



Implementação do Modelo de Transporte de Área Interfacial para Escoamentos Dispersos no OpenFOAM

Mariana Gallassi Pereira

Projeto Final de Curso

Orientadores

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.
Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Outubro de 2013

IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO DE TRANSPORTE DE ÁREA INTERFACIAL PARA ESCOAMENTOS DISPERSOS NO OPENFOAM

Mariana Gallassi Pereira

Projeto Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química como parte dos requisitos necessários à obtenção do Grau de Químico Industrial.

Aprovado por:

Heloísa Lajas Sanches, D.Sc.

Antonio de Oliveira Samel Moraes, M.Sc.

Lucilla Coelho de Almeida, M.Sc.

Orientado por:

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil
Outubro de 2013

Pereira, Mariana.

Implementação do Modelo de Transporte de Área Interfacial para Escoamentos Dispersos no OpenFOAM / Mariana Pereira. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2013. xiv, 86p.; il

(Projeto Final de Curso) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2013.

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

1. Fluidodinâmica Computacional. 2. Modelo de Área Interfacial. 3. OpenFOAM. 4. Projeto Final de Curso. (Graduação - UFRJ/EQ). 5. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva e Paulo Laranjeira da Cunha Lage. I. Implementação do Modelo de Transporte de Área Interfacial para Escoamentos Dispersos no OpenFOAM.

A todos aqueles que de alguma forma participaram para meu crescimento profissional e pessoal.

Agradecimentos

Agradeço a todos contribuíram para o nascimento desde trabalho, seja com algum conhecimento específico, palavras de apoio, ou simplesmente estando ali presente nos momentos de crise, que não foram poucos, diga-se de passagem.

Em especial, agradeço a minha família, namorado, aos alunos do LFTD pelo apoio, meus orientadores, Profs. Paulo e Luiz Fernando pelo conhecimento transmitido e aos meus amigos pela paciência.

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

IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO DE TRANSPORTE DE ÁREA INTERFACIAL PARA ESCOAMENTOS DISPERSOS NO OPENFOAM

Mariana Gallassi Pereira

Outubro de 2013

Orientadores: Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.
Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

O presente trabalho resolve o modelo de transporte de área interfacial, desenvolvido por KIM [1] através de um pacote para simulações CFD, o OpenFOAM. Este modelo, formulado para escoamentos unidimensionais, apresenta equações simplificadas e menor custo computacional se comparado com a equação de balanço populacional, o que garante uma maior aplicabilidade no cenário industrial. A proposta foi implementá-lo no OpenFOAM, que tem como principal vantagem a disponibilidade de acesso ao código, ou seja, trata-se de um *software* com código livre. Após a implementação, simulações de casos unidimensionais foram realizadas a fim de validar o modelo a partir de dados experimentais. Os resultados mostraram que a incorporação do modelo de transporte de área interfacial foi feita com sucesso, necessitando de atenção para o cálculo do termo fonte referente à quebra das bolhas. Uma vez validado o modelo, será possível, em trabalhos futuros, estender o modelo para escoamentos tridimensionais e realizar simulações tridimensionais, onde a acurácia da solução e a fluidodinâmica do escoamento poderão ser analisados.

Abstract of Undergraduate Project presented to Escola de Química as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Industrial Chemist.

IMPLEMENTATION OF INTERFACIAL AREA TRANSPORT MODEL FOR DISPERSE
FLOWS IN OPENFOAM
Mariana Gallassi Pereira

October 2013

Advisors: Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D. Sc.
Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D. Sc.

This work solves the interfacial area transport model, develop by KIM [1], using a CFD simulation package called OpenFOAM. This model, formulated for one-dimensional flows, presents simpler equations with reduced computational cost when compared to the population balance equation, which warrants wider applicability in the industrial scene. The proposal was to implement this model in a CFD simulation package, OpenFOAM, an open source software. After the implementation, one-dimensional simulations were performed in order to validate the model using experimental data. Results have shown that the incorporation of interfacial area transport model was successful. The need for special attention remains to a few specific details, as source term of breakage of bubbles. Once the model is validated it will be possible, in future projects, to perform tridimensional simulations, where accuracy of the solution and fluid dynamics of the flow can be evaluated.

Sumário

1	Introdução	2
1.1	Contextualização	2
1.2	Objetivo	3
2	Fluidodinâmica Computacional	5
2.1	Procedimento de simulação	6
2.1.1	Discretização no tempo e no espaço	6
2.1.2	Etapas de simulação	7
2.2	Pacotes CFD: OpenFOAM	8
2.2.1	Histórico	8
2.2.2	Estrutura do OpenFOAM	9
2.2.3	Representação de uma equação	9
2.2.4	Usos do OpenFOAM	10
3	Escoamento Multifásico	12
3.1	Introdução à modelagem multifásica	13
3.2	Balanco populacional	14
3.3	Interações entre as bolhas	15
3.4	Os mecanismos de interações entre bolhas	18
3.4.1	Modelos de quebra	18
3.4.2	Modelos de coalescência	18
3.4.3	Os modelos utilizados	19
3.5	Modelo de área interfacial	23
3.5.1	Equação de transporte de número de partícula	23
3.5.2	Equação de transporte de volume	24
3.5.3	Equação de conservação de massa	25
3.5.4	Formulação em um grupo	29
4	Implementação	34
4.1	Equações de conservação de massa	34
4.2	A equação de drift-flux	36
4.3	Modelagem da pressão	36
4.4	Modelagem da turbulência	36
4.5	Equação de transporte de área interfacial	37
4.6	Algoritmo da solução	40

5	Metodologia utilizada	41
5.1	Casos testados	41
5.1.1	Dados experimentais	42
5.1.2	Geometria e malha	42
5.1.3	Condições iniciais, de contorno e parâmetros da simulação	42
6	Resultados	45
6.1	Análise dos mecanismos de interação	45
6.1.1	Mecanismo de expansão	45
6.1.2	Mecanismo de quebra	48
6.1.3	Mecanismo de coalescência por colisões turbulenta	51
6.1.4	Mecanismo de coalescência por captura de esteira	54
6.2	Comparação entre os termos	56
6.3	Validação com dados experimentais	59
7	Conclusão	63
7.1	Trabalhos futuros	63
	Apendice A - Código	67
A	Código	68
A.1	createFields.c	69
A.2	coefficients.H	73
A.3	drift-flux.H	74
A.4	evaluatueUgUl.H	75
A.5	interfacialscalartransportFoam.c	76

Lista de Figuras

2.1	Discretização espacial. Fonte: OpenFOAM [2]	7
2.2	Etapas de simulação de uma peça mecânica: geometria, malha e curva de contorno, respectivamente. Fonte: Autodesk WikiHelp	8
2.3	Estrutura do OpenFOAM. Fonte: Manual do OpenFOAM [2]	9
2.4	Equação representada no código. Fonte: OpenFOAM [2]	10
3.1	(a) Padrões de fluxos para escoamentos verticais (b) Padrões de fluxos para escoamentos horizontais. Fonte: FALVEY [3].	12
3.2	Padrões de fluxos para escoamentos horizontais. FONTE: MANDHANE <i>et al</i> [4], adaptado	13
3.3	Mecanismos de interações entre dois grupos de bolhas. Fonte: ISHII [5]	16
3.4	Processo binário de quebra e coalescência.	32
5.1	Geometria (acima) e malha hexaédrica(abaixo)	43
6.1	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A1 apenas com expansão.	46
6.2	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A2 apenas com expansão.	47
6.3	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A3 apenas com expansão.	47
6.4	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A4 apenas com expansão.	48
6.5	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A5 apenas com expansão.	48
6.6	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A1 apenas com quebra.	49
6.7	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A2 apenas com quebra.	49
6.8	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A3 apenas com quebra.	50
6.9	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A4 apenas com quebra.	50
6.10	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A5 apenas com quebra.	51
6.11	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A1 apenas com colisão turbulenta.	52

6.12	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A2 apenas com colisão turbulenta.	52
6.13	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A3 apenas com colisão turbulenta.	53
6.14	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A4 apenas com colisão turbulenta.	53
6.15	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A5 apenas com colisão turbulenta.	54
6.16	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A1 apenas com colisão por captura na esteira de outra bolha.	54
6.17	Gráfico de concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o caso A2 apenas com colisão captura na esteira de outra bolha.	55
6.18	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A3 apenas com colisão captura na esteira de outra bolha.	55
6.19	Gráfico de concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o caso A4 apenas com colisão captura na esteira de outra bolha.	56
6.20	Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A5 apenas com colisão captura na esteira de outra bolha.	56
6.21	Concentração de área interfacial para o Caso A1.	57
6.22	Concentração de área interfacial para o Caso A2.	57
6.23	Concentração de área interfacial para o Caso A3.	58
6.24	Concentração de área interfacial para o Caso A4.	58
6.25	Concentração de área interfacial para o Caso A5.	59
6.26	Gráfico comparativo entre valores de a_i obtido no presente trabalho (IAM - Pereira), por Kim (IAM - KIM) e dados experimentais para o caso A1.	60
6.27	Gráfico comparativo entre valores de a_i obtido no presente trabalho (IAM - Pereira), por Kim (IAM - KIM) e dados experimentais para o caso A2.	60
6.28	Gráfico comparativo entre valores de a_i obtido no presente trabalho (IAM - Pereira), por Kim (IAM - KIM) e dados experimentais para o caso A3.	61
6.29	Gráfico comparativo entre valores de a_i obtido no presente trabalho (IAM - Pereira), por Kim (IAM - KIM) e dados experimentais para o caso A4.	61
6.30	Gráfico comparativo entre valores de a_i obtido no presente trabalho (IAM - Pereira), por Kim (IAM - KIM) e dados experimentais para o caso A5.	62

Lista de Tabelas

5.1	Condições experimentais. Fonte: ALMEIDA [6]	42
5.2	Condições experimentais com α_g ajustado	43
5.3	Coefficientes e parâmetros. Fonte: ALMEIDA [6]	44

Capítulo 1

Introdução

1.1 Contextualização

A fluidodinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics* - CFD) surgiu como uma alternativa aos altos custos com obtenção de dados experimentais necessários para estudos da dinâmica do fluido. Trata-se de um ramo da computação científica que visa analisar os problemas de escoamentos de fluidos e fenômenos físicos associados por meio de simulações computacionais baseadas em modelagens matemáticas dos sistemas, nos quais são resolvidas equações diferenciais parciais (ALMEIDA [6]).

Esta ferramenta permite estudar diversos fenômenos atrelados à indústria como troca de calor, massa, reações químicas, turbulência, escoamentos multifásicos. Este último, em especial, chama atenção pela sua vasta aplicação em diferentes setores, e seu conhecimento permite o aprimoramento de inúmeros processos e equipamentos no qual está presente.

O escoamento multifásico é caracterizado por elementos de matéria escoando simultaneamente em diferentes estados: líquido, sólido ou na forma gasosa. Na área de Engenharia, pode ser encontrado em inúmeras operações unitárias de variados segmentos industriais sobre diversas formas (RODRIGUES [7]):

- Escoamento gás-sólido ou líquido-sólido: Ocorre em equipamentos como leitos fluidizados borbulhantes ou circulantes e biorreatores presentes na indústria metalúrgica e petroquímica.
- Escoamento gás-líquido: Ocorre em equipamentos como colunas de bolhas, torres de resfriamento, óleo-gás e água-gás em tubulações e podem ser aplicados na indústria petroquímica e de refrigeração.
- Escoamento líquido-líquido: Geralmente ocorre na forma de escoamento de óleo leve/pesado e água em tubulações e pode ser encontrado nas indústrias de alimentos e de petróleo.

- Escoamento líquido-líquido-gás: Geralmente ocorre na forma de escoamento óleo-água-gás em tubulações da indústria de petróleo.

A estrutura básica do escoamento gás-líquido, foco deste trabalho, pode ser caracterizada à partir de dois parâmetros geométricos: a fração gasosa e a concentração de área interfacial. Para a fase gasosa, a fração volumétrica refere-se a quantidade relativa local no escoamento e é um parâmetro importante para a hidrodinâmica e projeto térmico de vários processos industriais. A concentração de área interfacial descreve a área disponível para trocas interfaciais de massa, *momentum* e energia.

Este último parâmetro é importante para o modelo de dois fluidos, proposto por ISHII [5]. Este considera cada fase separadamente e portanto, o modelo é expresso em termo de dois conjuntos de equações de conservação de massa, *momentum* e energia. Como as fases não são independentes entre si, o transporte de massa, *momentum* e energia é feito através da interface, por meios de termos fontes. Esses termos fontes são proporcionais à sua força motriz e densidade de área interfacial disponível para as trocas, definida como área da interface dividida por unidade de volume da mistura.

Uma vez que a concentração de área interfacial é um parâmetro geométrico, este pode variar significativamente de acordo com o regime de escoamento (bolhas, *slug*, *churn*). Os termos são modelados através de correlações empíricas que são válidas apenas para o regime proposto, tornando o modelo impreciso já que os critérios de transição são relações algébricas criadas para escoamentos plenamente desenvolvidos e estacionários. Elas não captam as transições entre os regimes, que são fenômenos intermitentes.

Para melhorar a acurácia da predição da concentração de área interfacial entre os regimes, KOCAMUSTAFAOGULLARI e ISHII [8] propuseram a introdução de um equações de transporte de área interfacial (ETAI), obtida de forma análoga as equações de balanço populacional (EBP) (RAMKRISHNA [9]). Na sua forma mais simplificada, a ETAI pode ser obtida calculando a média da área interfacial de partículas da seção de área transversal ao escoamento ao reduzir para a forma unidimensional. Desta maneira, a equação pode substituir os mapas de transição de regime.

Na comparação entre a EBP e a ETAI, a última apresenta maiores vantagens para a aplicação industrial devido ao seu baixo custo computacional uma vez que não é tão detalhada e dispendiosa quanto a EBP. Desta forma, a equação de transporte de área interfacial vem ganhando popularidade.

1.2 Objetivo

O presente trabalho tem como principal objetivo implementar a equação de transporte de área interfacial para simulações de escoamentos dispersos. Algumas etapas foram realizadas de forma a se alcançar o objetivo final:

- Estudo da ferramenta de Fluidodinâmica Computacional (CFD), conceitos de programação e estrutura do *software*.
- Estudo da modelagem multifásica, revisando principalmente o modelo de transporte de concentração de área interfacial.
- Implementação do modelo de concentração de área interfacial, na sua forma unidimensional, em um pacote de simulação CFD e realização de casos testes.
- Validação dos resultados com dados disponíveis na literatura (ALMEIDA [6] e KIM [1]).

A ferramenta CFD escolhida para este trabalho foi um *software* de código livre chamado OpenFOAM [2].

Capítulo 2

Fluidodinâmica Computacional

A fluidodinâmica computacional modela matematicamente a conservação de propriedade em equações diferenciais parciais, que serão resolvidas por meio de métodos numéricos, a fim de se obter um resultado final. Esta modelagem conta com duas equações base: conservação de massa e conservação de momento linear, também chamado de quantidade de movimento ou *momentum*. Ainda conta com a equação de energia.

A equação de conservação de massa relaciona a variação de massa com um divergente de momento linear, sendo ρ a densidade e \mathbf{v} a velocidade, Eq. 2.1:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \quad (2.1)$$

A equação de quantidade de movimento, Eq. 2.2, por sua vez, se baseia na segunda Lei de Newton e relaciona a taxa de variação de momento linear com o somatório de forças externas aplicada ao volume de fluido. Ou seja, é feito um balanço de forças.

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV = \Sigma \mathbf{F} \quad (2.2)$$

Após tratamento matemático, pode-se reescrever a Eq. 2.2 na forma de uma equação diferencial, Eq. 2.3.

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla P + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}) + \rho \mathbf{g} \quad (2.3)$$

onde P é a pressão, $\boldsymbol{\tau}$ representa as tensões viscosas do escoamento e \mathbf{g} a gravidade.

A equação de energia cinética pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v^2 \right) + \nabla \cdot \left(\frac{1}{2} \rho v^2 \mathbf{v} \right) = \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{g} - \nabla \cdot (p \cdot \mathbf{v}) + p \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \left(\frac{\tau}{\rho} \cdot \mathbf{v} \right) - \frac{\tau}{\rho} : \nabla \mathbf{v} \quad (2.4)$$

O primeiro termo refere-se a taxa de aumento da energia cinética, o segundo trata do fluxo de energia cinética. Do lado direito da equação, tem-se a taxa de trabalho devido à força gravitacional, a taxa de trabalho devido à pressão, taxa de conservação reversível a energia interna, taxa de trabalho devido à forças viscosas e taxa de conservação irreversível devido à energia interna, respectivamente.

Entretanto, não é possível fazer uma predição do campo de escoamento com apenas as duas equações de conservação, já que o sistema final apresenta um número maior de incógnitas do que equações. A solução é incorporar ao sistema novas equações, as chamadas equações de fechamento. Alguns exemplos são as equações de estado para as variáveis termodinâmicas e ou as constitutivas, que descrevem o comportamento do fluido no transporte difusivo. Para fluidos newtonianos a equação constitutiva utilizada é a formulação de Navier-Poisson, onde τ é o tensor viscoso, μ é a viscosidade do fluido e λ um coeficiente escalar.

$$\tau = \mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) + \lambda (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \quad (2.5)$$

Por fim, é preciso ainda fornecer as condições iniciais, para especificar o estado inicial no qual a simulação é iniciada, e as condições de contorno, para especificar como o escoamento interage com as vizinhanças. Assim é garantido que o sistema terá todas informações suficientes e pode então ser resolvido.

2.1 Procedimento de simulação

Nesta seção são apresentadas as etapas para a realização de uma simulação computacional, que se inicia na representação tridimensional geométrica do domínio espacial, até a interpretação dos resultados. Entretanto, faz-se necessário para a total compreensão do procedimento a introdução do conceito de discretização.

2.1.1 Discretização no tempo e no espaço

O termo discretização significa a aproximação do problema de domínio contínuo em quantidades discretas. Para tal, são utilizadas metodologias numéricas como volumes finitos (utilizada no presente trabalho), elementos finitos e diferenças finitas, que discretizam o problema da seguinte maneira (OpenFOAM [2]):

- **Discretização espacial:** O domínio da solução é dividido em volumes de controle, ou células, interconectados entre si ou com o contorno do domínio. A partir da discretização geométrica é construída a malha computacional (Fig. 2.1). As variáveis dependentes e outras propriedades são alocadas principalmente no centro P da célula, embora também podem ser guardadas nas faces ou nos vértices. A célula é limitada por faces f .
- **Discretização temporal:** O domínio do tempo é dividido em intervalos de tempo finitos, ou passos de tempo. É feita apenas para simulações transientes, onde há variação da variável estudada no tempo.
- **Discretização da equação:** O processo de discretização por volumes finitos transforma as equações diferenciais de variáveis contínuas em um sistema de equações algébricas correspondente.

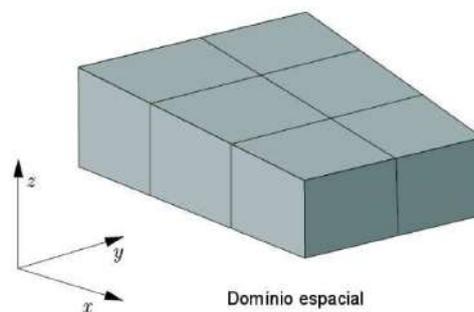


Figura 2.1: Discretização espacial. Fonte: OpenFOAM [2]

2.1.2 Etapas de simulação

A simulação segue as seguintes etapas:

1. **Representação geométrica tridimensional do domínio real (duto, ciclone, forno, coluna de bolhas).** São utilizados programas específicos para tal, como por exemplo, os disponíveis pelo pacote Ansys DesignModeler [10], ICEM [11]. Para domínios mais complexos, é usual recorrer ao *software* AutoCAD [12], oferecendo assim mais recursos ao projetista para retratar fielmente o domínio.
2. **Discretização espacial.** A geometria é discretizada em volumes de controle e tem como objetivo representar um espaço infinitesimal. Existem *softwares* especializados em produzir malhas como por exemplo o ICEM [11], Pointwise [13], entre outros.
3. **Discretização das equações** É feita a discretização das equações diferenciais de massa, quantidade de movimento e energia. Etapa realizada pela escolha da metodologia de aproximação discreta para cada termo da reação.

4. **Definição das propriedades dos fluidos e das condições de contorno.** Todas as propriedades dos fluidos envolvidos na simulação e as condições iniciais e de contorno devem ser estabelecidos.
5. **Solução das equações** É resolvido o sistema algébrico de equações de balanços diferenciais discretizados no tempo e no espaço e das equações de fechamento.
6. **Obtenção dos resultados** Os resultados são obtidos sob a forma de gráficos, curvas de contorno e valores numéricos das variáveis nos volumes de controle.

A Fig. 2.2 ilustra os passos principais do processo de simulação de uma peça mecânica.



Figura 2.2: Etapas de simulação de uma peça mecânica: geometria, malha e curva de contorno, respectivamente. Fonte: Autodesk WikiHelp

2.2 Pacotes CFD: OpenFOAM

As ferramentas CFD oferecem grandes vantagens para a análise de diversos tipos de escoamentos. Além da rapidez na obtenção dos resultados e confiabilidade das respostas, as simulações computacionais apresentam custos inferiores aos testes experimentais. A variedade de casos em que pode ser aplicada só é possível devido ao desenvolvimento na área de modelagem de fenômenos físicos e métodos numéricos para a resolução de diversos problemas, que pode vir principalmente do aprimoramento do código pelo usuário. Dessa forma, é interessante trabalhar com pacotes que permitam essa interação entre a ferramenta e o programador, já que ele pode acrescentar em muito com a modelagem ou novas formas de resolver um determinado problema. Seguindo este conceito, o *software* escolhido para o presente trabalho foi o OpenFOAM (SILVA [14]).

