

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO

Desenvolvimento de Processos Químicos - ACDPQ

**SIMULAÇÃO TRIDIMENSIONAL DE UMA COLUNA DE BOLHAS –
DIFERENTES ABORDAGENS GEOMÉTRICAS E MODELAGEM**

Autor: ENG. RENATO PRADO DIONÍSIO

Orientador: PROF. DR. MILTON MORI

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Campinas - São Paulo
02/ 2008

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

D622s Dionísio, Renato Prado
 Simulação tridimensional de uma coluna de bolhas -
 diferentes abordagens geométricas e modelagem / Renato
 Prado Dionísio.--Campinas, SP: [s.n.], 2008.

 Orientador: Milton Mori
 Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
 Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

 1. Reatores químicos. 2. Simulação por computador. 3.
 escoamento multifásico. 4. Gases líquidos. 5. Métodos do
 volumes finitos. I. Mori, Milton. II. Universidade Estadual
 de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III.
 Título.

Título em Inglês: Three-dimensional simulation of bubble columns-model
 and geometrical approaches on hydrodynamics

Palavras-chave em Inglês: Bubble collumns, CFD, External loop, Sparger

Área de concentração: Desenvolvimento de processos Químicos

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora: Marcos Akira D'Ávila, Reynaldo Taylor de Lima

Data da defesa: 12/02/2008

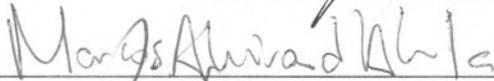
Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

FOLHA DE APROVAÇÃO

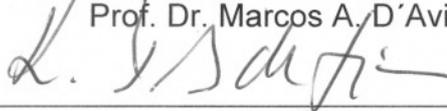
Dissertação de Mestrado defendida por Renato Prado Dionísio e aprovada em 12 de Fevereiro de 2008 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. — Milton Mori



Prof. Dr. Marcos A. D'Avila



Prof. Dr. Reynaldo Taylor de Lima

FOLHA DE VERSÃO FINAL

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química.


Prof. Dr. - Milton Mori

DEDICATÓRIA E AGRADECIMENTOS

Dedico este trabalho aos meus pais, Orvando e Christina, como uma singela homenagem em gratidão ao que representam para mim.

Agradeço a Deus,

À minha família, e também à minha encantadora namorada Ana, pelo apoio em todas ocasiões.

Ao professor Milton Mori, sempre disposto a buscar o melhor para seus alunos, e ao Pesquisador Marcos A. D'Avila pela grande contribuição ao trabalho.

Aos amigos do laboratório LMSPQ, por sua amizade, dedicação, e pelos muitos momentos de descontração pelos quais passamos juntos.

À PETROBRAS, pelo apoio financeiro, e à todos que direta ou indiretamente contribuíram para a possibilidade do desenvolvimento deste trabalho.

RESUMO

Colunas de bolhas são equipamentos utilizados para realizar operações de transferência de massa e/ou calor entre uma fase gasosa e uma fase líquida, ou entre uma fase gasosa e uma fase sólida dissolvida ou suspensa na fase líquida com ou sem reação química. Elas são equipamentos de simples operação, mas que apresentam uma fluidodinâmica bastante complexa. Seu funcionamento básico é dado pela injeção de um gás (fase dispersa) na base da coluna em um meio líquido (fase contínua). Elas são empregadas nas mais diversas áreas industriais, como processos de química fina, reações de oxidação, reações de alquilação, síntese de Fischer-Tropsch, tratamento de efluentes, reações de fermentação e produção de proteínas, e mais recentemente, em cultura de células devido à sua simplicidade de construção e operação.

Processos que utilizam esse tipo equipamento se aproveitam das vantagens que eles apresentam como o fato de não possuírem partes móveis e propiciarem uma grande área de contato entre as fases e conseqüentes taxas elevadas de transferência de massa e calor, o que favorece tanto as reações químicas quanto as biológicas.

O objetivo deste trabalho foi analisar computacionalmente, através da fluidodinâmica computacional (CFD), a influência de parâmetros geométricos (diferentes tipos de distribuidor de fase gasosa e recirculação externa da fase líquida na coluna) na fluidodinâmica do sistema. Foram realizadas simulações tridimensionais de colunas de bolhas empregando o pacote computacional ANSYS/CFX 5.11 que utiliza o método dos volumes finitos na discretização das equações diferenciais que governam o escoamento em colunas de bolhas de escala de laboratório.

Foi observado que a inclusão de distribuidores de fase gasosa na malha computacional acarretou em melhor predição dos perfis de fração volumétrica de gás nas colunas, resolvendo os problemas de aproximações geométricas arbitrárias sobre a forma de se distribuir o gás pela coluna em casos que a simples injeção uniforme apresenta problemas. A utilização dessa abordagem, no entanto, deve ser cuidadosamente considerada devido ao aumento do esforço computacional.

Também foi observada uma mudança notável no comportamento do perfil de velocidade axial da fase líquida devido à utilização de uma recirculação externa à coluna (*External Loop*), acarretando um decréscimo no valor total de fração volumétrica de gás na coluna (*Total gas hold-up*). No equipamento com o "*External loop*", o perfil de velocidade axial do líquido é ascendente em todo o corpo principal da coluna, diferindo das colunas cilíndricas verticais que possuem fluxo ascendente no centro da coluna e descendente nas regiões próximas às paredes. Os resultados mostraram que a metodologia utilizada no trabalho é adequada e capaz de prever comportamentos importantes nos equipamentos bifásicos em questão.

Palavras Chave:

Colunas de bolhas, CFD, Recirculação Externa, Distribuidores

ABSTRACT

Bubble columns are equipments used to perform mass and heat transfer operations between a gas and a liquid phase, or between a gas phase and a solid phase dissolved or suspended in the liquid phase with or without chemical reaction. They are of simple operation, but offer room for a quite complex multiphase flow. Its basic operation is given by the injection of a gas phase (dispersed phase) at the base of the column passing through a liquid medium (continuous phase). They are employed in a broad variety of industrial sectors, such as processes of fine chemicals, oxidation reactions, alkylation reactions, Fischer-Tropsch synthesis, effluents treatment, fermentation and production of proteins and more recently in cell culture because of its simplicity of construction and operation.

Processes that use such equipment take advantage of the fact that they have no moving parts and offer a high contact area between phases and consequent elevated mass and heat transfer rates, which favours both chemical and biological reactions.

The goal of this study is to use computational fluid dynamics (CFD) to examine the influence of geometric parameters (different types of gas spargers and a liquid phase external loop recirculation) and some approximations usually made in computational studies published in the literature.

In this work three-dimensional simulations of bubble columns were performed using ANSYS/CFX 5.11 computational package, which handles the finite volume method for discretizing the differential equations representing the flow in order to study laboratory scale bubble columns.

It was observed that the inclusion of gas spargers in the computational mesh of bubble column simulations improved the description of the gas volume fraction profiles in the columns and solved the problems of arbitrary decisions on how to distribute the entering gas in cases where the simple uniform injection present problems. Using this approach, however, should be considered with care due to additional computational effort needed to achieve the desired solution.

There was also a remarkable change in the behavior of the liquid phase axial velocity profiles due to the use of an external loop to the column, causing a decrease in the value of the total amount of gas present in the column (Total gas holdup). In the external loop equipment, the liquid axial velocity profile is upward throughout the entire main column, differing from cylindrical vertical columns in which the liquid flow is upward at the center of the column and is downward in regions near the walls. The results showed that the methodology used in this work is adequate, and able to predict bubble column and other two-phase equipment behaviour.

Key words:

Bubble columns, CFD, External loop, Sparger

SUMÁRIO

RESUMO.....	6
ABSTRACT	7
LISTA DE FIGURAS.....	9
LISTA DE TABELAS	10
NOMENCLATURA	11
1. - INTRODUÇÃO	14
1.1. - Equipamento	14
1.2. – Fluidodinâmica computacional	18
1.3. - Objetivos	20
1.4. - Apresentação do trabalho	21
2. - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	23
2.1. – Trabalhos Experimentais.....	23
2.1.1. - Gas holdup e efeitos geométricos.....	23
2.1.2. - Regimes de operação	26
2.2. - Revisão de trabalhos de CFD ligados à modelagem de colunas de bolhas.....	28
3. – MODELAGEM MATEMÁTICA E MÉTODOS NUMÉRICOS	32
3.1. - Modelagem Matemática	32
3.1.1. – Equações de conservação	32
3.1.2. - Força de Arraste.....	34
3.1.3. - Turbulência	37
3.2. – Métodos Numéricos.....	42
3.2.1. – Procedimento computacional	43
3.2.2. – Propriedades, condições de contorno e parâmetros das simulações.....	44
4. –RESULTADOS	47
4.1. – Coluna com loop externo.....	47
4.1.1. – Malhas geométricas e teste de malhas	48
4.1.2. – Resultados de fração volumétrica da fase gasosa	52
4.1.3. – Resultados gerais das colunas com loop externo	57
4.1.4. – Resultados de velocidade axial da fase líquida.....	60
4.2. – Comparação dos resultados com colunas sem loop externo	64
4.2.1. – Fração volumétrica Total de gás (Total Gas Holdup)	66
5. – CONCLUSÕES E PROPOSTAS PARA TRABALHOS FUTUROS	70
5.1. – Conclusões.....	70
5.2. – Trabalhos futuros.....	71
6. – BIBLIOGRAFIA	72

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 - Coluna de bolhas. (Charité).....	14
Figura 1.2 - Correlação entre números adimensionais e formas das partículas. (Clift, Grace e Weber , 1978).....	17
Figura 2.1 – Diferenças entre distribuidores da fase gasosa (Decker, 1992).....	25
Figura 2.2 – Regimes de operação (Wild et al, 2003).....	27
Figura 4.1 – Aparato experimental – Wang (2004).....	48
Figura 4.2 – Fração vol. média ao longo do tempo (ponto com 4,6 m de altura)	49
Figura 4.3 – Malha experimental – <i>Loop</i> externo	49
Figura 4.4 – Teste de malha e tempos de média.....	50
Figura 4.5 – Malha do distribuidor da fase gasosa de Wang et al 2004.	51
Figura 4.6 – Malha do distribuidor e interface fluido-fluido.	52
Figura 4.7 – Perfis de fração volumétrica	54
Figura 4.8 – Perfis de fração volumétrica	55
Figura 4.9 – Perfis de fração volumétrica	56
Figura 4.10 – Perfil de vel. da fase líquida.....	58
Figura 4.11 – Perfil de fração vol. da fase gasosa	58
Figura 4.12 – Planos transversais de fração volumétrica de gás. (A = 0,8m; B = 2,4m; C = 4,6m).....	59
Figura 4.13 – Mapas de vetores de velocidade da fase líquida (Topo da coluna).....	59
Figura 4.14 – Mapas de vetores de velocidade da fase líquida (Base da coluna)	60
Figura 4.15 A - Velocidade Axial do líquido	61
Figura 4.15 B – Velocidade Axial do líquido	61
Figura 4.16 A – Velocidade Axial do líquido	62
Figura 4.16 B – Velocidade Axial do líquido	62
Figura 4.17 A – Velocidade Axial do líquido	63
Figura 4.17 B – Velocidade Axial do líquido	63
Figura 4.18 A – Perfis de vel. Axial do líquido.....	65
Figura 4.18 B – Perfis de fração vol. do gás	65
Figura 4.19 A – Perfis de vel. axial do líquido.....	65
Figura 4.19 B – Perfis de fração vol. do gás	65
Figura 4.20 – <i>Total Gas holdup</i> . Variação com a velocidade de entrada	66
Figura 4.21 – <i>Total Gas holdup</i> . Comparação entre colunas	67
Figura 4.22 – <i>Gas holdup</i> em porções da coluna – Diferentes velocidades.....	68
Figura 4.23 – <i>Gas holdup</i> em porções da coluna – Diferentes colunas.....	69

LISTA DE TABELAS

TABELA 3.1 – Propriedades dos fluidos a 25° C	44
TABELA 3.2 - Condições de contorno.....	45
TABELA 3.3 - Diâmetro das bolhas.....	45
TABELA 4.1 – Desvios dos valores experimentais ($U_G = 0,8$ cm/s).....	55
TABELA 4.2 – Desvios dos valores experimentais ($U_G = 1,6$ cm/s).....	56
TABELA 4.3 – Desvios dos valores experimentais ($U_G = 3,2$ cm/s).....	57

