



Solução da Equação de Balanço Populacional utilizando o *Quadrature Method of Moments*

Ana Carolina Cosati

Professor: Argimiro R. Secchi
PEQ - COPPE - UFRJ

2017

Balço Populacional - tcnica empregada na anlise de escoamentos multifasicos polidispersos

- Permite modelar fenmenos de interao entre partculas.

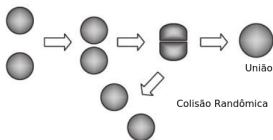


Figura: (a) Processos de agregao/coalescncia.

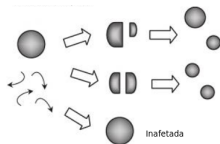


Figura: (b) Processos de quebra.

Balanço Populacional - técnica empregada na análise de escoamentos multifásicos polidispersos

- ▶ Permite modelar fenômenos de interação entre partículas.

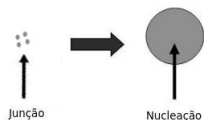


Figura: Nucleação.

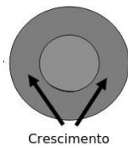


Figura: Crescimento.

Engenharia química - presença de escoamentos multifásicos em uma elevada gama de operações.

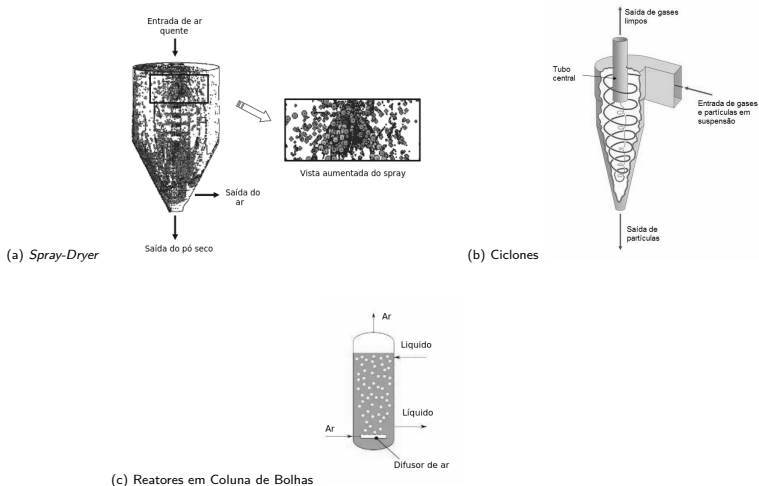


Figura: Escoamentos multifásicos comuns na Engenharia.

Acoplamento PB-CFD - prevendo melhor o comportamento da fase dispersa.

Fluidodinâmica Computacional - simulação numérica de processos que envolvam escoamentos

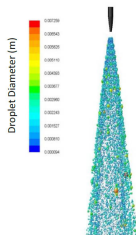


Figura: (a) Simulação CFD para verificar o ângulo de pulverização de um bocal.

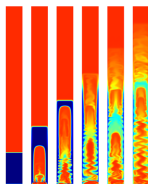


Figura: (b) Fase dispersa transportada para cima através de um *riser* vertical.

EBP: Equação de conservação da distribuição de densidade numérica de partículas, f .

A EBP pode ser:

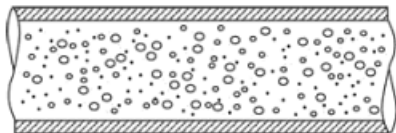


Figura: Homogênea: Sem variação espacial.

