



ERICK DJIN MORI

"SIMULAÇÃO DE COLUNA DE BOLHAS EM LEITO DE LAMA  
POR TÉCNICAS DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL"

Campinas  
2012



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ERICK DJIN MORI

"SIMULAÇÃO DE COLUNA DE BOLHAS EM LEITO DE LAMA  
POR TÉCNICAS DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL"

Orientador: Prof. Dr. Milton Mori

Co-Orientador: Prof. Dr. Marcos Akira d'Ávila

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química na Área de Concentração Desenvolvimento de Processos Químicos.

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO  
DEFENDIDA PELO ALUNO ERICK DJIN MORI E ORIENTADA PELO PROF.  
DR. MILTON MORI.

A handwritten signature in black ink, appearing to read "Milton Mori", is written above a horizontal line.

Prof. Dr. Milton Mori

Campinas  
2012

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE - UNICAMP

M824s Mori, Erick Djin  
Simulação de coluna de bolhas em leito de lama por técnicas da fluidodinâmica computacional / Erick Djin Mori. --Campinas, SP: [s.n.], 2012.

Orientador: Milton Mori  
Coorientador: Marcos Akira D'Ávila.  
Dissertação de Mestrado - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Bolhas. 2. Fluidodinâmica computacional (CFD).  
3. escoamento multifásico. 4. escoamento turbulento. I. Mori, Milton, 1947-. II. D'Ávila, Marcos Akira, 1972-. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

Título em Inglês: Computational fluid dynamics simulation of slurry bubble columns

Palavras-chave em Inglês: Bubble, Computational fluid dynamics, Multiphase flow, Turbulent flow

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora: Karla Patricia Oliveira Rodriguez Esquerre, Dirceu Noriler

Data da defesa: 20-09-2012

Programa de Pós Graduação: Engenharia Química

Dissertação de Mestrado defendida por Erick Djin Mori e aprovada em 21 de setembro de 2012 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



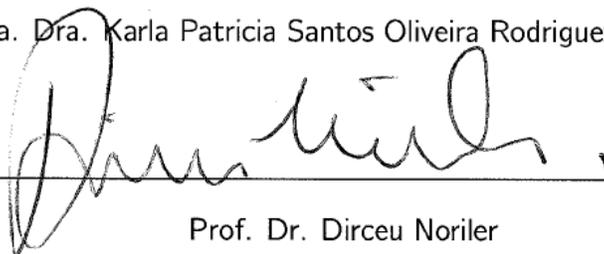
---

Prof. Dr. Milton Mori



---

Profa. Dra. Karla Patricia Santos Oliveira Rodriguez Esquerre



---

Prof. Dr. Dirceu Noriler

## Dedicatória

Este trabalho é dedicado especialmente à minha família.

## Agradecimentos

Aos meus pais agradeço pelo total apoio, constante incentivo e fé inabalável. Por me ensinar e me fazer perceber o valor dos estudos e de uma boa formação. Por isto e muito mais sou eternamente grato por tudo o que fizeram e têm feito por mim. Fico feliz por tê-los tido sempre ao meu lado, podendo contar com sua compreensão e seu incentivo ao longo desta jornada.

Hoje, só posso afirmar que faço o que faço por prazer, pois tive uma oportunidade única de aprender, crescer e vislumbrar o mundo por uma óptica diferente. Esta visão, assim como a experiência agregada durante o meu mestrado contribuíram muito para a formação da pessoa e do profissional que sou hoje. Sei que em grande parte devo isto ao meu orientador, o professor doutor Milton Mori. Pelos cuidados, conselhos e bons momentos que passei sob sua orientação sou imensamente grato. Fico muito feliz de tê-lo tido como meu professor em uma fase de minha vida que considero tão importante. Muito obrigado, Professor!

Agradeço ao meu co-orientador, o professor doutor Marcos Akira d'Ávila, por nossas conversas, em que sempre fui levado a *insights* sobre como conduzir minhas pesquisas. Seus conselhos, suas recomendações e sua experiência foram de suma importância para este trabalho.

Sou grato a todos meus colegas e ex-colegas de laboratório. Desde que cheguei no PQGe<sup>1</sup> vivi bons momentos junto a essa equipe, que além de ser um grupo altamente competente e qualificado, é composto por pessoas tão especiais, cada um com seu jeito particular. Tenho grande orgulho de ter pertencido a esta família e levarei sempre comigo valiosas lembranças com aqueles que acima de colegas, tenho como amigos.

Em especial, eu gostaria de agradecer ao pesquisador doutor Leonardo Machado da Rosa, por toda a sua paciência e entusiasmo ao passar minhas primeiras lições na área. Graças à sua dedicação, sua paixão pelo assunto e suas lições, eu fui capaz de construir uma base que me deu autonomia em minhas pesquisas.

Também sou muito grato à doutora Marcela Kotsuka da Silva, que já havia se aventurado dentro do tema de minha dissertação. Em função disso, pôde me transmitir muito de suas impressões, que me foram bastante úteis nas primeiras etapas deste trabalho. Além disso, graças à toda sua experiência e a seus ensinamentos, eu pude enfim "alçar vôo" em minhas simulações.

Meus sinceros agradecimentos vão para os nossos colegas da FURB<sup>2</sup>, com os quais eu sempre tive a oportunidade de aprender algo novo. Ao pesquisador doutor Dirceu Noriler eu agradeço por toda a atenção e por toda a camaradagem. Todos seus ensinamentos pacientemente transmitidos a mim, bem como nossas discussões, sempre tiveram uma contribuição muito positiva para o meu trabalho e para a minha formação, por vezes me mostraram também o outro lado da moeda.

Obrigado aos meus amigos de graduação, que me incentivaram em momentos difíceis fazendo com que eu nunca deixasse de acreditar. São nessas horas em que reconhecemos o real significado de amizade e ficamos contentes por termos pessoas tão especiais sempre próximos de nós!

À Petrobras, agradeço pelo apoio financeiro.

---

<sup>1</sup>Laboratório de Pesquisa em Processos Químicos e Gestão Empresarial

<sup>2</sup>Universidade Regional de Blumenau

*Suba o primeiro degrau com fé. Não é necessário que você veja toda a escada.*

*Apenas dê o primeiro passo.*

**Martin Luther King**

## Resumo

Escoamentos gás-líquido-sólido em colunas de bolhas ainda são pouco compreendidos pela comunidade científica. Conhecer melhor a hidrodinâmica em uma coluna de bolhas é condição primordial para o sucesso em seu dimensionamento. Se a natureza do escoamento multifásico por si só é complexa, a tarefa de estudá-lo se torna ainda mais desafiadora, tendo em vista que são poucos os trabalhos consistentes publicados na literatura que abordam a temática. No presente estudo, utiliza-se a técnica da fluidodinâmica computacional (CFD), para conduzir simulações tridimensionais e transientes, a fim de se descrever a hidrodinâmica de um sistema gás-líquido-sólido em uma coluna de bolhas com quantidade intermediária de sólidos. O problema é tratado por meio de uma abordagem Euleriana e a interação interfásica é descrita exclusivamente pelo arraste entre as fases gás-líquido e sólido-líquido. Os resultados numéricos obtidos são confrontados com resultados experimentais da literatura e comprovam a capacidade da ferramenta computacional em descrever o sistema em questão. A análise dos modelos de arraste para a interação sólido-líquido mostrou a relevância da escolha da lei de arraste para descrever corretamente a circulação de sólidos no leito. Para a interação gás-líquido sob as condições analisadas, os modelos que consideram distorções da fase gasosa mostraram melhor desempenho, frente os modelos que consideram apenas bolhas esféricas. A turbulência no meio contínuo foi descrita por modelos de duas equações, os modelos k-epsilon e RNG k-epsilon. O último mostrou melhor desempenho em descrever o padrão de escoamento, possivelmente por ter sido concebido para escoamentos vorticiais.

**Palavras-chave:** coluna de bolhas, leito de lama, fluidodinâmica computacional, escoamentos multifásicos, escoamentos turbulentos

## Abstract

Gas-liquid-solid flows inside bubble columns are not fully comprehended by scientific community yet. A better knowledge regarding the hydrodynamics of a bubble column is the first step towards reaching its sizing successfully. If the multiphase flow nature by itself presents great complexity, the task of studying it becomes even more challenging, since few are the consistent published work in the literature treating this subject. In the present study, the computational fluid dynamics (CFD) was used to capture the hydrodynamics of a gas-liquid-solid flow inside a bubble column with intermediate solid concentration. The Eulerian approach was used as frame of reference and for the interphase forces only the drag between gas-liquid and solid-liquid phases were considered. The numerical results were compared to experimental data of the literature, showing the ability of CFD in describing the multiphase flow. Furthermore, analysis of drag models for the solid-liquid interaction indicates that the drag law plays an important role in describing the solid circulating in the system. For the gas-liquid interaction under the analyzed conditions, it has been found that the drag laws considering the bubble distortion showed better agreement with experimental data in comparison to the ones that considered bubbles as rigid spheres. The turbulence in the continuous phase was described by a two equation model. Comparison between standard k-epsilon and RNG k-epsilon revealed that in this case, the latter represented better the flow pattern, since it was developed for swirling flows.

**Keywords:** slurry bubble column, computational fluid dynamics, multiphase flow, turbulent flow

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Objetivo Geral . . . . .	3
1.2	Objetivos Específicos . . . . .	3
1.3	Estrutura da Dissertação de Mestrado . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Revisão Bibliográfica</b>	<b>6</b>
2.1	Modo de Operação de uma Coluna de Bolhas Simples . . . . .	7
2.2	Regimes de Escoamento em Colunas de Bolhas . . . . .	7
2.3	Regimes de Partículas Sólidas . . . . .	9
2.4	Regimes de Bolhas . . . . .	11
2.5	Coluna de Bolhas: Sistemas Gás-Líquido e CFD . . . . .	14
2.6	Coluna de Bolhas: Sistemas Gás-Líquido-Sólido e CFD . . . . .	18
2.7	Fechamento: Hidrodinâmica em Coluna de Bolhas . . . . .	22
<b>3</b>	<b>Modelagem Matemática e Método Numérico</b>	<b>23</b>
3.1	Equações de Fechamento . . . . .	24
3.1.1	Frações volumétricas . . . . .	24
3.1.2	Força de Arraste . . . . .	25
3.1.3	Turbulência . . . . .	31
3.2	Método Numérico . . . . .	34

<b>4</b>	<b>Simulações e Métodos</b>	<b>35</b>
4.1	Geometria e Malha Numérica . . . . .	36
4.2	Condições de Contorno . . . . .	39
4.3	Propriedades dos Materiais . . . . .	39
4.4	Condições Iniciais e Numéricas de Simulação . . . . .	41
4.5	Teste de Malha . . . . .	42
4.6	Estudo do escoamento da fase sólida . . . . .	43
<b>5</b>	<b>Resultados</b>	<b>45</b>
5.1	Comparação entre modelos de arraste . . . . .	45
5.1.1	Arraste da fase dispersa particulada . . . . .	45
5.1.2	Arraste da fase dispersa fluida . . . . .	49
5.2	Análise de regimes de bolhas . . . . .	54
5.3	Comparação entre os modelos k-epsilon e RNG k-epsilon . . . . .	55
<b>6</b>	<b>Conclusões e Atividades Futuras</b>	<b>56</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>58</b>

# Lista de Figuras

2.1	Regimes de escoamento de uma coluna de bolhas . . . . .	8
2.2	Regimes de escoamento em função de parâmetros dimensionais . . . . .	9
2.3	Regimes de formas geométricas de bolhas . . . . .	13
4.1	Representação esquemática do aparato experimental de WU <i>et al.</i> (2008). . . . .	35
4.2	Configuração de distribuidor tipicamente utilizado . . . . .	36
4.3	Circunferências traçadas para determinação do tamanho da entrada uniforme . . . . .	37
4.4	Vistas da seção transversal da coluna de bolhas para geometria, blocos e malha . . . . .	38
4.5	Malha numérica (a) vista da coluna (b) entrada da coluna . . . . .	38
4.6	Fração volumétrica de ar radial para os diferentes tamanhos de malha . . . . .	42
4.7	Perda de carga na coluna de bolhas para diferentes tamanhos de malha . . . . .	43
5.1	Modelo de Schiller-Naumann - Perfil de fração volumétrica de alumina . . . . .	46
5.2	Modelo de Wen-Yu - Perfil de fração volumétrica de alumina . . . . .	47
5.3	Modelo de Wen-Yu - Perfil de fração volumétrica de alumina (outra escala) . . . . .	48
5.4	Modelo de Gidaspow - Perfil de fração volumétrica de alumina . . . . .	49
5.5	Performance dos modelos de Schiller-Naumann e White . . . . .	50
5.6	Performance dos modelos de Grace e Ishii-Zuber . . . . .	52
5.7	Comparação dos perfis de fração volumétrica dos modelos analisados . . . . .	53
5.8	Comparação entre os modelos k-epsilon e RNG k-epsilon . . . . .	55

# Lista de Tabelas

4.1	Propriedades físicas dos materiais componentes das fases do escoamento . . .	40
4.2	Resultados de velocidade terminal da partícula e número de Reynolds da partícula	44
5.1	Erros relativos para os diferentes modelos de arraste. . . . .	53
5.2	Regimes de bolhas para os modelos de arraste analisados . . . . .	54
5.3	Erros relativos para os diferentes modelos de turbulência. . . . .	55

# Nomenclatura

## Letras Latinas

$A_{coluna}$	seção transversal da coluna de bolhas, $m^2$
$A_{entrada}$	área equivalente total de entrada de gás, $m^2$
$C_D$	coeficiente adimensional de arraste
$C_{\varepsilon 1}$	constante do modelo k-epsilon
$C_{\varepsilon 1, RNG}$	constante do modelo RNG k-epsilon
$C_{\varepsilon 2}$	constante do modelo k-epsilon e RSM
$C_{\varepsilon 2, RNG}$	constante do modelo RNG k-epsilon
$C_{\mu}$	constante do modelo k-epsilon
$C_{\mu, bi}$	constante do modelo de Sato e Sekoguchi
$C_{\mu, RNG}$	constante do modelo RNG k-epsilon
$C_{visc}$	fator de correção da viscosidade
$d_b$	diâmetro da bolha, $m$
$d_p$	diâmetro da partícula, $m$
$d_T$	diâmetro da coluna de bolhas, $m$
$Eu$	número de Eötvös
$F_i$	força interfásica, $N$

$F_D$	força interfásica de arraste, $N$
$F_L$	força interfásica de sustentação, $N$
$F_{MV}$	força interfásica de massa virtual, $N$
$F_{DT}$	força interfásica de dispersão turbulenta, $N$
$f_\varphi$	coeficiente do modelo de turbulência RNG k-epsilon
$g$	aceleração do campo gravitacional, $\frac{m}{s^2}$
$k$	energia cinética turbulenta, $\frac{m^2}{s^2}$
$M$	número de Morton
$P_k$	produção de turbulência devido a forças viscosas, $\frac{kg}{m^3s^3}$
$R$	raio da coluna de bolhas, $m$
$r$	posição radial, $m$
$Re_b$	número de Reynolds da bolha
$Re_m$	número de Reynolds de mistura
$Re_p$	número de Reynolds da partícula
$t$	tempo, $s$
$u$	velocidade superficial da fase, $\frac{m}{s}$
$u_{tp}$	velocidade terminal de sedimentação das partículas, $\frac{m}{s}$
$V$	volume ocupado pela fase, $m^3$
$V_{g,entrada}$	velocidade linear de entrada da fase gasosa, $\frac{m}{s}$
$W_{max}$	massa de sólidos máxima em suspensão, $kg$

## Letras Gregas

$\gamma'$	fator de molhabilidade
$\epsilon$	fração volumétrica da fase
$\epsilon_{g,entrada}$	fração volumétrica do gás na corrente de entrada
$\mu$	viscosidade dinâmica da fase, $\frac{kg}{m \cdot s}$
$\mu_{ef}$	viscosidade dinâmica efetiva, $\frac{kg}{m \cdot s}$
$\mu_r$	viscosidade dinâmica relativa, $\frac{kg}{m \cdot s}$
$\mu_{susp}$	viscosidade dinâmica aparente da suspensão, $\frac{kg}{m \cdot s}$
$\rho$	massa específica da fase, $\frac{kg}{m^3}$
$\sigma$	tensão superficial, $\frac{kg}{s^2}$

## Subscritos

$b$	bolha
$g$	fase gasosa
$l$	fase líquida
$lg$	interação gás-líquido
$ls$	interação líquido-sólido
$p$	partícula
$s$	fase sólida

## **Siglas**

<i>CFD</i>	Computational Fluid Dynamics
<i>MVF</i>	Método dos Volumes Finitos
<i>RANS</i>	Reynolds Averaged Navier-Stokes
<i>RMS</i>	Root-Mean-Square
<i>RNG</i>	ReNormalization Group
<i>RSM</i>	Reynolds Stress Model

# Capítulo 1

## Introdução

Uma coluna de bolhas pode operar sob diversas formas construtivas, mas em sua configuração mais simples, é composta por um vaso cilíndrico e um distribuidor de fase gasosa. Em geral, este consiste em um prato perfurado, um prato sinterizado ou um distribuidor em anel acoplado no fundo da coluna. Quando em operação, o gás passa pelo distribuidor e entra no sistema sob a forma de bolhas, a diferença de densidade entre as espécies envolvidas faz com que a fase gasosa se locomova em movimento ascendente através de uma fase líquida ou suspensão sólido-líquido. Este deslocamento gera boas condições de agitação favorecendo reações químicas, fenômenos de troca de calor e de massa entre as fases.

Conhecidas por sua vasta gama de aplicações industriais em setores como o químico, petroquímico e bioquímico, colunas de bolhas são comumente utilizadas como reatores e equipamentos de contato multifásico, tais como absorvedores e trocadores de calor. Colunas de bolhas se destacam pela simplicidade e ausência de peças móveis, demandando pouca manutenção e baixos custos operacionais (KANTARCI *et al.*, 2005). Quando se verifica a presença de uma fase sólida no escoamento, é usual denominar o sistema de coluna de bolhas em leito de lama.

Paradoxalmente, para caracterizar o escoamento de um sistema de simples construção, tem-se um número de graus de liberdade bastante restrito, podendo-se estimar um pequeno número de variáveis do sistema, necessitando todas as demais estarem bem definidas. A turbulência, o escoamento local e a distribuição da fração volumétrica de gás no leito se relacionam de uma maneira complexa com as variáveis de operação e de construção (TABIB *et al.*, 2008). Neste sentido, possuir um conhecimento detalhado a cerca da hidrodinâmica

predominante no escoamento é fundamental para projetos de colunas de bolhas.

No caso de colunas de bolhas em leito de lama, acadêmicos e especialistas de indústrias têm unido esforços a fim de se estudar a influência que a introdução de uma fase sólida possui na hidrodinâmica do sistema. Caracterizar adequadamente a dinâmica de fluidos é uma etapa primordial para a modelagem deste tipo de equipamento, pois o comportamento das fases fluidas no interior do leito permite descrever com maior precisão outros fenômenos importantes (transferência de massa, reações químicas e transferência de calor) estabelecidos no escoamento da coluna em função da hidrodinâmica do sistema.

