

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DIRETA DO MOVIMENTO DE
PARTÍCULAS EM SUSPENSÕES MONO E BIDISPERSAS**Gustavo Coelho Abade**Universidade de Brasília, Departamento de Engenharia Mecânica
Campus Universitário Darcy Ribeiro, 70910-900, Brasília-DF, Brasil
gustavo@vortex.unb.br**Francisco Ricardo da Cunha**Universidade de Brasília, Departamento de Engenharia Mecânica
Campus Universitário Darcy Ribeiro, 70910-900, Brasília-DF, Brasil
frcunha@unb.br

Resumo. No presente trabalho, investiga-se a sedimentação de suspensões randômicas, mono e bidispersas num recipiente com lados periódicos por meio de simulação numérica direta. Determinam-se velocidades médias de sedimentação e sua variância para mono e bidispersões, avaliadas sobre um grande número de configurações. As simulações indicam que as variações na velocidade das partículas se devem às mudanças nas configurações das partículas vizinhas e às interações hidrodinâmicas viscosas. É mostrado como a velocidade de sedimentação e sua variância dependem do tamanho de um sistema com condições de contorno periódicas. É também explorado o efeito de polidispersidade, concentração de partículas e condição de impenetrabilidade do fundo da célula de simulação sobre as flutuações de velocidade. A partir de evoluções temporais, obtêm-se funções de autocorrelação de velocidade, tempos de correlação e coeficientes de difusão hidrodinâmica. Os resultados para a velocidade média de sedimentação apresentam-se em concordância com predições teóricas e correlações experimentais. Os resultados para a difusividade hidrodinâmica mostram forte anisotropia vertical-horizontal.

Palavras chave: suspensões randômicas, sedimentação, interações de partículas, flutuações de velocidade

1. Introdução

O presente trabalho tem como escopo geral o estudo micro-estrutural de sistemas fluido-partícula cuja dinâmica é norteadada por interações hidrodinâmicas de longo alcance mediadas por um fluido Newtoniano incompressível. Estes sistemas bifásicos estão envolvidos num grande número de aplicações em diversas áreas do conhecimento científico e tecnológico, sendo que o caso particular de processos de sedimentação de suspensões encontra larga aplicação industrial em procedimentos de separação partícula-fluido, como em plantas de tratamento de água e processamento de fluidos de mineração.

Análises fenomenológicas de escoamentos particulados comumente requerem simulações numéricas diretas para a descrição da dinâmica da fase particulada com vistas à predição de propriedades transporte. Trabalhos como o de Brady e Bossis, 1988 e, recentemente, Sierou and Brady, 2001 apresentam técnicas para simulação de interações hidrodinâmicas entre partículas suspensas em fluido Newtoniano sob a hipótese de escoamento em baixo número de Reynolds. Um método de expansões multipolo para o cálculo de interações hidrodinâmicas entre partículas rígidas foi desenvolvido por Ladd, 1988, e posteriormente aplicado a simulações numéricas (Ladd, 1993). Simulações numéricas de monodispersões realizadas por Cunha, 1995 mostraram flutuações de velocidade divergentes, em contraste com resultados experimentais (Nicolai e Guazzelli, 1995) que reportam flutuações independentes do tamanho do domínio. Hinch, 1988 e Cunha, 1997 discutem o problema da divergência das flutuações de velocidade em termos de análise de escala para suspensões monodispersas randômicas, onde uma flutuação típica do número N de partículas é $O(\sqrt{N})$.

Na presente análise, aplica-se uma abordagem focalizada na física da micro-escala para a predição de comportamentos globais e propriedades macroscópicas de suspensões mono e bidispersas sujeitas ao processo de sedimentação devido à ação de uma força de campo proporcional à densidade. As análises micro-estruturais são realizadas via simulações numéricas diretas baseadas num método Euleriano-Lagrangeano de descrição da mecânica do sistema bifásico, em continuação aos trabalhos anteriormente publicados (Abade e Cunha, 2001a,b).

As seções que seguem se organizam de forma a apresentar o problema e suas hipóteses fundamentais, assim como estabelecer um acordo sobre a terminologia dos parâmetros do sistema particulado. Na seção 3 descreve-se o método utilizado para as simulações diretas de suspensões, sumariando idéias afins de estrutura periódica

tridimensional, tensores mobilidade e interações hidrodinâmicas interpartícula. Na seção 4, são apresentados resultados de velocidade média de sedimentação e flutuações de velocidade, avaliadas sobre micro-estruturas estáticas, estabelecendo-se comparações com previsões teóricas e correlações experimentais. Apresentam-se ainda funções de autocorrelação de velocidade, tempos de correlação e coeficientes de dispersão hidrodinâmica a partir de simulações dinâmicas do processo de sedimentação.

2. Descrição do problema

Considera-se uma suspensão composta de N partículas esféricas rígidas, que podem diferir em raio e densidade, interagindo hidrodinamicamente enquanto sedimentam através de um fluido Newtoniano de viscosidade μ e densidade ρ_f , sob condições de baixo número de Reynolds. O sistema ocupa um domínio tridimensional representado por uma célula paralelepipedal com dimensões $d \times \ell \times h$ e condições de contorno periódicas em todas as direções. Para a simulação de uma suspensão infinita, as células unitárias compõem uma estrutura periódica tridimensional como uma *lattice* de Bravais (Born e Huang, 1954).

Para o caso geral de uma fase particulada polidispersa composta por m espécies, o raio, a densidade, o número de densidade e a concentração característicos de cada espécie s serão denotados por a_s , ρ_s , n_s e ϕ_s , respectivamente. Os parâmetros adimensionais de polidispersidade relativos a uma espécie s serão representados por razões de aspecto λ_s e razões de densidade reduzida η_s como segue

$$\lambda_s = \frac{a_s}{a}, \quad \eta_s = \frac{\rho_s - \rho_f}{\rho - \rho_f}, \quad (s = 1, 2, \dots, m), \quad (1)$$

em que a e ρ correspondem, respectivamente, ao raio e densidade característicos da espécie adotada como referência para a adimensionalização do problema.

A velocidade terminal de uma partícula isolada, a difusividade ordinária de Stokes-Einstein (1956) e o número de Péclet relativos a uma espécie s são dadas por

$$\mathbf{U}_0^{(s)} = \eta_s \lambda_s^2 \mathbf{U}_0, \quad D_0^{(s)} = \lambda_s^{-1} D_0, \quad Pe^{(s)} = \eta_s \lambda_s^2 Pe, \quad (s = 1, \dots, m) \quad (2)$$

respectivamente, em que

$$\mathbf{U}_0 = \frac{2}{9\mu} a^2 (\rho - \rho_f) \mathbf{g}, \quad D_0 = \frac{\kappa T}{6\pi\mu a}, \quad Pe = \frac{aU_0}{D_0}, \quad (3)$$

são as grandezas relativas à espécie referência, sendo \mathbf{g} a força gravitacional por unidade de massa, κ a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta.

A grandezas com dimensão de comprimento (vetores posição, distância relativa entre esferas e dimensões do domínio) serão adimensionalizadas considerando-se a como comprimento característico. Para a adimensionalização das forças, utiliza-se o arrasto hidrodinâmico de Stokes $6\pi\mu a U_0$ sobre uma partícula isolada, sedimentando com velocidade terminal U_0 .

O problema posto é estudado para o caso limite de alto número de Péclet ($Pe \gg 1$), o qual caracteriza uma suspensão não Browniana, e baixo número de Reynolds de partícula, que, ao ser representado por $Re = \tau_f / \tau_s \ll 1$, em que $\tau_f = a^2 / \nu$ é o tempo de relaxação viscosa e $\tau_s = a / U_0$ é uma escala de tempo característica do movimento da partícula, reflete a completa separação entre escalas de tempo das dinâmicas do fluido (difusão de vorticidade) e das partículas. Desconsidera-se ainda a inércia da fase particulada, sendo o problema de cálculo de interações hidrodinâmicas interpartícula caracterizado como sendo do tipo mobilidade.

