

**PROJETO DE GRADUAÇÃO**

**FLUTUAÇÕES DE VELOCIDADE EM  
SUSPENSÕES GÁS-SÓLIDO**

Por

**Filipe Henrique de Sousa Evangelista**

Brasília, 7 de julho de 2017

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA**

**FACULDADE DE TECNOLOGIA**

**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA  
Faculdade de Tecnologia  
Departamento de Engenharia Mecânica

PROJETO DE GRADUAÇÃO

**FLUTUAÇÕES DE VELOCIDADE EM  
SUSPENSÕES GÁS-SÓLIDO**

Por

**Filipe Henrique de Sousa Evangelista**

Relatório submetido como requisito parcial para obtenção  
do grau de Engenheiro Mecânico

**Banca Examinadora**

Prof. Francisco Ricardo da Cunha \_\_\_\_\_

Prof. Taygoara Felamingo de Oliveira \_\_\_\_\_

Prof. Adriano Possebon Rosa \_\_\_\_\_

Brasília 7 de julho de 2017

*Este trabalho é dedicado à minha mãe,  
por todo o apoio que me deu ao longo desta jornada.*

*"De poucas partidas aprendi tanto como da maioria de minhas derrotas."*  
(GM J. R. Capablanca)

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, pela saúde que tive para concluir a graduação. Sou grato também à minha mãe, Talita, cujo amor e suporte incondicionais foram essenciais ao longo do desenvolvimento deste trabalho. Somente mediante seus incansáveis esforços pude manter meu foco exclusivamente nas atividades acadêmicas enquanto isso se fez necessário, e espero poder recompensá-la doravante. Agradeço ao meu pai, Valdeci, pela generosidade, os conselhos e o apoio à minha escolha pela carreira acadêmica no estágio final da graduação. Agradeço ainda à minha família, que sempre acreditou em mim.

Agradeço ao Professor Francisco Ricardo por me orientar com muita paciência, direcionando habilmente meu trabalho com sua inesgotável sabedoria. Agradeço-o também por todo o seu empenho em manter a infraestrutura do Vortex, que nos provê condições adequadas à realização de um trabalho de excelência.

Expresso minha gratidão também a todos os meus amigos do Vortex, em particular ao Igor, o Gesse e o Yuri. Igor, você foi um dos meus maiores parceiros durante a graduação. Aprendi muito sobre seriedade, dedicação e companheirismo contigo. Gesse, sou grato por todas as discussões prolíficas que tivemos sobre Física e Matemática, que fizeram dos últimos dois anos aqueles em que mais aprendi, e pelas pizzarias que descobri no período. Yuri, sua tranquilidade, competência e prestatividade são exemplo para todos nós. Certamente, me espelho em vocês para tentar me tornar uma pessoa melhor e me sinto grato por ter participado de um ambiente de pesquisa tão harmonioso.

Agradeço a minha psicóloga, Sheila, por me orientar e encaminhar nos últimos anos, ajudando-me a amadurecer como pessoa e compreender melhor as formas de exercer minhas habilidades para a conclusão do curso. Faço menção especial a todos os meus amigos da Engenharia Mecânica, com os quais tive a oportunidade de ter compartilhado este caminho. Vocês me mostraram que era possível chegar ao fim desta jornada e me deram um senso de pertencimento que me motivou a continuar.

# Resumo

Neste trabalho, analisa-se a sedimentação de partículas sólidas suspensas em um fluido newtoniano, sujeitas a movimento browniano e interação hidrodinâmica viscosa, para baixo número de Reynolds. Caracterizam-se as flutuações de velocidade e a pressão de partículas nesta suspensão, que pode ser compreendida como um leito fluidizado em baixo número de Reynolds.

Desenvolve-se um modelo contínuo bifásico da suspensão e efetua-se uma análise de estabilidade linear de suas equações governantes, determinando a influência da fração volumétrica e da inércia das partículas sobre as condições de estabilidade do sistema. Estabelece-se ainda a condição neutra de estabilidade da suspensão, definindo com exatidão seus regimes estável e instável em termos dos parâmetros físicos relevantes.

Faz-se uma simulação numérica lagrangeana para examinar a influência do número de Stokes sobre a dinâmica do sistema, com relação a seus efeitos sobre a memória e as flutuações de velocidade deste. A variância de tais flutuações é calculada, a fim de caracterizá-las. Determina-se uma relação funcional entre tal propriedade e o número de Stokes, que é então comparada às análises de escala de [Hinch \(1988\)](#) e [Cunha \(1995\)](#), que estão relacionadas o paradoxo da divergência. A autocorrelação das flutuações de velocidade e a difusividade das partículas também são calculadas. Para números de Stokes moderados, nota-se que o processo não é markoviano e que as difusividades são anisotrópicas, devido à inserção de memória na direção da gravidade. Observa-se a insensibilidade das estatísticas de longo tempo à variação da inércia das partículas, atribuída à separação entre as escalas de tempo de relaxação e correlação.

Realiza-se também um estudo numérico e assintótico da sedimentação de uma partícula isolada em números de Reynolds arbitrários, propiciando futuros trabalhos com números de Reynolds não nulos.

Por meio da metodologia empregada neste projeto, pode-se proceder ao estudo de leitos fluidizados em números de Reynolds arbitrários, visando à caracterização de suas propriedades transporte.

**Palavras-chaves:** suspensões, flutuações de velocidade, movimento browniano, interações hidrodinâmicas, sedimentação, leito fluidizado, modelo contínuo.

# Abstract

The sedimentation of solid particles suspended in a Newtonian fluid, subject to Brownian motion and viscous hydrodynamic interaction is analyzed. The velocity fluctuations and particle pressure of this suspension, which may be interpreted as a low Reynolds number fluidized bed, are characterized in this work.

A two-phase continuum model for the suspension is developed. Its governing equations are solved under the approach of a linear stability analysis. The influence of volumetric fraction and particle inertia over the system stability are studied. The criterion for marginal stability is obtained, thus defining the stable and unstable regimes of the suspension in terms of its relevant physical parameters.

A Lagrangian numerical simulation is also carried out to investigate these suspensions. The influence of the Stokes and Péclet numbers over the system's dynamics, with respect to its memory and velocity fluctuations is examined. The variance of the those fluctuations is calculated in order to characterize them. Its functional dependence with the Stokes number is determined and compared to the [Hinch \(1988\)](#) and [Cunha \(1995\)](#) scalings, which are connected to the divergence paradox. The velocity fluctuations autocorrelation and the particle diffusivity are also calculated. The process is seen to deviate from a Markovian behavior and its diffusivity is found to be anisotropic at large Stokes numbers, owing to the insertion of memory in the gravity direction. The long time statistics are found to be insensitive to particle inertia changes, which is attributed to the separation of the relaxation and correlation time scales.

A numerical and asymptotic study of an isolated particle sedimentation at arbitrary Reynolds number is implemented as a starting point for works in non-null Reynolds number regimes.

The methodology used in this work may be applied to the study of arbitrary Reynolds number fluidized beds, addressing to the characterization of their transport properties.

**Keywords:** suspension, dusty gas, velocity fluctuations, Brownian motion, hydrodynamic interaction, sedimentation, fluidized bed, continuum model.

# Lista de Figuras

Figura 1 – Tipos de fluidização mais usuais: (a) leito fixo, (b) leito em condição de mínima fluidização, (c) leito particulado, (d) leito borbulhante, (e) leito tipo pistão, (f) transporte pneumático de partículas (SOBRAL, 2004). . . . .	2
Figura 2 – Ondas de concentração em um leito fluidizado (TORRES; SOBRAL; CUNHA, 2004). . . . .	3
Figura 3 – Efeito do volume sensível de um instrumento de medida na massa específica (BATCHELOR, 2000). . . . .	7
Figura 4 – Mapeamento do movimento de um corpo contínuo. . . . .	8
Figura 5 – Deformação de um arco material. . . . .	9
Figura 6 – Elemento infinitesimal de volume em tempos distintos. Adaptado de (CHANDRASEKHARAIHAH; DEBNATH, 2014). . . . .	10
Figura 7 – Densidade de força sobre um elemento fluido. . . . .	13
Figura 8 – Elemento de volume tetraédrico. . . . .	14
Figura 9 – Componentes da tensão em um plano. . . . .	15
Figura 10 – Domínio de integração (KIM; KARRILA, 1991). . . . .	24
Figura 11 – Corrente convectiva induzida pelo peso extra em um dos lados do reservatório. Adaptado de (HINCH, 1988; ABADE, 2005). . . . .	34
Figura 12 – Dependência das flutuações de velocidade, quando balanceadas por forças viscosas (linha tracejada) ou inerciais (linha contínua), com o comprimento característico do domínio. Adaptado de Cunha (1997). . . . .	36
Figura 13 – Volume ocupado pelas partículas que colidem com a superfície. Adaptado de (CHAPMAN; COWLING, 1970). . . . .	39
Figura 14 – Parâmetro $\mathcal{N}$ do critério de estabilidade. Curva obtida para $St = 2$ , $\bar{\phi} = 0,1$ e $\phi_{mp} = 0,65$ . . . . .	50
Figura 15 – Fator de amplificação de distúrbios para vários números de Stokes. Curvas obtidas para $N_s = 10$ , $\bar{\phi} = 0,1$ e $\phi_{mp} = 0,65$ . . . . .	52
Figura 16 – Diagrama de bifurcação para vários números de sedimentação. Curvas obtidas para $St = 2$ , $\bar{\phi} = 0,1$ e $\phi_{mp} = 0,65$ . . . . .	52

Figura 17 – Linha neutra da suspensão gás-sólido. Curva obtida para $N_s = 10$ , $f_s(\bar{\phi}) = 1,0$ e $\phi_{mp} = 0,65$ . . . . .	53
Figura 18 – Distribuição de números pseudorandômicos gerados pelo código numérico. . . . .	55
Figura 19 – Parâmetros geométricos envolvidos nas forças de repulsão entre partículas. Adaptado de (ABADE, 2005). . . . .	56
Figura 20 – Abstração da colisão elástica entre duas partículas. Adaptado de (ABADE, 2005). . . . .	57
Figura 21 – Método de Monte Carlo para geração da condição inicial estratificada. . . . .	62
Figura 22 – Seção bidimensional da malha para tabelamento das mobilidades. $L_1$ e $L_2$ são os comprimentos do domínio numérico nas direções $x$ e $y$ . . . . .	63
Figura 23 – Sucessão de interpolações para aproximação da mobilidade e nomenclatura dos pontos que usados para aproximação. Adaptado de (WIKIPEDIA, 2017). . . . .	63
Figura 24 – Condições de contorno da simulação numérica de suspensões monodispersas. . . . .	65
Figura 25 – Trajetória estocástica típica de uma partícula isolada sedimentando em movimento browniano, determinada computacionalmente para $St = 0$ e $Pe = 1$ . . . . .	69
Figura 26 – Deslocamentos quadráticos médios de uma partícula isolada livre de inércia, i.e. $St = 0$ , para diversos números de Péclet. As direções ortogonal e paralela à aceleração gravitacional são respectivamente representadas pelos símbolos $\bullet$ e $\Delta$ . Argumento de Einstein - Eq. (2.154) - indicado por linha contínua (—). . . . .	71
Figura 27 – Média da velocidade de uma partícula isolada massiva em função do tempo, para $St = 1$ e diferentes $Pe$ . As direções perpendicular e paralela à aceleração gravitacional são respectivamente denotadas por $\bullet$ e $\Delta$ . Velocidade média de uma partícula não browniana - equação (7.2) - denotada por linha contínua (—). . . . .	73
Figura 28 – Variância das flutuações de velocidade de uma partícula isolada massiva em função do tempo, para $Pe = 1$ . As direções perpendicular e paralela à aceleração gravitacional são respectivamente denotadas por $\bullet$ e $\Delta$ . . . . .	75
Figura 29 – Componente vertical da variância das flutuações de velocidade de uma partícula isolada massiva em função de $St$ , para $Pe = 1$ . Ajuste por uma lei de potência $\langle w'^2 \rangle = aSt^b$ , com constantes $a = 1,00$ e $b = -1,00$ . . . . .	76
Figura 30 – Autocorrelação normalizada das flutuações de velocidade em função de $Pe$ , para $St = 0,1$ . As direções perpendicular e paralela à aceleração gravitacional são respectivamente denotadas por $\bullet$ e $\Delta$ . Ajustes exponenciais indicados por linhas contínuas (—). . . . .	77
Figura 31 – Coeficiente de difusão de uma partícula isolada para $St = 0,1$ em função de $Pe$ . As direções perpendicular e paralela à aceleração gravitacional são respectivamente denotadas por $\bullet$ e $\Delta$ . . . . .	79

Figura 32 – Autocorrelação normalizada das velocidades em função do tempo, para $St = 1$ e $Pe = 1$ . As direções perpendicular e paralela à aceleração gravitacional são respectivamente denotadas por $\bullet$ e $\Delta$ . Ajuste exponencial da direção ortogonal à gravidade: $f(\tau) = \exp(-\tau/\tau_c)$ , com $\tau_c = 0,977 \pm 0,001$ . . . . .	80
Figura 33 – Integral da autocorrelação das velocidades em função do limite superior de integração, para $St = 1$ e $Pe = 1$ . As direções perpendicular e paralela à aceleração gravitacional são respectivamente denotadas por $\bullet$ e $\Delta$ . . . . .	80
Figura 34 – Esquema da simulação de interação hidrodinâmica entre duas esferas. . . . .	82
Figura 35 – Distância entre duas partículas. . . . .	83
Figura 36 – Esquema da simulação da interação hidrodinâmica entre três esferas com a configuração inicial de um triângulo equilátero. . . . .	84
Figura 37 – Evolução temporal do aglomerado de partículas. . . . .	85
Figura 38 – Linhas de corrente em uma gota mais densa que o fluido base (NITS-CHE; BATCHELOR, 1997). . . . .	85
Figura 39 – Histograma do número de partículas na condição inicial em função da altura no domínio numérico, para todas as realizações da simulação numérica. Foram utilizados um número de realizações $n_r = 100$ , número de partículas $N = 111$ e $\lambda = 0,004$ . . . . .	86
Figura 40 – Variância das flutuações de velocidade em função do tempo, nas direções paralela ( $\Delta$ ) e ortogonal ( $\bullet$ ) à aceleração gravitacional, para $Pe = 10$ , $\phi = 0,01$ , $N = 111$ e $\lambda = 0,004$ . Simulações na presença de interações hidrodinâmicas. . . . .	88
Figura 41 – Variância das flutuações de velocidade em função do número de realizações, nas direções paralela ( $\Delta$ ) e ortogonal ( $\bullet$ ) à aceleração gravitacional, para $Pe = 10$ , $\phi = 0,01$ , $N = 111$ e $\lambda = 0,004$ . Simulações na presença de interações hidrodinâmicas. . . . .	90
Figura 42 – Flutuações cruzadas de velocidade ( $\langle u'w' \rangle$ ), representadas por $\bullet$ , e variância das flutuações de velocidade, ( $\langle w'^2 \rangle$ ), simbolizadas por $\Delta$ , em função do tempo. Simulações realizadas para $Pe = 10$ , $St = 0,1$ , $\phi = 0,01$ , $N = 111$ , $\lambda = 0,004$ e $n_r = 50$ . Interações hidrodinâmicas presentes. . . . .	91
Figura 43 – Coeficiente de autocorrelação das flutuações de velocidade em função do tempo, nas direções paralela ( $\Delta$ ) e ortogonal ( $\bullet$ ) à aceleração gravitacional, para $Pe = 10$ , $\phi = 0,01$ , $N = 111$ e $\lambda = 0,004$ . Interações hidrodinâmicas presentes. . . . .	93
Figura 44 – Integral da autocorrelação em função do tempo, nas direções paralela ( $\Delta$ ) e ortogonal ( $\bullet$ ) à aceleração gravitacional, para $Pe = 10$ , $\phi = 0,01$ , $N = 111$ e $\lambda = 0,004$ . A difusividade é determinada como $\mathbf{D} = \lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{D}(t)$ . Simulações na presença de interações hidrodinâmicas. . . . .	95

Figura 45 – Dependência da difusividade com o número de Stokes nas direções paralela ( $\Delta$ ) e ortogonal ( $\bullet$ ) à aceleração gravitacional, para $Pe = 10$ , $\phi = 0,01$ , $N = 111$ e $\lambda = 0,004$ . Interações hidrodinâmicas presentes. . . . .	96
Figura 46 – Componente vertical da variância das flutuações de velocidade em função do número de Stokes para $Pe = 10$ , $\phi = 0,01$ , $N = 111$ e $\lambda = 0,004$ . Ajuste por meio de uma lei de potência $\langle w'^2 \rangle = a St^b$ , com coeficientes $a = 0,097$ e $b = -0,99$ . . . . .	96
Figura 47 – Variância das flutuações de velocidade em função do número de Stokes para $Pe = 10$ , $\phi = 0,01$ , $N = 111$ e $\lambda = 0,004$ . Ajuste por meio de uma lei de potência $\langle w'^2 \rangle = a St^b$ , com coeficientes $a = (8 \pm 4) \times 10$ e $b = -1,0 \pm 0,2$ . . . . .	97
Figura 48 – Pressão de partículas em função do número de Stokes para $Pe = 10$ , $\phi = 0,01$ , $N = 111$ e $\lambda = 0,004$ . Ajuste por meio de uma lei de potência $p_s = a St^b$ , com coeficientes $a = 9 \pm 2$ e $b = -0,08 \pm 0,08$ . . . . .	97
Figura 49 – Velocidade de uma partícula isolada não browniana em função do tempo para diferentes números de Reynolds terminais. Resultados obtidos para $R_\rho = 0,4$ . Solução numérica indicada por $\circ$ , assintótica por linha contínua e de Stokes por linha tracejada. . . . .	103
Figura 50 – Deslocamento de uma partícula isolada não browniana em função do tempo para diferentes números de Reynolds terminais. Resultados obtidos para $R_\rho = 0,4$ . Solução numérica indicada por $\circ$ , assintótica por linha contínua e de Stokes por linha tracejada. . . . .	105
Figura 51 – Quociente entre a velocidade terminal, $U_t$ , e a velocidade de Stokes, cá denotada por $U_s$ , para uma partícula isolada não browniana, com $R_\rho = 0,4$ , em função do número de Reynolds terminal. Soluções exata (—), numérica ( $\circ$ ) e assintótica (---). . . . .	106
Figura 52 – Produto do coeficiente de arrasto pelo número de Reynolds em função de $Re$ . Resultados obtidos para uma partícula isolada não browniana com $R_\rho = 0,4$ . Coeficientes de arrasto com efeitos de inércia (—) e puramente viscoso (---). . . . .	106

# Lista de Tabelas

Tabela 1 – Sumário das equações governantes do modelo contínuo bifásico para a suspensão gás-sólido. . . . .	43
Tabela 2 – Sumário das equações governantes adimensionais do modelo contínuo bifásico para a suspensão gás-sólido. . . . .	44
Tabela 3 – Tempos característicos do escoamento para $a = 1 \mu m$ , massa específica do fluido $\rho = 1,184 \text{ kg/m}^3$ , viscosidade dinâmica $\mu = 1,849 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m.s}$ , massa específica da partícula $\rho_s = 10^5 \rho$ , aceleração gravitacional $g = 9,81 \text{ m/s}^2$ , constante de Boltzmann $k_B = 1,381 \cdot 10^{-23} \text{ m}^2.\text{kg.s}^{-2}.\text{K}^{-1}$ e temperatura $T = 298 \text{ K}$ . . . . .	60
Tabela 4 – Comparação das velocidades terminais de sedimentação obtidas pelo código computacional ( $U_t/U$ ) com as previstas pelas Eqs. (8.5) e (8.6), ( $u(r/a)$ ). . . . .	83

# Lista de abreviaturas e siglas

cf.	Confira
e.g.	Por exemplo
Eq.	Equação
Fig.	Figura
i.e.	Isto é
Tab.	Tabela

# Lista de símbolos

## Símbolos latinos

$a$	Raio de uma partícula
$\bar{a}$	Raio reduzido
$A$	Superfície aberta
$b$	Raio de contato entre partículas
$\mathbf{b}$	Força de campo
$B_0$	Configuração de referência
$B_t$	Configuração atual
$\mathfrak{B}$	Corpo contínuo
$C$	Coefficiente de autocorrelação das flutuações de velocidade
$\mathcal{C}$	Arco material
$C_1, C_2$	Constantes de calibração numérica
$D^0$	Difusividade de Einstein-Stokes
$D$	Difusividade
$\mathbf{D}$	Tensor difusividade
$\mathbf{f}_\alpha$	Força sobre uma partícula
$\mathbf{f}_\alpha^h$	Força hidrodinâmica sobre uma partícula
$\mathbf{f}_\alpha^{nh}$	Força não hidrodinâmica sobre uma partícula
$\mathbf{F}$	Tensor gradiente de deformação na descrição lagrangeana
$\mathbf{F}_{sg}$	Força da fase gasosa sobre a particulada
$\mathbf{F}_{gs}$	Força da fase particulada sobre a gasosa

$\mathcal{F}$	Transformada de Fourier
$Fr$	Número de Froude
$\mathbf{g}$	Aceleração gravitacional
$\bar{G}$	Média temporal e espacial de uma propriedade arbitrária $G$
$G'$	Flutuação de uma propriedade arbitrária $G$
$\mathbf{G}$	Tensor de Oseen-Burgers
$\mathcal{G}$	Tensor de Oseen
$\mathbf{I}$	Tensor identidade
$J$	Dilatação
$\mathbf{k}$	Vetor número de onda
$l$	Comprimento característico
$\mathbf{L}$	Momento linear
$m$	Massa
$\mathbf{M}$	Matriz mobilidade global
$n$	Número de densidade
$\mathbf{n}$	Vetor pseudorandômico de direção do movimento browniano
$\hat{\mathbf{n}}$	Vetor normal unitário
$N_s$	Número de sedimentação
$p$	Campo escalar de pressão
$p_s$	Pressão de partículas
$Pe$	Número de Péclet
$\rho$	Massa específica do fluido
$\rho_0$	Massa específica da espécie de referência
$\rho_s$	Massa específica da fase particulada
$\mathcal{P}$	Campo de pressão do tensor de Oseen
$\mathbb{P}$	Ponto material
$\mathbf{r}$	Vetor distância entre partículas

<b>R</b>	Tensor autocorrelação das flutuações de velocidades
<b>R</b>	Matriz resistência global
<i>Re</i>	Número de Reynolds
<i>Re<sub>t</sub></i>	Número de Reynolds terminal
<i>s</i>	Frequência complexa
<i>S</i>	Superfície fechada
<i>St</i>	Número de Stokes
$\Delta t$	Passo de tempo
<i>t</i>	Tempo
<b>t</b>	Densidade de força
<i>T</i>	Temperatura
<b>T</b>	<i>Stresslet</i> do tensor de Oseen
<b>u</b>	Campo euleriano de velocidades
<b>u'</b>	Flutuações de velocidade
<b>u<sup>∞</sup></b>	Velocidade do escoamento incidente
<b>u<sup>D</sup></b>	Distúrbio de velocidade
<b>U</b>	Velocidade de Stokes
<i>V</i>	Volume
<b>v</b>	Campo de velocidades euleriano da fase particulada
<b>x</b>	Vetor posição na descrição euleriana
<b>X</b>	Vetor rótulo das partículas

## Símbolos gregos

$\alpha, \beta$	Índices que enumeram as partículas
$\delta(\mathbf{x})$	Delta de Dirac
$\delta_{\alpha\beta}$	Sobreposição virtual entre partículas
$\epsilon$	Fração volumétrica de vazios
$\varepsilon_{\alpha\beta}$	Espaçamento entre partículas
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Tensor de terceira ordem de Levi-Civita
$\phi$	Fração volumétrica
$\phi_t$	Função de mapeamento
$\kappa$	Segundo coeficiente de viscosidade
$\lambda$	Intensidade do gradiente de concentração por estratificação
$\lambda_\alpha$	Razão de aspecto
$\mu$	Viscosidade dinâmica
$\mu_s$	Viscosidade dinâmica da fase particulada
$\eta_\alpha$	Razão de massas específicas
$\Omega$	Domínio de integração
$\partial\Omega$	Bordo do domínio de integração
$\boldsymbol{\Omega}$	<i>Rotlet</i>
$\sigma$	Variância das velocidades
$\boldsymbol{\sigma}$	Tensor das tensões
$\tau_b$	Tempo de difusão browniana
$\tau_c$	Tempo de correlação
$\tau_s$	Tempo de sedimentação
$\tau_r$	Tempo de relaxação inercial
$\omega$	Frequência de propagação dos distúrbios
$\boldsymbol{\xi}$	Vorticidade
$\xi$	Fator de amplificação de distúrbios
$\zeta$	Coeficiente de Stokes para o arrasto sobre uma esfera

## Símbolos matemáticos

$\mathbb{C}$	Corpo dos números complexos
$\mathbb{R}$	Corpo dos números reais
$\nabla$	Operador diferencial nabla
$\langle \rangle$	Média em realizações

# Sumário

	<b>1 INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
<b>1.1</b>	<b>Motivação</b>	<b>1</b>
<b>1.2</b>	<b>Objetivos</b>	<b>4</b>
1.2.1	Objetivos Específicos	4
	<b>2 FUNDAMENTOS DE MICROHIDRODINÂMICA</b>	<b>6</b>
<b>2.1</b>	<b>Equações Gerais de Balanço</b>	<b>6</b>
2.1.1	Hipótese do Contínuo	6
2.1.2	Cinemática de um Meio Contínuo	7
2.1.2.1	Descrições Lagrangeana e Euleriana	7
2.1.2.2	Tensor Gradiente de Deformação	7
2.1.2.3	Relações de Euler	9
2.1.3	Teorema Transporte de Reynolds	11
2.1.4	Equação da Continuidade	12
2.1.5	Forças de Campo e de Superfície	12
2.1.6	Teorema de Cauchy	13
2.1.7	Balanço de Quantidade de Movimento	14
2.1.8	Tensor das Tensões de um Fluido Newtoniano	16
<b>2.2</b>	<b>Hidrodinâmica em Baixos Números de Reynolds</b>	<b>18</b>
2.2.1	Solução Fundamental de Stokes	18
2.2.2	Teorema Recíproco de Lorentz	22
2.2.3	Representação Integral de um Escoamento de Stokes	23
2.2.4	Primeira Lei de Faxén para Translação	25
2.2.5	Linearidade dos Escoamentos de Stokes	27
2.2.6	Formulações de Mobilidade e Resistência	28
<b>2.3</b>	<b>Movimento Browniano</b>	<b>30</b>
	<b>3 FLUTUAÇÕES DE VELOCIDADE</b>	<b>33</b>
<b>3.1</b>	<b>Análises de Escala</b>	<b>33</b>
3.1.1	Paradoxo da Divergência	34

3.1.2	Inércia das Partículas . . . . .	35
3.1.3	Estratificação . . . . .	37
<b>3.2</b>	<b>Pressão de Partículas . . . . .</b>	<b>38</b>
<b>3.3</b>	<b>Modelo Contínuo para Flutuações . . . . .</b>	<b>40</b>
3.3.1	Fase Gasosa . . . . .	40
3.3.2	Fase Particulada . . . . .	41
3.3.3	Adimensionalização das Equações Governantes . . . . .	42
	<b>4 ANÁLISE DE ESTABILIDADE LINEAR . . . . .</b>	<b>45</b>
4.1	Forma Unidimensional Transiente das Equações . . . . .	46
4.2	Linearização das Equações . . . . .	47
4.3	Distúrbios de Ondas Planas . . . . .	48
4.4	Análise Modal Temporal . . . . .	49
4.4.1	Diagramas de Bifurcação . . . . .	51
4.4.2	Linhas Neutras . . . . .	52
	<b>5 DINÂMICA DE LANGEVIN COM INTERAÇÕES HIDRODINÂMICAS . . . . .</b>	<b>54</b>
5.1	Forças Hidrodinâmicas . . . . .	54
5.2	Forças Brownianas . . . . .	55
5.3	Forças de Repulsão . . . . .	56
5.4	Forças de Contato . . . . .	56
5.5	Peso Líquido . . . . .	58
5.6	Equação Governante Adimensional . . . . .	58
	<b>6 METODOLOGIA NUMÉRICA . . . . .</b>	<b>61</b>
6.1	Geração das Condições Iniciais . . . . .	61
6.2	Tabelamento das Mobilidades . . . . .	62
6.3	Condições de Contorno . . . . .	64
6.3.1	Testes de Validação . . . . .	64
6.3.2	Suspensão Monodispersa . . . . .	65
6.4	Tratamento Estatístico . . . . .	65
6.5	Integração Numérica . . . . .	67
	<b>7 MOVIMENTO DE UMA PARTÍCULA ISOLADA . . . . .</b>	<b>69</b>
7.1	Fluido Base sem Inércia . . . . .	69
	<b>8 SIMULAÇÃO DIRETA DE SUSPENSÕES . . . . .</b>	<b>81</b>
8.1	Aglomerado de Partículas . . . . .	83
8.2	Suspensão Monodispersa . . . . .	85
	<b>9 EFEITO DA INÉRCIA DO FLUIDO SOBRE UMA PARTÍCULA ISOLADA . . . . .</b>	<b>98</b>

<b>9.1</b>	<b>Métodos de Solução</b> . . . . .	<b>99</b>
<b>9.2</b>	<b>Solução Numérica</b> . . . . .	<b>101</b>
	<b>10 CONSIDERAÇÕES FINAIS</b> . . . . .	<b>107</b>
<b>10.1</b>	<b>Conclusões</b> . . . . .	<b>107</b>
<b>10.2</b>	<b>Trabalhos Futuros</b> . . . . .	<b>108</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	<b>109</b>

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 Motivação

O movimento de partículas sólidas em fluidos é pervasivo, sendo parte de diversos processos industriais. Por exemplo, a sedimentação diferencial é um processo de separação de misturas que se baseia na diferença das velocidades de sedimentação de partículas com diferentes raios ou massas específicas. No entanto, observa-se que a taxa de sedimentação das tais é inferior à de uma partícula isolada, como indica a relação empírica de [Richardson e Zaki \(1954\)](#), o que pode ser apropriadamente compreendido à luz do trabalho de [Batchelor \(1972\)](#). Uma aplicação peculiar desse campo de pesquisa é a inserção de partículas sólidas no escoamento turbulento de ar em tubos, que reduz significativamente o coeficiente de arrasto, diminuindo o gradiente de pressão necessário para manter o fluxo ([SAFFMAN, 1962](#)). Fenômenos como estes incentivam o estudo de suspensões, visando à caracterização do movimento referido, que permite o desenvolvimento de tecnologias industriais mais eficientes.

Leitos fluidizados são um caso específico de suspensões particuladas, no qual um escoamento ascendente passa por uma placa porosa contida em um recipiente e exerce uma força de arrasto sobre as partículas sólidas inicialmente dispostas sobre a placa. Quando o arrasto supera o peso líquido das partículas, estas são carregadas para cima, movendo-se livremente, conforme ilustrado pela figura (1). Seu principal emprego são os reatores fluidizados multifásicos, utilizados para a execução de reações químicas, como o processamento de petróleo cru, a manufatura de produtos farmacêuticos e remédios ([DUDUKOVIC; LARACHI; MILLS, 1999](#)).

A fluidização raramente é homogênea e uniforme, incorrendo em instabilidades como ondas de concentração, para uma fase fluida líquida, e formação de bolhas, quando a fase fluida é gasosa. Isto reduz a eficiência de reatores fluidizados, levando à tona o estudo de estabilidade desses sistemas. A figura (2) exemplifica a formação de ondas de concentração em leitos fluidizados. Uma vez que as velocidades relativas entre as fases são altas (o número de Reynolds, parâmetro que as mensura, é elevado) em leitos fluidizados na prática, um modelo contínuo que os descreva deve ser bifásico. Nesta abordagem, as propriedades do fluido são obtidas mediante médias volumétricas de seus valores em cada ponto do meio. No entanto, a aplicação de médias nas fases leva a efeitos de massa virtual,

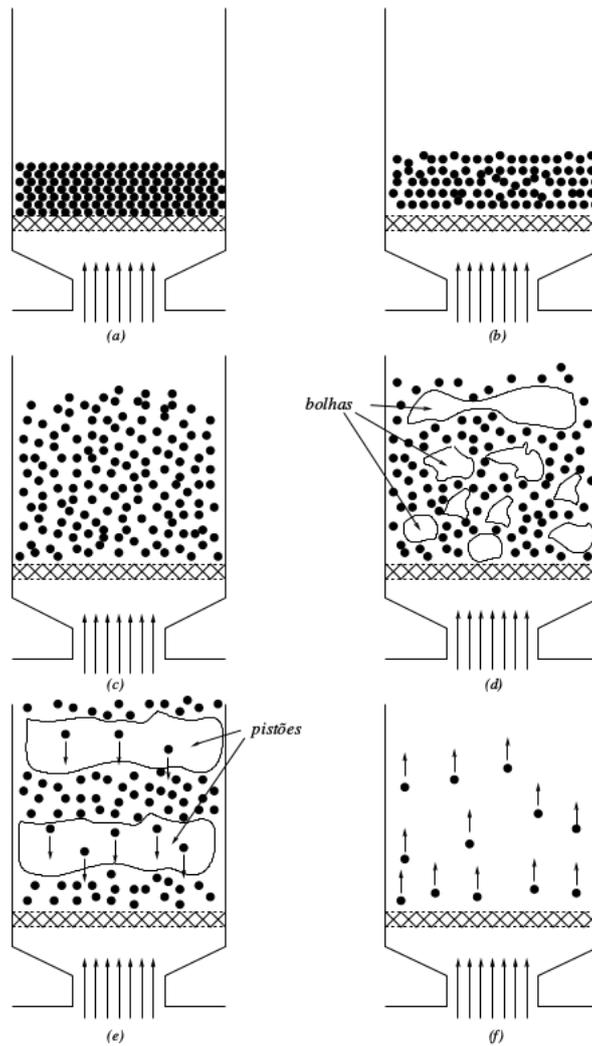


Figura 1 – Tipos de fluidização mais usuais: (a) leito fixo, (b) leito em condição de mínima fluidização, (c) leito particulado, (d) leito borbulhante, (e) leito tipo pistão, (f) transporte pneumático de partículas (SOBRAL, 2004).

arrasto entre fases e tensões em cada fase que exigem equações de fechamento (DURU et al., 2002).

Todavia, importa analisar o regime de baixo número de Reynolds pois as equações governantes de sua modelagem contínua contêm somente não linearidades oriundas das equações constitutivas do fluido, não constando aquelas provenientes do escoamento. De tal forma, a constituição do fluido pode ser analisada em separado, permitindo extrair sua precisa descrição, que então pode ser utilizada nas equações do regime de alto Reynolds.

Neste trabalho, nos voltamos à análise da sedimentação de partículas sólidas num fluido base de massa específica muito menor que a das partículas, em baixo número de Reynolds, objetivando simular uma suspensão gás-sólido. Afora as aplicações estritas deste problema, faz-se extremamente importante pela similaridade que possui com o de um leito fluidizado em baixo número de Reynolds. Com efeito, em ambos os casos, as flutuações de velocidade são bem descritas pelo equilíbrio entre flutuações no número de partículas devido a estatística de Poisson e arrasto de Stokes sobre as tais (TEE et al., 2008).

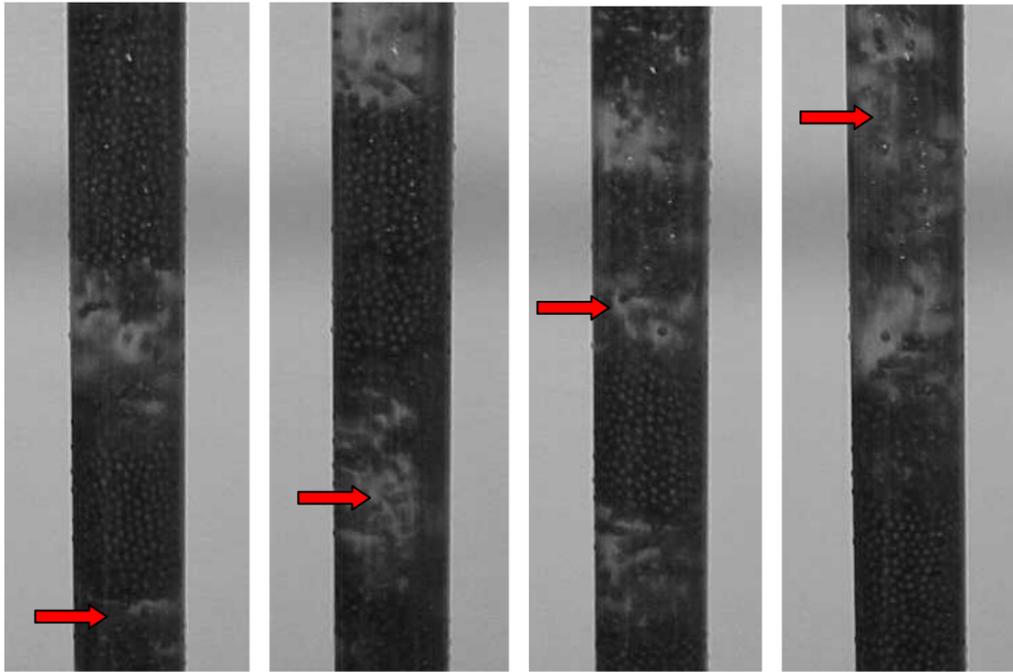


Figura 2 – Ondas de concentração em um leito fluidizado (TORRES; SOBRAL; CUNHA, 2004).

Em adição, um observador que translada com a velocidade média de uma suspensão em sedimentação vislumbra apenas flutuações de velocidade, qualitativamente análogas às de leitos fluidizados. Tal escolha de sistema de coordenadas não altera a dinâmica observada, visto que deriva de uma transformação galileana (BATCHELOR, 1988).

Ademais, o problema de sedimentação de partículas sólidas é fundamental à mecânica estatística do não equilíbrio (PADDING; LOUIS, 2004). Este estudo considera também a influência de movimento browniano sobre as partículas, que como ressaltado por Padding e Louis (2004), primeiro artigo a incluir tal efeito na análise deste problema, é relevante em dispersões coloidais (cujas partículas têm comprimento característico de ordem  $1 \mu m$ ) e aplicado a técnicas centrífugas de diagnóstico em macromoléculas biológicas.

Neste contexto, é importante considerar a influência dos diversos mecanismos físicos, que é descrita pelos tempos característicos dos tais, sobre a dinâmica do sistema. Para tal, definem-se parâmetros adimensionais que os relacionam a um tempo de referência, notadamente aquele que uma partícula leva para se deslocar um raio sob a ação da gravidade. Desta forma, definem-se os números de Stokes e de Péclet. Este mede o tempo que uma partícula leva para se difundir um raio, sujeita a colisões com as partículas do fluido base, enquanto aquele determina o tempo característico para uma partícula se adaptar à velocidade local do fluido.

Serão estudadas também instabilidades associadas a ondas de concentração nas dispersões de pó em gás para baixo número de Reynolds, tendo em vista sua supracitada relevância na eficiência de reatores fluidizados. Analisar-se-ão amplitudes e comprimentos

das tais ondas de vazios (cf. Fig. (2)) mediante uma análise de estabilidade linear. Neste sentido, importa precisar quais processos físicos podem estar atrelados à estabilização de suspensões. Em particular, serão considerados os papéis da estratificação de concentração na direção da gravidade e da inércia das partículas. Outros mecanismos podem ser empregados com a finalidade de estabilizar ondas de concentração em suspensões, como a aplicação de um campo magnético externo a um leito fluidizado de partículas magnéticas, estudada por (CUNHA; SOBRAL; GONTIJO, 2013). Desta forma, simulações diretas que visam à caracterização dinâmica de estruturas em suspensões sob a ação de campos magnéticos externos, como (GONTIJO; CUNHA, 2015), são extremamente relevantes.

## 1.2 Objetivos

Este trabalho objetiva analisar a sedimentação de partículas sólidas de dimensões coloidais em fluido, para baixo número de Reynolds de partículas. Emprega-se tanto uma abordagem lagrangeana, na qual se desenvolve uma simulação computacional direta, que segue o movimento das partículas, quanto um tratamento analítico euleriano. Nesta descrição, estudam-se as partículas sobre o viés da mecânica dos meios contínuos, analisando-as como uma fase contínua, perdendo assim informações acerca de seus movimentos individuais.

### 1.2.1 Objetivos Específicos

Dentro desse contexto, são propostos os seguintes objetivos específicos:

#### **Abordagem lagrangeana:**

- Apresentar estudos iniciais da sedimentação de partículas para números de Reynolds arbitrários;
- Desenvolver um código numérico para simular o movimento de partículas massivas sujeitas a forças brownianas e interagindo hidrodinamicamente. Além disso, considerar um domínio de fundo impenetrável e a possibilidade de estratificação de concentração na direção da gravidade;
- Validar o código numérico pelo cálculo do coeficiente de difusão ordinário Einstein-Stokes, usando tanto o deslocamento quadrático médio quanto a autocorrelação das flutuações de velocidade para diversos números de Péclet e Stokes;
- Desenvolver um procedimento numérico estatístico envolvendo  $N$  partículas e  $M$  realizações para cálculo da variância das flutuações de velocidade de partículas e da função autocorrelação das flutuações de velocidade da suspensão;

- Determinar numericamente o tensor de tensões de partícula, caracterizado por correlação de flutuações de velocidade com origem nas interações hidrodinâmicas viscosas partícula-partícula, em função da fração volumétrica da suspensão, do número de Péclet e do número de Stokes;
- Caracterizar uma pressão de partícula, viscosidade de partícula e um coeficiente de difusão em função da fração volumétrica,  $\phi$ , analisando o limite assintótico  $\phi \rightarrow 0$ ;
- Simular um número suficientemente grande de partículas para que a inércia das partículas equilibre as forças viscosas.

**Abordagem euleriana:**

- Construir um modelo contínuo bifásico de suspensão gás-sólido;
- Efetuar uma análise de estabilidade linear do modelo, para determinação da taxa de amplitude e velocidade de propagação de ondas de concentração, obtendo a condição crítica de estabilidade;
- Elaborar diagramas de bifurcação e linhas neutras do sistema;
- Verificar a dependência de flutuações típicas com o número de Stokes e com o coeficiente de estratificação para diferentes comprimentos de onda, associados com o tamanho do domínio de confinamento da suspensão.

# 2 FUNDAMENTOS DE MICROHIDRODINÂMICA

## 2.1 Equações Gerais de Balanço

Esta seção apresenta tópicos da mecânica dos meios contínuos, baseados em [Cunha \(2015\)](#), a fim de fundamentar as modelagens contínuas lagrangeana e euleriana deste trabalho.

### 2.1.1 Hipótese do Contínuo

Um grande número de trabalhos em mecânica dos fluidos se baseia na hipótese de que o fluido possa ser tratado como se fosse um meio contínuo. Isto é factível uma vez que as propriedades de interesse nessa área são observadas em escalas de comprimento macroscópicas. No entanto, a consistência de tal suposição se condiciona à existência de um volume de observação que contenha um número suficientemente grande de moléculas. Este volume deve ser tal que não haja variações significativas das propriedades medidas devidas a flutuações de moléculas particulares, embora seja pequeno o suficiente para não captar variações espaciais macroscópicas nas propriedades ([BATCHELOR, 2000](#)). A Fig. (3) ilustra a variação na mediação de uma propriedade com o tamanho do volume sensível.

Cabe destacar a hipótese do contínuo não é sempre aplicável, visto que em alguns escoamentos, ao se definir um volume que contenha um número suficiente de moléculas para inibir flutuações microscópicas das propriedades, captam-se variações macroscópicas nas tais. Ou seja, não é possível definir propriedades locais. Entre os escoamentos referidos, podem-se citar ondas de choque e gases rarefeitos ([BATCHELOR, 2000](#)).

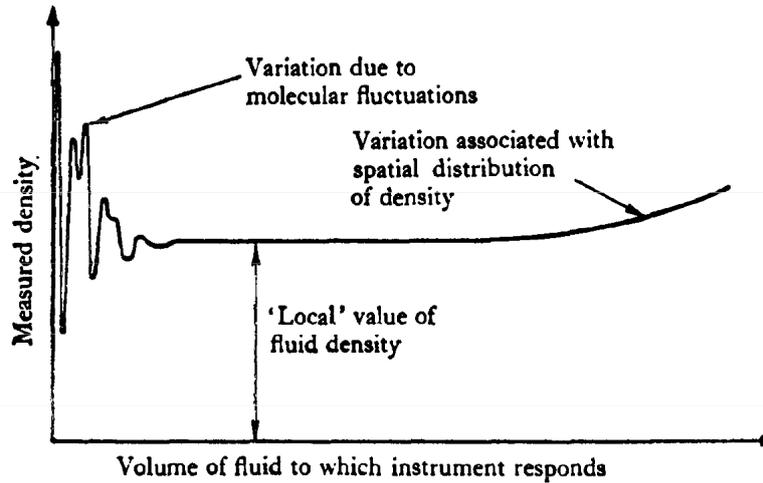


Figura 3 – Efeito do volume sensível de um instrumento de medida na massa específica (BATCHELOR, 2000).

## 2.1.2 Cinemática de um Meio Contínuo

### 2.1.2.1 Descrições Lagrangeana e Euleriana

O movimento de partículas é representado por uma transformação de coordenadas  $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}(\boldsymbol{X}, t)$ , sendo os vetores  $\boldsymbol{x}$  um conjunto de posições no espaço às quais são associadas as partículas que as ocupam, enquanto os vetores  $\boldsymbol{X}$  são as posições iniciais ocupadas por tais partículas. Ressalta-se que  $\boldsymbol{X}$  especifica a partícula que ocupou determinada posição em um dado instante.

Desse modo, é possível descrever o movimento de duas formas: avaliando as propriedades do contínuo em função de  $\boldsymbol{X}$ , por exemplo  $\rho(\boldsymbol{X}, t)$ , o que significa seguir a trajetórias das partículas, ou fazendo-o em termos de  $\boldsymbol{x}$ , como  $\rho(\boldsymbol{x}, t)$ , que equivale a observar posições espaciais, ao invés de seguir partículas. A primeira abordagem é chamada lagrangeana, e o vetor  $\boldsymbol{X}$  é dito rótulo, cujas componentes são nomeadas coordenadas materiais ou lagrangeanas. Já a segunda abordagem é chamada euleriana ou espacial, sendo que as componentes do vetor posição  $\boldsymbol{x}$  são designadas eulerianas, espaciais, físicas ou de laboratório.

### 2.1.2.2 Tensor Gradiente de Deformação

Um corpo contínuo  $\mathfrak{B}$  é definido como uma distribuição contínua de matéria que ocupa uma região  $B$  do espaço em um instante de tempo  $t$ . Tal corpo é constituído de um conjunto de partículas materiais  $\mathbb{P}$ , às quais estão associados os rótulos  $\boldsymbol{X}$ . O mesmo deve ainda atender aos seguintes postulados:

- Toda partícula  $\mathbb{P}$  de  $\mathfrak{B}$  tem uma posição única na região  $B$  em um dado instante de tempo;

- Todo ponto  $P$  da região  $B$  é uma posição da partícula  $\mathbb{P}$  de  $\mathfrak{B}$ .