Por muito tempo, projetos de colunas de bolhas se limitaram a métodos empíricos devido ao elevado grau de complexidade em sua hidrodinâmica. Contudo, avanços computacionais e numéricos têm viabilizado a abordagem de problemas de engenharia e da física por métodos computacionais. Em consequência, tem-se adquirido uma modelagem matemática cada vez mais completa de escoamentos em colunas de bolhas, reduzindo o grau de empirismo em sua modelagem (TABIB *et al.*, 2008).

Uma grande dificuldade encontrada por trabalhos experimentais envolvendo leitos de lama, consiste na limitação das técnicas de medição dos parâmetros hidrodinâmicos. Particularmente, quando se trabalha com concentrações de sólidos elevadas, a suspensão adquire um aspecto opaco e impossibilita a utilização de técnicas que se valem de fenômenos ópticos para obter dados experimentais. Isto somado à complexidade do escoamento em si, colaboram para que o número de trabalhos publicados sobre o tema seja bastante restrito, fazendo com que a quantidade de dados experimentais disponíveis na literatura seja bastante escassa.

Sendo assim, uma grande vantagem de se investir em métodos computacionais, consiste na possibilidade de depender cada vez menos de um aparato experimental, construído especialmente para estudar a viabilidade de projetos, ou até mesmo para fornecer dados experimentais utilizados na corroboração de resultados numéricos. Para se trabalhar neste nível, seria necessária uma modelagem matemática geral e robusta do problema, capaz de fornecer resultados numéricos com a precisão prescrita e um alto grau de confiabilidade. Entretanto, o atual estado da arte ainda não permite que isso seja realizado, sendo ainda necessário recorrer à experimentação para validação de resultados numéricos.

Frente a este contexto, uma ferramenta que tem se mostrado extremamente útil em abordagens de problemas complexos é a Fluidodinâmica Computacional (CFD), uma técnica que utiliza métodos numéricos para a resolução das equações de conservação de massa, de

quantidade de movimento e de energia. Por meio desta técnica, podem-se simular diversos problemas da mecânica dos fluidos, incluindo o escoamento em coluna de bolhas. As simulações no presente estudo foram conduzidas em um cluster da SGI contendo 30 nós, cada um com um processador quad-core de 2,8 GHz e 32 GB de RAM, cada simulação foi processada em no máximo quatro nós e o código computacional utilizado foi o ANSYS 12.

## 1.1 Objetivo Geral

O objetivo do presente trabalho é simular a hidrodinâmica de um escoamento multifásico gás-líquido-sólido, contendo uma concentração intermediária de partículas em um coluna de bolhas cilíndrica. As simulações são conduzidas utilizando-se a técnica da fluidodinâmica computacional, levando-se em consideração uma abordagem Euleriana-Euleriana e a turbulência do escoamento.

## 1.2 Objetivos Específicos

Os objetivos específicos do presente trabalho consistem em:

- Analisar a influência de diferentes modelos de arraste para as fases dispersas do escoamento, verificando aspectos físicos e numéricos, tendo como base correlações e dados da literatura.
- Comparar os desempenhos de dois modelos de turbulência com aplicações bem sucedidas em estudos publicados na área de interesse. Juntamente com as forças interfásicas, a descrição da turbulência exerce importante papel na capacidade da simulação em captar corretamente características de escoamentos multifásicos turbulentos. Procura-se verificar a capacidade de cada modelo em prever a fração volumétrica local em média temporal, parâmetro hidrodinâmico de grande relevância em estudos envolvendo coluna de bolhas, tendo sempre em vista a comparação com a prática.
- Uma análise dos regimes de colunas de bolhas também faz parte do escopo do trabalho, pois esta etapa é um dos fatores determinantes do sucesso ou fracasso dos modelos utilizados por simulações em CFD.

## 1.3 Estrutura da Dissertação de Mestrado

Esta dissertação é composta por seis capítulos organizados segundo a estrutura a seguir:

- **Capítulo 1 - Introdução:** o primeiro capítulo apresenta o tema da dissertação, cria um breve contexto sobre o assunto tratado, explicita os objetivos pretendidos e se encerra com a apresentação da estrutura desta dissertação.
- **Capítulo 2 - Revisão Bibliográfica:** aqui são apresentados de forma sucinta os fundamentos básicos para este trabalho, explicando o modo de operação de uma coluna de bolhas simples, bem como os regimes de escoamento existentes em uma coluna em operação, regimes de partículas sólidas em suspensão e regimes de geometrias distintas de bolhas. Além disso, também é realizada uma compilação dos principais artigos publicados que serviram como base teórica para o desenvolvimento do presente trabalho.
- **Capítulo 3 - Modelagem Matemática e Métodos Numéricos:** as equações matemáticas utilizadas nas simulações podem ser encontradas neste capítulo. São apresentadas as equações de fechamento e os modelos de turbulência. Em seguida, introduz-se brevemente o método dos volumes finitos, que foi a metodologia numérica adotada para a resolução do conjunto de equações matemáticas do problema.
- **Capítulo 4 - Simulações:** todas as atividades preliminares às simulações definitivas estão descritas nesta seção. Um breve resumo do trabalho experimental utilizado como referência para as simulações é feito, seguido de um descritivo sobre como a geometria e a malha numérica foram elaboradas para o caso em questão. O estudo das condições de contorno, propriedades dos materiais envolvidos, condições iniciais e numéricas também estão explicitadas no capítulo.
- **Capítulo 5 - Resultados e Discussões:** os resultados das simulações que atendem aos objetivos propostos por esta dissertação são apresentados aqui. Em princípio, faz-se a comparação entre os resultados numéricos obtidos para diferentes modelos de arraste, tanto para a fase discreta sólida, quanto para a fase discreta gasosa. A seguir, utilizando os modelos de arraste que mostraram melhores aproximações com os dados experimentais, verificou-se a influência de diferentes modelos de turbulência. A seção termina com um estudo dos regimes identificados na operação da coluna de bolhas.

- **Capítulo 6 - Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros:** a dissertação se encerra com a revisão dos resultados atingidos com o trabalho e algumas sugestões de atividades futuras que podem vir a dar continuidade ao tema em estudo.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

O projeto e dimensionamento de colunas de bolhas têm atraído significativa atenção nos últimos anos devido à complexa hidrodinâmica e sua influência sob as características de transporte. Embora a construção de uma coluna de bolhas seja de fácil execução, o seu projeto e dimensionamento requerem uma ampla compreensão com respeito à dinâmica de fluidos multifásicos e suas implicações.

Dentre os diversos parâmetros que influenciam um projeto de coluna de bolhas, existe a razão de aspecto, isto é, a relação entre altura e diâmetro do equipamento. Na indústria, é recorrente encontrar aplicações com valores de no mínimo 5, enquanto que para aplicações em reatores bioquímicos este valor está compreendido no intervalo de 2 a 5 (KANTARCI *et al.* (2005)). A possibilidade de se ter um diâmetro maior está diretamente relacionada a maiores quantidades de gás injetado no sistema. Enquanto que uma altura maior permite que os reagentes fiquem em contato por mais tempo, aumentando com isso os níveis de conversão de produto. Entretanto, sabe-se que colunas altas com grandes diâmetros tornam-se operacionalmente inviáveis de se manusear. Assim, um dos caminhos para um bom projeto de coluna de bolhas está no equilíbrio entre estas duas variáveis dimensionais.

Com a finalidade de buscar um melhor entendimento de como parâmetros geométricos e dimensionais afetam o escoamento no interior de uma coluna de bolhas, diversos trabalhos são publicados na área. Além disso, os estudos envolvendo a fluidodinâmica computacional intencionalmente vão além dos parâmetros construtivos, pois procuram entender como as várias fases se comportam dentro da coluna de bolhas e quais consequências trazem para o escoamento.

## 2.1 Modo de Operação de uma Coluna de Bolhas Simples

Em geral, a entrada de gás em colunas de bolhas ocorre por meio de um distribuidor da fase gasosa, cuja construção pode ser feita das mais variadas formas. Os tipos mais comuns encontrados em trabalhos da literatura são os pratos sinterizados e os pratos perfurados. Cada configuração de distribuidor fornece características específicas à fase discreta fluida do sistema afetando toda a hidrodinâmica do escoamento na coluna de bolhas. A completa compreensão da influência do distribuidor da fase gasosa ainda está longe de ser alcançada, principalmente em virtude dos complexos fenômenos que envolvem desde a formação de bolhas através de orifícios, até a natureza altamente oscilatória e instável da região próxima ao distribuidor.

Ao injetar ar no sistema, a diferença de densidade entre as fases dispersa e contínua faz com que as bolhas adquiram movimento predominantemente ascendente, induzindo o líquido a se movimentar em mesmo sentido. Conforme as bolhas atravessam o leito, a fase contínua é deslocada lateralmente, causando a inversão em seu sentido de escoamento, em regiões próximas à parede da coluna. Este fenômeno também é conhecido como recirculação da fase contínua.

Segundo DECKWER (1992), mesmo com uma injeção uniforme de gás na coluna, gradientes de fração volumétrica de gás e de velocidade da fase líquida são formados ao longo da seção transversal do leito. Isto ocorre uma vez que as bolhas tendem a se concentrar no centro da coluna, seguindo um movimento ascendente e arrastando consigo a fase contínua. Além disso, bolhas grandes tendem a se dirigir para esta região devido a efeitos gravitacionais. Na região da parede, o líquido circula em sentido descendente arrastando um número pequeno de bolhas com tamanhos menores até determinado ponto.

A saída do ar localiza-se no topo da coluna e em grande parte dos casos é feita diretamente para a atmosfera. Quando isso ocorre, pode-se dizer que a coluna opera em semi-batelada, pois o gás atravessa o escoamento de forma contínua, enquanto o líquido e os sólidos estão em batelada no interior da coluna de bolhas.

## 2.2 Regimes de Escoamento em Colunas de Bolhas

A caracterização fluidodinâmica de uma coluna de bolhas possui um efeito significativo em seu modo de operação e em seu rendimento. De acordo com KANTARCI *et al.* (2005), os

resultados experimentais obtidos dependem muito do tipo de regime estabelecido na coluna de bolhas. Na literatura, geralmente são observados três tipos de regimes de escoamento, classificados e mantidos em função da velocidade superficial de gás na coluna. Na Figura 2.1, estão esquematizados os regimes de escoamento observados experimentalmente.

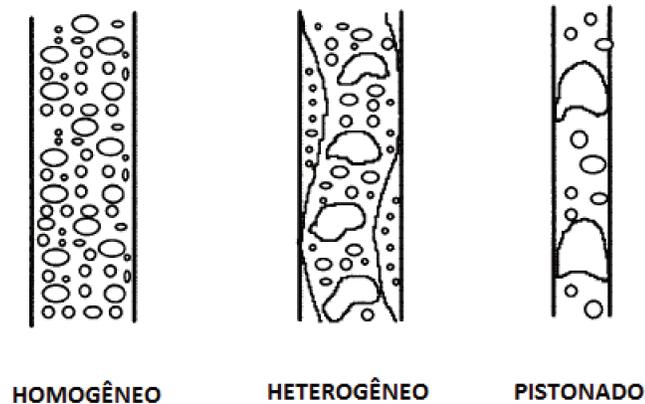


Figura 2.1: Regimes de escoamento de uma coluna de bolhas (BOUAIFI *et al.*, 2001).

O regime homogêneo se estabelece a baixas velocidades superficiais de gás e é caracterizado por possuir bolhas de tamanho pequeno, com baixas velocidades de ascensão. Em geral, observa-se uma distribuição uniforme de bolhas e uma leve agitação ao longo de toda a seção transversal da coluna. Fenômenos como a quebra e a coalescência de bolhas são praticamente inexistentes, por este motivo, o tamanho das bolhas é determinado apenas pelo tipo de distribuidor e pelas propriedades do sistema (THORAT e JOSHI, 2004).

O regime heterogêneo é mantido a elevadas velocidades superficiais de gás, sendo caracterizado por aumentos na turbulência gerada por bolhas em movimento e pela circulação de líquido. Como resultado, há a formação de padrões transientes de escoamento e de bolhas grandes com baixo tempo de residência (KANTARCI *et al.*, 2005). Neste tipo de regime, o tamanho médio das bolhas é determinado de acordo com os fenômenos de quebra e coalescência, que por sua vez são controlados pelas taxas de dissipação de energia no leito (THORAT e JOSHI, 2004).

O regime pistonado também conhecido como *slug flow* só foi observado em colunas de pequeno diâmetro em escala laboratorial, quando submetidas a velocidades superficiais de gás muito elevadas (HYNDMAN *et al.*, 1997). Este regime ocorre quando grandes bolhas

se estabilizam com as paredes da coluna, segundo HIBIKI e ISHII (2000), o escoamento é produzido à medida em que as bolhas maiores alcançam as menores, coalescendo com as mesmas ou as arrastando conforme se movimentam.

Na Figura 2.2, pode-se observar graficamente a correlação existente entre os regimes de escoamento em uma coluna de bolhas com respeito ao diâmetro da mesma e a velocidade superficial de gás. Nota-se que independentemente do diâmetro da coluna, a baixas velocidades superficiais de gás, o regime estabelecido na coluna de bolhas é o homogêneo. Conforme se aumenta a velocidade da fase gasosa, dois regimes podem ocorrer: para colunas de diâmetros pequenos, o regime pistonado se desenvolve na coluna. Enquanto que para diâmetros maiores, o regime heterogêneo se estabelece na coluna de bolhas.

Uma característica adicional extraída do gráfico, consiste na região de transição recorrente no sistema quando há a passagem de um regime de escoamento para outro. Além disso, é notável a existência de uma faixa de diâmetro de coluna de bolhas, para a qual o aumento na velocidade superficial de gás acarreta na passagem do regime homogêneo à região de transição e a partir de então, o regime de escoamento na coluna permanece sempre na região de transição.

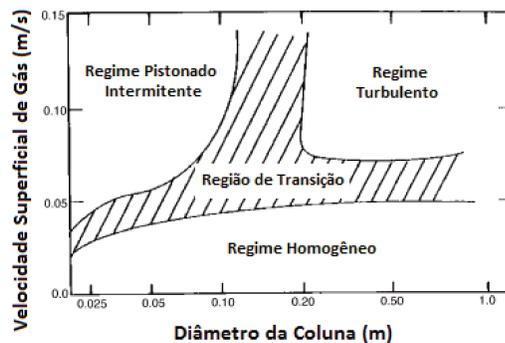


Figura 2.2: Regimes de escoamento em função da velocidade do gás e do diâmetro da coluna (KANTARCI *et al.*, 2005).

## 2.3 Regimes de Partículas Sólidas

Regimes de escoamento de partículas sólidas são relevantes para colunas de bolhas em leito de lama, pois permitem determinar a fração volumétrica de sólidos crítica, definida por RA-

MACHANDRAN e CHAUDHARI (1983) como a quantidade máxima de partículas mantida em completa suspensão sob determinadas condições operacionais.

A Equação 2.1, deduzida a partir de análises dimensionais proposta por ROY *et al.* (1964) pode ser utilizada para este fim:

$$\frac{w_{max}}{\rho_l} = 6,8 \times 10^{-4} \frac{C_{visc} d_T u_g \rho_g}{\mu_g} \left( \frac{\sigma \epsilon_g}{u_g \mu_l} \right)^{-0,23} \left( \frac{\epsilon_g u_{tp}}{u_g} \right)^{-0,18} \gamma'^{-3} \quad (2.1)$$

em que,  $w_{max}$  representa a massa de sólidos máxima em suspensão,  $\rho$  a massa específica,  $C_{visc}$  é um fator de correção,  $d_T$  o diâmetro da coluna,  $u$  velocidade superficial da fase,  $\mu$  a viscosidade molecular,  $\sigma$  a tensão superficial,  $\epsilon$  a fração volumétrica da fase e  $u_{tp}$  a velocidade terminal de sedimentação das partículas.

O fator de correção para a viscosidade é definido como na Equação 2.2:

$$C_{visc} = 2,32 \times 10^{-1} - 1,788 \times 10^{-1} \log \mu_l + 1,026 \times 10^{-1} (\log \mu_l)^2 \quad (2.2)$$

$C_{visc}$  é expresso em poise ( $g \text{ cm}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) e o fator de molhabilidade  $\gamma'$  pode ser considerado igual à unidade para a maioria dos catalisadores (ROY *et al.*, 1964).

A estimativa da fração volumétrica de gás  $\epsilon_g$  pode ser feita por meio de diversas correlações encontradas na literatura. No entanto, por meio de análises dimensionais, AKITA e YOSHIDA (1973) propuseram uma correlação capaz de estimar com boa aproximação este valor de fração volumétrica. Esta expressão é observada pela Equação 2.3:

$$\frac{\epsilon_g}{(1 - \epsilon_g)^4} = 0,2 \left( \frac{g d_T^2 \rho_l}{\sigma} \right)^{1/8} \left( \frac{g d_T^3 \rho_l^2}{\mu_l^2} \right)^{1/12} \left( \frac{u_g}{\sqrt{g d_T}} \right) \quad (2.3)$$

em que  $g$  é a aceleração do campo gravitacional.

A velocidade de sedimentação da alumina depende do tipo de regime em que a fase sólida se encontra, cada um se estabelece de acordo com uma faixa de número de Reynolds da partícula e suas correspondentes correlações matemáticas são representadas pelas Equações 2.4, 2.5 e 2.6:

a) Regime de Stokes

$$u_{tp} = \frac{g d_p^2 (\rho_s - \rho_l)}{18 \mu_l} \quad Re_p < 0,4 \quad (2.4)$$

b) Regime Intermediário

$$u_{tp} = d_p \left[ 0,0178 \frac{g^2(\rho_s - \rho_l)^2}{\rho_l \mu_l} \right]^{1/3} \quad 0,4 < Re_p < 500 \quad (2.5)$$

c) Regime de Newton

$$u_{tp} = \left[ \frac{3.1 d_p g (\rho_s - \rho_l)}{\rho_l} \right]^{1/2} \quad 500 < Re_p < 2 \times 10^5 \quad (2.6)$$

A definição do número de Reynolds da partícula em função da velocidade de sedimentação é dado pela Equação 2.7:

$$Re_p = \frac{u_{tp} \rho_l d_p}{\mu_l} \quad (2.7)$$

## 2.4 Regimes de Bolhas

Bolhas se movendo livremente sob a ação da gravidade geralmente são classificadas em três categorias distintas de acordo com CLIFT, GRACE e WEBER (1978):

- "Esféricas": em geral, pode-se considerar uma bolha com formato esférico quando a relação entre o eixo menor pelo eixo maior for de até 0,9. Isso ocorre principalmente quando as forças viscosas e/ou as tensões interfaciais são mais relevantes do que as forças inerciais.
- "Elipsoidais": o termo "elipsoidal" é comumente usado para denominar bolhas achatadas nos pólos, que não apresentam concavidades ao longo de sua superfície. As formas comuns neste grupo diferem bastante de elipses perfeitas, pois as bolhas sofrem dilatações e deformações ao se movimentar através do meio fluido. Isso torna a determinação de sua forma exata uma tarefa bastante complexa.
- "Touca": bolhas grandes tendem a adquirir uma base chata, lembrando formas esféricas ou elipsoidais que sofreram um corte transversal. Algumas bolhas sofrem um simples achatamento plano, enquanto outras apresentam diferentes graus de achatamento em suas bases, fazendo parecer uma espécie de "saia" na base da bolha.