2.2.1 Histórico

O OpenFOAM é um pacote de bibliotecas distribuído gratuitamente junto com seu código fonte. A primeira versão do pacote foi criada pelos alunos do *Imperial College*, Henry Weller e Hrvoje Jasak, em 1993, e tratava-se de um código baseado na linguagem C++ chamado FOAM (*Field Operation and Manipulation*) para operar e manipular campos tensoriais aplicados à fluidodinâmica computacional. Após tentativas de fazer uma linha comercial, em 2004 o código FOAM se tornou público, passando a se chamar OpenFOAM.

A aceitação no meio acadêmico foi bastante positiva e o OpenFOAM vem sendo utilizado em projetos de pesquisas e colaborando para o desenvolvimento do código, ajudando no crescimento do pacote CFD. Além disso, grandes empresas multinacionais, como AUDI, Airbus, Bayer, Shell, Honda, entre outras, já visualizaram seu potencial e utilizam o OpenFOAM no desenvolvimento de projetos de alta tecnologia (SILVA [14]).

2.2.2 Estrutura do OpenFOAM

O OpenFOAM é um conjunto de bibliotecas desenvolvido em C++, usado para criar executáveis, conhecidos como aplicativos. Ele possui centenas de aplicativos pré-compilados, porém o usuário tem a liberdade de desenvolver ou modificá-lo para melhor se adequar ao problema.

Os *aplicativos* dão origem a dois grupos:

- *Solvers*: Arquivos executáveis escritos na linguagem C++ responsáveis por resolver os problemas específicos.
- Utilitários: Realizam tarefas de pré e pós-processamentos, muitas vezes envolvendo manipulação de dados e cálculos algébricos.

De maneira resumida, a estrutura do OpenFOAM pode ser representada na Fig. 2.3. No ambiente de pré-processamento, existem ferramentas para criação e refino de malhas computacionais. Durante a solução, ele conta com aplicativos padrões ou os desenvolvidos pelo usuário. E finalmente, para o pós-processamento, existe uma ferramenta chamada ParaView [15], onde é possível analisar os resultados, entre outras.

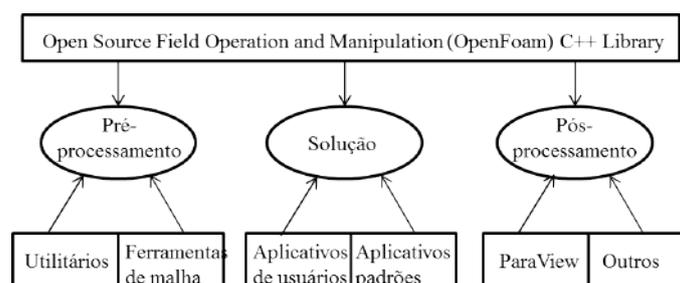


Figura 2.3: Estrutura do OpenFOAM. Fonte: Manual do OpenFOAM [2]

2.2.3 Representação de uma equação

A técnica de orientação a objeto aliada à técnica de sobrecarregamento de operadores, ambas utilizadas pelo OpenFOAM, permitiu que a criação de dados fosse semelhante à usada na mecânica do contínuo e que a simbologia usual pudesse ser empregada para as operações básicas.

As declarações de tipos de dados e operações são bastantes próximos da linguagem de engenharia. Por exemplo, a velocidade é um campo vetorial representado pelo símbolo U e pertence a uma classe **vectorField** Ou seja, este campo pode ser dito como objeto da classe **vectorField** (SILVA [14]).

O OpenFOAM é desenvolvido de forma que os *solvers* sejam escritos com uma sintaxe que lembra as equações diferenciais parciais ao serem resolvidas. Como já foi dito, estas serão transformadas em um sistema algébrico na forma $[A][x] = [b]$, onde $[A]$ é uma matriz quadrada, x é um vetor da variável dependente e b é o termo fonte. Por exemplo, a Eq. 2.6,

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot \phi U - \nabla \cdot \mu \nabla U = -\nabla p \quad (2.6)$$

é representada pelo código mostrado na Fig. 2.4.

```
solve
(
  fvm::ddt(rho, U)
  + fvm::div(phi, U)
  - fvm::laplacian(mu, U)
  ==
  - fvc::grad(p)
);
```

Figura 2.4: Equação representada no código. Fonte: OpenFOAM [2]

Cada termo da equação é individualmente representado utilizando a classe de funções **finiteVolumeMethod** (fvm) e **finiteVolumeCalculus** (fvc) e irá determinar o tipo de operação de discretização que está sendo realizada. A função de discretização implícita calcula as derivadas implicitamente e o resultado retorna para a matriz A. Já a função de discretização explícita calcula as derivadas explicitamente obtendo como resultado campos geométricos (OpenFOAM [2]).

2.2.4 Usos do OpenFOAM

Diversos pesquisadores vem utilizando o OpenFOAM em suas linhas de pesquisas. Na área de escoamentos multifásicos, autores como LAGE e SILVA [16] e FAVERO *et al.* [17] destacam-se no desenvolvimento de metodologias para o OpenFOAM. Dessa forma, muito já se avançou em termos de *solvers* disponíveis para o usuário utilizar em seus trabalhos.

Existe um diretório chamado Tutoriais, onde estão os casos para cada *solver* disponível. Uma vez no diretório, é possível escolher diferentes problemas que podem ser rodados com o mesmo solver. Seja qual for o caso escolhido, ele será composto de alguns diretórios obrigatórios:

- **0**: Diretório que contém todas as variáveis pertinentes com seus valores ajustados para a condição inicial, como por exemplo campo de velocidade, campo de pressão.

- **constant:** Diretório onde está localizada a malha computacional (em um diretório chamado *polymesh*) e outros arquivos que contenham propriedades contantes. Também contém informações sobre modelos genéricos à várias simulações como os modelos de turbulência, combustão, radiação térmica entre outros.
- **system:** Diretório que contém arquivos onde o usuário definirá os parâmetros da simulação: o passo de tempo, tempo total de simulação. Além disso, define os métodos numéricos para integração e discretização dos operadores, interpolação das variáveis, definição dos métodos de acoplamento e *solvers* de sistemas lineares. Essas informações estão disponíveis nos arquivos: *controlDict*, *fvSchemes* e *fvSolutions*.

Capítulo 3

Escoamento Multifásico

Um sistema líquido-gás pode adotar diferentes configurações no interior de um duto, dependendo das variáveis operacionais. Algumas delas, como a velocidade das fases, as propriedades dos fluidos, diâmetro da tubulação, merecem atenção especial uma vez que permitem ao escoamento apresentar padrões de fluxos distintos, com suas próprias equações de momento, transferência de calor, massa e energia. Conhecer e compreender o comportamento desse escoamento, principalmente na interface dos fluidos, é fundamental para a modelagem do problema e a determinação de parâmetros imprescindíveis para o dimensionamento e as características da operação dos equipamentos.

Os padrões de fluxos para escoamentos verticais bifásicos, ou seja, com apenas duas fases, podem ser vistos na Fig. 3.1 (a). Já os horizontais tendem a ser mais complexos que o vertical, por conta da assimetria no escoamento induzida pela gravidade agindo normal à direção do mesmo. Dessa forma, o fluido mais pesado tende a se depositar no fundo da tubulação. Os padrões para esse tipo de escoamento estão na Fig. 3.1 (b).

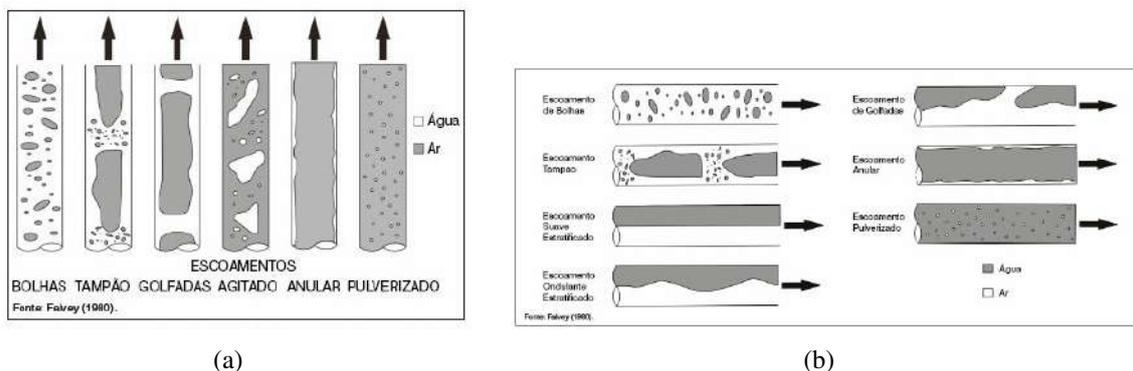


Figura 3.1: (a) Padrões de fluxos para escoamentos verticais (b) Padrões de fluxos para escoamentos horizontais. Fonte: FALVEY [3].

A descrição resumida de cada padrão de escoamento está colocado na sequência:

- Bolhas: Bolhas ou gotas são encontradas dispersas em uma fase contínua. Podem ser

monodispersas, ou seja, possuem propriedades iguais entre si, ou polidispersas.

- Estratificado: Duas fases são divididas por uma interface bem definida.
- Anular: Formado um filme de uma das fases na parede interna do duto enquanto a outra fase escoava pelo centro do duto.
- Intermitente: Engloba todos os escoamentos que não foram citados acima.

A fim de reunir a informação em apenas um espaço cartesiano, foram desenvolvidos os chamados mapas de regime. Eles contêm a informação sobre a morfologia do escoamento a partir de um par de parâmetros relevantes para definir o conjunto de variáveis desejados.

Acredita-se que BERGELIN e GAZLEY [18] juntos com KOSTERIN [19] são considerados os autores dos primeiros mapas de regimes de escoamentos. Entretanto o mapa mais recorrente na literatura foi desenvolvido por MANDHANE *et al* [4] em um trabalho sobre escoamento horizontais, utilizando mais de 5000 dados experimentais, incluindo análises de diferentes valores de diâmetros de dutos, massa específica, viscosidade, tensão superficial e velocidade (FACCINI [20]). O mapa de escoamentos desenvolvido por MANDHANE *et al* [4] está representado na Fig. 3.2.

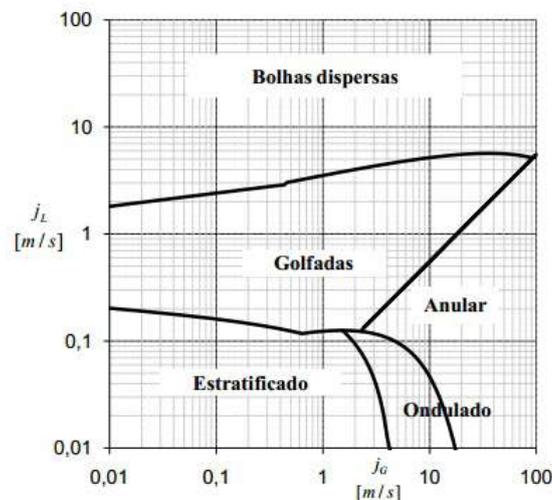


Figura 3.2: Padrões de fluxos para escoamentos horizontais. FONTE: MANDHANE *et al* [4], adaptado

A revisão bibliográfica da modelagem multifásica a seguir será baseada para escoamentos gás-líquido, que tem como padrão de fluxo bolhas dispersas.

3.1 Introdução à modelagem multifásica

Para a solução do escoamento multifásico, duas metodologias de simulação se destacam: Euleriana-Euleriana e Euleriana-Lagrangiana. Ambas tratam a fase contínua igualmente por meio da

equação de conservação de massa e quantidade de movimento. Todavia, as abordagens se diferenciam no tratamento da fase dispersa. Na modelagem Euleriana-Euleriana, que será a modelagem utilizada neste trabalho, a fase dispersa é vista como uma fase contínua, e portanto todas as fases são vistas como meios interpenetrantes (SILVA [14]), enquanto na abordagem Euleriano-Lagrangiano, ou simplesmente Lagrangeano, o escoamento da fase dispersa é calculado para cada entidade discreta (bolha, gotas ou bolhas), em um sistema de referência que se movimenta com a mesma.

Seguindo a abordagem Euleriana-Euleriana, a formulação mais geral é o modelo de dois fluidos, feito por ISHII [5]. Este considera cada fase separadamente, portanto o modelo expresso em termo de dois conjuntos de equações de conservação de massa, *momentum* e energia, um para cada fase.

Outro modelo disponível na literatura é o chamado *drift-flux*, uma simplificação ao modelo de dois fluidos. Sua formulação é baseada na solução da equação de conservação de *momentum* apenas para a mistura, além da solução das equações da continuidade e da conservação de energia para cada fase (mistura e fase dispersa). Logo, este modelo tem uma equação a menos em comparação ao modelo dois fluidos devido à eliminação de uma equação de conservação de momento linear, necessitando que haja uma equação constitutiva adicional para o movimento relativo entre as fases. Por esse motivo, com o modelo *drift-flux* é possível reduzir as dificuldades encontradas no modelo dois fluidos quanto a especificação dos termos de interações interfaciais entre as fases (ALMEIDA [6]). O modelo *drift-flux* é formulado e explicado detalhadamente em ZUBER e FINDLAY [21].

3.2 Balanço populacional

Em geral, uma das principais propriedades de interesse é o número de partículas dispersas na fase contínua. A equação do balanço populacional surgiu em 1916 justamente para se caracterizar melhor o comportamento espacial e dinâmico de uma população de partículas [9]. Assim, a partir da velocidade da fase dispersa, a equação de balanço populacional é resolvida. A partir da função de distribuição de diâmetro de partícula obtida, é calculado então um diâmetro médio e este valor é alimentado no termo referente às forças de interação entre as fases dispersa e contínua, na formulação Euleriana-Euleriana. Assim, conseguem-se valores corrigidos de velocidades que são novamente alimentados na EBP repetindo todo o processo descrito acima, até atingir a convergência numérica.

A evolução da função distribuição de tamanho das partículas é obtida através da sua equação de conservação. Esta pode, entretanto, variar ao longo do escoamento devido ao nascimento e morte de partículas. O nascimento de partículas provém tanto de processos de quebra e agregação, da mesma forma que afetam a morte das partículas, já que ao se coalescerem, por exemplo, uma das partículas deixa de existir. É fundamental para o sucesso da modelagem conhecer os processos de interação entre as fases que afetam a distribuição de tamanho das partículas (ARAÚJO [22]).

Na formulação do balanço populacional assume-se que existe uma densidade numérica de partículas definida em todos os pontos do espaço de estado das partículas. Este estado é caracterizado pelas coordenadas externas, que representam a localização da partícula no ambiente físico, e pelas coordenadas internas, que têm o papel de diferenciar as partículas quanto às suas propriedades de massa, tamanho, forma, idade. O número de partículas de cada região do espaço de estado é obtido então, através da integração da densidade numérica sobre a região desejada.

Já é conhecido que para se obter a função de distribuição do tamanho de partículas, levando em conta todas as interações interfaciais e os efeitos de quebra e agregação, deve-se resolver a equação do balanço populacional, representada na Eq. 3.1.

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} = -\nabla_x \cdot [\dot{X}f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)] + \nabla_x \cdot [D_x \cdot (\nabla_x \cdot D_x^T f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t))] + B_b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) - D_d(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + B_c(x, v, t) - D_c(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + J(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + G(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (3.1)$$

Uma nova variável, definida como a distribuição de densidade numérica das partículas, $f(\mathbf{x}, t)$.

O segundo e terceiro termos da Eq. 3.1 representam o transporte convectivo e difusivo de partículas no estado físico (SILVA [14]), sendo \dot{X} a taxa de variação da variável na coordenada externa, isto é, a sua velocidade. Os demais são termos fontes: B_b a taxa de nascimentos devido à quebras de partículas maiores, D_d refere-se taxa de morte devido à quebra em partículas menores, B_c a taxa de nascimento devido à coalescência de pequenas partículas, D_c a taxa de morte devido à coalescência com outras partículas, J refere-se nucleação e por fim, G a taxa de variação das propriedades da partícula.

Como é muito raro se obter a solução analítica desse tipo de equacionamento, por ser uma equação integro-diferencial com dependência temporal e espacial, são propostos alguns métodos numéricos para resolvê-la, como por exemplo o método das classes (KOSTOGLU e KARABELAS [23]) e o método DQMOM (MARCHISIO e FOX [24]).

3.3 Interações entre as bolhas

Os termos de transferência interfacial estão diretamente ligados com a área interfacial, ou com o diâmetro de bolha, assim como todos os mecanismos de transferência e suas influências. Desta forma, antes de iniciar a formulação da equação de transporte de área interfacial (ETAI), faz-se necessária uma breve revisão sobre as interações entre as bolhas, como os processos de quebra e coalescência, que serão primordiais para modelar os termos fonte e sumidouro da equação de concentração de área interfacial.

ISHII et al. [25] em 1989 propuseram classificar as bolhas em dois grupos distintos: o

primeiro composto por bolhas esféricas e distorcidas, chamado formação de um grupo, e o segundo grupo formado por bolhas com forma de balas e bolhas grandes do regime de golfadas (*slug*). Este último resulta em duas equações de transporte para a densidade numérica de bolhas, também conhecida como Formulação de dois grupos.

Além disso, ISHII *et al.* [25] listou os possíveis mecanismos de interação em cinco categorias:

- Coalescência promovida por colisões randômicas devido à turbulência do meio;
- Coalescência devido à captura de bolhas em esteiras de outras bolhas;
- Quebra devido ao impacto com vórtices turbulentos;
- Quebra por cisalhamento de pequenas bolhas das extremidades de bolhas do formato de balas;
- Quebra de grandes bolhas com formato de balas devido a instabilidades na superfície das bolhas.

Esses mecanismos estão ilustrados na Figura 3.3. A interação pode ocorrer entre bolhas do mesmo grupo ou entre bolhas de grupos distintos.

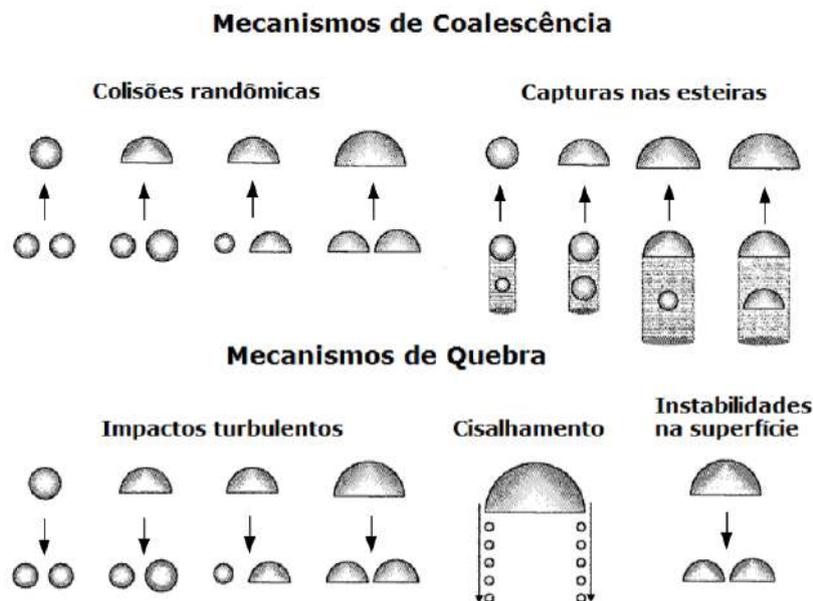


Figura 3.3: Mecanismos de interações entre dois grupos de bolhas. Fonte: ISHII [5]

Quando a fração volumétrica de gás é baixa, não são formadas bolhas com formato de balas ou bolhas do regime de golfadas e a formulação de um grupo pode ser utilizada. Nesta, as bolhas permanecem praticamente do mesmo tamanho após as interações e suas características

de transporte são semelhantes, podendo ser então descritas por apenas uma equação de transporte. Para esse tipo de escoamento, WU et al. [26] consideraram três mecanismos para coalescência e quebra de bolhas:

- Coalescência promovida por colisões aleatórias devido à turbulência do meio
- Coalescência devido à captura de bolhas em esteiras de outras bolhas;
- Quebra devido ao impacto com vórtices turbulentos

Trata-se de uma equação de transporte de área de interfacial obtida através da promediação sobre a área transversal da seção reta do tubo. Como dispunham de dados experimentais da distribuição axial da concentração de área interfacial sob diversos escoamentos, conseguiram ajustar os parâmetros e chegar a resultados para as modelagens de termos fonte e sumidouro propostos com boa concordância com os resultados coletados em laboratório.

Esse estudo conduzido por WU *et al.* [26], apesar de ter proposto uma modelagem apropriada para os termos fonte e sumidouro, assumiu a hipótese da fase gasosa ser incompressível. Entretanto estudos posteriores mostraram que o aumento na concentração de área interfacial devido a redução de pressão ao longo do escoamento não deve ser negligenciado em escoamentos verticais.

HIBIKKI e ISHII [27] publicaram um artigo no qual desenvolveram modelos para os termos fonte e sumidouro da equação de transporte de área interfacial para escoamentos borbulhantes adiabáticos, validando com os dados obtidos pelo mesmo grupo. HIBIKKI e ISHII notaram que a contribuição do mecanismo de coalescência devido à captura das bolhas nas esteiras de outras seria importante para a faixa de transição entre os escoamentos borbulhantes e em golfadas, escoamentos com bolhas em tubulações de pequenos diâmetros e vazões muito baixas. Todavia, para vazões relativamente altas, as bolhas que são capturadas nas esteiras são facilmente removidas destas regiões pela turbulência da fase líquida, tornando a contribuição deste mecanismo mínima. Com isso, os autores consideram que a coalescência ocorre apenas devido às colisões randômicas, tornando-se o único termo sumidouro da equação de transporte de área interfacial. Para o termo fonte, apenas as quebras ocasionadas por impactos de vórtices turbulentos foram considerados.

Os resultados obtidos para a equação em sua forma unidimensional com a modelagem proposta para os termos fonte e sumidouro apresentaram boa concordância com dados experimentais, com desvio relativo médio de 11,6%.

