

ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DE FORÇAS INTERFACIAIS EM ESCOAMENTOS BIFÁSICOS

Raquel Teogenes da Costa

Projeto Final de Curso

Orientadores

Prof^o Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc. Prof^o Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc. Jovani Luiz Favero, M.Sc.

Agosto de 2011

ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DE FORÇAS INTERFACIAIS EM ESCOAMENTOS BIFÁSICOS

Raquel Teogenes da Costa

Projeto Final de curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Aprovado por:

Prof. Ricardo Pires Peçanha, Ph.D.

Antonio de Oliveira Samel Moraes, B.Sc.

Livia Flavia Carletti Jatobá, M.Sc.

Orientado por:

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

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

Jovani Luiz Favero, M.Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil

Agosto de 2011

Da Costa, Raquel Teogenes.

Análise da Influência de Forças Interfaciais em Escoamentos Bifásicos/Raquel Teogenes da Costa.

Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2011.

v, 54; il.

(Projeto Final) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química. 2011.

Orientadores: Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, Paulo Laranjeira da Cunha Lage e Jovani Luiz Favero.

1. Escoamento Bifásico, CFD. 2. Coluna de Borbulhamento. 3. OpenFOAM. 4. Projeto Final (Graduação – UFRJ/EQ).

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha **família**, principalmente à minha mãe **Sandra Helena** e à minha avó **Therezinha**, por todo apoio e compreensão, principalmente nos momentos em que não pude estar presente. Pelo estímulo à carreira escolhida, e, sobretudo, pela formação dos meus valores e princípios.

Ao professor **Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva**, pela orientação, pensamento positivo, conselhos sempre válidos e por me apresentar ao mundo da fluidodinâmica computacional de forma tão fantástica.

Ao professor **Paulo Laranjeira da Cunha Lage**, pela orientação e observações cruciais ao desenvolvimento do trabalho, pela forma sábia e didática como transmite o conhecimento.

Ao orientador **Jovani Luiz Favero**, por repassar seus infindáveis conhecimentos em Linux e CFD de forma tão paciente, pelas sugestões de abordagem sempre válidas, pela ajuda do início ao fim do projeto.

À equipe do LTFD, pelo apoio moral, ótima recepção e ajuda ao longo do trabalho.

À *Escola de Química*, pela excelente formação acadêmica.

À empresa **Chemtech**, pela complementação da formação profissional, flexibilidade e compreensão nas horas necessárias.

A todos os familiares, amigos e colegas de trabalho, pelas palavras de apoio e incentivo.

Resumo do Projeto Final apresentado a Escola de Química como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DE FORÇAS INTERFACIAIS EM ESCOAMENTOS BIFÁSICOS

Raquel Teogenes da Costa

Agosto, 2011.

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

Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage. D.Sc. Jovani Luiz Favero, M.Sc.

Colunas de borbulhamento são reatores multifásicos que tem diversas aplicações em engenharia química, como evaporação por contato direto, fermentação e tratamento de efluentes. Apesar disso, a sua modelagem matemática ainda não foi completamente compreendida, devido à complexa hidrodinâmica do escoamento bifásico disperso, o que motiva o estudo desses equipamentos. Este trabalho teve por objetivo simular, utilizando o software de código livre OpenFOAM, o escoamento gás-líquido ao longo de uma coluna de borbulhamento, e com isso analisar o efeito da modelagem das forças de interação entre as fases, assim como o efeito da modelagem da turbulência induzida pela fase dispersa. Para tal simulação, foi utilizada a abordagem Euleriana- Euleriana para descrever o comportamento de ambas as fases e o software usou um conjunto de ferramentas numéricas e computacionais para resolver, visualizar e interpretar a solução das equações de balanço de momento e massa. Uma malha tridimensional foi gerada para aplicação do método dos volumes finitos, e um teste para a malha também foi obtido, levando em consideração a acurácia dos resultados obtidos. As principais forças de interação entre as fases foram modeladas e para então ser gerada uma série de resultados (relacionados com período de oscilação da pluma e análise da distribuição da fração de gás ao longo da coluna) de forma a analisar as forças mais relevantes para a modelagem feita. De acordo com os resultados obtidos, foram feitas análises quanto à modelagem das forças relevantes para o escoamento, assim como sugestões para trabalhos posteriores.

Sumário

\mathbf{N}	Nomenclatura viii			
1	Introdução e Motivação			1
2	Rev	evisão da Literatura		
	2.1	Colun	as de Borbulhamento	. 3
	2.2	Abord	lagem Lagrangeana e Euleriana	. 4
	2.3	Forças	s de Interação entre Fases	. 5
		2.3.1	Força de Arrasto	. 5
		2.3.2	Força de Sustentação	. 5
		2.3.3	Força Rotacional	. 6
		2.3.4	Força de Massa Virtual	. 6
		2.3.5	Força de Dispersão Turbulenta	. 6
	2.4	OpenI	FOAM	. 6
3	Mo	delage	m Matemática	7
	3.1	Equaç	ões Fundamentais	. 7
		3.1.1	Equação Média de Conservação da Massa	. 7
		3.1.2	Equação Média de Conservação da Quantidade de Movimento $\ . \ .$. 7
	3.2	Model	agem das Forças Interfaciais	. 8
		3.2.1	Força de Arrasto	. 8
		3.2.2	Força de Sustentação	. 9
		3.2.3	Força Rotacional	. 9
		3.2.4	Força de Massa Virtual	. 10

		3.2.5	Força de Dispersão Turbulenta	10
	3.3	Model	agem da Turbulência Induzida por Bolhas	10
4	Cas	os de l	Estudo	12
	4.1	Aprese	entação do Caso Analisado	12
		4.1.1	Coluna Estudada	12
		4.1.2	Caso Original	14
		4.1.3	Modificações Implementadas	14
5	Res	ultado	s e Discussão	20
	5.1	Result	ados	20
		5.1.1	Caso I	21
		5.1.2	Caso II	23
		5.1.3	Caso III	25
		5.1.4	Caso IV	27
		5.1.5	Caso V	29
		5.1.6	Caso VI	31
		5.1.7	Caso VII	33
		5.1.8	Caso VIII	35
		5.1.9	Caso IX	37
		5.1.10	Caso X	39
		5.1.11	Caso XI	41
		5.1.12	Caso do Efeito da Correlação de Cd	42
		5.1.13	Comparação entre velocidade relativa entre as fases	44
		5.1.14	Retenção Global de Gás	47
		5.1.15	Frequência de Oscilação da Pluma	48
		5.1.16	Discussões	49
6	Con	clusõe	s e Sugestões para Trabalhos Futuros	51
Re	eferê	ncias E	Bibliográficas	54