A caracterização do regime de bolhas pode ser realizado por meio da relação entre alguns números adimensionais, representados pelas Equações 2.8, 2.9 e 2.10.

a) Número de Reynolds da Bolha

$$Re_b = \frac{\rho_l \cdot |\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_g| \cdot d_b}{\mu_l} \quad (2.8)$$

b) Número de Eötvös

$$Eo = \frac{\mathbf{g} \cdot (\rho_l - \rho_g) \cdot d_b^2}{\sigma} \quad (2.9)$$

c) Número de Morton

$$M = \frac{\mathbf{g} \cdot (\rho_l - \rho_g) \cdot \mu_l^4}{\rho_l^2 \cdot \sigma^3} \quad (2.10)$$

em que  $d_b$  é o diâmetro da bolha e  $\sigma$  a tensão superficial entre o líquido e o gás.

Na Figura 2.3, representa-se graficamente a correlação entre os parâmetros adimensionais anteriormente citados, para a determinação da geometria de bolha predominante no escoamento. Observa-se que para baixos números de Reynolds, os efeitos viscosos são relevantes e o escoamento é laminar, neste caso, a geometria da bolha é esférica. Conforme o número de Reynolds aumenta juntamente com o número de Eötvös, os efeitos viscosos passam a ser menos significativos e os efeitos de forma começam a exercer maior influência no escoamento da bolha. Esta então passa a sofrer distorções em sua forma desde a geometria elipsoidal até a geometria de touca esférica, predominante quando o regime atinge o estágio inercial.

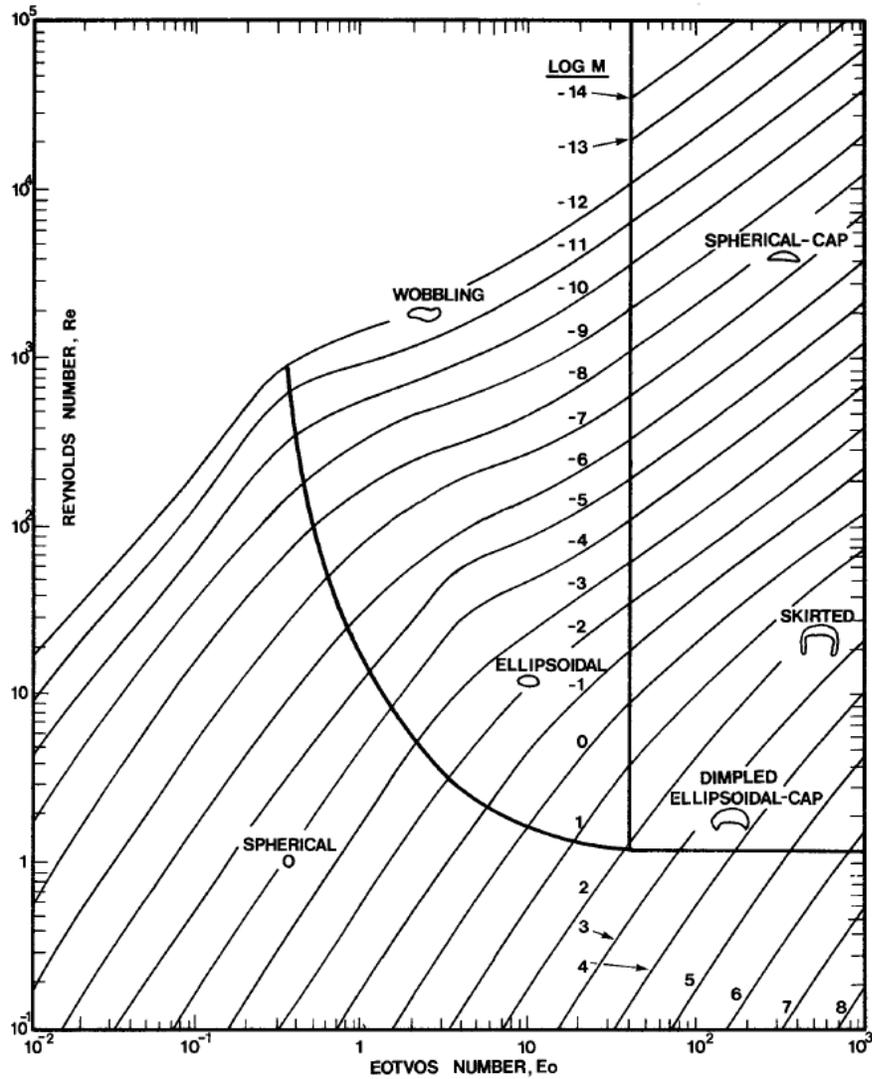


Figura 2.3: Regimes de formas geométricas de bolhas (CLIFT, GRACE e WEBER, 1978).

## 2.5 Coluna de Bolhas: Sistemas Gás-Líquido e CFD

Inúmeras são as publicações encontradas na literatura abordando a CFD aplicada a colunas de bolhas. O motivo para tanto, consiste principalmente no poder apresentado pela fluidodinâmica computacional em aproximar os resultados numéricos dos dados experimentais. Estudos pioneiros começaram a explorar o tema analisando sistemas bifásicos do tipo gás-líquido. A modelagem matemática, a metodologia numérica, além da influência dos parâmetros de processo e construtivos foram e ainda são amplamente explorados, pois o conhecimento pleno do tema ainda não foi alcançado.

Por muito tempo a natureza complexa do escoamento multifásico representou um grande empecilho para projetos de colunas de bolhas. Com isso, muitos estudos surgiram com a finalidade de compreender melhor a relação existente entre o padrão de escoamento e as características construtivas de uma coluna de bolhas, analisando para tanto variáveis como fração volumétrica de gás, perda de carga, mistura axial das fases gás e líquido, entre outros parâmetros. JOSHI *et al.* (2001) apresenta uma extensa compilação organizada de maneira cronológica sobre a evolução da modelagem e do projeto de colunas de bolhas. O autor classifica a evolução cronológica da modelagem do padrão de escoamento em colunas de bolhas em três fases bem distintas a saber:

- Fase I: nesta fase inicial, o escoamento era considerado laminar ( $Re \ll 1$ ) ou invíscido e a contribuição da turbulência na transferência de quantidade de movimento não era considerada. Em geral, muitas hipóteses eram adotadas com a finalidade de se obter uma solução analítica do problema.
- Fase II: neste estágio de desenvolvimento, a turbulência passou a ser incluída como fenômeno de transporte, mas modelos bem simplificados eram utilizados para estimar a difusividade turbulenta. Os modelos não consideravam interações entre as fases do sistema e basicamente assumiam-se que os escoamentos era unidirecionais.
- Fase III: nesta etapa, modelos mais elaborados de fechamento, tais como k-epsilon e modelos de tensores de Reynolds, têm sido utilizados para prever a difusividade turbulenta. Nota-se uma ênfase maior na formulação completa das equações de continuidade e conservação da quantidade de movimento, além de tentar considerar todos os fenômenos reais envolvidos.

Nas fases I e II muitas suposições eram realizadas e um forte grau de empirismo era conferido à modelagem do escoamento. Já na fase III, o foco em se obter um modelo mais completo, somado ao avanço substancial da fluidodinâmica computacional, fizeram com que os modelos atuais se tornassem mais robustos e com isso, muito tem se ganhado em termos de se compreender melhor a hidrodinâmica existente.

SOKOLICHIN *et al.* (2004) avaliam o estado em que se encontravam a modelagem e simulação do escoamento bifásico gás-líquido em coluna de bolhas. Os principais pontos de discussão ocorrem com o intuito de se chegar às simplificações plausíveis de serem adotadas na modelagem de dois fluidos. Dessa maneira, obtém-se um modelo que pode ser resolvido de forma mais simples. O trabalho também questiona quais efeitos físicos são indispensáveis para uma modelagem bem sucedida do escoamento multifásico em questão. Após uma completa introdução ao tema e uma extensa discussão, conclui-se que para as distintas forças de interação entre as fases gasosa e líquida, a pressão e a força de arraste são as variáveis mais importantes na modelagem do escoamento em uma coluna de bolhas.

KANTARCI *et al.* (2005) revisam a literatura publicada e mostram o estado atual alcançado até então, bem como quais temas ainda permanecem inconclusivos e sob demanda de mais pesquisa. Do ponto de vista hidrodinâmico, discorre-se que a velocidade superficial do gás exerce uma importante influência sobre a fração volumétrica da fase gasosa. Tanto para colunas de bolhas, quanto para colunas de bolhas em leito de lama, é comum constatar-se o aumento na fração volumétrica de gás com a elevação da velocidade superficial da fase gasosa. Nota-se que existe uma variação proporcional entre os dois parâmetros, quando se trabalha no regime homogêneo, enquanto que no regime heterogêneo, esta variação é menos pronunciada. A fase líquida possui uma grande influência sob a formação e tendência de coalescência das bolhas, constituindo então um importante fator de influência sobre a fração volumétrica do gás. Um aumento na viscosidade do líquido favorece a formação de bolhas maiores, implicando em velocidades de ascensão mais elevadas e conseqüentemente uma fração volumétrica de gás menor.

TABIB *et al.* (2008) expõem um extenso trabalho em relação à CFD aplicada a sistemas gás-líquido em colunas de bolhas. Os autores ressaltam que as forças interfásicas de interação entre os componentes do escoamento, juntamente com os modelos de turbulência, exercem papel fundamental na correta captura e descrição física da hidrodinâmica do sistema. Nas simulações com diferentes modelos de arraste, a correlação utilizada por ZHANG

e VANDERHEYDEN (2002) foi aquela que melhor aproximou os resultados numéricos dos experimentais. Observa-se que esta consiste em uma expressão utilizada para bolhas esféricas, pois foi fundamentada na fórmula proposta por WHITE (1974). O modelo de Ishii-Zuber também foi testado, mas não em sua totalidade, os autores utilizaram apenas a correlação que considera geometria das bolhas como elipsóides. Se analisada por esta perspectiva, nota-se a coerência teórica entre os modelos, pois ambos correspondem a regimes distintos de bolhas e assim, não se espera uma performance igual para os dois. O trabalho também compara diferentes modelos de turbulência e conclui que tanto simulações em LES (*Large Eddy Simulation*), quanto em RSM (*Reynolds Stress Model*) não compensam o custo computacional extra em comparação com o modelo k-epsilon, quando for necessário obter informações médias em simulações tridimensionais de colunas de bolhas.

DIONISIO (2008) conduz simulações em CFD adicionando dois novos parâmetros geométricos à coluna de bolhas operando em regime homogêneo: distribuidor da fase gasosa e recirculação externa. O autor obtém sucesso ao considerar apenas o arraste como força interfásica de interação gás-líquido, caracterizada pelo modelo de Ishii-Zuber. Para o modelo de turbulência, como se comparam os resultados numéricos e experimentais médios, utilizou-se o modelo de duas equações k-epsilon. Neste caso, a inserção do distribuidor da fase gasosa melhorou significativamente os resultados obtidos para frações volumétricas de gás ao longo da coluna, apesar do aumento do esforço computacional. As simulações foram também capazes de captar corretamente o perfil de velocidades axiais ao longo da coluna principal, uma vez que em função da recirculação externa, o fluxo de líquido é ascendente na coluna principal e descendente na coluna de recirculação.

LABORDE-BOUTET *et al.* (2009) apresentam resultados obtidos de pesquisas feitas comparando-se diferentes modelos de turbulência em colunas de bolhas. Em uma abordagem preliminar para o regime heterogêneo, diversas hipóteses simplificadoras foram adotadas com a finalidade de avaliar modelos RANS (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*), os já conhecidos modelos de duas equações e seus variantes: k-epsilon padrão, RNG k-epsilon e k-epsilon realizável. Para o sistema analisado, o modelo RNG k-epsilon foi aquele que melhor capturou as características do escoamento, verificando uma consistência teórica, uma vez que o modelo foi desenvolvido para descrever melhor escoamentos turbilhonares e escalas mais largas de turbulência. Em particular, observou-se uma boa performance do mesmo em fornecer resultados qualitativos para a taxa de dissipação da turbulência e viscosidade turbulenta.

EKAMBARA e DHOTRE (2010) ampliam um pouco mais a discussão com respeito aos modelos de turbulência aplicados a colunas de bolhas. Além de avaliarem os modelos k-epsilon e RNG k-epsilon, são incluídos na análise os modelos k-ômega, RSM e LES. O modelo de arraste utilizado foi o de Ishii-Zuber e os autores também consideraram outras forças interfásicas em sua modelagem como a forças de sustentação (*lift*), de lubrificação (*lubrication wall*) e de dispersão turbulenta (*turbulent dispersion*). Os modelos RSM e LES mostraram performances superiores ao descrever a região próxima ao distribuidor da fase gasosa, apresentando as simulações em LES melhores aproximações com dados experimentais. Contudo, os autores ressaltam que este modelo exige um alto poder computacional e pode ser instável, fazendo-se necessário utilizar bons valores iniciais, tais como resultados numéricos adquiridos de simulações preliminares com modelos RANS. Um outra conclusão obtida por este estudo, foi a de que os modelos RANS continuam apresentando bons resultados quando o objetivo é obter características em média temporal do escoamento.

PANG e WEI (2010) realizam análises qualitativas de diferentes modelos de arraste em escoamentos de colunas de bolhas, para números de Reynolds baixos e médios. O trabalho apresenta uma interessante discussão a cerca das forças de arraste (*drag*) e os principais e mais populares modelos são simulados para casos em que o número de Reynolds da bolha varia entre 1 e 100. Em outras palavras, são escoamentos tipicamente homogêneos, com bolhas bem espaçadas umas das outras, em que o arraste da fase gasosa é predominantemente função do número de Reynolds da bolha. Os resultados mostram uma forte tendência dos modelos avaliados em apresentar um mesmo perfil para o fator adimensional de arraste, bem como para a velocidade de ascensão da bolha, mesmo consistindo de correlações bem distintas umas das outras. No entanto, a correlação proposta por WHITE (1974) e utilizada por ZHANG e VANDERHEYDEN (2002) foi a correlação que mostrou características médias mais razoáveis para descrever o arraste da fase gasosa, neste caso em análise.

SILVA *et al.* (2010) dão continuidade ao trabalho de DIONISIO (2008), avaliando agora o regime heterogêneo em uma coluna de bolhas com distribuidor da fase gasosa acoplado ao fundo da mesma e com uma coluna de recirculação externa. Esta mudança no regime de escoamento, em geral, faz com que efeitos como a quebra e coalescência de bolhas passem a ser significativos, sendo necessário modelar tais fenômenos. Neste caso, a modelagem das forças interfásicas foi feita exclusivamente pela força de arraste, utilizando o modelo de Ishii-Zuber e a turbulência descrita pelo modelo k-epsilon. Para a quebra das bolhas, utilizou-se o modelo de Luo e Svendsen, enquanto que para a coalescência o modelo de Prince e

Blanch foi o adotado. Os autores compararam dois casos de estudo: o primeiro adotando um diâmetro médio de bolhas e o segundo prevendo um balanço populacional de bolhas com diferentes categorias de diâmetros. Na região onde o escoamento se encontra plenamente desenvolvido, os resultados numéricos obtidos mostraram uma melhora na previsão da fração volumétrica de gás próxima à parede da coluna, quando o modelo de balanço populacional foi utilizado. A inclusão do distribuidor da fase gasosa conduziu a uma diminuição na fração volumétrica local, fazendo com que o perfil radial obtido numericamente para este parâmetro fosse subestimado quando comparado aos dados experimentais.

## **2.6 Coluna de Bolhas: Sistemas Gás-Líquido-Sólido e CFD**

A inserção de uma fase sólida no escoamento não implica apenas em um incremento no nível de complexidade da hidrodinâmica de uma coluna de bolhas. Ela também traz desafios quanto à medição experimental de variáveis operacionais importantes já existentes e consolidadas em sistemas bifásicos, além de gerar a necessidade de se analisar novos parâmetros criados pela adição da terceira fase. O interesse de se estudar as colunas de bolhas em leito de lama é de longa data, pois elas encontram aplicações em diversos processos produtivos, tais como liquefação do carvão mineral, recuperação de partículas finas de minérios por flotação, produção de combustíveis líquidos pela síntese de Fischer-Tropsch e hidrocraqueamento catalítico na indústria petroquímica.

ITYOKUMBUL (1994) apresenta um método de resolução analítico para prever a velocidade de sedimentação da partícula em uma coluna de bolhas em leito de lama. Uma grande motivação para este trabalho era o fato de existirem publicados muitos dados experimentais inconsistentes referentes à partícula sólida, dificultando o processo de desenvolvimento de modelos confiáveis capazes de prever o comportamento hidrodinâmico do sólido. Por meio de comparações experimentais, o autor confirma que as Equações 2.4 e 2.5 propostas por RAMACHANDRAN e CHAUDHARI (1983) fornecem boas aproximações com relação aos dados experimentais. Além disso, constata-se que a velocidade de sedimentação em uma coluna de bolhas em leito de lama é maior do que a observada em um sistema de duas fases líquido-sólido.

LI e PRAKASH (1997) realizam estudos hidrodinâmicos experimentais em uma coluna de bolhas em leito de lama. Os autores medem as frações volumétricas médias de gás em

diversas velocidades superficiais da fase gasosa e sob diversas concentrações de sólidos. O estudo mostra uma redução na fração volumétrica de ar com o aumento da concentração de sólidos no sistema, a taxa com que ocorre este decréscimo é acentuada inicialmente, mas conforme o leito se torna mais concentrado ela passa a ser mais tênue. Após uma concentração acima de 40 % em volume de sólidos, observou-se um leve aumento na fração volumétrica do ar, explicada pela maior retenção de bolhas menores em virtude do aumento da viscosidade aparente da lama.

GANDHI *et al.* (1999) estudam o comportamento hidrodinâmico de uma coluna de bolhas em leito de lama sob diferentes velocidades superficiais de gás e diferentes concentrações de sólidos. A análise da fração volumétrica axial de gás mostrou que neste estudo, ocorre a supressão da quebra de bolhas próximo à região do distribuidor, ocasionada pela presença de partículas sólidas finas. Dessa maneira, a diminuição da fração volumétrica global de gás no leito, observada com o aumento da concentração de sólidos estaria associada à redução na taxa de quebra de bolhas. A influência da velocidade superficial de gás não foi significativa para o perfil axial da fração volumétrica de sólidos nas condições estudadas.

KRISHNA *et al.* (2001) observam a aparente distância entre os trabalhos acadêmicos publicados e as condições reais em que operam as colunas de bolhas em leito de lama industriais. Com isso, desenvolvem uma metodologia para dimensionar uma coluna de bolhas em escala industrial para a síntese de Fischer-Tropsch. Os autores descrevem a hidrodinâmica de uma população de bolhas em um leito de lama concentrado de parafina-óleo para diferentes diâmetros de colunas de bolhas. A experimentação permite concluir que neste caso, a hidrodinâmica das bolhas em um leito de lama de parafina-óleo segue um padrão muito próximo de um óleo altamente viscoso (*Tellus Oil*). Por meio de simulações bidimensionais axissimétricas em CFD de um sistema ar-*Tellus Oil*, os autores extrapolam os resultados hidrodinâmicos obtidos experimentalmente para a escala industrial. O trabalho apresenta um caso bem sucedido de extrapolação, mostrando que o procedimento pode ser útil em alguns casos específicos. Quando aliado à fluidodinâmica computacional, é possível descrever ou até mesmo fazer algumas previsões hidrodinâmicas do escoamento de colunas comerciais.