HIBIKKI e ISHII [28] e KIM [29] publicaram ainda estudos em que discutiam sobre quais seriam os mecanismos que de fato prevaleciam para cada condição e tipo de escoamentos. Este último analisou os dados experimentais comparando com o modelo de *drift-flux* acoplado à equação de transporte de área interfacial.

HIBIKKI e ISHII [30] propuseram aprimorar a equação de transporte de área interfacial com um grupo de bolhas com os termos fonte e sumidouro. De acordo com os autores, as variáveis

ajustáveis do termo fonte por quebras de bolhas por colisões randômicas são funções das deformações das bolhas, distribuição da velocidade das bolhas e do volume excluído, e que os erros propagados devido à incerteza destas variáveis são consideráveis. Na tentativa de minimizar esse problema, os autores propuseram correlações para tais variáveis que fossem calculadas a partir da fração de volumétrica e da taxa de dissipação de energia por unidade de massa. Isso é possível devido ao fato de todas as variáveis ajustáveis do termo fonte serem funções de outras variáveis que, por sua vez, dependem da fração volumétrica e da taxa de dissipação. Ou seja, o volume excluído é função da fração de volumétrica, a deformação das bolhas é função do número de Weber (o número de Weber é função da velocidade turbulenta, que por sua vez necessita da taxa de dissipação de energia para ser calculado) e a distribuição de velocidades é função da taxa de dissipação de energia e do diâmetro das bolhas. Os coeficientes dessas correlações são determinados através de dados experimentais.

Os resultados obtidos reproduziram melhor as tendências para a concentração de área interfacial ao longo do escoamento do que considerando essas variáveis constantes.

3.4 Os mecanismos de interações entre bolhas

Como o foco deste trabalho não é avaliar os diferentes mecanismos de quebra e coalescência encontrados na literatura, será feita apenas uma pequena revisão dos modelos existentes, seguido da modelagem dos mecanismos escolhidos.

3.4.1 Modelos de quebra

A quebra ocorre devido a colisões ou a influências no campo de escoamento. O mecanismo de quebra devido à colisão ocorre principalmente em partículas sólidas e tem surgimento no atrito existente na superfície das partículas, que são lascadas. O segundo mecanismo envolve partículas fluidas, como bolhas e gotas e ocorre devido a sua exposição por um campo de escoamento turbulento. Com isso, a quebra por turbulência é induzida pela ação de pequenos vórtices que colidem com a superfície da bolha, provocando deformações. Ou seja, a energia cinética do movimento turbulento da fase contínua promove um aumento da energia superficial da partícula, acarretando na sua deformação. A bolha irá se quebrar se o movimento turbulento promover um aumento de energia superficial suficiente para provocar o rompimento.

Uma revisão completa sobre o assunto pode ser obtida em ARAÚJO [22].

3.4.2 Modelos de coalescência

Em um escoamento turbulento, as bolhas se chocam aleatoriamente umas com as outras, devido ao movimento relativo existente entre a fase contínua e as bolhas. Alguns mecanismos são

discutidos na literatura para explicar esses choques, e ALMEIDA [6] resumiu em seu trabalho, tais mecanismos em cinco categorias:

- Induzido por flutuações turbulentas da fase contínua;
- Induzido por gradientes de velocidade do escoamento;
- Devido ao empuxo ou outras forças de corpo;
- Devido à captura de bolhas em um vórtice;
- Devido à interação nas esteiras;

Ao colidirem, forma-se um filme fluido entre as bolhas, que é drenado até que atinja uma espessura crítica para rompimento, na qual as forças moleculares atrativas passam a dominar e o filme se rompe, ocorrendo a coalescência.

Uma vez formado o filme fluido, não é garantido que o processo de coalescência irá se concluir. Se o tempo de contato não for suficiente para a drenagem completa do filme, a coalescência não ocorre. De maneira análoga, se a flutuação turbulenta for intensa na fase contínua, as bolhas podem se separar por completo. Deste modo, é introduzido o conceito de frequência de agregação.

A frequência de agregação é a probabilidade de duas bolhas no instante t se agregarem em um instante de tempo de $t + dt$. Esta é definida como o produto da frequência de colisão e eficiência de agregação. A frequência de colisão depende principalmente da distribuição do tamanho de partículas e do padrão de escoamento, enquanto a eficiência de agregação afeta o sucesso da agregação (LIU [31]).

O trabalho de ARAÚJO [22] apresenta um estudo completo sobre os modelos de coalescência e é uma rica referência sobre o assunto.

3.4.3 Os modelos utilizados

O critério adotado para a escolha dos modelos desse estudo foi baseado nos trabalhos que serão utilizados para a comparação e validação dos resultados das simulações. Logo, foram adotados os mesmos modelos dos trabalho de ALMEIDA [6] e KIM [1], que são:

- Quebra pelo impacto de vórtice turbulento;
- Coalescência induzida por colisões aleatórias;
- Coalescência induzida pela captura de uma bolha na esteira de outra.

Modelo de quebra induzida pelo impacto de vórtice turbulentos

O modelo de quebra utilizado foi o proposto por COULALOGLOU e TAVLARIDES [32], e trata-se de um modelo fenomenológico baseado na natureza turbulenta, já explicado na Seção 3.4.1. Partindo do princípio que a quebra ocorre devido à colisão entre o turbilhão e bolhas que possuem energia cinética superior à energia da superfície da partícula, a fração de bolhas que quebra é proporcional à fração de vórtices com energia suficiente para a quebra.

Como em todos os modelos, existe uma frequência em que a quebra ocorre. A frequência de quebra de uma bolha de volume V , $b(V)$ é dada pelo produto do inverso do tempo de quebra pela fração de bolhas que quebram:

$$b(V) = \left(\frac{1}{\text{tempo de quebra}} \right) (\text{fração das bolhas que quebram})$$

A modelagem desse fenômeno assume uma quebra binária. Para que duas bolhas filhas sejam separadas por um comprimento característico D , igual ao diâmetro da bolha D_b , em um intervalo de tempo t , é realizado um balanço entre a força inercial dos vórtices turbulentos do meio contínuo sendo contrabalanceada pela força de tensão superficial:

$$F_t - F_\sigma \propto \frac{\rho_l D_b^3 D_b}{t_b^3} \quad (3.2)$$

Sendo força inercial dos vórtices turbulentos e força de tensão superficial, respectivamente:

$$F_t \propto \rho_l D_b^2 u_t^2 \quad (3.3)$$

$$F_\sigma \propto \sigma D_b \quad (3.4)$$

A Eq.3.2 pode ser escrita, substituindo as forças por suas expressões. Além disso é adotado nos cálculos o número adimensional de Weber, que está relacionado a escoamentos que têm interface entre dois fluidos. Este número representa a razão entre a força inercial e a força de tensão superficial definido como $We \equiv \frac{\rho_l u_t^2 D_b}{\sigma}$.

$$t_b \propto \frac{D_b}{u_t} (1 - We^{-1})^{\frac{1}{2}} \quad (3.5)$$

Existe um número crítico para Weber, onde as forças coesivas e de rupturas se igualam. Abaixo desse número, a quebra não ocorre. PRINCE e BLANCH [33] sugerem um $We_{crit} = 2,3$ para sistemas água e ar.

Por fim, ainda é necessário introduzir o conceito de eficiência de quebra, é a fração de bolhas que quebram é proporcional à fração de vórtices com energia suficiente para a quebra.

Dadas todas as informações, a equação para a frequência de quebra pode ser escrita como Eq. 3.6, em que C_B é um parâmetro ajustável obtido experimentalmente. Detalhes sobre a dedução do modelo pode ser encontrados em COULALOGLOU e TAVLARIDES [32].

$$b(V) = C_B \left(\frac{u_t}{D_b} \right) \exp \left(-\frac{We_{crit}}{We} \right) \left[\max \left(1 - \frac{We_{crit}}{We}, 0 \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.6)$$

Modelo de coalescência induzida por colisões aleatórias

Este modelo parte da premissa que as colisões aleatórias são binárias e as bolhas são praticamente do mesmo tamanho (PRINCE e BLANCH [33], COULALOGLOU e TAVLARIDES [32]). Além disso, sabe-se que é necessário um intervalo médio de tempo para que ocorra a colisão, na qual as bolhas têm que percorrer uma distância, L_{CT} , com velocidade u_t . A frequência de colisões aleatórias será proporcional ao inverso do intervalo médio do tempo.

$$t_{CT} \propto \frac{1}{f_{CT}} = \frac{L_{CT}}{u_t} \quad (3.7)$$

A distância percorrida, por sua vez, pode ser descrita em função do diâmetro de bolha e da fração volumétrica do local, sendo necessário acrescentar um fator de forma, que levará em consideração os efeitos combinados dos movimentos das bolhas e as aproximações matemáticas. Quando a fração volumétrica tender ao valor máximo, ou seja, ao limite de empacotamento, α_{max} , a distância a ser percorrida pela bolha também tende a zero, e o fator de forma coletivo assume o valor de $\delta^{**} = \alpha_{max}^{\frac{1}{3}}$.

A direção do movimento das bolhas será também levada em conta nesta equação, através de um termo, o P_C . Uma vez que nem sempre elas se movem uma em direção à outra, faz-se necessário calcular a probabilidade da bolha estar se movendo de fato em direção à bolha vizinha, a fim de promover a coalescência. No entanto, mesmo que ocorra o movimento no sentido correto, não é garantido que o processo irá se concluir após a colisão. Para tal, utiliza-se um fator para considerar essa possibilidade, o C_{ct} .

Por fim, um último efeito é considerado. Quando a distância média entre as bolhas é muito grande, a colisão não ocorre pois o movimento relativo entre elas e suas vizinhas está limitado pelo tamanho dos vórtices de tamanhos equivalente aos da bolhas. Esse efeito é contabilizado pelo parâmetro C .

Desta forma, tem-se a frequência de colisões aleatórias obtidas por KIM [1]:

$$f_{CT} = C_{CT} \frac{u_t}{\frac{D_1 + D_2}{2}} \alpha_g \left[\frac{1}{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} (\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} - \alpha_g^{\frac{1}{3}})} \right] \left[1 - \exp \left(-C \frac{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} \alpha_g^{\frac{1}{3}}}{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} - \alpha_g^{\frac{1}{3}}} \right) \right] \quad (3.8)$$

Modelo de coalescência induzida pela captura de uma bolha na esteira de outra

As bolhas ao se moverem, independente da orientação do escoamento, provocam uma certa turbulência por onde passam, formando o que é conhecido como esteiras turbulentas. Essas situações são semelhantes aos sólidos em meios a fluidos nos escoamentos (CAMPOS [34]).

Quando bolhas entram nas esteiras de outras, elas tendem a se acelerar e podem colidir com a bolha que está à frente. KIM [1] propõe um modelo para esse mecanismo a partir de estudos de diversos cientistas.

A forma final da frequência de coalescência por volume de mistura devido à captura nas esteiras relaciona os seguintes termos: D_1 que se refere ao diâmetro da bolha à frente, D_2 o diâmetro da bolha que entrou na esteira, u_r é a velocidade terminal das bolhas, C_D o coeficiente de arraste, n refere-se do número de bolhas e um fator multiplicativo C_{CW} . Este fator leva em conta a razão do comprimento da esteira e o tamanho da bolha.

$$R_{CW} = C_{CW} D_1^2 u_r(D_1) C_D^{\frac{1}{3}}(D_1) n_1 n_2 \quad (3.9)$$

A velocidade terminal, u_r , da bolha condutora em relação a fase líquida é calculado por um processo iterativo que envolve além da equação da própria velocidade terminal, a definição de coeficiente de arraste e Reynolds. Este procedimento foi proposto por ISHII e CHAWLA [35].

$$u_r(D_1) = \left(\frac{g D_1 \Delta \rho}{3 C_D(D_1) \rho_l} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.10)$$

$$C_D(D_1) = \frac{24}{Re_{D_1}} (1 + Re_{D_1}^{0,75}) \quad (3.11)$$

$$Re_{D_1} = \frac{(1 - \alpha_g) \rho_l u_r D_1}{\mu_l} \quad (3.12)$$

A frequência de coalescência por captura de bolhas D_2 nas esteiras das bolhas D_1 é:

$$a_{CW_{12}} = \frac{R_{CW}}{n_1 n_2} = C_{CW} D_1^2 u_r(D_1) C_D^{\frac{1}{3}}(D_1) \quad (3.13)$$

Como esta expressão não é simétrica, é feita uma média, tendo por fim:

$$a_{CW} = \frac{C_{CW}}{2} \left(D_1^2 u_r(D_1) C_D^{\frac{1}{3}}(D_1) + D_2^2 u_r(D_2) C_D^{\frac{1}{3}}(D_2) \right) \quad (3.14)$$

3.5 Modelo de área interfacial

Basicamente, o transporte de massa, *momentum*, e energia é proporcional à concentração de área interfacial. Portanto, modelá-los de forma correta é essencial.

Na análise de sistemas com dois fluidos, os principais parâmetros geométricos são a fração de retenção gasosa e a concentração de área interfacial. Como o sistema é difícil de quantificar matematicamente em um ponto localizado, devido ao seu dinamismo, foi proposta uma equação do transporte de área interfacial, baseada na equação do balanço populacional, também levando em conta a função de densidade numérica.

Em um sistema com bolhas em um meio contínuo tem-se $f(V, \mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ como a função numérica de densidade por unidade de mistura e volume das bolhas. Assume-se que a densidade de bolhas está se movendo com velocidade \mathbf{v} , num tempo t , num espaço δx , com o centro de volume de controle localizado em \mathbf{x} , volume da partícula entre V e $V + \delta V$. Sabendo que a velocidade se mantém constante em todo o trajeto, a função de densidade numérica pode ser simplificada para $f(V, \mathbf{x}, t)$ (ISHII [5]). Pode-se escrever a equação para dois-fluidos, Eq 3.15.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f\mathbf{v}) + \frac{\partial}{\partial V} \left(f \frac{dV}{dt} \right) = \sum_j S_j + S_{ph} \quad (3.15)$$

Esta equação será análoga a Eq. de Boltzmann depois dos tratamentos dado para o transporte de número de bolhas de fluido (n), fração volumétrica (α_g) e concentração de área interfacial (A_I).

3.5.1 Equação de transporte de número de partícula

A Eq 3.15 apresentada na seção anterior é muito complexa para aplicações práticas, onde o interesse maior é o comportamento médio das bolhas e não sua função de distribuição no espaço físico (ISHII [5]). Dessa forma é mais interessante uma formulação macroscópica, que pode ser obtida a partir da integração da Eq. 3.15 de V_{min} até V_{max} e, em seguida, aplicando a regra de Leibnitz para integração.

$$\begin{aligned} \int_{V_{min}}^{V_{max}} \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{V_{min}}^{V_{max}} \nabla \cdot (f\mathbf{v}) + \int_{V_{min}}^{V_{max}} \frac{\partial}{\partial V} \left(f \frac{dV}{dt} \right) dV \\ = \int_{V_{min}}^{V_{max}} \sum_j S_j dV + \int_{V_{min}}^{V_{max}} S_{ph} dV \end{aligned} \quad (3.16)$$

O resultado é a Eq. 3.17, onde os termos à esquerda representam a taxa temporal da variação de densidade numérica das bolhas e a convecção, respectivamente. Os dois termos à direita representam a taxa líquida da variação de nascimento e morte devido à interações e a taxa líquida da variação de nascimento devido a processos de mudança de fase (nucleação).

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{v}_{pm}) = \sum_j R_j + R_{ph} \quad (3.17)$$

A densidade numérica, $n(\mathbf{x}, t)$, a velocidade média local das bolhas, $\mathbf{v}_{pm}(\mathbf{x}, t)$, e a taxa líquida $R(\mathbf{x}, t)$ são definidos a seguir.

$$n(\mathbf{x}, t) = \int_{V_{min}}^{V_{max}} f(V, \mathbf{x}, t) dV \quad (3.18)$$

$$\mathbf{v}_{pm}(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{\int_{V_{min}}^{V_{max}} f(V, \mathbf{x}, t) \mathbf{v}(V, \mathbf{x}, t) dV}{\int_{V_{min}}^{V_{max}} f(V, \mathbf{x}, t) dV} \quad (3.19)$$

$$R(\mathbf{x}, t) = \int_{V_{min}}^{V_{max}} S(V, \mathbf{x}, t) dV \quad (3.20)$$

3.5.2 Equação de transporte de volume

A equação de transporte de volume pode ser obtida multiplicando a Eq. 3.15 pela partícula de volume V e integrando pelo volume total de todos os tamanhos de bolhas,

$$\begin{aligned} \int_{V_{min}}^{V_{max}} V \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{V_{min}}^{V_{max}} V \nabla \cdot (f\mathbf{v}) + \int_{V_{min}}^{V_{max}} V \frac{\partial}{\partial V} (f\dot{V}) dV \\ = \int_{V_{min}}^{V_{max}} V \left(\sum_j S_j dV + \int_{V_{min}}^{V_{max}} S_{ph} \right) dV \end{aligned} \quad (3.21)$$

resultando na Eq. 3.22. A derivada temporal de V é representada por \dot{V} .

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) + \int_{V_{min}}^{V_{max}} V \frac{\partial(f\dot{V})}{\partial V} dV \\ = \int_{V_{min}}^{V_{max}} \left(\sum_j S_j V + S_{ph} V \right) dV \end{aligned} \quad (3.22)$$

A equação de retenção gasosa, α_g e a velocidade média volumétrica, v_g são definidos pela Eq. 3.23 e Eq. 3.24. Esta definição só é igual à velocidade média mássica da fase se a densidade da fase dispersa ρ_g , for independente da coordenada V ou se a velocidade da partícula não depender de seu volume.

$$\alpha_g(\mathbf{x}, t) = \int_{V_{min}}^{V_{max}} V f(V, \mathbf{x}, t) dV \quad (3.23)$$

$$\mathbf{v}_g(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{\int_{V_{min}}^{V_{max}} f(V, \mathbf{x}, t) V \mathbf{v}(V, \mathbf{x}, t) dV}{\int_{V_{min}}^{V_{max}} V f(V, \mathbf{x}, t) dV} \quad (3.24)$$

O terceiro termo da Eq. 3.22 representa a mudança em relação ao volume da partícula (por contração ou expansão), obtido após tratamentos matemáticos que podem ser encontrados em ALMEIDA [6]. Como o volume é conservado nos processos de quebra e coalescência, pode-se afirmar que:

$$\int_{V_{min}}^{V_{max}} \sum_j S_j V dV = 0 \quad (3.25)$$

O segundo termo do lado direito da Eq. 3.22 calcula o volume gerado por mudança de fase devido à nucleação, n_{ph} .

$$n_{ph} = \int_{V_{min}}^{V_{max}} S_{ph} V dV \quad (3.26)$$

3.5.3 Equação de conservação de massa

A equação de conservação de massa pode ser obtida multiplicando a Eq. 3.15 pela massa das bolhas de volume V , $m(V)$ e integrando pelo volume de todos os tamanhos de bolhas.

$$\begin{aligned} \int_{V_{min}}^{V_{max}} m(V) \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{V_{min}}^{V_{max}} m(V) \nabla \cdot (f \mathbf{v}) + \int_{V_{min}}^{V_{max}} m(V) \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV \\ = \sum_j \int_{V_{min}}^{V_{max}} m(V) S_j dV + \int_{V_{min}}^{V_{max}} m(V) S_{ph} dV \end{aligned} \quad (3.27)$$

O termo fonte de massa devido a nucleação pode ser definido por:

$$\int_{V_{min}}^{V_{max}} m(V) S_{ph} dV \equiv \rho_g n_{ph} \quad (3.28)$$

Sabe-se que $m(V) = \rho_g V$ e ρ_g é independente da coordenada interna V . Desta forma, a Eq. 3.27 pode ser escrita como mostra a Eq.3.29.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{V_{min}}^{V_{max}} m(V) f dV \right] + \nabla \cdot \left[\int_{V_{min}}^{V_{max}} m(V) (f \mathbf{v}) dV \right] + \rho_g \int_{V_{min}}^{V_{max}} V \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV = \\ \rho_g \sum_j \int_{V_{min}}^{V_{max}} V S_j dV + \rho_g n_{ph} \end{aligned} \quad (3.29)$$

O primeiro termo pode ser reescrito como colocado na Eq. 3.30.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{V_{min}}^{V_{max}} m(V) f dV \right] = \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g \alpha_g) \quad (3.30)$$

Definindo a velocidade média das bolhas ponderada pela massa, $\mathbf{v}_{m,g}$ como:

$$v_{m,g} \equiv \frac{\int_{V_{min}}^{V_{max}} m(V) f \mathbf{v} dV}{\int_{V_{min}}^{V_{max}} m(V) f dV} \equiv \frac{\rho_g \int_{V_{min}}^{V_{max}} V f \mathbf{v} dV}{\rho_g \int_{V_{min}}^{V_{max}} V f dV} \equiv v_g \quad (3.31)$$

O segundo termo da Eq. 3.29 reescrito como:

$$\nabla \cdot \left[\int_{V_{min}}^{V_{max}} m(V) (f \mathbf{v}) dV \right] \equiv \nabla \cdot [\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_{m,g}] = \nabla \cdot [\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g] \quad (3.32)$$

Pela conservação de volume, o termo fonte de massa devido a quebra e coalescência é nulo:

$$\rho_g \sum_j \int_{V_{min}}^{V_{max}} V S_j dV = 0 \quad (3.33)$$

Logo,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_g) + \nabla \cdot (\rho_g \alpha_g \mathbf{v}_{m,g}) = \rho_g \left[- \int_{V_{min}}^{V_{max}} V \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV + n_{ph} \right] \quad (3.34)$$

A equação acima está escrita na forma mais usual, onde o lado esquerdo é substituído por Γ_g , que representa o ganho de massa da fase gasosa por unidade de volume de mistura.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_g) + \nabla \cdot (\rho_g \alpha_g \mathbf{v}_{m,g}) = \Gamma_g \quad (3.35)$$

