



## SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS POLIDISPERSOS MULTIVARIADOS

Jovani Luiz Favero

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

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage  
Luiz Fernando Lopes Rodrigues  
Silva

Rio de Janeiro  
Fevereiro de 2014

SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS POLIDISPERSOS  
MULTIVARIADOS

Jovani Luiz Favero

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

Examinada por:

---

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

---

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

---

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

---

Prof. Marcos Antonio de Souza Barrozo, D.Sc.

---

Prof. Luiz Eduardo Bittencourt Sampaio, D.Sc.

---

Prof. Helio Pedro Amaral Souto, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL  
FEVEREIRO DE 2014

Favero, Jovani Luiz

Simulação de Escoamentos Multifásicos Polidispersos  
Multivariados/Jovani Luiz Favero. – Rio de Janeiro:  
UFRJ/COPPE, 2014.

XXVII, 209 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de  
Engenharia Química, 2014.

Referências Bibliográficas: p. 156 – 181.

1. Simulação.
  2. Escoamentos polidispersos.
  3. Balanço populacional multivariado.
  4. Dinâmica de Fluidos Computacional.
  5. OpenFOAM.
- I. Lage, Paulo Laranjeira da Cunha *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química.  
III. Título.

*A mente que se abre a uma nova  
ideia jamais voltará ao seu  
tamanho original.*

***Albert Einstein***

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus pelos momentos maravilhosos que venho vivenciando e pela força que me foi dada ao longo da minha vida.

Agradeço especialmente os meus orientadores Paulo Laranjeira da Cunha Lage e Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva pela confiança depositada e pela valiosa e indispensável orientação, sem a qual não teria sido possível o desenvolvimento deste trabalho.

Meus sinceros agradecimentos também aos membros da banca de doutorado, Argimiro Resende Secchi, Helio Pedro Amaral Souto, Luiz Eduardo Bittencourt Sampaio e Marcos Antonio de Souza Barrozo, por terem aceitado o convite para avaliar este documento e pelas contribuições dadas.

Não posso deixar de agradecer os atuais colegas do Laboratório de Termofluidodinâmica (LTFD), Amanda, Diogo, Fabio, Gabriel, Yuri, Julliana, Livia, Luiz Felipe, Mateus, Ricardo Schmitz, Samel, Taina, Tatiana e Thais, aos antigos colegas, Ammar, Enio, Fábio Barros, João Mitre, Marcelo, Otávio e Ricardo Carvalho e aos alunos de iniciação ou projeto final, Ana Paula, Guilherme, Mariana D., Mariana G., Raquel, Thabata e Tiago. Além do companheirismo, todos vocês contribuíram muito para meu aprendizado e do meu desenvolvimento pessoal.

Agradeço também ao Antonio pelo suporte técnico e pela troca de ideias sobre qualquer assunto, e lógico, pelo cafezinho sagrado de todo dia.

Quero agradecer também aos meus amigos de longa data, os mais recentes, aos amigos da mordomia, Dani, Leandro e Thais, e aos ex-colegas e professores de graduação e mestrado que de alguma forma também contribuíram para o desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço a Petrobras pelo suporte financeiro durante o desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço imensamente também a minha família que, apesar da distância geográfica, sempre me apoiou e me deu forças durante a graduação, o mestrado e agora o doutorado.

Por fim, gostaria deixar registrado um agradecimento especial para Denize, pela paciência, suporte, apoio, motivação e os ótimos momentos proporcionados.

*Jovani L. Favero*

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

## SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS POLIDISPERSOS MULTIVARIADOS

Jovani Luiz Favero

Fevereiro/2014

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage  
Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva

Programa: Engenharia Química

Escoamentos multifásicos polidispersos são bastante comuns na engenharia e apresentam grande importância em inúmeras aplicações industriais, tais como colunas de borbulhamento, processos fermentativos, polimerização e emulsificação. Nesses processos, os efeitos de interações entre elementos que compõem a fase dispersa são consideravelmente complicadas e em algumas aplicações práticas, uma boa representação da física do processo só é alcançada quando se considera mais de uma variável na modelagem do sistema polidisperso, resultando num problema do tipo multifásico polidisperso multivariado. Este trabalho visou o desenvolvimento e implementação de métodos para a solução de problemas de balanço populacional multivariado e do seu acoplamento com a dinâmica de fluidos computacional. Dentro os métodos investigados, o DQMoM-FC foi o que apresentou a melhor performance. Uma implementação do DQMoM-FC multivariado foi feita no *software OpenFOAM*. Os modelos para a quebra e coalescência de gotas e também um modelo de turbulência de dupla-camada foram estendidos e implementados. O problema referente a inversão de momentos multivariados também foi investigado em detalhes e novas metodologias foram propostas. Os métodos para inversão de momentos multivariados foram avaliados usando diferentes funções distribuições bivariadas. A validação das metodologias desenvolvidas e de suas implementações foram realizadas considerando diferentes casos testes para um escoamento de emulsão de água em óleo através de um duto contendo um acidente. O processo de misturação de uma corrente de água doce com uma emulsão de água salgada em óleo foi simulado considerando diferentes condições operacionais. Por fim, resultados de simulações de balanço populacional monovariado foram comparadas com dados experimentais, mostrando uma boa concordância.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

## SIMULATION OF MULTIVARIATE POLYDISPERSE MULTIPHASE FLOW

Jovani Luiz Favero

February/2014

Advisors: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva

Department: Chemical Engineering

Polydispersed multiphase flows are of great importance in several research areas and industrial applications, as bubble column reactors, microbial systems, polymerization and emulsification to cite a few. In these processes, the effects of interactions among the dispersed phases are usually complex and, in some practical applications, a good representation of the phenomena is only achieved when considering more than one variable in the modeling, resulting in a multivariate polydisperse multiphase problem. This work aimed at developing and implementing methods for the solution of the multivariate population balance problems and its coupling with computational fluid dynamics. Among the investigated methods, DQMoM-FC showed the best performance. The implementation of the multivariate DQMoM-FC was performed in the OpenFOAM software. The models for breakage and coalescence of droplets and also a two-layer turbulence model were extended and implemented. The problem regarding the multivariate moment inversion was also investigated in detail and new methodologies have been proposed. Methods for multivariate moment inversion were evaluated using different bivariate distribution functions. The validation of the developed methodologies and their implementations were performed considering different test cases for a flow of water-in-oil emulsion through a duct containing a valve-like accident. The process of mixing a stream of freshwater with the salty water-in-oil emulsion was simulated considering different operational conditions. Finally, simulation results considering univariate population balance models were compared with experimental data, showing good agreement.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>xii</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xvi</b>
<b>Nomenclatura</b>	<b>xix</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Motivação e Relevância do Trabalho . . . . .	2
1.2 Objetivos . . . . .	3
1.3 Estrutura do Texto . . . . .	3
<b>2 Escoamentos Multifásicos</b>	<b>5</b>
2.1 Definições Gerais . . . . .	5
2.2 Formulação Euleriana-Euleriana . . . . .	8
2.2.1 Modelo Euleriano Multi-fluido . . . . .	9
2.2.2 Modelagem da Turbulência . . . . .	10
2.2.3 Modelagem das Forças Interfaciais . . . . .	12
2.3 Aplicações envolvendo Escoamentos Multifásicos . . . . .	16
2.3.1 Colunas de Borbulhamento . . . . .	16
2.3.2 Dispersões Líquido-Líquido . . . . .	18
<b>3 Balanço Populacional</b>	<b>21</b>
3.1 Equação de Balanço Populacional . . . . .	21
3.2 Solução da Equação de Balanço Populacional . . . . .	25
3.2.1 Métodos Estocásticos . . . . .	26
3.2.2 Métodos que aproximam a Função Distribuição . . . . .	27
3.2.3 Métodos de Classes . . . . .	30
3.2.4 Métodos de Momentos e Variantes . . . . .	31
3.2.5 Avaliação crítica dos Métodos para Solução da PBE . . . . .	36
<b>4 CFD e o Software OpenFOAM</b>	<b>39</b>
4.1 Resolução de um Problema de CFD . . . . .	39

4.2	Método de Volumes Finitos . . . . .	40
4.2.1	Tipo de Arranjo das Variáveis . . . . .	41
4.2.2	Esquemas de Interpolação . . . . .	41
4.2.3	Solução das Equações Discretizadas . . . . .	42
4.3	O OpenFOAM . . . . .	43
4.3.1	Simulação CFD usando o OpenFOAM . . . . .	44
4.3.2	Desenvolvimento e Metodologia Numérica do OpenFOAM . .	45
4.3.3	Escoamentos Multifásicos no OpenFOAM . . . . .	46
<b>5</b>	<b>Métodos para Discretização de Distribuições Multivariadas</b>	<b>49</b>
5.1	Revisão da Literatura . . . . .	49
5.1.1	Reconstrução da Distribuição . . . . .	50
5.1.2	Métodos de Momentos e Inversão de Momentos Multivariados	51
5.2	Método de Força Bruta - Otimização não-linear . . . . .	53
5.3	Método do Produto Cartesiano Direto . . . . .	54
5.4	Análise de Componentes Principais . . . . .	55
5.4.1	A PCA aplicada a um Conjunto de Momentos . . . . .	56
5.5	Método do Produto Tensorial . . . . .	59
5.6	Análise de Componentes Independentes . . . . .	60
5.6.1	Algoritmos de ICA . . . . .	63
5.7	Método dos Momentos Condicionais . . . . .	65
<b>6</b>	<b>Desenvolvimento do Trabalho</b>	<b>68</b>
6.1	Etapas do Desenvolvimento . . . . .	68
6.1.1	Modelagem e Solução de Problemas de Balanço Populacional .	68
6.1.2	Solução de Escoamentos Multifásicos . . . . .	69
6.1.3	Acoplamento PB-CFD . . . . .	69
6.1.4	Estruturação de Código . . . . .	70
6.2	Inversão de Momentos Multivariados . . . . .	70
6.2.1	Inversão de Momentos Multivariados usando ICA . . . . .	70
6.2.2	Inversão de Momentos usando Combinação de Métodos e Re-refinamento de Solução . . . . .	71
6.3	Solução da PBE usando o DuQMoGeM . . . . .	72
6.4	Solução da PBE usando o DMoM . . . . .	74
6.5	Solução da PBE usando o DQMOM-FC . . . . .	76
6.6	Modelagem para a Dispersão, a Quebra e a Coalescência de Gotas .	79
6.6.1	Modelagem do Coeficiente de Dispersão . . . . .	79
6.6.2	Modelagem das Frequências de Quebra e Coalescência de Gotas	80
6.7	Modelo de Turbulência de Dupla-Camada . . . . .	83
6.8	Visão geral do <i>Solver</i> desenvolvido . . . . .	86

<b>7 Resultados e Discussão</b>	<b>89</b>
7.1 Inversão de Momentos Multivariados . . . . .	89
7.1.1 Procedimento Numérico . . . . .	89
7.1.2 Definições . . . . .	91
7.1.3 Comparação entre DCPM, PCA, ICA, TPM e CQMoM . . . . .	93
7.1.4 Resultados para PCA-CQMoM e ICA-CQMoM . . . . .	105
7.1.5 Refinamento de Solução usando Otimização . . . . .	107
7.1.6 Conclusões - Inversão de Momentos Multivariados . . . . .	109
7.2 Simulações usando o DuQMoGeM . . . . .	110
7.2.1 Procedimento Numérico . . . . .	110
7.2.2 Caso Teste 1 . . . . .	111
7.2.3 Caso Teste 2 . . . . .	112
7.2.4 Caso Teste 3 . . . . .	114
7.2.5 Conclusões - DuQMoGeM . . . . .	116
7.3 Simulações PB-CFD: Duto com Acidente . . . . .	117
7.3.1 Definição dos Casos . . . . .	117
7.3.2 Procedimento Numérico . . . . .	121
7.3.3 Simulação do modelo homogêneo . . . . .	123
7.3.4 Comparação entre DQMoM e DQMoM-FC . . . . .	128
7.3.5 Simulação PB-CFD usando o DQMoM-FC . . . . .	129
7.3.6 Conclusões - Duto com Acidente . . . . .	142
7.4 Simulação PB-CFD: Caso Multivariado . . . . .	143
7.4.1 Definição do Caso e Procedimento Numérico . . . . .	143
7.4.2 DQMoM-FC Multivariado . . . . .	145
7.4.3 Conclusões - Caso Multivariado . . . . .	148
7.5 Simulação PB-CFD: Caso Bivariado usando Momentos Mistos . . . . .	148
<b>8 Conclusões e Sugestões</b>	<b>153</b>
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>156</b>
<b>A Operadores no OpenFOAM</b>	<b>182</b>
A.1 Operador Gradiente . . . . .	183
A.2 Operador Divergente . . . . .	183
A.3 Operador Laplaciano . . . . .	184
A.4 Integração Temporal . . . . .	184
A.5 Outros Operadores auxiliares . . . . .	185
<b>B A PCA aplicada a Dados</b>	<b>186</b>

<b>C Fundamentação teórica da ICA</b>	<b>190</b>
C.1 Medidas de não-Gaussianidade . . . . .	190
C.1.1 Cumulantes . . . . .	190
C.1.2 Excesso de Curtose . . . . .	192
C.1.3 Cumulantes . . . . .	192
C.2 Teoria da Informação . . . . .	194
C.3 Medidas de Independência . . . . .	195
C.4 Branqueamento de Dados e Estatísticas . . . . .	196
C.5 Funções Contraste . . . . .	198
C.5.1 Função Contraste de Cardoso e Souloumiac . . . . .	200
C.6 Método de Jacobi . . . . .	202
<b>D Decomposição em Valores Singulares</b>	<b>203</b>
<b>E Comparação entre Diferentes Modelos de Turbulência</b>	<b>205</b>

# **Lista de Figuras**

4.1	Volume de controle. . . . .	40
6.1	Estrutura do <i>solver</i> e das bibliotecas. . . . .	88
7.1	Funções densidade de probabilidade: (a) distribuição Gaussiana rotacionada (Eq. (7.1)), (b) distribuição de Gumbel (Eq. (7.2)), (c) distribuição multimodal com modos platicúrticos e mesocúrticos (Eq. (7.3)), (d) distribuição bimodal com modos leptocúrtico e mesocúrtico (Eq. (7.4)), (e) distribuição multimodal Gaussiana (Eq. (7.5)) e (f) distribuição bimodal com modos platicúrtico e mesocúrtico totalmente separados (Eq. (7.6)). . . . .	92
7.2	Localização das abscissas para a distribuição Gaussiana rotacionada (Eq. 7.1) obtidas por (a) PCA e (b) CQMoM. . . . .	94
7.3	Localização das abscissas para a distribuição de Gumbel (Eq. 7.2) obtidas por (a) PCA e (b) ICA. . . . .	96
7.4	Localização das abscissas para a distribuição multimodal com modos mesocúrticos e platicúrticos (Eq. 7.3) obtidas por (a) PCA e (b) ICA. . . . .	97
7.5	Localização das abscissas para a distribuição bimodal com modos mesocúrtico e leptocúrtico (Eq. 7.4) obtidas por (a) PCA, (b) ICA, (c) CQMoM, (d) PCA-CQMoM, (e) ICA-CQMoM, (f) PCA-Otimização usando momentos até 4 <sup>a</sup> ordem e 6 pontos de quadratura. . . . .	100
7.6	Localização das abscissas para a distribuição multimodal Gaussiana (Eq. 7.5) obtidas por (a) PCA, (b) ICA, (c) CQMoM, (d) PCA-CQMoM, (e) ICA-CQMoM, (f) PCA-Otimização e PCA-CQMoM-Otimização usando momentos até 4 <sup>a</sup> ordem e 6 pontos de quadratura. . . . .	102
7.7	Localização das abscissas para a distribuição bimodal com modos totalmente separados (Eq. 7.6) obtidas por (a) PCA, (b) ICA, (c) PCA-CQMoM, (d) ICA-CQMoM, (e) PCA-Otimização usando momentos até 3 <sup>a</sup> ordem e 4 pontos de quadratura e (f) PCA-CQMoM-Otimização usando momentos até 4 <sup>a</sup> ordem e 6 pontos de quadratura e PCA-Otimização usando momentos até 4 <sup>a</sup> e 9 pontos de quadratura. . . . .	104

7.8 Resultados para o caso teste 1: (a) Momentos generalizados e os correspondentes erros absolutos usando tolerância absoluta de (b) $10^{-3}$ , (c) $10^{-5}$ e (d) $10^{-7}$ no pacote CUBATURE. . . . .	112
7.9 Resultados para o caso teste 2 com $N = 2$ : (a) momentos generalizados, (b) erro relativo e (c) erro absoluto dos momentos usando tolerância absoluta de $5,0 \times 10^{-5}$ no pacote CUBATURE. . . . .	114
7.10 Resultados para o caso teste 2 com $N = 3$ : (a) momentos generalizados, (b) erro relativo e (c) erro absoluto dos momentos usando tolerância absoluta de $5 \times 10^{-5}$ no pacote CUBATURE. . . . .	115
7.11 Resultados para o caso teste 3 usando tolerâncias absolutas de $10^{-3}$ e $10^{-4}$ no pacote CUBATURE para um caso com (a) $N = 2$ e outro com (b) $N = 3$ . . . . .	117
7.12 Definição da seção de testes: (a) vista em perspectiva da região das gavetas móveis, (b) aparato experimental e (c) visão esquemática com detalhes das dimensões da geometria para uma abertura de gaveta igual à H. Os parâmetros L1, L2, L3, L4 e L5 correspondem à 200, 2, 3, 5 e 1 milímetro (mm), respectivamente. As Figuras (a) e (b) foram extraídas de MITRE [1]. . . . .	119
7.13 Distribuição volumétrica do tamanho das gotas, $F$ , antes (“in”) e depois (“out”) do acidente para os casos (a) pt6g7 e (b) p9g11. Na legenda usada “exp” se refere às curvas das medidas experimentais e “sim” às curvas obtidas através de otimização [1]. . . . .	120
7.14 Resultado experimental para o diâmetro médio de Sauter ( $d_{32}$ ) antes e depois do acidente e comparação com resultados obtidos com o MoC e DQMoM-FC com 2 e 3 pontos de quadratura usando momentos inteiros e fracionários. . . . .	125
7.15 Resultado experimental para o diâmetro médio de DeBrouckere ( $d_{43}$ ) antes e depois do acidente e comparação com resultados obtidos com o MoC e DQMoM-FC com 2 e 3 pontos de quadratura usando momentos inteiros e fracionários. . . . .	126
7.16 Ilustração da malha na região do acidente. . . . .	128
7.17 Fração volumétrica da fase dispersa obtida com o DQMoM para (a) $N = 2$ e (b) $N = 3$ pontos de quadratura. . . . .	129
7.18 Fração volumétrica da fase dispersa obtida com o DQMoM-FC para $N = 2$ . . . . .	129
7.19 Valor médio <i>bulk</i> na seção D (outlet) do diâmetro médio de Sauter, $d_{32}$ , e DeBrouckere, $d_{43}$ , e da fração volumétrica de fase dispersa, $r_d$ , ao longo de 2 tempos hidrodinâmicos do canal. . . . .	131

7.20 Componentes da velocidade na direção (a) y, e (b) z, (c) energia cinética turbulenta e (d) taxa de dissipação de energia cinética turbulenta obtidos ao longo das seções A e B. . . . .	132
7.21 Fração volumétrica da fase dispersa e diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere obtidos ao longo da seção D para o caso pt6g7. . . . .	133
7.22 Fração volumétrica da fase dispersa e diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere obtidos ao longo da seção D para o caso pt4g13. . . . .	134
7.23 Campos estacionários para (a) p, (b) $\mathbf{u}_m = (1 - r_d)\mathbf{u}_0 + \sum_{\alpha=1}^N r_\alpha \mathbf{u}_\alpha$ (velocidade média da mistura), (c) $\epsilon_0$ e (d) $\nu_0^t$ na região rente ao acidente. . . . .	135
7.24 Campos estacionários das frequências de (a) coalescência e (b) quebra para a classe de gotas menores e (c) coalescência e (d) quebra para a classe de gotas maiores. . . . .	136
7.25 Frações volumétricas da fase dispersa das (a) menores e (b) maiores gotas e diâmetros das (c) menores e (d) maiores gotas. . . . .	137
7.26 Fração volumétrica total de fase dispersa das simulações (a) negligenciando e (b) considerando a dispersão de gotas. . . . .	138
7.27 Perfis dos diâmetros médios de Sauter para as simulações (a) negligenciando e (b) considerando a dispersão de gotas e dos diâmetros médios de DeBrouckere (c) negligenciando e (d) considerando a dispersão de gotas. . . . .	139
7.28 Resultados para concentração mássica (a) negligenciando e (b) considerando a dispersão de gotas. . . . .	142
7.29 Vista esquemática com detalhes das dimensões da geometria. Os parâmetros L1, L2, L3, L4, L5, L6 e L7 correspondem à 1, 0,04, 0,5, 2, 0,15, 0,05 e 0,2 metro (m), respectivamente. E1, E2 e E3 correspondem às entradas ( <i>inlet</i> ). . . . .	144
7.30 Campos estacionários para (a) $\mathbf{u}_m = (1 - r_d)\mathbf{u}_0 + \sum_{\alpha=1}^N r_\alpha \mathbf{u}_\alpha$ (velocidade média da mistura), (b) taxa de dissipação de energia turbulenta e (c) viscosidade turbulenta. . . . .	146
7.31 Campos estacionários do Caso 1 para frequências das gotas (a) menores com menores, (b) menores com maiores e (c) maiores com maiores coalescerem. . . . .	146
7.32 Campos estacionários das concentrações (a) de sal e (b) do componente $r$ para o Caso 2. . . . .	147
7.33 Campos estacionários para o Caso 1 das frequências das gotas (a) menores e (b) maiores quebrarem. . . . .	147
7.34 Campos estacionários para o Caso 2 das frequências das gotas (a) menores e (b) maiores quebrarem. . . . .	147

7.35 Campos estacionários para o Caso 2 do fator multiplicativo da frequência de quebra devido a sua dependência com a concentração do componente $r$ para a classe de gotas (a) menores e (b) maiores. . . . .	148
7.36 Campos estacionários para os diâmetros médios de (a) Sauter e (b) DeBrouckere para o Caso 1 e (c) Sauter e (d) DeBrouckere para o Caso 2. . . . .	149
7.37 Função distribuição e a discretização de 4 pontos obtida com o método PCA-Opt <sup>3</sup> <sub>(2×2)</sub> . . . . .	150
7.38 Evolução temporal das abscissas ponderadas (a) volume e (b) massa de sal das gotas. . . . .	151
7.39 Perfis estacionários dos diâmetros médios de (a) Sauter e (b) DeBrouckere. . . . .	151
7.40 Perfis estacionários do momento (a) zero e (b) da covariância entre as variáveis. . . . .	152
A.1 Discretização por volumes finitos. . . . .	182
C.1 Distribuições com diferentes níveis de curtose. . . . .	193
E.1 Ampliação da malha usada na região do acidente. . . . .	205
E.2 Campos estacionários para (a) $p$ , (b) $\mathbf{u}_m = (1 - r_d)\mathbf{u}_0 + \sum_{\alpha=1}^N r_\alpha \mathbf{u}_\alpha$ (velocidade média da mistura), (c) $\epsilon_0$ e (d) $\nu_0^t$ obtidos usando o modelo de turbulência $k - \epsilon$ . . . . .	206
E.3 Campos estacionários para (a) $p$ , (b) $\mathbf{u}_m = (1 - r_d)\mathbf{u}_0 + \sum_{\alpha=1}^N r_\alpha \mathbf{u}_\alpha$ (velocidade média da mistura), (c) $\epsilon_0$ e (d) $\nu_0^t$ obtidos usando o modelo de turbulência $k - \omega$ SST. . . . .	207
E.4 Campos estacionários para (a) $p$ , (b) $\mathbf{u}_m = (1 - r_d)\mathbf{u}_0 + \sum_{\alpha=1}^N r_\alpha \mathbf{u}_\alpha$ (velocidade média da mistura), (c) $\epsilon_0$ e (d) $\nu_0^t$ obtidos usando o modelo de turbulência de dupla-camada $k - \epsilon - W$ . . . . .	209

# Listas de Tabelas

5.1	Conjunto de momentos bivariados necessários para uma discretização de 3 pontos de quadratura em cada direção. . . . .	67
7.1	Distribuições usadas para avaliar os métodos de inversão de momentos multivariados. . . . .	91
7.2	Erro cumulativo $\log(\epsilon_O)$ da reconstrução dos momentos da distribuição Gaussiana rotacionada (Eq. (7.1)) para momentos até uma dada ordem, $O$ , usando PCA, ICA, TPM e CQMoM. . . . .	94
7.3	Erro cumulativo $\log(\epsilon_O)$ da reconstrução dos momentos da distribuição de Gumbel (Eq. (7.2)) para momentos até uma dada ordem, $O$ , usando PCA, ICA, TPM e CQMoM. . . . .	95
7.4	Erro cumulativo $\log(\epsilon_O)$ da reconstrução dos momentos da distribuição multimodal com modos mesocúrticos e platicúrticos (Eq. (7.3)) para momentos até uma dada ordem, $O$ , usando PCA, ICA, TPM e CQMoM. . . . .	97
7.5	Erro cumulativo $\log(\epsilon_O)$ da reconstrução dos momentos da distribuição bimodal com modos mesocúrtico e leptocúrtico (Eq. (7.4)) para momentos até uma dada ordem, $O$ , usando PCA, ICA, TPM e CQMoM. . . . .	99
7.6	Erro cumulativo $\log(\epsilon_O)$ da reconstrução dos momentos da distribuição multimodal Gaussiana (Eq. (7.5)) para momentos até uma dada ordem, $O$ , usando PCA, ICA, TPM e CQMoM. . . . .	101
7.7	Erro cumulativo $\log(\epsilon_O)$ da reconstrução dos momentos da distribuição bimodal com modos totalmente separados (Eq. (7.6)) para momentos até uma dada ordem, $O$ , usando PCA, ICA, TPM e CQMoM. . . . .	103
7.8	Erro cumulativo $\log(\epsilon_O)$ da reconstrução dos momentos da distribuição bimodal com modos mesocúrtico e leptocúrtico (Eq. (7.4)) para momentos até uma dada ordem, $O$ , usando PCA-CQMoM e ICA-CQMoM. . . . .	105
7.9	Erro cumulativo $\log(\epsilon_O)$ da reconstrução dos momentos da distribuição multimodal Gaussiana (Eq. (7.5)) para momentos até uma dada ordem, $O$ , usando PCA-CQMoM e ICA-CQMoM. . . . .	106

7.10	Erro cumulativo $\log(\epsilon_O)$ da reconstrução dos momentos da distribuição bimodal com modos totalmente separados (Eq. (7.6)) para momentos até uma dada ordem, $O$ , usando PCA-CQMoM e ICA-CQMoM.	107
7.11	Erro cumulativo $\log(\epsilon_O)$ da reconstrução dos momentos da distribuição bimodal com modos mesocúrtico e leptocúrtico (Eq. (7.4)) para momentos até uma dada ordem, $O$ , usando otimização para momentos até 3 <sup>a</sup> e 4 <sup>a</sup> ordens.	108
7.12	Erro cumulativo $\log(\epsilon_O)$ da reconstrução dos momentos da distribuição multimodal Gaussiana (Eq. (7.5)) para momentos até uma dada ordem, $O$ , usando otimização para momentos até 3 <sup>a</sup> e 4 <sup>a</sup> ordens.	108
7.13	Erro cumulativo $\log(\epsilon_O)$ da reconstrução dos momentos da distribuição bimodal com modos totalmente separados (Eq. (7.6)) para momentos até uma dada ordem, $O$ , usando otimização para momentos até 3 <sup>a</sup> e 4 <sup>a</sup> ordens.	109
7.14	Parâmetros dos modelos de quebra e coalescência para os modelos homogêneo e heterogêneo [2].	118
7.15	Resumo das características dos casos usados.	120
7.16	Propriedades físicas.	121
7.17	Condições de contorno.	122
7.18	Tempo de residência e valor médio da energia de dissipação turbulenta global usadas nas simulações de balanço populacional homogêneo.	123
7.19	Erros relativos dos diâmetros médios $d_{32}$ e $d_{43}$ para o caso homogêneo. Os dados experimentais foram obtidos de MITRE <i>et al.</i> [2].	124
7.20	Valores dos momentos até sétima ordem para a distribuição numérica de gotas obtidos da distribuição volumétrica de tamanhos de gotas (Figura 7.13(b)) para a seção anterior e posterior ao acidente e para o caso pt9g11.	127
7.21	Valores dos pesos ( $w_\alpha$ ) e abscissas ( $v_\alpha$ ) para uma discretização de 4 pontos de quadratura usando os momentos da seção anterior ao acidente dados na Tabela 7.20.	128
7.22	Características das malhas usadas nas simulações.	131
7.23	Diâmetros médios, em $\mu\text{m}$ , experimentais e seus valores <i>bulk</i> simulados.	140
7.24	Momentos e fatores de ponderação usados. O primeiro índice do momento está relacionado à variável volume, $v$ , e o segundo à variável massa de sal, $m$ , das gotas.	141
7.25	Valores de velocidades nas entradas e parâmetros usados no cálculo das condições de entrada para as variáveis do modelo de turbulência.	144
7.26	Discretização adimensional obtida com a PCA-Opt <sub>(2×2)</sub> <sup>3</sup> para a distribuição ilustrada pela Figura 7.1(f).	150



# Nomenclatura

<b>A</b>	Matriz de coeficientes do DQMoM
<i>A</i>	Matriz do operador de agregação
<i>a</i>	Frequência de agregação
<b>b</b>	Conjunto de dados brancos
<i>b</i>	Frequência de quebra
<b>C</b>	Matriz dos valores característicos (SVD)
<i>c</i>	Coeficientes da aproximação funcional de $f$
$C_{D,\alpha}$	Coeficiente de arrasto da fase $\alpha$
$Ca$	Número capilar
$Ca_{crit}$	Número capilar crítico
$C_{DT,\alpha}$	Coeficiente de dispersão turbulenta da fase $\alpha$
$C_{L,\alpha}$	Coeficiente de sustentação da fase $\alpha$
$C_{MV,\alpha}$	Coeficiente de massa virtual da fase $\alpha$
<b>D</b>	Tensor taxa de deformação, ou matriz de autovalores
$D_z$	Coeficiente associado à dispersão
<b>d</b>	Distância entre os nós de uma célula e de sua vizinha
$d_\alpha$	Diâmetro característico da fase $\alpha$
$D^{lam}$	Coeficiente associado à dispersão devido ao movimento Browniano
$D^{turb}$	Coeficiente associado à dispersão turbulenta

$Eo$	Número de Eötvös
$\mathbf{F}_{I,\alpha}$	Referente à troca de quantidade de movimento pela interface da fase $\alpha$
$f$	Função densidade numérica média de partículas
$F_{vol}$	Volume total de fluido em uma célula
<b>G</b>	Matriz unitária cujas linhas são autovetores
<b>g</b>	Aceleração da gravidade
<b>H</b>	Transformada de Hotelling
$H$	Termo fonte da PBE
$h$	Número de variáveis internas da PBE, ou dimensão
$H_e$	Entropia absoluta de uma variável aleatória discreta
<b>I</b>	Matriz identidade
$I$	Informação mútua
$I_0$	Função de Bessel de primeiro tipo modificada e de ordem zero
$J$	Negentropia
<b>K</b>	Tensor de cumulantes
$K$	Cumulante de uma distribuição multivariada
$k$	Energia cinética turbulenta
$L$	Matriz do operador de quebra
$L_a$	Medida de lado do canal
<b>M</b>	Matriz de mistura
$M$	Número de Morton
$\bar{N}$	Número médio total de partículas no sistema
$n$	Número de amostras de dados, ou número de pontos de quadratura usados para representar uma direção
<b>P</b>	Matriz de permutação

$P$	Função densidade de probabilidade de quebra de partículas
$p$	Pressão
$Q$	Vazão
$q$	Função densidade numérica instantânea de partículas
<b>R</b>	Matriz de rotação que otimiza a função contraste
$R$	Termo fonte responsável pela troca de massa entre as fases
$r$	Fração da fase
$Re$	Número de Reynolds
$Re_{max}$	Número de Reynolds máximo
<b>S</b>	Termo fonte relacionado a conservação da quantidade de movimento devido a forças externas, ou matriz de separação
<b>s</b>	Vetor de componentes independentes
$s$	Ordem total de um momento multivariado
$Sc^{turb}$	Número de Schmidt turbulento
$\mathbf{S}_f$	Vetor que contem a área da face
$St_k$	Número de Stokes
<b>T</b>	Tensor tensão, ou tensor de momentos
$t$	Tempo
$t_{res}$	Tempo de residência
<b>U</b>	Matriz com colunas ortonormais (SVD)
<b>u</b>	Vetor velocidade
$U_t$	Velocidade terminal
$\mathbf{u}_{r,\alpha}$	Velocidade relativa entre a fase contínua e a dispersa $\alpha$
<b>V</b>	Volume associado às variáveis internas ou externas, ou matriz com colunas ortonormais (SVD)
$V_{cel}$	Volume da célula computacional

$V_c$	Volume de controle
$\mathbf{W}$	Matriz de branqueamento
$\dot{\mathbf{X}}$	Taxa de variação das variáveis internas
$\mathbf{x}$	Variáveis internas da PBE, vetor de variáveis ou de seus valores
$\tilde{\mathbf{x}}$	Vetor de dados centrados
$\mathbf{Y}$	Vetor de variáveis correspondentes a fase contínua
$\mathbf{y}$	Vetor de dados linearmente transformados
$\dot{\mathbf{Z}}$	Taxa de variação das variáveis externas
$\mathbf{z}$	Variáveis externas, vetor das coordenadas espaciais

### Letras Gregas

$\delta$	Função Delta de Dirac
$\delta_{ij}$	Delta de Kronecker
$\epsilon$	Dissipação turbulenta
$\eta$	Microescala de Kolmogorov
$\gamma$	Fração de um dado fluido numa dada célula
$\gamma_2$	Excesso de curtose
$\kappa$	Cumulante de distribuição monovariada, ou viscosidade de dilatação
$d\lambda$	A medida baseada na função $f$ , com produto interno positivo definido
$\lambda$	Eficiência de coalescência
$d\bar{\lambda}$	Uma medida conhecida com produto interno positivo definido
$\mu$	Vetor de médias
$\mu$	Viscosidade dinâmica do fluido, ou momento
$\tilde{\mu}$	Momento centrado
$\Omega$	Domínio genérico

$\Omega$	Função contraste
$\omega, \tilde{\omega}$	Funções peso
$\phi$	Polinômio ortogonal na medida $d\bar{\lambda}(x) = \omega(x)dx$
$\tilde{\phi}$	Polinômio ortogonal na medida $d\bar{\lambda}(y) = \tilde{\omega}(y)dy$
$\Pi$	Matriz do operador de probabilidade de quebra
$\Psi_\alpha$	Termo de produção de energia turbulenta
$\varphi$	Variável arbitrária
$\rho$	Massa específica
$\varrho$	Parâmetro que corrige a redundância gerada pela contagem de pares de partículas idênticas
$\Sigma$	Matriz de covariância
$\sigma$	Coeficiente de tensão superficial
$\tau$	Tensão viscosa
$\Theta$	Uma propriedade física genérica
$\vartheta$	Número médio de partículas formadas por evento de quebra
$\theta$	Frequência de colisão de partículas
$\varsigma$	Abscissa ponderada
$\Xi$	Entropia diferencial

### Subescritos

$a$	Relacionado a fenômenos de agregação de partículas
$b$	Relacionado a fenômenos de quebra de partículas
$f$	Relacionado à face de uma célula
$g$	Relacionado a fenômenos de crescimento
$I$	Referente aos processos que ocorrem na interface
$J$	Relacionado a fenômenos de nucleação de partículas

$N$  Ponto de uma malha representando o nó de uma célula vizinha à célula de interesse

$P$  Ponto de uma malha representando o nó da célula de interesse

$\alpha$  Correspondente a fase discreta  $\alpha$

## Sobrescritos

$a$  Referente à força de arrasto

$BI$  Referente à turbulência induzida por bolhas

$dt$  Referente à força de dispersão turbulenta

$eff$  Representa o valor efetivo de uma grandeza

$lam$  Correspondente a escoamentos laminares

$mv$  Referente à força de massa virtual

$n$  Valor de uma variável no passo de tempo atual

$o$  Valor de uma variável em um nível de tempo anterior

$oo$  Valor de uma variável em dois níveis de tempo anteriores

$s$  Referente à força de sustentação

$T$  Transposto

$turb$  Correspondente a escoamentos turbulentos

$(\phi)$  Relativo ao polinômio  $\phi$

$(\phi, \tilde{\phi})$  Relativo ao polinômio  $\phi$  e  $\tilde{\phi}$

$-$  Relativo a medida  $d\bar{\lambda}$

## Siglas

ADQMoM *Adjustable Direct Quadrature Method of Moments*

ASMM *Algebraic Slip Mixture Model*

BSS *Blind Source Separation*

CAD *Computer-Aided Design*

CDS *Central Differencing Scheme*

CFD	<i>Computational Fluid Dynamic</i>
CG	<i>Conjugate Gradient</i>
CQMoM	<i>Conditional Quadrature Method of Moments</i>
CuBICA	<i>Cumulant Based ICA</i>
D <sup>2</sup> uQMoGeM	<i>Direct Dual-Quadrature Method of Generalized Moments</i>
DCPM	<i>Direct Cartesian Product Method</i>
DEM	<i>Discrete Element Method</i>
DIC	<i>Diagonal incomplete-Cholesky</i>
DILU	<i>Diagonal incomplete-LU</i>
DQMoM	<i>Direct Quadrature Method of Moments</i>
DQMoM-FC	<i>Direct Quadrature Method of Moments Fully Conservative</i>
DuQMoGeM	<i>Dual-Quadrature Method of Generalized Moments</i>
EQMoM	<i>Extended Quadrature Method of Moments</i>
FastICA	<i>Fixed-point algorithm for ICA</i>
FDM	<i>Finite Difference Method</i>
FEM	<i>Finite Element Method</i>
FVM	<i>Finite Volume Method</i>
GAMG	<i>Geometric-Algebraic Multi-Grid</i>
GMRES	<i>Generalized Minimal Residual</i>
GPL	<i>Gnu Public License</i>
GPU	<i>Graphics Processing Unit</i>
HDS	<i>Hybrid Differencing Scheme</i>
HRS	<i>High Resolution Schemes</i>
IC	<i>Independent Component</i>
ICA	<i>Independent Component Analysis</i>

JADE	<i>Joint Approximate Diagonalization of Eigen-matrices</i>
KDF	<i>Kernel Density Function</i>
KLT	<i>Transformada Discreta de Karhunen-Loève</i>
LSM	<i>Least Squares Method</i>
LSSEM	<i>Least Squares Spectral Element Method</i>
MaC	<i>Marker-and-Cell</i>
MC	<i>Monte-Carlo</i>
MoC	<i>Methods of Classes</i>
MoM	<i>Method of Moments</i>
MoMIC	<i>Method of Moments with Interpolative Closure</i>
NVD	<i>Normalised Variable Diagram</i>
OpenFOAM	<i>Open Field Operation And Manipulation</i>
PB	<i>Population Balance</i>
PBE	<i>Population Balance Equation</i>
PCA	<i>Principal Component Analysis</i>
PD	<i>Product-Difference</i>
PDF	<i>Probability Density Functions</i>
PISO	<i>Pressure Implicit Splitting of Operators</i>
POD	<i>Proper Orthogonal Decomposition</i>
QMoM	<i>Quadrature Method of Moments</i>
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>
SHIBBS	<i>SHifted Blocks for Blind Separation</i>
SIMPLE	<i>Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations</i>
SQMoM	<i>Sectional Quadrature Method of Moments</i>
SVD	<i>Singular Value Decomposition</i>

TLC	Teorema do Limite Central
TPM	<i>Tensor Product Method</i>
TVD	<i>Total Variation Diminishing</i>
UDS	<i>Upwind Differencing Scheme</i>
VoF	<i>Volume-of-Fluid</i>
WENO	<i>Weighted Essentially Non-Oscillatory</i>
WRM	<i>Weighted Residuals Method</i>

# Capítulo 1

## Introdução

Escoamentos multifásicos dispersos são caracterizados pela existência de uma ou mais fases dispersas, como bolhas, gotas ou partículas, em uma fase contínua. Quando os elementos que compõem a fase dispersa possuem diferenças apreciáveis entre si – tamanho, área superficial, temperatura, concentração de um de seus componentes, etc. – diz-se que o sistema é polidisperso.

A distribuição das propriedades de um sistema polidisperso pode passar por variações significativas ao longo do processo. Os mecanismos envolvidos nestas variações usualmente estão relacionados a diversos fenômenos, como a presença de reações químicas, agitação, o padrão do escoamento e fenômenos de transferência de massa e de calor entre as diferentes fases presentes no sistema.

Além disso, em algumas aplicações práticas, uma boa representação da física do processo só é possível quando se considera mais de uma variável para modelar o sistema polidisperso. Neste caso, é necessário considerar um escoamento do tipo multifásico polidisperso multivariado. Por exemplo, num escoamento de gás em líquido o mais usual é considerar somente a informação sobre o tamanho das bolhas, contudo o conhecimento do tamanho e da área superficial permitiria uma modelagem mais detalhada do processo. Em processos de misturação líquido-líquido pode ser interessante dispor, além da informação da distribuição do tamanhos das gotas, o valor da concentração dos componentes existentes nas mesmas. Outro exemplo é a polimerização em emulsão, onde cada partícula pode ser caracterizada por seu tamanho e pela massa de polímero presente na mesma.

Os escoamentos multifásicos polidispersos são bastante comuns na engenharia e apresentam grande importância em inúmeras aplicações industriais, tais como: na dinâmica de aerosóis, em ciclones, colunas de borbulhamento, processos de polimerização, cristalização, fermentação, emulsificação, entre outros [3–8]. Nesses processos os efeitos de interações entre as entidades que compõem a fase dispersa são consideravelmente complexas por contarem com a influência de diversos fenômenos físicos distintos e variáveis do sistema. Por outro lado, o conhecimento das propriedades de

um sistema polidisperso juntamente com a dinâmica do escoamento podem ser de fundamental importância em operações que utilizam algum dos processos citados. As simulações computacionais vem sendo cada vez mais usadas para tal propósito, atuando em cooperação com os protótipos de bancada. O uso do balanço populacional para modelar um sistema polidisperso acoplado com o escoamento multifásico, resolvido por dinâmica de fluidos computacional, tem se mostrado uma metodologia realmente eficaz para a simulação de escoamentos multifásicos polidispersos.

## 1.1 Motivação e Relevância do Trabalho

Uma simulação mais adequada de sistemas polidispersos depende de uma solução acurada da equação de balanço populacional multivariada acoplada à dinâmica de fluidos computacional. Um código que possibilite fazer simulações de sistemas polidispersos possui grande aplicação em muitos processos da engenharia, podendo ser utilizado tanto em estudos científicos, no meio acadêmico, quanto em indústrias, constituindo uma ferramenta para auxiliar na implementação de novos projetos e/ou na melhoria dos já existentes.

Todavia, a existência de um código ou até mesmo de uma metodologia para tal propósito é uma questão ainda controversa na literatura e um assunto que merece muita dedicação e pesquisa acadêmica. Dessa forma, este trabalho é motivado não somente pela vasta aplicação que os escoamentos multifásicos polidispersos possuem em processos que ocorrem na natureza ou na indústria, mas também pelos desafios científicos que esta área ainda apresenta, como por exemplo:

- **Solução de problemas de balanço populacional multivariado:** existe uma complexidade tanto em termo de modelagem quanto de solução. Este tema é ainda pouco abordado na literatura, mas vem ganhando um maior destaque nos últimos anos. Ainda hoje não existe uma metodologia que permita resolver este tipo de problema de forma acurada e eficiente. Grande parte dos trabalhos encontrados na literatura não vão além de resolver um problema de balanço populacional monovariado [5, 9, 10]. Quando consideram um caso multivariado, geralmente o fazem com muitas simplificações [11–13].
- **Solução de escoamentos multifásicos:** a simulação de escoamentos multifásicos ainda depende da solução de dois grandes desafios relacionados à modelagem e à solução numérica. São necessários avanços consistentes na área da modelagem das forças interfaciais e da turbulência. No que se refere a solução numérica do modelo multifásico, existem hoje diferentes metodologias, sendo que a escolha por uma ou outra depende do tipo de problema a ser

resolvido. Os maiores desafios nesse campo é tornar essas metodologias mais gerais, robustas, eficientes e acuradas [4, 14].

- **Acoplamento de balanço populacional com o escoamento multifásico:** como pode ser visto na literatura, os métodos baseados em momentos são os que se mostram mais promissores para atacar esse tipo de problema. Esses métodos necessitam da geração de uma discretização que represente a função distribuição multivariada e seus momentos de forma acurada. O problema da inversão de momentos monovariados tem solução fechada, mas o mesmo não ocorre para o caso multivariado. A obtenção de uma quadratura multidimensional a partir dos momentos multivariados é uma tarefa complexa, ainda uma questão em aberto na literatura. A solução deste problema é de fundamental importância para que seja possível realizar simulações de balanço populacional multivariado acopladas à dinâmica de fluidos computacional [11, 15, 16].

## 1.2 Objetivos

A proposta deste trabalho foi o desenvolvimento de um código para simulação de escoamentos multifásicos polidispersos multivariados. A implementação foi realizada no *software* de dinâmica de fluidos computacional de código aberto denominado OpenFOAM.

O trabalho teve três objetivos principais:

1. Desenvolver uma metodologia que seja acurada e ao mesmo tempo genérica, robusta e eficiente para resolver problemas de balanço populacional multivariado.
2. Estudar e propor metodologias para o acoplamento do balanço populacional multivariado com códigos de dinâmica de fluidos computacional.
3. Elaborar um código computacional abrangente e flexível para simular escoamentos multifásicos polidispersos multivariados.

## 1.3 Estrutura do Texto

No Capítulo 2 são apresentados os fundamentos teóricos sobre escoamentos multifásicos e uma breve revisão da literatura sobre a aplicação dos mesmos.

Posteriormente, no Capítulo 3, é descrita a fundamentação teórica sobre balanço populacional no que se refere a sua modelagem e aplicação. Também é encontrada

uma revisão bibliográfica dos métodos atualmente existentes na literatura para resolver a equação de balanço populacional, com foco na aplicação para problemas multivariados e heterogêneos.

No Capítulo 4 são apresentados alguns conceitos referentes à simulação de escoamentos usando a dinâmica de fluidos computacional além de um breve detalhamento do funcionamento do *software* OpenFOAM, com aspectos referentes às vantagens de seu uso e noções básicas para simulação e desenvolvimento através dele.

A problemática em torno da inversão de momentos multivariados é abordada no Capítulo 5. Também são apresentados os diferentes métodos que podem ser considerados como alternativas à solução deste problema.

No Capítulo 6 são descritos os desenvolvimentos e avanços alcançados neste trabalho em diferentes áreas, igualmente necessárias, para se chegar ao produto final, ou seja, o *solver* para simulação de escoamentos multifásicos polidispersos multivariados.

Posteriormente, no Capítulo 7, são apresentados e discutidos os resultados obtidos ao longo deste trabalho.

Por fim, o Capítulo 8 é reservado às conclusões gerais e sugestões para trabalhos futuros.

# Capítulo 2

## Escoamentos Multifásicos

*Neste capítulo são apresentados os fundamentos teóricos em escoamentos multifásicos e uma breve revisão da literatura sobre possíveis aplicações desse tipo de escoamento.*

### 2.1 Definições Gerais

Escoamentos multifásicos estão presentes em inúmeras aplicações da engenharia. Na engenharia química, este tipo de escoamento pode ser encontrado em unidades de extração e destilação, leitos fluidizados, homogenizadores, reatores químicos e fermentadores, processos de emulsificação e desemulsificação, processos de separação, evaporação e sistemas de dessalinização, colunas de borbulhamento, entre muitas outras aplicações [17, 18].

A complexidade dos escoamentos multifásicos é oriunda da existência de interfaces separando as diferentes fases. Essas interfaces podem ser múltiplas, deformáveis e móveis, originando descontinuidades nos valores das propriedades físicas dos fluidos e causando a existência de um escoamento complexo nas suas vizinhanças. A topologia da interface permite subdividir os escoamentos em separados, mistos ou dispersos. Neste sentido, um escoamento multifásico pode ser classificado, de acordo com as fases termodinâmicas envolvidas, em gás-sólido, gás-líquido, líquido-sólido ou líquido-líquido quando se tem uma mistura entre dois líquidos imiscíveis [17].

Escoamentos multifásicos do tipo disperso também são muito comuns na engenharia. Estes escoamentos têm como característica a existência de elementos dispersos em uma fase contínua, ou seja, a fase dispersa ocupa regiões desconexas do espaço. Num escoamento desse tipo podem existir interação entre as partículas, gotas ou bolhas, que compõem as fases dispersas, sendo comum a ocorrência dos fenômenos de agregação e quebra de partículas<sup>1</sup>. Quando as partículas não podem

---

<sup>1</sup>Por simplicidade, o termo partícula passará a ser usado neste trabalho para designar não unicamente partículas sólidas, mas também qualquer entidade dispersa numa fase contínua.

ser admitidas como sendo iguais, o escoamento passa a ser classificado como polidisperso. Estes escoamentos podem ser modelados usando a técnica de balanço populacional, que será descrita no Capítulo 3. Num escoamento polidisperso, a distribuição de tamanho das partículas e as suas interações podem vir a afetar não somente o perfil de velocidade das fases, mas também o regime do escoamento multifásico [4].

Apesar da vasta literatura sobre escoamentos multifásicos o assunto ainda é tema de muita pesquisa e não está tão bem consolidado como estão os escoamentos monofásicos.

A dinâmica de fluidos computacional (*Computational Fluid Dynamic - CFD*) tem mostrado ser uma boa ferramenta para a simulação dos fenômenos que são observados em escoamentos multifásicos. Na literatura que trata da simulação desse tipo de escoamento usando CFD, as abordagens Euleriana-Euleriana (E-E) e Euleriana-Lagrangeana (E-L) são as predominantes [14].

A modelagem E-L trata as partículas como entidades discretas presentes no escoamento de uma fase contínua. Cada partícula é modelada individualmente e o número de partículas a ser considerado pela modelagem deve ser suficiente para representar o número real de partículas presente no sistema. O mais comum é se assumir partículas representativas, isto é, uma partícula que representa o efeito de um conjunto de partículas. Devido a isto, geralmente se admitem hipóteses simplificativas no qual as partículas são consideradas fontes pontuais e com forma esférica. Dessa forma, resolvem-se as equações médias para conservação de massa, energia e quantidade de movimento para a fase contínua (Euleriana) e as velocidades e posições das partículas são obtidas a partir da segunda lei de Newton. Definindo  $m_i$ ,  $\mathbf{z}_i$  e  $\mathbf{u}_i$  como sendo, respectivamente, a massa, a posição e a velocidade da partícula  $i$ , a soma das forças atuantes na partícula  $i$  é dada por [4, 19]:

$$\sum F_i = m_i \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} \quad (2.1)$$

sendo a velocidade definida como:

$$\mathbf{u}_i = \frac{d\mathbf{z}_i}{dt} \quad (2.2)$$

O efeito das partículas sobre o meio assim como as interações entre partículas são passíveis de serem consideradas nesse tipo de modelagem usando-se, por exemplo, a abordagem DEM (*Discrete Element Method*) [20, 21]. Contudo, é mais comum o uso de simulações E-L quando se tem baixas quantidades de partículas (sistemas diluídos) devido ao enorme custo computacional em escoamentos com elevada densidade numérica de partículas. Esta limitação torna este método inviável para algumas

aplicações.

Existe ainda a possibilidade de se considerar as partículas como sendo entidades deformáveis. Este tipo de escoamento pode ser visto como um escoamento monofásico acrescido de uma metodologia apropriada para o tratamento das interfaces. Para tal, são muito conhecidas as metodologias MaC (*Marker-and-Cell*) [22] e VoF (*Volume-of-Fluid*) [23]. O VoF é uma técnica numérica muito empregada para fazer o acompanhamento de interfaces em escoamentos que apresentam superfícies livres. Na formulação VoF uma mesma equação de conservação é válida para ambas as fases. Por exemplo, um único campo de pressão e outro de velocidade são resolvidos num escoamento multifásico laminar e isotérmico. As diferentes fases se distinguem pela variação das propriedades do fluido no domínio ou através das interfaces.

O volume total de um dado fluido em uma célula é calculado como sendo  $F_{vol} = \gamma V_{cel}$ , onde  $V_{cel}$  é o volume da célula computacional e  $\gamma$  é a fração de um dos fluidos nesta célula. O valor de  $\gamma$  numa célula varia entre dois limites. Por exemplo, considerando um caso bifásico, uma célula completamente preenchida por um fluido apresenta  $\gamma = 1$ , ao passo que uma célula completamente preenchida pelo outro fluido apresenta  $\gamma = 0$ . Na interface,  $\gamma$  assume valores intermediários entre 0 e 1, satisfazendo a seguinte equação topológica [14, 24, 25]:

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} + \nabla \cdot (\gamma \mathbf{u}) = 0 \quad (2.3)$$

As propriedades físicas dos fluidos em uma célula qualquer são dadas em relação à fração de cada fluido presente na célula correspondente. Matematicamente, para uma propriedade genérica  $\Theta$ , isto pode ser dado como:

$$\Theta = \gamma \Theta_{fluido_1} + (1 - \gamma) \Theta_{fluido_2} \quad (2.4)$$

Atualmente este tipo de método vem sendo muito usado em escoamentos onde se tem interfaces que podem ser facilmente caracterizadas. Em muitas aplicações é comum usar técnicas de malhas adaptativas, fazendo-se um refinamento de malha junto à interface. Contudo, a aplicação desses métodos para representar escoamentos polidispersos com altas densidades numéricas de partículas ainda é inviável devido ao elevado custo computacional associado à necessidade de se usar malhas computacionais muito finas. Por exemplo, em reatores reais a fase dispersa é representada por uma ampla variedade de tamanhos e elevadas densidades numéricas de partículas, sendo computacionalmente impraticável usar uma malha que resolva corretamente a interface de todas essas partículas [26].

Na abordagem Euleriana-Euleriana, as fases são vistas como meios interpene-trantes. Essa formulação se baseia na promediação das equações de conservação

usando média volumétrica, temporal ou amostral [25]. As equações de conservação de massa e movimento médias são usadas para descrever ambas as fases em uma escala de mistura com tamanho superior à molecular. A caracterização da mistura pela média amostral permite aplicar essa metodologia em casos com elevada densidade numérica de partículas [4, 25]. O acoplamento entre este tipo de formulação e o balanço populacional é feito de forma bastante direta, sendo por isso a metodologia mais usada para tratar escoamentos polidispersos. Um maior aprofundamento sobre a formulação E-E será vista na próxima seção.

## 2.2 Formulação Euleriana-Euleriana

As simulações E-E apresentavam inicialmente muita difusão numérica e eram menos acuradas que as E-L [27]. Contudo, observou-se uma melhoria significativa através do uso de esquemas de interpolação de alta resolução, conhecidos como TVD (*Total Variation Diminishing*) e NVD (*Normalized Variable Diagram*) para os termos advectivos das equações de conservação de quantidade de movimento, mantendo-se com isso o interesse neste tipo de formulação [28].

A promediação da formulação Euleriana origina dois tipos de modelos: o modelo de mistura e o modelo multi-fluido.

No modelo de mistura ambas as fases são descritas como se fossem uma única fase, baseando-se na hipótese de que as fases estão em equilíbrio local. Nessa abordagem não é requerida a solução das equações da continuidade e de quantidade de movimento para cada uma das fases, mas apenas a equação para a mistura. Essa formulação provê uma descrição das propriedades e do comportamento da mistura, mas não dá informação sobre a interação e o comportamento das diferentes fases. No caso do ASMM (*Algebraic Slip Mixture Model*) deve-se também propor uma relação para descrever a velocidade de escorregamento entre as fases (*slip*) [4, 25].

O modelo Euleriano multi-fluido é mais geral e é obtido da promediação das equações de conservação de cada uma das fases. Neste tipo de modelo as fases são consideradas como sendo contínuas, interpenetrantes e representadas por equações de conservação médias. No processo de promediação introduz-se a fração de fase,  $r$ , ao conjunto de variáveis e devido à perda de informação no processo de média, alguns termos adicionais aparecem nas equações de conservação de cada fase. Estes termos devem ser tratados com uma modelagem adicional e são os responsáveis pelos fenômenos de interação entre as fases. A abordagem E-E é aplicável a todos os regimes de escoamento dependendo apenas de uma modelagem para a turbulência e para os termos referentes às forças interfaciais [4, 14, 17, 25].

O modelo Euleriano multi-fluido é naturalmente mais complexo que o modelo de mistura mas é o mais adequado para descrever sistemas no qual as fases dife-

rem significativamente em comportamento como, por exemplo, quando as fases têm campos de velocidade bem distintos.

### 2.2.1 Modelo Euleriano Multi-fluido

No modelo Euleriano multi-fluido para um escoamento disperso, consideram-se usualmente  $N + 1$  fases, com uma fase contínua, representada pelo subscrito  $\alpha = 0$ , e  $N$  fases dispersas, descritas com o subscrito  $\alpha = 1, \dots, N$ .

Admitindo um sistema multifásico isotérmico as equações de conservação obtidas usando média amostral são descritas por [4, 14]:

$$\frac{\partial(\rho_\alpha r_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha r_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = R_\alpha \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_\alpha r_\alpha \mathbf{u}_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha r_\alpha \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha) &= \nabla \cdot (r_\alpha \mathbf{T}_\alpha^{eff}) + r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} \\ &\quad + \mathbf{F}_{I,\alpha}^{eff} + R_\alpha \mathbf{u}_{\alpha,I} + \mathbf{S}_\alpha \end{aligned} \quad (2.6)$$

onde  $\rho_\alpha$ ,  $\mathbf{u}_\alpha$  e  $\mathbf{T}_\alpha^{eff}$  representam, respectivamente, a massa específica média, a velocidade média e o tensor tensão efetivo médio da fase  $\alpha$ , podendo este ser decomposto em uma parcela laminar e outra turbulenta ( $\mathbf{T}_\alpha^{eff} = \mathbf{T}_\alpha^{lam} + \mathbf{T}_\alpha^{turb}$ ).  $r_\alpha$  é a fração da fase, que equivale à probabilidade de dada fase estar presente em certo instante de tempo e ponto no espaço,  $R_\alpha$  é o termo fonte usado para modelar a transferência de massa entre as fases, sendo dependente do processo considerado (reação química, por exemplo),  $\mathbf{u}_{\alpha,I}$  representa a velocidade pela qual a fase  $\alpha$  é transferida através da interface, a qual será desprezada neste trabalho,  $\mathbf{S}_\alpha$  é um termo fonte relacionado à conservação da quantidade de movimento devido às forças externas atuando na fase  $\alpha$  e  $\mathbf{F}_{I,\alpha}^{eff}$  é o termo de troca de quantidade de movimento pela interface da fase  $\alpha$  [4, 17, 25].

O termo  $\mathbf{F}_{I,\alpha}^{eff}$  considera os efeitos das forças que atuam nas interfaces das fases, sendo muito comum separar a sua modelagem nas forças de arrasto, sustentação, massa virtual e dispersão turbulenta [4, 17].

O tensor tensão laminar médio,  $\mathbf{T}_\alpha^{lam}$ , pode ser decomposto em duas parcelas, uma correspondente às componentes normais da força e outra correspondente à tensão viscosa. Assumindo um fluido Newtoniano, é representada por:

$$\mathbf{T}_\alpha^{lam} = -p_\alpha \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_\alpha^{lam} \quad (2.7)$$

$$\boldsymbol{\tau}_\alpha^{lam} = 2\mu_\alpha \mathbf{D}_\alpha + (\kappa_\alpha - \frac{2}{3}\mu_\alpha)(\nabla \cdot \mathbf{u}_\alpha)\mathbf{I} \quad (2.8)$$

$$\mathbf{D}_\alpha = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u}_\alpha + (\nabla \mathbf{u}_\alpha)^T] \quad (2.9)$$

onde  $p$ ,  $\mu$ ,  $\kappa$ ,  $\mathbf{D}$  e  $\mathbf{I}$  são, respectivamente, a pressão, a viscosidade dinâmica, a viscosidade de dilatação, o tensor taxa de deformação e o tensor identidade.

### 2.2.2 Modelagem da Turbulência

A modelagem da turbulência é indispensável para uma descrição correta de escoamentos multifásicos em simulações usando CFD. O processo de tomada da média gera um termo adicional na equação de quantidade de movimento chamado de tensão de Reynolds. Esse termo é responsável pelos efeitos associados à turbulência. A modelagem da turbulência tende a focar determinados efeitos podendo variar de forma significativa dependendo das hipóteses utilizadas.

Uma das abordagens mais usadas para modelar a tensão de Reynolds é baseada na hipótese de BOUSSINESQ [29] que considera que as tensões turbulentas são proporcionais ao tensor taxa de deformação da velocidade média do escoamento. Diferentemente da viscosidade molecular, a viscosidade turbulenta não é uma propriedade do fluido. O seu valor varia de ponto a ponto, dependendo principalmente do padrão do escoamento.

A introdução do conceito de viscosidade turbulenta fornece uma metodologia para construir modelos de turbulência. Usando essa ideia, a viscosidade turbulenta é relacionada às variáveis do escoamento médio ou a outras variáveis da turbulência obtidas por uma expressão explícita ou outras equações adicionais.

Para fluidos considerados incompressíveis, a Equação 2.10 apresenta a formulação do tensor tensão turbulento total, onde  $k$  é a energia cinética turbulenta e  $\boldsymbol{\tau}_\alpha^{turb}$  é o tensor tensão de turbulência [4]:

$$\mathbf{T}_\alpha^{turb} = -\frac{2}{3}\rho_\alpha k \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_\alpha^{turb} \quad (2.10)$$

onde

$$\boldsymbol{\tau}_\alpha^{turb} = 2\mu_\alpha^{turb} \mathbf{D}_\alpha \quad (2.11)$$

Dante da enorme quantidade de modelos de turbulência existentes para escoamentos monofásicos apenas alguns destes foram adaptados para o caso multifásico. O modelo  $k - \epsilon$  considera que a turbulência do escoamento é caracterizada por uma escala de comprimento. Essa escala de comprimento é uma medida do tamanho dos turbilhões ou vórtices turbulentos e é considerada uma medida representativa e igual em todas as direções. Dessa forma, essa modelagem considera a hipótese de isotropia, a qual não produz bons resultados em escoamentos sob ação de rotação, recirculações ou gradientes adversos de pressão. Além disso, considera-se que a viscosidade turbulenta é isotrópica, ou seja, a relação entre o tensor tensão turbulento médio e o tensor taxa de deformação médio é igual em todas as direções. Mesmo

assim, o modelo  $k - \epsilon$  é sem dúvida o mais usado em escoamentos multifásicos turbulentos [30].

Este modelo introduz duas equações de transporte adicionais, uma para a energia cinética turbulenta,  $k$ , e outra para a taxa de dissipação de energia turbulenta,  $\epsilon$ .

A partir de  $k$  e  $\epsilon$  calcula-se a viscosidade turbulenta local [4]. Como é difícil obter um fechamento para a modelagem multifásica da turbulência, o mais comum é resolver um modelo de turbulência somente para a fase contínua, obtendo-se a viscosidade turbulenta para a mesma. Posteriormente, estima-se a viscosidade turbulenta da fase dispersa em função da viscosidade turbulenta da fase contínua, geralmente usando um modelo algébrico.

As equações de conservação para a energia cinética e a dissipação de energia turbulenta da fase contínua ( $\alpha = 0$ ), são dadas pelas Eqs. 2.12 e 2.13, respectivamente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(r_0\rho_0k_0)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_0\rho_0\mathbf{u}_0k_0) - \nabla \cdot \left[ r_0 \left( \mu_0^{lam} + \frac{\mu_0^{turb}}{\sigma_k} \right) \nabla k_0 \right] \\ = r_0(\Psi_0 - \rho_0\epsilon_0) + S_{0,k} \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(r_0\rho_0\epsilon_0)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_0\rho_0\mathbf{u}_0\epsilon_0) - \nabla \cdot \left[ r_0 \left( \mu_0^{lam} + \frac{\mu_0^{turb}}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon_0 \right] \\ = r_0S_{0,\epsilon}^P + S_{0,\epsilon} \end{aligned} \quad (2.13)$$

onde o termo fonte  $S_{0,\epsilon}^P$  é dado por:

$$S_{0,\epsilon}^P = \frac{\epsilon_0}{k_0}(C_{\epsilon 1}\Psi_0 - C_{\epsilon 2}\rho_0\epsilon_0) \quad (2.14)$$

$\Psi_0$  é o termo de produção de energia turbulenta dado por  $\Psi_0 = \nu_0^t D_0^2$  e  $D_0 = \sqrt{2\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{D}_0}$ .

Já  $S_{0,k}$  e  $S_{0,\epsilon}$  são termos fontes que podem ser usados na modelagem dos efeitos de turbulência causados por outras fontes como, por exemplo, a interação com partículas [31]. As constantes do modelo  $k - \epsilon$  padrão possuem os seguintes valores:  $C_{\epsilon 1} = 1,44$ ,  $C_{\epsilon 2} = 1,92$ ,  $\sigma_k = 1,0$  e  $\sigma_\epsilon = 1,3$ .

A viscosidade turbulenta  $\mu_0^{turb}$  é calculada usando a relação de Kolmogorov-Prandtl:

$$\mu_0^{turb} = C_\mu \rho_0 \frac{k_0^2}{\epsilon_0} \quad (2.15)$$

onde a constante  $C_\mu$  possui valor de 0,09.

As viscosidades turbulentas das fases dispersas, obtidas da viscosidade turbulenta da fase contínua, são usualmente modeladas por:

$$\mu_\alpha^{turb} = C_t^2 \frac{\rho_\alpha}{\rho_0} \mu_0^{turb}, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (2.16)$$

onde o parâmetro  $C_t$  é usado para especificar quanto da turbulência da fase contínua é transmitida para a fase dispersa. Considerando-se  $C_t = 1$ , a flutuação turbulenta da fase contínua é passada integralmente para a fase dispersa.

É comum também se considerar uma termo para modelar a turbulência gerada pela presença da fase dispersa. Neste sentido, um modelo bastante usado é o de Sato, o qual representa o efeito da turbulência produzida pelo movimento das bolhas em escoamentos gás-líquido [32, 33]. Usando o modelo de Sato, o valor da viscosidade turbulenta efetiva da fase contínua passa a ser dado pela soma da viscosidade turbulenta dada pela Equação 2.11 com a viscosidade induzida pelo movimento das bolhas, ou seja:

$$\mu_0^{turb,eff} = \mu_0^{turb} + \mu_0^{BI} \quad (2.17)$$

onde  $\mu_0^{BI}$  é dada por:

$$\mu_0^{BI} = \sum_{\alpha=1}^N \rho_0 C_\mu^{BI} r_\alpha d_\alpha |\mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u}_0| \quad (2.18)$$

e, conforme [34], recomenda-se o valor de 0,6 para a constante  $C_\mu^{BI}$ .

A turbulência induzida pela fase dispersa tem se mostrado importante para melhorar os resultados obtidos nas simulações de escoamentos gás-líquido. O assunto ainda é tema de pesquisa mas já é possível encontrar diversos trabalhos avaliando o efeito dessa modelagem [34–36].

O desenvolvimento de modelos de turbulência multifásicos ainda é um assunto que está em aberto devido a enorme complexidade do tema. A extensão dos modelos monofásicos não é direta, pois vários termos inter-correlacionados surgem no equacionamento, a maioria deles ainda sem um significado físico aparente, tornando muito difícil a tarefa de modelá-los.

### 2.2.3 Modelagem das Forças Interfaciais

Uma questão bastante importante na modelagem de escoamentos multifásicos é o tratamento das forças interfaciais de troca de quantidade de movimento,  $\mathbf{F}_{I,\alpha}^{eff}$ . Pelas leis de conservação, a quantidade total de movimento transferida entre as fases deve ser nula, ou seja,  $\sum_{\alpha=0}^N \mathbf{F}_{I,\alpha}^{eff} = 0$ . O sistema de equações multi-fluido é fechado com a modelagem das  $N + 1$  fases.

A obtenção de equações constitutivas para o fechamento do modelo Euleriano deve respeitar alguns princípios, como por exemplo, o princípio da equipresença, indiferença ao referencial, as leis da termodinâmica, entre outras. Além disso, ainda deve ser considerado o fato da solução ser bem posta, ou seja, ser possível a obtenção de uma única solução [25].

O fechamento do modelo Euleriano considera os fenômenos que ocorrem na interface entre as fases. A força interfacial de uma fase  $\alpha$  normalmente é decomposta

em termos da força de interação entre as fases e da ação da tensão interfacial média sobre o gradiente de fração de fase:

$$\mathbf{F}_{I,\alpha}^{eff} = \mathbf{F}_{I,\alpha} + p_{I,\alpha} \nabla r_\alpha - \boldsymbol{\tau}_{I,\alpha} \cdot \nabla r_\alpha \quad (2.19)$$

sendo muito comum desprezar os efeitos da tensão interfacial ( $\boldsymbol{\tau}_{I,\alpha} = 0$ ) e, dessa forma, considerar que a pressão possui localmente o mesmo valor para todas as fases,  $p_\alpha = p_{I,\alpha} = p$  [17, 27].

O termo de interação entre as fases pode considerar vários tipos de forças interfaciais, entre as quais as mais usadas são as forças de arrasto (*drag*), sustentação (*lift*), massa virtual e dispersão turbulenta. Considerando-se estas forças, a formulação do termo de interação entre fases para a fase dispersa é dada por:

$$\mathbf{F}_{I,\alpha 0} = \sum_{\alpha=1}^N [\mathbf{F}_{I,\alpha 0}^a + \mathbf{F}_{I,\alpha 0}^s + \mathbf{F}_{I,\alpha 0}^{mv} + \mathbf{F}_{I,\alpha 0}^{dt}] \quad (2.20)$$

onde  $\mathbf{F}^a$ ,  $\mathbf{F}^s$ ,  $\mathbf{F}^{mv}$  e  $\mathbf{F}^{dt}$  representam respectivamente as forças devido ao arrasto, sustentação, massa virtual e dispersão turbulenta.

Cabe notar que as forças de troca de quantidade de movimento entre as fases se inter-relacionam de acordo com a 3<sup>a</sup> lei de Newton, ou seja,  $\mathbf{F}_{I,0\alpha}^{(\cdot)} = -\mathbf{F}_{I,\alpha 0}^{(\cdot)}$ . Também deve ficar claro que  $\mathbf{F}_{I,\alpha 0}$  possui unidade de força dividido por volume.

## Força de Arrasto

A força de arrasto aparece sempre que existe um movimento relativo entre a partícula e o fluido e pode ser definida como a força exercida pela fase contínua sobre a partícula devido à diferença de velocidade existente entre elas [4, 5, 17].

A modelagem da força de arrasto em escoamentos multifásicos é dada pela Equação 2.21, onde  $\rho_0$  é a massa específica,  $C_{D,\alpha}$  é o coeficiente de arrasto para a fase  $\alpha$ ,  $\mathbf{u}_{r,\alpha} = \mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_\alpha$  é a velocidade relativa,  $A_\alpha$  é a área projetada normal ao vetor velocidade relativa da partícula da fase  $\alpha$  e  $V_\alpha$  é volume da partícula da fase  $\alpha$  [4].

$$\mathbf{F}_{I,\alpha 0}^a = \frac{1}{2} \rho_0 r_\alpha \frac{A_\alpha}{V_\alpha} C_{D,\alpha} |\mathbf{u}_{r,\alpha}| \mathbf{u}_{r,\alpha} \quad (2.21)$$

A modelagem do coeficiente de arrasto depende da física do problema, uma vez que a forma das partículas não é necessariamente fixa. É comum usar correlações para partículas isoladas. O modelo de SCHILLER e NAUMANN [37] é um dos mais simples para o cálculo do coeficiente de arrasto e se aplica no caso de partículas

esféricas:

$$C_{D,\alpha} = \begin{cases} \frac{24}{Re}(1 + 0,15Re^{0,687}) & \text{para } Re \leq 1000; \\ 0,44 & \text{para } Re > 1000. \end{cases} \quad (2.22)$$

onde  $Re$  é o número de Reynolds dado por:

$$Re = \frac{\rho_0 |\mathbf{u}_{r,\alpha}| d_\alpha}{\mu_0} \quad (2.23)$$

sendo que  $\mu_0$  é a viscosidade da fase contínua e  $d_\alpha$  é o diâmetro da partícula.

No modelo de Grace [38], as partículas podem assumir a forma elipsoidal:

$$C_{D,\alpha} = \frac{4}{3} \left( \frac{\rho_0 - \rho_\alpha}{\rho_0} \right) \frac{g d_\alpha}{U_t^2} \quad (2.24)$$

onde  $U_t$  é a velocidade terminal calculada por:

$$U_t = \frac{\mu_0}{\rho_0 d_\alpha} M^{-0,149} (J - 0,857) \quad (2.25)$$

com  $M$  (número de Morton) e  $J$  definidos por:

$$M = \frac{\mu_0^4 g (\rho_0 - \rho_\alpha)}{\rho_0^2 \sigma_{0\alpha}^3}, \quad J = \begin{cases} 0,94H^{0,751}, & \text{se } 2 < H \leq 59,3 \\ 3,42H^{0,441}, & \text{se } H > 59,3 \end{cases} \quad (2.26)$$

onde

$$H = \frac{4}{3} Eo M^{-0,149} \left( \frac{\mu_0}{\mu_{ref}} \right)^{-0,14}, \quad Eo = \frac{g (\rho_0 - \rho_\alpha) d_\alpha^2}{\sigma_{0\alpha}} \quad (2.27)$$

sendo que  $Eo$  é o número de Eötvös,  $\mu_{ref} = 9 \times 10^{-4} K g m^{-1} s^{-1}$  é a viscosidade laminar da água que é tomada como sendo uma viscosidade de referência para o modelo,  $g$  é o valor da aceleração da gravidade e  $\sigma_{0\alpha}$  é o coeficiente de tensão superficial.

Além desses, outro modelo bastante usado para gotas e bolhas com forma elipsoidal é o de Ishii e Zuber [39]:

$$C_{D,\alpha} = \frac{2}{3} Eo^{1/2} \quad (2.28)$$

Também encontram-se na literatura alguns modelos que consideram o efeito da concentração de partículas no cálculo de  $C_{D,\alpha}$ , como pode ser visto no trabalho de DODDS e NASER [40].

## Força de Sustentação

Em um escoamento com campo uniforme e estacionário, a força de sustentação refere-se à força normal à velocidade relativa do fluido. A força de sustentação é usualmente modelada por:

$$\mathbf{F}_{I,\alpha 0}^s = C_{L,\alpha} \rho_0 r_\alpha \mathbf{u}_{r,\alpha} \times (\nabla \times \mathbf{u}_0) \quad (2.29)$$

onde  $C_{L,\alpha}$  é o coeficiente de sustentação da fase  $\alpha$  [4, 14, 17, 25, 27, 36].

Cabe notar que, pela forma como foi definida a Equação 2.29,  $C_{L,\alpha}$  seria função das propriedades físicas do fluido, do tipo de escoamento e do tamanho da partícula, como pode ser visto em CROWE *et al.* [18]. Apesar disso, para escoamentos com  $Re > 10^2$ , o mais comum é considerar o coeficiente de sustentação sendo constante ( $C_{L,\alpha} = 0,5$ ) para o caso de partículas esféricas. Contudo, existem na literatura alguns modelos para o coeficiente de sustentação, por exemplo o de Tomiyama [41, 42].

## Massa Virtual

A massa virtual de uma partícula se refere ao volume de fluido que deve ser acelerado junto com a partícula, de forma que a massa total sujeita à aceleração na equação de conservação de quantidade de movimento da partícula seja  $(\rho_\alpha + C_{MV,\alpha} \rho_0) V_\alpha$ , onde  $C_{MV,\alpha}$  é o coeficiente de massa virtual devido à movimentação da partícula e  $V_\alpha$  é o volume da partícula da fase dispersa  $\alpha$  [4]. Desta forma, a modelagem usual da força de massa virtual é dada por:

$$\mathbf{F}_{I,\alpha 0}^{mv} = C_{MV,\alpha} \rho_0 r_\alpha \left( \frac{D_0 \mathbf{u}_0}{Dt} - \frac{D_\alpha \mathbf{u}_\alpha}{Dt} \right) \quad (2.30)$$

onde o operador  $\frac{D(\cdot)}{Dt}$  é a derivada material ou substantiva, dada por:

$$\frac{D_\alpha(\cdot)}{Dt} = \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} + \mathbf{u}_\alpha \cdot \nabla(\cdot) \quad (2.31)$$

O mais usual é se usar  $C_{MV,\alpha} = 0,5$ , que é o valor correspondente a partículas esféricas em escoamento não-viscoso. A soma da força de massa virtual usando  $C_{MV,\alpha} = 0,5$  com a força de sustentação usando  $C_{L,\alpha} = 0,5$  satisfaz o princípio de independência do referencial.

## Dispersão Turbulenta

A força de dispersão turbulenta ocorre devido à flutuação da força de arrasto associada à turbulência. É comumente dada pela seguinte forma funcional [36]:

$$\mathbf{F}_{I,0\alpha}^{dt} = C_{DT,\alpha} \rho_0 k_0 \nabla r_\alpha \quad (2.32)$$

onde  $C_{DT,\alpha}$  é o coeficiente de dispersão turbulenta que pode assumir um valor constante igual a 0,1 ou ser modelado. DE BERTODANO [43] propôs o seguinte modelo:

$$C_{DT,\alpha} = C_\mu^{1/4} \frac{1}{St_k(1 + St_k)} \quad (2.33)$$

onde o número de Stokes,  $St_k$ , é dado por  $St_k = \frac{\tau_\alpha}{\tau_0}$ ,  $\tau_\alpha = \frac{4d_\alpha}{3C_{D,\alpha}|\mathbf{u}_{r,\alpha}|}$  e  $\tau_0 = C_\mu^{3/4} \frac{k}{\epsilon}$ .

## 2.3 Aplicações envolvendo Escoamentos Multifásicos

As simulações de escoamentos multifásicos vêm sendo muito usadas em diversas áreas da pesquisa. Com o progresso conseguido nos últimos anos, o uso desse tipo de simulação vem saindo do meio acadêmico e passando cada vez mais a ser usado em aplicações encontradas na indústria.

Como exemplo do crescimento dessa área na engenharia química, pode-se citar a enorme quantidade de trabalhos publicados sobre escoamentos gás-líquido sobre colunas de borbulhamento e dispersões líquido-líquido em processos de emulsificação e desemulsificação.

### 2.3.1 Colunas de Borbulhamento

A literatura sobre colunas de borbulhamento ou reatores multifásicos é muito extensa, tanto no âmbito experimental quanto em simulação computacional. Colunas de borbulhamento tem sido utilizadas em processos envolvendo reações de oxidação de compostos como butano, tolueno e xileno, processos de polimerização e hidrogenação, síntese de Fischer-Tropsch, no campo da biotecnologia para produção de enzimas, proteínas e antibióticos, processos envolvendo fermentação, cultura de células, tratamento de efluentes e a evaporação por contato direto, como no caso de concentração de sucos [44, 45].

As colunas de borbulhamento são muito usadas devido a sua simplicidade de construção, o baixo custo operacional e suas boas características para transferência de calor e massa [46].

O padrão do escoamento em uma coluna de borbulhamento é dependente de vários parâmetros, dentre os quais a velocidade superficial de gás, aspectos relacionados à forma do distribuidor ou injetor e à geometria da coluna.