3. Simulações numéricas

O novo esquema numérico de simulação proposto baseia-se num modelo Euleriano-Lagrangeano de descrição do sistema bifásico fluido-partícula. A descrição Euleriana é aplicada à fase fluida e está embasada nas equações governantes para o campo de escoamento, representadas pelas equações de Stokes, sujeitas a um conjunto de condições de contorno nos limites do domínio e na superfície das partículas em suspensão. A solução das equações governantes permite modelar as interações interpartícula de longo alcance, descritas por um tensor simétrico e positivo definido que depende unicamente da distribuição espacial das partículas em suspensão.

A formulação Lagrangeana é representada por um conjunto de equações diferenciais ordinárias que descrevem a evolução temporal de cada um dos espécimes constituintes da fase particulada. O acoplamento entre as dinâmicas do fluido e da partícula é realizada mediante utilização da Lei de Faxén, a qual relaciona a velocidade de uma partícula α com campo de escoamento em sua vizinhança.

3.1. Interações hidrodinâmicas

Tendo em vista o bem conhecido problema de convergência inerente ao lento decaimento dos potenciais hidrodinâmicos interpartícula e a conveniência computacional de se utilizar sistemas periódicos em simulações de

suspensões infinitas, o esquema numérico utilizado para avaliação das interações hidrodinâmicas numa suspensão heterogênea está baseado na técnica de Ewald, 1921 aplicada ao tensor mobilidade hidrodinâmica de Rotne e Prager, 1969, segundo formulação proposta por Beenakker, 1986. A matriz mobilidade hidrodinâmica resultante inclui todos os potenciais hidrodinâmicos *far-field* não convergentes, os quais constituem uma aproximação ponto-partícula, sendo a finitude das partículas considerada mediante inclusão de um quadrupolo degenerado.

Para efeito de convergência das interações e aplicabilidade do tensor mobilidade supracitado, utiliza-se de uma estrutura periódica tridimensional, nos moldes de uma *lattice* de Bravais (Born e Huang, 1954), para a composição do sistema particulado. Uma breve descrição geométrica do sistema periódico é apresentada a seguir.

Sejam os centros das N esferas em uma célula unitária denotados pelo conjunto de vetores $\mathcal{C}_N = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$. Considere uma *lattice* periódica, cujas células unitárias possuem dimensões $d \times \ell \times 2h$, na qual o conjunto de vetores posição das partículas assume a forma geral $\mathcal{C}_N = (\mathbf{x}_{\gamma_1}, \dots, \mathbf{x}_{\gamma_N}) = (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_\gamma, \dots, \mathbf{x}_N + \mathbf{x}_\gamma)$, em que

$$\mathbf{x}_\gamma = (\gamma_1 d, \gamma_2 \ell, \gamma_3 2h), \quad (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (4)$$

define os pontos da *lattice*, construídos pela combinação linear dos vetores básicos ortogonais $d\mathbf{e}_1, \ell\mathbf{e}_2, 2h\mathbf{e}_3$, utilizando os coeficientes inteiros $\gamma = \{\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3\}$, denominados índices da célula. O conjunto de vetores $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ constitui a base canônica do espaço Euclidiano.

Os vetores de *lattice* recíprocos \mathbf{k}_ζ são construídos de modo que a função $e^{i\mathbf{k}_\zeta \cdot \mathbf{x}_\gamma}$ seja periódica em relação aos vetores básicos e assumam valor unitário para todo $\gamma \in \mathbb{Z}$, assumindo portanto a forma

$$\mathbf{k}_\zeta = 2\pi \left(\frac{\zeta_1}{d}, \frac{\zeta_2}{\ell}, \frac{\zeta_3}{2h} \right), \quad (\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (5)$$

em que $\zeta = \{\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3\}$ indexa as células da *lattice* recíproca.

Considerando que as partículas α e β pertençam a espécies s e p respectivamente, a velocidade de sedimentação de uma partícula α é dada pela Lei de Faxén, representada por

$$\mathbf{U}^\alpha = \mathbf{M}^\alpha(\xi) \cdot \mathbf{F}^\alpha + \sum_{\beta=1}^N \mathbf{G}(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha, \xi) \cdot \mathbf{F}^\beta, \quad (6)$$

em que $\mathbf{M}^\alpha(\xi)$ é a mobilidade associada à partícula α isolada, $\mathbf{F}^\alpha = -\eta_s \lambda_s^3 \mathbf{e}_3 + \mathbf{f}^\alpha$ é a força atuando sobre a partícula α , sendo $-\eta_s \lambda_s^3 \mathbf{e}_3$ o peso líquido, \mathbf{f}^α uma força de curto alcance (lubrificação e contato), tratada com detalhes posteriormente, e

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha) = \sum_{\substack{\gamma \\ \mathbf{x}_{\gamma\beta} \neq \mathbf{x}_\alpha}} \mathbf{J}^{(ps)}(\mathbf{x}_{\gamma\beta} - \mathbf{x}_\alpha) + \frac{1}{V} \sum_{\substack{\zeta \\ \mathbf{k}_\zeta \neq \mathbf{0}}} \mathbf{M}^{(rs)}(\mathbf{k}_\zeta) \Theta \quad (7)$$

é a mobilidade hidrodinâmica do par $\alpha - \beta$ de partículas, a qual inclui termos relativos às somas nos espaços físico e recíproco, cuja convergência é controlada pelo parâmetro $\xi = \pi^{1/2} V^{-1/3}$, em que $V = d\ell \times 2h$ é o volume da célula unitária. Pela imposição de uma condição de velocidade vertical nula no fundo da célula utilizando-se de um sistema de imagens (Cunha, 1995), o tensor $\mathbf{J}^{(ps)}$ e a função Θ são definidos por

$$\mathbf{J}^{(ps)} = \mathbf{M}^{(ps)}(\mathbf{x}_{\gamma\beta}^s - \mathbf{x}_\alpha, \xi) - \mathbf{M}^{(ps)}(\mathbf{x}_{\gamma\beta}^i - \mathbf{x}_\alpha, \xi) \quad (8)$$

e

$$\Theta = \cos[\mathbf{k}_\zeta \cdot (\mathbf{x}_\beta^s - \mathbf{x}_\alpha)] - \cos[\mathbf{k}_\zeta \cdot (\mathbf{x}_\beta^i - \mathbf{x}_\alpha)] \quad (9)$$

em que os vetores $\mathbf{x}_{\gamma\beta}^s = (x, y, z) + \mathbf{x}_\gamma$ e $\mathbf{x}_{\gamma\beta}^i = (x, y, -z) + \mathbf{x}_\gamma$ localizam, respectivamente, os pontos fonte e imagem no domínio da *lattice* e $\mathbf{M}^{(ps)}$ é a função de Green periódica no espaço físico, cuja expressão em sua forma adimensionalizada pode ser encontrada em trabalhos anteriores (Abade e Cunha, 2001a,b).

As simulações da evolução temporal do processo de sedimentação para sistemas em que se desconsidera a inércia da fase particulada são conduzidas conforme a seguinte equação Lagrangeana da partícula

$$\frac{d\mathbf{x}_\alpha}{dt} = \mathbf{U}^\alpha \quad (10)$$

em que \mathbf{U}^α é fornecida pela Eq. (6), sendo necessária uma condição inicial para distribuição das partículas, fornecida pelo conjunto de vetores posição $\mathcal{C}_N = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$.

O problema de valor inicial supracitado requer a resolução de $3N$ equações diferenciais ordinárias acopladas, as quais são integradas numericamente por meio de um algoritmo Runge-Kutta de quarta ordem.