Descontando o ganho por nucleação, tem-se o ganho de massa que inclui a massa transportada pela interface, Eq. 3.36.

$$-\rho_g \int_{V_{min}}^{V_{max}} V \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV = \Gamma_g - \rho_g n_{ph} \quad (3.36)$$

Este ganho de massa por unidade de fase gasosa seria dado por:

$$\frac{-\rho_g}{\alpha_g} \int_{V_{min}}^{V_{max}} V \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV = \frac{1}{\alpha_g} (\Gamma_g - \rho_g n_{ph}) \quad (3.37)$$

E ganho similar para única partícula seria:

$$\frac{1}{V} \frac{d(m(V))}{dt} = \frac{1}{V} \frac{d(\rho_g V)}{dt} \quad (3.38)$$

Assumindo que não ocorre transferência de massa para a bolha e considerando a hipótese que o ganho de massa de uma única partícula não varie com o volume da mesma, os ganhos representados nas Eqs. 3.37e 3.38 podem ser igualadas.

$$\frac{1}{\rho_g V} \frac{d(\rho_g V)}{dt} = \frac{1}{\rho_g} \frac{d\rho_g}{dt} + \frac{1}{V} \frac{dV}{dt} \quad (3.39)$$

A fim de testar se a hipótese está correta, segue a seguinte dedução. Assumindo que o gás é ideal,

$$\rho_g = \frac{p\bar{M}}{RT} \quad (3.40)$$

e,

$$\frac{d\rho_g}{dt} = \frac{\bar{M}}{R} \frac{d(\frac{p}{T})}{dt} \quad (3.41)$$

resulta na Eq. 3.42, que é independente do volume.

$$\frac{1}{\rho_g} \frac{d\rho_g}{dt} = \frac{1}{\frac{p}{T}} \frac{d(\frac{p}{T})}{dt} \quad (3.42)$$

Da mesma forma,

$$V = \frac{nRT}{p} \quad (3.43)$$

$$\frac{dV}{dt} = nR \frac{d(\frac{p}{T})}{dt} \quad (3.44)$$

Logo,

$$\frac{\frac{dV}{dt}}{V} = \frac{1}{\frac{T}{p}} \frac{d(\frac{p}{T})}{dt} \quad (3.45)$$

que também é independente do volume. Assim a hipótese assumida que o ganho de massa de uma única partícula não varie com o volume da mesma, é de fato verdadeira, de forma que:

$$\frac{1}{V} \frac{d\rho_g V}{dt} = \frac{1}{\alpha_g} (\Gamma_g - \rho_g n_{ph}) \quad (3.46)$$

Com isso, tem-se que:

$$\frac{1}{V} \frac{d(\rho_g V)}{dt} = \frac{1}{\alpha_g} \left(\frac{\Gamma_g - \rho_g n_{ph}}{\alpha_g} - \frac{d\rho_g}{dt} \right) \quad (3.47)$$

Retornando à equação de transporte de fração gasosa e integrando por partes o terceiro termo do lado esquerdo, tem-se:

$$\int_{V_{min}}^{V_{max}} V \frac{\partial}{\partial V} (f\dot{V}) dV = \left[V(f\dot{V}) \right]_{V_{min}}^{V_{max}} - \int_{V_{min}}^{V_{max}} f\dot{V} dV \quad (3.48)$$

Como, por hipótese, não existe transferência de massa, o fluxo entre V_{min} e V_{max} também é nulo. Multiplicando e dividindo por V :

$$- \int_{V_{min}}^{V_{max}} f\dot{V} dV = - \int_{V_{min}}^{V_{max}} f \frac{\dot{V}}{V} V dV = - \frac{\dot{V}}{V} \int_{V_{min}}^{V_{max}} fV dV = - \frac{\dot{V}}{V} \alpha_g \quad (3.49)$$

Logo,

$$\int_{V_{min}}^{V_{max}} V \frac{\partial}{\partial V} (f\dot{V}) dV = - \left(\frac{\dot{V}}{V} \right) \alpha_g \quad (3.50)$$

Desta forma, retornando à Eq. 3.22, fica-se então com a forma final da equação de transporte de fração de gás:

$$\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) + \frac{\alpha_g}{\rho_g} \left(\frac{\Gamma_g - \rho_g n_{ph}}{\alpha_g} - \frac{d\rho_g}{dt} \right) = n_{ph} \quad (3.51)$$

Como a derivada de ρ_g é substantiva, a equação anterior pode escrita como:

$$\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) - \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\alpha_g}{\rho_g} \left(\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla \rho_g = 0 \right) \quad (3.52)$$

ou multiplicando por ρ_g :

$$\frac{\partial (\alpha_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) = \Gamma_g \quad (3.53)$$

3.5.4 Formulação em um grupo

A equação de transporte de concentração de área interfacial pode ser deduzida multiplicando a Eq. 3.17 pela área superficial das bolhas de volume V , $A_I(V)$ e integrando pelo volume total de todas as bolhas, sendo t , V , \mathbf{x} variáveis independentes, tem-se:

$$\frac{\partial A_I}{\partial t} + \nabla \cdot (A_I \mathbf{v}_I) - \left(\frac{\dot{V}}{V} \right) \int_{V_{min}}^{V_{max}} (fV) dA_I = \int_{V_{min}}^{V_{max}} \left(\sum_j S_j + S_{ph} \right) A_I dV \quad (3.54)$$

A média de a_I para todos os volumes de bolhas dos fluidos entre V_{min} e V_{max} e a velocidade dada, são, respectivamente:

$$a_I(\mathbf{x}, t) = \int_{V_{min}}^{V_{max}} f(V, \mathbf{x}, t) A_I(V) dV \quad (3.55)$$

$$\mathbf{v}_I(\mathbf{x}, t) = \frac{\int_{V_{min}}^{V_{max}} f(V, \mathbf{x}, t) A_I(V) \mathbf{v}(V, \mathbf{x}, t) dV}{\int_{V_{min}}^{V_{max}} f(V, \mathbf{x}, t) A_I(V) dV} \quad (3.56)$$

Assumindo um volume equivalente, D_e , e um diâmetro de superfície equivalente, D_s , para retirar o termo $\left(\frac{\dot{V}}{V} \right) \int_{V_{min}}^{V_{max}} (fV) dA_I$ da Eq 3.54:

$$V = \frac{\pi}{6} D_e^3 \quad (3.57)$$

$$A_I = \pi D_s^2 \quad (3.58)$$

Assume-se que a razão D_e/D_s é constante. Apesar de não ser uma boa simplificação para bolhas distorcidas ou bolhas do escoamento *slug*, é uma boa aproximação para bolhas esféricas. Essa razão de diâmetro será considerada como um fator de forma.

$$D_s = k D_e \quad (3.59)$$

$$dA_I = 2\pi D_s dD_s \quad (3.60)$$

$$dV = \frac{\pi}{2k^3} D_s^2 dD_s \quad (3.61)$$

Então:

$$\int_{A_1}^{A_2} fV dA_I = \frac{2}{3} a_I \quad (3.62)$$

ou,

$$-\frac{\dot{V}}{V} \int_{A_1}^{A_2} fV dA_I = -\frac{2}{3} a_I \frac{1}{\alpha_g} \left(\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) - \eta_{ph} \right) \quad (3.63)$$

Pode-se rearranjar as Eq. 3.54 e a 3.47, obtendo-se a equação de transporte de área interfacial, Eq. 3.64. O terceiro termo do lado esquerdo representa a variação de concentração de área interfacial a partir da variação de volume.

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_I}{\partial t} + \nabla \cdot (a_I \mathbf{v}_I) - \frac{2}{3} \left(\frac{a_I}{\alpha_g} \right) \left\{ \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) - n_{ph} \right\} \\ = \int_{V_{min}}^{V_{max}} \left(\sum_j S_j + S_{ph} \right) A_I dV \end{aligned} \quad (3.64)$$

Para fechar o equacionamento, o termo do lado direito da Eq. 3.64, que representa o termo da taxa de fonte e sumidouro, são necessárias equações constitutivas. Por definição tem-se:

$$\int_{V_{min}}^{V_{max}} \sum_j S_j dV = \phi_j \quad (3.65)$$

O ϕ_j representa a taxa líquida de variação de densidade de área interfacial e é o produto da taxa líquida de nascimento de bolhas por interação de partículas, R_j e a variação de área superficial, ΔA_I .

$$\phi_j = R_j \Delta A_I \quad (3.66)$$

Para especificar ΔA_I , o processo de quebra e coalescência para bolhas esféricas é considerado como o representado na Fig. 3.4. Nela é assumido que o processo é binário, onde a quebra gera duas bolhas de volumes iguais, assim como a coalescência ocorre a partir de duas bolhas de mesmo tamanho, resultando em uma bolha com um volume total de $2V$. Portanto, o volume total de bolhas é conservado.

A variação de área superficial após cada um processo de interação é representado nas Eqs. 3.67 e 3.68. O sinal negativo e positivo que aparecem respectivamente nas Eqs. 3.67 e 3.68, indicam a perda e o ganho de área superficial.

$$\Delta A_I = A_2 - 2A_1 = \frac{\pi}{4} 4^{\frac{1}{3}} D_2^2 - 2 \frac{\pi}{4} D_1^2 = 1,5874 A_1 - 2A_1 = -0,413 A_I \quad (3.67)$$

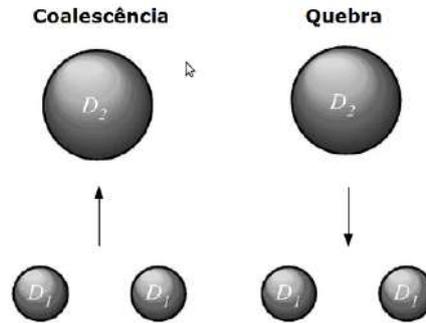


Figura 3.4: Processo binário de quebra e coalescência.

$$\Delta A_I = 2A_1 - A_2 = 2\frac{\pi}{4}d_1^2 - \frac{\pi}{4}D_2^2 = 2\frac{\pi}{4}\frac{D_2^2}{2^{\frac{2}{3}}} - \frac{\pi}{4}D_2^2 = +0,260A_I \quad (3.68)$$

KIM [1] reescreve a densidade numérica de partícula a partir de A_I e α_g :

$$a_I = nA_I \text{ e } \alpha_g = nV \quad (3.69)$$

e,

$$n = \psi \frac{a_I^3}{\alpha_g^2} \quad (3.70)$$

Sendo o fator de forma, ϕ , definido como:

$$\psi = \frac{1}{36\pi} \left(\frac{D_{Sm}}{D_e} \right)^2 \quad (3.71)$$

O diâmetro médio de Sauter, D_{Sm} é dado pela igualdade:

$$D_{Sm} = \frac{6\alpha_g}{a_I} \quad (3.72)$$

Combinando estas equações com a Eq. 3.66, a taxa superficial de fonte e sumidouro pode ser dada por:

$$\phi_j = \frac{1}{3\psi} \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 R_j \quad (3.73)$$

Analogamente, para o processo de nucleação, ϕ_{ph} pode ser dado pela relação 3.74. O termo D_{bc} representa o tamanho de bolha crítico, que é determinado de acordo com o processo de nucleação que está ocorrendo.

$$\phi_{ph} = \pi D_{bc}^2 R_{ph} \quad (3.74)$$

Substituindo todas as relações constitutivas após combinadas na Eq. 3.64, tem-se a equação de transporte de área interfacial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_I}{\partial t} + \nabla \cdot (a_I \mathbf{v}_I) = \frac{2}{3} \left(\frac{a_I}{\alpha_g} \right) \left\{ \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) - n_{ph} \right\} \\ + \frac{1}{3\psi} \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 \sum_j R_j + \pi D_{bc}^2 R_{ph} \end{aligned} \quad (3.75)$$

Pela formulação de um grupo, considera-se o escoamento dois-fluidos como sendo bolhas dispersas em uma fase líquida contínua, também chamado de escoamento de bolhas. Essas bolhas são esféricas e são sujeitas as mesmas características de arraste durante seu transporte. Dessa forma, seu fator de forma é considerado constante, uma vez que todas as bolhas possuem o mesmo diâmetro médio de Sauter.

$$\psi \approx \frac{1}{36\pi} = 8,85 \times 10^{-3} \quad (3.76)$$

Além disso, o diâmetro crítico de bolha devido a nucleação é muito menor comparado ao diâmetro médio de Sauter:

$$\left(\frac{D_{bc}}{D_{Sm}} \right) \approx 0 \quad (3.77)$$

Com isso, pode então dizer que o efeito do termo n_{ph} é desprezível para a equação de transporte de área interfacial. Com isso, a Eq. 3.75 pode ser simplificada, além de poder utilizar o valor da contante de forma.

$$\frac{\partial a_I}{\partial t} + \nabla \cdot (a_I \mathbf{v}_i) \approx \frac{2}{3} \left(\frac{a_I}{\alpha_g} \right) \left\{ \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) \right\} + \sum_j \phi_j \quad (3.78)$$

Os termos da esquerda representam a taxa total de variação da concentração de área interfacial (termo temporal e convectivo, respectivo) enquanto os termos à direita representam a taxa de variação da concentração de área a partir da variação volumétrica, interações entre bolhas e processo de nucleação.

Capítulo 4

Implementação

Apesar de se tratar de um escoamento multifásico, a implementação da equação da concentração de área interfacial pode ser baseada apenas em uma única equação de transporte da variável escalar. Isso só é possível acoplando ao algoritmo da solução o modelo drift-flux, que é uma simplificação na forma unidimensional do modelo multi-fluido. Entretanto, devido às características do OpenFOAM, toda a implementação deve ser feita considerando o espaço tridimensional e apenas nas definições dos casos restringe-se a uma dimensão.

Os valores experimentais obtidos por KIM [1] são valores médios em cada área da seção transversal do duto devido à uniformidade observada em cada seção. Todos os escoamentos são estacionários e isotérmicos, sem nucleação.

Para a obtenção das equações, foram utilizadas as seguintes médias: média na área de seção transversal do duto, $\langle \xi \rangle$, e a média na área ponderada pela fração volumétrica, $\langle \langle \xi \rangle \rangle$, e a média volumétrica, $\bar{\xi}$:

$$\langle \xi \rangle \equiv \frac{1}{A} \int_A \xi dA \quad (4.1)$$

$$\langle \langle \xi \rangle \rangle \equiv \frac{\int_A \alpha \xi dA}{\int_A \alpha dA} = \frac{\langle \alpha \xi \rangle}{\langle \alpha \rangle} \quad (4.2)$$

$$\bar{\xi} \equiv \frac{1}{V} \int_V \xi dV \quad (4.3)$$

4.1 Equações de conservação de massa

A equação da conservação de massa da fase líquida é:

$$\frac{\partial(\langle\alpha_l\rangle\rho_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle\alpha_l\rangle\rho_l\langle\mathbf{v}_l\rangle) = 0 \quad (4.4)$$

E, considerando a densidade do líquido constante:

$$\frac{\partial(\langle\alpha_l\rangle)}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle\alpha_l\rangle\langle\mathbf{v}_l\rangle) = 0 \quad (4.5)$$

A equação de conservação de massa para a fase gasosa é dada de forma análoga a Eq. 4.4. Entretanto, como a densidade da fase gasosa não é constante, não é possível fazer simplificações.

$$\frac{\partial(\langle\alpha_g\rangle\rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle\alpha_g\rangle\rho_g\langle\mathbf{v}_g\rangle) = 0 \quad (4.6)$$

Como $\mathbf{j}_g = \alpha_g\mathbf{v}_g$, para escoamentos estacionários, tem-se:

$$\nabla \cdot [(\rho_g\mathbf{j}_g)] = 0 \quad (4.7)$$

Sabendo que $\langle\rho_g\mathbf{j}_g\rangle = \langle\rho_g\rangle\langle\mathbf{j}_g\rangle + \langle\rho'_g\mathbf{j}'_g\rangle$, e que o ultimo termo é desprezível em relação ao primeiro.

$$\begin{aligned} \nabla \cdot [(\rho_g\mathbf{j}_g)] &= 0 \\ \langle\rho_g\rangle\nabla \cdot \langle\mathbf{j}_g\rangle &= -\langle\mathbf{j}_g\rangle\nabla \cdot \langle\rho_g\rangle \\ \nabla \cdot \ln\langle\mathbf{j}_g\rangle &= -\nabla \cdot \ln\langle\rho_g\rangle \end{aligned} \quad (4.8)$$

A lei dos gases ideais para este caso é valida, e a pressão não varia em cada seção de área transversal de duto:

$$\rho = \frac{pM}{RT} \quad (4.9)$$

onde, M é a massa molar do gás, R é a constante reais dos gases e T a temperatura, pode-se substituir a Eq. 4.9 na Eq. 4.8:

$$\nabla \cdot \ln\langle\mathbf{j}_g\rangle = -\nabla \cdot \ln\langle p\rangle \quad (4.10)$$

4.2 A equação de drift-flux

O modelo de drift-flux foi escolhido por ser uma simplificação do modelo de dois fluidos, além do fato de ter sido o modelo escolhido por KIM [1]. Ele é responsável por ajustar as constantes do modelo de concentração de área interfacial e calcula a fração de vazio.

A equação do drift-flux para um escoamento gás-liquido disperso, foi obtida apenas na sua forma unidimensional por ZUBER e FINDLAY [21]. Como as simulações serão todas unidimensionais, o modelo drift-flux poderá ser implementado desta forma. A partir de agora, a implementação ficará restrita apenas a simulações unidimensionais. A equação presente no modelo de ZUBER e FINDLAY [21] é a Eq. 4.11 e fornecerá a fração volumétrica.

$$\langle \alpha_g \rangle (C_0 \langle j_g \rangle + \langle \langle V_d \rangle \rangle) - \langle j_g \rangle = 0 \quad (4.11)$$

O C_0 é um fator de forma que descreve a distribuição da fase em um escoamento bifásico. Este pode ser obtido através de sua definição, $C_0 \equiv \frac{\langle \alpha_g j_g \rangle}{\langle \alpha_g \rangle \langle j_g \rangle}$. ALMEIDA [6] estudou a influência desse parâmetro, adotando em suas simulações valores calculados através da sua definição para os casos B e um valor médio constante proposto por KIM [1] para os casos A. Neste trabalho, adotou-se o mesmo valor médio, $C_0=1,076$. O j é a velocidade superficial da mistura sendo a soma de j_l e j_g . V_d é a velocidade de deslizamento entre as fases e possui uma equação própria proposta por ISHII [36].

$$\langle \langle V_d \rangle \rangle = \sqrt{2} \left(\frac{\sigma g \Delta \rho}{\rho_l^2} \right)^{0,25} (1 - \langle \alpha_g \rangle)^{1,75} \quad (4.12)$$

4.3 Modelagem da pressão

O gradiente de pressão ao longo do duto é obtido através de um perfil linear de pressão, utilizando valores de perda de carga experimentais medidos valores na posição axial.

$$P_z = p_0 - \left(z - z_0 \left| \frac{dp}{dz} \right| \right) \quad (4.13)$$

4.4 Modelagem da turbulência

A velocidade turbulenta pode ser estimada de acordo com a proposta de BATCHELOR [37]:

$$u_t = 1, 4\epsilon^{\frac{1}{3}} D_b^{\frac{1}{3}} \quad (4.14)$$

A taxa de dissipação turbulenta de energia por unidade de volume de mistura, ϵ , será aproximada pela relação proposta por Wu *et al.* [26]:

$$\epsilon = f_{fric} \frac{1}{2D_h} v_m^3 \quad (4.15)$$

onde D_h é o diâmetro hidráulico da seção, v_m^3 a velocidade de mistura que é dada por:

$$v_m = \frac{\rho_g \alpha_g U_g + \rho_l (1 - \alpha_g) U_l}{\rho_g \alpha_g + (1 - \alpha_g) \rho_l} \quad (4.16)$$

O fator de atrito, f_{fric} , é dado por TODREAS e KAZIMI [38]:

$$f_{fric} = f_f \left(\frac{\mu}{\mu_f} \right)^{0,25} = \frac{0,316}{Re_m^{0,25}} \left(\frac{\mu}{\mu_f} \right)^{0,25} \quad (4.17)$$

onde f_f é o fator do filme, Re_m é o Reynolds de de mistura de e μ_m a viscosidade da mistura, proposta por ISHII e CHAWLA [35]:

$$\mu_m = \frac{\mu_f}{1 - \alpha_g} \quad (4.18)$$

4.5 Equação de transporte de área interfacial

Partindo da premissa do diâmetro uniforme das bolhas nas secções, a velocidade média interfacial ponderada pela concentração de área interfacial pode ser aproximada como a velocidade média do gás ponderada pela fração de vazio,

$$\langle\langle v_I \rangle\rangle \equiv \frac{\langle a_I v_I \rangle}{\langle a_I \rangle} \approx \frac{\langle \alpha_g v_g \rangle}{\langle \alpha_g \rangle} \equiv \langle\langle v_g \rangle\rangle \quad (4.19)$$

A equação de concentração de área interfacial na sua forma tridimensional é colocada a seguir. É levado em conta o termo temporal, pois este trará maior estabilidade as simulações.

$$\frac{\partial \langle a_I \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot [\langle a_I \rangle \langle\langle v_g \rangle\rangle] = \frac{2}{3} \frac{\langle a_I \rangle}{\langle \alpha_g \rangle} \nabla [\langle a_I \rangle \langle\langle v_g \rangle\rangle] + \langle \phi_B \rangle + \langle \phi_{CT} \rangle + \langle \phi_{CW} \rangle \quad (4.20)$$

O terceiro termo pode ser reescrito em função da pressão, utilizando a relação apresentada na Eq. 4.8, assumindo que o gás é ideal e o escoamento é isotérmico. Logo tem-se:

$$\frac{2 \langle a_I \rangle}{3 \langle \alpha_g \rangle} \nabla \cdot [\langle a_I \rangle \langle \langle v_g \rangle \rangle] = \frac{2 \langle a_I \rangle \langle \langle v_g \rangle \rangle}{3 p} (-\nabla p) \quad (4.21)$$

A equação de transporte tridimensional, com valores médios, com os termos fontes e sumidouros, devido a interações entre as bolhas, é dado por:

$$\frac{\partial \langle a_I \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot [\langle a_I \rangle \langle \langle v_g \rangle \rangle] = \frac{2 \langle a_I \rangle \langle \langle v_g \rangle \rangle}{3 p} (-\nabla p) + \langle \phi_B \rangle - \langle \phi_{CT} \rangle - \langle \phi_{CW} \rangle \quad (4.22)$$

Os termos fontes responsáveis pelas interações entre as bolhas foram formulados a partir modelos escolhidos e explicados na Seção 3.4.1. A distribuição do tamanho de bolhas é representado pelo valor médio de Sauter, o D_{SM} , que pode ser calculado pela Eq. 3.72. Ademais, outras relações merecem novamente destaque: as Eqs. 3.70 e 3.71.