MATONIS *et al.* (2002) conduzem simulações bi e tridimensionais transientes em CFD de uma coluna de seção transversal retangular. A coluna opera em um regime homogêneo em que as partículas sólidas se encontram fluidizadas com gás e líquido circulando pelo leito de forma contínua. Os autores ressaltam que um dado importante a ser alimentado

em seu modelo é o valor de viscosidade aparente da fase sólida, que neste caso é medida experimentalmente com um viscosímetro Brookfield. Em sua modelagem, são considerados apenas o arraste experimentado pela bolha ao longo do leito viscoso e as interações sólido-sólido entre as partículas contidas no sistema. Os resultados obtidos numericamente são comparados com os experimentais e mostram boas aproximações para as condições analisadas.

KANTARCI *et al.* (2005) em sua revisão da literatura, analisam o comportamento hidrodinâmico na coluna de bolhas quando uma terceira fase sólida é adicionada ao sistema. Como uma tendência geral de diversos trabalhos publicados, nota-se uma redução na fração volumétrica da fase gasosa com a introdução de partículas sólidas em um sistema gás-líquido. Além disso, é comumente observado que o aumento na concentração de sólidos contribui para uma gradativa redução da fração volumétrica de gás no leito. Isto se dá pelo fato de na presença de partículas sólidas constatar-se uma menor retenção de bolhas pequenas, acompanhada pelo aumento de bolhas maiores na coluna. A presença de sólidos está relacionada à elevação da viscosidade aparente da lama, acentuada conforme se aumenta a concentração de sólidos, que por sua vez favorece a formação de bolhas de maior tamanho. Como se sabe, a velocidade de ascensão das bolhas é mais elevada, quanto maior o diâmetro das mesmas.

SCHALLENBERG *et al.* (2005) realizam simulações transientes tridimensionais em CFD de um sistema gás-líquido-sólido em coluna de bolhas. O leito é carregado com 10 % em volume de partículas sólidas, com diâmetro médio de 3 mm e a coluna opera em regime de semi-batelada. Os autores apontam para a importância de se considerar principalmente a interação gás-sólido em regimes homogêneos para assegurar a correta fluidização da fase sólida no leito. Esta interação representa a dificuldade encontrada pela bolha ao se movimentar através do leito, em virtude da presença de partículas sólidas em seu caminho. Neste estudo, utiliza-se um modelo para a interação gás-sólido em que a sua contribuição é bastante expressiva para frações volumétricas de gás de até 5,5 % em volume, entre 5,5 % e 12,0 % a interação passa a ser pouco representativa e acima dos 12,0 % em volume, ela é desprezível.

YANG *et al.* (2007) fazem uma revisão da literatura para a formação de bolhas e hidrodinâmica de sistemas gás-líquido-sólido. No trabalho, encontra-se um conteúdo bastante detalhado sobre técnicas de medição intrusivas e não intrusivas, comportamento de bolhas isoladas, escoamento de uma população de bolhas e uma seção dedicada à CFD aplicada aos sistemas gás-líquido-sólido. Para sistemas trifásicos com a fase sólida pequena e leve é comum observar padrões de comportamento de bolhas muito semelhante em líquidos viscosos.

Esta semelhança é relacionada ao fato de que nesses sistemas, a mistura sólido-líquido pode ser tratada como um meio pseudo-homogêneo de viscosidade maior do que a do líquido. Por outro lado, se a fase sólida é composta por partículas grandes e/ou pesadas, o comportamento da bolha é diferente variando caso a caso.

JIA *et al.* (2007) conduzem simulações transientes tridimensionais em CFD de um sistema gás-líquido-sólido em uma coluna de bolhas de seção transversal quadrada. A modelagem proposta considera a força de arraste exercida pela fase líquida nas fases gás e sólido. Além disso, os autores consideram a força de sustentação (*lift*) para as duas fases dispersas. A interação gás-sólido não foi considerada neste caso, juntamente com as demais forças interfásicas, pois causavam a divergência nos resultados numéricos. Um modelo MUSIG (*Multiple Size Group*) foi adotado para a determinação do diâmetro médio de Sauter e a quebra e a coalescência das bolhas também foram considerados neste caso. A coluna foi carregada com 2 % (w/v) de esferas de gel de alginato de diâmetro médio 3,5 mm. As simulações apresentaram boas aproximações com a experimentação para frações volumétricas locais de gás e velocidade axial de líquido em média temporal.

WU *et al.* (2008) aplicam uma nova técnica de medição de parâmetros hidrodinâmicos em uma coluna de bolhas em leito de lama de escala laboratorial. A técnica consiste em utilizar uma sonda de quatro pontas para medir importantes variáveis operacionais de uma coluna de bolhas. Para diferentes velocidades superficiais e diferentes concentrações de sólidos, a sonda pode se deslocar radialmente pela seção transversal da coluna. Para cada condição experimental, podem-se medir parâmetros dinâmicos da bolha como a fração volumétrica local de gás, o comprimento médio da corda da bolha e a sua velocidade de ascensão. Os autores chamam a atenção para o fato de a coluna utilizada nos experimentos ser pequena, podendo os efeitos de parede ter importância para os parâmetros analisados. Por isso, recomendam a investigação em colunas de dimensões maiores como uma atividade futura.

TROSHKO e ZDRAVISTCH (2009) utilizam a fluidodinâmica computacional para simular uma coluna de bolhas em leito de lama para a síntese de Fischer-Tropsch. A coluna utilizada possui escala laboratorial e opera em semi-batelada, com gás de síntese ( $\text{CO} + \text{H}_2$ ) passando continuamente através do leito. As simulações são eulerianas, transientes e tridimensionais, considerando-se um sistema bifásico gás-lama, pela hipótese de que a lama é perfeitamente misturada. Os autores utilizam um balanço populacional de bolhas para determinar um diâmetro de Sauter e a partir de então obter um modelo de força interfásica

de arraste. No entanto, mostra-se que o diâmetro de Sauter só é apropriado em casos em que o coeficiente adimensional de arraste ( $C_D$ ) tiver uma fraca dependência com relação ao diâmetro da bolha.

## **2.7 Fechamento: Hidrodinâmica em Coluna de Bolhas**

Nas últimas décadas, extensivos têm sido os estudos referentes a colunas de bolhas publicados na literatura. Nota-se um esforço inicial em compreender a hidrodinâmica de um sistema mais simples, ou seja, preliminarmente muitos pesquisadores adotaram sistemas binários do tipo gás-líquido a fim de compreender melhor a interação entre as fases, bem como quais fenômenos envolvidos no escoamento. Embora muito tenha se descoberto, ainda existem tópicos que permanecem em aberto e são temas de discussões que por vezes dividem os estudiosos no assunto em lados completamente opostos.

Para as forças interfásicas, conclui-se que a força de arraste exerce uma grande influência sobre o escoamento da fase dispersa. Contudo, ainda não são conclusivas a existência e influência de outras forças interfásicas tais como a força de sustentação, de lubrificação e de dispersão turbulenta. Apesar disso, nota-se que com a escolha de um bom modelo de arraste, é possível obter boas aproximações numéricas com dados experimentais, mas para tanto, o modelo de turbulência também é vital para o sucesso nas simulações em CFD. Em colunas de bolhas, para a análise de dados em média temporal, observa-se que modelos de duas equações, como o k-epsilon, são capazes de fornecer resultados numéricos satisfatórios quando comparados à experimentação.

Em colunas de bolhas em leito de lama, comumente, tem-se uma fase sólida adicionada ao sistema para exercer a função de catalisador de reações químicas. Em particular para simulações em CFD, a dificuldade em se obter dados experimentais de parâmetros hidrodinâmicos de tais sistemas representa uma grande barreira para o desenvolvimento de estudos na área. Poucos são os trabalhos publicados em que se abordam colunas de bolhas em leito de lama e CFD, sendo a maioria deles utilizando apenas uma concentração pequena de sólidos (de 0,5 a 4,0 %). De modo geral, estes estudos mostram que uma abordagem Euleriana do problema, assim como aplicada para sistemas gás-líquido, também pode ser adotada para sistemas gás-líquido-sólido em colunas de bolhas. Entretanto, o estudo hidrodinâmico de tal sistema ainda se encontra em fase primordial e necessita de um maior número de estudos.

## Capítulo 3

# Modelagem Matemática e Método Numérico

Simulações em fluidodinâmica computacional se fundamentam nas equações de balanço de conservação de massa, quantidade de movimento e energia. As mesmas são tratadas em sua forma diferencial e resolvidas numericamente pela ferramenta computacional. O modo como cada uma será escrita ou até mesmo simplificada depende das condições de operação e hipóteses adotadas pelo pesquisador.

Quando o sistema é isotérmico, como no caso em análise, os efeitos da transferência de calor são desprezíveis e pode-se desconsiderar a equação da conservação de energia na modelagem matemática do problema. Para as condições consideradas, assume-se que a transferência de massa entre as fases do sistema é pouco significativa. Além disso, no sistema em estudo não há reações químicas, sendo assim, não se faz necessário um balanço das espécies envolvidas.

A modelagem matemática adotou um enfoque Euleriano, em que as propriedades do fluido são consideradas como sendo função do espaço e do tempo em um referencial inercial. Usualmente, referem-se às equações conservativas representadas sob uma perspectiva Euleriana como modelo Euleriano. Nele, as fases são consideradas meios contínuos, podendo-se negligenciar as características moleculares da matéria e interpenetrantes entre si, hipótese que possibilita as fases distintas a ocuparem uma mesma região do espaço em um determinado instante. Assim, cada fase pode ter suas propriedades médias de transporte determinadas dentro de um domínio espacial contínuo, por meio de uma média volumétrica (MEIER (1998)).

No entanto, representar as equações de conservação Eulerianas em sua forma média implica em um aumento no número de variáveis do sistema, uma vez que é introduzida uma fração volumétrica média no conjunto de equações. Esta fração é definida como sendo a probabilidade de uma fase estar presente em determinado ponto no tempo e no espaço (RUSCHE (2002)). Isto leva como consequência a um desequilíbrio entre os números de equações e variáveis, fazendo-se necessário utilizar as equações de fechamento a fim de estabelecer novamente o equilíbrio entre as duas entidades.

Em casos de escoamentos multifásicos, a formulação das equações de conservação é feita individualmente para cada fase do sistema. As equações são escritas de maneira bastante similar, mas cada uma fica expressa em função da fração volumétrica correspondente à sua fase. Na literatura, existem boas referências tais como PATANKAR (1984) e MALISKA (2004), em que são feitas as deduções de cada balanço, bem como sua apresentação na forma diferencial, tão comumente vistas em trabalhos publicados na área de CFD.

## 3.1 Equações de Fechamento

### 3.1.1 Frações volumétricas

As frações volumétricas de cada fase são calculadas conforme as Equações 3.1, 3.2 e 3.3:

$$\epsilon_g = \frac{V_g}{V_g + V_l + V_p} \quad (3.1)$$

$$\epsilon_l = \frac{V_l}{V_g + V_l + V_p} \quad (3.2)$$

$$\epsilon_p = \frac{V_p}{V_g + V_l + V_p} \quad (3.3)$$

sendo  $V$  o volume da ocupado pela fase,  $\epsilon$  a fração volumétrica, o subíndice  $g$  corresponde à fase gasosa, o subíndice  $l$  corresponde à fase líquida e o subíndice  $p$  corresponde à fase sólida.

Satisfazendo assim, a seguinte condição:

$$\epsilon_g + \epsilon_l + \epsilon_p = 1 \quad (3.4)$$

### 3.1.2 Força de Arraste

A força de arraste se origina da resistência ao movimento experimentada por um corpo imerso em um meio fluido. Para escoamentos em colunas de bolhas, basicamente, esta força se manifesta através do arraste viscoso, que ocorre principalmente no interior da camada limite e é gerado pela tensão criada pela viscosidade do meio fluido. Além disso, há o arraste de forma, diretamente relacionado ao tamanho e à forma da partícula, sendo gerado pela distribuição desigual de pressão ao redor da bolha em movimento.

Para baixos números de Reynolds, o escoamento se encontra no regime viscoso em que as bolhas são predominantemente esféricas. Neste regime, a magnitude de contribuição tanto do arraste viscoso, quanto do arraste de forma varia de acordo com o número de Reynolds da bolha. No regime de partículas distorcidas, inicia-se o processo de separação do escoamento, originando vórtices na região posterior das bolhas. Um aumento do número de Reynolds da bolha favorece o arraste de forma, quando se atinge um valor crítico de número de Reynolds ( $\sim 100$ ), o arraste viscoso pode ser desconsiderado, pois o arraste resultante é praticamente todo devido ao arraste de forma. Ao aumentar ainda mais o número de Reynolds o escoamento migra gradualmente para o regime inercial, em que as bolhas distorcidas influenciam não apenas as bolhas vizinhas, mas também o meio fluido ao redor delas (PANG e WEI, 2010).

Em geral, correlações existentes na literatura para o cálculo do coeficiente de arraste são apresentadas em função do número de Reynolds da bolha e/ou do número de Eötvös. Quando a fase dispersa não é deformável, o coeficiente de arraste é equacionado com base no número de Reynolds da bolha, mostrando certa consistência teórica, uma vez que o número de Reynolds representa uma razão entre as forças inerciais e viscosas, ambas relevantes para o regime viscoso. Quando o escoamento se encontra no regime de partículas distorcidas, a forma da bolha assume um papel relevante no escoamento e o número de Eötvös, que é uma relação entre as forças de empuxo e de tensão superficial, aparece na modelagem do coeficiente de arraste.

Nas equações de conservação da quantidade de movimento, as forças de interação entre as fases gás-líquido e sólido-líquido são descritas pelos termos  $\mathbf{F}_{i,lq}$  e  $\mathbf{F}_{i,lp}$ , respectivamente. Estas forças são compostas por diversos efeitos físicos independentes, podendo ser matematicamente expressa pela soma de forças interfásicas como a força de arraste ( $\mathbf{F}_D$ ), a força de sustentação ( $\mathbf{F}_L$ ), força de massa virtual ( $\mathbf{F}_{MV}$ ), força de dispersão turbulenta ( $\mathbf{F}_{DT}$ ),

entre outras. Sejam as forças entre um par de fases de mesma magnitude e sentidos opostos, então, tem-se que:

$$\mathbf{F}_{i,lg} = -\mathbf{F}_{i,gl} = \mathbf{F}_{D,lg} + \mathbf{F}_{L,lg} + \mathbf{F}_{MV,lg} + \mathbf{F}_{DT,lg} + \dots \quad (3.5)$$

$$\mathbf{F}_{i,lp} = -\mathbf{F}_{i,pl} = \mathbf{F}_{D,lp} + \mathbf{F}_{L,lp} + \mathbf{F}_{MV,lp} + \mathbf{F}_{DT,lp} + \dots \quad (3.6)$$

De acordo com SOKOLICHIN *et al.* (2004), a força de arraste é a força interfásica com contribuição predominante em relação às demais forças. Seguindo este extenso trabalho, ela será considerada como única força de interação entre as fases. A força de arraste exercida pela fase dispersa sobre a fase contínua pode ser calculada como:

$$\mathbf{F}_{D,lg} = \frac{3}{4} \frac{C_{D,lg}}{d_b} \rho_l \epsilon_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_l| (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_l) \quad (3.7)$$

$$\mathbf{F}_{D,lp} = \frac{3}{4} \frac{C_{D,lp}}{d_p} \rho_l \epsilon_p |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_l| (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_l) \quad (3.8)$$

onde,  $C_{D,lg}$  é o coeficiente adimensional de arraste da interação entre as fases gás-líquido e  $C_{D,lp}$  o coeficiente adimensional de arraste da interação entre as fases sólido-líquido.

A abordagem adotada consistiu em analisar os efeitos de diferentes leis de arraste para as interações gás-líquido e sólido-líquido. No presente trabalho, como se trata de um estudo inicial de um sistema trifásico, por ora, optou-se por não se estudar os efeitos de interação gás-sólido. Neste sentido, a seguir são apresentados os modelos de arraste utilizados nas simulações para análise de efeitos e performance.

## Arraste da Fase Dispersa Sólida

- **Modelo de Schiller e Naumann (1933)**

O modelo de Schiller-Naumann foi concebido para uma única partícula esférica rígida em escoamento. Sendo assim, é recomendado para casos diluídos, em que o escoamento da partícula sofre muito pouca influência das partículas ao seu redor. Matematicamente, o modelo pode ser representado por:

$$C_{D,lp} = \frac{24}{Re_p} \left(1 + 0,15 Re_p^{0,687}\right) \quad \text{se } Re_p < 1000 \quad (3.9)$$

$$C_{D,lp} = 0,44 \quad \text{se } Re_p > 1000 \quad (3.10)$$

A consideração de  $C_D$  igual a 0,44 é uma nova adaptação do modelo original, para predizer o correto comportamento no limite em que o regime se torna inercial (CFX-12 User's Guide, 2009).

- **Modelo de Wen e Yu (1966)**

O modelo de Wen-Yu é muito semelhante ao de Schiller Naumann, contudo ele leva em consideração um conjunto de partículas em escoamento. Este modelo é recomendável para sistemas com até 20 % de fração de sólidos. O equacionamento do modelo utilizado neste estudo foi o mesmo apresentado em JIA *et al.* (2007):

$$C_{D,lp} = \epsilon_p^{-1,65} \max \left( \frac{24}{Re'_p} \left( 1 + 0,15 (Re'_p)^{0,687} \right), 0,44 \right) \quad (3.11)$$

$$Re'_p = \epsilon_p Re_p \quad (3.12)$$

$$Re_p = \frac{\rho_l \cdot |\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_p| \cdot d_p}{\mu_l} \quad (3.13)$$

- **Modelo de Gidaspow (1994)**

O modelo de Gidaspow utiliza a equação de arraste de Wen e Yu para frações volumétricas da fase dispersa inferiores a 20 %, acima deste valor a equação é trocada por uma correlação de Ergun para escoamento em meios porosos. Este modelo é recomendado para sistemas com partículas sólidas densamente distribuídas e pode ser escrito como:

$$C_{D,lp} = C_{D,lp} (\text{Wen-Yu}) \quad \text{se } \epsilon_l > 0,80 \quad (3.14)$$

$$C_{D,lp} = 150 \frac{(1 - \epsilon_l)^2 \mu_l}{\epsilon_l d_p^2} + \frac{7}{4} \frac{(1 - \epsilon_l) \rho_l |\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_p|}{d_p} \quad \text{se } \epsilon_l < 0,80 \quad (3.15)$$

## Arraste da Fase Dispersa Gasosa

- **Modelo de Schiller e Naumann (1933)**

Conforme visto previamente, o modelo de Schiller-Naumann é correlacionado ao número de Reynolds da bolha e não considera a deformação da fase dispersa. As Equações 3.16 e 3.17 são as mesmas já apresentadas para o arraste da fase dispersa particulada, mas possuem seus subíndices atualizados para a fase dispersa fluida:

$$C_{D,lg} = \frac{24}{Re_b} (1 + 0,15Re_b^{0,687}) \quad \text{se } Re_b < 1000 \quad (3.16)$$

$$C_{D,lg} = 0,44 \quad \text{se } Re_b > 1000 \quad (3.17)$$

- **Modelo de White (1974)**

A correlação de WHITE (1974) calcula o coeficiente de arraste para esferas rígidas em uma ampla faixa de número de Reynolds. Esta expressão também é utilizada no modelo de ZHANG e VANDERHEYDEN (2002) e é representada por:

$$C_{D,lg} = \frac{24}{Re_b} + \frac{6}{1 + \sqrt{Re_b}} + 0,44 \quad \text{para } 0 \leq Re_b \leq 2 \times 10^5 \quad (3.18)$$

- **Modelo de Grace (1978)**

Este modelo foi desenvolvido a partir de dados de um sistema ar-água, para uma única bolha em escoamento. Quando uma partícula possui geometria elipsoidal, uma correlação para determinar o coeficiente adimensional de arraste é utilizada conforme proposto em CLIFT, GRACE e WEBER (1978). O modelo pode ser também aplicado para os regimes viscoso (bolhas esféricas) e inercial (bolhas em forma de touca esférica).