Nomenclatura

g	campo gravitacional
\mathbf{M}_η	termo fonte referente à troca de momentum pela interface da fase η
\mathbf{R}_{η}	termo fonte referente à troca de massa pela interface da fas e η
\mathbf{U}_η	velocidade da fase η
\mathbf{U}_r	velocidade relativa entre a fase dispersa e contínua
C_x	coeficiente relativo à força interfacial genérica x
d_a	diâmetro característico da fase dispersa
k	energia cinética turbulenta
p	pressão
r_{η}	fração volumétrica da fase η

Subescritos

η	referente à uma fase genérica
a	referente à fase dispersa
b	referente à fase contínua

Letras Gregas

Nomenclatura

α	fração volumétrica da fase dispersa
β	fração volumétrica da fase contínua
ϵ	dissipação turbulenta
au	tensão viscosa
μ	viscosidade do fluido
ρ	massa específica

Sobrescritos

BI	bubble induced, induzido por bolhas
d	referente à força de arrasto
eff	grandeza efetiva
l	referente à força de sustentação
lam	referente ao escoamento laminar
rot	referente à força rotacional
t	referente ao escoamento turbulento
td	referente à força de dispersão turbulenta
vm	referente à força de massa virtual

Capítulo 1

Introdução e Motivação

A variedade das aplicações de processos bifásicos na engenharia química motiva o estudo dos mesmos. Como exemplos de processos industriais envolvendo colunas de borbulhamento, podem ser citados: síntese de Fischer-Tropsch, fermentação, cultura de células, tratamento de efluentes e a evaporação por contato direto, como no caso de concentração de sucos, onde gás superaquecido é injetado na coluna, sendo assim a fase dispersa, e o suco sendo a fase líquida e contínua (Krishna et al., 1999).

A plena compreensão dos fenômenos de transporte em escoamentos bifásicos dispersos nos leva ao dimensionamento correto destes equipamentos, assim como uma previsão das principais grandezas envolvidas. A principal motivação do presente trabalho vem da falta de informações na literatura referentes as escoamentos multifásicos e o tratamento da interação entre as fases.

Um escoamento bifásico monodisperso foi estudado em uma coluna retangular, aonde o gás é injetado no ponto central da face inferior da coluna, previamente preenchida com líquido. Na abordagem de tal escoamento, o efeito da modelagem das forças interfaciais na simulação do escoamento foi estudado, assim como sua influência nas principais variáveis do problema, como a fração volumétrica local de gás na coluna e o seu valor médio ao longo da mesma, as velocidades de ambas as fases e a velocidade relativa entre as mesmas.

A escolha do *software* utilizado baseou-se na facilidade de manipulação dos códigos envolvidos, o que levou ao uso do OpenFOAM, *software* de código aberto da OpenCFD (Jasak et al., 2004). Como exemplo das facilidades, temos a inclusão de operadores matemáticos complexos, como divergentes e rotacionais, de maneira simples e direta, e a visualização direta das equações.Trabalhando com escoamentos multifásicos, tal *software* se mostrou a melhor opção. Mais especificamente, o twoPhaseEulerFoam foi o solver utilizado e alterado do programa, já que o mesmo simula escoamentos bifásicos com abordagem Euleriana-Euleriana, que será discutida na Seção 2.2.

O objetivo do trabalho foi analisar o efeito dos modelos de forças interfaciais no escoamento, comparando com os dados experimentais disponíveis na literatura (Díaz et al., 2008).

O trabalho está estruturado da seguinte forma: no próximo capítulo é apresentada uma revisão da literatura com os principais tópicos abordados. No Capítulo 3 todas as equações relevantes para a modelagem matemática são apresentadas, enquanto no Capítulo 4 todas as modificações e testes são evidenciados. No Capítulo 5 os resultados são apresentados para cada caso, assim como uma discussão geral dos mesmos. Finalmente, no Capítulo 6 se encontram as principais conclusões do trabalho assim como sugestões para a sua continuação.

Capítulo 2

Revisão da Literatura

2.1 Colunas de Borbulhamento

Colunas de borbulhamentos são equipamentos amplamente usados na indústria química, podendo agir como reatores multifásicos ou simplesmente promovendo a troca de energia entre as duas fases. Sua estrutura é relativamente simples, possuem a forma de cilindros ou prismas de seções retangular e, na sua face inferior, há a injeção de gás de forma dispersa. A sua vasta aplicação industrial é justificada pela facilidade de construção e baixos custos de operação, o que motiva o estudo das colunas. Porém a complexidade hidrodinâmica dos escoamentos bifásicos em colunas de borbulhamento dificulta a modelagem dos mesmos, e com isso esses fenômenos não são compreendidos por completo(R. Bannari e Proulx, 2008).

Existem três tipos de regimes que caracterizam o perfil de escoamento em colunas de borbulhamento. Os principais fatores determinantes de tais regimes são a velocidade superficial do gás e do líquido, o distribuidor do gás e a geometria da coluna. Um breve resumo de cada regime é dado a seguir (Silva, 2008):

 Regime Homogêneo: caracterizado por baixas velocidades superficiais do gás, que apresenta bolhas de tamanhos praticamente uniformes, que ascendem com velocidade constante, sem interação considerável entre as mesmas ou desvios no percurso de subida.