O termo fonte de quebra é dado pela taxa de variação de área interfacial devido a quebra, ϕ_B . Primeiramente, calcula-se a taxa de variação do número de partículas devido a quebra, R_B , multiplicando a densidade numérica das bolhas pela frequência de quebra. O ϕ_B , Eq.4.24, é calculado multiplicando R_B por um termo oriundo da própria dedução da equação de transporte de concentração de área interfacial, e estará presente em todos os termos fontes.

$$R_B = nb = C_B \left(\frac{u_t}{D_{SM}} \right) \exp \left(-\frac{We_{crit}}{We} \right) \left(1 - \frac{We_{crit}}{We} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.23)$$

$$\phi_B = \frac{1}{3\bar{\Psi}} \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 R_B = \frac{C_B}{18} \left(\frac{a_I^2 u_t}{\alpha_g} \right) \exp \left(-\frac{We_{crit}}{We} \right) \left(1 - \frac{We_{crit}}{We} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.24)$$

A coalescência está representada em dois termos fontes, onde cada um se refere a um tipo de mecanismo. O primeiro é a taxa de variação de área interfacial devido as colisões aleatórias, ϕ_{CT} . De forma análoga ao termo de quebra, este também é calculado a partir da taxa de variação do número de partículas devido a coalescência provocadas por colisões aleatórias. Como esses termos já foram definidos em outras seções, as variáveis que apresentam notação de médias serão omitidas por comodidade.

$$R_{CT} = na_{CT} = nC_{CT} \frac{u_t}{D_{SM}} \alpha_g \left[\frac{1}{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} \left(\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} - \alpha_g^{\frac{1}{3}} \right)} \right] \left[1 - \exp \left(-C \frac{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} \alpha_g^{\frac{1}{3}}}{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} - \alpha_g^{\frac{1}{3}}} \right) \right] \quad (4.25)$$

$$\begin{aligned}
\phi_{CT} &= \frac{1}{3\Psi} \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 R_{CT} \\
&= \frac{1}{3\Psi} \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 n C_{CT} \frac{u_t}{D_{SM}} \alpha_g \left(\frac{1}{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} (\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} - \alpha_g^{\frac{1}{3}})} \right) \left(1 - \exp \left(-C \frac{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} \alpha_g^{\frac{1}{3}}}{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} - \alpha_g^{\frac{1}{3}}} \right) \right) \\
&= \frac{1}{3\pi} C'_{CT} a_I^I u_t \left(\frac{1}{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} (\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} - \alpha_g^{\frac{1}{3}})} \right) \left(1 - \exp \left(-C \frac{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} \alpha_g^{\frac{1}{3}}}{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} - \alpha_g^{\frac{1}{3}}} \right) \right) \quad (4.26)
\end{aligned}$$

onde $C'_{CT} = \left(\frac{C_{CT}\pi}{6} \right)$.

O segundo termo refere-se a taxa de variação de concentração de área interfacial devido a captura nas esteiras. A taxa de variação do numero de partículas é dado por:

$$R_{CW} = n^2 a_{CW} = n^2 C_{CW} C_D^{\frac{1}{3}} D_{SM}^2 u_r \quad (4.27)$$

A taxa de variação de concentração de área interfacial devido a captura nas esteiras é:

$$\phi_{CW} = \frac{1}{3\Psi} \left(\frac{\alpha_g^3}{a_I^2} \right)^2 \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 n^2 C_{CW} C_D^{\frac{1}{3}} D_{SM}^2 u_r \quad (4.28)$$

Após tratamento matemático, utilizando as Eqs. 3.72 e 3.70, tem-se:

$$\phi_{CW} = \frac{1}{3\Psi} \left(\Psi \frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 C_{CW} C_D^{\frac{1}{3}} \left(\frac{6\alpha_g}{a_I} \right)^2 u_r \quad (4.29)$$

Utilizando a aproximação do fator de forma, o termo é reescrito como:

$$\phi_{CW} = \frac{1}{3\pi} C_{CW} C_D^{\frac{1}{3}} u_r a_I^2 \quad (4.30)$$

Uma vez definidos os termos referentes aos mecanismos de quebra e coalescência, a equação de transporte de área interfacial finalmente é dada por Eq. 4.31. As referências aos valores médios das variáveis foram omitidas por conveniência.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial a_I}{\partial t} + \nabla[a_I v_g] &= \frac{2}{3} \frac{a_I v_g}{p} (-\nabla p) \\
&+ \frac{C_B}{18} \left(\frac{a_I^2}{\alpha_g} u_t \right) \exp\left(-\frac{We_{crit}}{We}\right) \left(1 - \frac{We_{crit}}{We}\right)^{\frac{1}{2}} \\
-\frac{1}{3\pi} C'_{CT} a_I^2 u_t &\left(\frac{1}{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} (\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} - \alpha_g^{\frac{1}{3}})} \right) \left(1 - \exp\left(-C \frac{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} \alpha_g^{\frac{1}{3}}}{\alpha_{max}^{\frac{1}{3}} - \alpha_g^{\frac{1}{3}}}\right)\right) \\
&- \frac{1}{3\pi} C_{CW} C_D^{\frac{1}{3}} u_r a_I^2
\end{aligned} \tag{4.31}$$

4.6 Algoritmo da solução

O *solver* criado no OpenFOAM é baseado no já existente *scalarTransportFoam* e recebeu o nome de *interfacialscalartransportFoam*. Cabe lembrar que o modelo drift-flux por ser unidimensional restringiu o *solver* para casos apenas unidimensionais. Além disso, só pode ser utilizado para escoamentos isotérmicos. A lógica programada para a solução desta equação consiste em alguns passos:

1. Primeiramente são calculados o perfil de pressão, que será o mesmo para toda a simulação, e o perfil de j_g que depende da pressão (Eq.4.10). O perfil de j_g é dado por:

$$j_g = \frac{j_{goP}}{p_0} \tag{4.32}$$

2. É calculado o ρ_g :

$$\rho_g = \frac{\rho_{goP}}{p_0} \tag{4.33}$$

3. É calculado α_g pela equação do *drift-flux*, Eq. 4.11.
4. É calculado a velocidade da fase gasosa e a partir de funções de interpolação do OpenFOAM, esses valores são interpolados para a face, a cada passo de tempo.
5. Já dentro do laço de tempo, antes do cálculo da equação de transporte de área interfacial, é calculado o diâmetro médio de Sauter a partir da Eq. 3.72.
6. São calculados u_t , C_D e Re_D , de acordo com as Eqs. 3.10, 3.11, 3.12.
7. Calcula-se a equação de transporte de área interfacial.

O código contendo toda a implementação se encontra no Apêndice A.

Capítulo 5

Metodologia utilizada

O presente trabalho visa a incorporação do modelo de área interfacial no OpenFOAM. Entretanto, para garantir sua validade, é necessário validar os resultados obtidos via simulação com dados experimentais reportados na literatura. Seguindo essa proposta, foram usados dois estudos como base para a validação da ETAI: KIM [1] e ALMEIDA [6].

KIM [1] elaborou em sua tese de doutorado a formulação da ETAI para escoamentos de bolhas dispersas, avaliou e modelou mecanisticamente os termos de interações interfaciais de quebra e coalescência que teriam efeito no escoamento, definindo assim os termos fonte e sumidouro da equação. A fim de validar o modelo matemático, desenvolveu técnicas de medição do escoamento bifásico, gerando uma base de dados. Os resultados da comparação do modelo de área interfacial com dados experimentais foram publicados em KIM [39].

ALMEIDA [6] em sua dissertação de mestrado utilizou a base de dados fornecida por KIM [39] para avaliar o modelo de transporte de área interfacial frente a equação de balanço populacional, ambas calculadas via rotina de programação em C++ e utilizando quando necessário, o pacote de soluções de equações integro-diferenciais DASSLC. Todas as simplificações e hipóteses adotadas por KIM foram confrontadas.

5.1 Casos testados

Para este trabalho foram simulados cinco casos. Em cada caso, foi avaliado separadamente a influência de cada termo da equação de transporte de área interfacial: expansão (E), quebra (B), coalescência por colisões turbulentas (CT), coalescência por capturas de esteiras (CW) e finalmente, todos os termos reunidos. O escoamento é vertical, bifásico (ar-água) e isotérmico.

5.1.1 Dados experimentais

Os experimentos de KIM [1] foram conduzidos no Laboratório de Termo-Hidráulica e Segurança de Reatores da Universidade de Purdue, onde foi construído um duto vertical retangular, com seção de 200x10mm e diâmetro hidráulico de 19mm. As medições locais foram realizadas em 6 posições através de sensores duplos de condutividade miniaturizados.

Escolheram-se 5 condições experimentais para serem testadas, resumidas na Tabela 5.1. Os dados foram recolhidos na segunda estação de medição, localizada em $z=0,6621\text{m}$, sendo $z=0\text{m}$ a posição de entrada de gás. A preferência da segunda estação de medição foi uma tentativa de minimizar os efeitos causados pelo desenvolvimento do escoamento na entrada do duto. As variáveis medidas foram, respectivamente: velocidade superficial de gás, velocidade superficial de líquido, fração de gás, concentração de área interfacial, pressão e perda de carga.

Tabela 5.1: Condições experimentais. Fonte: ALMEIDA [6]

Casos	$j_l(\text{m/s})$	$j_g(\text{m/s})$	α_g	$a_I (1/\text{m})$	$p (\text{Pa})$	$\frac{dp}{dz} (\text{Pa/m})$
A1	0,32	0,04	0,084	186,89	30603,60	9250,38
A2	0,95	0,05	0,038	87,72	35073,47	11636,70
A3	1,89	0,14	0,059	125,06	38464,37	11521,98
A4	2,84	0,21	0,050	151,23	36275,59	13219,94
A5	4,40	0,62	0,078	188,53	52254,53	20676,09

5.1.2 Geometria e malha

Apesar de todos os casos serem unidimensionais, preferiu-se reproduzir o formato do duto construído por KIM em seu laboratório. Foi criada uma geometria retangular discretizada apenas na direção x e com a entrada de gás localizada em $x=0,6621\text{m}$. Como será feito um caso unidimensional, as outras direções foram colapsadas utilizando a condição de contorno *empty* do OpenFOAM. Assim, a solução numérica ocorre apenas na direção discretizada. O comprimento final do duto é de $x=3\text{m}$. A geometria foi feita no eixo x mas foi levada em conta a gravidade na mesma direção. Gerou-se uma malha hexaédrica com 40 elementos a partir dessa geometria. Ambas estão representadas na Figura 5.1, onde também estão definidas a entrada (*inlet*), saída (*outlet*) e a condição imposta nas quatro laterais para torná-la uma malha unidimensional.

5.1.3 Condições iniciais, de contorno e parâmetros da simulação

Os conjuntos de dados mostrados na Tabela 5.1 foram utilizados como condição inicial para cada caso correspondente, com exceção da fração de gás α_g . As primeiras simulações mostraram uma descontinuidade no início do escoamento oriundas da influência do parâmetro C_0 . Como ALMEIDA [6] percebeu em seu trabalho, existe uma discordância entre o coeficiente de ajuste C_0 e valores experimentais, que são responsáveis por essa descontinuidade. Foi neces-

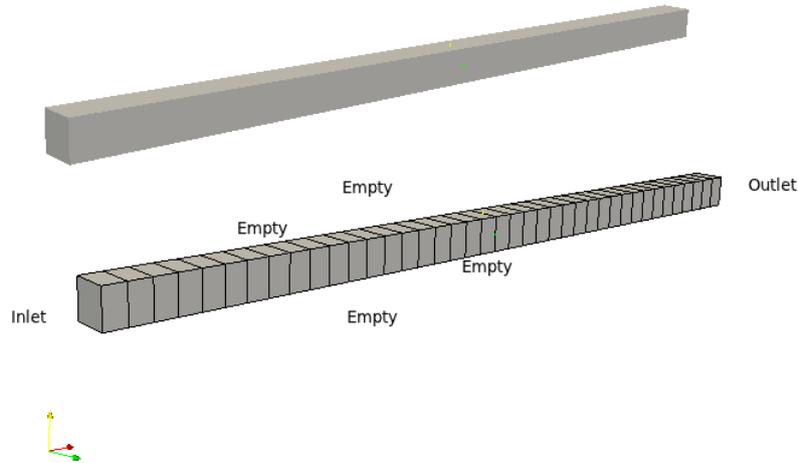


Figura 5.1: Geometria (acima) e malha hexaédrica(abaixo)

sário portanto ajustar a fração volumétrica, obtendo os valores logo após o ponto de descontinuidade e interpolando para a entrada. Desta forma, a Tabela 5.2 mostra o conjunto de dados utilizados com o valor de α_g corrigido.

Tabela 5.2: Condições experimentais com α_g ajustado

Casos	j_l (m/s)	j_g (m/s)	α_g	a_I (1/m)	p (Pa)	$\frac{dp}{dz}$ (Pa/m)
A1	0,32	0,04	0,068	186,89	30603,60	9250,38
A2	0,95	0,05	0,0385	87,72	35073,47	11636,70
A3	1,89	0,14	0,0582	125,06	38464,37	11521,98
A4	2,84	0,21	0,0598	151,23	36275,59	13219,94
A5	4,40	0,62	0,111	188,53	52254,53	20676,09

As condições de contorno na entrada (*inlet*) foram as seguintes:

- *Valor Fixo*: Usados para os campos $a_I, \alpha_g, j_l, j_g, p$
- *Calculado*: Usados para os campos U_I, U_g

As condições de contorno na saída(*outlet*) foram as seguintes:

- *Gradiente nulo*: Usados para os campos a_I, α_g, j_l, j_g
- *Calculado*: Usados para os campos U_I, U_g
- *Valor Fixo*: Usado para o campo de pressão que é calculado através da Eq. 4.13.

Os coeficientes dos modelos de quebra e coalescência e os demais parâmetros das simulações são listados na Tabela 5.3. O tempo total de cada simulação é de 25 segundos, passo

de tempo utilizado foi 0,001s e o método número de resolução utilizado no *solver* é o SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations). O resíduo máximo adotado foi de 10^{-10} .

Tabela 5.3: Coeficientes e parâmetros. Fonte: ALMEIDA [6]

Coeficientes	Parâmetros
$C_{CT}=0,0057325$	$D_h = 0,019\text{mm}$
$C=3$	$\rho_l = 997,0479 \text{ kg/m}^3$
$\alpha_{max}=0,75$	$M = 0,028 \text{ kg/mol}$
$C_{CW}=0,042$	$\sigma = 0,072 \text{ kg/s}^2$
$C_{Cb}=0,0026$	$T = 298 \text{ K}$
$We_{crit}=8,0$	$R = 8,314472 \text{ kgm}^3/\text{s}^2\text{molK}$
$C_0=1,076$	$u_l = 0.8795372 \text{ kgm}^3/\text{s}^2\text{molK}$

Em todas as simulações os resíduos foram menores que 10^{-10} e as variáveis não variáveis mais entre os passos de tempo, garantindo que a solução chegou no estado estacionário.

Capítulo 6

Resultados

O modelo de área interfacial será analisado a partir dos resultados das simulações dos casos citados em 5.1. Para tal, primeiramente será avaliado o efeito de cada mecanismo de interação interfacial para a variação de a_i , individualmente. Em seguida, todos os efeitos serão avaliados em conjunto a fim de determinar qual é o dominante para aquelas condições. Por fim, o resultado do modelo de área interfacial implementado no OpenFOAM será confrontado com os resultados obtidos pelo modelo matemático de KIM [1] e dados experimentais.

6.1 Análise dos mecanismos de interação

A fim de analisar cada termo separadamente foram feitas 5 simulações para cada caso, sendo que em quatro delas apenas um mecanismo era considerado: expansão (E), quebra (B), coalescência por colisões turbulentas (CT), coalescência por capturas nas esteiras (CW). Os gráficos apresentam ainda a variação da pressão e da fração de gás, já que o cálculo de a_i depende de ambas as variáveis.

Em todos gráficos, os valores das linhas são no tempo final de simulação, 25s, enquanto os valores dos pontos são em um tempo anterior, 24s. Em todos os casos, as simulações atingiram o estado estacionário, pois a variação dos valores das variáveis investigadas ficaram abaixo da precisão dada na resposta. O resíduo final de todas as simulações foi na ordem de grandeza de 10^{-11} . Logo, todas as simulações chegaram no estado estacionário.

6.1.1 Mecanismo de expansão

O termo fonte de expansão é responsável pelo aumento do tamanho das bolhas sem promover o acréscimo no número das mesmas no domínio. Desta forma o esperado é ocorrer um aumento da concentração de área interfacial a medida que haja expansão das bolhas, juntamente com

o aumento da fração de gás no duto. De fato, esse comportamento foi percebido em todos os casos testados, mostrados nas Figs. 6.1, 6.2, 6.3, 6.4, 6.5.

A variação de concentração de área interfacial devido somente à expansão entretanto, não foi a mesma para todos os casos. As diferentes condições iniciais de área interfacial e velocidades superficiais afetaram a variação final de concentração de área interfacial. O Caso A5, Fig 6.5 apresentou maior variação de área interfacial, $\Delta a_i = 28,5(1/m)$ ou 15,47%. Este caso possui os maiores valores de condições de entrada tanto para concentração de área interfacial quanto para velocidade superficial de gás. Já o Caso A2, Fig 6.2 apresentou menor variação de área interfacial, $\Delta a_i = 13,84(1/m)$ ou $\Delta a_i = 10,44\%$. Por sua vez, este caso possui os menores valores de concentração de área interfacial e velocidade superficial de gás no conjunto de dados disponíveis. Isso mostra que para maiores valores de a_i e j_g , o efeito da expansão se acentua.

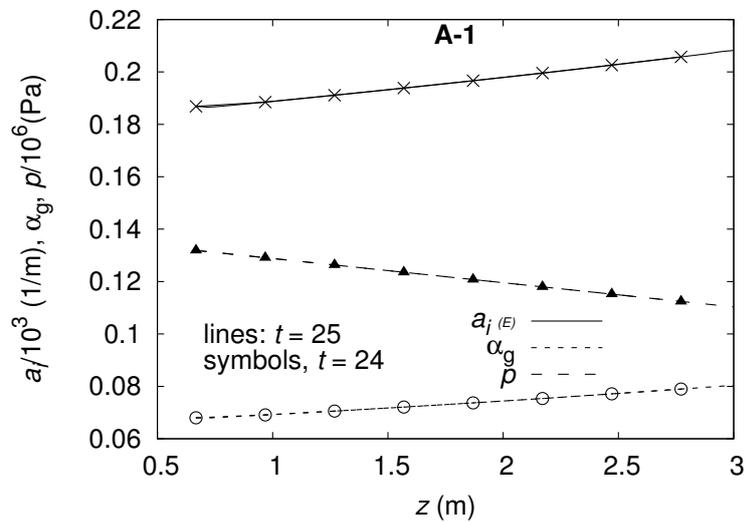


Figura 6.1: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A1 apenas com expansão.

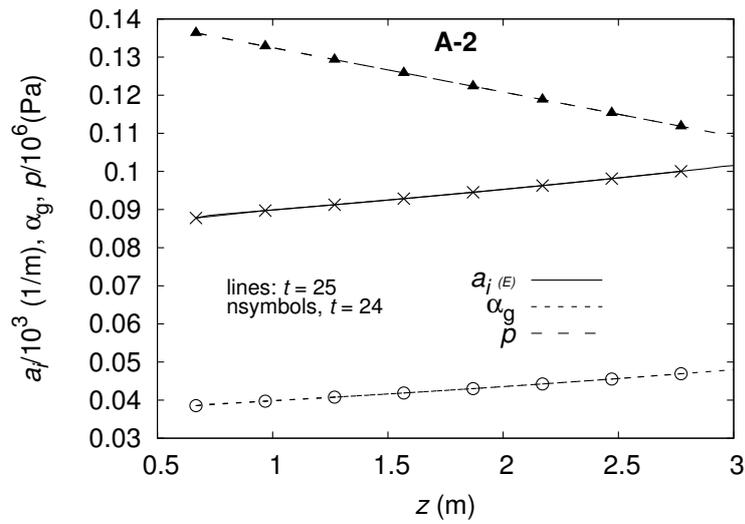


Figura 6.2: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A2 apenas com expansão.

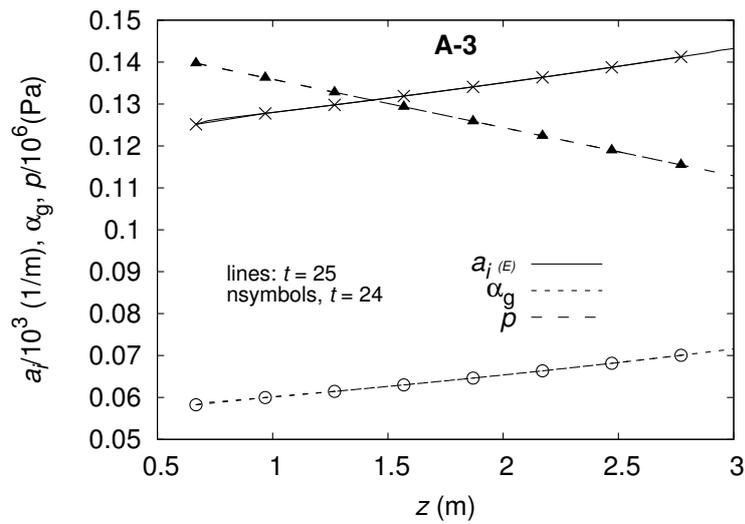


Figura 6.3: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A3 apenas com expansão.