Para o regime viscoso, utiliza-se a correlação de coeficiente adimensional de arraste proposto por Schiller-Naumann (1933), pois nestes casos, o modelo apresenta uma boa aproximação para o arraste da bolha. Sendo assim, tem-se que:

$$C_{D,lg} (\text{esfera}) = \frac{24}{Re_b} (1 + 0,15Re_b^{0,687}) \quad (3.19)$$

Quando o sistema se encontra no regime de partículas distorcidas, o coeficiente adimensional de arraste é descrito pela correlação de CLIFT, GRACE e WEBER (1978), originada de um balanço entre as forças gravitacionais e de empuxo. A correlação é apresentada como:

$$C_{D,lg}(\text{elipse}) = \frac{4}{3} \frac{gd_b}{u_T^2} \frac{|\rho_l - \rho_g|}{\rho_l} \quad (3.20)$$

$$u_T = \frac{\mu_l}{\rho_l d_b} M^{-0,149} (J - 0.857) \quad (3.21)$$

com,

$$J = \begin{cases} 0,94 H^{0,751} & 2 < H \leq 59,3 \\ 3,42 H^{0,441} & H > 59,3 \end{cases} \quad (3.22)$$

$$H = \frac{4}{3} E_o M^{-0,149} \left( \frac{\mu_c}{\mu_{ref}} \right)^{-0,14} \quad (3.23)$$

e  $\mu_{ref} = 0,0009 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$  é a viscosidade molecular da água a uma temperatura de referência de 25 °C.

No regime inercial, em que as bolhas possuem forma de touca esférica, uma boa aproximação para o coeficiente adimensional de arraste é dada por:

$$C_{D,lg}(\text{touca}) = \frac{8}{3} \quad (3.24)$$

A determinação de qual correlação é utilizada, dentro dos limites esfera e touca é realizada da seguinte maneira:

$$C_{D,lg}(\text{dist}) = \min(C_{D,lg}(\text{elipse}), C_{D,lg}(\text{touca})) \quad (3.25)$$

$$C_{D,lg} = \max(C_{D,lg}(\text{esfera}), C_{D,lg}(\text{dist}))$$

- **Modelo de Ishii e Zuber (1979)**

O modelo de Ishii-Zuber também leva em consideração os diversos regimes de escoamento de acordo com a geometria da bolha. Para o regime de bolhas esféricas, o coeficiente adimensional de arraste utiliza a correlação de Schiller-Naumann, porém segundo proposto em ISHII

e ZUBER (1979), este coeficiente é função de um número de Reynolds de mistura, sendo representado por:

$$C_{D,lg}(\text{esfera}) = \frac{24}{Re_m} (1 + 0,15 Re_m^{0,687}) \quad (3.26)$$

$$Re_m = \frac{\rho_l \cdot |\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_g| \cdot d_b}{\mu_m} \quad (3.27)$$

$$\mu_m = \mu_l \left( 1 - \frac{\epsilon_g}{\epsilon_{g,max}} \right)^{-2,5 \epsilon_{g,max} \mu_*} \quad (3.28)$$

$$\mu_* = \frac{\mu_g + 0,4\mu_l}{\mu_g + \mu_l} \quad (3.29)$$

Em números de Reynolds de bolha mais elevados, têm-se os regimes de partículas distorcidas e inercial, em que os efeitos de tensão superficial se tornam importantes. Em ambos os regimes, ISHII e ZUBER (1979) propõem correlações para o coeficiente adimensional de arraste para partículas, por meio de um fator representando a densidade de partículas presentes no sistema, multiplicado pelo coeficiente adimensional de arraste para uma única partícula.

No regime de partículas distorcidas, o coeficiente adimensional de arraste é praticamente constante e independente do número de Reynolds, mas depende da forma da partícula, expressa por meio do número adimensional de Eötvös. Assim, o coeficiente adimensional de arraste pode ser calculado por meio das Equações 3.30 e 3.31:

$$C_{D,lg}(\text{elipse}) = E(\epsilon_g) C_{D\infty,lg} \quad \text{onde} \quad C_{D\infty,lg} = \frac{2}{3} Eo^{1/2} \quad (3.30)$$

$$E(\epsilon_g) = \frac{(1 + 17,67 f(\epsilon_g)^{6/7})}{18,67 f(\epsilon_g)} \quad \text{com} \quad f(\epsilon_g) = \frac{\mu_l}{\mu_m} (1 - \epsilon_g)^{1/2} \quad (3.31)$$

Nos casos de partículas com forma de touca esférica, o coeficiente de arraste adimensional passa a ser determinado pela Equação 3.32:

$$C_{D,lg}(\text{touca}) = (1 - \epsilon_g)^2 C_{D\infty,lg} \quad \text{em que} \quad C_{D\infty,lg} = \frac{8}{3} \quad (3.32)$$

A seleção do regime de partículas se faz por meio das relações:

$$C_{D,Ig}(\text{dist}) = \min(C_{D,Ig}(\text{elipse}), C_{D,Ig}(\text{touca})) \quad (3.33)$$

$$C_{D,Ig} = \max(C_{D,Ig}(\text{esfera}), C_{D,Ig}(\text{dist}))$$

$$C_{D,Ig} = C_{D,Ig}(\text{esfera}), \quad \text{se } C_{D,Ig}(\text{esfera}) \geq C_{D,Ig}(\text{elipse}) \quad (3.34)$$

$$C_{D,Ig} = \min(C_{D,Ig}(\text{elipse}), C_{D,Ig}(\text{touca})), \quad \text{se } C_{D,Ig}(\text{esfera}) < C_{D,Ig}(\text{elipse})$$

### 3.1.3 Turbulência

A descrição coerente do ponto de vista matemático e físico feita pelas simulações em CFD são altamente influenciadas pelos modelos de forças interfásicas e de turbulência. Modelos fundamentados na viscosidade turbulenta, como os modelos de duas equações (k-epsilon e RNG k-epsilon) fornecem bons resultados numéricos para análises estacionárias e em média temporal, quando aplicados a colunas de bolhas (EKAMBARA e DHOTRE, 2010). No entanto, este tipo de modelo mostra grande dificuldade em prever o comportamento de regiões altamente anisotrópicas.

De uma maneira geral, o modelo k-epsilon representa de maneira bastante satisfatória escoamentos multifásicos ar-água em colunas de bolhas. Para um sistema ar-água-partículas, SCHALLENBERG *et al.* (2005) e JIA *et al.* (2007) mostraram que o modelo k-epsilon também pode ser utilizado para simular este tipo de escoamento.

Trabalhos um pouco mais recentes têm chamado a atenção para uma variação do modelo convencional e que tem apresentado bons resultados para simulações em colunas de bolhas, tanto em escoamentos gás-líquido (LABORDE-BOUTET *et al.*, 2009), quanto em escoamentos gás-líquido-sólido (TROSHKO e ZDRAVISTCH, 2009). Trata-se do modelo RNG k-epsilon, baseado na análise de renormalização de grupos das equações de conservação, concebido para escoamentos vorticiais e escalas mais amplas de turbulência (LABORDE-BOUTET *et al.*, 2009).

- **Modelo k-epsilon**

O modelo k-epsilon considera a hipótese de viscosidade turbulenta, em que a turbulência é modelada por meio de um novo termo em acréscimo à viscosidade molecular. Além disso, para escoamentos multifásicos com a fase dispersa composta por elementos de tamanho expressivo, o movimento destes gera um aumento na turbulência da fase contínua, denominada de turbulência induzida da fase dispersa. Todas estas parcelas reunidas compõem uma viscosidade efetiva ( $\mu_{ef}$ ), que aparece nos termos dos tensores das equações de conservação da quantidade de movimento.

Para um sistema gás-líquido-sólido, com partículas pequenas em escoamento laminar, pode-se expressar matematicamente a viscosidade efetiva de cada fase segundo as Equações 3.35, 3.36 e 3.37.

$$\mu_{ef,l} = \mu_l + \mu_{t,l} + \mu_{bi,l} \quad (3.35)$$

$$\mu_{ef,g} = \mu_g + \mu_{t,g} \quad (3.36)$$

$$\mu_{ef,s} = \mu_s \quad (3.37)$$

Na Equação 3.35, a viscosidade turbulenta da fase líquida é calculada de acordo com o modelo k-epsilon:

$$\mu_{t,l} = \rho_l C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.38)$$

As variáveis energia cinética turbulenta ( $k$ ) e a taxa de dissipação de energia cinética ( $\varepsilon$ ) são calculadas através de equações de conservação, conforme apresentadas pelas Equações 3.39 e 3.40:

$$\frac{\partial (\rho_g k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{u}_l k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu_l + \frac{\mu_{t,l}}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho_l \varepsilon \quad (3.39)$$

$$\frac{\partial (\rho_g \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{u}_l \varepsilon) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu_l + \frac{\mu_{t,l}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho_l \varepsilon) \quad (3.40)$$

onde  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$ ,  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$  são constantes. Enquanto o termo  $P_k$  representa a produção de turbulência devido a forças viscosas, determinado por:

$$P_k = \mu_{t,l} \nabla \mathbf{u}_l \cdot (\nabla \mathbf{u}_l + \nabla \mathbf{u}_l^T) - \frac{2}{3} (3 \mu_{t,l} \nabla \cdot \mathbf{u}_l + \rho_l k) \quad (3.41)$$

As constantes do modelo k-epsilon tradicional são:

$$C_\mu = 0,09; \quad C_{\epsilon 1} = 1,44; \quad C_{\epsilon 2} = 1,92; \quad \sigma_k = 1,0 \quad e \quad \sigma_\epsilon = 1,3 \quad (3.42)$$

O termo de turbulência induzida pelas bolhas, na Equação 3.35, é calculado segundo o modelo de Sato e Sekoguchi (1975):

$$\mu_{bi,l} = C_{\mu,bi} \rho_l \epsilon_g d_b |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_l| \quad (3.43)$$

com a constante  $C_{\mu,bi} = 0,6$ .

A viscosidade turbulenta da fase gasosa, da Equação 3.36, é determinada segundo um modelo *zero equation* para fase dispersa:

$$\mu_{t,g} = \frac{\rho_g}{\rho_l} \mu_{t,l} \quad (3.44)$$

#### • Modelo RNG k-epsilon

O modelo RNG k-epsilon se fundamenta nas mesmas correlações do modelo k-epsilon convencional, apresentando algumas modificações em relação ao segundo. A primeira diferença entre ambos consiste na substituição da constante  $C_{\epsilon 1}$  por uma função  $C_{\epsilon 1,RNG}$ , de modo que a equação de transporte para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta passa a ser expressa como:

$$\frac{\partial (\rho_g \epsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{u}_l \epsilon) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu_l + \frac{\mu_{t,l}}{\sigma_{\epsilon,RNG}} \right) \nabla \epsilon \right] + \frac{\epsilon}{k} (C_{\epsilon 1,RNG} P_k - C_{\epsilon 2,RNG} \rho_l \epsilon) \quad (3.45)$$

onde  $C_{\epsilon 1,RNG}$  é determinado através das Equações 3.46, 3.47 e 3.48.

$$C_{\epsilon 1,RNG} = 1,42 - f_\varphi \quad (3.46)$$

$$f_\varphi = \frac{\varphi \left( 1 - \frac{\varphi}{4,38} \right)}{1 + \beta_{RNG} \varphi^3} \quad (3.47)$$

$$\varphi = \sqrt{\frac{P_k}{\rho_l C_{\mu,RNG} \epsilon}} \quad (3.48)$$

Uma outra modificação ocorre nas constantes do modelo RNG k-epsilon, agora as mesmas assumem os seguintes valores:

$$C_{\mu,RNG} = 0,085; \quad C_{\epsilon 2,RNG} = 1,68; \quad \beta_{RNG} = 0,012 \quad e \quad \sigma_{\epsilon,RNG} = 0,7179 \quad (3.49)$$

## 3.2 Método Numérico

A modelagem matemática de problemas da Fluidodinâmica Computacional consiste em um conjunto de equações diferenciais parciais, cuja solução se obtém por meio de metodologias numéricas. O método numérico utilizado nas simulações é o *Método dos Volumes Finitos* (MVF), que tem como ideia básica satisfazer a forma integral das equações de conservação, dada uma determinada precisão, para cada volume de controle pertencente ao domínio de cálculo.

O método dos volumes finitos se tornou muito popular em aplicações de CFD, pois basicamente, ele garante a conservação de massa, energia e quantidade de movimento na região discretizada. Além de permitir o uso de malhas estruturadas e desestruturadas, compostas por poliedros irregulares, conferindo um aumento de flexibilidade por parte do modelo, podendo ser aplicado para diversos casos com geometria arbitrária.

O MVF consiste de um método aplicado computacionalmente, ou seja, todo o procedimento de discretização da região de interesse até o processo iterativo de resolução do problema é feito com o auxílio de um computador de alta capacidade. As simulações deste trabalho foram conduzidas no *software* comercial ANSYS CFX 12, que utiliza o Método dos Volumes Finitos para obter a solução do problema estabelecido.

Para maiores detalhes com respeito à metodologia numérica empregada, existem diversas obras na literatura explicando minuciosamente as equações, os procedimentos de discretização e esquemas de interpolação. Como uma leitura inicial da área, recomendam-se PATANKAR (1984), MALISKA (2004) e CFX-12 User's Guide (2009).

# Capítulo 4

## Simulações e Métodos

Simulações tridimensionais, transientes e Eulerianas são conduzidas com a finalidade de descrever a hidrodinâmica de um escoamento multifásico gás-líquido-sólido em colunas de bolhas. Os resultados numéricos são comparados com dados experimentais da literatura, utilizando a média-temporal dos parâmetros em análise. De acordo com os experimentos em WU *et al.* (2008), as medições são locais e realizadas em relação a um plano situado em uma altura de 56,1 cm, em que o escoamento é considerado como plenamente desenvolvido. Um esquema ilustrativo do aparato experimental utilizado por WU *et al.* (2008) pode ser visualizado na Figura 4.1.

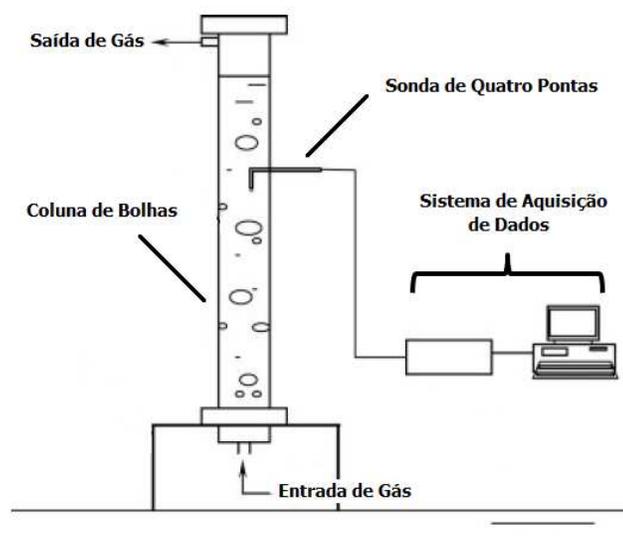


Figura 4.1: Representação esquemática do aparato experimental de WU *et al.* (2008).

## 4.1 Geometria e Malha Numérica

A geometria da coluna de bolhas e sua respectiva malha numérica foram construídas utilizando o *software* ANSYS ICEM CFD 11. Durante esta etapa, observou-se que WU *et al.* (2008) forneceram apenas o valor de superfície aberta do distribuidor da fase gasosa (1,09 %). Com apenas este dado, seria inviável a construção geométrica desta região da coluna. No entanto, um procedimento adotado por KRISHNA e VAN BATEN (2004) permitiu que uma abordagem simplificada para a base da coluna fosse utilizada. A ideia consistiu em aproximar a região do distribuidor por uma superfície, através da qual o gás seria injetado de maneira uniforme.

A adoção de uma área circular de mesmo valor da seção transversal da coluna não seria a melhor escolha neste caso, pois a fração volumétrica de gás passaria a ser praticamente uniforme ao longo do raio normalizado da coluna, contrariando os resultados experimentais de WU *et al.* (2008). Dessa forma, a superfície de entrada necessitaria ser menor do que a seção transversal da coluna. A estimativa do tamanho desta superfície foi realizada tomando-se como base alguns trabalhos produzidos pelo mesmo grupo de pesquisa de WU *et al.* (2008) (XUE *et al.*, 2003, WU, 2007 e WU *et al.* (2008)).

Observou-se que em diversos resultados experimentais, para diversos tamanhos de colunas de bolhas, um mesmo distribuidor da fase gasosa tipo prato perfurado era recorrente. A configuração típica do mesmo consiste em uma distribuição praticamente hexagonal, composta ao dispor os furos em um passo triangular, como é possível observar na Figura 4.2.

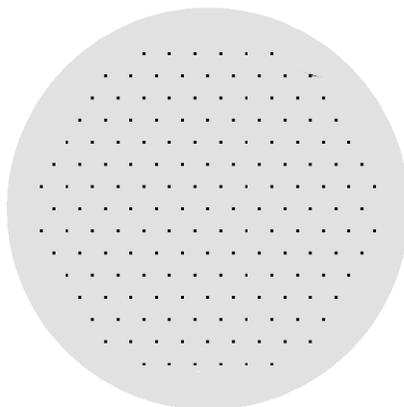


Figura 4.2: Configuração de distribuidor tipicamente utilizado pelo grupo de WU *et al.* (2008).

Esta característica foi utilizada para determinar o tamanho da entrada uniforme na base da coluna de bolhas. O procedimento para tanto consistiu em traçar uma circunferência circunscrita ao hexágono formado pelos furos, calculando a sua área e dividindo pela área da seção transversal da coluna. O valor obtido foi de aproximadamente 80 %, indicando que a circunferência circunscrita possui uma área correspondente a 80 % da seção transversal da coluna. Em seguida, realizou-se o mesmo procedimento, mas agora com uma circunferência inscrita ao hexágono, obtendo um segundo valor em torno de 60 % (Figura 4.3).