Define-se configuração como a região  $B$  que um contínuo  $\mathfrak{B}$  ocupa em um determinado instante de tempo. Então, o movimento do corpo material é entendido como uma mudança sequencial de configurações  $B_0 \rightarrow B_1 \rightarrow \dots \rightarrow B_n$ , em que  $B_0$  é uma configuração de referência, e pode ser descrito a partir das equações das trajetórias  $\mathbf{x}(\mathbf{X}, t)$  das partículas, dadas as condições de consistência  $\mathbf{x}(\mathbf{X}, 0) = \mathbf{X}$ . Desse modo, o movimento pode ser representado por um mapeamento da configuração de referência à atual por uma função  $\phi_t(\mathbf{X}) = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t)$ , conforme ilustrado pela Fig. (4).

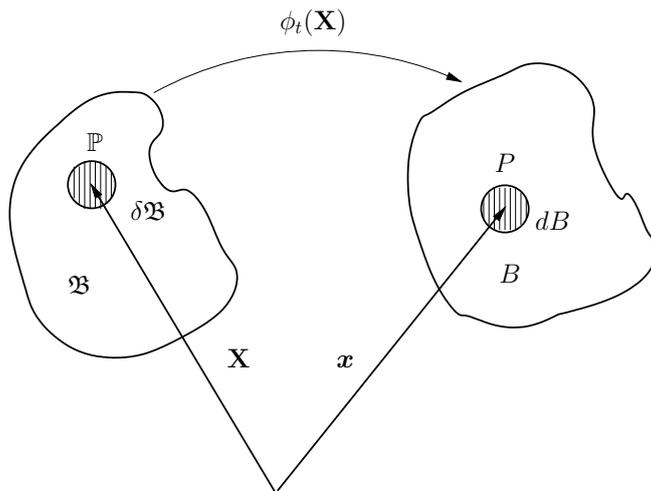


Figura 4 – Mapeamento do movimento de um corpo contínuo.

Visando à caracterização do mapeamento, analisa-se o movimento de um arco material  $dC$ , representado inicialmente pelo vetor  $d\mathbf{X}$  e no estado deformado por  $d\mathbf{x}$ , segundo a Fig. (5). Expandindo o vetor posição do elemento material que ocupa o ponto  $Q$  em série de Taylor,

$$x_i(\mathbf{X} + d\mathbf{X}, t) = x_i(\mathbf{X}, t) + \frac{\partial x_i}{\partial X_j} dX_j + O(|d\mathbf{X}|^2). \quad (2.1)$$

Para  $|d\mathbf{X}|$  arbitrariamente pequeno, segue da Eq. (2.1) que

$$dx_i = \frac{\partial x_i}{\partial X_j} dX_j. \quad (2.2)$$

Define-se o *tensor gradiente de deformação na descrição Lagrangeana*  $\mathbf{F}$  por

$$F_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial X_j}, \quad (2.3)$$

tal que a Eq. (2.2) é expressa em notação de Gibbs por

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{X}, \quad (2.4)$$

sendo esta a lei de transformação de arcos.

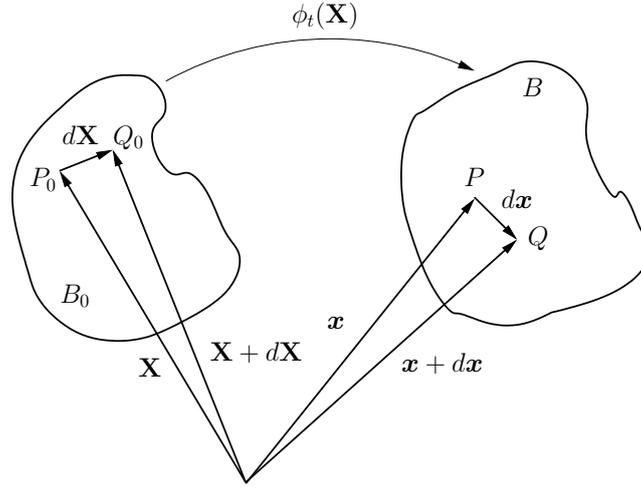


Figura 5 – Deformação de um arco material.

O tensor gradiente de deformação contém as informações sobre os tipos de movimentos que os arcos podem exibir, sejam de translação, rotação ou deformação. Nota-se que o jacobiano  $J$  da transformação de coordenadas é o próprio determinante do referido tensor,

$$J = \det(\mathbf{F}). \quad (2.5)$$

Decorre dos postulados de um meio contínuo que a transformação de coordenadas que caracteriza o movimento é sobrejetiva, logo deve ser invertível. Para tal, é necessário e suficiente que esta não tenha jacobiano nulo, i.e.,  $J \neq 0$ .

### 2.1.2.3 Relações de Euler

As duas relações de Euler estão associadas ao tensor gradiente de deformação e são empregadas para a dedução do teorema transporte de Reynolds. Através deste, podem-se deduzir as equações de balanço para um meio contínuo, o que ilustra a importância de tais ferramentas.

Considere um elemento de volume no estado deformado, representado pela Fig. (6), dado por

$$dV = d\mathbf{x} \cdot (d\bar{\mathbf{x}} \times d\bar{\mathbf{x}}). \quad (2.6)$$

Da Eq. (2.4),

$$dV = (\mathbf{F} \cdot d\mathbf{X}) \cdot (\mathbf{F} \cdot d\bar{\mathbf{X}} \times \mathbf{F} \cdot d\bar{\mathbf{X}}). \quad (2.7)$$

No entanto, sendo o tensor cofator  $\mathbf{F}^*$  definido como aquele para o qual

$$\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}^* = \det(\mathbf{F})\mathbf{I}, \quad (2.8)$$

segue de suas propriedades que

$$\mathbf{F} \cdot d\bar{\mathbf{X}} \times \mathbf{F} \cdot d\bar{\mathbf{X}} = \mathbf{F}^* \cdot (d\bar{\mathbf{X}} \times d\bar{\mathbf{X}}). \quad (2.9)$$

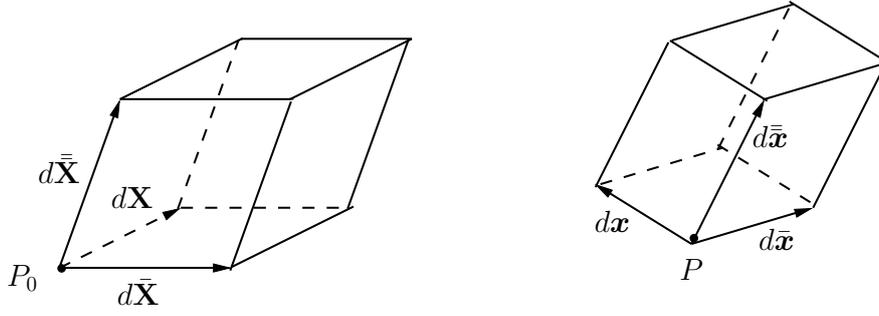


Figura 6 – Elemento infinitesimal de volume em tempos distintos. Adaptado de (CHANDRASEKHARAIHAH; DEBNATH, 2014).

Pelas Eqs. (2.5), (2.8) e (2.9),

$$dV = Jd\mathbf{X} \cdot (d\bar{\mathbf{X}} \times d\bar{\mathbf{X}}). \quad (2.10)$$

Uma vez que o volume no estado de referência é  $dV_0 = d\mathbf{X} \cdot (d\bar{\mathbf{X}} \times d\bar{\mathbf{X}})$ , tem-se

$$J = \frac{dV}{dV_0}, \quad (2.11)$$

que é conhecida como a primeira relação de Euler.

A derivada material de  $J$  pode ser obtida mediante a Expressão (2.5). Representando o determinante em notação indicial e usando a Eq. (2.3), se obtém

$$\frac{DJ}{Dt} = \frac{D}{Dt} \left( \varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_1}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k} \right). \quad (2.12)$$

Note que derivadas materiais são avaliadas com  $\mathbf{X}$  constante, de modo que podem ser permutadas com as derivadas parciais em  $X_i$ . Ademais, tem-se  $u_i = Dx_i/Dt$ , resultando em

$$\frac{DJ}{Dt} = \varepsilon_{ijk} \frac{\partial u_1}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k} + \varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_1}{\partial X_i} \frac{\partial u_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k} + \varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_1}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial u_3}{\partial X_k}. \quad (2.13)$$

Usando a regra da cadeia para explicitar as derivadas da velocidade em relação às coordenadas eulerianas,

$$\frac{DJ}{Dt} = \frac{\partial u_1}{\partial x_m} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_m}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k} + \frac{\partial u_2}{\partial x_m} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_1}{\partial X_i} \frac{\partial x_m}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k} + \frac{\partial u_3}{\partial x_m} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_1}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_m}{\partial X_k}. \quad (2.14)$$

Quando o índice  $m$  se iguala a qualquer outro assumido por  $x$  em uma parcela, há repetição de termos nesta, tal que a mesma se anula pela antissimetria do tensor de Levi-Civita. Deste modo, resta apenas

$$\frac{DJ}{Dt} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_1}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_1}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_1}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k}, \quad (2.15)$$

que pode ser convenientemente rearranjado para

$$\frac{DJ}{Dt} = \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \right) \varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_1}{\partial X_i} \frac{\partial x_2}{\partial X_j} \frac{\partial x_3}{\partial X_k}. \quad (2.16)$$

Identificam-se nesta expressão o divergente do campo de velocidades e o jacobiano da transformação de coordenadas, resultando na expressão

$$\frac{DJ}{Dt} = J \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (2.17)$$

designada por segunda relação de Euler.

### 2.1.3 Teorema Transporte de Reynolds

A dedução das equações de balanço para um meio contínuo requer uma expressão para a derivada material de integrais de volume. Neste caso, a derivada não pode ser comutada com a integral, uma vez que a região de integração varia com o tempo. *De fato, o resultado que se obtém é uma generalização da regra de Leibniz.* A fim de demonstrá-lo, considere o campo  $G(\mathbf{x}, t)$ , que pode ser escalar, vetorial ou tensorial. A taxa de variação da integral de volume desta quantidade é dada por

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} G(\mathbf{x}, t) dV. \quad (2.18)$$

Emprega-se a primeira relação de Euler, Eq. (2.11), para efetuar a integral no volume de referência  $V_0$ , pois isto permite comutar a integral com a derivada material, uma vez que esta é realizada com  $\mathbf{X}$  fixo. Assim,

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} G(\mathbf{x}, t) dV = \int_{V_0} \frac{D}{Dt} [G(\mathbf{x}, t)J] dV_0. \quad (2.19)$$

Derivando a expressão contida no segundo membro pela regra do produto e utilizando a segunda relação de Euler, Eq. (2.17),

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} G(\mathbf{x}, t) dV = \int_{V_0} J \left[ \frac{DG}{Dt} + G(\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] dV_0. \quad (2.20)$$

Lançando mão da Eq. (2.11) novamente, tem-se

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} G(\mathbf{x}, t) dV = \int_{V(t)} \left[ \frac{DG}{Dt} + G(\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] dV, \quad (2.21)$$

que é nomeado teorema transporte de Reynolds, devido a (REYNOLDS; BRIGHTMORE; MOORBY, 1903). A Eq. (2.23) é uma variação do teorema com utilidade significativa para a compreensão física da expressão determinada pode ser obtida a partir da definição de derivada material como se segue:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} G(\mathbf{x}, t) dV = \int_{V(t)} \left[ \frac{\partial G}{\partial t} + \nabla \cdot (G\mathbf{u}) \right] dV, \quad (2.22)$$

e aplicando o teorema da divergência,

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} G(\mathbf{x}, t) dV = \int_{V(t)} \frac{\partial G}{\partial t} dV + \int_{S(t)} G\mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS, \quad (2.23)$$

em que  $S(t)$  denota o bordo do volume  $V(t)$ . Depreende-se da Eq. (2.23) que a taxa de variação da integral de uma propriedade  $G(\mathbf{x}, t)$  no volume consiste de duas parcelas: a primeira relativa à variação dessa propriedade no interior do volume, e a segunda ao fluxo de  $G$  através da superfície de  $V$ .

### 2.1.4 Equação da Continuidade

Sendo  $\rho(\mathbf{x}, t)$  a massa específica de um contínuo, a massa é a propriedade extensiva obtida através da integração de tal campo no volume ocupado pelo corpo,

$$m = \int_V \rho(\mathbf{x}, t) dV. \quad (2.24)$$

Pelo princípio da conservação de massa, esta quantidade se mantém constante ao longo do movimento, de modo que

$$\frac{Dm}{Dt} = 0. \quad (2.25)$$

Aplicando o teorema transporte de Reynolds, Eq. (2.21), à Equação (2.24),

$$\frac{Dm}{Dt} = \int_V \left( \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} \right) dV. \quad (2.26)$$

Logo, pela Eq. (2.25), tem-se

$$\int_V \left( \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} \right) dV = 0. \quad (2.27)$$

Supondo que o integrando seja contínuo e notando que o volume  $V$  é arbitrário, segue do lema de du Bois-Reymond que o integrando deve se anular em todos os pontos do domínio, i.e.,

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.28)$$

nomeada equação da continuidade. Através desta, pode-se mostrar uma variação do teorema transporte de Reynolds, útil à demonstração das equações de balanço. Para tal, considere uma propriedade arbitrária  $F(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)f(\mathbf{x}, t)$ . Integrando-a em  $V$  e derivando pelo uso da Eq. (2.21),

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho(\mathbf{x}, t)f(\mathbf{x}, t) dV = \int_V \left[ \frac{D(\rho f)}{Dt} + \rho f \nabla \cdot \mathbf{u} \right] dV. \quad (2.29)$$

Derivando o produto contido no integrando e empregando a Eq. (2.27), tem-se

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho(\mathbf{x}, t)f(\mathbf{x}, t) dV = \int_V \rho \frac{Df}{Dt} dV. \quad (2.30)$$

### 2.1.5 Forças de Campo e de Superfície

Pode-se distinguir as forças em dois principais grupos. As forças de campo são caracterizadas por ter longo alcance e decaimento lento, tais que não variam apreciavelmente em um elemento infinitesimal do contínuo. Desse modo, estas são proporcionais ao volume do elemento, sendo representadas por  $\mathbf{F}_c = \rho \mathbf{b}(\mathbf{x}, t)dV$ . Neste caso,  $\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)$  é a força de campo por unidade de massa, um campo vetorial.

Já as forças de superfície se destacam pela origem molecular, de tal modo que têm decaimento rápido. Portanto, o volume de atuação está relacionado ao caminho livre médio das moléculas, numa região que é compreendida como uma superfície segundo a ótica da mecânica dos meios contínuos. Segue deste raciocínio que as forças de superfície são proporcionais às áreas sobre as quais incidem, ou seja,  $\mathbf{F}_s = \mathbf{t}(\mathbf{x}, t; \hat{\mathbf{n}})dA$ , em que  $\mathbf{t}(\mathbf{x}, t; \hat{\mathbf{n}})$  é denotada densidade de força.

Conforme ilustrado pela Fig. (7), define-se  $\mathbf{t}(\mathbf{x}, t; \hat{\mathbf{n}})$  como a força por unidade de área exercida *pelo lado para o qual  $\hat{\mathbf{n}}$  aponta* sobre o fluido situado no lado oposto. Evidentemente, pela terceira lei de Newton,  $\mathbf{t}(\mathbf{x}, t; \hat{\mathbf{n}}) = -\mathbf{t}^*(\mathbf{x}, t; \hat{\mathbf{n}})$ , em que o asterisco denota a convenção oposta à que adotamos para  $\mathbf{t}$ . No entanto, observe que pela definição,  $\mathbf{t}^*(\mathbf{x}, t; \hat{\mathbf{n}}) = \mathbf{t}(\mathbf{x}, t; -\hat{\mathbf{n}})$ . Logo,  $\mathbf{t}(\mathbf{x}, t; \hat{\mathbf{n}})$  é uma função ímpar de  $\hat{\mathbf{n}}$ .

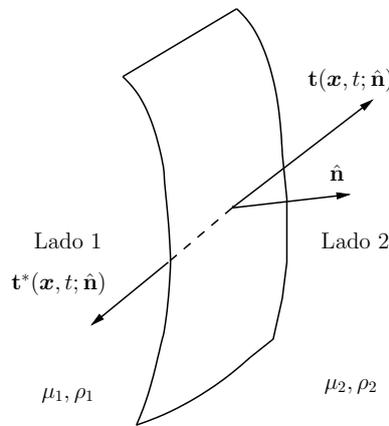


Figura 7 – Densidade de força sobre um elemento fluido.

### 2.1.6 Teorema de Cauchy

A densidade de força que consta na equação do balanço de momento linear, depende do vetor normal ao plano sobre a qual incide, logo não é um campo vetorial. O teorema de Cauchy permite separar a contribuição do vetor normal para a densidade de força das demais, possibilitando a descrição do movimento das partículas fluidas apenas em termos de campos, como será demonstrado.

Considere um tetraedro de fluido sobre o qual atuam forças de campo e de superfície, ilustrado pela figura (8). As forças de campo e a massa de tal elemento são proporcionais a seu volume, enquanto que apenas as forças de superfície escalam com a área sobre a qual atuam. Deste modo, considerando o limite em que as dimensões lineares do tetraedro tendem a zero sem alteração de sua forma, as forças de superfície têm ordem  $dA$ , superior à dos termos restantes no balanço de momento linear,  $dV$ . Portanto, tem-se que

$$\mathbf{t}(\hat{\mathbf{n}})dA + \mathbf{t}(-\hat{\mathbf{e}}_1)dA_1 + \mathbf{t}(-\hat{\mathbf{e}}_2)dA_2 + \mathbf{t}(-\hat{\mathbf{e}}_3)dA_3 = \mathbf{0}. \quad (2.31)$$

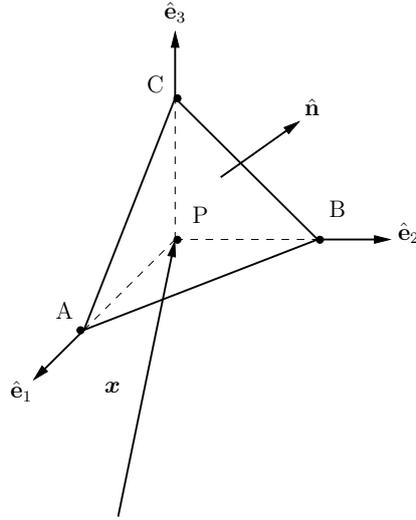


Figura 8 – Elemento de volume tetraédrico.

Como  $\mathbf{t}$  é ímpar em  $\hat{\mathbf{n}}$ , tem-se

$$\mathbf{t}(\hat{\mathbf{n}})dA = \mathbf{t}(\hat{\mathbf{e}}_1)dA_1 + \mathbf{t}(\hat{\mathbf{e}}_2)dA_2 + \mathbf{t}(\hat{\mathbf{e}}_3)dA_3. \quad (2.32)$$

Ademais, os  $dA_i$  nada mais são que as projeções de  $dA$  sobre os vetores de base do sistema coordenado, tal que

$$dA_i = (\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_i)dA. \quad (2.33)$$

Substituindo a Eq.(2.33) na Eq. (2.32) e notando que  $dA$  é um número arbitrário não nulo, depreende-se que

$$\mathbf{t}(\hat{\mathbf{n}}) = \hat{\mathbf{n}} \cdot [\hat{\mathbf{e}}_1\mathbf{t}(\hat{\mathbf{e}}_1) + \hat{\mathbf{e}}_2\mathbf{t}(\hat{\mathbf{e}}_2) + \hat{\mathbf{e}}_3\mathbf{t}(\hat{\mathbf{e}}_3)]. \quad (2.34)$$

Definindo

$$\mathbf{t}(\hat{\mathbf{e}}_i) = \sigma_{ij}\hat{\mathbf{e}}_j, \quad (2.35)$$

resulta da Eq. (2.33) que

$$\mathbf{t}(\hat{\mathbf{n}}) = \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.36)$$

conhecido como teorema de Cauchy, em que  $\boldsymbol{\sigma}$  é o tensor das tensões, campo tensorial cujas componentes  $\sigma_{ij}$  representam a força por unidade de área exercida sobre o plano de vetor normal  $\hat{\mathbf{e}}_i$ , no sentido do vetor  $\hat{\mathbf{e}}_j$ , conforme ilustra a Fig. (9).

### 2.1.7 Balanço de Quantidade de Movimento

A equação de Cauchy, que expressa o balanço de quantidade de movimento para um meio contínuo, pode ser deduzida através da segunda lei de Newton aplicada a um corpo. Segundo esta abordagem, a taxa de variação do momento linear é igual ao somatório das forças externas que o acometem, i.e.,

$$\frac{DL}{Dt} = \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_s. \quad (2.37)$$

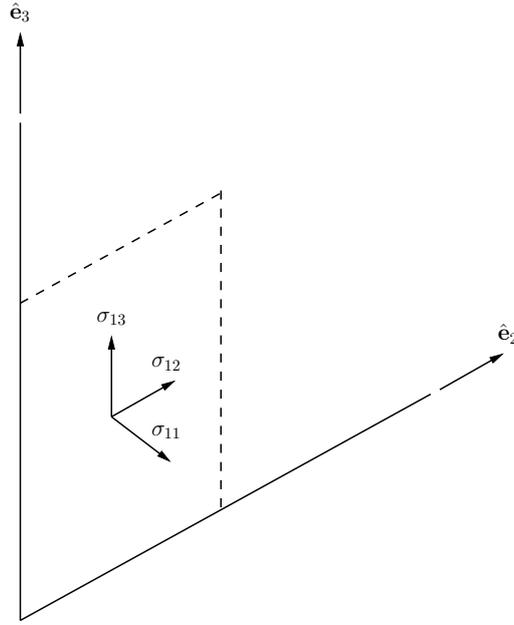


Figura 9 – Componentes da tensão em um plano.

Sendo  $d\mathbf{L} = \rho \mathbf{u} dV$  o momento linear de um elemento contínuo,  $d\mathbf{F}_c = \rho \mathbf{b} dV$  e  $d\mathbf{F}_s = \mathbf{t}(\mathbf{x}, t; \hat{\mathbf{n}}) dA$  as forças de campo e superfície que atuam sobre este, respectivamente,

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho \mathbf{u} dV = \int_V \rho \mathbf{b} dV + \int_S \mathbf{t} dS, \quad (2.38)$$

sendo áreas fechadas denotadas por  $S$ .

Aplicando ao primeiro membro desta equação a variação do teorema transporte de Reynolds dada pela Eq. (2.30), e à integral de superfície do segundo membro o teorema de Cauchy, conforme a Eq. (2.36),

$$\int_V \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} dV = \int_V \rho \mathbf{b} dV + \int_S \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} dS. \quad (2.39)$$

Pelo teorema da divergência para tensores,

$$\int_S \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} dS = \int_V \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} dV. \quad (2.40)$$

Em vista disso,

$$\int_V \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} dV = \int_V \rho \mathbf{b} dV + \int_V \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} dV. \quad (2.41)$$

Procede-se desta descrição à formulação diferencial mediante o uso do teorema da localização, o qual afirma que se a Eq. (2.41) é válida para quaisquer volumes  $V$  arbitrários, então deve-se ter

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b}, \quad (2.42)$$

designada por equação de Cauchy.

### 2.1.8 Tensor das Tensões de um Fluido Newtoniano

O número de equações escalares no sistema formado por (2.28) e (2.42) - 4 - é menor que o de incógnitas - 11:  $\rho$ ,  $p$ ,  $\mathbf{u}$  e  $\boldsymbol{\sigma}$  -, tal que se faz necessário conceber equações de fechamento, determinando  $\boldsymbol{\sigma}$  e  $\rho$ , de modo a tornar o sistema possível determinado. A pressão mecânica  $p$  que consta no rol de incógnitas advém da decomposição do tensor das tensões em suas partes isotrópica e deviatórica, como será mostrado a seguir.

Analogamente a esse caso, a formulação de um meio contínuo bifásico, empregada na seção (3.3), ocorre mediante médias nas fases e resulta em incógnitas que devem ser extraídas de equações constitutivas, as quais são propostas e examinadas na seção referida. Levando em conta que as simulações lagrangeanas desenvolvidas neste trabalho admitem um fluido base newtoniano, compete demonstrar brevemente a equação constitutiva do tensor das tensões deste. Para isto, explicita-se em tal tensor o termo isotrópico  $p_0 \mathbf{I}$ , devido à pressão termodinâmica  $p_0$  e associado ao equilíbrio:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p_0 \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}. \quad (2.43)$$

Nota-se ainda que a pressão mecânica  $p$  pode ser definida como o oposto da média da densidade de forças sobre uma esfera de raio infinitesimal,

$$p = -\langle \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{n}} \rangle. \quad (2.44)$$

A fim de obter uma expressão para a pressão mecânica em termos do tensor de tensões, considere o cálculo da média da componente normal da densidade de força em uma esfera, ponderada pela área:

$$\langle \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{n}} \rangle = \frac{\int_S \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS}{\int_S dS}. \quad (2.45)$$

Utilizando a equação (2.36) e calculando a integral que consta no denominador, tem-se

$$\langle \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{n}} \rangle = \frac{\int_S \boldsymbol{\sigma} : \hat{\mathbf{n}} \hat{\mathbf{n}} dS}{4\pi a^2}. \quad (2.46)$$

Para uma esfera infinitesimal, o tensor das tensões é aproximadamente constante e pode ser retirado da integral, logo

$$\langle \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{n}} \rangle = \frac{\boldsymbol{\sigma} : \int_S \hat{\mathbf{n}} \hat{\mathbf{n}} dS}{4\pi a^2}. \quad (2.47)$$

Dado que  $\int_S \hat{\mathbf{n}} \hat{\mathbf{n}} dS = 4\pi a^2 \mathbf{I}/3$ ,

$$\langle \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{n}} \rangle = \frac{\sigma_{ii}}{3}. \quad (2.48)$$

Assim, segue das equações (2.44) e (2.48) que

$$p = \frac{-\sigma_{ii}}{3}. \quad (2.49)$$

A relação para a parcela associada ao não equilíbrio,  $\boldsymbol{\tau}$ , advém de uma generalização da lei do cisalhamento de Newton,

$$\tau = \mu \frac{\partial u}{\partial y}, \quad (2.50)$$

cuja aplicabilidade é estendida admitindo-se que a tensão seja linear com o gradiente de velocidades, i.e.,

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\eta} : \nabla \mathbf{u}, \quad (2.51)$$

visto que a forma mais geral de relacionar dois tensores de segunda ordem linearmente é mediante um tensor de quarta ordem, que neste caso é  $\boldsymbol{\eta}$ . No entanto, o tensor das tensões deve ser independente do observador, consequentemente uma quantidade objetiva. Uma vez que a parte antissimétrica do gradiente de velocidades não atende a tal requisito, expressa-se  $\boldsymbol{\tau}$  apenas em termos da parte simétrica,  $\mathbf{D} = (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)/2$ , logo

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\eta} : \mathbf{D}. \quad (2.52)$$

Pressupõe-se também que o fluido é isotrópico, o que resulta na isotropia de seu tensor viscosidade  $\boldsymbol{\eta}$ , a qual é representada em termos de suas componentes por

$$\eta_{ijkl} = A(\mathbf{x}, t)\delta_{ij}\delta_{kl} + B(\mathbf{x}, t)\delta_{ik}\delta_{jl} + C(\mathbf{x}, t)\delta_{il}\delta_{jk}. \quad (2.53)$$

Dado que um fluido newtoniano é instantâneo e homogêneo, as funções  $A$ ,  $B$  e  $C$  que constam na equação (2.53) são, de fato, constantes. Assim,

$$\eta_{ijkl} = A\delta_{ij}\delta_{kl} + B\delta_{ik}\delta_{jl} + C\delta_{il}\delta_{jk}. \quad (2.54)$$

Segue das equações (2.52) e (2.54) (CUNHA, 2015), usando a simetria de  $\mathbf{D}$ , que

$$\boldsymbol{\tau} = A(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} + (B + C)\mathbf{D}. \quad (2.55)$$

Então, define-se  $B + C = 2\mu$ , de modo a recuperar a equação (2.50) para um fluido incompressível. Ademais, define-se  $\beta = A$  como o módulo de compressibilidade. Substituindo a Eq. (2.55) na Eq. (2.43), calculando o traço da expressão resultante e utilizando a Eq. (2.49), mostra-se que a pressão mecânica e a termodinâmica estão relacionadas pela expressão

$$p = p_0 - \left(\beta + \frac{2\mu}{3}\right) \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (2.56)$$

Define-se a viscosidade expansional ou segundo coeficiente de viscosidade como  $\kappa = \beta + 2\mu/3$ , tal que

$$p = p_0 - \kappa \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (2.57)$$

A viscosidade expansional apenas exerce efeitos significativos sobre a dinâmica do fluido quando ocorrem excitações na escala de tempo de sua estrutura, como na propagação de ondas acústicas em altas frequências e em ondas de choque (BATCHELOR, 2000). Uma vez que tal regime não é o escopo da presente análise, pode-se considerar  $\kappa \approx 0$ , dita a hipótese de Stokes. Logo, segue das Eqs. (2.57), (2.55) e (2.43) que

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\mu \left( \mathbf{D} - \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}}{3} \mathbf{I} \right). \quad (2.58)$$

Esta é a expressão do tensor das tensões de um fluido newtoniano stokesiano. Para o caso de um escoamento incompressível, tem-se

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D}. \quad (2.59)$$

Logo, decorre das equações (2.59) e (2.42) que o movimento de um fluido newtoniano incompressível é determinado por

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g}. \quad (2.60)$$

No caso em que as forças inerciais têm ordem superior às viscosas, i.e.  $Re \ll 1$ , e as forças de campo são conservativas, (2.60) reduz-se a

$$-\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad (2.61)$$

sendo  $P$  a pressão modificada, que incorpora os termos provenientes das forças de campo. Esta expressão é empregada ao longo da seção (2.2).

## 2.2 Hidrodinâmica em Baixos Números de Reynolds

A presente seção, embasada em (CUNHA, 2016), apresenta os princípios da hidrodinâmica em baixo número de Reynolds, visando à fundamentação do modelo de interação hidrodinâmica empregado nas simulações numéricas deste trabalho.

### 2.2.1 Solução Fundamental de Stokes

A dinâmica de partículas em suspensão será construída a partir da representação integral para escoamentos de Stokes. Esta relaciona a solução de um escoamento puramente viscoso<sup>1</sup> à solução fundamental de Stokes, que determina os campos de velocidade, pressão e tensão induzidos por um ponto de força num fluido newtoniano. Neste intuito, exibir-se-á a solução referida nesta seção. Para isso, considere o balanço de forças sobre o fluido e a equação da continuidade, dados respectivamente por

$$-\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.62)$$

em que  $p$  é o campo de pressão,  $\mu$  a viscosidade dinâmica do fluido,  $\mathbf{u}$  o campo de velocidades e  $\mathbf{F}(\mathbf{x})$  a força exercida pelo ponto de força sobre o fluido.

A força pontual realizada sobre o fluido é uma força concentrada, de tal modo que pode ser adequadamente descrita por  $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_0)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ , sendo  $\mathbf{x}$  um ponto arbitrário e  $\mathbf{x}_0$  o local onde se encontra a singularidade. Definindo a força realizada pelo fluido sobre o ponto de força como  $\mathbf{f}$  e sua amplitude por  $\mathbf{f}(\mathbf{x}_0)$ , tem-se que  $-\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}_0)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ , pois esta é a reação de  $\mathbf{F}$ . Admite-se aqui, por conveniência, que a singularidade esteja situada na origem do sistema de coordenadas. Tal simplificação não deve restringir os resultados obtidos, pois deriva de uma translação. Então, obtém-se das equações (2.62) que

$$-\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} = \mathbf{f}(\mathbf{0})\delta(\mathbf{x}), \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2.63)$$

<sup>1</sup> Do inglês *creeping flow*.

O par de equações (2.63) será resolvido por transformada de Fourier num espaço euclidiano tridimensional. Para isso, definir-se-ão a transformada de Fourier de uma função arbitrária  $\phi$  e sua inversa por

$$\hat{\phi}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x}, \quad (2.64)$$

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\phi}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{k}, \quad (2.65)$$

nas quais  $\mathbf{k}$  é o vetor número de onda e as integrais são calculadas no espaço livre.

Tal método é conveniente, pois o operador  $\nabla$  no espaço de Fourier, ou recíproco, é representado por  $-i\mathbf{k}$ . Logo,  $\nabla^2$  torna-se  $-k^2$  e as equações diferenciais parciais (2.63) são levadas a equações algébricas. Nota-se que é necessário determinar a transformada de Fourier da distribuição delta de Dirac. Logo, considere

$$\hat{\delta}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x}. \quad (2.66)$$

Pelas propriedades da distribuição delta de Dirac,

$$\hat{\delta}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}. \quad (2.67)$$

Da equação (2.67), decorre que a transformada inversa de  $\delta(\mathbf{x})$  é

$$\delta(\mathbf{x}) = \frac{1}{8\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{k}. \quad (2.68)$$

Por simplicidade notacional, escrevemos  $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{0})$ . Tomando as transformadas de Fourier das equações (2.63), tem-se que

$$i\mathbf{k} \hat{p} - \mu k^2 \hat{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{f}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (2.69)$$

e

$$\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{u}} = 0. \quad (2.70)$$

Multiplicando escalarmente a equação (2.69) por  $\mathbf{k}$ , usando a equação (2.70) e isolando  $\hat{p}$ ,

$$\hat{p} = \frac{-i}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\mathbf{f} \cdot \mathbf{k}}{k^2}. \quad (2.71)$$

Determina-se o campo de pressão a partir da transformada inversa da equação (2.71). A seguinte identidade é útil nesse desenvolvimento. Denotando a transformada de Fourier por  $\mathcal{F}$ ,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\{\nabla\phi\} &= -i\mathbf{k}\mathcal{F}\{\phi\} \\ \implies \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{\nabla\phi\}\} &= \mathcal{F}^{-1}\{-i\mathbf{k}\mathcal{F}\{\phi\}\}, \end{aligned}$$

mas

$$\begin{aligned}\mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{\nabla\phi\}\} &= \nabla(\mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{\phi\}\}) \\ \therefore \nabla(\mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{\phi\}\}) &= \mathcal{F}^{-1}\{-i\mathbf{k}\mathcal{F}\{\phi\}\}.\end{aligned}\quad (2.72)$$

Aplicando a equação (2.72) à transformada inversa da equação (2.71), notando que  $\mathbf{f}$  independe de  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{k}$ , tem-se

$$p(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{f}}{8\pi^3} \cdot \nabla \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{k^2} d\mathbf{k}.\quad (2.73)$$

Devemos pois obter a transformada inversa de  $1/k^2$ . Para isso, alternativamente à integração em coordenadas esféricas, pode-se usar a identidade

$$\nabla^2 \left( \frac{1}{4\pi|\mathbf{x}|} \right) = \nabla^4 \left( \frac{|\mathbf{x}|}{8\pi} \right) = -\delta(\mathbf{x}).\quad (2.74)$$

Então, note que

$$\nabla^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{k^2} d\mathbf{k} = \int_{-\infty}^{\infty} -e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{k},\quad (2.75)$$

pois o operador  $\nabla^2$  comuta com a integral, uma vez que ambos são lineares e operam em variáveis distintas. Pela equação (2.68),

$$\nabla^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{k^2} d\mathbf{k} = -8\pi^3 \delta(\mathbf{x}).\quad (2.76)$$

Conclui-se da equação (2.74) que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{k^2} d\mathbf{k} = \frac{2\pi^2}{|\mathbf{x}|}.\quad (2.77)$$

Esta é a transformada inversa que se desejava resolver, a fim de obter o campo de pressão induzido pelo ponto de força. Substituindo este resultado na equação (2.73), tem-se que

$$p(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{f}}{8\pi^3} \cdot \nabla \left( \frac{2\pi^2}{|\mathbf{x}|} \right).\quad (2.78)$$

Segue que

$$p(\mathbf{x}) = \frac{-\mathbf{f}}{8\pi} \cdot \frac{2\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|^3}\quad (2.79)$$

Define-se  $\mathcal{P}(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}/|\mathbf{x}|^3$ , tal que

$$p(\mathbf{x}) = -\frac{\mathbf{f}}{8\pi} \cdot \mathcal{P}(\mathbf{x}).\quad (2.80)$$

Generalizando o local da singularidade, com  $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$ ,

$$p(\mathbf{r}) = -\frac{\mathbf{f}}{8\pi} \cdot \mathcal{P}(\mathbf{r})\quad (2.81)$$

É oportuno ressaltar que  $\mathcal{P}(\mathbf{r})$  nada mais é que o vetor de Green do campo escalar  $p$ , ou seja, o propagador do distúrbio de pressão. Percebe-se ainda que este decai com  $1/r^2$ .

Dada a solução do campo de pressão no espaço recíproco, determinaremos então o campo de velocidades. Assim, substituindo a equação (2.71) na equação (2.69) e isolando  $\hat{\mathbf{u}}$ ,

$$\hat{\mathbf{u}} = \frac{-1}{\mu k^2 (2\pi)^{3/2}} \left[ \mathbf{f} \cdot \mathbf{I} - \frac{(\mathbf{f} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k}}{k^2} \right]. \quad (2.82)$$

Aplicando a transformada inversa de Fourier à equação (2.82),

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \frac{-1}{8\pi^3\mu} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k^2} \left[ \mathbf{f} \cdot \mathbf{I} - \frac{(\mathbf{f} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k}}{k^2} \right] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{k}. \quad (2.83)$$

O primeiro termo da integral contém a transformada inversa já calculada na equação (2.77). Para o segundo termo, usa-se uma propriedade semelhante à da equação (2.72).

Logo,

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \frac{-1}{8\pi^3\mu} \left[ \frac{2\pi^2}{|\mathbf{x}|} \mathbf{f} \cdot \mathbf{I} + \mathbf{f} \cdot \nabla \nabla \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{k^4} d\mathbf{k} \right] \quad (2.84)$$

Notando que

$$\nabla^4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{k^4} d\mathbf{k} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{k} \quad (2.85)$$

e usando as identidades enunciadas nas equações (2.68) e (2.74),

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{k^4} d\mathbf{k} = -\pi^2 |\mathbf{x}|. \quad (2.86)$$

Substituindo a equação (2.68) na equação (2.74),

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \frac{-1}{8\pi^3\mu} \left[ \frac{2\pi^2}{|\mathbf{x}|} \mathbf{f} \cdot \mathbf{I} - \mathbf{f} \cdot \nabla \nabla (\pi^2 |\mathbf{x}|) \right]. \quad (2.87)$$

Uma vez que  $\nabla \nabla (|\mathbf{x}|) = \mathbf{I}/|\mathbf{x}| - \mathbf{x}\mathbf{x}/|\mathbf{x}|^3$ , tem-se

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \frac{-\mathbf{f}}{8\pi\mu} \cdot \left( \frac{\mathbf{I}}{|\mathbf{x}|} + \frac{\mathbf{x}\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|^3} \right). \quad (2.88)$$

Generalizando a origem da singularidade,

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \frac{-\mathbf{f}}{8\pi\mu} \cdot \left( \frac{\mathbf{I}}{r} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^3} \right), \quad (2.89)$$

em que  $r = |\mathbf{r}|$ . Na equação (2.89),

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\mu} \left( \frac{\mathbf{I}}{r} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^3} \right) \quad (2.90)$$

é chamado de tensor de Oseen-Burgers (KIM; KARRILA, 1991). A solução do campo de velocidades obtida na equação (2.89) é denominada *Stokeslet*. Note que a velocidade produzida pelo movimento de um ponto de força nesse fluido decai com  $1/r$ . Tal decaimento lento afeta o movimento de demais partículas imersas no fluido, mesmo a longas distâncias.

Suficientemente longe de uma partícula, espera-se que os campos de velocidade e pressão produzidas pela mesma assemelhem-se aos gerados por um ponto de força. Deste

modo, a solução fundamental de Stokes representa uma aproximação de longo alcance (RUSSEL; SAVILLE; SCHOWALTER, 1989) e provê um ponto inicial para soluções de escoamentos puramente viscosos através do teorema recíproco de Lorentz.

Ademais, é proveitoso definir

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{I}}{r} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^3}, \quad (2.91)$$

que é conhecido na literatura como tensor de Oseen (KIM; KARRILA, 1991). Logo, pode-se escrever

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = -\frac{\mathbf{f}}{8\pi\mu} \cdot \mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0). \quad (2.92)$$

Com a equação (2.92), podemos agora determinar o campo de tensões e a vorticidade induzidas pelo ponto de força. O fluido base é newtoniano e incompressível, portanto sua equação constitutiva para o tensor das tensões é

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = -p\mathbf{I} + \mu[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T], \quad (2.93)$$

Por meio das fórmulas determinadas para a pressão e a velocidade, respectivamente (2.79) e (2.88), mostra-se que

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{f}}{8\pi} \cdot \mathbf{T}(\mathbf{r}). \quad (2.94)$$

Nesta expressão, o tensor  $\mathbf{T}(\mathbf{r})$ , de terceira ordem, tem a seguinte forma em notação de Gibbs:

$$\mathbf{T}(\mathbf{r}) = \frac{6\mathbf{r}\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^5}. \quad (2.95)$$

Este é a função tensorial de Green associada ao campo de tensões gerado por um ponto de força, ou *stresslet*. Pela definição de vorticidade,  $\boldsymbol{\xi} = \nabla \times \mathbf{u}$ , usando a equação (2.88),

$$\boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}) = \frac{-\mathbf{f}}{8\pi\mu} \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{r}), \quad (2.96)$$

sendo

$$\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{r}) = 2\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r^3} \quad (2.97)$$

o *rotlet*, tensor de segunda ordem que é a função de Green associada à propagação de vorticidade pela singularidade e  $\boldsymbol{\varepsilon}$  o tensor de terceira ordem de Levi-Civita, cujas componentes são dadas por

$$\varepsilon_{ijk} = \hat{\mathbf{e}}_i \cdot (\hat{\mathbf{e}}_j \times \hat{\mathbf{e}}_k). \quad (2.98)$$

## 2.2.2 Teorema Recíproco de Lorentz

O teorema recíproco de Lorentz (1907) relaciona dois escoamentos puramente viscosos. A partir dele, demonstra-se a representação integral de um escoamento de Stokes, fundamental para o método integral de contorno aplicado à microhidrodinâmica. Para

demonstrá-lo, consideramos o par de escoamentos puramente viscosos  $\{\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}\}$ ,  $\{\mathbf{u}', \boldsymbol{\sigma}'\}$  de fluidos newtonianos, definidos num mesmo domínio  $\Omega$ , cujo bordo é  $\partial\Omega$ . Neste caso,

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{f}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.99)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}' = \mathbf{f}', \quad \nabla \cdot \mathbf{u}' = 0. \quad (2.100)$$

A formulação descrita por estas equações admite a possibilidade de singularidades no domínio, representadas pelas forças por unidade de volume  $\mathbf{f}$  e  $\mathbf{f}'$ . Uma vez que a equação constitutiva do tensor das tensões de um fluido newtoniano incompressível é  $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D}$ , sendo  $\mathbf{D}$  a parte simétrica do gradiente de velocidades, tem-se que  $\boldsymbol{\sigma} : \nabla\mathbf{u} = 2\mu\mathbf{D} : \mathbf{D}$ . Logo,

$$\boldsymbol{\sigma} : \nabla\mathbf{u}' = \boldsymbol{\sigma}' : \nabla\mathbf{u}. \quad (2.101)$$

Usando a identidade

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}) = \boldsymbol{\sigma} : \nabla\mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (2.102)$$

obtém-se das equações (2.99), (2.100) e (2.101) o teorema recíproco de Lorentz, qual seja

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}') - \mathbf{u}' \cdot \mathbf{f} = \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{u}) - \mathbf{u} \cdot \mathbf{f}' \quad (2.103)$$

Integrando a equação (2.103) no domínio  $\Omega$  e usando o teorema da divergência, bem como a simetria do tensor das tensões, determina-se a forma integral do teorema referido,

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{u}' \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dS - \int_{\Omega} \mathbf{u}' \cdot \mathbf{f} \, dV = \int_{\partial\Omega} \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}' \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dS - \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{f}' \, dV. \quad (2.104)$$

### 2.2.3 Representação Integral de um Escoamento de Stokes

Sejam  $\{\mathbf{u}', \boldsymbol{\sigma}'\}$  a solução fundamental de Stokes e  $\{\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}\}$  um escoamento de Stokes arbitrário, não singular ( $\mathbf{f} = \mathbf{0}$ ), definido num domínio aberto  $\Omega$ . A aplicação do teorema recíproco de Lorentz, dado pela equação (2.104), a esse par de escoamentos, considerando as equações (2.89), (2.90) e (2.94) resulta em

$$-\frac{1}{8\pi\mu} \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\mathcal{G}}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dS(\boldsymbol{\zeta}) = \frac{1}{8\pi} \int_{\partial\Omega} \mathbf{u}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{T}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dS(\boldsymbol{\zeta}) - \int_{\Omega} \mathbf{u}(\boldsymbol{\zeta}) \delta(\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x}) \, dV(\boldsymbol{\zeta}), \quad (2.105)$$

em que  $dS(\boldsymbol{\zeta})$  e  $dV(\boldsymbol{\zeta})$  denotam integrações com respeito à variável  $\boldsymbol{\zeta}$  e são alternativamente representadas por  $dS_{\boldsymbol{\zeta}}$  e  $dV_{\boldsymbol{\zeta}}$ . Neste contexto,  $\hat{\mathbf{n}}$  é o vetor normal que aponta para fora da superfície  $\partial\Omega$ . Convém, no entanto, expressar tal equação em termos do vetor normal que aponta para dentro da superfície, definido por  $\mathbf{n} = -\hat{\mathbf{n}}$ . Nessa forma, tem-se

$$\frac{1}{8\pi\mu} \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\mathcal{G}}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{n} \, dS_{\boldsymbol{\zeta}} = -\frac{1}{8\pi} \int_{\partial\Omega} \mathbf{u}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{T}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \, dS_{\boldsymbol{\zeta}} - \int_{\Omega} \mathbf{u}(\boldsymbol{\zeta}) \delta(\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x}) \, dV_{\boldsymbol{\zeta}}. \quad (2.106)$$

Pelas propriedades da distribuição delta de Dirac, pode-se simplificar a integral de volume que ocorre na equação (2.106), determinando o campo de velocidades no fluido em função das integrais de superfície por

$$\left. \begin{array}{l} \text{Se } \mathbf{x} \in \Omega, \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}) \\ \text{Se } \mathbf{x} \notin \bar{\Omega}, \quad \mathbf{0} \end{array} \right\} = -\frac{1}{8\pi\mu} \int_{\partial\Omega} \mathbf{G}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{n} \, dS_{\boldsymbol{\zeta}} - \frac{1}{8\pi} \int_{\partial\Omega} \mathbf{u}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{T}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \, dS_{\boldsymbol{\zeta}}, \quad (2.107)$$

em que  $\bar{\Omega}$  é o fecho de  $\Omega$ .<sup>2</sup>

A equação (2.107) é a representação integral dos escoamentos de Stokes, que relaciona o campo de velocidade num ponto do escoamento à solução fundamental de Stokes, por meio de uma convolução. Através dela, faz-se possível determinar o campo de velocidades de um escoamento de Stokes arbitrário sem, para isso, recorrer diretamente à solução das equações de um escoamento puramente viscoso. De fato, usam-se exclusivamente a velocidade e densidade de força<sup>3</sup> no bordo  $\partial\Omega$  do domínio.

Impende adaptar o resultado obtido para a aplicação ao movimento de um corpo imerso, explicitando a contribuição do campo de velocidade e densidade de força sobre essa partícula. Para isso, divide-se o bordo do domínio de integração em duas superfícies, conforme a figura (10), em que  $S_p$  é uma superfície arbitrária, como a de uma partícula, num caso específico, e  $S_\infty$  é uma superfície esférica de raio arbitrariamente grande.