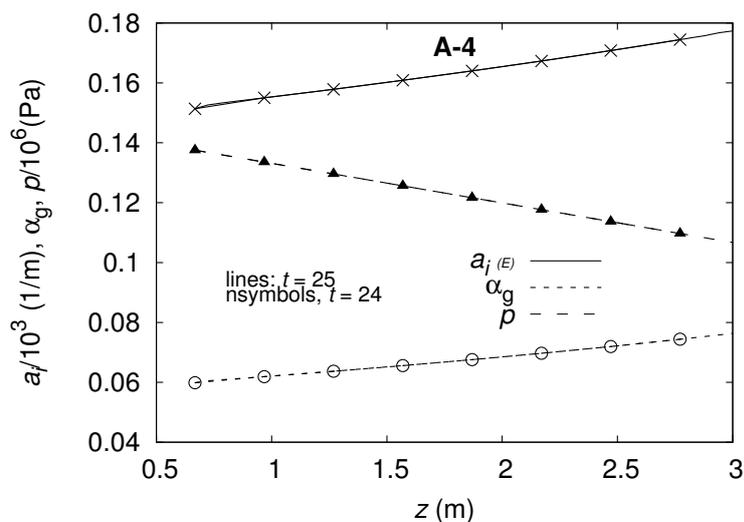


Figura 6.4: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A4 apenas com expansão.

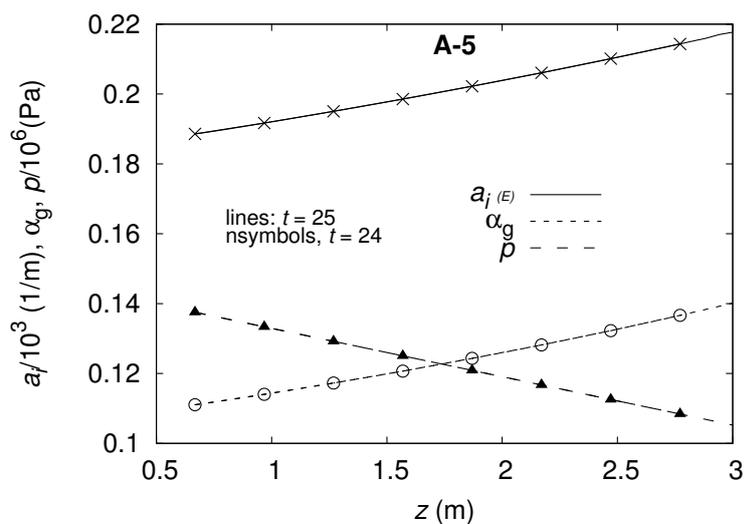


Figura 6.5: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A5 apenas com expansão.

6.1.2 Mecanismo de quebra

Estas simulações utilizaram o termo forte de quebra como sendo o único termo fonte da equação fonte da equação de transporte de área interfacial. Os resultados mostraram que para os Caso A1 (Fig. 6.6), Caso A2 (Fig. 6.7), Caso A3 (Fig. 6.8) e Caso A4 (Fig. 6.9) esse termo não influenciou em nada a concentração de área interfacial. A explicação está nos velocidades superficiais, que não foram altas o suficientes para promoverem a quebra. Tais velocidades impedem que o We ultrapasse o valor de We_{crt} e fazem com que esse efeito não seja contabilizado.

Apenas para o Caso A5, Fig. 6.10, a velocidade já é suficiente para que o número de We seja maior que o We_{crit} e o mecanismo comece a ter algum efeito, porém ainda pequeno. A variação da concentração de área interfacial, $\Delta a_i = -6,45(1/m)$ ou $\Delta a_i = -3,42\%$. Ocorre pequena perda de concentração de área interfacial que ainda precisa ser explicada.

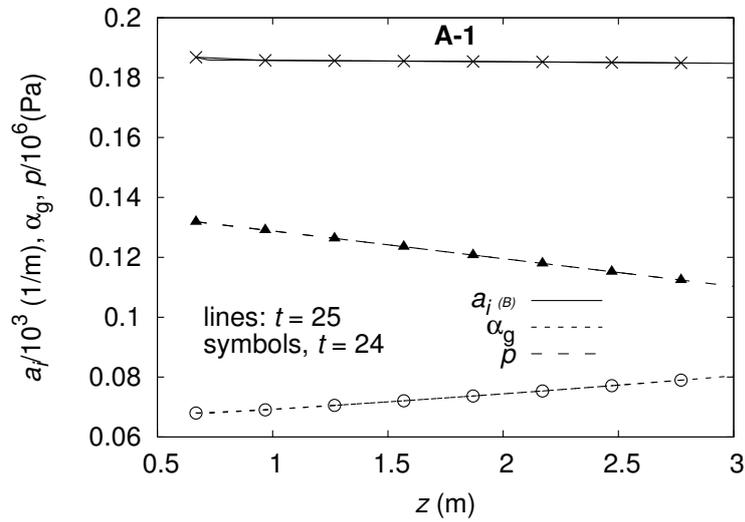


Figura 6.6: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A1 apenas com quebra.

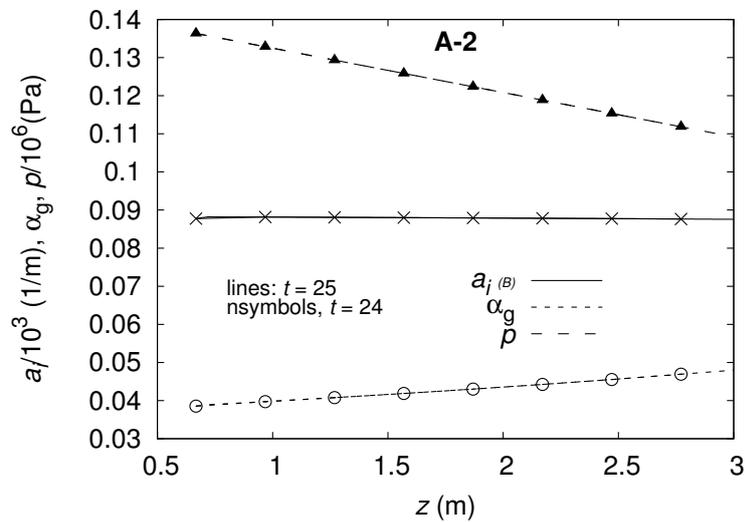


Figura 6.7: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A2 apenas com quebra.

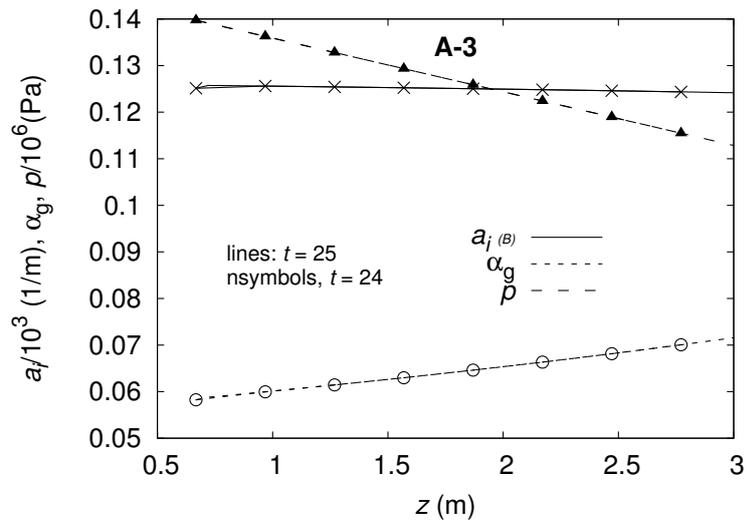


Figura 6.8: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A3 apenas com quebra.

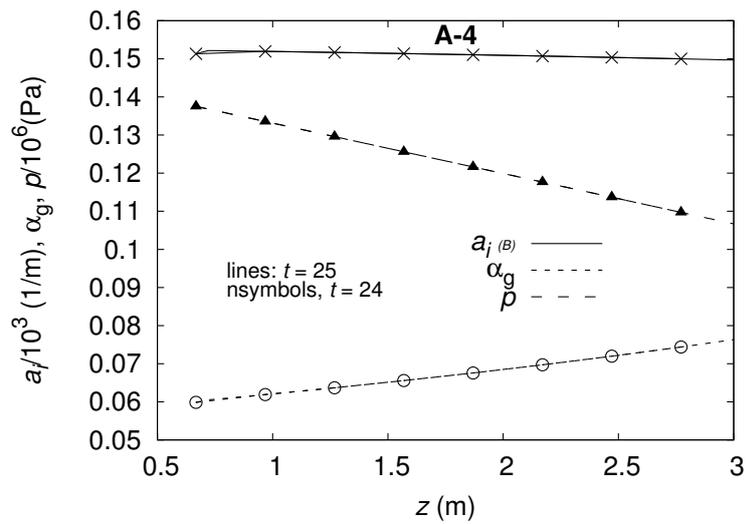


Figura 6.9: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A4 apenas com quebra.

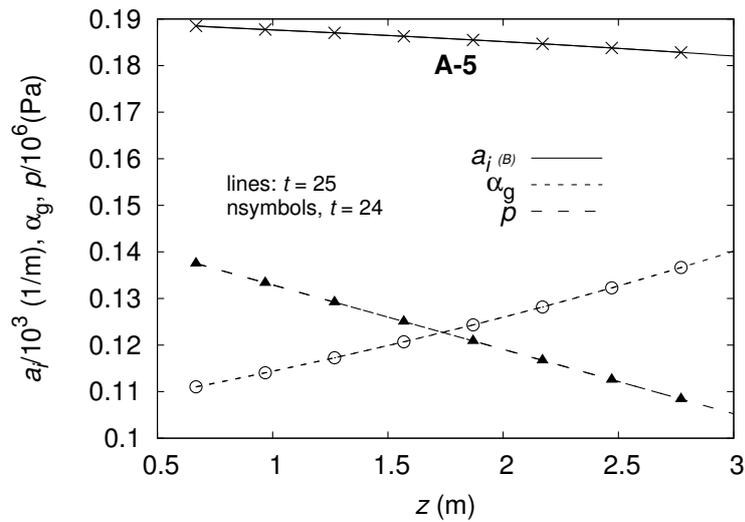


Figura 6.10: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A5 apenas com quebra.

6.1.3 Mecanismo de coalescência por colisões turbulentas

É esperado que a coalescência promova uma diminuição na concentração da área interfacial. As Figs. 6.11, 6.12, 6.13, 6.14, 6.15 que o mecanismo de coalescência devido à colisão turbulenta não tem efeito significativo em velocidades baixas, correspondentes aos Caso A1 (Fig. 6.11), Caso A2 (Fig. 6.12) e Caso A3 (Fig. 6.14) já que não há flutuações turbulentas suficiente para promoverem as colisões aleatórias entre as bolhas. A medida que as velocidades aumentam, o que ocorrem para o Caso A4 (Fig. 6.14) e A5 (Fig. 6.15), esse efeito é sentido, porém ainda não é dominante. A variação $\Delta a_i = -29,34(1/m)$ ou $\Delta a_i = -15,56\%$ mostrando que, a partir do momento que as flutuações turbulentas conseguem provocar as colisões, este termo influencia diminuindo a concentração de área interfacial.

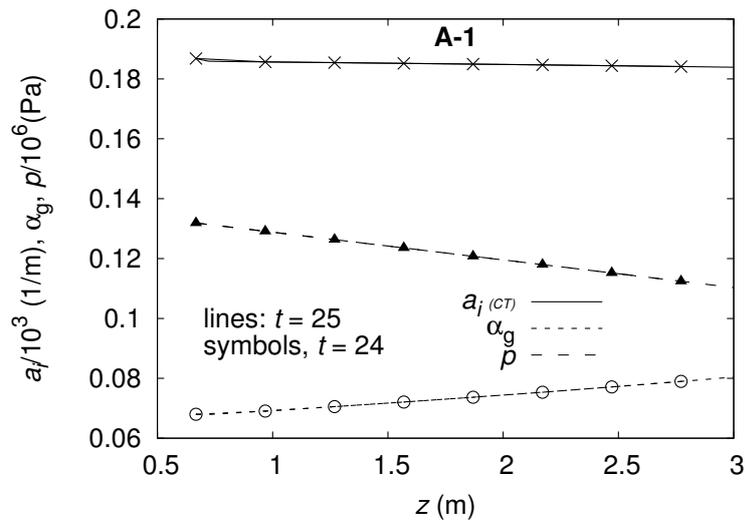


Figura 6.11: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A1 apenas com colisão turbulenta.

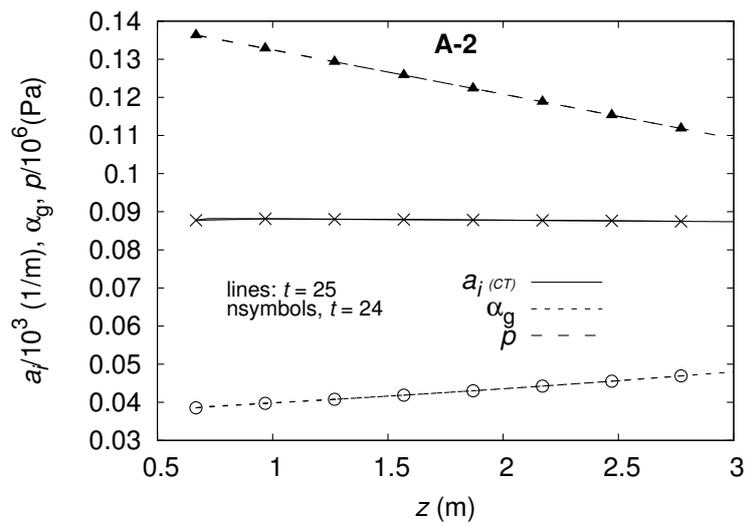


Figura 6.12: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A2 apenas com colisão turbulenta.

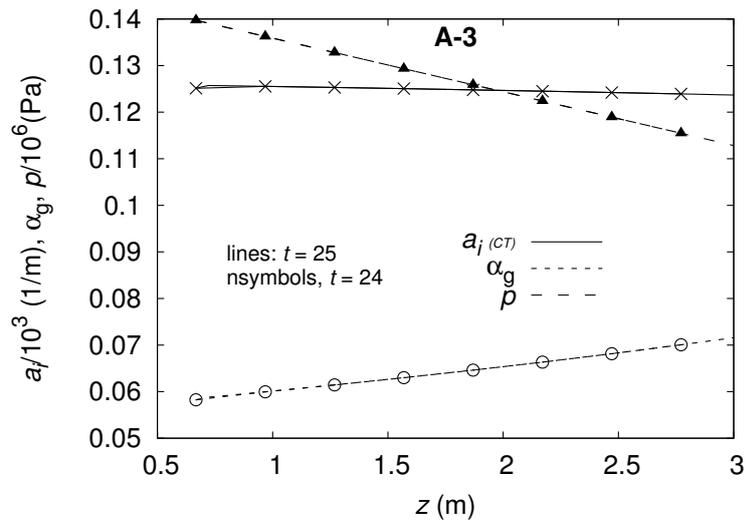


Figura 6.13: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A3 apenas com colisão turbulenta.

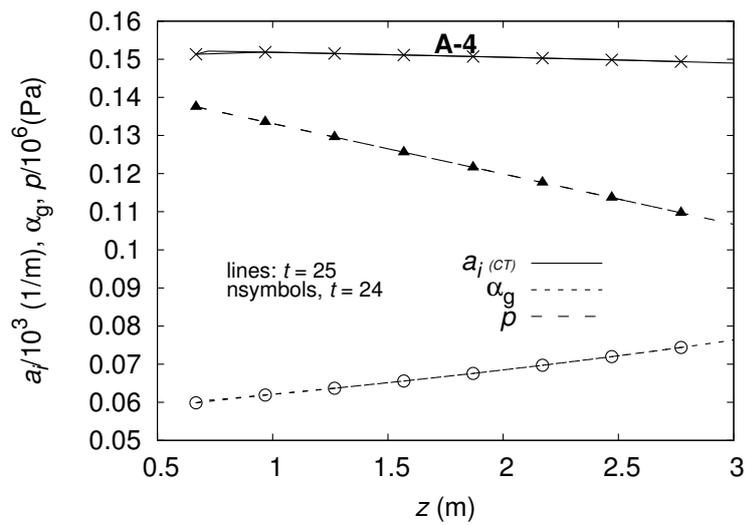


Figura 6.14: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A4 apenas com colisão turbulenta.

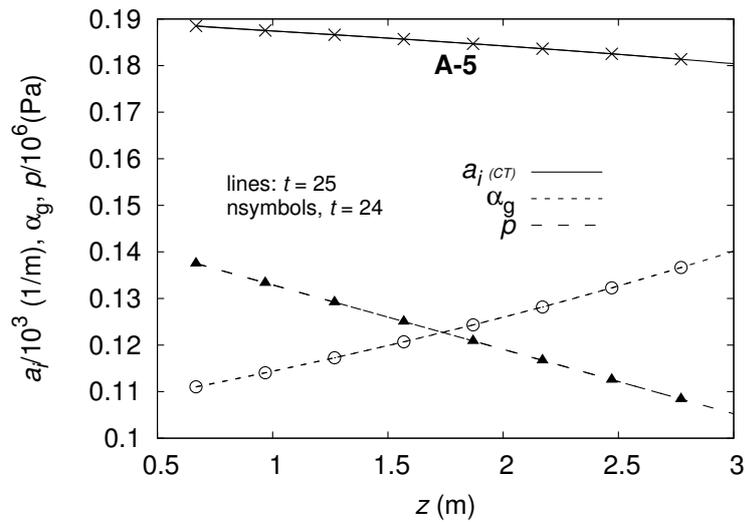


Figura 6.15: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A5 apenas com colisão turbulenta.

6.1.4 Mecanismo de coalescência por captura de esteira

Conforme o esperado, as Figs. 6.16, 6.17, 6.18, 6.19, 6.20 apresentaram queda na concentração de área interfacial. O efeito de coalescência por captura na esteira de outra bolha é predominante em relação ao mecanismo de coalescência visto na Subseção 6.1.3 e pode ser notado para todos os casos. O efeito é mais acentuado entretanto para velocidades mais baixas, condição do Caso A1 (Fig. 6.16). Este apresenta $\Delta a_i = -48,42(1/m)$ ou $\Delta a_i = -25,60\%$.

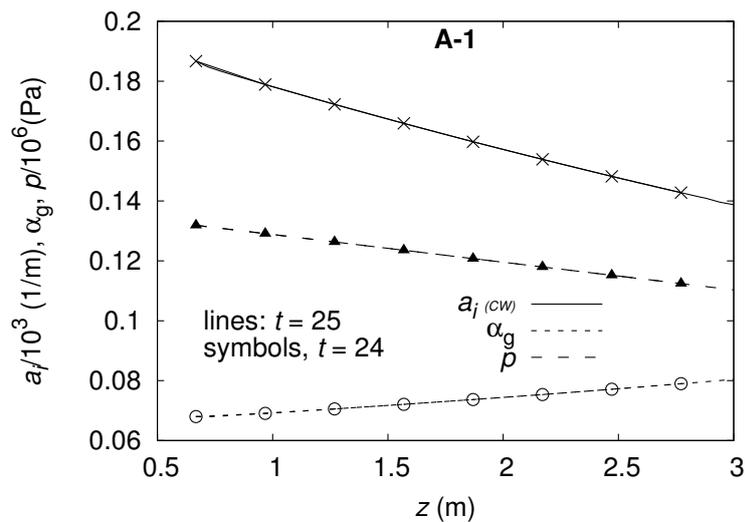


Figura 6.16: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A1 apenas com colisão por captura na esteira de outra bolha.

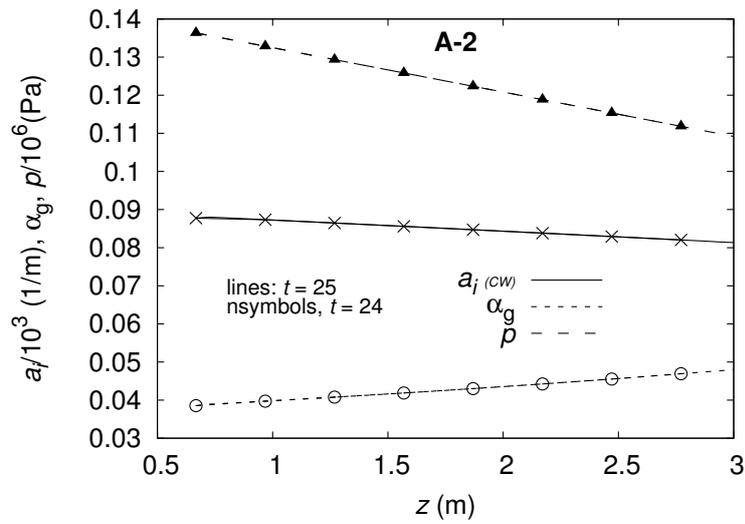


Figura 6.17: Gráfico de concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o caso A2 apenas com colisão captura na esteira de outra bolha.