- Regime Heterogêneo: caracterizado por uma faixa de distribuição de tamanho das bolhas na coluna, e também com o aumento da interação entre as mesmas, ambos acarretados pelo aumento da velocidade superficial do gás.
- Regime de Golfada: aumentando ainda mais a velocidade superficial do gás, formamse as chamadas grandes bolhas de Taylor, o que caracteriza esse regime, também chamado de *slug*, e que só ocorre em colunas de pequeno diâmetro.

No regime heterogêneo, aonde uma alta produtividade volumétrica é alcançada, é necessário incluir na modelagem os efeitos de quebra e coalescência das bolhas, como feito por Díaz et al. (2008), usando balanço populacional. Em todos os casos estudados no presente trabalho, o escoamento foi tratado como monodisperso, ou seja, foi considerado um diâmetro único para as bolhas de gás.

Essa suposição é válida pois a vazão trabalhada é suficientemente pequena para que os efeitos de quebra e coalescência de bolhas sejam desprezados, existindo uma estreita distribuição de tamanhos de bolhas. Além disso, Díaz et al. (2008) encontraram resultados de retenção global idênticos aos experimentais trabalhando nessa mesma vazão, considerando o escoamento monodisperso, o que corrobora a premissa adotada. De qualquer forma, resultados interessantes envolvendo a simulação com balanço populacional podem ser encontrados em R. Bannari e Proulx (2008), Damian (2007) e Silva e Lage (2011).

2.2 Abordagem Lagrangeana e Euleriana

Em fluidodinâmica computacional existem basicamente duas formas de abordar os escoamentos bifásicos, sejam eles mono ou polidispersos. A primeira delas é a chamada de Euleriana-Lagrangeana, e a segunda é a abordagem Euleriana-Euleriana. A primeira modela a fase contínua da forma euleriana e a fase dispersa da forma lagrangeana, enquanto a segunda utiliza a abordagem euleriana para ambas as fases. Sokolichin et al. (1997) e Sokolichin e Eigenberger (1999) fornecem uma comparação mais profunda entre estas abordagens em escoamentos bifásicos. E, de acordo com tais trabalhos, pode-se dizer que a abordagem Euleriana-Lagrangeana é a mais próxima da realidade, pois trata a fase dispersa como partículas. Porém, os custos computacionais desse tratamento a tornam impraticável. Resultados satisfatórios tem sido obtidos com a abordagem Euleriana-Euleriana, o que levou à sua adesão neste trabalho. Conforme demonstrado por Pfleger et al. (1999), que obtiveram resultados satisfatórios usando esta mesma abordagem trabalhando com colunas de bolhas.

2.3 Forças de Interação entre Fases

Nos escoamentos multifásicos, há forças modeladas em separado que representam a interação entre essas fases. Tais forças devem ser adequadamente computadas na resolução do problema, para que o escoamento seja modelado corretamente. Nas próximas seções estão descritas as cinco forças de interação presentes nos casos estudados e relevantes ao escoamento bifásico em colunas de bolhas.(Drew e Passman, 1999)

2.3.1 Força de Arrasto

A força de arrasto é exercida pela fase contínua sobre a partícula, na direção do escoamento relativo e no sentido contrário ao mesmo. É a principal força que determina a velocidade das bolhas. No caso estudado, o diâmetro da bolha foi grande o suficiente para que fosse considerada uma deformação do seu formato esférico. Utilizou-se a modelagem de Díaz et al. (2008) para esta força.

2.3.2 Força de Sustentação

A força de sutentação (Lift) ocorre devido a diferenças de pressão na superfície lateral da bolha, usualmente devido ao gradiente de velocidade da fase contínua. Esta força tem direção normal à velocidade da bolha.

2.3.3 Força Rotacional

A força rotacional, por vezes chamada de força de *Magnus*, ocorre devido à rotação de corpos, tendo maior importância em regiões aonde há uma alta velocidade de rotação da fase dispersa, como em vórtices.

2.3.4 Força de Massa Virtual

Exercida sobre um objeto acelerado, tal força se faz presente porque uma partícula imersa em um fluido acelera consigo parte do fluido ao seu redor, conforme visto em Silva (2008).

2.3.5 Força de Dispersão Turbulenta

A força de dispersão turbulenta é causada pela ação da turbulência da fase contínua sobre a força de arrasto, sendo pois maior em escoamentos turbulentos onde a força de arraste é significativa. Ela ocasiona uma dispersão adicional das bolhas, devido à sua migração de uma região de alta fração volumétrica de gás para uma região de baixa fração de gás.

2.4 OpenFOAM

O OpenFOAM, como citado anteriormente, é um *software* de código livre, que está escrito na linguagem C++ e resolve as equações de conservação de quantidade de movimento e massa para ambas as fases pelo métodos dos volumes finitos. O programa é composto por solvers, e os casos de aplicação.

Nos solvers estão embutidas as equações da modelagem das fases, como as de conservação, modelos de turbulência, os modelos para as forças interfaciais como arraste, dispersão turbulenta, etc.

Nos casos estão presentes as condições de contorno e iniciais, e os parâmetros de simulação, tais como o tempo total, o diâmetro das bolhas, etc. É também onde é necessário definir uma discretização do domínio, isto é, uma malha.

Maiores detalhes sobre o tratamento numérico fornecido pelo OpenFOAM aos problemas de escoamento multifásico podem ser encontrados em Silva (2008) e Rusche (2002).

Capítulo 3

Modelagem Matemática

3.1 Equações Fundamentais

A modelagem implementada no solver twoPhaseEulerFoam é descrita abaixo, e segue a abordagem Euleriana-Euleriana aplicada à escoamento bifásico em colunas de bolhas.

3.1.1 Equação Média de Conservação da Massa

A primeira equação aplicada para ambas fases do escoamento é a de conservação da massa:

$$\frac{\partial(r_{\eta}\rho_{\eta})}{\partial t} + \nabla \cdot (r_{\eta}\rho_{\eta}\mathbf{U}_{\eta}) = R_{\eta}$$
(3.1)

onde r_{η} é a fração volumétrica da fase η , ρ_{η} é a massa específica da fase η , \mathbf{U}_{η} é a velocidade intersticial da fase $\eta \in R_{\eta}$ é o termo de transferência de massa de tal fase.