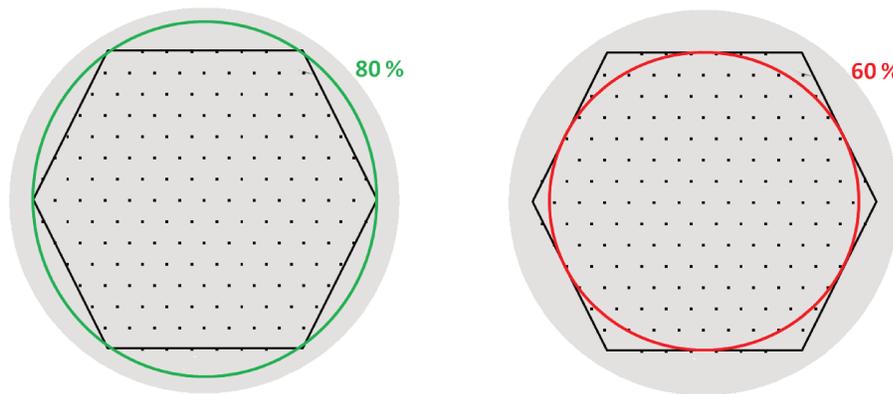


Figura 4.3: Circunferências traçadas para determinação do tamanho da entrada uniforme.

Tomando-se estes dois resultados como limites superior e inferior respectivamente, determinou-se um valor intermediário por meio da média aritmética entre estes dois extremos. A fração obtida de 70 %, corresponderia então, ao tamanho aproximado da superfície utilizada para simular as condições experimentais descritas por WU *et al.* (2008).

Em uma segunda etapa, o volume de cálculo delimitado pela geometria da coluna, foi discretizado por meio de uma malha numérica hexaédrica. O primeiro passo para construir tal malha, consistiu em tomar um bloco e fracioná-lo em diversas partes menores. A estratégia de como compor uma distribuição de blocos depende da complexidade da geometria em interesse e está bem explicada e exemplificada em ROSA (2008), DIAS (2009), DIONISIO (2008) e SANTOS (2005). Após definida a composição dos blocos, fez-se necessário determinar o número de elementos hexaédricos que seriam alocados ao longo de cada aresta dos blocos. Este procedimento é também conhecido como refinamento da malha numérica e representa uma etapa muito importante para estudos em CFD. Isto porque os resultados obtidos numericamente podem sofrer significativas variações em função da quantidade de elementos hexaédricos contidos no volume de cálculo.

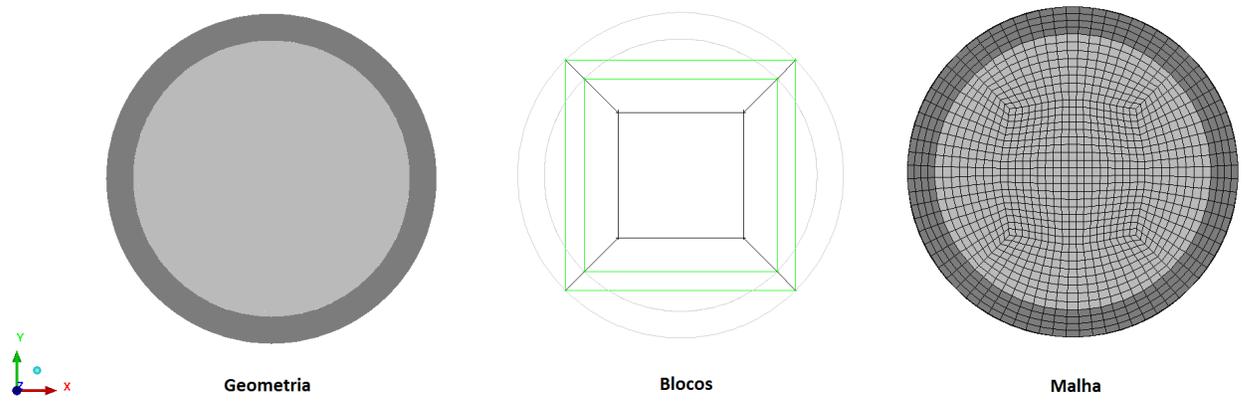


Figura 4.4: Vistas da seção transversal da coluna de bolhas para geometria, blocos e malha.

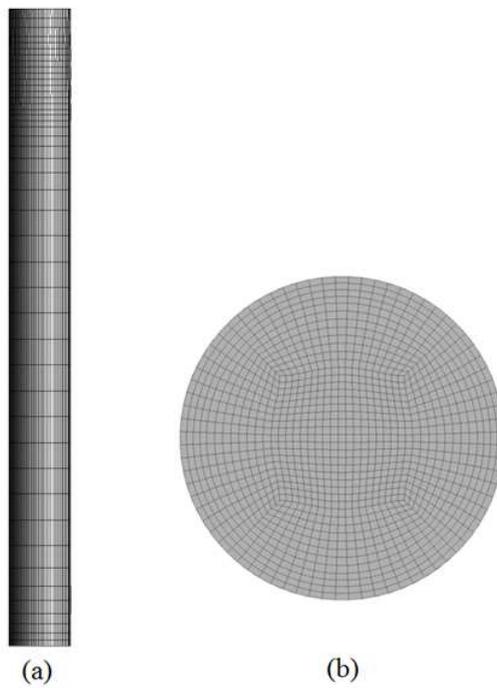


Figura 4.5: Malha numérica (a) vista da coluna (b) entrada da coluna.

O modo como o tamanho da malha em estudo foi determinado pode ser encontrado ao final deste capítulo. A título de ilustração, tem-se abaixo a Figura 4.4, mostrando uma vista transversal da coluna, por meio da qual é possível observar as etapas construtivas descritas até então. Pela Figura 4.5, pode-se observar a malha numérica final com uma vista geral da coluna de bolhas, bem como do detalhe da entrada da mesma.

## 4.2 Condições de Contorno

Todas as simulações foram conduzidas com uma velocidade superficial igual a 2 cm/s, para garantir este valor no interior do sistema, utilizou-se a Equação 4.1 para a estimativa da velocidade de gás na entrada da coluna.

$$v_{g,entrada} = \frac{u_g A_{coluna}}{\epsilon_{g,entrada} A_{entrada}} \quad (4.1)$$

em que  $v_{g,entrada}$  é a velocidade linear de entrada do gás,  $A_{coluna}$  a seção transversal da coluna,  $\epsilon_{g,entrada}$  é a fração volumétrica do gás na corrente de entrada e  $A_{entrada}$  a área equivalente total de entrada de gás. O valor da velocidade linear do ar na entrada da coluna calculado é de  $2,8571 \times 10^{-2}$ .

Na entrada da coluna, considera-se apenas ar sendo injetado no sistema, sendo o gás alimentado de maneira uniforme através de 70 % da área total da base da coluna. Nas paredes, utilizam-se condições de não escorregamento (*no-slip condition*) para as fases líquida e gasosa e de livre deslizamento para a fase particulada sólida (*free-slip condition*). A saída da coluna é considerada como uma abertura para um ambiente de 1 atm, através da qual só ar deixa o sistema.

## 4.3 Propriedades dos Materiais

A Tabela 4.1 apresenta as propriedades físicas das propriedades consideradas. A 25 °C, a tensão superficial entre a água e o ar é de aproximadamente 0,072 N/m e é o valor utilizado nas simulações.

Tabela 4.1: Propriedades físicas dos materiais componentes das fases do escoamento

Material	Massa Específica $\left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right]$	Viscosidade Dinâmica $\left[\frac{\text{kg}}{\text{m s}}\right]$	Temperatura [K]
Ar	1,185	$1,831 \times 10^{-5}$	298
Água	997	$8,899 \times 10^{-4}$	298
Alumina	4000	$1,142 \times 10^{-3}$	298

Quando a escala dimensional do escoamento é muito maior do que  $\sim 100$  vezes o raio da partícula, é possível tratar a suspensão como um meio contínuo. Neste caso, para a fase sólida considera-se a viscosidade aparente da suspensão como sendo a viscosidade atribuída à fase sólida ao longo do escoamento. A determinação desta viscosidade aparente pode ser estimada segundo modelos de viscosidade de suspensões. Em geral, tratam-se de expressões que correlacionam a viscosidade da suspensão com a fração volumétrica de sólidos.

STICKEL e POWELL (2005) analisam modelos conhecidos na literatura atual e confrontaram os resultados numéricos obtidos com dados experimentais. Neste trabalho, cita-se a correlação de Krieger e Dougherty (1959), que apresentam boa aproximação com resultados experimentais, além de poder ser aplicada para casos densos ou diluídos em partículas sólidas.

O modelo proposto por KRIEGER e DOUGHERTY (1959) pode ser expresso como mostra a Equação 4.2:

$$\mu_r = \left(1 - \frac{\phi}{\phi_m}\right)^{-[\mu]\phi_m} \quad (4.2)$$

Em que,  $[\mu]$  é uma constante conhecida como "Constante de Einstein" ou "Viscosidade Intrínseca" e para esferas rígidas  $[\mu] = 2,5$ ;  $\phi_m$  é o fator de assentamento máximo, para suspensões bem misturadas as partículas esféricas se distribuem segundo um arranjo de empacotamento fechado e aleatório, podendo-se aproximar  $\phi_m = 0,65$ ;  $\phi$  consiste na fração volumétrica de sólidos em suspensão, segundo utilizado por WU *et al.* (2008),  $\phi = 0,091$ .

A viscosidade relativa  $\mu_r$  é uma relação entre a viscosidade da suspensão e a viscosidade do meio contínuo (STICKEL e POWELL (2005)), determinada pela Equação 4.3:

$$\mu_r = \frac{\mu_{\text{susp}}}{\mu_l} \quad (4.3)$$

O valor para a viscosidade relativa calculado pela correlação de KRIEGER e DOUGHERTY (1959) é de 1,28. Nas condições do presente estudo, isto significa que o valor aparente da alumina é aproximadamente 1,28 vezes o valor da viscosidade da água.

## 4.4 Condições Iniciais e Numéricas de Simulação

Inicialmente, a coluna se encontra preenchida por água e alumina até uma altura de 90 cm (altura estática da coluna). A fase dispersa particulada está uniformemente distribuída por toda a fase contínua e ambas se encontram estagnadas. O início do processo ocorre com a entrada do ar no sistema, isso faz com que a altura do leito se eleve por alguns centímetros (altura dinâmica da coluna), este nível se estabiliza quando o sistema atinge o estado semi-estacionário.

A seguir, enumeram-se as condições numéricas das simulações:

- Tamanho único de bolhas: as simulações consideram tamanho único de bolhas para o cálculo do coeficiente adimensional de arraste, o tamanho de bolha utilizado para o sistema trifásico é 4,7 mm, baseado em dados experimentais de WU *et al.* (2008).
- Passo de Tempo: 0,01 s.
- Critério de Convergência:  $\text{RMS } 5 \times 10^{-5}$ .
- Tempo Total de Simulação: 200 s.
- Interpolação do Termo Advectivo: Alta Resolução.

Pelo fato de o estudo se encontrar em fase inicial, optou-se pela hipótese simplificadora de não analisar as interações entre as partículas sólidas e a fase gasosa do sistema.

## 4.5 Teste de Malha

O teste de malha é realizado para verificar se variações nos resultados numéricos são significativos em função do tamanho de malha. O teste toma como base 50000 elementos, admitindo que TABIB *et al.* (2008) utilizou 36000 elementos para simular uma coluna com geometria e dimensões semelhantes. Testam-se três diferentes tamanhos de malha de 50000, 150000 e 250000 elementos.

O teste analisa um parâmetro local e um global e possibilita a comparação entre os valores numéricos obtidos. O parâmetro local escolhido foi a fração volumétrica de ar em função da posição radial normalizada. O plano de interesse fica a uma altura de 56,1 cm, a mesma em que se encontra a sonda de quatro pontas utilizada nos experimentos de WU *et al.* (2008). Já o parâmetro Global adotado foi a perda de carga na coluna de bolhas.

Nas Figuras 4.6 e 4.7, encontram-se os resultados do teste de malha, mostrando respectivamente os perfis de fração volumétrica de ar radial e a perda de carga na coluna. O modelo de arraste para a fase gasosa utilizado foi o Ishii-Zuber, enquanto que para a fase sólida, utilizou-se o modelo de Wen Yu. A turbulência foi descrita pelo modelo de duas equações RNG k-epsilon.

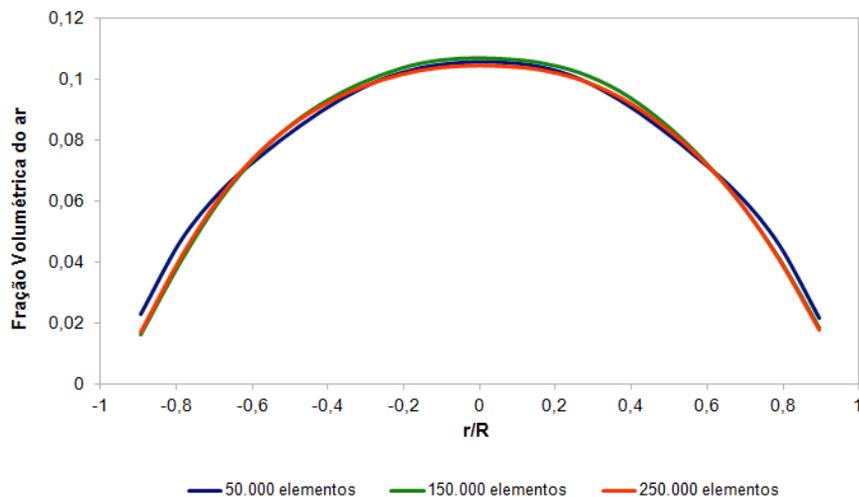


Figura 4.6: Fração volumétrica de ar radial para os diferentes tamanhos de malha.

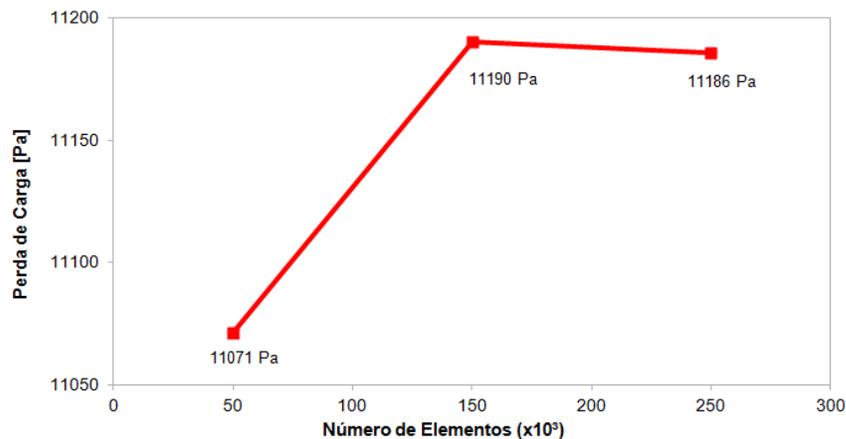


Figura 4.7: Perda de carga na coluna de bolhas para diferentes tamanhos de malha.

Da análise comparativa dos resultados numéricos, conclui-se que é possível utilizar a malha de 50000 elementos para as demais simulações do presente trabalho, uma vez que os perfis de fração volumétrica são praticamente coincidentes e a diferença de perda de pressão da menor malha em relação às outras duas maiores é aproximadamente de 100 Pa ou 0,9 %.

## 4.6 Estudo do escoamento da fase sólida

No trabalho de WU *et al.* (2008) não constam informações detalhadas a cerca do comportamento da alumina no interior da coluna durante os experimentos. Sendo assim, recorreu-se a uma correlação empírica capaz de prever a quantidade máxima de partículas sólidas mantidas em suspensão dadas as condições operacionais em estudo. O procedimento adotado é o mesmo proposto por RAMACHANDRAN e CHAUDHARI (1983) e já descrito na Seção 1.3 desta dissertação.

A primeira etapa consiste em determinar a velocidade terminal de sedimentação da alumina no leito de lama. Para tanto, é preciso considerar que existem três tipos de regime em que a fase sólida pode se encontrar:

- 1) Regime de Stokes
- 2) Regime Intermediário

### 3) Regime de Newton

O Regime de Stokes não se aplicaria neste caso, pois ele se estabelece em sistemas diluídos e a fase líquida em escoamento laminar. Já o Regime de Newton não seria o mais adequado para caracterizar o sistema, pois o diâmetro das partículas de alumina é pequeno o bastante para garantir que o escoamento da fase sólida não seja turbulento. Dessa forma, adotou-se o Regime Intermediário como aquele que caracteriza o escoamento da fase sólida ao longo da coluna de bolhas.

De fato, ao se calcular a velocidade terminal da partícula ( $u_{tp}$ ) pela Equação 2.5 e o número de Reynolds da partícula ( $Re_p$ ) utilizando a Equação 2.7, verifica-se a coerência do modelo uma vez que o escoamento fica caracterizado como pertencente ao regime intermediário, como se pode observar na Tabela 4.2 a seguir:

Tabela 4.2: Resultados de velocidade terminal da partícula e número de Reynolds da partícula

$u_{tp}$ $\left[ \frac{\text{cm}}{\text{s}} \right]$	$Re_p$	Regime Intermediário
1,42	1,63	$0,4 < Re_p < 500$

Determinando os demais parâmetros da Equação 2.1 de ROY *et al.* (1964) e atendo para que as unidades estejam todas no mesmo sistema, tem-se que a quantidade máxima de alumina em suspensão no caso em análise é de aproximadamente **4,5 kg**. Como a situação simulada é a mesma reproduzida experimentalmente por WU *et al.* (2008) e os mesmos utilizam uma quantidade de 9,1 % de alumina, esta fração corresponde a aproximadamente de **2,7 kg** de partículas sólidas. Sendo assim, nas atuais condições de operação, espera-se que toda a alumina esteja em suspensão.

# Capítulo 5

## Resultados

Os resultados numéricos obtidos com as simulações estão aqui reunidos e são discutidos tendo como base os resultados experimentais de WU *et al.* (2008) em média temporal. O capítulo começa apresentando os resultados obtidos com a utilização de diferentes modelos de arraste entre as fases líquida e sólida, selecionando aquele que melhor caracteriza o escoamento em análise. Em uma próxima etapa, comparam-se os resultados de diferentes modelos de arraste entre as fases gasosa e líquida, também buscando aquele que melhor descreve o sistema em questão. O capítulo se encerra confrontando os modelos de turbulência k-epsilon e RNG k-epsilon e constatando qual é o modelo que melhor se ajustou ao caso em estudo.

### 5.1 Comparação entre modelos de arraste

#### 5.1.1 Arraste da fase dispersa particulada

Para esta etapa da análise, faz-se variar unicamente o modelo de arraste para a fase sólida. Todas as demais condições de simulação citadas no Capítulo 4 são mantidas, o modelo de arraste para a fase gasosa utilizado é o Ishii-Zuber e a turbulência é descrita pelo modelo RNG k-epsilon.

As primeiras simulações do sistema trifásico utilizaram o modelo de Schiller-Naumann para descrever o arraste da fase dispersa particulada no meio contínuo. Sabe-se que este modelo é recomendável para sistemas diluídos, mas como o escoamento contém uma quantidade intermediária de sólidos, decidiu-se verificar se o modelo seria adequado para garantir a com-

pleta circulação da alumina. A Figura 5.1 mostra os perfis de fração volumétrica de alumina ao longo do tempo, em um plano axial da coluna.