NOMENCLATURA

Letras latinas

$A_{\alpha\beta}$	Área superficial por unidade de volume	$m^2.m^{-3}$
C_D	Coeficiente de arraste	$kg.m^3.s^{-1}$
C_ε	Constante do modelo de turbulência (k- ε)	-
$C_{\varepsilon 2}$	Constante do modelo de turbulência (k- ε)	-
c_s	Constante do modelo de turbulência (Reynolds Stress)	-
$C_{\mu RS}$	Constante do modelo de turbulência (Reynolds Stress)	-
d_β	diâmetro médio das bolhas	m
Eo	Número de Eötvös	-
F_p	Força estática	$kg.m.s^{-2}$
F_g	Força gravitacional	$kg.m.s^{-2}$
g	vetor gravidade,	$m.s^{-2}$
k	Energia cinética turbulenta por unidade de massa	$m^2.s^{-2}$
Mo	Número de Morton	-
M_α	Forças interfaciais atuando sobre a fase α	$kg.m.s^{-2}$
$M_{\alpha\beta}^D$	Força de arraste	$kg.m.s^{-2}$
$M_{\alpha\beta}^L$	Força lift	$kg.m.s^{-2}$
$M_{\alpha\beta}^{LUB}$	Força de lubrificação da parede	$kg.m.s^{-2}$
$M_{\alpha\beta}^{VM}$	Força de massa virtual	$kg.m.s^{-2}$
$M_{\alpha\beta}^{TD}$	Força de dispersão turbulenta	$kg.m.s^{-2}$
M_S	Força de pressão do sólido.	$kg.m.s^{-2}$
p'	Pressão modificada	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
p_α	Pressão na fase α	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
P_k	Produção de turbulência cisalhante	$kg.m^{-1}.s^{-3}$
Re	Número de Reynolds	-
r_β	fração volumétrica da fase β	-
r_{dm}	Máximo empacotamento da fase dispersa	-

S_E	Fonte de energia	$kg.m^{-1}.s^{-3}$
S_M	Fonte de momento	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
$S_{M\alpha}$	Fontes de massa devido a forças externas	kg
t	Tempo	s
U	Magnitude da velocidade	$m.s^{-1}$
U_G	Velocidade superficial de entrada do gás	$m.s^{-1}$
\vec{U}_α	Vetor velocidade da fase α	$m.s^{-1}$
\bar{U}	Velocidade média	$m.s^{-1}$
u	Flutuação da velocidade	$m.s^{-1}$

Letras gregas

ε	Taxa de dissipação da turbulência	$m^2.s^{-3}$
σ	Tensão superficial	$kg.s^{-2}$
ρ	Densidade	$kg.m^{-3}$
σ	Tensor de stress incluindo pressão	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
σ_k	Constante do modelo de turbulência (k- ε)	-
σ_ε	Constante do modelo de turbulência (k- ε)	-
ϕ_{ij}	Correlação pressão esforço	$kg.m^{-1}.s^{-3}$
μ	Viscosidade molecular (dinâmica)	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
μ_t	Viscosidade turbulenta	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
μ_{eff}	Viscosidade efetiva, $\mu + \mu_t$	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
Γ	Difusividade	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
ϕ	Variável escalar geral	-
δ	Matrix identidade ou Função delta de Kronecker	-
$\sigma_{\varepsilon RS}$	Constante do modelo de turbulência (Reynolds Stress)	-
ρ_α	Densidade da fase α	$kg.m^{-3}$

Superescritos

\vec{A}	Vetor A
\bar{A}	Média temporal de A
A^T	Matriz transposta de A

Subscritos

α	Fase típica, contínua
β ,	Fase típica, dispersa
c	Contínua
d	Dispersa
eff	Efetivo

Siglas

CFD	Fluidodinâmica computacional (Computational Fluid Dynamics)
FDM	Método das diferenças finitas (Finite difference Method)
FEM	Método dos elementos finitos (Finite Element Method)
FVM	Método dos volumes finitos (Finite Volume Method)
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
MUSIG	Multi-Size-Group
PDE	Equação diferencial parcial (Partial Differential Equation)

1. - INTRODUÇÃO

1.1. - Equipamento

Colunas de bolhas são equipamentos destinados a realizar o contato entre uma fase gasosa e uma fase líquida, com o intuito de promover transferência de calor e massa com ou sem reação química, entre a fase gasosa e a fase líquida, ou com uma fase sólida dissolvida ou em suspensão na fase líquida. Elas são bastante utilizadas por possuírem excelentes características de transferência de calor e massa, baixo custo operacional e de manutenção, simplicidade de construção e ausência de partes móveis (Kantarci et al., 2005).

Um reator de coluna de bolhas, em sua forma mais simples, é constituído por um cilindro vertical preenchido de líquido, no qual um gás é injetado pela sua base através de um distribuidor (Figura 1.1). A configuração do distribuidor pode variar bastante dependendo da aplicação e das condições de operação desejadas. Dentre os tipos de distribuidores existentes podem-se citar alguns exemplos de modelos utilizados, como os de prato perfurado, prato sinterizado, poroso, membranas, anéis, etc.

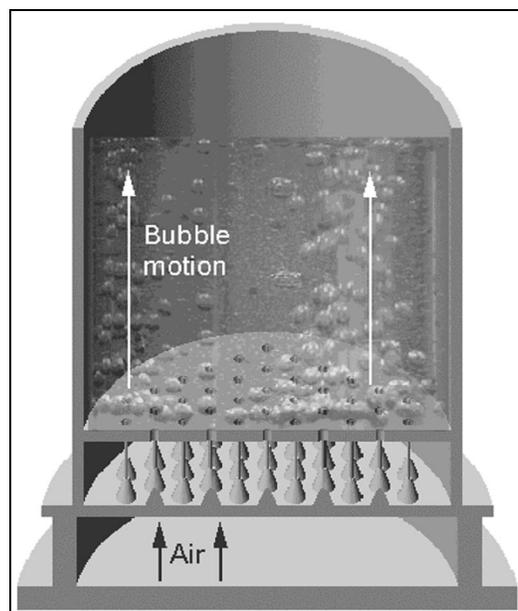


Figura 1.1 - Coluna de bolhas. (Charité)

A fase líquida pode ser estacionária, fluir em co-corrente ou contra-corrente, mas diferentemente de outras operações de transferência de massa, o fluxo em contra-corrente para colunas de bolhas, geralmente parece não apresentar vantagens significativas.

Devido à sua simples construção e operação, e por geralmente não apresentarem partes móveis, as colunas de bolhas podem ser utilizadas sem problemas com gases agressivos em uma enorme gama de temperaturas e pressões (Decker, 1992).

Algumas reações importantes são realizadas em reatores de colunas de bolhas, tais como produção de acetaldeído, ácido acético, ácido benzóico, ácido ftálico, dicloroetano, entre outras, sendo que a maioria dos processos gás-líquido necessita da presença de catalisadores dissolvidos na fase líquida.

Reações envolvendo a presença de catalisadores sólidos suspensos na fase líquida também são bastante importantes e comuns na indústria química, podendo-se citar como exemplos a Hidrogenação do benzeno com níquel suspenso, a produção de peróxido de hidrogênio (Decker, 1992) e a síntese de Fischer-Tropsch. Esta última converte monóxido de carbono, obtido a partir de metano, carvão, biomassa, entre outros, através de reação com hidrogênio em várias formas de hidrocarbonetos líquidos. O processo foi muito utilizado pela indústria alemã durante a segunda guerra mundial. Esta tecnologia elimina os principais entraves na comercialização do gás natural, como a baixa densidade de energia e os altos custos de transporte. A disponibilidade do Diesel limpo, com alto número de cetano e baixo teor de poluição, tem hoje, um mercado de grande potencial de crescimento.

As colunas de bolhas operam em diferentes regimes de fluidização dependendo principalmente da quantidade de gás presente na coluna. Para baixas velocidades superficiais de entrada de gás (menor vazão de gás) as bolhas possuem praticamente o mesmo tamanho e a mesma velocidade de ascensão. À medida que a velocidade superficial aumenta, os efeitos devido às interações

entre as bolhas e a fase contínua aumentam, assim como as características físicas das bolhas, acarretando diversos efeitos fluidodinâmicos, que serão comentados posteriormente. Neste trabalho consideraram-se somente casos com fluidizações no regime de bolhas homogêneo (ver seção 2.1.2).

Outra característica relevante do escoamento em colunas de bolhas reside no fato de as bolhas não se apresentarem sob a mesma forma em toda a coluna, interagindo de maneira diferente com as outras fases. As formas mais usuais são descritas abaixo (Clift, Grace e Weber , 1978):

- “Esférica”: Bolhas ou gotas são consideradas esféricas se a razão entre o menor e o maior eixo estiver acima de 0,9. Normalmente esta forma se apresenta quando as forças de tensão e/ou viscosas são muito mais importantes do que as forças gravitacionais.
- “Elipse”: O termo elipsoidal é dado às bolhas que se apresentam achatadas nos pólos, porém suas formas podem diferir grandemente de uma elipse. Além disso, partículas elipsoidais comumente sofrem dilatações periódicas, o que dificulta bastante sua caracterização.
- “Touca” ou “Cap”: Bolhas ou gotas grandes tendem a se achatar e podem ser vistas como se fossem constituídos por segmentos obtidos de cortes transversais das formas esféricas e elipsoidais.

É possível preparar uma correlação gráfica generalizada (Figura 1.2) para as formas das partículas em termos do Número de Eötvös , E_o , (Equação 1.1), (que representa a razão entre forças gravitacionais e tensões superficiais) e número de Morton , Mo , (Equação 1.2), que é uma combinação de outros números adimensionais (Números de Weber, Froude e Reynolds) *versus* número de Reynolds , Re , (Equação 1.3), que representa a razão entre forças inerciais e forças viscosas. Também há esboços dos formatos das bolhas descritas na mesma figura.

$E_o = \frac{g \Delta \rho d_b^2}{\sigma} \quad (1.1)$	$Mo = \frac{g \mu^4 \Delta \rho}{\rho^2 \sigma^3} \quad (1.2)$	$Re = \frac{\rho d_b U}{\mu} \quad (1.3)$
--	--	---

Onde:

<p>g é aceleração da gravidade;</p> <p>σ é a tensão superficial;</p> <p>d_b é o diâmetro da bolha;</p> <p>ρ é densidade das fases;</p>	<p>$\Delta \rho$ é a diferença de densidade entre as fases;</p> <p>U é a magnitude do vetor velocidade;</p> <p>μ é a viscosidade do meio fluido;</p>
--	---

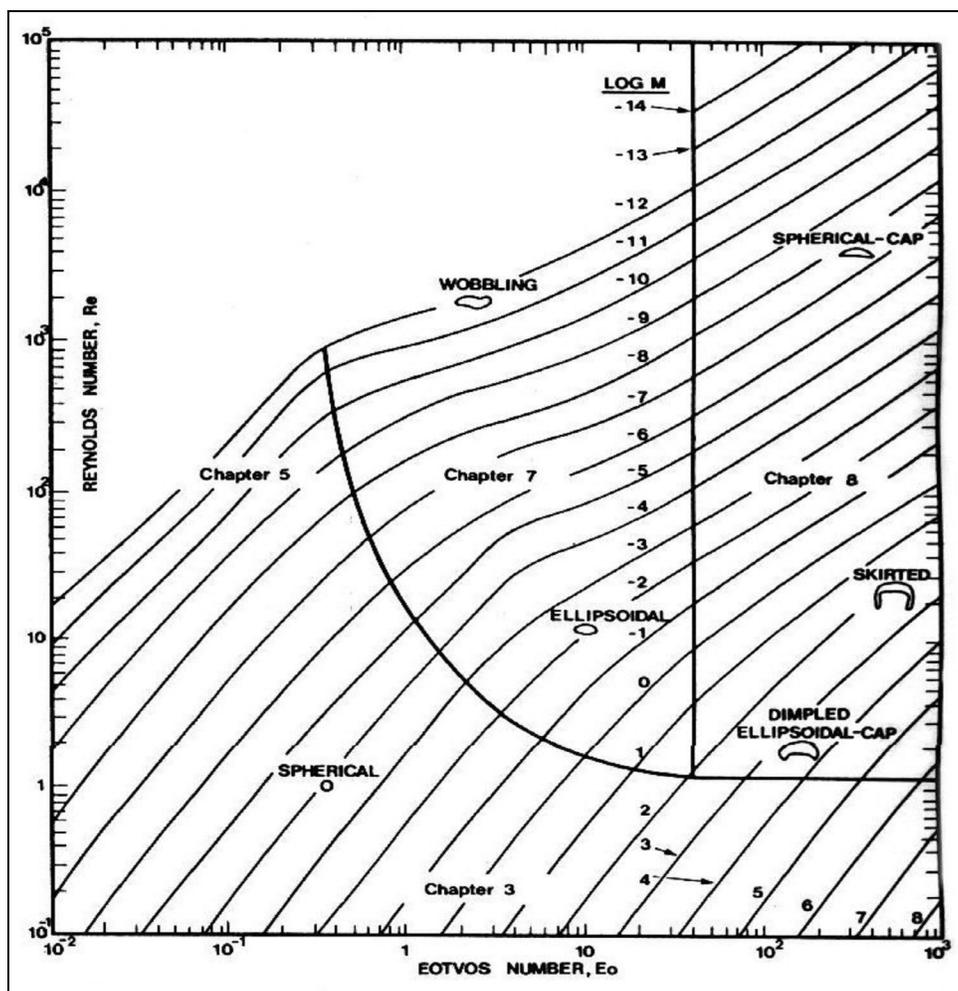


Figura 1.2 - Correlação entre números adimensionais e formas das partículas. (Clift, Grace e Weber, 1978)

Apesar de sua simples construção e operação, as colunas de bolhas fornecem um ambiente para interações hidrodinâmicas bastante complexas, e a modelagem e simulação de sua fluidodinâmica baseada somente nas equações

fundamentais de transporte requer um esforço computacional inviável atualmente. Daí que a correta determinação de parâmetros globais representativos do sistema é de notada importância para operações de *scale-up* e *design* de equipamentos.