Dois regimes bem distintos de escoamento podem ser visualizados de acordo com o valor da velocidade superficial de gás na coluna. O regime homogêneo é atingido quando baixas velocidades de gás são usadas, e o heterogêneo, quando se usa velocidades mais altas. Os trabalhos de MUDDE *et al.* [47] e MUDDE e VAN DEN AKKER [48] apresentam uma análise detalhada de escoamentos com baixa velocidade superficial de gás, concluindo que mesmo usando baixas velocidades é possível verificar o aparecimento de um padrão de recirculação no interior da coluna. Uma análise de escoamentos em diferentes sub-regimes heterogêneos foi feita no trabalho de CHEN *et al.* [49].

O efeito do distribuidor sobre o padrão do escoamento no interior de colunas de borbulhamento é tema de muitos trabalhos encontrados na literatura [50, 51]. Alguns trabalhos experimentais fizeram um esforço no intuito de tentar obter escoamentos o máximo possível uniformes, sem presença de recirculações, usando injeção localizada, como por exemplo, injetor tipo agulha, tubo perfurado, entre outros [52, 53]. O uso de injeção através de uma placa porosa também é muito comum em trabalhos dessa área [54].

Um estudo sobre a influência do padrão de aeração sobre o escoamento no interior de colunas retangulares e cilíndricas pode ser encontrada no trabalho de HARTEVELD *et al.* [55]. O sistema de aeração usado permitiu obter escoamentos uniformes sem a presença de recirculações mesmo para frações de gás mais altas, em torno de 25%.

Devido à sua simplicidade, as colunas com geometria retangular são as mais usadas tanto na parte experimental como em simulações usando CFD. Recentemente, vários trabalhos foram publicados nesta área, para citar alguns, BECKER *et al.* [56, 57], BUWA e RANADE [58, 59] e DÍAZ *et al.* [5].

No trabalho de DÍAZ *et al.* [5], uma coluna de borbulhamento retangular (escala laboratorial) foi usada para obtenção de dados experimentais que foram usados posteriormente para validação de simulações usando CFD. Os autores usaram simulação 3D bifásicas transiente, formulação E-E, modelo de turbulência  $k - \epsilon$  e consideraram fenômenos de quebra e coalescência de bolhas para analisar a influência que algumas variáveis numéricas e do escoamento têm sobre os termos de arrasto, sustentação e massa virtual.

Uma grande conclusão tirada a partir dos anos e dos vários trabalhos na área é que é indispensável o uso de esquemas de interpolação de alta resolução para o termo advectivo da equação de conservação de quantidade de movimento [28] e que a simulação de colunas de borbulhamento usando o modelo de turbulência  $k - \epsilon$  tem

uma melhoria significativa na representação de dados experimentais quando se usa simulação 3D [30]. Uma comparação entre LES (*Large Eddy Simulations*) e o modelo  $k - \epsilon$  foi mostrada no trabalho de DEEN *et al.* [34], que usaram uma formulação E-E e concluíram que o uso de simulações LES em colunas de borbulhamento gera resultados ainda melhores.

No trabalho de MITRE *et al.* [60] foi avaliada a performance de diferentes modelos para quebra e coalescência para colunas de borbulhamento, fornecendo posteriormente uma conclusão a respeito dos modelos que seriam mais recomendados para tal aplicação. Uma revisão mais detalhada sobre colunas de borbulhamento pode ser encontrada nos trabalhos de JULIÁ *et al.* [61] e SILVA [4].

### 2.3.2 Dispersões Líquido-Líquido

A dispersão líquido-líquido é um processo que ocorre em diversos fenômenos naturais assim como em aplicações da indústria química, farmacêutica, de alimentos, polímeros e no setor petrolífero. O conhecimento de como as diferentes fases interagem entre si é fundamental para melhorar a performance de reatores, misturadores, colunas de extração, processos de emulsificação e desemulsificação, etc. A característica de uma dispersão é função de diversos fenômenos, como quebra e coalescência de gotas, padrão do escoamento e turbulência, mudança de fase, inversão de fase entre muitas outras, fazendo este tipo de processo um tanto complicado de se tratar.

A uso da dinâmica de fluidos é de fundamental importância para auxiliar na tarefa de mudança de escala (*scale-up*) de equipamentos envolvendo processos desse tipo. Da mesma forma que para os escoamentos em colunas de borbulhamento, um entendimento completo dos fenômenos que influenciam o comportamento de dispersões líquido-líquido ainda está longe de ser atingido.

Vem se percebendo um esforço muito grande da comunidade científica no tangente à modelagem desse tipo de processo [62]. O mais usual é encontrar simulações CFD bifásicas que, em alguns casos, são acopladas com a solução de uma PBE para modelar os efeitos de quebra e coalescência.

LAURENZI *et al.* [63] investigaram o efeito da fluido-dinâmica de um tanque agitado com uma dispersão de óleo em água. Os autores avaliaram o efeito do uso de diferentes velocidades do impelidor e usaram uma modelagem Euleriana-Euleriana e resolveram a equação de balanço populacional pelo método das classes.

Mais recentemente MAAB *et al.* [64] avaliaram escoamentos de dispersões líquido-líquido dando uma ênfase especial à modelagem do termo de quebra, em particular ao número de gotas formadas pelos eventos de quebra. Os resultados experimentais mostraram que para certos diâmetros de gotas é possível obter até 97 novas gotas em um simples evento de quebra. A partir dos dados experimentais

os autores elaboraram um modelo para o número médio de gotas formadas pela quebra. Esse novo modelo mostrou-se ligeiramente superior em predizer os dados experimentais quando comparado aos outros modelos encontrados na literatura.

DERKSEN e AKKER [65] usaram simulações DNS (*Direct Numerical Simulations*) 3D para descrever dispersões líquido-líquido sob agitação usando o método de *lattice-Boltzmann*. Os autores avaliaram a evolução da distribuição de tamanhos e o efeito da turbulência sobre a quebra e coalescência de gotas.

Um melhor entendimento de dispersões líquido-líquido também é fundamental em processos que envolvem emulsões [66, 67]. Um exemplo disso é a separação de emulsão de água salgada em óleo, comumente encontrado no processo de separação primário da indústria de petróleo. O petróleo extraído dos campos de produção sempre contém algum teor de água e sais dissolvidos, seja devido às condições naturais do depósito ou às técnicas utilizadas para sua exploração. A quantidade de água emulsionada pode chegar a 60% da água total, sendo necessária uma etapa de purificação antes de se encaminhar à refinaria [68].

Mesmo assim, o petróleo destinado às refinarias ainda apresenta uma concentração elevada de sais e alguma água emulsionada. Estes por sua vez necessitam ser removidos para evitar danos aos equipamentos que são utilizados durante o processo de refino. É comum o uso de algumas técnicas baseadas em processos químicos ou físicos para promover a desestabilização da emulsão, sendo muito comum o uso de um processo eletrostático. Neste processo, primeiro é adicionada uma corrente de água doce à emulsão que passa, posteriormente, através de uma válida de mistura que promove a quebra e coalescência de gotas com o intuito de misturar as gotas de água doce e salgada e propiciar o transporte dos traços de sais inorgânicos da fase óleo para a fase água. Na sequência, a mistura é transferida para um tanque e é submetida a uma corrente elétrica para promover a coalescência. Ao alcançar um certo tamanho, as gotas de água decantam, possibilitando a remoção do petróleo virtualmente livre de sais pela parte superior do tanque e a água, rica em sais e contaminantes orgânicos, é retirada pela parte inferior do tanque [69].

A modelagem desse processo possui um certo grau de complexidade, sendo possível considerar o uso de simulações multifásicas acopladas ao balanço populacional multivariado. O trabalho de CUNHA *et al.* [68] fez um esforço neste sentido, usando balanço populacional monovariado para simular o processo de destabilização de emulsões de água em óleo. Nos trabalhos de SILVA *et al.* [70] e SILVA e LAGE [9] o escoamento de uma emulsão de água em óleo foi simulada usando balanço populacional monovariado acoplado a um escoamento multifásico.

O processo de emulsificação por membranas também é tema de intensa pesquisa nos últimos anos, sendo muito usado na indústria de alimentos. Neste processo a fase dispersa é injetada na fase contínua através dos micro-poros de uma membrana.

Uma revisão desse assunto até o ano 2000 pode ser encontrada no trabalho de JOSCELYNE e TRÄGÅRDH [71].

# Capítulo 3

## Balanço Populacional

*Neste capítulo são apresentados os fundamentos teóricos referentes ao balanço populacional e uma revisão sobre os métodos encontrados atualmente na literatura para resolver a equação de balanço populacional.*

### 3.1 Equação de Balanço Populacional

O balanço populacional (*Population Balance* - PB) tem como finalidade descrever a evolução temporal da distribuição de uma ou mais propriedades de um sistema particulado. Dessa forma, o comportamento dinâmico do sistema particulado passa a ser descrito pela equação de balanço populacional (*Population Balance Equation* - PBE) [3, 72, 73].

O uso do balanço populacional é muito abrangente e atualmente é usado em diversas áreas de pesquisa. Por exemplo, encontram-se na literatura inúmeros trabalhos que aplicaram balanço populacional para resolver problemas de dinâmica de aerosóis, cristalização, precipitação, polimerização, reatores de leitos fluidizados, culturas celulares em biorreatores, vaporização e condensação de *sprays*, entre inúmeras outras aplicações.

O uso da PBE para representar a dinâmica de sistemas polidispersos é antigo, podendo-se citar os trabalhos pioneiros de SMOLUCHOWSKI [74, 75] sobre a coagulação de partículas coloidais [76]. Os primeiros avanços na área de balanço populacional foram feitos pela comunidade científica envolvida em estudos de problemas atmosféricos, tais como aerosóis e formação de nuvens, e tinha como foco principal os problemas de coagulação [73]. O assunto só despertou interesse das áreas de engenharia química e mecânica em meados da década de 60 [72, 77–79].

Quando o problema de balanço populacional é dito homogêneo a distribuição numérica das partículas é função apenas das suas  $h$  propriedades,  $\mathbf{x} \equiv (x_1, x_2, \dots, x_h)$ , como por exemplo, temperatura, área superficial, composição e tamanho, chamadas de variáveis internas. Quando  $h = 1$  o problema de balanço populacional é dito

monovariado. Contudo, para muitas aplicações práticas existe a necessidade de se resolver duas ou mais dessas variáveis internas simultaneamente ( $h \geq 2$ ), resultando em um problema de balanço populacional multivariado. Para problemas heterogêneos a função distribuição de número de partículas passa a ser dependente também das variáveis externas,  $\mathbf{z} \equiv (z_1, z_2, z_3)$ , que correspondem as coordenadas espaciais em um domínio no  $\mathfrak{R}^3$ .

A função de densidade numérica média,  $f(\mathbf{x}, \mathbf{z}, t)$ , definida no espaço de estado da partícula e num tempo  $t$  é dada por:

$$E[q(\mathbf{x}, \mathbf{z}, t)] \equiv f(\mathbf{x}, \mathbf{z}, t), \quad \mathbf{x} \in \Omega_{\mathbf{x}} \quad \text{e} \quad \mathbf{z} \in \Omega_{\mathbf{z}} \quad (3.1)$$

onde  $q(\mathbf{x}, \mathbf{z}, t)$  é a função densidade numérica de partículas de uma realização do processo compatível com a média amostral e  $\Omega$  corresponde a um domínio genérico. O número médio total de partículas no sistema é dado por:

$$\bar{N}(t) = \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} dV_{\mathbf{x}} \int_{\Omega_{\mathbf{z}}} f(\mathbf{x}, \mathbf{z}, t) dV_{\mathbf{z}} \quad (3.2)$$

onde  $dV_{\mathbf{x}}$  e  $dV_{\mathbf{z}}$  são os volumes diferenciais no espaço das variáveis internas e externas, respectivamente. Outras funções de densidades também podem ser igualmente definidas, como por exemplo, distribuição de massa de partículas, distribuição de volume de partículas, etc.

A evolução de uma distribuição inicial de partículas, definida em um domínio físico qualquer, pode ocorrer devido a diferentes fenômenos, como por exemplo, crescimento, nucleação, agregação e quebra. Estes fenômenos estão associados basicamente à interação partícula-partícula e/ou à interação da partícula com a fase contínua na qual a mesma está imersa.

A PBE pode ser escrita na seguinte forma para uma função de distribuição de densidade numérica  $f(\mathbf{x}, \mathbf{z}, t)$  [3]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot (\dot{\mathbf{Z}}f) - \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \{ \mathbf{D}_z \cdot [\nabla_{\mathbf{z}} \cdot (\mathbf{D}_z^T f)] \} = H(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t) \quad (3.3)$$

onde  $\dot{\mathbf{Z}}$  é a taxa de variação determinística da variável externa (vetor velocidade) e  $\mathbf{D}_z$  é um coeficiente associado à dispersão de partículas, que pode ser anisotrópica, no espaço das variáveis externas, isto é, está associado a movimentação não-determinística das partículas. O termo  $H(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t)$  é um termo fonte com parcelas que consideram os fenômenos de crescimento,  $H_g(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t)$ , agregação,  $H_a(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t)$ , quebra,  $H_b(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t)$ , e nucleação,  $H_J(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t)$ , de partículas:

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t) = H_g(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t) + H_a(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t) + H_b(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t) + H_J(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t) \quad (3.4)$$

Como pode ser visto, o termo fonte da PBE é dependente de  $c$  variáveis associadas a fase contínua,  $\mathbf{Y} \in (Y_1, Y_2, \dots, Y_c)$  [3].

O termo de nucleação pode ser visto como uma taxa de geração de partículas no espaço de estado e a modelagem depende de cada processo (cristalização, solubilização, etc.), mas geralmente é tratado como um fluxo de partículas entrando no domínio do espaço de estado:

$$H_J(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t) = J_o(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \quad (3.5)$$

onde  $J_o$  é a taxa de formação de novas partículas por unidade de volume e de tempo, isto é, o surgimento de núcleos monodispersos com propriedades  $\mathbf{x}_o$ .

O termo de crescimento é representado por uma contribuição advectiva e outra difusiva no espaço de estado das variáveis internas:

$$H_g(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t) = -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\dot{\mathbf{X}} f) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \{ \mathbf{D}_x \cdot [\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{D}_x^T f)] \} \quad (3.6)$$

onde  $\dot{\mathbf{X}}$  é a taxa de variação determinística das variáveis internas e  $\mathbf{D}_x$  é o coeficiente associado à dispersão, ou seja, a movimentação randômica no espaço de estado das variáveis internas.

O processo de agregação de partículas acontece quando as mesmas colidemumas com as outras. Quando as partículas agregam e perdem a sua identidade própria, diz-se que ocorreu a coalescência das partículas. O termo  $H_a(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t)$  é dado por duas parcelas: uma correspondente a morte e outra ao nascimento de partículas devido ao processo de agregação:

$$\begin{aligned} H_a(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t) = & - \int_{\Omega_{\mathbf{x}'}} \int_{\Omega_{\mathbf{z}'}} a(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \mathbf{x}', \mathbf{z}'; \mathbf{Y}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{z}, t) f(\mathbf{x}', \mathbf{z}', t) d\mathbf{V}_{\mathbf{x}'} d\mathbf{V}_{\mathbf{z}'} \\ & + \frac{1}{\varrho} \int_{\Omega_{\mathbf{x}'}} \int_{\Omega_{\mathbf{z}'}} a(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{z}}; \mathbf{x}', \mathbf{z}'; \mathbf{Y}, t) f(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{z}}, t) \\ & \times f(\mathbf{x}', \mathbf{z}', t) \frac{\partial(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{z}})}{\partial(\mathbf{x}, \mathbf{z})} d\mathbf{V}_{\mathbf{x}'} d\mathbf{V}_{\mathbf{z}'} \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde o parâmetro  $\varrho$  serve para corrigir a redundância gerada pela contagem dos mesmos pares de partículas no intervalo de integração,  $\partial(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{z}})/\partial(\mathbf{x}, \mathbf{z})$  é o Jacobiano da transformação de coordenadas,  $a(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{z}}; \mathbf{x}', \mathbf{z}'; \mathbf{Y}, t)$  é a frequência de agregação e  $(\mathbf{x}', \mathbf{z}')$  e  $(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{z}})$  caracterizam os estados das partículas que se agregam para gerar uma outra partícula com estado  $(\mathbf{x}, \mathbf{z})$  [3].

A frequência de agregação  $a(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{z}}; \mathbf{x}', \mathbf{z}'; \mathbf{Y}, t)$  corresponde a probabilidade de duas partículas com propriedades  $(\mathbf{x}', \mathbf{z}')$  e  $(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{z}})$ , existentes num instante de tempo  $t$  e com propriedades da fase contínua  $\mathbf{Y}$ , se agregarem para formar uma partícula filha com propriedades  $(\mathbf{x}, \mathbf{z})$  no instante de tempo  $t + \delta t$ .

Muitos modelos já foram propostos para a frequência de agregação das partículas e, no geral, eles dependem da distribuição do tamanho de partículas, do padrão do escoamento e do balanço de energia no processo [4, 60].

A quebra de partículas é um processo que também está relacionado à interação entre partículas e ao padrão do escoamento. A quebra de partículas é modelada como sendo originária de três fenômenos principais: a colisão partícula-partícula ou da partícula com alguma superfície rígida (mais comum para partículas sólidas) [80], a quebra provocada devido à deformação que a fase contínua pode impor sobre as partículas em escoamentos cisalhantes e, por fim, a exposição da partícula a um escoamento turbulento que provoca mudanças na forma da mesma devido as forças inerciais e coesivas [81].

Assim como para o caso da agregação, a modelagem do termo de quebra  $H_b(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t)$  também é dividido em duas parcelas: uma que representa a morte e outra o nascimento de partículas pelo processo de quebra:

$$H_b(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t) = -b(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t)f(\mathbf{x}, \mathbf{z}, t) + \int_{\Omega_{\mathbf{x}'}} \int_{\Omega_{\mathbf{z}'}} \vartheta(\mathbf{x}', \mathbf{z}', \mathbf{Y}, t)b(\mathbf{x}', \mathbf{z}', \mathbf{Y}, t)P(\mathbf{x}, \mathbf{z} | \mathbf{x}', \mathbf{z}', \mathbf{Y}, t) f(\mathbf{x}', \mathbf{z}', t) d\mathbf{V}_{\mathbf{x}'} d\mathbf{V}_{\mathbf{z}'} \quad (3.8)$$

onde  $b(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t)$  é a frequência de quebra e  $\vartheta(\mathbf{x}', \mathbf{z}', \mathbf{Y}, t)$  é o número médio de partículas filhas formadas pela quebra de uma partícula mãe de estado  $(\mathbf{x}', \mathbf{z}')$ . Valores de  $\vartheta \geq 2$  podem ser admitidos, contudo, devido a não se ter um conhecimento muito detalhado deste parâmetro, o mais usual é assumir  $\vartheta = 2$ . Estudos mais recentes mostraram que esse parâmetro pode assumir valores diversos podendo chegar a mais de 30 em certos casos [1, 64].

O termo  $P(\mathbf{x}, \mathbf{z} | \mathbf{x}', \mathbf{z}', \mathbf{Y}, t)$  corresponde à função densidade de probabilidade das partículas formadas pela quebra de uma partícula de estado  $(\mathbf{x}', \mathbf{z}')$ , em um instante  $t$  e no ambiente caracterizado por  $\mathbf{Y}$ , virem a possuir o estado  $(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ .

Para propriedades internas como a massa da partícula ou o volume, no caso de partículas incompressíveis, a função  $P(\mathbf{x}, \mathbf{z} | \mathbf{x}', \mathbf{z}', \mathbf{Y}, t)$  apresenta as propriedades listadas abaixo [3]:

- Nenhuma partícula filha tem massa,  $m$ , maior que a partícula mãe ou geradora:

$$P(\mathbf{x}, \mathbf{z} | \mathbf{x}', \mathbf{z}', \mathbf{Y}, t) = 0, \quad \forall m(\mathbf{x}) \geq m(\mathbf{x}') \quad (3.9)$$

- A probabilidade total de serem geradas partículas filhas com massa menor ou

igual a massa da partícula mãe é unitária:

$$\int_{\Omega_x} P(\mathbf{x}, \mathbf{z} | \mathbf{x}', \mathbf{z}', \mathbf{Y}, t) d\mathbf{V}_x = 1 \quad (3.10)$$

- A massa se conserva no processo de quebra, logo a soma das massas de todas as partículas filhas é exatamente igual a massa da partícula mãe:

$$\int_{\Omega_x} m(\mathbf{x}) P(\mathbf{x}, \mathbf{z} | \mathbf{x}', \mathbf{z}', \mathbf{Y}, t) d\mathbf{V}_x = \frac{m(\mathbf{x}')}{\vartheta(\mathbf{x}', \mathbf{z}', \mathbf{Y}, t)} \quad (3.11)$$

Uma revisão mais detalhada sobre a modelagem da PBE pode ser vista em RAM-KRISHNA [3]. Um ponto que merece atenção é a modelagem das frequências de agregação e de quebra. Muitas vezes estes termos introduzem uma razoável complexidade na resolução das integrais associadas aos processos de quebra e agregação. Um aprofundamento maior na modelagem dos fenômenos de quebra e agregação pode ser encontrada nos trabalhos de CHESTERS [82], LASHERAS *et al.* [83], LIAO e LUCAS [84], LIAO e LUCAS [85] e MITRE [1]. Este último fornece uma revisão detalhada dos modelos de quebra e agregação de partículas e propõe um novo modelo para o caso de gotas em emulsões. A modelagem usada neste trabalho para as frequências de quebra e agregação serão discutidas em detalhes mais adiante.

O aumento e a diversificação do uso de balanço populacional pela comunidade científica causou também um aumento da procura por métodos acurados e eficientes para resolver a PBE. Atualmente, a quantidade de métodos encontrados na literatura é bastante vasta. Contudo, a grande maioria dos trabalhos encontrados na literatura resolvem problemas de balanço populacional monovariados e homogêneos, ou seja, resolve-se a evolução temporal da PBE para uma única variável interna e ignora-se a dependência espacial [3]. Um detalhamento dos métodos que podem ser usados para se resolver a PBE será apresentado na seção a seguir.

## 3.2 Solução da Equação de Balanço Populacional

A literatura sobre métodos de solução da PBE é muito vasta, tendo em vista que esse assunto abrange diversas áreas de aplicação.

A PBE é uma equação integro-diferencial que, devido à sua complexidade, não tem, usualmente, solução analítica. Com a imposição de hipóteses simplificadoras, soluções analíticas podem ser obtidas, mas possuem serventia restrita apenas para a validação de metodologias numéricas.

O uso de metodologias semi-analíticas, as quais usam o método das características, aproximações sucessivas, gerações sucessivas ou a transformada de Laplace,

conseguem resolver uma modelagem um pouco mais abrangente que os métodos puramente analíticos, mas, ainda assim, necessitam de muitas restrições na modelagem [3].

Os métodos numéricos acabam sendo a alternativa mais abrangente para se resolver os problemas de balanço populacional com aplicação prática. Em geral, os métodos numéricos podem ser divididos nas seguintes categorias:

- Métodos estocásticos (Subseção 3.2.1);
- Métodos que aproximam a função distribuição (Subseção 3.2.2);
- Métodos de classes (Subseção 3.2.3);
- Métodos de momentos e métodos que aproximam os momentos da distribuição (métodos híbridos) (Subseção 3.2.4);

### 3.2.1 Métodos Estocásticos

Os métodos estocásticos ou métodos de Monte-Carlo (MC) utilizam a estatística de uma amostra de partículas, sujeitas à ação de diferentes fenômenos como crescimento, agregação, quebra, etc., para simular a evolução do conjunto real de partículas. Os eventos que levam à evolução da amostra de partículas acontecem de forma randômica e com probabilidade especificada pelas características do sistema particulado.

Os primeiros trabalhos envolvendo a simulação de problemas de balanço populacional usando métodos de MC foram feitos pela comunidade científica da área de aerossóis [73]. O trabalho de SPIELMAN e LEVENSPIEL [86] foi o primeiro a efetivamente aplicar o método de MC na área da engenharia química. No referido trabalho os autores investigaram o efeito da mistura de gotas na taxa de conversão de reações químicas de uma dispersão líquido-líquido. Posteriormente, no trabalho de COLLINS e KNUDSEN [87], foram simuladas a coalescência e a quebra de gotas em escoamentos turbulentos novamente para uma dispersão líquido-líquido. Uma simulação mais abrangente usando MC foi feita por ZEITLIN e TAVLARIDES [88, 89] que avaliaram a evolução do tamanho de gotas em misturadores e tanques agitados para os processos de quebra e coalescência.

Os métodos de MC empregados na resolução de PBEs podem ser divididos em algoritmos controlados pelo tempo (*time-driven*) ou por eventos (*event-driven*).

Nos algoritmos controlados pelo tempo, um passo de tempo é pré-estabelecido e todos os micro-eventos possíveis são então tratados (agregação, quebra, nucleação, etc.). O passo de tempo deve ser menor que a escala de tempo da ocorrência dos micro-eventos. Um algoritmo de MC controlado pelo tempo foi proposto por LIFFMAN [90] para a simulação de agregação de partículas.

Nos algoritmos controlados por eventos, calcula-se primeiramente o padrão dos mesmos, de acordo com a taxa média de ocorrência de todos os eventos possíveis, e então o evento que obtém sucesso é tratado e finalmente o tempo é ajustado de acordo com a escala de tempo do evento. Fica claro que os principais problemas neste tipo de abordagem são a determinação do intervalo de tempo entre dois eventos e o tratamento que deve ser dado aos eventos que obtiveram sucesso.

Apesar da grande maioria dos trabalhos publicados na literatura simularem casos monovariados a extensão do método MC para PBEs multivariadas vem sendo bastante explorada atualmente.

MEIMAROGLOU e KIPARISSIDES [91] resolveram uma PBE bivariada para processos de crescimento e agregação e conseguiram predizer a evolução da distribuição bivariada com certa acurácia e com um custo computacional aceitável, apesar do custo computacional aumentar bastante com o aumento do tamanho da amostra da população utilizada. Recentemente, MEIMAROGLOU *et al.* [92] usaram esta mesma metodologia para simular a distribuição de peso molecular e de propriedades topológicas das moléculas de polietileno de baixa densidade (LDPE) produzidos em reatores tubulares a altas pressões.

IRIZARRY [93] desenvolveu o método MC baseado em conjunto, *Point Ensemble Monte Carlo* (PEMC), para aplicação em sistemas particulados multivariados. Neste método vários conjuntos de partículas foram usadas no domínio local e um método direto de MC foi utilizado para construir o processo de Markov usado para aproximar a função de distribuição. Com esse método, o autor conseguiu uma redução considerável do esforço computacional mantendo uma acurácia numérica razoável. O mesmo autor propôs também uma variante do método anterior, conseguindo uma diminuição do esforço computacional para resolver os mesmos casos [94].

### 3.2.2 Métodos que aproximam a Função Distribuição

Os métodos que aproximam a função distribuição utilizam bases no espaço de funções das variáveis internas, cujos elementos podem ter suporte global, empregando-se usualmente expansões polinomiais, ou suporte local, quando o domínio das variáveis internas é discretizado. Estes métodos tem a dificuldade intrínseca ao tentar aproximar funções de distribuição que não pertencem ao espaço  $\mathcal{L}_2$ , como, por exemplo, a função delta de Dirac.

Os coeficientes da aproximação funcional são usualmente determinados através da formulação fraca da PBE, originando os métodos de resíduos ponderados (*Weighted Residuals Methods* - WRM). SUBRAMANIANAND e RAMKRISHNA [95] foram os primeiros a utilizarem o método WRM com base global para resolução

de problemas de balanço populacional. Uma revisão mais detalhada sobre WRM usando bases globais pode ser encontrada em RAMKRISHNA [3, 79], HULBURT e AKIYAMA [96] e RAMKRISHNA [97].

O método dos mínimos quadrados (*Least Squares Method* - LSM) também pode ser considerado como sendo um caso especial do WMR. O uso do método dos mínimos quadrados para solução da PBE foi usada nos trabalhos de DORAO e JAKOBSEN [98, 99]. O método foi testado para problemas de quebra e agregação que possuem solução analítica. No LSM, o erro das propriedades da distribuição depende da ordem da expansão usada. ZHU *et al.* [100] testaram uma abordagem do LSM acoplada a um algoritmo de otimização direta para resolver a PBE considerando os processos de quebra e agregação e compararam os resultados com soluções obtidas pelo método de diferenças finitas. Os autores comentaram que o termo de agregação introduz um comportamento bastante não-linear, afetando a robustez dos *solvers* numéricos.

A fim de aplicar o método LSM para resolver problemas com geometria e solução complexas, DORAO e JAKOBSEN [101] propuseram a versão *hp-adaptive* LSM espectral (*Least Squares Spectral Element Method* - LSSEM). O LSSEM combina a aproximação local usada pelos métodos de elementos finitos, a positividade simétrica da formulação LSM e a alta acurácia dos métodos espetrais. Contudo, o LSSEM exige um esforço computacional muito grande, pois as aproximações de ordem elevada foram usadas de forma uniforme em todo o domínio computacional.

Os métodos que usam bases com suporte local podem ser vistos como variantes do método de elementos finitos. Devido à considerável maturidade e flexibilidade desses métodos, boa parte dos trabalhos mais antigos usaram essa metodologia para resolver a PBE. A discretização feita transforma a PBE da forma contínua para um conjunto de equações algébrico-diferenciais passível de ser resolvido por diferentes métodos numéricos [3].

Os métodos de elementos finitos (*Finite Element Method* - FEM) foram primeiramente usados por GELBARD e SEINFELD [102]. A escolha da função peso como sendo a função delta de Dirac caracteriza os métodos de colocação. Se ao invés disso, for usado a função peso como sendo a própria base da expansão funcional chega-se ao método de Galerkin [103]. STEEMSON e WHITE [104] usaram colocação ortogonal *spline* para resolver problemas estacionários de nucleação e crescimento. O método de colocação também foi usado por EYRE *et al.* [105], porém usando malha adaptativa.

Uma nova variante de FEM foi proposta por CHEN *et al.* [106] o qual foi chamado de método *wavelet-Galerkin*. Os autores demonstraram sua aplicação para resolver uma PBE monovariada para predizer a distribuição de tamanho de partículas. Mais tarde, LIU e CAMERON [107] usaram este mesmo método para a predição acurada

de descontinuidades.

A aplicação do método Galerkin/FEM para uma função distribuição bivariada foi feita recentemente no trabalho de ALEXOPOULOS *et al.* [108]. Foram analisados vários mecanismos de agregação e crescimento. As simulações geraram resultados com acurácia elevada, mas, como comentado pelos próprios autores, as custas de um esforço computacional significativo.

Apesar dos métodos de elementos finitos calcularem a distribuição de tamanho com acurácia elevada, a conservação dos momentos usualmente não é considerada. Para tal, o método de volumes finitos (*Finite Volume Method* - FVM) foi usado em alguns trabalhos, como por exemplo, em BOURGADE e FILBET [109] e KUMAR *et al.* [110]. A aplicação de métodos de volumes finitos para uma PBE bivariada foi feita no trabalho de QAMAR e WARNECKE [111]. Contudo, o uso de métodos de volumes finitos para resolver problemas de balanço populacional ainda é muito raro.

A aplicação do método de diferenças finitas (*Finite Difference Method* - FDM) para a solução da PBE também pode ser encontrada em alguns trabalhos da literatura. Os métodos de diferenças finitas resultam na discretização direta da PBE [112]. TSANG e RAO [113] mostraram que resultados numéricos obtidos usando diferenças finitas e o método das classes são bastante similares, tratando os métodos como equivalentes. Neste mesmo trabalho os autores analisaram a performance de diferentes esquemas de interpolação para processos de condensação.

IMMANUEL e DOYLE III [114] desenvolveram o método chamado *hierarchical two-tier solution strategy* onde a PBE é primeiramente discretizada em sub-populações e, posteriormente, é reformulada para cada uma dessas sub-populações. Diferentes níveis de malha podem ser usados. Duas funções de distribuição são definidas, uma para a malha grossa e outra para a fina. Fenômenos como coagulação podem ser considerados na malha grossa ao passo que nucleação e crescimento são considerados na malha fina. Nesse método, as integrais podem ser simplificadas por soluções semi-analíticas resultando em uma diminuição do esforço computacional. O método foi aplicado para resolver uma PBE multidimensional para processos de granulação. A ênfase dos autores foi sobre a técnica de solução numérica e somente formas simples para o modelo de agregação foram usadas.

Uma revisão mais completa sobre métodos de discretização para solução de problemas de balanço populacional pode ser encontrada em RAMKRISHNA [3, 79], VANNI [115], ALEXOPOULOS e KIPARISSIDES [116] e NOPENS e VANROLLEGHEM [117].

### 3.2.3 Métodos de Classes

Os métodos de classes (*Methods of Classes* - MoC) são métodos que buscam a representação da distribuição de partículas por uma discretização em um número finito de classes. As densidades numéricas das partículas das classes são os momentos seccionais de ordem zero. Assim, o domínio das variáveis internas é discretizado e um valor único de cada variável interna é usado para representar cada uma das classes. A PBE é então transformada em um sistema de equações diferenciais que pode ser resolvido numericamente.

Para um problema monovariado e definindo-se o intervalo  $[x_i, x_{i+1})$  por  $I_i$ , o momento seccional  $M_i$  que representa o número total de partículas neste intervalo é dado por [118]:

$$M_i(t) \equiv \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, t) dx, \quad i = 1, \dots, N \quad (3.12)$$

Um intervalo  $I_i$  pode ser descrito por um *pivô*,  $v_i$ , que representa as partículas do intervalo. Assim, a função densidade numérica pode ser representada por:

$$f(x, t) \approx \sum_{i=1}^N M_i \delta(x - v_i) \quad (3.13)$$

onde  $\delta$  é a função delta de Dirac.

Para um problema homogêneo monovariado que considera somente os fenômenos de quebra e agregação de partículas a PBE discretizada é dada por [3, 118]:

$$\begin{aligned} \frac{dM_i}{dt} &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} M_j \sum_{(v_j+v_k) \in I_i} M_k a(v_k, v_j) - M_i \sum_{j=1}^N M_j a(v_i, v_j) \\ &\quad + \sum_{j=1}^N M_j \vartheta(v_j) b(v_j) \int_{x_i}^{x_{i+1}} P(x, v_j) dx - b(v_i) M_i \\ &\quad i = 1, \dots, N \end{aligned} \quad (3.14)$$

ou seja, a PBE é agora representada por uma equação diferencial ordinária para cada uma das  $N$  classes usadas.

Os métodos das classes podem ser separados em internamente consistentes ou inconsistentes com relação à propriedade integral analisada. A consistência interna implica que a discretização da PBE, submetida a um operador integral, é igual a forma discreta deste operador aplicado à PBE discretizada. Em geral, os MoC's apresentam consistência interna para poucas propriedades integrais da população. No caso monovariado, eles geralmente são consistentes apenas para os momentos de ordem zero e um. Uma questão bastante discutida na literatura de MoC é a conservação dos momentos de alta ordem, que por sua vez representam propriedades

físicas importantes, como por exemplo, a área interfacial das partículas.

São encontrados muitos trabalhos na literatura sugerindo diferentes tipos de discretizações. BLECK [119] foi quem introduziu as primeiras ideias usando uma discretização geométrica do tipo  $x_{i+1} = 2x_i$  para problemas de agregação pura onde a distribuição da propriedade pode variar rapidamente para tamanhos maiores.

Já BATTERHAM *et al.* [120] introduziram uma modificação para que o momento de primeira ordem fosse exatamente conservado. Para isto, as partículas criadas que não coincidiam com os pontos nodais, *pivôs*, eram distribuídas para os pontos nodais vizinhos. Contudo, esta conservação artificial do momento de primeira ordem introduz erros nos outros momentos, inclusive no de ordem zero.

Mais recente, os trabalhos de LISTER *et al.* [121], HILL e NG [122] e KUMAR e RAMKRISHNA [123, 124] deram mais flexibilidade aos métodos do tipo MoC com relação à malha utilizada. O último também permite a conservação de dois momentos quaisquer. No trabalho de KUMAR e RAMKRISHNA [125] foi desenvolvida uma metodologia baseada no método das características para resolver problemas de crescimento que apresentam descontinuidades. KUMAR *et al.* [126] também propuseram melhorias para o MoC usando uma técnica de média em célula (*cell average*) que possibilita calcular de forma mais acurada o termo de agregação. O método foi aplicado para resolver problemas de agregação, incluindo modelos com relevância física.

Apesar do MoC ter sido desenvolvido para distribuições monovariadas, recentemente surgiram alguns trabalhos estendendo o método para casos multidimensionais. VALE e MCKENNA [127] estenderam o método de pivôs fixos para simular processos de agregação bivariados. As duas coordenadas  $x$  e  $y$  e seu produto  $xy$  são conservadas.

CHAKRABORTY e KUMAR [128] desenvolveram uma variante do MoC usando pivôs fixos a fim de conservar várias propriedades da partícula. Malhas triangulares e tetraédricas foram usadas para resolver problemas 2 e 3-D, respectivamente. Os autores comentam que um aumento na qualidade da solução numérica pode ser conseguida alterando-se a direcionalidade da malha através de um reagrupamento de pivôs. NANDANWAR e KUMAR [129] usaram esse método para resolver problemas de quebra e agregação 2-D e CHAUHAN *et al.* [130] resolveram problemas de agregação pura e de quebra e agregação combinadas.

### 3.2.4 Métodos de Momentos e Variantes

O método dos momentos (*Method of Moments* - MoM) é um método bastante antigo e muito usado na resolução da PBE. HULBURT e KATZ [72] foram os primeiros a utilizarem este método [73]. A essência do método dos momentos é a transformação

da PBE em um conjunto de equações diferenciais ordinárias que representam a dinâmica dos momentos de uma distribuição. A transformação da PBE em equações de evolução dos momentos é acompanhada pela perda de informação da forma da distribuição, uma vez que mais de uma distribuição pode ter um mesmo conjunto finito de momentos.

Um problema do método dos momentos é a obtenção de um sistema de equações fechado, como comentado no próprio trabalho de HULBURT e KATZ [72]. Porém, com o passar do tempo foram surgindo diferentes soluções para este problema. O método de momentos com fechamento por interpolação (*Method of Moments with Interpolative Closure - MoMIC*) foi sugerido primeiramente por FRENKLACH e HARRIS [131] e recentemente estendido por FRENKLACH [132] e DIEMER e OLSON [133]. O MoMIC foi usado recentemente também para resolver uma PBE bivariada considerando fenômenos de quebra e coalescência [134] e também aplicado para resolver problemas de balanço populacional acoplado com simulação CFD [135].

Um método bastante geral para resolver o problema de fechamento foi proposto por MCGRAW [136] e é conhecido como método de momentos com fechamento por quadratura (*Quadrature Method of Moments - QMoM*). O QMoM usa o conceito de quadratura Gaussiana para aproximar as integrais da PBE, a qual é obtida a partir dos momentos da distribuição. Neste tipo de aproximação os parâmetros da quadratura, pesos,  $w_i$ , e abscissas,  $x_i$ , (Equação 3.15) são determinados a partir dos  $2N$  momentos (Equação 3.16) da PBE monovariada. Considerando que a propriedade interna da PBE é aditiva, tem-se:

$$f(x, t) = \sum_{i=1}^N w_i(t) \delta(x - x_i(t)) \quad (3.15)$$

e

$$\mu_k = \int_0^\infty x^k f(x, t) dx = \sum_{i=1}^N x_i^k w_i \quad (3.16)$$

Quando a Equação 3.16 é substituída na PBE se obtêm as equações para evolução dos momentos, por exemplo, considerando somente o termo advectivo e os efeitos de quebra e agregação para uma PBE monovariada, tem-se [136]:

$$\begin{aligned} \frac{d\mu_k}{dt} + \nabla \cdot [\bar{\mathbf{u}}_k \mu_k] &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [(x_i + x_j)^k - x_i^k - x_j^k] a(x_i, x_j) w_i w_j \\ &+ \sum_{i=1}^N w_i b(x_i) [\vartheta(x_i) \Pi_k(x_i) - x_i^k] \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde  $\bar{\mathbf{u}}_k$  é a velocidade na qual o momento  $k$  é advectado:

$$\bar{\mathbf{u}}_k = \frac{\int_0^\infty x^k \mathbf{u}_d f(x) dx}{\int_0^\infty x^k f(x) dx} \quad (3.18)$$

$\mathbf{u}_d$  é a velocidade da fase dispersa e os momentos da densidade de probabilidade de quebra são dados por:

$$\Pi_k(x_i) = \int_0^{x_i} x^k P(v|x_i) dv \quad (3.19)$$

Quando o QMoM é aplicado à solução de uma PBE monovariada pode-se usar o algoritmo PD (*Product-Difference*), desenvolvido por GORDON [137], para resolver o problema da obtenção da quadratura a partir dos momentos. Com o uso do algoritmo PD, o problema de inversão se resume a solução de um problema de autovalor/autovetor de uma matriz de Jacobi.

O QMoM apresenta um custo computacional muito reduzido quando comparado ao método da classes. Devido à eficiência e acurácia do QMoM ele logo ganhou boa aceitação pela comunidade científica e passou a ser uma alternativa viável para aplicações envolvendo balanço populacional heterogêneo. O acoplamento do método QMoM com códigos de CFD já foi descrito em vários trabalhos [6, 7, 138–141].

A aplicação do QMoM para um caso bivariado foi apresentada primeiramente por WRIGHT *et al.* [15]. O grande problema do QMoM para casos multivariados é a dificuldade em se obter pontos de quadratura no espaço multidimensional a partir da inversão de um conjunto de momentos multivariados. Visando resolver o problema da inversão de momentos multivariados, recentemente, YOON e MCGRAW [8, 16] apresentaram os conceitos matemáticos e estatísticos para a extensão multivariada do método QMoM usando a análise de componentes principais (*Principal Component Analysis - PCA*).

Para eliminar a necessidade da inversão de momentos, da qual o QMoM é dependente, MARCHISIO e FOX [142] propuseram uma variação do QMoM, denominada de DQMoM (*Direct Quadrature Method of Moments*). Este método resolve equações diferenciais para evoluir diretamente a discretização da distribuição, isto é, os pesos e abscissas, ao invés dos momentos. A inversão dos momentos em pontos de quadratura só é necessária para gerar a condição inicial e de contorno.

No DQMoM, a aproximação dada pela Equação 3.15 é substituída diretamente na PBE, resultando num sistema de equações para evolução dos pesos  $w_i$  e abscissas  $x_i$ . Considerando somente o termo advectivo da PBE, após certa manipulação, a equação para o DQMoM em termos de abscissa ponderada,  $\varsigma_i = w_i x_i$ , e para um caso monovariado é dada por:

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{u}_i w_i] = \theta_i, \quad \frac{\partial \varsigma_i}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{u}_i \varsigma_i] = \kappa_i \quad (3.20)$$

onde  $\theta_i$  e  $\kappa_i$  são os termos fonte das equações do DQMoM para os pesos e abscissas ponderadas, sendo dados pela solução do sistema linear de equações dado por:

$$(1 - k) \sum_{i=0}^{N-1} x_i^k \theta_i + k \sum_{i=0}^{N-1} x_i^{k-1} \kappa_i = \bar{H}_k \quad (3.21)$$

onde

$$\bar{H}_k = \int_0^\infty x^k H(x, t) dx \quad (3.22)$$

O DQMoM é um bom método para aplicações PB-CFD. O uso do método acoplado com simulações CFD já foi apresentada em alguns trabalhos, por exemplo, MARCHISIO *et al.* [6], SILVA e LAGE [9], MAZZEI *et al.* [10], ZUCCA *et al.* [143] e BUFFO *et al.* [13].

A aplicação do DQMoM para problemas multivariados vem sendo bastante explorada atualmente. Apesar de não ter o problema associado com a inversão de momentos multivariados, o método DQMoM mostrou-se bastante dependente da escolha do conjunto de momentos usados. Em FOX [12] foi avaliado o efeito da escolha do conjunto de momentos bivariados e da ordem  $N$  da aproximação por quadratura sobre a estabilidade do método DQMoM. Os autores encontraram que, em geral, para  $N$  fixo, todos os conjuntos de momentos bivariados que não geram singularidade na matriz de coeficientes do DQMoM levam a resultados praticamente idênticos. Todavia, certas escolhas para o conjunto de momentos levam a uma matriz mais bem condicionada.

Mais recentemente, FOX [11] demonstrou que uma escolha ruim do conjunto de momentos pode levar a abscissas não únicas e pesos negativos. O autor desenvolveu uma metodologia sem fundamentação matemática para escolher o conjunto de momentos para que a matriz de coeficientes do DQMoM seja não singular e tenha um posto adequado.

Tanto o QMoM quanto o DQMoM apresentam dificuldades na obtenção de solução, devido à perda de acurácia numérica, para problemas onde a magnitude dos momentos variam numa faixa ampla. Quando isso ocorre, o algoritmo PD encontra dificuldades e é incapaz de calcular a quadratura que representa o conjunto de momentos. No caso do DQMoM, seu sistema linear de equações se torna muito mal condicionado, com a matriz tornando-se quase singular. Outro problema é que a aproximação das integrais do termo fonte da Equação 3.3 é feita por quadraturas de poucos pontos e há casos onde as funções de quebra ou agregação (Equação 3.8 e Equação 3.7) são suficientemente complexas podendo levar a grandes erros nas aproximações das integrais.

Para tentar contornar os problemas de mal condicionamento da matriz do sistema de equações do DQMoM surgiram os métodos M-QMoM (*Modified QMoM*) [144]

e ADQMoM (*Adjustable Direct Quadrature Method of Moments*) [145]. Esses dois métodos são variações do QMoM e DQMoM, respectivamente, e a ideia principal é calcular momentos com ordens variáveis para modificar a magnitude relativa dos mesmos e evitar problemas com instabilidades numéricas. Dessa forma, resolve-se:

$$\mu_k = \int_0^\infty x^{k/p} f(x, t) dx \quad (3.23)$$

onde  $p$  é um fator ajustável e em teoria pode ser qualquer número inteiro positivo.

ATTARAKIH *et al.* [146] propuseram um método que resolve os momentos da PBE de forma acurada e ao mesmo tempo consegue uma representação da distribuição. O SQMoM (*Sectional Quadrature Method of Moments*) discretiza o domínio das variáveis internas e aplica o método QMoM para cada sub-intervalo e, similarmente ao QMoM, usa o algoritmo PD. Quanto maior o número de sub-intervalos melhor será a reprodução da função distribuição. Por outro lado, quanto maior a quantidade de momentos resolvidos em cada sub-intervalo, maior será a acurácia dos momentos.

Recentemente, LAGE [147] introduziu o método DuQMoGeM (*The Dual Quadrature Method of Generalized Moments*) que usa duas quadraturas, uma regra de quadratura de alta acurácia para calcular as integrais do termo fonte da PBE e uma quadratura Gauss-Christoffel para discretizar o domínio das variáveis internas. O método se mostrou acurado para resolver os problemas analisados: crescimento puro, agregação pura, quebra pura e quebra e agregação combinadas. Resultados acurados foram obtidos também para o caso da frequência de quebra não ser descrita corretamente por uma base polinomial, onde o QMoM e o DQMoM apresentam problemas de acúmulo de erros. Mais recentemente, no trabalho de SANTOS *et al.* [148] foi desenvolvido o D<sup>2</sup>uQMoGeM (*Direct Dual Quadrature Method of Generalized Moments*) que é uma versão direta do DuQMoGeM, ou seja, mistura as propriedades do DQMoM com as do DuQMoGeM. A solução de problemas de balanço populacional usando o DuQMoGeM juntamente com integração adaptativa resolvida em placas de processamento gráfico (*Graphics Processing Unit - GPU*) foi mostrada posteriormente no trabalho de SANTOS *et al.* [149].

O EQMoM (*Extended Quadrature Method of Moments*) [150] é outro método que também explora a ideia de usar duas quadraturas para calcular as integrais do termo fonte da PBE com acurácia elevada. A diferença é que, neste método, a distribuição é aproximada pelas chamadas KDFs (*Kernel Density Function*) ao invés de uma base polinomial, como no caso do DuQMoGeM. As KDFs podem ser diferentes funções de distribuição, como por exemplo, as distribuições Beta, Gamma ou Gaussiana, entre outras.

BUFFO *et al.* [13] fizeram simulações do escoamento de gás em líquido em um

tanque agitado admitindo a velocidade, o tamanho e a composição como variáveis internas e usaram o DQMoM para resolver a PBE. Os autores evidenciaram problemas relacionados à difusão numérica e falta de conservação de momentos. A solução para este problema foi apresentada por BUFFO *et al.* [151] num trabalho posterior. Nesse trabalho os autores desenvolveram o método DQMoM-FC (*Direct Quadrature Method of Moments Fully Conservative*) que resolveu o problema de difusão numérica e de falta de conservação de momentos observados com o DQMoM.

Recentemente, também foi proposto o método CQMoM (*Conditional Quadrature Method of Moments*) para solução de problemas de balanço populacional multivariado [152, 153]. Nesse método, os momentos da PBE são transportados e/ou resolvidos, tal qual o QMoM para o caso monovariado. A inversão do conjunto de momentos multivariados é feita usando uma metodologia baseada em cálculo de momentos condicionados. Uma descrição detalhada assim como uma análise do método de momentos condicionados será feita mais adiante. O CQMoM foi usado recentemente em simulações envolvendo balanço populacional heterogêneo. No trabalho de PETITTI *et al.* [154] o método foi usado para simular um reator gás-liquido agitado e BUFFO *et al.* [155] simularam uma coluna de borbulhamento.

### 3.2.5 Avaliação crítica dos Métodos para Solução da PBE

A existência de uma vasta literatura tratando da solução de problemas de balanço populacional é explicada pela complexidade envolvida na solução da PBE. Por exemplo, o método das características é uma boa opção para resolver uma PBE que modela fenômenos de crescimento puro. Contudo, com a adição dos fenômenos de agregação e quebra, o método das características usualmente deixa de ser uma opção viável se comparado a outros métodos existentes. Por outro lado, a maioria dos métodos que resolvem bem os fenômenos de agregação e quebra apresentam dificuldades em resolver bem os problemas de crescimento.

O fato é que, ainda hoje, não existe um método robusto que resolva de forma acurada todos os fenômenos que podem ser modelados pela PBE. Dessa forma, enquanto não se tiver um método que resolva de forma definitiva esta questão o mais sensato é usar o método que melhor atenda às expectativas. Encontram-se inúmeros trabalhos na literatura comparando diferentes métodos para solução da PBE, para citar alguns mais recentes, SILVA *et al.* [156] e LEMANOWICZ e GIERCZYCKI [157].

Uma questão crucial que deve ser considerada na hora da escolha de um método para solução da PBE é a facilidade do acoplamento com códigos de CFD. Muitos métodos apresentam aplicação prática restrita a problemas homogêneos. Outra questão importante, principalmente no tangente a este trabalho, é a viabilidade da

extensão para casos multivariados.

Os métodos estocásticos (MC), vistos na Subseção 3.2.1, apresentam as vantagens de serem de fácil implementação e extensão para casos multivariados. Porém, os resultados numéricos obtidos com esses métodos usualmente apresentam ruídos e o acoplamento com códigos de CFD é bastante complicada, visto a natureza discreta do método e o alto custo computacional [91, 93, 94, 158].

Os métodos baseados em WRM, vistos na Subseção 3.2.2, e o MoC, vistos na Subseção 3.2.3, são simples e geralmente permitem calcular a distribuição de forma acurada [121–124]. O MoC também pode ser usado de forma acoplada a CFD [159–161]. Apesar disso, um problema de métodos como FEM e MoC é que eles truncam o domínio semi-infinito e fica difícil tratar os eventos que geram partículas cujo tamanho não está dentro do limite máximo especificado. O erro de domínio finito faz com que a quantidade de momentos conservada seja limitada. Uma baixa acurácia na predição dos momentos resultará numa performance ruim do método quando usado acoplado com CFD [162]. O aumento da acurácia é conseguida com o uso de uma discretização mais fina, porém isso reflete em um aumento significativo do custo computacional. Para casos multivariados o problema passa a ser muito mais crítico.

Os métodos que aproximam os momentos da PBE (QMoM, DQMoM, etc.), vistos na Subseção 3.2.4, possuem a grande vantagem de exigir um esforço computacional muito inferior aos outros métodos e também resolvem de forma relativamente acurada os momentos da PBE, propriedades estas desejáveis para o acoplamento PB-CFD [6, 136, 138, 139, 142]. A desvantagem desses métodos é a perda da informação da função distribuição e, para métodos como o QMoM e DQMoM, a solução poder apresentar erros elevados em problemas onde as funções de quebra e agregação são complexas. Além disso, o DQMoM também apresenta o problema de não conservar os momentos.

Os métodos DuQMoGeM e EQMoM são opções atrativas para se resolver problemas de balanço populacional acoplado com simulações CFD. A grande vantagem desses métodos é conseguir resolver um conjunto pré-selecionado de momentos da PBE com acurácia controlada e separar a solução da PBE da discretização usada para o acoplamento PB-CFD. A aplicação do método para problemas multivariados também é factível. Contudo, a aplicação para problemas de balanço populacional heterogêneo é um tanto complicada devido ao elevado custo computacional. Apesar desses métodos não dependerem da inversão dos momentos para evoluí-los, existe a necessidade da inversão para o acoplamento com CFD. Para problemas monovariados a inversão pode ser feita de forma bastante simples usando o algoritmo PD. Para casos multivariados o problema é um tanto quanto complicado sendo um dos objetos de estudo deste trabalho.

Por fim, se considerada a questão custo/benefício, o DQMoM-FC e o CQMoM estão entre as melhores alternativas disponíveis atualmente para solução de problemas de balanço populacional heterogêneo multivariado. São métodos com custo computacional bastante reduzido se comparado aos métodos DuQMoGeM e EQMoM e conseguem uma solução com acurácia aceitável. O DQMoM-FC tem a vantagem em relação ao CQMoM de necessitar da inversão de momentos somente para a inicialização.

# Capítulo 4

## CFD e o *Software* OpenFOAM

*Neste capítulo é introduzido o assunto de dinâmica de fluidos computacional e são apresentados alguns detalhes sobre o software de CFD chamado OpenFOAM*

### 4.1 Resolução de um Problema de CFD

A representação matemática de um escoamento qualquer é dado pelas equações de conservação (massa, quantidade de movimento, energia, etc.) e equações constitutivas de fechamento. Como a obtenção de soluções analíticas para este tipo de equações são na maioria dos casos, desconhecidas, torna-se necessária a aplicação de um método numérico. A fluidodinâmica computacional é usada para obter a solução numérica de um conjunto de equações diferenciais parciais, satisfazendo às condições iniciais e de contorno impostas.

O procedimento de resolução numérica de um problema de CFD consiste na discretização do domínio e das equações diferenciais parciais. Assim, as equações diferenciais parciais são aproximadas por um sistema de equações algébrico-diferenciais ordinárias (método das linhas) para um conjunto de pontos discretos no espaço que compõem uma malha computacional, ou por um sistema de equações algébricas para um conjunto de pontos discretos no espaço e no tempo.

Os métodos numéricos mais utilizados para resolução de escoamentos de fluidos são os de diferenças finitas (FDM), elementos finitos (FEM) e volumes finitos (FVM).

O método das diferenças finitas é o mais antigo desses métodos. Apesar de ter sido muito utilizado no passado, seu uso vem diminuindo, em favor do uso dos métodos de elementos e volumes finitos [163].

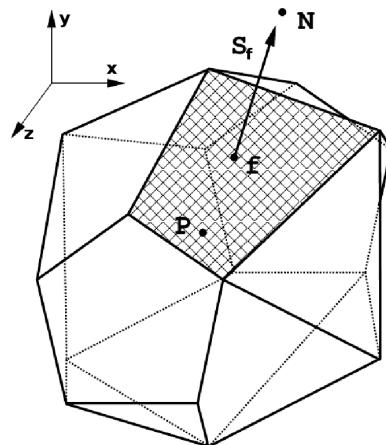
O método de elementos finitos se originou da necessidade de resolver problemas complexos de análise estrutural, normalmente encontrados na engenharia civil e aeronáutica. Ainda hoje o método de elementos finitos é de longe o mais usado na resolução de problemas envolvendo análise estrutural. Apesar de ser igualmente aplicável para resolver problemas de dinâmica de fluidos, ele geralmente não é muito

usado, à exceção de algumas áreas, como por exemplo, simulação de escoamentos de fluidos com comportamento viscoelástico, onde sem dúvidas ainda é o método mais usado. Encontram-se muitos trabalhos na literatura que usam este método e o desenvolvimento de novas metodologias em elementos finitos é um assunto ainda muito explorado [163, 164].

O método de volumes finitos surgiu no início da década de 70 em um cenário onde o uso dos métodos de diferenças finitas e elementos finitos estavam bem consolidados. Nesse método as equações discretizadas continuam representando equações de conservação para os volumes de controle (volumes finitos). Esta, entre outras vantagens como a estabilidade numérica e a menor quantidade de memória requerida, ocasionaram um rápido crescimento do uso desse método na área de fluidodinâmica computacional [165–168].

## 4.2 Método de Volumes Finitos

No método de volumes finitos o domínio é discretizado gerando uma malha computacional. A discretização espacial da equação diferencial parcial é feita integrando-se nas coordenadas espaciais todos os termos da equação para cada volume de controle definido no domínio. Com isso, uma aproximação da equação diferencial parcial é obtida para cada volume de controle elementar, como por exemplo, o representado pela Figura 4.1, onde o ponto  $P$  corresponde ao nó da célula de interesse, o ponto  $N$  é o nó de uma célula vizinha,  $f$  é a face de comunicação entre as duas células e  $\mathbf{S}_f$  é um vetor que representa a área da face do poliedro que fornece o volume de controle elementar. Dessa forma, o processo de discretização gera um conjunto de equações algébricas que, quando resolvido, fornece a informação das variáveis do problema em pontos discretos do domínio.



**Figura 4.1:** Volume de controle (adaptado de JASAK [168]).

Existe uma vasta literatura sobre o método de volumes finitos, para citar alguns

trabalhos, PATANKAR [165], FERZIGER e PERIC [166], PINTO e LAGE [169], MALISKA [170] e JASAK [168].

### 4.2.1 Tipo de Arranjo das Variáveis

Uma diferença encontrada em trabalhos que usam o método de volumes finitos é o tipo de arranjo das variáveis que é usado, podendo este ser co-localizado ou desencontrado. O arranjo co-localizado armazena todas as variáveis do problema no centro dos volumes de controle, enquanto que no arranjo desencontrado, duas ou mais variáveis estão localizadas em posições diferentes do volume. O arranjo desencontrado foi primeiramente o mais usado, contudo, atualmente, o arranjo co-localizado é muito mais usado tendo em vista que diversas vantagens são conseguidas com este arranjo, como por exemplo, menor uso de memória computacional e uma maior facilidade para se trabalhar com coordenadas generalizadas e diferentes topologias para os volumes de controle.

Além disso, o emprego de técnicas de malhas múltiplas (*multigrid*) só é viável usando este tipo de arranjo [171]. Um problema que surgiu com o uso do arranjo co-localizado foi o aparecimento de oscilações no campo de pressão. Contudo, o uso do método de interpolação de *momentum*, também conhecido como método de correção de Rhie-Chow [172], foi usado com sucesso para resolver esse problema. O método de interpolação de *momentum* consiste em fazer com que a velocidade nas interfaces, necessárias para o cálculo dos fluxos advectivos, dependam das pressões nos volumes vizinhos, “imitando” o arranjo desencontrado [168].

### 4.2.2 Esquemas de Interpolação

Uma questão crucial a ser discutida no método de volumes finitos se refere às funções de interpolação. Mesmo com malhas mais grosseiras, soluções mais acuradas podem ser conseguidas usando esquemas de alta ordem. Contudo, o aumento da ordem de interpolação pode causar problemas de instabilidade numéricas e soluções fisicamente irreais e com a presença de oscilações espúrias. Os esquemas de interpolação mais comumente usados em volumes finitos são de 1<sup>a</sup> ordem UDS (*Upwind Differencing Scheme*), 2<sup>a</sup> ordem CDS (*Central Differencing Scheme*) ou uma mistura desses, gerando um esquema híbrido HDS (*Hybrid Differencing Scheme*).

Os esquemas conhecidos como HRS (*High Resolution Schemes*) são exemplos de esquemas híbridos. Essa classe de métodos busca obter uma ordem elevada para a interpolação e uma solução livre de oscilações, podendo-se citar os esquemas de interpolação TVD (*Total Variation Diminishing*) [173–175] e NVD (*Normalised Variable Diagram*) [168, 176].

Outra possibilidade que vem sendo bastante explorada são os esquemas de alta

ordem conhecidos como WENO (*Weighted Essentially Non-Oscillatory*) [177, 178]. Neste tipo de esquema as oscilações são controladas com o uso de combinações convexas de diferentes esquemas de alta ordem.

### 4.2.3 Solução das Equações Discretizadas

A resolução das equações discretizadas pelo método de volumes finitos pode ser feita de duas formas: totalmente acoplada ou segregada. Na forma totalmente acoplada resolve-se um único sistema de equações composto por todas as equações que compõem o modelo. Na forma segregada, as diferentes equações do modelo são resolvidas de forma independente umas das outras, necessitando de uma etapa posterior de correção.

Em qualquer uma destas metodologias, acoplada ou segregada, a resolução do sistemas de equações não-lineares pode ser feita de duas maneiras. Uma delas é usar o método das substituições sucessivas usando ou não relaxação. A outra é usar o método de Newton para resolver o sistema não-linear. Em cada iteração deste método é necessário também resolver um sistema linear de equações algébricas.

O sistema de equações discretizado obtido com a aplicação do método de volumes finitos tem como característica apresentar elevada esparsidade. É indispensável considerar essa propriedade nos algoritmos de solução a fim de diminuir o esforço computacional.

Para resolver o sistema linear pode-se optar por usar métodos diretos ou iterativos. Os métodos diretos fazem a inversão completa da matriz usando por exemplo eliminação gaussiana ou fatorização (LU, Cholesky). Esses métodos demandam um elevado esforço computacional para problemas de grande dimensão. Os métodos iterativos são baseados na transformação do sistema linear em um procedimento iterativo onde, a partir de uma estimativa inicial, chega-se à solução desejada. Esses métodos demandam menor esforço computacional e por isso são os que são efetivamente usados em CFD. Como exemplos, se tem o método de Gauss-Seidel, o método GMRES (*Generalized Minimal Residual*), o método de CG (*Conjugate Gradient*) e seus derivados, métodos de malhas múltiplas como o GAMG (*Geometric-Algebraic Multi-Grid*), entre outros [179–183].

Um ponto não menos importante a se considerar é o uso de pré-condicionadores, pois, dependendo do procedimento iterativo aplicado, a matriz de coeficientes pode não ser diagonal dominante, ocasionando o surgimento de instabilidades numéricas. Alguns pré-condicionadores como o DIC (*Diagonal incomplete-Cholesky*), DILU (*Diagonal incomplete-LU*) e o AMG (*Algebraic Multi-Grid*) são bastante usados e conhecidos na literatura [184–187].

Cabe lembrar também que o uso da forma segregada para resolver escoamentos

incompressíveis deve ser acompanhada por um procedimento iterativo para resolver o acoplamento pressão-velocidade. Para tal, são muito usados os algoritmos como o SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*) [188] e o PISO (*Pressure Implicit Splitting of Operators*) [189], entre outros. Outros tipos de acoplamento requerem procedimentos específicos.

## 4.3 O OpenFOAM

O OpenFOAM (*Open Field Operation and Manipulation*) é um software de CFD de código aberto e de domínio público através da licença GPL (*Gnu Public License*).

As principais vantagens que motivam o uso do OpenFOAM e que vem dando ao *software* cada vez mais adeptos são:

- Código aberto. Não envolve investimentos com a compra de licenças e possibilita ao usuário desenvolver, verificar, manipular e incrementar o código.
- Escrito em linguagem C++. Como esta linguagem é orientada a objetos torna-se muito mais fácil a criação de novos códigos, uma vez que propriedades como abstração e encapsulamento de dados, herança, polimorfismo, etc., facilitam muito a usabilidade e a expansão do *software*.
- Possui incorporado um gerador de malhas e um visualizador de resultados.
- Possibilita fazer grandes simulações usando processamento paralelo.
- Utilização de malhas poliédricas e adaptativas ou móveis.
- Possibilidade de importação e exportação de dados. O *software* possui ferramentas que permitem a importação de malhas estruturadas ou não-estruturadas de diferentes *softwares* gratuitos ou comerciais e também permite a exportação dos resultados simulados para visualização em outros *softwares*.
- Ampla faixa de aplicação em problemas de engenharia. Além da solução de problemas de CFD o *software* permite também resolver problemas de análise estrutural, ficando muito mais fácil o acoplamento em problemas envolvendo multi-física.
- Flexibilidade ao usuário. Por exemplo, o *software* possui uma vasta quantidade de *solvers* para resolução de sistemas lineares de equações e dispõem de uma grande variedade de esquemas de interpolação.

A principal desvantagem do OpenFOAM, pelo menos a nível de usuário, é a inexistência de uma interface gráfica. Outra questão é a falta de uma boa documentação do *software*, ou seja, uma descrição detalhada da modelagem e metodologias numéricas disponíveis.

### 4.3.1 Simulação CFD usando o OpenFOAM

Cada caso deve seguir uma estrutura de diretórios que contém os arquivos que armazenam as informações necessárias. Estes arquivos possuem as informações sobre a modelagem, a geometria, detalhes da malha, condições de contorno, parâmetros para os métodos numéricos e as propriedades físicas do problema. A estrutura básica pode ser colocada como:

- <Diretório de Tempo>: contém os arquivos com informações das condições iniciais e de contorno para as variáveis do caso (por exemplo, campo de velocidade, pressão, tensão, etc.). O nome associado ao diretório <Diretório de Tempo> refere-se ao instante simulado no qual os dados são gravados.
- <system>: os arquivos contidos neste diretório estão associados ao procedimento de solução do problema. Devem existir pelo menos 3 arquivos neste diretório: o `controlDict`, o `fvSolution` e o `fvSchemes`.
- <constant>: deve conter os arquivos de propriedades físicas pertinentes ao caso, por exemplo, `transportProperties`. A descrição completa da geometria e da malha está incluída no sub-diretório `polyMesh`, nos arquivos `blockMeshDict` e `boundary`.

O OpenFOAM não possui um editor CAD (*Computer-Aided Design*) para construção da geometria do problema. As informações sobre a geometria são armazenadas e podem ser editadas no arquivo `blockMeshDict`. Contudo, pode-se importar geometrias e malhas geradas em outros *softwares*, como por exemplo, ICEM [190], NETGEN [191], TETGEN [192], GMSH [193] e SALOME [194]. Nesse quesito, o OpenFOAM é bastante flexível e aceita malhas do tipo poliédricas [195].

O OpenFOAM permite a paralelização da simulação usando MPI (*Message Passage Interface*) para a comunicação entre os computadores e a decomposição do domínio pode ser feita por diferentes métodos, destacando-se o METIS [196] e o SCOTCH [197] pela sua eficiência no particionamento da malha [195].

O OpenFOAM apresenta implementadas as principais condições de contorno, como entrada de massa (*inlet*), saída de massa (*outlet*), parede fixa ou móvel (*wall*), condição atmosférica (*atmospheric*), simetria (*symmetry*), entre outras. Porém nada impede ao usuário criar sua própria condição de contorno, caso julgue ser necessário.

O pós-processamento de dados e a visualização dos resultados pode ser feita de várias maneiras. A visualização normalmente é feita usando o software ParaView [198], que é um software muito versátil e gratuito. Outros *softwares* de visualização também podem ser usados, pois é possível converter os resultados fornecidos pelo OpenFOAM para formatos lidos por *softwares* como Fieldview [199], Ensight [200] e Tecplot [201]. Existe ainda uma ferramenta de conversão dos resultados do OpenFOAM para o formato VTK [202], possibilitando a leitura dos dados em qualquer visualizador que entenda este formato.

### 4.3.2 Desenvolvimento e Metodologia Numérica do OpenFOAM

Por ser um *software* de código aberto, o OpenFOAM permite a construção de *solvers* e utilitários, bastando para isto, que o desenvolvedor tenha conhecimento em CFD, linguagem C++ [203, 204] e um conhecimento básico da estrutura do OpenFOAM como os operadores, classes e algumas funções membros importantes. As fontes sobre programação no OpenFOAM são seus manuais (*User's Guide* e *Programmer's Guide*) e fóruns de internet [205]. O trabalho de JASAK [168] também apresenta detalhadamente vários aspectos sobre a formulação numérica, incluindo a metodologia de discretização, condições de contorno, etc., e a teoria dos algoritmos implementados no OpenFOAM como o acoplamento pressão-velocidade, a correção dos fluxos em malhas não estruturadas, etc.

A técnica de orientação a objetos usada pelo OpenFOAM permitiu criar tipos de dados muito próximos aos usados na mecânica do contínuo. As equações da mecânica do contínuo e os conceitos de escalares, vetores, tensores e seus respectivos campos, assim como a álgebra tensorial e sistemas de unidades são utilizados com uma sintaxe parecida à usada na notação matemática usual. Isto, além de facilitar a implementação de novos *solvers*, também torna muito mais ágil o desenvolvimento.

As classes implementadas no OpenFOAM declaram tipos e operações que fazem parte da linguagem matemática utilizada na engenharia. Por exemplo, o campo de velocidade pode ser representado no código de programação pelo símbolo `U` e a magnitude do campo de velocidade pode ser obtido com a operação `mag(U)`. A orientação a objetos permite definir uma classe do tipo `scalarField` e outra do tipo `vectorField`, para se representar campos escalares e vetoriais, respectivamente.

Novas classes podem herdar propriedades de outras classes, por exemplo, uma classe `vectorField` pode ser derivada de uma classe `vector` e outra `Field`. O C++ fornece um mecanismo chamado de classes `template`, de forma que a classe `Field<Type>` pode representar um campo de qualquer `<Type>`, como `scalar`, `vector` ou `tensor`. As características gerais da classe `template` são passadas para qualquer

classe criada a partir deste `template`. Os *templates* e a herança reduzem a duplicação de código e criam hierarquias de classe que impõem organização e estrutura ao código.

O OpenFOAM usa o método dos volumes finitos para discretizar os campos geométricos e as bibliotecas `fvm` e `fvc` definem as informações necessárias para tal. Cada termo nas equações diferenciais parciais é representado individualmente usando as classes *finiteVolumeMethod* e *finiteVolumeCalculus*, abreviado por `fvm` e `fvc`, respectivamente. Tanto `fvm` como `fvc` definem funções estáticas que representam os operadores diferenciais, como o gradiente, o divergente e o laplaciano.

Apesar destas bibliotecas possuírem o mesmo propósito, suas aplicações são diferentes. A biblioteca `fvm` reúne funções para realizar operações implícitas de discretização pelo método dos volumes finitos e os resultados são armazenados em uma matriz definida pela classe `fvMatrix<Type>`. Já a biblioteca `fvc` agrupa funções para calcular operações explícitas de discretização. Ou seja, as operações realizadas com a classe `fvc` retornam explicitamente um campo geométrico (classe `geometricField<Type>`) [4, 168]. No Apêndice A são dados mais detalhes além de serem apresentados os operadores básicos disponíveis no OpenFOAM.

### 4.3.3 Escoamentos Multifásicos no OpenFOAM

A análise de escoamentos multifásicos já está razoavelmente bem consolidada no OpenFOAM, existindo vários *solvers* usando diferentes abordagens numéricas e de modelagem. Contudo, essa é uma área que ainda vem sendo bastante explorada e novos desenvolvimentos estão sempre surgindo com as novas versões.

Para escoamentos multifásicos com captura de interface encontram-se disponíveis diferentes *solvers* que usam a abordagem VoF, comentada no Capítulo 2. Por exemplo, existem os *solvers* `compressibleInterFoam` e `compressibleInterDyMFoam` para escoamentos não-isotérmicos e compressíveis de dois fluidos imiscíveis, sendo que o último permite usar malha dinâmica. Para escoamentos isotérmicos e incompressíveis de dois fluidos imiscíveis pode-se optar pelo `interFoam` ou o `interDyMFoam` para malhas dinâmicas, ou o `multiphaseInterFoam` para escoamentos com um número arbitrário de fases imiscíveis.

A abordagem Euleriana-Euleriana também está presente em alguns dos *solvers* nativos do OpenFOAM. O `bubbleFoam` é um *solver* bifásico baseado na formulação E-E e foi desenvolvido primeiramente para a simulação de escoamentos dispersos do tipo gás-líquido. Posteriormente surgiu o *solver* `twoPhaseEulerFoam` que é uma extensão do *solver* anterior para a simulação de escoamentos bifásicos dispersos do tipo gás-líquido, líquido-líquido, gás-sólido e líquido-sólido. O algoritmo usado nesses dois *solvers* é muito similar e está descrito no trabalho de RUSCHE [14].

O *solver* `twoPhaseEulerFoam` apresenta as seguintes limitações:

- resolve somente 2 fases, uma contínua e outra dispersa;
- o escoamento é isotérmico;
- as fases são necessariamente incompressíveis;
- o diâmetro das entidades que compõem a fase dispersa são constantes, não se consideram os efeitos de agregação, quebra, crescimento, etc.;
- não existe transferência de calor ou massa entre as fases, somente a troca de quantidade de movimento é considerada.

O *solver* `twoPhaseEulerFoam` têm disponível somente o modelo  $k - \epsilon$  para modelar a turbulência, usando uma metodologia como àquela descrita na Subseção 2.2.2. Encontram-se implementadas as forças interfaciais de arrasto, sustentação e massa virtual. O coeficiente de arrasto pode ser calculado usando diferentes modelos, como, Schiller-Naumann, Gabilaro, Ergun, etc. Já os coeficientes de sustentação e massa virtual admitem apenas valores constantes.

Esse *solver* foi desenvolvido para lidar com os fenômenos de inversão e separação das fases. Para isso, uma formulação conhecida como *phase intensive* foi usada. Nessa formulação todos os termos da equação de conservação de quantidade de movimento foram divididos pela fração volumétrica e pela massa específica da fase. Os termos relacionados às forças interfaciais, arrasto, sustentação e massa virtual, foram equacionados de acordo com um modelo de mistura, sendo diferente do usualmente encontrado na literatura e descrito na Subseção 2.2.3. Essa formulação está descrita no trabalho de RUSCHE [14].

Para contornar a restrição do *solver* `twoPhaseEulerFoam` só simular duas fases e não considerar uma distribuição de diâmetros, SILVA e LAGE [9] propuseram dois novos *solvers*, o `musigFoam` e `multiPhasePbeFoam`. O primeiro considera um único campo de velocidades para a fase dispersa, uma metodologia que é conhecida na literatura como MuSiG (*Multiple Size Group*) [4]. Dessa forma, toda a distribuição de partículas é transportada pelo mesmo campo de velocidades. Já o `multiPhasePbeFoam` é capaz de lidar com um número arbitrário de fases e uma PBE monovariada é resolvida para considerar os efeitos de agregação e quebra de partículas. Este último é mais abrangente visto que considera que cada fase dispersa possui seu próprio campo de velocidades. Ambos os *solvers* usam o método DQMoM para resolver a PBE.

Outra questão importante é que nesses *solvers* não foram usados os modelos de mistura na modelagem das forças interfaciais, ou seja, foi adotada a formulação

usualmente descrita na literatura de escoamentos multifásicos. Uma descrição detalhada do algoritmo usado nesses *solvers*, assim como os detalhes do acoplamento do balanço populacional com o escoamento multifásico pode ser encontrada diretamente no trabalho de SILVA e LAGE [9].

Atualmente, na versão OpenFOAM-2.2, também encontra-se disponível o *solver compressibleTwoPhaseEulerFoam* que simula escoamentos bifásicos compressíveis e não-isotérmicos usando a formulação Euleriana-Euleriana [195].

# Capítulo 5

## Métodos para Discretização de Distribuições Multivariadas

*Neste capítulo é apresentada uma revisão da literatura no que tange à inversão de momentos multivariados e são apresentados alguns métodos que podem ser usados para tal.*

### 5.1 Revisão da Literatura

Os momentos representam propriedades importantes de uma função distribuição, como por exemplo, a média, a variância e a assimetria, entre outras. Os pontos de quadratura, compostos por valores de pesos e abscissas, correspondem a uma discretização da função distribuição que satisfaz ou reproduz uma quantidade limitada dos seus momentos. O momento  $h$ -variado padrão de uma distribuição  $f(\mathbf{x})$  é dado por:

$$\mu_{k_1, k_2, \dots, k_h} = \mu_{\mathbf{k}} = \int \int \dots \int x_1^{k_1} x_2^{k_2} \dots x_h^{k_h} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (5.1)$$

onde  $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_h]^T$  é o vetor de variáveis internas e  $\mathbf{k} = [k_1, k_2, \dots, k_h]^T$  é o vetor que fornece a ordem do momento para cada uma das variáveis  $x_i$ . Uma discretização que represente um certo conjunto de momentos pode ser obtida encontrando-se os  $N$  pontos de uma quadratura  $h$ -dimensional que satisfaçam a seguinte relação:

$$\mu_{k_1, k_2, \dots, k_h} = \sum_{i=1}^N x_{1_i}^{k_1} x_{2_i}^{k_2} \dots x_{h_i}^{k_h} \omega_i \quad (5.2)$$

para as abscissas  $\mathbf{x}_i$  e os pesos  $\omega_i$ .

A inversão do conjunto de momentos é um ponto chave nos métodos de solução da PBE que são baseados em momentos com fechamento por quadratura.

### 5.1.1 A Reconstrução da Função Distribuição a partir de seus Momentos

A reconstrução de uma distribuição a partir de um número finito de momentos é conhecido na literatura como problema de inversão (*finite moment problem*) ou problema de *Stieltjes* para domínios semi-infinitos e de *Hausdorff* para domínios finitos, sendo, em geral, um problema bastante difícil [206]. A principal dificuldade é inerente ao fato de que distribuições diferentes podem possuir um mesmo conjunto finito de momentos. Assim, salvo algumas exceções, é necessário o conhecimento dos infinitos momentos de uma distribuição para se garantir uma reconstrução exata da mesma.

A reconstrução da função distribuição pode ser feita de diferentes maneiras. Uma delas é assumir uma função conhecida (função gama, beta, log-normal, etc.) com parâmetros a serem ajustados a partir de valores conhecidos da função ou de seus momentos. Outra forma é usar uma base de funções (com suporte global ou local) para aproximar a distribuição usando a informação da função ou de seus momentos para calcular os valores dos coeficientes da expansão funcional. Pode-se também usar técnicas de interpolação, como *splines*, entre valores conhecidos da função ou outras informações, como por exemplo os momentos.

A reconstrução da distribuição usando o ajuste de parâmetros de uma função conhecida ou usando uma expansão funcional em bases de polinômios são as técnicas mais usadas na literatura. Contudo, essas técnicas são dependentes do conhecimento prévio do comportamento da função distribuição, ou seja, a função ou base usada afeta o resultado final e a decisão do que é melhor para se usar depende do conhecimento da forma da distribuição [206].

Em alguns trabalhos encontrados na literatura a reconstrução é feita usando *splines*. Essa técnica por sua vez não impõe a priori uma forma para a função distribuição [207]. No entanto, a reconstrução de uma distribuição usando um conjunto de momentos é um problema da estatística que ainda está em aberto. A reconstrução de uma função distribuição multivariada a partir de um conjunto de momentos multivariados é uma tarefa ainda mais complicada [134].

Apesar de toda essa dificuldade para reconstruir a função distribuição a partir de seus momentos, isso nem sempre é um problema grave, uma vez que em muitas aplicações as propriedades de interesse podem ser determinadas usando somente os primeiros momentos da distribuição.