Deve ser ainda mencionado que a utilização de um sistema de imagens apresenta desvantagens com relação à formulação de mobilidades totalmente periódicas do ponto de vista do esforço computacional. Inicialmente por

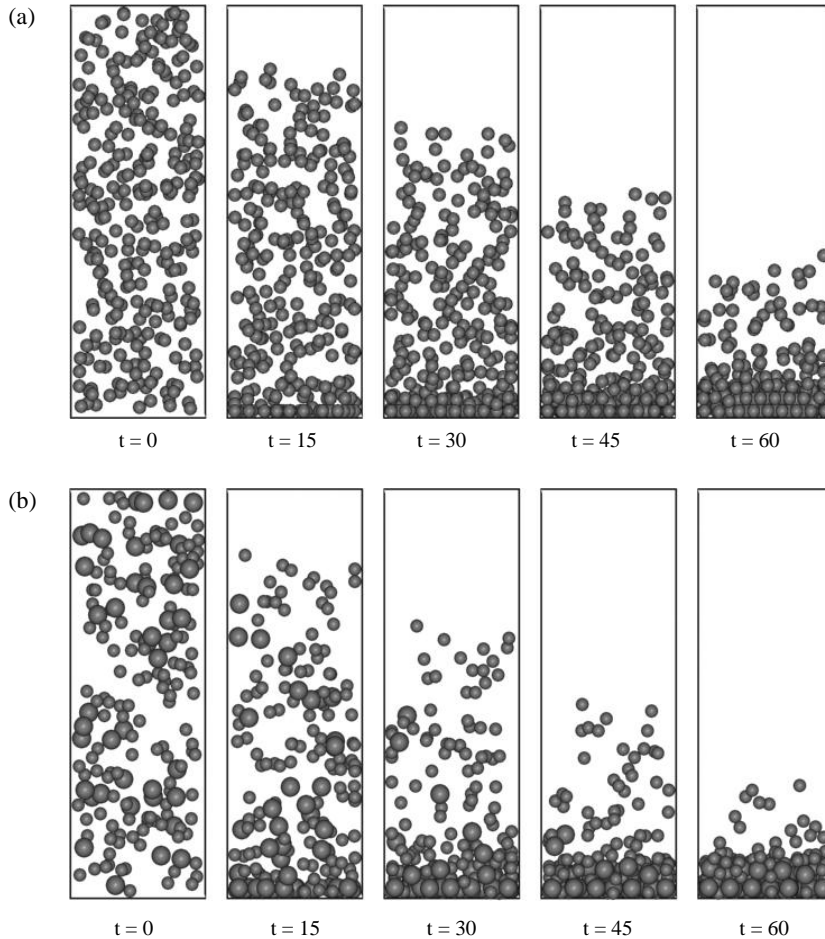


Figura 1: Evolução temporal típica do processo de sedimentação para 60 tempos de Stokes (a/U_0). Em (a) representa-se a evolução de uma monodispersão com $\phi = 0.05$ e em (b) a evolução de uma bidispersão com $\phi = 0.05$ e espécies com razão de aspecto $a_2/a_1 = 1.5$, distribuídas randomicamente a iguais frações volumétricas.

não ser susceptível ao procedimento de tabelamento das funções de Green (Abade e Cunha, 2001a), responsável por uma redução de 90 a 98% no tempo de CPU, uma vez que requer elevado consumo de memória, ainda incompatível com os recursos computacionais de que dispomos. Um outro aspecto é aquele relativo à simetria das funções de Green periódicas com relação a partículas de mesma espécie, característica que permite a redução das operações em um número proporcional a $\sum_{s=1}^m (N_s - 1)^2/2$, em que N_s denota o número de partículas da espécie s e m é o número de espécies diferindo em raio.

3.2. Forças repulsivas de curto alcance

Conforme apresentado em seções precedentes, a formulação adotada para a solução do escoamento fluido induzido pelas partículas em sedimentação considera apenas potenciais hidrodinâmicos *far-field*. Este nível de aproximação das interações, embora seja suficiente para a descrição do processo de sedimentação em suspensões no regime semidiluído, não permite que efeitos de lubrificação, oriundos da pressão dinâmica no filme de fluido entre as superfícies de partículas em estreita aproximação, sejam capturados. Como consequência, durante a evolução do processo de sedimentação, é possível a ocorrência de erros numéricos devido a *overlaps* ocasionais entre esferas. Este problema torna-se crítico em regiões de elevada fração volumétrica da fase sólida, em especial no fundo da célula de simulação onde ocorre formação de um sedimento a concentrações próximas do empacotamento máximo, conforme representado na Fig. (1).

A abordagem do problema embasada na teoria da lubrificação exigiria, além da inclusão de termos *near-field*, o emprego de uma formulação do tipo resistência $O(N^3)$, inerentemente exigente em termos computacionais. Propõe-se portanto a utilização de forças artificiais de repulsão, em conformidade com Cunha, 1995, que ofereçam resistência ao movimento relativo de esferas em aproximação simulando de forma satisfatória o efeito de lubrificação. Sendo as partículas α e β pertencentes às espécies s e p , respectivamente, a força sobre a partícula

α devido à partícula β atuando na direção da linha que une os centros das esferas em questão é dada por

$$\mathbf{f}_l^\alpha = C_1 \eta_p \lambda_p^3 \exp \left[-\frac{(-\varepsilon_{\alpha\beta})}{\lambda_p C_2} \right] \hat{\mathbf{r}}, \quad \text{para } 0 < (-\varepsilon_{\alpha\beta}) < \varepsilon_0 \quad (11)$$

em que C_1 e C_2 são parâmetros numéricos arbitrários que representam, respectivamente, a intensidade e a faixa de atuação da força, $\varepsilon_{\alpha\beta} = (\lambda_s + \lambda_p) - |\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta|$ é o *overlap* virtual entre as esferas e ε_0 é a máxima separação entre a superfície das partículas para a qual a força é calculada. A determinação dos parâmetros C_1 , C_2 e ε_0 realizou-se por meio de experimentos numéricos com um par de partículas, considerando diferentes relações entre raios, nos quais a aproximação relativa foi induzida pela sedimentação diferencial.

Embora as forças de lubrificação apresentem um caráter divergente no regime viscoso que evita o contato superficial entre as esferas, considera-se uma força restauradora devida a eventuais colisões elásticas provenientes de inaccurácias numéricas, em parte associadas a limitações de passos de tempo. Por simplicidade, utiliza-se uma relação linear para o contato interpartícula de tal forma que a força normal elástica seja proporcional ao *overlap* virtual das partículas em colisão. Tem-se, portanto

$$\mathbf{f}_c^\alpha = -k\varepsilon_{\alpha\beta}\hat{\mathbf{r}}, \quad \text{para } \varepsilon_{\alpha\beta} > 0 \quad (12)$$

em que k denota a constante de elasticidade cujo valor depende de propriedades mecânicas (número de Poisson e módulo de Young) e geométricas das esferas em colisão.

As forças repulsivas supracitadas são também empregadas para modelar interações partícula-parede em simulações com contornos impenetráveis.

4. Resultados e discussão

4.1. Simulações no tempo zero

Na presente seção, apresenta-se-á a obtenção de propriedades transporte, tais como valores médios e flutuações da velocidade de sedimentação, avaliadas sobre diversas configurações randômicas, as quais compõem um conjunto ergódico e estatisticamente homogêneo. O procedimento numérico de geração das distribuições randômicas e igualmente prováveis é descrito em detalhes em trabalhos anteriores (Abade e Cunha, 2001a). Enfatizam-se os testes de validação do esquema numérico mediante comparação de resultados da relação funcional entre a velocidade média de sedimentação e a fração volumétrica da fase sólida, para sistemas randômicos mono e bidispersos, com aqueles preditos pela teoria e/ou verificados experimentalmente.

4.1.1. Velocidade média de sedimentação para monodispersões

A validação do método empregado para a geração da condição inicial do sistema particulado associado com a rotina de cálculo das interações é feita mediante comparação com resultados experimentais para a velocidade média de sedimentação em função da concentração, representados pela correlação de Richardson e Zaki, 1954

$$f(\phi) = \langle U \rangle / U_0 = (1 - \phi)^n, \quad (13)$$

para a qual foi assumido um expoente $n = 5$, e com a expressão assintótica de Batchelor, 1972, baseada na premissa de ergodicidade e homogeneidade estatística das distribuições, dada por

$$\langle U \rangle / U_0 \sim 1 - 5\phi + O(\phi^2) \quad (14)$$

Uma outra base de comparação teórica que se utiliza é representada pela expressão devida a Brady e Durlofsky, 1988, apresentada a seguir

$$f(\phi) = \frac{\langle U \rangle}{U_0} = 1 + \phi - \frac{1}{5}\phi^2 - \frac{6}{5}\phi \left(\frac{5 - \phi + 1/2\phi^2}{1 + 2\phi} \right), \quad (15)$$

obtida utilizando-se da aproximação de Rotne e Prager, 1969, e considerando a função de distribuição radial de Percus-Yevick.