Existe uma sensibilidade bastante acentuada dos fenômenos hidrodinâmicos, tais como a fração volumétrica de gás (*gas holdup*) e transferência de massa, tanto em relação às propriedades dos fluidos como em relação a fatores geométricos da coluna, o que causa grandes dificuldades ao se tentar correlacionar as variáveis relevantes nas colunas de bolhas.

1.2. – Fluidodinâmica computacional

Fluidodinâmica computacional (Em inglês, *Computational Fluid Dynamics*, ou simplesmente CFD) é uma metodologia que consiste em obter soluções numéricas de problemas da mecânica dos fluidos usando métodos numéricos. Com o advento de computadores de alta velocidade e com grande capacidade de memória, a fluidodinâmica computacional tem sido muito utilizada em problemas envolvendo tanto fluidos compressíveis quanto incompressíveis, com escoamento laminar ou turbulento, e em sistemas com ou sem reação química, o que comprova a versatilidade da metodologia.

As equações que governam os fluidos são as equações da continuidade (conservação de massa), a equação de Navier-Stokes (conservação da quantidade de movimento), e a equação da energia. Estas equações dão forma a um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares acopladas (PDEs).

Por causa dos termos não-lineares nestas PDEs, métodos analíticos podem render poucas soluções. Soluções analíticas fechadas são obtidas somente quando estas PDEs podem ser linearizadas (ou quando podem ser feitas simplificações geométricas para casos particulares), ou ainda quando os termos não-lineares naturalmente se cancelam (como no caso dos escoamentos plenamente desenvolvidos nos dutos e dos escoamentos invíscidos e

irrotacionais) ou nos casos onde os termos não-lineares são pequenos quando comparados a outros termos de modo que possam ser negligenciados. Se as não-linearidades nas PDEs não podem ser negligenciadas (o que é a situação encontrada na maioria dos escoamentos presentes em problemas de engenharia), métodos numéricos deverão ser empregados.

Resolver um problema particular utilizando CFD consiste em, primeiramente, discretizar o domínio físico em que ocorre o escoamento, como por exemplo, o interior de uma coluna de bolhas, um ciclone ou um forno queimador. Os métodos de discretização mais empregados em CFD são o método das diferenças finitas (FDM), o método dos volumes finitos (FVM) e o método dos elementos finitos (FEM).

Para cada elemento da malha gerada¹ são associadas geralmente entre 3 a 20 variáveis, tais como pressão, três componentes de velocidade, densidade, temperatura, etc. Além disso, a fim de se descrever importantes fenômenos físicos, tais como turbulência, é necessário trabalhar com malhas bastante refinadas dentro do domínio.

Sistemas de equações não lineares são tipicamente resolvidos pelo método de Newton, que por sua vez requer a solução direta ou iterativa de grandes e esparsos sistemas de equações algébricas lineares. Métodos de resolução de tais sistemas de equações constituem um tópico muito estudado hoje em dia, por se tratar da parte do problema que mais consome tempo computacional e, também, porque a habilidade de resolver tais sistemas é um fator limitante para o tamanho e a complexidade do problema físico que pode ser abordado.

Uma vez que a solução é encontrada, é preciso analisar, visualizar e apresentar os resultados obtidos. Aí entram as técnicas de visualização. Tais técnicas são úteis, pois ajudam a entender a natureza do problema, a interação dos algoritmos com a arquitetura do computador, ajudam a analisar a performance

¹ Malha é o nome dado ao conjunto de elementos ou subdomínios gerados ao se discretizar a região de interesse para resolução do problema

do código e, principalmente, auxiliam a descobrir possíveis falhas na modelagem e no código.

As técnicas de CFD têm um grande potencial nas áreas de processos químicos devido à drástica redução no tempo necessário e no custo envolvido no projeto e na previsão de desempenho de equipamentos. Além disso, permitem a visualização dos campos de velocidade, de concentração, de pressão, e de vários outros parâmetros do escoamento, possibilitando uma melhor compreensão dos fenômenos envolvidos e também uma pronta intervenção nas variáveis operacionais ou de projeto dos equipamentos de forma a melhorar o seu desempenho.

1.3. - Objetivos

O objetivo desta tese de mestrado foi analisar através de técnicas de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) a influência de parâmetros e aproximações geométricas usualmente feitas em simulações por CFD do escoamento bifásico (gás-líquido) em colunas de bolhas de escala de laboratório.

Especificamente, o objetivo foi estudar a influência de distribuidores de fase gasosa em simulações do escoamento gás-líquido em colunas de bolhas e também analisar a influência da introdução de uma recirculação externa à coluna nos perfis de fração volumétrica de gás e velocidade axial da fase líquida. O sistema estudado foi Ar-Água a diferentes velocidades superficiais de entrada de ar na parte inferior da coluna.

Usualmente, os distribuidores de fase gasosa não são considerados em sua plenitude na modelagem geométrica em CFD na grande maioria dos trabalhos computacionais presentes na literatura, como nos trabalhos de Xia et al., (2006) e Dhotre et al., (2004), por exemplo. Geralmente, considera-se uma entrada uniforme de gás na base da coluna, ou trabalha-se com apenas um ou poucos furos. Como não há uma distribuição uniforme das fases na base da coluna,

considerar a entrada da fase gasosa em lugares discretos da base pode ser de grande importância em direção a uma representação mais real do escoamento no interior da coluna. Como a área de entrada também é diferente, a velocidade de entrada do gás é muito maior nos furos do distribuidor para a mesma vazão de gás do que se considerássemos entrada uniforme.

Nas simulações foi utilizada a abordagem Euleriana-Euleriana e assumiu-se um tamanho de bolha único para o cálculo do coeficiente de arraste. Foram postuladas três tipos de entrada de gás através da base da coluna, tanto para colunas com recirculação externa como para as que não a possuem. Em um dos casos, definiu-se uma velocidade constante uniformemente distribuída pela base total da coluna, em outro caso têm-se a entrada de gás com velocidade constante e uniforme em 75% da área da base da coluna e, finalmente, uma entrada através de 133 orifícios de 1mm^2 dispostos na base da coluna, que representa um distribuidor de pratos perfurados. Os resultados de fração volumétrica foram comparados com dados experimentais publicados na literatura (Wang et al., (2004).

1.4. - Apresentação do trabalho

Este trabalho está dividido da seguinte maneira:

Capítulo 1 – INTRODUÇÃO. Este capítulo apresenta um resumo do equipamento utilizado nos estudos desta tese de mestrado, as técnicas computacionais utilizadas, as metas e diretrizes do trabalho.

Capítulo 2 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA. Apresenta-se uma revisão dos trabalhos mais relevantes publicados na literatura sobre colunas de bolhas, tanto experimentais quanto computacionais, inserindo o trabalho no estágio atual do conhecimento relativo a esses equipamentos.

Capítulo 3 – MODELAGEM MATEMÁTICA E MÉTODOS NUMÉRICOS. Este capítulo apresenta os modelos matemáticos que descrevem o escoamento em

colunas de bolhas, define o sistema estudado e as condições de contorno utilizadas. Descreve-se também a forma de resolução do problema definido através das técnicas de CFD.

Capítulo 4 – RESULTADOS. Aqui são mostrados os testes de malha realizados, os critérios utilizados nas simulações além de serem apresentados e discutidos os resultados obtidos.

Capítulo 5 – CONCLUSÕES E PROPOSTAS PARA TRABALHOS FUTUROS. Este capítulo descreve, comenta, e tira conclusões gerais acerca dos resultados obtidos no trabalho desenvolvido, além de indicar direções a serem seguidas em trabalhos futuros.

Capítulo 6 – BIBLIOGRAFIA. Finalmente, no capítulo seis são referenciados os artigos, livros e teses mais relevantes consultados durante a realização do trabalho.

2. - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. – Trabalhos Experimentais

Os estudos experimentais recentes de escoamentos em colunas de bolhas se concentram nos seguintes tópicos (Kantarci et al., 2005):

- ✓ Estudos de *gas holdup* e efeitos geométricos nessa variável.
- ✓ Características das bolhas.
- ✓ Regime de operação e fluidodinâmica.
- ✓ Características de transferência de calor e massa.

Neste trabalho não foram tratados os aspectos de transferência de calor e massa nos equipamentos estudados. Essa tarefa fica postergada para estudos posteriores.

2.1.1. - Gas holdup e efeitos geométricos

O *gas holdup* (ε_g) é um parâmetro adimensional que representa a fração volumétrica de gás dentro da coluna e é de suma importância no *design* de colunas de bolhas por estar diretamente ligado ao fenômeno de transporte de massa entre as fases. Existem diferentes métodos para se obter esse parâmetro experimentalmente, desde uma simples observação visual na mudança de altura de líquido antes e depois da injeção de gás, até métodos estatísticos mais sofisticados, como o de tomografia computadorizada utilizado por Chen et al., (1998). A técnica mais utilizada baseia-se em medir o perfil de pressão estática entre dois ou mais pontos na coluna, já que a variação espacial de ε_g produz variações de pressão (Kantarci et al., 2005), que por sua vez induzem recirculação de líquido e influenciam as características fluidodinâmicas, fator de mistura e coeficientes de transferência de calor e massa.

Existem diversos trabalhos concernentes à influência das dimensões da coluna nos valores de ε_g (Forret et al., 2003). As dimensões mais importantes das

colunas de bolhas cilíndricas são sua altura H , diâmetro D , e a razão $A = H/D$. Segundo Kantarci et al., (2005) os principais fatores que afetam o *gas holdup* são: Velocidade superficial do gás, propriedades da fase líquida, dimensões da coluna, condições de operação (Temperatura e pressão), tipo do distribuidor da fase gasosa e propriedades da fase sólida suspensa.

O distribuidor da fase dispersa, com certeza, tem uma grande parcela de influência no modo de operação de uma coluna de bolhas uma vez que determina o tamanho inicial das bolhas da coluna. Diversos tipos de distribuidores são utilizados, tais como pratos perfurados de diferentes tipos, variando em arranjo, número e características dos furos, membranas, anéis, pratos sinterizados, entre outros. Bouaifi et al., (2001) declarou que há uma relação inversa entre o tamanho das bolhas e valores de ε_g .

Segundo Decker, (1992) quando um prato sinterizado é utilizado, inicialmente existe uma relação linear entre a velocidade superficial de entrada do gás u_G e o *gas holdup* ε_g . À medida que u_G aumenta, ε_g passa por um máximo, por um mínimo local e depois volta a aumentar, porém a uma taxa inferior. Com um distribuidor caracterizado por ser do tipo de prato perfurado, a relação entre as variáveis é diferente, onde a inclinação da curva de $u_G - \varepsilon_g$ varia continuamente na região de baixa u_G , indicando a presença cada vez mais intensa de bolhas de maior monta.

Para altos valores de u_G , as curvas tendem a convergir, indicando uma diminuição da importância em diferenciar-se entre os tipos de distribuidores utilizados. Veja a Figura 2.1 (Decker, 1992) .

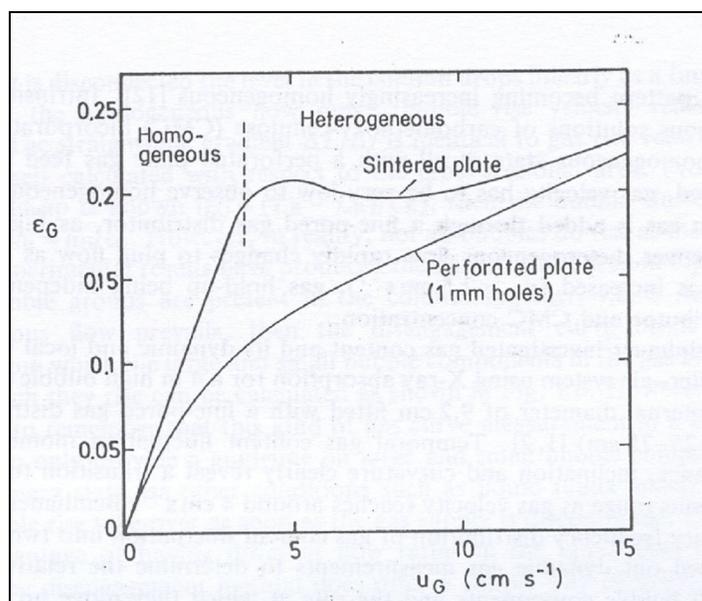


Figura 2.1 – Diferenças entre distribuidores da fase gasosa (Decker, 1992)

As propriedades da fase líquida influenciam as características de formação e condições de quebra e coalescência das bolhas, alterando ϵ_g , e modificando a faixa de transição entre regimes de operação. Um aumento na viscosidade do líquido resulta no aparecimento de bolhas maiores e velocidades de ascensão mais elevadas, diminuindo assim o valor de ϵ_g (Li e Prakash, 1997).