### 5.1.2 Métodos de Momentos e Inversão de Momentos Multivariados

A literatura sobre a aplicação do método dos momentos para problemas multivariados é escassa quando comparada ao caso monovariado. Será apresentada a seguir uma revisão dos trabalhos que foram julgados como os mais relevantes nesta área, ou seja, aplicaram métodos baseados em momentos para resolver a PBE multivariada e lidaram com o problema de inversão de momentos multivariados.

A inversão de um conjunto de momentos monovariados pode ser feita de forma eficiente usando o algoritmo PD [137]. O problema é a inversão de um conjunto de momentos multivariados. Não existe uma forma direta de se fazer isto. Muitos trabalhos encontrados na literatura contornam o problema usando somente 1 ponto de quadratura e outros usam somente os momentos puros, ou seja, desconsideram a dependência entre as variáveis [7, 13, 208]. Porém, tanto o fato de se usar apenas 1 ponto de quadratura quanto o de se descartar os momentos que descrevem a dependência entre as variáveis podem não ser adequados em alguns casos.

WRIGHT *et al.* [15] foram os primeiros a relatar a extensão do QMoM para o caso bivariado. Os autores apresentaram dois tipos de quadraturas multidimensionais (cubaturas) para a inversão de um conjunto de 36 momentos multivariados: uma de 3-pontos ( $N = 3$ ) e outra de 12-pontos ( $N = 12$ ).

No caso que usa  $N = 3$  foi feito um processo no qual se obtêm os pesos e as abscissas combinadas (combinação das duas abscissas) considerando-se somente os momentos diagonais. Esta etapa torna o problema parecido com o caso unidimensional e possibilita o uso de métodos de inversão de distribuições monovariadas. Os pesos e abscissas encontradas no passo anterior são então usados em equações para os momentos que estão fora da diagonal, obtendo-se as abscissas para cada direção e usando os pesos encontrados no passo anterior. Esse procedimento usa a informação de todo o conjunto de momentos, contudo apresenta simplificações e não é a solução ótima. Além disso, a extensão para além do caso bivariado seria complicada.

Para o caso que usa  $N = 12$  foi feita uma inversão dos 36 momentos mistos fracionários  $\mu_{kl}$  com  $k$  e  $l$  sendo  $0, 1/3, 2/3, 1, 4/3, 5/3$ . Os autores usaram um algoritmo de minimização baseado em gradientes conjugados para ajustar os 12 pontos da quadratura multidimensional. Este método pode ser visto como uma inversão por força bruta. Restrições foram usadas para garantir que os pesos fossem positivos. O uso de uma cubatura de 12-pontos é um tanto questionável para aplicações PB/CFD, pois além de se ter um alto custo computacional, a quantidade de fases consideradas na simulação CFD também seria grande. Para casos com mais de 2 dimensões, o custo computacional se tornaria muito elevado.

Para tentar contornar essa situação, YOON e MCGRAW [8, 16] apresentaram

os conceitos matemáticos e estatísticos para a extensão multivariada do método QMoM usando a análise de componentes principais (PCA - *Principal Component Analysis*). No método chamado de PCA-QMoM a função distribuição é representada por um conjunto de momentos mistos de baixa ordem e os correspondentes pontos de cubatura são gerados pela combinação da PCA e projeção inversa (*back projection*), que é apresentado com mais detalhes na Seção 5.4.

FOX [12] avaliou o efeito que a escolha do conjunto de momentos bivariados e número de pontos,  $N$ , da aproximação por cubatura possuem sobre a estabilidade numérica do DQMoM para representar os momentos fracionários de até no máximo terceira ordem. Os resultados obtidos com o DQMoM foram comparados aos resultados de WRIGHT *et al.* [15]. Foram apresentados resultados para diferentes conjuntos de momentos e usando diferentes quantidades de pontos de cubatura. Os autores encontraram que, em geral, para  $N$  fixo, todos os conjuntos de momentos bivariados que não geram singularidade na matriz de coeficientes do DQMoM levam a resultados praticamente idênticos. Para qualquer valor de  $N \geq 3$ , a predição dos  $3N$  momentos bivariados fracionários utilizados são muito similares. Todavia, certas escolhas para o conjunto dos  $3N$  momentos levam a uma matriz mais bem condicionada e, desse modo, preferível do ponto de vista numérico. O autor mostra que o condicionamento da matriz de coeficientes do DQMoM é muito afetada pela escolha de momentos que é feita. Em geral, pode-se perceber uma piora no condicionamento da matriz do DQMoM quando se escolhe um conjunto de momentos de ordem mais elevada.

Embora o problema abordado por WRIGHT *et al.* [15] tenha uma função log-normal como condição inicial, FOX [12] usou um único peso com valor igual a um e os restantes sendo nulos para reproduzir aproximadamente os momentos da distribuição inicial. O autor comenta que os valores das abscissas que possuem peso zero foram obtidas de forma arbitrária. Com essa estratégia elimina-se o problema da inversão de um conjunto de momentos para gerar uma condição inicial para o DQMoM. Contudo, isso pode gerar problemas nos instantes iniciais da simulação e passos de tempo suficientemente pequenos são necessários até que os valores dos pesos e abscissas se ajustem, ou seja, este procedimento de inicialização gera um problema com rigidez numérica (*stiffness*).

Num trabalho posterior, FOX [11] fez uma análise mais profunda sobre o problema da escolha do conjunto de momentos a ser usada no DQMoM. Ele demonstrou que uma escolha ruim do conjunto de momentos pode levar a abscissas não únicas e pesos negativos. Contudo, existe um conjunto ótimo de momentos para o método DQMoM quando se usa  $N = n^h$  pontos de cubatura para representar uma função distribuição com dimensão  $h$ , com  $n$  e  $h$  entre 1 e 3. Isto é,  $N$  é o número total de pontos,  $n$  é o número de pontos usados em uma direção e  $h$  é a dimensão do

problema. Segundo o autor, isto resulta da necessidade de tratar igualmente todas as direções. Esta escolha também é independente dos termos fontes da PBE que governa a evolução temporal da função distribuição. A escolha do conjunto ótimo de momentos é dada sem uma fundamentação matemática e, como comentado pelo próprio autor, a escolha é baseada principalmente na obtenção de um conjunto de momentos que gere uma matriz de coeficientes do DQMoM não singular.

Contudo, o autor não tratou o problema da inversão. Foi resolvida uma equação do tipo Fokker-Planck que possui uma solução estacionária tal que  $\mu_{kl} = \mu_{k0}\mu_{0l}$ . Desta forma, o conhecimento dos momentos puros é suficiente para estimar o restante dos momentos e, dessa forma, somente esses necessitam ser resolvidos.

No trabalho de FOX [209] foi apresentado o método de produto tensorial (TPM - *Tensor Product Method*). Os autores obtiveram uma quadratura de terceira ordem em duas e três dimensões e aplicaram para solução de um problema gás-sólido diluído. Posteriormente, FOX [210] estenderam o método para quadraturas de ordem arbitrárias. O TPM será descrito na Seção 5.5.

Uma outra metodologia para inversão de momentos multivariados foi proposta no trabalho de CHENG e FOX [152], a qual foi chamada de CQMoM e será apresentada com mais detalhes na Seção 5.7.

Por fim, FAVERO *et al.* [211] fizeram uma comparação entre as diversas metodologias disponíveis na literatura e propuseram uma nova metodologia baseada na análise de componentes independentes. Além disso, também avaliaram o uso de combinação de diferentes métodos. A fundamentação teórica da análise de componentes independentes está detalhada na Seção 5.6 e complementada no Apêndice C. O uso da ICA para obtenção de uma quadratura multidimensional faz parte desse trabalho, sendo abordado posteriormente no Capítulo 6.

## 5.2 Método de Força Bruta - Otimização não-linear

A princípio, uma quadratura multidimensional pode ser calculada resolvendo-se a Equação 5.19 para encontrar os pesos e abscissas que reconstroem  $N(h+1)$  momentos multivariados. Contudo, devido a alta não-linearidade do sistema de equações, uma opção melhor é usar um método de otimização para tal, onde a função objetivo é relacionada à diferença entre o valor do momento multivariado e a sua reconstrução calculada pela discretização obtida.

Detalhes sobre algoritmos de otimização podem ser encontrados na literatura, por exemplo, em PIERRE [212], MILLER [213] e WEISE [214], e não serão dados detalhes aqui. Mais relevante para este trabalho é definir a função objetivo do

problema de otimização. Para fins de simplicidade, considere um caso bivariado e uma quadratura de  $N$  pontos com abscissas,  $x_{1_i}$  e  $x_{2_i}$ , e pesos  $\omega_i$ . A função objetivo a ser minimizada pode ser definida usando os erros relativos dos momentos. Para o conjunto de momentos até uma ordem total,  $O$ , obtém-se:

$$F_{obj} = \sum_{k=0}^O \sum_{l=0}^{O-k} \left| \frac{\epsilon_{kl}}{\mu_{kl}} \right|, \quad \epsilon_{kl} = \sum_{i=1}^N x_{1_i}^k x_{2_i}^l \omega_i - \mu_{kl} \quad (5.3)$$

Nada impede de se otimizar um problema sub ou super-determinado. Porém, quando o número de parâmetros for igual ao número de momentos da função objetivo,  $F_{obj}$ , o resultado da otimização pode ser equivalente à obtenção da solução do sistema não-linear de equações.

### 5.3 Método do Produto Cartesiano Direto

O método do produto cartesiano direto (DCPM - *Direct Cartesian Product Method*) usa somente momentos puros, ou seja, desconsidera a dependência entre as variáveis. O uso desse método já foi reportado em alguns trabalhos que resolveram problemas de balanço populacional multivariado [13, 208]. Como este método parte do princípio de que as variáveis são independentes, é possível aplicar a seguinte fatoração para a função distribuição:

$$f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_h) = f_1(x_1)f_2(x_2)\dots f_h(x_h) \quad (5.4)$$

onde  $f_i(x_i)$  são distribuições marginais, definidas por:

$$f_i(x_i) = \int_{\bar{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x}) d\bar{\mathbf{x}} \quad (5.5)$$

e  $\bar{\mathbf{x}}$  é o vetor  $\mathbf{x}$  sem a variável  $x_i$ .

Dessa forma, os momentos mistos ou cruzados podem ser calculados pelo produto dos momentos puros:

$$\mu_{k_1, k_2, \dots, k_h} = \mu_{k_1, 0, \dots, 0} \mu_{0, k_2, \dots, 0} \dots \mu_{0, 0, \dots, k_h} \quad (5.6)$$

onde o conjunto de momentos multivariados até uma dada ordem  $O$  apresenta exatamente  $(Oh + 1)$  graus de liberdade.

Dessa forma, uma quadratura  $h$ -dimensional pode ser determinada pelo produto Cartesiano das  $h$  quadraturas unidimensionais, obtidas com um método de inversão de momentos monovariados usando os primeiros  $2N_i$  momentos para cada uma das  $h$  variáveis  $x_i$ . A inversão de momentos monovariados pode ser feita de forma efici-

ente usando o algoritmo de produto-diferença (PD) [137] ou o algoritmo Chebyshev modificado implementado na biblioteca ORTHOG [215].

Por exemplo, considere  $\{x_{i_{j_i}}, \omega_{j_i}\}, j_i = 1, \dots, N_i$  como sendo a quadratura unidimensional obtida usando os  $2N_i$  momentos puros de  $x_i$ ,  $\{\mu_{0, \dots, k_i, \dots, 0}\}, k_i = 0, \dots, 2N_i - 1$ , que tem ordem de acurácia  $2N_i - 1$ . Considerando então uma distribuição normalizada, uma quadratura multidimensional com  $N = \prod_{i=1}^h N_i$  pontos pode ser obtida por:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_j &= \mathbf{x}_{j_1, j_2, \dots, j_h} = [x_{1_{j_1}}, x_{2_{j_2}}, \dots, x_{h_{j_h}}] \quad \text{e} \\ \omega_j &= \omega_{j_1, j_2, \dots, j_h} = \prod_{i=1}^h \omega_{j_i}, \quad j_i = 1, \dots, N_i, i = 1, \dots, h \end{aligned} \tag{5.7}$$

onde  $j$  é dado pelo rearranjoamento dos índices  $j_i$  como, por exemplo,  $j = j_1 + \sum_{i=2}^h (j_i - 1) \prod_{k=1}^{i-1} N_k$ ,  $h > 1$ .

Contudo, no caso das variáveis não serem independentes, a quadratura multidimensional apresenta acurácia de somente primeira ordem, sendo essa a principal limitação desse método.

## 5.4 Análise de Componentes Principais

A análise de componentes principais (PCA - *Principal Component Analysis*) é também conhecida na literatura como transformada discreta de Karhunen-Loève (KLT), transformada de Hotelling ou decomposição ortogonal própria (*Proper Orthogonal Decomposition*, POD) dependendo da área de aplicação.

A PCA foi primeiramente proposta por PEARSON [216] e é um método de análise de dados multidimensionais. Em geral, os dados são obtidos (ou medidos) usando variáveis que não são, necessariamente, as melhores para a descrição de um dado fenômeno. Assim, o princípio básico da PCA é que variáveis mais adequadas podem ser obtidas rotacionando o eixo de coordenadas cartesianas para as direções nas quais a variância dos dados é máxima. Desta forma, as novas variáveis são combinações lineares das variáveis originais. Além disso, as novas variáveis devem ser descorrelacionadas e ordenadas da maior para a menor variância. Para problemas de dimensões elevadas, isto permite desconsiderar as variáveis que apresentam menor variância e que, portanto, afetam menos o fenômeno observado. Isto leva à redução de dimensão do problema, eliminando dados redundantes e possibilitando uma melhor identificação da informação contida no conjunto de dados [217, 218].

Matematicamente, a PCA é uma transformação linear ortogonal (rotação) das variáveis cartesianas originais, seguida de possíveis trocas de ordem das variáveis (permutações), que definem um novo sistema de coordenadas cartesiano de forma

que a primeira coordenada tenha a maior variância, a segunda coordenada tenha a segunda maior variância e assim por diante. Como os dados nas novas variáveis estão descorrelacionados, a matriz (tensor) de covariância deve ser diagonal. Desta forma, fica claro que as direções dos componentes principais são aquelas que levam à diagonalização da matriz (tensor) de covariância. Além disso, cabe observar que a PCA é um método fundamentado nas estatísticas de até segunda ordem.

Como a PCA permite obter representações aproximadas dos dados originalmente de dimensões elevadas em um número consideravelmente menor de dimensões, ela é um dos métodos estatísticos de múltiplas variáveis mais simples e mais empregados nas áreas de reconhecimento de padrões, processamento de imagens, análise de sinais e compressão de dados, entre outras. Neste trabalho será detalhado somente o método de PCA clássico e não suas versões modificadas, como por exemplo o kernel PCA (KPCA), que tenta buscar combinações não-lineares que representem melhor um conjunto dados [219].

A PCA pode ser aplicada diretamente sobre o conjunto de dados ou usando as estatísticas que representam os mesmos. Neste trabalho, somente interessa o uso da PCA aplicada sobre as estatísticas da função distribuição, os momentos, que é descrita a seguir. A aplicação da PCA diretamente sobre um conjunto de dados é detalhada no Apêndice B.

#### 5.4.1 A PCA aplicada a um Conjunto de Momentos

O método de PCA pode ser aplicado usando os momentos de uma distribuição normalizada ( $\mu_0 = 1$ ). Com os momentos de primeira e segunda ordem é possível aplicar o método de PCA, visto que a matriz de covariância depende exclusivamente destes. Os momentos de primeira ordem são necessários para se obter os momentos centrados  $\tilde{\mu}$ , que facilita a aplicação do método. Os momentos centrados são obtidos subtraindo-se de cada variável a sua respectiva média, ou seja:

$$\tilde{\mu}_{k_1, k_2, \dots, k_h} = \tilde{\mu}_{\mathbf{k}} = \int \int \dots \int \left[ \prod_{i=1}^h (x_i - \mu_{\mathbf{e}_i})^{k_i} \right] f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (5.8)$$

onde  $\mathbf{e}_i$  é o vetor unitário na direção  $i$ , isto é, tem componentes nulos exceto para a linha  $i$  na qual o componente é unitário. Definindo o vetor dos momentos de primeira ordem (médias), como  $\boldsymbol{\mu} = [\mu_{\mathbf{e}_1}, \mu_{\mathbf{e}_2}, \dots, \mu_{\mathbf{e}_h}]^T$ , pode-se definir as variáveis centradas  $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}$  e escrever:

$$\tilde{\mu}_{k_1, k_2, \dots, k_h} = \tilde{\mu}_{\mathbf{k}} = \int \int \dots \int \left( \prod_{i=1}^h \tilde{x}_i^{k_i} \right) \tilde{f}(\tilde{\mathbf{x}}) d\tilde{\mathbf{x}} \quad (5.9)$$

onde  $\tilde{f}(\tilde{\mathbf{x}}) = f(\mathbf{x})$ .

Para facilitar o entendimento, vamos considerar um caso bivariado, isto é,  $h = 2$ . Neste caso, a matriz de covariância é dada por:

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \tilde{\mu}_{20} & \tilde{\mu}_{11} \\ \tilde{\mu}_{11} & \tilde{\mu}_{02} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_{20} - \mu_{10}^2 & \mu_{11} - \mu_{10}\mu_{01} \\ \mu_{11} - \mu_{01}\mu_{10} & \mu_{02} - \mu_{01}^2 \end{bmatrix} \quad (5.10)$$

O próximo passo é resolver o problema de autovalor que gera a diagonalização  $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{G}^T \mathbf{D} \mathbf{G}$ , e encontrar a matriz de *Hotelling*,  $\mathbf{H}$ , podendo-se usar a decomposição em valores singulares (*Singular Value Decomposition* - SVD) para tanto [218, 220] (ver Apêndice D para detalhes). A matriz da transformada de *Hotelling* é obtida ordenando-se os autovetores de  $\mathbf{G}$  na ordem decrescente de seus autovalores (ver Apêndice B para detalhes). Usando a matriz de *Hotelling*,  $\mathbf{H}$ , a matriz de covariância (ou de momentos de segunda ordem centrados) pode ser transformada para as direções principais por:

$$\boldsymbol{\Sigma}' = \mathbf{H} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{H}^T \quad \text{ou} \quad \Sigma'_{ij} = \sum_{k,l=1}^2 H_{ik} H_{jl} \Sigma_{kl} \quad (5.11)$$

onde  $\boldsymbol{\Sigma}'$  é diagonal. A Equação 5.11 é similar à transformação de um tensor de segunda ordem em um espaço de dimensão 2, e indica que o problema pode ser generalizado para um espaço de  $h$  variáveis.

Os momentos centrados de ordem  $s$ , onde  $s = \sum_{i=1}^h k_i$ , podem ser usados para definir um tensor simétrico,  $\mathbf{T}$ , de ordem  $s$  que está no espaço  $\Re^h$  [16]. Assim, de forma genérica, pode-se definir um tensor simétrico que armazene as estatísticas de qualquer ordem. A ordem (quantidade de índices ou *rank*) desse tensor dá a informação da ordem estatística que o mesmo está representando. Por exemplo, as estatísticas de segunda, terceira e quarta ordem podem ser representadas por tensores de segunda, terceira e quarta ordem, respectivamente.

Assim, utilizando a notação indicial cartesiana para representar os tensores, o tensor de momentos centrados de segunda ordem corresponde à própria matriz de covariância e pode ser escrito por  $T_{ij} = \Sigma_{ij}$ ,  $i, j = 1, \dots, h$ , que pode ser representado por uma matriz simétrica  $h \times h$ . Generalizando, o valor de um elemento do tensor estatístico de ordem  $s$ ,  $T_{i_1, i_2, \dots, i_s}$ , em um problema no espaço  $\Re^h$ , onde  $i_1, i_2, \dots, i_s \in \{1, 2, \dots, h\}$ , é dado por  $\tilde{\mu}_{k_1, k_2, \dots, k_h}$ , onde  $k_j$  é o número de ocorrências do inteiro  $j$  no conjunto  $\{i_1, i_2, \dots, i_s\}$ . Note que a propriedade de simetria é generalizada da seguinte forma: dois elementos de um tensor estatístico são iguais entre si se seus índices são uma permutação um do outro. Por exemplo, os elementos do tensor que representa a estatística de segunda ordem é dada por:  $T_{11} = \tilde{\mu}_{20}$ ,

$T_{12} = T_{21} = \tilde{\mu}_{11}$  e  $T_{22} = \tilde{\mu}_{02}$ . Já para o tensor de momentos de quarta ordem tem-se:

$$\begin{aligned} T_{1111} &= \tilde{\mu}_{40} \\ T_{1112} &= T_{1121} = T_{1211} = T_{2111} = \tilde{\mu}_{31} \\ T_{1122} &= T_{1221} = T_{2211} = T_{2112} = T_{1212} = T_{2121} = \tilde{\mu}_{22} \\ T_{2221} &= T_{2212} = T_{2122} = T_{1222} = \tilde{\mu}_{13} \\ T_{2222} &= \tilde{\mu}_{04} \end{aligned} \quad (5.12)$$

A quantidade de elementos que compõem o tensor de momentos está relacionada com a ordem do momento e a dimensionalidade do problema. De maneira geral, o tensor é composto por  $h^s$  elementos, onde  $h$  é a dimensão do problema, sendo  $s$  a ordem dos momentos centrados que compõem o tensor. Por exemplo, para um caso bivariado o tensor que representa os momentos de segunda ordem é dado por  $2^2 = 4$  elementos enquanto que o tensor de quarta ordem tem  $2^4 = 16$  elementos. Para um caso  $h$ -variado a quantidade de elementos que compõem o tensor de momentos de segunda ordem é igual a  $h^2$ . Note que nem todos estes elementos são distintos devido à propriedade de simetria.

Então, o método de PCA pode ser facilmente aplicado a partir do tensor de momentos centrados de segunda ordem, que é diagonalizado pelo tensor  $\mathbf{H}$ . A rotação dada por  $\mathbf{H}$  pode ser equiparada a uma rotação tensorial (com troca de eixos) que orienta os momentos nas direções de maior variância e pode ser aplicada aos tensores de momentos de qualquer ordem. Os momentos originais são recuperados fazendo-se a rotação tensorial inversa. Matematicamente, para o tensor de momentos de segunda ordem, a operação de rotação é dada por:

$$T'_{ij} = \sum_{k,l=1}^h H_{ik} H_{jl} T_{kl} \Rightarrow T'_{ij} = \bar{D}_{ii} \delta_{ij} \quad (5.13)$$

onde  $\mathbf{T}'$  é o tensor diagonal dos momentos de segunda ordem transformado pela rotação. Já para um tensor de quarta ordem, a rotação é dada por:

$$T'_{mnop} = \sum_{i,j,k,l=1}^h H_{mi} H_{nj} H_{ok} H_{pl} T_{ijkl} \quad (5.14)$$

O uso do tensor  $\mathbf{H}$  nas equações acima representa uma transformação linear, e equivale a uma rotação seguida de permutação das coordenadas.

Por fim, o DCPM, apresentado na Seção 5.3, é usado para obter os pontos de quadratura no sistema de coordenadas principais no qual as variáveis encontram-se descorrelacionadas. Com os pontos de quadratura obtidos no sistema de coordenadas principais,  $\mathbf{y}$ , pode-se recuperar os pontos de quadratura no sistema de coordenadas

originais,  $\mathbf{x}$ , usando-se a projeção inversa, ou seja:

$$\mathbf{x} = \mathbf{H}^T \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu} \quad (5.15)$$

Cabe notar também que os pesos não se alteram com a mudança do sistema de coordenadas.

Com um esforço computacional relativamente pequeno a PCA dá a possibilidade de se encontrar as  $h$  direções principais que descrevem um conjunto de dados multivariados, inclusive possibilitando a redução de dimensionalidade. Apesar dessas qualidades, a PCA não é um método livre de limitações, podendo-se citar as seguintes:

- O conjunto de dados modificados pela PCA são combinações lineares dos dados originais. Em muitos casos, a consideração de combinações não-lineares dos dados originais permite encontrar direções que representam melhor o conjunto de dados.
- As componentes principais são necessariamente ortogonais entre si. Para certas funções a primeira direção de maior variância não é ortogonal à segunda direção de maior variância.
- A média e a variância devem ser estatísticas suficientes para descrever a função distribuição. A única classe de distribuição de probabilidade que é exatamente descritas pelos momentos de primeira e segunda ordem são as distribuições normais (i.e., Gaussianas).
- A PCA obtém direções cujas coordenadas são descorrelacionadas, o que não implica, necessariamente, na independência entre as mesmas.

## 5.5 Método do Produto Tensorial

Esse método foi desenvolvido por FOX [209, 210] e é, em essência, muito similar ao método de PCA. Dessa forma, primeiramente encontra-se um novo sistema de coordenadas que descorrelaciona as variáveis. Após isso, o conjunto de momentos é transformado para o novo sistema de coordenadas. Por fim, aplica-se o DCPM seguido de projeção inversa, o qual os autores chamaram de *tensor product method* (TPM).

Existem duas diferenças principais entre o TPM e a PCA. A primeira é que o TPM usa a decomposição de Cholesky para encontrar a matriz de transformação que diagonaliza a matriz de covariância. A transformação de Cholesky é dada por:

$$\mathbf{L}^T \mathbf{L} = \boldsymbol{\Sigma} \quad (5.16)$$

onde  $\mathbf{L}$  é uma matriz triangular superior, para um caso bidimensional temos:

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \Sigma_{11}^{1/2} & \Sigma_{12}/\Sigma_{11}^{1/2} \\ 0 & (\Sigma_{22} - \Sigma_{12}^2/\Sigma_{11})^{1/2} \end{bmatrix} \quad (5.17)$$

e definindo a matriz de transformação  $\mathbf{A} = \mathbf{L}^T$ :

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}), \text{ logo } \mathbf{x} = \mathbf{Ay} + \boldsymbol{\mu} \quad (5.18)$$

Após a transformação de variáveis, o método DCPM é aplicado para obtenção dos pesos e abscissas. Cabe lembrar que, a transformação de Cholesky também faz com que a matriz de covariância fique unitária. Já a PCA resolve um problema de autovalor/autovetor e não se preocupa em tornar a matriz de covariância unitária.

A segunda diferença é que os pesos da quadratura são recalculados, posteriormente, a partir da solução de um sistema de equações lineares para um certo conjunto de momentos multivariados especificado:

$$\mu_{k_1, k_2, \dots, k_h} = \sum_{i=1}^N x_{1_i}^{k_1} x_{2_i}^{k_2} \dots x_{h_i}^{k_h} \omega_i \quad (5.19)$$

onde os momentos  $\mu_{k_1, k_2, \dots, k_h}$  e as abscissas  $\mathbf{x}$  são conhecidas e os pesos  $\omega_i$  são calculados pela solução do sistema linear. Devido a isso, o TPM consegue reproduzir acuradamente todos os momentos usados para determinar os pesos da quadratura, conseguindo, dessa forma, resultados iguais ou melhores que a PCA. FOX [209] também comentou que o TPM, por usar decomposição de Cholesky, é mais robusto que a PCA. Uma desvantagem do TPM é que em alguns casos pode-se encontrar pesos negativos a partir da solução do sistema linear. Obviamente, isso não seria fisicamente plausível.

## 5.6 Análise de Componentes Independentes

O método de análise de componentes independentes (*Independent Component Analysis* - ICA) é uma técnica estatística usada para transformar linearmente um vetor de variáveis aleatórias, medições, ou sinais, para um novo sistema cujas coordenadas sejam, no maior grau possível, estatisticamente independentes entre si. Apesar do ICA ter sido definido primeiramente por HERAULT e JUTTEN [221] e já ter sido usado em alguns trabalhos, como, por exemplo, em CARDOSO [222], uma definição mais ampla do conceito de ICA foi apresentada primeiramente por COMON [223] com o uso de ferramentas provenientes da teoria de informação, como o princípio de informação mútua e entropia. O método de ICA também está intimamente

relacionado com um outro método estatístico conhecido como busca por projeção (*projection pursuit*) [224] definido inicialmente por FRIEDMAN e TUKEY [225].

Um exemplo clássico da aplicação da ICA é resolver o problema conhecido como separação de fontes desconhecidas (*Blind Source Separation*, BSS), ou seja, quando não se tem informação alguma a respeito das fontes individuais ou mesmo da quantidade de fontes, mas somente se conhece diversos sinais contendo as informações de todas as fontes sobrepostas [226]. Por exemplo, temos o “cocktail party” que é o problema de separar os sinais sonoros individuais das fontes a partir da informação obtida por um conjunto de microfones em uma sala com muitas pessoas falando simultaneamente (fontes). Outros exemplos bem conhecidos da aplicação da ICA são na análise de dados de sinais cerebrais gravados por múltiplos sensores, interferência de sinais de rádio em aparelhos da telefonia celular, séries de dados obtidos ao mesmo tempo mas em diferentes localizações de processos industriais, entre outros.

O método ICA considera que o vetor de observações,  $\mathbf{x}$ , pode ser uma mistura linear de um vetor de componentes independentes ou variáveis latentes (não diretamente observáveis) não conhecidas,  $\mathbf{s}$ , e uma matriz de mistura,  $\mathbf{M}$ , também não conhecida. Assim, utilizando variáveis com média nula, isto é,  $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}$ , pode-se escrever  $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{Ms}$  e, portanto,  $\mathbf{s} = \mathbf{S}\tilde{\mathbf{x}}$  onde  $\mathbf{S} = \mathbf{M}^{-1}$  é a matriz que separa as componentes independentes. O objetivo da ICA é encontrar a matriz de separação  $\mathbf{S}$  que torna as componentes do vetor de variáveis  $\mathbf{s}$  o mais independente possível entre si. As componentes independentes são também chamadas de fatores ou fontes na área de separação de sinais. Uma definição mais rigorosa da ICA pode ser encontrada em HYVÄRINEN e OJA [227].

A ICA pode ser vista como uma extensão da PCA, pois usa um critério mais forte que a simples descorrelação dos dados usada pela PCA. A correlação é uma medida do relacionamento linear entre duas variáveis. Dizemos que  $x_1$  e  $x_2$  são descorrelacionadas se, e somente se, a covariância entre essas variáveis for nula, ou seja,  $cov(x_1, x_2) = 0$ . Contudo,  $cov(x_1, x_2) = 0$  não implica na independência entre  $x_1$  e  $x_2$ , embora o inverso seja verdade. Duas variáveis aleatórias quaisquer,  $x_1$  e  $x_2$ , são ditas independentes se a informação sobre o valor de  $x_1$  não fornece informação alguma sobre o valor da variável  $x_2$ , e vice-versa. A independência entre variáveis pode ser definida através da função densidade de probabilidade (*Probability Density Functions* - PDF). Seja  $f(x_1, x_2)$  a função densidade de probabilidade conjunta de duas variáveis aleatórias  $x_1$  e  $x_2$ , então a função  $f_1(x_1)$ , que é chamada de função densidade de probabilidade marginal de  $x_1$ , é definida por:

$$f_1(x_1) = \int f(x_1, x_2) dx_2 \quad (5.20)$$

e de forma similar para  $f_2(x_2)$ . Assim,  $x_1$  e  $x_2$  serão independentes se, e somente se,

a PDF que representa as variáveis puder ser fatorada da seguinte maneira:

$$f(x_1, x_2) = f_1(x_1)f_2(x_2) \quad (5.21)$$

Esta definição pode ser estendida para um número  $h$  de variáveis aleatórias com uma PDF multidimensional sendo representada pelo produto de  $h$  PDFs marginais.

Considerando o caso bidimensional, o significado da independência pode ser entendido a partir do cálculo da expectativa (média) do produto das funções  $h_1(x_1)h_2(x_2)$ :

$$\begin{aligned} E\{h_1(x_1)h_2(x_2)\} &= \int \int h_1(x_1)h_2(x_2)f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \int h_1(x_1)f_1(x_1) dx_1 \int h_2(x_2)f_2(x_2) dx_2 \quad (5.22) \\ &= E\{h_1(x_1)\} E\{h_2(x_2)\} \end{aligned}$$

A Equação 5.22 mostra claramente que a correlação entre as variáveis é nula pois  $cov(x_1, x_2) = E\{x_1x_2\} - E\{x_1\}E\{x_2\}$ . Assim, se um conjunto de dados for independente é possível afirmar que é também descorrelacionado, porém o contrário nem sempre é verdadeiro. Além disso, usando a Equação 5.22, temos que  $E\{x_1^{k_1}x_2^{k_2}\} = E\{x_1^{k_1}\}E\{x_2^{k_2}\}$ , isto é,  $\mu_{k_1, k_2} = \mu_{k_1, 0}\mu_{0, k_2}$ , o que não ocorre para os momentos de ordem acima de 2 se as variáveis são apenas descorrelacionadas. Nota-se que a expressão dos momentos mistos obtidos pelo produto dos momentos puros permite transformar o problema de determinação de uma quadratura multidimensional em um produto cartesiano de quadraturas unidimensionais, ou seja, é o caso onde o DCPM funciona perfeitamente.

O objetivo da ICA é maximizar algum critério ou medida da independência dos dados e, ao contrário da PCA, procura por direções que não necessariamente precisam ser ortogonais entre si. O critério de independência das variáveis está associado à não-Gaussianidade da distribuição nas novas coordenadas, ou seja, ao quanto ela é distante de uma distribuição do tipo Gaussiana. A não-Gaussianidade de uma distribuição pode ser medida através de estatísticas de ordem superior a 2, as quais são nulas para as distribuições Gaussianas.

A relação entre independência das variáveis e não-Gaussianidade, assim como uma fundamentação teórica mais detalhada de ICA pode ser encontrada no Apêndice C. Entretanto, ela pode ser analisada através do teorema do limite central, que diz que a distribuição da soma de variáveis aleatórias tende a uma distribuição Gaussiana sob certas condições [227]. Isto implica que qualquer combinação linear de variáveis aleatórias tem uma distribuição mais próxima da Gaussiana do que as variáveis originais. Assim, o critério de busca das componentes independentes deve

maximizar a não-Gaussianidade da distribuição nas novas coordenadas [227]. Por outro lado, isto indica que a ICA não é aplicável se a distribuição for Gaussiana. Mais especificamente, COMON [223] mostrou que a condição necessária para a aplicação da ICA é que a distribuição não pode ser Gaussiana a não ser em, no máximo, uma das componentes independentes.

Para o leitor não familiarizado com os conceitos de teoria da informação, cumulantes, curtose, entropia, negentropia e branqueamento de dados recomenda-se fortemente a leitura do Apêndice C para facilitar o entendimento das próximas seções.

### 5.6.1 Algoritmos de ICA

Os métodos de ICA podem ser aplicados diretamente a um conjunto de dados ou aos cumulantes obtidos a partir destes dados ou das distribuições de probabilidade dos mesmos. COMON [223] fez uma comparação entre estas duas estratégias de ICA. Basicamente, a escolha por uma ou outra destas estratégias é devida a especificidades do problema. Para problemas com um número elevado de dados, o uso de métodos baseados em estatísticas pode ser mais atrativo do ponto de vista computacional, pois a quantidade necessária de cálculos nesses métodos pode se tornar menor.

Quando a ICA é aplicada diretamente aos dados, o procedimento consiste em aplicar transformações lineares sucessivas no conjunto de dados até que algum critério de independência seja atingido. Obviamente, este processo é iterativo. Na outra estratégia, o conjunto de dados é usado para calcular os seus cumulantes uma única vez. Posteriormente, resolve-se o problema de ICA usando estas estatísticas, sem ser necessário acessar novamente o conjunto de dados.

Dentre as metodologias que aplicam ICA diretamente sobre um conjunto de dados destaca-se o algoritmo FastICA (*Fixed-point algorithm for ICA*) [228]. Já dentre os métodos baseados em estatísticas podem-se destacar os métodos JADE (*Joint Approximate Diagonalization of Eigen-matrices*), SHIBBS (*SHIfted Blocks for Blind Separation*) [229, 230] e o método CuBICA [231].

Independentemente de qual tipo de algoritmo é usado, eles necessitam de uma etapa de pré-processamento no qual os dados são centrados (*centering*), branqueados (*whitening* ou *sphering*) e, dependendo da análise, também pode ser necessária uma redução de dimensão, visando simplificar ou reduzir a complexidade do problema para a aplicação do algoritmo de ICA. A operação usada para centralizar o conjunto de momentos já foi detalhada na Seção 5.4.1. O branqueamento significa uma transformação dos dados ou suas estatísticas tal que a variância se torne unitária. O branqueamento, com uma possível redução dimensional, é geralmente feita usando a SVD e a transformada de Hotteling (PCA), ou seja (ver Apêndice C.4 para mais

detalhes):

$$\mathbf{W} = \mathbf{H}^T \bar{\mathbf{D}}^{-1/2} \mathbf{H} \quad (5.23)$$

Para casos em que somente os momentos da distribuição são conhecidos, e não a distribuição propriamente dita, os métodos baseados em estatísticas são os únicos que podem ser aplicados. Isto acontece para a aplicação de interesse desse trabalho, que é encontrar uma discretização para uma função de distribuição multivariada, conhecendo somente seus momentos. O método JADE e o CuBICA serão descritos em maiores detalhes a seguir.

### Os métodos JADE e CuBICA

O JADE [229] é um método que busca por componentes independentes usando a função contraste (ver Seção C.5 para detalhes) definida por:

$$\Psi_{JADE}(\mathbf{Q}) = \sum_{i,k,l=1}^h K_{z_{iikl}}^2 \quad (5.24)$$

ou seja, usa o cumulante de quarta ordem calculado para  $\mathbf{z}$ , que é obtido do vetor de variáveis branqueadas pela transformação ortogonal  $\mathbf{Q}$ ,  $\mathbf{z} = \mathbf{Q}\mathbf{b}$ .

Já o método CuBICA [231] considera as estatísticas de terceira e quarta ordem na formulação de sua função contraste, sendo dada por:

$$\Psi_{CuBICA}(\mathbf{Q}) = \frac{1}{3!} \sum_{i=1}^h K_{z_{iii}}^2 + \frac{1}{4!} \sum_{i=1}^h K_{z_{iiii}}^2 \quad (5.25)$$

Os métodos JADE e CuBICA aplicados a um conjunto de dados podem ser descrito em alguns passos:

1. Calcular a matriz de branqueamento  $\mathbf{W}$  onde as matrizes  $\mathbf{H}$  e  $\mathbf{D}$  são obtidas usando a decomposição em valores característicos da matriz de covariância  $\Sigma$ , e aplicar a transformação de branqueamento sobre o conjunto de dados centrados  $\tilde{\mathbf{x}}$  para obter os dados brancos,  $\mathbf{b} = \mathbf{W}\tilde{\mathbf{x}}$ ;
2. Calcular o conjunto de cumulantes dos dados branqueados e as matrizes características. O método JADE necessita somente do cumulante de quarta ordem, já o método CuBICA necessita do cumulante de terceira ordem também.
3. Otimizar a função de contraste correspondente ao método. Isto implica em encontrar uma matriz de rotação ortonormal  $\mathbf{R}$  tal que as matrizes características do tensor de cumulantes sejam diagonalizadas simultaneamente.
4. Calcular a matriz de separação  $\mathbf{S} = \mathbf{RW}$  e, finalmente, estimar as componentes independentes com  $\mathbf{s} = \mathbf{S}\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{R}\mathbf{b} = \mathbf{RW}^{-1}\tilde{\mathbf{x}}$ . Cabe notar que não há

necessidade de calcular a inversa da matriz de branqueamento  $\mathbf{W}$  uma vez que  $\mathbf{W}^{-1} = \mathbf{H}^T \bar{\mathbf{D}}^{1/2} \mathbf{H}$ .

A etapa 3 pode ser vista como um problema de diagonalização simultânea de várias matrizes ou como a diagonalização de um tensor de ordem maior que 2, sendo conhecido na literatura como diagonalização conjunta (*joint diagonalization*). Os métodos JADE e CuBICA otimizam suas funções contraste usando uma generalização do método de Jacobi (Apêndice C.6) ao invés de empregar algoritmos de otimização baseados em gradientes [230].

A aplicação da ICA para a obtenção de uma quadratura multidimensional a partir dos momentos de uma distribuição faz parte do desenvolvimento feito durante este trabalho e será discutido posteriormente no Capítulo 6.

## 5.7 Método dos Momentos Condicionais

O método dos momentos condicionais (*Conditional Method of Moments* - CMoM) foi proposto no trabalho de CHENG e FOX [152]. O método foi usado para a inversão de momentos bivariados calculados pelo QMoM, originando o método chamado CQMoM (*Conditional Quadrature Method of Moments*). No trabalho original, o método foi usado para resolver um problema de nano-precipitação. Mais recentemente o método foi usado também no trabalho de YUAN e FOX [153].

No CQMoM, a função densidade de probabilidade multivariada (conjunta) passa a ser dada pelo produto de distribuições monovariadas. Isto é possível usando o conceito de distribuições condicionadas. Por exemplo, uma distribuição bivariada é expandida da seguinte forma:

$$f(x, y) = f(x)f(y|x) = \sum_{i,j=1}^N w_i \tilde{w}_{ij} \delta(x - x_i) \delta(y - y_{ij}) \quad (5.26)$$

onde  $f(x)$  representa a distribuição marginal de  $x$  e  $f(y|x)$  a distribuição condicional de  $y$  dado  $x$ . Dessa forma, pode-se escolher uma das variáveis para ser a variável independente, geralmente a que necessita de mais pontos de quadratura, e a outra passa a ser a variável condicionada. No caso geral, uma distribuição multivariada com dimensão  $h$  passa a ser dada pelo produto de uma distribuição marginal com  $h - 1$  distribuições condicionadas.

Os momentos condicionados são obtidos a partir da distribuição condicionada. Por exemplo, o momento condicional de  $y$  de uma dada ordem  $l$  é definido como sendo:

$$\langle y^l \rangle(x) \equiv \int y^l f(y|x) dy \quad (5.27)$$

O método para se encontrar os pesos e abscissas a partir de um conjunto de momentos bivariados,  $\mu_{kl}$ , pode ser resumido nos seguintes passos:

1. Dados os valores dos momentos  $\mu_{k0} = \langle x^k \rangle$  para  $k = 0, \dots, 2N - 1$ , usa-se o algoritmo PD para encontrar  $\{w_i, x_i\}$  para  $i = 1, \dots, N$ .
2. Para cada  $l = 0, \dots, 2N - 1$  deve-se encontrar o valor de  $\langle y^l \rangle_i$  resolvendo-se o sistema linear dado por  $\mu_{kl} = \langle x^k y^l \rangle = \sum_{i=1}^N w_i x_i^k \langle y^l \rangle_i$  para  $k = 0, \dots, N - 1$ . Por exemplo, para  $l = 1$  e  $N = 3$ , gera-se o seguinte sistema linear:

$$\begin{pmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \\ w_1 x_1 & w_2 x_2 & w_3 x_3 \\ w_1 x_1^2 & w_2 x_2^2 & w_3 x_3^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle y^1 \rangle_1 \\ \langle y^1 \rangle_2 \\ \langle y^1 \rangle_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_{01} \\ \mu_{11} \\ \mu_{21} \end{pmatrix} \quad (5.28)$$

que é resolvido para se obter os valores dos momentos condicionais  $\langle y^l \rangle_i$ . Visto que  $\langle y^l \rangle_i$  é um momento condicionado, tem-se que os valores de  $\langle y^0 \rangle_i = 1, \forall i$ .

3. Para cada  $i$ , usa-se o algoritmo PD para inverter os momentos condicionais  $\langle y^l \rangle_i$  para  $l = 0, \dots, 2N - 1$ , a fim de encontrar  $\{\tilde{w}_{ij}, y_{ij}\}$ .

Os momentos originais podem ser reconstruídos usando a seguinte equação:

$$\mu_{kl} = \sum_{i,j=1}^N w_i \tilde{w}_{ij} x_i^k y_{ij}^l \quad (5.29)$$

O seguinte conjunto de momentos condicionados,  $\langle \mathbf{y} \rangle$ , é necessário para a aplicação de uma discretização de  $N_x$  pontos na direção  $x$ , independente, e  $N_y$  pontos na direção  $y$ , condicionada:

$$\langle \mathbf{y} \rangle_i = \{1, \langle y^1 \rangle_i, \langle y^2 \rangle_i, \dots, \langle y^{2N_y-1} \rangle_i\}, \quad i = 0, \dots, N_x - 1 \quad (5.30)$$

Por exemplo, a aplicação do método CQMoM para o caso de  $N_x = N_y = 3$ , sendo  $x$  a direção independente e  $y$  a condicionada, gera o seguinte conjunto de momentos condicionados:  $\{1, \langle y^1 \rangle_1, \langle y^2 \rangle_1, \langle y^3 \rangle_1, \langle y^4 \rangle_1, \langle y^5 \rangle_1\}$ ,  $\{1, \langle y^1 \rangle_2, \langle y^2 \rangle_2, \langle y^3 \rangle_2, \langle y^4 \rangle_2, \langle y^5 \rangle_2\}$  e  $\{1, \langle y^1 \rangle_3, \langle y^2 \rangle_3, \langle y^3 \rangle_3, \langle y^4 \rangle_3, \langle y^5 \rangle_3\}$ .

Como se pode perceber, para a colocação de 3 pontos de quadratura em cada direção existe a necessidade de um conjunto de 21 momentos, ou seja,  $2N_x + N_x(2N_y - 1) = 21$ , onde  $N_x$  e  $N_y$  representam a quantidade de pontos de quadratura na direção  $x$  e  $y$ , respectivamente. Uma outra questão a se observar é que esta é a mesma quantidade de momentos usados pelos métodos PCA e ICA para colocação de 3 pontos de quadratura em cada uma das direções. No entanto, os métodos de PCA e ICA necessitavam todos os momentos até 5<sup>a</sup> ordem, já o CQMoM não necessita

**Tabela 5.1:** Conjunto de momentos bivariados necessários para uma discretização de 3 pontos de quadratura em cada direção.

$k \backslash l$	0	1	2	3	4	5
0	$\mu_{00}$	$\mu_{01}$	$\mu_{02}$	$\mu_{03}$	$\mu_{04}$	$\mu_{05}$
1	$\mu_{10}$	$\mu_{11}$	$\mu_{12}$	$\mu_{13}$	$\mu_{14}$	$\mu_{15}$
2	$\mu_{20}$	$\mu_{21}$	$\mu_{22}$	$\mu_{23}$	$\mu_{24}$	$\mu_{25}$
3	$\mu_{30}$					
4	$\mu_{40}$					
5	$\mu_{50}$					

de todo o conjunto de momentos até 5<sup>a</sup> ordem, mas de dois momentos de 6<sup>a</sup> ordem e um de 7<sup>a</sup> ordem, como pode ser visto na Tabela 5.1.

# Capítulo 6

## Desenvolvimento do Trabalho

*As etapas elaboradas para o desenvolvimento do trabalho são apresentadas na Seção 6.1. Depois, na Seção 6.2, são discutidos os desenvolvimentos feitos no que tange à inversão de momentos multivariados. Posteriormente, são apresentados alguns métodos para a solução da PBE, entre eles, a extensão do método DuQMoGeM para o caso bivariado (Seção 6.3), a derivação do DQMoM usando a formulação peso abscissa pura (Seção 6.4) e, por fim, o método DQMoM-FC usando a formulação peso-abscissa generalizado para o caso multivariado e momentos de ordem arbitrária (Seção 6.5). Após isso, na Seção 6.6, foi detalhada a modelagem para as frequências de quebra e agregação usadas neste trabalho e sua extensão para simulações de escoamentos polidispersos multivariados. Na sequência, apresenta-se a modelagem de turbulência implementada e usada na simulações (Seção 6.7) e, finalmente, é fornecida uma visão geral de como está a estrutura do código disponível (Seção 6.8).*

### 6.1 Etapas do Desenvolvimento

A fim de se alcançar os objetivos pretendidos, foi necessário o estudo de vários aspectos relacionados à modelagem e à solução de problemas de balanço populacional multivariado e escoamentos multifásicos. Dessa forma, pode-se distinguir quatro etapas igualmente importantes e necessárias para o desenvolvimento do trabalho.

#### 6.1.1 Modelagem e Solução de Problemas de Balanço Populacional

Nesta etapa, o foco principal foi desenvolver, implementar e testar métodos para solução de problemas de balanço populacional multivariado. Os métodos DuQ-MoGeM, DQMoM e DQMoM-FC foram avaliados como possíveis candidatos para resolver problemas de balanço populacional multivariado e heterogêneo.

Outra questão explorada foi a modelagem da interação partícula-partícula. Alguns modelos para quebra e coalescência de gotas foram propostos na literatura recente [2]. Esses modelos foram estendidos, implementados e avaliados em problemas de balanço populacional homogêneo e heterogêneo.

### 6.1.2 Solução de Escoamentos Multifásicos

Avaliou-se possíveis melhorias e extensões em códigos de CFD para escoamentos multifásicos atualmente disponíveis no OpenFOAM. Algumas questões realizadas durante este trabalho referem-se à modelagem da turbulência e das forças interfaciais. Também esmerou-se em buscar métodos para aumentar a estabilidade e a robustez do código, entre os quais: (i) a solução acoplada das equações de transporte para peso e abscissa; (ii) o uso de uma sub-escala própria de tempo para resolver as equações de transporte das variáveis do balanço populacional (*sub-cycling*); (iii) o uso do método SVD (Apêndice D) para resolver o sistema linear do DQMoM e do DQMoM-FC.

### 6.1.3 Acoplamento PB-CFD

A modelagem multi-fluido apresentada na Seção 2.2.1 necessita da informação do diâmetro de partícula e da fração de fase, ambas obtidas da solução do balanço populacional. Tomando-se o volume da partícula,  $v$ , como propriedade interna da PBE, a discretização fornecida pelos métodos baseados em momentos provê diretamente a informação necessária para o fechamento do equacionamento multifásico multi-fluido. Neste caso, a fração de cada fase dispersa,  $r_\alpha$ , é dada pelo produto do peso com a abscissa e o somatório das mesmas corresponde a fração total de fase dispersa,  $r_d$ :

$$r_d = \sum_{\alpha=1}^N r_\alpha; \quad r_\alpha = w_\alpha v_\alpha \quad (6.1)$$

Sob a hipótese de partículas esféricas, o diâmetro é obtido diretamente do valor da abscissa:

$$d_\alpha = \left( \frac{6 v_\alpha}{\pi} \right)^{1/3} \quad (6.2)$$

Por outro lado, o acoplamento entre balanço populacional multivariado, quando resolvido por métodos baseados em momentos, e CFD apresenta uma dificuldade adicional que consiste no problema da inversão de momentos multivariados. Este problema continua em aberto na literatura. Durante o desenvolvimento da pesquisa foram elaborados novos métodos voltados à solução desse problema.

### 6.1.4 Estruturação de Código

Para que seja factível um acoplamento PB-CFD mais abrangente, isto é, de modo que seja possível escolher, em tempo de execução, diferentes métodos para a solução da PBE, resolver problemas de balanço populacional de dimensão arbitrária ( $h$ -variados), usar diferentes modelos de turbulência, entre outras, é indispensável organizar o código na forma de classes existentes na linguagem de programação C++. Esta estrutura permite um melhor controle do fluxo de dados entre diferentes partes do código, dando flexibilidade e facilitando a extensão do *solver*.

## 6.2 Inversão de Momentos Multivariados

As seções a seguir descrevem alguns avanços referentes à inversão de momentos multivariados.

### 6.2.1 Inversão de Momentos Multivariados usando ICA

A aplicação da ICA para obtenção da quadratura multidimensional é, em essência, similar ao procedimento usado pela PCA.

A partir do conhecimento dos momentos da função distribuição, os métodos JADE e CuBICA podem ser aplicados de forma similar à discutida na Seção 5.6.1. O procedimento é apresentado a seguir:

1. Usar os momentos de primeira e segunda ordem para montar a matriz de covariância.
2. Calcular a decomposição em valores singulares (Apêndice D) da matriz de covariância e obter a matriz de branqueamento  $\mathbf{W} = \mathbf{H}^T \bar{\mathbf{D}}^{-1/2} \mathbf{H}$ .
3. Aplicar a transformação de branqueamento sobre os momentos. Ver o Apêndice C.4 para maiores detalhes.
4. Usar os momentos branqueados para calcular os tensores de cumulantes e suas respectivas matrizes características.
5. Encontrar uma matriz de rotação ortonormal  $\mathbf{R}$  tal que as matrizes características dos tensores de cumulantes sejam simultaneamente diagonalizadas. Dessa forma, é necessária a diagonalização das matrizes características do tensor de cumulante de quarta ordem no caso da JADE, e de terceira e quarta ordem no caso da CuBICA.
6. Calcular a matriz de separação  $\mathbf{S} = \mathbf{R}\mathbf{W}$  e usá-la para rotacionar o conjunto de momentos necessários. Esse novo conjunto de momentos está nas direções

da ICA, ou seja, nas direções que são o máximo independentes possível do ponto de vista do critério usado pela JADE ou pela CuBICA.

A matriz de separação obtida pela ICA,  $\mathbf{S}$ , transforma os tensores de momentos de um sistema de coordenadas,  $\mathbf{x}$ , para um novo sistema de coordenadas,  $\mathbf{y}$ . É nesse novo sistema de coordenadas que é aplicado o DCPM para obter os pesos e abscissas da quadratura em cada uma das  $h$  variáveis, usando-se somente os momentos puros. As abscissas são transformadas de volta para o sistema de coordenadas original usando projeção inversa, que no caso da ICA é dada por:

$$\mathbf{x} = \mathbf{W}^{-1}\mathbf{R}^T\mathbf{y} + \boldsymbol{\mu} \quad (6.3)$$

Não existe garantia de que a transformação obtida pela ICA linear produza novas variáveis totalmente independentes. Na verdade, o método se propõe em minimizar a dependência entre as variáveis de acordo com uma certa métrica bem definida, sendo, dessa forma, um método mais robusto e elaborado que a PCA. Uma limitação da versão de ICA apresentada é assumir uma transformação linear. Contudo, a ICA vem recebendo bastante atenção recentemente, principalmente na área da engenharia elétrica, e muitas versões de ICA não-lineares já foram reportadas [219, 232–234]. Basicamente, a ideia do ICA não-linear é permitir o uso de uma transformação não-linear entre as variáveis  $\mathbf{y}$  e  $\mathbf{x}$ . Essas novas versões de ICA poderiam ter sido melhor exploradas no âmbito desse trabalho, porém, não foram abordadas.

### 6.2.2 Inversão de Momentos usando Combinação de Métodos e Refinamento de Solução

Os métodos PCA e ICA possuem ideias similares, que consistem em encontrar um novo sistema de coordenadas que torne as variáveis descorrelacionadas ou independentes, respectivamente. O CQMoM, por outro lado, é aplicado diretamente nas variáveis originais. Contudo, ele também poderia se beneficiar dessa transformação de coordenadas, onde as variáveis são mais independentes entre si do que no sistema de coordenadas original. Assim, os métodos PCA-CQMoM e ICA-CQMoM foram desenvolvidos combinando-se a PCA com CQMoM e a ICA com CQMoM, respectivamente.

Para tal, o primeiro passo consiste em se aplicar a transformação de coordenadas dada pela PCA ou pela ICA nos momentos da distribuição. Em seguida, aplica-se o CQMoM nesses momentos transformados para obtenção dos pesos e abscissas. Por fim, usa-se a projeção inversa para voltar as abscissas ao sistema de coordenadas originais.

Por fim, um refinamento da solução obtida por esses métodos poderia ser con-

seguida usando otimização. A obtenção de solução usando otimização apresenta um custo computacional elevado, principalmente quando existe a necessidade de se usar algoritmos de otimização global e o acoplamento com códigos CFD. Contudo, a técnica pode ser particularmente útil quando usada na obtenção de uma condição inicial e de contorno para métodos de momentos diretos, como por exemplo, o DQMoM e o DQMoM-FC.

### 6.3 Solução da PBE usando o DuQMoGeM

No DuQMoGeM considera-se uma família de polinômios ortogonais para aproximar a função densidade de probabilidade [147]. Dessa forma, para uma família de polinômios  $\phi_i$  tem-se:

$$(\phi_i, \phi_j)_{d\bar{\lambda}(x)} \equiv \int_0^{x_{max}} \phi_i(x) \phi_j(x) \omega(x) dx = \delta_{ij} \|\phi_i\|_{d\bar{\lambda}(x)}^2 \quad (6.4)$$

sendo que  $x_{max}$  é o valor máximo possível da coordenada interna, podendo ser um valor finito ou infinito ( $x_{max} \leq \infty$ ), e a função densidade de probabilidade monovariada,  $f(x, t)$ , é expandida como:

$$f(x, t) = \omega(x) \sum_{i=0}^{\infty} c_i \phi_i(x) \quad (6.5)$$

e o coeficiente da aproximação funcional é dado por:

$$c_i = \frac{1}{\|\phi_i\|_{d\bar{\lambda}(x)}^2} \int_0^{x_{max}} \phi_i(x) f(x) dx = \frac{(\phi_i, 1)_{d\lambda(x)}}{\|\phi_i\|_{d\bar{\lambda}(x)}^2} = \frac{\mu_i^{(\phi)}}{\|\phi_i\|_{d\bar{\lambda}(x)}^2} \quad (6.6)$$

com as seguintes medidas  $d\lambda(x) = f(x)dx$ ,  $d\bar{\lambda}(x) = \omega(x)dx$  e  $\omega(x)$  é a função peso [147].

Dessa forma, o momento generalizado  $\mu_i^{(\phi)}$ , associado ao polinômio de grau  $i$ , é proporcional ao coeficiente  $c_i$  da aproximação funcional.

Para o caso homogêneo, a seguinte equação de resíduos ponderados pode ser escrita para uma PBE monovariada considerando-se os fenômenos de agregação, quebra e um termo fonte  $S(x, t)$  qualquer:

$$\mathcal{R}(x, t; f) \equiv \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} + H_a(x, t) + H_b(x, t) - S(x, t) = 0 \quad (6.7)$$

A partir da formulação de Galerkin de resíduos ponderados e momentos generalizados, os coeficientes da aproximação de  $f(x, t)$  usando  $N$  termos são dados por

[147]:

$$\|\phi_k\|_{d\bar{\lambda}(x)}^2 \frac{dc_k}{dt} + \sum_{i,j=0}^{N-1} A_{kij} c_j c_i + \sum_{i=0}^{N-1} L_{ki} c_i = S_k \quad (6.8)$$

onde, para propriedades internas aditivas, tem-se que:

$$A_{kij} = \int_0^{x_{max}} \int_0^{x_{max}} \left[ \phi_k(x) - \frac{1}{2} \phi_k(x+x') \right] a(x, x') \phi_i(x) \phi_j(x') \omega(x) \omega(x') dx dx' \quad (6.9)$$

$$L_{ki} = \int_0^{x_{max}} \left[ \phi_k(x) - \vartheta(x) \Pi_k^\phi(x) \right] b(x) \phi_i(x) \omega(x) dx \quad (6.10)$$

$$S_k = \int_0^{x_{max}} \phi_k(x) S(x, t) dx \quad (6.11)$$

e

$$\Pi_k^\phi(x, t) = \int_0^{x_{max}} \phi_k(x') P(x' | x, t) dx' = \int_0^x \phi_k(x') P(x' | x, t) dx' \quad (6.12)$$

O método DuQMoGeM baseado na formulação de Galerkin de resíduos ponderados e momentos generalizados permite usar diferentes regras de quadraturas. Uma regra de quadratura de alta acurácia pode ser usada para calcular as integrais necessárias para o fechamento do sistema de equações de momentos generalizados (termos fontes, Equações 6.9, 6.10, 6.11 e 6.12) e uma outra quadratura de Gauss-Christoffel pode ser usada para discretizar a função distribuição [147]. Dessa forma, a acurácia associada à resolução dos momentos da distribuição é completamente independente da discretização usada para representar a função distribuição.

A aplicação do DuQMoGeM para resolver uma PBE multivariada é feita de forma similar àquela descrita para o caso monovariado. Por exemplo, para uma PBE bivariada, tem-se:

$$\mathcal{R}(x, y, t; f) \equiv \frac{\partial f(x, y, t)}{\partial t} + H_a(x, y, t) + H_b(x, y, t) - S(x, y, t) = 0 \quad (6.13)$$

onde  $f(x, y, t)$  é uma função densidade de probabilidade bivariada, e  $x$  e  $y$  são duas propriedades internas compreendidas no intervalo  $[0, x_{max}]$  e  $[0, y_{max}]$ , respectivamente, sendo que os  $x_{max}$  e  $y_{max}$  podem assumir valores finitos ou infinitos ( $\{x_{max}, y_{max}\} \leq \infty$ ).

Usando uma aproximação funcional para  $f$  dada por:

$$f(x, y, t) = \omega(x) \tilde{\omega}(y) \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} c_{ij} \phi_i(x) \tilde{\phi}_j(y) \quad (6.14)$$

$$c_{ij} = \frac{(\phi_i \tilde{\phi}_j, 1)_{d\bar{\lambda}(x,y)}}{\|\phi_i\|_{d\bar{\lambda}(x)}^2 \|\tilde{\phi}_j\|_{d\bar{\lambda}(y)}^2} = \frac{\mu_{ij}^{(\phi, \tilde{\phi})}}{\|\phi_i\|_{d\bar{\lambda}(x)}^2 \|\tilde{\phi}_j\|_{d\bar{\lambda}(y)}^2} \quad (6.15)$$

a aplicação do DuQMoGeM origina a seguinte equação para evolução dos coeficientes:

tes:

$$\|\phi_k\|_{d\bar{\lambda}(x)}^2 \|\tilde{\phi}_l\|_{d\bar{\lambda}(y)}^2 \frac{dc_{kl}}{dt} + \sum_{i,j,p,q=0}^{N-1} A_{klijpq} c_{ij} c_{pq} + \sum_{i,j=0}^{N-1} L_{klij} c_{ij} = S_{kl} \quad (6.16)$$

Os operadores de agregação, quebra e o termo fonte são dados por:

$$A_{klijpq} = \int_0^{y_{max}} \int_0^{x_{max}} \int_0^{y_{max}} \int_0^{x_{max}} \left[ \phi_k(x) \tilde{\phi}_l(y) - \frac{1}{2} \phi_k(x' + x) \tilde{\phi}_l(y' + y) \right] \\ \times a(x, y, x', y') \omega(x) \tilde{\omega}(y) \phi_i(x) \tilde{\phi}_j(y) \\ \times \omega(x') \tilde{\omega}(y') \phi_p(x') \tilde{\phi}_q(y') dx dy dx' dy' \quad (6.17)$$

$$L_{klij} = \int_0^{y_{max}} \int_0^{x_{max}} b(x, y) \left[ \phi_k(x) \tilde{\phi}_l(y) - \vartheta(x, y) \Pi_{kl}^{(\phi, \tilde{\phi})}(x, y) \right] \\ \times \omega(x) \tilde{\omega}(y) \phi_i(x) \tilde{\phi}_j(y) dx dy \quad (6.18)$$

$$S_{kl} = \int_0^{y_{max}} \int_0^{x_{max}} \phi_k(x) \tilde{\phi}_l(y) S(x, y, t) dx dy \quad (6.19)$$

e

$$\Pi_{kl}^{(\phi, \tilde{\phi})}(x, y, t) = \int_0^y \int_0^x \phi_k(x') \tilde{\phi}_l(y') P(x', y' | x, y, t) dx' dy' \quad (6.20)$$

Como se pode perceber, os operadores de agregação e quebra possuem dimensão  $3h$  e  $2h$ , respectivamente, sendo  $h$  o número de propriedades internas. Os polinômios  $\phi$  e  $\tilde{\phi}$  são duas famílias de polinômios ortogonais no produto interno com seus pesos  $\omega$  e  $\tilde{\omega}$ , respectivamente. Sem perda de generalidade pode-se também usar a mesma família de polinômios ortogonais para ambas as variáveis internas.

As integrais que aparecem nos operadores de agregação, quebra, termo fonte ( $S$ ) e o operador de probabilidade de quebra podem ser calculados usando rotinas de integração adaptativa, tendo-se em mãos um critério que permite resolver estes termos com maior ou menor acurácia. Isto mostra que se tem um controle da acurácia com que o termo fonte da PBE é resolvido.

## 6.4 Solução da PBE usando o DMoM

Usando o método DQMoM [142] a função distribuição é aproximada por uma expansão funcional dada pelo somatório de funções delta de Dirac:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha \prod_{j=1}^h \delta(x_j - x_{j,\alpha}) \quad (6.21)$$

para os pesos  $w_\alpha$  e abscissas  $\mathbf{x}_\alpha$ .

O uso do DQMoM para simulações de escoamentos polidispersos já foi feita no

trabalho de SILVA e LAGE [9]. Para tal, foi usada a formulação peso e abscissa ponderada, onde a abscissa ponderada é dada por  $\varsigma_\alpha = w_\alpha x_\alpha$ . O termo difusivo da PBE foi ignorado. De fato, a maioria dos trabalhos encontrados na literatura consideram essa formulação. Contudo, existem algumas vantagens em se usar a formulação peso e abscissa pura, por exemplo, em casos de domínio vazio ou em casos que surgem regiões onde não existe fase dispersa. Da mesma forma, existem alguns casos onde o termo difusivo deve ser considerado para uma descrição mais coerente do problema. Assim, serão apresentadas aqui algumas etapas da dedução das equações do DQMoM para a formulação peso e abscissa pura considerando o termo difusivo da PBE.

Considerando-se a PBE dada pela Equação 3.3 para um caso monovariado e com difusão isotrópica e independente da propriedade interna, após a substituição da Equação 6.21 e simplificar e rearranjar os termos, chega-se em:

$$\sum_{\alpha=1}^N \delta(x - x_\alpha) A_\alpha - \sum_{\alpha=1}^N \delta'(x - x_\alpha) w_\alpha B_\alpha - \sum_{\alpha=1}^N \delta''(x - x_\alpha) w_\alpha D_z C_\alpha = H(x, \mathbf{z}, \mathbf{Y}, t) \quad (6.22)$$

onde as seguintes parcelas são definidas:

$$\frac{\partial w_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{u}_\alpha w_\alpha] - \nabla \cdot [D_z \nabla w_\alpha] = A_\alpha \quad (6.23)$$

$$\frac{\partial x_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{u}_\alpha x_\alpha] - x_\alpha \nabla \cdot \mathbf{u}_\alpha - \nabla \cdot [D_z \nabla x_\alpha] - \frac{2D_z}{w_\alpha} \nabla x_\alpha \cdot \nabla w_\alpha = B_\alpha \quad (6.24)$$

$$\nabla x_\alpha \cdot \nabla x_\alpha = C_\alpha \quad (6.25)$$

Aplicando o operador momento na Equação 6.22 e usando as propriedades da função delta de Dirac, chega-se ao seguinte sistema linear de equações para um conjunto de  $2N$  momentos ( $k = 0, \dots, 2N - 1$ ):

$$\sum_{\alpha=1}^N x_\alpha^k A_\alpha + k \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha x_\alpha^{k-1} B_\alpha = k(k-1) D_z \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha x_\alpha^{k-2} C_\alpha + \bar{H}_k^{(N)} \quad (6.26)$$

No DQMoM, o termo  $\bar{H}_k^{(N)}$  é calculado usando uma quadratura de ordem  $N$ . Para o caso de agregação e quebra de partículas chega-se a:

$$\begin{aligned} \bar{H}_k^{(N)} &= \int_0^\infty x^k H(x, \mathbf{z}, \mathbf{Y}) dx \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N [(x_\alpha + x_\beta)^k - x_\alpha^k - x_\beta^k] a(x_\alpha, x_\beta) w_\alpha w_\beta \\ &\quad + \sum_{\alpha=1}^N b(x_\alpha) w_\alpha [\vartheta(x_\alpha) \Pi_k(x_\alpha) - x_\alpha^k] \end{aligned} \quad (6.27)$$

$$\Pi_k(x_\alpha) = \int_0^{x_\alpha} x^k P(x \mid x_\alpha) dx \quad (6.28)$$

De forma similar, as seguintes equações de transporte são obtidas para os pesos e abscissas da quadratura no caso bivariado ( $h = 2$ ):

$$\frac{\partial w_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{u}_\alpha w_\alpha] - \nabla \cdot [D_z \nabla w_\alpha] = A_\alpha \quad (6.29)$$

$$\frac{\partial x_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{u}_\alpha x_\alpha] - x_\alpha \nabla \cdot \mathbf{u}_\alpha - \nabla \cdot [D_z \nabla x_\alpha] - \frac{2D_z}{w_\alpha} \nabla x_\alpha \cdot \nabla w_\alpha = B_\alpha^x \quad (6.30)$$

$$\frac{\partial y_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{u}_\alpha y_\alpha] - y_\alpha \nabla \cdot \mathbf{u}_\alpha - \nabla \cdot [D_z \nabla y_\alpha] - \frac{2D_z}{w_\alpha} \nabla y_\alpha \cdot \nabla w_\alpha = B_\alpha^y \quad (6.31)$$

Os termos fontes das equações de transporte são determinados pela solução do sistema linear:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^N x_\alpha^k y_\alpha^l A_\alpha + k \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha x_\alpha^{k-1} y_\alpha^l B_\alpha^x + l \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha x_\alpha^k y_\alpha^{l-1} B_\alpha^y = \\ & 2 k l D_z \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha x_\alpha^{k-1} y_\alpha^{l-1} \nabla x_\alpha \cdot \nabla y_\alpha \\ & + k(k-1) D_z \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha x_\alpha^{k-2} y_\alpha^l \nabla x_\alpha \cdot \nabla x_\alpha \\ & + l(l-1) D_z \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha x_\alpha^k y_\alpha^{l-2} \nabla y_\alpha \cdot \nabla y_\alpha \\ & + \bar{H}_{kl}^{(N)} \end{aligned} \quad (6.32)$$

e o vetor independente do sistema linear para quebra e agregação é dado por:

$$\begin{aligned} \bar{H}_{kl}^{(N)} = & \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha b(x_\alpha, y_\alpha) [\vartheta(x_\alpha, y_\alpha) \Pi_{kl}(x_\alpha, y_\alpha) - x_\alpha^k y_\alpha^l] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N w_\alpha w_\beta [(x_\alpha + x_\beta)^k (y_\alpha + y_\beta)^l - x_\alpha^k y_\alpha^l - x_\beta^k y_\beta^l] a(x_\alpha, x_\beta, y_\alpha, y_\beta) \end{aligned} \quad (6.33)$$

onde

$$\Pi_{kl}(x_\alpha, y_\alpha) = \int_0^{x_\alpha} \int_0^{y_\alpha} x^k y^l P(x, y \mid x_\alpha, y_\alpha) dx dy \quad (6.34)$$

## 6.5 Solução da PBE usando o DQMoM-FC

O método DQMoM-FC foi proposto por BUFFO *et al.* [151] para resolver o problema do DQMoM [142] não conservar os momentos em simulações envolvendo balanço populacional heterogêneo. Eles justificaram que o uso de equações de transporte para

variáveis primitivas, como os pesos e abscissas no caso do DQMoM, não garantem uma solução no qual os momentos sejam conservados. Este comportamento não-conservativo dos momentos é observado em casos onde os pesos e abscissas são inicialmente descontínuos no espaço, mesmo no caso do conjunto de momentos ser realizável de cada lado da descontinuidade [10].

A ideia do DQMoM-FC é reescrever a maneira pela qual os fluxos são avaliados, buscando garantir a conservação de momentos. Isto pode ser conseguido se os fluxos advectivos e difusivos forem tratados como termos fontes da PBE, ou seja, diferentemente do DQMoM [9, 142], esses termos não entram implicitamente nas equações de transporte de pesos e abscissas. Procedendo-se dessa forma, verifica-se que o balanço de momentos passa a ser satisfeito para um dado volume de controle qualquer que tenha entrada e saída de fase dispersa. Os autores referenciaram o procedimento colocado em VIKAS *et al.* [235] para ser usado no cálculo dos fluxos advectivos de forma a garantir momentos realizáveis.

Neste trabalho, foi deduzida uma versão multivariada do DQMoM-FC em termos de pesos,  $w$ , e abscissas,  $\mathbf{x}$ , originando o seguinte sistema linear:

$$\sum_{\alpha=1}^N \prod_{i=1}^h x_{i,\alpha}^{k_i} A_{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^N \sum_{j=1}^h k_j w_{\alpha} x_{j,\alpha}^{k_j-1} \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^h x_{i,\alpha}^{k_i} B_{j,\alpha} = \bar{H}_{\mathbf{k}}^{(N)} - \bar{F}_{\mathbf{k}}^{(N)} \quad (6.35)$$

juntamente com as equações de evolução temporal de pesos e abscissas:

$$\frac{\partial w_{\alpha}}{\partial t} = A_{\alpha}, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (6.36)$$

$$\frac{\partial x_{j,\alpha}}{\partial t} = B_{j,\alpha}, \quad j = 1, \dots, h; \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (6.37)$$

onde  $\mathbf{k} = [k_1, \dots, k_h]^T$  é o vetor cujo índices fornecem a ordem do momento multivariado para cada uma das variáveis internas, podendo este ser um número inteiro ou fracionário. O momento multivariado é dado por:

$$\mu_{\mathbf{k}} = \int_0^{\infty} \dots \int_0^{\infty} \prod_{j=1}^h x_j^{k_j} f(\mathbf{x}, \mathbf{z}, t) dx_1 \dots dx_h \quad (6.38)$$

podendo ser aproximado pela seguinte quadratura:

$$\mu_{\mathbf{k}} \simeq \mu_{\mathbf{k}}^{(N)} = \sum_{\alpha=1}^N w_{\alpha} \prod_{j=1}^h x_{j,\alpha}^{k_j} = \sum_{\alpha=1}^N \mu_{\mathbf{k},\alpha} \quad (6.39)$$

onde  $\mu_{\mathbf{k},\alpha} \doteq w_{\alpha} \prod_{j=1}^h x_{j,\alpha}^{k_j}$ .

O sistema dado pela Equação 6.35 tem posto completo quando  $s = (h+1)N$

equações linearmente independentes são fornecidas. Isso equivale a um conjunto de  $s$  momentos da PBE aproximados por uma quadratura de  $N$  pontos num espaço com dimensão  $h$  [13, 151]. A escolha do melhor conjunto de momentos para compôr o sistema linear do DQMoM-FC em casos com  $h > 2$  não é trivial, existindo trabalhos na literatura que tratam especificamente dessa questão [11].

Os termos  $\overline{H}_{\mathbf{k}}^{(N)}$  e  $\overline{F}_{\mathbf{k}}^{(N)}$  são, respectivamente, o momentos de ordem  $\mathbf{k}$  do termo fonte relacionado aos processos de interação entre partículas e do termo fonte relacionado à advecção e difusão dos momentos no espaço físico aproximados por uma quadratura de  $N$  pontos.

Considerando os processos de quebra e agregação de partículas para um caso com dimensão  $h$ , tem-se:

$$\begin{aligned} \overline{H}_{\mathbf{k}}^{(N)} &= \sum_{\alpha=1}^N w_{\alpha} b(\mathbf{x}_{\alpha}) \left[ \vartheta(\mathbf{x}_{\alpha}) \Pi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_{\alpha}) - \prod_{i=1}^h x_{i,\alpha}^{k_i} \right] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N \left[ \prod_{i=1}^h (x_{i,\alpha} + x_{i,\beta})^{k_i} - \prod_{i=1}^h x_{i,\alpha}^{k_i} - \prod_{i=1}^h x_{i,\beta}^{k_i} \right] a(\mathbf{x}_{\alpha}, \mathbf{x}_{\beta}) w_{\alpha} w_{\beta} \end{aligned} \quad (6.40)$$

onde

$$\Pi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_{\alpha}) = \int_{\mathbf{0}}^{\mathbf{x}_{\alpha}} \left( \prod_{i=1}^h x_i^{k_i} \right) P(\mathbf{x} \mid \mathbf{x}_{\alpha}) d\mathbf{x} \quad (6.41)$$

A advecção e a difusão dos momentos no espaço físico é dada por:

$$\overline{F}_{\mathbf{k}}^{(N)} = \nabla \cdot \left[ \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{u}_{\alpha} \mu_{\mathbf{k},\alpha} \right] - \nabla \cdot \left[ D \nabla \mu_{\mathbf{k}}^{(N)} \right] \quad (6.42)$$

onde  $\mathbf{u}_{\alpha}(\mathbf{z}, t) = \mathbf{u}_d(\mathbf{x}_{\alpha}, \mathbf{y}(\mathbf{z}, t), \mathbf{z}, t)$  é a velocidade de advecção de cada uma das abscissas, que corresponde as velocidades das fases dispersas,  $\alpha = 1, \dots, N$ . Assumiu-se que o coeficiente de difusão,  $D$ , é isotrópico e não é função das abscissas  $\mathbf{x}$ .

A advecção e a difusão dos momentos no espaço físico corresponde aos fluxo dos mesmos pelas faces das células,  $fc$ , podendo ser vista como um processo de injeção ou extração de partículas num volume de controle definido. Dessa forma, esse fluxo pode ser calculado em cada uma das células que discretizam o espaço físico usando o método de volumes finitos convencional. Neste trabalho, por exemplo, usou-se o método de volumes finitos implementado no *software* OpenFOAM, detalhado no trabalho de JASAK [168]. No Apêndice A são dados detalhes de como são avaliados os diferentes operadores no OpenFOAM. Um momento genérico de dimensão  $h$  é reconstruído nas faces das células usando a discretização em termos de pesos e

abscissas, ou seja:

$$\bar{F}_{\mathbf{k}}^{(N)} = \sum_{fc} \left( \sum_{\alpha=1}^N \phi_{\alpha,fc} w_{\alpha,fc} \prod_{i=1}^h x_{i,\alpha,fc}^{k_i} \right) - \sum_{fc} D_{fc} \mathbf{S}_{fc} \cdot \left( \nabla \left[ \sum_{\alpha=1}^N w_{\alpha} \prod_{i=1}^h x_{i,\alpha}^{k_i} \right] \right)_{fc} \quad (6.43)$$

onde  $\phi_{\alpha,fc} = \mathbf{u}_{\alpha,fc} \cdot \mathbf{S}_{fc}$  e  $\mathbf{S}_{fc}$  é o vetor de área da face  $fc$ .

Em problemas envolvendo solução de balanço populacional heterogêneo o sistema linear dado pela Equação 6.35 deve ser resolvido em cada célula do espaço físico discretizado em cada passo de tempo.

## 6.6 Modelagem para a Dispersão, a Quebra e a Coalescência de Gotas

### 6.6.1 Modelagem do Coeficiente de Dispersão

Assumindo difusão isotrópica, a modelagem do coeficiente de dispersão de partículas  $D_z$  pode ser dividido em duas parcelas  $D_z = D_z^{lam} + D_z^{turb}$ , onde  $D_z^{lam}$  corresponde ao coeficiente de dispersão devido ao movimento Browniano de partículas e  $D_z^{turb}$  é o coeficiente de dispersão turbulenta de partículas [143, 236, 237]. O coeficiente de dispersão devido ao movimento Browniano é inversamente proporcional ao tamanho das partículas, logo, é usualmente desprezado, a menos que o problema envolva partículas de tamanho muito pequeno, como em processos envolvendo escoamento de nanopartículas [143]. Já o coeficiente de dispersão turbulenta de partículas existirá em escoamentos turbulentos e sua modelagem ainda não é muito bem conhecida. A literatura que trata da modelagem do coeficiente associado à dispersão turbulenta de partículas ainda é muita escassa. Nos trabalhos existentes, o mais comum é assumir, por simplicidade, que a dependência do coeficiente de dispersão turbulenta com relação à propriedade interna é dada pelo número de Schmidt turbulento,  $Sc^{turb}$ . Dessa forma, a dispersão turbulenta é relacionada com a viscosidade turbulenta do escoamento,  $\nu_0^{turb}$ , e o  $Sc^{turb}$  de acordo com a seguinte relação [237]:

$$D_z^{turb} = \frac{C_\mu}{Sc^{turb}} \frac{k_0^2}{\epsilon_0} = \frac{\nu_0^{turb}}{Sc^{turb}} \quad (6.44)$$

onde, para partículas pequenas que seguem fielmente as linhas de corrente do escoamento, geralmente partículas menores que  $10\mu m$ , tem-se que  $Sc^{turb} \approx 1$ . Para partículas grandes que não seguem exatamente as linhas de corrente do escoamento, o  $Sc^{turb}$  assume valores menores que 1, aumentando a dispersão [238, 239].