A Figura (2-a) apresenta os resultados numéricos da velocidade média de sedimentação em função da fração volumétrica para monodispersões, estabelecendo a comparação com os resultados preditos pelas Eqs. (13) a (15). Para condições diluídas ($\phi \leq 0.03$), os resultados numéricos fornecem valores abaixo dos valores preditos tanto pela teoria quanto pelos experimentos, sendo a concordância verificada apenas dentro da faixa do erro estatístico. Esta discordância em termos da média se deve a efeitos de periodicidade e finitude do sistema, os quais serão melhor explorados na Seção 4.1.3, que impõem a necessidade de um número maior de partículas para que o sistema assuma características randômicas preponderantes sobre o grau de ordenação conferido pela *lattice*. Para concentrações no intervalo semidiluído ($0.03 < \phi < 0.10$), as simulações proveêm resultados em boa concordância com os preditos pela correlação empírica, ressaltando que o nível de aproximação das interações

captura o comportamento dominante das suspensões em sedimentação. Para frações volumétricas acima de 15%, as velocidades médias são super-estimadas, o que reflete a necessidade por termos de alta ordem na aproximação das interações hidrodinâmicas.

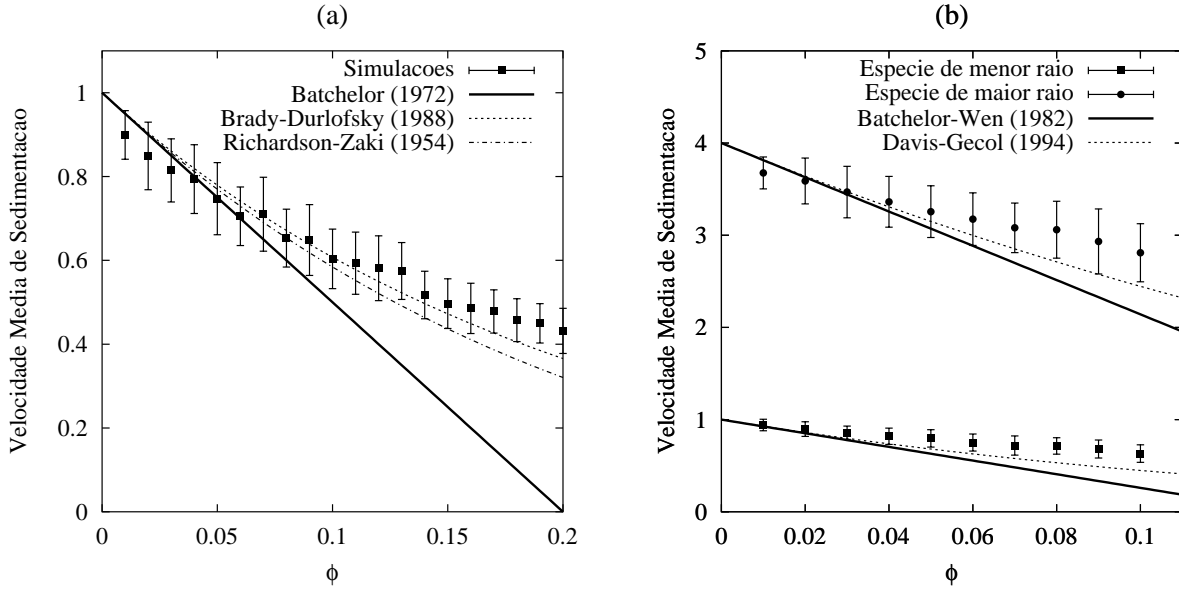


Figura 2: Velocidade média de sedimentação, adimensionalizada por U_0 , em função da fração volumétrica total para (a) monodispersões e (b) bidispersões com $\phi_1 = \phi_2 = \phi/2$ e $\lambda = a_2/a_1 = 2$.

4.1.2. Velocidade média de sedimentação para bidispersões

Apresenta-se nesta seção a validação dos resultados para a velocidade média de sedimentação numa suspensão composta por duas espécies de partículas diferindo apenas em raio. Como base de comparação, utiliza-se a teoria de Batchelor, 1982, para polidispersões diluídas, representada pela seguinte expressão

$$f_s(\phi) = \frac{\langle U^{(s)} \rangle}{U_0^{(s)}} \sim 1 + \sum_{p=1}^m S_{sp}(\lambda, \eta) \phi_p + O(\phi^2) \quad (s = 1, 2, \dots, m) \quad (16)$$

a qual fornece a velocidade média de sedimentação de cada espécie s numa suspensão composta de m espécies distintas. Os termos S_{sp} são coeficientes de sedimentação cujos valores dependem da razão de aspecto $\lambda = a_p/a_s$ e da razão de densidade reduzida $\eta = (\rho_p - \rho_f)/(\rho_s - \rho_f)$, sendo fornecidos em publicação de Batchelor e Wen, 1982, para várias combinações de λ e η .

Para se estabelecer a comparação em intervalos de fração volumétrica maiores, utiliza-se da correlação proposta por Davis e Gecol, 1994, apresentada a seguir

$$f_s = \frac{\langle U_s \rangle}{U_0} = \lambda_s^2 (1 - \phi)^{-S_{ss}} \left(1 + \sum_{p \neq s} (S_{sp} - S_{ss}) \phi_s \right) \quad (17)$$

em que os coeficientes S_{sp} assumem os valores apropriados providos por Batchelor e Wen, 1982.

Na Figura (2-b) são representados os resultados das simulações com bidispersões em comparação com aqueles preditos pelas Eqs. (16) e (17), para as quais foram adotados os valores $S_{11} = S_{22} = -5$, $S_{12} = -9.81$ e $S_{21} = -4.29$ para os coeficientes de sedimentação. As simulações se realizaram para bidispersões compostas por 1000 partículas e impondo-se concentrações iguais para ambas as espécies. Os valores médios e erros estatísticos foram avaliados sobre 100 configurações randômicas, independentes e igualmente prováveis.

Observa-se da Fig. (2-b) que as regiões de melhor concordância, no regime diluído ($\phi \leq 0.02$), com as Eqs. (16) e (17) diferem para as duas espécies. A razão desta diferença está no número de partículas que representa cada espécie em suspensão e na susceptibilidade aos efeitos de periodicidade e finitude do sistema. Uma vez impostas iguais frações volumétricas para as espécies, aquelas de maior raio possuirão menor número de elementos e, por conseqüência, apresentarão uma característica ordenada mais pronunciada. Desta forma, no regime diluído, os valores de velocidade média para a espécie de maior raio tendem a ser inferiores aos preditos por Batchelor e Wen, 1982, e Davis e Gecol, 1994, mas mantêm-se uma concordância dentro do erro estatístico.

4.1.3. Efeitos de finitude e periodicidade do sistema

Conforme ressaltado em trabalho de Philips et al., 1988, e extensamente verificado nas presentes simulações, a utilização de um sistema periódico na modelagem de suspensões randômicas infinitas dá margem a efeitos indesejáveis sobre algumas propriedades transporte, notadamente velocidade média de sedimentação e coeficientes de difusão hidrodinâmica, e que se mostram relativamente severos em problemas de sedimentação.

Embora tenha sido utilizado um procedimento estatisticamente rigoroso para a geração de condições iniciais randômicas no interior da célula de simulação, a repetibilidade da células no espaço para composição da *lattice* introduzirá um grau de periodicidade ao sistema, o qual será tanto maior quanto menor for a fração volumétrica da fase particulada. Em suma, as suspensões consideradas apresentarão características periódicas e randômicas cujas propriedades refletirão uma composição dos efeitos isolados. Uma representação simples desta superposição, sugerida por Philips et al., 1988, é apresentada a seguir para a dependência da taxa de sedimentação em relação à concentração

$$f(\phi) = \frac{\langle U_{\parallel} \rangle}{U_0} = 1 - \gamma_{ord}\phi^{1/3}N^{-1/3} - \gamma_{ran}\phi(1 - N^{-1}) \quad (18)$$

em que γ_{ord} e γ_{ran} são os coeficientes $O(\phi^{1/3})$ e $O(\phi)$, respectivamente, representativos das soluções assintóticas para distribuições ordenadas (Saffman, 1973) e randômicas.