3.1.2 Equação Média de Conservação da Quantidade de Movimento

A segunda equação fundamental utilizada pelo *software* parte de uma versão chamada *phase intensive* (Rusche, 2002), onde todos os termos da equação original de conservação foram divididos pela fração volumétrica, e pela massa específica da fase em questão, o que gera:

$$\frac{\partial \mathbf{U}_{\eta}}{\partial t} + \mathbf{U}_{\eta} \cdot \nabla \mathbf{U}_{\eta} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_{\eta}^{eff}) + \frac{\nabla r_{\eta}}{r_{\eta}} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\eta}^{eff} = -\frac{1}{\rho_{\eta}} \nabla p + \frac{\mathbf{M}_{\eta}}{r_{\eta}\rho_{\eta}} + \mathbf{g}$$
(3.2)

onde τ é o tensor tensão viscosa, p é a pressão local, **M** é o termo fonte referente à troca de momento entre as fases e **g** é a aceleração da gravidade.

3.2 Modelagem das Forças Interfaciais

As forças de interação, descritas na Seção 2.3, foram modeladas matematicamente, conforme encontrado em Drew e Passman (1999), Silva (2008) e Rusche (2002). Elas se encontram somadas no termo **M** da Equação 3.2. Nas formulações abaixo, α é igual a r_a e β é igual a r_b

3.2.1 Força de Arrasto

$$\mathbf{M}_{\mathbf{a}}^{\mathbf{d}} = -\alpha\beta \frac{3}{4} \frac{\rho_b C_d}{d_a} |\mathbf{U}_r| \mathbf{U}_r$$
(3.3)

onde $\mathbf{U_r} = \mathbf{U_a} - \mathbf{U_b} \in C_d$ foi calculado pelo modelo de *Grace* (Díaz et al., 2008) em quase todos os casos:

$$C_d(elipse) = \frac{4}{3} \left(\frac{\rho_b - \rho_a}{\rho_b}\right) \frac{g \, d_a}{U_{tr}^2} \tag{3.4}$$

onde U_{tr} é a velocidade terminal calculada como:

$$U_{tr} = \frac{\mu_b}{\rho_b d_a} M^{-0.149} (J - 0.857)$$
(3.5)

onde M é o número de Morton:

$$M = \frac{\mu_b^4 g(\rho_b - \rho_a)}{\rho_b^2 \sigma_{ba}^3}$$
(3.6)

e J é definido como:

$$J = \begin{cases} 0.94 H^{0.751}, & \text{se } 2 < H \le 59.3 \\ 3.42 H^{0.441}, & \text{se } H > 59.3 \end{cases}$$
(3.7)

onde:

$$H = \frac{4}{3} Eo M^{-0.149} \left(\frac{\mu_b}{\mu_{ref}}\right)^{-0.14}$$
(3.8)

$$Eo = \frac{g\left(\rho_b - \rho_a\right)d_a^2}{\sigma_{ba}} \tag{3.9}$$

No último caso, onde avaliou-se o efeito da correlação de C_d , foi usado o modelo proposto por Schiller-Naumann (Inc., 2007):

$$C_d = \frac{24}{Re} (1+0, 15Re^{0,687}) \tag{3.10}$$

onde Re é o número de Reynolds.

3.2.2 Força de Sustentação

A equação encontrada na literatura para a força de sustentação é (Drew e Passman, 1999):

$$\mathbf{M}_{\mathbf{a}}^{\mathbf{l}} = \alpha \beta C_{l} \rho_{b} \mathbf{U}_{r} \times (\nabla \times \mathbf{U}_{b}) \tag{3.11}$$

Porém, a versão apresentada pelo solver twoPhaseEulerFoam é diferente desta, em função do tratamento simétrico para as fases dado no solver. Esse tratamento altera o termo da velocidade do líquido (U_b) pela velocidade média da mistura, como pode ser visto na Equação 3.12 abaixo.

$$\mathbf{U} = \alpha \cdot \mathbf{U}_{\mathbf{a}} + \beta \cdot \mathbf{U}_{\mathbf{b}} \tag{3.12}$$

3.2.3 Força Rotacional

$$\mathbf{M}_{\mathbf{a}}^{\mathbf{rot}} = \alpha \beta C_{rot} \rho_b \mathbf{U}_r \times (\nabla \times \mathbf{U}_a) \tag{3.13}$$

Para as constantes $C_l \in C_{rot}$, deve ser respeitada sempre a igualdade:

$$C_{vm} = C_{rot} + C_l \tag{3.14}$$

Isso visa a adequação das forças à independência de referencial.

3.2.4 Força de Massa Virtual

$$\mathbf{M}_{\mathbf{a}}^{\mathbf{vm}} = \alpha \beta \rho_b C_{vm} \left(\frac{\partial \mathbf{U}_{\mathbf{b}}}{\partial t} + \mathbf{U}_{\mathbf{b}} \cdot \nabla \mathbf{U}_{\mathbf{b}} - \frac{\partial \mathbf{U}_{\mathbf{a}}}{\partial t} - \mathbf{U}_{\mathbf{a}} \cdot \nabla \mathbf{U}_{\mathbf{a}} \right)$$
(3.15)

onde C_{vm} assume valor de 1/2, de acordo com Drew e Passman (1999), e $\beta = 1 - \alpha$.

3.2.5 Força de Dispersão Turbulenta

$$\mathbf{M}_{\mathbf{a}}^{\mathbf{td}} = -C_{td}\rho_b k_b \nabla \alpha \tag{3.16}$$

onde C_{td} terá o valor de 0.1 ou seguirá o modelo de Bertodano (1998) usado em Lucas et al. (2007).

$$C_{td} = C_{\mu}^{1/4} \frac{1}{St(1+St)} \tag{3.17}$$

Com St sendo o número de Stokes e igual a $\frac{\tau_g}{\tau_l}$, $\tau_g = \frac{4d_a}{3C_d U_r}$ e $\tau_l = C_{\mu}^{3/4} \frac{k}{\epsilon}$.