## 6.6.2 Modelagem das Frequências de Quebra e Coalescência de Gotas

Recentemente, MITRE *et al.* [2] propuseram novos modelos para a coalescência e a quebra de gotas de emulsões de água em óleo escoando através de canais com acidentes. Eles usaram um modelo de balanço populacional homogêneo (modelo Lagrangeano) para predizer a evolução da distribuição de tamanho de gotas. Os parâmetros dos modelos propostos foram ajustados usando os dados experimentais disponíveis. O modelo proposto para a frequência de coalescência de gotas com diâmetros  $d_\alpha$  e  $d_\beta$  é dado por:

$$a(d_\alpha, d_\beta) = \lambda(d_\alpha, d_\beta) \theta(d_\alpha, d_\beta) \quad (6.45)$$

onde a frequência de colisão de gotas,  $\theta(d_\alpha, d_\beta)$ , é dada por:

$$\theta(d_\alpha, d_\beta) = C_c S(d_\alpha, d_\beta) u_r \quad (6.46)$$

Na Equação 6.46,  $C_c$  é um parâmetro multiplicador da frequência de colisão e  $S(d_\alpha, d_\beta)$  é a área característica da seção reta de colisão entre as gotas, definida como

$$S(d_\alpha, d_\beta) = \frac{\pi(d_\alpha + d_\beta)^2}{4} \quad (6.47)$$

e  $u_r$  é dado por:

$$u_r = \frac{u_{d_\alpha} + u_{d_\beta}}{2} \quad (6.48)$$

onde  $u_{d_\alpha}$  é a velocidade da gota relacionada a turbulência do escoamento, que, para emulsões com gotas na faixa sub-Kolmogorov, é dada por:

$$u_{d_\alpha} = \dot{\gamma} d_\alpha = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\nu_0}} d_\alpha \quad (6.49)$$

onde  $\dot{\gamma}$  é a taxa de cisalhamento turbulento dos menores vórtices do escoamento.

De forma mais compacta a frequência de colisão de gotas pode ser dada por:

$$\theta(d_\alpha, d_\beta) = C_c \frac{\pi}{8} \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\nu_0}} (d_\alpha + d_\beta)^3 \quad (6.50)$$

Para a modelagem da eficiência de coalescência,  $\lambda(d_\alpha, d_\beta)$ , quatro abordagens foram consideradas por MITRE *et al.* [2]:

- Interface rígida:

$$\lambda(d_\alpha, d_\beta) = \exp \left[ -C_e \frac{1}{4} \ln \left( \frac{h_i}{h_f} \right) \right] \quad (6.51)$$

- Interface deformável e imóvel:

$$\lambda(d_\alpha, d_\beta) = \exp \left[ -C_e \frac{8}{9} C a_{eq}^2 \left( \frac{d_{eq}}{2h_f} \right)^2 \right] \quad (6.52)$$

- Interface deformável e parcialmente móvel:

$$\lambda(d_\alpha, d_\beta) = \exp \left[ -C_e \frac{\sqrt{3}}{4} \left( \frac{\mu_d}{\mu} \right) C a_{eq}^{(3/2)} \left( \frac{d_{eq}}{2h_f} \right) \right] \quad (6.53)$$

- Interface deformável e móvel:

$$\lambda(d_\alpha, d_\beta) = \exp \left[ -C_e \frac{3}{2} C a_{eq} \ln \left( \frac{h_i}{h_f} \right) \right] \quad (6.54)$$

Nessa modelagem,  $C_c$  e  $C_e$  são parâmetros a serem ajustados,  $\nu_0$  é a viscosidade cinemática da fase contínua,  $\mu_0$  é a viscosidade dinâmica da fase contínua,  $\mu_d$  é a viscosidade dinâmica da fase dispersa,  $d$  é o diâmetro da gota,  $\epsilon_0$  é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta e  $d_{eq} = 2(d_\alpha^{-1} + d_\beta^{-1})^{-1}$  é o diâmetro equivalente da gota [2]. Por fim,  $h_i$  e  $h_f$  correspondem, respectivamente, à espessura inicial e final do filme formado entre as gotas durante o processo de colisão. O valor de  $h_i$  é desconhecido, sendo comum assumir a razão  $h_i/h_f$  como uma constante a ser determinada, podendo dessa forma ser incorporada ao parâmetro  $C_c$ . Já  $h_f$  pode ser calculado a partir de:

$$h_f = \left( \frac{d_{eq} A}{16\pi\sigma} \right)^{1/3} \quad (6.55)$$

onde  $A$  é a constante de Hamaker e  $\sigma$  é a tensão interfacial do par água-óleo.

$Ca$  é o número capilar, definido como:

$$Ca = \frac{\mu_0 \sqrt{\epsilon_0/\nu_0} d}{2\sigma} \quad (6.56)$$

sendo  $C a_{eq}$  o seu valor para  $d_{eq}$ .

Para a frequência de quebra de gotas, o seguinte modelo foi proposto:

$$b(d_\alpha) = \begin{cases} 1.24 C_b \sqrt{\epsilon_0/\nu_0} C a_\alpha^{2.2} \left( \frac{d_\alpha}{2\eta} \right)^{4/5}, & \text{para } C a_\alpha > C a_{crit} \\ 0, & \text{para } C a_\alpha \leq C a_{crit} \end{cases} \quad (6.57)$$

onde  $C_b$  é um parâmetro a ser ajustado,  $C a_\alpha$  é o número capilar calculado para  $d_\alpha$

e  $\eta$  é escala de comprimento de Kolmogorov, definidos como:

$$Ca_\alpha = \frac{\mu_0 \sqrt{\epsilon_0/\nu_0} d_\alpha}{2\sigma}; \quad \eta = \left( \frac{\nu_0^3}{\epsilon_0} \right)^{1/4} \quad (6.58)$$

$Ca_{crit}$  é o número capilar crítico, o qual foi obtido por MITRE *et al.* [2] como sendo função dos números de Reynolds e de Stokes:

$$Ca_{crit} = 1.65 \times 10^{-4} St_K Re_{max}^{-3/20} \quad (6.59)$$

onde  $St_K$  e  $Re_{max}$  são dados por:

$$St_K = \frac{t_{res}}{\sqrt{\nu_0/\epsilon_0}}; \quad Re_{max} = \frac{Q}{L_a \nu_0}; \quad t_{res} = \frac{V_c}{Q} \quad (6.60)$$

$V_c$  é o volume efetivo do acidente,  $t_{res}$  é o tempo de residência da gota em  $V_c$ ,  $Q$  é a vazão volumétrica e  $L_a$  é a largura do canal [2].

A função densidade de probabilidade das partículas filhas formadas pela quebra,  $P(v | v')$ , assume que  $\vartheta$  partículas filhas de igual volume são formadas durante a quebra:

$$P(v | v') = \delta \left( v - \frac{v'}{\vartheta} \right) \quad (6.61)$$

e o número médio de partículas filhas formadas,  $\vartheta$ , é considerado como um parâmetro a ser ajustado com dados experimentais.

Para o caso homogêneo, MITRE *et al.* [2] estimaram a taxa média de dissipação de energia turbulenta no acidente através da Equação 6.62, onde  $t_{res}$  foi calculado pela Equação 6.60.

$$\langle \epsilon_0 \rangle = \frac{\Delta p}{\rho_0 t_{res}} \quad (6.62)$$

Na extensão dessa modelagem para o caso heterogêneo proposta nesse trabalho  $\epsilon_0$  e  $t_{res}$  passam a ser campos, ou seja, seus valores são calculados localmente em cada uma das células que compõem o domínio físico discretizado. O campo de  $\epsilon_0$  é obtido da solução do modelo de turbulência e  $t_{res}$  é calculado em cada um dos volumes de controle usando a seguinte expressão:

$$t_{res}^\alpha = \frac{\sqrt[3]{V_c^{cell}}}{\sqrt{\mathbf{u}_\alpha \cdot \mathbf{u}_\alpha}} \quad (6.63)$$

onde  $V_c^{cell}$  é o volume da célula e  $\mathbf{u}_\alpha$  ( $\alpha = 1, \dots, N$ ) é o valor da velocidade da fase dispersa  $\alpha$  no centro da célula. Nota-se que, todas as variáveis que dependem de  $\epsilon_0$  ou  $t_{res}$  tornam-se campos também, como por exemplo,  $Ca$ ,  $Ca_{crit}$ ,  $St_K$  e  $\eta$ .

No caso das partículas terem tamanhos muito pequenos e apresentarem massas

específicas próxima das da fase contínua é possível assumir que  $\mathbf{u}_\alpha \approx \mathbf{u}_0$  e dessa forma a Equação 6.63 pode ser reescrita como sendo:

$$t_{res} = \frac{\sqrt[3]{V_c^{cell}}}{\sqrt{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{u}_0}} \quad (6.64)$$

A modelagem que foi mostrada é para o caso monovariado. A extensão dessa modelagem para o caso multivariado considerado nesse trabalho assume que as frequências de quebra e coalescência dependem somente do tamanho das gotas, a menos que seja dito o contrário. Usando essa hipótese, somente a função densidade de probabilidade multivariada das partículas filhas formadas pela quebra precisa ser redefinida. Assumindo-se que durante a quebra de uma partícula mãe todas as propriedades internas consideradas sejam divididas igualmente para cada uma das partículas filhas geradas, que acontece no caso das propriedades serem aditivas como, massa total, massa dos componentes, etc, tem-se:

$$P(\mathbf{x} | \mathbf{x}') = \prod_{j=1}^h \delta \left( x_j - \frac{x'_j}{\vartheta} \right) \quad (6.65)$$

onde  $\vartheta$  é o mesmo valor do caso monovariado.

## 6.7 Modelo de Turbulência de Dupla-Camada

O modelo  $k - \epsilon$  padrão apresentado na Seção 2.2.2 é um modelo de altos números de Reynolds (*High Reynolds Number* - HRN) e prediz de forma satisfatória as variáveis de turbulência na região distante da parede, onde o escoamento é plenamente turbulento. Comumente, os modelos HRN são usados juntamente com funções de paredes para resolver escoamentos onde  $30 \leq y^+ \leq 300$  e os modelos de baixos números de Reynolds (*Low Reynolds Number* - LRN) são aplicados em casos em que  $y^+ \approx 1$ .  $y^+$  corresponde a uma distância adimensional do centro da célula à parede mais próxima, sendo dado por [240–242]:

$$y^+ \equiv \frac{y \sqrt{\nu \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)_{y=0}}}{\nu} \quad (6.66)$$

onde  $y$  é a distância do centro do volume de controle à parede mais próxima e  $\nu$  é a viscosidade cinemática da fase contínua<sup>1</sup>.

A faixa de  $y^+$  entre 1 e 30 corresponde à região transicional, ficando entre estas duas abordagens e sendo menos conhecida em termos de modelagem [243].

---

<sup>1</sup>Para fins de praticidade, não será usado o índice 0 para se referir as variáveis da fase contínua na presente seção.

Além do uso de funções de parede, pode-se usar a ideia de se modelar duas camadas distintas com o intuito de melhorar as previsões dos modelos nas distintas faixas de aplicação de cada um e na região transicional. Basicamente, os modelos de duas camadas misturam um modelo algébrico para a região próxima à parede e um modelo diferencial, como o próprio  $k - \epsilon$  por exemplo, para a região distante da parede. Essa modelagem foi proposta no trabalho de CHEN e PATEL [244] mas encontram-se várias versões de modelos de dupla-camada na literatura, combinando diferentes tipos de modelos algébricos e diferenciais. Uma comparação entre duas versões de modelos de dupla-camada, usando diferentes modelos algébricos juntamente com o modelo  $k - \epsilon$ , pode ser encontrada no trabalho de LAKEHAL e RODI [245].

O modelo de dupla-camada implementado aqui corresponde a adaptação para o caso multifásico do modelo descrito no trabalho de VOLKOV [246]. A ideia desse modelo de dupla-camada consiste em se usar o modelo  $k - \epsilon$  padrão para resolver a turbulência na região distante da parede (região de escoamento turbulento plenamente desenvolvido) e aplicar o modelo de uma equação de Wolfshtein [247] na região de escoamento laminar próximo à parede. Dessa forma, obtém-se um modelo híbrido  $k - \epsilon - W$ .

As subcamadas são definidas de acordo com o valor do número de Reynolds turbulento local,  $Re_y$ , que está relacionado com a distância da parede, tal que:

$$Re_y = \frac{\rho k^{1/2} y}{\mu} \quad (6.67)$$

As equações do modelo  $k - \epsilon$  padrão (Eqs. 2.12 e 2.13) são usadas na região onde  $Re_y > Re_{y^*}$  e a viscosidade turbulenta é calculada usando-se a fórmula de Kolmogorov-Prandtl (Equação 2.15). Já na região onde  $Re_y < Re_{y^*}$  o modelo  $k - l$  de Wolfshtein [247] é usado e, neste caso, a energia cinética turbulenta é determinada pela Equação 2.12 mas a dissipação de energia turbulenta e a viscosidade turbulenta passam a serem calculadas pelas Equações 6.68 e 6.69, respectivamente.

$$\epsilon_w = \frac{k^{3/2}}{l_\epsilon} \quad (6.68)$$

$$\mu_w^{turb} = \rho C_\mu l_\mu \sqrt{k} \quad (6.69)$$

No trabalho de VOLKOV [246] foi usado um valor de  $Re_{y^*} = 180$ . Contudo, esse valor é controverso, por exemplo, no *software* FLUENT [248] usa-se  $Re_{y^*} = 200$  e o *software* STAR-CCM+ [249] adota um valor  $Re_{y^*} = 60$ . As escalas  $l_\epsilon$  e  $l_\mu$  são dadas por:

$$l_\epsilon = C_l y \left[ 1 - \exp \left( -\frac{Re_y}{A_\epsilon} \right) \right] \quad (6.70)$$

$$l_\mu = C_l y \left[ 1 - \exp \left( -\frac{Re_y}{A_\mu} \right) \right] \quad (6.71)$$

onde  $A_\mu = 70$ ,  $A_\epsilon = 2C_l$ ,  $C_l = \kappa C_\mu^{-3/4}$  e  $\kappa = 0,41$ . No caso de  $y^+ < 1$ ,  $k = 0$  é aceitável como condição de contorno para a energia cinética turbulenta nas paredes e  $\mathbf{n} \cdot \nabla \epsilon = 0$  é usado para a dissipação de energia turbulenta, não requerendo tratamento especial com o uso de funções de parede [250]. No caso do  $y^+$  ser elevado,  $y^+ > 11,25$ , é aconselhável usar a condição de  $\mathbf{n} \cdot \nabla k = 0$  juntamente com funções de parede para a dissipação de energia turbulenta [248]. Existem diferentes funções de parede descritas na literatura. Uma das mais usadas e simples foi proposta por LAUNDER e SPALDING [241]. Neste caso, a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta,  $\epsilon$ , na célula adjacente à parede é calculada por:

$$\epsilon = \frac{C_\mu^{3/4} k^{3/2}}{\kappa y} \quad (6.72)$$

Outras funções de parede mais elaboradas, levando em conta os efeitos relacionados aos gradientes de pressão, ou funções de parede generalizadas, válidas para quaisquer valores de  $y^+$ , podem ser encontradas na literatura, por exemplo, nos trabalhos de CRAFT *et al.* [251] e POPOVAC e HANJALIC [252].

Para fazer a transição suave das variáveis entre as diferentes camadas (modelagens), usou-se a seguinte função de suavização:

$$\lambda_\epsilon = \frac{1}{2} \left[ 1 + \tanh \left( \frac{Re_y - Re_{y^*}}{A} \right) \right] \quad (6.73)$$

onde a constante  $A$  é usada para controlar a suavidade da transição, sendo geralmente colocada de forma geral como sendo:

$$A = \frac{|\Delta Re_y|}{\tanh(0,98)} \quad (6.74)$$

para  $\Delta Re_y = 0,1 Re_{y^*} = 18$ .

Dessa forma, valores de  $\lambda_\epsilon = 0$  são esperados na região próxima às paredes e valores de  $\lambda_\epsilon = 1$  são esperados em locais de escoamento com altos números Reynolds. Valores intermediários entre 0 e 1 definem a região de transição entre as subcamadas. De forma geral, a viscosidade turbulenta pode ser calculada como:

$$\mu^{turb} = \lambda_\epsilon \mu_{k-\epsilon}^{turb} + (1 - \lambda_\epsilon) \mu_W^{turb} \quad (6.75)$$

sendo que  $\mu_{k-\epsilon}^{turb}$  e  $\mu_W^{turb}$  correspondem às viscosidades externa e interna, respectivamente, da subcamada próxima à parede.

O termo fonte da equação de dissipação de energia turbulenta, Equação 2.14,

também é modificado para conter a ponderação por  $\lambda_\epsilon$ , ou seja:

$$S_\epsilon^P = \lambda_\epsilon \left[ \frac{\epsilon}{k} (C_{\epsilon 1} \Psi - C_{\epsilon 2} \rho \epsilon) \right] + (1 - \lambda_\epsilon) \rho \alpha \left[ \frac{k^{3/2}}{l_\epsilon} - \epsilon \right] \quad (6.76)$$

A Eq. 2.13 é recuperada na região de altos números de Reynolds e na região de baixos números de Reynolds a seguinte equação é usada para calcular a dissipação de energia turbulenta local:

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} = \alpha \left[ \frac{k^{3/2}}{l_\epsilon} - \epsilon \right] \quad (6.77)$$

e a constante  $\alpha \sim 1$  controla a diferença entre  $\epsilon$  e  $\frac{k^{3/2}}{l_\epsilon}$ .

Sintetizando a modelagem usada:

Se  $y^+ < 3$ , não se aplica a lei de parede para a velocidade. Neste caso: i)  $k$  é resolvido pela Equação 2.12 com condição de contorno na parede dada por  $k = 0$ ; ii) a solução da Equação 6.77 é usada em locais onde  $Re_y < Re_{y^*}$  e a da Equação 2.13 em locais onde  $Re_y > Re_{y^*}$ , usando a condição de contorno na parede  $\mathbf{n} \cdot \nabla \epsilon = 0$ .

Se  $y^+ > 3$ , aplica-se uma lei de parede para a velocidade. Neste caso: i)  $k$  é resolvido pela Equação 2.12 com condição de contorno na parede  $\mathbf{n} \cdot \nabla k = 0$ ; ii) a solução da Equação 6.77 é usada em locais onde  $Re_y < Re_{y^*}$  e a da Equação 2.13 em locais onde  $Re_y > Re_{y^*}$  usando a condição de contorno na parede de  $\mathbf{n} \cdot \nabla \epsilon = 0$ . Contudo, se  $y^+ > 11,225$ , o valor de  $\epsilon$  na célula adjacente à parede é recalculado usando a Equação 6.72.

## 6.8 Visão geral do *Solver* desenvolvido

O *solver* desenvolvido permite a simulação de escoamentos multifásicos polidispersos através da solução da PBE, por diferentes métodos, acoplada com a abordagem multi-fluido. O *solver* vem sendo desenvolvido na versão OpenFOAM-1.6-ext [253] e foi denominado `multiPhaseMultiVariatePbeFoam`.

O modelo multifásico Euleriano-Euleriano está implementado no código principal do *solver* onde é resolvida a equação de conservação de quantidade de movimento, a equação da pressão, o acoplamento pressão-velocidade e são chamadas funções membros usadas para solução do modelo de turbulência e do balanço populacional.

Para facilitar o controle e a extensão do código, o *solver* usa três bibliotecas: (i) uma com modelos para o coeficiente de arrasto; (ii) outra com modelos de turbulência; (iii) e, por fim, uma biblioteca com métodos de solução da PBE.

A biblioteca com modelos para coeficiente de arrasto possui implementados modelos como Schiller-Naumann [37], Gabilaro [254], Grace [38] e Ergun [254], entre outros.

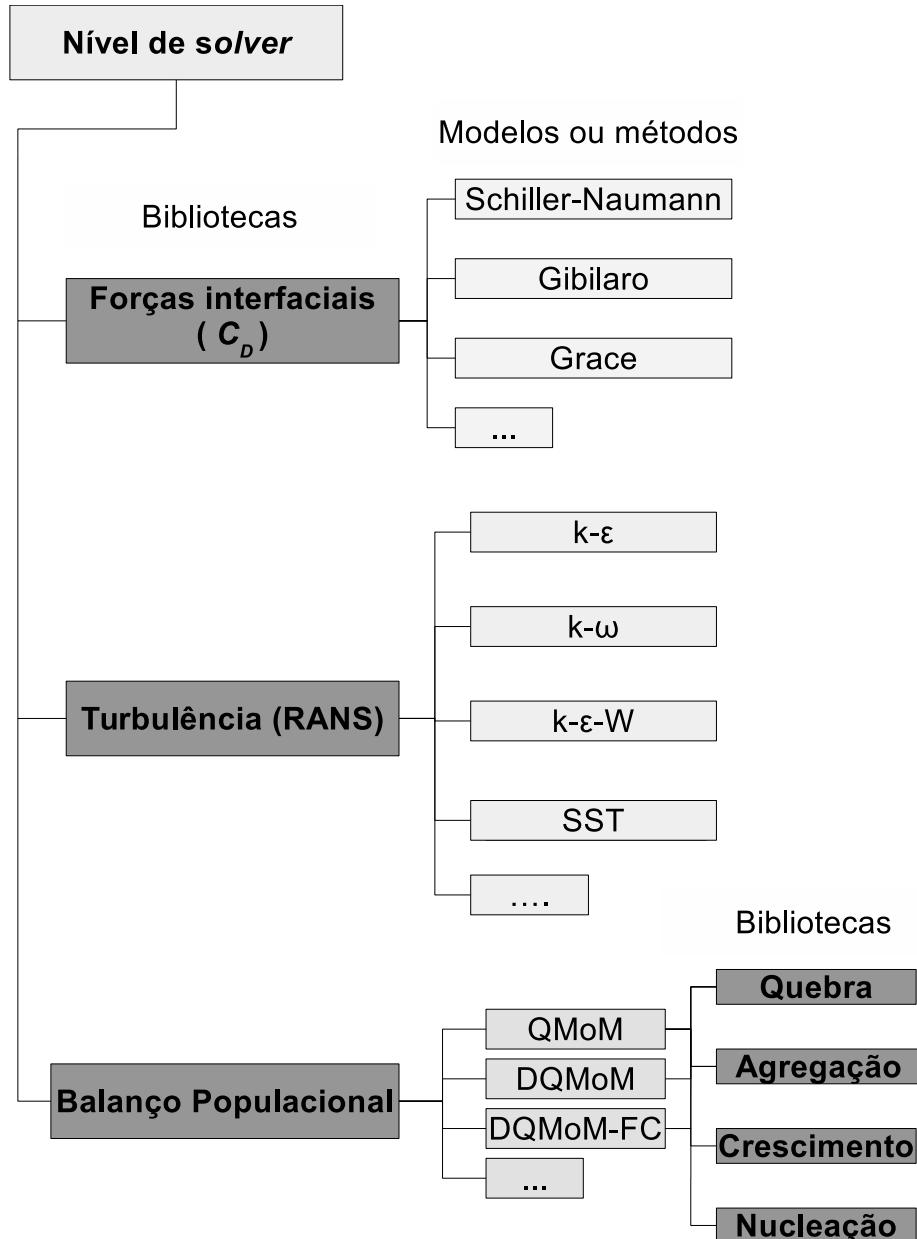
A biblioteca de modelos de turbulência tem disponível atualmente a modelagem baseada em equações de média de Reynolds (*Reynolds Averaged Navier-Stokes* - RANS). Nessa classe de modelos, estão disponíveis os modelos  $k - \epsilon$ , Realizable  $k - \epsilon$ , RNG  $k - \epsilon$ ,  $k - \epsilon - W$ ,  $k - \omega$ , SST (Shear-Stress Transport), entre outros [242, 246, 255, 256].

Por fim, a biblioteca contendo métodos para solução da PBE possui implementado o QMoM, o DQMoM e o DQMoM-FC. Apesar de somente se ter disponíveis métodos baseados em momentos, o uso de outras metodologias, como o MoC, também poderia ser incorporada facilmente à biblioteca de métodos. A biblioteca precisa basicamente de variáveis do escoamento, como velocidades e variáveis de turbulência e retorna o diâmetro e a fração de cada uma das fases dispersas. A implementação feita para o DQMoM-FC é genérica em duas questões: (i) é possível usar um conjunto arbitrário de momentos de ordem inteira ou fracionária para cada uma das variáveis internas da PBE; (ii) a implementação é genérica para  $h$  variáveis internas. Por exemplo, a lista abaixo define os momentos para um caso trivariado:

```
//-- Tabela de indices de momentos
momentIndexTable
(
  ( 0           0   0   )
  ( 0.333333333 0   0   )
  ( 0.333333333 1   0   )
  ( 0.333333333 0   0.5 )
  ( 0.333333333 0   1   )
  ( 1           0   0   )
  ( 1           1   1   )
  ...
);


```

O valor das colunas representam a ordem do momento para cada uma das variáveis internas. Dessa forma, a soma dos valores dados em uma linha representam a ordem total do momento multivariado e, dessa forma, cada linha define ou especifica um momento multivariado. O método SVD (ver Apêndice D) é usado para resolver o sistema linear de equações do DQMoM-FC (Equação 6.35) para os momentos especificados na lista de momentos. O SVD elimina automaticamente as equações que deixam o sistema mal condicionado. No caso em questão, eliminar uma equação significa desprezar o momento que a compõem. Como alguns momentos são mais importantes, como por exemplo, os momentos que garantem conservação de número e a massa das partículas, usou-se um fator de ponderação para cada um dos momentos, onde momentos mais importantes são ponderados com valores altos a fim



**Figura 6.1:** Estrutura do *solver* e das bibliotecas.

de que os mesmos não sejam desprezados pela SVD.

A biblioteca de métodos para solução da PBE usa outras bibliotecas onde estão implementados os modelos para a agregação, a quebra, o crescimento e a nucleação de partículas. Na Figura 6.1 é apresentada uma representação simplificada da estrutura comentada.

# Capítulo 7

## Resultados e Discussão

Primeiramente, na Seção 7.1, são apresentados e discutidos os resultados referentes à inversão de momentos multivariados. Na sequência, avalia-se o DuQMoGeM (Seção 7.2) e a possibilidade de aplicação do mesmo em simulações de balanço populacional multivariado e heterogêneo. Em seguida, na Seção 7.3, apresentada-se a simulação de um problema de balanço populacional monovariado heterogêneo e sua comparação com dados experimentais. Por fim, os resultados de dois casos fictícios, um envolvendo balanço populacional multivariado heterogêneo e outro usando uma função distribuição complexa, são apresentados nas Seções 7.4 e 7.5, respectivamente.

### 7.1 Inversão de Momentos Multivariados

Os resultados apresentados nesta seção foram publicados no trabalho de FAVERO *et al.* [211].

#### 7.1.1 Procedimento Numérico

Os métodos para inversão de momentos multivariados apresentados nos Capítulos 5 e 6 são aplicáveis em PDFs  $h$ -variadas. Contudo, por razões de simplicidade, somente PDFs bivariadas serão analisadas neste trabalho.

O procedimento usado pode ser resumido nos seguintes passos:

- (i) Especificou-se uma PDF normalizada a duas variáveis, definidas por  $x_1$  e  $x_2$ ;
- (ii) Calcularam-se os momentos da PDF usando o software MAPLE v.12 [257];
- (iii) Obteve-se a quadratura bidimensional por algum dos métodos apresentados;
- (iv) Os pontos de quadratura obtidos foram usados para reconstruir os momentos até quinta ordem e então calculou-se os erros associados ao procedimento de

inversão.

Os métodos para inversão de momentos multivariados foram implementados em linguagem C. Para a inversão de momentos monovariados usou-se o pacote ORTHOPOL [258]. A rotina de SVD, usada para encontrar a matriz de transformação de Hotelling, e a rotina para calcular a decomposição de Cholesky foram obtidas de PRESS *et al.* [259]. A solução dos sistemas lineares de equações foi feita usando o método de eliminação Gaussiana obtido de PINTO e LAGE [169]. A aplicação do método JADE foi feita usando uma versão adaptada do código desenvolvido por CARDOSO [260] e o algoritmo CuBICA descrito em BLASCHKE e WISKOTT [231] foi implementado em C. Uma tolerância de  $10^{-14}$  foi estabelecida no algoritmo de Jacobi usado pelos métodos JADE e CuBICA para diagonalização dos tensores de cumulantes.

A determinação da quadratura bidimensional por otimização não-linear foi feita usando o pacote NLOpt [261]. Para a otimização não-linear em questão deve-se usar preferencialmente um algoritmo de busca global. O algoritmo com código NLOPT\_GN\_CRS2\_LM foi o que apresentou os melhores resultados nos testes feitos. Este, por sua vez, é um algoritmo de busca global que dispensa o fornecimento das derivadas da função objetivo (GN - *Global Not derivative*). O princípio deste método de otimização é fazer uma busca randômica controlada e com mutação local (CRS - *Controlled Random Search*, LM - *Local Mutation*) [262, 263]. O método permite restrições de limites superiores e inferiores para as variáveis e aceita que seja fornecida uma estimativa inicial para ser usada como um dos pontos da população.

O NLOpt também permite usar um algoritmo de otimização local posteriormente a um de busca global, para o caso de refinamento de solução. Para a etapa de otimização local usou-se o algoritmo BOBYQA [264], que é um algoritmo que suporta restrições e dispensa o fornecimento das derivadas da função objetivo.

O critério de parada da otimização é satisfeito quando as tolerâncias absolutas e relativas, tanto para os valores das variáveis quanto para a função objetivo, sejam menores que  $10^{-15}$  ou seja atingido o número máximo de avaliações,  $5 \times 10^8$ . A população inicial usada no algoritmo NLOPT\_GN\_CRS2\_LM foi de  $150 \times (3N + 1)$  e limitou-se a região de busca para valores de abscissas entre  $0 \leq x_i \leq 10$  e para pesos entre  $0 \leq \omega_i \leq 1$ ,  $i = 1, \dots, N$ .

Todos os cálculos foram feitos em precisão dupla e foi usado o compilador GNU GCC 4.6.3 numa máquina Intel i7-2600K com sistema operacional Linux. O tempo computacional usado pelo método de otimização não-linear foi obtido numa única rodada. Já os tempos dos métodos DCPM, PCA, TPM, ICA e CQMoM foram calculados pela média de  $10^5$  rodadas sequenciais. Os tempos de CPU apresentados não consideram o tempo usado no cálculo dos momentos da distribuição.

**Tabela 7.1:** Distribuições usadas para avaliar os métodos de inversão de momentos multivariados.

$g(x_1, x_2)$	Eq.
$\exp \left[ - (2.5\sqrt{2}(x_1 - x_2))^2 - (0.5\sqrt{2}(x_1 + x_2) - 5)^2 \right]$	(7.1)
$\exp [-\exp(-x_1 + 5) - \exp(-x_2 + 5) + x_1 + y_2 - 10]$	(7.2)
$2 \exp [-(2x_1 - 4)^2 - (x_2 - 6)^2] + 2 \exp [-(x_1 - 3)^2 - (x_2 - 4)^2]$ + $\exp [-(x_1 - 4)^2 - (x_2 - 7)^4]$	(7.3)
$2 \exp [- x_1 + x_2 - 10  -  2x_2 - 9 ] + \exp [-(6x_1 - 4x_2 - 60)^2 - (x_2 - 8)^2]$	(7.4)
$\exp [-(x_1 - 3)^2 - (x_2 - 3)^2] + \exp [-(x_1 - 3)^2 - (x_2 - 5)^2]$ + $\frac{1}{2} \exp [-(x_1 - 7)^2 - (x_2 - 5)^2] + \frac{1}{2} \exp [-(x_1 - 7)^2 - (x_2 - 7)^2]$	(7.5)
$\exp [-(x_1 - 6)^2 - (3x_2 - 7)^4] + \exp [-(3x_1 - 9)^2 - (x_2 - 6)^4]$	(7.6)

### 7.1.2 Definições

Na Tabela 7.1 são definidas as distribuições,  $g(x_1, x_2)$ , usadas. As distribuições foram normalizadas da seguinte forma:

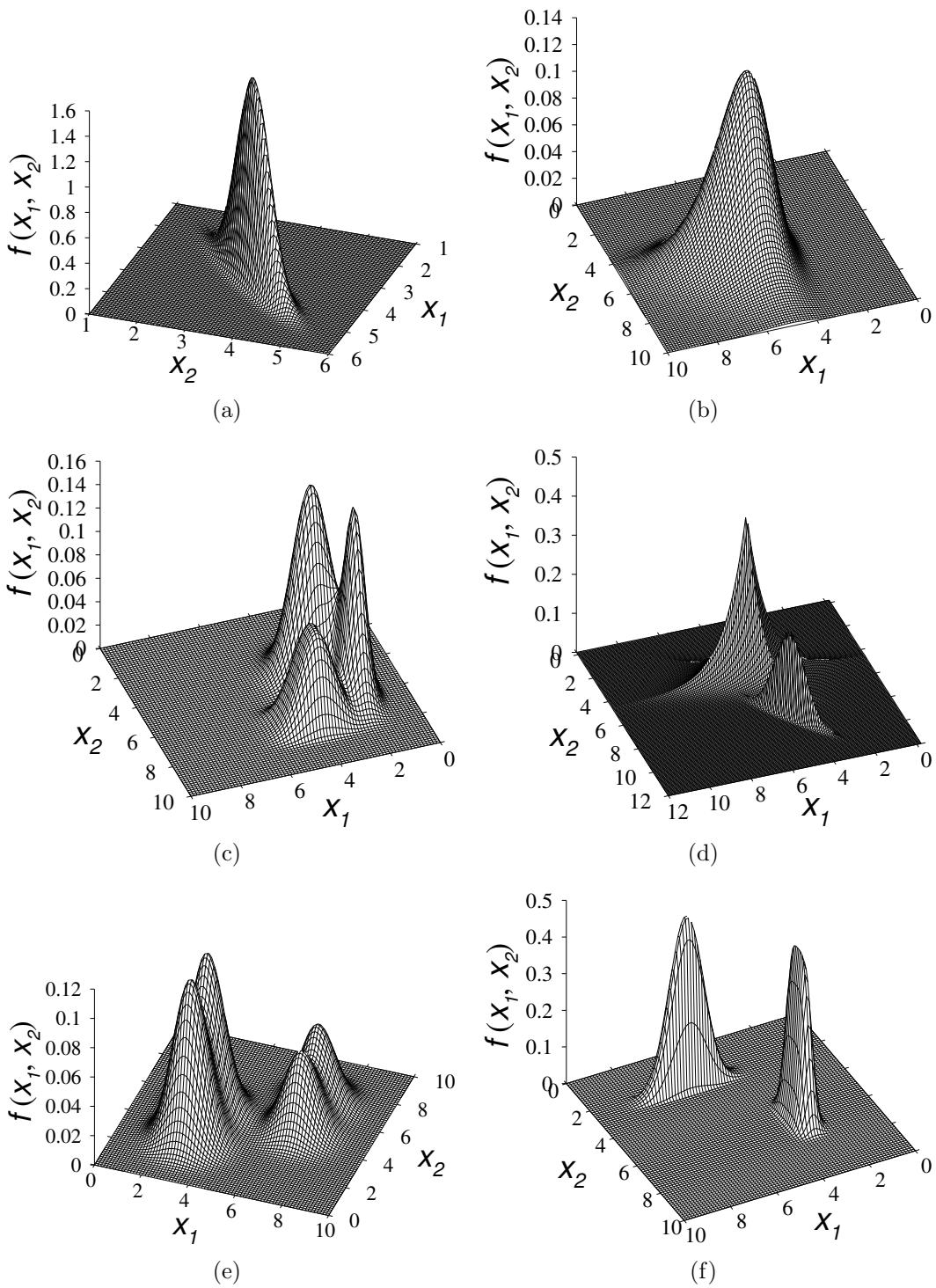
$$f(x_1, x_2) = \frac{g(x_1, x_2)}{\int_0^\infty \int_0^\infty g(x_1, x_2) dx_1 dx_2} \quad (7.7)$$

Na Figura 7.1 são ilustradas as PDFs definidas na Tabela 7.1.

Os resultados foram organizados em três seções. Primeiramente, os resultados obtidos com os métodos DCPM, PCA, ICA e CQMoM são comparados para o caso de  $2 \times 2$ ,  $3 \times 2$ ,  $2 \times 3$  e  $3 \times 3$  pontos de quadratura. O TPM foi aplicado somente para obtenção de quadraturas de  $3 \times 3$  pontos, tendo em vista que ele é equivalente a PCA para quadraturas de  $2 \times 2$  pontos. Tanto o TPM como o CQMoM foram aplicados para as duas permutações possíveis de variáveis. Em seguida, são apresentados os resultados para a PCA e a ICA combinadas com o CQMoM e, por fim, são apresentados os resultados obtidos usando otimização não-linear.

O erro quadrático médio relativo e cumulativo dos momentos reconstruídos foi calculado usando a Equação 7.8, onde  $\mu$  é o valor analítico do momento,  $\mu^{rec}$  é o valor do momento recuperado,  $O$  corresponde à ordem do momento bivariado e  $N_{mom}$  é a quantidade total de momentos até a ordem analisada.

$$\epsilon_O = \sqrt{\frac{1}{N_{mom}} \sum_{k=0}^O \sum_{l=0}^{O-k} \left( \frac{\mu_{kl} - \mu_{kl}^{rec}}{\mu_{kl}} \right)^2} \quad (7.8)$$



**Figura 7.1:** Funções densidade de probabilidade: (a) distribuição Gaussiana rotacionada (Eq. (7.1)), (b) distribuição de Gumbel (Eq. (7.2)), (c) distribuição multimodal com modos platicúrticos e mesocúrticos (Eq. (7.3)), (d) distribuição bimodal com modos leptocúrtico e mesocúrtico (Eq. (7.4)), (e) distribuição multimodal Gaussiana (Eq. (7.5)) e (f) distribuição bimodal com modos platicúrtico e mesocúrtico totalmente separados (Eq. (7.6)).

### 7.1.3 Comparação entre DCPM, PCA, ICA, TPM e CQMoM

O DCPM, PCA, ICA, TPM e CQMoM foram aplicados para todas as distribuições apresentadas na Tabela 7.1. Ambos JADE e CuBICA foram usados para a ICA, porém os resultados obtidos com o último foram melhores e, dessa forma, somente os resultados usando CuBICA são apresentados.

#### Distribuição Gaussiana rotacionada

A distribuição Gaussiana rotacionada em  $45^\circ$  é mostrada na Figura 7.1(a) e corresponde à Equação 7.1 da Tabela 7.1. Essa distribuição é interessante de ser analisada porque suas variáveis são correlacionadas.

O logaritmo de base 10 do erro cumulativo para cada um dos métodos está mostrado na Tabela 7.2. Como pode ser visto, o método DCPM não consegue bons resultados por não considerar a correlação existente entre as variáveis. Aumentando-se o número de pontos de quadratura não melhora em nada o resultado. Nesse caso, percebe-se claramente a limitação do DCPM e também verifica-se que é necessário considerar a informação dos momentos mistos.

Por outro lado, a PCA e a ICA obtiveram resultados muito bons. Isso porque ambos os métodos aplicaram uma rotação no sistema de coordenadas, descorrelacionando as variáveis antes de aplicar a inversão unidimensional. Esses métodos obtiveram quadraturas de  $2 \times 2$ ,  $3 \times 2$  e  $2 \times 3$  que recuperaram com acurácia momentos até  $3^{\text{a}}$  ordem. Para  $3 \times 2$  e  $2 \times 3$  pontos de quadratura, os momentos até  $4^{\text{a}}$  e  $5^{\text{a}}$  ordem foram razoavelmente bem reconstruídos. Usando uma quadratura de  $3 \times 3$  pontos, todos os momentos até  $5^{\text{a}}$  ordem foram reconstruídos com acurácia. As quadraturas obtidas pela PCA e ICA são praticamente iguais. Os resultados do método TPM foram similares aos obtidos pela PCA e ICA.

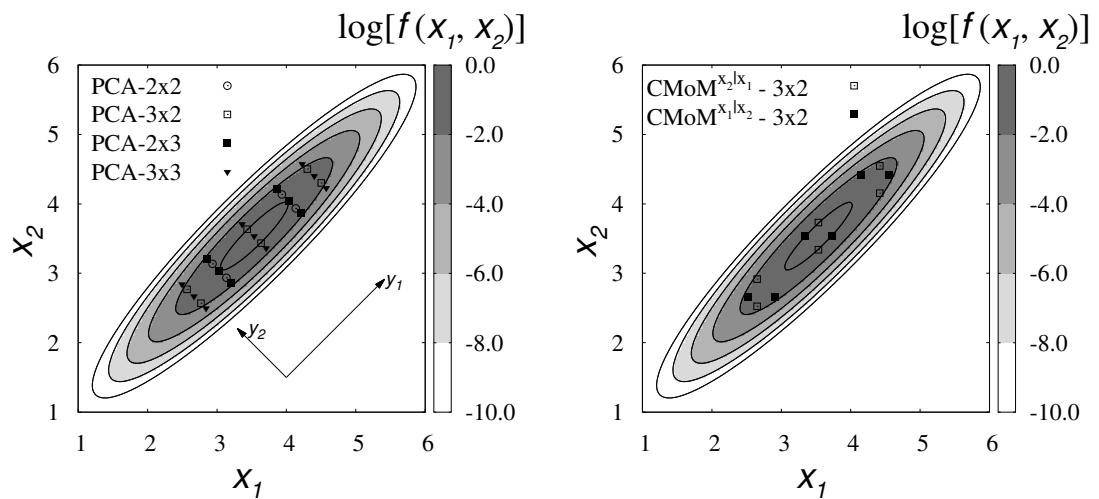
O CQMoM apresentou problemas com conjunto não-realizável de momentos para os casos onde um mesmo número de pontos de quadratura foi usado para ambas as variáveis. Nos casos onde  $N_1 \neq N_2$ , os resultados do CQMoM, para ambas as permutações de variáveis, foram similares aos obtidos com a PCA ou a ICA.

A Figura 7.2 mostra a localização das abscissas obtidas pela PCA e o CQMoM.

O tempo de CPU para os métodos analisados aumentou na seguinte ordem: CQMoM, PCA, TPM e ICA. Esse comportamento foi observado em todas as distribuições analisadas neste trabalho. O elevado custo computacional da ICA, quando comparada a PCA, pode ser atribuído à necessidade de etapas adicionais de pré-processamento e à execução dos cálculos relacionados ao algoritmo CuBICA.

**Tabela 7.2:** Erro cumulativo  $\log(\epsilon_O)$  da reconstrução dos momentos da distribuição Gaussiana rotacionada (Eq. (7.1)) para momentos até uma dada ordem,  $O$ , usando PCA, ICA, TPM e CQMoM.

Método	$\log \epsilon_1$	$\log \epsilon_2$	$\log \epsilon_3$	$\log \epsilon_4$	$\log \epsilon_5$	CPU ( $\mu\text{s}$ )
<b>DPCM</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,99	-2,11	-1,76	-1,53	-1,35	0,8
<b>PCA</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,55	-15,51	-14,09	-3,38	-2,74	2,3
<b>ICA</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,71	-15,73	-14,10	-3,39	-2,74	11,0
<b>CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—
<b>CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—
<b>DPCM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub>,x<sub>2</sub></sup>	-15,60	-2,11	-1,76	-1,53	-1,35	1,4
<b>DPCM</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub>,x<sub>2</sub></sup>	-15,49	-2,11	-1,76	-1,53	-1,35	1,3
<b>PCA</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,55	-15,56	-14,09	-6,18	-5,69	6,9
<b>PCA</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-16,14	-16,29	-14,10	-3,38	-2,74	7,4
<b>ICA</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,78	-15,58	-14,10	-3,39	-2,74	11,2
<b>ICA</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,35	-15,41	-14,10	-6,18	-5,70	11,1
<b>CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	-16,01	-15,73	-15,76	-5,36	-4,75	2,8
<b>CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-16,01	-15,73	-15,76	-5,36	-4,75	2,9
<b>DPCM</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,31	-2,11	-1,76	-1,53	-1,35	1,8
<b>PCA</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,68	-15,80	-14,10	-13,84	-13,66	7,9
<b>ICA</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,22	-15,25	-14,10	-13,84	-13,67	12,1
<b>TPM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	-16,01	-16,05	-16,01	-12,66	-12,16	8,3
<b>TPM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-16,01	-16,05	-16,01	-12,66	-12,16	8,3
<b>CQMoM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—
<b>CQMoM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—



**Figura 7.2:** Localização das abscissas para a distribuição Gaussiana rotacionada (Eq. 7.1) obtidas por (a) PCA e (b) CQMoM.

**Tabela 7.3:** Erro cumulativo  $\log(\epsilon_O)$  da reconstrução dos momentos da distribuição de Gumbel (Eq. (7.2)) para momentos até uma dada ordem, O, usando PCA, ICA, TPM e CQMoM.

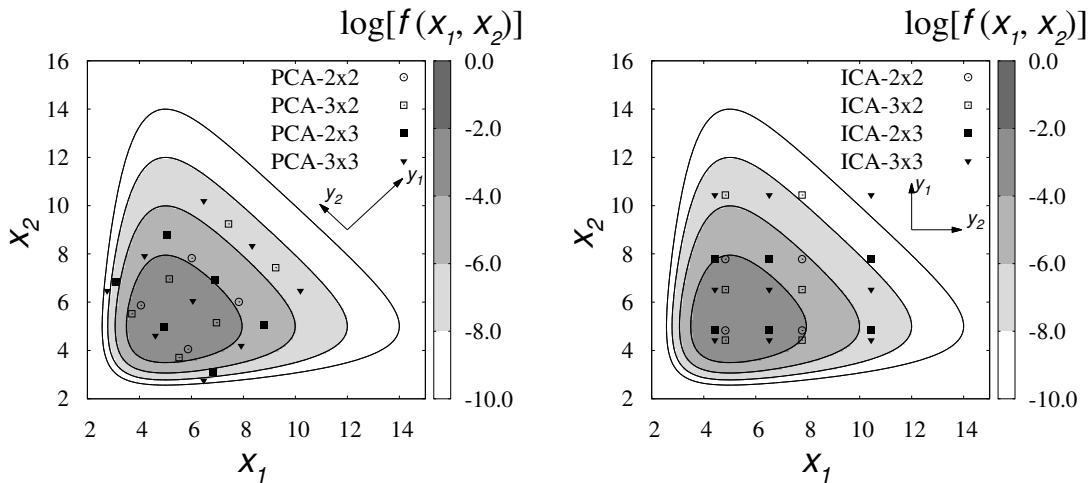
Método	$\log \epsilon_1$	$\log \epsilon_2$	$\log \epsilon_3$	$\log \epsilon_4$	$\log \epsilon_5$	CPU ( $\mu\text{s}$ )
<b>DPCM</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,44	-14,70	-14,57	-2,64	-2,01	0,8
<b>PCA</b> <sub>(2×2)</sub>	-∞*	-16,33	-2,37	-1,85	-1,50	2,3
<b>ICA</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,63	-15,64	-14,71	-2,64	-2,01	11,1
<b>CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	-16,04	-16,10	-14,78	-2,64	-2,01	1,9
<b>CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-16,04	-16,10	-14,78	-2,64	-2,01	1,7
<b>DPCM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub>,x<sub>2</sub></sup>	-15,55	-14,66	-14,51	-2,79	-2,16	1,3
<b>DPCM</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub>,x<sub>2</sub></sup>	-15,54	-14,67	-14,52	-2,79	-2,16	1,2
<b>PCA</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,95	-15,92	-2,37	-1,86	-1,53	6,8
<b>PCA</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,19	-15,20	-2,37	-1,87	-1,52	7,1
<b>ICA</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,89	-15,65	-14,70	-2,79	-2,16	11,1
<b>ICA</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,80	-15,76	-14,70	-2,79	-2,16	11,4
<b>CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	-15,42	-15,49	-15,50	-2,79	-2,16	2,9
<b>CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-15,42	-15,49	-15,50	-2,79	-2,16	2,7
<b>DPCM</b> <sub>(3×3)</sub>	-14,99	-14,60	-14,46	-14,45	-14,43	1,6
<b>PCA</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,19	-15,18	-2,37	-1,88	-1,55	7,4
<b>ICA</b> <sub>(3×3)</sub>	-16,04	-16,10	-14,69	-14,10	-13,89	12,1
<b>TPM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	-15,89	-15,66	-15,63	-14,79	-13,86	7,9
<b>TPM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-15,89	-15,66	-15,63	-14,79	-13,86	7,9
<b>CQMoM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	-15,69	-15,38	-15,37	-14,90	-14,03	3,9
<b>CQMoM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-15,69	-15,38	-15,37	-14,90	-14,03	3,8

\* Atingiu a precisão de cálculo da máquina.

## Distribuição de Gumbel

A Figura 7.1(b) mostra a distribuição de Gumbel, como é conhecida na literatura, sendo representada pela Equação 7.2 da Tabela 7.1. Diferentemente da distribuição Gaussiana, as estatísticas de alta ordem são necessárias para sua representação. Os erros cumulativos de inversão dos momentos são mostrados na Tabela 7.3 para cada um dos métodos analisados. Como pode ser visto nesta tabela, o DCPM conseguiu bons resultados para este caso, mostrando que não é necessário transformação de coordenadas. Os resultados da PCA não são acurados para os momentos acima de 2<sup>a</sup>, que pode ser explicado pelo fato que o sistema de coordenadas principais encontrado pela PCA estar rotacionado de 45° em relação ao sistema de coordenadas originais. Apesar de no sistema de coordenadas principais as variáveis estarem descorrelacionadas, existem efeitos de dependência nos momentos de alta ordem, explicando os resultados ruins obtidos pela PCA para os momentos de ordem elevada.

A ICA não aplica rotação alguma sobre o sistema de coordenadas, conseguindo



**Figura 7.3:** Localização das abscissas para a distribuição de Gumbel (Eq. 7.2) obtidas por (a) PCA e (b) ICA.

acurácia de 3<sup>a</sup> e 5<sup>a</sup> ordem para  $2 \times 2$  e  $3 \times 3$  pontos de quadratura, respectivamente. Em outras palavras, essas quadraturas inverteram com acurácia todos os momentos que foram utilizados na sua determinação. Este exemplo mostra que a ICA pode, como neste caso, conseguir resultados melhores que a PCA.

Os resultados do TPM e do CQMoM são similares aos obtidos pela ICA para todas as quadraturas avaliadas.

Na Figura 7.3 é ilustrada a localização das abscissas obtidas pela PCA e ICA. Percebe-se que a ICA distribui pontos de quadratura em direções ortogonais diferentes das obtidas pela PCA.

### Distribuição multimodal - modos mesocúrtico/platicúrtico

Este exemplo considera a distribuição dada pela Equação 7.3 da Tabela 7.1 sendo composta por modos platicúrticos e mesocúrticos como pode ser visualizado na Figura 7.1(c).

Os erros cumulativos da inversão são apresentados na Tabela 7.4. Para esta distribuição o DCPM consegue reproduzir corretamente somente os momentos até primeira ordem. A PCA, a ICA e o CQMoM conseguiram quadraturas de  $2 \times 2$  pontos que reproduzem bem todos momentos até 2<sup>a</sup> ordem. Um aumento na quantidade de pontos de quadratura não traz melhorias significativas aos resultados obtidos pela PCA e ICA. Neste caso, as direções obtidas pela ICA são não-ortogonais, mostrando a flexibilidade adicional da ICA em relação à PCA.

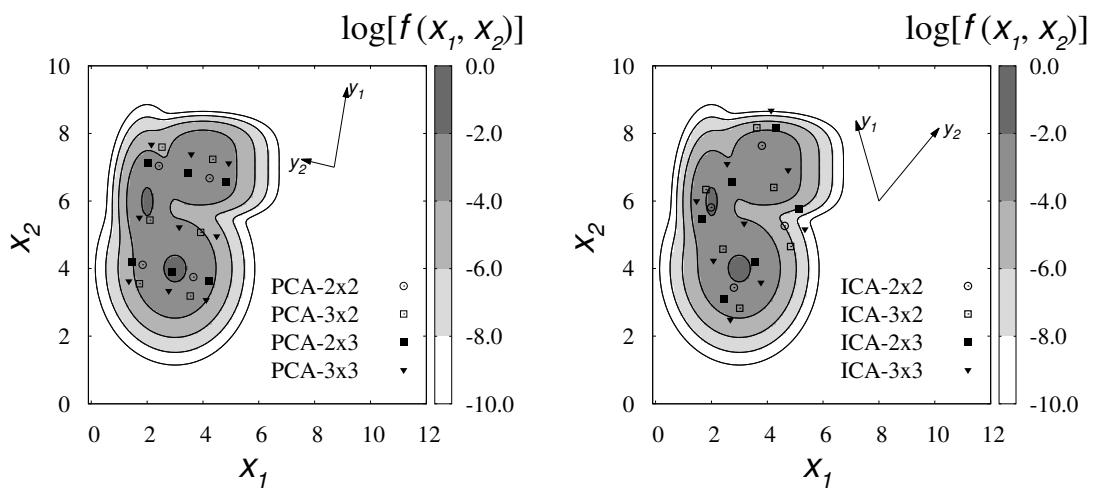
Por outro lado, a quadratura de  $3 \times 3$  pontos obtida pelo TPM conseguiu 3<sup>a</sup> ordem de acurácia, sendo mais acurada que a PCA e a ICA. Cabe lembrar que a localização das abscissas obtidas pelo TPM são iguais as da PCA, contudo, recalculando os valores dos pesos o método conseguiu aumentar a acurácia da quadratura.

Os resultados obtidos com o CQMoM são ainda melhores, conseguindo 3<sup>a</sup> ordem

**Tabela 7.4:** Erro cumulativo  $\log(\epsilon_O)$  da reconstrução dos momentos da distribuição multimodal com modos mesocúrticos e platicúrticos (Eq. (7.3)) para momentos até uma dada ordem, O, usando PCA, ICA, TPM e CQMoM.

Método	$\log \epsilon_1$	$\log \epsilon_2$	$\log \epsilon_3$	$\log \epsilon_4$	$\log \epsilon_5$	CPU ( $\mu\text{s}$ )
<b>DPCM</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,38	-2,18	-1,76	-1,47	-1,26	1,0
<b>PCA</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,56	-15,55	-2,37	-1,85	-1,52	2,4
<b>ICA</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,33	-15,35	-2,77	-2,35	-2,04	11,3
<b>CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	-15,60	-15,63	-2,56	-2,09	-1,74	1,9
<b>CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-16,01	-15,60	-2,72	-2,25	-1,88	1,9
<b>DPCM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub>,x<sub>2</sub></sup>	-15,15	-2,18	-1,76	-1,47	-1,27	1,3
<b>DPCM</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub>,x<sub>2</sub></sup>	-16,07	-2,18	-1,76	-1,47	-1,27	1,3
<b>PCA</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	- $\infty^*$	-16,31	-2,37	-1,85	-1,53	6,9
<b>PCA</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-16,19	-16,34	-2,37	-1,87	-1,56	6,9
<b>ICA</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,74	-15,71	-2,77	-2,34	-2,01	11,5
<b>ICA</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,27	-15,26	-2,77	-2,30	-1,99	11,5
<b>CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	-15,51	-15,58	-15,61	-3,10	-2,55	2,8
<b>CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-15,56	-15,53	-15,55	-2,77	-2,21	2,7
<b>DPCM</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,38	-2,18	-1,76	-1,48	-1,27	1,6
<b>PCA</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,67	-15,71	-2,37	-1,88	-1,57	7,2
<b>ICA</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,54	-15,51	-2,77	-2,29	-1,97	12,2
<b>TPM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	-15,97	-15,82	-15,68	-3,66	-3,14	8,0
<b>TPM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-15,97	-15,98	-15,90	-3,70	-3,13	7,9
<b>CQMoM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	-15,17	-15,28	-15,37	-3,77	-3,30	3,8
<b>CQMoM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-15,84	-15,95	-15,79	-3,78	-3,25	4,1

\* Atingiu a precisão de cálculo da máquina.



**Figura 7.4:** Localização das abscissas para a distribuição multimodal com modos mesocúrticos e platicúrticos (Eq. 7.3) obtidas por (a) PCA e (b) ICA.

de acurácia com quadraturas de 6 pontos. A quadratura de  $3 \times 3$  pontos não mostrou um aumento considerável na reconstrução dos momentos de alta ordem. Esse caso mostra que o CQMoM consegue resultados bons para os casos onde não existe problemas relacionados a momentos não-realizáveis.

Na Figura 7.4 é ilustrada a localização das abscissas obtida pela PCA e ICA. Como pode ser visto, a ICA encontra direções não-ortogonais para este caso.

### **Distribuição bimodal - modos mesocúrtico/leptocúrtico**

Este exemplo considera uma distribuição do tipo bimodal, porém, cada um dos modos é representado por uma função com propriedades estatísticas diferentes, conforme a Equação 7.4 da Tabela 7.1 e ilustrado pela Figura 7.1(d). Na Tabela 7.5 são mostrados os erros cumulativos da reconstrução dos momentos. Fica claro que o DCPM produz resultados ruins neste caso. A PCA e a ICA geram quadraturas de  $2 \times 2$  pontos que são de 2<sup>a</sup> ordem de acurácia. Neste caso também se percebe que as direções encontradas pela ICA, Figura 7.5(b), diferem das encontradas pela PCA Figura 7.5(a). O TPM não conseguiu obter quadraturas de  $3 \times 3$  pontos, visto que na solução do sistema linear para determinação dos pesos obteve-se solução negativa para ambas as permutações possíveis das variáveis.

O CQMoM apresentou problemas com conjuntos de momentos não-realizáveis para algumas permutações de variáveis. Porém, nos casos onde não se teve problemas desse tipo, as quadraturas de 6 e 9 pontos conseguiram 3<sup>a</sup> ordem de acurácia. Os pontos de quadratura obtidos pelo CQMoM são mostrados na Figura 7.5(c).

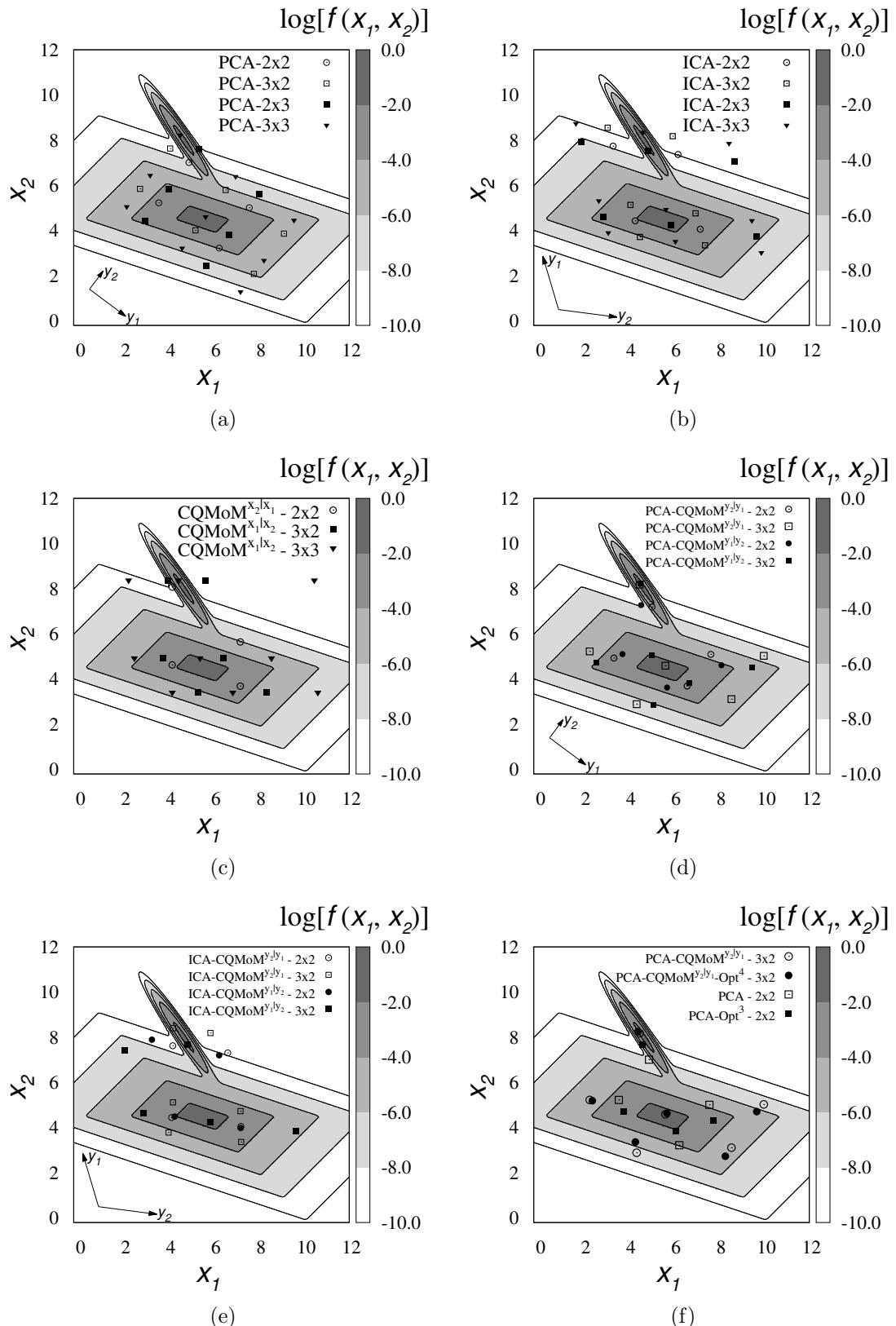
### **Distribuição multimodal Gaussiana**

A Equação 7.5 da Tabela 7.1 representa a distribuição multimodal Gaussiana mostrada na Figura 7.1(e). Os erros cumulativos da reconstrução dos momentos são mostrados na Tabela 7.6. O DCPM encontrou quadraturas de somente primeira ordem de acurácia. A PCA e a ICA conseguiram quadraturas de 2<sup>a</sup> ordem de acurácia, contudo, os resultados obtidos pela ICA para os momentos de 3<sup>a</sup> ordem são aproximadamente uma ordem de magnitude mais acurados que os obtidos pela PCA. O TPM conseguiu quadraturas de 3<sup>a</sup> ordem para ambas as permutações de variáveis.

Com o CQMoM obteve-se quadraturas de 6 e 9 pontos com 2<sup>a</sup> e 3<sup>a</sup> ordem de acurácia, respectivamente. Por outro lado, a quadratura de 9 pontos não foi possível devido ao problema de conjunto de momentos condicionais não-realizáveis. As Figuras 7.6(a), 7.6(b) e 7.6(c) mostram os valores de abscissas obtidas com os métodos PCA, ICA e CQMoM, respectivamente.

**Tabela 7.5:** Erro cumulativo  $\log(\epsilon_O)$  da reconstrução dos momentos da distribuição bimodal com modos mesocúrtico e leptocúrtico (Eq. (7.4)) para momentos até uma dada ordem,  $O$ , usando PCA, ICA, TPM e CQMoM.

Método	$\log \epsilon_1$	$\log \epsilon_2$	$\log \epsilon_3$	$\log \epsilon_4$	$\log \epsilon_5$	CPU ( $\mu\text{s}$ )
<b>DPCM</b> <sub>(2×2)</sub>	-16,02	-1,91	-1,53	-1,26	-1,05	0,9
<b>PCA</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,72	-15,70	-2,13	-1,64	-1,33	2,3
<b>ICA</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,91	-15,75	-2,63	-2,10	-1,70	11,2
<b>CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	-15,54	-15,59	-3,26	-2,37	-1,86	1,7
<b>CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—
<b>DPCM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub>,x<sub>2</sub></sup>	-15,48	-1,91	-1,53	-1,26	-1,04	1,3
<b>DPCM</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub>,x<sub>2</sub></sup>	-15,85	-1,91	-1,53	-1,26	-1,04	1,2
<b>PCA</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,80	-15,86	-2,13	-1,66	-1,36	6,9
<b>PCA</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,58	-15,62	-2,13	-1,65	-1,34	6,9
<b>ICA</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,98	-15,85	-2,63	-2,10	-1,71	11,5
<b>ICA</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,32	-15,21	-2,63	-2,29	-1,99	11,5
<b>CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—
<b>CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-15,72	-15,81	-15,55	-2,58	-2,01	2,7
<b>DPCM</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,42	-1,91	-1,53	-1,26	-1,04	1,6
<b>PCA</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,51	-15,46	-2,13	-1,66	-1,36	7,3
<b>ICA</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,48	-15,49	-2,63	-2,28	-2,04	12,1
<b>TPM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	pesos negativos					—
<b>TPM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	pesos negativos					—
<b>CQMoM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—
<b>CQMoM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-16,02	-15,86	-15,77	-4,02	-3,43	4,0

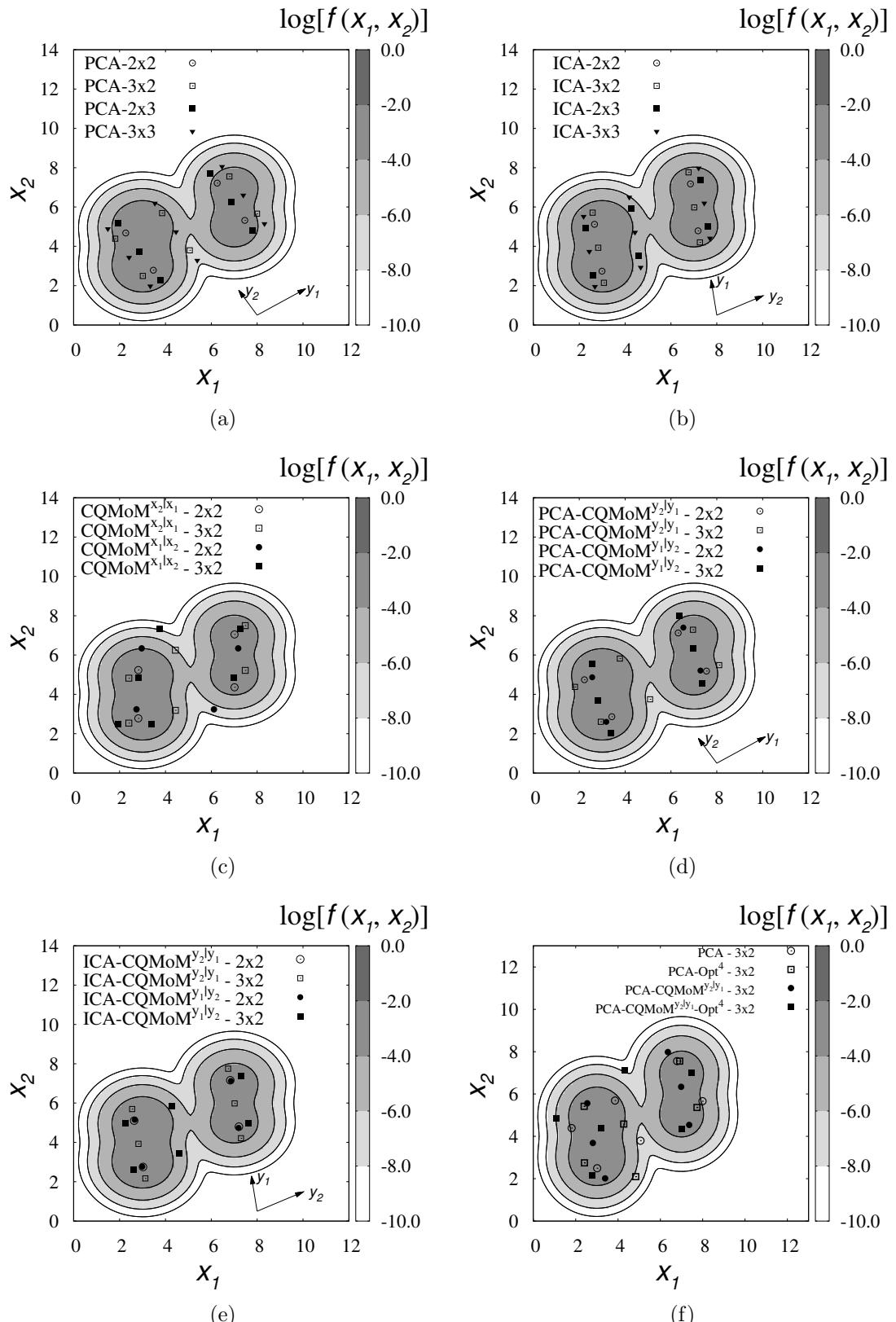


**Figura 7.5:** Localização das abscissas para a distribuição bimodal com modos mesocúrtico e leptocúrtico (Eq. 7.4) obtidas por (a) PCA, (b) ICA, (c) CQMoM, (d) PCA-CQMoM, (e) ICA-CQMoM, (f) PCA-Otimização usando momentos até 4<sup>a</sup> ordem e 6 pontos de quadratura.

**Tabela 7.6:** Erro cumulativo  $\log(\epsilon_O)$  da reconstrução dos momentos da distribuição multimodal Gaussiana (Eq. (7.5)) para momentos até uma dada ordem, O, usando PCA, ICA, TPM e CQMoM.

Método	$\log \epsilon_1$	$\log \epsilon_2$	$\log \epsilon_3$	$\log \epsilon_4$	$\log \epsilon_5$	CPU ( $\mu\text{s}$ )
<b>DPCM</b> <sub>(2×2)</sub>	$-\infty^*$	-1,48	-1,16	-0,96	-0,82	0,9
<b>PCA</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,96	-16,00	-2,63	-2,19	-1,86	2,4
<b>ICA</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,69	-15,59	-3,78	-2,55	-2,03	11,2
<b>CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	-15,76	-15,65	-3,13	-2,45	-1,99	1,8
<b>CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-15,79	-15,72	-2,72	-2,13	-1,72	1,8
<b>DPCM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub>,x<sub>2</sub></sup>	-15,54	-1,48	-1,16	-0,96	-0,83	1,2
<b>DPCM</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub>,x<sub>2</sub></sup>	-15,25	-1,48	-1,16	-0,96	-0,83	1,2
<b>PCA</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,38	-15,38	-2,63	-2,31	-2,15	7,0
<b>PCA</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,96	-16,00	-2,63	-2,18	-1,86	7,0
<b>ICA</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,42	-15,35	-3,78	-2,57	-2,05	11,2
<b>ICA</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,24	-15,29	-3,78	-3,07	-2,62	11,3
<b>CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	-15,57	-15,57	-15,54	-3,06	-2,56	2,6
<b>CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-15,28	-15,41	-15,48	-2,79	-2,28	2,6
<b>DPCM</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,16	-1,48	-1,16	-0,96	-0,83	1,5
<b>PCA</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,32	-15,37	-2,63	-2,30	-2,13	7,3
<b>ICA</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,28	-15,22	-3,78	-3,53	-3,39	12,3
<b>TPM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	-15,77	-15,79	-15,71	-2,63	-2,06	8,0
<b>TPM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	-15,93	-15,78	-15,73	-3,10	-2,56	7,9
<b>CQMoM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—
<b>CQMoM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—

\* Atingiu a precisão de cálculo da máquina.



**Figura 7.6:** Localização das abscissas para a distribuição multimodal Gaussiana (Eq. 7.5) obtidas por (a) PCA, (b) ICA, (c) CQMoM, (d) PCA-CQMoM, (e) ICA-CQMoM, (f) PCA-Otimização e PCA-CQMoM-Otimização usando momentos até 4<sup>a</sup> ordem e 6 pontos de quadratura.

**Tabela 7.7:** Erro cumulativo  $\log(\epsilon_O)$  da reconstrução dos momentos da distribuição bimodal com modos totalmente separados (Eq. (7.6)) para momentos até uma dada ordem,  $O$ , usando PCA, ICA, TPM e CQMoM.

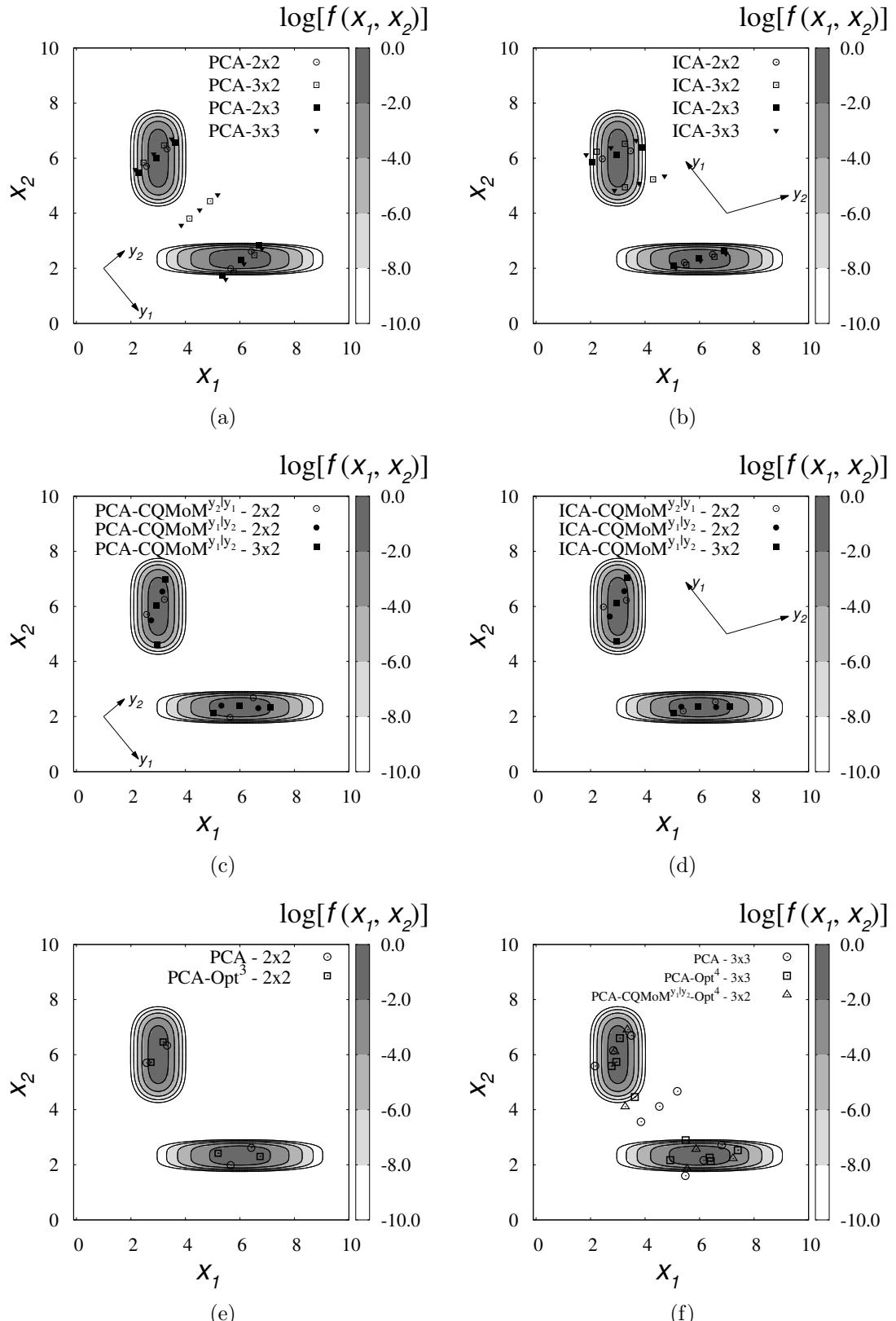
Método	$\log \epsilon_1$	$\log \epsilon_2$	$\log \epsilon_3$	$\log \epsilon_4$	$\log \epsilon_5$	CPU ( $\mu\text{s}$ )
<b>DPCM</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,91	-1,15	-0,79	-0,52	-0,30	0,9
<b>PCA</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,75	-15,90	-2,40	-1,99	-1,72	2,4
<b>ICA</b> <sub>(2×2)</sub>	-15,77	-15,81	-2,33	-1,97	-1,73	11,1
<b>CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—
<b>CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—
<b>DPCM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub>,x<sub>2</sub></sup>	-15,44	-1,15	-0,79	-0,52	-0,30	1,2
<b>DPCM</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub>,x<sub>2</sub></sup>	-15,35	-1,15	-0,79	-0,52	-0,30	1,1
<b>PCA</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,15	-15,16	-2,40	-1,99	-1,73	6,9
<b>PCA</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,27	-15,24	-2,40	-1,99	-1,72	6,9
<b>ICA</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-15,75	-15,83	-2,33	-1,97	-1,73	11,3
<b>ICA</b> <sub>(2×3)</sub> <sup>y<sub>1</sub>,y<sub>2</sub></sup>	-∞*	-16,16	-2,33	-1,97	-1,73	11,4
<b>CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—
<b>CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—
<b>DPCM</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,07	-1,15	-0,79	-0,52	-0,30	1,5
<b>PCA</b> <sub>(3×3)</sub>	-14,95	-14,96	-2,40	-1,99	-1,73	7,3
<b>ICA</b> <sub>(3×3)</sub>	-15,54	-15,52	-2,33	-1,97	-1,73	12,3
<b>TPM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	pesos negativos					—
<b>TPM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	pesos negativos					—
<b>CQMoM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>2</sub> x<sub>1</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—
<b>CQMoM</b> <sub>(3×3)</sub> <sup>x<sub>1</sub> x<sub>2</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—

\* Atingiu a precisão de cálculo da máquina.

### Distribuição bimodal com modos separados

A Figura 7.1(f) mostra a distribuição bimodal com modos mesocúrtico e platicúrtico totalmente separados, correspondendo à Equação 7.6 da Tabela 7.1. Os erros cumulativos da reconstrução dos momentos são apresentados na Tabela 7.7. Novamente, o método DCPM obteve quadraturas com acurácia de primeira ordem enquanto a PCA e a ICA conseguiram quadraturas com 2<sup>a</sup> ordem de acurácia. As Figuras 7.7(a) e 7.7(b) mostram os valores das abscissas obtidas pela PCA e ICA, respectivamente. O TPM não conseguiu uma quadratura de  $3 \times 3$  pontos com pesos não-negativos.

O CQMoM não conseguiu obter nenhuma das quadratura analisadas para esta distribuição devido a problemas relacionados com conjunto de momentos não-realizáveis. Este é um exemplo em que o CQMoM falha completamente.



**Figura 7.7:** Localização das abscissas para a distribuição bimodal com modos totalmente separados (Eq. 7.6) obtidas por (a) PCA, (b) ICA, (c) PCA-CQMoM, (d) ICA-CQMoM, (e) PCA-Otimização usando momentos até 3<sup>a</sup> ordem e 4 pontos de quadratura e (f) PCA-CQMoM-Otimização usando momentos até 4<sup>a</sup> ordem e 6 pontos de quadratura e PCA-Otimização usando momentos até 4<sup>a</sup> e 9 pontos de quadratura.

**Tabela 7.8:** Erro cumulativo  $\log(\epsilon_O)$  da reconstrução dos momentos da distribuição bimodal com modos mesocúrtico e leptocúrtico (Eq. (7.4)) para momentos até uma dada ordem, O, usando PCA-CQMoM e ICA-CQMoM.