É comumente aceito que pressões elevadas geralmente correspondem a maiores valores de ϵ_g . Apesar de alguns artigos não denotarem a temperatura como fator significativo, Deckwer et al., (1980), reportaram em seu trabalho ter observado um aumento no valor de ϵ_g com a temperatura até certo ponto onde ela deixa de ser importante.

Chen et al, (1998) realizaram experimentos em uma coluna de bolhas cilíndrica de 44 cm de diâmetro para sistemas Água-Ar e DrakeOil®-Ar com velocidades superficiais de entrada de gás de 2, 5, e 10 cm/s utilizando as técnicas de tomografia computadorizada (CT) para obter perfis de fração volumétrica de gás e de rastreamento automatizado de partículas radioativas (CARPT) para medir valores de velocidades de recirculação da fase líquida. Eles

encontraram os perfis esperados de *gas hold-up* e concluiu que seus resultados estavam de acordo com a literatura.

Wang et al., (2004) realizaram experimentos em um reator do tipo Airlift com *loop* externo de 5,76 m usando o sistema ar-água para testar dois tipos de distribuidores de fase gasosa: um prato sinterizado e outro prato perfurado, obtendo então resultados de fração volumétrica, velocidade e diâmetro das bolhas através de medições com uma sonda de fibra óptica. Ele descreve que seu trabalho também se propõe a servir de base para futuros trabalhos de CFD. Os autores observaram a formação de um perfil de *gas holdup* caracterizado por um pico próximo à parede para baixas velocidades ao utilizar o prato sinterizado como distribuidor da fase gasosa. Já com o distribuidor do tipo prato perfurado foi observado um pico central no perfil *gas holdup* para todas as velocidades estudadas.

2.1.2. - Regimes de operação

Para baixas velocidades superficiais de entrada de gás, geralmente abaixo de 5 cm/s (para a água), observa-se uma distribuição uniforme de tamanho de bolhas. As bolhas nesse regime sobem através da coluna a uma velocidade praticamente constante (geralmente entre 18 e 24 cm/s) e estão bem distribuídas ao considerar-se secções transversais da coluna. O tamanho das bolhas é quase que exclusivamente determinado pelas características do distribuidor e pelas propriedades do sistema (Thorat e Joshi, 2004).

Quando a velocidade aumenta, o fluxo homogêneo de bolhas vai se tornando cada vez menos estável e há formação de bolhas maiores devido ao efeito da coalescência. Estas bolhas maiores possuem uma velocidade ascendente mais elevada do que bolhas menores. Este estado onde há a convivência entre diferentes tamanhos de bolhas é denominado de regime heterogêneo, sendo caracterizado pelo aumento da turbulência das fases e intensificação da recirculação da fase líquida.

Com base na Figura 2.2 é possível verificar os padrões mais comuns de escoamento nos regimes fluidodinâmicos nas colunas de bolhas.

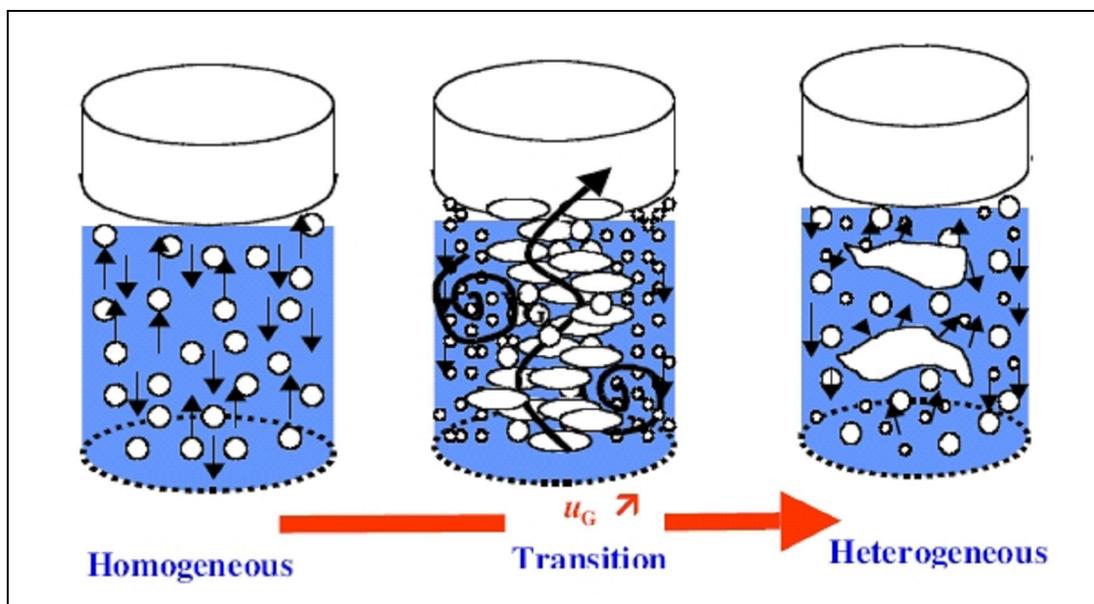


Figura 2.2 – Regimes de operação (Wild et al, 2003)

O aparecimento de um ou de outro regime de escoamento está notadamente associado à velocidade de entrada do gás, diâmetro da coluna, propriedades das fases, mas também é influenciado pela forma com que o gás é distribuído ao entrar na coluna, pela forma e material do distribuidor.

O regime de operação de uma coluna de bolhas é fator determinante na operação e performance de um reator de colunas de bolhas e também é importante ao se lidar com simulações computacionais, pois para o regime heterogêneo as aproximações geralmente assumidas no regime homogêneo não são mais válidas. Diversos fatores devem ser observados, tais como a necessidade de modelos de quebra e coalescência das bolhas, aplicabilidades de certos modelos de turbulência, passo de tempo, etc.

Por isso a detecção da faixa de transição de regimes e a investigação de sua dependência com os parâmetros do sistema são de extrema importância. Ao

se dar a transição, existe o aumento da circulação de líquido ascendente no centro da coluna e descendente próximo à parede da coluna. Com isso, tem-se a entrada de mais gás pelo centro e observa-se a ocorrência de um perfil de ε_g , que promove ainda mais recirculação de líquido.

A velocidade de entrada do gás associada à transição de regime depende das dimensões da coluna, das características do distribuidor e de propriedades do sistema (Thorat e Joshi, 2004).

Apesar de a transição de regime ser um processo gradual (Hyndman et al., (1997), para efeito de modelagem da fluidodinâmica do sistema costuma-se definir um ponto fixo de transição.

Todos os resultados experimentais mostram influências do regime de operação e das características de formação das bolhas no distribuidor. A influência do distribuidor demonstra-se ser muito maior em meios onde não há o fenômeno da coalescência (Camarasa et al, 1999).,

2.2. - Revisão de trabalhos de CFD ligados à modelagem de colunas de bolhas

Por mais de meio século pesquisadores têm tentado modelar o complexo comportamento fluidodinâmico de uma coluna de bolhas, apesar de grandes limitações computacionais. Mesmo hoje em dia ainda não é possível realizar simulações numéricas diretas (DNS). Joshi (2001), discorre em seu trabalho sobre o desenvolvimento cronológico da modelagem fluidodinâmica de uma coluna de bolhas e sumariza os autores pioneiros na área. Segundo o autor, este desenvolvimento pode ser convenientemente classificado em três fases.

Na primeira fase, os fluidos eram considerados invíscidos e a contribuição da turbulência nas equações de momento não era levada em conta. Simplificações eram feitas para obter-se uma solução analítica do problema.

Nos estudos classificados como pertencendo à fase dois, já houve a inclusão de certos aspectos da turbulência, utilizando-se de modelos simplificados para estimar a difusividade turbulenta. As principais limitações estavam em assumirem-se os fluxos como unidimensionais, e não se considerarem interações de forças entre as fases.

Na terceira fase, modelos elaborados de fechamento (Por exemplo, $k-\varepsilon$, *Reynolds stress*) foram utilizados para estimar a difusividade turbulenta e tentou-se levar em consideração todos os fenômenos envolvidos, buscando a completude na formulação das equações da continuidade e momentum.

Mudde e Simonin (1999), Sokolichin E Eigenberger (1999), Pflieger et al. (1999) e Dhotre e Joshi, (2007) mostraram em seus trabalhos que para se obter uma solução pseudoperiódica e independente da malha, é necessário utilizar simulações tridimensionais. Além disso, os valores da viscosidade turbulenta se aproximam melhor dos valores reais.

Sokolichin et al., (1997) realizaram simulações de colunas de bolhas utilizando o modelo $k-\varepsilon$ de turbulência comparando as abordagens Euleriana e Lagrangiana e notaram que não há diferenças substanciais entre elas se um esquema apropriado de discretização for empregado. Os mesmos autores em seu trabalho subsequente (Sokolichin et al, 2004) ressaltam que para uma única bolha e sua velocidade de ascensão, as forças mais importantes são a força de arraste e de pressão.

Ranade e Taylaia (2001) utilizando uma abordagem Euleriana-Euleriana e um modelo de turbulência $k-\varepsilon$, investigaram a influência da configuração do distribuidor da fase gasosa na fluidodinâmica de uma coluna de bolhas. Os resultados simulados foram comparados com os dados experimentais presentes em Haque et al. (1986). O coeficiente de arraste utilizado foi o proposto por Schwarz e Tuner (1988) , baseado em uma velocidade de escorregamento “*slip*”, que somente é apropriada para as zonas totalmente desenvolvidas, acarretando

discrepâncias nos valores de ε_g . A simulação superou o valor experimental em 100% para o caso bidimensional e em 90% para a o caso tridimensional.

Deen (2001) realizou simulações LES (*Large Eddy Simulation*) e comparou-as com seus trabalhos anteriores, tanto experimentais quanto computacionais. Ele concluiu que ao contrario de suas simulações anteriores, as simulações LES foram capazes de capturar o movimento extremamente transiente da pluma de bolhas, que foi observada experimentalmente. Além disso, a velocidade e suas flutuações estiveram quantitativamente de acordo com os resultados experimentais.

Larachi et al, (2006) realizou simulações de uma coluna de bolhas com diferentes arranjos de tubos internos, e segundo ele, utilizou modelos 3-D com o mínimo de física relevante (Força de arraste + Diâmetro de bolha único + Turbulência), lançando mão da correlação de Morsi e Alexandre (Rafique et al., 2004) para o cálculo do coeficiente de arraste, que considera as bolhas como partículas esféricas rígidas. Ele notou um decréscimo considerável na energia cinética turbulenta devido à inserção dos tubos, mesmo para poucas oclusões, e indicou que os maiores turbilhões se tornam sensíveis à escala do espaçamento entre os tubos.

Santos et al., (2007) trabalharam com diversas simulações de colunas de bolhas analisando a influência da fase contínua e de modelos de arraste sobre a hidrodinâmica de colunas de bolhas contendo Água e Ar ou Óleo e Ar. Os modelos utilizados foram os de Grace, Ishii-Zuber e Schiller-Naumann. Eles concluíram que a modelagem da deformação das bolhas para o cálculo do coeficiente do arraste é muito importante, e que os modelos de arraste utilizados para baixas velocidades (2 cm/s) representaram bem os fenômenos envolvidos, onde foi observado boa concordância com os dados da literatura obtidos em Chen et al., (1998).

Joshi e Dhotre (2006) realizaram simulações numéricas tridimensionais de um acoplamento entre uma câmara de gás e uma coluna de bolhas com distribuidor de fase gasosa. Os resultados foram obtidos através de um processo iterativo de simulações da câmara e da coluna. Eles encontraram que a configuração da câmara afeta qualitativamente a distribuição de *gas holdup*, principalmente para regiões próximas ao distribuidor ($H/D < 5$) e que a uniformidade da distribuição da entrada de gás aumenta com a elevação da queda de pressão no distribuidor.

Para o regime heterogêneo, há trabalhos que desenvolvem modelos tentando correlacionar melhor a área interfacial entre fases, uma vez que as bolhas possuem tamanhos diferentes dando origem a uma distribuição de tamanhos de bolhas. A precisão dos campos do escoamento fica bastante limitada nesse regime caso um modelo de balanço populacional não seja incluído na modelagem, pois o fluxo da fase líquida depende do tamanho das bolhas, especialmente em escoamentos onde o empuxo é uma força dominante (Sha Laari e Turunen, 2006).