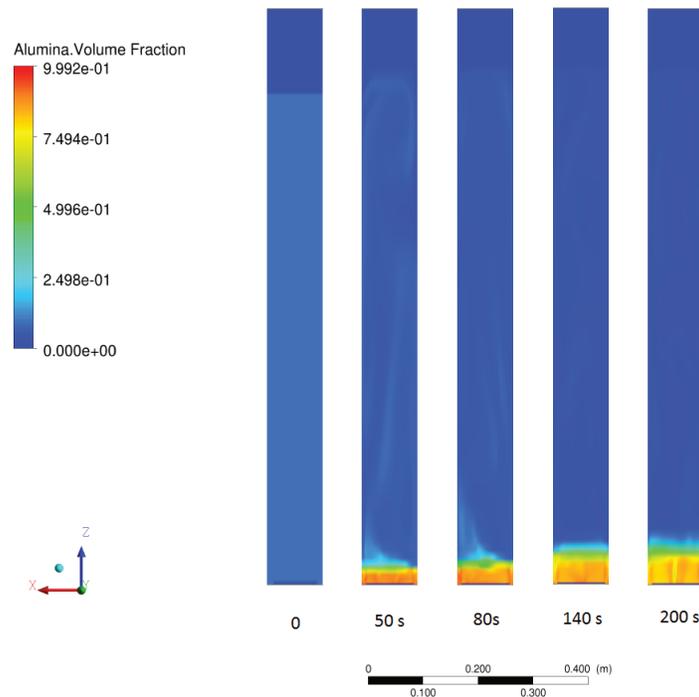


Figura 5.1: Modelo de Schiller-Naumann: Perfil de fração volumétrica de alumina.

Como se pode observar, a alumina começa uniformemente distribuída pelo leito, mas com o passar do tempo ela começa a sedimentar. Pouco a pouco a alumina se deposita no fundo da coluna, até que a completa sedimentação ocorra. Do resultado obtido da Equação 2.1 de ROY *et al.* (1964), espera-se que toda a alumina esteja em suspensão pela coluna durante a sua operação. Assim, estes resultados confirmam que o modelo não é adequado para as condições operacionais em que a coluna de bolhas se encontra.

O próximo modelo analisado é o modelo de Wen-Yu, como se pode observar pela Figura 5.2 a completa suspensão da alumina foi bem capturada pelas simulações. O modelo se fundamenta nas equações de Schiller-Naumann, concebido para o arraste de partículas esféricas, adaptado para ser aplicado a sistemas com uma concentração mais elevada e considerando a fração de partículas no cálculo do coeficiente de arraste.

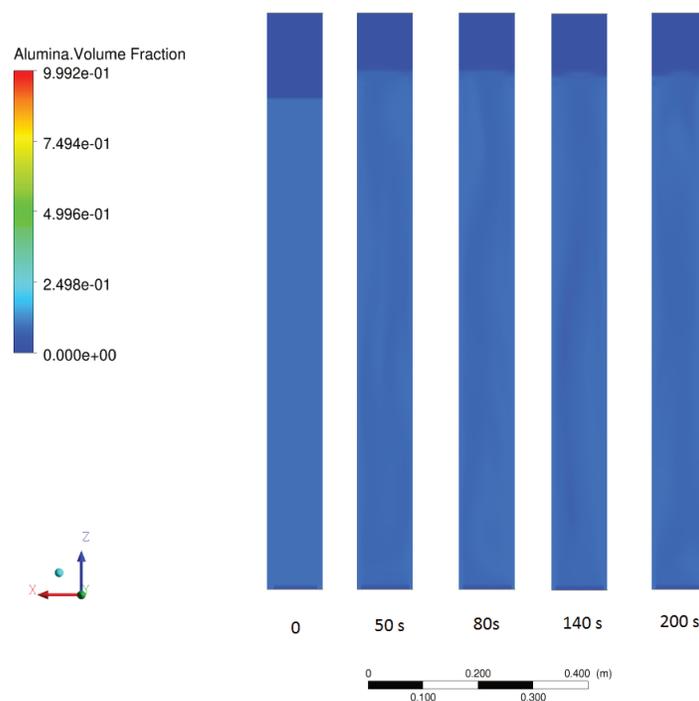


Figura 5.2: Modelo de Wen-Yu: Perfil de fração volumétrica de alumina.

A Figura 5.3 representa o mesmo perfil observado na Figura 5.2 porém, agora com um limite máximo de escala menor. Conforme o ar atravessa o leito, criam-se regiões mais concentradas e menos concentradas de sólidos, mas a alumina permanece totalmente em suspensão ao longo de todo o tempo de simulação.

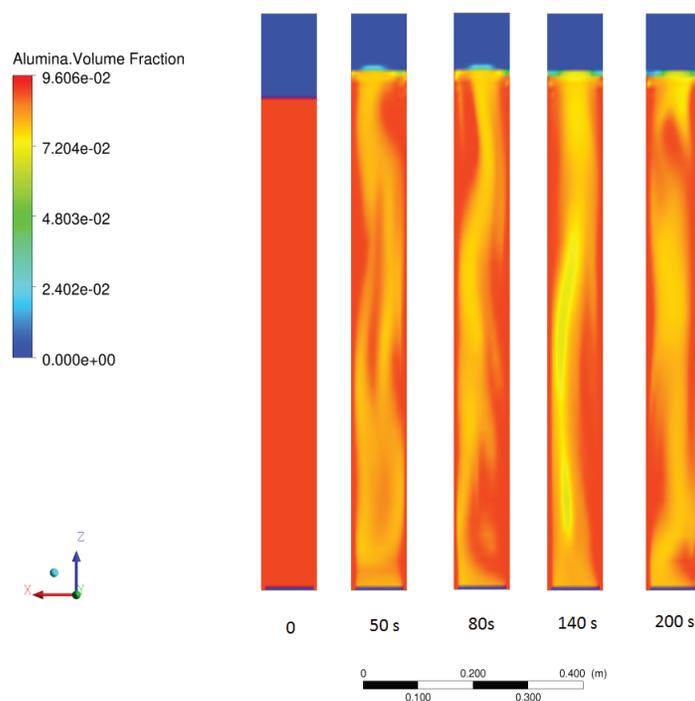


Figura 5.3: Modelo de Wen-Yu: Perfil de fração volumétrica de alumina (outra escala).

A falta de dados experimentais com respeito à fase sólida não permite corroborar os resultados numéricos com a experimentação física. Por isso, recorreu-se à correlação empírica de ROY *et al.* (1964) (Equação 2.1), que garante a total suspensão da alumina no leito. A equação muito embora seja capaz de prever a quantidade de sólidos em suspensão, não garante a distribuição uniforme da fase sólida no sistema.

Sabendo-se que há a possibilidade do escoamento apresentar elevados gradientes instantâneos de fração volumétrica de sólido em determinados pontos da coluna, decidiu-se testar o modelo de Gidaspow, capaz de descrever escoamentos diluídos (pela correlação de Wen-Yu) e concentrados (pela correlação de Ergun). A Figura 5.4 mostra os perfis de fração volumétrica obtidos das simulações.

Os resultados permitem concluir que o modelo de Gidaspow também é capaz de descrever as partículas sólidas em suspensão. Na região próxima ao distribuidor existe uma concentração maior de partículas, indicando a presença de uma pequena quantidade de corpo de fundo na coluna de bolhas. Fisicamente, isto também poderia acontecer e seria plausível admitir que o modelo de Gidaspow é capaz de descrever o arraste da fase sólida no escoamento.

No entanto, em função da ausência de informações experimentais e por estar se baseando na correlação de ROY *et al.* (1964) (Equação 2.1), optou-se aqui por adotar o modelo de Wen-Yu para as simulações posteriores.

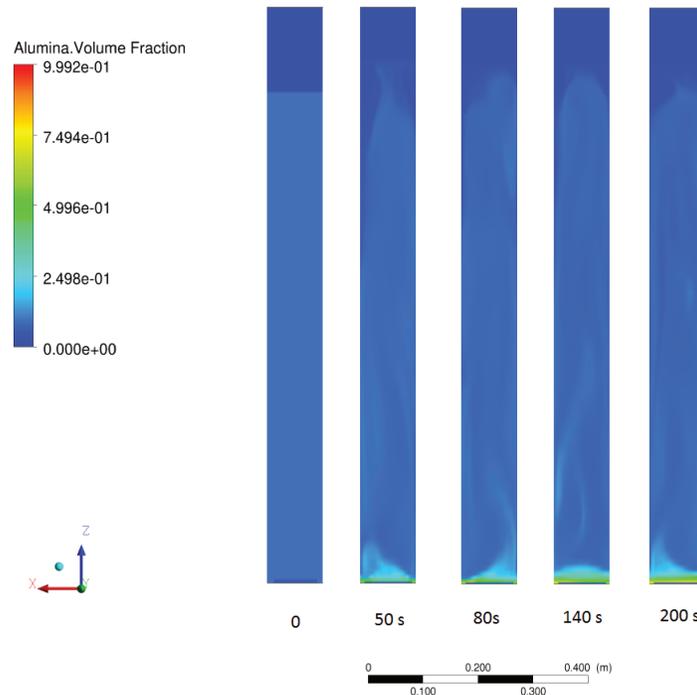


Figura 5.4: Modelo de Gidaspow: Perfil de fração volumétrica de alumina.

### 5.1.2 Arraste da fase dispersa fluida

Nesta seção, faz-se variar unicamente o modelo de arraste para a fase gasosa. Todas as demais condições de simulação citadas no Capítulo 4 são mantidas, o modelo de arraste para a fase sólida é o Wen-Yu e a turbulência é descrita pelo modelo RNG k-epsilon.

Os modelos de arraste analisados nesta seção basicamente se dividem em duas classes: aqueles que descrevem o escoamento assumindo a existência apenas de bolhas esféricas e aqueles que abrangem mais de uma forma geométrica de bolhas em função das características do sistema. Dessa maneira, os resultados numéricos obtidos foram comparados com os dados experimentais de WU *et al.* (2008) e agrupados segundo sua forma de abordar a geometria das bolhas.

## Modelos para bolhas esféricas

Um trabalho publicado com simulações em CFD utilizando o modelo de Schiller-Naumann é o de PANG e WEI (2010). Pela tendência atual dos regimes de operação analisados para colunas de bolhas, são poucos os trabalhos que utilizam este modelo em suas análises. Contudo, isto não desvaloriza o mesmo, pois como constatado por PANG e WEI (2010), se o regime de bolhas for adequado, os resultados numéricos apresentam coerência física e boa aproximação com dados experimentais.

Uma outra correlação que tem mostrado bons resultados na determinação do coeficiente adimensional de arraste tem sido o modelo proposto por WHITE (1974). Extensos trabalhos como os de TABIB *et al.* (2008) e PANG e WEI (2010) têm confirmado a capacidade do modelo em descrever o escoamento de bolhas para sistemas gás-líquido em regime homogêneo.

Na Figura 5.5, podem-se observar as performances dos modelos de Schiller-Naumann e White, com relação aos dados experimentais de WU *et al.* (2008), ao prever as frações volumétricas de ar ao longo do raio normalizado da coluna de bolhas.

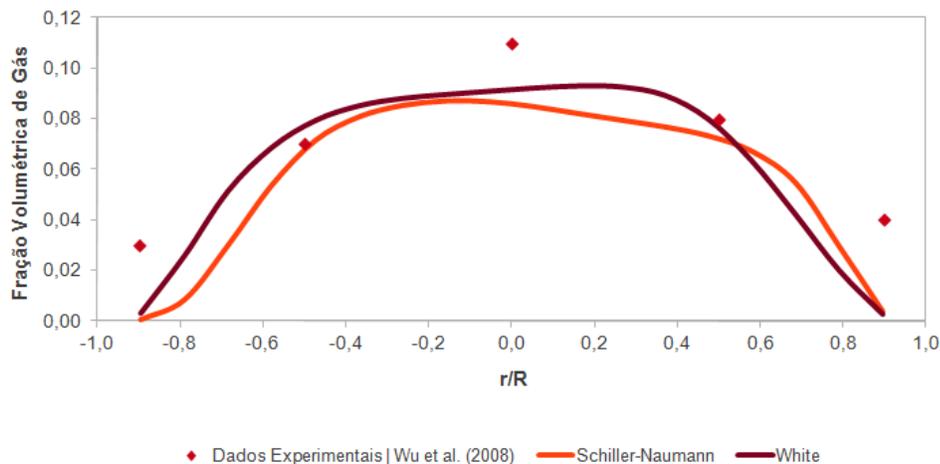


Figura 5.5: Modelos de Schiller-Naumann e White comparados com os dados experimentais de Wu et al. (2008).

As curvas obtidas permitem concluir que para as condições estudadas, a fração volumétrica de ar foi subestimada na região central do leito. Além disso, nota-se que na região próxima às paredes da coluna, há uma grande distância entre os valores experimentais e os resultados numéricos. Assim, como na região central, próximo às paredes, a fração volumétrica de gás foi subestimada pelas simulações.

### **Modelos para geometrias de bolhas variadas**

A segunda classe de modelos analisada consiste de uma categoria mais flexível, pois cobre uma faixa mais ampla de regimes de bolhas. Os dois modelos estudados consideram as mesmas formas geométricas e o que diferencia um modelo do outro, é a forma como cada um descreve matematicamente o arraste da fase dispersa composta pelas bolhas.

O modelo de Grace é expresso como uma função dos números de Eötvös e de Morton, quando o regime de bolhas é elipsoidal. Para o regime esférico, o modelo utiliza a correlação de Schiller-Naumann, já que este apresenta uma boa aproximação do escoamento em casos diluídos com bolhas esféricas (CFX-12 User's Guide (2009)). Quando o regime é inercial, o modelo considera as bolhas como sendo toucas esféricas e o coeficiente de arraste das mesmas é representado como sendo uma constante.

O modelo de Ishii-Zuber é amplamente utilizado para descrever o arraste entre a fase gás e líquido, em simulações de colunas de bolhas com sistemas ar-água (DIONISIO (2008), TABIB *et al.* (2008), EKAMBARA e DHOTRE (2010), PANG e WEI (2010), SILVA *et al.* (2010)). Encontrando também aplicações para descrever o arraste entre as fases gás e líquido de sistemas gás-líquido-sólido em colunas de bolhas (SCHALLENBERG *et al.* (2005), JIA *et al.* (2007), TROSHKO e ZDRAVISTCH (2009)).

Apesar de considerar as mesmas categorias do modelo de Grace para formas geométricas da fase dispersa, o modelo de Ishii-Zuber implementa algumas modificações nas equações dos coeficientes adimensionais de arraste. No regime de bolhas esféricas, considera-se um coeficiente de mistura entre as fases gás e líquido, corrigindo a viscosidade dinâmica do líquido para uma viscosidade dinâmica aparente de mistura. Esta por sua vez é utilizada para determinar um número de Reynolds de mistura, que é aplicado na equação de Schiller-Naumann.

No regime de bolhas elipsoidais, o modelo caracteriza a forma da bolha como função do número de Eötvös multiplicado por um fator de correção, relacionando às propriedades dos fluidos envolvidos, bem como da fração volumétrica de gás. Já no regime inercial, a constante considerada pelo modelo de Grace é multiplicada por um fator de correção e as bolhas são consideradas como tendo forma de touca esférica.

A Figura 5.6, permite observar os resultados obtidos pelos modelos de Grace e Ishii-Zuber, por meio do perfil de fração volumétrica de gás em função do raio normalizado da coluna de bolhas.

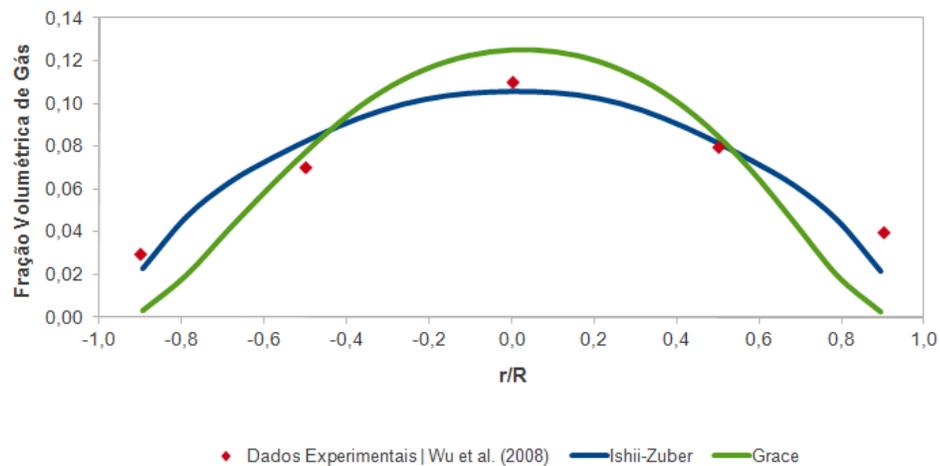


Figura 5.6: Modelos de Grace e Ishii-Zuber comparados com os dados experimentais de Wu et al. (2008).

As previsões feitas pelos modelos apontaram para maiores frações volumétricas de ar no centro da coluna e frações volumétricas menores próximo às paredes, em conformidade com os dados experimentais. O modelo de Grace captou bem a simetria na distribuição radial de fração volumétrica de ar, enquanto os modelos para bolhas esféricas não haviam sido capaz de prever.

O modelo de Ishii-Zuber também descreveu a simetria encontrada no perfil de fração volumétrica de gás. Entretanto, o modelo obteve valores subestimados para a região central, assim como próximo às paredes.

Comparando os quatro perfis obtidos com as simulações, visualmente pode-se verificar o modelo de Ishii-Zuber como aquele com a melhor performance em descrever o escoamento de interesse (Figura 5.7).

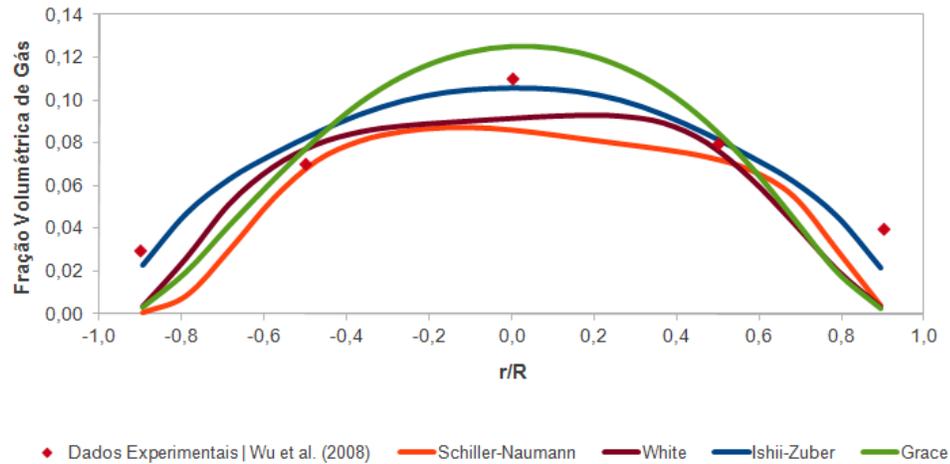


Figura 5.7: Comparação dos perfis de fração volumétrica dos modelos analisados.

A Tabela 5.1 apresenta os erros relativos de cada modelo com respeito aos dados experimentais de WU *et al.* (2008). A região de parede foi considerada nas posições  $r/R = +0,90$  e  $r/R = -0,90$ . A posição central se deu em  $r/R = 0$ .