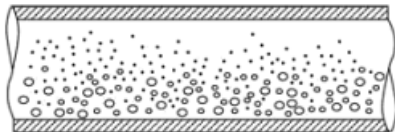


Figura: Heterogênea: Com variação espacial.

f : n° de partículas/t.[unidade de espaço de estado]

A f pode ser:

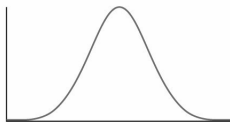


Figura: Monovariada

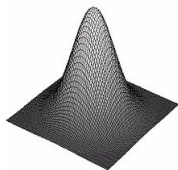
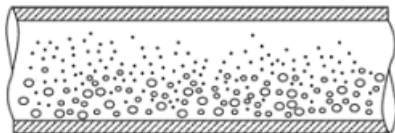


Figura: Multivariada (bivariada, no caso)

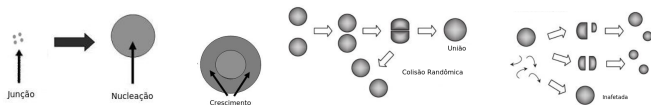
A EBP heterogênea considera a variação no espaço



$$\frac{\partial f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} = -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\dot{\mathbf{X}} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (D_x \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)) + H(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) \quad (1)$$

- ▶ Espaço de Estados:
 - ▶ \mathbf{x} - vetor de **váriáveis externas**.
 - ▶ \mathbf{v} - vetor de **váriáveis internas**.
- ▶ $H(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$: **termo fonte**.
- ▶ $\mathbf{y} = \mathbf{y}(t, \mathbf{x})$ - vetor de variáveis da fase contínua.

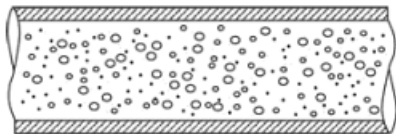
O termo fonte engloba processos de quebra, agregação, nucleação e crescimento



$$H(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = B_c(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) - D_c(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) + B_b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) - D_b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) + J(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) + G(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) \quad (2)$$

- ▶ B - "**B**irth"
- ▶ D - "**D**eath"
- ▶ b - "**b**reakage"
- ▶ c - "**c**oalescence"
- ▶ G - variação de propriedades de partículas - crescimento
- ▶ J - nucleação

A EBP homogênea desconsidera a variação no espaço



$$\frac{\partial f(\mathbf{v}, t)}{\partial t} = H(\mathbf{v}, t) \quad (3)$$

- ▶ Mais utilizada para teste de novos métodos, por ser mais simples

Termo fonte exemplificado para uma distribuição monovariada, onde m é a massa das partículas, assumindo quebra e agregação como fenômenos locais

Os termos integrais contém a f .

$$B_C(t, m, \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2} \int_0^m f(t, m - m', \mathbf{x}) f(t, m', \mathbf{x}) \alpha(m - m', m', \mathbf{y}) dm' \quad (4)$$

$$D_C(t, m, \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \int_0^\infty f(t, m, \mathbf{x}) f(t, m', \mathbf{x}) \alpha(m, m', \mathbf{y}) dm' \quad (5)$$

$$B_B(t, m, \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \int_{m'}^\infty \nu(m', \mathbf{y}) P(m | m', \mathbf{y}) b(m', \mathbf{y}) f(t, m', \mathbf{x}) dm' \quad (6)$$

$$D_B(t, m, \mathbf{x}, \mathbf{y}) = b(m, \mathbf{y}) f(t, m, \mathbf{x}) \quad (7)$$

EBP é integro-diferencial



Carece de solução analítica
para a grande maioria dos
casos



Necessidade de
Métodos Numéricos

O Método dos Momentos Clássico

Consistem em resolver a PBE na forma:

$$\langle v^k, R(f) \rangle = \int_0^{v_{max}} v^k R(f) dv = 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (8)$$

Ficando na forma:

$$\frac{d\mu_k(t)}{dt} + \langle v^k, B \rangle + \langle v^k, D \rangle + \langle v^k, G \rangle - \langle v^k, J \rangle = 0 \quad (9)$$

A chave para o funcionamento do MOM é conseguir expressar os produtos internos em termos do momentos transportados.