Observa-se portanto que, efeitos de finitude e periodicidade decaem muito lentamente ($N^{-1/3}$) com o número de partículas, e para que haja preponderância segura de características randômicas do sistema exige-se $N \gg \phi^{-2}$, o que representa uma imposição extremamente severa em regime diluído e limitadora para simulações computacionais segundo métodos inerentemente $O(N^2)$.

4.1.4. Dependência das flutuações de velocidade com o tamanho do sistema

Nesta seção pretende-se verificar a dependência das flutuações da velocidade de sedimentação com relação ao tamanho numérico do sistema com o intuito de confirmar questões de divergência da variância de velocidade postas inicialmente por Caflish e Luke, 1985, e posteriormente confirmadas por Hinch, 1988, em termos de argumentos de escala.

Para suspensões monodispersas randômicas, mostra-se que a flutuação de velocidade $\langle U' \rangle$ aumenta com a dimensão linear ℓ do sistema de tal forma que a escala

$$\langle U' \rangle \sim U_0 \sqrt{\phi \frac{\ell}{a}} \quad (19)$$

representa esta dependência.

As presentes simulações foram conduzidas para mono e bidispersões de forma a verificar se efeitos de polidispersidade tendem a modificar a dependência representada pela Eq. (19).

Na Figura (3) é representada a dependência das flutuações de velocidade, nas direções paralela e perpendicular à gravidade, com relação ao parâmetro do sistema $\sqrt{\phi\ell/a}$. As simulações foram realizadas utilizando-se um número fixo de partículas ($N = 300$) distribuídas randomicamente no interior da célula totalmente periódica. Os valores médios e erros estatísticos das flutuações de velocidade foram avaliados sobre 100 configurações randômicas, independentes e igualmente prováveis.

Observa-se a forte característica linear da relação apresentada, em especial na direção paralela à gravidade, e conseqüente reprodução da proporcionalidade entre $\langle U' \rangle$ e $\sqrt{\phi\ell/a}$ predita pela Eq. (19), para o regime diluído (correspondente a baixos valores do parâmetro do sistema). A fuga do ajuste linear, conferido pela linha tracejada, e subseqüente saturação das flutuações são devidas ao aumento da fração volumétrica da fase particulada e conseqüente perda de mobilidade dos seus constituintes.

Na Figura (4) representam-se as flutuações de velocidade, nas direções paralela e perpendicular à gravidade, em função do parâmetro do sistema, para as mesmas condições das simulações realizadas no levantamento da Fig (3), exceto pela imposição de impenetrabilidade do fundo e topo da célula de simulação. A proporcionalidade representada pela Eq. (19) é também verificada para condições diluídas, sendo a fuga do ajuste linear e a saturação das flutuações devidas às mesmas razões explanadas em caso anterior. Entretanto, verifica-se que a amenização dos efeitos de periodicidade vertical pela impenetrabilidade teve reflexos na inclinação das curvas de ajuste linear no sentido de reduzir a anisotropia $\langle U'_{\parallel} \rangle / \langle U'_{\perp} \rangle$ de flutuações para proporções mais realísticas.

Por fim, representa-se na Fig. (5) a dependência das flutuações de velocidade, na direção paralela à gravidade, com relação ao parâmetro do sistema $\sqrt{\phi\ell/a}$ numa bidispersão caracterizada por $a_2/a_1 = 1.5$ e $\phi_1 = \phi_2 = \phi/2$ e composta de 300 partículas distribuídas randomicamente numa célula totalmente periódica. A proporcionalidade predita pela Eq. (19) é novamente verificada, sendo que a polidispersidade não induz, a princípio, um comportamento diferenciado da variância perante variações do parâmetro do sistema. Estabelecendo uma comparação com a Fig. (3), observa-se que a presença de partículas maiores em suspensão induz maiores níveis de flutuação de velocidade em partículas de raio unitário.

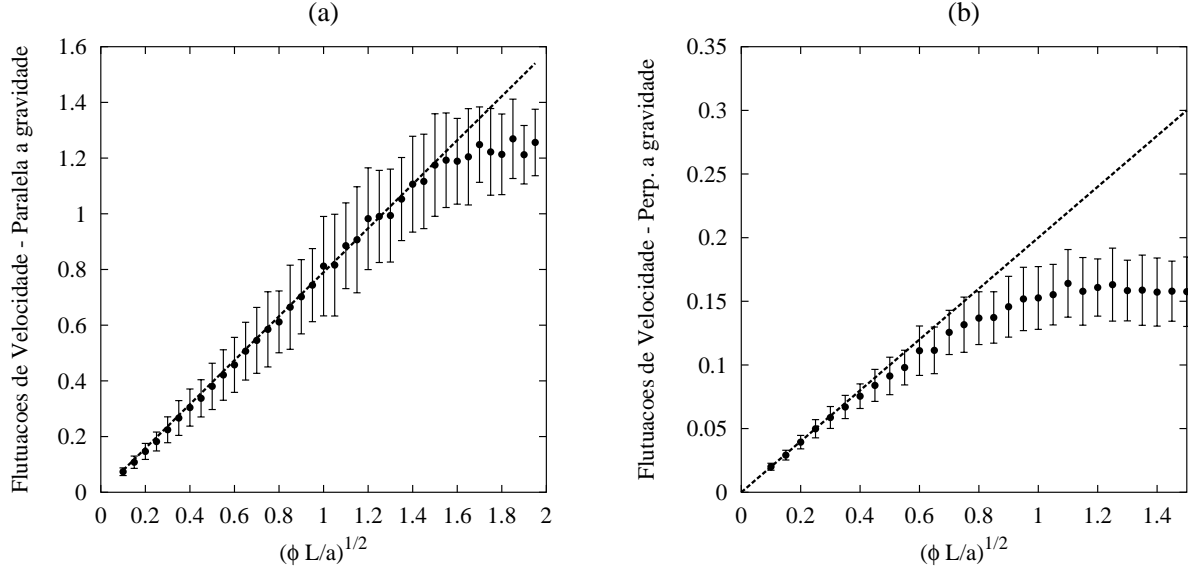


Figura 3: Flutuações de velocidade em função do parâmetro do sistema $\sqrt{\phi\ell/a}$ para uma suspensão monodispersa, contida numa célula com lados periódicos. As linhas tracejadas representam o ajuste linear (a) $\langle U'_{\parallel} \rangle / U_0 = 0.79\sqrt{\phi\ell/a}$ (paralela à gravidade); (b) $\langle U'_{\perp} \rangle / U_0 = 0.20\sqrt{\phi\ell/a}$ (perpendicular à gravidade).

4.2. Análise estatística da evolução temporal

A estatística de longo tempo realizada sobre evoluções temporais do processo de sedimentação consiste basicamente na verificação da decorrelação das velocidades das partículas mediante determinação das funções de autocorrelação, a partir das quais serão obtidos tempos de correlação e difusividades hidrodinâmicas. As funções de autocorrelação de flutuação de velocidade nas direções paralela e perpendicular à gravidade, as quais denotaremos por $C_{\parallel}(t)$ e $C_{\perp}(t)$, respectivamente, serão calculadas na forma

$$C(t) = \langle U'(t_0)U'(t_0 + t) \rangle \quad (20)$$

em que $\langle \rangle$ denota a média sobre as partículas em suspensão, sobre diferentes tempos iniciais t_0 e sobre as realizações a partir de condições iniciais independentes e igualmente prováveis. $U' = U - \bar{U}$ denota a flutuação local de velocidade, em que \bar{U} é a velocidade média avaliada sobre as partículas em suspensão.