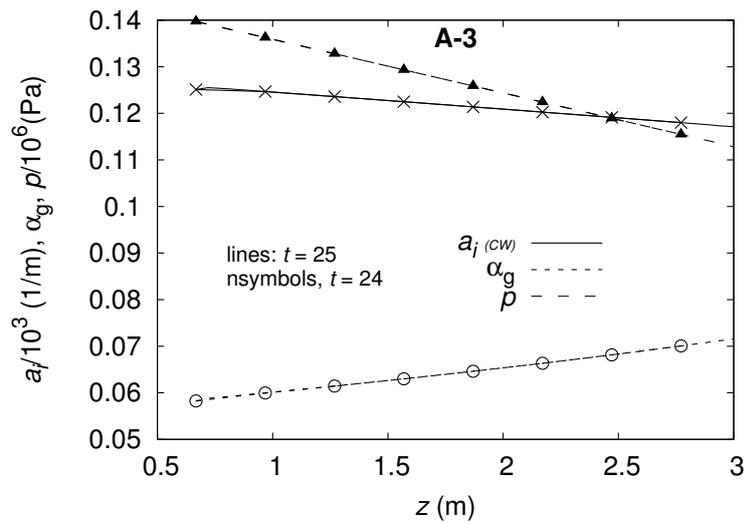


Figura 6.18: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A3 apenas com colisão captura na esteira de outra bolha.

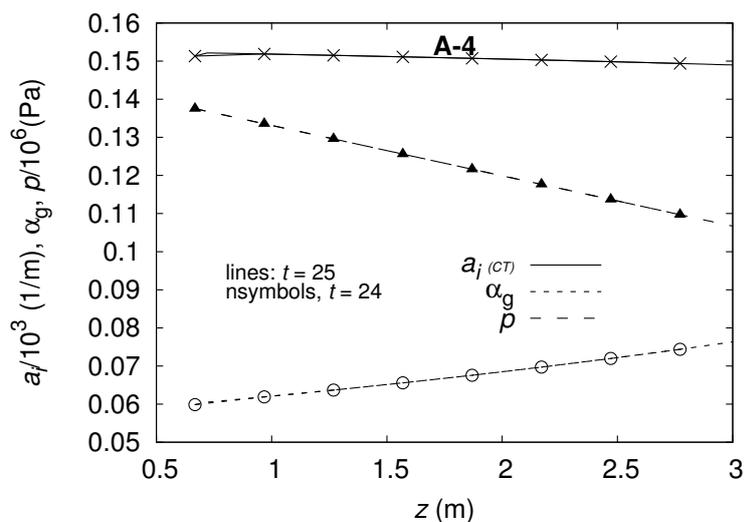


Figura 6.19: Gráfico de concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o caso A4 apenas com colisão captura na esteira de outra bolha.

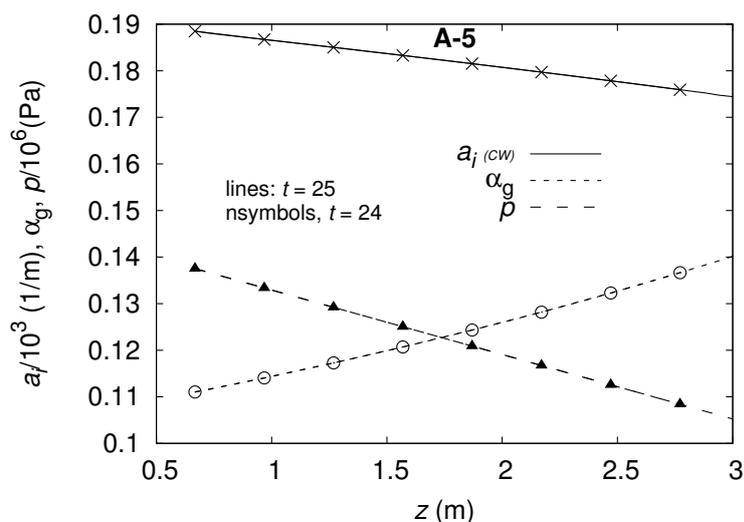


Figura 6.20: Concentração de área interfacial, fração de gás e pressão para o Caso A5 apenas com colisão captura na esteira de outra bolha.

6.2 Comparação entre os termos

Os termos que mais impactam para a variação de concentração de área interfacial foram a expansão e a coalescência por captura nas esteiras. A expansão predominou nos Casos A2 (Fig. 6.22), A3 (Fig. 6.23), A4 (Fig. 6.24) e A5 (Fig. 6.25), enquanto a coalescência por captura nas esteiras só foi notório no Caso A1 (Fig. 6.21). Este último, portanto, é sensível ao aumento de velocidade, enquanto o efeito da expansão parece ocorrer em todas as faixas de velocidade. É

esperado também que para velocidades acima das testadas, o efeito de quebra, que começa a ser notado no Caso A5 (Fig. 6.25), seja um dos principais termos a promoverem a variação da concentração de área interfacial.

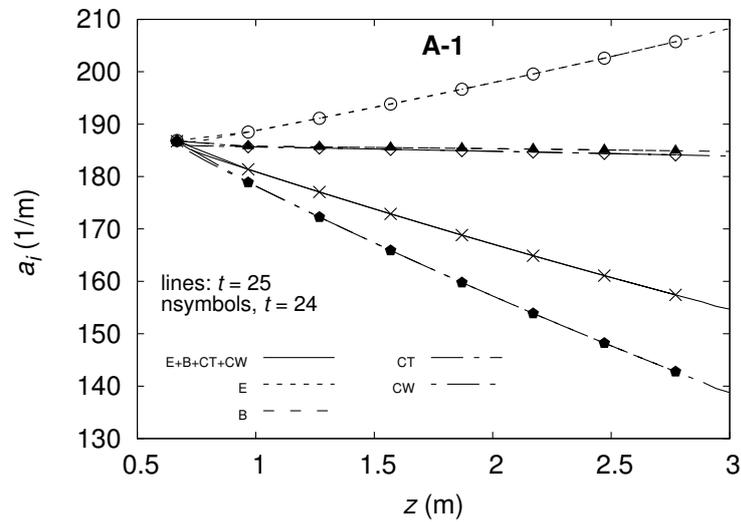


Figura 6.21: Concentração de área interfacial para o Caso A1.

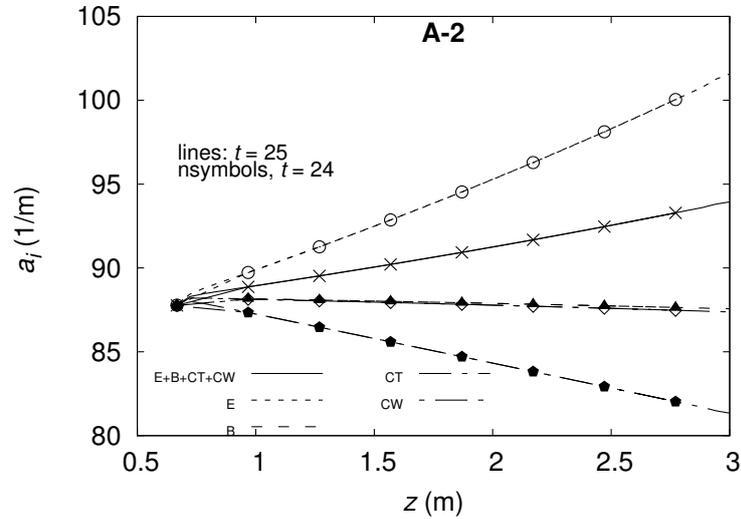


Figura 6.22: Concentração de área interfacial para o Caso A2.

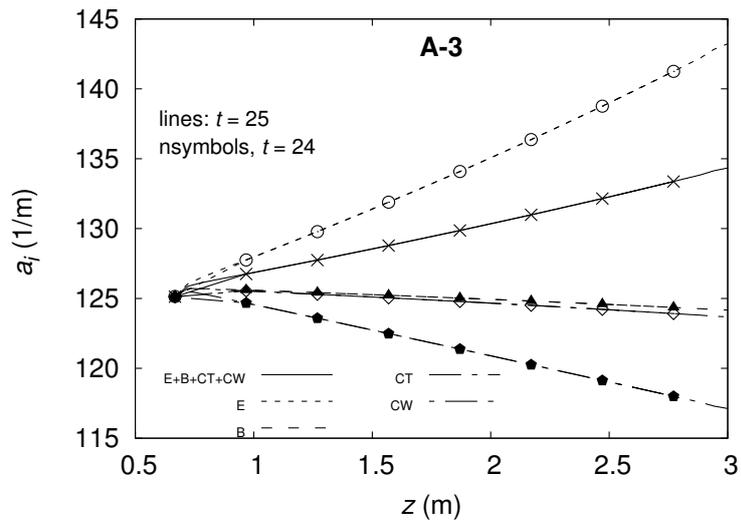


Figura 6.23: Concentração de área interfacial para o Caso A3.

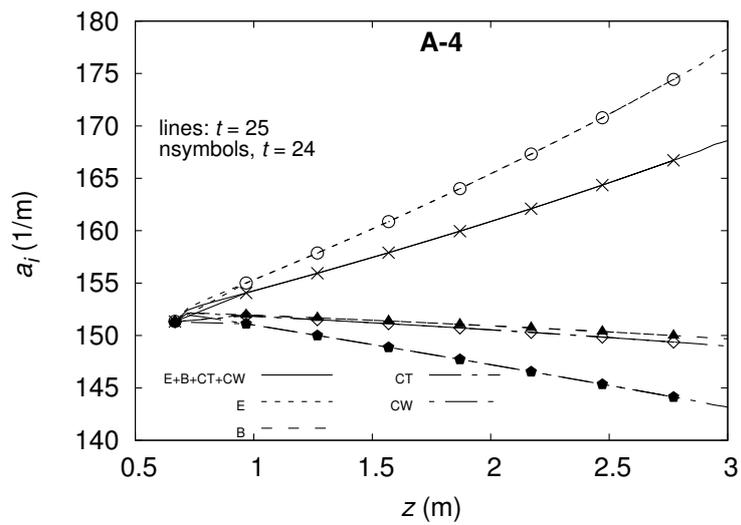


Figura 6.24: Concentração de área interfacial para o Caso A4.

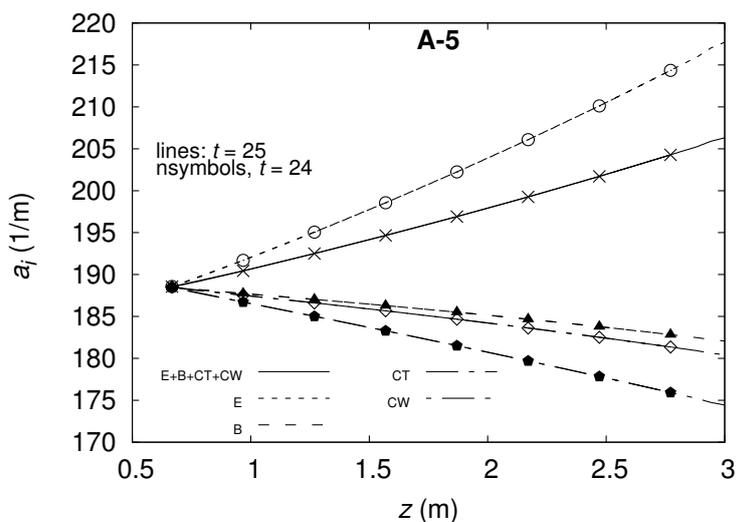


Figura 6.25: Concentração de área interfacial para o Caso A5.

6.3 Validação com dados experimentais

Os gráficos nesta seção confrontam os resultados do modelo de área interfacial (IAM - Pereira) obtidos no presente trabalho com os produzidos por KIM [1] (IAM - Kim) através do mesmo modelo, e os dados experimentais. Nota-se que para os Caso A1 (Fig. 6.26) e Caso A4 (Fig. 6.29), conseguiu-se um resultado próximo aos valores experimentais. Para o Caso A5 (Fig. 6.30), o resultado obtido por IAM - Pereira está muito abaixo do esperado. Já para os Caso A2 (Fig. 6.27) e A3 (Fig. 6.28) nenhum dos autores conseguiu se aproximar dos valores experimentais. Essa divergência tem que ser explicada uma vez que KIM [1] ajustou essa equação de acordo com esse experimento. Como já citado anteriormente, as escolhas adotadas por KIM [1], principalmente no que tange a solução numérica, pode ter influenciado bastante a discordância de resultados.

A explicação para a discrepância do Caso A5 (Fig. 6.30) provavelmente é devido ao termo de quebra. Os resultados dos termos fontes de quebra apresentaram bastante divergência em relação aos obtidos por KIM [1] e ALMEIDA [6] em seus trabalhos. A metodologia utilizada por cada autor apresenta detalhes próprios que podem ter acarretado para a discrepância dos valores finais. A discordância reside principalmente no cálculo da velocidade turbulenta no trabalho de ALMEIDA [6], que impactará sensivelmente no termo de quebra e nas escolhas assumidas por KIM [1]. Este não levou em conta a variação de ρ devido à mudança de pressão ao longo do duto e resolveu as equações por meio de Euler explícito. Por se tratar de uma equação com muitos termos fontes, esse método embute erros numéricos em sua solução. Desta forma, os resultados obtidos pelo OpenFOAM no presente trabalho não refletiram a tendência de ocorrer a quebra a partir do Caso A3 (Fig. 6.8), como observado por KIM [1] e ALMEIDA [6], mas apenas no Caso A5 (Fig. 6.10).

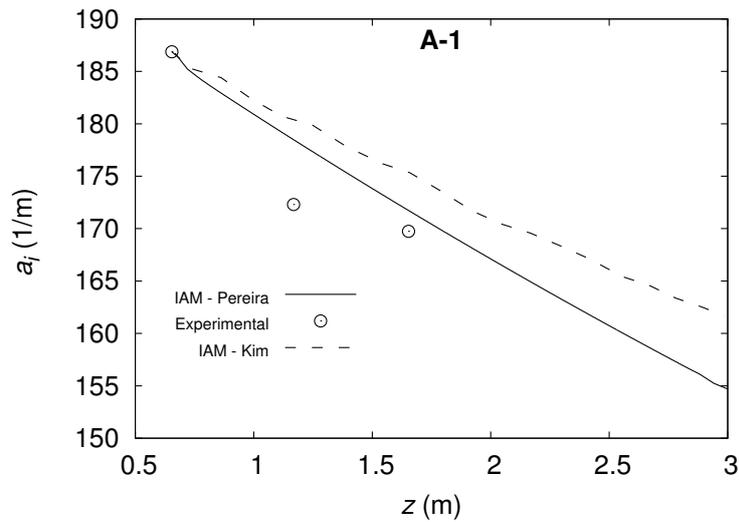


Figura 6.26: Gráfico comparativo entre valores de a_i obtido no presente trabalho (IAM - Pereira), por Kim (IAM - KIM) e dados experimentais para o caso A1.

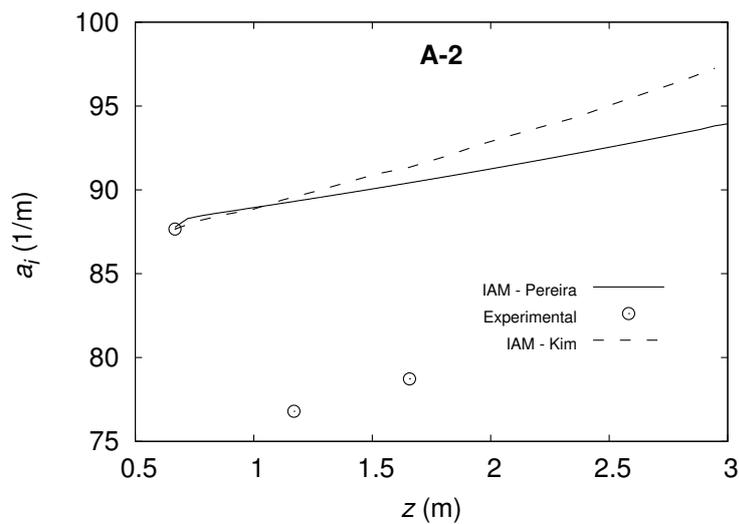


Figura 6.27: Gráfico comparativo entre valores de a_i obtido no presente trabalho (IAM - Pereira), por Kim (IAM - KIM) e dados experimentais para o caso A2.

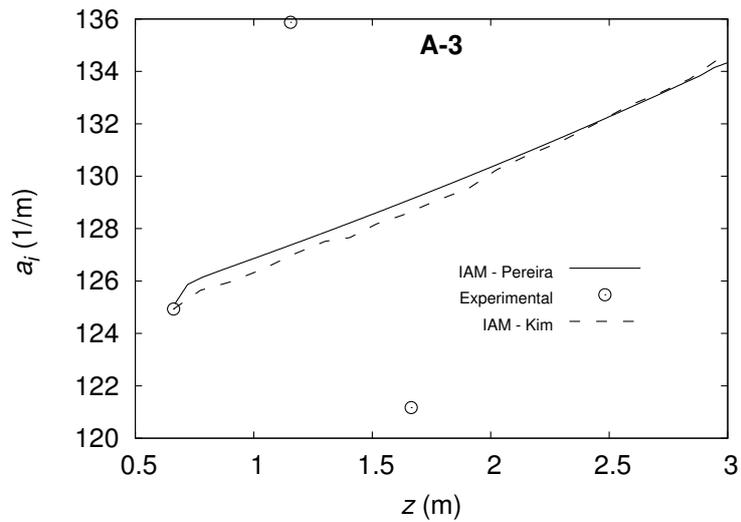


Figura 6.28: Gráfico comparativo entre valores de a_i obtido no presente trabalho (IAM - Pereira), por Kim (IAM - KIM) e dados experimentais para o caso A3.

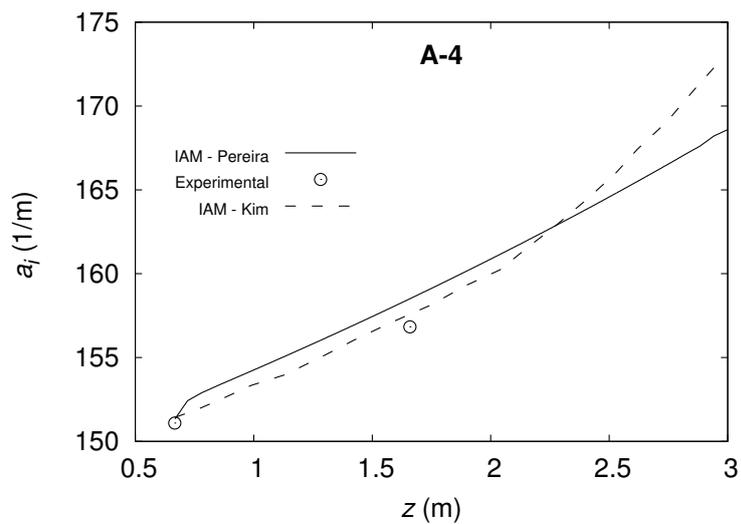


Figura 6.29: Gráfico comparativo entre valores de a_i obtido no presente trabalho (IAM - Pereira), por Kim (IAM - KIM) e dados experimentais para o caso A4.

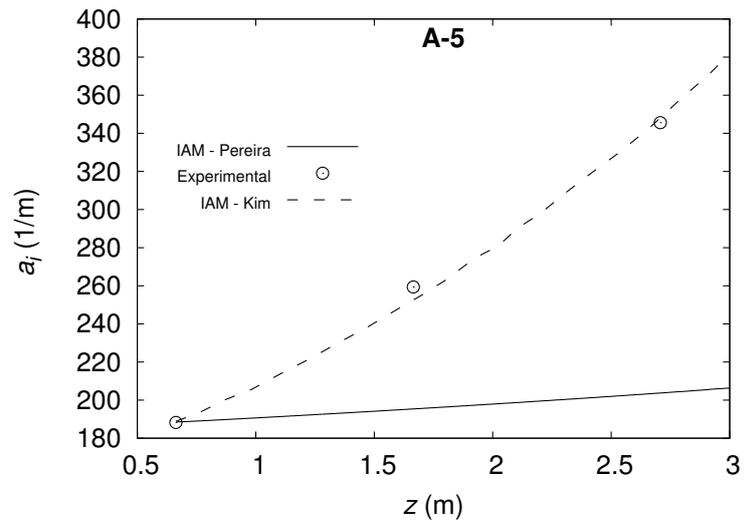


Figura 6.30: Gráfico comparativo entre valores de a_i obtido no presente trabalho (IAM - Pereira), por Kim (IAM - KIM) e dados experimentais para o caso A5.

Capítulo 7

Conclusão

A implementação realizada no OpenFOAM foi bem sucedida. Isso pode ser notado pela análise feita para cada mecanismo de interação. Os resultados mostraram que o modelo conseguiu reproduzir todos os efeitos para o escoamento unidimensionais, com exceção do termo de quebra. É necessário atentar para sua modelagem e buscar valores para comparação, já que devido a discordâncias nas metodologias de cálculos dos demais autores, não é possível comparar os resultados diretamente.

O modo de resolução adotado neste trabalho contabiliza todas as variantes envolvidas ao longo do escoamento, sendo feitas pequenas aproximações. Com isso, a solução da equação completa se torna mais acurada, como pode ser visto nas figuras da Seção 6.3. No Caso A2 e A3, como KIM [1] não conseguiu reproduzir os resultados experimentais e o trabalho se baseia no modelo criado por este, não era esperado que os resultados obtidos pelo OpenFOAM tivessem mais sucesso. Possivelmente, as divergências encontradas em seu código, a escolha do método numérico, ou o próprio modelo levaram a tal erro. Por fim, a discordância vista no Caso A5 é explicada pelo termo de quebra. Para KIM [1] e ALMEIDA [6], com esta velocidade, o efeito de quebra influencia notoriamente para a variação de área interfacial, o que não se confirmou ao implementar este termo, com todas as suas variáveis sendo recalculadas ao longo da simulação.

7.1 Trabalhos futuros

O estudo deve ser aprofundando ainda para escoamentos unidimensionais principalmente na investigação do termo de quebra e na tentativa de reprodução dos resultados experimentais dos Casos A2 e A3.

A seguir, a implementação pode ser feita em um *solver* multifásico para que sejam simulados casos tridimensionais. A fração de gás deixaria de ser calculada pelo modelo do *drift-flux* e passaria a ser calculada pelas equações do escoamento multifásico. Desta forma, seria analisado

tanto o método de resolução quanto a fluidodinâmica do problema.