Para melhorar a representação destes escoamentos aumentando a precisão da estimativa da área interfacial entre as fases, modelos de balanço populacional são incluídos na solução das equações de transporte utilizando métodos de discretização ou métodos de momento. Uma revisão ampla pode ser encontrada no trabalho de Araujo, (2006).

Um método bastante utilizado de discretização é o *multi-size-group approach* (MUSIG), Lo (1996). No modelo MUSIG, a hidrodinâmica é simulada baseada na abordagem Euleriana-Euleriana. Um único campo de velocidades do gás é obtido para o tamanho médio das bolhas e usado para todos os grupos de tamanhos de bolhas. A distribuição do tamanho das bolhas é obtida ao se resolver as equações de balanço populacional para cada grupo, considerando os processos de quebra e coalescência de bolhas. A área interfacial entre as fases líquida e gasosa é calculada usando o diâmetro médio de Sauter e a fração volumétrica.

3. – MODELAGEM MATEMÁTICA E MÉTODOS NUMÉRICOS

3.1. - Modelagem Matemática

3.1.1. – Equações de conservação

No modelo baseado na formulação Euleriana-Euleriana para fluxos dispersos, discutido inicialmente por Ishii (1975), ambas as fases são tratadas como contínuas e interpenetrantes que interagem entre si. São feitas médias entre as equações ao se aplicar pesos de fração volumétrica nas equações instantâneas de conservação de massa, quantidade de movimento e energia. Ao utilizar essa abordagem têm-se mais incógnitas do que equações, fazendo-se necessária então a utilização de equações de fechamento (*Closure laws*), sendo estas geralmente empíricas.

Neste trabalho, utilizaram-se apenas as equações de conservação de massa e quantidade de movimento, levando-se em conta os diversos tipos de interações relevantes entre as fases, caracterizando o regime de escoamento presente. Essas interações são representadas pelas forças descritas mais abaixo. A equação (3.1) é a equação de conservação de massa para uma dada fase α .

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_\alpha \rho_\alpha) + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \vec{U}_\alpha) = S_{MS\alpha} + \sum_{\beta=1}^{N_p} \Gamma_{\alpha\beta} \quad (3.1)$$

Onde,

r_α É a fração volumétrica da fase α ;

\vec{U}_α Vetor velocidade da fase α ;

ρ_α É densidade da fase α ;

$S_{MS\alpha}$ Representa possíveis fontes de massa da fase α ;

$\Gamma_{\alpha\beta}$ É o fluxo mássico por unidade de volume da fase β para a fase α . Ele só se faz presente quando existe transferência de massa entre as fases. Portanto, no caso deste trabalho, este termo é nulo.

A equação (3.2) é a equação da conservação da quantidade de movimento (aplicação da segunda lei de Newton) na fase α .

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(r_\alpha \rho_\alpha \vec{U}_\alpha \right) + \nabla \cdot \left(r_\alpha \left(\rho_\alpha \vec{U}_\alpha \otimes \vec{U}_\alpha \right) \right) = -r_\alpha \nabla p_\alpha + \nabla \cdot \left(r_\alpha \mu_\alpha \left(\nabla \vec{U}_\alpha + \left(\nabla \vec{U}_\alpha \right)^T \right) \right) \\ + \sum_{\beta=1}^{N_p} \left(\Gamma_{\alpha\beta}^+ \vec{U}_\beta - \Gamma_{\beta\alpha}^+ \vec{U}_\alpha \right) + S_{M\alpha} + M_\alpha \end{aligned} \quad (3.2)$$

Onde,

p_α É a pressão na fase α .

$S_{M\alpha}$ representa fontes de quantidade de movimento devido a forças externas;

M_α É a força total imposta à fase α devido à interação com as outras fases e é dada através da Equação (3.3):

$$M_\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} M_{\alpha\beta} \quad (3.3)$$

Como as forças entre um par de fases são de mesma magnitude e de direções opostas, o somatório em todas as fases se anula (Equação 3.4).

$$M_{\alpha\beta} = -M_{\beta\alpha} \Rightarrow \sum_{\alpha} M_\alpha = 0 \quad (3.4)$$

A força interfacial total atuante entre as fases é composta por várias contribuições que podem surgir de diversos fenômenos físicos independentes, como força de arraste $M_{\alpha\beta}^D$, força de lubrificação da parede $M_{\alpha\beta}^{LUB}$, força de massa virtual $M_{\alpha\beta}^{VM}$, força de dispersão turbulenta $M_{\alpha\beta}^{TD}$, etc...

$$M_{\alpha\beta} = M_{\alpha\beta}^D + M_{\alpha\beta}^{LUB} + M_{\alpha\beta}^{VM} + \dots \quad (3.5)$$

Finalmente $\Gamma_{\alpha\beta}^+ \vec{U}_\beta - \Gamma_{\beta\alpha}^+ \vec{U}_\alpha$ representa transferência de momentum induzida pela transferência de massa entre as fases.

Neste trabalho inclui-se apenas a força de arraste na modelagem matemática utilizada. Apesar de outras forças também influenciarem o escoamento, sabe-se que o arraste é a principal interação existente e dominante nos escoamentos de uma coluna de bolhas para determinada condição de operação e equipamento (Jakobsen et al, 1997).

3.1.2. - Força de Arraste

A equação que representa a força de arraste presente no escoamento das bolhas tem seu módulo diretamente proporcional ao quadrado da diferença de velocidade entre as fases. Equações (3.6) e (3.7).

$$M_{\alpha\beta} = c_{\alpha\beta}^D (\vec{U}_\beta - \vec{U}_\alpha) \quad (3.6)$$

e

$$c_{\alpha\beta}^D = \frac{C_D}{8} A_{\alpha\beta} \rho_\alpha |\vec{U}_\beta - \vec{U}_\alpha| \quad (3.7)$$

Sendo $A_{\alpha\beta}$ a área superficial por unidade de volume assumindo que a fase β está presente em partículas esféricas de diâmetro médio d_β (Equação 3.8).

$$A_{\alpha\beta} = \frac{6r_\beta}{d_\beta} \quad (3.8)$$

Neste trabalho utilizou-se o modelo de Ishii-Zuber para calcular C_D (Coeficiente de arraste adimensional) na equação (3.7), uma vez que ele considera efeitos de distorção das bolhas, correlaciona bem os dados na faixa de operação das simulações (Santos et al., 2007), e não depende de parâmetros

ajustáveis pelo usuário, o que aumenta a confiabilidade no modelo para extrapolações.

De acordo com o modelo de Ishii-Zuber, para o regime de partículas esféricas, o coeficiente de arraste é função de um número de Reynolds modificado Re_m , sendo calculado da seguinte maneira:

$$C_D (esfera) = \frac{24}{Re_m} (1 + 0,15 Re_m^{0,687}) \quad (3.9)$$

com

$$Re_m = \frac{\rho_c |\vec{U}_d - \vec{U}_c| d_b}{\mu_m} \quad (3.10)$$

e

$$\mu_m = \mu_c \left(1 - \frac{r_d}{r_{dm}} \right)^{-2,5 r_{dm} \mu_*}, \quad \mu_* = \frac{\mu_d + 0,4 \mu_c}{\mu_d + \mu_c} \quad (3.11)$$

Onde,

d_b É o diâmetro da bolha

\vec{U}_c, \vec{U}_d São os vetores velocidade das fases contínua e dispersa, respectivamente.

μ_c, μ_d São as viscosidades das fases contínua e dispersa, respectivamente.

r_d É a fração volumétrica da fase dispersa.

r_{dm} É uma definição de valor de máximo empacotamento, que é uma medida de fração volumétrica. Seu valor padrão para fases fluidas dispersas é a unidade.

No regime de partículas distorcidas, o coeficiente adimensional de arraste é praticamente constante e independente do número de Reynolds, porém dependente da forma da partícula detectável através do grupo adimensional de

Eötvös, Eo , definido pela Equação (1.1), que representa a razão entre forças gravitacionais e tensões superficiais.

Para este regime, o modelo de Ishii-Zuber representa a densidade de partículas presentes no sistema por meio da introdução de um fator multiplicativo para o coeficiente de arraste de uma única partícula $C_{D\infty}$.

As equações utilizadas para partículas com a forma elipsoidal são as seguintes (Equações 3.12 e 3.13):

$$C_D(\textit{ellipse}) = E(r_d) C_{D\infty} \quad \text{onde} \quad C_{D\infty} = \frac{2}{3} Eo^{1/2} \quad (3.12)$$

e,

$$E(r_d) = \frac{\left(1 + 17,67 f(r_d)^{6/7}\right)}{18,67 f(r_d)} \quad \text{com} \quad f(r_d) = \frac{\mu_c}{\mu_m} (1 - r_d)^{1/2} \quad (3.13)$$

Já para o caso de partículas com a forma de touca (cap), o coeficiente de arraste é representado pela Equação (3.14):

$$C_D(\textit{cap}) = (1 - r_d)^2 C_{D\infty}, \quad \text{onde} \quad C_{D\infty} = \frac{8}{3} \quad (3.14)$$

A utilização de uma ou outra correlação é selecionada da seguinte maneira:

$$\textit{Se} \quad C_D(\textit{esfera}) \geq C_D(\textit{ellipse}), \quad C_D = C_D(\textit{esfera})$$

$$\textit{Se} \quad C_D(\textit{esfera}) < C_D(\textit{ellipse}), \quad C_D = \min(C_D(\textit{ellipse}), C_D(\textit{cap}))$$

Quanto às outras forças presentes na Equação (3.5), descrições mais detalhadas podem ser encontradas em Joshi (2001).

Na ausência de movimento das bolhas, apenas duas únicas forças atuam sobre as fases. São elas as forças de Pressão (Equação 3.15) e Gravidade (Equação 3.16).

$$F_p = -V_b \cdot \nabla p \quad (3.15)$$

$$F_g = m_b \cdot g \quad (3.16)$$

Onde,

m_b É o massa da bolha.

V_b É o volume da bolha.

∇p É o gradiente de pressão atuando na bolha.

Outra relação de fechamento a ser considerada é a Equação (3.17), por meio da qual a somatória das frações volumétricas de todas as fases deve ser, por definição, igual à unidade.

$$\sum_{\alpha=1}^{N_p} r_{\alpha} = 1 \quad (3.17)$$

3.1.3. - Turbulência

As primeiras investigações quantitativas a respeito do fenômeno da turbulência são geralmente atribuídas a Osborne Reynolds, o qual utilizou técnicas de visualização de um corante injetado em uma corrente de água a fim de obter respostas acerca do regime de escoamento, se era laminar ou turbulento. Nestes estudos ele estabeleceu pela primeira vez o número adimensional que expressa a razão entre forças inerciais e viscosas, que ficou conhecido como o número de Reynolds, o qual permite distinguir entre os dois possíveis regimes do escoamento. Foi Reynolds também o primeiro a sugerir uma decomposição das

variáveis turbulentas em quantidades médias e seus resíduos, denominados doravante de flutuações.

Importantes avanços na teoria da turbulência ocorreram durante o período compreendido entre as duas grandes guerras mundiais, e estão associados aos nomes de Von Karman (1937), Prandtl (1925) e Taylor (1921, 1935), cientistas que deram enormes contribuições à ciência aeronáutica.

Recentes desenvolvimentos na área mudaram a perspectiva em relação à utilização isolada de relações semi-empíricas muito utilizadas na década de 60, uma vez que a resolução de enormes sistemas de equações diferenciais parciais se tornou acessível graças ao aumento no poder computacional e na disponibilidade de computadores digitais de alta velocidade.

Atualmente, não se considera uma definição formal de turbulência, mas sim uma série de características principais que um escoamento turbulento possui (Tennekes e Lumley, 1972).

- **Irregularidade:** Escoamentos turbulentos são irregulares, aleatórios e caóticos, consistindo de um grande espectro de escalas de turbilhões, onde os maiores são da escala da geometria do fluxo e os menores que são dissipados pelas forças viscosas em energia interna.
- **Difusividade:** A difusividade em fluxos turbulentos aumenta, assim como também há um acréscimo na transferência de quantidade de movimento.
- **Altos números de Reynolds.**
- **Tridimensionalidade:** Escoamentos turbulentos são sempre tridimensionais. Contudo, quando são feitas médias das propriedades nas equações, o fluxo pode ser tratado como bidimensional.

- **Dissipação:** Escoamentos turbulentos são dissipativos, isso é, a energia é transmitida a partir das escalas maiores para as escalas menores de turbilhões até ser transformada em energia interna.

- **Continuidade:** Apesar de haver escalas turbulentas bastante pequenas, elas são muito maiores do que as escalas moleculares possibilitando o tratamento das variáveis como contínuas.

Quando se trabalha com escoamentos turbulentos, geralmente utiliza-se a decomposição de Reynolds, que considera que as variáveis podem ser representadas por quantidades médias e suas flutuações, já que estamos interessados apenas em seus valores médios. Outra razão para a utilização desse procedimento reside no fato de que, se assim não fosse feito, seria necessária uma malha bastante refinada para captar corretamente todas as escalas de turbulência.