Método	$\log \epsilon_1$	$\log \epsilon_2$	$\log \epsilon_3$	$\log \epsilon_4$	$\log \epsilon_5$	CPU ( $\mu\text{s}$ )
<b>PCA-CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>y<sub>2</sub> y<sub>1</sub></sup>	-15,80	-15,81	-2,27	-1,75	-1,41	3,9
<b>PCA-CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub> y<sub>2</sub></sup>	-15,42	-15,36	-2,40	-1,88	-1,56	3,9
<b>ICA-CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>y<sub>2</sub> y<sub>1</sub></sup>	-16,02	-15,85	-3,49	-2,39	-1,85	8,4
<b>ICA-CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub> y<sub>2</sub></sup>	-15,81	-15,79	-2,67	-2,11	-1,70	8,3
<b>PCA-CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>2</sub> y<sub>1</sub></sup>	-15,98	-16,03	-15,49	-3,29	-2,81	8,1
<b>PCA-CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub> y<sub>2</sub></sup>	-15,28	-15,29	-15,31	-2,84	-2,40	7,9
<b>ICA-CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>2</sub> y<sub>1</sub></sup>	-15,42	-15,43	-15,42	-2,44	-1,89	14,1
<b>ICA-CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub> y<sub>2</sub></sup>	-15,36	-15,40	-15,41	-2,94	-2,32	14,2

### 7.1.4 Resultados para PCA-CQMoM e ICA-CQMoM

O objetivo dessa análise é verificar se os problemas do CQMoM relacionados a obtenção de conjunto de momentos não-realizáveis podem ser eliminados ou ao menos atenuados através das transformações de coordenadas obtidas pela PCA ou ICA. Visto que é necessário todo o conjunto de momentos até uma dada ordem para transformar um momento da mesma ordem, somente as quadraturas de 4 e 6 pontos podem ser geradas pela combinação de métodos usando os momentos de até quinta ordem. Sendo assim, somente essas quadraturas serão consideradas para avaliar o desempenho dos métodos combinados e serão mostrados apenas os resultados para as três últimas distribuições da Tabela 7.1.

#### Distribuição bimodal - modos mesocúrtico/leptocúrtico

A Tabela 7.8 mostra os erros cumulativos correspondentes à reconstrução dos momentos da distribuição ilustrada na Figura 7.1(d). Como pode ser visto, a transformação dos momentos para as coordenadas da PCA e da ICA eliminou os problemas relacionados a momentos não-realizáveis encontrados anteriormente pelo CQMoM usando o sistema original de coordenadas (Seção 7.1.3 e Tabela 7.5).

Similarmente aos casos onde o CQMoM havia sido aplicado com sucesso, as quadraturas de  $2 \times 2$  e  $3 \times 2$  pontos reconstruíram acuradamente todos os momentos de até segunda e terceira ordem, respectivamente. Dessa forma, a robustez do CQMoM foi aumentada sem perda de acurácia.

As Figuras 7.5(d) e 7.5(e) ilustram os valores das abscissas obtidas usando a PCA-CQMoM e ICA-CQMoM, respectivamente. Fica claro que, diferentemente dos resultados da PCA e ICA, as abscissas não são colocadas em direções paralelas às coordenadas da PCA ou da ICA.

**Tabela 7.9:** Erro cumulativo  $\log(\epsilon_O)$  da reconstrução dos momentos da distribuição multimodal Gaussiana (Eq. (7.5)) para momentos até uma dada ordem,  $O$ , usando PCA-CQMoM e ICA-CQMoM.

Método	$\log \epsilon_1$	$\log \epsilon_2$	$\log \epsilon_3$	$\log \epsilon_4$	$\log \epsilon_5$	CPU ( $\mu\text{s}$ )
<b>PCA-CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>y<sub>2</sub> y<sub>1</sub></sup>	$-\infty^*$	-16,04	-2,63	-2,19	-1,87	4,0
<b>PCA-CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub> y<sub>2</sub></sup>	-15,90	-15,89	-3,61	-2,54	-2,02	4,0
<b>ICA-CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>y<sub>2</sub> y<sub>1</sub></sup>	-15,79	-15,83	-5,65	-2,57	-2,04	8,4
<b>ICA-CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub> y<sub>2</sub></sup>	-15,69	-15,52	-3,79	-2,54	-2,02	8,4
<b>PCA-CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>2</sub> y<sub>1</sub></sup>	-15,69	-15,67	-15,59	-2,74	-2,22	7,8
<b>PCA-CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub> y<sub>2</sub></sup>	-15,26	-15,27	-15,27	-2,57	-2,03	7,9
<b>ICA-CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>2</sub> y<sub>1</sub></sup>	-15,90	-15,90	-15,66	-2,58	-2,05	14,2
<b>ICA-CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub> y<sub>2</sub></sup>	-15,38	-15,33	-15,32	-3,11	-2,60	14,2

\* Atingiu a precisão de cálculo da máquina.

### Distribuição multimodal Gaussiana

Esta distribuição é dada pela Equação 7.5 e representada pela Figura 7.1(e). Como foi mostrado na Seção 7.1.3, o CQMoM não teve problemas com momentos não-realizáveis para a obtenção das quadraturas de  $2 \times 2$  e  $3 \times 2$  pontos. Pretende-se mostrar aqui que o uso dos métodos combinados PCA-CQMoM e ICA-CQMoM conseguem resultados similares ao CQMoM em casos onde não existem problemas com conjunto de momentos não-realizáveis. Os erros cumulativos são apresentados na Tabela 7.9. Comparando esses resultados com os mostrados na Tabela 7.6 verifica-se que os resultados obtidos apresentam acurácia similar.

As abscissas obtidas pela PCA-CQMoM e ICA-CQMoM são mostrados nas Figuras 7.6(d) e 7.6(e), respectivamente.

### Distribuição bimodal com modos separados

A Tabela 7.10 apresenta os erros cumulativos para a distribuição dada pela Equação 7.6 e ilustrada pela Figura 7.1(f). Quando aplicado no sistema original de coordenadas, o CQMoM não foi capaz de determinar nenhuma das quadraturas analisadas, como descrito na Seção 7.1.3. Usando os momentos transformados pela PCA ou ICA, o CQMoM conseguiu determinar a quadratura de  $2 \times 2$  pontos com 2<sup>a</sup> ordem de acurácia. A quadratura de  $3 \times 2$  pontos pôde ser determinada somente para uma das duas permutações de variáveis, sendo de 3<sup>a</sup> ordem de acurácia. Isso confirma que os métodos combinados são mais robustos que o CQMoM.

As abscissas obtidas por PCA-CQMoM e ICA-CQMoM são mostradas nas Figuras 7.7(c) e 7.7(d), respectivamente. Está claro que, diferentemente dos resultados mostrados nas Figuras 7.7(a) e 7.7(b), todas as abscissas estão em regiões onde a distribuição possui valores não nulos. Os resultados obtidos por ambas as combinações

**Tabela 7.10:** Erro cumulativo  $\log(\epsilon_O)$  da reconstrução dos momentos da distribuição bimodal com modos totalmente separados (Eq. (7.6)) para momentos até uma dada ordem, O, usando PCA-CQMoM e ICA-CQMoM.

Método	$\log \epsilon_1$	$\log \epsilon_2$	$\log \epsilon_3$	$\log \epsilon_4$	$\log \epsilon_5$	CPU ( $\mu\text{s}$ )
<b>PCA-CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>y<sub>2</sub> y<sub>1</sub></sup>	-15,68	-15,63	-2,41	-1,99	-1,73	4,0
<b>PCA-CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub> y<sub>2</sub></sup>	-15,91	-15,89	-3,15	-2,65	-2,33	4,0
<b>ICA-CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>y<sub>2</sub> y<sub>1</sub></sup>	-15,86	-15,89	-2,41	-2,06	-1,82	8,3
<b>ICA-CQMoM</b> <sub>(2×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub> y<sub>2</sub></sup>	-16,19	-16,08	-2,96	-2,49	-2,19	8,2
<b>PCA-CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>2</sub> y<sub>1</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—
<b>PCA-CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub> y<sub>2</sub></sup>	-15,41	-15,42	-15,35	-3,18	-2,86	7,9
<b>ICA-CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>2</sub> y<sub>1</sub></sup>	momentos condicionais não-realizáveis					—
<b>ICA-CQMoM</b> <sub>(3×2)</sub> <sup>y<sub>1</sub> y<sub>2</sub></sup>	-15,58	-15,65	-15,69	-3,19	-2,85	14,2

de métodos são muitos similares para esta distribuição.

### 7.1.5 Refinamento de Solução usando Otimização

Algoritmos de otimização local geraram resultados muito ruins para todos os casos analisados neste trabalho. Isso mais a forte dependência associada ao chute inicial, indicam a existência de solução com múltiplos mínimos locais. Verificou-se que mesmo para distribuições simples, como distribuições do tipo unimodal exponencial, não foi possível resolver o sistema de equações não-linear dado pela Equação 5.19 otimizando a Equação 5.3. Inversões acuradas de momentos somente foram conseguidas para problemas super-determinados e usando otimização global. O algoritmo de otimização usado depende da geração de uma população randômica e verificou-se que um bom chute inicial, que corresponde a uma partícula da população, geralmente facilita a convergência. Dessa forma, os seguintes métodos híbridos foram analisados: (i) a quadratura obtida pela PCA é usada como chute inicial na otimização usando os momentos de até 3<sup>a</sup> ordem, chamada PCA-Opt<sup>3</sup> e (ii) as quadraturas obtidas pela PCA ou PCA-CQMoM foram usadas como chute inicial na otimização usando os momentos de até 4<sup>a</sup> ordem, chamadas de PCA-Opt<sup>4</sup> e PCA-CQMoM-Opt<sup>4</sup>, respectivamente. As mesmas distribuições usadas na Seção 7.1.4 serão usadas aqui também.

#### Distribuição bimodal - modos mesocúrtico/leptocúrtico

Os erros cumulativos dos momentos reconstruídos estão mostrados na Tabela 7.11. Comparando os resultados das Tabelas 7.5, 7.8 e 7.11 percebe-se que a ordem de acurácia da quadratura pode ser aumentada em alguns casos. A quadratura de 4 pontos obtida por PCA-Opt<sup>3</sup> possui 3<sup>a</sup> ordem de acurácia e a de 6 pontos obtida por PCA-CQMoM-Opt<sup>4</sup> possui 4<sup>a</sup> de acurácia. Como pode ser visto na Figura 7.5(f)

**Tabela 7.11:** Erro cumulativo  $\log(\epsilon_O)$  da reconstrução dos momentos da distribuição bimodal com modos mesocúrtico e leptocúrtico (Eq. (7.4)) para momentos até uma dada ordem,  $O$ , usando otimização para momentos até 3<sup>a</sup> e 4<sup>a</sup> ordens.

Método	$\log \epsilon_1$	$\log \epsilon_2$	$\log \epsilon_3$	$\log \epsilon_4$	$\log \epsilon_5$	CPU (h)
<b>PCA-Opt<sup>3</sup><sub>(2×2)</sub></b>	-14,49	-14,52	-14,44	-2,44	-1,92	0,004
<b>PCA-Opt<sup>3</sup><sub>(3×2)</sub></b>	-15,56	-15,50	-15,60	-2,54	-2,01	0,21
<b>PCA-Opt<sup>3</sup><sub>(3×3)</sub></b>	-6,53	-6,67	-6,78	-3,33	-2,61	2,47*
<b>PCA-Opt<sup>4</sup><sub>(2×2)</sub></b>	-8,69	-3,15	-3,09	-3,18	-2,40	0,13
<b>PCA-Opt<sup>4</sup><sub>(3×2)</sub></b>	-9,24	-4,11	-4,22	-4,31	-3,37	0,64
<b>PCA-Opt<sup>4</sup><sub>(3×3)</sub></b>	-6,52	-4,71	-4,82	-4,91	-3,20	2,85*
<b>PCA-CQMoM<sup>y<sub>2</sub> y<sub>1</sub></sup>-Opt<sup>4</sup><sub>(3×2)</sub></b>	-14,75	-14,78	-14,69	-14,69	-3,34	0,15

\* Atingiu o número máximo de avaliações da função objetivo.

mínimas mudanças nos valores das abscissas foram necessárias para melhorar as quadraturas obtidas pela PCA e PCA-CQMoM.

Entretanto, os resultados obtidos usando a PCA-Opt<sup>3</sup> para  $2 \times 3$  pontos de quadratura são praticamente idênticos aos obtidos para 4 pontos de quadratura. Os resultados obtidos por PCA-Opt<sup>3</sup> para o caso de  $3 \times 3$  pontos de quadratura apresenta acurácia baixa, mostrando elevados erros mesmo para momentos de baixa ordem. A inclusão de momentos de 4<sup>a</sup> ordem na PCA-Opt<sup>4</sup> gerou quadraturas de baixa acurácia, a qual reconstrói os momentos de baixa ordem com erros não desprezíveis. A quadratura de  $3 \times 3$  teve um elevado custo computacional e atingiu o número máximo permitido de avaliações da função objetivo.

### Distribuição multimodal Gaussiana

A Tabela 7.12 mostra os erros cumulativos dos momentos para as quadraturas usadas.

A PCA-Opt<sup>3</sup> conseguiu novamente quadraturas de 4 pontos com 3<sup>a</sup> ordem de

**Tabela 7.12:** Erro cumulativo  $\log(\epsilon_O)$  da reconstrução dos momentos da distribuição multimodal Gaussiana (Eq. (7.5)) para momentos até uma dada ordem,  $O$ , usando otimização para momentos até 3<sup>a</sup> e 4<sup>a</sup> ordens.

Método	$\log \epsilon_1$	$\log \epsilon_2$	$\log \epsilon_3$	$\log \epsilon_4$	$\log \epsilon_5$	CPU (h)
<b>PCA-Opt<sup>3</sup><sub>(2×2)</sub></b>	-14,74	-14,87	-14,74	-2,54	-1,99	0,0039
<b>PCA-Opt<sup>3</sup><sub>(3×2)</sub></b>	-14,77	-9,77	-9,83	-2,87	-2,34	1,58
<b>PCA-Opt<sup>3</sup><sub>(3×3)</sub></b>	-14,19	-6,32	-6,25	-2,86	-2,34	2,44*
<b>PCA-Opt<sup>4</sup><sub>(2×2)</sub></b>	-13,29	-3,01	-3,10	-3,12	-2,49	0,014
<b>PCA-Opt<sup>4</sup><sub>(3×2)</sub></b>	-12,83	-12,98	-11,61	-11,34	-3,41	0,2
<b>PCA-Opt<sup>4</sup><sub>(3×3)</sub></b>	-15,18	-7,69	-7,58	-7,46	-3,77	2,84*
<b>PCA-CQMoM<sup>y<sub>2</sub> y<sub>1</sub></sup>-Opt<sup>4</sup><sub>(3×2)</sub></b>	-12,75	-10,14	-10,02	-10,11	-3,07	0,48

\* Atingiu o número máximo de avaliações da função objetivo.

**Tabela 7.13:** Erro cumulativo  $\log(\epsilon_O)$  da reconstrução dos momentos da distribuição bimodal com modos totalmente separados (Eq. (7.6)) para momentos até uma dada ordem,  $O$ , usando otimização para momentos até 3<sup>a</sup> e 4<sup>a</sup> ordens.

Método	$\log \epsilon_1$	$\log \epsilon_2$	$\log \epsilon_3$	$\log \epsilon_4$	$\log \epsilon_5$	CPU (h)
<b>PCA-Opt<sup>3</sup><sub>(2×2)</sub></b>	-15,68	-15,04	-15,07	-3,10	-2,66	0,0042
<b>PCA-Opt<sup>3</sup><sub>(3×2)</sub></b>	-9,21	-9,36	-9,47	-3,35	-3,04	1,55
<b>PCA-Opt<sup>3</sup><sub>(3×3)</sub></b>	-7,72	-6,16	-6,27	-3,09	-2,76	2,43*
<b>PCA-Opt<sup>4</sup><sub>(2×2)</sub></b>	-4,13	-4,28	-3,27	-3,35	-2,83	0,11
<b>PCA-Opt<sup>4</sup><sub>(3×2)</sub></b>	-7,69	-6,23	-6,34	-6,42	-3,70	2,20*
<b>PCA-Opt<sup>4</sup><sub>(3×3)</sub></b>	-12,51	-12,29	-12,12	-12,21	-3,64	2,60
<b>PCA-CQMoM<sup>y<sub>1</sub> y<sub>2</sub></sup>-Opt<sup>4</sup><sub>(3×2)</sub></b>	-10,81	-10,41	-10,43	-10,51	-3,57	1,64

\* Atingiu o número máximo de avaliações da função objetivo.

acurácia. Bons resultados também foram obtidos usando ambos PCA-Opt<sup>4</sup> e PCA-CQMoM-Opt<sup>4</sup> para a obtenção de quadraturas de 6 pontos que possuem acurácia de 4<sup>a</sup> ordem. A localização das abscissas são mostradas na Figura 7.6(f).

### Distribuição bimodal com modos separados

Na Tabela 7.13 são mostrados os erros cumulativos dos momentos reconstruídos. Similarmente aos resultados obtidos na seção anterior a PCA-Opt<sup>3</sup> conseguiu uma quadratura de 4 pontos com acurácia de 3<sup>a</sup> ordem fazendo apenas pequenas mudanças nos valores das abscissas, como pode ser visto na Figura 7.7(e).

Além disso, a PCA-CQMoM-Opt<sup>4</sup> conseguiu quadraturas de 6 pontos que possuem basicamente acurácia de 4<sup>a</sup> ordem. As abscissas correspondentes são mostradas na Figura 7.7(f). Nota-se que todas as abscissas encontram-se em regiões onde a distribuição é não-nula.

Para esta distribuição, a PCA-Opt<sup>4</sup> obteve uma quadratura de 4<sup>a</sup> ordem com 9 pontos de quadratura que é mais acurada que aquelas obtidas com PCA-CQMoM<sup>3</sup><sub>(3×3)</sub> e PCA-CQMoM<sup>4</sup><sub>(3×3)</sub>.

### 7.1.6 Conclusões - Inversão de Momentos Multivariados

De forma geral, o método DCPM mostrou ser de primeira ordem de acurácia e os métodos PCA e ICA conseguiram acurácia de segunda ordem. Contudo, a ICA demonstrou ser uma metodologia mais robusta e mais acurada que a PCA em alguns casos. O método TPM conseguiu quadraturas de 9 pontos de terceira ordem de acurácia. Contudo, é um método pouco robusto. O CQMoM é bastante acurado e consegue reproduzir todos os momentos usados na inversão. Por outro lado, também apresentou problemas relacionados a falta de robustez. Os métodos combinados ou híbridos PCA-CQMoM e ICA-CQMoM herdaram a acurácia do CQMoM e foram mais robustos.

O uso de otimização global foi eficaz em aumentar a acurácia das quadraturas obtidas pela PCA ou PCA-CQMoM. Porém, o elevado custo computacional envolvido faz com que essa estratégia só seja aplicável em métodos de momentos diretos, os quais necessitam da inversão somente em sua inicialização.

Dessa forma, percebe-se que o problema de inversão de momentos multivariados é complexo e é bastante relevante na solução de balanço populacional multivariado usando métodos de momentos. O problema deixa de ser tão grave quando são usados métodos de momentos diretos, como o DQMoM ou DQMoM-FC, sendo essa uma conclusão a ser considerada na hora da escolha do método a ser usado em simulações PB-CFD.

## 7.2 Simulações usando o DuQMoGeM

Os resultados a seguir foram publicados no trabalho de FAVERO e LAGE [265] e apresentados em LAGE e FAVERO [266].

### 7.2.1 Procedimento Numérico

O cálculo das integrais multidimensionais que aparecem nas Equações 6.17 e 6.18 foi feito usando uma rotina para integração multidimensional adaptativa. Após alguns testes com algumas rotinas disponíveis na literatura, optou-se por usar a rotina CUBATURE [267] pela sua eficiência e robustez. Essa rotina permite que se especifique tolerâncias globais relativa e absolutas para o cálculo das integrais e usa duas regras de cubatura entrelaçadas com graus 5 e 7 propostas originalmente por GENZ e MALIK [268]. Para a integração unidimensional, essa rotina usa uma regra de Gauss-Kronrod com 7 e 15 pontos de quadratura.

O sistema de equações diferenciais ordinárias dado pela Equação 6.16 foi resolvido usando a rotina DASSLC [269] com tolerâncias relativas e absoluta iguais a  $10^{-12}$ . A base polinomial usada na Equação 6.14 foi a polinomial de Laguerre  $[0, \infty)$  com funções peso  $\omega(x) = e^{-x}$  e  $\tilde{\omega}(y) = e^{-y}$  para ambas as variáveis e o pacote em FORTRAN conhecido como ORTHOPOL [258] foi usado para gerar os coeficientes de recorrência usados para calcular os polinômios até a ordem necessária para cada caso.

Todos os cálculos foram executados em precisão dupla em uma máquina Intel E5430 com 16GB de memória RAM usando sistema operacional Linux e compilador GNU versão 4.1.2. Os tempos de CPU que serão apresentados foram obtidos pela média de 3 rodadas.

## 7.2.2 Caso bivariado com Agregação e Quebra - Caso Teste 1

Considerando a Equação 6.13, admitiu-se que as duas propriedades internas são aditivas, como por exemplo, a massa total da partícula,  $x$ , e massa de um dos componentes,  $y$ , em um sistema composto por dois componentes. Admite-se também a quebra sendo binária, uma frequência de quebra linear e uma frequência de agregação constante:

$$\vartheta(x, y) = 2, \forall(x, y), \quad b(x, y) = x \quad \text{e} \quad a(x - x', y - y', x', y') = 0.1 \quad (7.9)$$

A função densidade de probabilidade das filhas foi considerada uniforme em relação a massa da partícula, mas a concentração do soluto das partículas filhas é igual a concentração do soluto das partículas mães, ou seja:

$$P(x, y | x', y') = \frac{1}{x'} H(x' - x) \delta\left(y - \frac{y'x}{x'}\right) \quad (7.10)$$

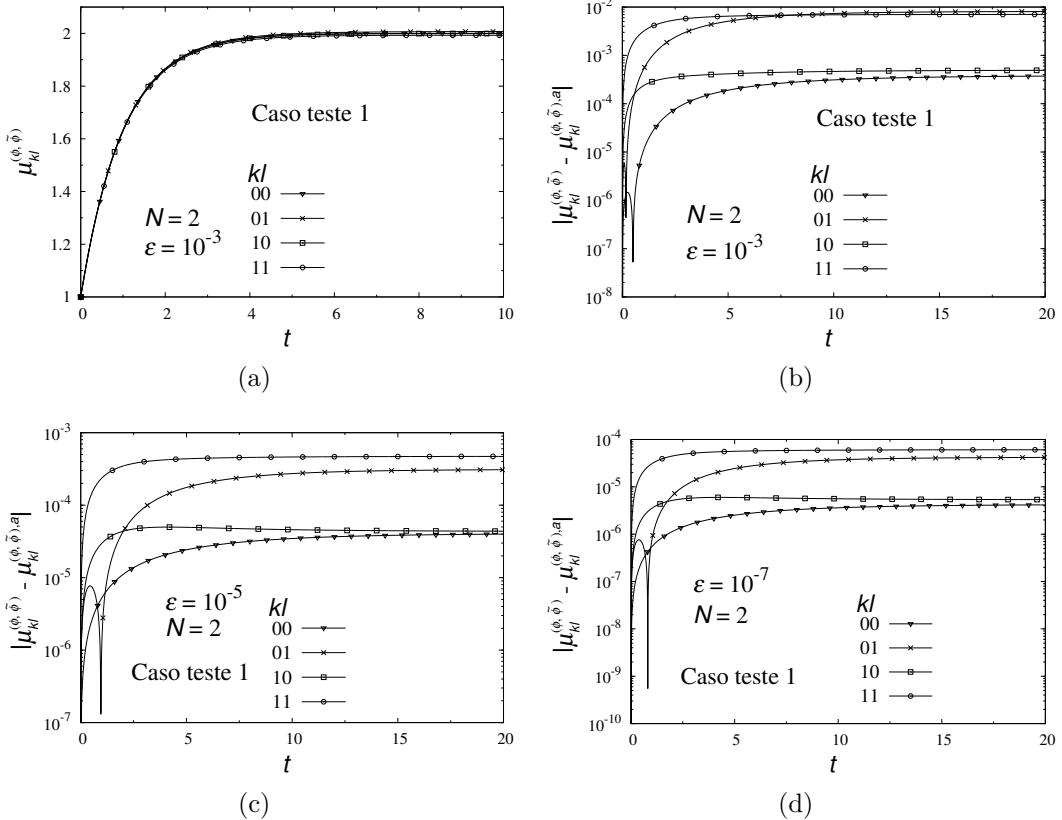
Admitindo que a solução analítica da função distribuição é dada por  $f(x, y, t) = (2 - e^{-t})xye^{-x-y}$  o termo fonte necessário para satisfazer a PBE é:

$$S(x, y, t) = xy e^{(-x-y)} \left\{ e^{-t} - (2 - e^{-t}) \left[ \frac{1}{10}(2 - e^{-t}) \left( \frac{1}{72}x^2y^2 - 1 \right) + 2x \left( \frac{x^2 + y^2 + 2xy + 2x + 2y + 2}{x^3 + 3x^2y + 3xy^2 + y^3} - \frac{1}{2} \right) \right] \right\} \quad (7.11)$$

Neste caso a função densidade de probabilidade é representada exatamente pelos seus primeiros dois termos da expansão polinomial, que podem ser representados pelos momentos generalizados dados por  $\mu_{ij}^{(\phi, \tilde{\phi})}(t)$ ,  $i, j = 0, 1$ . Todos os outros momentos são iguais a zero. Os momentos analíticos são dados como sendo  $\mu_{ij}^{(\phi, \tilde{\phi})}(t) = (2 - e^{-t})\mu_{ij}^{(\phi, \tilde{\phi})}(0)$  os quais fornecem a condição inicial para a Equação 6.16 como  $c_{ij} = 1$ ,  $i, j = 0, 1$ . Para que não se tenha interferência do termo fonte,  $S(x, y, t)$ , os momentos analíticos do mesmo foram calculados no software MAPLE v.12 [257] e alimentados diretamente no código.

Três diferentes valores de tolerâncias,  $10^{-3}$ ,  $10^{-5}$  e  $10^{-7}$ , foram usadas para avaliar o acoplamento entre o DuQMoGeM e o pacote de integração adaptativa. Foi necessária a especificação de um critério de acurácia baseada na tolerância absoluta para proceder com a integração adaptativa, visto que várias das integrais do termo de agregação e de quebra apresentam valor zero.

Na Figura 7.8 são apresentados os resultados obtidos. Percebe-se pela Figura 7.8(a) que os resultados obtidos para os momentos são bastante bons, mesmo para



**Figura 7.8:** Resultados para o caso teste 1: (a) Momentos generalizados e os correspondentes erros absolutos usando tolerância absoluta de (b)  $10^{-3}$ , (c)  $10^{-5}$  e (d)  $10^{-7}$  no pacote CUBATURE.

a pior das tolerâncias usadas.

Nas Figuras 7.8(b), 7.8(c) e 7.8(d) são apresentados os erros absolutos dos momentos generalizados para os valores de tolerâncias iguais a  $10^{-3}$ ,  $10^{-5}$  e  $10^{-7}$ , respectivamente. Pode-se ver que existe uma dependência do erro dos momentos com a tolerância usada no cálculo das integrais multidimensionais dos operadores de quebra e agregação. Os tempos de CPU foram de 2,2, 24,4 e 279 segundos para as tolerâncias de  $10^{-3}$ ,  $10^{-5}$  e  $10^{-7}$ , respectivamente.

### 7.2.3 Problema bivariado de Agregação pura com Modelo Constante - Caso Teste 2

A PBE admitida é dada pelas Equações 6.13 e 6.17 desconsiderando-se os termos fontes referentes ao fenômeno de quebra. Usando um modelo contante para a agregação,  $a(x, y, x', y', t) = a_0$ , GELBARD e SEINFELD [102] obtiveram a solução analítica para a função densidade de probabilidade para diferentes condições iniciais. O caso analisado neste trabalho possui condição inicial dada por:

$$f(x, y, 0) = e^{-(x+y)} \quad (7.12)$$

que possui a seguinte solução analítica:

$$f(x, y, t) = \frac{4}{(t+2)^2} e^{-(x+y)} I_0 \left( 2\sqrt{\frac{t}{t+2}} xy \right) \quad (7.13)$$

onde  $I_0$  é a função de Bessel de primeiro tipo modificada e de ordem zero. Neste caso, os valores da variável interna crescem continuamente e a função densidade de probabilidade tende a zero conforme o tempo aumenta. A dificuldade desse caso decorre da aproximação da função  $I_0$  por uma base polinomial, quando as variáveis  $x$  e  $y$  possuem valores elevados.

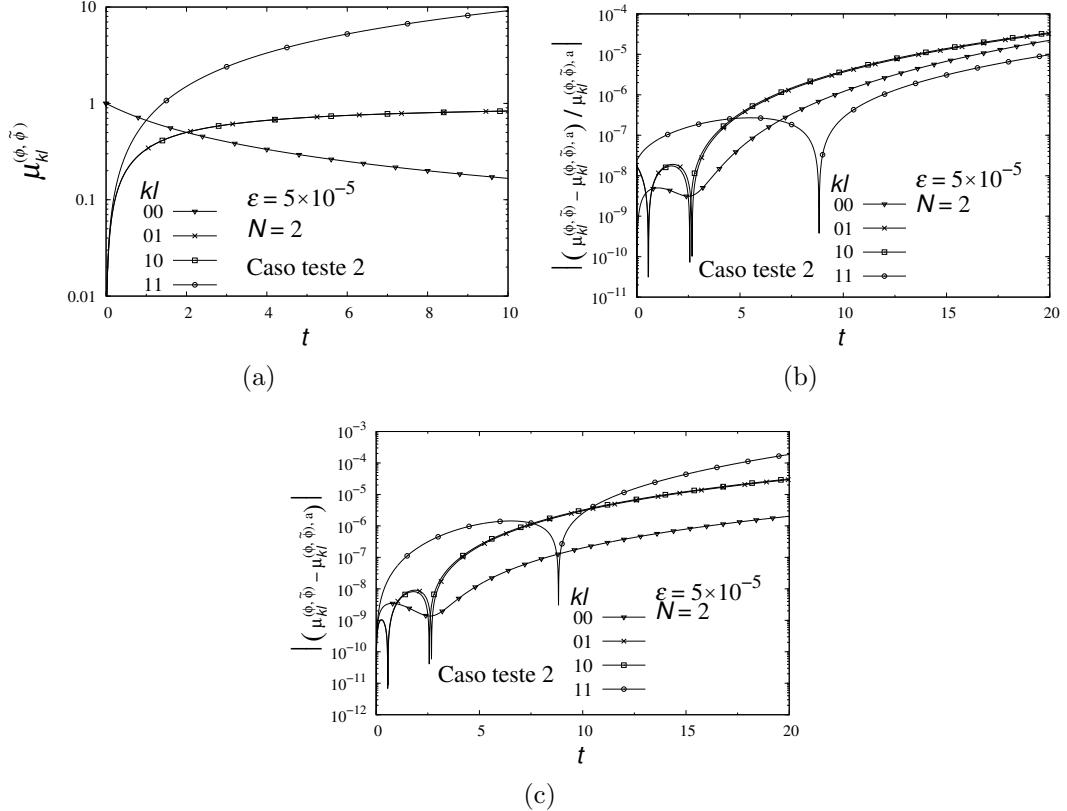
Um valor de tolerância absoluta de  $5,0 \times 10^{-5}$  foi usado no pacote CUBATURE para proceder com a integração multidimensional adaptativa. A condição inicial para os coeficientes  $c_{ij}$  foi obtida da Equação 7.12, levando a valores de um para  $c_{00}$  e zero para todos os outros coeficientes. Os momentos da solução analítica foram calculados analiticamente no pacote MAPLE v.12 [257] para se poder avaliar o erro da solução numérica.

As Figuras 7.9(a), 7.9(b) e 7.9(c) mostram, respectivamente, os valores dos momentos generalizados e seus erros relativos e absolutos usando  $N = 2$ . O tempo de CPU para este caso foi de 17,3 segundos. Devido à agregação, o número de partículas diminui e o valor médio da propriedade interna aumenta, como se pode perceber pelos resultados, que mostram uma diminuição do momento de ordem zero e um aumento dos momentos de primeira ordem,  $\mu_{01}^{(\phi, \tilde{\phi})} = \mu_{10}^{(\phi, \tilde{\phi})}$ .

A Figura 7.9(b) mostra que todos os quatro momentos generalizados foram obtidos com boa acurácia, sendo os momentos de primeira ordem os que apresentam o maior erro relativo. Por outro lado, a Figura 7.9(c) mostra que o momento  $\mu_{11}^{(\phi, \tilde{\phi})}$  é o que apresenta o maior erro absoluto, sendo o único que possui um erro maior que a tolerância usada no pacote CUBATURE para valores elevados de tempo.

Os valores dos nove momentos generalizados e seus erros relativos e absolutos são apresentados nas Figuras 7.10(a), 7.10(b) e 7.10(c), respectivamente, para o DuQMoGeM usando  $N = 3$ . Como pode ser visto na Figura 7.10(a) os valores dos momentos de maior ordem são bastante elevados. Esta simulação demandou um esforço computacional elevado, necessitando de aproximadamente 4,4 horas de CPU. Apesar da expansão funcional aumentar de 4 para 9 termos com o aumento de  $N$  de 2 para 3, a quantidade de funções que devem ser integradas numericamente (Equação 6.17) aumenta de 64 para 729. Outro motivo para este elevado tempo de CPU se deve ao fato de que a maioria dessas integrais possuem valores próximos de zero, tornando mais difícil a integração dessas funções.

As Figuras 7.10(b) e 7.10(c) mostram que, usando a mesma tolerância no pacote CUBATURE, ambos os erros relativos e absolutos nos momentos generalizados são maiores para  $N = 3$  do que para  $N = 2$ . Isso provavelmente é devido à soma de erro

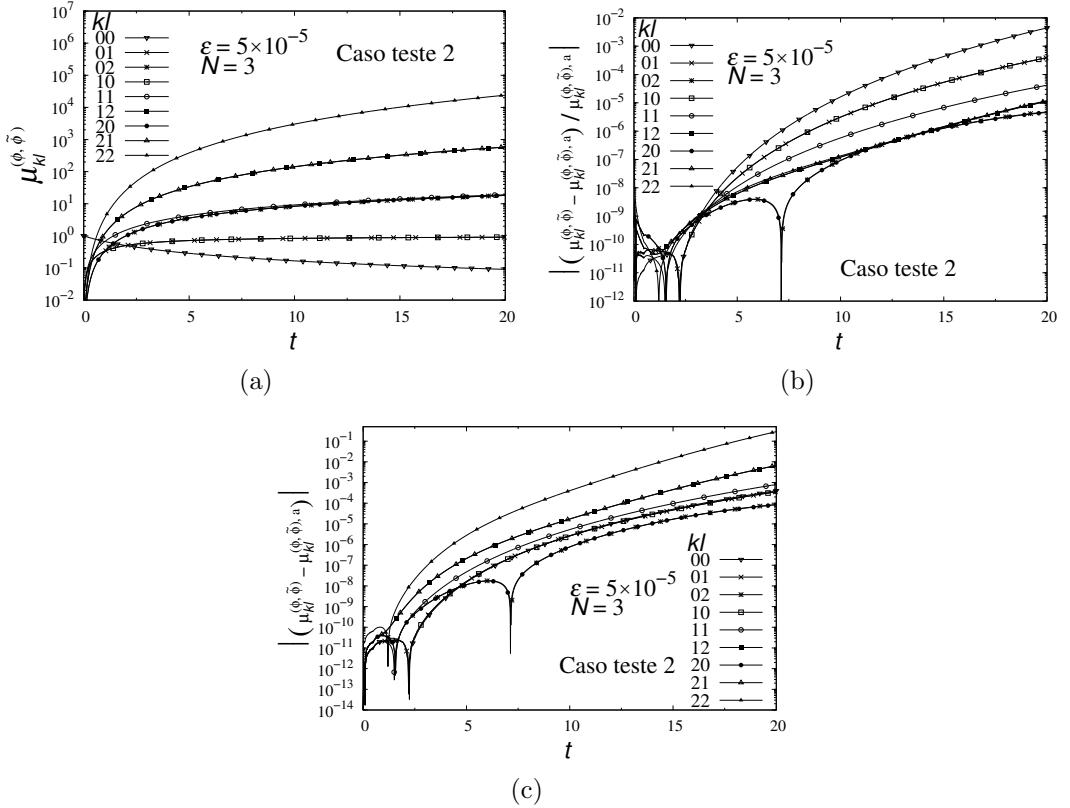


**Figura 7.9:** Resultados para o caso teste 2 com  $N = 2$ : (a) momentos generalizados, (b) erro relativo e (c) erro absoluto dos momentos usando tolerância absoluta de  $5,0 \times 10^{-5}$  no pacote CUBATURE.

numérico, visto que a quantidade de termos existentes na expansão do operador de agregação aumenta de 16 para 81 termos usando  $N = 2$  e  $N = 3$ , respectivamente. Contudo, percebe-se que todos os momentos generalizados foram calculados com um erro relativo menor que  $\varepsilon$  para  $t \leq 10$ .

#### 7.2.4 Problema bivariado de Agregação pura com Modelo Aditivo - Caso Teste 3

Um problema de agregação com modelo aditivo é numericamente mais complicado de resolver que o caso anterior que considerada um modelo constante. A PBE usada aqui é idêntica àquela usada na seção anterior (Subseção 7.2.3), exceto pela forma do modelo de agregação, o qual agora é dado por  $a(x, y, x', y', t) = (x + y) + (x' + y')$ . Recentemente, FERNÁNDEZ-DÍAZ e GÓMEZ-GARCÍA [270] desenvolveram a solução analítica para este problema considerando a mesma condição inicial usada



**Figura 7.10:** Resultados para o caso teste 2 com  $N = 3$ : (a) momentos generalizados, (b) erro relativo e (c) erro absoluto dos momentos usando tolerância absoluta de  $5 \times 10^{-5}$  no pacote CUBATURE.

no caso anterior. A solução analítica é dada por:

$$f(x, y, t) = \exp \left( -x - y - \varphi t - \frac{(x + y)(1 - e^{-\varphi t})}{2} \right) \times \sum_{k=0}^{\infty} \frac{[xy(x + y)(1 - e^{-\varphi t})/2]^k}{(k + 1)!(k!)^2} \quad (7.14)$$

onde a série está relacionada à função hipergeométrica generalizada e  $\varphi$  representa a massa total presente no sistema, a qual é constante durante a evolução temporal:

$$\varphi = \mu_{10} + \mu_{01} = \int_0^\infty \int_0^\infty (x + y) f(x, y) dx dy \quad (7.15)$$

Usando  $\varphi = 2$ , com  $\mu_{01} = \mu_{10} = 1$ , a condição inicial para os coeficientes  $c_{ij}$  foi obtida a partir da Equação 7.12, levando a mesma condição inicial usada no caso teste 2.

Para este caso, a expansão da função densidade de probabilidade foi limitada aos polinômios até uma dada ordem, sendo esta relacionada a máxima ordem desejada nos momentos generalizados. Matematicamente, a expansão da PDF pode ser dada

por:

$$f(x, y, t) \simeq \omega(x)\tilde{\omega}(y) \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1-i} c_{ij}\phi_i(x)\tilde{\phi}_j(y) \quad (7.16)$$

Esta estratégia limita o número de coeficientes que deverão ser integrados numericamente, mostrando esta propriedade adicional do método DuQMoGeM como sendo um método baseado em momentos. Para se ter uma ideia, o número de integrais multidimensionais a serem numericamente integradas para o caso de  $N = 3$  é reduzida de 729 para 216 usando a expansão dada pela Equação 7.16, resolvendo todos os momentos até segunda ordem.

Para este caso não se conseguiu uma solução analítica para os momentos generalizados usando o *software* MAPLE v.12 [257]. Usando a integração numérica da Equação 7.14 no MAPLE, foi possível obter alguns valores pontuais da solução para  $t < 1$ . Na Figura 7.11 são mostrados os valores para  $N = 2$  e  $N = 3$  usando tolerâncias de  $10^{-3}$  e  $10^{-4}$  para resolver as integrais multidimensionais usando o pacote CUBATURE para ambos os casos.

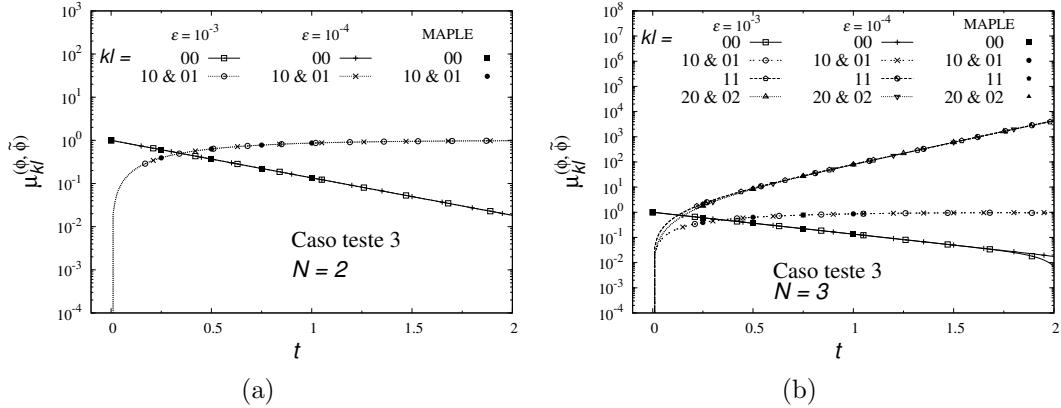
A Figura 7.11(a) mostra que os valores dos momentos generalizados apresentam uma boa concordância com os resultados obtidos pelo software MAPLE, mesmo no caso de se usar a tolerância de  $10^{-3}$ . Os tempos de CPU para este caso foram de 0,92 e 4,38 segundos para as tolerâncias de  $10^{-3}$  e  $10^{-4}$ , respectivamente.

Na Figura 7.11(b) são mostrados os resultados para o caso em que foi usado  $N = 3$ . Todos os momentos generalizados foram calculados com uma boa concordância quando comparados aos valores analíticos obtidos usando o MAPLE. No caso em que foi usada a tolerância de  $10^{-3}$  percebe-se que a solução desvia um pouco da solução mais acurada para tempos próximos de 2. Isto mostra que o acúmulo de erro durante a evolução temporal pode ser controlada com uma solução mais acurada das integrais multidimensionais. O tempo de CPU para este caso foi de 1,81 e 8,92 minutos para as tolerâncias de  $10^{-3}$  e  $10^{-4}$ , respectivamente.

### 7.2.5 Conclusões - DuQMoGeM

O uso de rotinas de integração automática no DuQMoGeM permitiu obter uma solução acurada dos momentos da PBE em casos onde as integrais do termo fonte da mesma não são bem aproximadas por quadraturas de poucos pontos. Isto possibilita resolver a PBE de forma acurada em casos onde os modelos de quebra e agregação de partículas são funções complexas. Os resultados mostraram que é possível controlar o erro nos momentos a partir do valor da tolerância usada nas rotinas de integração adaptativa.

Apesar da vantagem do método quanto a sua acurácia, o custo computacional



**Figura 7.11:** Resultados para o caso teste 3 usando tolerâncias absolutas de  $10^{-3}$  e  $10^{-4}$  no pacote CUBATURE para um caso com (a)  $N = 2$  e outro com (b)  $N = 3$ .

mostrou ser seu ponto fraco, caso o objetivo seja aplicações envolvendo balanço populacional heterogêneo. Dessa forma, considerando os recursos de processamento atuais, o método ainda é inviável para ser aplicado em grandes simulações PB-CFD. Alguns avanços mais recentes renovaram a esperança no método resolvendo a integração adaptativa em placas de processamento gráfico (GPU) [149], porém, isso não será considerado neste trabalho.

## 7.3 Simulações PB-CFD: Duto com Acidente

Parte dos resultados apresentados nesta seção foram submetidos para publicação em FAVERO *et al.* [271] e apresentados em FAVERO *et al.* [272].

### 7.3.1 Definição dos Casos

O caso base usado tem como objetivo determinar o comportamento de emulsão de água em óleo ao escoar por um sistema contendo um acidente – imitando o efeito de uma válvula – a fim de se identificar a influência do mesmo sobre o processo. Este tipo de aplicação acontece em refinarias no processo de dessalinização de óleo. Nesse processo adiciona-se água doce à emulsão de água salgada em óleo e se escoa a carga por uma válvula globo com finalidade de promover a mistura da água doce com a água salgada dispersa no óleo.

Para reproduzir essas condições usou-se um duto de seção transversal quadrada com 5 mm de lado e 200 mm de comprimento. Na parte central do duto, três gavetas móveis, com seção quadrada de 5 mm de lado permitem a definição de diferentes configurações geométricas para o acidente. Uma vista em perspectiva da geometria, com foco na região central onde se localizam as gavetas móveis, é ilustrada pela Figura 7.12(a). Na Figura 7.12(b) é ilustrado o aparato experimental

**Tabela 7.14:** Parâmetros dos modelos de quebra e coalescência para os modelos homogêneo e heterogêneo [2].

Parâmetro	Homogêneo	Heterogêneo
$C_c$	0,0105	0,01
$C_e$	0,00	0,01
$C_b$	0,0106	0,01
$\vartheta$	26,9	30,0

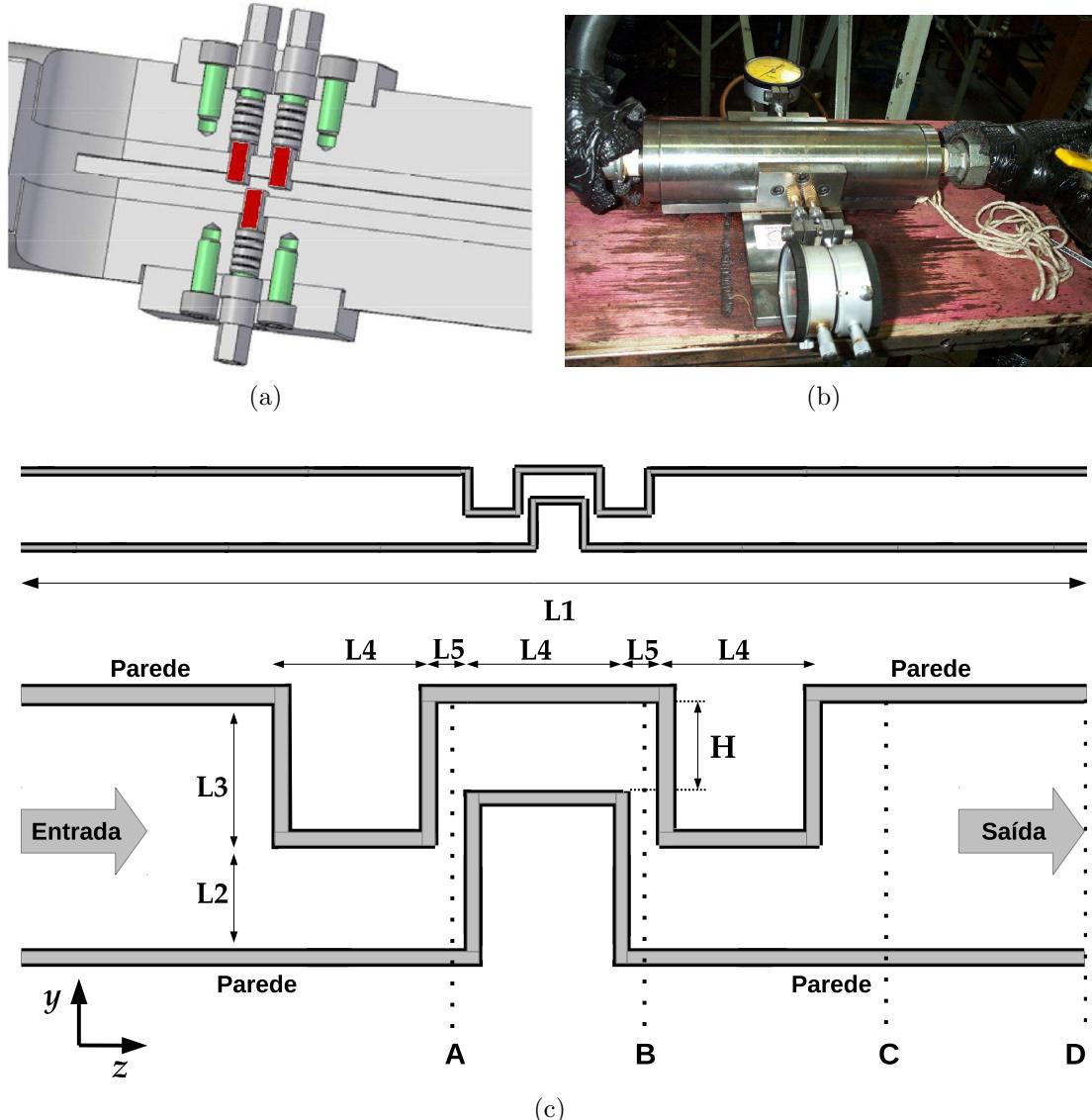
usado para obtenção dos dados experimentais e na Figura 7.12(c) é mostrada uma vista esquemática detalhando as dimensões da geometria.

A aquisição dos dados experimentais foi feita no Núcleo de Separadores Compactos do Instituto de Engenharia Mecânica de Itajubá nos trabalhos de SILVA *et al.* [273, 274]. Os experimentos consistiram de até 5 réplicas para cada um dos diferentes cenários onde variava-se a abertura das gavetas, a concentrações de água no óleo e a vazão nominal utilizada. Os resultados experimentais obtidos forneciam informação da distribuição numérica e de tamanho de gotas antes e após o acidente, da vazão, da diferença de pressão, da temperatura e do posicionamento das gavetas. Além disso, também foram efetuadas medidas de massa específica e viscosidade do óleo, fração mássica de água no óleo e tensão interfacial entre o óleo e a água para a faixa de temperatura de operação.

Usando esse conjunto de dados experimentais, MITRE *et al.* [2] estudaram a evolução da distribuição de tamanho de gotas em emulsões de água em óleo e desenvolveram os modelos para os processos de quebra e coalescência de gotas descritos anteriormente na Seção 6.6. Dentre as opções de modelos para eficiência de coalescência propostas por MITRE *et al.* [2], escolheu-se o modelo de interface deformável e parcialmente móvel, por ser um dos modelos que conseguiu bons resultados.

Os valores dos parâmetros dos modelos de quebra e coalescência usados nas simulações de balanço populacional homogêneo e heterogêneo estão especificados na Tabela 7.14. Para o caso homogêneo a eficiência de coalescência pôde ser assumida constante [2]. Por outro lado, a eficiência de coalescência é importante nas simulações de balanço populacional heterogêneo, onde a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta varia bastante nas diferentes regiões da geometria. Como as simulações de balanço populacional homogêneo mostraram ser pouco sensíveis para a estimativa do parâmetro  $C_e$ , MITRE *et al.* [2] assumiram um valor fixo para o mesmo e, a partir disto, estimaram os outros parâmetros usando otimização. Os valores dos parâmetros colocados na Tabela 7.14 foram obtidos de MITRE *et al.* [2] e foram aproximados para valores arredondados, considerando a margem de erro dos mesmos. Tal qual em MITRE *et al.* [2], usou-se a constante de Hamaker  $A = 0.6 \times 10^{-20}$  J.

Dos casos experimentais reportados por MITRE *et al.* [2], 5 deles foram selecionados para serem simulados. Os casos escolhidos representam a melhor (pt6g7), a



**Figura 7.12:** Definição da seção de testes: (a) vista em perspectiva da região das gavetas móveis, (b) aparato experimental e (c) visão esquemática com detalhes das dimensões da geometria para uma abertura de gaveta igual à  $H$ . Os parâmetros  $L_1$ ,  $L_2$ ,  $L_3$ ,  $L_4$  e  $L_5$  correspondem à 200, 2, 3, 5 e 1 milímetro (mm), respectivamente. As Figuras (a) e (b) foram extraídas de MITRE [1].

**Tabela 7.15:** Resumo das características dos casos usados.

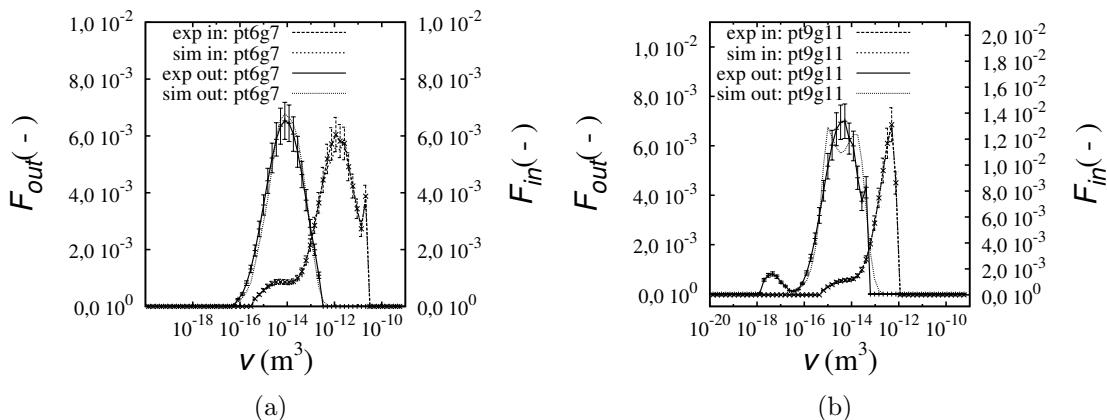
Parâmetro [2]	Caso				
	pt2g4	pt4g13	pt6g7	pt7g2	pt9g11
$Q$ [cm <sup>3</sup> /s]	81,8	56,8	32,4	82,0	57,22
$H$ [mm]	2,5	1,0	0,5	1,0	2,5
$r_d$ [-]	0,1296	0,1292	0,0717	0,0736	0,0734
$Re_{max}$ [-]	1358,01	883,12	385,54	1252,91	1041,35
$\Delta p$ [kgf/cm <sup>2</sup> ]	3,48	2,45	1,53	4,67	1,74

típica (pt4g13), a não usual (pt7g2) e as piores (pt2g4 e pt9g11) concordâncias entre as previsões do modelo de balanço populacional homogêneo e os dados experimentais da distribuição do tamanho de gotas.

As características desses casos estão resumidas na Tabela 7.15 e a Figura 7.13 ilustra as distribuições volumétricas do tamanho de gotas ( $F$ ) antes (“in”) e depois (“out”) do acidente para os casos pt6g7 e pt9g11, onde “exp” é referente às curvas das medidas experimentais e “sim” às curvas reproduzidas através de otimização.

As propriedades físicas dos fluidos para os casos analisados estão na Tabela 7.16. A variação das propriedades físicas se deve principalmente às diferenças de temperatura durante a realização dos experimentos.

A turbulência no escoamento é gerada predominantemente pelo acidente e uma geometria 2D foi considerada para o caso do balanço populacional heterogêneo. Essa aproximação é permitida pela geometria do acidente e leva a uma elevada economia do custo computacional da simulação. Desta forma, ela foi adotada sem uma validação formal. O modelo de turbulência de dupla-camada apresentado na Seção 6.7 foi usado em todas as simulações e considerou-se transferência integral de flutuação turbulenta da fase contínua para a fase dispersa, usando o modelo a zero-equação dado pela Equação 2.16 com  $C_t = 1$ . Outros modelos de turbulência



**Figura 7.13:** Distribuição volumétrica do tamanho das gotas,  $F$ , antes (“in”) e depois (“out”) do acidente para os casos (a) pt6g7 e (b) p9g11. Na legenda usada “exp” se refere às curvas das medidas experimentais e “sim” às curvas obtidas através de otimização [1].

**Tabela 7.16:** Propriedades físicas.

Casos	pt2g4	pt4g13	pt6g7	pt7g2	pt9g11
$\rho_w$ [kg/m <sup>3</sup> ]	985,00	985,32	986,59	985,40	985,35
$\nu_w$ [mm <sup>2</sup> /s]	0,469	0,477	0,512	0,479	0,478
$\rho_o$ [kg/m <sup>3</sup> ]	865,0	865,0	865,0	865,0	865,0
$\nu_o$ [mm <sup>2</sup> /s]	12,0	12,8	16,8	13,1	11,0
$\sigma$ [g/s <sup>2</sup> ]	22,0	22,2	23,0	22,3	22,2

também foram testados, contudo, não apresentaram resultados satisfatórios. Uma comparação de resultados obtidos usando diferentes modelos de turbulência pode ser vista no Apêndice E. As forças interfaciais consideradas foram arrasto, sustentação e massa virtual. O coeficiente de arrasto foi calculado usando o modelo de SCHILLER e NAUMANN [37] para partículas esféricas e os coeficientes de sustentação e massa virtual forma considerados constantes, onde  $C_{L,\alpha} = C_{MV,\alpha} = 0,5$ .

### 7.3.2 Procedimento Numérico

O método de Euler implícito (primeira ordem) foi usado para a discretização temporal e uma condição inicial nula foi especificada para a pressão, a velocidade e as variáveis do modelo de turbulência. A condição inicial para os pesos e abscissas foram obtidas invertendo-se os momentos da distribuição numérica de gotas medidas na seção anterior ao acidente.

As condições de contorno para as variáveis envolvidas estão descritas na Tabela 7.17. A inversão de momentos foi feita usando o algoritmo Chebyshev modificado [258], um método bastante eficiente e robusto para resolver o sistema de equações dado por:

$$\mu_k = \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha v_\alpha^k, \quad k = 0, \dots, 2N - 1 \quad (7.17)$$

O valor na entrada (*inlet*) da energia cinética turbulenta e da taxa de dissipação da mesma foram calculados, respectivamente, por:

$$k_0 = \frac{3}{2} (|\mathbf{u}_0| I)^2 \quad (7.18)$$

$$\epsilon_0 = C_\mu^{\frac{3}{4}} \frac{k_0^{\frac{3}{2}}}{l} \quad (7.19)$$

onde  $I$  é a intensidade turbulenta,  $l = 0,07 d_h$  é uma escala de comprimento associada a turbulência e  $d_h$  é o diâmetro hidráulico do duto. É comum usar  $I = 1\%$  para escoamentos com baixa turbulência,  $I = 5\%$  para escoamentos com turbulência intermediária e  $I = 10\%$  a  $I = 20\%$  para escoamentos com elevada turbulência.

Neste trabalho, usou-se o esquema linear *upwind* limitado de 2ª ordem para os

**Tabela 7.17:** Condições de contorno.

Variável	Entrada ( <i>Inlet</i> )	Saída ( <i>Outlet</i> )	Parede ( <i>Wall</i> )
$p$	$\mathbf{n} \cdot \nabla p = 0$	0 [Pa]	$\mathbf{n} \cdot \nabla p = 0$
$\mathbf{u}$	valor fixo uniforme	$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} = 0$	0 [m/s]
$k_0$	Eq. 7.18 com $I = 1\%$	$\mathbf{n} \cdot \nabla k = 0$	0 [ $m^2/s^2$ ]
$\epsilon_0$	Eq. 7.19 com $d_h = 5$ mm	$\mathbf{n} \cdot \nabla \epsilon = 0$	$\mathbf{n} \cdot \nabla \epsilon = 0$
$v_\alpha, m_\alpha$ $w_\alpha$	valor fixo uniforme (Eq. 7.17)	$\mathbf{n} \cdot \nabla w_\alpha = 0$ $\mathbf{n} \cdot \nabla v_\alpha = 0$ $\mathbf{n} \cdot \nabla m_\alpha = 0$	$\mathbf{n} \cdot \nabla w_\alpha = 0$ $\mathbf{n} \cdot \nabla v_\alpha = 0$ $\mathbf{n} \cdot \nabla m_\alpha = 0$

termos advectivos da equação de conservação de quantidade de movimento e do modelo de turbulência e o esquema de alta resolução Minmod de 1/2<sup>a</sup> ordem [173] para advecção dos momentos. Estes esquemas são mais acurados que o esquema *upwind* e previnem a obtenção de soluções espúrias ou com oscilações. Os operadores gradiente e Laplaciano foram avaliados usando os esquemas Gauss linear de 2<sup>a</sup> ordem.

O sistema linear de equações resultante da discretização espacial foi resolvido usando o método dos gradientes conjugados (CG) com precondicionador *multi-grid* algébrico (AMG) para a pressão, PBiCG com precondicionador ILU para as variáveis do modelo de turbulência e BiCGstab com precondicionador Cholesky para as outras variáveis [180, 184–186]. As tolerâncias relativas usadas no OpenFOAM para resolver o sistema linear de equações resultante da discretização espacial para as variáveis relacionadas à conservação de quantidade de movimento, à turbulência e ao balanço populacional foram fixadas em zero. Por outro lado, as tolerâncias absolutas usadas foram de  $10^{-9}$  para solução da pressão,  $10^{-7}$  para velocidade e variáveis da turbulência e  $10^{-10}$  para os pesos e abscissas [168]. Considerando que foi simulado o processo transiente de preenchimento do duto com fase dispersa, estabeleceu-se um critério para verificar quando o estado estacionário seria atingido. O critério usado considera que as variáveis devem apresentar mudanças desprezíveis durante 2 tempos de residência hidrodinâmicos na seção de teste.

Devido ao problema de rigidez numérica (*stiffness*) relacionado à solução da PBE, usou-se a técnica de sub-ciclos (*sub-cycling*) para integração temporal das equações do DQMoM e DQMoM-FC. Nas simulações que serão apresentadas, o uso de 2 a 5 sub-ciclos foram suficientes para garantir a estabilidade numérica. O sistema linear do DQMoM e do DQMoM-FC foram resolvidos usando a rotina de decomposição em valores singulares (SVD - Apêndice D) obtida de PRESS *et al.* [259]. Esse método mostrou ser computacionalmente eficiente e tem a vantagem de conseguir resolver

**Tabela 7.18:** Tempo de residência e valor médio da energia de dissipação turbulenta global usadas nas simulações de balanço populacional homogêneo.

Caso	pt2g4	pt4g13	pt6g7	pt7g2	pt9g11
$t_{res}$ [ms]	2,90	3,52	5,78	2,44	4,14
$\langle \epsilon_0 \rangle$ [ $10^5 \text{ m}^2/\text{s}^3$ ]	1,33	0,775	0,297	2,15	0,47

problemas com mau condicionamento, que eventualmente podem surgir em algumas células da geometria discretizada.

O diâmetro médio de Sauter e o diâmetro médio volumétrico ou DeBrouckere foram calculados a partir dos valores dos diâmetros  $d_\alpha$  (Equação 6.2) conforme:

$$d_S = d_{32} = \frac{\sum_{\alpha=1}^N d_\alpha^3 w_\alpha}{\sum_{\alpha=1}^N d_\alpha^2 w_\alpha} \quad (7.20)$$

$$d_{DB} = d_{43} = \frac{\sum_{\alpha=1}^N d_\alpha^4 w_\alpha}{\sum_{\alpha=1}^N d_\alpha^3 w_\alpha} \quad (7.21)$$

O valor “bulk” médio de uma variável genérica  $\psi_\alpha$  foi calculado como sendo:

$$\psi_{bulk} = \frac{\int_S \mathbf{u}_\alpha \cdot \mathbf{n} \psi_\alpha \, dA}{\int_S \mathbf{u}_\alpha \cdot \mathbf{n} \, dA} \quad (7.22)$$

onde  $S$  representa a área seccional na qual a variável é integrada.

### 7.3.3 Simulação do modelo homogêneo

Nas simulações analisadas nessa seção os métodos DQMoM e DQMoM-FC são, por definição, iguais, visto que não são considerados os termos advectivo e difusivo. Os objetivos dessas simulações foram: (i) validar a implementação do DQMoM-FC, comparando os resultados com os obtidos pelo MoC; (ii) analisar o número de pontos de quadratura necessários no DQMoM-FC e (iii) verificar o efeito do uso de momentos de ordem inteira ( $m_p = 1$ ) ou fracionária ( $m_p = 1/3$ ), sendo o volume da gota a variável interna.

Dois e três pontos de quadratura foram considerados conduzindo a conservação do conjunto de momentos dado por  $\{\mu_{k \times m_p}\}$ ,  $k = 0, \dots, 2N - 1$ .

O tempo de residência,  $t_{res}$ , e o valor médio da energia de dissipação turbulenta global  $\langle \epsilon_0 \rangle$ , foram calculados pela Equações 6.64 e 6.62, respectivamente, e estão discriminados na Tabela 7.18 para os 5 casos analisados.

As Figuras 7.14(a), 7.14(b), 7.14(c), 7.14(d) e 7.14(e) ilustram os resultados para o diâmetro médio de Sauter,  $d_{32}$ , para os casos pt2g4, pt4g13, pt6g7, pt7g2 e pt9g11, respectivamente. A solução obtida com o DQMoM-FC pode ser comparada com a do MoC, obtida por MITRE *et al.* [2], e com os dados experimentais. Percebe-se que a solução obtida é praticamente igual usando 2 ou 3 pontos de quadratura. Porém,

**Tabela 7.19:** Erros relativos dos diâmetros médios  $d_{32}$  e  $d_{43}$  para o caso homogêneo. Os dados experimentais foram obtidos de MITRE *et al.* [2].

Método	$N$	$m_p$	Casos				
			pt2g4	pt4g13	pt6g7	pt7g2	pt9g11
MoC			8,95	37,2	1,45	17,5	43,99
DQMoM-FC	2	1	13,9	8,45	22,5	8,18	10,11
DQMoM-FC	3	1	11,8	11,0	21,3	7,25	11,19
DQMoM-FC	2	1/3	10,4	39,1	0,89	18,7	42,34
DQMoM-FC	3	1/3	10,9	40,6	0,48	19,1	41,92
Método			%E( $d_{32}$ )				
MoC			18,0	7,87	5,69	0,62	18,25
DQMoM-FC	2	1	47,3	30,3	37,8	37,2	29,98
DQMoM-FC	3	1	41,6	23,5	34,5	34,0	26,66
DQMoM-FC	2	1/3	14,5	12,3	3,33	3,86	14,75
DQMoM-FC	3	1/3	16,0	10,9	7,53	3,25	13,27

somente o caso que usa momentos fracionários consegue uma solução que apresenta boa concordância com o MoC.

Os resultados para o diâmetro médio de DeBrouckere,  $d_{43}$ , estão mostrados nas Figuras 7.15(a), 7.15(b), 7.15(c), 7.15(d) e 7.15(e), para os casos pt2g4, pt4g13, pt6g7, pt7g2 e pt9g11, respectivamente, e levam a mesma conclusão feita anteriormente para a análise do  $d_{32}$ .

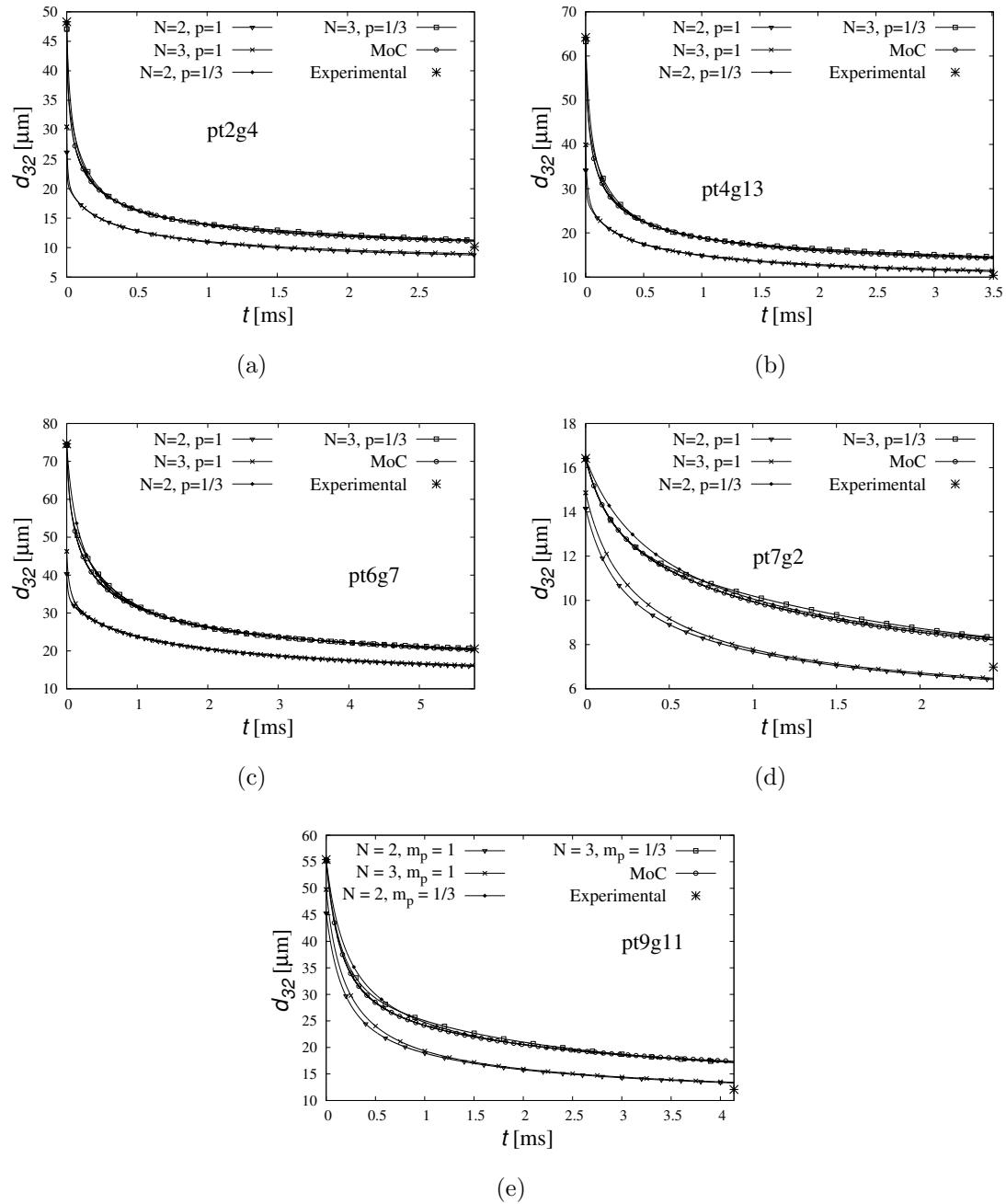
Um erro relativo foi calculado para melhor quantificar as diferenças entre os valores simulados e os valores experimentais. O erro foi definido como:

$$\%E(y) = \frac{|y - y^{exp}|}{y^{exp}} \cdot 100\% \quad (7.23)$$

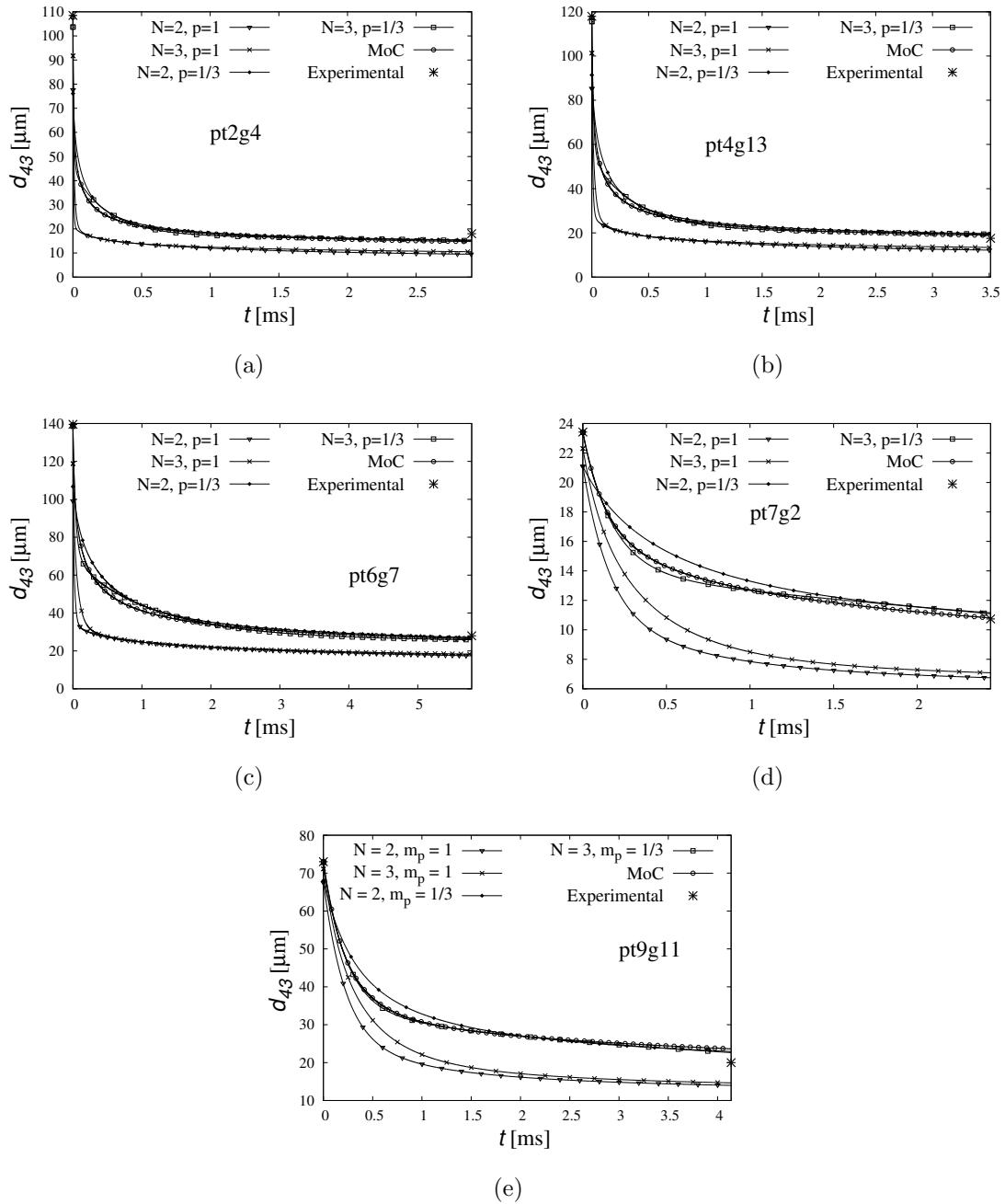
onde  $y$  é o valor simulado de uma variável arbitrária após transcorrido um tempo de residencia e  $y^{exp}$  é o valor experimental dessa mesma variável medida na saída da seção de testes (*outlet*).

Os erros relativos para os diâmetros médios estão descritos na Tabela 7.19. Pode-se observar que os erros do DQMoM-FC com  $m_p = 1/3$  usando ambos  $N = 2$  ou  $N = 3$  pontos de quadratura já são comparáveis aos erros do MoC [2]. O diâmetro médio de DeBrouckere é melhor estimado para os casos pt6g7 e pt7g2. Por outro lado, o diâmetro médio de Sauter é melhor estimado para os casos pt6g7 e pt2g4. Uma concordância muito ruim do  $d_{32}$  é observada para o caso pt4g13. Por fim o caso pt9g11 apresentou resultados ruins tanto para o  $d_{32}$  quanto para o  $d_{43}$ .

A partir dos resultados apresentados é possível concluir que, ao menos para o caso homogêneo, o DQMoM-FC usando momentos de ordem fracionária ( $m_p = 1/3$ ) conseguiu resultados comparáveis ao MoC usando somente dois pontos de quadra-



**Figura 7.14:** Resultado experimental para o diâmetro médio de Sauter ( $d_{32}$ ) antes e depois do acidente e comparação com resultados obtidos com o MoC e DQMoM-FC com 2 e 3 pontos de quadratura usando momentos inteiros e fracionários.



**Figura 7.15:** Resultado experimental para o diâmetro médio de DeBrouckere ( $d_{43}$ ) antes e depois do acidente e comparação com resultados obtidos com o MoC e DQMoM-FC com 2 e 3 pontos de quadratura usando momentos inteiros e fracionários.

**Tabela 7.20:** Valores dos momentos até sétima ordem para a distribuição numérica de gotas obtidos da distribuição volumétrica de tamanhos de gotas (Figura 7.13(b)) para a seção anterior e posterior ao acidente e para o caso pt9g11.

Momento	Seção anterior	Seção Posterior
$\mu_0$	$3,386 \times 10^{12}$	$9,844 \times 10^{14}$
$\mu_1$	0,073	0,073
$\mu_2$	$2,108 \times 10^{-14}$	$5,846 \times 10^{-16}$
$\mu_3$	$1,014 \times 10^{-26}$	$1,341 \times 10^{-29}$
$\mu_4$	$5,898 \times 10^{-39}$	$4,297 \times 10^{-43}$
$\mu_5$	$3,789 \times 10^{-51}$	$1,563 \times 10^{-56}$
$\mu_6$	$2,582 \times 10^{-63}$	$6,024 \times 10^{-70}$
$\mu_7$	$1,824 \times 10^{-75}$	$2,392 \times 10^{-83}$

tura,  $N = 2$ .

Deve ser dito ainda que, devido ao número médio de gotas formadas pelos eventos de quebra ser bastante elevado,  $\vartheta \approx 27$ , a distribuição de tamanhos varia muito rapidamente sob condições favoráveis de quebra, deixando o problema bastante rígido (*stiff*). Isso foi observado principalmente quando foi aumentada a quantidade de pontos de quadratura. Nesse caso, foi necessário usar passos de tempo bastante reduzidos para manter o problema numericamente estável. Outra questão a se considerar é que a distribuição é bastante estreita e a inversão dos seus momentos gera um ponto de quadratura com peso muito elevado, carregando a maior parte da informação, e os outros pontos de quadratura possuem pesos muitos baixos, sendo facilmente contaminados por erros numéricos durante a evolução temporal da solução. Por exemplo, os momentos inteiros da distribuição numérica de gotas, necessários para uma discretização de 4 pontos de quadratura, para o caso pt9g11 possuem os valores dados na Tabela 7.20, para a seção anterior e posterior ao acidente. Percebe-se que os valores dos momentos acima de terceira ordem já são bastante pequenos.

Invertendo-se o conjunto de momentos da seção anterior ao acidente (Tabela 7.20) usando o algoritmo de Chebyshev modificado, [258] obtém-se a discretização da distribuição numérica de gotas dada na Tabela 7.21. Como se pode notar, existe uma abscissa com peso muito elevado comparado às outras. Por exemplo,  $w_1 / \sum_{\alpha=1}^{N=4} w_\alpha = 0,92$  enquanto  $w_4 / \sum_{\alpha=1}^{N=4} w_\alpha = 0,0038$ , exemplificando a questão discutida anteriormente.

Os resultados obtidos possibilitam validar o DQMoM-FC (Seção 6.5) e os modelos de quebra e coalescência de gotas (Seção 6.6) implementados no OpenFOAM. Os desvios apresentados pelo DQMoM-FC em relação ao MoC podem ser atribuídos aos diferentes métodos de integração temporal utilizados e também ao cálculo das integrais dos termos de quebra e principalmente de coalescência, visto a baixa quantidade de pontos de quadratura que é usada no cálculo das mesmas. Cabe lembrar também que o MoC consegue baixa acurácia no cálculo dos momentos de alta

**Tabela 7.21:** Valores dos pesos ( $w_\alpha$ ) e abscissas ( $v_\alpha$ ) para uma discretização de 4 pontos de quadratura usando os momentos da seção anterior ao acidente dados na Tabela 7.20.

$\alpha$	$v_\alpha$ [m <sup>3</sup> ]	$w_\alpha$ [m <sup>-3</sup> ]
1	$4,025 \times 10^{-15}$	$3,122 \times 10^{12}$
2	$1,434 \times 10^{-13}$	$1,976 \times 10^{11}$
3	$4,264 \times 10^{-13}$	$5,336 \times 10^{10}$
4	$7,468 \times 10^{-13}$	$1,303 \times 10^{10}$

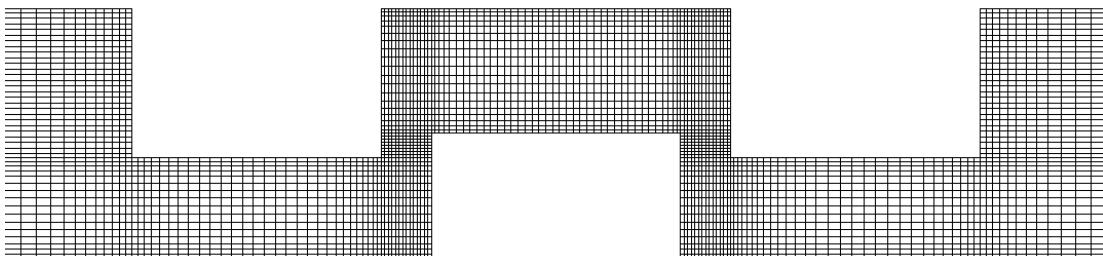
ordem.