Exemplos: Termos de crescimento e quebra

- ▶ Termo de crescimento

$$\langle m^k, G \rangle = \int_0^{m_{max}} m^k \frac{\partial(gf)}{\partial m} dm = [m^k gf]_0^{m_{max}} - k \int_0^{m_{max}} m^{k-1} gf dm \quad (10)$$

Utilizando expansões do tipo $\sum_0^\infty = \psi_j m^j$ para uma função ψ genérica:

$$\langle m^k, G \rangle = \sum_0^\infty g_j \mu_{k+j-1} \quad (11)$$

- ▶ Os termos de quebra ficam:

$$\langle m^k, D_b \rangle = \int_0^{m_{max}} m^k b f dm = \sum_0^\infty b_j \mu_{k+j} \quad (12)$$

$$\langle m^k, B_b \rangle = (1 - 2\pi_n) \int_0^{m_{max}} m^k b f dm \quad (13)$$

Conclusões sobre o MOM

- ▶ Simples de ser implementado
- ▶ Baixo custo computacional
- ▶ Dependendo de certas formas funcionais - sistema não-fechado
- ▶ Esta é a origem do problema de fechamento

Muitas formas de resolver o problema de fechamento são propostas na literatura

- ▶ Extrapolação dos valores dos momentos visando obter os de ordem superior
- ▶ Uso de funções de interpolação - MOMIC de [Frenklach and Harris, 2002]
- ▶ Fechamento das integrais do termo fonte por quadratura
- ▶ Este último deu origem ao QMOM *Quadrature Method of Moments* de [McGraw, 1997]

As Quadraturas de Gauss-Christoffel

- ▶ Christoffel - generalização do conceito de quadratura gaussiana para medidas arbitrárias
- ▶ Garante adaptabilidade do método
- ▶ Cômputo da quadratura de N_p pontos é feito utilizando o PDA de [Gordon, 1968]

$$\mu_k = \int_0^{m_{max}} m^k f dm, \quad k = 0, 1, 2, \dots, 2N - 1 \rightarrow \xi_i, w_i, i = 1, \dots, N \quad (14)$$

$$\int_0^{m_{max}} \psi(m) f(m, t) dm = \sum_{i=1}^{N_p} w_i \psi(\xi_i) \quad (15)$$

e equivale a aproximação dada por:

$$f(m, t) \approx f_{N_p}(m, t) = \sum_{i=1}^{N_p} w_i(t) \delta[m - \xi_i(t)] \quad (16)$$

O PDA de [Gordon, 1968] é iniciado com a montagem da matriz triangular superior $P_{i,j}$

$$P_{i,1} = \delta_{i,1} \quad i = 1, \dots, 2N_p + 1 \quad (17)$$

$$P_{i,2} = (-1)^{i-1} \mu_{i-1} \quad i = 1, \dots, 2N_p \quad (18)$$

$$P_{i,j} = P_{i,j-1}P_{i+1,j-2} - P_{1,j-2}P_{i+1,j-1} \quad j = 3, \dots, 2N_p + 1 \quad (19)$$

$$i = 1, \dots, 2N_p + 2 - j \quad (20)$$

- ▶ De posse da matriz $P_{i,j}$, monta-se o vetor α_n

$$\alpha_n = \frac{P_{1,n+1}}{P_{1,n}P_{1,n-1}} \quad \alpha_1 = 0, n \geq 2 \quad (21)$$

- ▶ Com α_n , obtém-se os vetores a_n e b_n

$$a_n = \alpha_{2n} + \alpha_{2n-1} \quad (22)$$

$$b_n^2 = \alpha_{2n+1}\alpha_{2n} \quad (23)$$

finalmente...