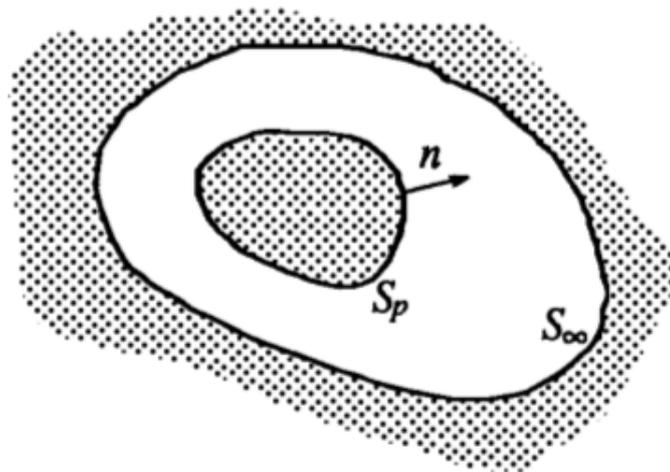


Figura 10 – Domínio de integração (KIM; KARRILA, 1991).

Definindo  $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^D(\mathbf{x}) + \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x})$ , o que equivale a separar o campo de velocidades em um distúrbio produzido pela partícula  $\mathbf{u}^D(\mathbf{x})$  e um escoamento incidente  $\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x})$ , se  $\mathbf{u}(\mathbf{x}) \rightarrow \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x})$  quando  $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ , tem-se que  $\mathbf{u}^D(\mathbf{x}) \rightarrow \mathbf{0}$  para  $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ . Aplicando a representação integral ao campo de velocidades produzido por uma partícula, num volume

<sup>2</sup> "Um ponto  $a \in \mathbb{R}^n$  é aderente a um conjunto  $X \subset \mathbb{R}^n$  quando é limite de uma sequência de pontos desse conjunto. O conjunto de pontos aderentes a  $X$  chama-se o fecho de  $X$  e é indicado com a notação  $\bar{X}$ ". (LIMA, 1976).

<sup>3</sup> Do inglês *traction*.

de fluido delimitado pelas superfícies  $S_p$  e  $S_\infty$ ,

$$\left. \begin{array}{l} \text{Se } \mathbf{x} \in \Omega, \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}) \\ \text{Se } \mathbf{x} \notin \bar{\Omega}, \quad \mathbf{0} \end{array} \right\} = -\frac{1}{8\pi\mu} \int_{S_p} \mathcal{G}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{n} \, dS_\zeta - \frac{1}{8\pi} \int_{S_p} \mathbf{u}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{T}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \, dS_\zeta \\ - \frac{1}{8\pi\mu} \int_{S_\infty} \mathcal{G}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{n} \, dS_\zeta - \frac{1}{8\pi} \int_{S_\infty} \mathbf{u}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{T}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \, dS_\zeta. \quad (2.108)$$

Define-se ainda

$$\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) \equiv -\frac{1}{8\pi\mu} \int_{S_\infty} \mathcal{G}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{n} \, dS_\zeta - \frac{1}{8\pi} \int_{S_\infty} \mathbf{u}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{T}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \, dS_\zeta, \quad (2.109)$$

de forma que

$$\left. \begin{array}{l} \text{Se } \mathbf{x} \in \Omega, \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}) \\ \text{Se } \mathbf{x} \notin \bar{\Omega}, \quad \mathbf{0} \end{array} \right\} = \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) - \frac{1}{8\pi\mu} \int_{S_p} \mathcal{G}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{n} \, dS_\zeta - \frac{1}{8\pi} \int_{S_p} \mathbf{u}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{T}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \, dS_\zeta. \quad (2.110)$$

Nos pontos interiores ao domínio de fluido, isto equivale a

$$\mathbf{u}^D(\mathbf{x}) = -\frac{1}{8\pi\mu} \int_{S_p} \mathcal{G}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{n} \, dS_\zeta - \frac{1}{8\pi} \int_{S_p} \mathbf{u}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{T}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \, dS_\zeta. \quad (2.111)$$

A primeira integral que consta na equação (2.111) pode ser interpretada como o campo de velocidades gerado por uma distribuição de forças de superfície  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \, dS$  e é denominada simples camada potencial<sup>4</sup>, analogamente à teoria potencial (KIM; KARRILA, 1991). O segundo termo da equação é chamado de dupla camada potencial<sup>5</sup>, pela mesma razão, e pode ser fisicamente compreendido como a soma de uma distribuição de fontes ou sumidouros de intensidade  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$  e uma dupla camada de *Stokeslets* com intensidade de dipolo  $|\mathbf{u}| \mathbf{n}$  na direção de  $\mathbf{u}$  (KIM; KARRILA, 1991).

No caso de partículas rígidas, escopo das simulações desenvolvidas neste trabalho, nota-se que a integral da dupla camada potencial é nula, conforme mostrado em (KIM; KARRILA, 1991). Logo, a representação integral de um escoamento de Stokes induzido por um corpo rígido é

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) - \frac{1}{8\pi\mu} \int_{S_p} \mathcal{G}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{n} \, dS_\zeta. \quad (2.112)$$

## 2.2.4 Primeira Lei de Faxén para Translação

Partindo da representação integral, demonstraremos a primeira lei de Faxén para translação de partículas rígidas esféricas. Tal expressão determina a força hidrodinâmica viscosa que atua sobre esse corpo, sendo uma generalização da lei de Stokes para escoamentos incidentes arbitrários, ainda no contexto de escoamentos puramente viscosos.

<sup>4</sup> Do inglês *single layer*.

<sup>5</sup> Do inglês *double layer*.

Para isso, considere o movimento de corpo rígido de uma partícula esférica, que translada com velocidade  $\mathbf{U}$  e gira com velocidade angular  $\boldsymbol{\omega}$  em relação a seu centro,  $\mathbf{x}_0$ . Assim,  $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{U} + \boldsymbol{\omega} \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \forall \mathbf{x} \in S_p$ . Considere agora a integral da equação (2.112) sobre a superfície da esfera,

$$\int_{S_p} \mathbf{U} dS_x + \boldsymbol{\omega} \times \int_{S_p} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) dS_x = \int_{S_p} \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) dS_x - \frac{1}{8\pi\mu} \int_{S_p} \left[ \int_{S_p} \mathcal{G}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{n} dS_\zeta \right] dS_x. \quad (2.113)$$

Explicitando a densidade de força,  $\mathbf{t}(\boldsymbol{\zeta}) = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\zeta}) \cdot \mathbf{n}$ , para um tensor de tensões simétrico, comutando as integrais em  $\mathbf{x}$  e  $\boldsymbol{\zeta}$  no segundo termo do lado direito da equação e notando que  $\mathbf{t}(\boldsymbol{\zeta})$  independe de  $\mathbf{x}$ , tem-se

$$\int_{S_p} [\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) - \mathbf{U}] dS_x = \frac{1}{8\pi\mu} \int_{S_p} \left[ \int_{S_p} \mathcal{G}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) dS_x \right] \cdot \mathbf{t}(\boldsymbol{\zeta}) dS_\zeta + \boldsymbol{\omega} \times \int_{S_p} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) dS_x. \quad (2.114)$$

Calcularemos então a integral  $\int_{S_p} \mathcal{G}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) dS_x$ , usando para isso uma expansão multipolo do tensor de Oseen, ou seja, uma série de Taylor do mesmo. Neste caso, em potências de  $\mathbf{x} - \mathbf{x}_0$ , em torno do ponto  $\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x}_0$ . Para tanto, usa-se a identidade  $\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x} = (\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x}_0) - (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ , obtendo

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x}) = \mathcal{G}(\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x}_0) - (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \nabla \mathcal{G}|_{\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x}_0} + \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}{2} : \nabla \nabla \mathcal{G}|_{\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x}_0} + \dots \quad (2.115)$$

Substituindo a equação (2.115) na equação (2.114), os termos referentes ao tensor de Green são constantes com relação a  $\mathbf{x}$  e podem ser removidos da integral. Faz-se então necessário determinar as integrais do poliádico  $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^n$ , de ordem  $n$ ,  $n \in N$ , com relação a  $\mathbf{x}$ . Convém ressaltar os seguintes casos específicos: para  $n$  ímpar,

$$\int_{S_p} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^n dS_x = \mathbf{0}. \quad (2.116)$$

Para  $n = 2$ ,

$$\int_{S_p} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2 dS_x = \frac{4\pi a^4}{3} \mathbf{I}. \quad (2.117)$$

Em adição, decorre das equações (2.63) e (2.92) que  $\nabla^{2n} \mathcal{G} = \mathbf{0}$ ,  $n \in N : n \geq 2$ . Desta propriedade, em conjunto com as equações (2.115), (2.116) e (2.117), resulta que

$$\int_{S_p} \mathcal{G}(\boldsymbol{\zeta}, \mathbf{x}) dS_x = 4\pi a^2 \left( 1 + \frac{a^2}{6} \nabla^2 \right) \mathcal{G}(\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x}_0). \quad (2.118)$$

Utilizando as equações (2.116), para  $n = 1$ , e (2.118) em (2.114),

$$\int_{S_p} [\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) - \mathbf{U}] dS_x = \frac{a^2}{2\mu} \int_{S_p} \left[ \left( 1 + \frac{a^2}{6} \nabla^2 \right) \mathcal{G}(\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x}_0) \right] \cdot \mathbf{t}(\boldsymbol{\zeta}) dS_\zeta. \quad (2.119)$$

Usa-se a definição do tensor de Oseen, dada pela equação (2.91) e simplifica-se a expressão, notando que  $|\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{x}_0| = a$ , resultando em

$$\int_{S_p} [\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) - \mathbf{U}] dS_x = \frac{2a}{3\mu} \int_{S_p} \mathbf{t}(\boldsymbol{\zeta}) dS_\zeta. \quad (2.120)$$

Pela definição da força hidrodinâmica,  $\mathbf{f}^h = \int_{S_p} \mathbf{t}(\boldsymbol{\zeta}) dS_{\boldsymbol{\zeta}}$ , obtém-se a lei de Faxén para a translação de uma partícula esférica rígida, qual seja

$$\mathbf{f}^h = \frac{3\mu}{2a} \int_{S_p} [\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) - \mathbf{U}] dS_{\mathbf{x}}. \quad (2.121)$$

Salienta-se, ainda, que tal identidade pode assumir uma forma alternativa por meio da expansão multipolo de  $\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x})$ . Com efeito, realizando-a em torno do centro da esfera,

$$\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_0) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \nabla \mathbf{u}^\infty|_{\mathbf{x}_0} + \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}{2} : \nabla \nabla \mathbf{u}^\infty|_{\mathbf{x}_0} + \dots \quad (2.122)$$

Considerando a identidade  $\nabla^{2n} \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ ,  $n \in N : n \geq 2$ , decorre das equações (2.121) e (2.122) que

$$\mathbf{f}^h = 6\pi\mu a \left[ \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_0) + \frac{a^2}{6} \nabla^2 \mathbf{u}^\infty|_{\mathbf{x}_0} - \mathbf{U} \right]. \quad (2.123)$$

Esta é uma forma alternativa da primeira lei de Faxén, para translação de partículas esféricas rígidas. Usar-la-emos para deduzir as relações de resistência e mobilidade, que foram simuladas computacionalmente neste trabalho.

## 2.2.5 Linearidade dos Escoamentos de Stokes

Como aplicação do teorema recíproco de Lorentz, demonstraremos a relação linear entre a força sobre uma partícula rígida e sua velocidade em escoamentos de Stokes, segundo a abordagem apresentada por [Kim e Karrila \(1991\)](#). Considere dois escoamentos não singulares produzidos pelo movimento de um corpo rígido,  $\{\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}\}$  e  $\{\mathbf{u}', \boldsymbol{\sigma}'\}$ . Sendo as velocidades sobre suas superfícies  $\mathbf{U}$  e  $\mathbf{U}'$  e as forças que atuam sobre os tais  $\mathbf{f}$  e  $\mathbf{f}'$ , segue da equação (2.104) que

$$\mathbf{U} \cdot \mathbf{f}' = \mathbf{U}' \cdot \mathbf{f}. \quad (2.124)$$

Sejam então  $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{U})$ ,  $\mathbf{U} = \mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2$  e  $\mathbf{U}' = \mathbf{U}_1$ . Dessa forma,

$$(\mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{U}_1) = \mathbf{U}_1 \cdot \mathbf{f}(\mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2). \quad (2.125)$$

Analogamente, para  $\mathbf{U} = \mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2$  e  $\mathbf{U}' = \mathbf{U}_2$ , tem-se

$$(\mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{U}_2) = \mathbf{U}_2 \cdot \mathbf{f}(\mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2). \quad (2.126)$$

Combinando as equações (2.125) e (2.126), tem-se

$$(\mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2) \cdot [\mathbf{f}(\mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2) - \mathbf{f}(\mathbf{U}_1) - \mathbf{f}(\mathbf{U}_2)] = \mathbf{0}. \quad (2.127)$$

Para  $\mathbf{U}_1$  e  $\mathbf{U}_2$  arbitrários, deve-se ter que  $\mathbf{f}(\mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2) = \mathbf{f}(\mathbf{U}_1) + \mathbf{f}(\mathbf{U}_2)$ . Sabe-se ainda que a forma mais geral de combinar dois vetores linearmente é por meio de um tensor de segunda ordem. Logo, deve-se ter

$$\mathbf{F} = -\mu \mathbf{A} \cdot (\mathbf{U} - \mathbf{U}^\infty). \quad (2.128)$$

## 2.2.6 Formulações de Mobilidade e Resistência

Através das ferramentas expostas nas seções precedentes, analisaremos as forças hidrodinâmicas no problema da sedimentação de partículas esféricas numa suspensão diluída em baixo número de Reynolds, com o objetivo de desenvolver a descrição dinâmica do movimento das mesmas. As formulações ora desenvolvidas embasarão a fundamentação do presente estudo e são utilizadas no código numérico.

Partimos do caso específico da primeira lei de Faxén em que o termo contendo  $a^2$  é desprezível, visto que estamos no regime assintótico de partículas pontuais, para o qual  $a_\alpha \ll 1$ , logo

$$\mathbf{f}_\alpha^h = 6\pi\mu a_\alpha [\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_\alpha) - \mathbf{U}_\alpha], \quad \alpha = 1, \dots, N, \quad (2.129)$$

sendo  $N$  o número de partículas em suspensão. Em se tratando de suspensões com baixas frações volumétricas, considera-se que o escoamento incidente sobre cada partícula pode ser construído como uma superposição dos distúrbios de primeira ordem produzidos pelas outras, obtidos da equação (2.92) segundo

$$\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_\alpha) = \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^N \frac{-1}{8\pi\mu} \mathcal{G}(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta) \cdot \mathbf{f}_\beta^h, \quad \alpha = 1, \dots, N, \quad (2.130)$$

assim escrito em razão da simetria do tensor de Oseen. Substituindo a equação (2.130) na equação (2.129), tem-se

$$\mathbf{f}_\alpha^h = 6\pi\mu a_\alpha \left[ -\mathbf{U}_\alpha - \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^N \frac{1}{8\pi\mu} \mathcal{G}(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta) \cdot \mathbf{f}_\beta^h \right]. \quad (2.131)$$

Neste contexto, identificam-se o tensor mobilidade de Oseen, referente às interações entre pares,

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta}^p(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\mu r} (\mathbf{I} + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}), \quad (2.132)$$

e o tensor automobilidade, definido como

$$\mathbf{M}_{\alpha\alpha}^s(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{I}}{6\pi\mu a_\alpha}, \quad (2.133)$$

nos quais  $\mathbf{r} = \mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta$  e  $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$ , de modo que

$$\mathbf{f}_\alpha^h = (\mathbf{M}_{\alpha\alpha}^s)^{-1} \cdot \left[ -\mathbf{U}_\alpha - \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^N \mathbf{M}_{\alpha\beta}^p(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta) \cdot \mathbf{f}_\beta^h \right]. \quad (2.134)$$

Então, convém definir vetores globais força  $\mathbf{f}^h = (\mathbf{f}_1^h, \mathbf{f}_2^h, \dots, \mathbf{f}_N^h)$  e velocidade  $\mathbf{U} = (\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, \dots, \mathbf{U}_N)$ , bem como matrizes globais de automobilidade e mobilidade entre pares, construídas por blocos a partir das representações matriciais dos tensores de segunda

ordem exibidos nas equações (2.132) e (2.133) segundo

$$\mathbf{M}^p = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{M}_{12}^p & \cdots & \mathbf{M}_{1N}^p \\ \mathbf{M}_{21}^p & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{M}_{2N}^p \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{M}_{N1}^p & \mathbf{M}_{N2}^p & \cdots & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (2.135)$$

e

$$\mathbf{M}^s = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_{11}^s & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{M}_{22}^s & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{M}_{NN}^s \end{bmatrix}. \quad (2.136)$$

Assim, expressa-se a equação (2.134) como

$$\mathbf{U} = -(\mathbf{M}^s + \mathbf{M}^p) \cdot \mathbf{f}^h, \quad (2.137)$$

de tal modo que é pertinente definir

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}^s + \mathbf{M}^p, \quad (2.138)$$

implicando em

$$\mathbf{U} = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{f}^h, \quad (2.139)$$

expressão esta conhecida como a relação de mobilidade (ABADE, 2005). Este é um sistema de equações acopladas, útil à descrição da cinemática das suspensões nas quais se pode desprezar a inércia das partículas. Nesse caso, conhecem-se as forças hidrodinâmicas que atuam sobre as tais e impende determinar as velocidades que adquirem, caracterizando-se como uma equação diferencial ordinária de primeira ordem em virtude da relação

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{U}, \quad (2.140)$$

através da qual se determina a configuração do sistema ao longo do tempo.

Na formulação de resistência, no entanto, pressupõem-se conhecidas as velocidades e se deseja determinar as forças hidrodinâmicas. A relação de resistência deriva da inversão da equação (2.139),

$$\mathbf{f}^h = -\mathbf{R} \cdot \mathbf{U}, \quad (2.141)$$

na qual  $\mathbf{R} = \mathbf{M}^{-1}$  é o tensor resistência global. A obtenção da configuração do sistema na formulação de resistência exige a resolução de uma equação diferencial ordinária de segunda ordem, decorrente aplicação da segunda lei de Newton às partículas, utilizando a expressão (2.141), i.e.,

$$\mathbb{M} \cdot \frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{f}^h + \mathbf{f}^{nh}, \quad (2.142)$$

em que  $\mathbf{f}^{nh}$  é o somatório de todas as forças não hidrodinâmicas que atuam sobre as partículas e  $\mathbb{M}$  é a matriz

$$\mathbb{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{m}_1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{m}_2 & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{m}_N. \end{bmatrix}, \quad (2.143)$$

sendo  $\mathbf{m}_\alpha = m_\alpha \mathbf{I}$ ,  $\alpha \in \mathbb{N} : \alpha = 1, \dots, N$  e  $m_\alpha$  a massa da partícula  $\alpha$ .

As equações (2.139) e (2.141) têm natureza mais geral do que a assumida na demonstração desta seção. Embora nos restrinjamos à análise de partículas pontuais, cabe ressaltar que quando as mesmas têm raios finitos, a forma das equações se preserva, enquanto que os tensores mobilidade e resistência são alterados.

## 2.3 Movimento Browniano

Partículas de dimensões coloidais, de raio  $a < 1 \mu m$ , apresentam um movimento errático, denominado browniano em homenagem ao botânico Robert Brown, que o descreveu em 1827 (MCQUARRIE, 2000), e sua dinâmica é modelada em primeira aproximação pela equação de Langevin. Em tal descrição, aplica-se a segunda lei de Newton às mesopartículas, considerando a ação de forças inerciais, de arrasto viscoso e devidas a colisões com as partículas do fluido base, resultando em

$$m \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\zeta \mathbf{u} + \mathbf{f}(t), \quad (2.144)$$

na qual  $m$  é a massa da partícula coloidal,  $\mathbf{u}$  sua velocidade,  $t$  o tempo,  $\zeta = 6\pi\mu a$  o coeficiente de Stokes para o arrasto sobre uma esfera em escoamento puramente viscoso e  $\mathbf{f}(t)$  é a força browniana. É pertinente ainda definir  $\gamma = \zeta/m$ , que é o inverso do tempo de relaxação da partícula.

A equação diferencial (2.144) é uma equação diferencial estocástica, pois o forçamento  $\mathbf{f}(t)$  não é determinístico. A solução da eq. (2.144) é o cálculo da probabilidade de que a velocidade seja  $\mathbf{u}(t)$  no tempo  $t$ , dada a condição inicial  $\mathbf{u}(0)$  (MCQUARRIE, 2000). Admitem-se  $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$  e  $\mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0$  como condições iniciais desse problema de valor inicial. A equação (2.144) depende da natureza do forçamento  $\mathbf{f}(t)$ . Logo, faz-se necessário assumir hipóteses estatísticas acerca deste. O movimento browniano é uma caminhada ao acaso<sup>6</sup>, portanto um processo de média nula. Segue desta condição que  $\langle \mathbf{f}(t) \rangle = \mathbf{0}$ , expressão na qual  $\langle \cdot \rangle$  denota uma média do processo estocástico nas realizações.

Considera-se também que o processo seja estacionário nesta análise, logo as propriedades estatísticas do forçamento não dependem do tempo. Além disso, esse processo

---

<sup>6</sup> Do inglês *random walk*

estocástico é um ruído branco, tal que a autocorrelação do forçamento em tempos distintos é nula. Representando-a por  $\langle \mathbf{f}(t)\mathbf{f}(t') \rangle$  para dois tempos distintos  $t$  e  $t'$ , as hipóteses de ruído branco e estacionariedade são matematicamente representadas por

$$\langle \mathbf{f}(t)\mathbf{f}(t') \rangle = \mathbf{F}\delta(t - t'), \quad (2.145)$$

na qual  $\mathbf{F}$  é um tensor de segunda ordem que expressa a intensidade do ruído e independe do tempo.

A Eq. (2.144) pode ser resolvida pelo método do fator integrante que, considerando também uma condição de velocidade inicial nula, fornece

$$\mathbf{u}(t) = e^{-\gamma t} \int_0^t \mathbf{f}(t') \frac{e^{\gamma t'}}{m} dt'. \quad (2.146)$$

Tomando uma média nas realizações da Eq. (2.146), mostra-se que  $\langle \mathbf{u}(t) \rangle = \mathbf{0}$ . Denota-se a autocorrelação das velocidades de um processo estacionário  $\mathbf{u}(t)$  por  $\mathbf{C}(\tau)$ , tal que  $\mathbf{C}(\tau) = \langle \mathbf{u}(t)\mathbf{u}(t + \tau) \rangle$ . A escala de tempo em que observamos o movimento é muito superior ao tempo de correlação, tal que a descrição cinemática contínua da partícula relata um processo em quase equilíbrio termodinâmico. Nesse regime, determina-se a autocorrelação das velocidades a partir da Eq. (2.146) como

$$\mathbf{C}(\tau) = \frac{\mathbf{F}e^{-\gamma\tau}}{2\gamma m^2}, \quad (2.147)$$

em que  $\tau = |t'' - t'|$ . No caso em que  $\tau = 0$ ,

$$\mathbf{C}(0) = \frac{\mathbf{F}}{2\zeta m}. \quad (2.148)$$

A equação (2.148) é empregada para determinar uma expressão analítica para a intensidade do forçamento browniano, uma vez que a variância das velocidades pode ser alternativamente deduzida do princípio da equipartição da energia (RUSSEL; SAVILLE; SCHOWALTER, 1989) segundo

$$\langle \mathbf{u}(t)\mathbf{u}(t) \rangle = \frac{k_B T}{m} \mathbf{I}, \quad (2.149)$$

em que  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura. A comparação das equações (2.147) e (2.148) fornece o dito teorema da flutuação-dissipação (RUSSEL; SAVILLE; SCHOWALTER, 1989),

$$\mathbf{F} = 2k_B T \zeta \mathbf{I}, \quad (2.150)$$

o qual relaciona a intensidade do forçamento browniano a flutuações térmicas no fluido e ao arrasto permanente sobre a partícula, que dissipa energia.

Para o cálculo do tensor difusividade, usa-se a definição cinemática de velocidade,  $\mathbf{u} = d\mathbf{x}/dt$ , da qual se tem

$$\langle \mathbf{x}(t)\mathbf{x}(t) \rangle = \int_0^t dt' \int_0^{t'} \mathbf{C}(t'' - t') dt''. \quad (2.151)$$

Devido à paridade do tensor autocorrelação de velocidades, convém realizar a mudança de variáveis  $\tau = t'' - t'$  na integral (CUNHA, 2016), da qual resulta

$$\langle \mathbf{x}(t)\mathbf{x}(t) \rangle = 2t \int_0^t \left(1 - \frac{\tau}{t}\right) \mathbf{C}(\tau) d\tau. \quad (2.152)$$

Derivando a Eq. (2.152) e usando a Eq. (2.147),

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{x}(t)\mathbf{x}(t) \rangle = \frac{2k_B T}{\zeta} \mathbf{I}. \quad (2.153)$$

Pelo argumento de Einstein para o coeficiente de auto-difusão (RUSSEL; SAVILLE; SCHOWALTER, 1989), no entanto,

$$\langle \mathbf{x}(t)\mathbf{x}(t) \rangle = 2\mathbf{D}t. \quad (2.154)$$

Derivando a eq. (2.154) e comparando-a com (2.153), usando  $\zeta = 6\pi\mu a$ , proveniente do arrasto de Stokes, chega-se à expressão

$$\mathbf{D} = \frac{k_B T}{6\pi\mu a} \mathbf{I}. \quad (2.155)$$

Por isso o tensor  $\mathbf{D}$  dado pela eq. (2.155) é denominado tensor difusividade de Einstein-Stokes (ZWANZIG, 2001).

Alternativamente, pode-se expressar o tensor difusividade em termos da função autocorrelação de velocidades. Para isso, note que igualando as equações (2.152) e (2.154),

$$\mathbf{D} = \int_0^t \left(1 - \frac{\tau}{t}\right) \mathbf{C}(\tau) d\tau. \quad (2.156)$$

Assumindo que  $\mathbf{C}(\tau)$  decaia suficientemente rápido, o termo  $\tau/t$  pode ser desprezado no limite  $t \rightarrow \infty$ , de forma que

$$\mathbf{D} = \int_0^\infty \mathbf{C}(\tau) d\tau. \quad (2.157)$$

Em processos estacionários, o coeficiente de autocorrelação das velocidades  $\mathbf{c}(\tau)$  torna-se

$$\mathbf{c}(\tau) = \frac{\mathbf{C}(\tau)}{\sigma^2}, \quad (2.158)$$

sendo  $\sigma^2$  a variância da velocidade. Então, segue das equações (2.157) e (2.158) que

$$\mathbf{D} = \sigma^2 \int_0^\infty \mathbf{c}(\tau) d\tau. \quad (2.159)$$

Define-se o tempo de correlação  $\tau_c$  como

$$\tau_c = \int_0^\infty \text{tr}(\mathbf{c}(\tau)) d\tau, \quad (2.160)$$

sendo este uma medida do decaimento da autocorrelação em instantes posteriores, ao passo que a diferença de tempos se desvia do equilíbrio ( $\tau = 0$ ), cf. (MCQUARRIE, 2000). É importante salientar que, quando há anisotropia nas autocorrelações de velocidade, como no escopo deste trabalho, convém definir tempos de correlação diferentes para cada direção, conforme

$$\tau_{c,i} = \frac{D_{ii}}{\langle u_i^2 \rangle}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.161)$$

# 3 FLUTUAÇÕES DE VELOCIDADE

## 3.1 Análises de Escala

Estudos da velocidade de suspensões em sedimentação têm importantes aplicações, entre as quais podemos citar a sedimentação diferencial, processo empregado para separar misturas. Neste contexto, é fundamental determinar a velocidade média da suspensão, de forma a saber o tempo que o processo leva. Uma vez que as flutuações de velocidade estão associadas à mistura das partículas, também influenciam nessa duração.

Para suspensões diluídas, pode-se fazer uma análise de escala simplista da velocidade média de sedimentação, mediante a adição entre pares das interações hidrodinâmicas. Nesse regime, a aproximação de partículas pontuais é válida e pela solução fundamental de Stokes, Eq. (2.92), os distúrbios de velocidade têm ordem  $u' \sim Ua/r$ , em que  $r$  é a distância entre duas partículas e  $U$  a velocidade de Stokes de uma partícula isolada, de raio  $a$ . Tomando uma média volumétrica dos distúrbios de velocidade produzidos sobre uma partícula teste (BATCHELOR, 1972),

$$\langle u \rangle \sim \int_V \frac{Ua}{r} n \, dV. \quad (3.1)$$

em que  $\langle u \rangle$  é a velocidade média da suspensão,  $n$  seu número de densidade e  $V$  é o volume do domínio de integração. Se tal região tem um comprimento característico  $R$ , então  $V \sim R^3$ . Com  $n \sim \phi/a^3$ , tem-se

$$\langle u \rangle \sim U\phi \left( \frac{R}{a} \right)^2. \quad (3.2)$$

Esse resultado sugere que a velocidade média não seja uma propriedade média da suspensão, pois dependeria da extensão do volume por ela ocupado. No entanto, não há concordância entre tal predição e a relação empírica de Richardson-Zaki,  $\langle u \rangle = U(1 - \phi)^k$ , amplamente compatível com observações experimentais, em que  $k$  é uma constante experimental. Coube a (BATCHELOR, 1972) solucionar tal dilema através de uma renormalização da integral, separando-a em duas parcelas: a primeira divergente, referente ao escoamento reverso provocado pelo movimento das partículas, e a outra convergente,

determinando o valor

$$\langle u \rangle = U(1 - 6,55\phi) \quad (3.3)$$

para a velocidade média da suspensão, para partículas iguais em baixo número de Reynolds, na ausência de interações hidrodinâmicas.

### 3.1.1 Paradoxo da Divergência

As flutuações de velocidade foram investigadas mediante uma análise de escala por [Hinch \(1988\)](#) e [Cunha \(1995\)](#). Considerando uma distribuição randômica e independente de  $N$  partículas, haveria um desvio padrão  $\sqrt{N}$  nesse número, segundo o teorema do limite central. Portanto, imaginando que o domínio fosse dividido em duas partes iguais, como ilustra a Fig. (11), o peso extra em um dos lados induziria correntes convectivas, que seriam equilibradas pelo arrasto viscoso sobre as partículas. Assim, [Hinch \(1988\)](#)

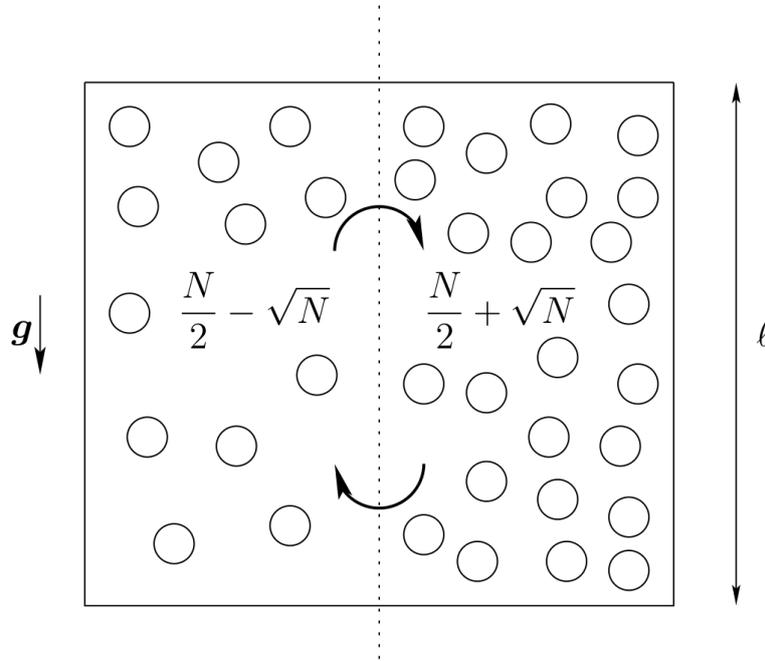


Figura 11 – Corrente convectiva induzida pelo peso extra em um dos lados do reservatório. Adaptado de ([HINCH, 1988](#); [ABADE, 2005](#)).

considerou um aglomerado de partículas de raio  $l$  em que flutuações de peso, geradas por variações estatísticas no número de partículas, são balanceadas por um arrasto de Stokes sobre as flutuações de velocidade em todo o domínio, i.e.,  $6\pi\mu u'l \sim \Delta\rho v_p g\sqrt{N}$ , em que  $v_p$  é o volume de uma partícula. Segundo tal raciocínio, notando que  $\Delta\rho v_p g = 6\pi\mu Ua$ ,  $V_p = \phi V$  e  $N = V_p/v_p \sim \phi l^3/a^3$ , no qual  $V_p$  é o volume total de partículas, obteve-se

$$u' \sim U\sqrt{\frac{\phi l}{a}}. \quad (3.4)$$

Essa análise prevê uma divergência ainda mais severa para a difusividade, visto que esta tem escala  $D \sim u'l$ , resultando em

$$D \sim aU\phi^{1/2} \left(\frac{l}{a}\right)^{3/2}. \quad (3.5)$$

Tais argumentos de escala, embora corroborados por simulações numéricas (KOCH, 1994; LADD, 1997; CUNHA et al., 2002; CUNHA; SOUSA; HINCH, 2002), não concordaram com observações experimentais (NICOLAI; GUAZZELLI, 1995). Esta discordância foi denominada *paradoxo da divergência*. Desde então, vários trabalhos se propuseram a determinar os mecanismos físicos por trás dessa incoerência, visando à compatibilização de experimentos, teorias e simulações numéricas. As próximas seções deste capítulo expõem alguns mecanismos físicos que examinaremos no presente trabalho, apontados na literatura como possíveis causas da discordância que se tem observado.

O objetivo precípua deste estudo é analisar o efeito da inércia das partículas sobre a inibição das flutuações de velocidade. Neste sentido, a estratificação é um mecanismo auxiliar para a obtenção de uma simulação numérica com custo computacional viável, pois colabora para a convergência das flutuações referidas sem elevar o número de partículas simulado.

### 3.1.2 Inércia das Partículas

No contexto das dispersões de pó em gás, a massa específica das partículas pode ser milhares de vezes superior à do gás (SAFFMAN, 1962). Logo, faz-se necessário incorporar a inércia das partículas à modelagem do problema e analisar seu efeito sobre a dinâmica da suspensão. Neste sentido, convém definir uma massa específica efetiva  $\rho_{eff} = \phi\rho_s$  e uma viscosidade efetiva  $\mu_{eff} = \mu$ , pois o termo  $5\mu\phi/2$  de (EINSTEIN, 1956) é desprezível em suspensões diluídas cujo fluido base é um gás.

O tempo de relaxação das partículas,  $\tau_p = m/6\pi\mu a$ , quantifica a inércia das tais, pois é uma medida da rapidez com a qual respondem a distúrbios de velocidade no fluido. Usa-se o tempo de sedimentação,  $\tau_s = a/U$ , como escala para o escoamento. A razão entre as duas quantidades referidas é definida como o número de Stokes,

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_s} = \frac{mU}{6\pi\mu a^2}, \quad (3.6)$$

que por consequência também avalia a inércia das partículas. Já  $\tau_\nu = a^2/\nu$  é o tempo que a vorticidade leva para ser difundida por um comprimento  $a$ . Como o número de Reynolds é

$$Re = \frac{\tau_\nu}{\tau_s} = \frac{Ua}{\nu}, \quad (3.7)$$

tem-se que  $St/Re \sim \rho_s/\rho$ . Portanto, ainda que consideremos o limite assintótico  $Re \ll 1$ , pode-se ter  $St = O(1)$  e deve-se considerar a inércia das partículas.

Segue dos argumentos apresentados que a inércia das partículas,  $\phi\rho_s u'^2 l^2$ , pode equilibrar as flutuações de peso líquido induzidas por variações estatísticas no número de densidade,  $mg\sqrt{nl^3}$ , sendo  $l$  um comprimento arbitrário. Balanceando ambos os mecanismos, tem-se (HINCH, 1988; CUNHA, 1995; EVANGELISTA; CUNHA, 2017)

$$u' \sim \frac{U}{\sqrt{St}} \sqrt[4]{\frac{a}{l\phi}}. \quad (3.8)$$

Nota-se que as Eqs. (3.4) e (3.8) definem um comprimento crítico<sup>1</sup>  $l_c$  para o qual efeitos viscosos e de inércia das partículas se equilibram, qual seja

$$l_c = aSt^{-2/3}\phi^{-1}. \quad (3.9)$$

Para tal comprimento, ilustrado pela Fig. (12), as flutuações de velocidade escalam com

$$u' \sim USt^{-1/3} \quad (3.10)$$

e sua variância conforme

$$\langle u'^2 \rangle \sim U^2 St^{-2/3}. \quad (3.11)$$

Impende salientar que a variância na Eq. (3.11) não depende das dimensões do domínio físico, i.e., é uma propriedade intensiva. Ademais, a inércia das partículas é imprescindível para isso, uma vez que o comprimento crítico  $l_c \rightarrow \infty$  à medida que  $St \rightarrow 0$ . A Fig. (12) ilustra a variação das flutuações de velocidade com o comprimento característico do domínio, obtida das Eqs. (3.4) e (3.10).

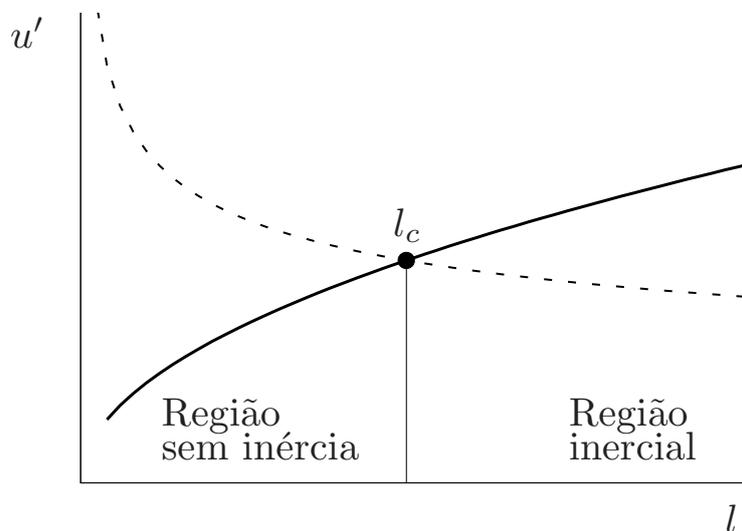


Figura 12 – Dependência das flutuações de velocidade, quando balanceadas por forças viscosas (linha tracejada) ou inerciais (linha contínua), com o comprimento característico do domínio. Adaptado de Cunha (1997).

<sup>1</sup> Referido em inglês por *screening length*.

### 3.1.3 Estratificação

O fenômeno de estratificação é a dependência do número de densidade das partículas com a direção vertical (da força gravitacional). A primeira sugestão de que este mecanismo estivesse atrelado à convergência das flutuações de velocidade, observada em experimentos, foi dada por Blawdziewicz em 1995, em comunicação privada com Hinch (GUAZZELLI; HINCH, 2011). A análise de escala apresentada nesta seção, extraída de (GUAZZELLI; HINCH, 2011), tem por finalidade mostrar o efeito da estratificação sobre as flutuações, justificando seu uso no código numérico desenvolvido. Não há interesse em verificar estas análises de escala no código numérico. Deseja-se exclusivamente compatibilizar a simulação com observações experimentais e verificar a convergência das flutuações de velocidade para domínios numéricos de dimensões menores. Deste modo, reduz-se o custo computacional das simulações.

A estratificação pode ser atribuída a diversos fatores, entre os quais a dispersão da frente de sedimentação, que é a interface entre a suspensão e o fluido sem partículas. A mesma influencia as flutuações de velocidade apenas quando a variação no número de partículas que provoca é da ordem das induzidas por flutuações estatísticas. Para um domínio de comprimento característico  $L$ , tal condição equivale a  $L\partial(nL^3)/\partial z \sim \sqrt{nL^3}$ . Em termos da fração volumétrica,

$$L \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\phi L^3}{a^3} \right) \sim \sqrt{\frac{\phi L^3}{a^3}}. \quad (3.12)$$

Define-se o fator de intensidade da estratificação como

$$\lambda = \frac{1}{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial z}, \quad (3.13)$$

de modo que a intensidade crítica  $\lambda_c$ , correspondente à condição estabelecida pela Eq. (3.12), é

$$\lambda_c = \left( \frac{a^3}{\phi L^5} \right)^{1/2}. \quad (3.14)$$

Analogamente, para uma estratificação de intensidade superior a esta, aglomerados de partículas cuja estratificação equilibra flutuações estatísticas no número de densidade limitam-se a um comprimento  $l$ ,

$$\lambda = \left( \frac{a^3}{\phi l^5} \right)^{1/2}. \quad (3.15)$$

Segue das Eqs. (3.14) e (3.15) que os maiores aglomerados cujas flutuações estatísticas no número de densidade têm mesma ordem das induzidas por estratificação possuem comprimento dado por

$$l = L \left( \frac{\lambda_c}{\lambda} \right)^{2/5}. \quad (3.16)$$

Substituindo as Eqs. (3.16) e (3.14) na Eq. (3.4), obtém-se uma flutuação de velocidades independente do tamanho do domínio, qual seja

$$u' \sim U \left( \frac{\phi^2}{a\lambda} \right)^{1/5}. \quad (3.17)$$

De semelhante modo, para a difusividade,

$$D \sim Ua \left( \frac{\phi}{a^3\lambda^3} \right)^{1/5}. \quad (3.18)$$

De fato, nota-se que ambas as quantidades calculadas pelas Eqs. (3.17) e (3.18) são intensivas, em concordância com as observações experimentais mencionadas.

## 3.2 Pressão de Partículas

Desejamos analisar a troca de quantidade de movimento em uma superfície de modo a identificar as forças decorrentes dessa interação e definir a partir disso uma pressão de partículas, estendendo tal conceito, por analogia, à modelagem bifásica contínua que é efetuada na seção (3.3). A abordagem desta seção baseia-se naquela apresentada por (CHAPMAN; COWLING, 1970).

O número de partículas contido em um elemento de volume,  $n(\mathbf{x}, t) dV$ , pode ser representado alternativamente através da distribuição das velocidades  $\mathbf{v}$  dessas partículas por  $dV \int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}$ , em que  $f$  é um número de densidade no espaço das velocidades. Deste modo, a média de uma propriedade escalar, vetorial ou tensorial  $\langle G(\mathbf{x}, t) \rangle$  nas partículas que ocupam o volume é dada a partir de

$$n\langle G(\mathbf{x}, t) \rangle = \int G(\mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}. \quad (3.19)$$

Considere uma parede estacionária  $dS$ , ilustrada pela Fig. (13), contra a qual colidem todas as partículas contidas no volume  $dV = (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) dS dt$ . Neste caso, a quantidade destas que impacta a superfície é exatamente o número de partículas contido no volume,

$$dS dt \int_+ (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \quad (3.20)$$

em que o símbolo  $+$  denota o movimento das moléculas na direção do vetor normal à superfície, abstraido como exterior ao domínio. Analogamente, o número de partículas rebatidas pela parede é

$$dS dt \int_- (\mathbf{v} \cdot -\hat{\mathbf{n}}) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}. \quad (3.21)$$

Admite-se que não há condensação ou evaporação sobre a superfície, tal que o número de partículas que incidem sobre esta é igual ao das que são rebatidas. Subtraindo a expressão (3.21) da (3.20),

$$dS dt \left[ \int_+ (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} - \int_- (\mathbf{v} \cdot -\hat{\mathbf{n}}) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} \right] = 0, \quad (3.22)$$

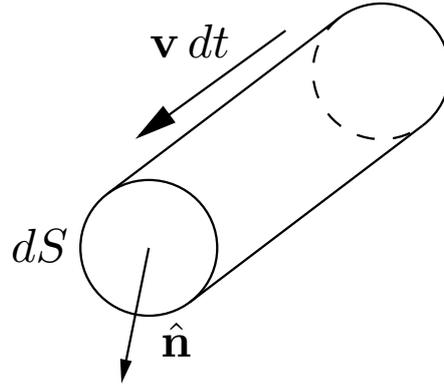


Figura 13 – Volume ocupado pelas partículas que colidem com a superfície. Adaptado de (CHAPMAN; COWLING, 1970).

portanto segue da Eq. (3.19) que

$$\langle \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} \rangle = 0. \quad (3.23)$$

O momento linear das moléculas antes das colisões é semelhantemente obtido como

$$dS dt \int_+ m \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}. \quad (3.24)$$

Após as colisões,

$$dS dt \int_- m \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot -\hat{\mathbf{n}}) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}. \quad (3.25)$$

Por outro lado, a variação do momento linear sobre a superfície é igual ao impulso sobre esta, devido à força de superfície, dado por

$$dS dt \mathbf{t}(\mathbf{x}, t). \quad (3.26)$$

Deste modo, subtraindo a Eq. (3.25) de (3.24) e igualando o resultado a (3.26), tem-se

$$dS dt \mathbf{t}(\mathbf{x}, t) = dS dt \int m \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}. \quad (3.27)$$

Usando a Eq. (3.19) e a identidade  $\rho = mn$ , tem-se

$$\mathbf{t} = \rho \langle (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \mathbf{v} \rangle. \quad (3.28)$$

Expressando o resultado em termos das flutuações de velocidade,  $\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \langle \mathbf{v} \rangle$ , e empregando a Eq. (3.23), segue que

$$\mathbf{t} = \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.29)$$

em que

$$\boldsymbol{\sigma} = \rho \langle \mathbf{v}' \mathbf{v}' \rangle \quad (3.30)$$

é um tensor de flutuações hidrodinâmicas, análogo ao tensor de Reynolds, que relaciona a tensão às flutuações de velocidade. Então, podem-se definir uma *pressão de partículas* associada aos termos diagonais deste tensor, e viscosidades de partículas atreladas aos termos não diagonais. Neste trabalho, nos ateremos àquela. Note ainda a analogia entre a Eqs. (3.29) e (2.36).

De fato, pode-se definir a pressão de partículas  $p_s$  para uma dispersão de pó em gás, em que  $\rho_s \gg \rho$ , como (ABADE; CUNHA, 2007; CUNHA, 1997; BATCHELOR, 1988)

$$p_s = \frac{\phi \rho_s}{3} \langle \mathbf{v}' \cdot \mathbf{v}' \rangle. \quad (3.31)$$

Importa ainda adimensionalizar a equação (3.31) e fazer uma análise de escala com base na seção (3.1.2), a fim de identificar a dependência funcional que se espera obter no código numérico. Para tal, dividem-se ambos os membros da equação referida por  $\mu U/a$  e emprega-se a Eq. (3.10), resultando em

$$\tilde{p}_s \sim \phi St^{1/3}, \quad (3.32)$$

sendo  $\tilde{p}_s = p_s/(\mu U/a)$ .

Semelhantemente, interessa definir viscosidades de partículas  $\mu_{s,ij}$  como

$$\mu_{s,ij} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} = \phi \rho_s \langle v'_i v'_j \rangle, \quad i \neq j, \quad (3.33)$$

pois compararemos a escala dos termos diagonais aos não diagonais na seção (8.2), mostrando que estes têm módulo menor. Em decorrência de tal fato, a viscosidade de partículas atenua apenas as flutuações de velocidade com baixo comprimento de onda. Adimensionalizando a Eq. (3.33), com  $\tilde{\mu}_{s,ij} = \mu_{s,ij}/\mu$ ,

$$\tilde{\mu}_{s,ij} = \frac{\phi St \langle \tilde{v}'_i \tilde{v}'_j \rangle}{\frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial \tilde{x}_i}}, \quad i \neq j, \quad (3.34)$$

sendo a  $i$ -ésima componente do vetor  $\mathbf{v}$  denotada por  $v_i$ .