Por exemplo, a velocidade U , pode ser decomposta em seu componente médio \bar{U} e sua flutuação u .

$$U = \bar{U} + u \quad (3.18)$$

Onde,

$$\bar{U} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} U dt \quad (3.19)$$

e Δt é um intervalo de tempo grande em relação às flutuações turbulentas, porém pequeno em relação à escala de tempo em que as equações que descrevem os fenômenos estão sendo resolvidas.

Neste trabalho utiliza-se um modelo de turbulência apenas para a fase contínua, e por questão de simplicidade na apresentação, as equações mostradas neste item (3.1.3) foram deduzidas para um escoamento monofásico.

Substituindo-se as variáveis na forma decomposta por Reynolds nas equações de conservação de massa e de quantidade de movimento (Navier-Stokes), obtemos suas respectivas equações médias, dadas abaixo (Equações 3.20 e 3.21):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \bar{U}] = 0 \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \bar{U} \otimes \bar{U}] = \nabla \cdot [\sigma - \overline{\rho u \otimes u}] + S_M \quad (3.21)$$

A equação da continuidade (3.20) não é alterada pela decomposição de Reynolds, porém a equação da conservação da quantidade de movimento (Equação 3.21) contém termos de fluxos e difusividades turbulentas adicionais. Esses termos são conhecidos como Tensões de Reynolds $\overline{\rho u \otimes u}$, e como Fluxos de Reynolds $\overline{\rho u \phi}$. Eles refletem o fato de que o transporte convectivo devido à turbulência irá melhorar a mistura do meio além daquela causada por flutuações térmicas causadas em um nível molecular.

O modelo de turbulência utilizado neste trabalho para a fase contínua é o modelo κ - ϵ . Ele se baseia na hipótese da *Eddy viscosity*, ou viscosidade turbulenta, que sugere que a turbulência consiste de pequenos turbilhões que estão constantemente se formando e se dissipando, e as Tensões de Reynolds são consideradas como sendo proporcionais aos gradientes de velocidades médias (Equação 3.22).

$$-\overline{\rho u \otimes u} = -\frac{2}{3} \rho k \delta - \frac{2}{3} \mu_t \nabla \cdot \bar{U} \delta + \mu_t \left(\nabla \bar{U} + (\nabla \bar{U})^T \right) \quad (3.22)$$

Onde,

μ_t É a viscosidade turbulenta, definida na equação (3.26).

δ É a matriz identidade ou função delta de Kronecker

O modelo κ - ε introduz duas novas variáveis no sistemas de equações a ser resolvido , que são:

- κ - é a energia cinética turbulenta, definida como a variância das flutuações na velocidade, tendo dimensões ($L^2.T^{-2}$).
- ε - é o termo de dissipação da Viscosidade turbulenta (Taxa em que as flutuações da velocidade desaparecem), e tem dimensões ($L^2.T^{-3}$).

Então, o conjunto de equações a ser resolvido, em notação vetorial, utilizando o modelo κ - ε , fica:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \bar{U}] = 0 \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{U}}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \bar{U} \otimes \bar{U}] - \nabla \cdot [\mu_{eff} \nabla \bar{U}] = \nabla p' + \nabla \cdot [\mu_{eff} \nabla \bar{U}]^T + B \quad (3.24)$$

com,

$$p' = p + \frac{2}{3} \rho k \quad (3.25)$$

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (3.26)$$

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.27)$$

Os parâmetros κ - ε são obtidos diretamente através das equações diferenciais de transporte destas propriedades. Equações (3.28) e (3.29).

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \bar{U} k] - \nabla \cdot \left[\frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \nabla k \right] = P_k - \rho \varepsilon \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \bar{U} \varepsilon] - \nabla \cdot \left[\frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right] = \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (3.29)$$

Onde,

P_k é um termo de produção de turbulência devido às forças viscosas e de empuxo.

As constantes do modelo utilizadas neste trabalho possuem os seguintes valores: $C_\mu = 0,09$, $C_{\varepsilon 1} = 1,44$, $C_{\varepsilon 2} = 1,92$, $\sigma_k = 1,0$, $\sigma_\varepsilon = 1,31$.

O modelo κ - ε foi escolhido para ser utilizado neste trabalho devido a sua simplicidade, robustez e por apresentar bons resultados com simulações tridimensionais em diversos trabalhos pesquisados na literatura, como o de Mudde e Simonin (1999), Pflieger et al., (1999) e Sokolichin E Eigenberger (1999), sendo que este último ainda testa a aplicabilidade do modelo em outras situações.

3.2. – Métodos Numéricos

Os métodos mais conhecidos e já bastante estabelecidos para a solução numérica de equações diferenciais são os métodos de diferenças finitas, de elementos finitos e de volumes finitos. O método de volumes finitos é bastante empregado industrialmente devido à sua robustez e garantia de conservação das propriedades nas fronteiras do domínio da solução.

A resolução numérica do sistema de equações gerado neste trabalho e a visualização dos resultados foram feitas através do software comercial CFX/ANSYS 11tm, que utiliza a técnica dos volumes finitos para a discretização do domínio da solução do problema.

O método dos volumes finitos (MVF) é a técnica de CFD mais bem estabelecida e usada para propósitos gerais. Esta técnica parte da integração formal das equações de transporte que regem o escoamento do fluido em todos os volumes de controle obtidos pela discretização do domínio. Nesta integração, a forma conservativa de cada equação é usada para que seja possível transformar as integrais em volume dos divergentes dos fluxos advectivos e difusivos em

integrais em área dos fluxos normais à superfície dos volumes de controle, através da aplicação do teorema da divergência. Embora esta operação seja exata, a completa discretização destes termos e das outras integrais no volume necessita do uso de técnicas numéricas para aproximar os campos das variáveis conservadas que utilizam funções de interpolação ou aproximações funcionais. A precisão destas aproximações e da representação obtida para os fluxos através das superfícies dos volumes de controle são os aspectos mais importantes no método de volumes finitos. Como os outros métodos, as equações finais levam a um sistema algébrico de equações².

Descrições e exemplos da utilização do método dos volumes finitos podem ser facilmente encontrados na literatura. Sugere-se algumas obras como abordagem inicial. Veja Versteeg e Malalasekera , (1996).

3.2.1. – Procedimento computacional

Para obter os resultados desejados com as simulações adotou-se a seguinte seqüência de procedimentos utilizados em CFD. Primeiramente, discretizou-se o domínio de solução do problema ao construir a malha numérica que foi utilizada para representar o escoamento no interior do equipamento. Utilizou-se para tal fim o software comercial ANSYS/ICEM 5.0tm.

Após a obtenção da malha computacional, partiu-se para a etapa de configuração e aplicação das condições de contorno do problema, chamada também de pré-processamento. Em seguida, resolveu-se o sistema de equações gerado na etapa da discretização com o auxílio de um software específico de linearização das equações. Finalmente, houve a etapa de pós-processamento, onde se trabalhou no tratamento e visualização dos resultados obtidos.

Utilizou-se o software comercial ANSYS/CFX 11tm para realizar as etapas de pré-processamento, resolução dos sistemas lineares e pós-processamento,

² Trecho retirado do endereço eletrônico: <http://notasemcfid.blogspot.com/2007/07/o-corao-de-cfd.html>

além do software de planilha eletrônica Microsoft Exceltm. Nas simulações foram utilizados dois computadores ITAUTEC quad-core 1.6 GHz e 2Gb RAM (CPU) em paralelo, sendo que o tempo médio para a obtenção das soluções foi de uma semana para cada caso.

Depois de atingido o critério para encerrar a simulação de cada caso (mais detalhes na seção 4.1.1) partiu-se para o tratamento e análise dos resultados. Para a obtenção dos gráficos de perfis de fração volumétrica da fase gasosa e velocidade axial da fase líquida foi criado um algoritmo no software de planilhas eletrônicas ExcelTM, que automatizou o cálculo das médias radiais, das médias temporais e das propriedades das fases disponíveis em todo o domínio resolvido da coluna. Cabe salientar também que para o cálculo dos valores médios de fração volumétrica total de gás nas colunas, para fins comparativos, utilizou-se apenas a parte principal da coluna (no caso da coluna com a recirculação externa), desconsiderando a contribuição da parte do *Loop* nas médias.

3.2.2. – Propriedades, condições de contorno e parâmetros das simulações.

Nas simulações das colunas utilizou-se o sistema bifásico Água-Ar a 25° C, a 1 atm de pressão e altura inicial de líquido em 5 m. As propriedades das substâncias que compõem o sistema estão dispostas na Tabela 3.1 e as condições de contorno utilizadas na Tabela 3.2.

TABELA 3.1 – Propriedades dos fluidos a 25° C

	Água	Ar
Massa Específica [kg/m³]	980	1
Viscosidade [cP]	1	0,001
Tensão Interfacial [N/m]	0,072	

TABELA 3.2 - Condições de contorno

Local	Tipo	Especificações
Base da coluna	Entrada	Velocidades tangenciais de entrada Fração volumétrica de gás = 1 Fração volumétrica de líquido = 0
Topo da coluna	Saída	Pressão relativa = 0 [Pa] Fração volumétrica de gás = 0 Fração volumétrica de líquido = 1
Parede	Parede lisa	Condição de não-escorregamento para ambas as fases (No slip condition)

Outros parâmetros das simulações:

- Tamanho único de bolhas – Sabe-se da literatura que para $U_G < 5$ cm/s (Thorat e Joshi, 2004) e observando a distribuição dos tamanhos de bolhas presentes no trabalho de Wang et al., (2004), conclui-se que o regime de escoamento presente na coluna é o regime homogêneo. Os valores utilizados nas simulações foram obtidos no trabalho experimental de Wang et al., (2004) e estão dispostos na Tabela 3.3.

TABELA 3.3 - Diâmetro das bolhas

Velocidades superficiais de entrada de gás [cm/s]	Diâmetro das bolhas [mm], d_b	
	Simulações com o distribuidor de fase gasosa	Simulações com entrada uniforme
$U_G = 0,8$	5	3,5
$U_G = 1,6$	5	3,5
$U_G = 3,2$	5	4

- Fluidos incompressíveis
- Abordagem Euleriana-Euleriana – Fases tratadas como contínuas e interpenetrantes.
- Esquema utilizado de interpolação no espaço – *High order Upwind*.
- Esquema utilizado de interpolação no tempo – *First Order Backward Euler scheme*, que é um esquema implícito de primeira ordem de avanço no tempo.
- Passo de tempo = 0,01 s.

4. – RESULTADOS

4.1. – Coluna com loop externo

As primeiras simulações foram realizadas em colunas com recirculação externa (*External Loop*) no intuito de identificar novos padrões de escoamento devido a essa modificação geométrica para diferentes velocidades superficiais de entrada de gás em 2 tipos de distribuidores de fase gasosa. O trabalho propõe-se a combinar os efeitos dessas variações da coluna tendo o máximo de respaldo experimental possível através de comparações com uma coluna utilizada por Wang et al., (2004) e seus dados experimentais.

Portanto, trabalhou-se nas simulações com o sistema bifásico Ar-Água, assim como Wang et al., (2004) o fizeram em uma coluna de 5,76 metros de altura, 23 centímetros de diâmetro na coluna principal (Figura 4.1). As colunas possuíam dois tipos de distribuidor de fase gasosa, um do tipo prato sinterizado (Caso 1) e outro do tipo prato perfurado (Caso 2) para coletar dados experimentais de fração volumétrica, diâmetros e velocidade de ascensão das bolhas.

Infelizmente, no artigo não constam dados de velocidade axial da fase líquida, porém as mesmas foram avaliadas numericamente, pois foram entendidas como variáveis relevantes para a representação da fluidodinâmica de uma coluna de bolhas.