A Figura (6) apresenta as funções de autocorrelação de velocidade normalizadas, $C(t)/C(0)$, para a evolução temporal de uma suspensão monodispersa a $\phi = 0.03$ durante um tempo adimensional de $100a/U_0$. Observa-se a tendência de decorrelação das velocidades em virtude do decaimento das funções de autocorrelação em direção ao valor zero, embora o tempo de evolução tenha sido insuficiente para que houvesse total decorrelação das velocidades na direção paralela à gravidade. Os valores médios e o erro estatístico das autocorrelações foram avaliados sobre apenas 10 realizações, por questões de tempo de CPU, não permitindo a eliminação completa de ruídos estatísticos na apresentação dos resultados.

O cálculo do coeficiente de dispersão hidrodinâmica, representado em forma tensorial por

$$\mathbf{D} = e_3 e_3 D_{\parallel} + (\mathbf{I} - e_3 e_3) D_{\perp} \quad (21)$$

é realizado mediante integração da função autocorrelação $C(t)$, conforme representado a seguir

$$D_{\parallel} = \int_0^{\infty} C_{\parallel}(\tau) d\tau \quad \text{e} \quad D_{\perp} = \int_0^{\infty} C_{\perp}(\tau) d\tau \quad (22)$$

A Figura (7) apresenta os coeficientes de dispersão hidrodinâmica obtidos via integração numérica das funções de autocorrelação representadas na Fig. (6). Observa-se uma anisotropia de difusividades $D_{\parallel}/D_{\perp} \approx 60$ elevada em comparação com resultados obtidos via simulação numérica, como os reportados por Cunha et al., 2001, ($D_{\parallel}/D_{\perp} \approx 10$), e aqueles obtidos nos experimentos, $D_{\parallel}/D_{\perp} \approx 5$ (Nicolai et al., 1995). Estas elevadas anisotropias dos coeficientes de dispersão se justificam pela utilização de condições de contorno totalmente periódicas, em especial na direção da gravidade, à luz da grande redução da razão D_{\parallel}/D_{\perp} obtidas por Cunha et al., 2001, pela imposição de impenetrabilidade do fundo e topo da célula de simulação e conseqüente atenuação dos efeitos da periodicidade vertical.

Por fim, na Fig. (8) são representados os tempos de correlação para as direções paralela e perpendicular à gravidade. As curvas representadas foram obtidas a partir da relação $\tau = D/\langle U'^2 \rangle$. Verifica-se uma anisotropia

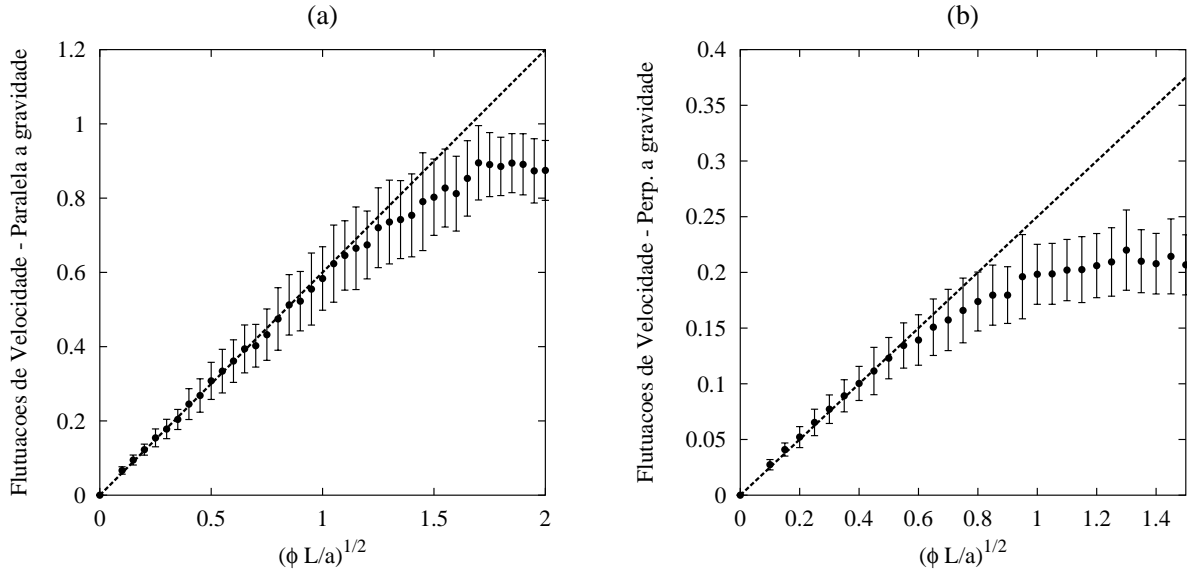


Figura 4: Flutuações de velocidade em função do parâmetro do sistema $\sqrt{\phi\ell/a}$ para uma suspensão monodispersa em domínio com fundo impenetrável e lados periódicos. As linhas tracejadas representam o ajuste linear (a) $\langle U'_{\parallel} \rangle / U_0 = 0.60\sqrt{\phi\ell/a}$ (paralela à gravidade); (b) $\langle U'_{\perp} \rangle / U_0 = 0.25\sqrt{\phi\ell/a}$ (perpendicular à gravidade).

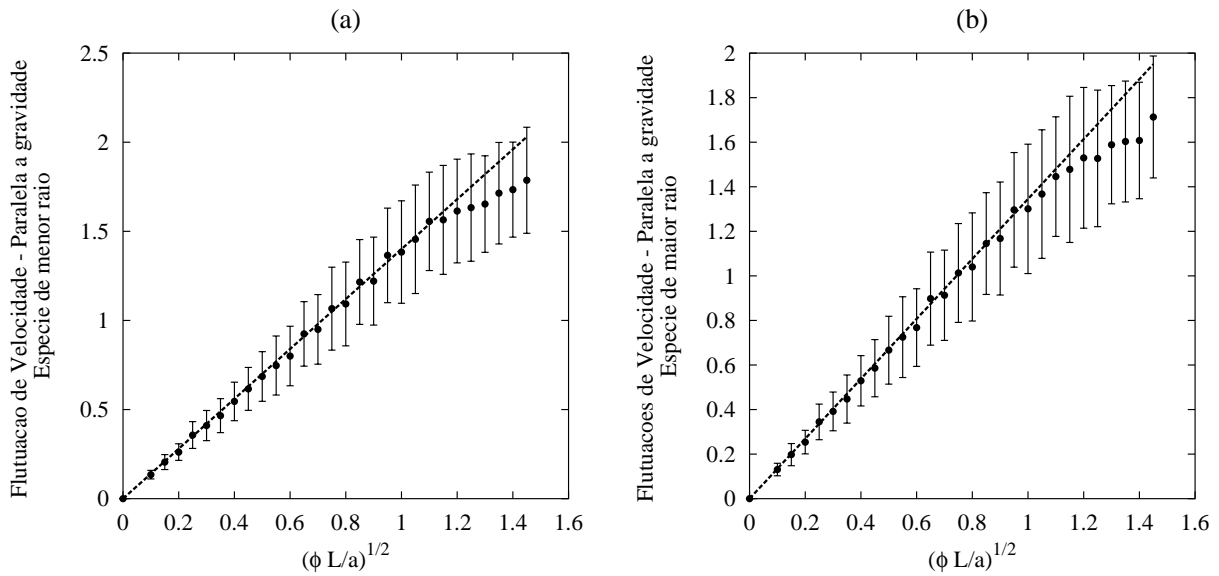


Figura 5: Flutuações de velocidade na direção paralela à gravidade em função do parâmetro do sistema $\sqrt{\phi\ell/a}$ para uma bidispersão ($a_2/a_1 = 1.5$ e $\phi_1 = \phi_2 = \phi/2$) em domínio periódico. As linhas tracejadas representam o ajuste linear (a) $\langle U'_1 \rangle / U_0 = 1.400\sqrt{\phi\ell/a}$ (espécie menor); (b) $\langle U'_2 \rangle / U_0 = 1.345\sqrt{\phi\ell/a}$ (espécie maior).