### 3.3 Modelo Contínuo para Flutuações

Nesta seção, propõe-se um modelo contínuo simples, com equações constitutivas de fechamento bem postas e confiáveis para suspensões gás-sólido diluídas, baseado na abordagem de escoamentos bifásicos particulados, cf. (IRVING; KIRKWOOD, 1950). Neste contexto, a dinâmica das flutuações de velocidade na suspensão é representada em uma escala de comprimento muito maior que as microestruturais, como a separação média entre partículas  $\sim a\phi^{-1/3}$ .

#### 3.3.1 Fase Gasosa

Admite-se que a difusão de momento linear seja desprezível na fase gasosa, de massa específica  $\rho$  e viscosidade dinâmica  $\mu$ . Portanto, as equações governantes desta fase são

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon \mathbf{u}) = 0 \quad (3.35)$$

e

$$\rho\epsilon \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \rho\epsilon \mathbf{g} + \mathbf{F}_{sg}, \quad (3.36)$$

supondo  $\rho$  constante, nas quais  $\epsilon = 1 - \phi$  é a fração volumétrica de vazios,  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  é o campo euleriano de velocidades do gás,  $p$  a pressão mecânica e  $\mathbf{F}_{sg}$  é um arrasto entre as fases, proposto neste trabalho como um arrasto de Stokes,  $\mathbf{F}_{sg} = 6\pi\mu an(\mathbf{x}, t)(\mathbf{v} - \mathbf{u})$ , em consonância com demais trabalhos em suspensões gás-sólido, e.g. (SAFFMAN, 1962).

Salienta-se também que a força exercida pela fase gasosa sobre a particulada é obtida através da terceira lei de Newton na ausência de tensão interfacial entre as fases como

$$\mathbf{F}_{gs} = -\mathbf{F}_{sg} = 6\pi\mu an(\mathbf{x}, t)(\mathbf{u} - \mathbf{v}). \quad (3.37)$$

Note que podemos extrair uma relação para o gradiente de pressão em termos de  $\mathbf{F}_{sg}$ , visto que uma dispersão de pó em gás encontra-se no limite assintótico  $\rho_s \gg \rho$ , no qual a inércia do fluido é desprezada. Deste modo, segue da Eq. (3.36) que

$$\nabla p = 6\pi\mu an(\mathbf{x}, t)(\mathbf{v} - \mathbf{u}) + \rho\epsilon \mathbf{g}. \quad (3.38)$$

Uma suspensão de partículas pontuais sedimentando em baixo número de Reynolds tem velocidade média nula, devido à conservação da massa da mistura em qualquer seção do reservatório (BATCHELOR, 1972). Deste modo, tem-se

$$\epsilon \mathbf{u} + \phi \mathbf{v} = \mathbf{0}. \quad (3.39)$$

Por definição,  $U = 2a^2\Delta\rho g/9\mu$  e  $\phi = 4\pi a^3 n/3$ . Como estamos no regime assintótico de suspensões gás-sólido,  $\Delta\rho \sim \rho_s$ , portanto as Eqs. (3.38) e (3.39) implicam

$$\nabla p = \frac{\phi\rho_s g \mathbf{v}}{U(1-\phi)} + \rho\epsilon \mathbf{g}. \quad (3.40)$$

Uma vez que o arrasto entre fases escala com  $\rho_s$  e o peso da fase gasosa com  $\rho$ , este termo é desprezível, resultando em

$$\nabla p = \frac{\phi\rho_s g \mathbf{v}}{U(1-\phi)}, \quad (3.41)$$

sendo esta a distribuição de pressão no fluido.

### 3.3.2 Fase Particulada

Semelhantemente, a fase particulada é admitida como um meio contínuo, sobre o qual atuam forças de superfície, campo e arrasto entre fases, com estratificação linear de concentração na direção vertical, segundo

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}) = 0 \quad (3.42)$$

e

$$\phi\rho_s \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \mathbf{F}_{gs} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_s + \phi(1 - \lambda z)\rho_s \mathbf{g}, \quad (3.43)$$

em que  $\rho_s$  é constante e  $\boldsymbol{\sigma}_s$  é um tensor de tensões associado à fase particulada. Foi utilizada a aproximação de Boussinesq para a estratificação, cf. (TRITTON, 2012; CHANDRASEKHAR, 2013), aplicando a correção da concentração apenas para o termo gravitacional, pois seu efeito tem ordem maior que os demais.

Emprega-se um modelo newtoniano stokesiano para o tensor das tensões,

$$\boldsymbol{\sigma}_s = -p_s(\phi) \mathbf{I} + \mu f_s(\phi) \left[ \nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T - \frac{2(\nabla \cdot \mathbf{v})}{3} \mathbf{I} \right], \quad (3.44)$$

por simplicidade, no qual  $f_s(\phi)$  indica a dependência da viscosidade com a fração volumétrica da suspensão, sendo  $\mu f_s(\phi)$  uma *viscosidade de partículas*. Para o regime de Einstein, de suspensões infinitamente diluídas,  $f_s(\phi) = 5\phi/2$ . No entanto, este estudo se volta à análise de  $p_s$ , a *pressão de partículas*, que é abordada em maiores detalhes na seção (3.2).

Aplicando o operador divergente à equação (3.44), substituindo-a em (3.43) e utilizando (3.41),

$$\begin{aligned} \phi \rho_s \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = & -\nabla p_s + \mu f_s(\phi) \left[ \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{\nabla(\nabla \cdot \mathbf{v})}{3} \right] - \\ & \phi \rho_s g \left[ \frac{\mathbf{v}}{U(1-\phi)} + \hat{\mathbf{e}}_3 \right] + \lambda \phi \rho_s g z \hat{\mathbf{e}}_3. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Percebe-se que a Eq. (3.35) acaba sendo redundante. De fato, esta deriva de (3.42) e (3.39). Logo, a dinâmica da suspensão é descrita por um sistema de duas equações - (3.42) e (3.45) - e duas incógnitas -  $\phi$  e  $\mathbf{v}$ . As equações do modelo contínuo estão sumarizadas na Tab. (1).

### 3.3.3 Adimensionalização das Equações Governantes

Procede-se agora à adimensionalização das equações (3.42) e (3.45), visando à identificação dos parâmetros que governam a dinâmica deste modelo. Para tal, consideramos como escalas características do problema: a velocidade de Stokes,  $U$ , o tempo de sedimentação,  $a/U$ , o raio de uma partícula,  $a$ , e uma pressão  $\mu U/a$ . Deste modo, as variáveis adimensionais, denotadas por tís, são expressas por

$$\tilde{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{v}}{U}, \quad \tilde{t} = \frac{tU}{a}, \quad \tilde{p}_s = \frac{p_s a}{\mu U}, \quad \tilde{z} = \frac{z}{a} \quad \text{e} \quad \tilde{\nabla} = a \nabla. \quad (3.46)$$

Então, segue da Eq. (3.42) que

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\nabla} \cdot (\phi \tilde{\mathbf{v}}) = 0. \quad (3.47)$$

Similarmente, para a Eq. (3.45),

$$\begin{aligned} \frac{\rho_s U^2}{a} \phi \left( \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{v}} \right) = & -\frac{\mu U}{a^2} \tilde{\nabla} \tilde{p}_s + \frac{\mu U}{a^2} f_s(\phi) \left[ \tilde{\nabla}^2 \tilde{\mathbf{v}} + \frac{\tilde{\nabla}(\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{v}})}{3} \right] - \\ & \phi \rho_s g \left[ \frac{\tilde{\mathbf{v}}}{1-\phi} + \hat{\mathbf{e}}_3 \right] + \lambda \phi \rho_s g a \tilde{z} \hat{\mathbf{e}}_3. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Tabela 1 – Sumário das equações governantes do modelo contínuo bifásico para a suspensão gás-sólido.

Equação	Número da equação no texto
$\nabla p = \frac{\phi \rho_s g \mathbf{v}}{U(1 - \phi)}$	3.41
$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}) = 0$	3.42
$\begin{aligned} \phi \rho_s \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \\ -\nabla p_s + \mu f_s(\phi) \left[ \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{\nabla(\nabla \cdot \mathbf{v})}{3} \right] - \\ \phi \rho_s g \left[ \frac{\mathbf{v}}{U(1 - \phi)} + \hat{\mathbf{e}}_3 \right] + \lambda \phi \rho_s g z \hat{\mathbf{e}}_3 \end{aligned}$	3.45

Dividindo ambos os membros da Eq. (3.48) por  $\mu U/a^2$ , obtém-se

$$St \phi \left( \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{v}} \right) = -\tilde{\nabla} \tilde{p}_s + f_s(\phi) \left[ \tilde{\nabla}^2 \tilde{\mathbf{v}} + \frac{\tilde{\nabla}(\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{v}})}{3} \right] - N_s \phi \left[ \frac{\tilde{\mathbf{v}}}{1 - \phi} + \hat{\mathbf{e}}_3 \right] + Ra \phi \tilde{z} \hat{\mathbf{e}}_3, \quad (3.49)$$

sendo

$$St = \frac{\rho_s U a}{\mu} \quad (3.50)$$

o número de Stokes, i.e., a razão entre a inércia de uma partícula e as forças viscosas que a acometem, enquanto

$$N_s = \frac{\rho_s g a^2}{\mu U} \quad (3.51)$$

é o número de sedimentação, definido como o quociente das forças gravitacionais e viscosas sobre uma partícula e

$$Ra = \frac{\rho_s g \lambda a^3}{\mu U} \quad (3.52)$$

é o número de Rayleigh, que mensura a importância relativa da flutuação de peso ocasionada pela estratificação, quando comparada às forças viscosas. Da mesma maneira, pode-se adimensionalizar a Eq. (3.41), obtendo

$$\tilde{\nabla} \tilde{p} = N_s \frac{\phi \tilde{\mathbf{v}}}{1 - \phi}. \quad (3.53)$$

A tabela (2) resume as equações adimensionais governantes do modelo contínuo. A partir desta seção, trabalharemos majoritariamente com as equações adimensionalizadas,

Tabela 2 – Sumário das equações governantes adimensionais do modelo contínuo bifásico para a suspensão gás-sólido.

Equação	Número da equação no texto
$\tilde{\nabla} \tilde{p} = N_s \frac{\phi \tilde{\mathbf{v}}}{1 - \phi}$	3.53
$\frac{\partial \phi}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\nabla} \cdot (\phi \tilde{\mathbf{v}}) = 0$	3.47
$St \phi \left( \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{v}} \right) =$ $-\tilde{\nabla} \tilde{p}_s + f_s(\phi) \left[ \tilde{\nabla}^2 \tilde{\mathbf{v}} + \frac{\tilde{\nabla}(\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{v}})}{3} \right] -$ $N_s \phi \left[ \frac{\tilde{\mathbf{v}}}{1 - \phi} + \hat{\mathbf{e}}_3 \right] + Ra \phi z \hat{\mathbf{e}}_3$	3.49

portanto omitiremos os tís para suavizar a notação, sem o risco de incorrer em inconsistência. Caso haja necessidade de empregar variáveis dimensionais e adimensionais num mesmo contexto, retomar-se-á naquele trecho à convenção ora estabelecida, indicando-o explicitamente no texto.

# 4 ANÁLISE DE ESTABILIDADE LINEAR

A fim de estudar instabilidades como a propagação de ondas de concentração em leitos fluidizados, deve-se obter a solução das equações da continuidade e do momento linear para a fase particulada, respectivamente (3.47) e (3.49). Neste capítulo empregaremos uma análise de estabilidade linear para a solução aproximada das equações referidas, de modo a observar o estágio inicial da evolução temporal de tais ondas.

Neste contexto, instabilidades são compreendidas como desvios de soluções estacionárias das equações governantes do sistema devidos a pequenas perturbações, às quais todos os sistemas estão naturalmente sujeitos. Portanto, deseja-se caracterizar a reação do sistema a pequenos distúrbios de quaisquer modos. Quando as amplitudes de perturbações arbitrárias são atenuadas, diz-se que o sistema é estável. Para amplitudes crescentes de distúrbios, que desviam o sistema de seu estado de equilíbrio, o sistema é dito instável. Os estados de transição entre a estabilidade e a instabilidade são ditos estados marginais ou neutros, e são caracterizados por uma relação entre os parâmetros físicos,  $X_1, X_2, \dots, X_j$ , do sistema,

$$\Sigma(X_1, \dots, X_j) = 0, \quad (4.1)$$

que é o principal objetivo de uma análise de estabilidade linear (CHANDRASEKHAR, 2013).

De modo geral, o procedimento de uma análise de estabilidade linear consiste na aplicação de perturbações infinitesimais a um estado estacionário do sistema e sua consequente substituição nas equações governantes do movimento. Assim, apenas termos de ordem linear nas perturbações são retidos e a equação é linearizada. Visto que tal procedimento resulta em equações lineares, a reação do sistema a um distúrbio arbitrário é completamente conhecida a partir de sua resposta aos modos normais que o compõem. Ressalta-se que a condição neutra de estabilidade, Eq. (4.1), ocorre para um determinado número de onda crítico,  $k_c$ , que se manifesta no estágio inicial do surgimento de instabilidades.

Batchelor (1988) desenvolveu um trabalho pioneiro ao modelar as equações governantes para um leito fluidizado em número de Reynolds arbitrário, identificando os fatores necessários ao fechamento dessas equações. Em tal artigo, Batchelor alega que

um dos principais parâmetros desconhecidos à época eram as flutuações de velocidade. Batchelor também desenvolveu uma análise de estabilidade linear a fim de identificar as condições necessárias à estabilidade do sistema para um caso mais amplo que o considerado neste trabalho. Ainda no contexto da modelagem bifásica de leitos fluidizados, [Duru et al. \(2002\)](#) realizaram uma análise de estabilidade linear para as equações de [Anderson e Jackson \(1967\)](#). Nessa abordagem, os autores utilizaram o método das características para obter uma equação diferencial ordinária para a forma das ondas de concentração, que também foi medida em experimentos. Equacionando tal forma a partir de medições experimentais e substituindo-a na equação diferencial obtida, os autores chegaram a expressões para a viscosidade de partículas e a pressão de partículas.

Cá, desenvolve-se uma análise de estabilidade linear restrita a uma suspensão em baixo número de Reynolds, logo efeitos como a massa virtual das partículas podem ser desprezados. A principal novidade da análise feita neste capítulo é a consideração de estratificação na fração volumétrica de partículas, que como argumentado por [Blawdziewicz \(GUAZZELLI; HINCH, 2011\)](#), poderia estar associada à convergência das flutuações de velocidade. Então, investiga-se o efeito da estratificação de concentração, como descrita na §3.3.2, sobre a estabilidade do sistema. Tendo em vista a similaridade entre o problema analisado neste capítulo e a instabilidade de Rayleigh-Bénard ([CHANDRASEKHAR, 2013](#)), também interessa o estudo de modos normais à direção da estratificação, que pode ser objeto de trabalhos futuros. Devido à importância que as flutuações de velocidade tomam nesse cenário, as tais são examinadas no capítulo 8 deste trabalho por uma metodologia numérica.

## 4.1 Forma Unidimensional Transiente das Equações

Como o escopo desta análise é a evolução de instabilidades primárias, de natureza unidimensional, consideraremos a forma das equações governantes sob essa restrição. Para tal, faz-se

$$\mathbf{v} = v(z, t)\hat{\mathbf{e}}_3 \quad \text{e} \quad \phi = \phi(z, t), \quad (4.2)$$

resultando das Eqs. (3.47) e (3.49) que

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + v \frac{\partial \phi}{\partial z} + \phi \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (4.3)$$

e

$$St \phi \left( \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial z} \right) = - \frac{\partial p_s}{\partial z} + \frac{4f_s(\phi)}{3} \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} - N_s \phi \left( \frac{v}{1-\phi} + 1 \right) + Ra \phi z. \quad (4.4)$$

## 4.2 Linearização das Equações

Para a linearização das equações, as variáveis independentes são decompostas em médias e flutuações segundo

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad \text{e} \quad v = \bar{v} + v'. \quad (4.5)$$

Importa ressaltar que expressões numéricas dos resultados de estabilidade determinados neste trabalho requerem a adoção de equações constitutivas para as propriedades médias desconhecidas. Entre as tais, adotam-se o modelo de [Harris e Crighton \(1994\)](#) para a pressão de partículas,

$$p_s = \frac{\bar{\phi}}{\phi_{mp} - \bar{\phi}}, \quad (4.6)$$

e a consagrada equação empírica de [Richardson e Zaki \(1954\)](#) para a velocidade média das partículas,

$$\bar{v} = (1 - \bar{\phi})^n, \quad (4.7)$$

sendo  $\phi_{mp}$  a fração volumétrica de empacotamento máximo das partículas, assumida como  $\phi_{mp} = 0,65$ . O expoente é assumido como  $n = 5,1$ , para partículas esféricas, cf. ([ABADE, 2005](#)). Ambas as equações (4.6) e (4.7) já estão expressas em forma adimensional.

Ao substituir a equação (4.5) em (4.3) e (4.4), retêm-se apenas os termos de primeira ordem nos distúrbios, i.e., desprezam-se parcelas que não contenham flutuações, ou cuja ordem nas flutuações é maior ou igual a 2. Nota-se ainda que derivadas temporais ou espaciais de médias são nulas. Ademais, termos contendo funções das variáveis independentes são expandidos em séries de Maclaurin e truncados na primeira ordem. Procedendo deste modo, a equação (4.3) reduz-se a

$$\frac{\partial \phi'}{\partial t} + \bar{v} \frac{\partial \phi'}{\partial z} + \bar{\phi} \frac{\partial v'}{\partial z} = 0. \quad (4.8)$$

Semelhantemente, para a equação (4.4), considerando a aproximação assintótica

$$\frac{\phi}{1 - \phi} \sim \frac{\bar{\phi}}{1 - \bar{\phi}} + \frac{\phi'}{(1 - \bar{\phi})^2}, \quad (4.9)$$

tem-se

$$St \bar{\phi} \left( \frac{\partial v'}{\partial t} + \bar{v} \frac{\partial v'}{\partial z} \right) = -\alpha \frac{\partial \phi'}{\partial z} + \frac{4f_s(\bar{\phi})}{3} \frac{\partial^2 v'}{\partial z^2} - N_s \left\{ \left[ 1 + \frac{\bar{v}}{(1 - \bar{\phi})^2} \right] \phi' + \frac{\bar{\phi}}{1 - \bar{\phi}} v' \right\}, \quad (4.10)$$

em que definimos

$$\alpha = \left. \frac{dp_s}{d\phi} \right|_{\bar{\phi}} \quad (4.11)$$

para suavizar a notação. Com a mesma finalidade, omitiremos a dependência de  $f_s$  com  $\bar{\phi}$  doravante. Nota-se que o termo de estratificação apenas produz flutuações de segunda ordem, sendo desprezível.

### 4.3 Distúrbios de Ondas Planas

A análise de estabilidade linear consiste na imposição de uma solução de ondas planas para os distúrbios das equações (4.8) e (4.10), i.e.,

$$\phi' = \phi_a \exp(st + ikz) \quad \text{e} \quad v' = v_a \exp(st + ikz), \quad (4.12)$$

em que  $s$  é a frequência e  $k$  o número de onda dos distúrbios. A aplicação de (4.12) em (4.8) e (4.10) resulta em

$$(s + ik\bar{v})\phi_a + ik\bar{\phi}v_a = 0 \quad (4.13)$$

e

$$\left\{ N_s \left[ 1 + \frac{\bar{v}}{(1 - \bar{\phi})^2} \right] + ik\alpha \right\} \phi_a + \left[ St \bar{\phi}(s + ik\bar{v}) + \frac{4f_s k^2}{3} + \frac{N_s \bar{\phi}}{1 - \bar{\phi}} \right] v_a = 0. \quad (4.14)$$

O sistema de equações (4.13) e (4.14) equivale a  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{\Omega} = \mathbf{0}$ , em que

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} s + ik\bar{v} & ik\bar{\phi} \\ N_s \left[ 1 + \frac{\bar{v}}{(1 - \bar{\phi})^2} \right] + ik\alpha & St \bar{\phi}(s + ik\bar{v}) + \frac{4f_s(\bar{\phi})}{3} k^2 + \frac{N_s \bar{\phi}}{1 - \bar{\phi}} \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

e

$$\mathbf{\Omega} = \begin{bmatrix} \phi_a \\ v_a \end{bmatrix}. \quad (4.16)$$

Para que o sistema *não admita apenas solução trivial*, deve-se ter

$$\det(\mathbf{A}) = 0, \quad (4.17)$$

de tal modo que

$$(s + ik\bar{v})^2 + \left[ \frac{N_s}{St(1 - \bar{\phi})} + \frac{4f_s k^2}{3St\bar{\phi}} \right] (s + ik\bar{v}) + \frac{\alpha k^2}{St} - \frac{iN_s k}{St} \left[ 1 + \frac{\bar{v}}{(1 - \bar{\phi})^2} \right] = 0. \quad (4.18)$$

Definem-se os parâmetros

$$B = \frac{1}{St} \left( \frac{N_s}{1 - \bar{\phi}} + \frac{4f_s k^2}{3\bar{\phi}} \right) \quad (4.19)$$

e

$$C = \frac{\alpha k^2}{St} - \frac{iN_s k}{St} \left[ 1 + \frac{\bar{v}}{(1 - \bar{\phi})^2} \right], \quad (4.20)$$

cujas partes real e imaginária são, respectivamente,

$$C_1 = \frac{\alpha k^2}{St} \quad (4.21)$$

e

$$C_2 = -\frac{N_s}{St} \left[ 1 + \frac{\bar{v}}{(1 - \bar{\phi})^2} \right] k. \quad (4.22)$$

Logo, a Eq. (4.18) é alternativamente escrita como

$$(s + ik\bar{v})^2 + B(s + ik\bar{v}) + C = 0. \quad (4.23)$$

## 4.4 Análise Modal Temporal

Na análise modal temporal, deseja-se determinar o comportamento dos distúrbios ao longo do tempo, logo importa isolar a frequência e exibir sua dependência com o número de onda. Nesta análise, admite-se  $s \in \mathbb{C}$  e  $k \in \mathbb{R} : k \geq 0$ . Procedendo desse modo, segue da Eq. (4.23), pela fórmula de Bháskara que

$$s + ik\bar{v} = \frac{-B + \sqrt{\Delta}}{2}, \quad (4.24)$$

com  $\Delta = B^2 - 4C = \Delta_1 + i\Delta_2$ . Note que  $\Delta \in \mathbb{C}$ , portanto possui duas raízes quadradas. De fato,

$$\sqrt{\Delta} = \pm \left( \sqrt{\frac{\Delta_1 + |\Delta|}{2}} + i \sqrt{\frac{-\Delta_1 + |\Delta|}{2}} \right) \quad (4.25)$$

Efetuando as operações contidas na definição de  $\Delta$ , conclui-se que

$$\Delta_1 = B^2 - 4C_1 \quad (4.26)$$

e

$$\Delta_2 = -4C_2. \quad (4.27)$$

Então, segue da (4.24) que

$$s(k) = -ik\bar{v} - \frac{B}{2} \pm \left( \sqrt{\frac{\Delta_1 + |\Delta|}{2}} + i \sqrt{\frac{-\Delta_1 + |\Delta|}{2}} \right) \quad (4.28)$$

Pode-se decompor a frequência complexa  $s$  em suas partes real e imaginária:  $s(k) = \xi(k) - i\omega(k)$ , sendo  $\xi$  e  $\omega$  denominados, respectivamente, fator de amplificação e frequência real. Um fator de amplificação positivo reflete a elevação da amplitude dos distúrbios ao longo do tempo. Logo, para que  $\xi > 0$  seja possível, fornecendo tanto modos estáveis quanto instáveis, escolhe-se o sinal positivo da raiz na Eq. (4.28), concluindo-se que

$$\xi(k) = \frac{1}{2} \left( -B + \sqrt{\frac{\Delta_1 + |\Delta|}{2}} \right) \quad (4.29)$$

e

$$\omega(k) = \bar{v}k - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{-\Delta_1 + |\Delta|}{2}}. \quad (4.30)$$

Com efeito, interessa ainda realizar mais algum progresso algébrico na manipulação da Eq. (4.29) para a obtenção de uma condição de estabilidade equivalente e mais fácil de analisar. Decorre das Eqs. (4.19), (4.21), (4.22), (4.26), (4.27) e (4.29) que

$$\xi = -\frac{B}{2} + \frac{1}{2} \left\{ \frac{B^2}{2} - 2C_1 + \frac{1}{2} [(B^2 - 4C_1)^2 + 16C_2^2]^{1/2} \right\}^{1/2}. \quad (4.31)$$

Utilizando a identidade

$$(B^2 - 4C_1)^2 = (B^2 + 4C_1)^2 - 16B^2C_1, \quad (4.32)$$

escreve-se a Eq. (4.31) como

$$\xi = -\frac{B}{2} + \frac{1}{2} \left\{ \frac{B^2}{2} - 2C_1 + \frac{1}{2} [(B^2 + 4C_1)^2 + 16(C_2^2 - B^2C_1)]^{1/2} \right\}^{1/2}. \quad (4.33)$$

Nota-se, por inspeção, que quando  $C_2^2 - B^2C_1 = 0$ ,  $\xi = 0$ . Como a raiz quadrada é monotonicamente crescente, tem-se que o sinal do fator de amplificação equivale ao da expressão  $C_2^2 - B^2C_1$ . Assim, importa definir um parâmetro

$$\mathcal{N} = \frac{C_2^2}{B^2C_1}, \quad (4.34)$$

tal que  $\mathcal{N} > 1 \Leftrightarrow \xi > 0$ . Em termos das expressões previamente determinadas para  $B$ ,  $C_1$  e  $C_2$ , tem-se ainda das Eqs. (4.19), (4.21), (4.22) que

$$\mathcal{N} = \frac{StN_s^2 \left[ 1 + \frac{\bar{v}}{(1-\bar{\phi})^2} \right]^2}{\alpha \left( \frac{N_s}{1-\bar{\phi}} + \frac{4f_s k^2}{3\bar{\phi}} \right)^2}. \quad (4.35)$$

Evidentemente,  $\mathcal{N}$  é monotonicamente decrescente com  $k$ , como ilustrado pela Fig. (14). Logo, seu valor máximo,  $\mathcal{N}_m$ , é atingido para  $k = 0$ . Resulta da Eq. (4.35) que

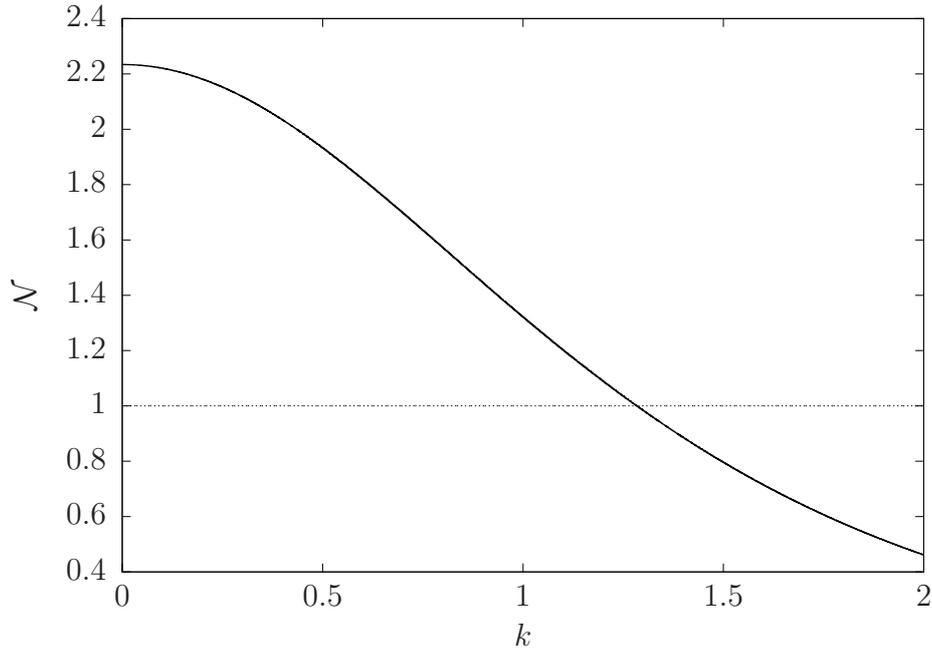


Figura 14 – Parâmetro  $\mathcal{N}$  do critério de estabilidade. Curva obtida para  $St = 2$ ,  $\bar{\phi} = 0,1$  e  $\phi_{mp} = 0,65$ .

$$\mathcal{N}_m = \frac{St(1-\bar{\phi})^2}{\alpha} \left[ 1 + \frac{\bar{v}}{(1-\bar{\phi})^2} \right]^2. \quad (4.36)$$

Portanto, visto que a condição de instabilidade da suspensão pode ser formulada como  $\mathcal{N}_m > 1$ , pois equivale a  $\xi > 0$  para algum número de onda crítico  $k_c$ , i.e., deve-se ter

$$St > \frac{\alpha}{(1-\bar{\phi})^2} \left[ 1 + \frac{\bar{v}}{(1-\bar{\phi})^2} \right]^{-2}. \quad (4.37)$$

Depreende-se que as forças de inércia estão associadas à instabilidade do sistema, que ocorre exclusivamente para números de Stokes superiores a um valor específico associado a propriedades da suspensão. Nota-se também que a pressão de partículas favorece a estabilidade, pois é mais elevada em regiões de alta concentração, tendendo a uniformizar a concentração de partículas ao longo do domínio.

Pode-se também caracterizar a região de números de onda instáveis determinando o número de onda neutro  $k_n$ , para o qual  $\mathcal{N}(k_n) = 1$ . Impondo tal condição à Eq. (4.35),

$$\frac{N_s^2 St \left[ 1 + \frac{\bar{v}}{(1 - \bar{\phi})^2} \right]^2}{\alpha \left( \frac{N_s}{1 - \bar{\phi}} + \frac{4f_s k_n^2}{3\bar{\phi}} \right)^2} = 1, \quad (4.38)$$

de forma que

$$k_n = \left[ \frac{3\bar{\phi} N_s}{4f_s(1 - \bar{\phi})} (N_m^{1/2} - 1) \right]^{1/2}. \quad (4.39)$$

Das Eqs. (4.36) e (4.39), tem-se

$$k_n \sim N_s^{1/2} St^{1/4}. \quad (4.40)$$

Portanto, as forças viscosas atenuam as flutuações em altos números de onda, mitigando a instabilidade, enquanto as forças de inércia promovem instabilidade, ampliando a região instável.

#### 4.4.1 Diagramas de Bifurcação

Um diagrama de bifurcação é composto por famílias de fatores de amplificação em função do número de onda, para algum parâmetro de interesse. Sua finalidade é informar como a alteração de tal parâmetro influencia a região de estabilidade do sistema. Neste estudo, interessa-nos ilustrar a influência dos parâmetros físicos  $St$  e  $\bar{\phi}$  sobre a estabilidade das ondas de concentração.

Como visto do diagrama de bifurcação exposto na Fig. (15), a inércia das partículas favorece a formação de instabilidades no sistema e a propagação de modos instáveis requer que a inércia das partículas seja suficientemente elevada, em acordo com a Eq. (4.37).

A Fig. (16) exhibe a dependência entre o fator de amplificação dos distúrbios e a intensidade das forças viscosas sobre as partículas. Nota-se que, a despeito da variação no número de sedimentação, o sistema não se torna estável, em acordo com a Eq. (4.37). Com efeito, a ação da viscosidade apenas atenua as flutuações em altos números de onda, reduzindo a faixa de números de onda instáveis. Isso é notado à medida que o número de sedimentação diminui, tanto da Fig. (16) quanto da Eq. (4.40).

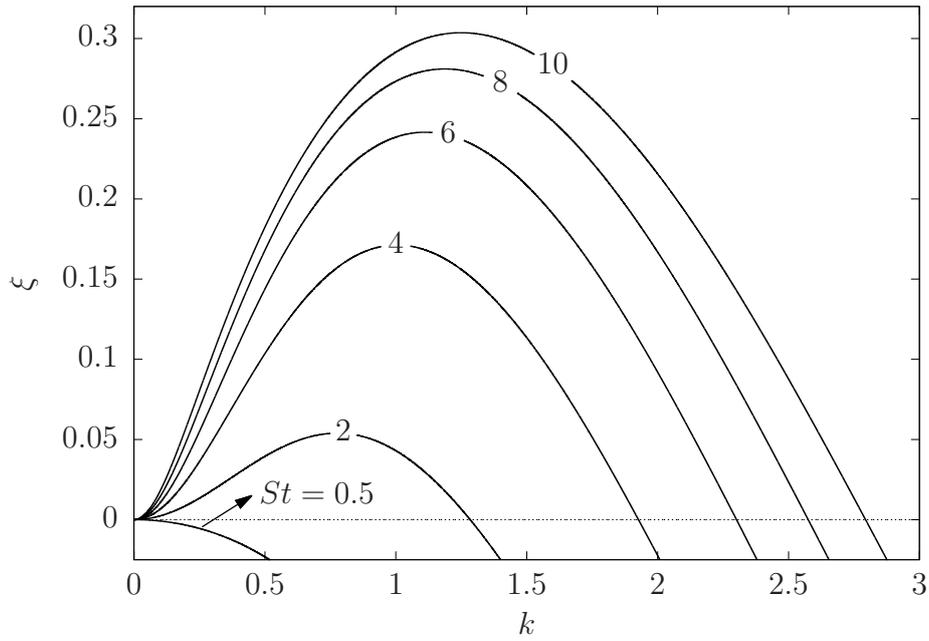


Figura 15 – Fator de amplificação de distúrbios para vários números de Stokes. Curvas obtidas para  $N_s = 10$ ,  $\bar{\phi} = 0, 1$  e  $\phi_{mp} = 0, 65$ .

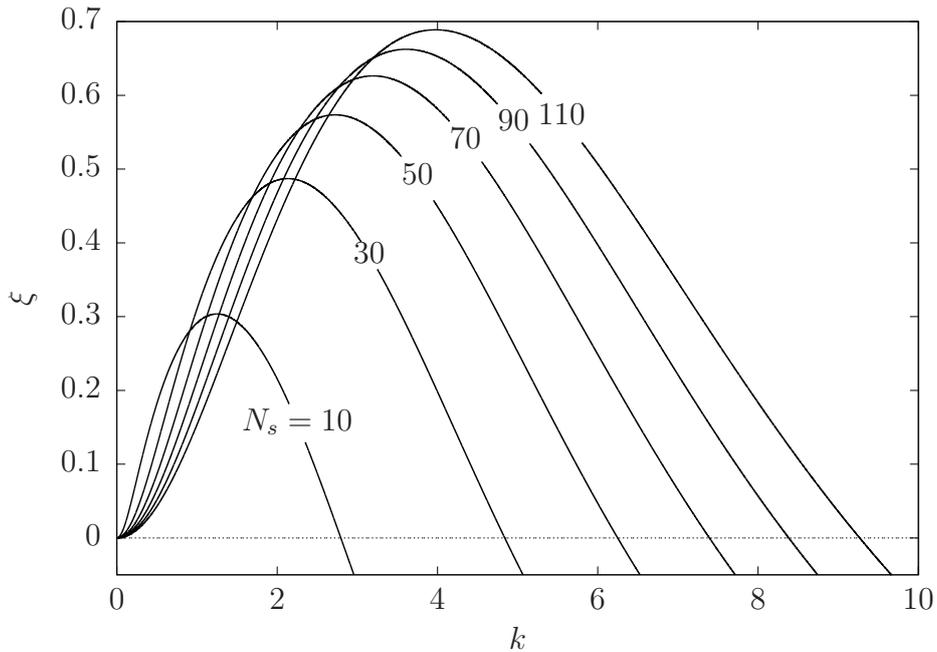


Figura 16 – Diagrama de bifurcação para vários números de sedimentação. Curvas obtidas para  $St = 2$ ,  $\bar{\phi} = 0, 1$  e  $\phi_{mp} = 0, 65$ .

#### 4.4.2 Linhas Neutras

As linhas neutras, como definidas pela Eq. (4.1), determinam a relação entre parâmetros físicos para a condição de estabilidade. Interessa delimitar regiões de estabilidade relacionando dois parâmetros, de modo a investigar a influência dos mecanismos físicos que os tais representam. Para isso, mantêm-se os demais parâmetros constantes. No problema em consideração, a linha neutra é obtida a partir da imposição  $\mathcal{N}_m = 1$ , seguindo

das Eqs. (4.6), (4.7), (4.11) e (4.36) que a linha neutra é expressa por

$$St = \frac{\phi_{mp}}{[(\phi_{mp} - \bar{\phi})(1 - \bar{\phi})]^2} \frac{1}{[1 + (1 - \bar{\phi})^{3,1}]^2}. \quad (4.41)$$

Neste contexto, os parâmetros que governam a estabilidade são  $St$  e  $\bar{\phi}$ . A dependência entre os tais é representada pela Fig. (17), que reitera o papel da inércia em desestabilizar o sistema. Nota-se ainda que a região de estabilidade é ampliada para maiores frações volumétricas médias.

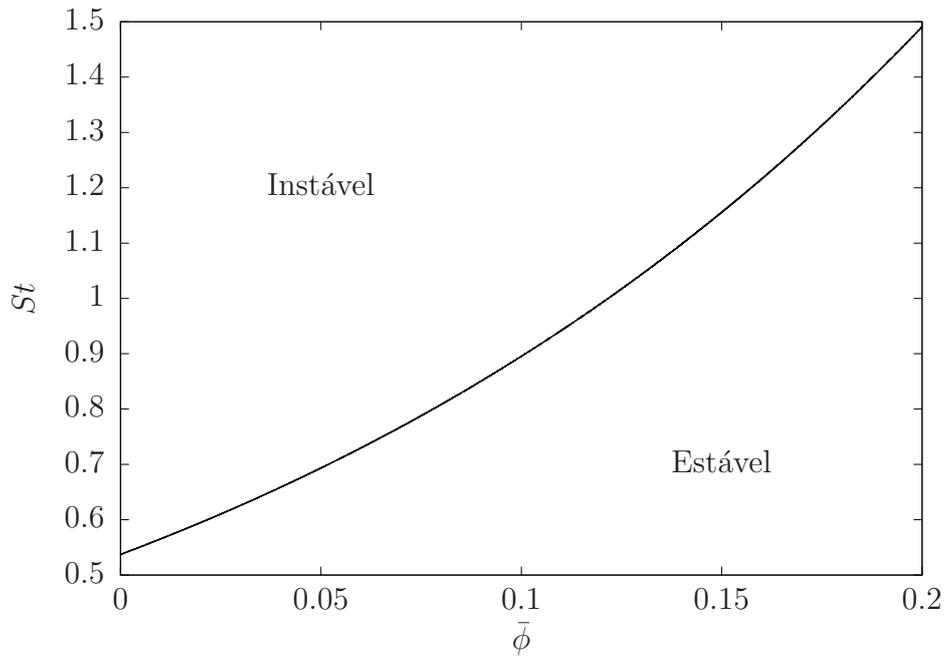


Figura 17 – Linha neutra da suspensão gás-sólido. Curva obtida para  $N_s = 10$ ,  $f_s(\bar{\phi}) = 1,0$  e  $\phi_{mp} = 0,65$ .

# 5 DINÂMICA DE LANGEVIN COM INTERAÇÕES HIDRODINÂMICAS

A dinâmica das partículas em sedimentação neste trabalho foi modelada para a solução numérica de acordo com a segunda lei de Newton, por uma equação do tipo Langevin, da qual se origina a expressão

$$m_\alpha \frac{d\mathbf{u}_\alpha}{dt} = \mathbf{f}_\alpha^h + \mathbf{f}_\alpha^b + \mathbf{f}_\alpha^r + \mathbf{f}_\alpha^c + \mathbf{f}_\alpha^p, \quad \alpha = 1, \dots, N, \quad (5.1)$$

em que o subíndice denota a partícula de número  $\alpha$  e cujo segundo membro é constituído por forças devidas a interação hidrodinâmica viscosa  $\mathbf{f}_\alpha^h$ , movimento browniano  $\mathbf{f}_\alpha^b$ , repulsão fictícia  $\mathbf{f}_\alpha^r$ , contato  $\mathbf{f}_\alpha^c$  e ao peso líquido das partículas  $\mathbf{f}_\alpha^p$ , respectivamente.

A modelagem das forças empregadas na dinâmica das partículas é explanada nas seções que se seguem.

## 5.1 Forças Hidrodinâmicas

Tendo em vista que desejamos contabilizar a inércia das partículas, uma vez que tratamos de uma dispersão de pó em gás, considera-se uma formulação de resistência, exposta na seção (2.2.6), tal que as forças hidrodinâmicas são dadas por

$$\mathbf{f}_\alpha^h = - \sum_{\beta=1}^N \mathbf{R}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{u}_\beta, \quad (5.2)$$

na qual  $\mathbf{R}_{\alpha\beta}$  é um bloco da matriz resistência global

$$\mathbf{R} = \mathbf{M}^{-1}, \quad (5.3)$$

sendo  $\mathbf{M}$  a matriz mobilidade global, também construída por blocos como

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{M}_{12} & \cdots & \mathbf{M}_{1N} \\ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22} & \cdots & \mathbf{M}_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{M}_{N1} & \mathbf{M}_{N2} & \cdots & \mathbf{M}_{NN} \end{bmatrix}, \quad (5.4)$$

em que

$$\mathbf{M}_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{I}}{6\pi\mu a_{\alpha}}, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (5.5)$$

e

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\mu r} (\mathbf{I} + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}), \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N, \quad \alpha \neq \beta \quad (5.6)$$

para  $\mathbf{r} = \mathbf{x}_{\beta} - \mathbf{x}_{\alpha}$ .

## 5.2 Forças Brownianas

No caso da força browniana, utiliza-se numericamente um vetor cujas propriedades estatísticas sejam as mesmas enunciadas para a equação de Langevin, i.e., com média nula e autocorrelação dada pela equação (2.145). Faz-se ainda a aproximação  $\delta(\Delta t) \sim 1/\Delta t$  para um passo de tempo  $\Delta t$  suficientemente pequeno, artifício utilizado de modo a viabilizar a implementação dessa condição no código. Logo, constroi-se a força browniana como  $\mathbf{f}_{\alpha}^b(t) = c\mathbf{n}(t)$ , em que  $\mathbf{n}$  é um vetor numérico pseudorandômico cujas componentes têm distribuição gaussiana, e tal que  $\langle \mathbf{n} \rangle = \mathbf{0}$  e  $\langle \mathbf{n}\mathbf{n} \rangle = \mathbf{1}$ , cf. (NÄGELE, 2006). Os números pseudorandômicos para o vetor  $\mathbf{n}$  foram gerados segundo uma distribuição gaussiana. Para isto, uma transformação de variáveis foi aplicada à distribuição uniforme gerada pela subrotina intrínseca `random_number`, conforme o algoritmo exposto por (PRESS et al., 1992, pág. 279). Um histograma dos números gerados é apresentado na figura (18).

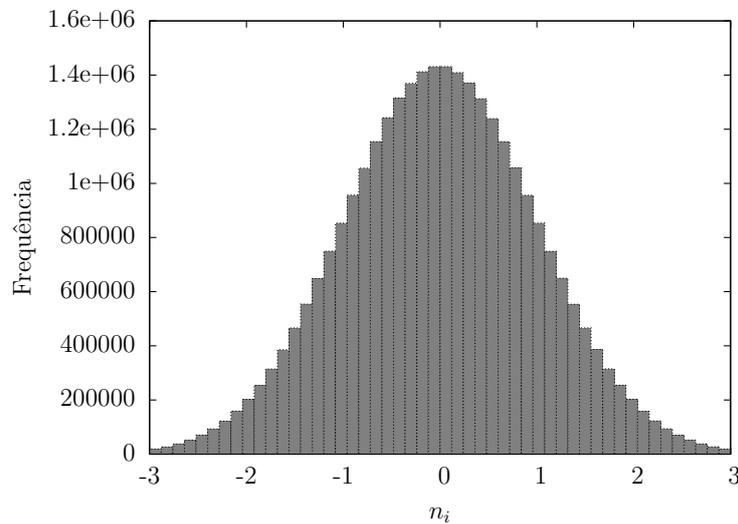


Figura 18 – Distribuição de números pseudorandômicos gerados pelo código numérico.

Depreende-se da equação (2.150) que  $c = \zeta\sqrt{2D_{\alpha}^0/\Delta t}$ , portanto

$$\mathbf{f}_{\alpha}^b(t) = \sqrt{\frac{2D_{\alpha}^0}{\Delta t}} \zeta \mathbf{n}(t), \quad (5.7)$$

sendo  $D_{\alpha}^0$  o coeficiente de difusão de Einstein-Stokes da partícula  $\alpha$ .

### 5.3 Forças de Repulsão

A ocorrência de forças repulsivas é frequentemente observada em laboratório e estas constituem parte fundamental da evolução temporal do sistema, pois evitam a sobreposição de partículas. Uma vez que este trabalho não se atém ao estudo de efeitos agregativos, optou-se por empregar o modelo exponencial de [Cunha \(1995\)](#), [Cunha et al. \(2002\)](#), [Cunha, Sousa e Hinch \(2002\)](#), admitindo polidispersidade de raios, qual seja

$$\mathbf{f}_\alpha^r = \begin{cases} -\sum_{\beta=1}^N C_1 6\pi\mu \left(\frac{a_\alpha + a_\beta}{2}\right) \left(\frac{U_\alpha + U_\beta}{2}\right) \exp\left[\frac{-2\varepsilon_{\alpha\beta}}{C_2(a_\alpha + a_\beta)}\right] \hat{\mathbf{r}}, & 0 < \varepsilon_{\alpha\beta} < \varepsilon_0, \\ \mathbf{0}, & \varepsilon_{\alpha\beta} > \varepsilon_0, \end{cases} \quad (5.8)$$

em que  $U_\alpha$  e  $U_\beta$  são as velocidades de Stokes das partículas  $\alpha$  e  $\beta$ .  $C_1$ ,  $C_2$  e  $\varepsilon_0$  são parâmetros de calibração numérica e  $\varepsilon_{\alpha\beta} = |\mathbf{r}| - (a_\alpha + a_\beta)$  é o espaçamento entre partículas.  $C_1$  e  $C_2$  controlam a intensidade e o alcance da força de repulsão, respectivamente, enquanto que  $\varepsilon_0$  determina o espaçamento mínimo a partir do qual a mesma passa a atuar sobre duas partículas. Neste trabalho, foram utilizados os valores  $C_1 = 10$ ,  $C_2 = 0,05$  e  $\varepsilon_0 = 0,2$ . A figura (19) ilustra a geometria do problema.

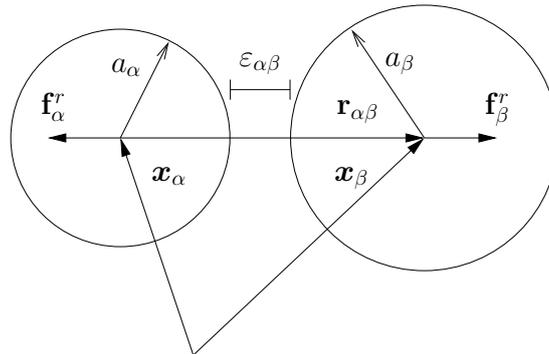


Figura 19 – Parâmetros geométricos envolvidos nas forças de repulsão entre partículas. Adaptado de ([ABADE, 2005](#)).