### 7.3.4 Comparação entre DQMoM e DQMoM-FC

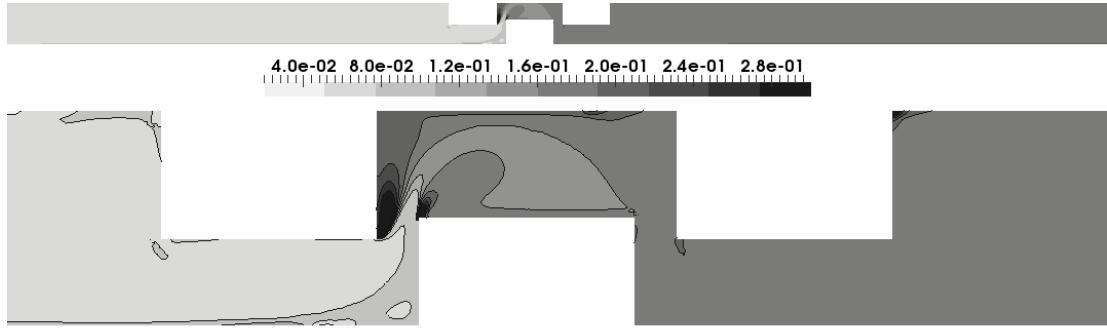
O intuito dessa análise é mostrar que o DQMoM não é conservativo. Os resultados apresentados correspondem à solução em estado estacionário para o caso pt9g11 usando uma malha computacional estruturada composta de 12k células hexaédricas. A dispersão de gotas foi considerada com  $Sc^{turb} = 1$  e foi usado o conjunto de momentos dado por  $\{\mu_{k/3}\}$ ,  $k = 0, \dots, 2N - 1$ . Na Figura 7.16 é ilustrada a malha computacional na região do acidente.

Após atingir o estado estacionário, o valor *bulk* (Equação 7.22) da fração total de fase dispersa na saída do canal deve ser igual ao valor da entrada do mesmo, para que seja respeitada a conservação de massa. Os valores obtidos para  $r_d$  usando o DQMoM foram de 0,17 e 0,14 para  $N = 2$  e  $N = 3$ , respectivamente. Como pode ser visto, as diferenças existentes entre os dois casos são apreciáveis. Contudo, em nenhum dos casos, a fração de fase dispersa é conservada, já que  $r_d = 0,073$  na entrada do canal. As Figuras 7.17(a) e 7.17(b) mostram os gráficos de contorno de  $r_d$  usando 2 e 3 pontos de quadratura no DQMoM, respectivamente. Nessas figuras fica evidente o problema do DQMoM ser não-conservativo em simulações de balanço populacional heterogêneo. O problema ocorre na região do acidente, onde existe uma intensa quebra de gotas e o DQMoM prevê erroneamente uma geração de fração de fase dispersa.

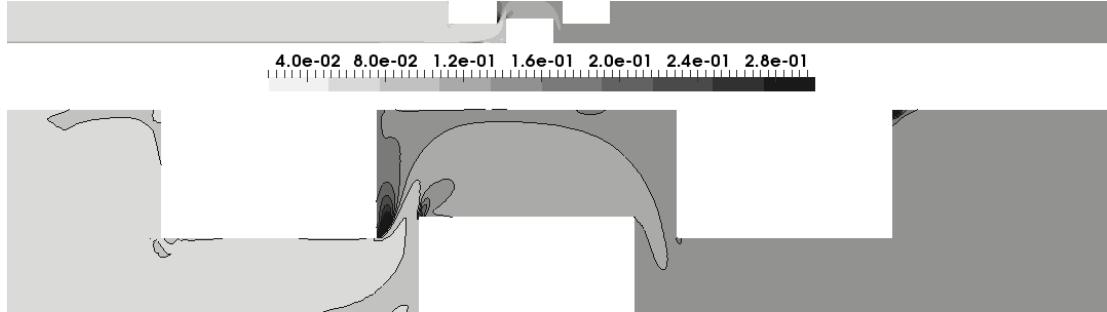
Para mostrar que o problema da não-conservação está atrelado ao método, ou seja, ao DQMoM, e não à quantidade de pontos de quadratura usados, o mesmo



**Figura 7.16:** Ilustração da malha na região do acidente.

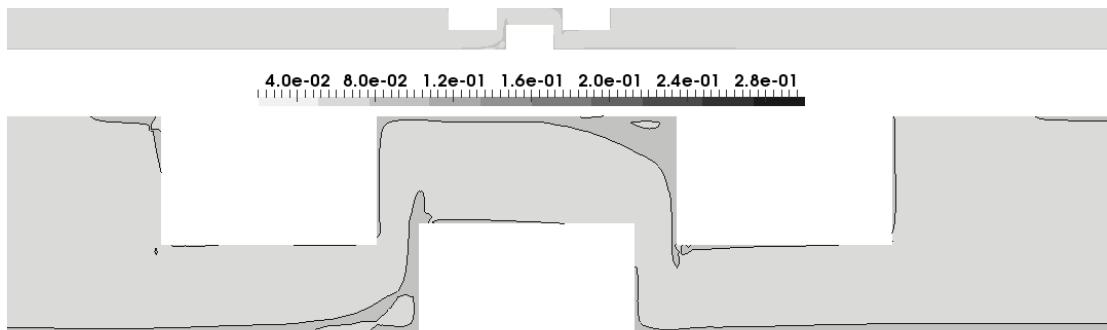


(a)



(b)

**Figura 7.17:** Fração volumétrica da fase dispersa obtida com o DQMoM para (a)  $N = 2$  e (b)  $N = 3$  pontos de quadratura.



**Figura 7.18:** Fração volumétrica da fase dispersa obtida com o DQMoM-FC para  $N = 2$ .

caso foi simulado com o DQMoM-FC usando 2 pontos de quadratura. A Figura 7.18 ilustra o gráfico de contorno de  $r_d$  e, como pode ser visto, não é mais observada a geração de fase dispersa na região do acidente nem o aumento da fração de fase dispersa na região posterior ao acidente. De fato, o valor *bulk* de  $r_d$  na saída do canal é igual ao da entrada a menos de pequenas perturbações numéricas.

Os resultados apresentados são suficientes para concluir que o DQMoM-FC é que deve ser usado em problemas envolvendo balanço populacional heterogêneo.

### 7.3.5 Simulação PB-CFD usando o DQMoM-FC

Nesta seção são mostrados os resultados obtidos com o DQMoM-FC para os casos pt2g4, pt4g13, pt6g7 e pt7g2. Levando em conta os resultados obtidos no caso

homogêneo, foi usado o conjunto de momentos fracionários  $\{\mu_{k/3}\}$ ,  $k = 0, \dots, 2N - 1$ . Os casos pt4g13 e pt6g7 foram simulados usando 2 e 3 pontos de quadratura. Contudo, não foram verificadas diferenças apreciáveis nas previsões dos diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere, tal qual ocorreu nas simulações de PB homogêneo. Levando isso em conta, somente os resultados para  $N = 2$  são apresentados.

### Análise do Estado Estacionário e Convergência de Malha

Os resultados para verificação de estado estacionário e convergência de malha foram obtidos em quatro seções da geometria, definidas como A, B, C e D na Figura 7.12(c). Esta análise foi feita desconsiderando o efeito de dispersão de gotas ( $Sc^{turb} \rightarrow \infty$ ).

O estado estacionário foi verificado analisando-se a fração de fase e os diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere. O caso pt6g7 foi o que levou mais tempo para chegar ao estado estacionário. A variável que mais demorou para atingir o estado estacionário foi a fração de fase,  $r_d$ . Na situação mais crítica, ou seja, caso pt6g7 e variável  $r_d$ , o estado estacionário foi obtido com diferenças menores que 0.2%, comparando os resultados no decorrer de um tempo de residência hidrodinâmico na seção de teste.

A Figura 7.19 ilustra o valor médio *bulk* (Eq. 7.22) obtido na seção D (*outlet*) para os diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere e para a fração volumétrica de fase dispersa ao longo de 2 tempos de residência hidrodinâmico e para o caso pt6g7. Como pode ser visto, os resultados são praticamente idênticos para todos os instantes mostrados.

A análise de convergência de malha foi feita considerando os resultados em estado estacionário. Três diferentes malhas foram usadas para cada um dos casos. A Tabela 7.22 mostra os valores médios e máximos de  $y^+$  (Equação 6.66) para as diferentes malhas e casos. Como pode ser visto, mesmo para a malha mais grossa, os valores de  $y^+$  médios são inferiores a 2,5 para todos os casos. Para a malha mais fina os valores de  $y^+$  médios estão em torno de 1 para todos os casos. Esses valores baixos de  $y^+$  são desejáveis para o modelo de turbulência de dupla-camada usado, visto que isso permite resolver a subcamada laminar do escoamento e não há necessidade de se usar funções de parede.

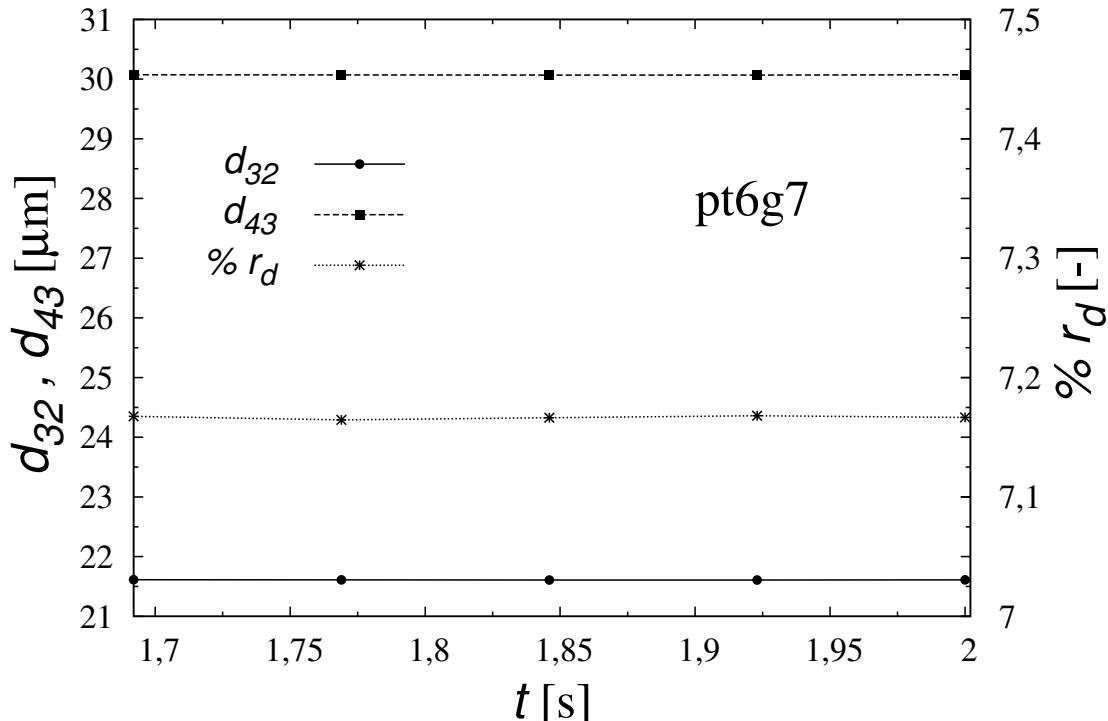
O caso pt6g7 mostrou-se o pior dentre os casos analisados para a convergência em malha. As Figuras 7.20(a), 7.20(b), 7.20(c) e 7.20(d) ilustram os perfis das componentes de velocidade  $u_y$  e  $u_z$ , da energia cinética turbulenta e da taxa de dissipaçāo de energia cinética turbulenta, respectivamente, obtidos nas seções A e B mostradas na Figura 7.12(c) para o caso pt6g7. Nessas seções existem grandes gradientes nas variáveis analisadas. Os resultados mostram uma boa concordância para os perfis de velocidade. Por outro lado, os perfis de  $k$  e  $\epsilon$  mostram uma concordância razoável e percebe-se que os resultados obtidos com a malha 3 estão

**Tabela 7.22:** Características das malhas usadas nas simulações.

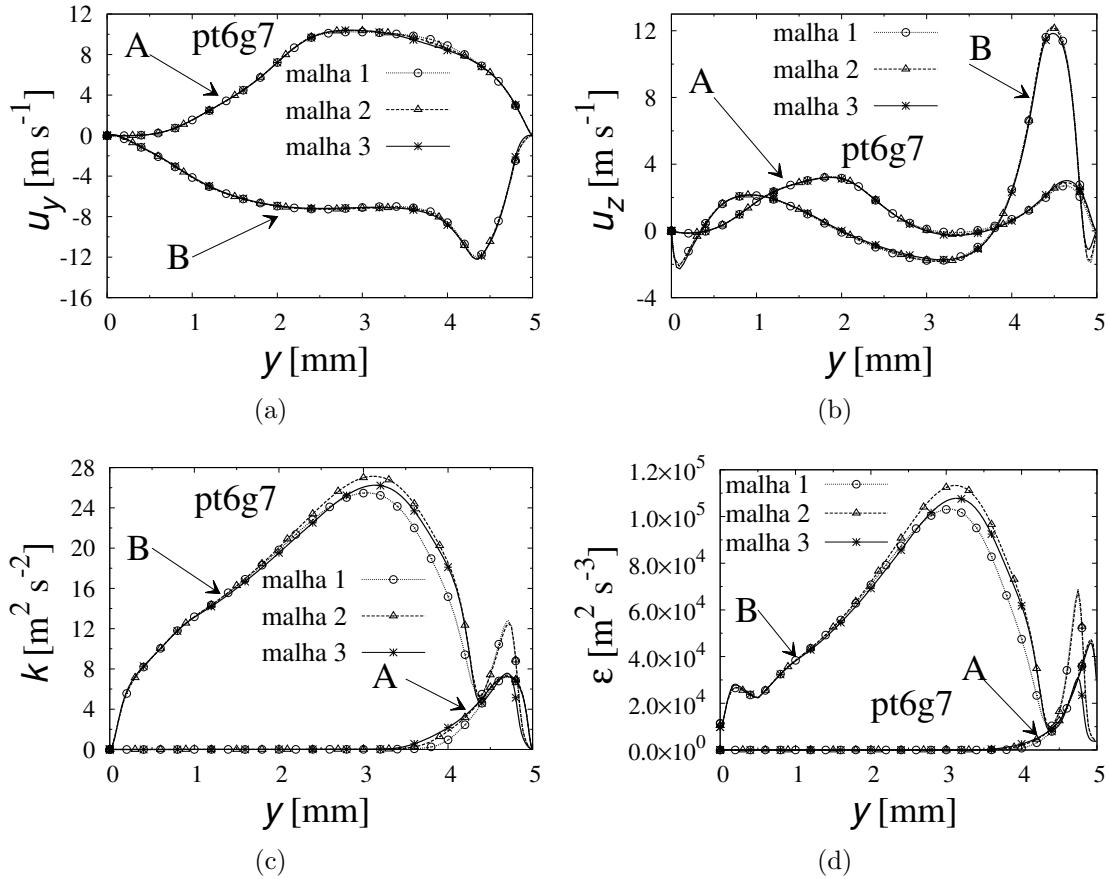
Caso	Malha	$N^o$ células	$y^+$ médio	$y^+$ máximo
pt2g4	1	20k	2,44	7,04
	2	40k	1,86	6,35
	3	80k	1,10	4,51
pt4g13	1	20k	1,82	6,11
	2	40k	1,44	5,28
	3	80k	0,86	3,74
pt6g7	1	20k	1,12	4,84
	2	40k	0,87	4,27
	3	80k	0,54	2,93
pt7g2	1	20k	2,32	7,24
	2	40k	1,84	6,20
	3	80k	1,07	4,24

entre os das malhas 1 e 2.

As Figuras 7.21(a), 7.21(b) e 7.21(c) mostram os perfis de fração volumétrica total de fase dispersa e os diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere, respectivamente, obtidos ao longo da seção D para o caso pt6g7. Percebe-se que existem diferenças apreciáveis entre os perfis, principalmente para a fração de fase. Entretanto, a diferença dos valores médios *bulk* na seção D são aceitáveis, sendo em torno de 0,04%, 2% e 3,5% comparando-se as malhas 2 e 3 para  $r_d$ ,  $d_{32}$  e  $d_{43}$ , respectivamente. Cabe



**Figura 7.19:** Valor médio *bulk* na seção D (outlet) do diâmetro médio de Sauter,  $d_{32}$ , e DeBrouckere,  $d_{43}$ , e da fração volumétrica de fase dispersa,  $r_d$ , ao longo de 2 tempos hidrodinâmicos do canal.



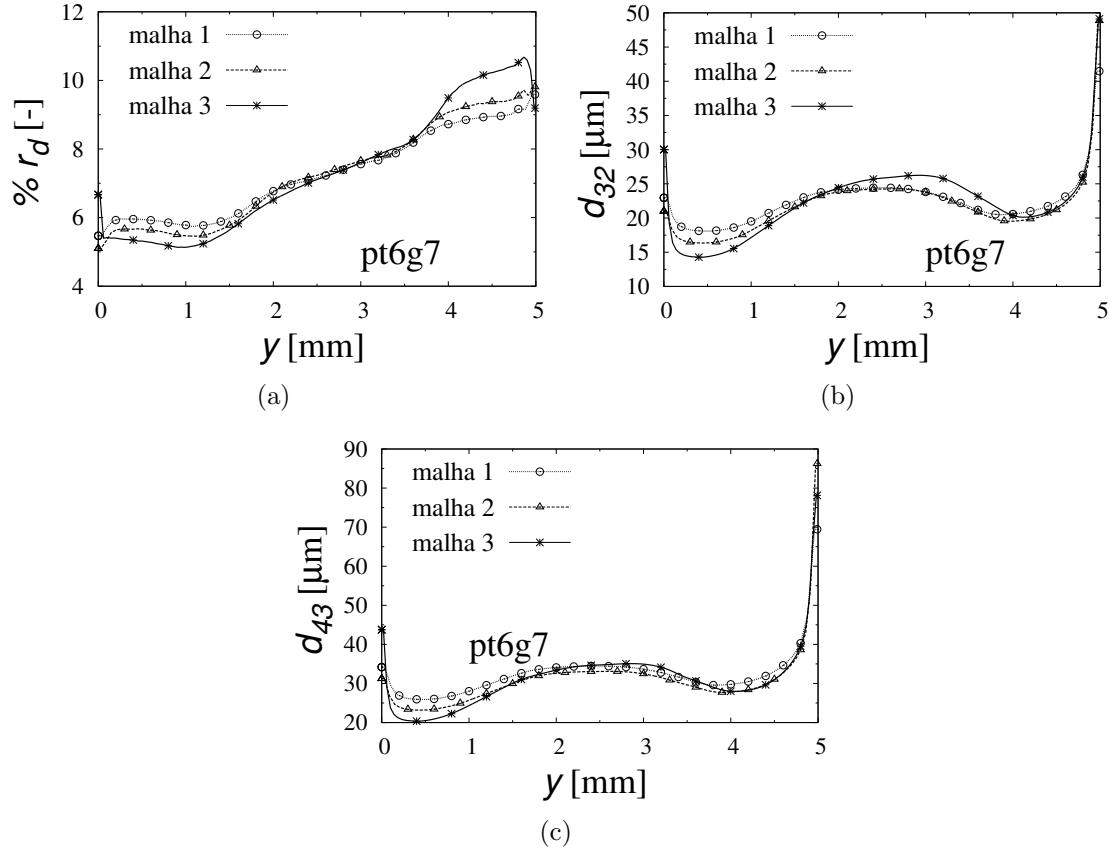
**Figura 7.20:** Componentes da velocidade na direção (a) y, e (b) z, (c) energia cinética turbulenta e (d) taxa de dissipação de energia cinética turbulenta obtidos ao longo das seções A e B.

lembra que, apesar da diferença observada nos perfis da fração volumétrica da fase dispersa entre as diferentes malhas, o seu valor *bulk* é igual entre elas, a menos de erros numéricos, visto que em estado estacionário essa propriedade é necessária para garantir a conservação de massa. De fato, as diferenças de  $r_d$  entre as malhas 1 e 2 em relação a malha 3 estão na ordem de  $10^{-4}$ .

Os resultados mostrados anteriormente correspondem a pior situação. Para os casos pt2g4, pt4g13 e pt7g2 obteve-se resultados mais concordantes entre as diferentes malhas. Por exemplo, na Figura 7.22 é ilustrado os perfis de  $r_d$  e dos diâmetros médios para o caso pt4g13. Os resultados mostram uma boa concordância entre as diferentes malhas. Levando-se em conta os resultados obtidos e o balanço custo-benefício entre acurácia *versus* custo computacional, a malha 2 é a que se mostra mais adequada. Os resultados apresentados daqui em diante foram todos obtidos nessa malha.

### Análise do Escoamento Multifásico Polidisperso

Uma análise do escoamento será apresentada somente para o caso pt6g7. Esse caso foi o que se mostrou mais difícil de convergir. Por outro lado, foi o caso em que o

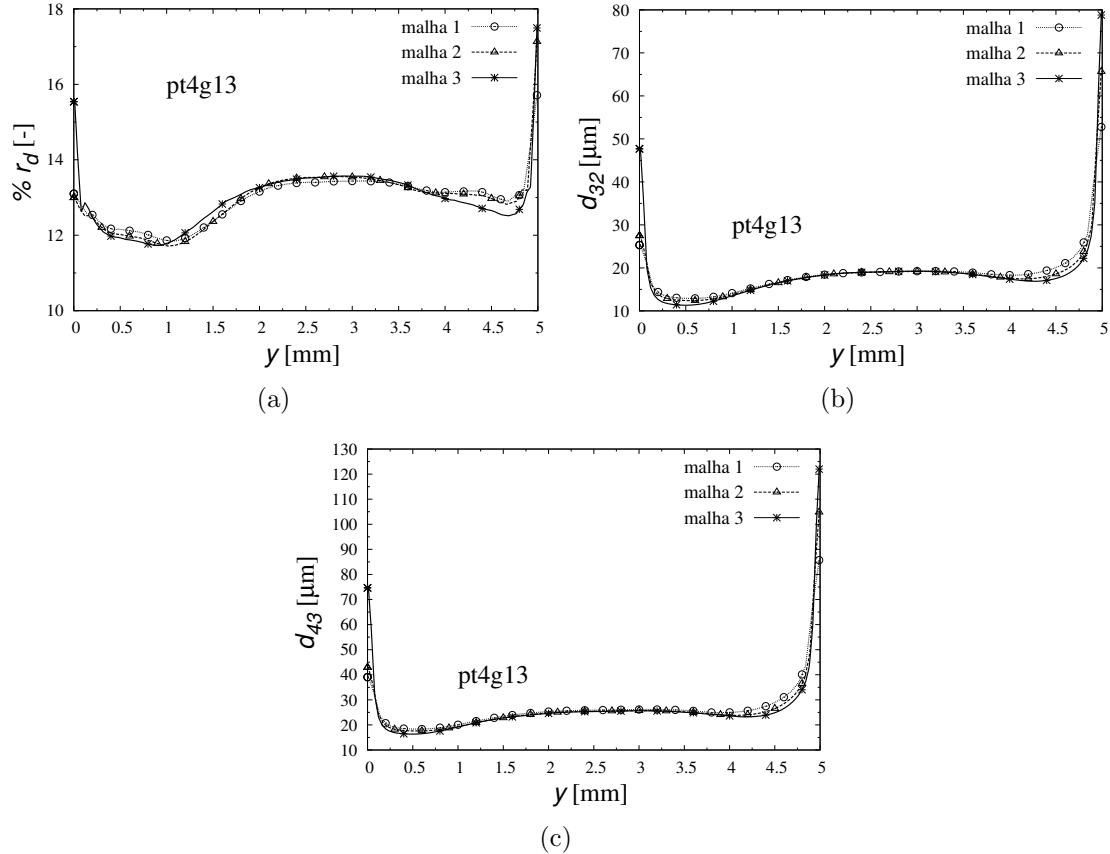


**Figura 7.21:** Fração volumétrica da fase dispersa e diâmetros médios de Sauter e De-Brouckere obtidos ao longo da seção D para o caso pt6g7.

modelo homogêneo obteve os melhores resultados.

A Figura 7.23(a) ilustra o gráfico de contorno para a pressão, mostrando que existe uma grande queda de pressão no acidente. Na Figura 7.23(b) é possível observar as altas velocidades existentes nessa região devido ao estreitamento do canal e, como consequência, são observadas altas taxas de dissipação de energia turbulenta, como mostra a Figura 7.23(c). Na Figura 7.23(d) pode-se observar que a viscosidade cinemática turbulenta atinge valores bastante elevados somente na ou logo após a região do acidente.

As Figuras 7.24(a) e 7.24(b) mostram, respectivamente, as frequências de coalescência e de quebra para a classe de gotas de menor tamanho. Para esta classe de gotas, percebe-se que ocorre coalescência e quebra na região do acidente. Já as Figuras 7.24(c) e 7.24(d) mostram, respectivamente, as frequências de coalescência e de quebra para a classe de gotas de maior tamanho. A coalescência dessa classe de gotas acontece principalmente nas regiões anterior e posterior ao acidente. Esse comportamento é causado pelo modelo de eficiência de coalescência. Isso mostra que apesar das colisões de gotas serem elevadas na região do acidente, elas não são efetivas. Por outro lado, a quebra de gotas acontece principalmente no acidente, onde são observados os valores mais elevados da taxa de dissipação de energia ciné-



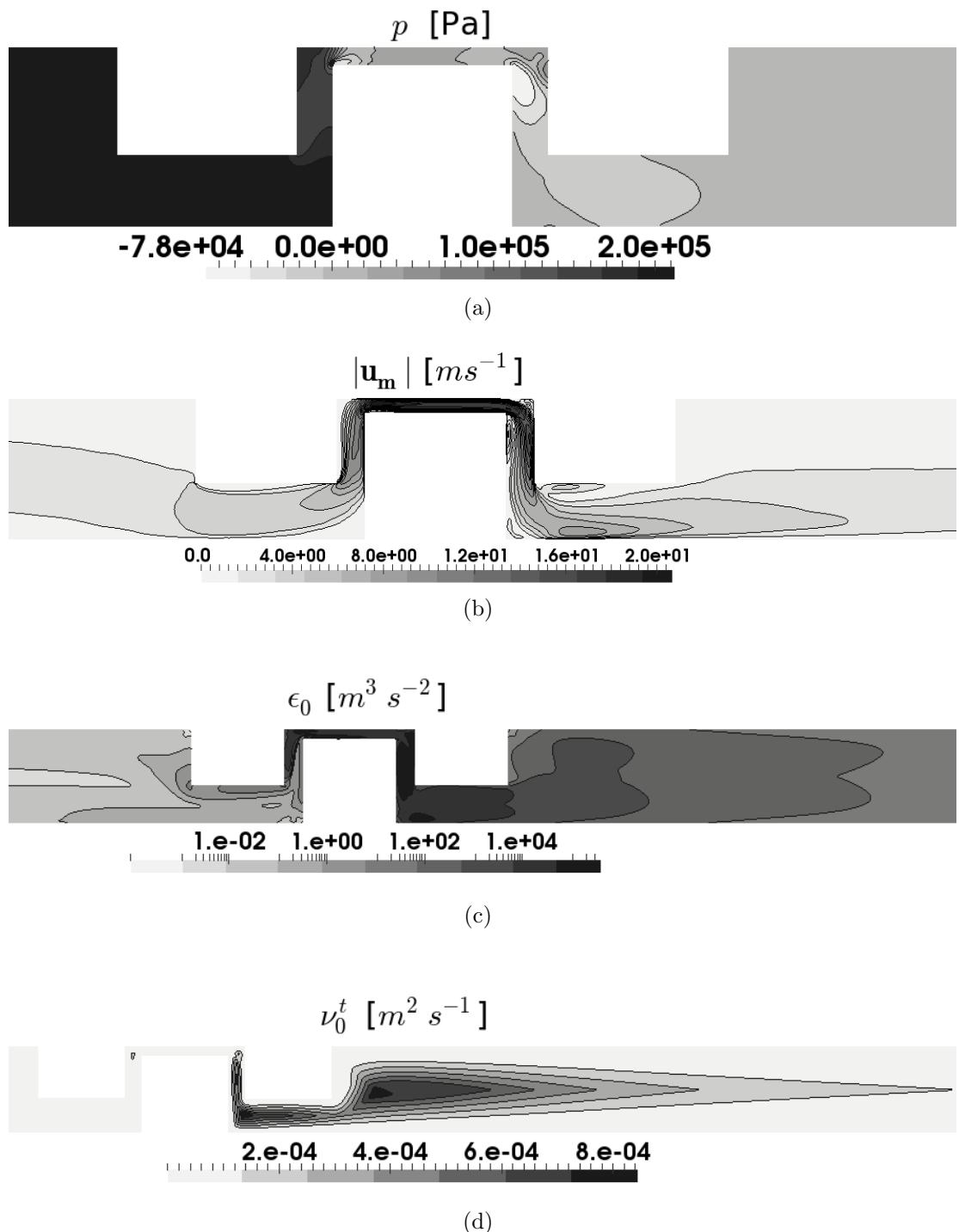
**Figura 7.22:** Fração volumétrica da fase dispersa e diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere obtidos ao longo da seção D para o caso pt4g13.

tica turbulenta. Dessa forma, percebe-se que os fenômenos de quebra e coalescência ocorrem em regiões distintas.

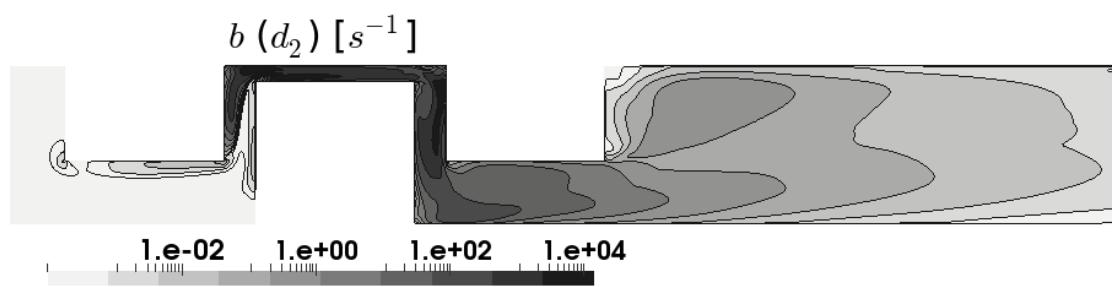
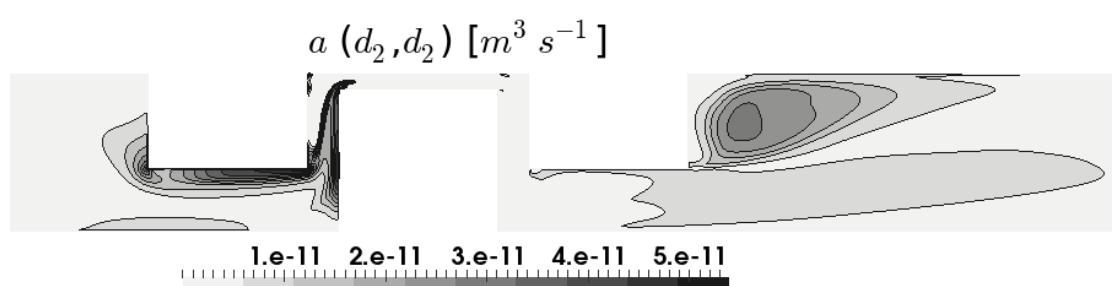
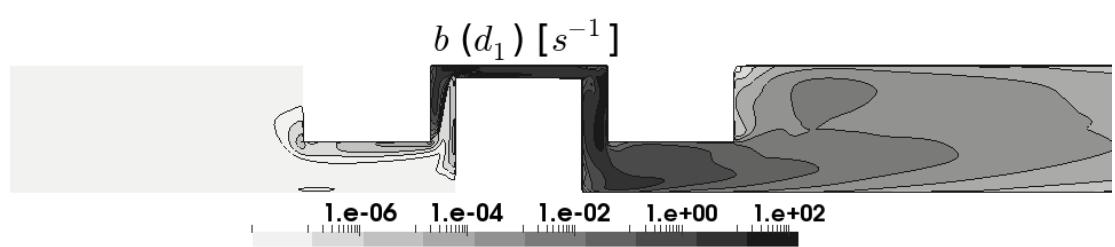
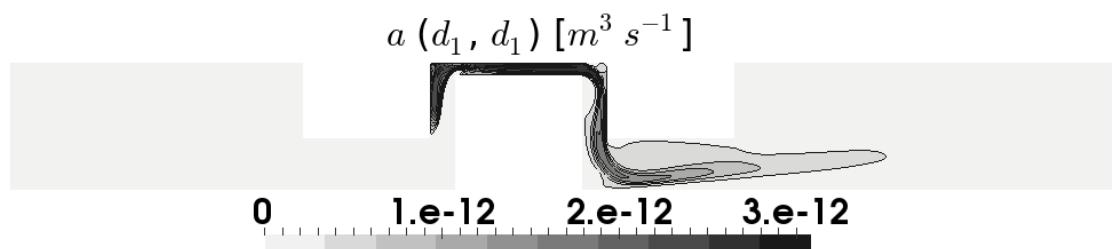
A Figura 7.25 mostra as frações volumétricas e os diâmetros das duas fases consideradas. Como pode ser visto nas Figuras 7.25(a) e 7.25(b), os perfis de fração de fase são bastante heterogêneos na região posterior ao acidente, existindo retenção de gotas em algumas regiões. Analisando os diâmetros de cada fase ilustrados pelas Figuras 7.25(c) e 7.25(d), fica evidente que existe uma intensa quebra de gotas na região do acidente.

Todos os resultados mostrados anteriormente nesta subseção foram obtidos negligenciando-se a dispersão de gotas ( $Sc^{turb} \rightarrow \infty$ ). As Figuras 7.26(a) e 7.26(b) mostram, respectivamente, os perfis de fração volumétrica total de fase dispersa negligenciando e considerando a dispersão de gotas com  $Sc^{turb} = 1$ . Como pode ser visto, a inclusão da dispersão de gotas eliminou a heterogeneidade da fração de fase dispersa na região posterior ao acidente.

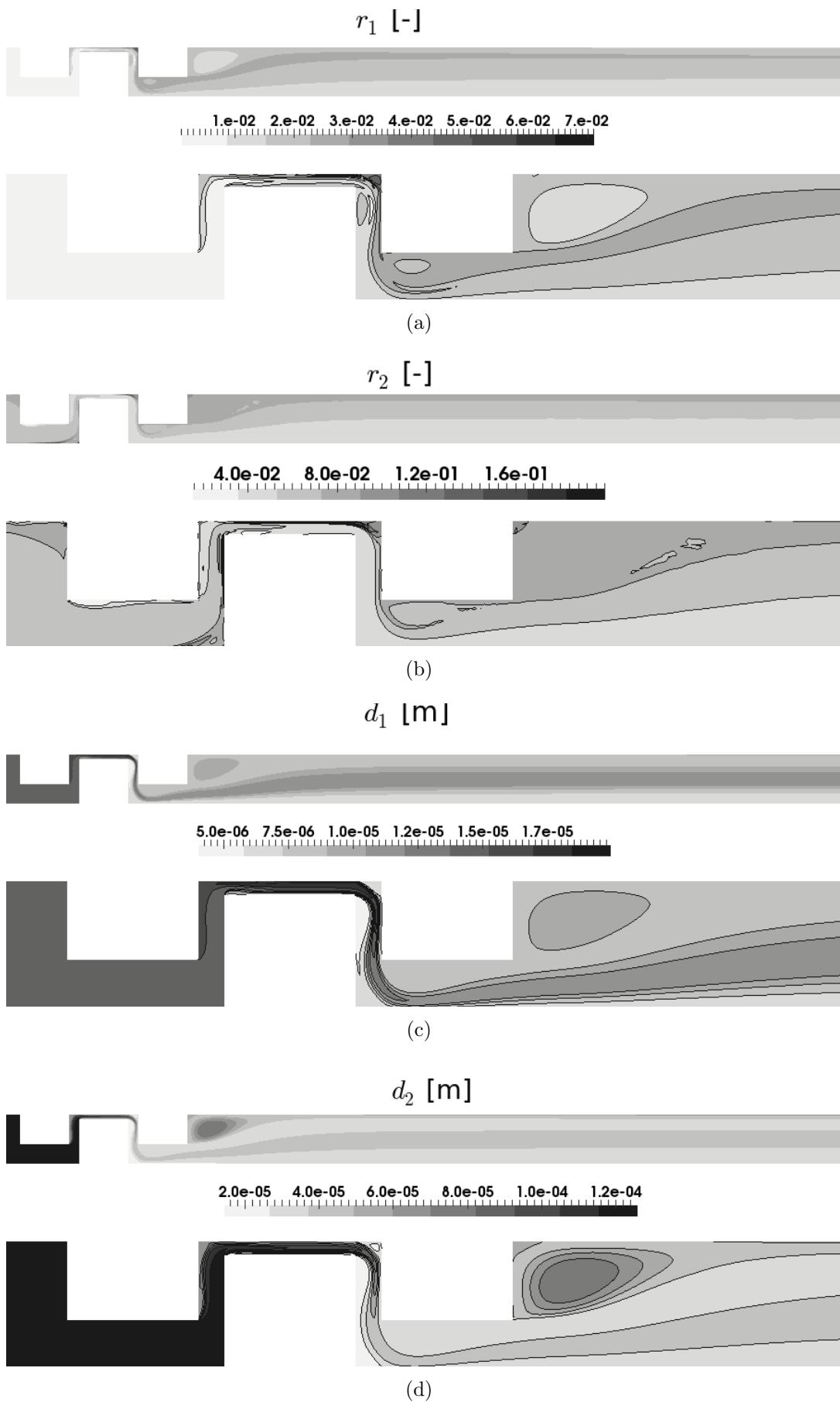
As Figuras 7.27(a) e 7.27(b) mostram, respectivamente, os resultados dos diâmetros médios de Sauter para simulações negligenciando e considerando a dispersão de gotas, enquanto nas Figuras 7.27(c) e 7.27(d) são apresentados esses mesmos resultados para o diâmetro médio de DeBrouckere. Percebe-se que existe um escoamento



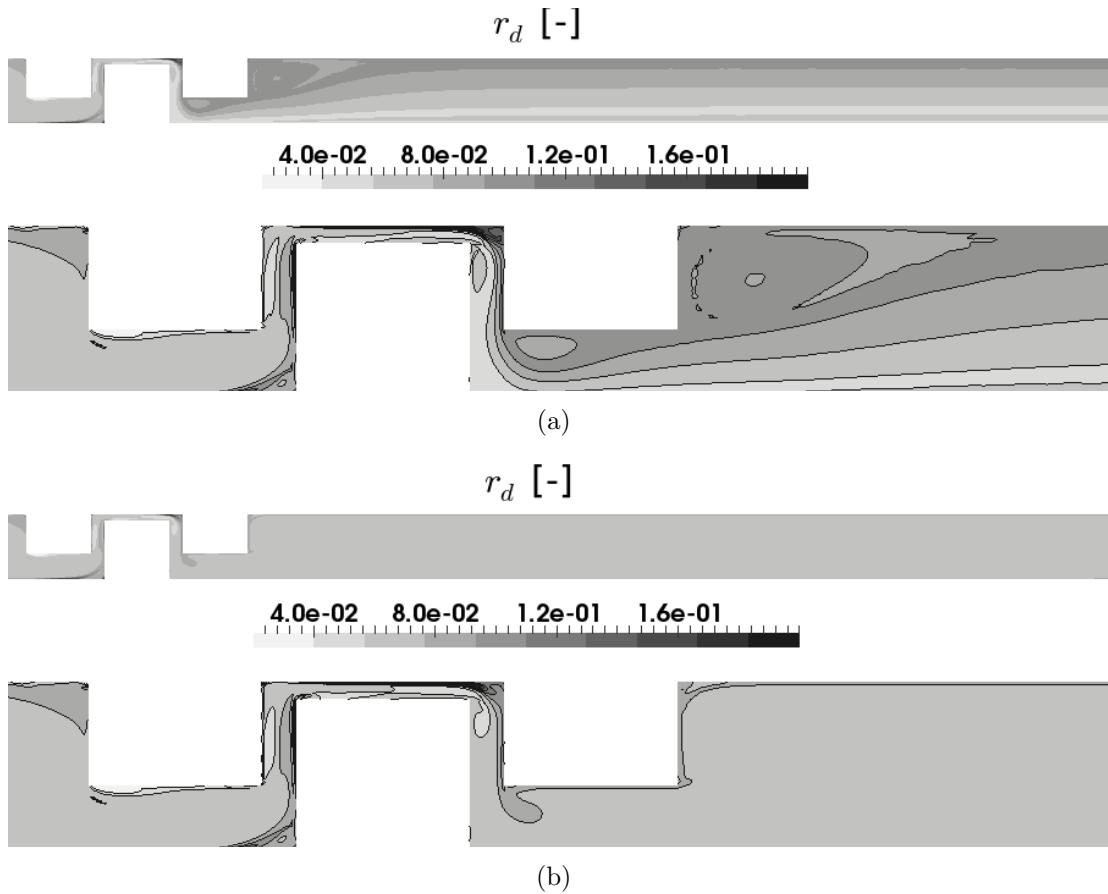
**Figura 7.23:** Campos estacionários para (a)  $p$ , (b)  $\mathbf{u}_m = (1 - r_d)\mathbf{u}_0 + \sum_{\alpha=1}^N r_\alpha \mathbf{u}_\alpha$  (velocidade média da mistura), (c)  $\epsilon_0$  e (d)  $\nu_0^t$  na região rente ao acidente.



**Figura 7.24:** Campos estacionários das frequências de (a) coalescência e (b) quebra para a classe de gotas menores e (c) coalescência e (d) quebra para a classe de gotas maiores.



**Figura 7.25:** Frações volumétricas da fase dispersa das (a) menores e (b) maiores gotas e diâmetros das (c) menores e (d) maiores gotas.



**Figura 7.26:** Fração volumétrica total de fase dispersa das simulações (a) negligenciando e (b) considerando a dispersão de gotas.

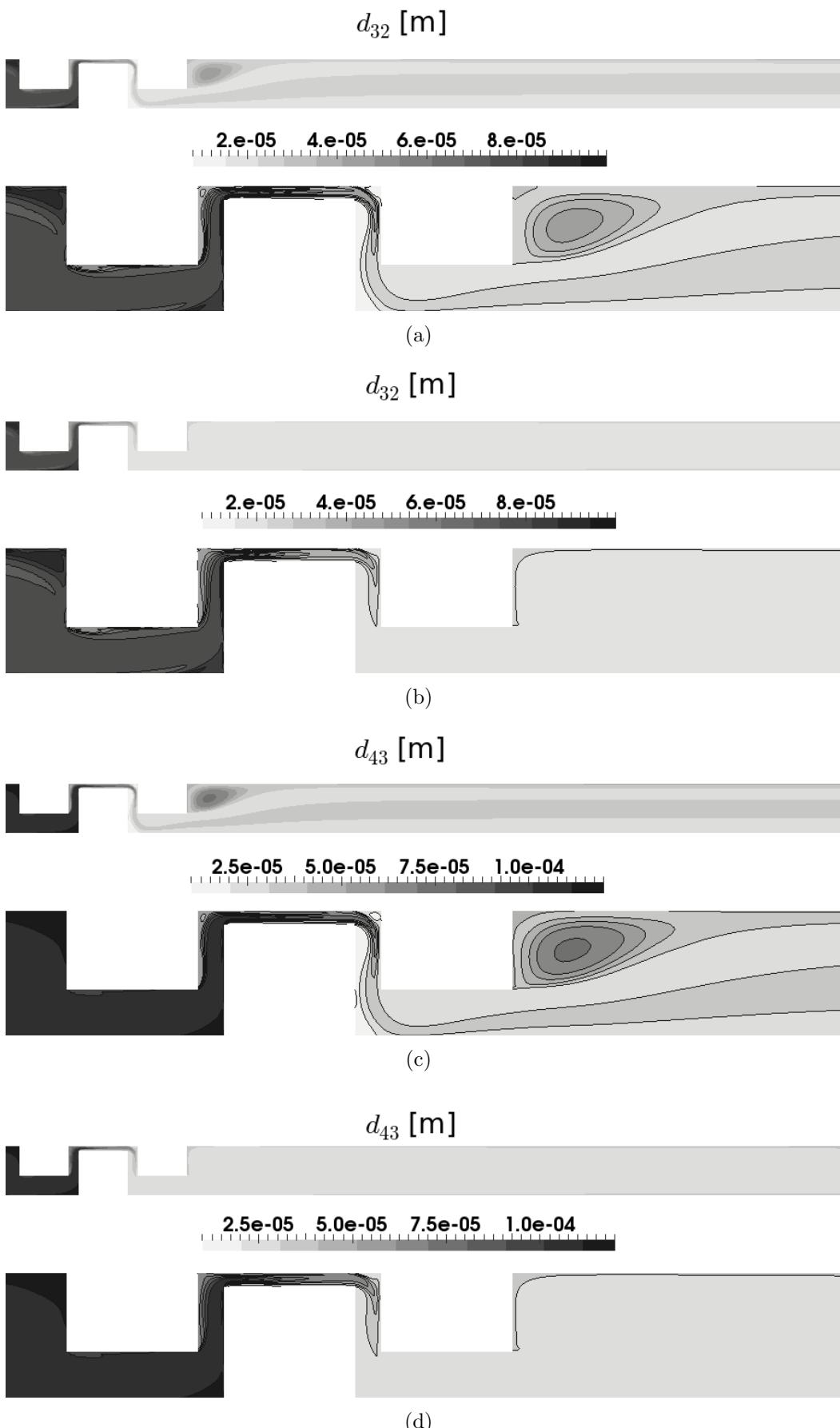
heterogêneo para o caso em que a dispersão de gotas não foi considerada, com gotas maiores escoando no centro do canal.

Os resultados também mostram que no caso em que foi considerada a dispersão de gotas existe um escoamento praticamente homogêneo dos diâmetros médios após o acidente. É possível se observar também gotas com diâmetros elevados no vórtice formado logo após o acidente. Isto acontece porque a coalescência é maior nessa região, como foi mostrado anteriormente na Figura 7.24(c).

### Comparação com Dados Experimentais

A Tabela 7.23 mostra os diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere experimentais e seus valores *bulk* na saída do canal preditos nas simulações negligenciando e considerando a dispersão de gotas. Como pode ser visto, todos os valores de diâmetros médios foram superestimados.

Contudo, a dispersão de gotas provocou uma diminuição nos valores dos diâmetros médios, melhorando a concordância com os dados experimentais. Isso ocorre porque a coalescência diminui, devido à sua dependência quadrática em relação à distribuição numérica de gotas,  $f$ .



**Figura 7.27:** Perfis dos diâmetros médios de Sauter para as simulações (a) negligenciando e (b) considerando a dispersão de gotas e dos diâmetros médios de DeBrouckere (c) negligenciando e (d) considerando a dispersão de gotas.

**Tabela 7.23:** Diâmetros médios, em  $\mu\text{m}$ , experimentais e seus valores *bulk* simulados.

Caso	Experimental				Simulado - saída do canal			
	Entrada		Saída		Sim. $Sc^t \rightarrow \infty$	Sim. $Sc^t = 1.0$	$d_{32}$	$d_{43}$
	$d_{32}$	$d_{43}$	$d_{32}$	$d_{43}$	$d_{32}$	$d_{43}$	$d_{32}$	$d_{43}$
pt2g4	48.3	108.5	10.2	18.0	13.4	18.5	12.5	18.0
pt4g13	64.2	117.9	10.4	17.5	17.4	23.8	16.1	22.8
pt6g7	74.6	139.5	20.5	28.0	21.6	30.0	20.2	28.8
pt7g2	16.4	23.4	6.98	10.7	9.17	12.4	8.62	12.1

Apesar dos diâmetros médios terem sido superestimados, os erros em suas predições foram aceitáveis quando comparados com a mudança de seus valores provocada pelo acidente. Esse desvio relativo foi calculado, para uma variável genérica  $y$ , como sendo:

$$\%E_{in,out}(y) = \frac{|y_{out}^{sim} - y_{out}^{exp}|}{|y_{in}^{exp} - y_{out}^{exp}|} \cdot 100\% \quad (7.24)$$

onde os sobrescritos “sim” e “exp” correspondem, respectivamente, ao valor simulado e experimental e os subscritos “in” e “out” correspondem aos dados obtidos na entrada e na saída do canal, respectivamente.

Os desvios para o caso pt6g7 foram por volta de 0.5% e 0.7% para os diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere, respectivamente. Para o caso pt4g13 os desvios foram de aproximadamente 10% e 5% para os diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere, respectivamente. Estes desvios são comparáveis aos do caso homogêneo usado no ajuste dos parâmetros dos modelos das frequências de quebra e coalescência de gotas. Por exemplo, fazendo-se esta mesma análise para o caso homogêneo, usando o DQMoM-FC com  $N = 2$ , obtém-se desvios de 0.3% e 0.8% para os diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere, respectivamente, para o caso pt6g7. Para o caso pt4g13 os desvios são de 8% e 2% para o  $d_{32}$  e  $d_{43}$ , respectivamente.

### Caso Bivariado

Considerou-se uma das variáveis internas sendo o volume das gotas,  $v$ , e outra a massa de um dos dois componentes que a compõem. Mais especificamente, é a massa de sal,  $m$ , dissolvida nas gotas de água da emulsão.

Devido à inexistência de dados experimentais, a simulação bivariada foi realizada para um caso hipotético usando a condição experimental do caso pt6g7.

A área seccional da entrada (*inlet*) foi dividida em duas seções. Numa com 40% da área total de entrada as gotas de água entram no domínio com concentração adimensional de sal unitária e em outra, com o restante da área, as gotas de água entram sem sal, isto é, com concentração nula.

A distribuição de tamanhos de gotas na entrada foi a mesma usada para o caso monovariado. Somente momentos puros (independentes) foram usados no DQMoM-

**Tabela 7.24:** Momentos e fatores de ponderação usados. O primeiro índice do momento está relacionado à variável volume,  $v$ , e o segundo à variável massa de sal,  $m$ , das gotas.

$\mu_{00}$	$\mu_{1/3\ 0}$	$\mu_{2/3\ 0}$	$\mu_{10}$	$\mu_{0\ 1/3}$	$\mu_{0\ 2/3}$	$\mu_{01}$
$10^2$	$10^2$	$10^2$	$10^2$	$10^1$	$10^0$	$10^2$

FC [211]. Portanto, a quadratura de dois pontos para o caso bivariado foi determinado usando o seguinte conjunto de momentos  $\{\mu_{00}, \mu_{1/3\ 0}, \mu_{2/3\ 0}, \mu_{10}, \mu_{0\ 1/3}, \mu_{0\ 2/3}, \mu_{01}\}$ .

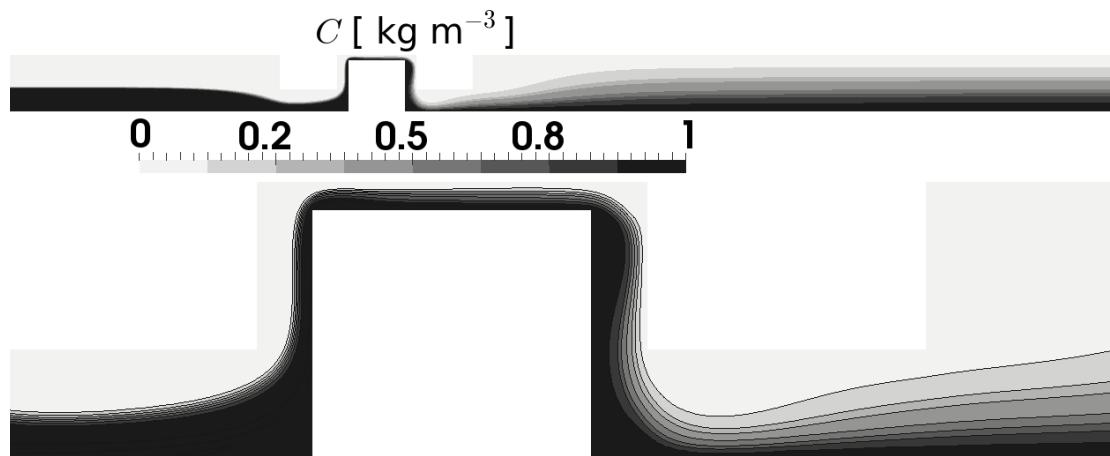
Para este caso bivariado,  $(2 + 1)N = 6$  momentos são necessários para fechar o sistema de equações do DQMoM-FC. Desse modo, existe um momento extra no conjunto de momentos usado. Isso não é um problema, considerando que o método SVD foi usado para resolver o sistema linear de equações do DQMoM-FC. O SVD exclui os momentos que possuem menor importância ou fazem a matriz ficar singular. Obviamente, alguns momentos como  $\mu_{00}$ ,  $\mu_{01}$  e  $\mu_{10}$  não podem ser desprezados, pois esses momentos estão relacionados à conservação de número de gotas e às massas de água e sal das gotas. Devido a isso, usou-se fatores de ponderação para prevenir que a SVD removesse alguns desses momentos. Mais detalhes podem ser vistos na Seção 6.8 e Apêndice D. Os fatores de ponderação usados para cada um dos momentos estão definidos na Tabela 7.24. Como não se tem conhecimento de uma regra heurística para obter os fatores de ponderação, os valores apresentados foram obtidos priorizando os momentos de baixa ordem e os momentos puros da propriedade volume das gotas.

Naturalmente, os resultados para tamanhos de gotas são idênticos àqueles obtidos no caso monovariado, visto que a massa de sal não afeta as frequências de quebra e coalescência de gotas, conforme a modelagem dada na Seção 6.6. Dessa forma, somente os resultados da concentração de sal dissolvida nas gotas de água serão discutidos.

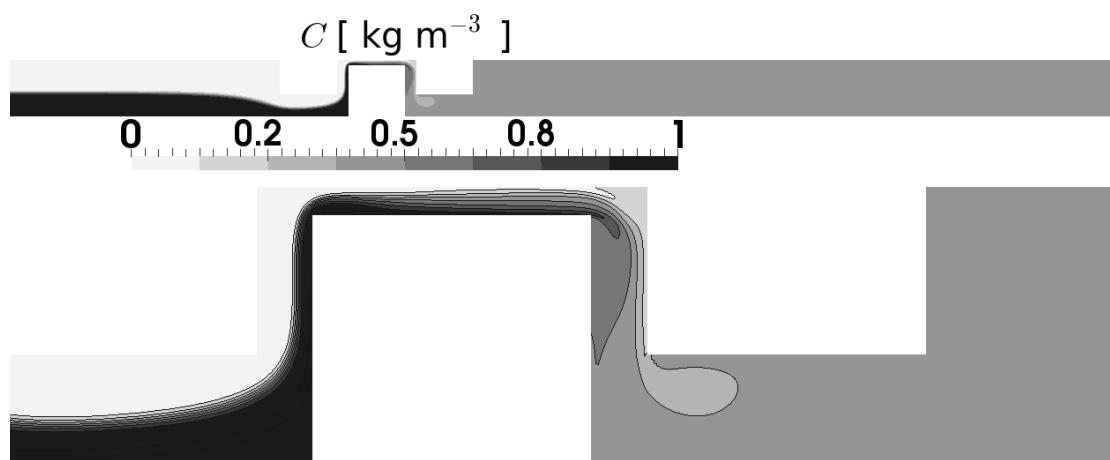
As simulações foram feitas usando a malha 2, negligenciando e considerando a dispersão de gotas. As Figuras 7.28(a) e 7.28(b) mostram a concentração,  $C$ , obtidas no estado estacionário. A concentração foi calculada por:

$$C = \frac{\sum_{\alpha=1}^N m_\alpha w_\alpha}{\sum_{\alpha=1}^N v_\alpha w_\alpha} \quad (7.25)$$

Como pode ser visto, não existe uma mistura das duas correntes na região anterior do acidente devido à natureza laminar do escoamento. Como já havia sido observado no caso monovariado, a simulação que negligencia a dispersão de gotas não gera uma mistura homogênea na seção posterior ao acidente. Por outro lado, as simulações que consideram a dispersão de gotas produzem uma boa mistura dentro e após o acidente, onde o escoamento é turbulento. Mesmo sendo um caso hipotético,



(a)



(b)

**Figura 7.28:** Resultados para concentração mássica (a) negligenciando e (b) considerando a dispersão de gotas.

conclui-se que para este caso, a dispersão de gotas é essencial para o modelo ser capaz de simular uma misturação suficiente para homogeneizar a concentração de sal na região posterior ao acidente.

### 7.3.6 Conclusões - Duto com Acidente

O solver `multiPhaseMultiVariatePbeFoam` foi testado em diferentes casos no qual emulsão de água em óleo escoa por um duto contendo um acidente.

Simulações de balanço populacional homogêneo (0-D) mostraram que o DQMoM-FC usando dois pontos de quadratura e momentos fracionários ( $m_p = 3$ ) consegue resultados similares aos obtidos com o MoC.

Simulações de balanço populacional heterogêneo mostraram o problema do DQ-MoM referente à conservação de momentos. O mesmo caso foi simulado com o DQMoM-FC e não se observaram mais problemas com conservação de momentos,

indicando que o DQMoM-FC é que deve ser usado em casos de balanço populacional heterogêneo.

Os modelos de quebra e coalescência de gotas propostos por MITRE *et al.* [2] juntamente com o modelo de turbulência de dupla-camada conseguiram uma boa representação do escoamento polidisperso. Os valores *bulk* dos diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere preditos pelas simulações PB-CFD mostraram uma boa concordância com os dados experimentais, considerando as incertezas existentes na estimação dos parâmetros dos modelos de quebra e coalescência.

Foram feitas simulações negligenciando e considerando a dispersão de gotas. Nas simulações que foi negligenciado o efeito de dispersão de gotas obteve-se um escoamento não-homogêneo na seção posterior ao acidente, com gotas maiores escoando na região central do duto. Para as simulações considerando a dispersão de gotas, observou-se um escoamento homogêneo na região posterior ao acidente e uma pequena diminuição nos valores dos diâmetros médios, aumentando a concordância com os dados experimentais. Na simulação do caso bivariado a dispersão de partículas foi fundamental para promover a mistura das correntes de água doce e salgada pela quebra e coalescência.

O uso do SVD mostrou ser de grande valia em simulações de balanço populacional heterogêneo, principalmente para o caso bivariado.

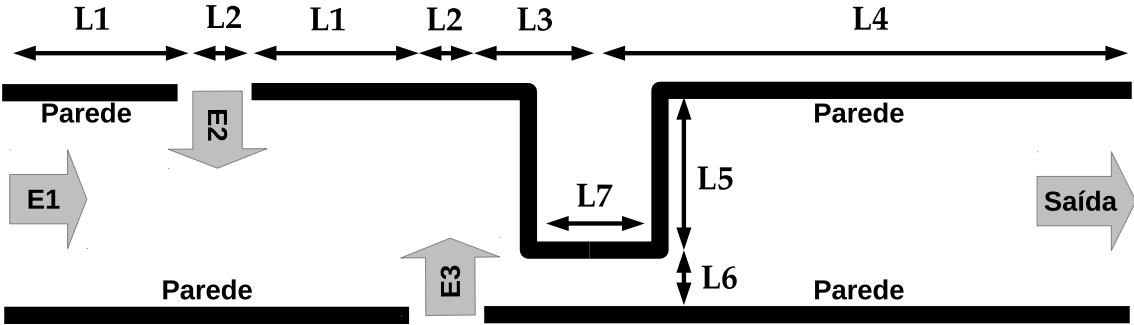
## 7.4 Simulação PB-CFD: Caso Multivariado

O caso mostrado nesta seção é similar ao caso da seção anterior, ou seja, também corresponde a um escoamento de emulsão de água em óleo através de um sistema com perda de carga localizada. Contudo, foi considerado balanço populacional heterogêneo trivariado com mais de uma variável interna afetando a interação entre gotas.

### 7.4.1 Definição do Caso e Procedimento Numérico

Foi considerado uma das variáveis internas sendo o volume das gotas,  $v$ , a outra sendo a massa de sal,  $m_s$ , dissolvida nas gotas de água da emulsão e, por fim, a massa de um agente que favorece a quebra de gotas,  $m_r$ , também dissolvido nas gotas de água da emulsão e referenciado como componente  $r$ .

Neste caso a turbulência no escoamento é gerada principalmente pelo acidente e novamente uma geometria 2D foi considerada e usou-se o modelo de turbulência de dupla-camada apresentado na Seção 6.7. Na Figura 7.29 é mostrada uma vista esquemática detalhando as dimensões da geometria. Foi assumido transferência integral de flutuação turbulenta da fase contínua para a fase dispersa ( $C_t = 1$ ). O



**Figura 7.29:** Vista esquemática com detalhes das dimensões da geometria. Os parâmetros  $L_1$ ,  $L_2$ ,  $L_3$ ,  $L_4$ ,  $L_5$ ,  $L_6$  e  $L_7$  correspondem à 1, 0,04, 0,5, 2, 0,15, 0,05 e 0,2 metro (m), respectivamente.  $E_1$ ,  $E_2$  e  $E_3$  correspondem às entradas (*inlet*).

**Tabela 7.25:** Valores de velocidades nas entradas e parâmetros usados no cálculo das condições de entrada para as variáveis do modelo de turbulência.

Entrada	$ \mathbf{u} $ [m/s]	$I$	$d_h$ [m]
$E_1$	4	1%	0,2
$E_2$	2	5%	0,04
$E_3$	3	5%	0,04

coeficiente de arrasto foi calculado usando o modelo de SCHILLER e NAUMANN [37] e os coeficientes de sustentação e massa virtual foram considerados constantes, onde  $C_{L,\alpha} = C_{MV,\alpha} = 0,5$ .

Na Figura 7.29, em  $E_1$  as gotas de água entram no domínio com concentração de sal unitária e concentração do componente  $r$  nula, em  $E_2$  as gotas de água entram no domínio com concentração de sal nula e concentração do componente  $r$  unitária e em  $E_3$  as gotas de água entram no domínio com concentração de sal e componente  $r$  nulas.

As características e propriedades físicas da emulsão correspondem às mesmas do caso pt6g7 apresentado anteriormente e a configuração numérica do caso foi a mesma especificada na Seção 7.3.2. Por fim, na Tabela 7.25 são dadas as especificações do escoamento, como os valores de velocidades e os parâmetros usados no cálculo das condições de entrada para as variáveis do modelo de turbulência.

A distribuição de tamanhos de gotas usada nas entradas  $E_1$ ,  $E_2$  e  $E_3$  corresponde à mostrada pela Figura 7.13(a) e somente momentos puros foram utilizados no DQMoM-FC [211]. Usou-se o seguinte conjunto de momentos  $\{\mu_{000}, \mu_{1/300}, \mu_{2/300}, \mu_{100}, \mu_{01/30}, \mu_{010}, \mu_{001/3}, \mu_{001}\}$ , onde o primeiro índice do momento está relacionado à variável volume,  $v$ , o segundo à variável massa de sal,  $m_s$ , e o terceiro à variável massa do componente  $r$ ,  $m_r$ , das gotas.

O modelo usado para a eficiência de coalescência foi o de interface deformável e parcialmente móvel [2]. Para a frequência de quebra dois casos foram considerados: (i) Caso 1 - o modelo dado pela Equação 6.57 e (ii) Caso 2 - uma modificação desse modelo incluindo o efeito de um componente  $r$  que atua facilitando o processo de

quebra de gotas. Nesse caso hipotético, a frequência de quebra é dada por:

$$b(d_\alpha) = \begin{cases} 1.24C_b\sqrt{\epsilon_0/\nu_0} Ca_\alpha^{2.2} \left(\frac{d_\alpha}{2\eta}\right)^{4/5} \left(10^3 \frac{m_{r,\alpha}}{v_\alpha} \frac{\tilde{v}}{\tilde{m}_r}\right), & \text{para } Ca_\alpha > Ca_{crit} \\ 0, & \text{para } Ca_\alpha \leq Ca_{crit} \end{cases} \quad (7.26)$$

ou seja, a frequência de quebra depende da concentração do componente  $r$  nas gotas de emulsão, podendo ser mil vezes maior, em relação ao modelo dado pela Equação 6.57, em locais onde a concentração do componente  $r$  é próxima a 1. Tem-se também que  $\tilde{v} = \mu_{100}/\mu_{000}$  e  $\tilde{m}_r = \mu_{001}/\mu_{000}$  com  $\mu_{100} = 0,0717$  e  $\mu_{001} = 0,0717 \text{ kg m}^{-3}$ .

Os parâmetros usados nos modelos de frequência de coalescência e quebra de gotas foram os dados na Tabela 7.14. Também foi considerado a dispersão de gotas usando  $Sc^{turb} = 1$ .

#### 7.4.2 DQMoM-FC Multivariado

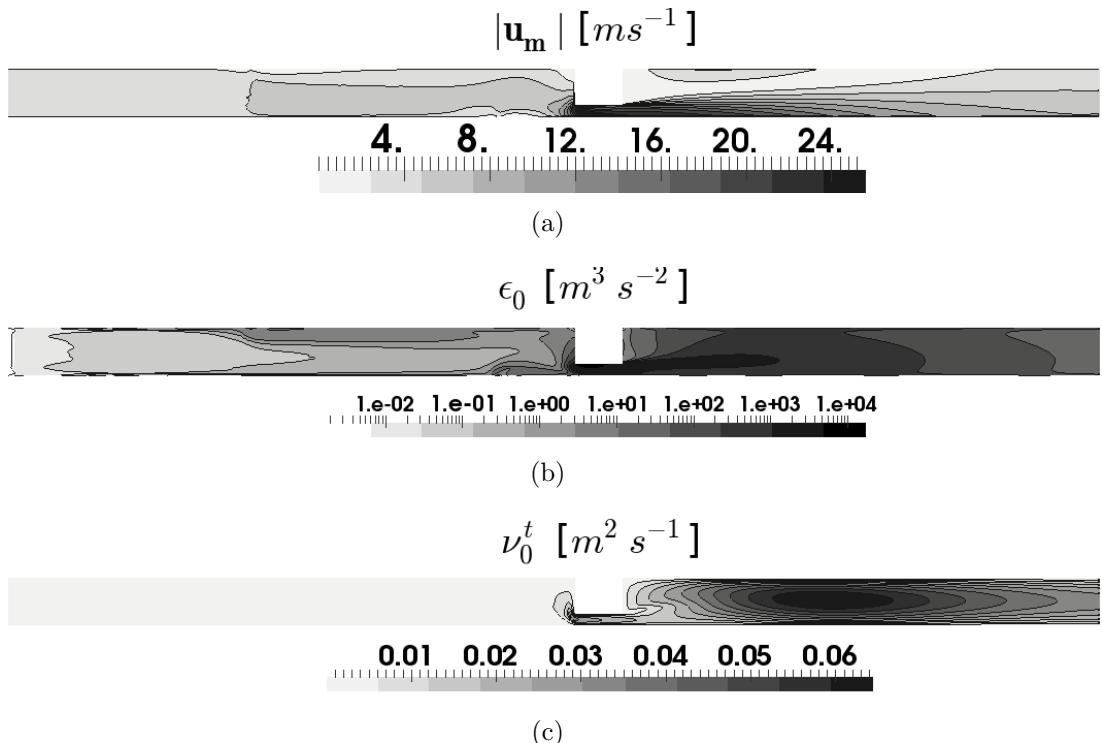
A malha utilizada possui 14k células hexaédricas. O  $y^+$  médio e máximo estão em torno de 25 e 80, respectivamente. Devido a isso, usou-se nas paredes a condição  $\mathbf{n} \cdot \nabla k_0 = 0$  para a energia cinética turbulenta e a função de parede dada pela Equação 6.72 para a dissipação de energia cinética turbulenta.

Na Figura 7.30 são ilustrados os perfis e algumas variáveis do escoamento para o Caso 1. A Figura 7.30(a) mostra o perfil da magnitude da velocidade de mistura, a Figura 7.30(b) mostra o perfil da taxa de dissipação de energia turbulenta e a Figura 7.30(c) mostra o perfil da viscosidade cinemática turbulenta. Como pode ser observado nesta última figura, valores elevados de viscosidade turbulenta são observados na região posterior ao acidente.

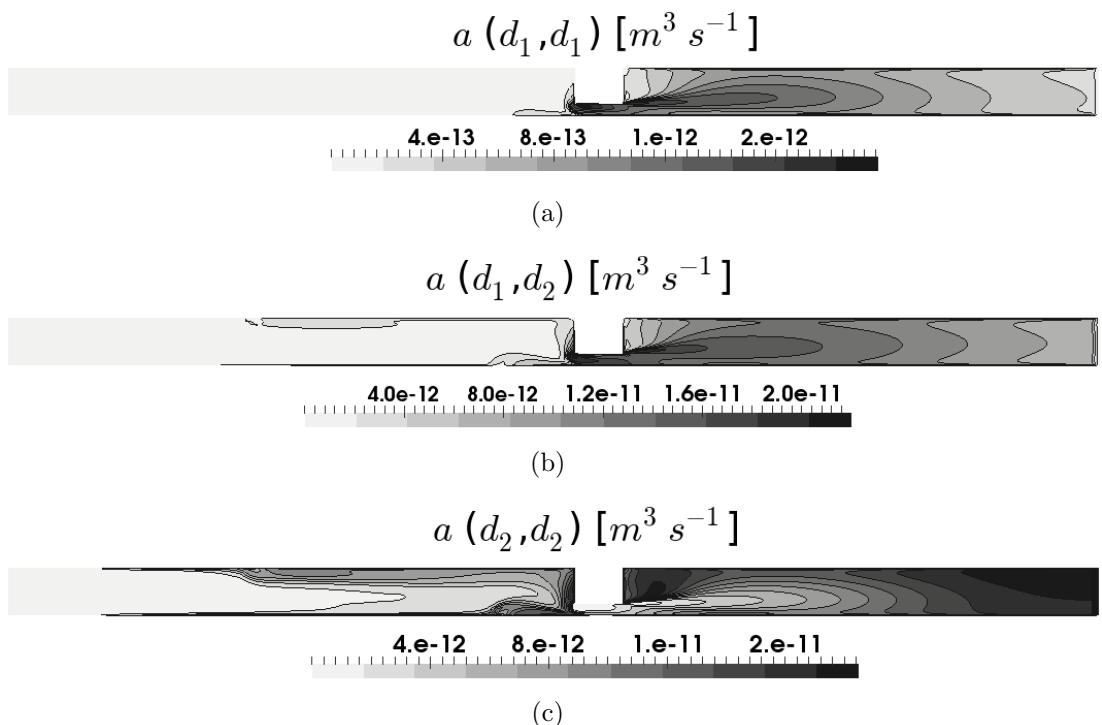
Os perfis das frequências de coalescência para as diferentes classes de gotas estão ilustrados na Figura 7.31 para o Caso 1. Como pode ser observado, as regiões mais propícias para as gotas coalescerem ocorrem no acidente e na seção posterior ao mesmo. Percebe-se também que existe alguma coalescência provocada pelas duas entradas de fluido normais ao escoamento principal. Essas duas entradas geram turbulência nesses locais, como pode ser melhor visto pela Figura 7.30(b).

As concentrações de sal,  $C_s$ , e do componente  $r$ ,  $C_r$ , são mostradas nas Figuras 7.32(a) e 7.32(b), respectivamente, para o Caso 2. Como esperado, observa-se uma diminuição da concentração de sal na região após o acidente, devido à mistura da corrente de água salgada com as correntes de água doce, e um aumento na concentração do componente  $r$ .

Nas Figuras 7.33(a) e 7.33(b) são mostrados os perfis das frequências de quebra para as classes de gotas menores e maiores, respectivamente, para o Caso 1. As Figuras 7.34(a) e 7.34(b) mostram esta mesma análise para o Caso 2.



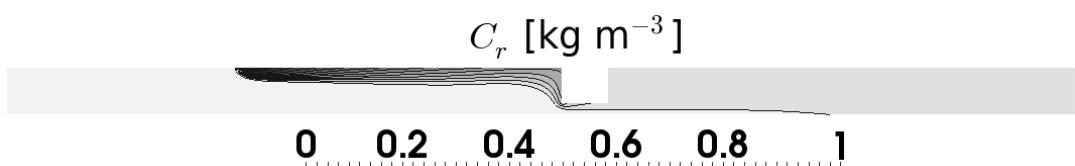
**Figura 7.30:** Campos estacionários para (a)  $\mathbf{u}_m = (1 - r_d)\mathbf{u}_0 + \sum_{\alpha=1}^N r_\alpha \mathbf{u}_\alpha$  (velocidade média da mistura), (b) taxa de dissipação de energia turbulenta e (c) viscosidade turbulenta.



**Figura 7.31:** Campos estacionários do Caso 1 para frequências das gotas (a) menores com menores, (b) menores com maiores e (c) maiores com maiores coalescerem.

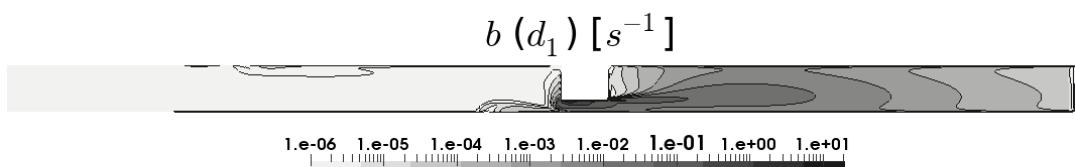


(a)

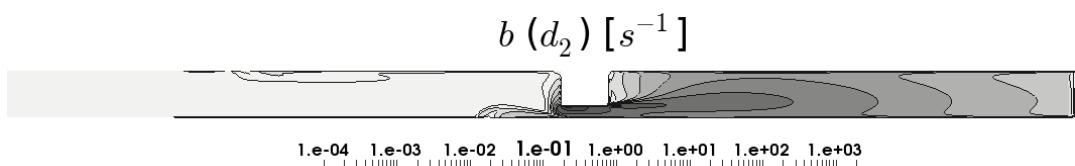


(b)

**Figura 7.32:** Campos estacionários das concentrações (a) de sal e (b) do componente  $r$  para o Caso 2.

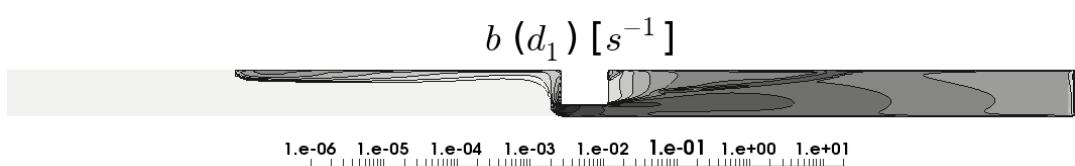


(a)

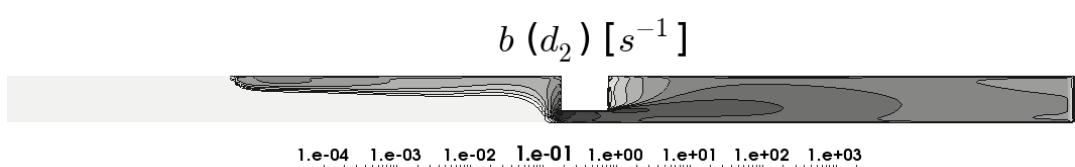


(b)

**Figura 7.33:** Campos estacionários para o Caso 1 das frequências das gotas (a) menores e (b) maiores quebrarem.



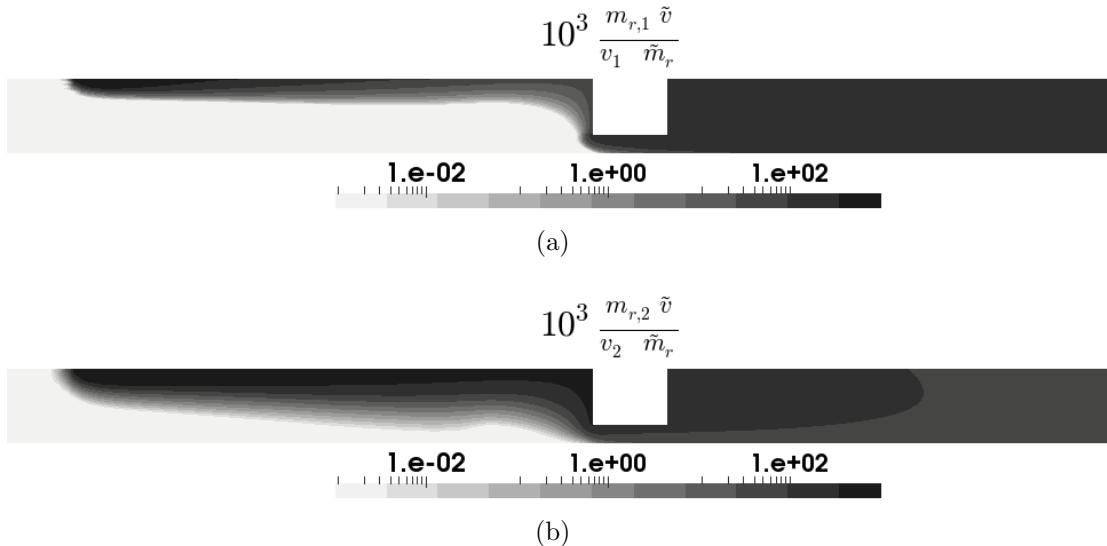
(a)



(b)

**Figura 7.34:** Campos estacionários para o Caso 2 das frequências das gotas (a) menores e (b) maiores quebrarem.

Como pode ser visto nessas figuras, houve um aumento localizado significativo da frequência de quebra no Caso 2 devido à sua dependência com a concentração do componente  $r$ , como pode ser visto pela Figura 7.35, que mostra os valores do fator multiplicativo  $10^3 \frac{m_{r,\alpha}}{v_\alpha} \frac{\tilde{v}}{\tilde{m}_r}$ .



**Figura 7.35:** Campos estacionários para o Caso 2 do fator multiplicativo da frequência de quebra devido a sua dependência com a concentração do componente  $r$  para a classe de gotas (a) menores e (b) maiores.