- ▶ Os vetores a_n e b_n são utilizados para montar a matriz tridiagonal

$$\mathbf{J}_{N_p} = \begin{bmatrix} a_1 & b_2 & \dots & \dots & 0 \\ b_2 & a_2 & b_3 & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \\ \vdots & \dots & \dots & a_{N_p-1} & b_{N_p} \\ 0 & \dots & \dots & b_{N_p} & a_{N_p} \end{bmatrix} \quad (24)$$

- ▶ Autovalores da matriz \mathbf{J} - ξ_i
- ▶ Autovetores associados aos pesos usando a identidade de Christoffel-Darboux

O Algoritmo de Chebyshev - outra forma de calcular os coeficientes de recursão

- ▶ Faz uso de polinômios ortogonais e de sua relação de recorrência

$$B_{n+1,m} = B_{n,m+1} - (a_n - a'_n)B_{n,m} - b_n B_{n-1,m} + b'_n B_{n,m-1} \quad (25)$$

onde $B_{n,m} = \langle p_n, q_m \rangle$

- ▶ Faz-se uso das propriedades de ortogonalidade para obter os coeficientes de recursão

$$b_n = \frac{B_{n,n}}{B_{n-1,n-1}} \quad (26)$$

$$a_n = a'_n + \frac{B_{n,n+1}}{B_{n,n}} - \frac{B_{n-1,n}}{B_{n-1,n-1}} \quad (27)$$

- ▶ Quando a'_n e b'_n são zero - momentos padrão

A implementação foi feita em C e empregou:

Algoritmo de Chebyshev:

- ▶ inversão dos momentos em pesos (w_i) e abscissas (ξ_i);

DASSLC ([Secchi, 2007])

- ▶ integração temporal - passo de tempo adaptativo;

```
1 rank 4
2 option savefile resDassl.out
3 option maxorder 3
4 print
5
6 option rtol 1e-10 atol 1e-15
7 data initial
8 time 0.0
9 0: 1.00000 0.0
10 1: 1.00000 0.0
11 2: 2.00000 0.0
12 3: 6.00000 0.0
13
14 endata
```

Figura: Input DASSLC

Para a solução, adota-se:

- ▶ $\nu(\xi_i) = 2$
- ▶ $b(\xi_i) = L \cdot \xi_i$
- ▶ $a(m, \xi_i) = K$
- ▶ $P(m|\xi_i) = \frac{1}{\xi_i}$
- ▶ L, K = constantes

Caso com solução analítica para quebra e agregação- McCoy and Madras [2003]:

Evolução dos momentos:

$$\mu_k(\tau) = \left[\frac{\phi(\infty) + \tanh(\frac{1}{2}\phi(\infty)\tau)}{\phi(\infty)(1 + \phi(\infty)\tanh(\frac{1}{2}\phi(\infty)\tau))} \right]^{k-1} \Gamma(k+1) \quad (28)$$

onde, $\Gamma(k+1) = k!$ e $\tau > 0$.

Conjunto inicial de momentos (condição inicial):

$$\mu_k(0) = \Gamma(k+1) \quad (29)$$

$$\Phi(\infty) = \sqrt{\frac{2L}{K} \frac{\sqrt{\mu_1(0)}}{\mu_0(0)}} = \frac{\mu(\infty)}{\mu(0)} \quad (30)$$

Equação de evolução dos momentos em termos dos pesos e abscissas...

$$\frac{d\mu_k}{dt} = H_k \quad (31)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_i^{Np} \sum_j^{Np} [(\xi_i + \xi_j)^k - \xi_i^k - \xi_j^k] K w_i w_j + \sum_i^{Np} L \xi_i w_i [2\pi_k(\xi_i) - \xi_i^k] \quad (32)$$

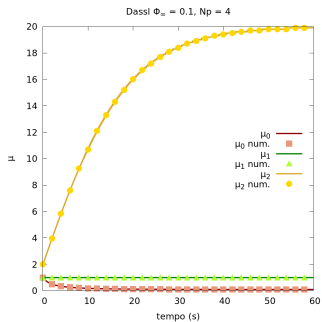
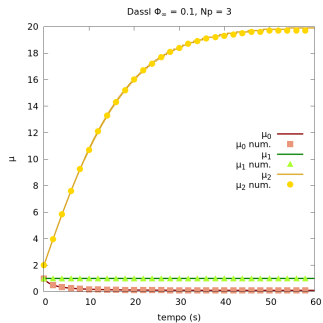
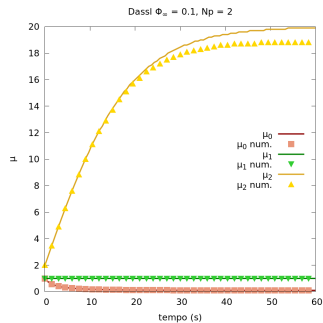
onde,