As forças em consideração são oriundas da lubrificação entre partículas e seu cálculo mediante o método das reflexões exigiria um esforço computacional inenxequível, de forma que este modelo captura a física do problema com muito mais simplicidade, tornando-se extremamente apropriado à simulação numérica.

### 5.4 Forças de Contato

À medida que a inércia das partículas se eleva, a dinâmica da suspensão é dominada por colisões, de modo que se faz necessário considerar modelos mais realistas de forças de colisão. A abordagem e a modelagem ora apresentadas baseiam-se em ([ABADE, 2005](#); [ABADE; CUNHA, 2007](#)). No presente trabalho, emprega-se o modelo não linear de Hertz,

frequentemente usado em simulações de materiais granulares. Para tal, consideramos a equação (TIMOSHENKO; GOODIER, 1970)

$$b = \left[ \frac{3\bar{a}}{4} f_c \left( \frac{1 - \nu_\alpha^2}{E_\alpha} + \frac{1 - \nu_\beta^2}{E_\beta} \right) \right]^{1/3}, \quad (5.9)$$

em que  $b$  é o raio de contato entre as superfícies das esferas de raios  $a_\alpha$  e  $a_\beta$ . Define-se o raio reduzido  $\bar{a}$  em termos dos raios das partículas como

$$\bar{a} = \frac{a_\alpha a_\beta}{a_\alpha + a_\beta}. \quad (5.10)$$

Os módulos de Young e coeficientes de Poisson das partículas são  $E_\alpha$  e  $E_\beta$ ,  $\nu_\alpha$  e  $\nu_\beta$ , respectivamente.  $f_c$  é a força de contato que as pressiona.

Para implementar a força de contato expressa na equação (5.9), devemos relacioná-la à sobreposição virtual  $\delta_{\alpha\beta} \equiv -\varepsilon_{\alpha\beta}$  entre as esferas, que se resume a um artifício numérico para representar a colisão. A figura (20) ilustra o raio de contato entre as superfícies e a abstração contida no conceito de sobreposição virtual. Depende-se da geometria do

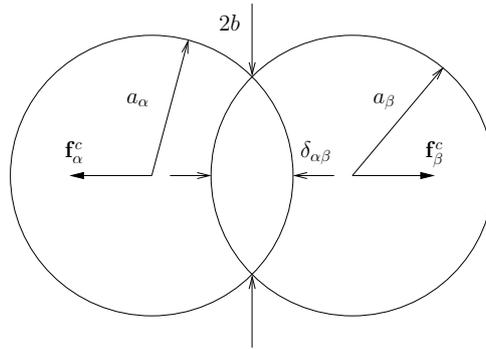


Figura 20 – Abstração da colisão elástica entre duas partículas. Adaptado de (ABADE, 2005).

problema que esta se relaciona aos raios das partículas e ao raio de contato entre as superfícies por

$$\delta_{\alpha\beta} = a_\alpha + a_\beta - \left( \sqrt{a_\alpha^2 - b^2} + \sqrt{a_\beta^2 - b^2} \right). \quad (5.11)$$

Para  $b/a_\alpha \ll 1$  e  $b/a_\beta \ll 1$ , podem-se fazer as expansões binomiais

$$(a_\alpha^2 - b^2)^{1/2} \sim a_\alpha - \frac{b^2}{2a_\alpha} \quad \text{e} \quad (a_\beta^2 - b^2)^{1/2} \sim a_\beta - \frac{b^2}{2a_\beta}, \quad (5.12)$$

que em conjunto com as equações (5.11) resulta em

$$b \sim \sqrt{2\delta_{\alpha\beta}\bar{a}}. \quad (5.13)$$

Cabe ressaltar que, em se tratando de suspensões monodispersas cujas partículas têm raio  $a$ ,  $\bar{a} = a/2$ . No caso de partículas de mesmo material,  $\nu_\alpha = \nu_\beta = \nu$ ,  $E_\alpha = E_\beta = E$  e segue das equações (5.9) e (5.13) que

$$f_c \sim \frac{1 - \nu^2}{E} \sqrt{\bar{a}\delta_{\alpha\beta}^3}. \quad (5.14)$$

Introduz-se como constante de proporcionalidade o parâmetro numérico  $k$ , que incorpora as propriedades do material das partículas, resultando na expressão

$$f_c = k_{cp} \sqrt{\bar{a} \delta_{\alpha\beta}^3}, \quad (5.15)$$

sendo  $k_{cp}$  uma constante de proporcionalidade que envolve as propriedades das partículas e da parede. Salienta-se que este modelo também é aplicável à interação partícula-parede, caso em que se considera a parede como uma esfera de raio  $a_\beta \rightarrow \infty$ , correspondendo ao limite assintótico

$$\bar{a} = \lim_{a_\beta \rightarrow \infty} \frac{a_\alpha a_\beta}{a_\alpha + a_\beta} = a_\alpha. \quad (5.16)$$

Desse modo, a força exercida pela parede sobre a partícula é

$$f_{cp} = k \sqrt{a_\alpha \delta_\alpha^3}, \quad (5.17)$$

aplicada na direção normal à parede.

Devido à inércia das partículas, as tais dificilmente respondem às forças de contato rápido o suficiente para evitar sobreposições virtuais elevadas. Assim, emprega-se ainda uma translação para a força de contato, i.e., esta é deslocada de um determinado comprimento, passando a atuar antes que realmente haja interpenetração entre as partículas. Essa translação é representada por  $\chi$  e as forças de contato assumem a expressão

$$\mathbf{f}_\alpha^c = \begin{cases} -\sum_{\beta=1}^N k \sqrt{\bar{a}(\delta_{\alpha\beta} + \chi)^3} \hat{\mathbf{r}}, & 0 < (\delta_{\alpha\beta} + \chi) < \delta_0, \\ \mathbf{0}, & (\delta_{\alpha\beta} + \chi) > \delta_0. \end{cases} \quad (5.18)$$

Foram usados os valores  $k = 100$ ,  $\chi = 0,2$  e  $\delta_0 = 0,6$  para as constantes de calibração.

## 5.5 Peso Líquido

O peso líquido das partículas consiste simplesmente na força gravitacional sobre as tais subtraída do empuxo. Deste modo,

$$\mathbf{f}_\alpha^p = \frac{4\pi a_\alpha^3}{3} \Delta \rho_\alpha \mathbf{g}. \quad (5.19)$$

Em se tratando de suspensões gás-sólido,  $\rho_\alpha \gg \rho$ , portanto se faz a aproximação  $\Delta \rho_\alpha = \rho_\alpha - \rho \sim \rho_\alpha$ , resultando em

$$\mathbf{f}_\alpha^p = \frac{4\pi a_\alpha^3}{3} \rho_\alpha \mathbf{g}. \quad (5.20)$$

## 5.6 Equação Governante Adimensional

Substituindo as equações (5.2), (5.7) e (5.20) em (5.1), tem-se

$$m_\alpha \frac{d\mathbf{u}_\alpha}{dt} = -\sum_{\beta=1}^N \mathbf{R}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{u}_\beta + \sqrt{\frac{2D_\alpha^0}{\Delta t}} \zeta \mathbf{n}(t) + \mathbf{f}_\alpha^r + \mathbf{f}_\alpha^c + \frac{4\pi a_\alpha^3}{3} \rho_\alpha \mathbf{g}. \quad (5.21)$$

Convém adimensionalizar a equação (5.21), de modo a reduzir o número de parâmetros de entrada do código e identificar os grupos adimensionais efetivamente relevantes para a dinâmica do sistema, investigando a influência dos tais sobre as variáveis em estudo. Neste intuito, escolhe-se uma espécie de partículas como referência, cujas propriedades são adotadas como escalas características. Notadamente, o raio  $a$  e a massa específica  $\rho_0$  da espécie de referência são usados para comparação, definindo os parâmetros adimensionais

$$\lambda_\alpha = \frac{a_\alpha}{a} \quad \text{e} \quad \eta_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{\rho_0}, \quad (5.22)$$

denominados razão de aspecto,  $\lambda_\alpha$ , e razão de densidade,  $\eta_\alpha$ .

Definem-se ainda o tempo de sedimentação, a velocidade de Stokes e o arrasto de Stokes relativos à espécie de referência como escalas características de tempo, velocidade e força. Assim, deriva-se a forma adimensional da equação (5.21),

$$St \eta_\alpha \lambda_\alpha^3 \frac{d\tilde{\mathbf{u}}_\alpha}{d\tilde{t}} = - \sum_{\beta=1}^N \tilde{\mathbf{R}}_{\alpha\beta} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_\beta + \sqrt{\frac{2}{\lambda_\alpha Pe \Delta\tilde{t}}} \mathbf{n}(t) + \tilde{\mathbf{f}}_\alpha^r + \tilde{\mathbf{f}}_\alpha^c - \eta_\alpha \lambda_\alpha^3 \hat{\mathbf{e}}_3, \quad (5.23)$$

na qual variáveis adimensionais são indicadas por tís e  $\hat{\mathbf{e}}_3$  é o vetor canônico do espaço euclidiano cuja direção é oposta à da aceleração gravitacional.

Entre os parâmetros adimensionais que constam na expressão (5.23), identificam-se os números de Stokes,  $St$ , e Péclet,  $Pe$ . O primeiro pode ser compreendido como uma razão entre o tempo de relaxação inercial de uma partícula da espécie de referência e o tempo de sedimentação,

$$St = \frac{\tau_r}{\tau_s} = \frac{mU}{\zeta a}, \quad (5.24)$$

com o tempo de relaxação indicado por  $\tau_r$  e o de sedimentação por  $\tau_s$ . Logo, o número de Stokes é uma medida da inércia das partículas, a resistência ao movimento sob a ação de forças externas.

Já o número de Péclet é a razão entre o tempo de difusão e o de sedimentação, ou seja, uma medida da influência relativa do movimento browniano sobre a cinemática da partícula. Quanto menor  $Pe$ , mais célere é o processo difusivo, incorrendo na elevação dessa influência. Conforme a argumentação exposta,

$$Pe = \frac{\tau_b}{\tau_s} = \frac{aU}{D^0}, \quad (5.25)$$

sendo  $\tau_b = a^2/D^0$  o tempo de difusão browniano e  $D^0$  a difusividade Einstein-Stokes da espécie de referência.

Explicitamente, as forças de repulsão e de contato têm forma adimensional dada por

$$\tilde{\mathbf{f}}_\alpha^r = \begin{cases} - \sum_{\beta=1}^N \frac{C_1}{4} (\lambda_\alpha + \lambda_\beta) (\eta_\alpha \lambda_\alpha^2 + \eta_\beta \lambda_\beta^2) \exp \left[ \frac{-2\tilde{\varepsilon}_{\alpha\beta}}{C_2(\lambda_\alpha + \lambda_\beta)} \right] \hat{\mathbf{r}}, & 0 < \tilde{\varepsilon}_{\alpha\beta} < \tilde{\varepsilon}_0, \\ \mathbf{0}, & \tilde{\varepsilon}_{\alpha\beta} > \tilde{\varepsilon}_0, \end{cases} \quad (5.26)$$

e

$$\tilde{\mathbf{f}}_\alpha^c = \begin{cases} -\sum_{\beta=1}^N \tilde{k} \sqrt{\tilde{a}(\tilde{\delta}_{\alpha\beta} - \tilde{\chi})^3} \hat{\mathbf{r}}, & 0 < (\tilde{\delta}_{\alpha\beta} - \tilde{\chi}) < \tilde{\delta}_0, \\ \mathbf{0}, & (\tilde{\delta}_{\alpha\beta} - \tilde{\chi}) > \tilde{\delta}_0. \end{cases} \quad (5.27)$$

respectivamente, em que

$$\tilde{k} = \frac{ak}{6\pi\mu U}. \quad (5.28)$$

Ademais,  $\tilde{\mathbf{R}} = \tilde{\mathbf{M}}^{-1}$ , sendo

$$\tilde{\mathbf{M}}_{\alpha\alpha} = \frac{\mathbf{1}}{\lambda_\alpha}, \quad (5.29)$$

$$\tilde{\mathbf{M}}_{\alpha\beta} = \frac{3}{4} \left[ \frac{1}{r}(\mathbf{1} + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}) + \frac{(\lambda_\alpha^2 + \lambda_\beta^2)}{3r^3}(\mathbf{1} - 3\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (5.30)$$

para frações volumétricas moderadas, seção (8.1), e

$$\tilde{\mathbf{M}}_{\alpha\beta} = \frac{3}{4r}(\mathbf{1} + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}) \quad (5.31)$$

no caso da aproximação de partículas pontuais, § 8.2 em diante.

A equação adimensional governante (5.23), dadas as expressões adimensionais das forças que nela constam, será integrada numericamente, conforme os procedimentos detalhados no capítulo (6). Diversos mecanismos físicos, aos quais estão associadas diferentes escalas de tempo, são importantes para a dinâmica do sistema. Deste modo, é interessante expor essas escalas para um caso típico, a fim de ter uma noção empírica da ordem de tais escalas. A tabela (3) contém as escalas típicas de tempo referidas.

Tabela 3 – Tempos característicos do escoamento para  $a = 1 \mu m$ , massa específica do fluido  $\rho = 1,184 \text{ kg/m}^3$ , viscosidade dinâmica  $\mu = 1,849 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m.s}$ , massa específica da partícula  $\rho_s = 10^5 \rho$ , aceleração gravitacional  $g = 9,81 \text{ m/s}^2$ , constante de Boltzmann  $k_B = 1,381 \cdot 10^{-23} \text{ m}^2.\text{kg.s}^{-2}.\text{K}^{-1}$  e temperatura  $T = 298 \text{ K}$ .

$\tau_b$	$\tau_s$	$\tau_r$
4,6 s	$3,8 \cdot 10^{-3} \text{ s}$	$2,6 \cdot 10^{-5} \text{ s}$

# 6 METODOLOGIA NUMÉRICA

## 6.1 Geração das Condições Iniciais

A geração de condições iniciais é objeto de interesse deste problema pois pode exercer direta influência sobre a dinâmica do sistema, uma vez que as interações hidrodinâmicas estão associadas à configuração das partículas. Tipos diferentes de condições iniciais foram gerados, conforme o caso que se desejava analisar (cf. capítulos (7) e (8)).

Nos testes de interação hidrodinâmica, seção (8), empregou-se uma formulação de mobilidade, tal que apenas as posições iniciais eram necessárias. Gerou-se uma configuração inicial de posições pseudorandômicas com distribuição uniforme, utilizando a subrotina intrínseca `random_number`, da linguagem FORTRAN, sujeita à condição de impenetrabilidade das esferas. Desse modo, duas ou mais partículas não podem ocupar o mesmo volume na configuração inicial. Adicionou-se a esse *volume excluído* um filme de lubrificação, representando o mecanismo físico de repulsão que ocorre quando duas partículas estão muito próximas, separadas por um fina camada de fluido. Desta forma, o volume excluído é dado por

$$0 < |\mathbf{r}| < (\lambda_\alpha + \lambda_\beta) + C, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N, \quad (6.1)$$

em que  $C$  é um parâmetro numérico de calibração, referente à espessura do filme, que deve ser cuidadosamente escolhido, de forma a não afetar o grau de randomicidade da distribuição resultante, cf. (CUNHA et al., 2002). Para o caso do aglomerado de partículas, seção (8.1), em adição aos procedimentos supracitados, limita-se a geração de partículas a uma região esférica.

Na simulação de suspensões monodispersas, seção (8.2), considera-se a inércia das partículas, tal que a formulação de resistência é adotada. Então, devem-se gerar condições iniciais de posição e velocidade. Neste caso, admitem-se velocidades iniciais nulas. Quanto às posições, deseja-se estudar o efeito de uma estratificação linear na direção vertical sobre a fração volumétrica. Isso é feito gerando uma configuração inicial de acordo com as observações precedentes e aplicando um método de Monte Carlo à componente vertical das posições, cf. (ALLEN; TILDESLEY, 1989). Para tal, considera-se uma estratificação linear definida a partir da função

$$f(z) = 1 - \lambda z. \quad (6.2)$$

Para cada partícula, gera-se um número randômico  $\gamma$  com distribuição uniforme no intervalo  $(0, 1)$ . Se  $\gamma < 1 - \lambda\gamma$ , a partícula gerada é aceita. Caso contrário, esta é rejeitada e uma nova esfera é gerada e submetida ao mesmo crivo. Por conseguinte, constroi-se uma distribuição linear de partículas na direção vertical. A figura (21) ilustra o procedimento, delineando as regiões de aceite e rejeição de partículas.

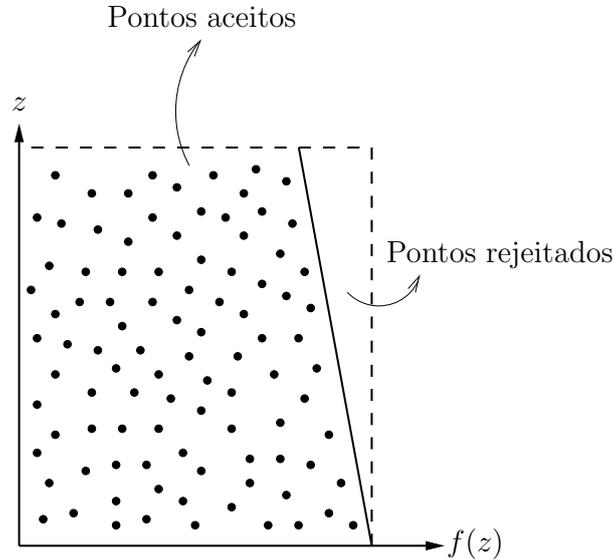


Figura 21 – Método de Monte Carlo para geração da condição inicial estratificada.

## 6.2 Tabelamento das Mobilidades

Para se observar uma variância independente das dimensões do domínio numérico, deve-se simular um sistema com comprimento maior que o crítico, cf. Eq. (3.13). A principal dificuldade em se atingir tal requisito é o custo computacional da simulação, que se torna maior à medida que o número de partículas simuladas é elevado. Por se tratar de uma formulação de resistência, o custo computacional da simulação é  $O(N^3)$ , tendo em vista a necessidade de inversão da matriz mobilidade global. Nas simulações de suspensões monodispersas (§8.2), a fim de tentar reduzir tal custo, optou-se por tabelar as funções mobilidade num arquivo de texto, para pontos pré-determinados do domínio. Assim, a mobilidade para um dado ponto é interpolada, sem que haja a necessidade de realizar todas as operações contidas em sua definição, podendo reduzir o tempo gasto em cada passo. A Fig. (22) ilustra a malha de pontos cujas mobilidades foram arquivadas. Utilizaram-se 100 pontos em cada direção.

Visto que se trata de uma interpolação em três direções, o cálculo da mobilidade num ponto  $\mathbf{x}$  do domínio foi feito por um processo de interpolações lineares sucessivas, como ilustrado pela Fig. (23), do qual resulta a fórmula

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}) \approx \mathbf{M}_0(1 - z_d) + \mathbf{M}_1 z_d, \quad (6.3)$$

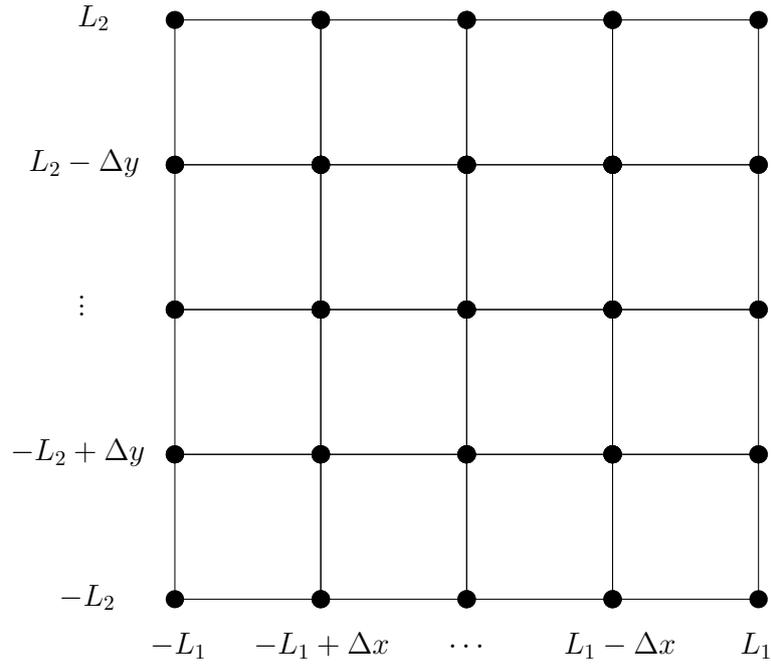


Figura 22 – Seção bidimensional da malha para tabelamento das mobilidades.  $L_1$  e  $L_2$  são os comprimentos do domínio numérico nas direções  $x$  e  $y$ .

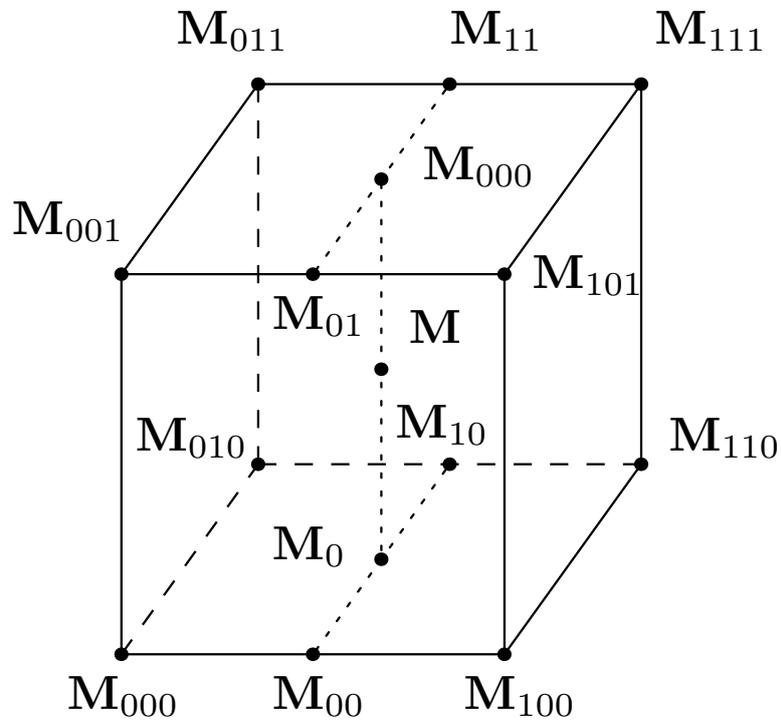


Figura 23 – Sucessão de interpolações para aproximação da mobilidade e nomenclatura dos pontos que usados para aproximação. Adaptado de (WIKIPEDIA, 2017).

em que

$$\mathbf{M}_0 = \mathbf{M}_{00}(1 - y_d) + \mathbf{M}_{10}y_d, \quad (6.4)$$

$$\mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_{01}(1 - y_d) + \mathbf{M}_{11}y_d, \quad (6.5)$$

$$\mathbf{M}_{00} = \mathbf{M}(x_0, y_0, z_0)(1 - x_d) + \mathbf{M}(x_1, y_0, z_0)x_d, \quad (6.6)$$

$$\mathbf{M}_{01} = \mathbf{M}(x_0, y_0, z_1)(1 - x_d) + \mathbf{M}(x_1, y_0, z_1)x_d, \quad (6.7)$$

$$\mathbf{M}_{10} = \mathbf{M}(x_0, y_1, z_0)(1 - x_d) + \mathbf{M}(x_1, y_1, z_0)x_d, \quad (6.8)$$

$$\mathbf{M}_{11} = \mathbf{M}(x_0, y_1, z_1)(1 - x_d) + \mathbf{M}(x_1, y_1, z_1)x_d, \quad (6.9)$$

com

$$x_d = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}, \quad (6.10)$$

$$y_d = \frac{y - y_0}{y_1 - y_0}, \quad (6.11)$$

e

$$z_d = \frac{z - z_0}{z_1 - z_0}. \quad (6.12)$$

No entanto, o tabelamento das mobilidades foi inefetivo neste problema, tornando o custo das simulações cerca de 30% maior. Atribui-se isso à simplicidade da matriz mobilidade de Oseen, Eq. (5.30), usada no regime diluído, requerendo um número menor de operações que o usado para a interpolação.

## 6.3 Condições de Contorno

Nesta seção são detalhadas as condições de contorno utilizadas nos diferentes tipos de simulações numéricas.

### 6.3.1 Testes de Validação

Em todas as simulações dos capítulos (7), (8) e (9), exceto na seção (8.2), foram utilizadas as mesmas condições de contorno. Isto porque são, majoritariamente, testes de validação do algoritmo, nos quais não se pretendia observar efeitos de fundo impenetrável, nem replicar o domínio numérico para simular uma suspensão real. De fato, todas essas simulações foram realizadas com um domínio numérico infinito, sem a presença de paredes ou réplicas desse reservatório em qualquer direção.

### 6.3.2 Suspensão Monodispersa

Neste caso, deseja-se simular uma suspensão real. Portanto, foram implementados fundo e topo impenetráveis através de forças de repulsão e contato, dadas pelas Eqs. (5.26) e (5.27). Em se tratando de uma repulsão parede-partícula para o fundo impenetrável, a equação (5.26) é adaptada para

$$\tilde{\mathbf{f}}_{\alpha}^r = \begin{cases} -\sum_{\beta=1}^N C_1 \eta_{\alpha} \lambda_{\alpha}^3 \exp\left(\frac{-2z_{\alpha}}{C_2}\right) \hat{\mathbf{r}}, & 0 < z_{\alpha} < \tilde{\epsilon}_0, \\ \mathbf{0}, & \tilde{\epsilon}_{\alpha\beta} > \tilde{\epsilon}_0, \end{cases} \quad (6.13)$$

sendo  $z_{\alpha}$  a distância da partícula  $\alpha$  ao fundo. Isto é particularmente importante pois a presença de um fundo impenetrável ocasiona um escoamento reverso, relevante à dinâmica do sistema, como argumentaram Cunha et al. (2002).

Admitem-se também forças de repulsão exponenciais nas paredes laterais e no topo, cujas expressões são análogas à Eq. (6.13). A figura (24) ilustra as condições de contorno da simulação de suspensões monodispersas.

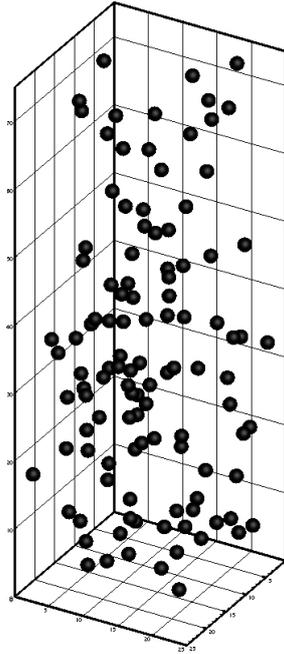


Figura 24 – Condições de contorno da simulação numérica de suspensões monodispersas.

## 6.4 Tratamento Estatístico

Por (5.23) se tratar de uma equação diferencial estocástica, foram feitas várias realizações da simulação, sendo as propriedades de interesse extraídas de médias nas realizações. Uma vez que esse procedimento visa à obtenção de estatísticas válidas com um custo computacional viável, requer que se faça o mínimo de realizações necessário

para a convergência das estatísticas. Tendo em vista que uma suspensão é composta de várias partículas, foram extraídas primeiramente médias nas partículas, depois nas realizações, a fim de conseguir estatísticas com amostras de tamanho mais representativo. Nas simulações de suspensões monodispersas, o cálculo de todas as médias foi efetuado no intervalo  $z \in (L_3/4, 3L_3/4)$  do domínio, sendo  $z$  a altura do centro de massa de uma partícula, em relação ao fundo, e  $L_3$  a altura do domínio de integração. Tal região foi escolhida de modo a excluir tanto a frente dispersa de sedimentação quanto o sedimento, formado no fundo do recipiente, que possui concentrações substancialmente mais elevadas que a parte ativa da suspensão. As médias obtidas conforme o procedimento cá descrito são simbolizadas por  $\langle \rangle$ .

Analogamente à seção (2.3), interessam-nos a variância das flutuações de velocidade  $\langle \mathbf{u}'^2 \rangle$  e a difusividade  $\mathbf{D}$ . Aquela é a medida mais simples das flutuações de velocidade, caracterizando o comportamento de curto tempo da suspensão e é calculada segundo a forma tensorial

$$\langle \mathbf{u}'\mathbf{u}' \rangle = \frac{1}{n_r} \sum_{\beta=1}^{n_r} \left( \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{u}'_{\alpha}(t) \mathbf{u}'_{\alpha}(t) \right). \quad (6.14)$$

Aqui,  $n_r$  é o número de realizações e  $N$  o número de partículas contidas na região ativa da suspensão, dependente da realização em curso. A expressão supracitada para a variância é aplicável uma vez que as flutuações de velocidade têm média nula. O tempo  $t$  no qual são calculadas as variâncias é aquele em que as tais saturam, que é determinado no código pelo cálculo das variâncias para tempos subsequentes. Quando os valores diferem menos de 2% em módulo para três tempos subsequentes, diz-se que a variância convergiu. Uma maior confiabilidade das estatísticas é obtida efetuando uma média temporal para 50 passos após o tempo de convergência. Um estimador apropriado para o intervalo necessário à convergência das estatísticas de curto tempo é o tempo de relaxação, visto que este mede o quão vagarosamente uma partícula perde memória de suas condições iniciais e se adapta à velocidade local do fluido.

Já a difusividade é uma propriedade de longo tempo que quantifica o processo de flutuações, medindo os deslocamentos que estas induzem a longo prazo. Note que esta pode ser definida como uma integral,

$$\mathbf{D} = \int_0^{\infty} \langle \mathbf{u}'(t) \mathbf{u}'(t + \tau) \rangle d\tau, \quad (6.15)$$

na qual se assume que o processo seja estacionário, i.e., a autocorrelação das flutuações dependeria apenas da diferença entre os tempos final e inicial. Uma vez que não se pode fazer tal afirmação da simulação desenvolvida, foi efetuada uma média de  $\langle \mathbf{u}'(t) \mathbf{u}'(t + \tau) \rangle$  em 50 passos de tempos iniciais  $t$  posteriores à convergência das estatísticas de curto tempo, o que denotamos implicitamente neste caso pelo símbolo  $\langle \rangle$ , representando neste caso uma média tanto nas partículas e realizações quanto nos tempos iniciais.

Nota-se também que a integral presente na Eq. (6.15) é imprópria, devido ao limite superior de integração. Dado que o integrando decai suficientemente rápido com  $\tau$ , pode-se

aproximá-la por

$$\mathbf{D} \approx \int_0^T \langle \mathbf{u}'(t) \mathbf{u}'(t + \tau) \rangle d\tau, \quad (6.16)$$

em que  $T$  é um tempo suficientemente grande. Tal abordagem foi utilizada na simulação, definindo uma função  $\mathcal{D}(T) = \int_0^T \langle \mathbf{u}'(t) \mathbf{u}'(t + \tau) \rangle d\tau$  tal que  $\lim_{T \rightarrow \infty} \mathcal{D}(T) = \mathbf{D}$ . Na simulação, escolhe-se qualitativamente um tempo  $T$  maior que o tempo de correlação máximo, definido na Eq. (2.161), observando qual  $T$  é necessário para que  $\mathcal{D}$  sature. Assim, mensura-se um decaimento apreciável do integrando e observa-se um comportamento efetivamente de longo tempo.

Dado que as flutuações de velocidade em sedimentação são relatadas como fortemente anisotrópicas (NICOLAI et al., 1995), surge a necessidade de decompor as propriedades em análise nas direções paralela e ortogonal à gravidade. Isto é feito mediante o uso do operador projeção como

$$\langle \mathbf{u}' \mathbf{u}' \rangle = \langle u_{\parallel}'^2 \rangle \hat{\mathbf{e}}_3 \hat{\mathbf{e}}_3 + \langle u_{\perp}'^2 \rangle (\mathbf{I} - \hat{\mathbf{e}}_3 \hat{\mathbf{e}}_3) \quad (6.17)$$

e

$$\langle \mathbf{D} \rangle = D_{\parallel} \hat{\mathbf{e}}_3 \hat{\mathbf{e}}_3 + D_{\perp} (\mathbf{I} - \hat{\mathbf{e}}_3 \hat{\mathbf{e}}_3). \quad (6.18)$$

Vale salientar que, do modo como as equações foram apresentadas, não é possível simular o caso puramente browniano, para o qual  $Pe = 0$ , pois tal parâmetro consta no denominador de  $\mathbf{f}_{\alpha}^b$ . Esta situação nos interessa, particularmente para uma partícula isolada, como forma de validação do modelo de força browniana implementado. Tal obstáculo foi contornado utilizando o tempo de difusão como escala característica para  $Pe < 10^{-4}$  (uma tolerância numérica a partir da qual se admite  $Pe \sim 0$ ), caso em que se obtém a equação governante adimensional

$$\frac{d\tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}}{d\tilde{t}} = \sqrt{\frac{2}{\Delta\tilde{t}}} \mathbf{n}(t), \quad \alpha = 1, \dots, N. \quad (6.19)$$

## 6.5 Integração Numérica

Determinaram-se as velocidades e trajetórias das partículas por meio de integração numérica da equação (5.23), através de um código computacional desenvolvido na linguagem FORTRAN. Empregou-se um método de Euler, com passo de tempo adimensional adaptativo dado pela expressão

$$\Delta\tilde{t} = \frac{1}{100} \min(1, 5Pe, 5St, \tilde{\varepsilon}), \quad (6.20)$$

em que  $\tilde{\varepsilon} = \max(\min(\tilde{\varepsilon}_{\alpha\beta}), 10^{-5})$ . Aproveu-se empregar tal passo de tempo pois este é muito menor que os tempos característicos de todos os mecanismos físicos, garantindo que os tais sejam adequadamente observados na simulação. Outrossim, a inserção do parâmetro  $\tilde{\varepsilon}$  permite que as partículas tenham um número de passos de tempo suficiente para responder

às forças de curto alcance, frequentemente prevenindo sobreposições de partículas durante o movimento. Este procedimento gera uma malha de tempo desigualmente espaçada, por isto as posições e velocidade foram linearmente interpoladas após serem calculadas, anteriormente à análise estatística. Deste modo, simplificam-se as rotinas estatísticas e a apresentação dos dados.

Como o estudo se voltou para a análise do regime de  $St$  não nulo, fez-se necessário inverter a matriz mobilidade global. Para tal, utilizou-se a subrotina `dgesv`, da biblioteca *LAPACK*, que implementa um método do gradiente conjugado preconditionado.

# 7 MOVIMENTO DE UMA PARTÍCULA ISOLADA

## 7.1 Fluido Base sem Inércia

A fim de investigar as flutuações de velocidade em uma suspensão sujeita a interações hidrodinâmicas e movimento browniano, caracterizando, entre outros, a pressão de partículas, realizou-se uma série de testes em problemas com resultados conhecidos para validar o algoritmo, comparando aqueles obtidos por nosso código aos contidos na literatura. Parte das simulações realizadas se dedicou ao estudo do movimento de uma partícula isolada, para a qual não há efeito de interações hidrodinâmicas, em baixo número de Reynolds, analisando a influência dos números de Stokes e Péclet sobre a dinâmica desta. *A priori*, considerou-se uma partícula sem inércia, i.e.,  $St = 0$ , pretendendo vislumbrar o papel que a sedimentação desempenha no sistema. A figura (25) ilustra uma trajetória estocástica típica de nossas simulações para a conjuntura referida.

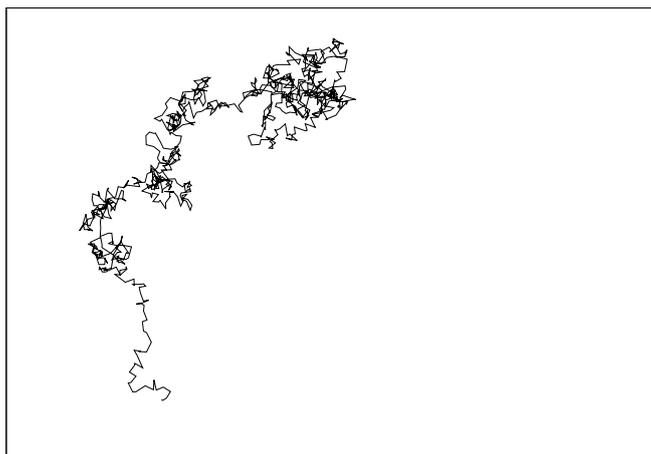
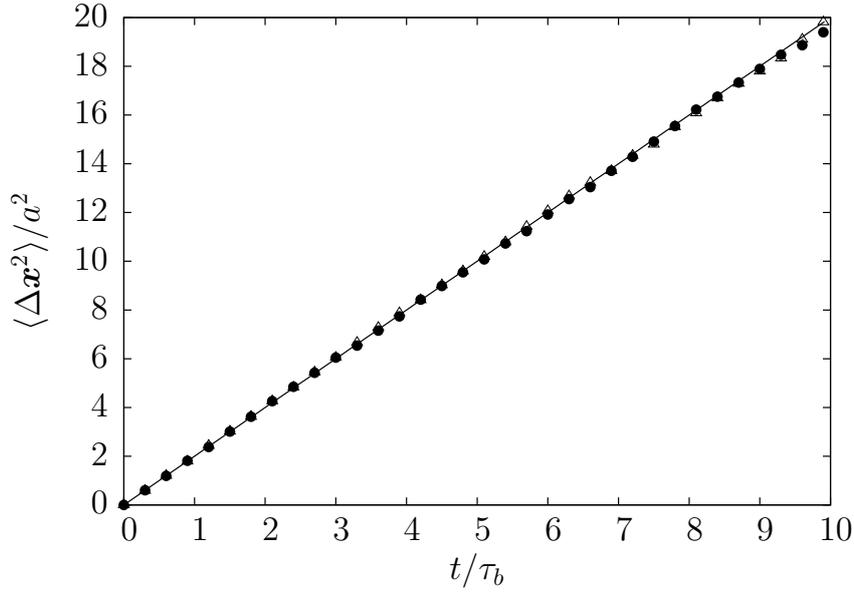
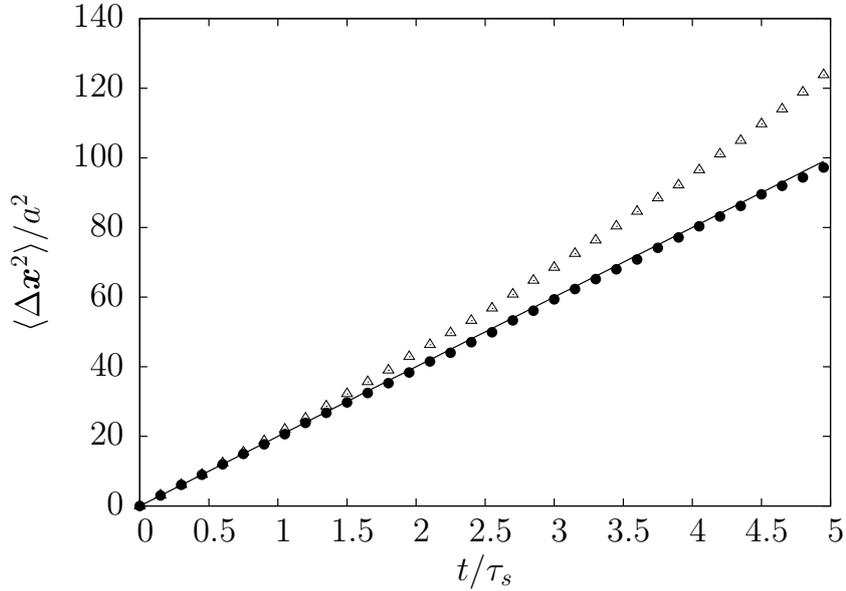


Figura 25 – Trajetória estocástica típica de uma partícula isolada sedimentando em movimento browniano, determinada computacionalmente para  $St = 0$  e  $Pe = 1$ .

O primeiro parâmetro examinado foi o deslocamento quadrático médio em função do tempo, como mostra a figura (26). No movimento puramente browniano, i.e.  $Pe = 0$ , observou-se com exatidão a linearidade dessa variável com o tempo, em pleno acordo



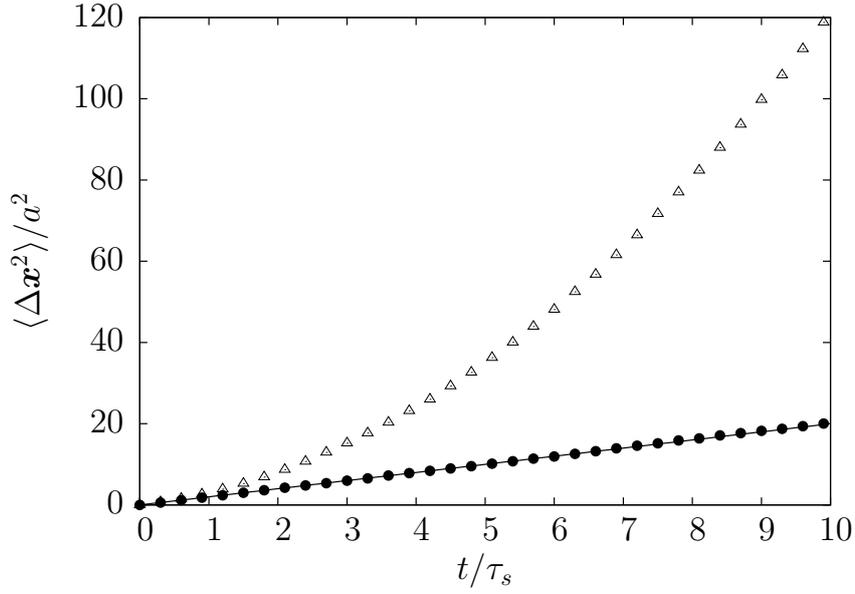
(a)  $Pe = 0$ .



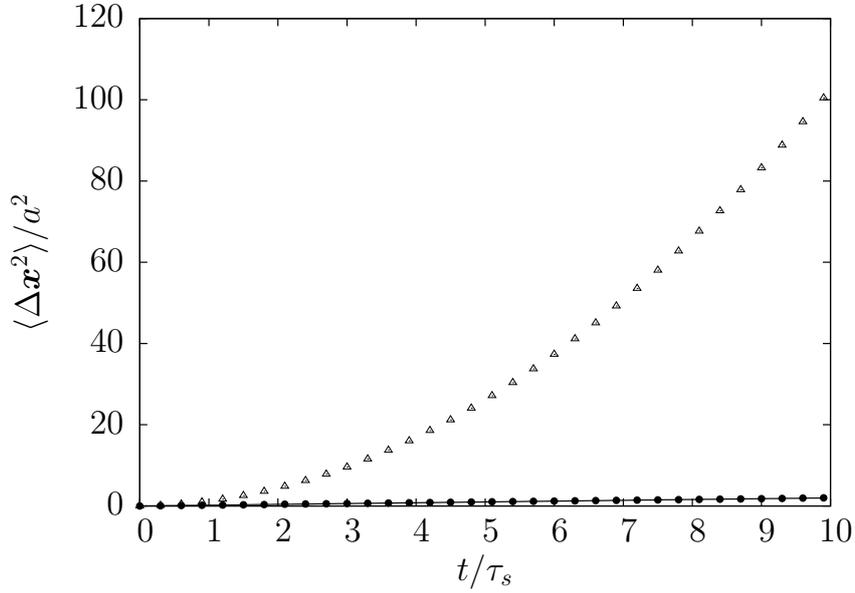
(b)  $Pe = 0, 1$ .

com o argumento de Einstein, expresso pela equação (2.154). Nota-se que, à medida que  $Pe$  aumenta, a sedimentação passa a desempenhar um papel mais importante sobre o deslocamento quadrático médio, introduzindo um efeito determinístico sobre este. Nesse caso, percebe-se um deslocamento quadrático médio paralelo à gravidade tendendo a um comportamento parabólico quando  $Pe$  aumenta, característico de um movimento retilíneo uniforme, enquanto permanece linear na direção ortogonal, não sendo afetado. Note que, em todos os casos, para a direção perpendicular à gravidade, a difusividade, calculada como metade do coeficiente angular da reta obtida, coincide com a de Einstein-Stokes, que é expressa em forma adimensional por  $\tilde{D}^0 = Pe^{-1}$ .

No caso de partículas massivas, i.e.,  $St \neq 0$ , avalia-se a velocidade média da partícula isolada em função do tempo nas direções paralela e perpendicular à gravidade. Conforme a figura (27) indica, a componente da velocidade ortogonal à gravidade tem



(c)  $Pe = 1$ .



(d)  $Pe = 10$ .

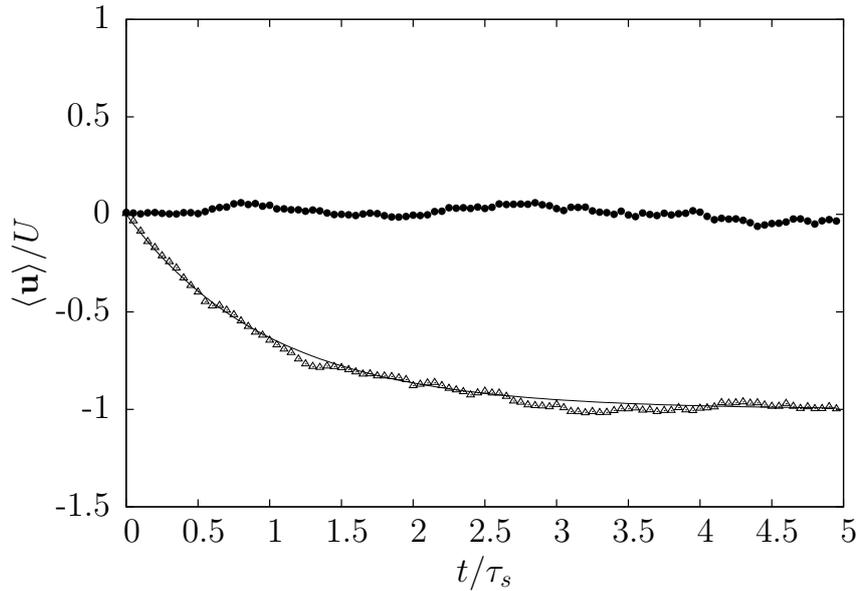
Figura 26 – Deslocamentos quadráticos médios de uma partícula isolada livre de inércia, i.e.  $St = 0$ , para diversos números de Péclet. As direções ortogonal e paralela à aceleração gravitacional são respectivamente representadas pelos símbolos ● e Δ. Argumento de Einstein - Eq. (2.154) - indicado por linha contínua (—).

média nula, enquanto a paralela tende à velocidade de Stokes quando o tempo aumenta, para todos os  $Pe$ . Observa-se uma maior dispersão dos resultados para baixos números de Péclet. Compararam-se ainda as velocidades determinadas numericamente à solução exata para uma partícula não browniana, obtendo excelente concordância para  $Pe$  alto. Para isto, note que no contexto referido, a Eq. (5.23) se resume a

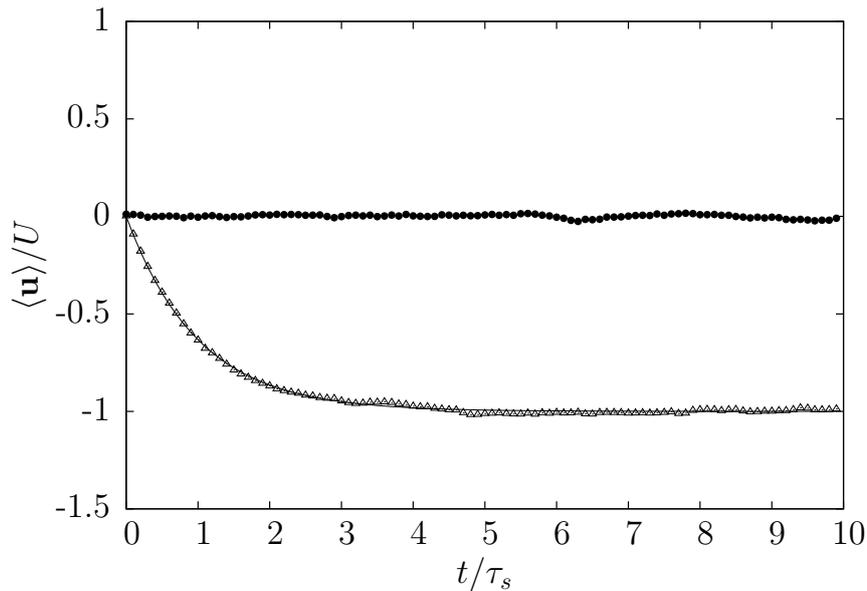
$$St \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\mathbf{u} - \hat{\mathbf{e}}_3, \quad (7.1)$$

cuja solução é

$$\mathbf{u}(t) = (e^{-t/St} - 1)\hat{\mathbf{e}}_3. \quad (7.2)$$

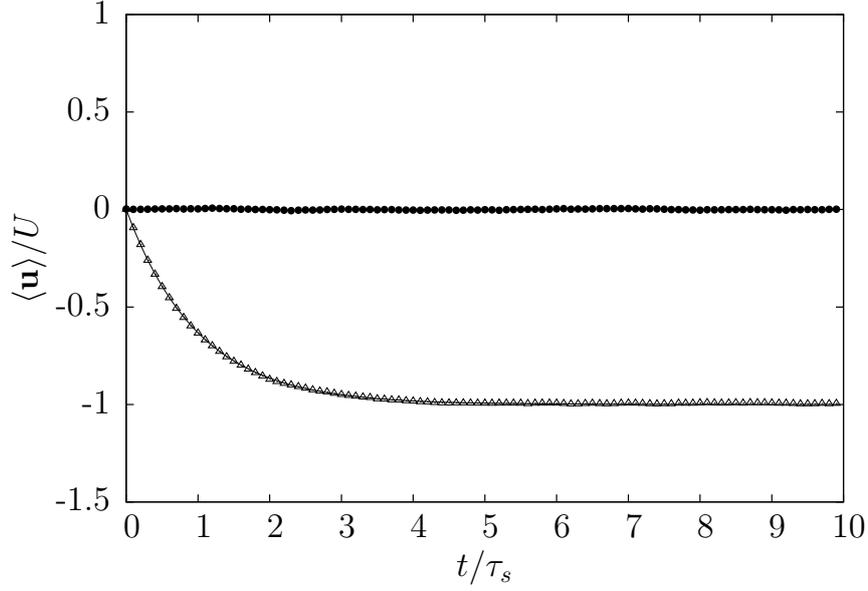


(a)  $Pe = 0, 1$ .