3.3 Modelagem da Turbulência Induzida por Bolhas

Também foi incluída na modelagem a turbulência induzida por bolhas, seguindo o modelo de Sato et al. (1981), onde a viscosidade efetiva da fase contínua é dada pela Equação 3.18:

$$\mu_b^{eff} = \mu_b^{lam} + \mu_b^t + \mu_b^{BI} \tag{3.18}$$

onde μ_b^{lam} é característico da fase, μ_b^t é baseada no modelo k- ϵ , e igual a $\rho_b C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}$.

Por fim, o termo adicional foi calculado como mostra a Equação 3.19.

$$\mu_b^{BI} = \rho_b C_\mu^{BI} \alpha d_a |\mathbf{U}_\mathbf{a} - \mathbf{U}_\mathbf{b}| \tag{3.19}$$

onde a constante C_{μ}^{BI} tem valor 0.6, de acordo com Deen et al. (2001).

O termo de viscosidade altera o termo $\boldsymbol{\tau}_{\eta}^{eff}$ da Equação 3.2, pois:

$$\boldsymbol{\tau}_{b}^{eff} = -\mu_{b}^{eff} (\nabla \mathbf{U}_{\mathbf{b}} + (\nabla \mathbf{U}_{\mathbf{b}})^{T})$$
(3.20)

Capítulo 4

Casos de Estudo

Neste capítulo são apresentados os detalhes geométricos da coluna estudada, os parâmetros do escoamento original e as modificações implementadas no solver twoPhaseEulerFoam.

4.1 Apresentação do Caso Analisado

4.1.1 Coluna Estudada

A coluna estudada tem o formato de um prisma de base retangular, com 55 cm de altura, 20 cm de largura e 4 cm de profundidade, como visto em Díaz et al. (2008). A Figura 4.1 representa a geometria descrita, incluindo o ponto de injeção de gás.

Tal coluna foi discretizada com uma malha contendo 21.252 células hexaédricas, ao longo das 3 direções, como mostra a Figura 4.2. As variáveis do problema foram calculadas para cada ponto central das células, sendo interpolados para a face das mesmas quando necessário.



Figura 4.1: Geometria da Coluna (Díaz et al. (2008)) com ponto de injeção(INLET) e saída(OUTLET) destacados.



Figura 4.2: Malha tridimensional.

4.1.2 Caso Original

A simulação iniciou-se com a coluna previamente preenchida com água até a altura de 45 centímetros, e ar foi injetado no local especificado(*INLET*) na Figura 4.1, com velocidade inicial igual a 0.0024 m/s. O escoamento foi considerado monodisperso, com diâmetro de bolha igual a 5,26 mm, e as forças interfaciais modeladas incluídas foram as de arrasto, massa virtual e sustentação. Como visto anteriormente, o modelo de **Grace** (Díaz et al., 2008) foi usado para a força de arrasto, sendo mantido para todos os casos.

4.1.3 Modificações Implementadas

O quadro abaixo resume as modificações aplicadas em cada caso, de forma sequencial. Cada caso será detalhado nessa seção e no resto do documento, referenciado pelo seu número.



Figura 4.3: Árvore de Simulações.

Caso I

O Caso I foi citado na Subseção 4.1.2, pois é o caso base, com o qual as outras simulações serão comparadas. De forma resumida, apresenta como forças de interação entre fases:

• Massa Virtual

- Arrasto
- Sustentação

Caso II

Primeiramente modificou-se o termo da força de sustentação. Como dito na Subseção 3.2.2, a versão apresentada pelo solver twoPhaseEulerFoam é diferente da vista na literatura, e como esse tratamento altera o valor da força, essa alteração foi retirada e voltou-se à versão original da força, que depende da velocidade do líquido (U_b) e não da velocidade média da mistura (Equação 3.12).

Isto define as forças interfaciais deste caso como:

- Massa Virtual
- Arrasto
- Sustentação (conforme Equação 3.11)

Caso III

Além da modificação anterior, aplicou-se também a força rotacional, definida na Subseção 2.3.3 e na Subseção 3.2.3.

- Massa Virtual
- Arrasto
- Sustentação (conforme Equação 3.11)
- Rotacional

Caso IV

Neste caso, além da força rotacional, foi aplicada também a força da dispersão turbulenta, com coeficiente constante. Tal força foi definida na Subseção 2.3.5 e explicitada matematicamente na Subseção 3.2.5. Resumindo a forças modeladas:

- Massa Virtual
- Arrasto
- Sustentação (conforme Equação 3.11)
- Rotacional
- \bullet Dispersão turbulenta (C_{td} constante)

Caso V

Este caso é idêntico ao anterior, com exceção à adição da turbulência induzida por bolhas nas equações de conservação de quantidade de movimento, como visto em Deen et al. (2000) e Deen et al. (2001). Resumindo, as forças foram:

- Massa Virtual
- Arrasto
- Sustentação (conforme Equação 3.11)
- Rotacional
- Dispersão turbulenta (C_{td} constante)
- Adição da viscosidade devido à turbulência induzida por bolhas (Sato et al., 1981)

Caso VI

Esse caso pode ser comparado diretamente com o caso IV, já que a única diferença é o fato do valor de C_{td} não ser mais constante, e ser dado agora pelo modelo proposto por de Bertodano (1998) e relatado na Subseção 3.2.5.

- Massa Virtual
- Arrasto

- Sustentação (conforme Equação 3.11)
- Rotacional
- Dispersão turbulenta (Modelo para C_{td})

Caso VII

Estudando o solver twoPhaseEulerFoam, notou-se uma discrepância entre a forma como a força da massa virtual foi tratada em relação às outras forças. Nesse caso, aplicou-se o modelo de mistura para tal força, conforme a equação Equação 4.1

$$\rho_b = \alpha \rho_a + \beta \rho_b \tag{4.1}$$

- Massa Virtual (Alterada para modelo de mistura)
- Arrasto
- Sustentação (conforme Equação 3.11)
- Rotacional
- Dispersão turbulenta (Modelo para C_{td})

Caso VIII

Esse caso é bastante semelhante ao caso II simulado. Ele representa um teste à acurácia dos resultados em termos do tamanho da malha. Todas as outras simulações foram rodadas com uma malha de 21252 células hexaédricas, como dito na Subseção 4.1.1, enquanto nesta simulação utilizou-se uma malha contendo 60720 células hexaédricas.