Referências Bibliográficas

- [1] KIM, S. *Interfacial area transport equation and measurement of local interfacial characteristics*. Tese de Doutorado - School of Nuclear Engineering, Purdue University, 1999.
- [2] OPENFOAM. User's guide. Technical report, OpenFOAM Foundation, 2013.
- [3] FALVEY, H. *Air-water flow in hydraulic systems*. Dissertação de Mestrado - United States.
- [4] MANDHANE, J. M.; GREGORY, G. A.; AZIZ, K. A flow pattern map for gas-liquid flow in horizontal pipes. *Int. J. Multiphase Flow*, v. 1, p. 537–553.
- [5] ISHII, M. *Thermofluid dynamic theory of two-phase flow*. Paris: Eyrolles, 1975.
- [6] ALMEIDA, L, C. *Avaliação da modelagem do transporte de área interfacial em escoamentos dispersos usando balanço populacional*. Dissertação de Mestrado - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, PEQ, Rio de Janeiro, 2012.
- [7] RODRIGUEZ, O. M. H. *Escoamento multifásico na produção de petróleo fundamentos e aplicações*. Technical report, IX Semana de Engenharia Mecânica e Mecatrônica, Universidade de São Carlos, 2006.
- [8] KOCAMUSTAFAOGULLARI, G.; ISHII, M. Foundation of the interfacial area transport equation and its closure relations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, New York, v. 48, n. 3, p. 481–493, May 1995.
- [9] RAMKRISHNA, D. *Population balance - theory and applications to particulate systems in engineering*. Academic Press, San Diego, 2000.
- [10] ANSYS. Ansys designmodeler and ansys meshing for cfd customers - 14.5 update. Technical report, ANSYS UK, 2013.
- [11] ANSYS. Ansys icem cfd user manual. Technical report, ANSYS, 2013.
- [12] AUTOCAD. Autocad basics. Technical report, 2013.
- [13] POINTWISE. User manual version 15. Technical report, Pointwise, 2003.
- [14] SILVA, L. F. L. R. *Desenvolvimento de metodologias para simulação de escoamentos polidispersos usando código livre*. Tese de Doutorado - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, PEQ, Rio de Janeiro, 2008.

- [15] PARAVIEW. Paraview user's guide. Technical report, Pointwise, 2012.
- [16] SILVA, L. F. L. R.; LAGE, P. L. C. Development and implementation of polydispersed multiphase flow model in openfoam. *Computers e Chemical Engineering* 35, v. 12, p. 2653–2666, 2011.
- [17] FAVERO, J. L.; FERREIRA, G. S.; SILVA, L. F. L. R.; LAGE, P. L. C. Simulation of water-in-oil emulsion flow with openfoam using validated coalescence and breakage models. Technical report, Fifth Latin American CFD Workshop Applied to the Oil and Gas Industry, Rio de Janeiro, 2012.
- [18] BERGELIN, O. P.; GAZLEY, C. Cocurrent gas-liquid flow, i. flow in horizontal tubes. *Proc Heat Transfer and Fluid Mech. Inst, Berkeley CA*, p. 5–18.
- [19] KOSTERIN, S. I. An investigation of the influence of diameter and inclination of a tube on the hydraulic resistance and flow structure of gas-liquid mixtures. *Izvest. Akad. Nauk. USSR*, v. 12, p. 1824–1830.
- [20] FACCINI, J. L. H. *Estudo de escoamentos bifásicos estratificados usando técnicas ultrassônicas*. Tese de Doutorado - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear, Rio de Janeiro, 2008.
- [21] ZUBER, N.; FINDLAY, J. Average volumetric concentration in two-phase flow systems. *J. Heat Trans.*, v. 87, p. 453, 1965.
- [22] ARAÚJO, J. *Estudo dos modelos de quebra e coalescência para escoamentos polidispersos*. Dissertação de Mestrado - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, PEQ, Rio de Janeiro, 2006.
- [23] KOSTOGLU, M.; KARABELAS, A. J. Evaluation of zero order methods for simulating particle coagulation. *Journal of Colloid and Interface Science*, New York, v. 163, p. 420–430, 1994.
- [24] MARCHISIO, D. L.; FOX, R. O. Solution of the population balance equation using the direct quadrature method of moments. *Journal of Aerosol Science*, v. 27, p. 255–265, 1997.
- [25] ISHII, M.; WU, Q.; ASSAD, A. Bubble coalescence and break-up in air-sparged bubble columns. *In: Proceedings of IMuST Meeting*, 2000.
- [26] WU, Q.; KIM, S.; ISHII, M. et al. One group interfacial area transport in vertical bubbly flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 41, p. 1103–1112, 1998.
- [27] HIBIKI, T.; ISHII, M. One group interfacial area transport of bubbly flows in vertical round tubes. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 43, p. 2711–2726, 2000.
- [28] HIBIKI, T. AND TAKAMASA, T.; ISHII, M. Interfacial area transport of bubbly flow in a small diameter pipe. *Journal of Nuclear Science and Technology*, v. 43, p. 2711–2726, 2000.

- [29] ISHII, M.; KIM, S.; UHLE, J. Interfacial area transport equation model development and benchmark experiments. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 45, p. 3111–3123, 2002.
- [30] HIBIKI, T.; ISHII, M. Development of one group interfacial area transport equation in bubbly flow systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 45, p. 2351–2372, 2002.
- [31] LIU, L. X.; LITSTER, J. D.; IVESON, S. M. et al. Coalescence of deformable granules in wet granulation processes. *AIChE Journal*, v. 46, n. 3, p. 529–539, 2000.
- [32] COULALOGLOU, C. A.; TAVLARIDES, L. L. Description of interaction processes in agitated liquid-liquid dispersions. *Chemical Engineering Science*, v. 32, p. 1289–1297, 1977.
- [33] PRINCE, M. J.; BLANCH, H. W. Bubble coalescence and break-up in air-sparged bubble columns. *AIChE Journal*, v. 36, n. 10, p. 1485–1499, 1990.
- [34] DE, C. J. B. L. M. *Caracterização da esteiras de bolhas tubulares e sua accção misturadora*. Tese de Doutoramento - Universidade do Porto, Porto, 1987.
- [35] ISHII, M.; CHAWLA, T. C. Local drag laws in dispersed two-phase flow. Technical report, In: Report ANL-79-105, NUREG/CR-1230, Argonne National Laboratory, 1979.
- [36] ISHII, M. One-dimensional drift-flux model and constitutive equations for relative motion between phases in various two-phase flow regimes. Technical report, Argonne National Laboratory Report ANL-77/47., 1977.
- [37] BATCHELOR, B. K. Pressure fluctuation in isotropic turbulence. *Proc. Cambridge phil. Soc.*, v. 47, n. 3, p. 359–371, 1951.
- [38] TODREAS, N. E.; KAZIMI, M. S. Nuclear systems i. *Hemisphere Publishing Corp.*, 1990.
- [39] KIM, S.; SUN, X.; ISHII, M. Interfacial area transport and evaluation of source and sink terms for confined air-water bubbly flow. *Nuclear Engineering and Design*, v. 219, p. 61–75, 2002.

Apêndice A

Código

O solver criado chama-se *interfacialscalartransportFoam*, e possui quatro arquivos básicos.

São estes:

- *createFields.c* executável obrigatório responsável por criar todos as variáveis de campo que serão utilizadas na solução.
- *coefficients.H*: E um arquivo auxiliar, criado para fazer o calculo iterativo da velocidade terminal das bolhas, coeficiente de arraste e Reynolds necessários para o termo fonte de quebra e velocidade turbulenta.
- *drift-flux.H*: Outro arquivo auxiliar, criado para o cálculo as equações do drift-flux.
- *evaluateUgUl.H*: Também é um arquivo auxiliar, criado para cálculo da velocidade intersticial de gás e líquido a partir da velocidade superficial dos mesmos, também para o centro do volume, quanto para a face.
- *interfacialscalartransportFoam.c*: E o executável principal, onde contém toda a programação.

Nas seções a seguir, é o código implementado.

A.1 createFields.c

```

Info<< "Reading transportProperties\n" << endl;
IOdictionary transportProperties
(
    IOobject
    (
        "transportProperties",
        runTime.constant(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::NO_WRITE
    )
);

dimensionedScalar ul
(
    transportProperties.lookup("ul")
);
dimensionedScalar Dh
(
    transportProperties.lookup("Dh")
);
dimensionedScalar rhoI
(
    transportProperties.lookup("rhoI")
);
dimensionedScalar alphamax
(
    transportProperties.lookup("alphamax")
);
dimensionedScalar Cct
(
    transportProperties.lookup("Cct")
);
dimensionedScalar C
(
    transportProperties.lookup("C")
);
dimensionedScalar Co
(
    transportProperties.lookup("Co")
);
dimensionedScalar Ccw
(
    transportProperties.lookup("Ccw")
);
dimensionedScalar Cb
(
    transportProperties.lookup("Cb")
);
dimensionedScalar g
(
    transportProperties.lookup("g")
);
dimensionedScalar zt
(
    transportProperties.lookup("zt")
);
dimensionedScalar M
(
    transportProperties.lookup("M")
);
dimensionedScalar R
(
    transportProperties.lookup("R")
);
dimensionedScalar T
(
    transportProperties.lookup("T")
);

```

```

Info<< "Reading field interfacial area ai\n" << endl;
volScalarField ai
(
    IOobject
    (
        "ai",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);

Info<< "Calculating field p\n" << endl;
volScalarField p
(
    IOobject
    (
        "p",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);
// getting pressure from inlet e outlet
label inlet = mesh.boundaryMesh().findPatchID("inlet");
const vectorField& Cfinlet = mesh.Cf().boundaryField()[inlet];
const scalarField& Pinlet = p.boundaryField()[inlet];
label outlet = mesh.boundaryMesh().findPatchID("outlet");
const vectorField& Cfoutlet = mesh.Cf().boundaryField()[outlet];
const scalarField& Poutlet = p.boundaryField()[outlet];
scalar Xinlet = min(Cfinlet.component(0));
scalar Xoutlet = max(Cfoutlet.component(0));
scalar dpdx = (Pinlet[0]-Poutlet[0])/(Xinlet-Xoutlet);

Info << "Pin = " << Pinlet[0] << " Pout = " << Poutlet[0] << endl;
Info << "Xinlet = " << Xinlet << " Xoutlet = " << Xoutlet << endl;
Info << "dpdx = " << dpdx << endl;

forAll(p,celli)
{
    p[cellI] = Pinlet[0] + (mesh.C()[celli].component(0) - Xinlet)*dpdx;
};

// Info << "p = "<< p << endl;

Info<< "Calculating field Rho\n" << endl;
volScalarField rhog
(
    IOobject
    (
        "rhog",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh,
    dimensionedScalar("rhogo", dimensionSet(1, -3, 0, 0, 0), 0.)
);

// Calculating rhog field (constant as p and T are constants)
forAll(rhog,celli)
{
    rhog[cellI] = (p[cellI]*M.value()) / (R.value()*T.value());
};

```

```

);

// rhog, jg, jl are fixed b uniform constant p field
// Therefore drift flux can be used to calculate alphagIn
// initializing with a uniforme field
scalarField& alphagIn = alphag.boundaryField()[inlet];
scalarField& alphagOut = alphag.boundaryField()[outlet];
forAll(alphag,celli)
{
    alphag[celli] = alphagIn[0];
};
forAll(alphagOut, facei)
{
    alphagOut[facei] = alphagIn[0];
};
# include "driftfluxEqn.H"

volScalarField D
(
    IOobject
    (
        "D",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh,
    dimensionedScalar("D", dimensionSet(0, 1, 0, 0, 0), 0.)
);

Info<< "Reading fields Ug and Ul\n" << endl;
volVectorField Ul
(
    IOobject
    (
        "Ul",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);

volVectorField Ug
(
    IOobject
    (
        "Ug",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);
// Initialization of Ug and Ul using uniform alphag

vectorField& UgInlet = Ug.boundaryField()[inlet];
vectorField& UgOutlet = Ug.boundaryField()[outlet];
vectorField& UlInlet = Ul.boundaryField()[inlet];
vectorField& UlOutlet = Ul.boundaryField()[outlet];

# include "evaluateUgUl.H"

Info << "Reading/calculating turbulence\n" << endl;
volVectorField ut

```

```
Info << "Creating ur, Red and Cd\n" << endl;

    volVectorField ur
    (
        IOobject
        (
            "ur",
            runTime.timeName(),
            mesh,
            IOobject::NO_READ,
            IOobject::NO_WRITE
        ),
        mesh,
        dimensionedVector("ur", dimensionSet(0, 1, -1, 0, 0, 0, 0), vector::zero)
    );

    forAll(ur,celli){
        ur[celli].x() = 0.0001;
    };
};
```

A.2 coefficients.H

```

Info<< "\nReading coefficients, calculating ur, Red, Cd.\n" << endl;

forAll(ur,celli){
    scalar deltarho = rhoI.value()-rhoG[celli];
    scalar alphaI = 1. - alphag[celli];

    scalar Ur = ur[celli].x();
    scalar Ur0 = Ur+1;

    int i;
    for(i=0; fabs(Ur-Ur0)>1.e-8 && i<500; i++)
    {
        Ur0 = Ur;

        scalar Red = alphaI*rhoI.value()*D[celli]*Ur / ul.value();
        scalar Cd = (24. + 2.4*std::pow(Red,0.75))/ Red;

        scalar u = (D[celli]*deltarho*g.value()) / (3.*Cd*rhoI.value());
        Ur = std::pow(u,(1./2.));
    }
    if(i==500)
    {
        Info << "Convergence of alphag not achieved in cell " << celli << " Reached absolute
tolerance of " << fabs(Ur-Ur0) << endl;
    }

    scalar Red = alphaI*rhoI.value()*D[celli]*Ur / ul.value();
    scalar Cd = (24. + 2.4*std::pow(Red,0.75))/ Red;

    scalar u = (D[celli]*deltarho*g.value()) / (3.*Cd*rhoI.value());
    Ur = std::pow(u,(1./2.));
    Scw[celli] = std::pow(Cd, 1./3.)*Ccw.value()*ur[celli].x();

    ur[celli].x()=Ur;
};

forAll(ut,celli){
    scalar mumix= ul.value()/(1.-alphag[celli]);
    scalar rhom = alphag[celli]*rhoG[celli] + (1.-alphag[celli])*rhoI.value();
    scalar Umix = rhoG[celli]*alphag[celli]*Ug[celli].x()+(1.-alphag[celli])*rhoI.value()*Ul
[celli].x() / rhom ;
    scalar Rem = rhoI.value()*Umix*Dh.value()/mumix;
    scalar Wecrit = 8.;

    scalar temp1 = std::pow(Rem, 1./4.);
    scalar f = 0.316*std::pow(mumix /ul.value(),1./4.) / temp1;
    scalar epsilon = (f*std::pow(Umix, 3.)) / 2* Dh.value();

    ut[celli].x() = 1.4* std::pow(epsilon, 1./3.)*std::pow(D[celli],1./3.);

    scalar We = rhoI.value()*std::pow(ut[celli].x(),2.)*D[celli]/ st.value();
    Squebra[celli] = ( We<Wecrit ? 0: std::exp(-Wecrit/We)*std::sqrt(1.-Wecrit/We) );

    Info << "We = " << We << endl;
};

Info << "ur = " << ur << endl;
Info << "ut = " << ut << endl;

```

A.3 drift-flux.H

```

    forAll(alphag, celli)
    {
        scalar vdaux = std::sqrt(2.)*std::pow( ((st.value()*g.value()*(rhol.value()-rhog[celli]))/(sqr
(rhol).value()), 0.25);
        scalar j = jg[celli].x() + jl[celli].x();
        scalar& jgx = jg[celli].x();

        scalar alpha = alphag[celli];
        scalar alpha0 = alpha+1;

        int i;
        for(i=0; fabs(alpha-alpha0)>1.e-8 && i<500; i++)
        {
            alpha0 = alpha;
            alpha = jgx / (Co.value()*j+vdaux*std::pow(1-alpha,1.75));
        }
        if(i==500)
        {
            Info << "Convergence of alphag not achieved in cell " << celli << " Reached absolute tolerance
of " << fabs(alpha-alpha0) << endl;
        }
        alphag[celli]=alpha;
    };

    forAll(alphagOut, facei)
    {
        scalar vdaux = std::sqrt(2.)*std::pow( ((st.value()*g.value()*(rhol.value()-rhogOut[facei]))/(sqr
(rhol).value()), 0.25);
        scalar j = jgOutlet[facei].x() + jlOutlet[facei].x();
        scalar& jgx = jgOutlet[facei].x();

        scalar alpha = alphagOut[facei];
        scalar alpha0 = alpha+1;

        int i;
        for(i=0; fabs(alpha-alpha0)>1.e-8 && i<500; i++)
        {
            alpha0 = alpha;
            alpha = jgx / (Co.value()*j+vdaux*std::pow(1-alpha,1.75));
        }
        if(i==500)
        {
            Info << "Convergence of alphag not achieved in face " << facei << " Reached absolute tolerance
of " << fabs(alpha-alpha0) << endl;
        }
        alphagOut[facei] = alpha;
    };

```

A.4 *evaluateUgUl.H*

```
forAll(UgInlet, facei)
{
    UgInlet[facei] = jgInlet[facei]/alphagIn[facei];
};
forAll(Ug, celli)
{
    Ug[celli] = jg[celli]/alphag[celli];
};
forAll(UgOutlet, facei)
{
    UgOutlet[facei] = jgOutlet[facei]/alphagOut[facei];
};

forAll(UlInlet, facei)
{
    UlInlet[facei] = jlInlet[facei]/(1.-alphagIn[facei]);
};
forAll(Ul, celli)
{
    Ul[celli] = jl[celli]/(1.-alphag[celli]);
};
forAll(UlOutlet, facei)
{
    UlOutlet[facei] = jlOutlet[facei]/(1.-alphagOut[facei]);
};
```



```

    # include "coefficients.H"
    //-----Source terms calculations-----//

    dimensionedScalar A = (3.*mathematicalConstant::pi*pow(alphamax,(1./3.)));
    volScalarField B = pow(alphamax,(1./3.)) - pow(alphag,(1./3.));
    volScalarField E = A*B;
    volScalarField F = pow(alphamax,(1./3.))*pow(alphag,(1./3.));
    volScalarField G = pow(alphamax,(1./3.)) - pow(alphag,(1./3.));
    volScalarField H = F / G;
    volScalarField I = 1. - (exp(-C*H));

    Info << "alphag = " << alphag << endl;

    //-----//

    fvScalarMatrix aiEqn
    (
        fvm::ddt(ai)
        + fvm::div(phiig,ai)

        + fvm::Sp((2./3.*(Ug & fvc::grad(p))/p), ai) // (E)
        - fvm::Sp( Squebra*Cb*ai*mag(ut) / (18.*alphag), ai) // (B)
        + fvm::Sp((Cct*mag(ut)*I*ai/E), ai) // (CT)
        + fvm::Sp((Scw *ai)/(mathematicalConstant::pi*3.), ai) //efeito (CW)
    );

    // aiEqn.relax();
    aiEqn.solve();

    }

    }

    runTime.write();
}

Info<< "End\n" << endl;
return 0;
}

```

```

};
scalarField& rhogIn = rhog.boundaryField()[inlet];
forAll(rhogIn, facei)
{
    rhogIn[facei] = (Pinlet[0]*M.value()) / (R.value()*T.value());
};
scalarField& rhogOut = rhog.boundaryField()[outlet];
forAll(rhogOut, facei)
{
    rhogOut[facei] = (Poutlet[0]*M.value()) / (R.value()*T.value());
};

Info<< "Reading fields jg and jl\n" << endl;

// only jl is uniform and 'constant'
volVectorField jl
(
    IOobject
    (
        "jl",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);

volVectorField jg
(
    IOobject
    (
        "jg",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);

const vectorField& jlInlet = jl.boundaryField()[inlet];
const vectorField& jlOutlet = jl.boundaryField()[outlet];
const vectorField& jgInlet = jg.boundaryField()[inlet];
vectorField& jgOutlet = jg.boundaryField()[outlet];
forAll(jg,celli)
{
    jg[celli].x() = jgInlet[0].x()*Pinlet[0]/p[celli];
    jg[celli].y() = jg[celli].z() = 0;
};
forAll(jgOutlet, facei)
{
    jgOutlet[facei].x() = jgInlet[0].x()*Pinlet[0]/Poutlet[facei];
    jgOutlet[facei].y() = jgOutlet[facei].z() = 0;
};

Info<< "Reading field alphag\n" << endl;

volScalarField alphag
(
    IOobject
    (
        "alphag",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);

```

```

(
    IObject
    (
        "ut",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IObject::NO_READ,
        IObject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh,
    dimensionedVector("ut", dimensionSet(0, 1, -1, 0, 0, 0), vector::zero)
);

volScalarField Squebra
(
    IObject
    (
        "Squebra",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IObject::NO_READ,
        IObject::NO_WRITE
    ),
    mesh,
    dimensionedScalar("Squebra", dimensionSet(0, 0, 0, 0, 0), 0.)
);

volScalarField Scw
(
    IObject
    (
        "Scw",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IObject::NO_READ,
        IObject::NO_WRITE
    ),
    mesh,
    dimensionedScalar("Scw", dimensionSet(0, 1, -1, 0, 0), 0.)
);

Info << "Reading/calculating face flux field phig\n" << endl;

surfaceScalarField phig
(
    IObject
    (
        "phig",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IObject::READ_IF_PRESENT,
        IObject::AUTO_WRITE
    ),
    linearInterpolate(Ug) & mesh.Sf()
);

surfaceScalarField phil
(
    IObject
    (
        "phil",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IObject::READ_IF_PRESENT,
        IObject::AUTO_WRITE
    ),
    linearInterpolate(Ul) & mesh.Sf()
);

surfaceScalarField& phi = phig;

```