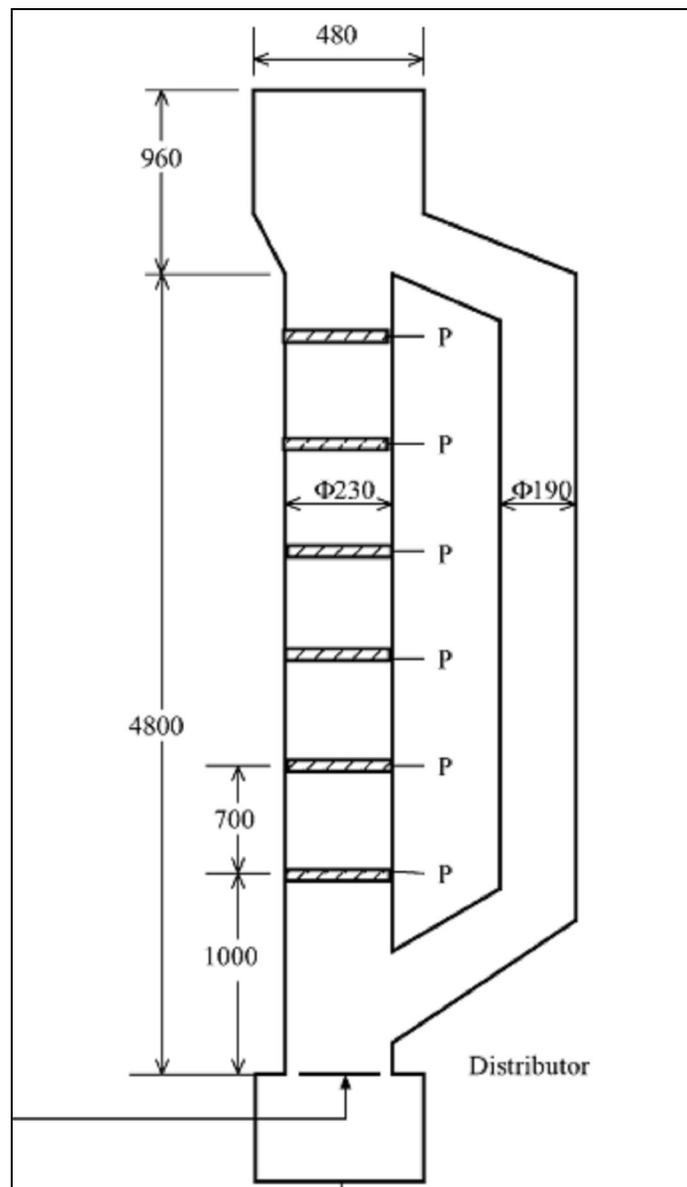


Figura 4.1 – Aparato experimental – Wang (2004)

4.1.1. – Malhas geométricas e teste de malhas

Todos os resultados mostrados nas figuras e gráficos comparativos das colunas utilizadas neste trabalho foram obtidos através de médias de valores das propriedades ao longo do tempo para períodos onde o desvio das flutuações a partir da média ficassem dentro de $\pm 5\%$. Na Figura 4.2 expõe-se essa abordagem mostrando resultados de fração volumétrica de gás em um ponto central na coluna com altura de 4,6 m ao longo do tempo indicando a decisão pelo término da simulação numérica.

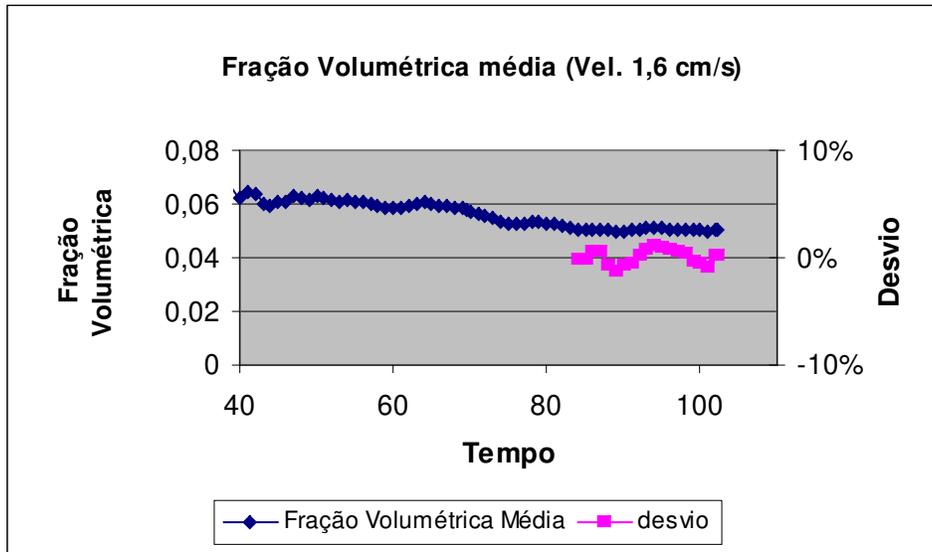


Figura 4.2 – Fração vol. média ao longo do tempo (ponto com 4,6 m de altura)

Uma malha geométrica (Figura 4.3) com as mesmas dimensões da coluna utilizada por Wang et al., (2004) foi construída com 55 mil volumes de controle para reproduzir inicialmente as condições de entrada de gás através do prato sinterizado. Trabalhou-se então, como condição de contorno nestas simulações, com velocidade superficial de entrada de gás uniformemente distribuída por toda a base da coluna.

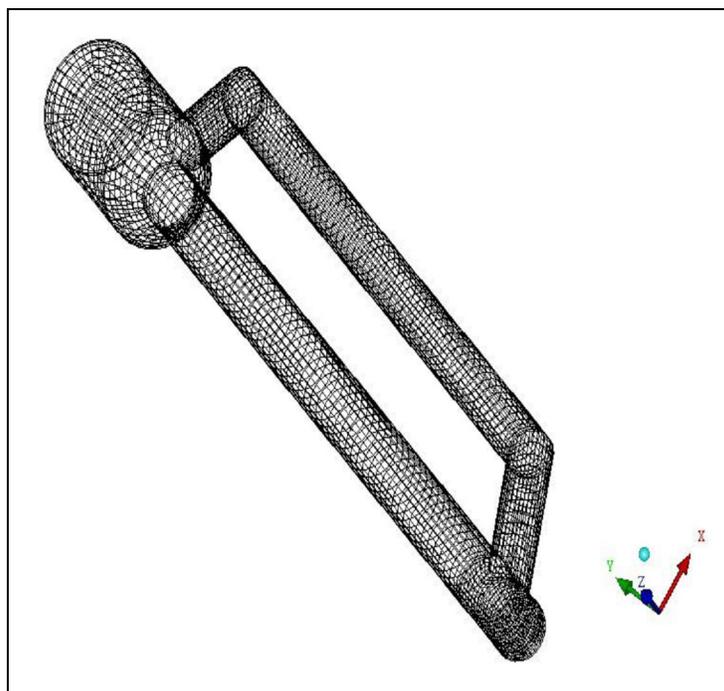


Figura 4.3 – Malha experimental – *Loop* externo

Para se assegurar da qualidade da solução no que concerne à malha, duas malhas foram feitas, uma de 55 mil volumes de controle e outra de 120 mil. Pela Figura 4.4 pode-se observar que ambas malhas proporcionaram a mesma solução para simulações de uma coluna com prato sinterizado e $U_G = 3,2$ cm/s.

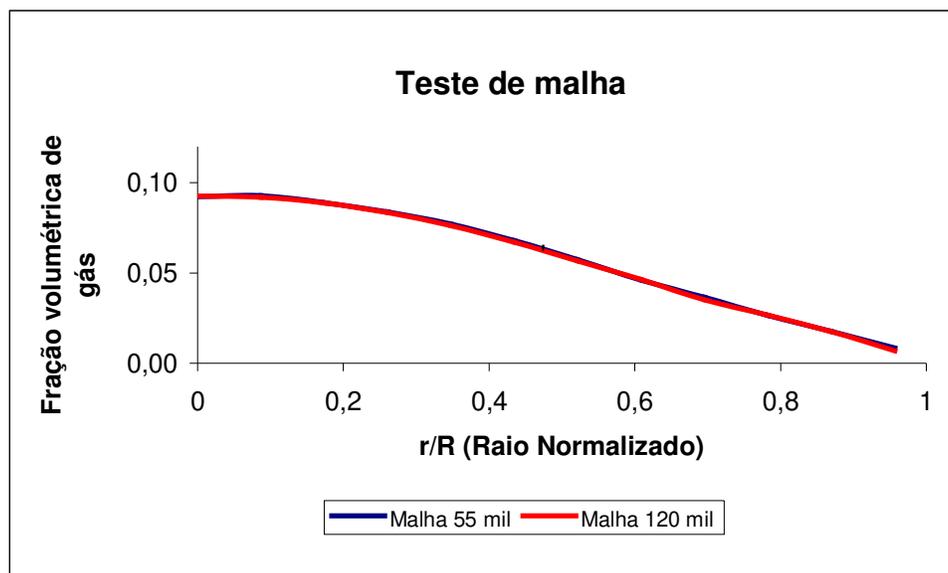


Figura 4.4 – Teste de malha e tempos de média

Este teste comparativo de malhas serviu de base para todas as outras simulações e mostrou ser desnecessário o uso de malhas mais refinadas, uma vez que os resultados foram independentes do tamanho da malha utilizada.

Conforme dito anteriormente, para representar a entrada de gás através de um prato sinterizado (Caso 1 em Wang et al., (2004)) utilizou-se como condição de contorno nas simulações a entrada de gás com velocidade uniformemente distribuída por toda a base coluna. Já para a representação do Caso 2 (Prato perfurado), foi construída uma malha geométrica de 0,1 m de altura com aproximadamente 70 mil volumes de controle no distribuidor da fase gasosa, como mostrado na Figura 4.5. Ao todo, 133 furos de 1 mm de diâmetro foram distribuídos em passo quadrado pela superfície do distribuidor.

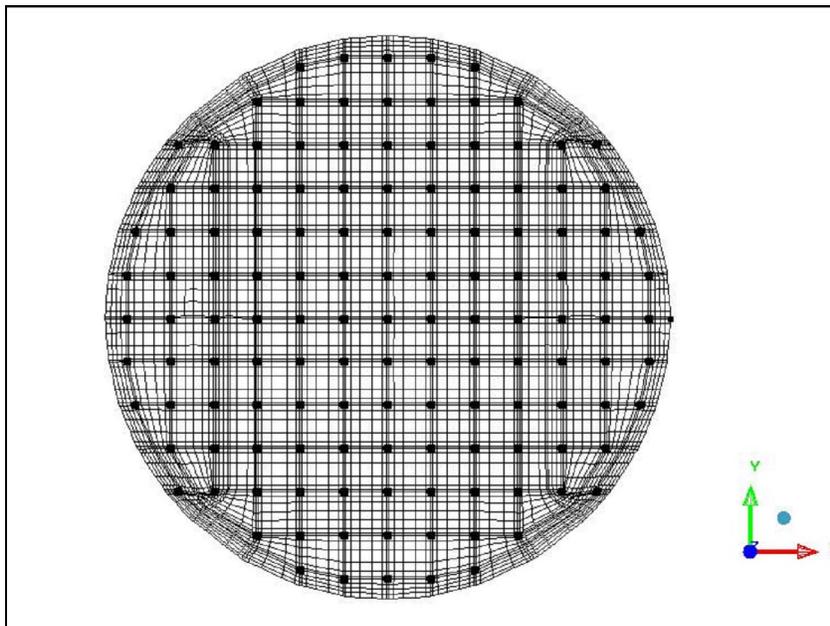


Figura 4.5 – Malha do distribuidor da fase gasosa de Wang et al 2004.

Para as simulações com o distribuidor adotou-se a estratégia de utilizar uma malha composta de duas partes distintas e unidas por uma interface fluido-fluido para minimizar o tamanho total da malha final (Figura 4.6, D+C), pois para regiões próximas ao distribuidor há necessidade de refinar a malha a fim de capturar os elevados gradientes de velocidade envolvidos. A malha geométrica do corpo da coluna foi a mesma utilizada no caso sem o distribuidor (Figura 4.3), porém com altura diminuída em 0,1 m para que a altura total do equipamento se mantivesse preservada.

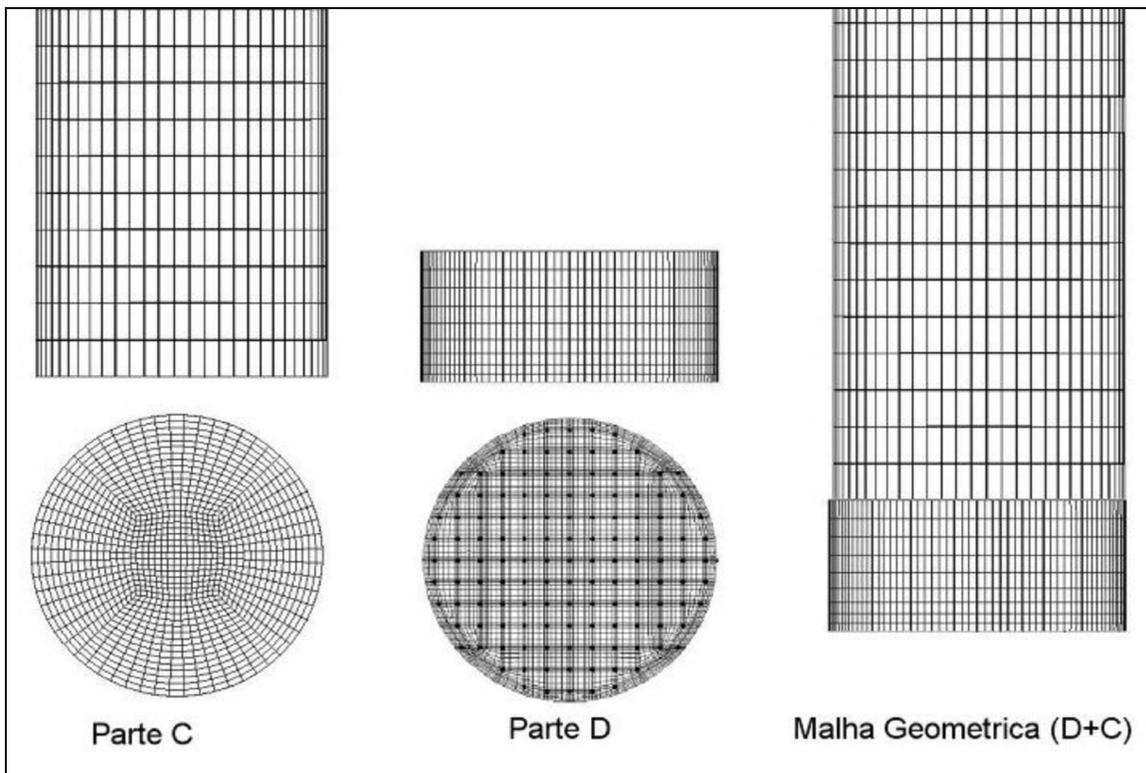


Figura 4.6 – Malha do distribuidor e interface fluido-fluido.