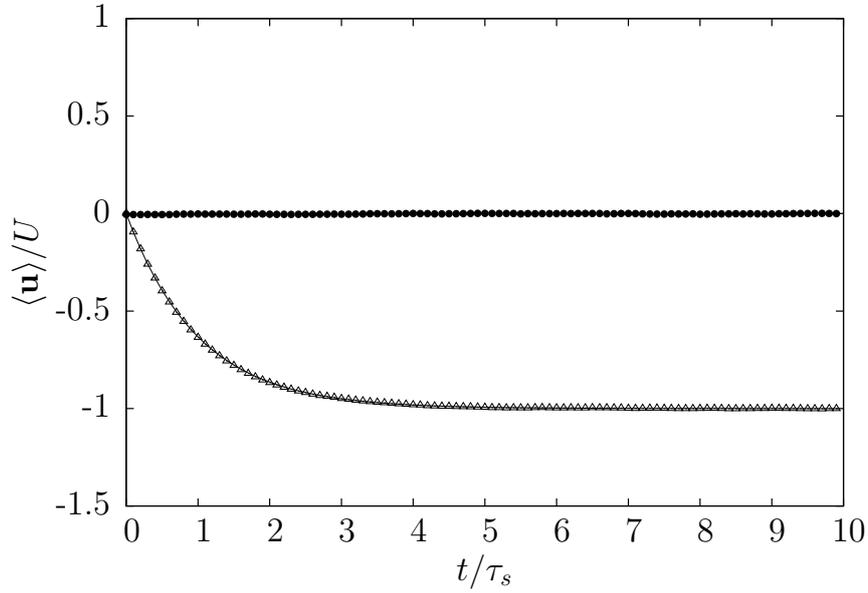


(b)  $Pe = 1$ .

Além da média, calcula-se também a variância das velocidades, um dos principais objetivos do presente estudo, para diferentes números de Stokes. A figura (28) exibe os resultados obtidos. Nota-se que essa variância atinge um platô em um tempo da ordem de  $St$ . Isto retrata com exatidão o papel do aumento de  $St$  sobre a dinâmica do sistema, qual seja inserir memória sobre as partículas, fazendo-as levar mais tempo para se adaptar às variações locais de velocidade do fluido. Neste sentido, importa caracterizar quantitativamente a dependência do platô das flutuações de velocidade com o número de Stokes, o que é feito na figura (29). Interessa determinar como a dependência funcional identificada nesta figura se altera quando são consideradas interações hidrodinâmicas entre partículas no comprimento crítico, seguindo a análise de escala dada pela Eq. (3.11).



(c)  $Pe = 10$ .

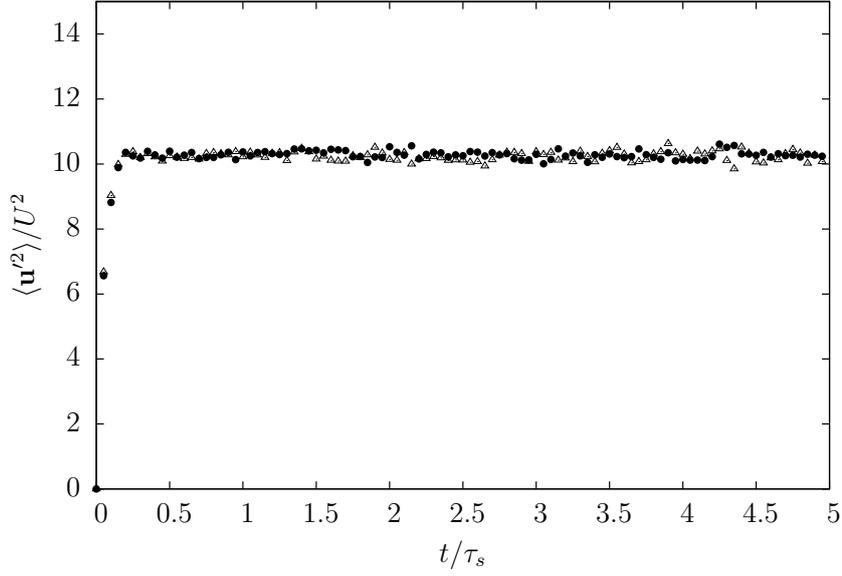


(d)  $Pe = 50$ .

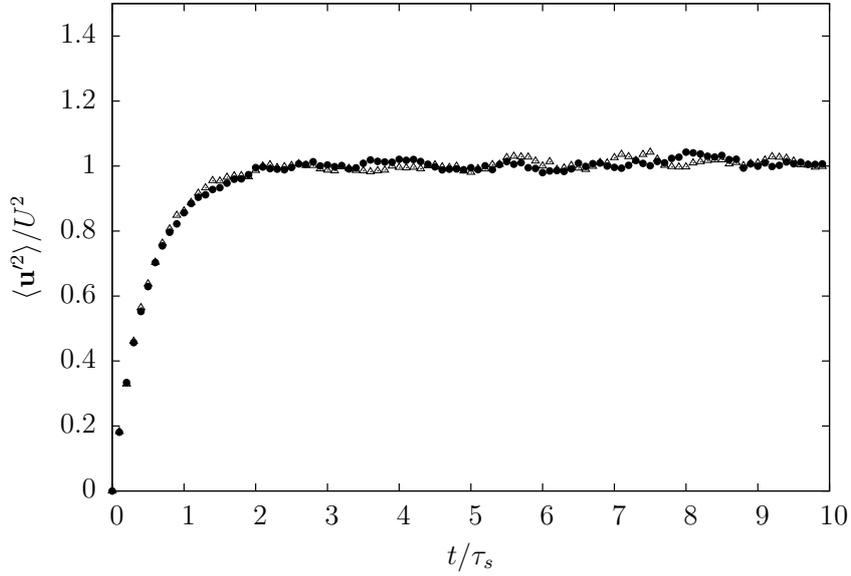
Figura 27 – Média da velocidade de uma partícula isolada massiva em função do tempo, para  $St = 1$  e diferentes  $Pe$ . As direções perpendicular e paralela à aceleração gravitacional são respectivamente denotadas por  $\bullet$  e  $\Delta$ . Velocidade média de uma partícula não browniana - equação (7.2) - denotada por linha contínua (—).

Ainda neste contexto, computou-se a autocorrelação normalizada das flutuações de velocidade de uma partícula isolada massiva, para  $St = 0, 1$ , em função do número de Péclet, como ilustra a figura (30). Para efeito de comparação, note que este caso é regido pelas Eqs. (2.147) e (2.150), as quais resultam, em forma adimensional, em

$$\tilde{\mathbf{C}}(\tilde{\tau}) = \frac{e^{-\tilde{\tau}/St}}{StPe} \mathbf{I}. \quad (7.3)$$



(a)  $St = 0, 1$ .



(b)  $St = 1$ .

Desta maneira, a autocorrelação normalizada,  $\tilde{\mathbf{c}}(\tilde{\tau}) = \tilde{\mathbf{C}}(\tilde{\tau})/\tilde{\mathbf{C}}(0)$ , assume a forma

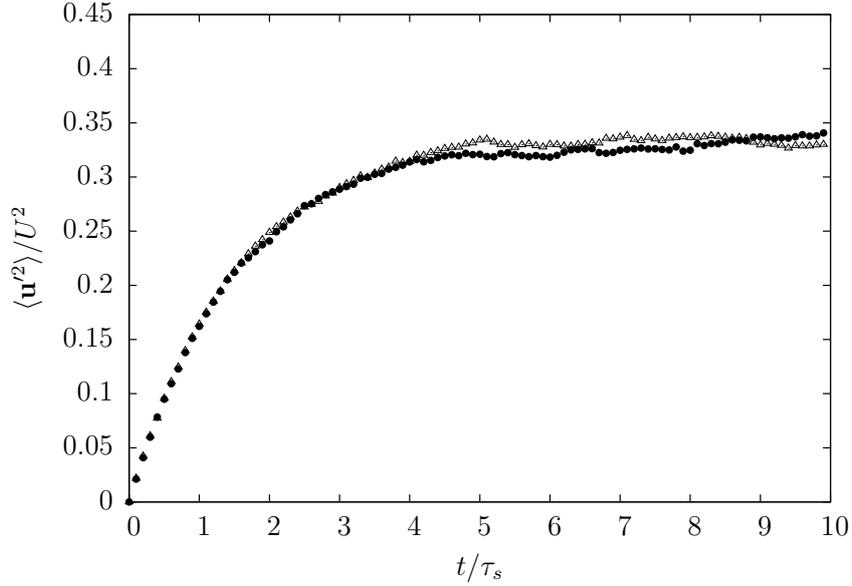
$$\tilde{\mathbf{C}}(\tilde{\tau}) = e^{-\tilde{\tau}/St} \mathbf{I}. \quad (7.4)$$

Observa-se que o tempo de correlação adimensional obtido da Eq. (7.4) é  $\tilde{\tau}_c = 1/St$ , não dependendo de  $Pe$ . De fato, é isto que se observa na figura (30), como corroboram os ajustes exponenciais utilizados.

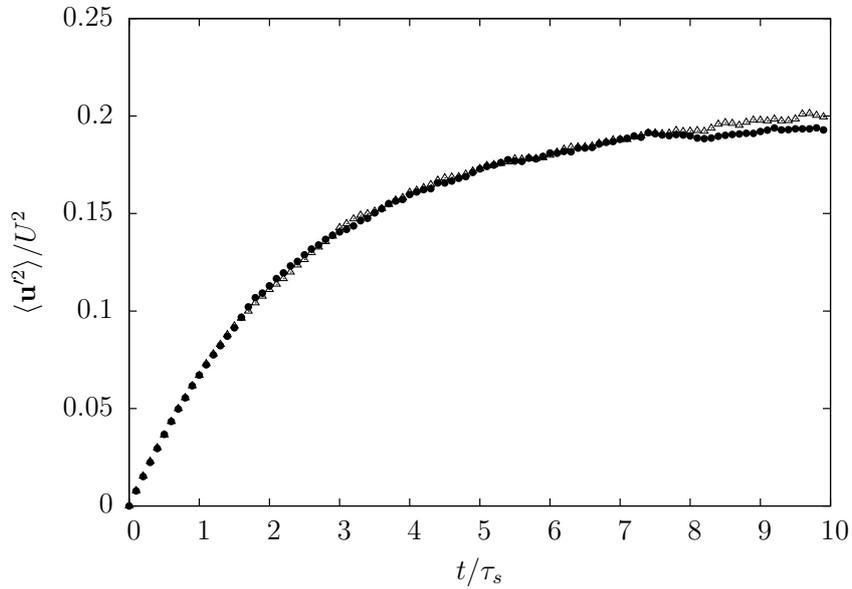
Calculou-se ainda a difusividade da partícula isolada por meio da expressão

$$\tilde{\mathbf{D}} = \lim_{\tilde{t} \rightarrow \infty} \tilde{\mathcal{D}}(\tilde{t}) = \int_0^{\tilde{t}} \tilde{\mathbf{C}}(\tilde{\tau}) d\tilde{\tau}. \quad (7.5)$$

A figura (31) contém as integrais da autocovariância de velocidades em função do tempo, para alguns números de Péclet. O platô da integral referida é o coeficiente de difusão. Observa-se que, de fato, a integral satura para tempos suficientemente grandes, tal que



(c)  $St = 3$ .



(d)  $St = 5$ .

Figura 28 – Variância das flutuações de velocidade de uma partícula isolada massiva em função do tempo, para  $Pe = 1$ . As direções perpendicular e paralela à aceleração gravitacional são respectivamente denotadas por • e  $\Delta$ .

é efetivamente possível caracterizar um coeficiente de difusão. Verifica-se ainda que não há distinção significativa entre a difusividade na direção paralela à gravidade, comparada à transversal. Ademais, vê-se que o coeficiente de difusão é reduzido à medida que  $Pe$  aumenta. Isto denota o domínio do mecanismo de sedimentação sobre a difusão browniana, que se torna quase inexistente para  $Pe \gg 1$ .

A fim de mostrar por outra perspectiva que o aumento de  $Pe$  está associado ao recrudescimento do efeito determinístico sobre o sistema, a figura (32) exhibe a autocorrelação normalizada *das velocidades*. Já a figura (33) mostra a integral da autocorrelação das velocidades. Vê-se que há uma clara anisotropia das tais autocorrelações, i.e., o domínio

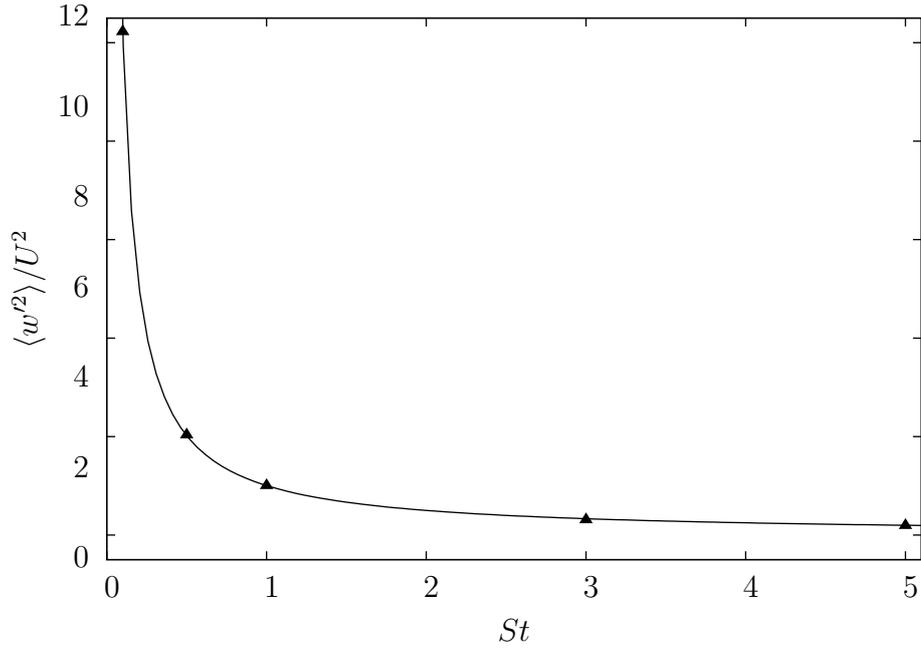
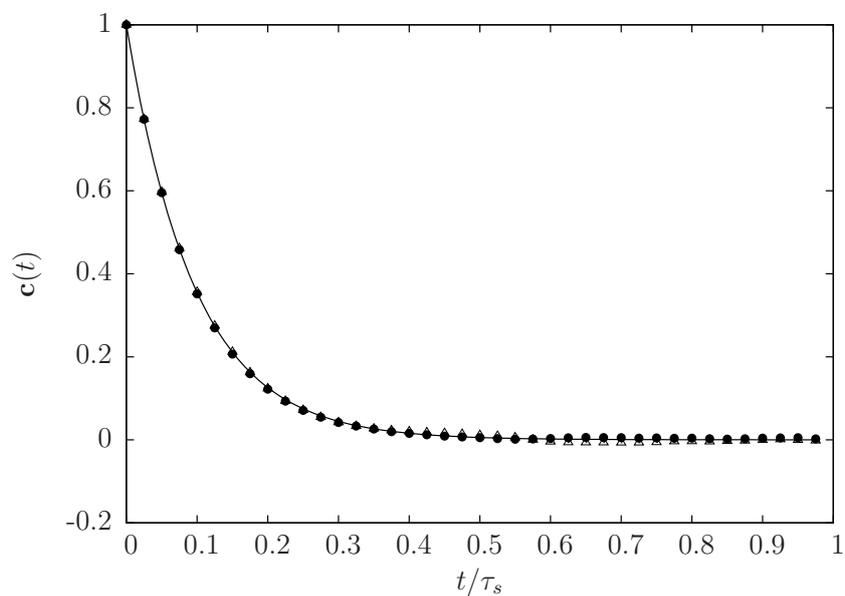
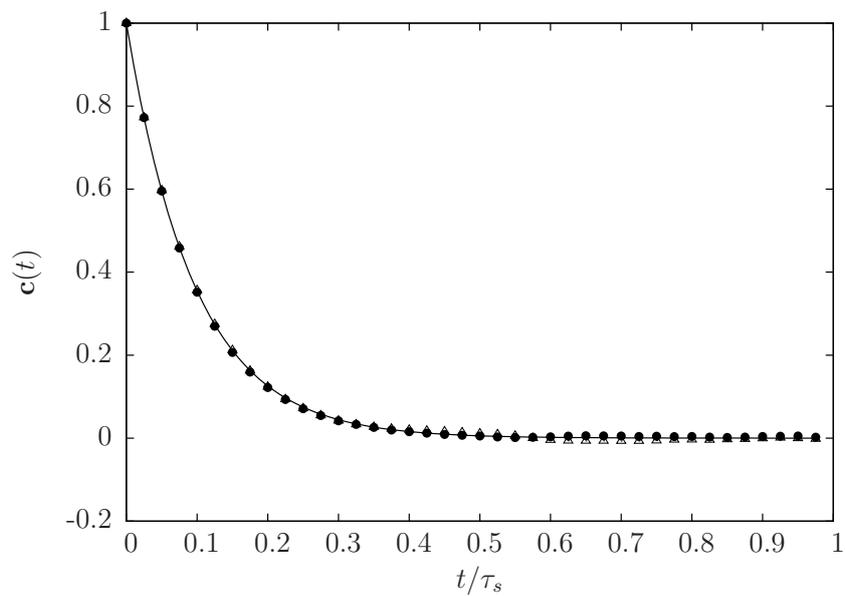


Figura 29 – Componente vertical da variância das flutuações de velocidade de uma partícula isolada massiva em função de  $St$ , para  $Pe = 1$ . Ajuste por uma lei de potência  $\langle w'^2 \rangle = aSt^b$ , com constantes  $a = 1,00$  e  $b = -1,00$ .

da força gravitacional injeta memória sobre o sistema, fazendo com que as velocidades na direção em que atua estejam mais relacionadas para instantes distintos. Desta forma, a integral da variável referida sequer converge no tempo observado na simulação. Nota-se ainda que o tempo de correlação extraído na figura (32) é aproximadamente o número de Stokes da simulação, em conformidade com a Eq. (7.4).

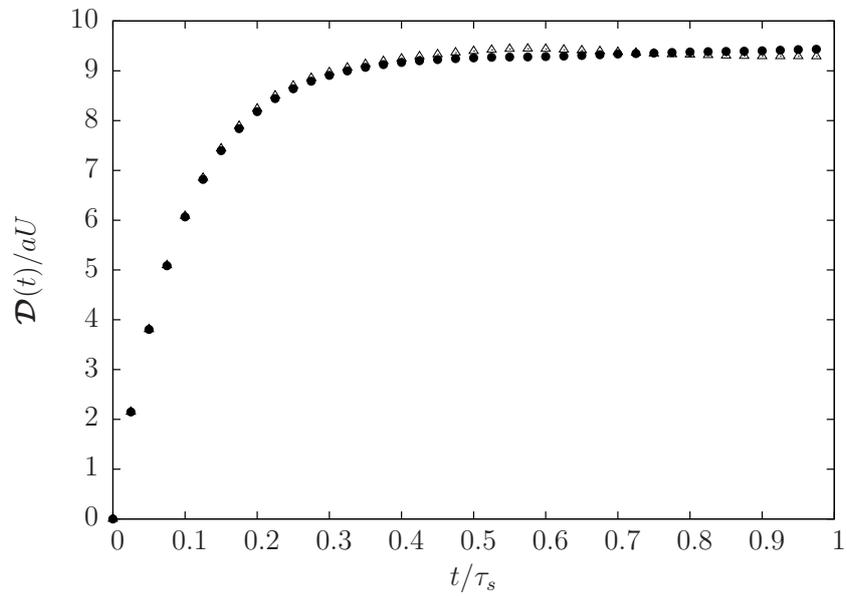


(a)  $Pe = 0, 1$ . Ajuste exponencial para a componente vertical:  $c(t) = \exp(-t/\tau_c)$ ,  $\tau_c = 0,0964 \pm 0,0002$ .

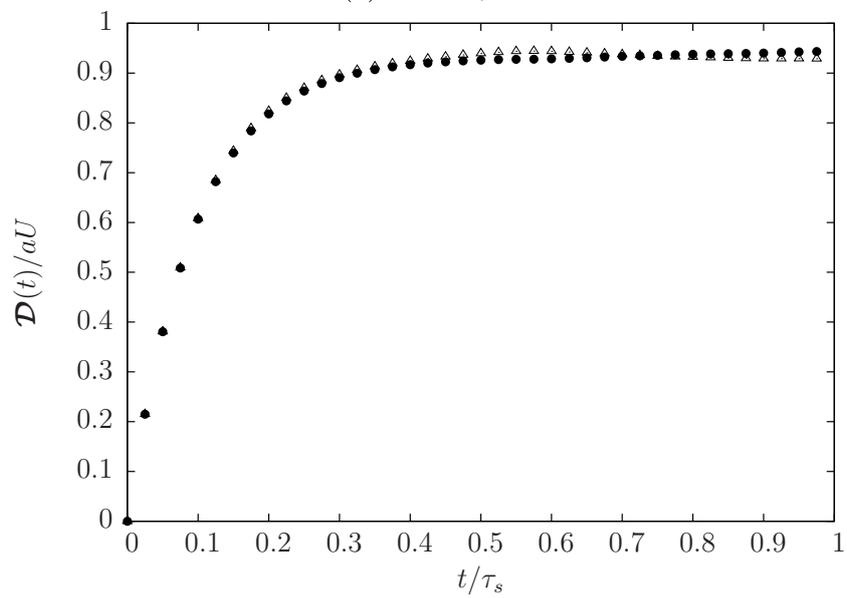


(b)  $Pe = 10$ . Ajuste exponencial para a componente vertical:  $c(t) = \exp(-t/\tau_c)$ ,  $\tau_c = 0,0964 \pm 0,0002$ .

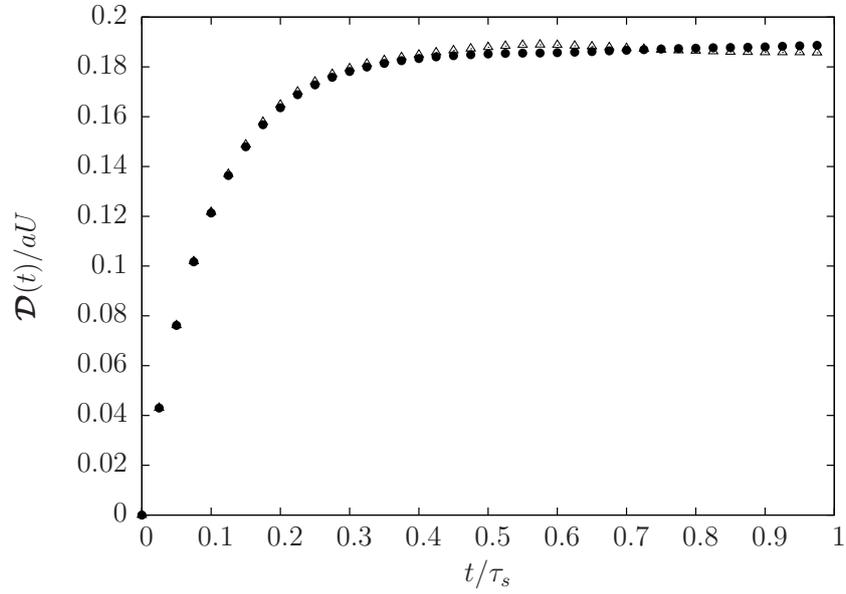
Figura 30 – Autocorrelação normalizada das flutuações de velocidade em função de  $Pe$ , para  $St = 0, 1$ . As direções perpendicular e paralela à aceleração gravitacional são respectivamente denotadas por  $\bullet$  e  $\Delta$ . Ajustes exponenciais indicados por linhas contínuas (—).



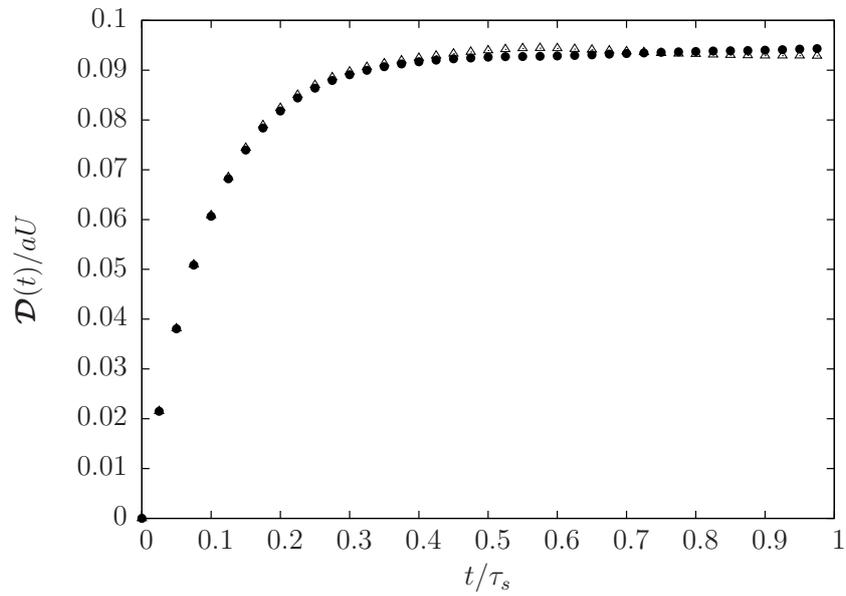
(a)  $Pe = 0, 1$ .



(b)  $Pe = 1$ .



(c)  $Pe = 5$ .



(d)  $Pe = 10$ .

Figura 31 – Coeficiente de difusão de uma partícula isolada para  $St = 0,1$  em função de  $Pe$ . As direções perpendicular e paralela à aceleração gravitacional são respectivamente denotadas por  $\bullet$  e  $\Delta$ .

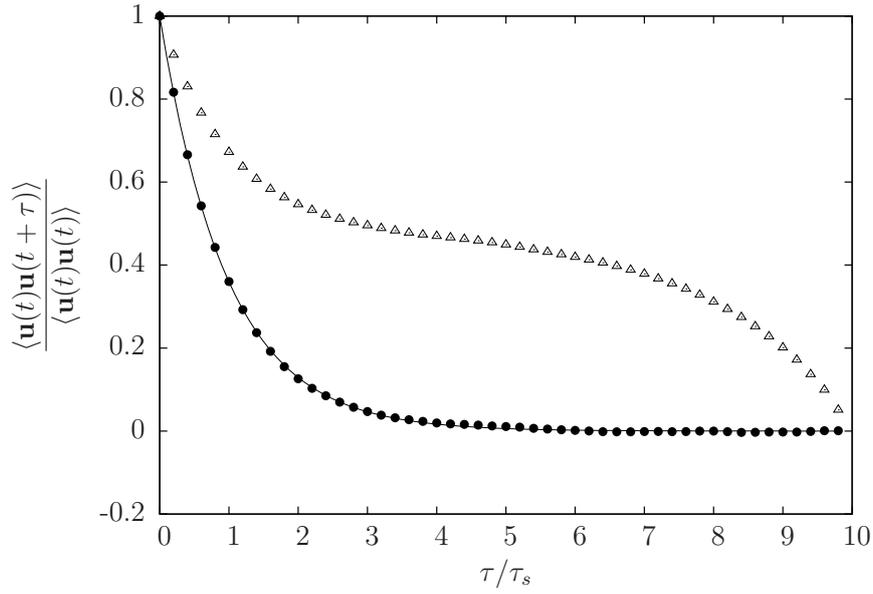


Figura 32 – Autocorrelação normalizada das velocidades em função do tempo, para  $St = 1$  e  $Pe = 1$ . As direções perpendicular e paralela à aceleração gravitacional são respectivamente denotadas por • e  $\Delta$ . Ajuste exponencial da direção ortogonal à gravidade:  $f(\tau) = \exp(-t/\tau_c)$ , com  $\tau_c = 0,977 \pm 0,001$ .

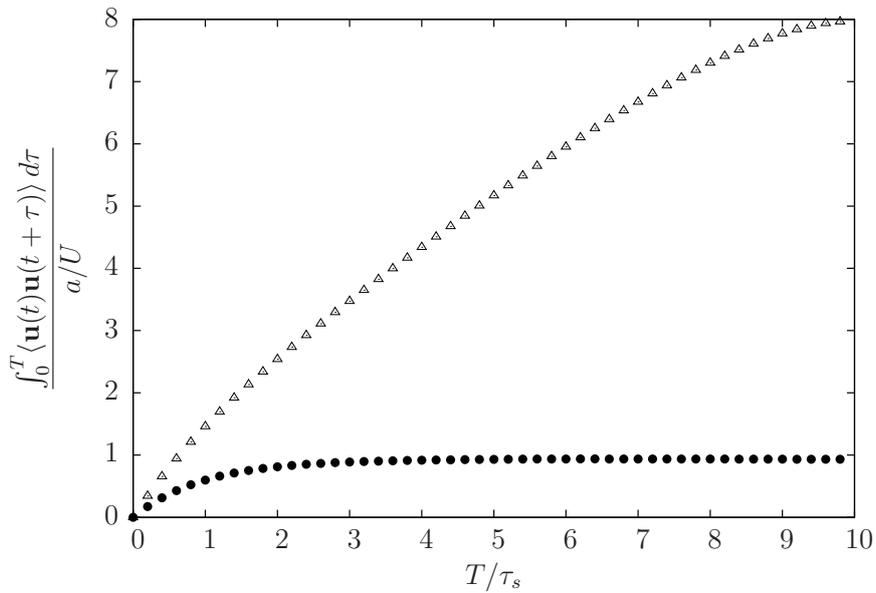


Figura 33 – Integral da autocorrelação das velocidades em função do limite superior de integração, para  $St = 1$  e  $Pe = 1$ . As direções perpendicular e paralela à aceleração gravitacional são respectivamente denotadas por • e  $\Delta$ .

# 8 SIMULAÇÃO DIRETA DE SUSPENSÕES

Este capítulo consiste no sumário das simulações numéricas lagrangeanas, efetuadas visando à caracterização das flutuações de velocidade em suspensões gás-sólido, e os testes realizados para validá-las.

A validação do modelo de interação hidrodinâmica teve por objeto, em princípio, o movimento de partículas com massa desprezível e raios iguais. Nesse caso, inquirimos acerca do impacto das interações hidrodinâmicas sobre características distintivas dos escoamentos de Stokes, notadamente sua linearidade e reversibilidade, cf. seção (2.2.5). Em um primeiro teste, foram consideradas duas partículas verticalmente dispostas, inicialmente a uma distância  $r = 10a$ . A figura (34) ilustra o caso simulado. Com efeito, exibiremos a solução exata dessa interação, admitindo que as partículas sejam pontuais, e a compararemos com os resultados das presentes simulações.

Dado que as partículas não possuem inércia, a soma das forças sobre cada qual é nula. Portanto,  $\mathbf{f}_\alpha^h = -\mathbf{f}_\alpha^{nh}$ . Admite-se que o peso líquido é a única força não hidrodinâmica que atua sobre as partículas e que as tais são idênticas. Como a velocidade de Stokes  $\mathbf{U}_\alpha$  é definida a partir de  $6\pi\mu a\mathbf{U}_\alpha = 4\pi a_\alpha^3 \Delta\rho_\alpha \mathbf{g}/3$ , tem-se

$$\mathbf{f}_\alpha^h = -6\pi\mu a\mathbf{U}, \quad \alpha = 1, 2, \quad (8.1)$$

em que  $\mathbf{U}$  é a velocidade de Stokes de ambas.

Empregando a formulação de mobilidade, Eq. (2.139),

$$\mathbf{u}_1 = -\mathbf{M}_{11} \cdot \mathbf{f}_1^h - \mathbf{M}_{12} \cdot \mathbf{f}_2^h. \quad (8.2)$$

A automobilidade para partículas esféricas, que advém do arrasto de Stokes, é

$$\mathbf{M}_{11} = \frac{\mathbf{I}}{6\pi\mu a}, \quad (8.3)$$

enquanto a mobilidade entre pares, originada da hipótese de partículas pontuais, segue da Eq. (5.6):

$$\mathbf{M}_{12} = \frac{1}{8\pi\mu r} (\mathbf{I} + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}). \quad (8.4)$$

Para partículas verticalmente dispostas cuja distância entre centros é  $r$ ,  $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{e}}_3$ . Consequentemente, substituindo as Eqs. (8.1), (8.3) e (8.4) em (8.2), tem-se

$$\mathbf{u}_1 = \left(1 + \frac{3a}{2r}\right) \mathbf{U}. \quad (8.5)$$

De modo inteiramente análogo, mostra-se que

$$\mathbf{u}_2 = \left(1 + \frac{3a}{2r}\right) \mathbf{U}. \quad (8.6)$$

Nota-se que as velocidades das partículas são iguais e independem do tempo, indicando que a linearidade, reversibilidade e instantaneidade dos escoamentos de Stokes são preservadas neste caso, apesar do acoplamento das equações governantes. Ademais, determinou-se uma expressão explícita para a velocidade, que pode ser comparada com os resultados da simulação.

De fato, o código numérico forneceu os dados da figura (35) e da tabela (4). Naquela, verificou-se a manutenção das distâncias entre as partículas e nesta, as velocidades previstas pelas Eqs. (8.5) e (8.6), auferindo credibilidade ao algoritmo desenvolvido.

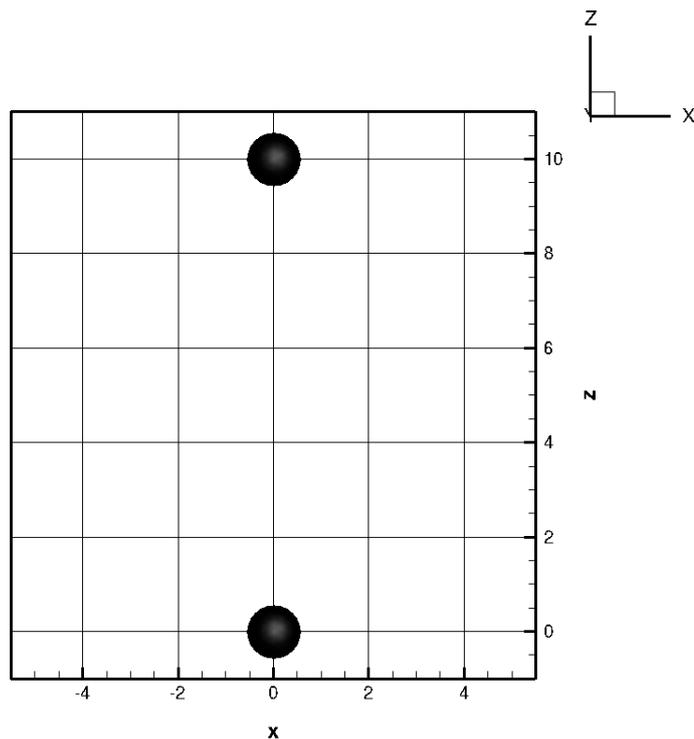


Figura 34 – Esquema da simulação de interação hidrodinâmica entre duas esferas.

Verificou-se ainda a quebra de simetria induzida pelo acoplamento das equações governantes para o caso da sedimentação de três partículas com configuração inicial de um triângulo equilátero cujos lados têm comprimento  $10a$ . A figura (36) ilustra o caso referido. De fato, vê-se que as partículas da base do triângulo se afastam à medida que sedimentam.

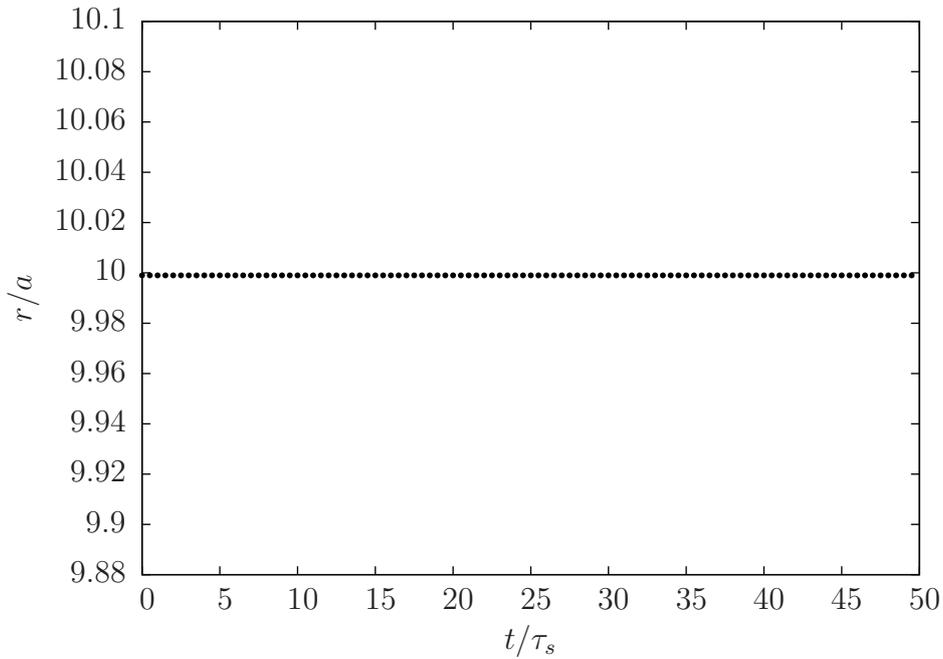


Figura 35 – Distância entre duas partículas.

Tabela 4 – Comparação das velocidades terminais de sedimentação obtidas pelo código computacional ( $U_t/U$ ) com as previstas pelas Eqs. (8.5) e (8.6), ( $u(r/a)$ ).

$r/a$	$u(r/a)$	$U_t/U$
4,0	1,375	1,37500
6,0	1,25	1,25000
8,0	1,1875	1,18750

## 8.1 Aglomerado de Partículas

Esta seção se baseia nas discussões de (NITSCHKE; BATCHELOR, 1997; ABADE; CUNHA, 2007) sobre a evolução temporal de um aglomerado de partículas<sup>1</sup> e procura reproduzir o movimento determinado por tais autores, de forma a validar a presente simulação. O estudo da sedimentação dessas estruturas é particularmente interessante, pois se observa um fenômeno de migração de partículas não caracterizável por uma difusividade para fora dessa região, i.e., como a razão de um fluxo por um gradiente de concentração. Com efeito, a concentração não é contínua na interface, haja vista que o interior do aglomerado contém partículas, diversamente de seu exterior. Esta difusão ocorre em escalas de raios de partículas notadamente superiores à do movimento browniano, não sendo este o mecanismo responsável pelo fenômeno. Com efeito, tal migração é provocada pela interação hidrodinâmica viscosa entre as partículas, que as faz percorrer trajetórias estocásticas.

Neste contexto, consideraremos um sistema determinado por uma interface esférica móvel que separa uma região interna, composta de uma dispersão randômica de partículas

<sup>1</sup> Designado por *blob* na língua inglesa.

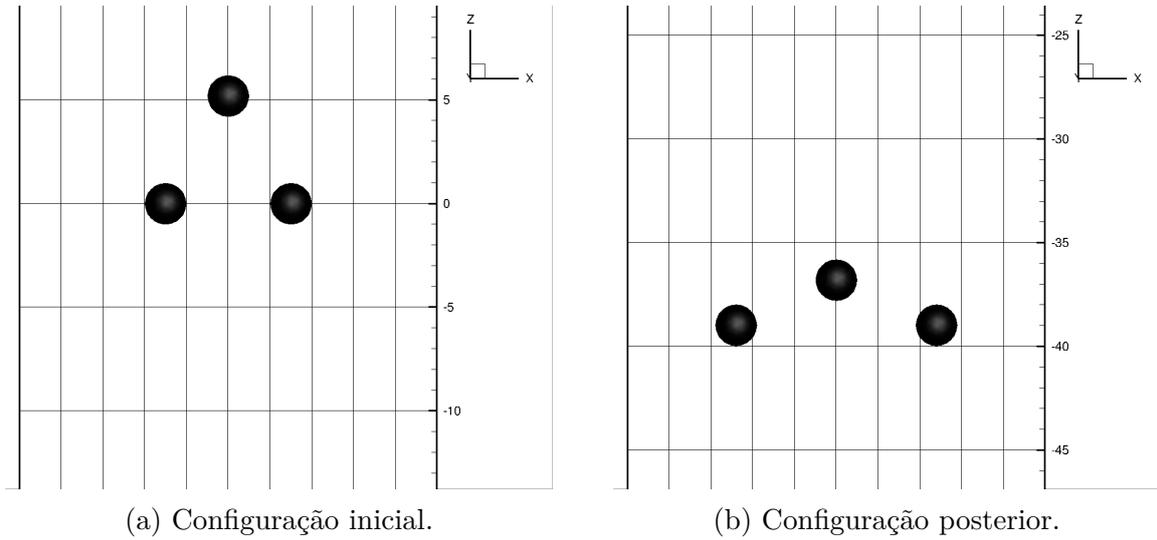


Figura 36 – Esquema da simulação da interação hidrodinâmica entre três esferas com a configuração inicial de um triângulo equilátero.

em fluido com fração volumétrica prescrita, da externa, contendo apenas fluido. Inquirimos acerca da evolução temporal da concentração de partículas no aglomerado. É, então, conveniente defini-lo esférico, pois seu formato não variará significativamente ao longo do tempo, permitindo uma quantificação mais precisa do processo de migração.

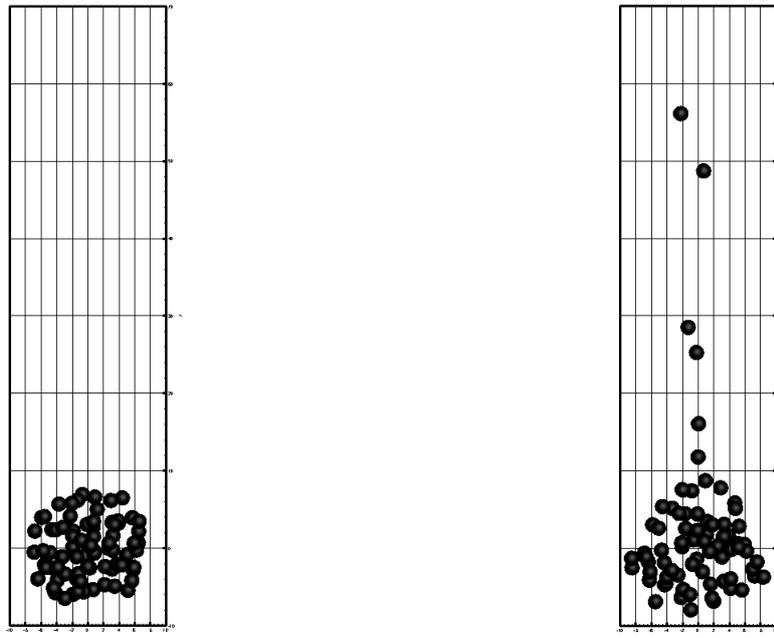
Optou-se por determinar as trajetórias das partículas para uma condição de fração volumétrica inicial de 15%. Nesta concentração não se pode mais assumir regime diluído, tal que a modelagem de partículas pontuais não é válida. Então, empregou-se o tensor de mobilidade de Rotne-Prager (ROTNE; PRAGER, 1969),

$$\tilde{\mathbf{M}}_{\alpha\beta} = \frac{3}{4} \left[ \frac{1}{\tilde{r}} (\mathbf{1} + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}) + \frac{(\lambda_\alpha^2 + \lambda_\beta^2)}{3\tilde{r}^3} (\mathbf{1} - 3\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}) \right]. \quad (8.7)$$

que contabiliza apenas os distúrbios de primeira ordem que as partículas exercem sobre suas vizinhas. Estipulou-se um raio adimensional do aglomerado  $R = 8$ , incorrendo num total de 76 partículas inicialmente contidas neste. A configuração inicial foi gerada de tal modo que não houvesse sobreposição<sup>2</sup> de partículas.

A figura (37) mostra uma evolução temporal típica da configuração das partículas, a partir da qual se identifica a topologia variável do aglomerado, ou seja, a perda de partículas que se acumulam na esteira formada a jusante deste. Efetivamente, este problema apresenta similaridades ao de uma gota mais densa sedimentando em um fluido de menor massa específica, no sentido de que se verifica uma região de recirculação nas linhas de corrente formadas no interior da gota, exibida pela figura (38). O fenômeno que provoca a perda de partículas desse domínio é justamente a interação hidrodinâmica, que gera dispersão, desviando as partículas inicialmente contidas nas linhas de corrente interiores ao aglomerado e conduzindo-as para a região externa, na qual há um movimento ascendente relativamente à gota. A observação desse fenômeno por meio do código criado é um indício de validade do mesmo.