- Massa Virtual
- Arrasto
- Sustentação (conforme Equação 3.11)
- Malha mais fina

Caso IX

Como inicialmente foi visto uma mudança significativa dos resultados após a inclusão da turbulência induzida por bolhas, resolveu-se investigar se esse efeito era devido a esse fenômeno, ou à junção de todos os outros. Com isso surgiu o caso presente, que é basicamente o caso II junto com a adição do modelo de Sato et al. (1981).

- Massa Virtual
- \bullet Arrasto
- Sustentação (conforme Equação 3.11)
- Adição da viscosidade turbulenta induzida por bolhas (Sato et al., 1981)

Caso X

Seguindo a mesma linha de raciocínio, os dois últimos casos irão tratar das combinações ainda não estudadas envolvendo a viscosidade de Sato et al. (1981). Neste caso, adicionouse também a força rotacional.

- Massa Virtual
- Arrasto
- Sustentação (conforme Equação 3.11)
- Rotacional
- Adição da viscosidade turbulenta induzida por bolhas (Sato et al., 1981)

Caso XI

Neste caso, além das forças vistas no caso anterior, estudou-se o efeito em conjunto com o da força de dispersão turbulenta, dessa vez utilizando o modelo citado no Caso VI.

• Massa Virtual

- Arrasto
- Sustentação (conforme Equação 3.11)
- Rotacional
- Dispersão turbulenta (Modelo para C_{td})
- Adição da viscosidade turbulenta induzida por bolhas (Sato et al., 1981)

Caso do efeito da Correlação de Cd

Neste caso, avaliou-se a influência da modelagem de C_d via o modelo de Schiller-Naumann, como visto na Equação 3.10. Esta simulação que pode ser comparada com o Caso V, pois a única diferença entre ambos foi o modelo utilizado para determinação do C_d . Aqui utilizou-se o modelo de Schiller-Naumann, que não prevê deformações no formato da bolha. Porém com esse tamanho ($d_a = 5,26$ mm), a bolha já apresenta deformações que a achatam, tranformando-se em um elipsóide, e por isso esse modelo foi abandonado. Resumo das forças:

- Massa Virtual
- Arrasto (C_d via Schiller-Naumann)
- Sustentação (conforme Equação 3.11)
- Rotacional
- Dispersão turbulenta (C_{td} constante)
- Adição da viscosidade turbulenta induzida por bolhas (Sato et al., 1981)

Capítulo 5

Resultados e Discussão

5.1 Resultados

A disposição dos resultados gerados se dará da seguinte forma: 4 figuras serão apresentadas para cada caso, e no final, uma tabela comparativa para os valores de retenção global de gás e frequência de oscilação da pluma.

A primeira figura representa a velocidade do líquido (m/s) em vetores, sobre o fundo da fração volumétrica de gás, no instante t = 100 segundos.

A segunda figura representa a velocidade média do líquido e a fração volumétrica média de gás, ao final dos 160 segundos de simulação. Para tal, a simulação dos casos foi dividida em duas etapas: a primeira se deu do tempo zero a 60 segundos, tempo suficiente para garantir a formação da pluma de ar, e segunda etapa, que se deu de 60 a 160 segundos, intervalo no qual se calculou a média para as grandezas acima.

A terceira figura mostra os perfis radiais da fração volumétrica de gás em quatro alturas específicas da coluna, explicitadas em cada caso.

A quarta figura é o gráfico do período de Lomb da pressão (Lomb, 1976), com o qual se visa determinar a frequência característica de oscilação da mesma.

Então alguns gráficos comparativos da velocidade relativa entre as fases serão apresentados. Tais gráficos são instantâneas, e são referentes ao instante final da simulação (160 segundos).