Tabela 5.1: Erros relativos para os diferentes modelos de arraste.

Modelo de Arraste	Centro	Parede ( $r/R < 0$ )	Parede ( $r/R > 0$ )
Schiller-Naumann	21,94	24,02	75,66
White	16,49	65,69	79,06
Grace	13,62	69,23	77,58
Ishii-Zuber	4,06	24,02	46,21

Dos quatro modelos avaliados, aqueles que consideraram mais de uma geometria de bolhas apresentaram melhores aproximações com a experimentação, quando comparados aos modelos para apenas geometria esférica de bolhas. O modelo de Ishii-Zuber foi o que forneceu resultados com erros relativos menores em relação aos demais. Por este motivo, este foi o modelo escolhido para descrever o escoamento de interesse e também para conduzir as demais simulações do presente trabalho.

## 5.2 Análise de regimes de bolhas

A análise de regimes de bolhas é bastante importante em colunas de bolhas, uma vez que os modelos de arraste disponíveis na literatura são formulados considerando-se a forma geométrica das bolhas. Embora não se tenham dados experimentais a cerca das velocidades das fases dispersas e contínua, foi possível obter uma aproximação da ordem de grandeza destas por meio das simulações. Com estes parâmetros, pôde-se estimar um valor médio de número de Reynolds local, sendo possível determinar o regime de bolhas estabelecido na altura 56,1 cm, distância esta onde o regime de escoamento já se encontra plenamente desenvolvido.

A determinação do regime de bolhas foi feita por meio do gráfico da Figura 2.3, calculando-se a partir da Equação 2.8 o número de Reynolds da bolha e pela Equação 2.9, o número de Eötvös, estes dois grupos adimensionais definiram um ponto no gráfico e consequentemente, o tipo de escoamento encontrado na coluna de bolhas. Sendo assim, para cada modelo de arraste analisado, listaram-se na Tabela 5.2 os valores dos números adimensionais, bem como os regimes de bolhas predominantes no escoamento em cada caso.

Tabela 5.2: Regimes de bolhas para os modelos de arraste a partir de dados numéricos e propriedades do sistema.

Modelo de Arraste	$Re_b$	$Eo$	Tipo de Regime
Schiller-Naumann	1818	3,0	Formas elipsoidais distorcidas
White	1545	3,0	Formas elipsoidais distorcidas
Grace	1087	3,0	Formas elipsoidais distorcidas
Ishii-Zuber	978	3,0	Formas elipsoidais distorcidas

Em todos os casos, notou-se que o regime predominante no escoamento foi o regime de bolhas com formas elipsoidais distorcidas. Este seria um forte indício do aparente sucesso dos modelos com correlações para o cálculo do coeficiente adimensional de arraste em aproximar suas descrições com os dados experimentais de fração volumétrica de gás. Em contrapartida, os modelos para bolhas esféricas não forneceram bons resultados por não estarem sendo aplicados para os regimes de bolhas para os quais foram concebidos.

### 5.3 Comparação entre os modelos k-epsilon e RNG k-epsilon

A figura 5.8 apresenta os perfis radiais de fração volumétrica obtido pelas simulações com os modelos k-epsilon e RNG k-epsilon.

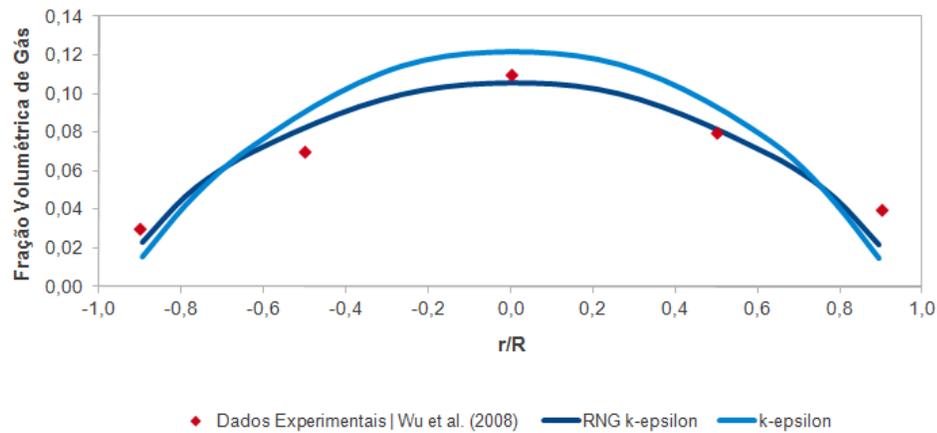


Figura 5.8: Comparação entre os modelos k-epsilon e RNG k-epsilon.

Observou-se que o modelo convencional superestimou os valores ao centro da coluna, enquanto os valores de fração volumétrica de ar próximos à parede continuaram baixos. Já o modelo RNG k-epsilon subestimou os valores de fração volumétrica no centro da coluna, mas nas paredes apresentou erros relativos menores do que o modelo convencional. De uma maneira geral, o modelo RNG k-epsilon aproximou mais os resultados numéricos dos experimentais obtidos por WU *et al.* (2008), fato que corrobora com os trabalhos de EKAMBARA e DHOTRE (2010), LABORDE-BOUTET *et al.* (2009) e TROSHKO e ZDRAVISTCH (2009).

A Tabela 5.3 contém os erros relativos dos dois modelos, calculados tendo como base aos dados experimentais de WU *et al.* (2008):

Tabela 5.3: Erros relativos para os diferentes modelos de turbulência.

Modelo de Arraste	Centro	Parede ( $r/R < 0$ )	Parede ( $r/R > 0$ )
RNG k-epsilon	4,06	24,02	46,21
k-epsilon	10,27	49,39	63,90

## Capítulo 6

### Conclusões e Atividades Futuras

Os resultados deste trabalho permitiram chegar a uma modelagem capaz de simular um escoamento multifásico gás-líquido-sólido em uma coluna de bolhas em leito de lama. A seguir, destacam-se algumas conclusões obtidas dos estudos e das análises desenvolvidos.

Foram testados três modelos para o arraste aplicado pela fase líquida sobre a fase sólida. O modelo de Schiller-Naumann para uma única partícula esférica em escoamento, o modelo de Wen-Yu para o escoamento de um conjunto com poucas partículas esféricas e o Modelo de Gidaspow para o escoamento de um conjunto com poucas ou muitas partículas. Para uma estimativa preliminar do comportamento das partículas em suspensão, utilizou-se uma metodologia empírica, obtendo como resultado a total suspensão da fase sólida para o caso estudado. Neste sentido, o modelo de Wen-Yu foi aquele que possivelmente representou melhor os sólidos em circulação, muito embora o modelo de Gidaspow também tenha obtido êxito em manter boa parte da alumina em suspensão.

Em uma etapa seguinte, avaliou-se a influência de diferentes modelos para o arraste aplicado pela fase líquida sobre a fase gasosa. Os modelos utilizados podem ser divididos em duas categorias diferentes: modelos de bolhas exclusivamente esféricas e modelos com múltiplas geometrias de bolhas. Para o primeiro grupo, escolheram-se os modelos de Schiller-Naumann e de White, enquanto que para o segundo grupo, foram escolhidos os modelos de Grace e Ishii-Zuber. Para as condições operacionais analisadas, notou-se uma melhor performance dos modelos com múltiplas geometrias de bolhas em descrever os perfis radiais de fração volumétrica local de gás, sendo que dentre os modelos avaliados, o modelo de Ishii-Zuber foi o que apresentou melhor aproximou os resultados numéricos dos experimentais.

Buscando compreender um pouco melhor o motivo da aparente superioridade dos modelos de mais de uma geometria de bolhas em relação aos modelos de bolhas esféricas, observada neste caso em análise, avaliou-se o regime de bolhas local. Embora existissem desvios maiores ou menores para cada simulação dos quatro modelos utilizados, notou-se que em todos os casos, o regime de bolhas estabelecido localmente era o de bolhas elipsoidais distorcidas. O que poderia explicar em parte o motivo do maior sucesso dos modelos de Grace e Ishii-Zuber em prever os perfis radiais de fração volumétrica de gás.

Diversos trabalhos hidrodinâmicos em colunas de bolhas utilizam o modelo k-epsilon para descrever os efeitos turbulentos sobre a fase contínua. Contudo, alguns trabalhos recentes vinham apontando para uma variante deste modelo clássico de duas equações, o modelo RNG k-epsilon. Apesar das semelhanças entre os dois, observaram-se diferenças nas previsões dos perfis radiais de fração volumétrica de gás. Ambos os modelos forneceram boas aproximações com os dados experimentais, mas o modelo RNG k-epsilon foi aquele que obteve uma aproximação mais próxima da experimentação.

## Sugestões para Trabalhos Futuros

Com a finalidade de expandir e aperfeiçoar a modelagem obtida, sugerem-se alguns tópicos que não foram abordados neste trabalho:

- Considerar as interações gás-sólido e sólido-sólido, buscando implementar correlações capazes de prever corretamente a hidrodinâmica do escoamento multifásico.
- Avaliar outros modelos de arraste para a interação entre as fases líquido e sólido, buscando um modelo capaz de descrever o escoamento de uma gama maior de concentrações de sólidos no leito.
- Avaliar a capacidade dos modelos em descrever a hidrodinâmica prevendo a inclusão de um distribuidor da fase gasosa, bem como analisar quais impactos a adição desta estrutura trará para os resultados numéricos.
- Buscar e implementar métodos estatísticos nos estudos em CFD, buscando avaliar incertezas associada às estimativas, como a incerteza estatística e incerteza da simulação. Em casos de trabalhos experimentais futuros, avaliar também as incertezas oriundas dos equipamentos de medição.

# Referências Bibliográficas

- AKITA, K., YOSHIDA, F. Gas Holdup and Volumetric Mass Transfer Coefficient in Bubble Columns. *Industry and Engineering Chemistry Process Design*, vol. 12, pp. 76-80, 1973.
- BOUAIFI, M., HEBRARD, G., BASTOUL, D., ROUSTAN M. A Comparative Study of Gas Holdup, Bubble Size, Interfacial Area and Mass Transfer Coefficients in Stirred Gas-Liquid Reactors and Bubble Columns. *Chemical Engineering and Processing*, vol. 46, pp. 5210-5220, 2007.
- ANSYS, INC. *CFX-12 User's Guide*, 2009.
- CLIFT, R., GRACE, J. R., WEBER, M. E. *Bubbles, Drops and Particles*. San Diego, EUA; Academic Press Inc., 1978.
- DECKWER, W.D. *Bubble Column Reactors*. Chichester, Inglaterra; John Wiley & Sons Ltd, 1992.
- DIAS, D. B. *Avaliação de Técnicas de Fluidodinâmica Computacional em Ciclones*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2009, 37 p. Dissertação de Mestrado.
- DIONÍSIO, R. P. *Simulação Tridimensional de Uma Coluna de Bolhas - Diferentes Abordagens Geométricas e Modelagem*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2008, 51 p. Dissertação de Mestrado.
- EKAMBARA, K., DHOTRE, M. T. CFD Simulation of Bubble Column. *Nuclear Engineering and Design*, vol. 240, pp. 963-969, 2010.
- GANDHI, B., PRAKASH, A., BERGOUGNOU, M. A. Hydrodynamic Behaviour of Slurry Bubble Column at High Solids Concentrations. *Powder Technology*, vol. 103, pp. 80-94, 1999.

- HADINOTO, K. Predicting Turbulence Modulations at Different Reynolds Numbers in Dilute-Phase Turbulent Liquid-Particle Flow Simulations. *Chemical Engineering Science*, vol. 65, pp. 5297-5308, 2010.
- HIBIKI, T., ISHII, M. Two-group Interfacial Area Transport Equations at Bubbly-to-Slug Flow Transition. *Nuclear Engineering and Design*, vol. 202, pp. 39-76, 2000.
- HYNDMAN, C. L., LARACHI, F., GUY, C. Understanding Gas-Phase Hydrodynamics in Bubble Columns: a Convective Model Based on Kinect Theory. *Chemical Engineering Science*, vol. 52, pp. 63-77, 1997.
- ISHII, M., ZUBER, N. Drag Coefficient and Relative Velocity in Bubbly, Droplet or Particulate Flows. *AIChE Journal*, vol. 25, pp. 843-855, 1979.
- ITYOKUMBUL, M. T. A Non-Parametric Method for Particle Settling Velocity Determination in a Slurry Bubble Column. *The Chemical Engineering Journal*, vol. 54, pp. 1-6, 1994.
- JIA, X., WEN, J., FENG, W., YUAN Q. Local Hydrodynamics Modeling of a Gas-Liquid-Solid Three-Phase Airlift Loop Reactor. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 46, pp. 5210-5220, 2007.
- JOSHI, J. B. Computational Flow Modelling and Design of Bubble Column Reactors. *Chemical Engineering Science*, vol. 56, pp. 5893-5933, 2001.
- TABIB, M. V., ROY, S. A., JOSHI, J. B. CFD Simulation of Bubble Column - An Analysis of Interphase Forces and Turbulence Models. *Chemical Engineering Journal*, vol. 139, pp. 589-614, 2008.
- KANTARCI, N., BORAK, F., ULGEN, K. O. Bubble Column Reactors. *Process Biochemistry*, vol. 40, pp. 2263-2283, 2005.
- KRIEGER, I. M., DOUGHERTY, T. J. A Mechanism for Non-Newtonian Flow in Suspensions of Rigid Spheres. *Transactions of the Society of Rheology*, vol. III, pp. 137-152, 1979.
- KRISHNA, R., VAN BATEN, J. M., URSEANU, M. I., ELLENBERGER, J. Design and Scaleup of a Bubble Column Slurry Reactor for Fischer-Tropsch Synthesis. *Chemical Engineering Science*, vol. 56, pp. 537-545, 2001.

- KRISHNA, R., VAN BATEN, J. M. Eulerian Simulation Strategy for Scaling Up a Bubble Column Slurry Reactor for Fischer-Tropsch Synthesis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 43, pp. 4483-4493, 2004.
- LABORDE-BOUTET, C., LARACHI, F., DROMARD, N., DELSART, O., SCHWEICH, D. CFD Simulations of Bubble Column Flows: Investigations on Turbulence Models in RANS Approach. *Chemical Engineering Science*, vol. 64, pp. 4399-4413, 2009.
- LI, H., PRAKASH, A. Heat Transfer and Hydrodynamics in a Three-Phase Slurry Bubble Column. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 36, pp. 4688-4694, 1997.
- MALISKA, C. R. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional. Rio de Janeiro, Brasil: 2ª Edição; LTC Editora, 2004.
- MATONIS, D., GIDASPOW, D., BAHARY, M. CFD Simulations of Flow and Turbulence in a Slurry Bubble Column. *AIChE Journal*, vol. 48, pp. 1413-1429, 2002.
- MEIER, H. F. *Modelagem Fenomenológica e Simulação Bidimensional de Ciclones por Técnicas de Fluidodinâmica Computacional*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2008, 19 p. Tese de Doutorado.
- PANG, M. J., WEI, J. J. Analysis of Drag and Lift Coefficient Models of Bubbly Flow Systems for Low to Median Reynolds Number. *7<sup>th</sup> International Conference on Multiphase Flow*, Tampa, EUA, 2010.
- PANTANKAR, S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Nova York, EUA; McGraw-Hill, 1984.
- RAMACHANDRAN, P. A., CHAUDHARI, R. V. Three-Phase Catalytic Reactors. Nova York, EUA; Gordon and Breach, 1983.
- ROSA, L. M. *Aplicação de Técnicas CFD para o Cálculo de Escoamento em Meio Reativo em Riser*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2008, 56 p. Tese de Doutorado.
- ROY, N. K., GUHA, D. K., RAO, M. N. Suspension of Solids in a Bubbling Liquid: Critical Gas Flow Rates for Complete Suspension. *Chemical Engineering Science*, vol. 19, pp. 215-225, 1964.

- RUSCHE, R. *Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions*. London: Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science, Technology & Medicine, 2002, 33 p. Tese de Doutorado.
- SANTOS, C. M. *Simulação Tridimensional de Uma Coluna de Bolhas - Diferentes Abordagens Geométricas e Modelagem*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2005, 65 p. Dissertação de Mestrado.
- SCHALLENBERG, J., ENSS, J. H., DIETMAR, C. H. The important Role of Local Dispersed Phase Hold-ups for the Calculation of Three-Phase Bubble Columns. *Chemical Engineering Science*, vol. 60, pp. 6027-6033, 2005.
- SILVA, M. K., D'AVILA, M. A., MORI, M. CFD Modelling of a Bubble Column with an External Loop in the Heterogeneous Regime. *Chemical Engineering Science*, accepted in press, 2010.
- SOKOLICHIN, A., EINGERBERGER, G., LAPIN, A. Simulation of Buoyancy Driven Bubbly Flow: Established Simplifications and Open Questions. *Fluid Mechanics and Transport Phenomena*, vol. 50, pp. 24-45, 2004.
- STICKEL, J. J., POWELL, R. L. Fluid Mechanics and Rheology of Dense Suspensions. *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 37, pp. 129-149, 2005.
- STOLOJANU, V., PRAKASH, A. Hydrodynamic Measurements in a Slurry Bubble Column Using Ultrasonic Techniques. *Chemical Engineering Science*, vol. 52, pp. 4225-4230, 1997.
- THORAT, B. N., JOSHI, J. B. Regime Transition in Bubble Columns: Experimental and Predictions. *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 28, pp. 423-430, 2004.
- TROSHKO, A. A., ZDRAVISTCH, F. CFD Modeling of Slurry Bubble Column Reactors for Fischer-Tropsch Synthesis. *Chemical Engineering Science*, vol. 64, pp. 892-903, 2009.
- WHITE, F. M. *Viscous Fluid Flow*. Nova York, EUA; McGraw-Hill, 1974.
- WU, C. *Heat Transfer and Bubble Dynamics in Slurry Bubble Columns for Fischer-Tropsch Clean Alternative Energy*. Saint Louis: Department of Energy, Environmental and Chemical Engineering, Washington University, 2007, 54 p. Tese de Doutorado.

- WU, C., SUDDARD, K., AL-DAHMAN, M. H. Bubble Dynamics Investigation in a Slurry Bubble Column. *AIChE Journal*, vol. 54, pp. 1203-1212, 2008.
- XUE, J., AL-DAHMAN, M. H., DUDUKOVIC, M. P., MUDDE, R. F. Bubble Dynamics Measurements Using Four-Point Optical Probe. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 81, pp. 375-381, 2003.
- XUE, J., AL-DAHMAN, M. H., DUDUKOVIC, M. P., MUDDE, R. F. Bubble Velocity Size and Interfacial Measurements in a Bubble Column by 4-Point Optical Probe. *Fluid Mechanics and Transport Phenomena*, vol. 54, pp. 350-363, 2007.
- YANG, G. Q., DU, B., FAN, L. S. Bubble Formation and Dynamics in Gas-Liquid-Solid Fluidization - A Review. *Chemical Engineering Science*, vol. 62, pp. 2-27, 2007.
- ZHANG, D. Z., VANDERHEYDEN, W. B. The Effects of Mesoscale Structures on the Macroscopic Momentum Equations for Two-phase Flows. *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 28, pp. 805-822, 2002.