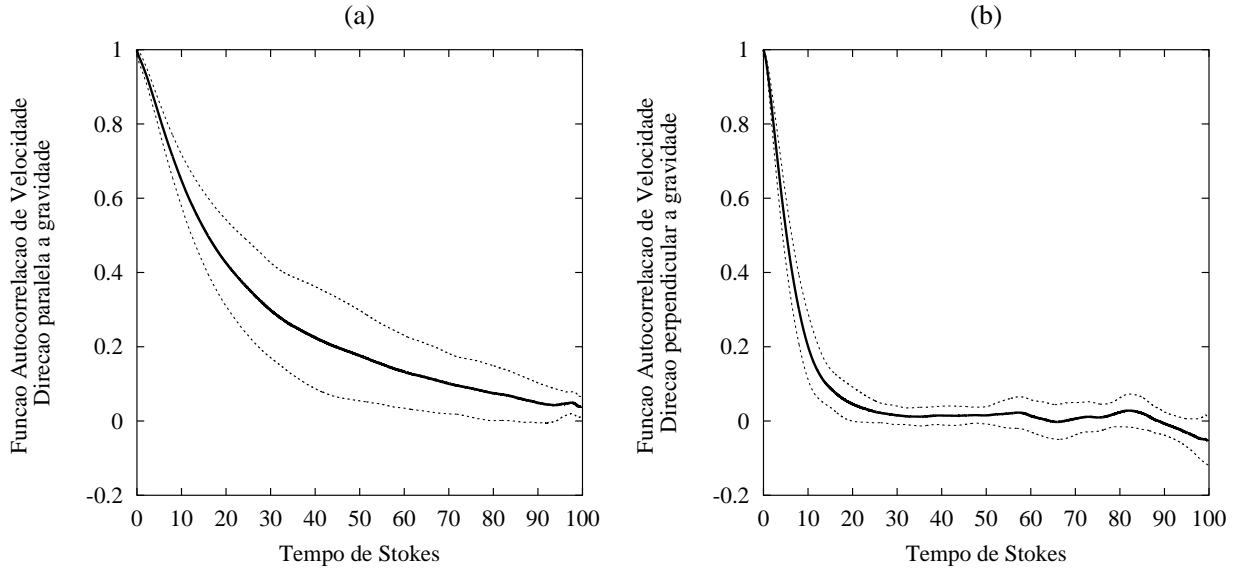


Figura 6: Funções de autocorrelação de velocidade em direções (a) paralela e (b) perpendicular à gravidade para uma suspensão monodispersa a $\phi = 0.03$ e uma evolução temporal de 100 tempos de Stokes. As linhas tracejadas correspondem ao erro estatístico.

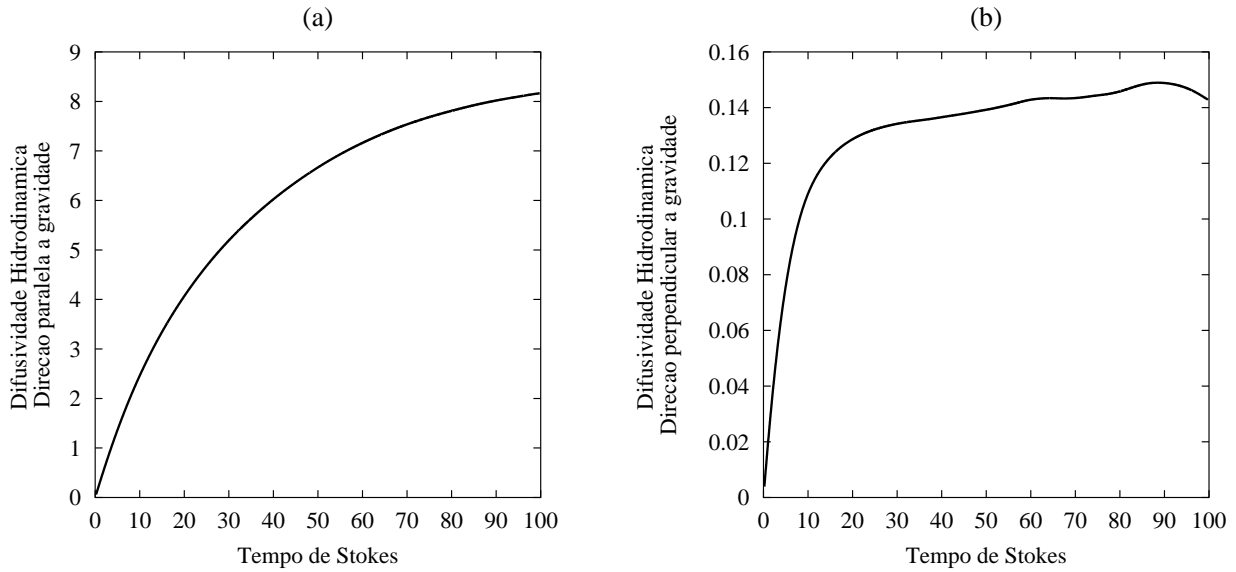


Figura 7: Difusividades hidrodinâmicas para as direções (a) paralela e (b) perpendicular à gravidade.

$\tau_{\parallel}/\tau_{\perp} \approx 4$, sendo o elevado valor encontrado para a razão D_{\parallel}/D_{\perp} devido à contribuição das razões da variância de velocidade $\langle U_{\parallel}^2 \rangle / \langle U_{\perp}^2 \rangle \approx 15$.

5. Conclusão

No presente trabalho, descreveu-se uma metodologia para simulação numérica de suspensões não coloidais, mono e bidispersas, embasada numa formulação Euleriana-Lagrangeana de descrição, sob a hipótese de escoamento em baixo número de Reynolds de partícula.

A partir de simulações no tempo zero, foram obtidas relações funcionais entre a velocidade média de sedimentação e a fração volumétrica da fase sólida para mono e bidispersões no regime semi-diluído. Em condições de regime diluído, boa concordância dos resultados com previsões teóricas e correlações empíricas é verificada dentro da região do erro estatístico. Ressalta-se o forte efeito da periodicidade sobre a velocidade média de sedimentação, o qual impõe a necessidade de elevado número de partículas para se recuperar relações assintóticas para a função $f(\phi)$ em casos limite de $\phi \ll 1$.

Foram ainda abordadas as questões de divergência das flutuações de velocidade com o tamanho numérico do

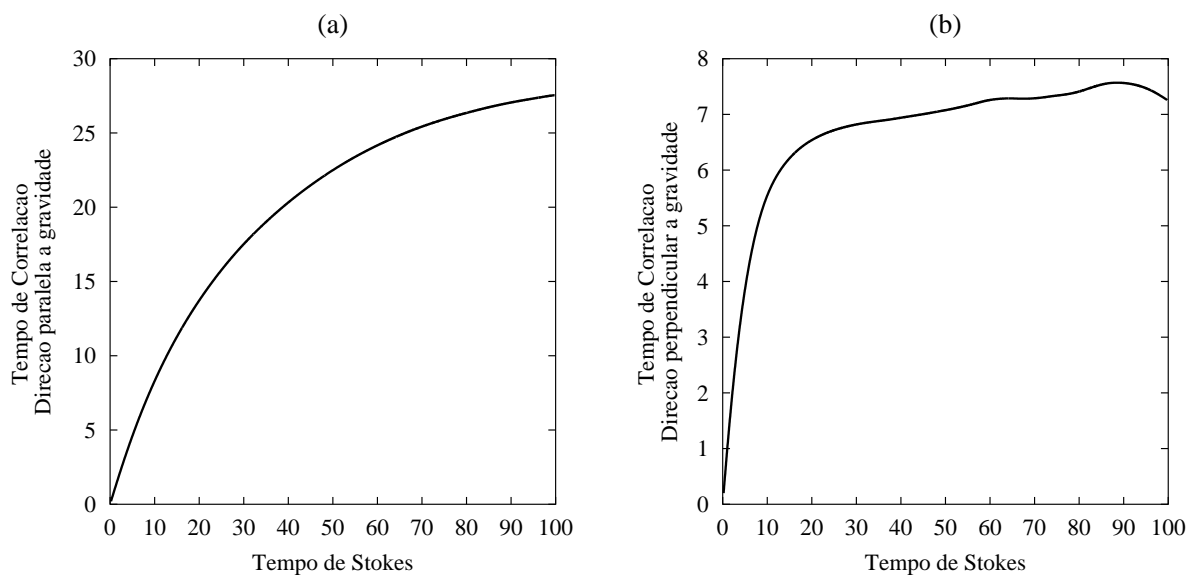


Figura 8: Tempos de Correlação para as direções (a) paralela e (b) perpendicular à gravidade.

sistema. Verificou-se que para os sistemas simulados, as flutuações de velocidade mostraram ser proporcionais ao parâmetro $\sqrt{\phi\ell/a}$, conforme predito pelas análises de escala (Hinch, 1988; Cunha, 1995). A imposição de impenetrabilidade do fundo da célula, assim como bidispersidade, não produziram qualquer modificação na dependência $\langle U' \rangle / U_0 \sim \sqrt{\phi\ell/a}$, a menos do coeficiente de proporcionalidade.