$$\pi_k(\xi_i) = \int_0^{\xi_i} m^k P(m; \xi_i) dm = \frac{\xi_i^k}{k+1} \quad (33)$$

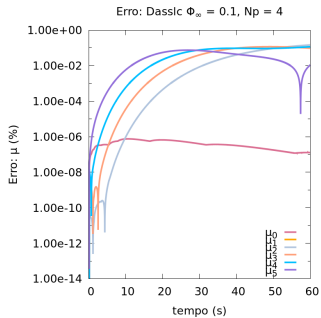
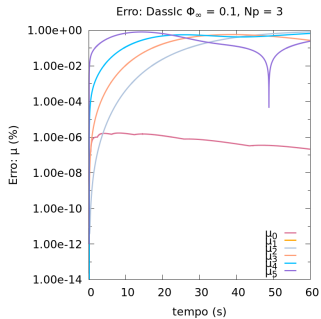
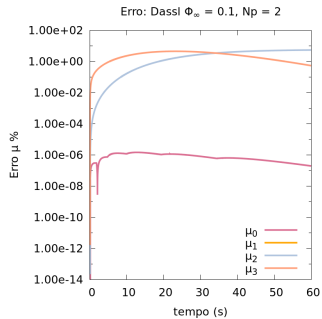
Parâmetros utilizados:

- ▶ Número de pontos de quadratura: 2, 3 e 4 (consequentemente, 4, 6 e 8 momentos)
- ▶ Valores de $\phi(\infty)$:
 - ▶ $\phi(\infty) = 0.1$ agregação dominante
 - ▶ $\phi(\infty) = 1$ invariante
 - ▶ $\phi(\infty) = 3$ quebra dominante
- ▶ μ_0 - número de partículas
- ▶ μ_1 - conservação de propriedade

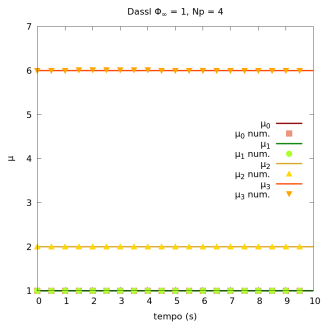
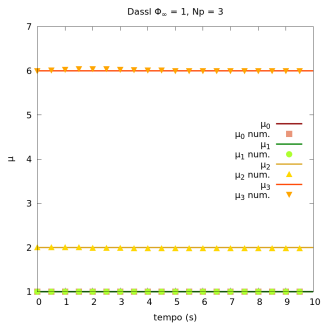
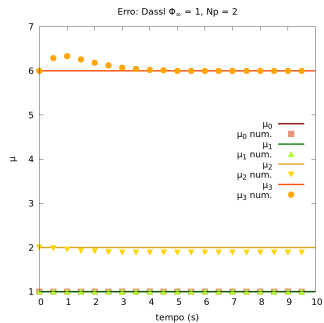
Resultados para $\Phi(\infty) = 0.1$, com diferentes N_p