5.1.1 Caso I



Figura 5.1: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás instantâneas



Figura 5.2: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás médias



Figura 5.3: Fração volumétrica média de gás ao longo de 4 alturas da coluna



Figura 5.4: Espectro de frequência de oscilação da pluma

5.1.2 Caso II



Figura 5.5: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás instantâneas



Figura 5.6: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás médias



Figura 5.7: Fração volumétrica média de gás ao longo de 4 alturas da coluna



Figura 5.8: Espectro de frequência de oscilação da pluma

5.1.3 Caso III



Figura 5.9: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás instantâneas



Figura 5.10: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás médias





Figura 5.12: Espectro de frequência de oscilação da pluma

5.1.4 Caso IV



Figura 5.13: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás instantâneas



Figura 5.14: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás médias



Figura 5.15: Fração volumétrica média de gás ao longo de 4 alturas da coluna



Figura 5.16: Espectro de frequência de oscilação da pluma

5.1.5 Caso V



Figura 5.17: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás instantâneas



Figura 5.18: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás médias





Figura 5.20: Espectro de frequência de oscilação da pluma

5.1.6 Caso VI



Figura 5.21: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás instantâneas



Figura 5.22: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás médias



Figura 5.24: Espectro de frequência de oscilação da pluma

5.1.7 Caso VII

Figura 5.25: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás instantâneas

Figura 5.26: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás médias

Figura 5.27: Fração volumétrica média de gás ao longo de 4 alturas da coluna

Figura 5.28: Espectro de frequência de oscilação da pluma

5.1.8 Caso VIII

Figura 5.29: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás instantâneas

Figura 5.30: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás médias

Figura 5.32: Espectro de frequência de oscilação da pluma

5.1.9 Caso IX

Figura 5.33: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás instantâneas

Figura 5.34: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás médias

Figura 5.36: Espectro de frequência de oscilação da pluma

5.1.10 Caso X

Figura 5.37: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás instantâneas

Figura 5.38: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás médias

Figura 5.40: Espectro de frequência de oscilação da pluma

5.1.11 Caso XI

Figura 5.41: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás instantâneas

Figura 5.42: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás médias

Figura 5.43: Fração volumétrica média de gás ao longo de 4 alturas da coluna

Figura 5.44: Espectro de frequência de oscilação da pluma

5.1.12 Caso do Efeito da Correlação de Cd

Todas as simulações apresentadas foram antes simuladas utilizando o modelo de Grace para o coeficiente da força de arrasto (C_d) , e um caso particular apresentou bons resultados para a fração volumétrica de gás e a velocidade de líquido médias. A pluma não tendeu para nenhum lado da coluna, o que pode ser visto tanto nos cortes em diferentes alturas (Figura 5.47) como na coluna em si (Figura 5.46). Em compensação, tanto a frequência de oscilação característica da pluma (0.0529) quanto a retenção global de gás (0.0050)ficaram distantes dos valores experimentais, que são respectivamente 0.0879 e 0.0069.

Figura 5.45: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás instantâneas

Figura 5.46: Velocidade do líquido e fração volumétrica de gás médias

Figura 5.47: Fração volumétrica média de gás ao longo de 4 alturas da coluna

Figura 5.48: Espectro de frequência de oscilação da pluma

5.1.13 Comparação entre velocidade relativa entre as fases

O objetivo desta seção é comparar a intensidade da velocidade relativa, entre casos que apresentam como única diferença entre si a inclusão ou não da viscosidade devido à turbulência induzida por bolhas.

Portanto, os casos analisados em caráter comparativo são: Caso IV x Caso V e Caso VI x Caso XI, e as figuras podem ser vistas abaixo:

Figura 5.49: Velocidade relativa no caso IV (t = 160s)

Figura 5.50: Velocidade relativa no caso V(t=160s)

Figura 5.51: Velocidade relativa no caso VI (t = 160s)

Figura 5.52: Velocidade relativa no caso XI (t = 160s)

5.1.14 Retenção Global de Gás

A retenção global de ar da coluna pode ser calculada através da Equação 5.1

$$<\alpha>=\frac{\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\cdot v_i}{\sum_{i=1}^{N}v_i}\tag{5.1}$$

Onde α_i é a fração volumétrica de gás na célula i da coluna, v_i corresponde ao volume desta mesma célula. O somatório se dá até a última célula N preenchida com líquido da coluna.

Para a contagem da retenção global de gás, foram consideradas todas as células que apresentassem fração volumétrica de gás menor ou igual a 0.5, para garantir a inclusão de todas as células preenchidas com líquido. Como a injeção de gás proporciona uma expansão da coluna, essa abordagem se mostrou mais interessante do que a simples contagem de todas as células dentro do intervalo de altura igual a 45 cm.

O valor experimental para $\langle \alpha \rangle$ encontrado por Díaz et al. (2008) nessa mesma coluna foi igual a 0.0069. Uma tabela com os valores encontrados via simulação assim como o desvio em relação ao valor experimental encontram-se abaixo:

Caso	Volume	$< \alpha >$	Desvio(%)
Ι	0.00358501	0.00777337	12.66
II	0.00358501	0.00777158	12.63
III	0.00358457	0.00787062	14.07
IV	0.00358501	0.00782453	13.40
V	0.00358435	0.00763046	10.59
VI	0.00358479	0.00779367	12.95
VII	0.00358501	0.00777567	12.70
VIII	0.00359874	0.00760178	10.17
IX	0.00358501	0.00775461	12.39
X	0.00358435	0.00760747	10.25
XI	0.00358435	0.00771482	11.81
C_d	0.00358435	0.00500000	-27.54

Tabela 5.1: Retenção Global de Gás

5.1.15 Frequência de Oscilação da Pluma

Como dito anteriormente, foi instalado um ponto de monitoramento da pressão na parede da coluna (H = 0.4 m) com o objetivo de calcular a frequência de oscilação da pluma. A escolha da pressão no ponto referido veio do trabalho experimental de Díaz et al. (2008), com o qual os resultados via simulação foram comparados.

A partir dos valores de pressão, a partir da técnica de (Lomb, 1976) foi gerado um espectro com as frequências de oscilação da pluma. Deste gráfico retirou-se o valor de frequência que apresentou o maior pico, o que caracteriza a frequência característica de oscilação da pluma.

Seu valor experimental foi encontrado por Díaz et al. (2008) e vale 0.0879. Uma tabela com os valores encontrados via simulação, assim como o desvio em relação ao valor experimental encontra-se abaixo:

Caso	Frequência Característica (Hz)	Desvio(%)
Ι	0,0250	-71,56
II	0,1675	90, 56
III	0,0350	-60, 18
IV	0,0225	-74,40
V	0,0150	-82,94
VI	0,0700	-20,37
VII	0,0975	10,92
VIII	0,0150	-82,94
IX	0,1125	27,99
X	0,1125	27,99
XI	0,0825	-6, 14
C_d	0,0529	-39,80

Tabela 5.2: Frequência Característica de Oscilação da Pluma

5.1.16 Discussões

Analisando os gráficos do espectro de frequência de oscilação da pluma, observa-se que os mais próximos da frequência real de oscilação da pluma foram os casos VI, VII e XI, casos que tem em comum a modelagem da força de dispersão turbulenta, e dois deles, além disso, apresentam a modelagem da turbulência induzida por bolhas. Recomenda-se então mais testes envolvendo a modelagem de tal força, que se mostrou relevante neste resultado.

Os perfis de fração volumétrica média de gás e velocidade média de líquido ao longo da coluna não apresentaram a simetria esperada, ou seja, a pluma tendeu para um dos lados, o que não corresponde à realidade do escoamento. O melhor resultado nesse aspecto foi o que utilizou o modelo de *Schiller-Naumann* para o coeficiente de arrasto em conjunto com a modelagem da turbulência via Sato et al. (1981). Outras simulações envolvendo o modelo de *Schiller-Naumann* foram realizadas, e verificou-se que somente após a inclusão

da referida turbulência, perfis simétricos foram alcançados para essas grandezas médias. Isso sugere dizer que de alguma forma a inclusão do modelo de *Grace* anulou o efeito de Sato et al. (1981) nas simulações.