<sup>2</sup> Referida na língua inglesa por *overlap*.



(a) Configuração inicial do *blob* para  $\tilde{t} = 0$ .

(b) Configuração do *blob* após  $\tilde{t} = 3$ .

Figura 37 – Evolução temporal do aglomerado de partículas.

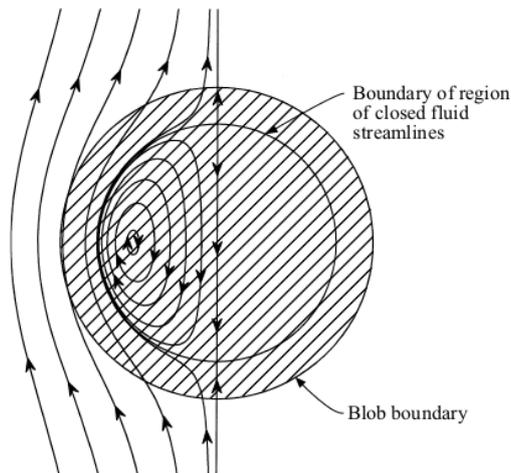


Figura 38 – Linhas de corrente em uma gota mais densa que o fluido base (NITSCHKE; BATCHELOR, 1997).

## 8.2 Suspensão Monodispersa

Ulteriormente à validação dos modelos de interação hidrodinâmica e movimento browniano, contidas nas seções precedentes, examinou-se a dinâmica de suspensões monodispersas (cujas partículas têm raios iguais) sujeitas a ambos os mecanismos simultaneamente. Intentou-se determinar as propriedades estatísticas da suspensão, em particular a variância das flutuações de velocidade, a autocorrelação e a difusividade, explorando a dependência destas com os parâmetros adimensionais da simulação, notadamente os números de Stokes e Péclet, para uma intensidade do gradiente de concentração dada, conforme os procedimentos descritos no capítulo (6).

Utilizou-se um domínio numérico prismático de base quadrada, cujas dimensões foram definidas como  $L_1 = L_2 = L_3/3 = 25a$ , sendo  $L_i$  o comprimento da aresta paralela ao vetor  $\hat{e}_i$ . Aplicou-se estratificação vertical linear do número de partículas sobre a condição inicial, como ilustra a figura (39).

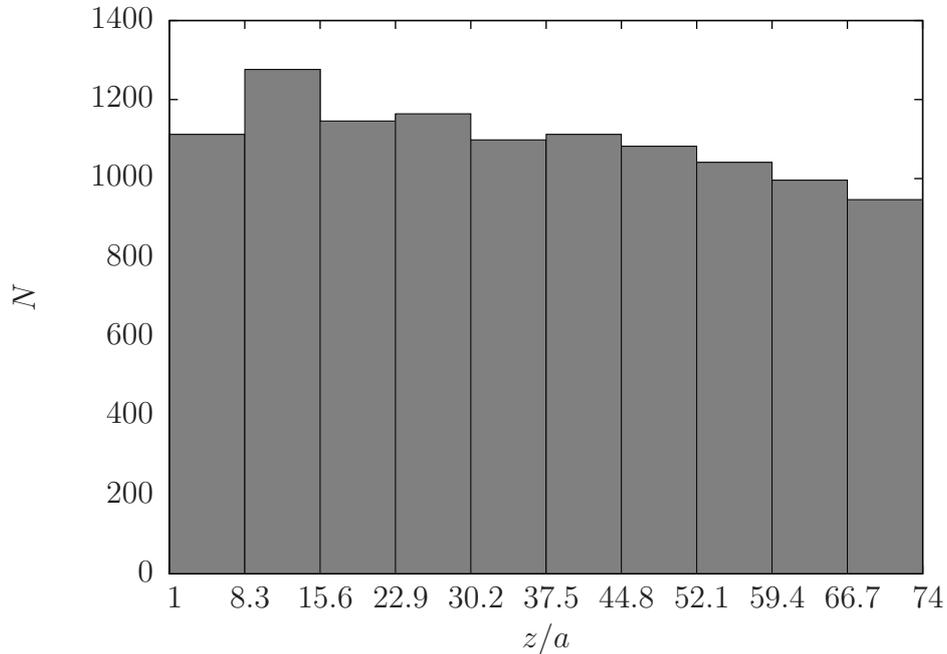
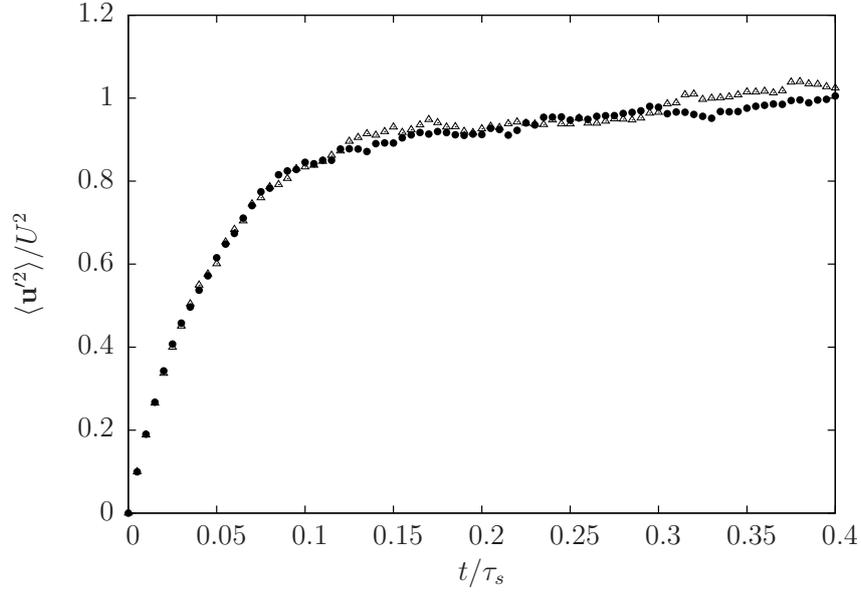


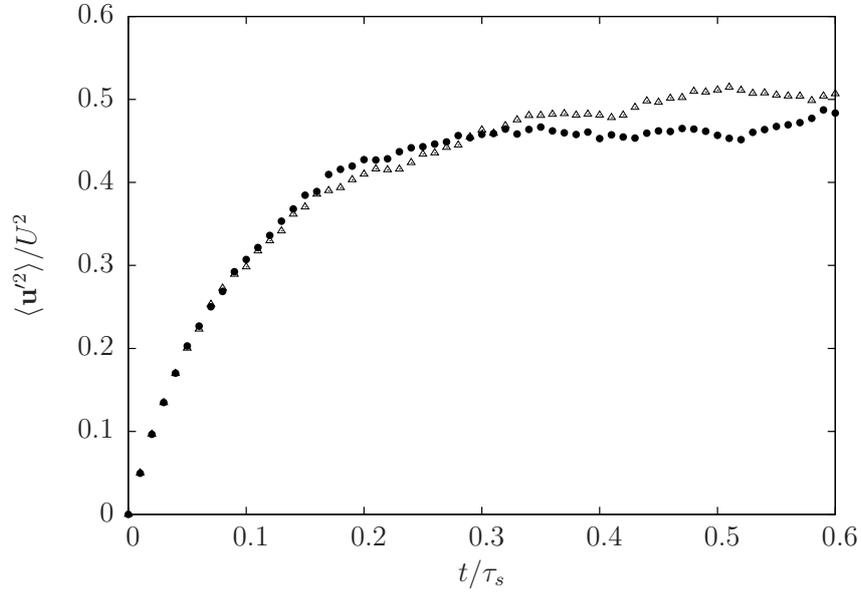
Figura 39 – Histograma do número de partículas na condição inicial em função da altura no domínio numérico, para todas as realizações da simulação numérica. Foram utilizados um número de realizações  $n_r = 100$ , número de partículas  $N = 111$  e  $\lambda = 0,004$ .

As variáveis observadas dividem-se naturalmente em dois grupos: de curto tempo e de longo tempo. No primeiro, enquadra-se a variância das flutuações de velocidade, exibida na figura (40). Observa-se que esta atinge um patamar próximo à velocidade de Stokes, portanto ambas têm mesma ordem para  $St \sim 0,1$ , como indicam estudos recentes, cf. (GUAZZELLI; HINCH, 2011), e a análise de escala dada pela Eq. (3.11). A convergência da variância com o número de realizações é atestada pela figura (41). A média das flutuações de velocidade cruzadas, que como se depreende da Eq. (3.33) está associada à viscosidade de partículas, é expressa pela Fig. (42). Nota-se que as tais de fato têm ordem menor que a variância das flutuações de velocidade, justificando a proeminência da pressão de partículas na análise em curso.

A autocorrelação das flutuações de velocidade e a difusividade, ambas variáveis de longo tempo, são exibidas nas figuras (43) e (44). Aquela mostra a anisotropia entre as autocorrelações perpendicular e paralela à aceleração gravitacional, i.e., exhibe a injeção de memória sobre o sistema devida à gravidade, resultando em tempos de relaxação mais longos nesta direção. Na segunda figura, pode-se identificar o mesmo fenômeno, notando que este provoca uma difusividade superior associada à direção da gravidade. A Fig. (45) mostra que, na faixa analisada, as difusividades não variam significativamente com o número de Stokes. Observando-se que o tempo de correlação,  $\tilde{\tau}_c = \tilde{D}_{ii}/\langle \tilde{u}_i^2 \rangle$ , é



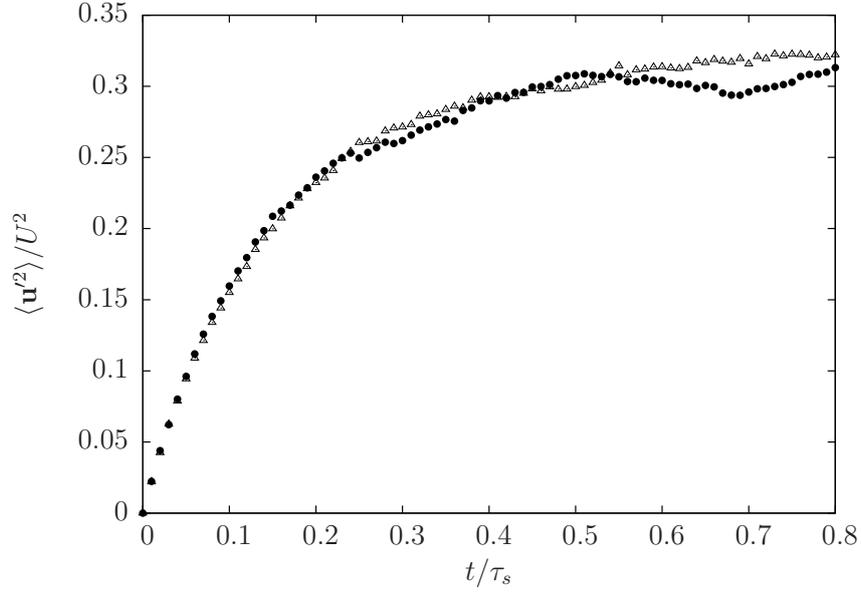
(a)  $St=0,1$ .



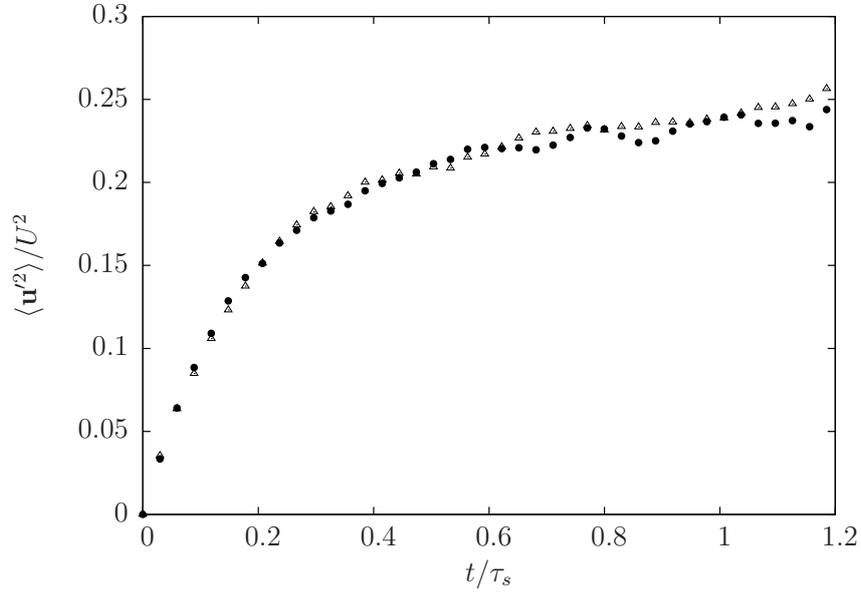
(b)  $St=0,2$ .

substancialmente mais elevado que o de relaxação,  $\tilde{\tau}_R = St$ , argumenta-se que os efeitos inerciais não exercem influência relevante sobre as estatísticas de longo tempo devido à separação entre as escalas de tempo de ambos os mecanismos. Conclui-se que para a análise da variação de propriedades com a inércia das partículas, apenas importam as estatísticas de curto tempo. Já para a dependência com a fração volumétrica, é interessante explorar também as variáveis de longo tempo, pois esta exerce direta influência sobre as interações hidrodinâmicas entre as partículas, provocando um mecanismo de difusão característico ao não equilíbrio, diverso do browniano.

A figura (46) exhibe o decréscimo da variâncias das flutuações de velocidade com o número de Stokes, fornecendo uma dependência  $St^{-1}$ , diversa da prevista pela Eq. (3.11). Tal divergência pode ser atribuída às limitações da simulação desenvolvida, visto que a mesma emprega um número de partículas aquém do que seria necessário para se obter um comprimento crítico, a partir do qual apenas forças de inércia equilibram flutuações



(c)  $St=0,3$ .

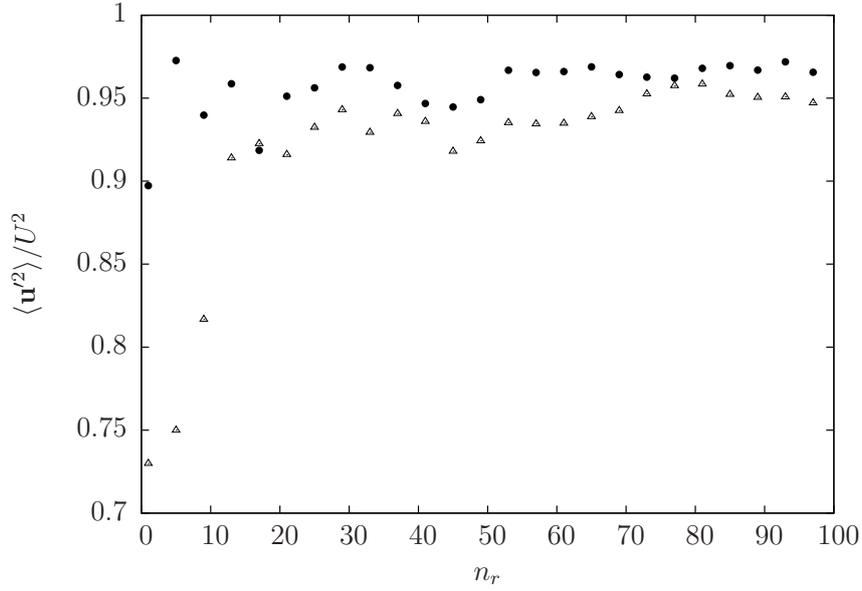


(d)  $St=0,4$ .

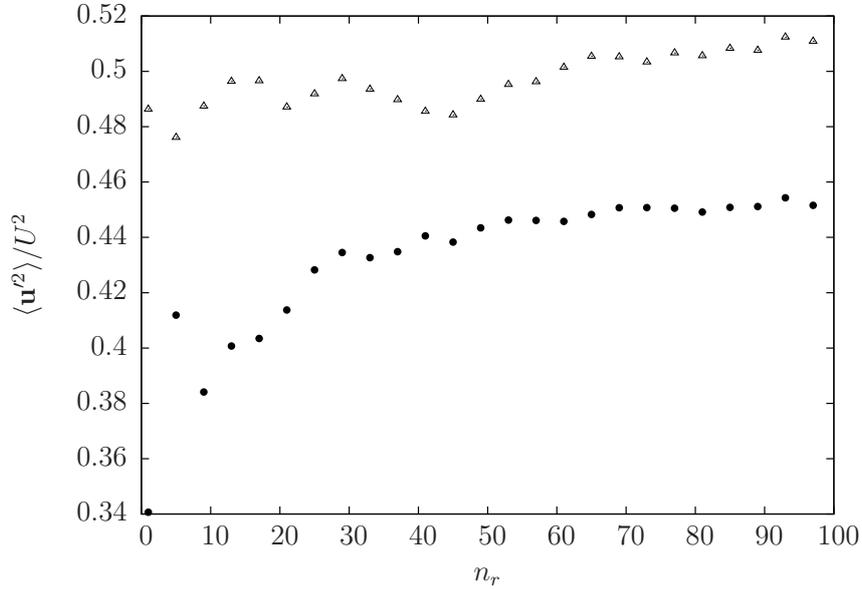
Figura 40 – Variância das flutuações de velocidade em função do tempo, nas direções paralela ( $\Delta$ ) e ortogonal ( $\bullet$ ) à aceleração gravitacional, para  $Pe = 10$ ,  $\phi = 0,01$ ,  $N = 111$  e  $\lambda = 0,004$ . Simulações na presença de interações hidrodinâmicas.

no número de densidade. Na presente simulação, tem-se efeitos viscosos de arrasto e interações hidrodinâmicas influenciando as flutuações de velocidade. De fato, a análise de escala dada na Eq. (3.9) determina um comprimento crítico  $l_c/a \approx 464$  para  $St = 0,1$  e  $\phi = 0,01$ . Isto indica que se deve tentar explorar a região de maiores números de Stokes e frações volumétricas.

Nota-se que, para um comprimento  $l_c/a = 25$  e fração volumétrica  $\phi = 0,01$ , compatíveis com o adotado nas simulação precedentes, segue da Eq. (3.9) que se deve ter um número de Stokes  $St = 8$ . Visando atingir tal regime, foram realizadas simulações entre  $St = 8$  e  $St = 10$ , determinando das tais a variância das flutuações de velocidade e a pressão de partículas, expressas respectivamente pelas Figs. (47) e (48). Enfatiza-se

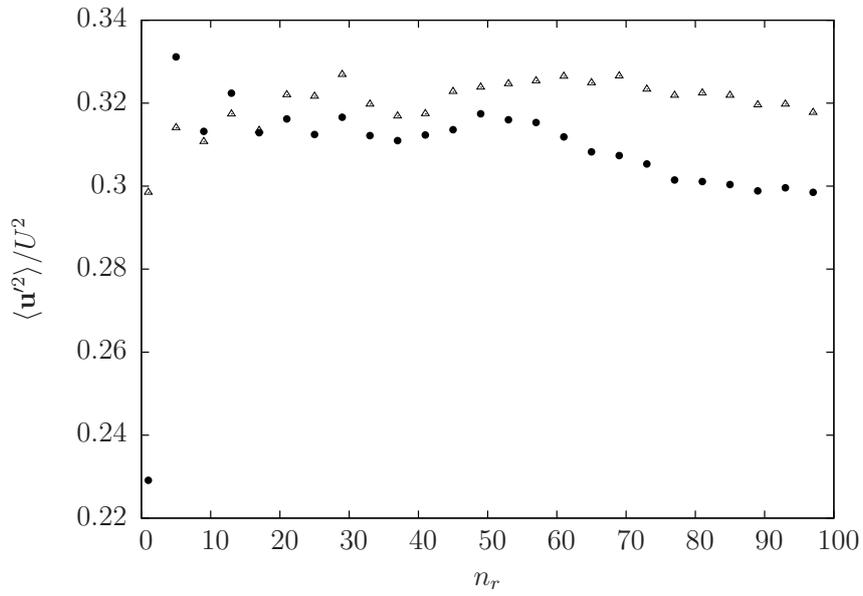


(a)  $St=0,1$ .

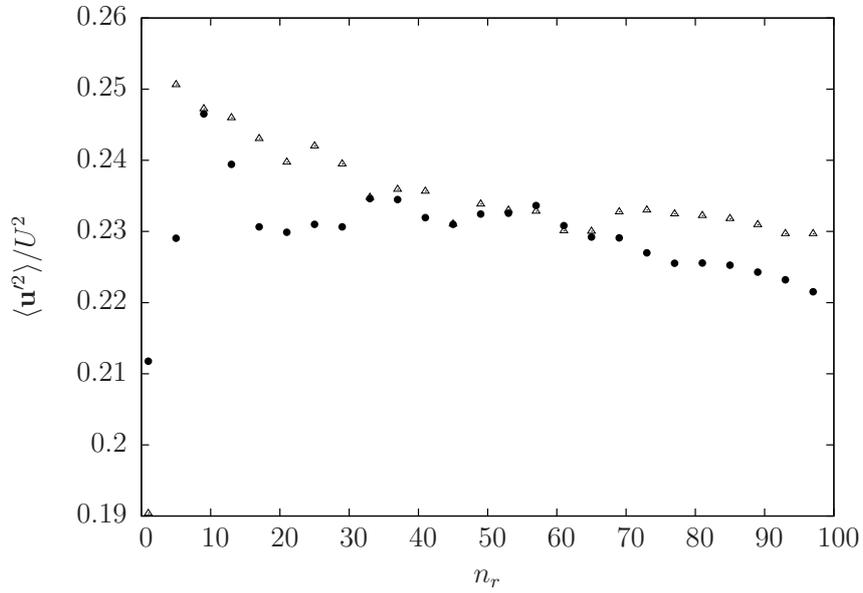


(b)  $St=0,2$ .

que, devido ao elevado custo computacional das simulações referidas, fez-se necessário reduzir o número de realizações para 20. Em decorrência disso, observa-se uma dispersão considerável dos resultados. Observando-se que a dependência com  $St^{-1}$  persiste para altos números de Stokes, deve-se procurar compreender a razão de não se ter recuperado a análise de escala dada pela Eq. (3.11). A princípio, pode-se argumentar que a análise de escala referida deriva da suposição de uma distribuição estatisticamente homogênea de partículas, característica do equilíbrio termodinâmico e à qual está associado um fator de estrutura unitário. Elementos como o volume excluído, devido ao tamanho finito das partículas, e as mudanças microestruturais oriundas da interação entre as partículas alteram dinamicamente a configuração, ainda que um estado estatisticamente homogêneo seja implementado como condição inicial. Não obstante, observa-se um decaimento das flutuações com o número de Stokes, em concordância com a predição de que a inércia das partículas possa estar associada à convergência das flutuações de velocidade, dada pela



(c)  $St=0,3$ .



(d)  $St=0,4$ .

Figura 41 – Variância das flutuações de velocidade em função do número de realizações, nas direções paralela ( $\Delta$ ) e ortogonal ( $\bullet$ ) à aceleração gravitacional, para  $Pe = 10$ ,  $\phi = 0,01$ ,  $N = 111$  e  $\lambda = 0,004$ . Simulações na presença de interações hidrodinâmicas.

Eq. (3.11).

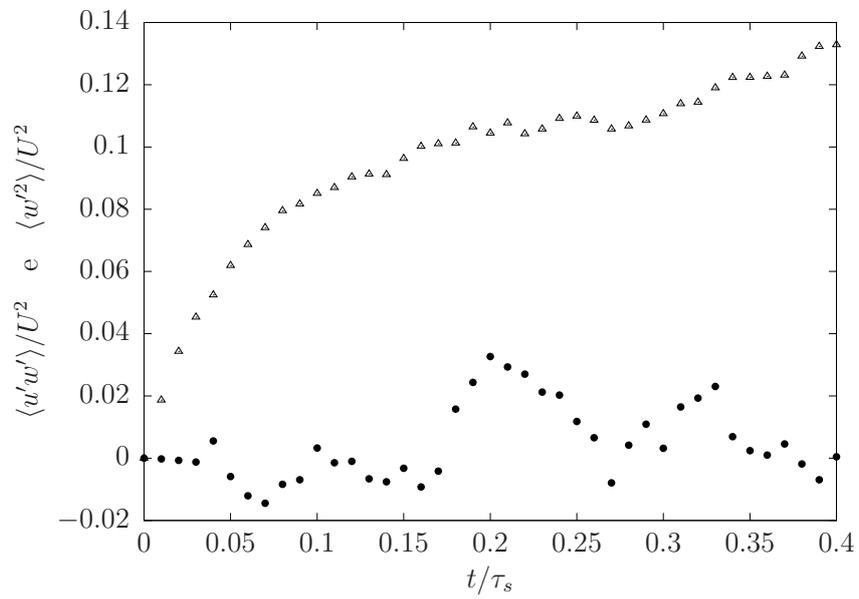
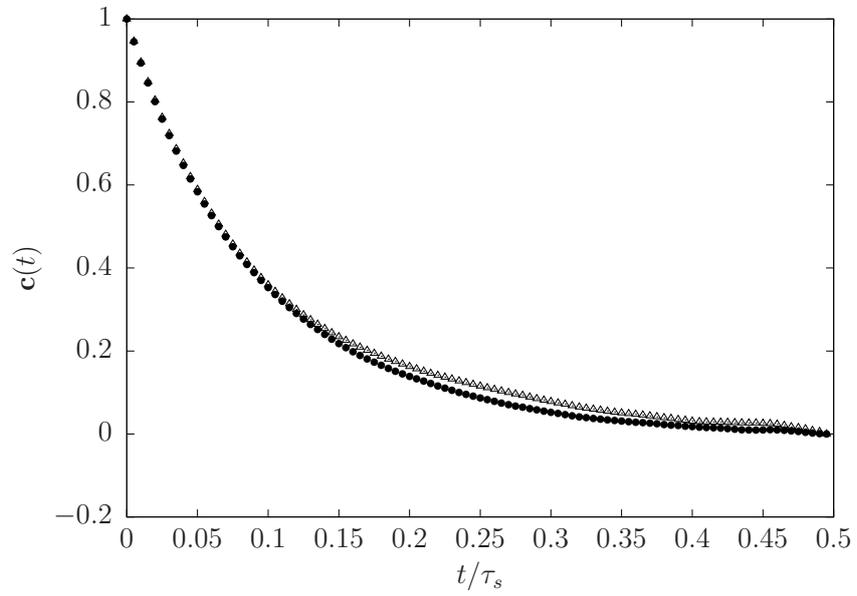
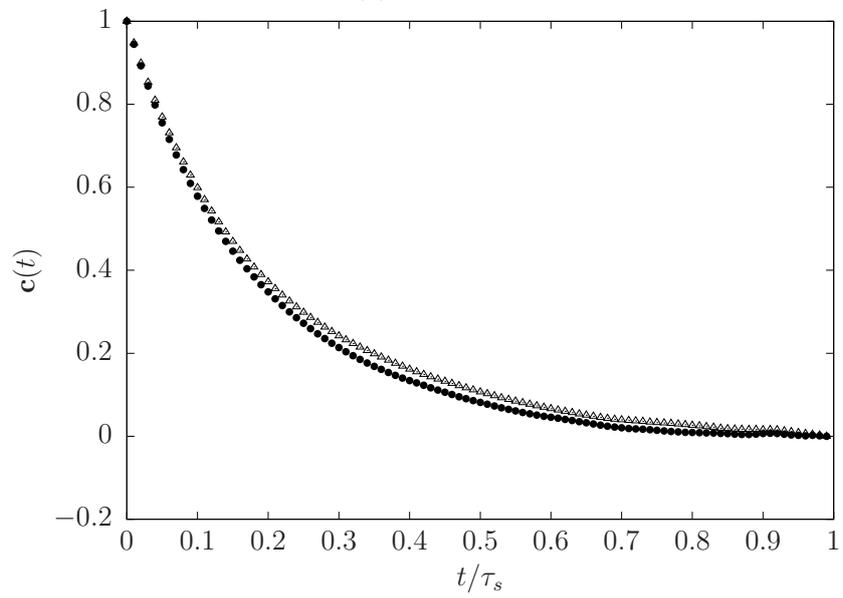


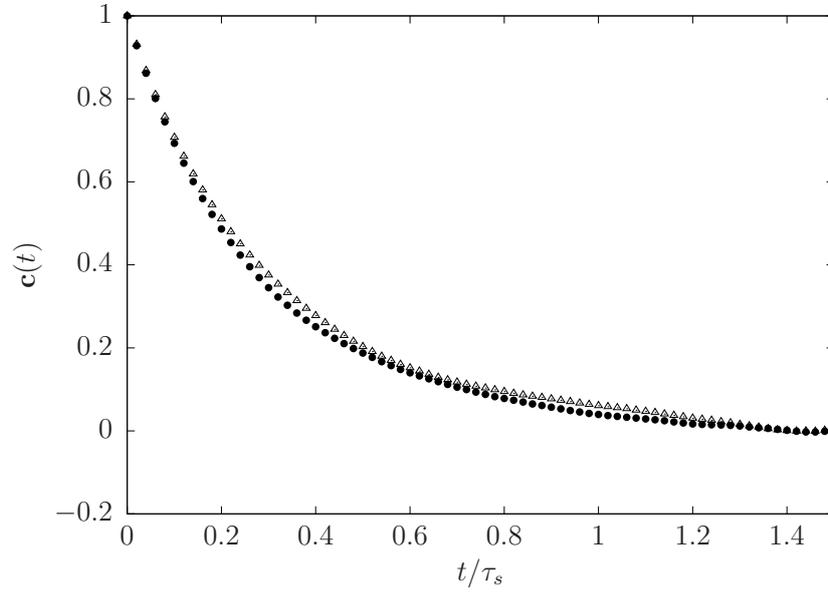
Figura 42 – Flutuações cruzadas de velocidade ( $\langle u'w' \rangle$ ), representadas por ●, e variância das flutuações de velocidade, ( $\langle w'^2 \rangle$ ), simbolizadas por △, em função do tempo. Simulações realizadas para  $Pe = 10$ ,  $St = 0,1$ ,  $\phi = 0,01$ ,  $N = 111$ ,  $\lambda = 0,004$  e  $n_r = 50$ . Interações hidrodinâmicas presentes.



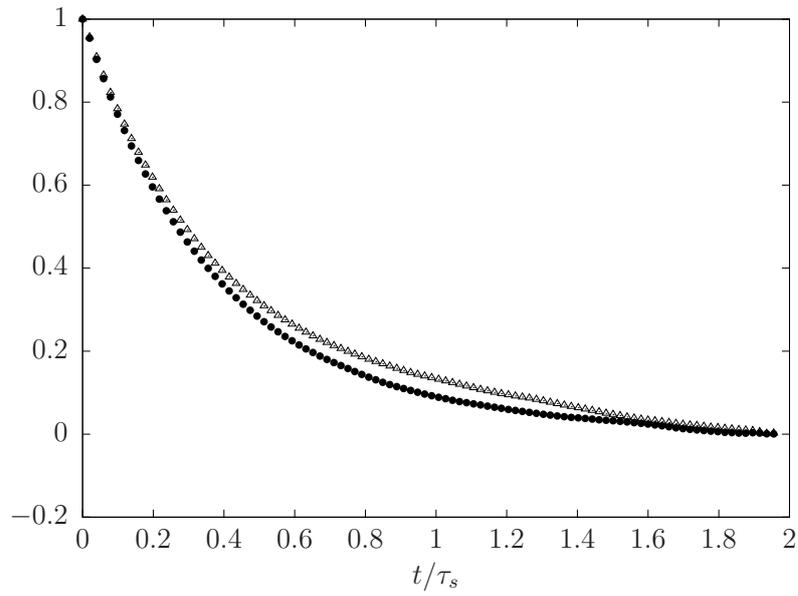
(a)  $St=0.1$ .



(b)  $St=0.2$ .

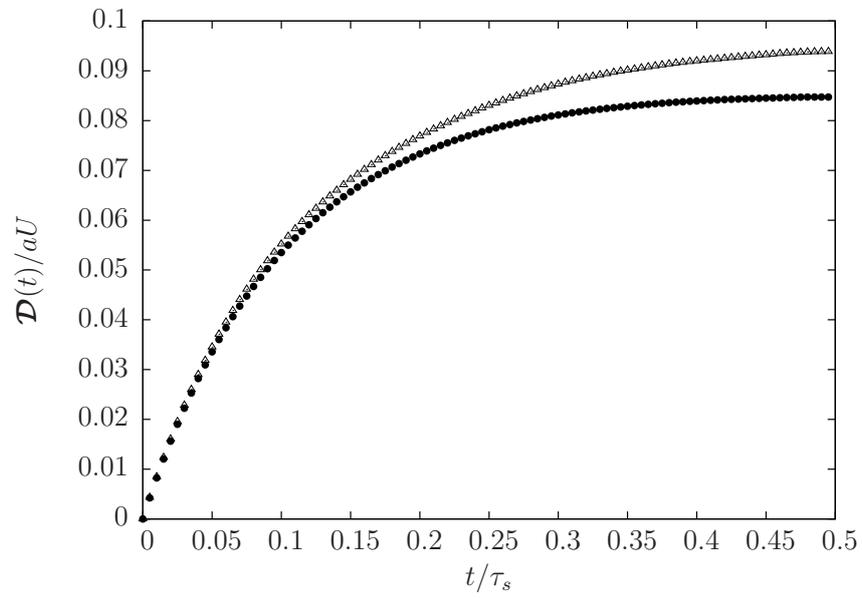


(c)  $St=0,3$ .

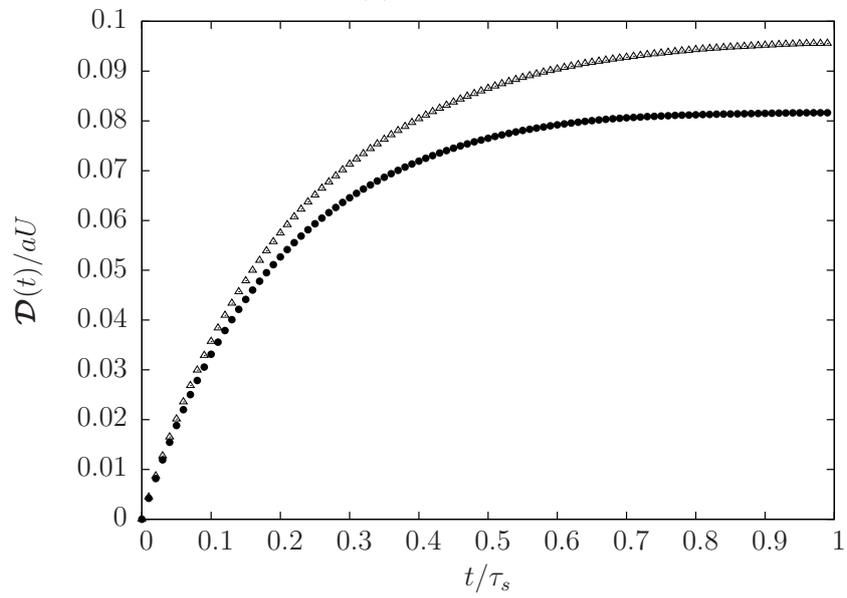


(d)  $St=0,4$ .

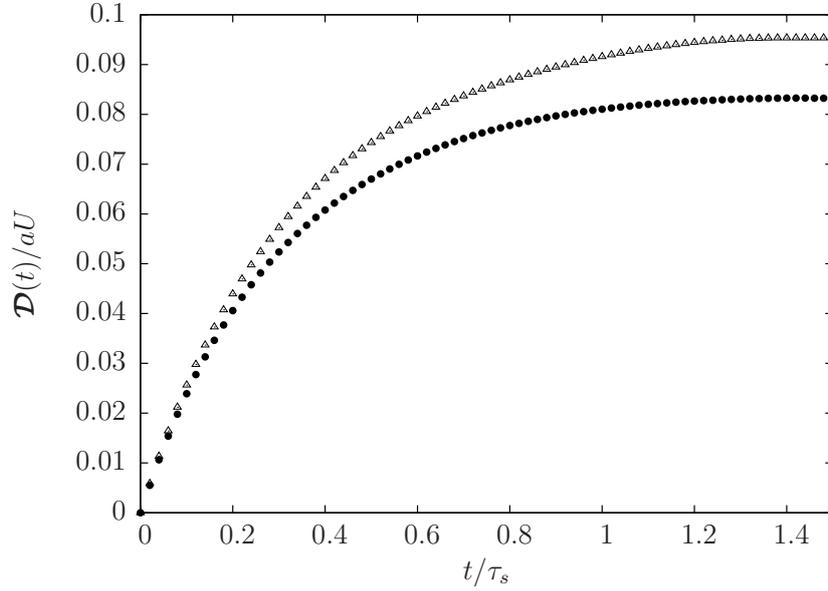
Figura 43 – Coeficiente de autocorrelação das flutuações de velocidade em função do tempo, nas direções paralela ( $\Delta$ ) e ortogonal ( $\bullet$ ) à aceleração gravitacional, para  $Pe = 10$ ,  $\phi = 0,01$ ,  $N = 111$  e  $\lambda = 0,004$ . Interações hidrodinâmicas presentes.



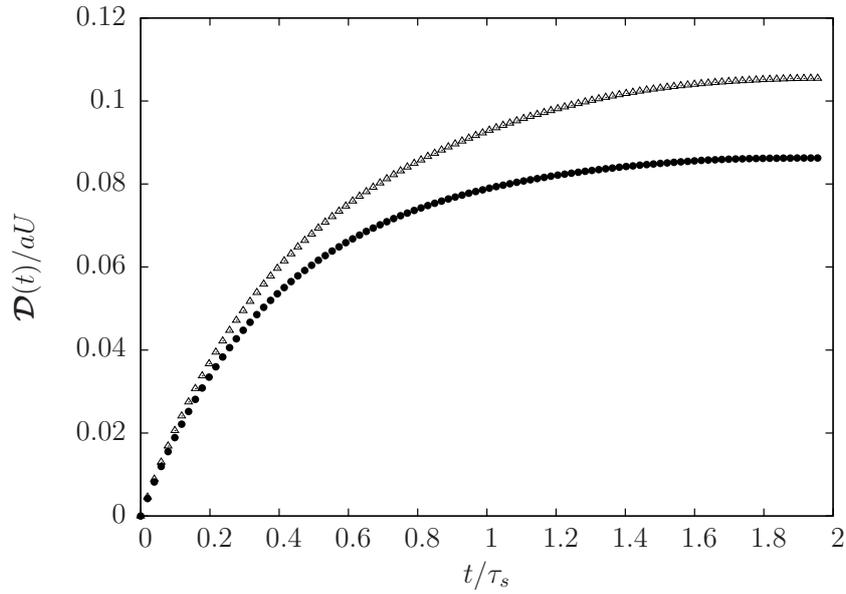
(a)  $St=0,1$ .



(b)  $St=0,2$ .



(c)  $St=0,3$ .



(d)  $St=0,4$ .

Figura 44 – Integral da autocorrelação em função do tempo, nas direções paralela ( $\Delta$ ) e ortogonal ( $\bullet$ ) à aceleração gravitacional, para  $Pe = 10$ ,  $\phi = 0,01$ ,  $N = 111$  e  $\lambda = 0,004$ . A difusividade é determinada como  $\mathbf{D} = \lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{D}(t)$ . Simulações na presença de interações hidrodinâmicas.

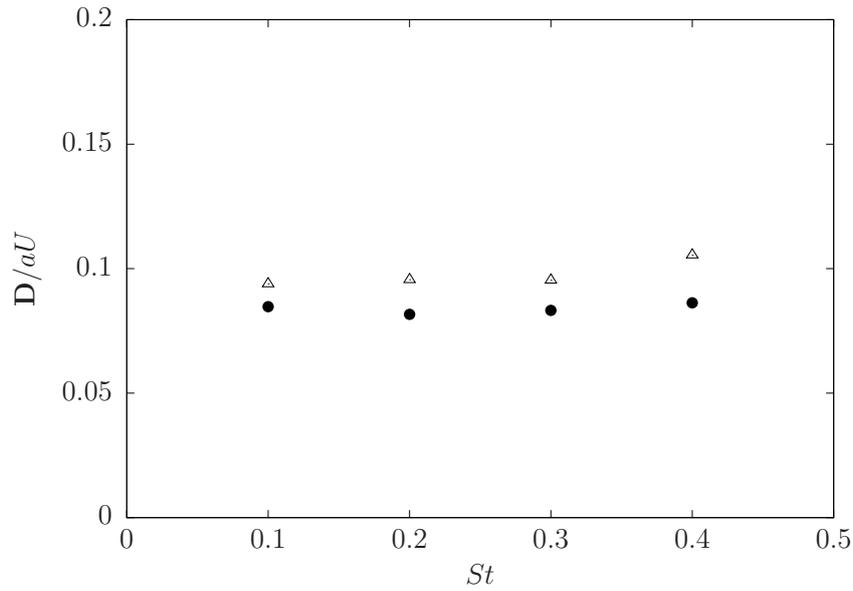


Figura 45 – Dependência da difusividade com o número de Stokes nas direções paralela ( $\Delta$ ) e ortogonal ( $\bullet$ ) à aceleração gravitacional, para  $Pe = 10$ ,  $\phi = 0,01$ ,  $N = 111$  e  $\lambda = 0,004$ . Interações hidrodinâmicas presentes.

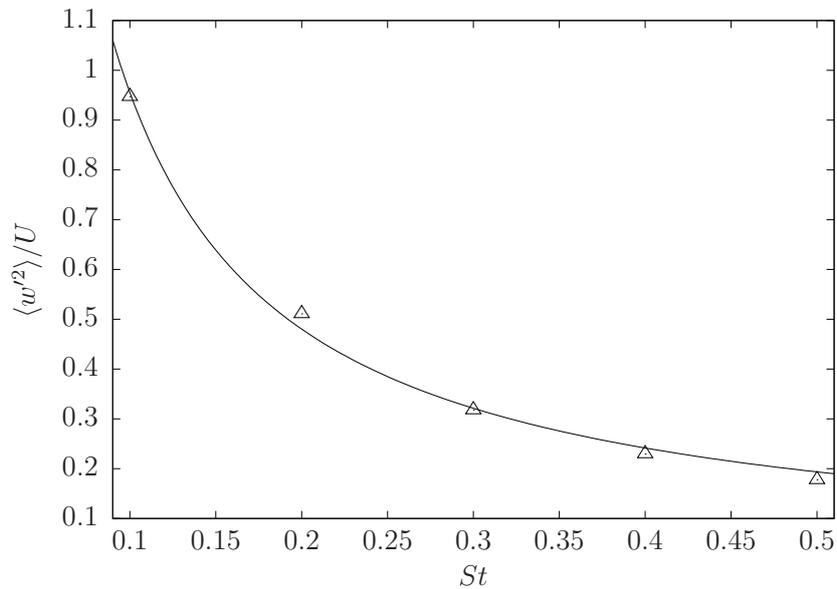


Figura 46 – Componente vertical da variância das flutuações de velocidade em função do número de Stokes para  $Pe = 10$ ,  $\phi = 0,01$ ,  $N = 111$  e  $\lambda = 0,004$ . Ajuste por meio de uma lei de potência  $\langle w'^2 \rangle = a St^b$ , com coeficientes  $a = 0,097$  e  $b = -0,99$ .

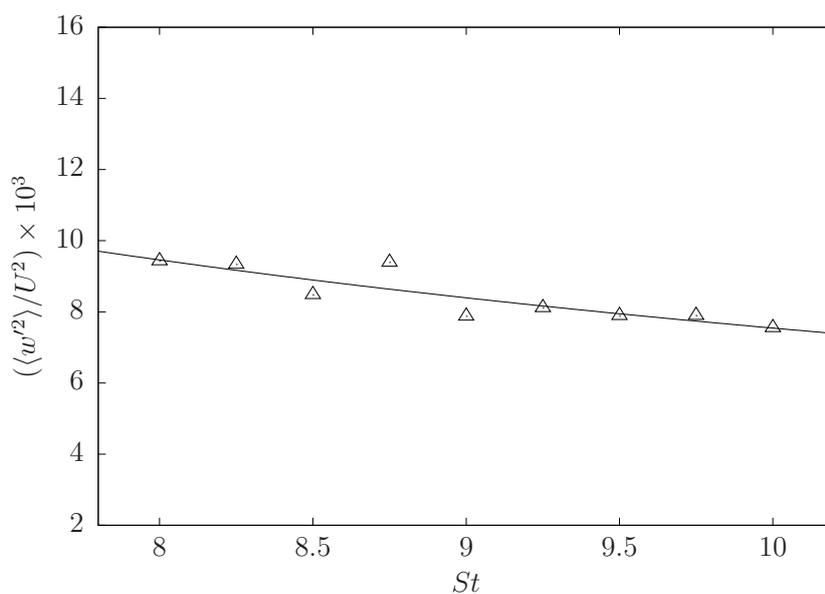


Figura 47 – Variância das flutuações de velocidade em função do número de Stokes para  $Pe = 10$ ,  $\phi = 0,01$ ,  $N = 111$  e  $\lambda = 0,004$ . Ajuste por meio de uma lei de potência  $\langle w'^2 \rangle = a St^b$ , com coeficientes  $a = (8 \pm 4) \times 10$  e  $b = -1,0 \pm 0,2$ .

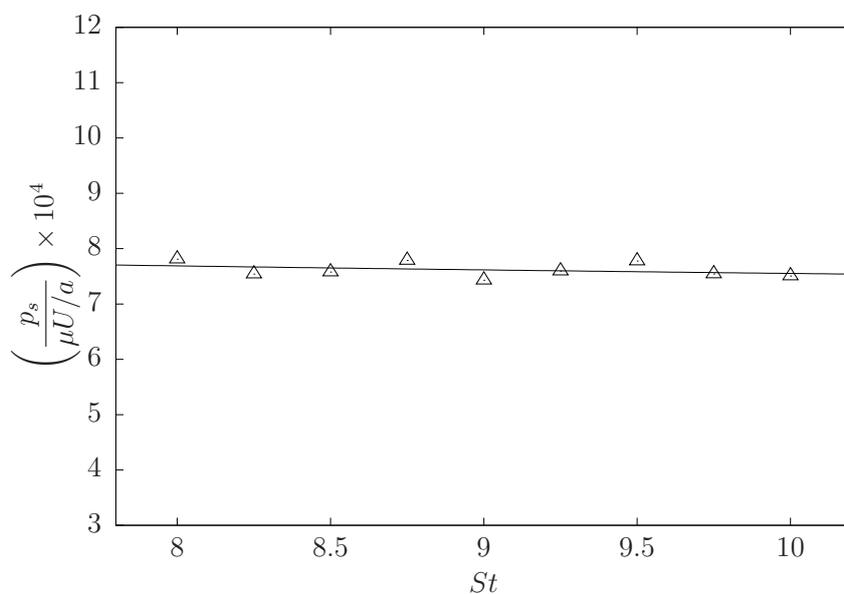


Figura 48 – Pressão de partículas em função do número de Stokes para  $Pe = 10$ ,  $\phi = 0,01$ ,  $N = 111$  e  $\lambda = 0,004$ . Ajuste por meio de uma lei de potência  $p_s = a St^b$ , com coeficientes  $a = 9 \pm 2$  e  $b = -0,08 \pm 0,08$ .