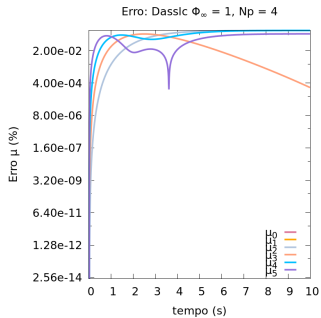
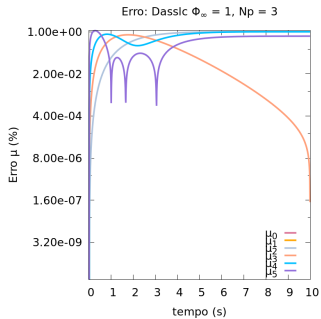
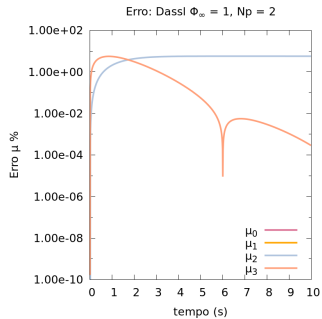
Erros: $\Phi(\infty) = 0.1$, com diferentes Np



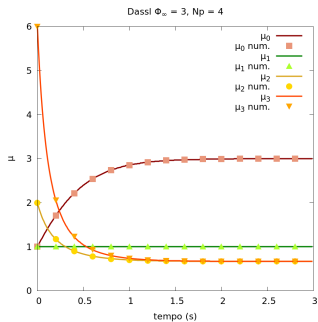
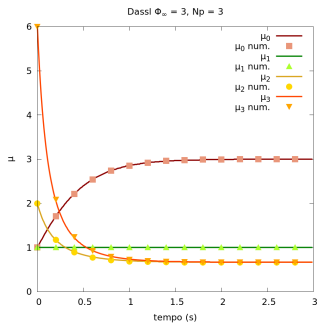
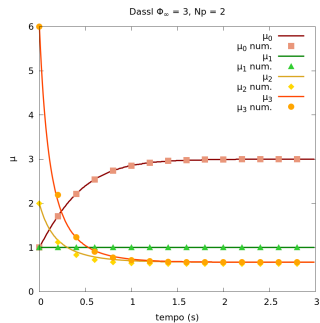
Resultados para $\Phi(\infty) = 1$, com diferentes Np



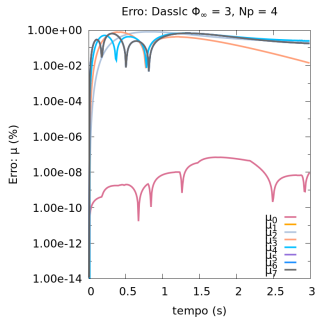
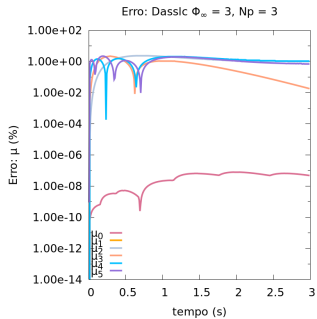
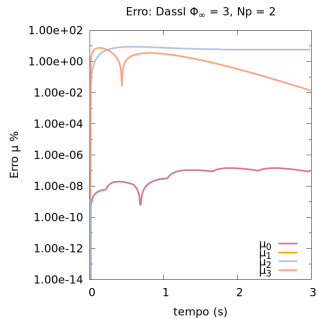
Erros: $\Phi(\infty) = 1$, com diferentes Np



Resultados para $\Phi(\infty) = 3$, com diferentes Np



Erros: $\Phi(\infty) = 3$, com diferentes Np



Conclusões

- ▶ O QMOM busca conservar os $2N_p$ primeiros momentos da distribuição
- ▶ Razoável custo computacional - cômputo da quadratura para cada passo de tempo
- ▶ Não gera uma aproximação para f
- ▶ Não resolve problemas multivariados

Referências

- M. Frenklach and S. J. Harris. Method of moments with interpolative closure. *Chemical Engineering Science*, 57(12):2229–2239, 2002.
- R. McGraw. Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments. *Aerosol Science and Technology*, 27, 1997.
- G. R. Gordon. Error bounds in equilibrium statistical mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, 9, 1968.
- A. R. Secchi. Dassslc - user's manual. 2007.
- B. J. McCoy and G. Madras. Analytical solution for a population balance equation with aggregation and fragmentation. *Chemical Engineering Science*, 58, 2003.