Resta, portanto, a implementação de simulações de dispersões confinadas, com condições de contorno de impenetrabilidade e não escorregamento impostas nas paredes da célula de simulação, na expectativa de que as flutuações de velocidade apresentem uma dependência $\langle U' \rangle / U_0 \sim \phi^{1/3}$ apenas com relação à fração volumétrica, para sistemas suficientemente grandes. Uma futura exploração das simulações dinâmicas com polidispersões poderá ser bastante instrutiva na medida em que há uma expectativa de que interações hidrodinâmicas mais intensas possam induzir mudanças micro-estruturais significativas num longo tempo de evolução, de forma a modificar a dependência das flutuações em relação ao tamanho do domínio.

Os resultados de simulações com imposição de impenetrabilidade do plano inferior da célula de simulação estão ainda restritos a micro-estruturas estáticas, o que se justifica pelo custo computacional ainda proibitivo. Face à redução da anisotropia de flutuações de velocidade verificadas, espera-se reproduzir, a partir de simulações dinâmicas, razões de difusividades hidrodinâmicas próximas às reportadas nos experimentos (Nicolai et al., 1995).

6. Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq-Brasília/Brasil e ao CTPetro-Finep pelo suporte financeiro.

7. Referências

- Abade, G. C. and Cunha, F. R., 2001a, Simulações Computacionais de Micro-estrutura de Suspensões, “XXII Congresso Ibero Latino Americano Sobre Métodos Computacionais Para Engenharia”, Campinas, São Paulo.
- Abade, G. C. and Cunha, F. R., 2001b, Um Método Para Simulações Computacionais de Sistemas particulados Randômicos com Interação Hidrodinâmica, “XVI Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica”, Uberlândia, Minas Gerais.
- Batchelor, G. K., 1972, Sedimentation in a Dilute Dispersion of Spheres, “J. Fluid Mech”, Vol. 52, pp. 245–286.
- Batchelor, G. K., 1982, Sedimentation in a Dilute Polydisperse System of Interacting Spheres. Part 1. General Theory, “J. Fluid Mech.”, Vol. 119, pp. 379–408.
- Batchelor, G. K. and Wen, C. S., 1982, Sedimentation in a Dilute Polydisperse System of Interacting Spheres. Part 2. Numerical Results, “J. Fluid Mech.”, Vol. 124, pp. 495–528.
- Beenakker, C. W. J., 1986, Ewald Sum of the Rotne-Prager Tensor, “J. Chem. Phys.”, Vol. 85, No. 3, pp. 1581–82.
- Born, M. and Huang, K., 1954, “Dynamical Theory of Crystal Lattices”, Clarendon Press, Oxford.
- Brady, J. F. and Bossis, G., 1988, Stokesian Dynamics, “Ann. Rev. Fluid Mech.”, Vol. 6, pp. 111–57.
- Caffish, R. E. and Luke, J. H. C., 1985, Variance in The Sedimentation Speed of a Suspension, “Phys. Fluids”,

Vol. 28, pp. 759–760.

- Cunha, F. R., 1995, “Hydrodynamic Dispersion in Suspensions”, PhD thesis, DAMTP - Cambridge University, England.
- Cunha, F. R., 1997, On The Fluctuations in a Random Suspension of Sedimenting Particles, “RBCM - J. of Braz. Soc. Mechanical Sciences”, Vol. XIX, No. 4, pp. 474–495.
- Cunha, F. R., Sousa, A. J., and Hinch, E. J., 2001, Numerical Simulations of Velocity Fluctuations and Dispersion of Sedimenting Particles, “Chem. Eng. Commun.”, in press.
- Davis, R. H. and Gecol, H., 1994, Hindered Settling Function with no Empirical Parameters for Polydisperse Suspensions, “AIChE Journal”, Vol. 40, No. 13, pp. 570–575.
- Ewald, P. P., 1921, Die Berechnung Optischer und Elektrostatischer Gitterpotentiale, “Ann. Phys. Lpz.”, Vol. 64, pp. 253.
- Hinch, E. J., 1988, “Disorder and Mixing”, chapter Sedimentation of Small, pp. 153–161. Kluwer Academic Publishers.
- Ladd, A. J. C., 1988, Hydrodynamic Interaction in a Suspension of Spherical Particles, “J. Chem. Phys.”, Vol. 88, pp. 5051–63.
- Ladd, A. J. C., 1993, Dynamical Simulations of Sedimenting Spheres, “Phys. Fluids A”, Vol. 5, No. 2, pp. 299–310.
- Nicolai, H. and Guazzelli, E., 1995, Effect of the Vessel Size on the Hydrodynamic Diffusion of Sedimenting Spheres, “Phys. Fluids”, Vol. 7, No. 1, pp. 3–5.
- Nicolai, H., Herzhaft, B., Hinch, J. E., Oger, L., and Guazzelli, E., 1995, Particle Velocity Fluctuations and Hydrodynamic Self-Diffusion of Sedimenting non-Brownian Spheres, “Phys. Fluids”, Vol. 7, No. 1, pp. 12–23.
- Nijboer, B. R. A. and Wette, F. W., 1957, On The Calculation of Lattices Sums, “Physica”, Vol. 23, pp. 309.
- Rosa, O. L. S., 1998, Flutuações e Dispersão em Sedimentação com Estratificação na Vertical, Master’s thesis, Universidade de Brasília, Brasília, DF.
- Rotne, J. and Prager, S., 1969, Variational Treatment of Hydrodynamic Interaction in Polymers, “J. Chem. Phys.”, Vol. 50, pp. 4831.
- Saffman, P. G., 1973, On The Settling Speed of Free and Fixed Suspensions, “Stud. Appl. Maths.”, Vol. 52, pp. 115–127.
- Sierou, A. and Brady, J. F., 2001, Accelerated Stokesian Dynamics Simulations, “J. Fluid Mech.”, Vol. 448, pp. 115–146.

DIRECT COMPUTER SIMULATION OF UNEQUAL PARTICLES MOTION IN SUSPENSIONS

Gustavo Coelho Abade

Universidade de Brasília, Departamento de Engenharia Mecânica, 70910-900, Brasília-DF, Brasil
gustavo@vortex.unb.br

Francisco Ricardo da Cunha

Universidade de Brasília, Departamento de Engenharia Mecânica, 70910-900, Brasília-DF, Brasil
frcunha@unb.br

Abstract. *The work investigates suspension of equal and unequal particles sedimenting in a box with periodic sides. Computer simulations of sedimentation velocity and its variance based on statistics over a large number of random configurations are calculated for monodisperse and bidisperse suspensions. The simulations indicate that the variations in the individual particles’ velocities are due to varying configurations of neighbouring particles and the result of viscous hydrodynamic interactions. It is shown how the sedimentation velocity and its variance might depend on the size of a system with periodic boundary conditions. It is also explored the effect of polydispersity and particle concentration on the velocity fluctuations. From dynamic simulations velocity auto-correlation functions and hydrodynamic diffusivities were obtained. The results for the mean settling velocity were found to be in agreement with theory and experiments. The results for the hydrodynamic diffusivities show strong vertical-horizontal anisotropy.*

Keywords. *random suspensions, sedimentation, particle interactions, velocity fluctuations*