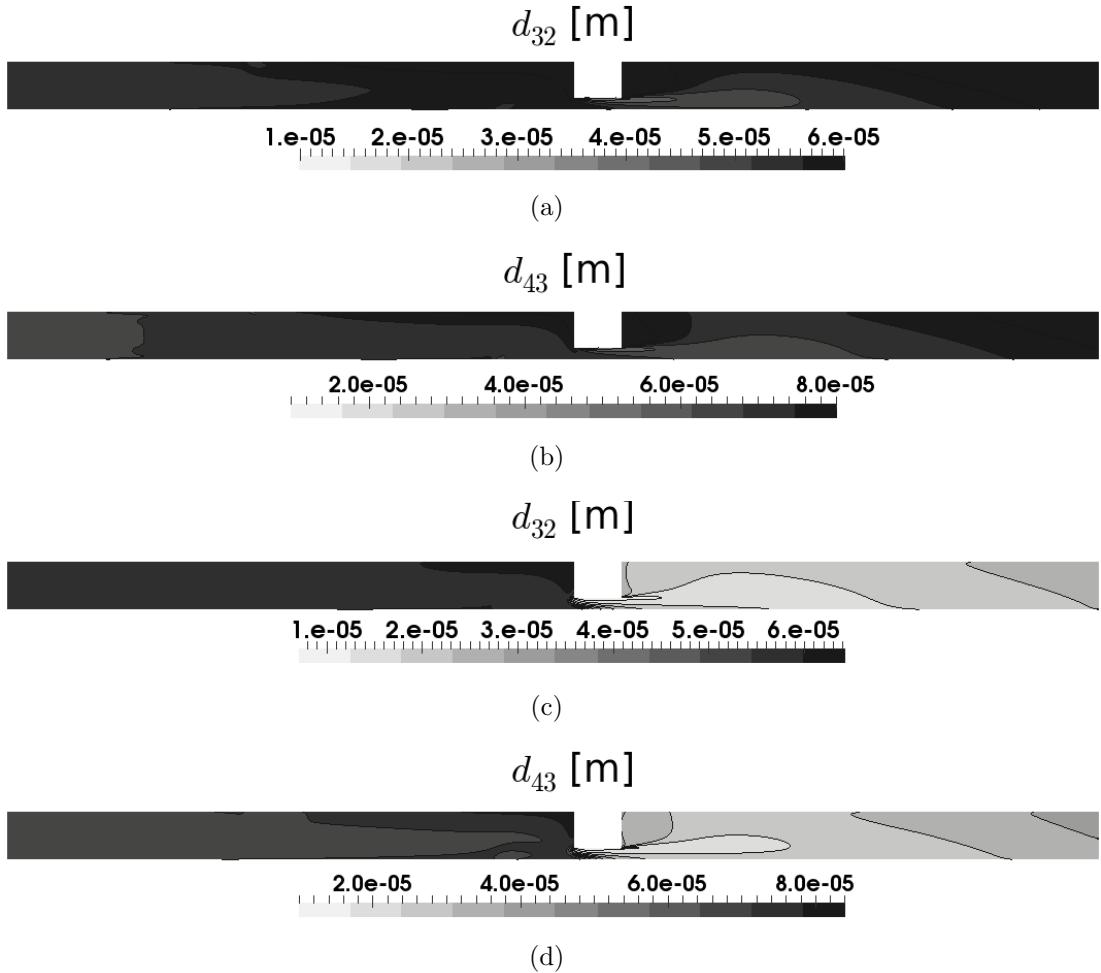
Esse efeito do aumento da frequência de quebra pode ser visto nos diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere, comparando os perfis do Caso 1 com os do Caso 2, mostrados na Figura 7.36.

#### 7.4.3 Conclusões: Caso Multivariado

Um caso hipotético foi usado para testar o desempenho do *solver multiPhaseMultiVariatePbeFoam* em um problema de balanço populacional heterogêneo e multivariado. O modelo de frequência de quebra foi modificado para considerar a dependência com uma segunda variável, além do tamanho de gotas. Os resultados obtidos estão de acordo com o esperado, isto é, a quebra de gotas foi bastante intensificada no caso em que um agente que facilita o processo de quebra foi adicionado à emulsão.

### 7.5 Simulação PB-CFD: Caso Bivariado usando Momentos Mistos

Neste caso objetiva-se usar uma PDF bivariada que tenha dependência entre suas variáveis. Um método de inversão que considera momentos mistos foi usado e momentos mistos também foram considerados na simulação do balanço populacional pelo método DQMoM-FC.



**Figura 7.36:** Campos estacionários para os diâmetros médios de (a) Sauter e (b) DeBrouckere para o Caso 1 e (c) Sauter e (d) DeBrouckere para o Caso 2.

O caso base usado foi o pt9g11 definido na Seção 7.3.1, ou seja, a geometria, as características da emulsão e do escoamento e as propriedades físicas dos fluidos foram idênticas ao caso pt9g11. De fato, a única diferença foi a distribuição de entrada alimentada e usada para obter a condição inicial e de contorno dos pesos e abscissas. O procedimento numérico também foi igual ao descrito na Seção 7.3.2. Similarmente ao caso apresentado na Seção 7.3.5, a área seccional da entrada (*inlet*) foi dividida em duas seções, em uma com 40% da área total as gotas de água entram no domínio com concentração de sal unitária e em outra, com o restante da área, as gotas de água entram sem sal, concentração nula.

A distribuição usada foi a bimodal com modos totalmente separados dada pela Equação 7.6. Usou-se uma discretização de 4 pontos obtida com o método PCA-Opt<sup>3</sup><sub>(2×2)</sub>. Esse método conseguiu uma quadratura com acurácia de 3<sup>a</sup> ordem. A discretização adimensional obtida está dada na Tabela 7.26 e ilustrada na Figura 7.37. Os pesos e abscissas adimensionais foram obtidos da seguinte forma:

$$\tilde{v}_\alpha = \frac{\mu_{00}}{\mu_{10}} v_\alpha, \quad \tilde{m}_\alpha = \frac{\mu_{00}}{\mu_{01}} m_\alpha \text{ e} \quad \tilde{w}_\alpha = \frac{1}{\mu_{00}} w_\alpha \quad (7.27)$$

**Tabela 7.26:** Discretização adimensional obtida com a PCA-Opt<sup>3</sup><sub>(2x2)</sub> para a distribuição ilustrada pela Figura 7.1(f).

$\alpha$	$\tilde{v}_\alpha$	$\tilde{m}_\alpha$	$\tilde{w}_\alpha$
1	2,846	5,495	0,231
2	3,089	6,508	0,264
3	5,320	2,306	0,260
4	6,711	2,367	0,246

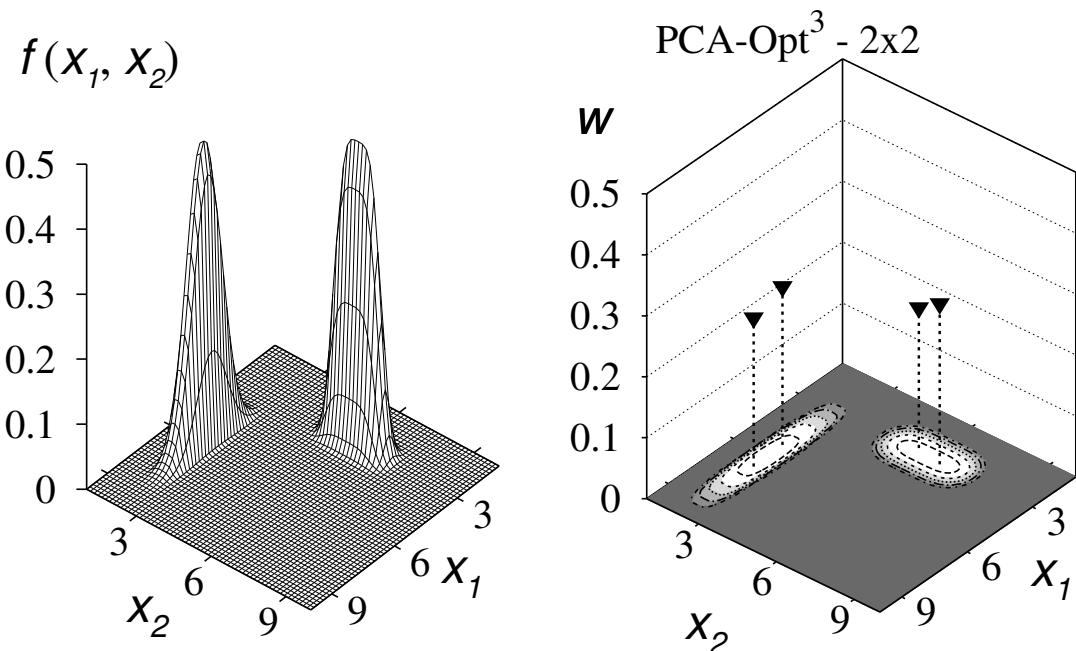
**Tabela 7.27:** Momentos e fatores de ponderação usados. O primeiro índice do momento está relacionado à variável volume,  $v$ , e o segundo à variável massa de sal,  $m$ , das gotas.

$\mu_{00}$	$\mu_{10}$	$\mu_{01}$	$\mu_{20}$	$\mu_{11}$	$\mu_{02}$	$\mu_{30}$	$\mu_{21}$
$5 \times 10^3$	$5 \times 10^3$	$5 \times 10^2$	$6 \times 10^2$	$1 \times 10^2$	$1 \times 10^0$	$3 \times 10^2$	$1 \times 10^1$
$\mu_{12}$	$\mu_{03}$	$\mu_{40}$	$\mu_{31}$	$\mu_{22}$	$\mu_{13}$	$\mu_{04}$	$\mu_{50}$
$1 \times 10^0$	$1 \times 10^{-1}$	$1 \times 10^2$	$1 \times 10^{-1}$	$1 \times 10^{-2}$	$1 \times 10^{-3}$	$1 \times 10^{-4}$	$1 \times 10^1$

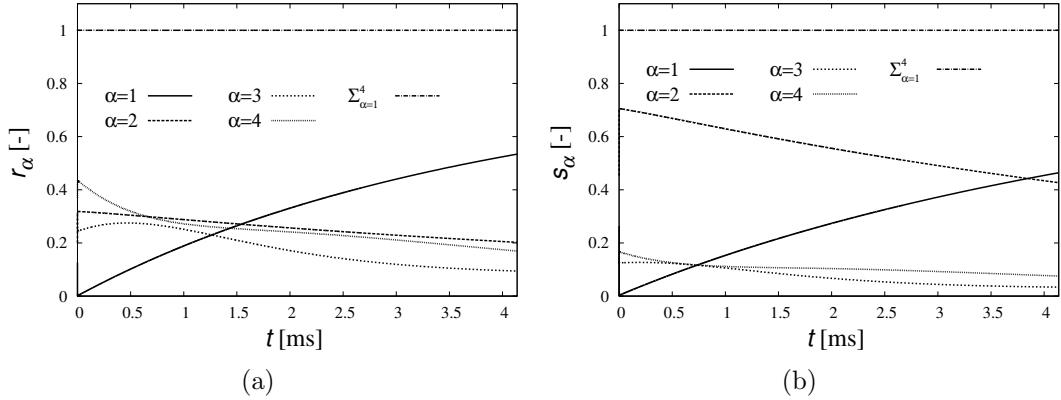
onde  $\tilde{v}$ ,  $\tilde{m}$  e  $\tilde{w}$  são, respectivamente, o volume da gota, a massa de sal dissolvida na gota e o peso adimensional. Tem-se também que  $\mu_{00} = 3,386 \times 10^{12} \text{ m}^{-3}$ ,  $\mu_{10} = 0,0734$  e  $\mu_{01} = 0,0734 \text{ kg m}^{-3}$ .

O conjunto de momentos e os fatores de ponderação usados na solução do sistema linear do DQMoM-FC pela SVD estão dados na Tabela 7.27. Um peso maior foi dado aos momentos de ordem mais baixa e também priorizou-se os momentos mais relevantes para a variável volume das gotas.

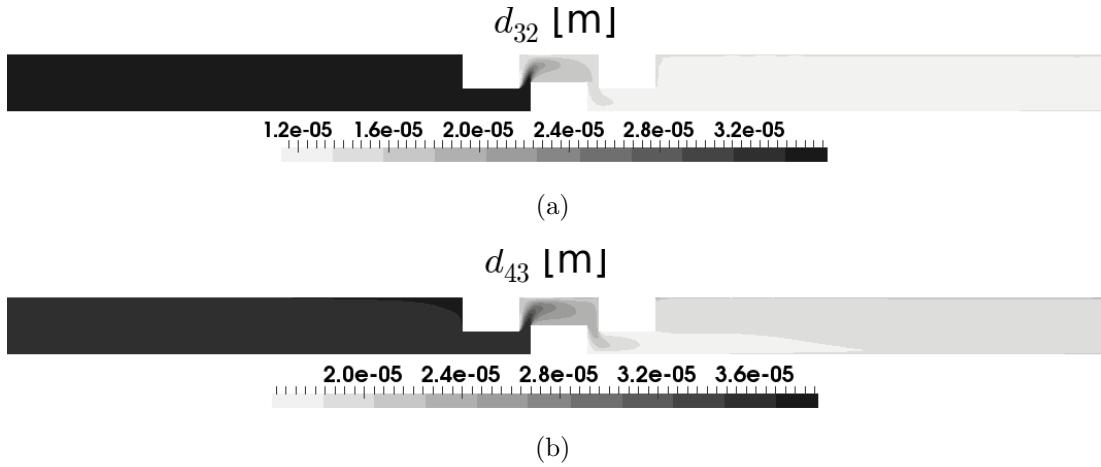
Na Figura 7.38 são ilustrados os gráficos de evolução temporal das abscissas ponderadas normalizadas,  $r_\alpha = v_\alpha w_\alpha$  e  $s_\alpha = m_\alpha w_\alpha$ , e o somatório das mesmas para



**Figura 7.37:** Função distribuição e a discretização de 4 pontos obtida com o método PCA-Opt<sup>3</sup><sub>(2x2)</sub>.



**Figura 7.38:** Evolução temporal das abscissas ponderadas (a) volume e (b) massa de sal das gotas.

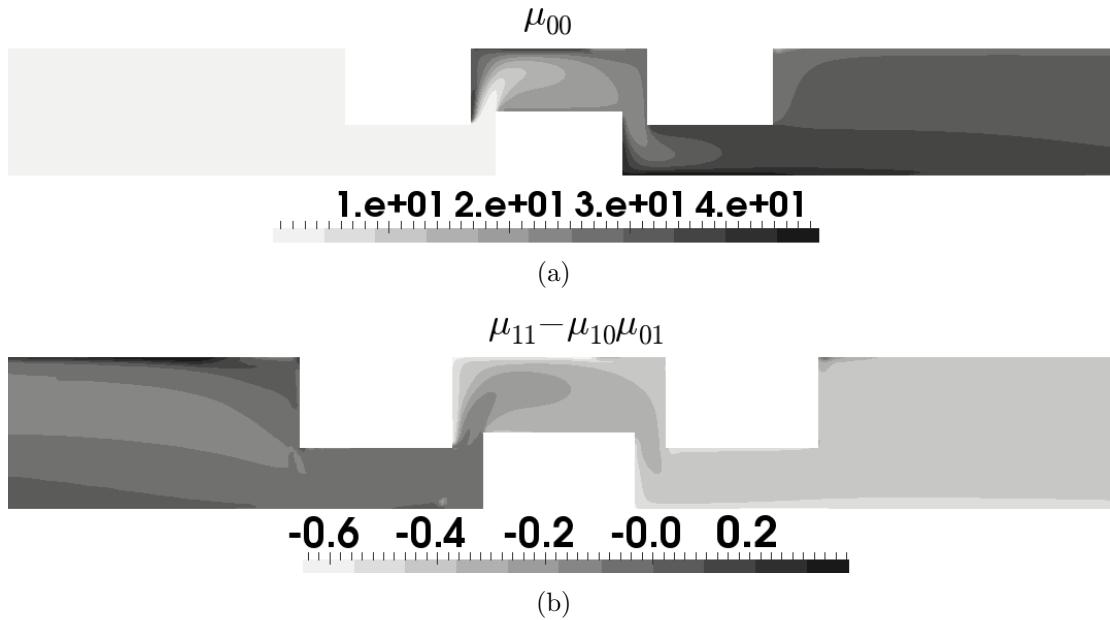


**Figura 7.39:** Perfis estacionários dos diâmetros médios de (a) Sauter e (b) DeBrouckere.

a simulação do modelo homogêneo durante o tempo de residência do caso pt9g11 dado na Tabela 7.18. Como pode ser visto, o somatório das abscissas ponderadas se mantém constante e igual a 1, mostrando que a massa total de fase dispersa e a massa de sal nas gotas se conservam. Essa análise mostra também que, ao menos no caso homogêneo, o conjunto de momentos utilizados não geram problemas de quadraturas não-realizáveis, ou seja, abscissas ou pesos negativos.

A simulação do caso heterogêneo foi feita usando o mesmo conjunto de momentos do caso homogêneo. Na Figura 7.39 é ilustrado os perfis dos diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere. Como pode ser visto, existe uma intensa variação nos diâmetros das gotas provocada pela quebra. A Figura 7.40(a) mostra o perfil do momento zero e deixa claro que existe um aumento considerável do número de gotas na seção posterior ao acidente. Por fim, na Figura 7.40(b) é apresentado o perfil da covariância entre as variáveis na região do acidente, mostrando que a mesma também é bastante afetada pelo acidente.

A partir dos resultados obtidos no caso analisado nesta seção, conclui-se que a metodologia de inversão de momentos apresentada anteriormente pode ser de grande valia para ser usada na inicialização do DQMoM-FC em casos onde há a necessi-



**Figura 7.40:** Perfis estacionários do momento (a) zero e (b) da covariância entre as variáveis.

dade de usar distribuições multivariadas que apresentam dependências entre suas variáveis.

# Capítulo 8

## Conclusões e Sugestões

O presente trabalho atingiu os objetivos pretendidos, que consistiam no desenvolvimento e implementação de uma metodologia para simulação de escoamentos multifásicos polidispersos multivariados. Dessa forma, três grandes desafios foram abordados: (i) inversão de momentos multivariados; (ii) modelagem de escoamentos multifásicos e balanço populacional; (iii) resolver de forma eficiente e acurada problemas de balanço populacional heterogêneo.

Vários métodos foram analisados quanto ao desempenho de cada um para se fazer a inversão de momentos multivariados para diferentes distribuições. Em geral, os métodos conseguiram resultados melhores para distribuições do tipo unimodais. Para funções multimodais todos os métodos apresentaram dificuldades em conseguir inverter com acurácia os momentos de alta ordem. O método PCA conseguiu quadraturas com segunda ordem de acurácia. A ICA, proposta neste trabalho, também mostrou ser de segunda ordem de acurácia, porém, foi mais robusta e mais acurada que a PCA em alguns casos. O CQMoM foi bastante acurado mas apresentou problemas relacionados à falta de robustez. Os métodos combinados ou híbridos propostos, PCA-CQMoM e ICA-CQMoM, herdaram a acurácia do CQMoM e foram mais robustos. Por fim, o uso de otimização global foi eficaz em aumentar a acurácia das quadraturas obtidas pela PCA ou PCA-CQMoM. Dessa forma, recomenda-se o uso dos métodos combinados, PCA-CQMoM ou ICA-CQMoM, para serem usados conjuntamente com métodos que evoluem os momentos da PBE, como o QMoM, por exemplo. Para métodos de momentos diretos, como o DQMoM ou DQMoM-FC, recomenda-se o uso da PCA ou PCA-CQMoM seguido de um refinamento de solução usando otimização.

A solução de problemas de balanço populacional multivariado usando o método DuQMoGeM e rotinas de integração adaptativa gerou resultados satisfatórios para os casos analisados. Ao contrário do QMoM, o DuQMoGeM não precisa de uma discretização para se fazer a evolução do conjunto de momentos. Esta é uma vantagem deste método, pois, como já comentado, existe uma dificuldade associada a inversão

acurada de momentos multivariados acima de segunda ordem. Neste caso, o erro na inversão seria propagado para os momentos, levando a um acúmulo crescente de erro. No caso do DuQMoGeM isto não acontece, pois a inversão é necessária somente para gerar a discretização para o acoplamento PB-CFD. O uso de integração adaptativa também permitiu um cálculo acurado do termo fonte da PBE. Apesar das vantagens em relação à acurácia, o método se mostrou custoso para resolver problemas multivariados. Possíveis melhorias no custo computacional podem ser obtidas com a aceleração do cálculo das integrais multidimensionais. Outra possibilidade seria usar a versão direta do método, ou seja, uma versão para evolução direta dos pesos e abscissas da distribuição, necessitando, dessa maneira, uma única inversão de momentos multivariados para gerar a condição inicial. Devido a isso, o DuQMoGeM não foi considerado como uma opção viável para simular os casos de balanço populacional heterogêneo avaliados.

Simulações de balanço populacional heterogêneo mostraram que o DQMoM apresenta problemas relacionados à conservação de momentos. Devido a isso, o DQMoM-FC foi usado nos casos de balanço populacional heterogêneo, o qual mostrou ser um método conservativo e eficiente. A modelagem implementada previu resultados para diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere com uma boa concordância com os dados experimentais. Os desvios para o caso pt6g7 foram por volta de 0.5% e 0.7% para os diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere, respectivamente. Para o caso pt4g13 os desvios foram de aproximadamente 10% e 5% para os diâmetros médios de Sauter e DeBrouckere, respectivamente. Simulações negligenciando e considerando a dispersão de gotas mostraram que o termo de dispersão pode influenciar significativamente nos perfis de fração de fase e dos diâmetros médios. A dispersão de gotas foi fundamental para promover a mistura das correntes de água doce e salgada pela quebra e coalescência no caso analisado. O uso da SVD também mostrou ser de grande valia em simulações de balanço populacional heterogêneo, principalmente para casos multivariados.

Por fim, o *solver* desenvolvido no *software* OpenFOAM, **multiPhaseMultiVariatePbeFoam**, possui uma implementação bastante genérica e estruturada, dando flexibilidade e facilidade para futuras extensões. A implementação do método DQMoM-FC foi generalizada para um número qualquer de variáveis e para um conjunto qualquer de momentos, inteiros ou fracionários. A validação da metodologia e da implementação pode ser assegurada tendo em vista os resultados para os diferentes casos apresentados.

Os seguintes tópicos são sugeridos para trabalhos futuros:

- Investigar outros métodos de ICA para serem usados na inversão de momentos multivariados. Em especial, investigar o uso da ICA não-linear.

- Analisar com maior profundidade a modelagem do termo de dispersão de partículas e investigar o seu efeito usando dados experimentais.
- Estudar mais detalhadamente o tratamento da turbulência e das forças interfaciais em escoamentos multifásicos.
- Avaliar melhor o uso da SVD juntamente com fatores de ponderação adequados.
- Estender a modelagem e a implementação do código para tratamento de escoamentos multifásicos não-isotérmicos e compressíveis.
- Estender o código para tratar um número arbitrário de distintos fluidos dispersos numa fase contínua. A PBE de cada um dos fluidos dispersos poderia ser resolvida com um método a ser escolhido e usar diferentes modelos de interação partícula-partícula.

# Referências Bibliográficas

- [1] MITRE, J. F. *Modelos de Quebra e Coalescência de Gotas para o Escoamento de Emulsões*. Tese de D.Sc., PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2010.
- [2] MITRE, J. F., LAGE, P. L. C., SILVA, E., ET AL. “Droplet breakage and coalescence models for the flow of water-in-oil emulsions through duct accidents”, *Chemical Engineering Research and Design*, 2013. Submetido para publicação.
- [3] RAMKRISHNA, D. *Population Balances — Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*. San Diego, Academic Press, 2000.
- [4] SILVA, L. F. L. R. *Desenvolvimento de Metodologias para Simulação de Escoamentos Polidispersos usando Código Livre*. Tese de D.Sc., PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2008.
- [5] DÍAZ, M. E., IRANZO, A., CUADRA, D., ET AL. “Numerical simulation of the gas-liquid flow in a laboratory scale bubble column: Influence of bubble size distribution and non-drag forces”, *Chemical Engineering Journal*, v. 139, n. 2, pp. 363 – 379, 2008.
- [6] MARCHISIO, D. L., VIGIL, R. D., FOX, R. O. “Implementation of the quadrature method of moments in CFD codes for aggregation-breakage problems”, *Chemical Engineering Science*, v. 58, n. 15, pp. 3337–3351, 2003.
- [7] ATTARAKIH, M. M., BART, H.-J., FAQIR, N. M. “Numerical solution of the bivariate population balance equation for the interacting hydrodynamics and mass transfer in liquid-liquid extraction columns”, *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 1, pp. 113–123, 2006. Advances in population balance modelling, Second International Conference on Population Balance Modelling.
- [8] YOON, C., MCGRAW, R. “Representation of generally mixed multivariate aerosols by the quadrature method of moments: II. Aerosol dynamics”, *Journal of Aerosol Science*, v. 35, n. 5, pp. 577–598, 2004.

- [9] SILVA, L. F. L. R., LAGE, P. L. C. “Development and implementation of a poly-dispersed multiphase flow model in OpenFOAM”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 35, n. 12, pp. 2653 – 2666, 2011.
- [10] MAZZEI, L., MARCHISIO, D. L., LETTIERI, P. “Direct Quadrature Method of Moments for the Mixing of Inert Polydisperse Fluidized Powders and the Role of Numerical Diffusion”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 49, n. 11, pp. 5141–5152, 2010.
- [11] FOX, R. O. “Optimal Moment Sets for Multivariate Direct Quadrature Method of Moments”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 48, n. 21, pp. 9686–9696, 2009.
- [12] FOX, R. O. “Bivariate direct quadrature method of moments for coagulation and sintering of particle populations”, *Journal of Aerosol Science*, v. 37, n. 11, pp. 1562–1580, 2006.
- [13] BUFFO, A., VANNI, M., MARCHISIO, D. “Multidimensional population balance model for the simulation of turbulent gas-liquid systems in stirred tank reactors”, *Chemical Engineering Science*, v. 70, pp. 31–44, 2012.
- [14] RUSCHE, H. *Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions*. Ph.D. thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, Londres, Reino Unido, 2002.
- [15] WRIGHT, D. L., MCGRAW, R., ROSNER, D. E. “Bivariate Extension of the Quadrature Method of Moments for Modeling Simultaneous Coagulation and Sintering of Particle Populations”, *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 236, n. 2, pp. 242–251, 2001.
- [16] YOON, C., MCGRAW, R. “Representation of generally mixed multivariate aerosols by the quadrature method of moments: I. Statistical foundation”, *Journal of Aerosol Science*, v. 35, n. 5, pp. 561–576, 2004.
- [17] ISHII, M., HIBIKI, T. *Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow*. 1 ed. Nova York, USA, Springer, 2006.
- [18] CROWE, C., SOMMERFIELD, M., YUTAKA, T. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. Boca Raton, CRC Press, 1998.
- [19] BENNETT, A. *Lagrangian Fluid Dynamics*. United Kingdom, Cambridge University Press, 2006.

- [20] ZHU, H., ZHOU, Z., YANG, R., ET AL. “Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 13, pp. 3378 – 3396, 2007.
- [21] ZHU, H., ZHOU, Z., YANG, R., ET AL. “Discrete particle simulation of particulate systems: A review of major applications and findings”, *Chemical Engineering Science*, v. 63, n. 23, pp. 5728 – 5770, 2008.
- [22] HARLOW, F., WELCH, J. “Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with a free surface”, *The Physics of Fluids*, v. 8, n. 2, pp. 2182 – 2189, 1965.
- [23] HIRT, C., NICHOLS, B. “Volume of fluid (VoF) method for the dynamics of free boundaries”, *Journal of Computational Physics*, v. 39, n. 1, pp. 201 – 225, 1981.
- [24] UBBINK, O., ISSA, R. “A method for capturing sharp fluid interfaces on arbitrary meshes”, *Journal of Computational Physics*, v. 153, pp. 26 – 50, 1999.
- [25] DREW, D. A., PASSMAN, S. L. *Theory of Multicomponent Fluids*. 1 ed. Nova York, Springer, 1998.
- [26] MADSEN, J. *Computational and Experimental Study of Sprays from the Breakup of Water Sheets*. Ph.D. thesis, Faculty of Engineering and Science, Aalborg University Esbjerg, DK-6700 Esbjerg, Denmark, 2006.
- [27] JAKOBSEN, H. A., SANNAES, B. H., GREVSKOTT, S., ET AL. “Modeling of Vertical Bubble-Driven Flows”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 36, pp. 4052 – 4074, 1997.
- [28] SOKOLICHIN, A., EIGENBERGER, G., LAPIN, A., ET AL. “Dynamic numerical simulation of gas-liquid two-phase flows Euler/Euler versus Euler/Lagrange”, *Chemical Engineering Science*, v. 52, pp. 611 – 626, 1997.
- [29] BOUSSINESQ, J. “Théorie de l’Écoulement Tourbillant”, *Mem. Présentés par Divers Savants Acad. Sci. Inst. Fr.*, v. 23, pp. 46 – 50, 1877.
- [30] SOKOLICHIN, A., EIGENBERGER, G. “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, pp. 2273 – 2284, 1999.

- [31] BANNARI, R., KERDOUSS, F., SELMA, B., ET AL. “Three-dimensional mathematical modeling of dispersed two-phase flow using class method of population balance in bubble columns”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 32, n. 12, pp. 3224 – 3237, 2008.
- [32] SATO, Y., SEKOGUCHI, K. “Liquid velocity distribution in two-phase bubble flow”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 2, pp. 79 – 95, 1975.
- [33] SATO, Y., SADATOMI, M., SEKOGUCHI, K. “Momentum and heat transfer in two-phase bubble flow - I Theory”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 7, pp. 167 – 177, 1981.
- [34] DEEN, N., SOLBERG, T., HJERTAGER, B. “Large eddy simulation of the Gas–Liquid flow in a square cross-sectioned bubble column”, *Chemical Engineering Science*, v. 56, n. 21 - 22, pp. 6341 – 6349, 2001.
- [35] KAJISHIMA, T. “Influence of particle rotation on the interaction between particle clusters and particle-induced turbulence”, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, v. 25, pp. 721 – 728, 2004.
- [36] LUCAS, D., KREPPEL, E., PRASSER, H.-M. “Use of models for lift, wall and turbulent dispersion forces acting on bubbles for poly-disperse flows”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 15, pp. 4146 – 4157, 2007.
- [37] SCHILLER, L., NAUMANN, A. Z. “Über die grundlegenden Berechnungen bei der Schwerkraftaufbereitung”, *Ver. Deut. Ing.*, v. 77, pp. 318–320, 1933.
- [38] GRACE, J., WAIREGI, T., NGUYEN, T. “Shapes and velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids”, *Transactions Institution of Chemical Engineers*, v. 54, pp. 167 – 173, 1976.
- [39] ISHII, M., ZUBER, N. “Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows”, *AIChe Journal*, v. 25, n. 5, pp. 843 – 855, 1979.
- [40] DODDS, D. S., NASER, J. “The Effect of Particle Concentration on the Coefficient of Drag of a Spherical Particle”. In: *Proceedings of 15th Australasian Fluid Mechanics Conference*, Sydney, Australia, December 2004.
- [41] TOMIYAMA, A., SOU, A., ZUN, I., ET AL. “Effects of Eötvös number and dimensionless liquid volumetric flux on lateral motion of a bubble in a laminar duct flow”, *Advances in Multiphase Flow*, pp. 3 – 15, 1995.
- [42] TOMIYAMA, A., TAMAI, H., ZUN, I., ET AL. “Transverse migration of single bubbles in simple shear flows”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, n. 11, pp. 1849 – 1858, 2002.

- [43] DE BERTODANO, M. A. L. “Two fluid model for two-phase turbulent jets”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 179, n. 1, pp. 65 – 74, 1998.
- [44] KRISHNA, R., ELLENBERGER, J., MARETTO, C. “Flow Regime Transition in Bubble Columns”, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, v. 26, n. 4, pp. 467–475, 1999.
- [45] JÚNIOR, R. S. *Modelagem e simulação do escoamento gás-líquido em leitos borbulhantes nos reatores de colunas de bolha*. Dissertação de mestrado, Universidade Regional de Blumenau, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Blumenau, SC, Brasil, 2011.
- [46] DARMANA, D., DEEN, N., KUIPERS, J., ET AL. “Numerical study of homogeneous bubbly flow: Influence of the inlet conditions to the hydrodynamic behavior”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 35, n. 12, pp. 1077 – 1099, 2009.
- [47] MUDDE, R., GROEN, J., VAN DEN AKKER, H. “Liquid velocity field in a bubble column: LDA experiments”, *Chemical Engineering Science*, v. 52, pp. 4217 – 4224, 1997.
- [48] MUDDE, R., VAN DEN AKKER, H. “Dynamic behavior of the flow field of a bubble column at low to moderate gas fractions”, *Chemical Engineering Science*, v. 54, pp. 4921 – 4927, 1999.
- [49] CHEN, R. C., REESE, J., FAN, L. “Flow structure in a three-dimensional bubble column and three-phase fluidized bed”, *AIChE Journal*, v. 40, n. 7, pp. 1093 – 1104, 1994.
- [50] FISCHER, J., KUMAZAWA, H., SADA, E. “On the local gas holdup and flow pattern in standard-type bubble columns”, *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v. 33, n. 1, pp. 7 – 21, 1994.
- [51] ZAHRADNÍK, J., FIALOVÁ, M., RŮŽIČKA, M., ET AL. “Duality of the gas-liquid flow regimes in bubble column reactors”, *Chemical Engineering Science*, v. 52, n. 21 - 22, pp. 3811 – 3826, 1997.
- [52] LANCE, M., BATAILLE, J. “Turbulence in the liquid phase of a uniform bubbly air-water flow”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 222, pp. 95 – 188, 1991.
- [53] GARNIER, C., LANCE, M., MARIÉ, J. “Measurement of local flow characteristics in buoyancy-driven bubbly flow at high void fraction”, *Experimental Thermal and Fluid Science*, v. 26, pp. 811 – 815, 2002.

- [54] GROEN, J., OLDEMAN, R., MUDDE, R., ET AL. “Coherent structures and axial dispersion in bubble column reactors”, *Chemical Engineering Science*, v. 51, pp. 2511 – 2520, 1996.
- [55] HARTEVELD, W., MUDDE, R., VAN DEN AKKER, H. “Dynamics of a bubble column: influence of gas distributions on coherent structures”, *Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 81, pp. 389 – 394, 2003.
- [56] BECKER, S., DE BIE, H., SWEENEY, J. “Dynamic flow behavior in bubble columns”, *Chemical Engineering Science*, v. 54, pp. 4929 – 4935, 1999.
- [57] BECKER, S., DE BIE, H., SWEENEY, J. “Study on the flow structure in an aerated flat apparatus using laser Doppler anemometry”, *Chemical Engineering Technology*, v. 23, pp. 222 – 226, 2000.
- [58] BUWA, V., RANADEV, V. “Dynamics of gas-liquid flow in a rectangular bubble column: experiments and single/multi-group CFD simulations”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 4715 – 4736, 2002.
- [59] BUWA, V., RANADEV, V. “Characterization of dynamics of gas-liquid flows in rectangular bubble columns”, *AICHE Journal*, v. 50, pp. 2394 – 2407, 2004.
- [60] MITRE, J., TAKAHASHI, R., RIBEIRO JR., C., ET AL. “Analysis of breakage and coalescence models for bubble columns”, *Chemical Engineering Science*, v. 65, n. 23, pp. 6089–6100, 2010.
- [61] JULIÁ, J. E., HERNÁNDEZ, L., CHIVA, S., ET AL. “Hydrodynamic characterization of a needle sparger rectangular bubble column: Homogeneous flow, static bubble plume and oscillating bubble plume”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 22, pp. 6361 – 6377, 2007.
- [62] ALOPAEUS, V., KOSKINEN, J., KESKINEN, K. I. “Simulation of the population balances for liquid-liquid systems in a nonideal stirred tank. Part 1 Description and qualitative validation of the model”, *Chemical Engineering Science*, v. 54, n. 24, pp. 5887 – 5899, 1999.
- [63] LAURENZI, F., CORONEO, M., MONTANTE, G., ET AL. “Hydrodynamics of immiscible liquid-liquid dispersions in stirred vessels”. In: *13th European Conference on Mixing*, London, April 2009.
- [64] MAAB, S., GÄBLER, A., ZACCONE, A., ET AL. “Experimental Investigations and Modelling of Breakage Phenomena in Stirred Liquid/Liquid

- Systems”, *Chemical Engineering Research and Design*, v. 85, n. 5, pp. 703 – 709, 2007.
- [65] DERKSEN, J., AKKER, H. V. D. “Multi-Scale Simulations of Stirred Liquid-Liquid Dispersions”, *Chemical Engineering Research and Design*, v. 85, n. 5, pp. 697 – 702, 2007.
- [66] BHARDWAJ, A., HARTLAND, S. “Dynamics of Emulsification and Demulsification of Water in Crude Oil Emulsions”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 33, n. 5, pp. 1271 – 1279, 1994.
- [67] KIM, Y. H., WASAN, D. T. “Effect of Demulsifier Partitioning on the Destabilization of Water-in-Oil Emulsions”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 35, n. 4, pp. 1141 – 1149, 1996.
- [68] CUNHA, R. E. P., FORTUNY, M., DARIVA, C., ET AL. “Mathematical Modeling of the Destabilization of Crude Oil Emulsions Using Population Balance Equation”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 47, n. 18, pp. 7094 – 7103, 2008.
- [69] BRESCIANI, A. E. *Análise do processo de dessalgação de petróleo. Otimização do uso de água*. Tese de Doutorado, Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, Brasil, 2009.
- [70] SILVA, L. F. L. R., DAMIAN, R. B., LAGE, P. L. C. “Implementation and analysis of numerical solution of the population balance equation in CFD packages”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 32, n. 12, pp. 2933–2945, 2008.
- [71] JOSCELYNE, S. M., TRÄGÅRDH, G. “Membrane emulsification – a literature review”, *Journal of Membrane Science*, v. 169, n. 1, pp. 107 – 117, 2000.
- [72] HULBURT, H. M., KATZ, S. “Some problems in particle technology: A statistical mechanical formulation”, *Chemical Engineering Science*, v. 19, n. 8, pp. 555–574, 1964.
- [73] DRAKE, R. L. “A general mathematical survey of the coagulation equation”. In: Hidy, G. M., Brock, J. R. (Eds.), *Topics in Current Aerosol Research (Part 2)*, v. 3, *International Reviews in Aerosol Physics and Chemistry*, Pergamon, pp. 201–376, Oxford, 1972.
- [74] SMOLUCHOWSKI, M. V. “Drei Vorträge über Diffusion, Brownsche Bewegung und Koagulation von Kolloidteilchen”, *Zeitschrift für physikalische Chemie*, v. 17, pp. 557–585, 1916.

- [75] SMOLUCHOWSKI, M. V. "Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloidaler Lösungen", *Zeitschrift für physikalische Chemie*, v. 92, n. 2, pp. 129–168, 1917.
- [76] CHANDRASEKHAR, S. "Stochastic Problems in Physics and Astronomy", *Reviews of Modern Physics*, v. 15, pp. 1–89, 1943.
- [77] WILLIAMS, F. A. "Spray combustion and atomisation", *Physics of Fluids*, v. 1, n. 6, pp. 541–545, 1958.
- [78] RANDOLPH, A. D., LARSON, M. A. *Theory and particulate processes — Analysis and techniques of continuous crystallization*. New York, Academic Press, 1971.
- [79] RAMKRISHNA, D. "Status of population balances", *Reviews in Chemical Engineering*, v. 3, n. 1, pp. 49–95, 1985.
- [80] CAMPBELL, G. M., WEBB, C. "On predicting roller milling performance: Part I: the breakage equation", *Powder Technology*, v. 115, n. 3, pp. 234–242, 2001.
- [81] LUO, H., SVENDSEN, H. F. "Theoretical model for drop and bubble breakup in turbulent dispersions", *AICHE Journal*, v. 42, n. 5, pp. 1225–1233, 1996.
- [82] CHESTERS, A. K. "The modeling of coalescence processes in fluid liquid dispersions - A review of current understanding", *Chemical Engineering Research & Design*, v. 69, n. 4, pp. 259 – 270, 1991.
- [83] LASHERAS, J., EASTWOOD, C., MARTÍNEZ-BAZÁN, C., ET AL. "A review of statistical models for the break-up of an immiscible fluid immersed into a fully developed turbulent flow", *International Journal of Multiphase Flow*, v. 28, n. 2, pp. 247 – 278, 2002.
- [84] LIAO, Y., LUCAS, D. "A literature review of theoretical models for drop and bubble breakup in turbulent dispersions", *Chemical Engineering Science*, v. 64, n. 15, pp. 3389 – 3406, 2009.
- [85] LIAO, Y., LUCAS, D. "A literature review on mechanisms and models for the coalescence process of fluid particles", *Chemical Engineering Science*, v. 65, n. 10, pp. 2851 – 2864, 2010.
- [86] SPIELMAN, L., LEVENSPIEL, O. "A Monte Carlo Treatment for Reacting and Coalescing Dispersed Phase Systems", *Chemical Engineering Science*, v. 20, pp. 247–254, 1965.

- [87] COLLINS, S. B., KNUDSEN, J. G. “Drop Size Distributions Produced by Turbulent Flow of Immiscible Liquids”, *AIChe Journal*, v. 16, pp. 1972–1080, 1970.
- [88] ZEITLIN, M. A., TAVLARIDES, L. L. “Fluid-Fluid Interaction and Hydrodynamics in Agitated Dispersions: A Simulation Model”, *Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 50, pp. 207–215, 1972.
- [89] ZEITLIN, M. A., TAVLARIDES, L. L. “Dispersed Phase Reactor Model for Predicting Conversion and Mixing”, *AIChe Journal*, v. 18, pp. 1268–1271, 1972.
- [90] LIFFMAN, K. “A direct simulation Monte-Carlo method for cluster coagulation”, *Journal of Computational Physics*, v. 100, n. 1, pp. 116–127, 1992.
- [91] MEIMAROGLOU, D., KIPARISSIDES, C. “Monte Carlo simulation for the solution of the bi-variate dynamic population balance equation in batch particulate systems”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 18-20, pp. 5295–5299, 2007. 19th International Symposium on Chemical Reaction Engineering - From Science to Innovative Engineering - ISCRE-19.
- [92] MEIMAROGLOU, D., PLADIS, P., BALTSAS, A., ET AL. “Prediction of the molecular and polymer solution properties of LDPE in a high-pressure tubular reactor using a novel Monte Carlo approach”, *Chemical Engineering Science*, v. 66, n. 8, pp. 1685–1696, 2011.
- [93] IRIZARRY, R. “Fast Monte Carlo methodology for multivariate particulate systems—I: Point ensemble Monte Carlo”, *Chemical Engineering Science*, v. 63, n. 1, pp. 95–110, 2008.
- [94] IRIZARRY, R. “Fast Monte Carlo methodology for multivariate particulate systems-II: [tau]-PEMC”, *Chemical Engineering Science*, v. 63, n. 1, pp. 111–121, 2008.
- [95] SUBRAMANIANAND, G., RAMKRISHNA, D. “On the Solution of Statistical Models of Cell Populations”, *Mathematical Bioscience*, v. 10, pp. 1–23, 1971.
- [96] HULBURT, H. M., AKIYAMA, T. “Liouville Equations for Agglomeration and Dispersion Processes”, *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, v. 8, n. 2, pp. 319–324, 1969.
- [97] RAMKRISHNA, D. “Solution of population balance equations”, *Chemical Engineering Science*, v. 26, n. 7, pp. 1134–1136, 1971.

- [98] DORAO, C. A., JAKOBSEN, H. A. “A least squares method for the solution of population balance problems”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 30, n. 3, pp. 535–547, 2006.
- [99] DORAO, C. A., JAKOBSEN, H. A. “Application of the least-squares method for solving population balance problems in  $R^{d+1}$ ”, *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 15, pp. 5070–5081, 2006.
- [100] ZHU, Z., DORAO, C. A., JAKOBSEN, H. A. “A least-squares method with direct minimization for the solution of the breakage-coalescence population balance equation”, *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 79, pp. 716–727, 2008.
- [101] DORAO, C., JAKOBSEN, H. “hp-adaptive least squares spectral element method for population balance equations”, *Applied Numerical Mathematics*, v. 58, n. 5, pp. 563–576, 2008.
- [102] GELBARD, F., SEINFELD, J. H. “Numerical solution of the dynamic equation for particulate systems”, *Journal of Computational Physics*, v. 28, n. 3, pp. 357–375, 1978.
- [103] ROUSSOS, A. I., ALEXOPOULOS, A., KIPARISSIDES, C. “Part III: Dynamic evolution of the particle size distribution in batch and continuous particulate processes: A Galerkin on finite elements approach”, *Chemical Engineering Science*, v. 60, n. 24, pp. 6998–7010, 2005.
- [104] STEEMSON, M. L., WHITE, E. T. “Numerical modelling of steady state continuous crystallization processes using piecewise cubic spline functions”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 12, n. 1, pp. 81–89, 1988.
- [105] EYRE, D., WRIGHT, C. J., REUTERT, G. “Spline-collocation with adaptive mesh grading for solving the stochastic collection equation”, *Journal of Computational Physics*, v. 78, n. 2, pp. 288–304, 1988.
- [106] CHEN, M.-Q., HWANG, C., SHIH, Y.-P. “A wavelet-Galerkin method for solving population balance equations”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 20, n. 2, pp. 131–145, 1996.
- [107] LIU, Y., CAMERON, I. T. “A new wavelet-based method for the solution of the population balance equation”, *Chemical Engineering Science*, v. 56, n. 18, pp. 5283–5294, 2001.

- [108] ALEXOPOULOS, A., ROUSSOS, A., KIPARISSIDES, C. “Part V: Dynamic evolution of the multivariate particle size distribution undergoing combined particle growth and aggregation”, *Chemical Engineering Science*, v. 64, n. 14, pp. 3260–3269, 2009.
- [109] BOURGADE, J. P., FILBET, F. “Convergence of a finite volume scheme for coagulation-fragmentation equations”, *Mathematics of Computation*, v. 77, pp. 851–882, 2007.
- [110] KUMAR, J., WARNECKE, G., PEGLOW, M., ET AL. “Comparison of numerical methods for solving population balance equations incorporating aggregation and breakage”, *Powder Technology*, v. 189, n. 2, pp. 218–229, 2009. Special Issue: 3rd International Workshop on Granulation: Granulation across the Length Scales, 3rd International Workshop on Granulation across the Length Scales.
- [111] QAMAR, S., WARNECKE, G. “Solving population balance equations for two-component aggregation by a finite volume scheme”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 3, pp. 679–693, 2007.
- [112] KIM, W. S., TARBELL, J. M. “Numerical technique for solving population balances in precipitation processes”, *Chemical Engineering Communications*, v. 101, n. 1, pp. 115–129, 1991.
- [113] TSANG, T. H., RAO, A. “Comparison of Different Numerical Schemes for Condensational Growth of Aerosols”, *Aerosol Science and Technology*, v. 9, n. 3, pp. 271–277, 1988.
- [114] IMMANUEL, C. D., DOYLE III, F. J. “Solution technique for a multi-dimensional population balance model describing granulation processes”, *Powder Technology*, v. 156, n. 2-3, pp. 213–225, 2005. Particle Technology Forum Special Issue - Papers presented in the Particle Technology Forum sessions at the 2003 Annual AIChE meeting in San Francisco (November, 2003).
- [115] VANNI, M. “Approximate Population Balance Equations for Aggregation-Breakage Processes”, *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 221, n. 2, pp. 143–160, 2000.
- [116] ALEXOPOULOS, A. H., KIPARISSIDES, C. A. “Part II: Dynamic evolution of the particle size distribution in particulate processes undergoing simultaneous particle nucleation, growth and aggregation”, *Chemical Engineering Science*, v. 60, n. 15, pp. 4157–4169, 2005.

- [117] NOPENS, I., VANROLLEGHEM, P. A. “Comparison of discretization methods to solve a population balance model of activated sludge flocculation including aggregation and breakage”, *Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems*, v. 12, n. 5, pp. 441–454, 2006.
- [118] BOVE, S., SOLBERG, T., HJERTAGER, B. H. “A novel algorithm for solving population balance equations: the parallel parent and daughter classes. Derivation, analysis and testing”, *Chemical Engineering Science*, v. 60, n. 5, pp. 1449–1464, 2005.
- [119] BLECK, R. “A Fast, Approximate Method for Integrating the Stochastic Coalescence Equation”, *Journal of Geophysical Research*, v. 75, n. 27, pp. 5165–5171, 1970.
- [120] BATTERHAM, R. J., HALL, J. S., BARTON, G. “Pelletizing kinetics and simulation of full scale balling circuits”. In: *Proceedings of third international symposium on agglomeration*, v. 1, pp. A136–A150, Nurnberg, May 1981.
- [121] LISTER, J. D., SMIT, D. J., J.HOUNSLOW, M. “Adjustable discretized population balance for growth and aggregation”, *AIChe Journal*, v. 41, n. 3, pp. 591–603, 1995.
- [122] HILL, P. J., NG, K. M. “New discretization procedure for the agglomeration equation”, *AIChe Journal*, v. 42, n. 3, pp. 727–741, 1996.
- [123] KUMAR, S., RAMKRISHNA, D. “On the solution of population balance equations by discretization—I. A fixed pivot technique”, *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 8, pp. 1311–1332, 1996.
- [124] KUMAR, S., RAMKRISHNA, D. “On the solution of population balance equations by discretization—II. A moving pivot technique”, *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 8, pp. 1333–1342, 1996.
- [125] KUMAR, S., RAMKRISHNA, D. “On the solution of population balance equations by discretization—III. Nucleation, growth and aggregation of particles”, *Chemical Engineering Science*, v. 52, n. 24, pp. 4659–4679, 1997.
- [126] KUMAR, J., PEGLOW, M., WARNECKE, G., ET AL. “Improved accuracy and convergence of discretized population balance for aggregation: The cell average technique”, *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 10, pp. 3327–3342, 2006.

- [127] VALE, H. M., MCKENNA, T. F. “Solution of the Population Balance Equation for Two-Component Aggregation by an Extended Fixed Pivot Technique”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 44, n. 20, pp. 7885–7891, 2005.
- [128] CHAKRABORTY, J., KUMAR, S. “A new framework for solution of multidimensional population balance equations”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 15, pp. 4112–4125, 2007.
- [129] NANDANWAR, M. N., KUMAR, S. “A new discretization of space for the solution of multi-dimensional population balance equations: Simultaneous breakup and aggregation of particles”, *Chemical Engineering Science*, v. 63, n. 15, pp. 3988–3997, 2008.
- [130] CHAUHAN, S. S., CHAKRABORTY, J., KUMAR, S. “On the solution and applicability of bivariate population balance equations for mixing in particle phase”, *Chemical Engineering Science*, v. 65, n. 13, pp. 3914–3927, 2010.
- [131] FRENKLACH, M., HARRIS, S. J. “Aerosol dynamics modeling using the method of moments”, *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 118, n. 1, pp. 252–261, 1987.
- [132] FRENKLACH, M. “Method of moments with interpolative closure”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, n. 12, pp. 2229–2239, 2002.
- [133] DIEMER, R. B., OLSON, J. H. “A moment methodology for coagulation and breakage problems: Part 2–moment models and distribution reconstruction”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, n. 12, pp. 2211–2228, 2002.
- [134] DIEMER JR., R. B., OLSON, J. H. “Bivariate moment methods for simultaneous coagulation, coalescence and breakup”, *Journal of Aerosol Science*, v. 37, n. 3, pp. 363–385, 2006.
- [135] AKROYD, J., SMITH, A. J., SHIRLEY, R., ET AL. “A coupled CFD-population balance approach for nanoparticle synthesis in turbulent reacting flows”, *Chemical Engineering Science*, v. 66, n. 17, pp. 3792–3805, 2011.
- [136] MCGRAW, R. “Description of the aerosol dynamics by the quadrature method of moments”, *Aerosol Science and Technology*, v. 27, pp. 255–265, 1997.
- [137] GORDON, R. “Error bounds in equilibrium statistical mechanics”, *Journal of Mathematical Physics*, v. 9, n. 5, pp. 655–663, 1968.

- [138] MARCHISIO, D. L., PIKTURNA, J. T., FOX, R. O., ET AL. “Quadrature method of moments for population-balance equations”, *AIChe Journal*, v. 49, n. 5, pp. 1266–1276, 2003.
- [139] WANG, L., MARCHISIO, D., VIGIL, R., ET AL. “CFD simulation of aggregation and breakage processes in laminar Taylor-Couette flow”, *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 282, n. 2, pp. 380–396, 2005.
- [140] WAN, B., RING, T. A. “Verification of SMOM and QMOM population balance modeling in CFD code using analytical solutions for batch particulate processes”, *China Particuology*, v. 4, n. 5, pp. 243–249, 2006.
- [141] PETITTI, M., NASUTI, A., MARCHISIO, D. L., ET AL. “Bubble size distribution modeling in stirred gas-liquid reactors with QMOM augmented by a new correction algorithm”, *AIChe Journal*, v. 56, n. 1, pp. 36–53, 2010.
- [142] MARCHISIO, D. L., FOX, R. O. “Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments”, *Journal of Aerosol Science*, v. 36, n. 1, pp. 43–73, 2005.
- [143] ZUCCA, A., MARCHISIO, D. L., VANNI, M., ET AL. “Validation of bivariate DQMOM for nanoparticle processes simulation”, *AIChe Journal*, v. 53, n. 4, pp. 918–931, 2007.
- [144] SU, J., GU, Z., LI, Y., ET AL. “Solution of population balance equation using quadrature method of moments with an adjustable factor”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 21, pp. 5897–5911, 2007.
- [145] SU, J., GU, Z., LI, Y., ET AL. “An adaptive direct quadrature method of moment for population balance equations”, *AIChe Journal*, v. 54, n. 11, pp. 2872–2887, 2008.
- [146] ATTARAKIH, M. M., DRUMM, C., BART, H.-J. “Solution of the population balance equation using the sectional quadrature method of moments (SQMOM)”, *Chemical Engineering Science*, v. 64, n. 4, pp. 742–752, 2009.  
3rd International Conference on Population Balance Modelling.
- [147] LAGE, P. L. C. “On the representation of QMOM as a weighted-residual method—The dual-quadrature method of generalized moments”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 35, n. 11, pp. 2186–2203, 2011.

- [148] SANTOS, F. P., FAVERO, J. L., LAGE, P. L. C. “Solution of the population balance equation by the direct dual quadrature method of generalized moments”, *Chemical Engineering Science*, v. 101, pp. 663 – 673, 2013.
- [149] SANTOS, F. P., SENOCAK, I., FAVERO, J. L., ET AL. “Solution of the population balance equation using parallel adaptive cubature on GPUs”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 55, pp. 61 – 70, 2013.
- [150] YUAN, C., LAURENT, F., FOX, R. O. “An extended quadrature method of moments for population balance equations”, *Journal of Aerosol Science*, v. 51, pp. 1–23, 2012.
- [151] BUFFO, A., VANNI, M., MARCHISIO, D., ET AL. “Multivariate Quadrature-Based Moments Methods for turbulent polydisperse gas-liquid systems”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 50, pp. 41–57, 2013.
- [152] CHENG, J. C., FOX, R. O. “Kinetic Modeling of Nanoprecipitation using CFD Coupled with a Population Balance”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 49, n. 21, pp. 10651 – 10662, 2010.
- [153] YUAN, C., FOX, R. O. “Conditional quadrature method of moments for kinetic equations”, *Journal of Computational Physics*, v. 230, n. 22, pp. 8216 – 8246, 2011.
- [154] PETITTI, M., VANNI, M., MARCHISIO, D. L., ET AL. “Simulation of coalescence, break-up and mass transfer in a gas-liquid stirred tank with CQMOM”, *Chemical Engineering Journal*, v. 228, pp. 1182 – 1194, 2013.
- [155] BUFFO, A., MARCHISIO, D. L., VANNI, M., ET AL. “Simulation of polydisperse multiphase systems using population balances and example application to bubbly flows”, *Chemical Engineering Research and Design*, v. 91, n. 10, pp. 1859 – 1875, 2013.
- [156] SILVA, L. F. L. R., RODRIGUES, R. C., MITRE, J. F., ET AL. “Comparison of the accuracy and performance of quadrature-based methods for population balance problems with simultaneous breakage and aggregation”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 34, n. 3, pp. 286–297, 2010.
- [157] LEMANOWICZ, M., GIERCZYCKI, A. T. “Assessment of QMOM and DQMOM calculation efficiency”, *Chemical and Process Engineering*, v. 31, n. 4, pp. 589–602, 2010.

- [158] KRALLIS, A., MEIMAROGLOU, D., KIPARISSIDES, C. “Dynamic prediction of the bivariate molecular weight-copolymer composition distribution using sectional-grid and stochastic numerical methods”, *Chemical Engineering Science*, v. 63, n. 17, pp. 4342–4360, 2008.
- [159] LO, S. “Application of the musig model to bubbly flows”. 1996. AEAT-1096, AEA Technology.
- [160] MONTANTE, G., HORN, D., PAGLIANTI, A. “Gas-liquid flow and bubble size distribution in stirred tanks”, *Chemical Engineering Science*, v. 63, n. 8, pp. 2107–2118, 2008.
- [161] KERDOUSS, F., BANNARI, A., PROULX, P., ET AL. “Two-phase mass transfer coefficient prediction in stirred vessel with a CFD model”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 32, n. 8, pp. 1943–1955, 2008.
- [162] SU, J., GU, Z., XU, X. “Advances in numerical methods for the solution of population balance equations for disperse phase systems”, *Science in China Series B: Chemistry*, v. 52, n. 8, pp. 1063–1079, 2009.
- [163] PEIRÓ, J., SHERWIN, S. *Finite Difference, Finite Element and Finite Volume Methods For Partial Differential Equations*. London, UK, Springer, 2005.
- [164] SCHÄFER, M. *Computational Engineering – Introduction to Numerical Methods*. New York, USA, Springer, 2006.
- [165] PATANKAR, S. V. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- [166] FERZIGER, J. H., PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 1999.
- [167] VERSTEEG, H. K., MALALASEKERA, W. *An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method*. Longman Group Ltd, 1996.
- [168] JASAK, H. *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows*. Ph.D. thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, University of London., 1996.
- [169] PINTO, J. C., LAGE, P. L. C. *Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química*. Brasil, RJ, E-papers, 2001.

- [170] MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. 2 ed. Rio de Janeiro, LTC, 2004.
- [171] PERIC, M., KESSLER, R., SCHEURER, G. “Comparison of finite-volume numerical methods with staggered and colocated grids”, *Computers & Fluids*, v. 16(4), pp. 389–403, 1988.
- [172] RHIE, C. M., CHOW, W. L. “Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Airfoil with Trailing Edge Separation”, *AIAA Journal*, v. 21, n. 11, pp. 1523–1532, 1983.
- [173] HARTEN, A. “High-resolution schemes for hyperbolic conservation laws”, *Journal of Computational Physics*, v. 49, pp. 357–393, 1983.
- [174] SWEBY, P. K. “High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws”, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v. 21, pp. 995 – 1011, 1984.
- [175] LEER, B. V. “Towards the ultimate conservative differencing scheme. II Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme”, *J. Comp. Physics*, v. 14, pp. 361–370, 1974.
- [176] ALVES, M. A., OLIVEIRA, P. J., PINHO, F. T. “A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 41, pp. 47–75, 2003.
- [177] LIU, X.-D., OSHER, S., CHAN, T. “Weighted essentially non-oscillatory schemes”, *Journal of Computational Physics*, v. 115, n. 1, pp. 200 – 212, 1994.
- [178] MUNIZ, A. R., SECCHI, A. R., CARDOZO, N. S. “High-order finite volume method for solving viscoelastic fluid flows”, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 25, n. 1, pp. 53 – 58, 2008.
- [179] HESTENES, M. R., STIEFEL, E. “Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems”, *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, v. 49, n. 6, pp. 409 – 436, 1952.
- [180] VORST, H. A. V. D. “Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems”, *SIAM Journal Scientific Computing*, v. 13, n. 2, pp. 631–644, 1992.
- [181] SAAD, Y., SCHULTZ, M. H. “GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems”, *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 7, pp. 856 – 869, 1986.

- [182] HEATH, M. T. *Scientific Computing: An Introductory Survey*. 2 ed. , McGrawHill Higher Education, 2002.
- [183] WESSELING, P. *An introduction to multigrid methods*. John Wiley & Sons, 1992.
- [184] AJIZ, M. A., JENNINGS, A. “A robust incomplete Cholesky-conjugate gradient algorithm”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 20, pp. 949 – 966, 1984.
- [185] LEE, J., ZHANG, J., LU, C.-C. “Incomplete LU preconditioning for large scale dense complex linear systems from electromagnetic wave scattering problems”, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 185, n. 1, pp. 158 – 175, 2003.
- [186] JACOBS, D. A. H. “Preconditioned Conjugate Gradient methods for solving systems of algebraic equations”, *Central Electricity Research Laboratories RD/L/N193*, v. 62, 1980.
- [187] BRANDT, A. “Multi-Level Adaptive Solutions to Boundary-Value Problems”, *Mathematics of Computation*, v. 31, n. 138, pp. 333 – 390, 1977.
- [188] PATANKAR, S. V., SPALDING, D. B. “A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 115, pp. 1787–1803, 1972.
- [189] ISSA, R. I. “Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting”, *Journal of Computational Physics*, v. 62, n. 1, pp. 40 – 65, 1986.
- [190] ANSYS INC. *ANSYS ICEM CFD*, 2013. Disponível em: <<http://www.ansys.com/Products/Other+Products/ANSYS+ICEM+CFD>>. Acessado em 01 de Dezembro de 2013.
- [191] NETGEN. *Netgen Mesh Generator*, 2013. Disponível em: <[http://sourceforge.net/apps/mediawiki/netgen-mesher/index.php?title=Main\\_Page](http://sourceforge.net/apps/mediawiki/netgen-mesher/index.php?title=Main_Page)>. Acessado em 01 de Dezembro de 2013.
- [192] HANG SI. *Tetgen Mesh Generator*, 2013. Disponível em: <<http://wias-berlin.de/software/tetgen/>>. Acessado em 01 de Dezembro de 2013.

- [193] GEUZAINÉ, C., REMACLE, J.-F. “Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 79, pp. 1309–1331, 2009.
- [194] OPEN CASCADE. *SALOME: The Open Source Integration Platform for Numerical Simulation*, 2013. Disponível em: <<http://www.salome-platform.org/>>. Acessado em 01 de Dezembro de 2013.
- [195] OPENCFD. *OpenFOAM: The Open Source CFD Toolkit User Guide*. OpenCFD Ltd., 2013. Disponível em: <<http://www.openfoam.org/docs/user/>>. Acessado em 01 de Dezembro de 2013.
- [196] KARYPIS, G. *METIS - Serial Graph Partitioning and Fill-reducing Matrix Ordering*, 2013. Disponível em: <<http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis>>. Acessado em 01 de Dezembro de 2013.
- [197] PELLEGRINI, F., ROMAN, J. “SCOTCH: A Software Package for Static Mapping by Dual Recursive Bipartitioning of Process and Architecture Graphs”. In: *High-Performance Computing and Networking*, v. 20, pp. 493–498, Brussels, Belgium, April 1996. HPCN’96.
- [198] SANDIA CORPORATION, KITWARE INC. *ParaView - Open Source Scientific Visualization*, 2013. Disponível em: <<http://www.paraview.org/>>. Acessado em 01 de Dezembro de 2013.
- [199] LIGHT, I. *FieldView*, 2013. Disponível em: <<http://www.ilight.com/en/products/fieldview-13>>. Acessado em 01 de Dezembro de 2013.
- [200] CEI, I. *EnSight - CSM and CFD Post processing*, 2013. Disponível em: <<http://www.ceisoftware.com/>>. Acessado em 01 de Dezembro de 2013.
- [201] TECPLLOT, I. *Tecplot*, 2013. Disponível em: <<http://www.tecplot.com/>>. Acessado em 01 de Dezembro de 2013.
- [202] KITWARE, I. *VTK - Visualization Toolkit*, 2013. Disponível em: <<http://www.vtk.org/>>. Acessado em 01 de Dezembro de 2013.
- [203] STROUSTRUP, B. *C++ The Programming Language*, v. 1. 3 ed. , John Wiley & Sons, 1999.
- [204] YANG, D. *C++ and Object-Oriented Numeric Computing for Scientists and Engineers*. Nova York, Springer, 2001.

- [205] CFD ONLINE. *OpenFOAM Forum*, 2013. Disponível em: <<http://www.cfd-online.com/Forums/openfoam/>>. Acessado em 01 de Dezembro de 2013.
- [206] MEIMAROGLOU, D., ROUSSOS, A., KIPARISSIDES, C. “Part IV: Dynamic evolution of the particle size distribution in particulate processes. A comparative study between Monte Carlo and the generalized method of moments”, *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 17, pp. 5620–5635, 2006.
- [207] JOHN, V., ANGELOV, I., ÖNCÜL, A., ET AL. “Techniques for the reconstruction of a distribution from a finite number of its moments”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 11, pp. 2890–2904, 2007.
- [208] MARCHISIO, D. L. “On the use of bi-variate population balance equations for modelling barium titanate nanoparticle precipitation”, *Chemical Engineering Science*, v. 64, n. 4, pp. 697 – 708, 2009. 3rd International Conference on Population Balance Modelling.
- [209] FOX, R. O. “A quadrature-based third-order moment method for dilute gas-particle flows”, *Journal of Computational Physics*, v. 227, n. 12, pp. 6313 – 6350, 2008.
- [210] FOX, R. O. “Higher-order quadrature-based moment methods for kinetic equations”, *Journal of Computational Physics*, v. 228, n. 20, pp. 7771 – 7791, 2009.
- [211] FAVERO, J. L., SILVA, L. F. L. R., LAGE, P. L. C. “Comparison of methods for multivariate moment inversion—Introducing the independent component analysis”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 60, pp. 41 – 56, 2014. ISSN: 0098-1354.
- [212] PIERRE, D. *Optimization Theory with Applications*. Dover Books on Mathematics Series. Dover Publications, 1987.
- [213] MILLER, R. E. *Optimization: Foundations and Applications*. John Wiley & Sons, Inc., 1999.
- [214] WEISE, T. *Global Optimization Algorithms – Theory and Application*. <http://www.it-weise.de/projects/book.pdf> (published on-line), 2009. Disponível em: <<http://www.it-weise.de/projects/book.pdf>>.

- [215] GAUTSCHI, W. *Orthogonal polynomials: computation and approximation.* Numerical Mathematics and Scinentific Computation. Oxford, Great Britain, Oxford University Press, 2004.
- [216] PEARSON, K. “On Lines and Planes of Closest Fit to Systems of Points in Space”, *Journal of Aerosol Science*, v. 2, n. 6, pp. 559 – 572, 1901.
- [217] HÄRDLE, W., SIMAR, L. *Applied Multivariate Statistical Analysis*. 2nd ed. New York, Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- [218] CHAMBERS, J., HAND, D., HÄRDLE, W. *Computational Statistics*. Statistics and Computing. New York, Springer Dordrecht Heidelberg, 2009.
- [219] SCHÖLKOPF, B., SMOLA, A., MÜLLER, K.-R. “Nonlinear component analysis as a kernel eigenvalue problem”. 1996.
- [220] CHAMBERS, J., HAND, D., HÄRDLE, W. *SVD and signal processing III: algorithms, architectures, and applications*. Elsevier Science, 1995.
- [221] HERAULT, J., JUTTEN, C. “Space or Time Adaptive Signal Processing by Neural Network Models”. In: *AIP Conference Proceedings 151 on Neural Networks for Computing*, pp. 206–211, Woodbury, NY, USA, July 1987. American Institute of Physics Inc.
- [222] CARDOSO, J. F. “Source separation using higher order moments”. In: *International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing - ICASSP-89*, May 1989.
- [223] COMON, P. “Independent component analysis, A new concept?” *Signal Processing*, v. 36, n. 3, pp. 287 – 314, 1994. Higher Order Statistics.
- [224] JONES, M. C., SIBSON, R. “What is Projection Pursuit?” *Journal of the Royal Statistical Society. Series A (General)*, v. 150, n. 1, pp. 1–37, 1987.
- [225] FRIEDMAN, J., TUKEY, J. “A Projection Pursuit Algorithm for Exploratory Data Analysis”, *IEEE Transactions on Computers*, v. 23, n. 9, pp. 881 – 890, 1974.
- [226] HAYKIN, S. *Neural Networks. A Comprehensive Foundation*. 2nd ed. New York, Macmillan College Publishing, 1994.
- [227] HYVÄRINEN, A., OJA, E. “Independent component analysis: algorithms and applications”, *Neural Networks*, v. 13, n. 4-5, pp. 411 – 430, 2000.

- [228] HYVÄRINEN, A., OJA, E. “A fast fixed-point algorithm for independent component analysis”, *Neural Computation*, v. 9, pp. 1483–1492, October 1997.
- [229] CARDOSO, J.-F., SOULOUMIAC, A. “Blind Beamforming for Non Gaussian Signals”, *IEE Proceedings*, v. 140, pp. 362–370, 1993.
- [230] CARDOSO, J. F. “High-order contrasts for independent component analysis”, *Neural Computation*, v. 11, pp. 157–192, 1999.
- [231] BLASCHKE, T., WISKOTT, L. “CuBICA: Independent component analysis by simultaneous third- and fourth-order cumulant diagonalization”, *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 52, n. 5, pp. 1250–1256, may 2004.
- [232] HYVÄRINEN, A., PAJUNEN, P. “Nonlinear independent component analysis: Existence and uniqueness results”, *Neural Networks*, v. 12, n. 3, pp. 429 – 439, 1999.
- [233] ALMEIDA, L. “Linear and nonlinear ICA based on mutual information”. In: *The IEEE Adaptive Systems for Signal Processing, Communications, and Control Symposium (AS-SPCC)*, pp. 117–122, October 2000.
- [234] JUTTEN, C., KARHUNEN, J. “Advances in blind source separation (BSS) and independent component analysis (ICA) for nonlinear mixtures”, *International Journal of Neural Systems*, v. 14, n. 5, pp. 267 – 292, 2004.
- [235] VIKAS, V., WANG, Z., PASSALACQUA, A., ET AL. “Realizable high-order finite-volume schemes for quadrature-based moment methods”, *Journal of Computational Physics*, v. 230, n. 13, pp. 5328–5352, 2011.
- [236] ZUCCA, A., MARCHISIO, D. L., BARRESI, A. A., ET AL. “Implementation of the population balance equation in CFD codes for modelling soot formation in turbulent flames”, *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 1, pp. 87–95, 2006.
- [237] MARCHISIO, D. L. *Quadrature Method of Moments for Poly-Disperse Flows*, v. 492, *CISM Courses and Lectures*. Springer, 2007.
- [238] BAL-DYGA, J., ORCIUCH, W. “Some hydrodynamic aspects of precipitation”, *Powder Technology*, v. 121, n. 1, pp. 9–19, 2001.
- [239] BAXTER, L. L., SMITH, P. J. “Turbulent dispersion of particles: the STP model”, *Energy & Fuels*, v. 7, n. 6, pp. 852–859, 1993.

- [240] LAUNDER, B. E., SPALDING, D. B. *Mathematical Models of Turbulence*. London, Academic Press, 1972.
- [241] LAUNDER, B. E., SPALDING, D. B. “The numerical computation of turbulent flows”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 3, pp. 269–289, 1974.
- [242] POPE, S. B. *Turbulent Flows*. Cambridge, UK, Cambridge University Press, 2000.
- [243] HINZE, J. O. *Turbulence*. 2nd ed. New York, McGraw-Hill, 1975.
- [244] CHEN, C. J., PATEL, V. C. “Near wall turbulence model for complex flows including separation”, *AIAA Journal*, v. 26, pp. 641–648, 1988.
- [245] LAKEHAL, D., RODI, W. “Calculation of the flow past a surface-mounted cube with two-layer turbulence models”, *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, v. 67, pp. 65–78, 1997.
- [246] VOLKOV, K. “Near-wall modelling in computations of turbulent flows on unstructured grids”, *Thermophysics and Aeromechanics*, v. 14, pp. 107–123, 2007.
- [247] WOLFSHTEIN, M. “The velocity and temperature distribution in one-dimensional flow with turbulence augmentation and pressure gradient”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 12, n. 3, pp. 301–318, 1969.
- [248] ANSYS. *ANSYS FLUENT Theory Guide*. ANSYS, Inc., 2011.
- [249] CD-ADAPCO. *STAR-CCM+*. CD-adapco, Inc., 2012.
- [250] KALITZIN, G., MEDIC, G., IACCARINO, G., ET AL. “Near-wall behavior of RANS turbulence models and implications for wall functions”, *Journal of Computational Physics*, v. 204, n. 1, pp. 265 – 291, 2005.
- [251] CRAFT, T., GANT, S., IACOVIDES, H., ET AL. “A new wall function strategy for complex turbulent flows”, *Numerical Heat Transfer*, v. 45, pp. 301–318, 2004.
- [252] POPOVAC, M., HANJALIC, K. “Compound Wall Treatment for RANS Computation of Complex Turbulent Flows and Heat Transfer”, *Flow, Turbulence and Combustion*, v. 78, pp. 177–202, 2007.

- [253] OPENFOAM-1.6-EXT. *The OpenFOAM®Extend Project*, 2013. Disponível em: <<http://www.extend-project.de/>>. Acessado em 01 de Dezembro de 2013.
- [254] ENWALD, H., PEIRANO, E., ALMSTEDT, A.-E. “Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 22, Supplement, pp. 21 – 66, 1996.
- [255] MENTER, F., ESCH, T. “Elements of Industrial Heat Transfer Prediction”. In: *16th Brazilian Congress of Mechanical Engineering*, v. 20, Uberlandia, Brazil, November 2001. COBEM.
- [256] WILCOX, D. *Turbulence Modeling for CFD*. 2nd ed. , DCW Industries Inc., 2002.
- [257] MAPLESOFT INC. “MAPLE v.12”. 2008. Disponível em: <<http://www.maplesoft.com/>>. Acessado em 01 de Junho de 2010.
- [258] GAUTSCHI, W. “Algorithm 726: ORTHPOL — A Package of Routines for generating Orthogonal Polynomials and Gauss-Type Quadrature Rules”, *ACM Transactions on Mathematical Software*, v. 20, n. 1, 1994.
- [259] PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T., ET AL. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. 2nd ed. New York, NY, USA, Cambridge University Press, 1992.
- [260] CARDOSO, J.-F. “JADE em C”. 2011. Disponível em: <<http://perso.telecom-paristech.fr/~cardoso/guidesepsou.html>>extgreater . Acessado em 25 de Setembro de 2011.
- [261] JOHNSON, S. G. “The NLOpt nonlinear-optimization package”. 2012. Disponível em: <<http://ab-initio.mit.edu/nlopt>>. Acessado em 01 de Março de 2012.
- [262] PRICE, W. L. “Global optimization by controlled random search”, *Journal Optimization Theory & Applications*, v. 40, n. 3, pp. 333 – 348, 1983.
- [263] KAELO, P., ALI, M. M. “Some variants of the controlled random search algorithm for global optimization”, *Journal Optimization Theory & Applications*, v. 130, n. 2, pp. 253 – 264, 2006.
- [264] POWELL, M. J. D. “The BOBYQA algorithm for bound constrained optimization without derivatives”. 2009. *Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics, Cambridge England, NA2009/06*.

- [265] FAVERO, J. L., LAGE, P. L. C. “The dual-quadrature method of generalized moments using automatic integration packages”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 38, pp. 1–10, 2012.
- [266] LAGE, P. L. C., FAVERO, J. L. “The Dual-Quadrature Method of Generalized Moments Using Automatic Integration Packages”. In: *Proc. 4th International Conference on Population Balance Modelling*, Berlin, Germany, September 2010.
- [267] JOHNSON, S. G. “CUBATURE: Adaptive multidimensional integration package”. 2009. Disponível em: <<http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Cubature>>. Acessado em 01 de Junho de 2010.
- [268] GENZ, A., MALIK, A. “Algorithm 006: An adaptive algorithm for numerical integration over an N-dimensional rectangular region”, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 6, n. 4, pp. 295 – 302, 1980.
- [269] SECCHI, A. R. “DASSLC: User’s manual -v3.2 (Diferential-Algebraic System Solver in C)”. 2007. Disponível em: <<http://www.enq.ufrgs.br/enqlib/numeric/>>. Acessado em 01 de Junho de 2010.
- [270] FERNÁNDEZ-DÍAZ, J. M., GÓMEZ-GARCÍA, G. J. “Exact solution of Smoluchowski’s continuous multi-component equation with an additive kernel”, *EPL*, v. 78, n. 5, pp. 56002, 2007.
- [271] FAVERO, J. L., SILVA, L. F. L. R., LAGE, P. L. C. “Modeling and simulation of mixing in water-in-oil emulsion flow through a valve-like element using a population balance model”, *Computers & Chemical Engineering*, 2014. Submetido para publicação.
- [272] FAVERO, J. L., SILVA, L. F. L. R., LAGE, P. L. C. “Simulação de escoamentos multifásicos polidispersos usando balanço populacional: evolução da distribuição de tamanho de gotas em emulsões de água em óleo”. In: *XXXVI ENEMP - Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados*, Maceió, Alagoas, October 2013.
- [273] SILVA, E., BARCA, L. F., SOUZA, M. A. D. *Estudo experimental sobre o efeito do escoamento através de singularidades na formação de emulsões de água em óleo. Síntese de resultados experimentais*. Relatório técnico, Laboratório de Separação de Fases, Instituto de Engenharia Mecânica da UNIFEI, Itajubá, 2010.

- [274] SILVA, E., BARCA, L. F., SOUZA, M. A. D. *Estudo experimental sobre o efeito do escoamento através de singularidades na formação de emulsões de água em óleo. Resultados de testes da fase 1.* Relatório técnico, Laboratório de Separação de Fases, Instituto de Engenharia Mecânica da UNIFEI, Itajubá, 2010.
- [275] MCCULLAGH, P. *Tensor Methods in Statistics.* London, Chapman and Hall, 1987.
- [276] WYSS, W. “Cumulants and moments”, *Reports on Mathematical Physics*, v. 18, n. 1, pp. 79 – 86, 1980.
- [277] AMBLARD, P.-O., BROSSIER, J.-M. “Adaptive estimation of the fourth-order cumulant of a white stochastic process”, *Signal Processing*, v. 42, n. 1, pp. 37 – 43, 1995.
- [278] CARDOSO, J. F. “Blind signal separation: statistical principles”, *Proceedings of the IEEE*, v. 86, n. 10, pp. 2009–2025, 1998.
- [279] GOLUB, G. H., LOAN, C. F. V. *Matrix Computations.* 3<sup>a</sup> edição ed. , John Hopkins University Press, 1996.
- [280] MOREAU, E. “A generalization of joint-diagonalization criteria for source separation”, *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 49, n. 3, pp. 530 –541, 2001.
- [281] VOLLMGRAF, R., OBERMAYER, K. “Quadratic optimization for simultaneous matrix diagonalization”, *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 54, n. 9, pp. 3270 –3278, 2006.
- [282] SHIH, T.-H., LIOU, W. W., SHABBIR, A., ET AL. “A New k-epsilon Eddy Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows”, *Computers and Fluids*, v. 24, n. 3, pp. 227 – 238, 1995.
- [283] WILCOX, D. “Re-assessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models”, *AIAA Journal*, v. 26, n. 11, pp. 1299 – 1310, 1988.
- [284] SPALART, P. R., ALLMARAS, S. R. “A One-Equation Turbulence Model for Aerodynamic Flows”, *La Recherche Aerospatiale*, v. 1, pp. 5 – 21, 1994.

# Apêndice A

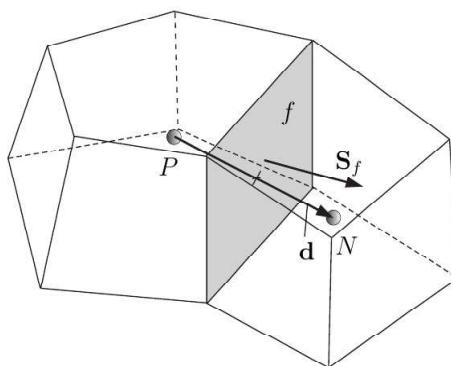
## Operadores no OpenFOAM

A Tabela A.1 mostra algumas palavras chave usadas no arquivo `fvSchemes` e os respectivos operadores matemáticos que as mesmas representam.