Não houve mudanças significativas ao longo da fração volumétrica de gás nas diferentes alturas da coluna, apesar de o padrão seguido ser o esperado, com exceção ao primeiro nível da coluna, aonde percebe-se a tendência da pluma de estar do lado esquerdo da coluna. Novamente, o caso que utilizou a modelagem de C_d via *Schiller-Naumann* alcançou as frações melhores distribuídas ao longo da coluna.

A modelagem das forças não alterou de forma significativa a retenção global de gás, uma vez que os resultados apresentam desvios numa faixa de 10% a 14% basicamente. O teste em relação à eficácia da malha se mostrou interessante nesse sentido (Caso VIII). Em todos os casos, a contagem da retenção global de gás contou com um volume menor que o esperado $(0.0036m^3)$. Isso é gerado por efeitos de interface, e a malha utilizada não é refinada o suficiente para negligenciar tais efeitos. Isso foi comprovado pelo Caso VIII, que apresentou a melhor aproximação do volume na contagem e retenção global mais próxima da experimental.

Capítulo 6

Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

Apesar de os resultados em si não terem mostrado uma boa adequação com os resultados experimentais de Díaz et al. (2008), a partir dos mesmos pode ser feito um mapeamento de quais forças alteraram quais características do escoamento, para que sejam alcançados resultados mais próximos da realidade.

Recomenda-se simulações utilizando malhas mais refinadas que a utilizada, assim como a implementação da modelagem da força de dispersão turbulenta e a turbulência induzida por bolhas de acordo com os resultados aqui obtidos.

Como sugestões para trabalhos futuros, deve-se avaliar o cálculo de todas as forças como o previsto na literatura, isto é, sem a extensão ao tratamento simétrico das fases.

Sugere-se também a adesão de novos modelos para o cálculo da constante C_d , para que se possa realmente concluir que a inclusão do modelo **Grace** prejudicou ou não a modelagem, assim como a adição de novas forças, como a de lubrificação de parede.

Um outro efeito pode ser estudado, como a modelagem da geometria do dispersor. A aproximação de um jato contínuo ao invés de jatos pontuais de gás pode ter prejudicado a oscilação da pluma, então o estudo da geometria real é válida.

Referências Bibliográficas

- Damian, R. B. (2007). Simulação cfd de escoamentos multifásicos polidispersos usando balanço populacional. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, RJ, Brasil.
- de Bertodano, M. A. L. (1998). Two fluid model for two-phase turbulent jets. Nuclear Engineering and Design, 179(1):65 – 74.
- Deen, N., Solberg, T., e Hjertager, B. (2001). Large eddy simulation of the gas-liquid flow in a square cross-sectioned bubble column. *Chemical Engineering Science*, 56(21-22):6341-6349.
- Deen, N. G., Solberg, T., e Hjertager, B. (2000). Numerical simulation of the gas-liquid flow in a square crosssectioned bubble column. In *CHISA 14th International Congress* of *Chemical and Process Engineering*.
- Drew, D. A. e Passman, S. L. (1999). *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer, 1 edição.
- Díaz, M. E., Iranzo, A., Cuadra, D., Barbero, R., Montes, F. J., e Galán, M. A. (2008). Numerical simulation of the gas-liquid flow in a laboratory scale bubble column: Influence of bubble size distribution and non-drag forces. *Chemical Engineering Journal*, 139(2):363-379.
- Inc., A. (2007). ANSYS CFX-11.0 User Manual.
- Jasak, H., Weller, H. G., e Nordin, N. (2004). In-cylinder CFD simulation using a C++ object-oriented toolkit. Paper number 2004-01-0110, Detroit. SAE World Congress.

- Krishna, R., Ellenberger, J., e Maretto, C. (1999). Flow regime transition in bubble columns. International Communications in Heat and Mass Transfer, 26(4):467–475.
- Lomb, N. R. (1976). Least-squares frequency analysis of unequally spaced data. Astrophysics and Space Science, 39:447 – 462.
- Lucas, D., Krepper, E., e Prasser, H.-M. (2007). Use of models for lift, wall and turbulent dispersion forces acting on bubbles for poly-disperse flows. *Chemical Engineering Science*, 62(15):4146- 4157.
- Pfleger, D., Gomes, S., Gilbert, N., e Wagner, H. G. (1999). Hydrodynamic simulations of laboratory scale bubble columns fundamental studies of the eulerian-eulerian modelling approach. *Chemical Engineering Science*, 54(21):5091- 5099.
- R. Bannari, Fouzi Kerdouss, B. S. A. B. e Proulx, P. (2008). Three-dimensional mathematical modeling of dispersed two-phase flow using class method of population balance in bubble columns. *Computers and Chemical Engineering*, 32(12):3224-3237.
- Rusche, H. (2002). Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, Londres, Reino Unido.
- Sato, Y., Sadatomi, M., e Sekoguchi, K. (1981). Momentum and heat transfer in two-phase bubble flow-ii. a comparison between experimental data and theoretical calculations. *International Journal of Multiphase Flow*, 7(2):179 – 190.
- Silva, L. e Lage, P. (2011). Development and implementation of a polydispersed multiphase flow model in openfoam. *Computers and Chemical Engineering*, In Press, Corrected Proof.
- Silva, L. F. L. R. (2008). Desenvolvimento de Metodologias para Simulação de Escoamentos Polidispersos Usando Código Livre. PhD thesis, COPPE/UFRJ, RJ, Brasil.

Sokolichin, A. e Eigenberger (1999). Applicability of the standard $k - \epsilon$ turbulence model

to the dynamic simulation of bubble columns. part i. detailed numerical simulations. Chemical Engineering Science, 54:2273- 2284.

Sokolichin, A., Eigenberger, G., Lapin, A., e Liibbert, A. (1997). Dynamic numerical simulation of gas-liquid two-phase flows euler/euler versus euler/lagrange. *Chemical Engineering Science*, 52:611- 626.