# 9 EFEITO DA INÉRCIA DO FLUIDO SOBRE UMA PARTÍCULA ISOLADA

Visto que leitos fluidizados na prática encontram-se em regimes de alto número de Reynolds, convém considerar as forças provenientes da inércia do fluido sobre as partículas. Sobral, Oliveira e Cunha (2007) realizaram um importante trabalho nesta área ao estudar a sedimentação de partículas esféricas no regime de Oseen - com número de Reynolds baixo mas finito. Nesta seção, pretende-se estender a região de Reynolds considerada no trabalho referido por meio de uma relação *ad hoc*. Considera-se o efeito da inércia do fluido sobre uma partícula esférica isolada segundo a proposição semiempírica para o arrasto hidrodinâmico de Clift, Grace e Weber (1978), segundo a qual

$$\mathbf{f}_h = -3\pi\mu\mathbf{u}d[1 + h(Re)], \quad (9.1)$$

em que  $d$  é o diâmetro da esfera e a função  $h(Re)$  é definida como

$$h(Re) = \begin{cases} 0, & 0 \leq Re \leq 10^{-4}, \\ \frac{3Re}{16}, & 10^{-4} < Re \leq 10^{-2}, \\ 0, 1315Re^{0,82-0,05\kappa}, & 10^{-2} < Re \leq 20, \\ 0, 1935Re^{0,6305}, & 20 < Re \leq 260, \end{cases} \quad (9.2)$$

sendo  $\kappa = \log_{10}(Re)$ . Nota-se que o arrasto hidrodinâmico é composto de dois termos,  $\mathbf{f}_\mu = -3\pi\mu\mathbf{u}d$ , devido ao arrasto viscoso e outro  $\mathbf{f}_p = -3\pi\mu\mathbf{u}dh(Re)$  devido ao arrasto inercial, no qual se encontra a função proposta por Clift, Grace e Weber (1978).

Impende salientar que o número de Reynolds, expresso na Eq. (9.2), é definido como  $Re = \rho u d / \mu$ , sendo  $\rho$  a massa específica do fluido. Além disso, restringiu-se o estudo deste caso a uma partícula não browniana, a fim de analisar separadamente ambos os mecanismos físicos. Sob essa hipótese, admite-se que o movimento da partícula é unidirecional, ocorrendo na direção da força gravitacional. Desse modo, a equação governante do movimento é

$$m \frac{du}{dt} = -3\pi\mu u d [1 + h(Re)] + \Delta\rho \frac{\pi d^3}{6} g - m_0 \frac{du}{dt}. \quad (9.3)$$

O termo  $-m_0 du/dt$ , chamado arrasto de massa virtual, deve-se à reação da força que a partícula exerce sobre o fluido para acelerá-lo, e assume-se que a massa virtual,  $m_0$ , seja igual a  $\rho\pi d^3/12$  para uma partícula esférica, como na teoria de escoamentos potenciais.

A adimensionalização deste caso específico foi proposta considerando como dimensões características do escoamento a velocidade terminal da partícula, denotada por  $U_t$ , e seu diâmetro,  $d$ . Assim, definiram-se as variáveis adimensionais segundo as expressões

$$\tilde{u} = \frac{u}{U_t}, \quad \tilde{z} = \frac{z}{d} \quad e \quad \tilde{t} = \frac{tU_t}{d}, \quad (9.4)$$

em que  $z$  representa o deslocamento da partícula.

Substituindo tais variáveis na Eq. (9.3), dividindo ambos os membros da equação resultante por  $3\pi\mu dU_t$  e rearranjando termos, obtém-se

$$\frac{\rho_s U_t d}{18\mu} \left(1 + \frac{\rho}{2\rho_s}\right) \frac{d\tilde{u}}{d\tilde{t}} = -(1+h)\tilde{u} + \frac{\rho_s U_t d}{18\mu} \left(1 - \frac{\rho}{\rho_s}\right) \frac{dg}{U_t^2}. \quad (9.5)$$

Alguns parâmetros adimensionais relevantes do escoamentos são identificados na Eq. (9.5). Notadamente, a razão de massas específicas, definida como  $R_\rho = \rho/\rho_s$ , o número de Stokes,  $St = \rho_s U_t d/18\mu$ , e o número de Froude,  $Fr = U_t^2/dg$ , que caracteriza o quociente entre forças de inércia e gravitacionais no escoamento. Substituindo esses parâmetros na Eq. (9.5), tem-se

$$St \left(1 + \frac{R_\rho}{2}\right) \frac{d\tilde{u}}{d\tilde{t}} = -(1+h)\tilde{u} + \frac{St(1-R_\rho)}{Fr}. \quad (9.6)$$

Define-se o último termo do segundo membro da Eq. (9.6) como o número de sedimentação, que pode ser alternativamente expresso por  $N_s = U/U_t$ , como se pode deprender da Eq. (9.5). Escrevendo  $\alpha = St(1 + R_\rho/2)$ , a Eq. (9.6) pode ser reescrita como

$$\alpha \frac{d\tilde{u}}{d\tilde{t}} = -(1+h)\tilde{u} + N_s. \quad (9.7)$$

## 9.1 Métodos de Solução

A função  $h(Re)$  torna a Eq. (9.7) não linear, dificultando a obtenção de soluções analíticas. Para a região  $10^{-4} < Re \leq 10^{-2}$ , em que a equação é fracamente não linear, empregou-se um método de perturbação regular de segunda ordem visando à obtenção de uma solução aproximada. Nessa região,  $h(Re) = 3Re/16$ . Definindo o parâmetro Reynolds terminal  $Re_t = \rho U_t d/\mu$ , segue que  $Re = Re_t \tilde{u}$ . Logo, tem-se  $h = 3Re_t \tilde{u}/16$ . Denotando  $\epsilon = 3Re_t/16$  e substituindo a expressão resultante na Eq. (9.7), tem-se

$$\alpha \frac{d\tilde{u}}{d\tilde{t}} = -\tilde{u} - \epsilon \tilde{u}^2 + N_s, \quad 10^{-4} < Re \leq 10^{-2}. \quad (9.8)$$

Considerou-se a condição  $\epsilon \ll 1$  e se admitiu a existência de uma solução por séries de potência em  $\epsilon$ , do tipo  $\tilde{u}(\tilde{t}) = \tilde{u}_0(\tilde{t}) + \epsilon\tilde{u}_1(\tilde{t}) + \epsilon^2\tilde{u}_2(\tilde{t}) + \dots$ , que foi truncada em  $O(\epsilon^2)$ , resultando em

$$\tilde{u}_p(\tilde{t}) = \tilde{u}_0(\tilde{t}) + \epsilon\tilde{u}_1(\tilde{t}) + \epsilon^2\tilde{u}_2(\tilde{t}), \quad (9.9)$$

solução do problema perturbado. Substituindo a expressão na Eq. (9.9) em (9.7), chega-se ao seguinte sistema de equações diferenciais:

$$\begin{cases} \alpha \frac{d\tilde{u}_0}{d\tilde{t}} + \tilde{u}_0 = N_s, & \tilde{u}_0(0) = 0, \\ \alpha \frac{d\tilde{u}_1}{d\tilde{t}} + \tilde{u}_1 = -\tilde{u}_0^2, & \tilde{u}_1(0) = 0, \\ \alpha \frac{d\tilde{u}_2}{d\tilde{t}} + \tilde{u}_2 = -2\tilde{u}_0\tilde{u}_1, & \tilde{u}_2(0) = 0. \end{cases} \quad (9.10)$$

Determina-se a solução não perturbada do problema

$$\tilde{u}_0(\tilde{t}) = N_s \left(1 - e^{-\tilde{t}/\alpha}\right), \quad (9.11)$$

que é a solução de Stokes, referente ao escoamento livre de efeitos de inércia, e substituindo a Eq. (9.11) na segunda equação do sistema (9.10), tem-se

$$\tilde{u}_1(\tilde{t}) = -N_s^2 \left(1 - \frac{2\tilde{t}}{\alpha} e^{-\tilde{t}/\alpha} - e^{-2\tilde{t}/\alpha}\right). \quad (9.12)$$

Ademais, a substituição da Eq. (9.12) na terceira equação do sistema (9.10) resulta em

$$\tilde{u}_2(\tilde{t}) = -2N_s^3 \left[1 - \left(\frac{\tilde{t}^2}{\alpha^2} + \frac{\tilde{t}}{\alpha} - \frac{5}{2}\right) e^{-\tilde{t}/\alpha} + \left(\frac{2\tilde{t}}{\alpha} - 3\right) e^{-2\tilde{t}/\alpha} - \frac{1}{2} e^{-3\tilde{t}/\alpha}\right]. \quad (9.13)$$

Nota-se que a velocidade adimensional terminal prevista pela solução assintótica é dada por

$$\lim_{\tilde{t} \rightarrow \infty} \tilde{u}_p(\tilde{t}) = N_s - \epsilon N_s^2 - 2\epsilon^2 N_s^3. \quad (9.14)$$

Agora, calcula-se o deslocamento adimensional assintótico pela integração de  $\tilde{u}_p(\tilde{t})$ , com condição inicial  $\tilde{z}_p(0) = 0$ , como

$$\tilde{z}_p(\tilde{t}) = \tilde{z}_0(\tilde{t}) + \epsilon\tilde{z}_1(\tilde{t}) + \epsilon^2\tilde{z}_2(\tilde{t}), \quad (9.15)$$

no qual

$$\tilde{z}_0(\tilde{t}) = N_s \left[(\tilde{t} - \alpha) + \alpha e^{-\tilde{t}/\alpha}\right], \quad (9.16)$$

$$\tilde{z}_1(\tilde{t}) = -N_s^2 \left[\left(\tilde{t} - \frac{5\alpha}{2}\right) + 2(\tilde{t} + \alpha)e^{-\tilde{t}/\alpha} + \frac{\alpha}{2}e^{-2\tilde{t}/\alpha}\right] \quad (9.17)$$

e

$$\tilde{z}_2(\tilde{t}) = -2N_s^3 \left[\left(\tilde{t} - \frac{5\alpha}{3}\right) + \left(\frac{\tilde{t}^2}{\alpha} + 3\tilde{t} + \frac{\alpha}{2}\right) e^{-\tilde{t}/\alpha} - (\tilde{t} - \alpha)e^{-2\tilde{t}/\alpha} + \frac{\alpha}{6}e^{-3\tilde{t}/\alpha}\right]. \quad (9.18)$$

A comparação entre a velocidade terminal da solução assintótica e a velocidade de Stokes da partícula foi obtida mediante a relação

$$\frac{(U_t)_p}{U} = \frac{(U_t)_p}{U_t} \frac{U_t}{U} = \frac{(\tilde{u}_p)_t}{N_s} = 1 - \epsilon N_s - \epsilon^2 N_s^2. \quad (9.19)$$

## 9.2 Solução Numérica

Desenvolveu-se um código em FORTRAN implementando um método de Runge-Kutta de quarta ordem para a integração numérica da Eq. (9.7). Utilizou-se o fato de que, em velocidade terminal,

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{u}}{d\tilde{t}} &= 0 \\ \Rightarrow N_s &= 1 + h(Re_t), \end{aligned} \quad (9.20)$$

pois a velocidade terminal adimensional é 1. Tal resultado atrela o número de sedimentação ao número de Reynolds terminal.

A determinação do quociente entre a velocidade terminal numérica e a velocidade de Stokes da partícula, usada para a validação do código, foi conseguida através da seguinte identidade

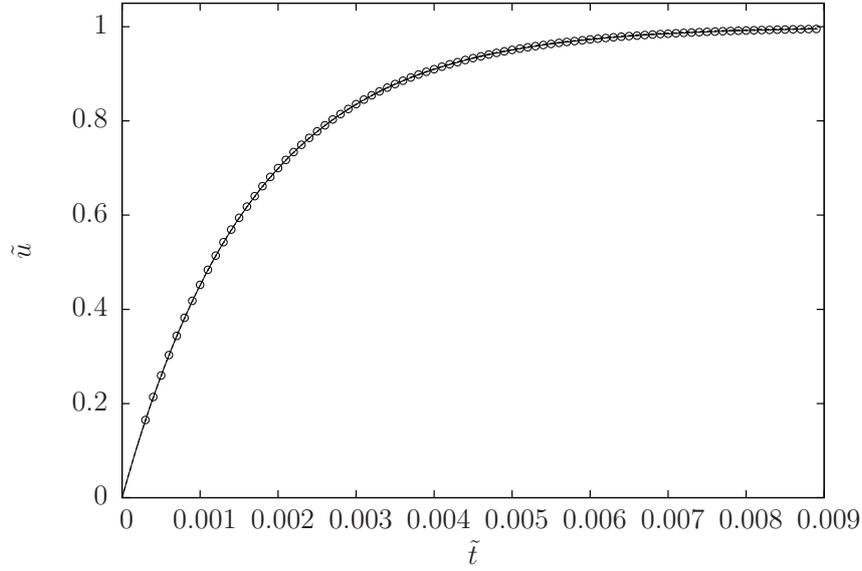
$$\frac{(U_t)_{num}}{U} = \frac{(U_t)_{num}}{U_t} \frac{U_t}{U} = \frac{(\tilde{u}_t)_{num}}{N_s}, \quad (9.21)$$

em que o subscrito *num* denota numérico e  $(\tilde{u}_t)_{num}$  foi considerado como o último elemento do vetor de velocidades numérico.

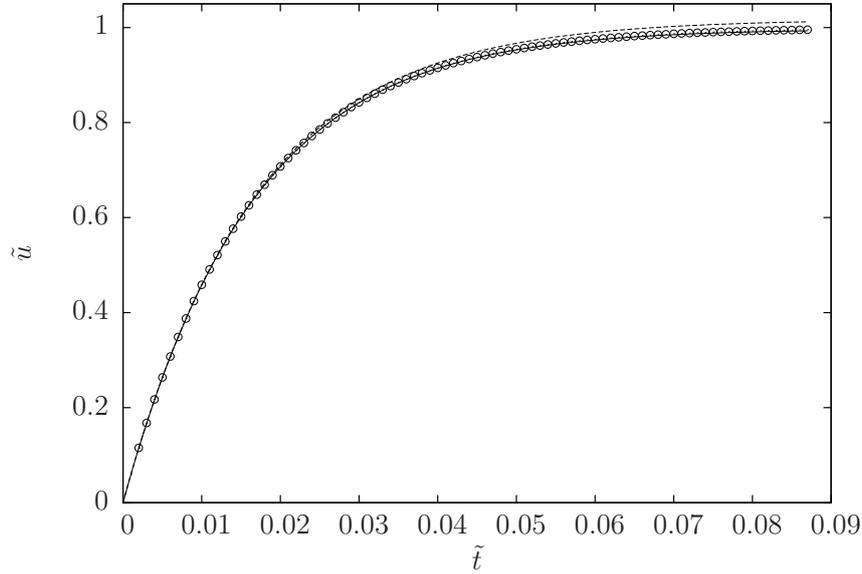
Interessa descrever em que região a solução assintótica se aplica para descrever os efeitos de inércia relevantes no escoamento com uma determinada precisão. A solução numérica, cuja validade será examinada nesta seção, foi usada como referência na comparação com as velocidades assintótica e de Stokes para diferentes números de Reynolds terminal, como indica a figura (49).

A figura (49a) ilustra um caso em que tanto a solução de Stokes quanto o método de perturbação exibem resultados precisos na descrição da velocidade da partícula. Isso indica que os efeitos de inércia são desprezíveis nesse escoamento. Nota-se das figuras (49b), (49c) e (49d) que à medida que o número de Reynolds terminal aumenta, o importância relativa das forças de inércia se eleva, tornando inadequada a hipótese de que  $\epsilon \ll 1$  e invalidando a aplicação da solução assintótica, como se vê claramente pela figura (49c). Ainda assim, nota-se que a solução assintótica tem uma aplicação mais abrangente que a de Stokes, captando efeitos de inércia quando são pequenos, conforme a (49b), em que o método de perturbação fornece uma solução extremamente precisa, enquanto que a de Stokes já apresenta um desvio significativo da solução numérica. Um dos objetivos deste trabalho é exatamente quantificar até qual número de Reynolds a solução assintótica é precisa, de acordo com algum critério preestabelecido. A figura (50) exhibe o mesmo comportamento identificado na figura (49), desta vez para as curvas de deslocamento adimensional.

A validação das soluções numérica e assintótica foi realizada a partir da comparação com a  $\tilde{U}_t$ , dada pela equação (9.20), conforme a figura (51). Esta mostra a concordância entre as soluções numérica e exata para um número de Reynolds terminal arbitrário, indicando a convergência do método e sua validade. De forma semelhante ao que mostram



(a)  $Re_t=0,01$



(b)  $Re_t=0,1$

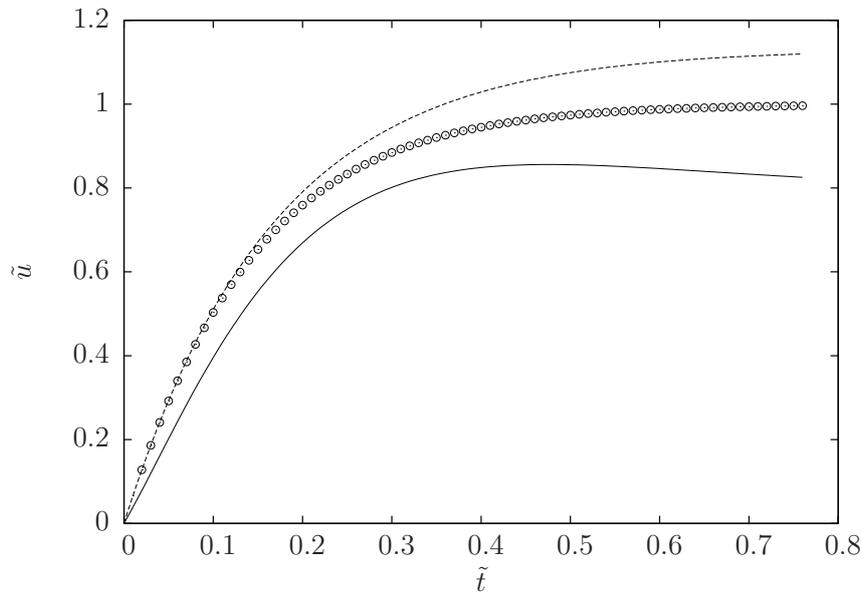
as figuras (49) e (50), o encarte da figura (51) comprova que a solução assintótica é válida para baixos números de Reynolds, até cerca de  $Re = 0,2$ , mas que diverge da solução exata para números de Reynolds moderados e altos. Tal comportamento é previsível a partir da equação (9.14), pois, além da hipótese  $\epsilon \ll 1$  ser inaplicável,  $\lim_{\epsilon \rightarrow \infty} (\tilde{u}_p)_t = -\infty$ , onde o índice  $t$  indica velocidade terminal, enquanto que a razão  $U_t/U$  não apresenta esse comportamento.

Observa-se ainda que os efeitos inerciais do fluido produzem um coeficiente de arrasto diverso do puramente viscoso. De fato, pela definição do coeficiente de arrasto,

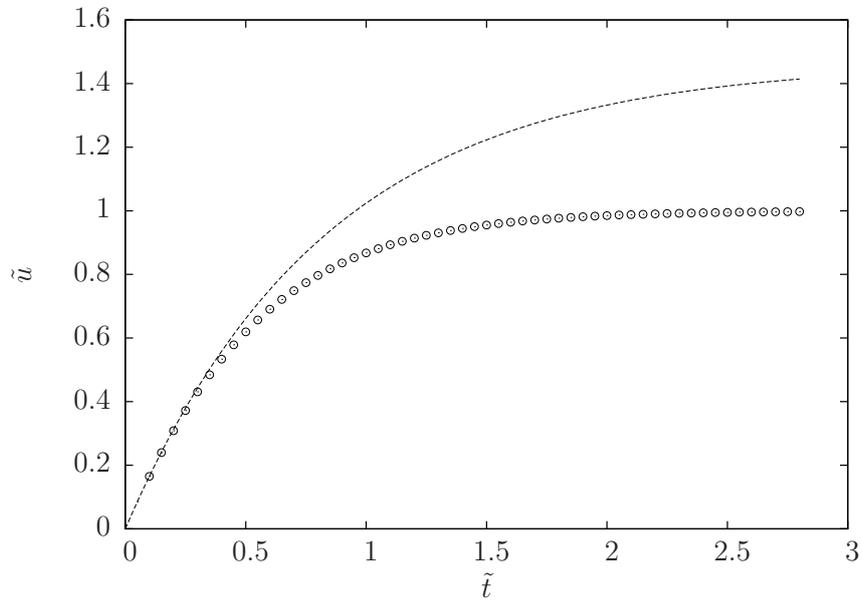
$$C_D = \frac{8|\mathbf{f}_h|}{\pi \rho u^2 d^2} \quad (9.22)$$

e segue das Eqs. (9.1) e (9.22) que

$$C_D = \frac{24[1 + h(Re)]}{Re}. \quad (9.23)$$



(c)  $Re_t=1$

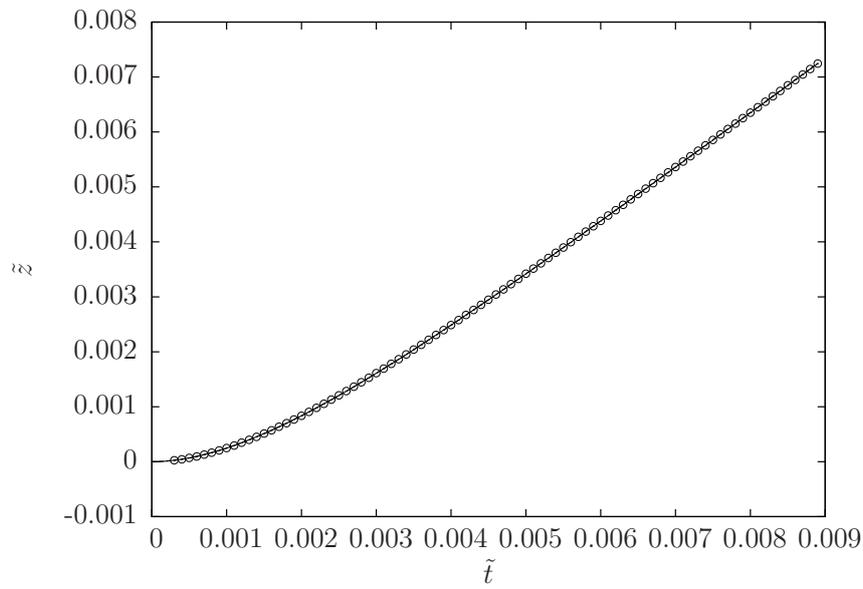


(d)  $Re_t=5$

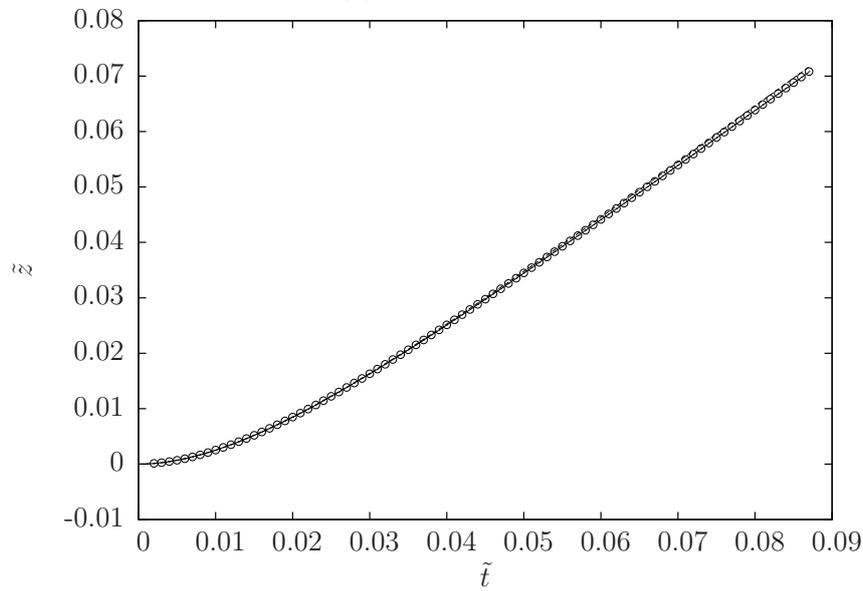
Figura 49 – Velocidade de uma partícula isolada não browniana em função do tempo para diferentes números de Reynolds terminais. Resultados obtidos para  $R_\rho = 0, 4$ . Solução numérica indicada por  $\circ$ , assintótica por linha contínua e de Stokes por linha tracejada.

A Fig. (52) ilustra a distinção entre o coeficiente de arrasto com efeitos inerciais, dado pelas Eqs. (9.23) e (9.2), e o puramente viscoso,  $C_D = 24/Re$ . Percebe-se que o arrasto com efeitos inerciais é sempre maior, devido à formação de regiões de recirculação a jusante da partícula para números de Reynolds baixos mas não nulos.

Note que a validade dessa solução numérica está condicionada à da proposição semiempírica para o arrasto hidrodinâmico de Clift, Grace e Weber (1978). A aplicação bem sucedida de tal modelo em diversos trabalhos acadêmicos, e.g. (LAWRENCE; MEI, 1995), corrobora sua legitimidade. Por meio deste modelo, abre-se caminho para o estudo de leitos fluidizados em números de Reynolds arbitrários. A solução assintótica ora

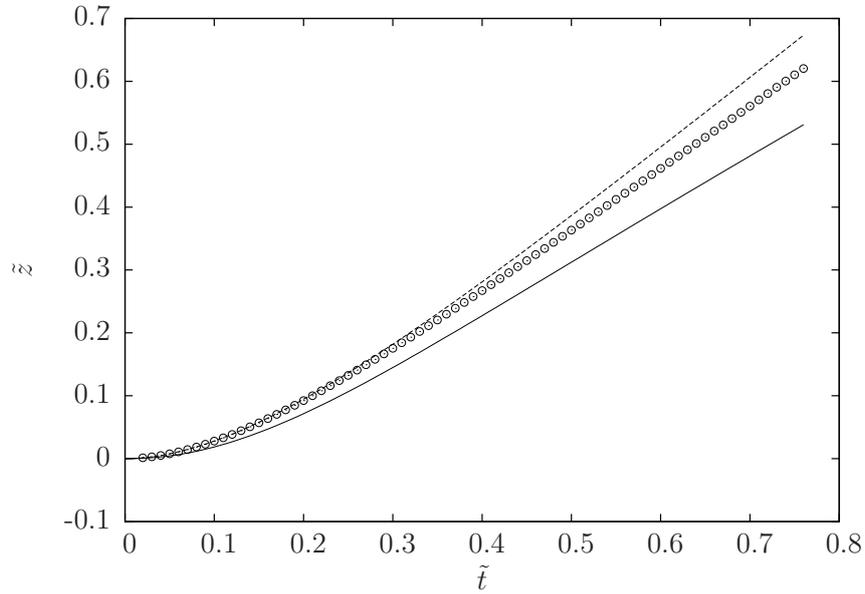


(a)  $Re_t = 0,01$ .

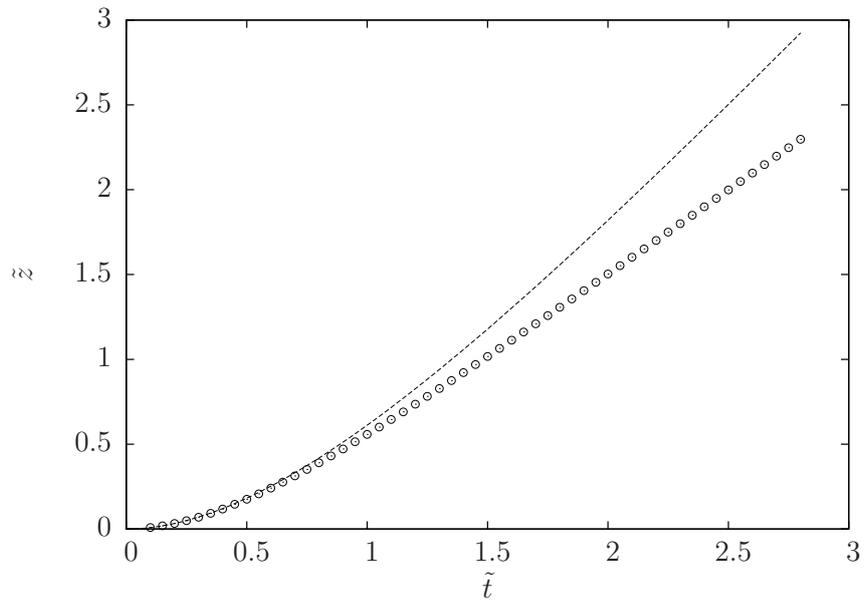


(b)  $Re_t = 0,1$ .

desenvolvida possibilita futuras análises do regime de  $Re$  baixo, porém finito.



(c)  $Re_t = 1$ .



(d)  $Re_t = 5$ .

Figura 50 – Deslocamento de uma partícula isolada não browniana em função do tempo para diferentes números de Reynolds terminais. Resultados obtidos para  $R_\rho = 0, 4$ . Solução numérica indicada por  $\circ$ , assintótica por linha contínua e de Stokes por linha tracejada.

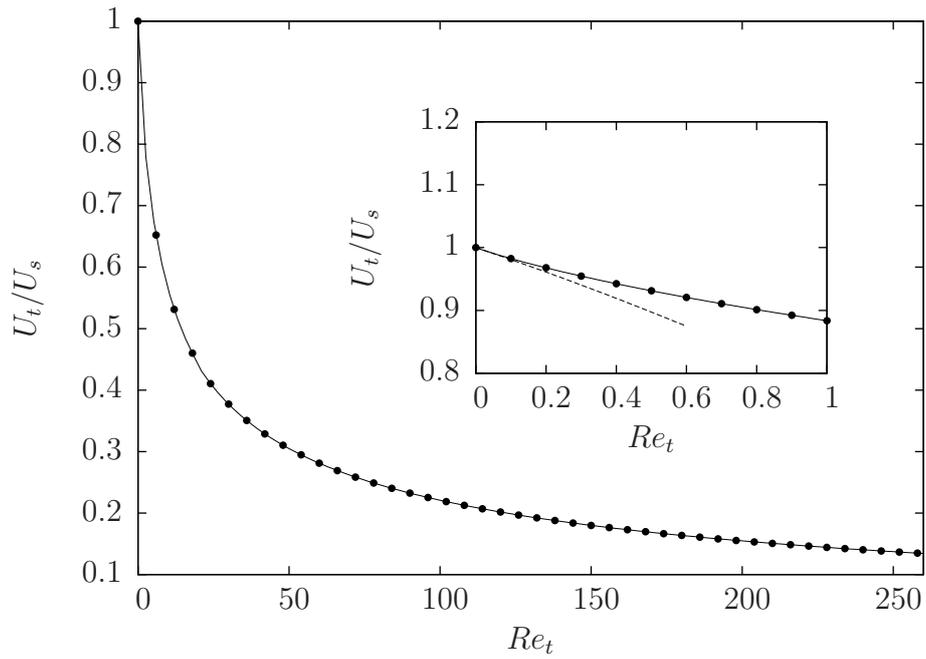


Figura 51 – Quociente entre a velocidade terminal,  $U_t$ , e a velocidade de Stokes, cá denotada por  $U_s$ , para uma partícula isolada não browniana, com  $R_\rho = 0,4$ , em função do número de Reynolds terminal. Soluções exata (—), numérica (•) e assintótica (---).

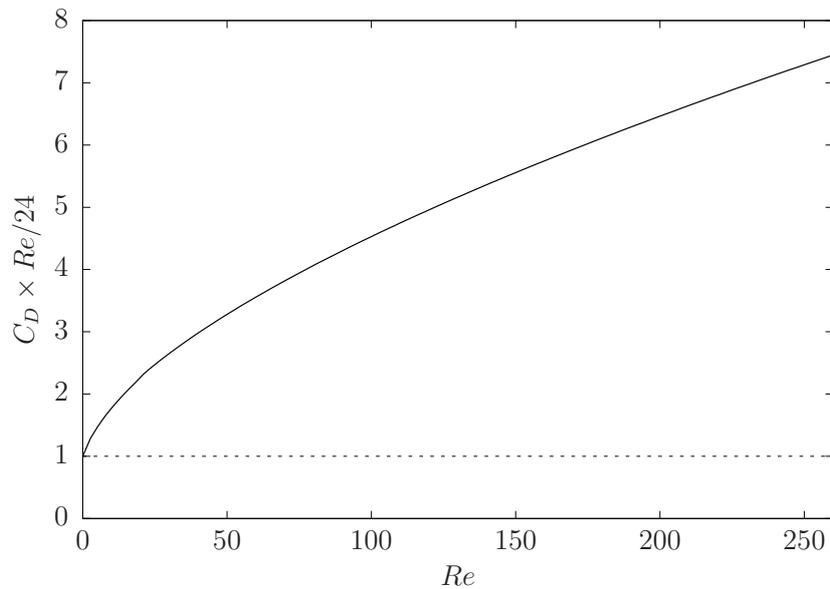


Figura 52 – Produto do coeficiente de arrasto pelo número de Reynolds em função de  $Re$ . Resultados obtidos para uma partícula isolada não browniana com  $R_\rho = 0,4$ . Coeficientes de arrasto com efeitos de inércia (—) e puramente viscoso (---).

# 10 CONSIDERAÇÕES FINAIS

## 10.1 Conclusões

Neste trabalho, formulou-se um modelo bifásico contínuo de uma suspensão gás-sólido em baixos números de Reynolds, em consonância com trabalhos anteriores (ANDERSON; JACKSON, 1967; BATCHELOR, 1988; DURU et al., 2002). Empregou-se uma análise de estabilidade linear às equações resultantes de tal modelagem, a fim de determinar a influência dos parâmetros físicos sobre a região de estabilidade. Foram construídos diagramas de bifurcação para o fator de amplificação de distúrbios em função do número de Stokes e do número de sedimentação. Determinou-se ainda a linha neutra do sistema, identificando-se a condição crítica de estabilidade em função de  $St$  e da fração volumétrica média.

Desenvolveu-se também uma simulação numérica lagrangeana para a análise da suspensão, incorporando forças brownianas, gravitacionais e de interações hidrodinâmicas, a fim de caracterizar as flutuações de velocidade nessa suspensão. Desse modo, determinaram-se estatísticas de curto tempo, como a variância das flutuações de velocidade, e de longo tempo, como a autocorrelação das flutuações de velocidade e a difusividade das partículas. Comparou-se a dependência entre as flutuações de velocidade e a inércia das partículas com a previsão feita pela análise de escala de Hinch (1988) e Cunha (1995). Calculou-se a pressão de partículas da suspensão e examinou-se a dependência dessa propriedade com o número de Stokes. Investigou-se também a anisotropia nas autocorrelações das flutuações de velocidade, devida à injeção de memória na direção da gravidade. Assim, verificou-se que o processo perde sua característica markoviana para números de Péclet moderados. Calcularam-se também as difusividades, observando uma anisotropia que caracteriza um processo de difusão anômala. Verificou-se que tal difusividade é insensível à variação da inércia das partículas para o intervalo observado, indicando que o número de Stokes não tem influência sobre as estatísticas de longo tempo.

Estudou-se ainda o movimento de uma partícula com efeitos de inércia do fluido base, no intento de possibilitar a inclusão de tais efeitos para simulações de suspensões em regimes de Reynolds não nulo. Para tanto, desenvolveu-se uma solução assintótica para números de Reynolds terminais baixos mas finitos e uma solução numérica para  $Re_t$  arbitrário.

## 10.2 Trabalhos Futuros

O aluno pretende dar seguimento a este estudo em sua dissertação de mestrado, utilizando a metodologia desenvolvida neste trabalho para explorar outros aspectos relevantes ao tema, quais sejam:

### **Abordagem contínua:**

- Instabilidades ortogonais à direção de sedimentação, em analogia com o problema de Rayleigh-Bénard;
- Solução do sistema de duas equações não lineares que governam o movimento da suspensão;
- Análise da evolução da forma das ondas de concentração ao longo da suspensão.

### **Abordagem discreta:**

- Paralelização das realizações do código numérico;
- Teste de modelos para o fundo impenetrável, como o método das imagens em conjunto com forças repulsivas exponenciais de curto alcance;
- Utilização de células periódicas e somas de Ewald;
- Determinação da relação funcional das estatísticas de curto tempo com o número de Stokes e a fração volumétrica;
- Exame da possibilidade de aplicação de uma expansão virial para a viscosidade de partículas;
- Estudo da dependência das estatísticas de longo tempo, particularmente a difusividade, com a fração volumétrica da suspensão;
- Caracterização microestrutural da suspensão, determinando a evolução temporal de seu fator de estrutura;
- Determinação do tensor de flutuações hidrodinâmicas em função da fração volumétrica e do número de Stokes.

# Referências

- ABADE, G. C. *Mecânica da Sedimentação de Partículas Esféricas Interagindo Hidrodinamicamente*. [S.l.]: Universidade de Brasília, 2005. Citado 7 vezes nas páginas [vii](#), [viii](#), [29](#), [34](#), [47](#), [56](#) e [57](#).
- ABADE, G. C.; CUNHA, F. R. Computer simulation of particle aggregates during sedimentation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 196, n. 45, p. 4597–4612, 2007. Citado 3 vezes nas páginas [40](#), [56](#) e [83](#).
- ALLEN, M. P.; TILDESLEY, D. J. *Computer simulation of liquids*. [S.l.]: Oxford university press, 1989. Citado na página [61](#).
- ANDERSON, T. B.; JACKSON, R. Fluid mechanical description of fluidized beds. equations of motion. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, ACS Publications, v. 6, n. 4, p. 527–539, 1967. Citado 2 vezes nas páginas [46](#) e [107](#).
- BATCHELOR, G. A new theory of the instability of a uniform fluidized bed. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge Univ Press, v. 193, p. 75–110, 1988. Citado 4 vezes nas páginas [3](#), [40](#), [45](#) e [107](#).
- BATCHELOR, G. K. Sedimentation in a dilute dispersion of spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge Univ Press, v. 52, n. 02, p. 245–268, 1972. Citado 3 vezes nas páginas [1](#), [33](#) e [41](#).
- BATCHELOR, G. K. *An introduction to fluid dynamics*. [S.l.]: Cambridge university press, 2000. Citado 4 vezes nas páginas [vii](#), [6](#), [7](#) e [17](#).
- CHANDRASEKHAR, S. *Hydrodynamic and hydromagnetic stability*. [S.l.]: Courier Corporation, 2013. Citado 3 vezes nas páginas [42](#), [45](#) e [46](#).
- CHANDRASEKHARAIHAH, D. S.; DEBNATH, L. *Continuum mechanics*. [S.l.]: Elsevier, 2014. Citado 2 vezes nas páginas [vii](#) e [10](#).
- CHAPMAN, S.; COWLING, T. G. *The mathematical theory of non-uniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases*. [S.l.]: Cambridge university press, 1970. Citado 3 vezes nas páginas [vii](#), [38](#) e [39](#).
- CLIFT, R.; GRACE, J. R.; WEBER, M. E. *Bubbles, drops, and particles*. [S.l.]: Courier Corporation, 1978. Citado 2 vezes nas páginas [98](#) e [103](#).
- CUNHA, F.; SOBRAL, Y.; GONTIJO, R. Stabilization of concentration waves in fluidized beds of magnetic particles. *Powder technology*, Elsevier, v. 241, p. 219–229, 2013. Citado na página [4](#).

- CUNHA, F. R. *Hydrodynamic Dispersion in Suspensions*. Tese (Doutorado) — Department of Applied Mathematics and Physical Sciences, Cambridge University, Cambridge, UK, 1995. Citado 6 vezes nas páginas [v](#), [vi](#), [34](#), [36](#), [56](#) e [107](#).
- CUNHA, F. R. On the fluctuations in a random suspension of sedimenting particles. *J. Braz. Soc. Mech. Sci.*, v. 19, n. 4, p. 474–495, 1997. Citado 3 vezes nas páginas [vii](#), [36](#) e [40](#).
- CUNHA, F. R. *Notas de Aula de Mecânica dos Meios Contínuos*. Universidade de Brasília: Programa de Pós-Graduação em Ciências Mecânicas, 2015. Citado 2 vezes nas páginas [6](#) e [17](#).
- CUNHA, F. R. *Notas de Aula de Microhidrodinâmica*. Universidade de Brasília: Programa de Pós-Graduação em Ciências Mecânicas, 2016. Citado 2 vezes nas páginas [18](#) e [32](#).
- CUNHA, F. R. et al. Modeling and direct simulation of velocity fluctuations and particle-velocity correlations in sedimentation. *Journal of Fluids Engineering*, American Society of Mechanical Engineers, v. 124, n. 4, p. 957–968, 2002. Citado 4 vezes nas páginas [35](#), [56](#), [61](#) e [65](#).
- CUNHA, F. R.; SOUSA, A. J.; HINCH, E. J. Numerical simulation of velocity fluctuations and dispersion of sedimentating particles. *Chemical Engineering Communications*, Taylor & Francis, v. 189, n. 8, p. 1105–1129, 2002. Citado 2 vezes nas páginas [35](#) e [56](#).
- DUDUKOVIC, M. P.; LARACHI, F.; MILLS, P. L. Multiphase reactors—revisited. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 54, n. 13, p. 1975–1995, 1999. Citado na página [1](#).
- DURU, P. et al. Constitutive laws in liquid-fluidized beds. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge Univ Press, v. 452, p. 371–404, 2002. Citado 3 vezes nas páginas [2](#), [46](#) e [107](#).
- EINSTEIN, A. *Investigations on the Theory of the Brownian Movement*. [S.l.]: Courier Corporation, 1956. Citado na página [35](#).
- EVANGELISTA, F. H. S.; CUNHA, F. R. Velocity fluctuations in a dilute gas-suspension. In preparation, 2017. Citado na página [36](#).
- GONTIJO, R.; CUNHA, F. Dynamic numerical simulations of magnetically interacting suspensions in creeping flow. *Powder Technology*, Elsevier, v. 279, p. 146–165, 2015. Citado na página [4](#).
- GUAZZELLI, É.; HINCH, J. Fluctuations and instability in sedimentation. *Annual Review of Fluid Mechanics*, Annual Reviews, v. 43, p. 97–116, 2011. Citado 3 vezes nas páginas [37](#), [46](#) e [86](#).
- HARRIS, S.; CRIGHTON, D. Solitons, solitary waves, and voidage disturbances in gas-fluidized beds. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge Univ Press, v. 266, p. 243–276, 1994. Citado na página [47](#).
- HINCH, E. J. *Disorder and Mixing*. Dordrecht: Kluwer Academic, 1988. Citado 6 vezes nas páginas [v](#), [vi](#), [vii](#), [34](#), [36](#) e [107](#).
- IRVING, J.; KIRKWOOD, J. G. The statistical mechanical theory of transport processes. iv. the equations of hydrodynamics. *The Journal of chemical physics*, AIP Publishing, v. 18, n. 6, p. 817–829, 1950. Citado na página [40](#).

- KIM, S.; KARRILA, S. J. *Microhydrodynamics: Principles and Selected Applications*. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 1991. Citado 6 vezes nas páginas [vii](#), [21](#), [22](#), [24](#), [25](#) e [27](#).
- KOCH, D. L. Hydrodynamic diffusion in a suspension of sedimenting point particles with periodic boundary conditions. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 6, n. 9, p. 2894–2900, 1994. Citado na página [35](#).
- LADD, A. J. C. Sedimentation of homogeneous suspensions of non-brownian spheres. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 9, n. 3, p. 491–499, 1997. Citado na página [35](#).
- LAWRENCE, C. J.; MEI, R. Long-time behaviour of the drag on a body in impulsive motion. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge Univ Press, v. 283, p. 307–327, 1995. Citado na página [103](#).
- LIMA, E. L. *Curso de Análise, vol. 2*. [S.l.: s.n.], 1976. Citado na página [24](#).
- LORENTZ, H. A. *Abhandlungen über theoretische Physik*. [S.l.]: BG Teubner, 1907. Citado na página [22](#).
- MCQUARRIE, D. A. *Statistical Mechanics*. [S.l.]: University Science Books, 2000. Citado 2 vezes nas páginas [30](#) e [32](#).
- NÄGELE, G. Brownian dynamics simulations. *Computational Condensed Matter Physics*, v. 37, n. 1, p. B4, 2006. Citado na página [55](#).
- NICOLAI, H.; GUAZZELLI, E. Effect of the vessel size on the hydrodynamic diffusion of sedimenting spheres. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 7, n. 1, p. 3–5, 1995. Citado na página [35](#).
- NICOLAI, H. et al. Particle velocity fluctuations and hydrodynamic self-diffusion of sedimenting non-brownian spheres. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 7, n. 1, p. 12–23, 1995. Citado na página [67](#).
- NITSCHKE, J.; BATCHELOR, G. Break-up of a falling drop containing dispersed particles. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge Univ Press, v. 340, p. 161–175, 1997. Citado 3 vezes nas páginas [ix](#), [83](#) e [85](#).
- PADDING, J.; LOUIS, A. Hydrodynamic and brownian fluctuations in sedimenting suspensions. *Physical review letters*, APS, v. 93, n. 22, p. 220601, 2004. Citado na página [3](#).
- PRESS, W. H. et al. *Numerical Recipes in FORTRAN*. [S.l.]: Cambridge Univ. Press, 1992. Citado na página [55](#).
- REYNOLDS, O.; BRIGHTMORE, A. W.; MOORBY, W. H. *The sub-mechanics of the universe*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1903. Citado na página [11](#).
- RICHARDSON, J. F.; ZAKI, W. N. Sedimentation and fluidization: Part i. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, v. 32, p. 35–52, 1954. Citado 2 vezes nas páginas [1](#) e [47](#).
- ROTNE, J.; PRAGER, S. Variational treatment of hydrodynamic interaction in polymers. *The Journal of Chemical Physics*, AIP Publishing, v. 50, n. 11, p. 4831–4837, 1969. Citado na página [84](#).
- RUSSEL, W. B.; SAVILLE, D. A.; SCHOWALTER, W. R. *Colloidal Dispersions*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1989. Citado 3 vezes nas páginas [22](#), [31](#) e [32](#).

SAFFMAN, P. On the stability of laminar flow of a dusty gas. *Journal of fluid mechanics*, Cambridge Univ Press, v. 13, n. 01, p. 120–128, 1962. Citado 3 vezes nas páginas 1, 35 e 41.

SOBRAL, Y.; OLIVEIRA, T.; CUNHA, F. On the unsteady forces during the motion of a sedimenting particle. *Powder Technology*, Elsevier, v. 178, n. 2, p. 129–141, 2007. Citado na página 98.

SOBRAL, Y. D. Estabilidade hidrodinâmica e magnética de leitos fluidizados. *ENM/FT/UnB, Dissertação de Mestrado em Engenharia Mecânica DM-73, 315p*, 2004. Citado 2 vezes nas páginas vii e 2.

TEE, S.-Y. et al. Velocity fluctuations in a low-reynolds-number fluidized bed. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge Univ Press, v. 596, p. 467–475, 2008. Citado na página 2.

TIMOSHENKO, S. P.; GOODIER, J. N. *Theory of Elasticity*. New York, NY: McGraw-Hill, 1970. Citado na página 57.

TORRES, W. P.; SOBRAL, Y. D.; CUNHA, F. R. Uma investigação experimental de ondas de concentração em leitos fluidizados líquido-sólido. parte 1: Caracterização do sistema de fluidização e identificação de instabilidades. 2004. Citado 2 vezes nas páginas vii e 3.

TRITTON, D. J. *Physical fluid dynamics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. Citado na página 42.

WIKIPEDIA. *Trilinear Interpolation*. [S.l.], 2017. Disponível em: <[https://en.wikipedia.org/wiki/Trilinear\\_interpolation](https://en.wikipedia.org/wiki/Trilinear_interpolation)>. Citado 2 vezes nas páginas viii e 63.

ZWANZIG, R. *Nonequilibrium Statistical Mechanics*. [S.l.]: Oxford University Press, 2001. Citado na página 32.