**Tabela A.1:** Operadores definidos no OpenFOAM.

Palavra Chave	Categoria do termo Matemático
<code>snGradSchemes</code>	Componente do gradiente normal à face da célula
<code>gradSchemes</code>	Operador Gradiente $\nabla$
<code>divSchemes</code>	Operador Divergente $\nabla \cdot$
<code>laplacianSchemes</code>	Operador Laplaciano $\nabla^2$
<code>timeSchemes</code>	Primeira e segunda derivada temporal $\partial/\partial t, \partial^2/\partial t^2$

Na Figura A.1 é mostrada uma célula típica resultante da discretização do domínio. O ponto  $P$  corresponde à célula de interesse, o ponto  $N$  a uma célula vizinha,  $f$  é a face de comunicação entre as duas células,  $\mathbf{d}$  é o vetor de  $P$  até  $N$  e  $\mathbf{S}_f$  é um vetor que representa a área da face.



**Figura A.1:** Discretização por volumes finitos (adaptado de RUSCHE [14]).

## A.1 Operador Gradiente

O gradiente é um operador que é avaliado sempre explicitamente podendo ser calculado de diversas formas:

- **Integração Gaussiana:** é feita usando a função `fvc::gGrad`. A discretização é obtida usando o método padrão de integração Gaussiana no volume de controle.

$$\int_V \nabla \varphi dV = \int_S d\mathbf{S} \varphi = \sum_f \mathbf{S}_f \varphi_f \quad (\text{A.1})$$

onde  $\varphi$  é uma variável arbitrária e o sub-índice  $f$  corresponde à face da célula.

- **Método dos mínimos quadrados:** a aproximação por mínimos quadrados é feita usando uma função conhecida como `fvc::lsGrad`. A discretização é feita calculando-se o valor do tensor  $\mathbf{G}$  em todos os pontos  $P$  pela soma dos vizinhos  $N$ :

$$\mathbf{G} = \sum_N w_N^2 \mathbf{d}\mathbf{d} \quad (\text{A.2})$$

onde  $w_N = 1/|\mathbf{d}|$  é a função peso. O gradiente pode ser avaliado como:

$$(\nabla \varphi)_P = \sum_N w_N^2 \mathbf{G}^{-1} \cdot \mathbf{d} (\varphi_N - \varphi_P) \quad (\text{A.3})$$

- **Método do gradiente normal à superfície:** o gradiente normal à superfície,  $\mathbf{n}_f \cdot (\nabla \varphi)_f$ , é avaliado nas faces das células. Dessa forma,  $\mathbf{n}_f$  é o vetor normal a face da célula e:

$$(\nabla \varphi)_f = \frac{(\varphi_N - \varphi_P)}{|\mathbf{d}|} \quad (\text{A.4})$$

Neste caso, o operador gradiente é chamado pela função `fvc::snGrad`. Um termo de correção para malhas não-ortogonais pode ser introduzido. Para usar o termo de correção usa-se a função `fvc::snGradCorrection`.

## A.2 Operador Divergente

O operador divergente é um termo explícito. Sua integração no volume de controle e linearização é feita por:

$$\int_V \nabla \cdot \varphi dV = \int_S d\mathbf{S} \cdot \varphi = \sum_f \mathbf{S}_f \cdot \varphi_f \quad (\text{A.5})$$

Já o divergente advectivo é resolvido implicitamente. Para tal, o mesmo é integrado no volume de controle e linearizado como:

$$\int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \varphi) dV = \int_S d\mathbf{S} \cdot (\rho \mathbf{u} \varphi) = \sum_f \mathbf{S}_f \cdot (\rho \mathbf{u})_f \varphi_f \quad (\text{A.6})$$

O valor de  $\varphi_f$  pode ser calculado usando diferentes esquemas de interpolação disponíveis no OpenFOAM.

## A.3 Operador Laplaciano

O operador Laplaciano fornece a integração no volume de controle da expressão mostrada a seguir:

$$\int_V \nabla \cdot (\Gamma \nabla \varphi) dV = \int_S d\mathbf{S} \cdot (\Gamma \nabla \varphi) = \sum_f \Gamma_f \mathbf{S}_f \cdot (\nabla \varphi)_f \quad (\text{A.7})$$

A discretização do gradiente na face é totalmente implícita quando o comprimento  $\mathbf{d}$  entre o centro da célula de interesse  $P$  e o centro da célula vizinha  $N$  é ortogonal ao plano da face:

$$\mathbf{S}_f \cdot (\nabla \varphi)_f = |\mathbf{S}_f| \frac{\varphi_N - \varphi_P}{|\mathbf{d}|} \quad (\text{A.8})$$

No caso de malhas não-ortogonais, um termo explícito adicional é introduzido, o qual é calculado através da interpolação dos valores dos gradientes no centro das células, usando diferenças centrais. No trabalho de JASAK [168] está descrito mais detalhadamente como este procedimento é feito no OpenFOAM.

## A.4 Integração Temporal

Para a derivada temporal de primeira ordem  $\partial/\partial t$  a integração é feita no volume de controle da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \varphi dV = \mathcal{L}(\varphi) \quad (\text{A.9})$$

O termo é discretizado no tempo usando:

- **Valores novos:**  $\varphi^n \equiv \varphi(t + \Delta t)$  para o passo de tempo que está sendo resolvido.
- **Valores do passo anterior:**  $\varphi^o \equiv \varphi(t)$  valor do passo de tempo anterior.

- **Valores de dois passos anteriores:**  $\varphi^{oo} \equiv \varphi(t - \Delta t)$  valor do passo de tempo anterior ao último passo de tempo.

Os esquemas Euler implícito e explícito e o método de Crank-Nicholson são dados por:

$$\frac{\varphi^n - \varphi^o}{\Delta t} = \theta \mathcal{L}(\varphi^n) + (1 - \theta) \mathcal{L}(\varphi^o) \quad (\text{A.10})$$

onde o método de Euler implícito e explícito são obtidos usando  $\theta = 1$  e  $\theta = 0$ , respectivamente. Estes dois métodos são de primeira ordem. O método de Crank-Nicholson é obtido usando  $\theta = 1/2$ . Este por sua vez é um método de segunda ordem [164]. No OpenFOAM a implementação do método Crank-Nicholson é diferente da forma geral colocada acima. Existe um parâmetro que pondera entre os método de Crank-Nicholson e Euler implícito. Crank-Nicholson puro é obtido usando valor do parâmetro igual a 1 e Euler implícito é obtido usando valor zero. Valores intermediários correspondem a uma mistura desses dois métodos.

O esquema de diferenças *backward* é de segunda ordem. Este esquema usa dois passos de tempo anteriores ao passo atual para o cálculo e necessita guardar uma maior quantidade de dados, se comparado com o método de Euler implícito. Assim, este método é dado por [164]:

$$\frac{3\varphi^n - 4\varphi^o + \varphi^{oo}}{2\Delta t} = \mathcal{L}(\varphi^n) \quad (\text{A.11})$$

## A.5 Outros Operadores auxiliares

Além dos operadores diferenciais comentados no item anterior existe ainda uma grande diversidade de operadores auxiliares como, por exemplo:

- Operador `interpolationSchemes`: é usado para realocar a posição de um campo, por exemplo, interpolar os valores de um campo do centro para a face das células.
- Operador `fluxRequired`: esse operador informa quais variáveis dependem do fluxo para serem determinadas. Por exemplo, em muitos algoritmos de solução de problemas de fluidodinâmica computacional existe a necessidade de se gerar o fluxo logo após se resolver a equação da pressão para posteriormente se executar o passo seguinte do algoritmo.
- Operador `surfaceIntegrate` para calcular a integral sobre uma superfície.

# Apêndice B

## A PCA aplicada a um Conjunto de Dados

Considere um conjunto de  $n$  amostras de dados com dimensão  $h$ , cada uma delas representada pelo vetor  $\mathbf{x} \in \Re^h$ . Em geral  $n >> h$ . A média destes conjuntos de dados é facilmente calculada por:

$$\boldsymbol{\mu} = [\mu_j], \quad \mu_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ji} \quad (\text{B.1})$$

onde  $x_j, j = 1, \dots, h$  são as componentes de  $\mathbf{x}$ , cada qual representando o valor de uma das variáveis observadas. Usando a média, o conjunto de dados pode ser facilmente *centrado*:

$$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \boldsymbol{\mu} \quad (\text{B.2})$$

onde  $\tilde{\mathbf{x}}$  é o vetor de dados centrados, isto é, o valor médio de cada variável é nulo.

Note que a operação descrita pela Equação B.2 não altera a covariância dos dados. Isto pode ser visto definindo a matriz de dados  $h \times n$  como:

$$\tilde{\mathbf{X}} = [\tilde{\mathbf{x}}_1 | \tilde{\mathbf{x}}_2 | \dots | \tilde{\mathbf{x}}_n] \quad (\text{B.3})$$

que permite escrever a matriz de covariância  $h \times h$  dos dados  $\tilde{\mathbf{x}}$  como:

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\tilde{\mathbf{X}}} = \frac{1}{n-1} \tilde{\mathbf{X}} \tilde{\mathbf{X}}^T = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \tilde{\mathbf{x}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i^T = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^T \quad (\text{B.4})$$

que, portanto, é igual a covariância dos dados  $\mathbf{x}$ .

Cada elemento da matriz  $\boldsymbol{\Sigma}_{\tilde{\mathbf{X}}}$  é a covariância entre um par de variáveis. A covariância de uma variável com ela própria é a sua variância, a qual representa uma medida de quanto dispersos estão os dados em relação à média daquela variável. Uma covariância positiva entre duas variáveis indica que ambas crescem juntas, já

uma covariância negativa indica que enquanto uma variável cresce a outra decresce. Quanto maiores esses valores, em módulo, mais significativo será o acoplamento entre as diferentes direções.

Deve-se notar que  $\Sigma_{\tilde{X}}$  é uma matriz simétrica positiva semi-definida, pois

$$\mathbf{a}^T \Sigma_{\tilde{X}} \mathbf{a} = \frac{1}{n-1} \mathbf{a}^T \tilde{\mathbf{X}} \tilde{\mathbf{X}}^T \mathbf{a} = \frac{1}{n-1} \mathbf{b}^T \mathbf{b} = \frac{1}{n-1} \|\mathbf{b}\| \geq 0, \quad \forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^h, \quad \mathbf{b} = \tilde{\mathbf{X}}^T \mathbf{a} \quad (\text{B.5})$$

Por ser real e simétrica,  $\Sigma_{\tilde{X}}$  tem sempre  $h$  autovalores linearmente independentes que podem ser feitos ortonormais entre si e, portanto, sempre pode ser diagonalizada através de uma matriz unitária (ou ortogonal)  $\mathbf{G}$  ( $\mathbf{G}^{-1} = \mathbf{G}^T$ ,  $\mathbf{G}^T \mathbf{G} = \mathbf{I}$ ):

$$\Sigma_{\tilde{X}} = \mathbf{G}^T \mathbf{D} \mathbf{G} \quad \text{ou} \quad \mathbf{D} = \mathbf{G} \Sigma_{\tilde{X}} \mathbf{G}^T \quad (\text{B.6})$$

sendo as *linhas* de  $\mathbf{G}$  os auto-vetores ortonormais de  $\Sigma_{\tilde{X}}$  e  $\mathbf{D}$  é a matriz diagonal que contém os autovalores de  $\Sigma_{\tilde{X}}$  correspondentes. Como  $\Sigma_{\tilde{X}}$  é positiva semi-definida, os autovalores são sempre não negativos. Note que a transformação dada pela Equação B.6 pode ser obtida através da decomposição em valores singulares [218, 220] (ver Apêndice D).

Uma matriz unitária representa uma rotação de corpo rígido sem ( $\det(\mathbf{G}) = 1$ ) ou com reflexão ( $\det(\mathbf{G}) = -1$ ) de eixos. É possível verificar que as direções dadas pelos autovalores de  $\Sigma_{\tilde{X}}$  são as direções das componentes principais aplicando a matriz de rotação  $\mathbf{G}$  ao conjunto de dados, pois, se:

$$\mathbf{z} = \mathbf{G} \tilde{\mathbf{x}} \quad \text{ou} \quad \mathbf{Z} = \mathbf{G} \tilde{\mathbf{X}} \quad (\text{B.7})$$

então

$$\Sigma_Z = \frac{1}{n-1} \mathbf{Z} \mathbf{Z}^T = \frac{1}{n-1} \mathbf{G} \tilde{\mathbf{X}} \tilde{\mathbf{X}}^T \mathbf{G}^T = \mathbf{G} \Sigma_{\tilde{X}} \mathbf{G}^T = \mathbf{D} \quad (\text{B.8})$$

que mostra que as variáveis  $\mathbf{z}$  estão descorrelacionadas. A transformação da PCA se completa através da ordenação das direções da ordem decrescentes das variâncias, isto é, dos autovalores de  $\Sigma_{\tilde{X}}$ . Isto pode ser representado por uma matriz de permutação,  $\mathbf{P}$ , que é uma matriz unitária que contém apenas um elemento não nulo e igual a um em cada linha e cada coluna. Permitindo que o elemento não nulo seja  $-1$ , a matriz  $\mathbf{P}$  pode representar também uma reflexão do eixo coordenado. Assim, definindo  $\mathbf{y} = \mathbf{P} \mathbf{z}$ , tem-se:

$$\mathbf{y} = \mathbf{P} \mathbf{G} \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{H} \tilde{\mathbf{x}} \quad (\text{B.9})$$

Note que a permutação não interfere na diagonalização da matriz de covariância, pois

$$\bar{\mathbf{D}} = \mathbf{P} \mathbf{D} \mathbf{P}^T = \mathbf{P} \mathbf{G} \Sigma_{\tilde{X}} \mathbf{G}^T \mathbf{P}^T = \mathbf{H} \Sigma_{\tilde{X}} \mathbf{H}^T \quad \text{ou} \quad \Sigma_{\tilde{X}} = \mathbf{H}^T \bar{\mathbf{D}} \mathbf{H} \quad (\text{B.10})$$

onde  $\bar{\mathbf{D}}$  é a matriz diagonal com os autovalores ordenados em ordem decrescente e as linhas de  $\mathbf{H}$  são formadas pelos autovetores correspondentes nesta ordenação. Desta forma,  $\mathbf{H}$  é a transformada de Hotelling. Se as últimas linhas de  $\mathbf{H}$ , que são os auto-vetores correspondentes a autovalores nulos ou de baixa magnitude, foram feitas nulas, a Equação B.9 pode efetivamente gerar um vetor transformado  $\mathbf{y}$  com dimensão menor que  $h$ .

Considere agora a decomposição em valores singulares da matriz transposta dos dados centrados,  $\tilde{\mathbf{X}}^T$ ,  $n \times h$ , dada por:

$$\tilde{\mathbf{X}}^T = \mathbf{U}\mathbf{C}\mathbf{V}^T \quad (\text{B.11})$$

onde  $\mathbf{U}$  é uma matriz ortogonal  $n \times h$ ,  $\mathbf{V}$  é uma matriz ortogonal  $h \times h$  e  $\mathbf{C}$  é uma matriz diagonal  $h \times h$  com os valores característicos de  $\tilde{\mathbf{X}}_T$ , ordenados em ordem decrescente de magnitude. Logo,

$$(n-1)\Sigma_{\tilde{\mathbf{X}}} = (\mathbf{U}\mathbf{C}\mathbf{V}^T)^T \mathbf{U}\mathbf{C}\mathbf{V}^T = \mathbf{V}\mathbf{C}\mathbf{U}^T\mathbf{U}\mathbf{C}\mathbf{V}^T = \mathbf{V}\mathbf{C}\mathbf{C}\mathbf{V}^T = \mathbf{V}\mathbf{C}^2\mathbf{V}^T \quad (\text{B.12})$$

Comparando as Equações (B.10) e (B.12), fica claro que  $\mathbf{V} = \mathbf{H}^T$  e  $(n-1)\bar{\mathbf{D}} = \mathbf{C}^2$ , de forma que a transformada de Hotelling pode ser diretamente obtida dos dados centrados.

Resumindo, o método de PCA transforma o vetor  $\mathbf{x}$  no vetor  $\mathbf{y} \in \Re^m$  para  $m \leq h$  projetado nas  $m$  direções ortogonais de maior variância, ou seja, as componentes principais. Como os dados estão descorrelacionados nas coordenadas das direções principais, eles podem ser representados de forma mais clara e concisa. Outra vantagem de descorrelacionar os dados é a possível redução da dimensionalidade dos dados pois, em geral, grande parte da variância dos dados é explicada por um número reduzido de componentes, sendo possível descartar as restantes sem grande perda de informação. A PCA ainda fornece uma medida da quantidade de informação que é perdida quando uma direção é descartada. Como a PCA é um método que usa estatísticas de segunda ordem, os dados serão tanto melhor representados quanto mais se aproximarem de uma distribuição do tipo normal, tendo em vista que as estatísticas de segunda ordem são suficientes para representar este tipo de distribuição.

O procedimento para a aplicação da PCA sobre um conjunto de dados pode então ser resumido nos seguintes passos.

- Obter as  $n$  amostras de dados  $\mathbf{x}$  com dimensão  $h$ .
- Calcular a média dos dados  $\boldsymbol{\mu}$ .
- Subtrair a média dos dados para obter um novo conjunto de dados centraliza-

dos  $\tilde{\mathbf{x}}$ , etapa conhecida como *centering*.

- Calcular a matriz de covariância dos dados centralizados  $\Sigma_{\tilde{X}}$  com dimensão  $h \times h$ .
- Calcular a matriz de autovalores  $\mathbf{D}$  e de autovetores  $\mathbf{G}$  da matriz de covariância.
- Obter a matriz da transformada de Hotelling,  $\mathbf{H}$ , que nada mais é que ordenar os autovetores que compõem as suas linhas na ordem decrescente de seus autovalores. Dessa forma, as linhas dessa matriz correspondem aos autovetores da matriz de covariância arranjados de tal forma que a primeira linha contém o autovetor associado ao maior autovalor e assim sucessivamente até que a última linha corresponda ao menor autovalor. O uso de um método como a decomposição em valores característicos já devolve os autovetores ordenados na ordem decrescente dos autovalores, não sendo necessária esta etapa [218, 220].
- Aplicar a transformada de Hotelling sobre os dados para obter o novo conjunto de dados,  $\mathbf{y}$ , descorrelacionados, onde  $\mathbf{y} = \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{H}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})$ . Essa transformação mapeia os valores de  $\mathbf{x}$  em valores de  $\mathbf{y}$  cuja média é zero e cuja matriz de covariância é diagonal.
- A reconstrução de  $\mathbf{x}$  a partir de  $\mathbf{y}$  é dada por  $\mathbf{x} = \mathbf{H}^T\mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}$ . Uma redução de dimensionalidade dos dados pode ser obtida utilizando somente os autovetores que representam as direções com as maiores variâncias, isto é, descartando-se a informação contida nas últimas colunas da matriz  $\mathbf{H}^T$ .

# Apêndice C

## Fundamentação teórica da ICA

### C.1 Medidas de não-Gaussianidade

O afastamento de uma distribuição da Gaussiana correspondente com a mesma matriz de covariância é função das estatísticas de ordem superior a 2, que são mais compactamente representadas pelos chamados cumulantes, que serão vistos a seguir.

#### C.1.1 Cumulantes

Os cumulantes foram inicialmente introduzidos na área da astronomia, pelo matemático Thorvald N. Thiele (1838-1910) que os denominou semi-invariantes. Em alguns trabalhos antigos os cumulantes são também designados de momentos cumulativos [231, 275–278]. Os cumulantes possuem relação direta com os momentos e, de forma geral, os cumulantes de qualquer ordem podem ser obtidos a partir dos momentos de até mesma ordem e vice-versa. Os cumulantes são uma alternativa aos momentos para representar as estatísticas de uma distribuição e, em geral, os cálculos estatísticos ficam mais simples quando feitos usando os cumulantes.

Para um distribuição monovariada normalizada de uma única variável real  $x$ , o cumulante de ordem  $k$  é definido por [217]:

$$\kappa_k = \frac{1}{i^k} \left[ \frac{\partial^k \Psi_x(w)}{\partial w^k} \right]_{w=0}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (\text{C.1})$$

onde  $\Psi_x(w)$  é a função geradora de cumulantes que é dada por:

$$\Psi_x(w) = \log[M_x(w)] \quad (\text{C.2})$$

onde  $M_x(w)$  é a função geradora de momentos que, para cada número real  $w$ , é dada por:

$$M_x(w) = E \{ e^{iwx} \} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iwx} f(x) dx \quad (\text{C.3})$$

Os cumulantes podem ser calculados a partir dos momentos da distribuição normalizada ( $\mu_0 = 1$ ) através do determinante

$$\kappa_k = (-1)^{k-1} \begin{vmatrix} \mu_1 & 1 & \cdots & 0 \\ \mu_2 & \binom{1}{0}\mu_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_k & \binom{k-1}{0}\mu_{k-1} & \cdots & \binom{k-1}{k-2}\mu_1 \end{vmatrix} \quad (\text{C.4})$$

ou através da seguinte recursão:

$$\kappa_k = \mu_k - \sum_{i=1}^{k-1} \binom{k-1}{i-1} \kappa_i \mu_{k-i}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (\text{C.5})$$

Assim, os 4 primeiros cumulantes são dados por:

$$\kappa_1 = \mu_1 \quad (\text{C.6})$$

$$\kappa_2 = \mu_2 - \mu_1^2 \quad (\text{C.7})$$

$$\kappa_3 = \mu_3 - 3\mu_1\mu_2 + 2\mu_1^3 \quad (\text{C.8})$$

$$\kappa_4 = \mu_4 - 4\mu_3\mu_1 - 3\mu_2^2 + 12\mu_2\mu_1^2 - 6\mu_1^4 \quad (\text{C.9})$$

Os cumulantes de ordem  $k \geq 2$  são mais simplesmente obtidos a partir dos momentos centrados,  $\tilde{\mu}_i, i \leq k$ , pois:

$$\kappa_k = \tilde{\mu}_k - \sum_{i=2}^{k-2} \binom{k-1}{i-1} \kappa_i \tilde{\mu}_{k-i}, \quad k = 2, \dots \quad (\text{C.10})$$

que permite escrever:

$$\kappa_2 = \tilde{\mu}_2 \quad (\text{C.11})$$

$$\kappa_3 = \tilde{\mu}_3 \quad (\text{C.12})$$

$$\kappa_4 = \tilde{\mu}_4 - 3\tilde{\mu}_2^2 \quad (\text{C.13})$$

Dessa forma, o  $k$ -ésimo cumulante é função dos momentos até a ordem  $k$ , e vice-versa.

Representando como  $\kappa_k(x)$  o cumulante de ordem  $k$  para a distribuição na variável  $x$ , podemos escrever as seguintes propriedades interessantes dos cumulantes:

- Invariância quanto ao deslocamento da origem (semi-invariância):

$$\kappa_1(x + \alpha) = \kappa_1(x) + \alpha$$

$$\kappa_k(x + \alpha) = \kappa_k(x), k \geq 2$$

- Homogeneidade ou multilinearidade:

$$\kappa_k(\alpha x) = \alpha^k \kappa_k(x)$$

- Aditividade para variáveis independentes  $x$  e  $y$ :

$$\kappa_k(x + y) = \kappa_k(x) + \kappa_k(y)$$

### C.1.2 Excesso de Curtose

Existem diversas medidas que podem ser usadas como estimadores da não-gaussianidade. A curtose (*kurtosis*) é uma medida clássica de não-gaussianidade e é uma das medidas mais amplamente usadas para a busca dos componentes independentes [227]. A curtose de uma distribuição normalizada de uma única variável é igual ao seu cumulante de quarta ordem. É comum também encontrar na literatura o termo excesso de curtose:

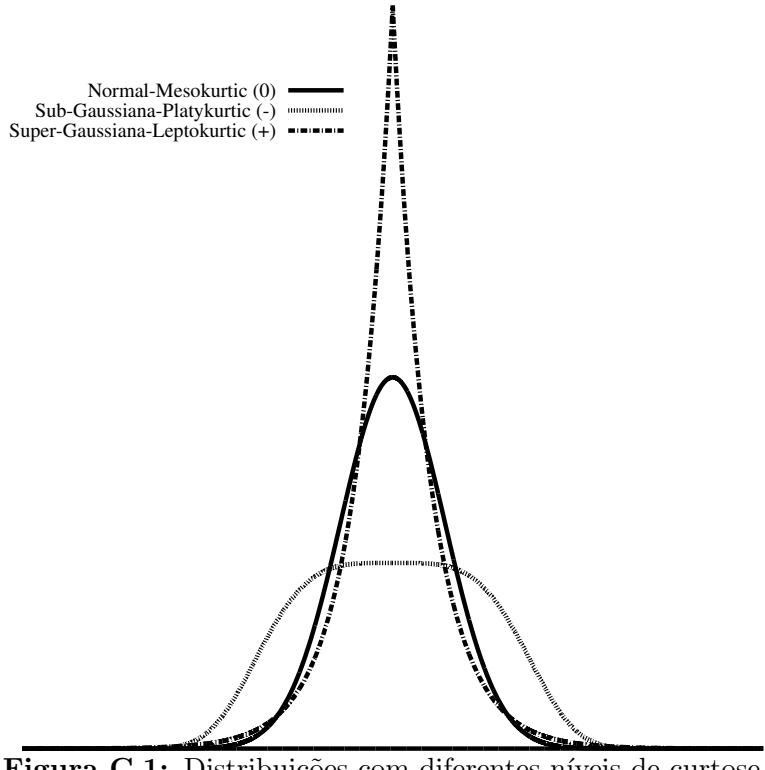
$$\gamma_2 = \frac{\kappa_4}{\kappa_2^2} = \frac{\tilde{\mu}_4}{\tilde{\mu}_2^2} - 3 \quad (\text{C.14})$$

onde a notação  $\gamma_2$  é usada na literatura para representar o excesso de curtose, uma vez que existe também uma outra quantidade, dada por  $\gamma_1$ , que está associada a medida da assimetria (*skewness*) de uma distribuição. Como uma distribuição Gaussiana apresenta  $\tilde{\mu}_4 = 3\tilde{\mu}_2^2$ , o excesso de curtose de uma PDF Gaussiana é nulo, mostrando que seu valor mede a não-Gaussianidade de uma distribuição.

Uma curtose elevada significa pouca flutuação dos dados, ou seja, estão mais próximos à média. Valores de curtose baixos significam que os dados apresentam um grande nível de variância, estão mais distantes da média. A Figura C.1 mostra três distribuições com diferentes valores de curtose. A diferença entre as curvas pode ser explicada pelos diferentes valores de excesso de curtose que cada distribuição possui. Quando o excesso de curtose é nulo a distribuição é chamada de mesocúrtica (*mesokurtic*). Um excesso de curtose positivo significa que a distribuição possui uma cauda mais significante que uma distribuição normal e é chamada de leptocúrtica (*leptokurtic*). Já um excesso de curtose negativo significa que a distribuição possui uma cauda menos significante que uma distribuição normal sendo chamada de platicúrtica (*platykurtic*).

### C.1.3 Cumulantes de Distribuições Multivariadas

A definição de cumulantes pode ser generalizada para funções multivariadas. Para os propósitos deste trabalho, é suficiente saber que os cumulantes de ordem  $s$  de funções multivariadas,  $x \in \Re^h$  podem ser representados por tensores,  $\mathbf{K}$ , da mesma



**Figura C.1:** Distribuições com diferentes níveis de curtose.

ordem em um espaço de dimensão  $h$ , podendo ser representado através dos tensores dos momentos centrados de até mesma ordem,  $\mathbf{T}$ . Por exemplo, os cumulantes de segunda, terceira e quarta ordem são expressos por:

$$K_{ij} = \text{Cum}(x_i, x_j) = T_{ij} = \Sigma_{ij} \quad (\text{C.15})$$

$$K_{ijk} = \text{Cum}(x_i, x_j, x_k) = T_{ijk} \quad (\text{C.16})$$

$$K_{ijkl} = \text{Cum}(x_i, x_j, x_k, x_l) = T_{ijkl} - T_{ij}T_{kl} - T_{ik}T_{jl} - T_{il}T_{jk} \quad (\text{C.17})$$

onde  $i, j, k, l = 1, \dots, h$  e  $\Sigma_{ij}$  são os componentes da matriz de covariância. Note que, tal como os momentos, os tensores dos cumulantes são simétricos, pois seus elementos com os mesmos valores dos índices em qualquer ordenação são iguais. Além disso, eles também satisfazem relações de multilinearidade para qualquer transformação linear invertível,  $\mathbf{x}' = \mathbf{Ax}$ , como, por exemplo, para o cumulante de quarta ordem [275]:

$$K'_{mnop} = \sum_{i,j,k,l=1}^h A_{mi}A_{nj}A_{ok}A_{pl}K_{ijkl} \quad (\text{C.18})$$

Além das propriedades representadas acima, cabe destacar que:

- os componentes do vetor de variáveis  $\mathbf{x}$  são independentes se, e somente se, os cumulantes cruzados ou misturados, isto é, que tem pelo menos dois índices com valores diferentes, são nulos, e

- quando uma distribuição tende a uma normal (Gaussian), os cumulantes de ordem maior ou igual a 3 podem ser desprezados (são nulos), enquanto que os momentos de mesma ordem não.

Desta forma, a não-Gaussianidade está associada à existência de cumulantes não nulos de ordem maior ou igual a 3 e a independência das variáveis leva à nulidade dos seus componentes cruzados.

## C.2 Fundamentos da Teoria da Informação

A teoria de informação sustenta que a informação ganha com a realização de um evento,  $I(x_k)$ , está relacionado com a probabilidade do mesmo ocorrer,  $p_k$ , ou seja:

$$I(x_k) = \log\left(\frac{1}{p_k}\right) = -\log(p_k) \quad (\text{C.19})$$

onde a base logarítmica define a unidade da informação, isto é, se a base for 2 a unidade será *bits*. Logo, quanto mais raro é o evento, maior a informação contida no mesmo. Já a entropia absoluta de uma variável aleatória discreta é uma medida da quantidade média de informação transmitida por mensagem  $H_e = E[I(x_k)]$  [226].

Para distribuições de densidade de probabilidade, define-se a *entropia diferencial* como [226]:

$$\Xi(f_{\mathbf{x}}) = -E\{\ln[f(\mathbf{x})]\} = -\int_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \ln[f(\mathbf{x})] d\mathbf{x} \quad (\text{C.20})$$

que tem algumas propriedades interessantes:

- invariância quanto à translação:

$$\Xi(f_{\mathbf{x}+c}) = \Xi(f_{\mathbf{x}}) \quad (\text{C.21})$$

- transformação linear:

$$\Xi(f_{\mathbf{Ax}}) = \Xi(f_{\mathbf{x}}) + \ln|\det \mathbf{A}| \quad (\text{C.22})$$

- a distribuição Gaussian tem entropia máxima:

$$\Xi(\phi_{\mathbf{x}}) \geq \Xi(f_{\mathbf{x}}) \quad (\text{C.23})$$

onde  $\phi_{\mathbf{x}}$  é a distribuição Gaussian multivariada com matriz de covariância,  $\Sigma$ , igual a de  $f_{\mathbf{x}}$ , sendo que ambas tem média nula. Neste caso, a Gaussiana

com  $h$  variáveis é expressa por:

$$\phi_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-h/2} (\det \Sigma)^{-1/2} \exp\left(\frac{1}{2}\mathbf{x}^T \Sigma^{-1} \mathbf{x}\right) \quad (\text{C.24})$$

e sua entropia diferencial é dada por:

$$\Xi(\phi_{\mathbf{x}}) = \frac{1}{2} \{h[1 + \ln(2\pi)] + \ln \det \Sigma\} \quad (\text{C.25})$$

Portanto, a distribuição Gaussiana é a distribuição menos estruturada ou mais randômica possível entre todas as distribuições com a mesma matriz de covariância, apresentando a maior entropia possível. Isto permite usar a não-gaussianidade como medida de entropia. Desta forma, é natural definir a *negentropia* como o quanto a distribuição se afasta da Gaussiana correspondente por:

$$J(f_{\mathbf{x}}) = \Xi(\phi_{\mathbf{x}}) - \Xi(f_{\mathbf{x}}) \quad (\text{C.26})$$

de forma que  $J(f_{\mathbf{x}}) \geq 0$ , só sendo nula para as distribuições Gaussianas [227] correspondentes. Além disso, devido à Equação C.22, a negentropia é invariante em uma transformação linear de coordenadas que seja invertível [223].

A teoria da informação também define a chamada informação mútua entre duas variáveis vetoriais randômicas,  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$ , como sendo a diferença das entropias diferenciais das distribuições de probabilidade  $f_{\mathbf{x}}(x)$  e  $f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ , onde esta última é a distribuição de probabilidade condicional de  $\mathbf{x}$  com  $\mathbf{y}$  conhecido [226]. Usando a definição de entropia diferencial, pode-se escrever:

$$I(f_{\mathbf{x}}, f_{\mathbf{y}}) = \Xi(f_{\mathbf{x}}) - \Xi(f_{\mathbf{x}|\mathbf{y}}) = \int_{\mathbf{x}} \int_{\mathbf{y}} f_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \ln \left[ \frac{f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}|\mathbf{y})}{f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})} \right] d\mathbf{x}d\mathbf{y} \quad (\text{C.27})$$

Como  $f_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}|\mathbf{y})f_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})$ , pode-se facilmente provar que

$$I(f_{\mathbf{x}}, f_{\mathbf{y}}) = \Xi(f_{\mathbf{x}}) - \Xi(f_{\mathbf{x}|\mathbf{y}}) = \Xi(f_{\mathbf{y}}) - \Xi(f_{\mathbf{y}|\mathbf{x}}) = \Xi(f_{\mathbf{x}}) + \Xi(f_{\mathbf{y}}) - \Xi(f_{\mathbf{x},\mathbf{y}}) \quad (\text{C.28})$$

e, portanto,  $I(f_{\mathbf{x}}, f_{\mathbf{y}}) = I(f_{\mathbf{y}}, f_{\mathbf{x}})$ . Além disso, verifica-se que  $I(f_{\mathbf{x}}, f_{\mathbf{y}}) \geq 0$ , só sendo nula se as variáveis são independentes.

### C.3 Medidas de Independência de Variáveis

O ponto chave nos algoritmos de ICA é a definição de uma medida que informe o grau de dependência entre diferentes variáveis aleatórias. Há vantagens em trabalhar com dados ou distribuições com média nula (centrados), o que vai ser admitido de agora em diante.

Da seção anterior, fica claro que a medida mais direta de independência entre si das variáveis  $x_i, i = 1, \dots, h$  que compõem o vetor  $\mathbf{x}$ , cuja distribuição de densidade de probabilidade é dada por  $f(\mathbf{x})$ , é a *informação mútua* entre a mesma e o produto das distribuições marginais de densidade de probabilidade para cada uma das variáveis,  $f_{x_i}(x_i), i = 1, \dots, h$  [223, 226]:

$$I(f_{\mathbf{x}}) = \int_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \ln \left( \frac{f(\mathbf{x})}{\hat{f}(\mathbf{x})} \right) d\mathbf{x} \quad (\text{C.29})$$

onde

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^h f_{x_i}(x_i) \quad (\text{C.30})$$

e

$$f_{x_i}(x_i) = \int_{\bar{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x}) d\bar{\mathbf{x}} \quad (\text{C.31})$$

sendo que  $\bar{\mathbf{x}}$  não contém a variável  $x_i$ . Usando a Equação C.27, a Equação C.29 pode ser escrita como:

$$I(f_{\mathbf{x}}) = \sum_{i=1}^h \Xi(f_{x_i}) - \Xi(f_{\mathbf{x}}) \quad (\text{C.32})$$

Utilizando a definição de negrentropia, Equação C.26, e a Equação C.25, pode-se escrever:

$$I(f_{\mathbf{x}}) = J(f_{\mathbf{x}}) - \sum_{i=1}^h J(f_{x_i}) + \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{\prod_{i=1}^h \sigma_i}{\det \Sigma} \right] \quad (\text{C.33})$$

onde  $\sigma_i$  são as variâncias das distribuições  $f_{x_i}, i = 1, \dots, h$ , que são iguais aos termos da diagonal de  $\Sigma$ , isto é,  $\sigma_i = \Sigma_{ii}$ . COMON [223] mostrou que a condição necessária e suficiente para que o último termo da Equação C.33 se anule é que a matriz de covariância seja diagonal. Isto pode ser facilmente obtido trabalhando-se com *dados ou distribuições branqueados*, conforme visto na próxima seção.

## C.4 Branqueamento de Dados e Estatísticas

O processo de branqueamento dos dados ou distribuições equivale à utilização de distribuições em variáveis padronizadas, isto é, com média nula (centralizada) e com à matriz de covariância igual a identidade. Tal condição é obtida centralizando os dados, Equação B.2, ou as distribuições, Equação 5.8, calculando a matriz de covariância, Equação B.4 ou Equação 5.10, e diagonalizando usando a SVD, conforme visto na Equação B.10, que define a transformada de Hotteling,  $\mathbf{H}$ , e a matriz diagonal com os valores característicos em ordem decrescente de valor,  $\bar{\mathbf{D}}$ . A transformação

linear que branqueia os dados e distribuições é dada por:

$$\mathbf{W} = \mathbf{H}^T \bar{\mathbf{D}}^{-1/2} \mathbf{H} \quad (\text{C.34})$$

e os dados branqueados são dados por:

$$\mathbf{b} = \mathbf{W} \tilde{\mathbf{x}} \quad \text{ou} \quad \mathbf{B} = \mathbf{W} \tilde{\mathbf{X}} \quad (\text{C.35})$$

Nota-se que a matriz de covariância dos dados branqueados é dada por:

$$\begin{aligned} \Sigma_B &= \frac{1}{n-1} \mathbf{B} \mathbf{B}^T = \frac{1}{n-1} \mathbf{W} \tilde{\mathbf{X}} \tilde{\mathbf{X}}^T \mathbf{W}^T \\ &= \mathbf{W} \Sigma_{\tilde{\mathbf{X}}} \mathbf{W}^T = \mathbf{H}^T \bar{\mathbf{D}}^{-1/2} \mathbf{H} \mathbf{H}^T \bar{\mathbf{D}} \mathbf{H} \left( \mathbf{H}^T \bar{\mathbf{D}}^{-1/2} \mathbf{H} \right)^T = \mathbf{I} \end{aligned} \quad (\text{C.36})$$

e que, para uma transformação linear qualquer,  $\mathbf{z} = \mathbf{Ab}$  ou  $\mathbf{Z} = \mathbf{AB}$

$$\Sigma_Z = \frac{1}{n-1} \mathbf{Z} \mathbf{Z}^T = \frac{1}{n-1} \mathbf{A} \mathbf{B} (\mathbf{A} \mathbf{B})^T = \mathbf{A} \Sigma_B \mathbf{A}^T = \mathbf{A} \mathbf{A}^T \quad (\text{C.37})$$

Portanto, para que o vetor  $\mathbf{z}$  pertença ao espaço das distribuições de probabilidade padronizadas, que tem variância unitária, é necessário e suficiente que a transformação linear seja ortogonal, uma vez que  $\mathbf{Q} \mathbf{Q}^T = \mathbf{I}$ .

A transformação da matriz de covariância dada pela Equação C.36 pode ser generalizada para as estatísticas de ordem superior de acordo com a multilinearidade dos tensores de momentos ou cumulantes. Por exemplo, para o cumulante de quarta ordem:

$$K'_{mnop} = \sum_{i,j,k,l=1}^h W_{mi} W_{nj} W_{ok} W_{pl} K_{ijkl} \quad (\text{C.38})$$

Nota-se que, de acordo com as Equações C.21 e C.22, a entropia dos dados brancos é dada por:

$$\Xi(f_b) = \Xi(f_{\tilde{x}}) + \ln |\det \mathbf{W}| = \Xi(f_{x-\mu}) + \ln |\det \bar{\mathbf{D}}^{-1/2}| = \Xi(f_x) + \ln |\det \bar{\mathbf{D}}^{-1/2}| \quad (\text{C.39})$$

já que  $|\det \mathbf{H}| = 1$ . Desta forma, a negentropia não é alterada no processo de branqueamento, pois  $\phi_x$  e  $f_x$  tem a mesma matriz de covariância:

$$J(f_b) = \Xi(\phi_b) - \Xi(f_b) = \Xi(\phi_x) - \Xi(f_x) = J(f_x) \quad (\text{C.40})$$

Da mesma forma, a negentropia não muda na aplicação de uma transformação ortogonal,  $\mathbf{Q}$ , sobre os dados branqueados

$$J(f_z) = J(f_b) = J(f_x), \quad \mathbf{z} = \mathbf{Q} \mathbf{b} \quad (\text{C.41})$$

pois  $|\det \mathbf{Q}| = 1$ . Usando a Equação C.33, pode-se assim calcular a informação mútua da distribuição de probabilidade  $\mathbf{z} = \mathbf{Q}\mathbf{b}$  por

$$I(f_{\mathbf{z}}) = J(f_{\mathbf{z}}) - \sum_{i=1}^h J(f_{z_i}) = J(f_{\mathbf{x}}) - \sum_{i=1}^h J(f_{z_i}) \quad (\text{C.42})$$

## C.5 Funções Contraste

Como critério para a aplicação da ICA, COMON [223] definiu que a *função contraste*,  $\Omega$ , precisa ter as seguintes propriedades:

- ser invariante a uma permutação das variáveis (multiplicação de  $\mathbf{x}$  por uma matriz de permutação,  $\mathbf{P}$ ), isto é,  $\Omega(f_{\mathbf{x}}) = \Omega(f_{\mathbf{Px}})$ ,
- ser invariante a um escalonamento das variáveis (multiplicação de  $\mathbf{x}$  por uma matriz diagonal,  $\mathbf{\Lambda}$ ), isto é,  $\Omega(f_{\mathbf{x}}) = \Omega(f_{\mathbf{\Lambda}x})$ , e
- se  $\mathbf{x} = \mathbf{Ms}$ , sendo  $\mathbf{s}$  o vetor de componentes independentes e  $\mathbf{M}$  uma transformação linear invertível, então  $\Omega(f_{\mathbf{x}}) \leq \Omega(f_{\mathbf{Ms}})$ , isto é, o máximo da função é obtido para os componentes independentes.

As duas primeiras condições indicam que o problema de se achar as direções independentes,  $\mathbf{s}$ , a partir do vetor de variáveis  $\mathbf{x}$ , não é único pois se  $\mathbf{s}$  é uma solução que maximiza  $\Omega(f_{\mathbf{Ms}})$ ,  $\mathbf{\LambdaPs}$  também o é.

Como  $I(f_{\mathbf{x}}) \geq 0$ , só sendo nula se as variáveis são independentes, o seu negativo é um candidato natural para ser uma função contraste. Como no problema de separação de fontes desconhecidas não se sabe nem a intensidade das fontes e nem a matriz de mistura, é razoável realizar a minimização da informação mútua restrita ao espaço das distribuições padronizadas ou dados branqueados. Além disso, a ordenação das variáveis através da magnitude dos valores característicos e o escalonamento dos mesmos para terem uma matriz de covariância unitária elimina a multiplicidade de soluções devido a escalonamentos e permutações de variáveis.

Assim, COMON [223] mostrou que uma *função contraste* pode ser definida como:

$$\Omega(f_{\mathbf{x}}) = -I(f_{\mathbf{z}}) \quad (\text{C.43})$$

onde

$$\mathbf{z} = \mathbf{Q}\mathbf{b}, \quad \mathbf{b} = \mathbf{W}\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{W}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \quad (\text{C.44})$$

e  $\mathbf{Q}$  é uma transformação ortogonal. Nota-se que no espaço das distribuições padronizadas a variância tem que se manter como uma matriz unitária sob uma transformação linear, de forma que as transformações lineares possíveis são ortogonais,

como mostrado na Equação C.37. Usando Equação C.42, temos:

$$\Omega(f_{\mathbf{x}}) = \sum_{i=1}^h J(f_{z_i}) - J(f_{\mathbf{x}}) \quad (\text{C.45})$$

Esta função não pode ser usada diretamente no processo de maximização de  $\Omega$  porque as distribuições não são conhecidas, muito embora seja claro que a negentropia dos dados observados,  $J(f_{\mathbf{x}})$ , seja uma constante. Porém, a distribuição de uma variável padronizada,  $f(z)$ , onde  $z$  é a soma de  $m$  variáveis randômicas independentes, pode ser expandida em torno da Gaussiana multivariada de covariância unitária. Usando esta expansão, a negentropia da distribuição,  $J(f_z)$ , pode ser aproximada por [223]:

$$J(f_z) = \frac{1}{48} (4\kappa_3^2 + \kappa_4^2 + 7\kappa_3^4 - 6\kappa_3^2\kappa_4) + O(m^{-2}) \quad (\text{C.46})$$

onde  $\kappa_3$  e  $\kappa_4$  são, respectivamente, os cumulantes de terceira e quarta ordens da distribuição  $f(z)$ . Usando esta aproximação, a Equação C.45 pode ser aproximada por:

$$\Omega(f_{\mathbf{x}}) \approx \frac{1}{48} \sum_{i=1}^h (4K_{iii}^2 + K_{iiii}^2 + 7K_{iii}^4 - 6K_{iii}^2 K_{iiii}) - J(f_{\mathbf{x}}) \quad (\text{C.47})$$

onde  $K_{iii}$  e  $K_{iiii}$  são, respectivamente, os cumulantes marginais de terceira e quarta ordens da distribuição da variável padronizada  $\mathbf{z} = \mathbf{Q}\mathbf{b}$ , isto é, os elementos da diagonal principal dos tensores cumulantes de terceira e quarta ordem definidos por  $K_{ij\dots q} = \text{Cum}\{z_i, z_j, \dots, z_q\}$ . Deve-se notar que estes tensores cumulantes satisfazem a relação de multilinearidade, isto é, se  $Q_{ij}$  representa as componentes da matriz de rotação,  $\mathbf{Q}$ , e  $K'_{ij\dots q} = \text{Cum}\{b_i, b_j, \dots, b_q\}$ , então:

$$K_{ijk} = \sum_{p,q,r=1}^h Q_{ip}Q_{jq}Q_{kr}K'_{pqr} \quad (\text{C.48})$$

e

$$K_{ijkl} = \sum_{p,q,r,s=1}^h Q_{ip}Q_{jq}Q_{kr}Q_{ls}K'_{pqrs} \quad (\text{C.49})$$

Assim, como  $J(f_{\mathbf{x}})$  é constante, a maximização de  $\Omega(f_{\mathbf{x}})$  é aproximadamente obtida pela maximização do funcional:

$$\Psi(\mathbf{Q}) = \sum_{i=1}^h (4K_{iii}^2 + K_{iiii}^2 + 7K_{iii}^4 - 6K_{iii}^2 K_{iiii}) \quad (\text{C.50})$$

Entretanto, embora a informação mútua dada pela Equação C.43 seja uma função contraste, não há prova que o funcional  $\Psi(\mathbf{Q})$  o seja. COMON [223] demonstrou que os seguintes critérios, baseados em simplificações da Equação C.50, são funções

contraste:

$$\Psi(\mathbf{Q}) = \sum_{i=1}^h K_{i...i}^2 \quad (\text{C.51})$$

onde  $K_{i...i}$  são os elementos da diagonal principal dos tensores cumulantes de ordem  $r \geq 2$ . Particularmente, se  $r \geq 3$ , o critério discrimina vetores de variáveis com no máximo um cumulante marginal de ordem  $r$  nulo. Como a independência das  $h$  variáveis é equivalente à independência das combinações destas variáveis duas a duas, COMON [223] propôs um algoritmo iterativo de maximização de qualquer função polinomial envolvendo cumulantes e usando rotações no plano (Seção C.6).

Como o somatório dos quadrados de todos os componentes do tensor  $K_{ij...q}$  é constante sob a aplicação de uma transformação ortogonal, à maximização de  $\Psi(\mathbf{Q})$  dada pela Equação C.51 equivale a minimização do somatório dos quadrados dos cumulantes cruzados, isto é:

$$\max \Psi(\mathbf{Q}) \iff \min \left\{ \sum_{i,j,\dots,q=1}^h K_{ij...q}^2 - \sum_{i=1}^h K_{i...i}^2 \right\} \quad (\text{C.52})$$

Uma vez definida a matriz ortogonal  $\mathbf{Q}$ , chamada aqui de matriz  $\mathbf{R}$  que rotaciona  $\mathbf{z}$  para que suas direções sejam independentes, a Equação C.44 permite escrever que:

$$\mathbf{s} = \mathbf{R}\mathbf{z} = \mathbf{R}\mathbf{W}\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{R}\mathbf{W}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \Rightarrow \mathbf{S} = \mathbf{R}\mathbf{W} \quad (\text{C.53})$$

que define a matriz de separação  $\mathbf{S}$  da ICA.

### C.5.1 Função Contraste de Cardoso e Souloumiac

CARDOSO e SOULOUMIAC [229], por sua vez, propuseram a seguinte função de contraste:

$$\Psi(\mathbf{Q}) = \sum_{i,k,l=1}^h K_{iikl}^2 \quad (\text{C.54})$$

onde  $K_{iikl}$  é o cumulante de quarta ordem do vetor de variáveis branqueadas,  $\mathbf{z}$ . A maximização do contraste dado pela Equação C.54 é equivalente à minimização dos cumulantes cruzados com os dois primeiros índices diferentes:

$$\min \left\{ \sum_{i,j,k,l=1, i \neq j}^h K_{iikl}^2 \right\} \quad (\text{C.55})$$

Nota-se que para  $k$  e  $l$  fixos,  $K_{iikl}$  é uma matriz e a maximização dos elementos contidos na Equação C.54 é equivalente à sua diagonalização. Foi esta equivalência que levou os autores a proporem esta função contraste.

Considere uma matriz qualquer  $\mathbf{A}$ . Então, a expressão

$$\mathbf{C}_z(\mathbf{A}) = C_{ij} = \sum_{k,l=1}^h K_{ijkl} A_{kl} \quad (\text{C.56})$$

define uma matriz  $\mathbf{C}_z$  a partir dos cumulantes de quarta ordem da variável  $\mathbf{z}$ . Considere a matriz  $\mathbf{e}_p \mathbf{e}_q^T$ , onde  $\mathbf{e}_p = [e_{k,p}]$ ,  $e_{k,p} = \delta_{kp}$ , isto é, é o vetor com componentes nulas exceto para a linha  $k$ , cujo valor é unitário. Então, os elementos desta matriz são iguais a  $\delta_{kp}\delta_{lq}$  e  $\mathbf{C}_z(\mathbf{e}_p \mathbf{e}_q^T)$  é uma matriz denominada de fatia paralela  $(p, q)$  do cumulante de quarta ordem, cujos componentes são dados por  $K_{ijpq}$ . Note que qualquer matriz  $\mathbf{C}_z(\mathbf{A})$  pode ser representada como uma combinação linear destas  $h^2$  matrizes, com os elementos de  $\mathbf{A}$  sendo os coeficientes multiplicativos das mesmas, o que mostra que este conjunto é uma base deste espaço de matrizes.

Portanto, o critério dado pela Equação C.55 implicaria na diagonalização simultânea destas  $h^2$  matrizes, pelo menos de forma aproximada, já que a diagonalização só será exata se realmente todas as variáveis de  $\mathbf{z}$  forem completamente independentes, pois nestes caso apenas os componentes da diagonal principal do cumulante de quarta ordem seriam diferentes de zero. Isto pode ser provado se admitirmos que o modelo linear do ICA é válido, isto é,  $\mathbf{s} = \mathbf{R}\mathbf{b}$ , o que leva a  $\mathbf{z} = \mathbf{Q}\mathbf{R}^T\mathbf{s}$ . Representando  $\mathbf{Q}\mathbf{R}^T = \mathbf{U} = [\mathbf{u}_1 | \mathbf{u}_2 | \dots | \mathbf{u}_h]$ , pois  $\mathbf{U}$  é uma matriz ortogonal, então é fácil mostrar que  $\mathbf{C}_z(\mathbf{A})$  assume a seguinte forma diagonal:

$$\mathbf{C}_z(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^h (\kappa_{4,i} \mathbf{u}_i^T \mathbf{A} \mathbf{u}_i) \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^T, \quad \forall \mathbf{A} \quad (\text{C.57})$$

onde  $\kappa_{4,i}$  é a curtose do componente  $i$  de  $\mathbf{s}$ .

Considerando um conjunto de  $s$  matrizes  $\mathbf{N}_r, r = 1, \dots, s$ , o diagonalizador simultâneo deste conjunto é a matriz unitária,  $\mathbf{Q}$ , que maximiza o critério [229]:

$$\sum_{r=1}^s |\text{diag}(\mathbf{Q}^T \mathbf{N}_r \mathbf{Q})|^2 \quad (\text{C.58})$$

Entretanto, este procedimento é pouco atraente para um conjunto de  $s = h^2$  matrizes.

CARDOSO e SOULOUMIAC [229] provaram que existem as chamadas matrizes características,  $\mathbf{E}$ , que satisfazem a:

$$\mathbf{C}_z(\mathbf{E}_r) = \lambda_r \mathbf{E}_r, \quad \text{trace} \{ \mathbf{E}_r \mathbf{E}_s^T \} = \delta_{rs}, \quad r, s = 1, \dots, h^2 \quad (\text{C.59})$$

e que são ortonormais. O espectro de autovalores tem  $h(h-1)$  autovalores nulos e os outros  $h$  autovalores são iguais a curtose das componentes independentes  $\lambda_r = \kappa_{4,r}$ ,

$r = 1, \dots, h$ . Desta forma, a base deste espaço de matrizes tem apenas  $h$  matrizes, de forma que só é necessário fazer a diagonalização simultânea aproximada das  $h$  matrizes características (*Joint Approximate Diagonalization of Eigen-matrices, JADE*).

## C.6 Método de Jacobi

O método de Jacobi é uma técnica iterativa para a diagonalização de uma matriz simétrica  $\mathbf{A}$  por uma matriz ortonormal,  $\mathbf{Q}$ . O método utiliza uma sequência de transformações ortonormais envolvendo apenas duas variáveis,  $\mathbf{Q}_{ij}$ , cada qual sendo uma rotação de Givens, que é uma rotação no plano destas duas variáveis [279]. A aplicação da rotação plana gera a matriz  $\mathbf{A}'_{ij} = \mathbf{Q}_{ij}^T \mathbf{A} \mathbf{Q}_{ij}$ , onde a rotação no plano das variáveis de índices  $i$  e  $j$  é representada por:

$$\mathbf{Q}_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & c & \cdots & s & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & -s & \cdots & c & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{C.60})$$

onde  $c$  e  $s$  representam o cosseno e o seno do ângulo de rotação. No método convencional,  $c$  e  $s$  podem ser analiticamente calculados para zerar os termos fora da diagonal da matriz transformada  $A'_{ij}$ . O processo é realizado iterativamente percorrendo os  $h(h-1)/2$  pares de variáveis, o que é a chamada varredura do método. As varreduras são executadas até que o somatório dos quadrados dos termos fora da diagonal principal da matriz que está sendo transformada seja menor que uma dada tolerância. Fazendo-se as mesmas operações em uma matriz identidade, acaba-se obtendo a matriz ortonormal de diagonalização  $\mathbf{Q}$ .

CARDOSO e SOULOUMIAC [229] generalizaram o método de Jacobi para minimizar o somatório dos quadrados dos termos fora da diagonal das matrizes obtidas por  $\mathbf{C}(\mathbf{E}_r)$ ,  $r = 1, \dots, h$ , obtendo a solução através de um problema de autovalor de uma matriz  $3 \times 3$  real simétrica no caso de dados complexos, que se reduz a um problema similar para uma matriz  $2 \times 2$  real simétrica para dados reais. Assim, uma das principais vantagens deste método é que os problemas bidimensionais apresentam solução analítica simples [229–231, 280, 281].

# Apêndice D

## Decomposição em Valores Singulares

A decomposição em valores singulares (SVD) é uma técnica numérica usada para solução de sistemas de equações lineares ou para inversão de matrizes singulares ou muito próximo de serem singulares. Nestes casos, os métodos tradicionais como eliminação Gaussiana ou decomposição LU não conseguem obter uma solução, devido ao mau condicionamento do problema. Por outro lado, a solução dada pela SVD nos casos onde não existem problemas de matriz singular tende a ser a mesma solução obtida com métodos tradicionais, como eliminação Gaussiana e decomposição LU [218, 259].

Da mesma forma que a SVD torna possível inverter uma matriz mal condicionada, é possível também obter uma solução para matrizes não-quadradas ou com deficiência de posto. Considerando um sistema linear  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$  com solução  $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ , a matriz  $A_{m \times n}$  pode ser tanto quadrada quanto retangular, ou seja, com número de linhas,  $m$ , maior ou menor que o número de colunas,  $n$ , e pode ser escrita como o produto de uma matriz ortogonal  $U_{m \times m}$ , uma matriz diagonal  $W_{m \times n}$ , com elementos positivos ou nulos (os valores singulares), e a matriz transposta de uma matriz ortogonal  $V_{n \times n}$ , ou seja:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{W} \mathbf{V}^T \quad (\text{D.1})$$

onde  $\mathbf{U}$  é ortogonal e suas colunas são vetores ortonormais e  $\mathbf{V}$  é ortonormal, ou seja, tanto suas colunas como suas linhas são vetores ortonormais:

$$\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{I} \quad (\text{D.2})$$

No caso em que  $A_{m \times n}$  possui um número de linhas menor que o de colunas, ou seja,  $m < n$ , os valores singulares  $w_j$  para  $j = m + 1, \dots, n$  são nulos.

O número de condicionamento da matriz  $\mathbf{A}$  pode ser calculado facilmente, após

essa decomposição, a partir do vetor dos elementos da diagonal principal de  $\mathbf{W}$ , ou seja, os autovalores de  $\mathbf{A}$ . Formalmente, o número de condicionamento de uma matriz é definido como a razão, em magnitude, do seu maior com o menor autovalor. A matriz torna-se singular quando o seu número de condicionamento é infinito e mal condicionada quando o mesmo é suficientemente elevado para provocar problemas em operações de ponto flutuante, ou seja, quando o recíproco do número de condicionamento é da ordem de  $10^{-6}$  em operações de ponto flutuante com precisão simples e  $10^{-12}$  usando precisão dupla ou estendida.

De acordo com a Equação D.1, a inversa da matriz  $\mathbf{A}$  pode ser calculada como:

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{V} [\text{diag}(1/w_j)] \mathbf{U}^T \quad (\text{D.3})$$

onde  $\text{diag}$  corresponde ao vetor contendo a diagonal principal de  $\mathbf{W}$ .

O único problema de se fazer a inversão da matriz  $\mathbf{A}$ , conforme colocado na Equação D.3, é quando um ou mais dos valores de  $w_j$  são nulos, no caso de uma matriz com posto deficiente, ou o  $w_j$  ser um valor muito pequeno no caso de uma matriz mal condicionada. Nestes casos, o que normalmente é feito em rotinas de cálculo de SVD é definir um valor mínimo de corte,  $\varepsilon$ , para  $w_j$  no qual para todo  $w_j < \varepsilon$  o valor de  $1/w_j$  é substituído por zero. Em casos em que a SVD é aplicada para obtenção de pseudo-inversas de matrizes ou solução de sistemas lineares de equações,  $\varepsilon$  é um valor baseado na precisão de cálculo de operações de ponto flutuante da máquina, geralmente se usa  $10^{-10} < \varepsilon < 10^{-6}$ . Em outras aplicações, como por exemplo, na redução da dimensionalidade de dados feita por métodos como PCA e ICA, esse valor poder ser maior,  $10^{-3} < \varepsilon < 10^{-1}$  [218, 220].

Em casos de problemas super-determinados, a solução do sistema linear obtida pela SVD é a que minimiza o valor do resíduo,  $r$ , num problema de mínimos quadrados (norma Euclidiana ou  $L^2$ ), tal que:

$$r \equiv \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\| \quad (\text{D.4})$$

para uma quantidade específica de componentes da matriz  $\mathbf{W}$  que foram considerados. Em casos sub-determinados a SVD fornece uma das múltiplas soluções possíveis [259]. Caso seja usado  $\varepsilon = 0$  a solução da SVD é igual à obtida pelos métodos diretos de eliminação Gaussiana ou decomposição LU. Contudo, isso faria a SVD apresentar os mesmos problemas dos métodos diretos em casos de matrizes com posto deficiente ou mal condicionadas, onde  $w_j \rightarrow 0$ .

# Apêndice E

## Comparação entre Diferentes Modelos de Turbulência

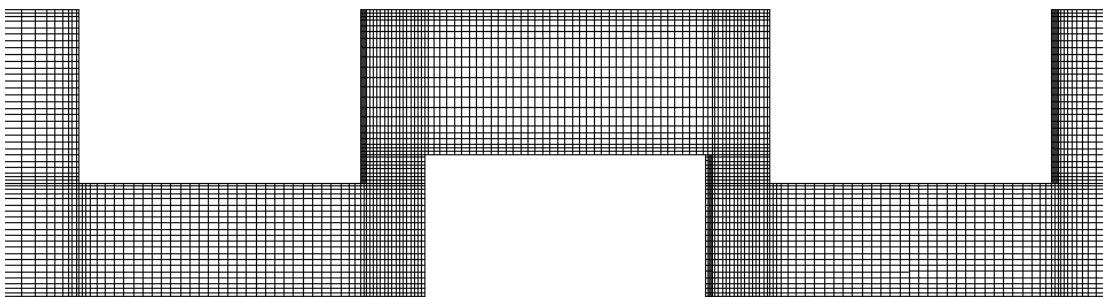
Serão mostrados alguns resultados obtidos para o caso pt9g11, apresentado na Seção 7.3.1, usando diferentes modelos de turbulência. O resumo das características desse caso foi definido na Tabela 7.15. Foram avaliados os modelos de turbulência  $k - \epsilon$  [240], Realizable  $k - \epsilon$  [282],  $k - \omega$  [256, 283],  $k - \omega$  SST (Shear-Stress Transport) [255], Spalart-Allmaras [284] e o modelo de dupla-camada,  $k - \epsilon - W$ , apresentado na Seção 6.7.

Uma geometria 2D foi usada com uma malha computacional contendo aproximadamente 14k células hexaédricas. Na Figura E.1 é ilustrada a malha na região do acidente.

Usando essa malha obteve-se um  $y^+$  máximo e médio em torno de 6 e 1,5, respectivamente. As condições de contorno para o caso formam dadas na Tabela 7.17, porém, para os modelos  $k - \epsilon$ , Realizable  $k - \epsilon$ ,  $k - \omega$ ,  $k - \omega$  SST (Shear-Stress Transport) usou-se as funções de parede disponíveis no OpenFOAM. A condição de entrada para a variável  $\omega_0$  foi calculada como:

$$\omega_0 = C_\mu^{-\frac{1}{4}} \frac{\sqrt{k_0}}{l} \quad (\text{E.1})$$

onde  $l = 0,07 d_h$  é a escala de comprimento associada a turbulência e  $d_h$  é o diâmetro

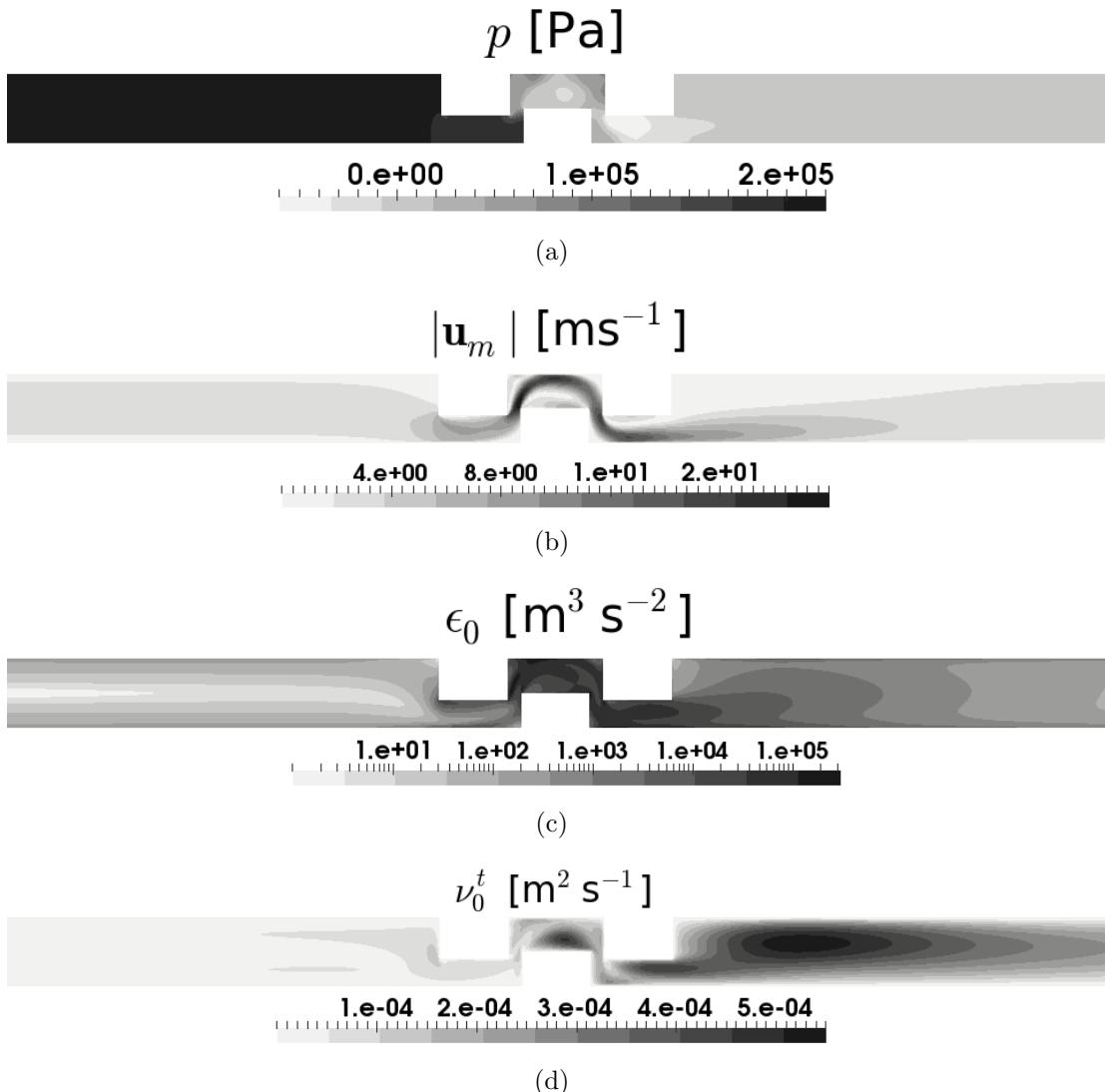


**Figura E.1:** Ampliação da malha usada na região do acidente.

hidráulico do duto.

Como o objetivo dessa análise é avaliar diferentes modelos de turbulência, o modelo multi-fluido foi resolvido usando quatro fases dispersas no DQMoM e não foi considerado a interação entre partículas, ou seja, ignorou-se a quebra e a coalescência de gotas. O termo de dispersão de gotas foi considerado usando  $Sc^{turb} = 1$ . Somente os resultados para os modelos  $k - \epsilon$ ,  $k - \omega$  SST (Shear-Stress Transport) e  $k - \epsilon - W$  serão apresentados e discutidos, pois os resultados dos outros modelos levam as mesmas conclusões para o caso analisado.

Na Figura E.2 são ilustrados os gráficos de contorno para a pressão, a velocidade de mistura, a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta e a viscosidade turbulenta obtidas usando o modelo de turbulência  $k - \epsilon$ . Percebe-se uma queda de pressão na região do acidente (Figura E.2(a)) juntamente com um aumento de velo-

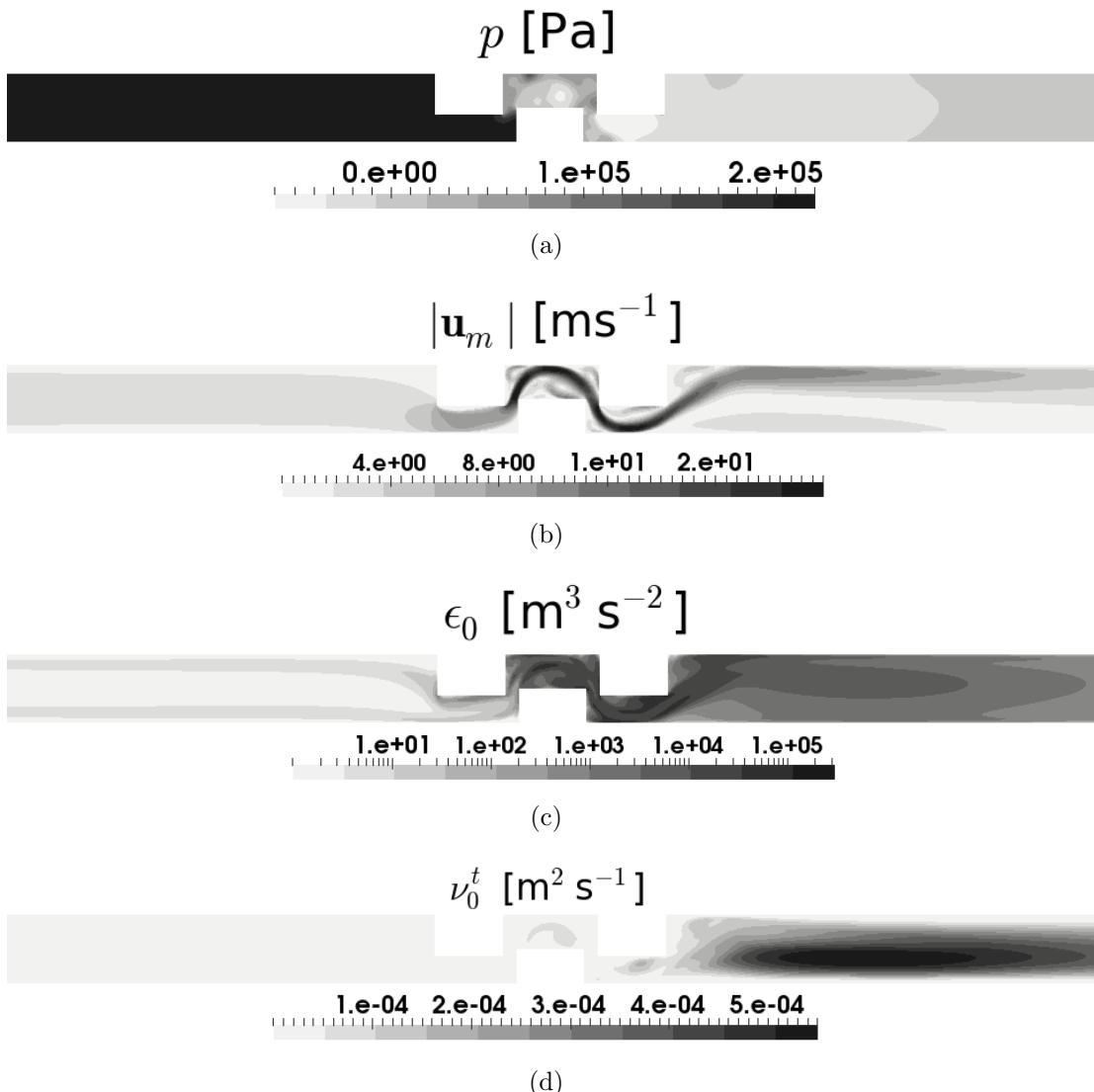


**Figura E.2:** Campos estacionários para (a)  $p$ , (b)  $\mathbf{u}_m = (1 - r_d)\mathbf{u}_0 + \sum_{\alpha=1}^N r_\alpha \mathbf{u}_\alpha$  (velocidade média da mistura), (c)  $\epsilon_0$  e (d)  $\nu_0^t$  obtidos usando o modelo de turbulência  $k - \epsilon$ .

cidade devido ao estreitamento do canal (Figura E.2(b)). Como pode ser visto pela Figura E.2(c), existe uma taxa de dissipação de energia cinética turbulenta elevada na região anterior ao acidente. Isso não é plausível, tendo em vista que o escoamento é laminar nessa região. Esse predição errada do valor de  $\epsilon_0$  é problemática, considerando que essa variável poderia afetar as frequências de quebra e coalescência de gotas, caso fossem consideradas. A viscosidade turbulenta possui valores mais elevados na região do acidente e logo posterior ao mesmo (Figura E.2(d)).

Na Figura E.3 são ilustrados os gráficos de contorno para a pressão, a velocidade de mistura, a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta e a viscosidade turbulenta obtidas usando o modelo de turbulência  $k - \omega$  SST.

Como esperado, também nesse caso percebe-se uma queda de pressão na região do acidente (Figura E.3(a)). Observa-se pela Figura E.3(b) que ocorre um



**Figura E.3:** Campos estacionários para (a)  $p$ , (b)  $\mathbf{u}_m = (1 - r_d)\mathbf{u}_0 + \sum_{\alpha=1}^N r_\alpha \mathbf{u}_\alpha$  (velocidade média da mistura), (c)  $\epsilon_0$  e (d)  $\nu_0^t$  obtidos usando o modelo de turbulência  $k - \omega$  SST.

**Tabela E.1:** Valores da diferença de pressão,  $\Delta p$ , entre a entrada e a saída do canal.

Método	Experimental [273]	$k - \epsilon$	$k - \omega$ SST	$k - \epsilon - W$
$\Delta p$ [MPa]	0,171	0,205	0,227	0,207

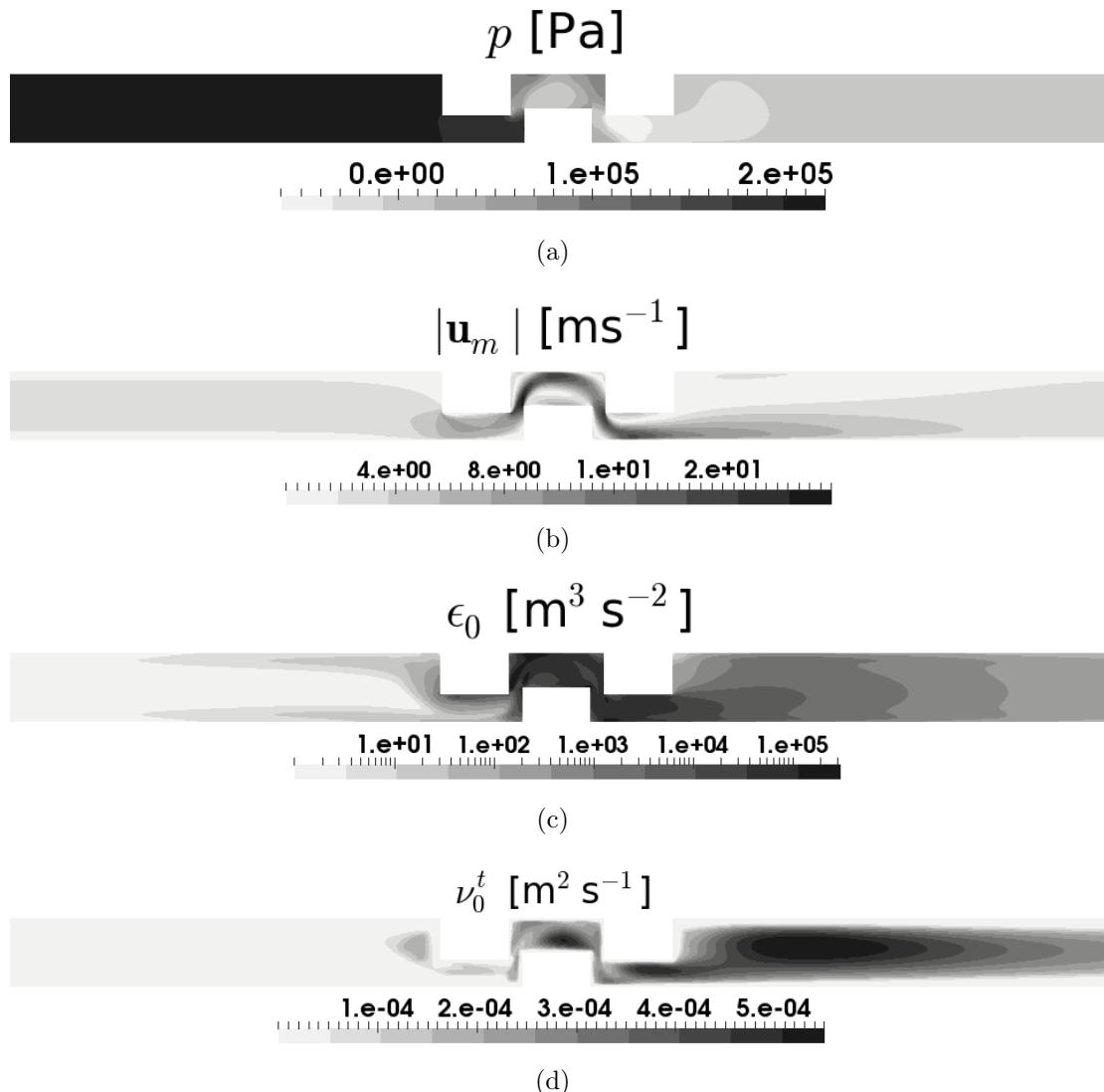
aumento de velocidade devido ao estreitamento do canal. Observa-se também um comportamento estranho do perfil de velocidade na seção posterior ao acidente. Esse comportamento não é plausível, podendo ser atrelado ao modelo  $k - \omega$  SST que mostrou ser muito sensível às condições iniciais e de contorno aplicadas. Por exemplo, observou-se que o modelo é muito sensível ao valor da intensidade turbulenta usada na entrada ou variações da função de parede para  $\omega_0$  [250], podendo em alguns casos não gerar o perfil de velocidade estranho mostrado na Figura E.3(b). Por outro lado, observa-se que a dissipação de energia cinética turbulenta é muito baixa na região anterior ao acidente (Figura E.3(c)), sendo um resultado mais razoável que o obtido com o modelo  $k - \epsilon$ . A viscosidade turbulenta possui valores expressivos somente na região posterior ao acidente (Figura E.3(d)).

Por fim, na Figura E.4 são ilustrados os gráficos de contorno para a pressão, a velocidade de mistura, a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta e a viscosidade turbulenta obtidas usando o modelo de dupla-camada  $k - \epsilon - W$ .

Novamente observa-se uma queda de pressão na região do acidente (Figura E.4(a)) e um aumento de velocidade devido ao estreitamento do canal (Figura E.4(b)). A taxa de dissipação de energia cinética turbulenta é muito baixa na região anterior ao acidente (Figura E.4(c)), sendo um resultado mais razoável que o obtido com o modelo  $k - \epsilon$ . A viscosidade turbulenta possui valores significativos na região do acidente e posterior ao mesmo (Figura E.4(d)).

Na Tabela E.1 são apresentados os valores da diferença de pressão,  $\Delta p$ , entre a entrada e a saída do canal obtido experimentalmente e os valores preditos usando diferentes modelos de turbulência. Como pode ser visto, todos os valores preditos pela simulação superestimaram o valor de  $\Delta p$ . O modelo  $k - \omega$  SST foi o que pior previu o valor de  $\Delta p$ , que pode estar relacionado ao perfil de velocidades estranho obtido com este modelo. Os modelos  $k - \epsilon$  e  $k - \epsilon - W$  obtiveram resultados muito parecidos, com um erro relativo de aproximadamente 20%.

Dentre os três modelos de turbulência analisados, verificou-se que o modelo de dupla-camada  $k - \epsilon - W$  foi o que previu resultados mais coerentes em relação as propriedades do escoamento. Comparado ao modelo  $k - \epsilon$ , o modelo  $k - \epsilon - W$  respeitou a propriedade do escoamento ser laminar na região anterior ao acidente. Comparado ao modelo  $k - \omega$  SST, não gerou perfis de velocidades com comportamento estranho e é menos sensível às condições iniciais e de contorno.



**Figura E.4:** Campos estacionários para (a)  $p$ , (b)  $\mathbf{u}_m = (1 - r_d)\mathbf{u}_0 + \sum_{\alpha=1}^N r_\alpha \mathbf{u}_\alpha$  (velocidade média da mistura), (c)  $\epsilon_0$  e (d)  $\nu_0^t$  obtidos usando o modelo de turbulência de dupla-camada  $k - \epsilon - W$ .