4.1.2. – Resultados de fração volumétrica da fase gasosa

Neste trabalho utilizaram-se valores de tamanhos de bolhas obtidos experimentalmente para cada caso (Tabela 3.3) e nestas condições é possível afirmar que os resultados numéricos estão traduzindo bem os dados experimentais de fração volumétrica de gás obtidos em Wang et al., (2004), e corroboram a tese de que o prato sinterizado (Caso 1) é melhor modelado por uma entrada uniforme na base da coluna e que o prato perfurado (Caso 2) é melhor representado pela malha com os pontos discretos, conforme discutido abaixo.

No intuito de se obter informações mais detalhadas acerca da qualidade das simulações e também de se fazer comparações entre elas, calcularam-se os desvios normalizados das médias dos resultados obtidos nas simulações com relação aos dados experimentais de perfis de fração volumétrica de gás, d_m , em um plano situado a 4,6 m acima da base da coluna, através da Equação (4.1).

Este parâmetro fornece informações acerca da relação entre ordens de grandeza e do afastamento médio dos resultados numéricos obtidos quando comparados aos dados experimentais.

$$d_m = \frac{\bar{S} - \bar{E}}{\bar{E}} \quad (4.1)$$

com,

$$\bar{E} = \sum_{r=1}^1 \frac{E(r)}{N} \quad (4.2)$$

e

$$\bar{S} = \sum_{r=1}^1 \frac{S(r)}{N} \quad (4.3)$$

Onde,

$E(r)$ É o valor experimental de fração volumétrica da fase gasosa, em função do raio normalizado, r .

N É o numero total de observações experimentais.

$S(r)$ É o valor de fração volumétrica da fase gasosa obtido nas simulações, em função do raio normalizado, r .

Porém, os valores de d_m sozinhos não são suficientes para caracterizar a relação entre os resultados numéricos e os dados experimentais. É possível se obter baixos valores de d_m , por exemplo, para elevados valores de desvios com sinais opostos, que acabam por se cancelar.

Por isso, calcularam-se também as médias, dos módulos dos desvios normalizados entre os valores obtidos nas simulações e os dados experimentais, M_d (Equação 4.4). Este parâmetro, analisado em conjunto com d_m , fornece informações qualitativas a respeito do tipo de relação existente entre os valores numéricos e os dados experimentais.

$$M_d = \sum_{r=1}^1 \frac{|S(r) - E(r)|}{N \cdot \bar{E}(r)} \quad (4.4)$$

Nas Figuras 4.7 a 4.9 observa-se o comportamento comparado do perfil de fração volumétrica de gás entre valores experimentais obtidos nos experimentos de Wang et al., (2004) (Casos 1 e 2) e simulações numéricas com dois tipos de condição de contorno para a entrada do gás, utilizadas com o intuito de representa-las mais adequadamente. Deve-se ter em mente também a relação entre o tipo de distribuidor utilizado e a velocidade superficial de entrada de gás na obtenção dos vários tamanhos das bolhas utilizadas na modelagem matemática e sua influência consubstanciada nos resultados.

Para $U_G = 0,8$ cm/s (Figura 4.7) nota-se que o perfil representado pelos valores experimentais de fração volumétrica de gás com o prato sinterizado (Caso 1) apresenta um diminuto pico de fração próximo à parede, característica observada por Wang et al., (2004) em seu trabalho e presente nos resultados numéricos (Linhas cheias).

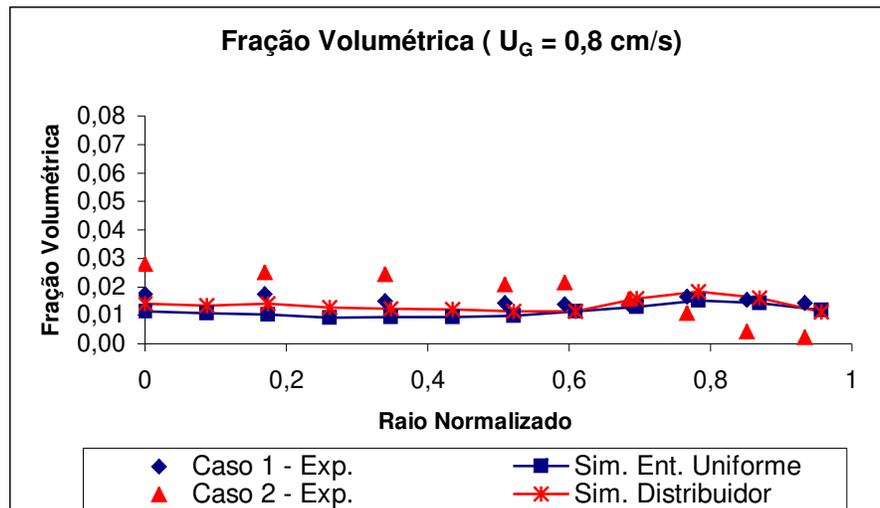


Figura 4.7 – Perfis de fração volumétrica

Para o prato perfurado (caso 2), nota-se que os resultados simulados não apresentam a diminuição na concentração de gás nas regiões próximas à parede

da coluna (Observada experimentalmente), o que explica o elevado valor de M_d obtido para este caso (Tabela 4.1).

TABELA 4.1 – Desvios dos valores experimentais ($U_G = 0,8 \text{ cm/s}$)

Tipo de distribuidor	$U_G = 0,8 \text{ cm/s}$		
	$\bar{E}(r)$	d_m	M_d
Prato Sinterizado (Caso 1)	0,015	-23%	23%
Prato Perfurado (Caso 2)	0,017	-18%	56%

Com a velocidade superficial de entrada de gás em $1,6 \text{ cm/s}$ observa-se uma diferença significativa no comportamento dos perfis de fração volumétrica de gás entre os dois tipos de distribuidores testados experimentalmente. Para o prato sinterizado (Caso 1) nota-se um perfil radial constante, e no que concerne a simulação houve um desvio médio d_m de -39% dos resultados simulados em relação aos dados experimentais.

Para o caso 2, observa-se uma diminuição na concentração de gás nas regiões próximas às paredes para o prato perfurado (Figura 4.8). Nota-se que a abordagem seguida neste trabalho com a inserção de gás em pontos discretos na simulação da coluna foi capaz de captar a diferença no comportamento dessa variável observado experimentalmente.

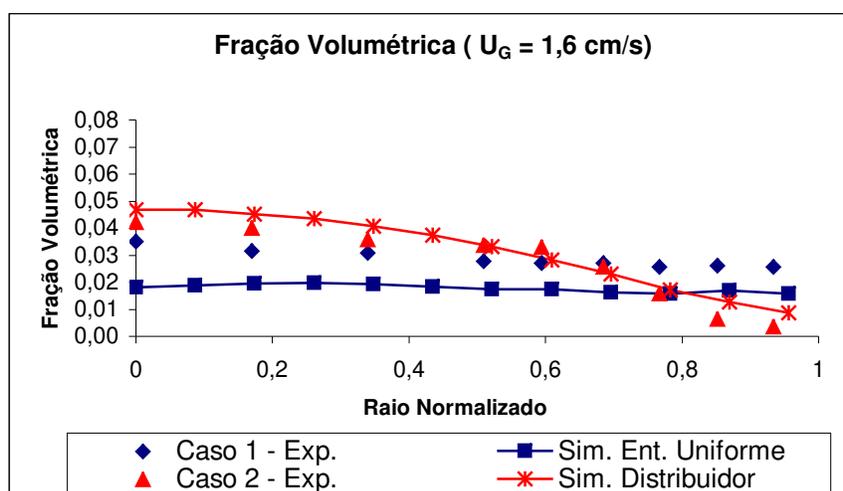


Figura 4.8 – Perfis de fração volumétrica

O valor de d_m em 9% (Tabela 4.2) foi bem mais baixo do que para o caso 1, e o menor valor de M_d indica que essa melhor representação se deu ao longo de todo o raio da coluna.

TABELA 4.2 – Desvios dos valores experimentais ($U_G = 1,6$ cm/s)

Tipo de distribuidor	$U_G = 1,6$ cm/s		
	$\bar{E}(r)$	d_m	M_d
Prato Sinterizado (Caso 1)	0,029	-39%	39%
Prato Perfurado (Caso 2)	0,026	9%	15%

Para o caso com $U_G = 3,2$ cm/s (Figura 4.9), a mais alta estudada nesse trabalho e ainda no regime homogêneo, os resultados numéricos se mostram concordantes com os respectivos casos experimentais apontando novamente a tendência de diminuição dos valores de fração volumétrica de gás para regiões próximas à parede, principalmente com o distribuidor de pratos perfurados.

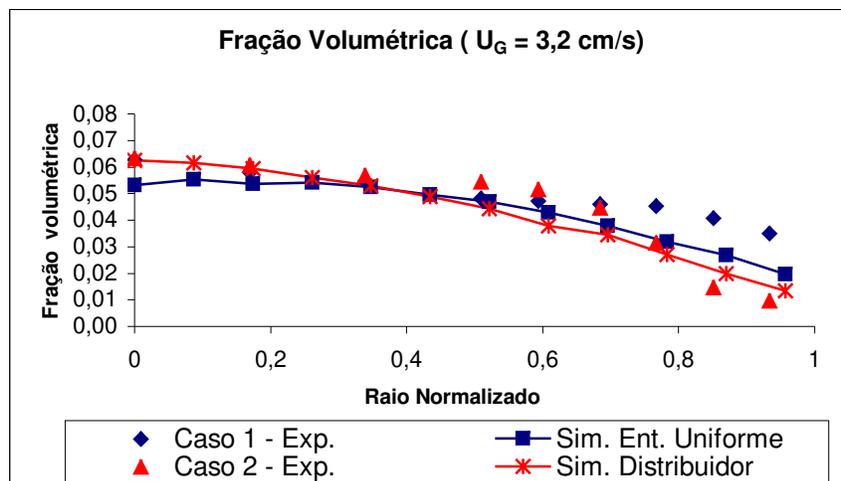


Figura 4.9 – Perfis de fração volumétrica

Para o prato sinterizado os valores de d_m e M_d foram menores em relação às outras velocidades estudadas (Tabela 4.3). Para o prato perfurado, os valores

foram semelhantes aos observados para $U_G = 1,6$ cm/s, indicando a estabilidade dos desvios e a capacidade da modelagem utilizada em prever corretamente o comportamento das colunas de bolhas nessas velocidades.

TABELA 4.3 – Desvios dos valores experimentais ($U_G = 3,2$ cm/s)

	$U_G = 3,2$ cm/s		
Tipo de distribuidor	$\bar{E}(r)$	d_m	M_d
Prato Sinterizado (Caso 1)	0,049	-17%	17%
Prato Perfurado (Caso 2)	0,043	-9%	14%

Foi possível mostrar que as simulações com malhas contendo os furos do prato perfurado são factíveis, eliminam a necessidade de suposições arbitrárias de área de entrada do gás e melhoram a descrição dos perfis de fração volumétrica de gás. A utilização dessa abordagem, no entanto, deve ser cuidadosamente considerada devido ao aumento do esforço numérico necessário para se obter a solução desejada, devendo ser empregada em análises com maior grau de precisão requerido e à luz da necessidade de outros modelos matemáticos dependendo do regime de escoamento presente no equipamento.

4.1.3. – Resultados gerais das colunas com loop externo

As Figuras 4.10 a 4.14 mostram comportamentos do escoamento através de médias temporais das variáveis para $U_G = 3,2$ cm/s em uma coluna com recirculação externa e entrada uniforme de gás (Caso 1). Os comportamentos gerais observados para essa velocidade podem ser estendidos para as outras velocidades superficiais de entrada de gás e também para as simulações com distribuidores.

Na Figura 4.10 observa-se um mapa de velocidade axial da fase líquida em um plano longitudinal que contém o eixo da coluna. Nela pode-se observar o sentido rotativo do escoamento, ao se identificar o sentido do fluxo, e também

notar uma zona de velocidade mais elevada próxima à parede oposta da conexão inferior do *loop*.

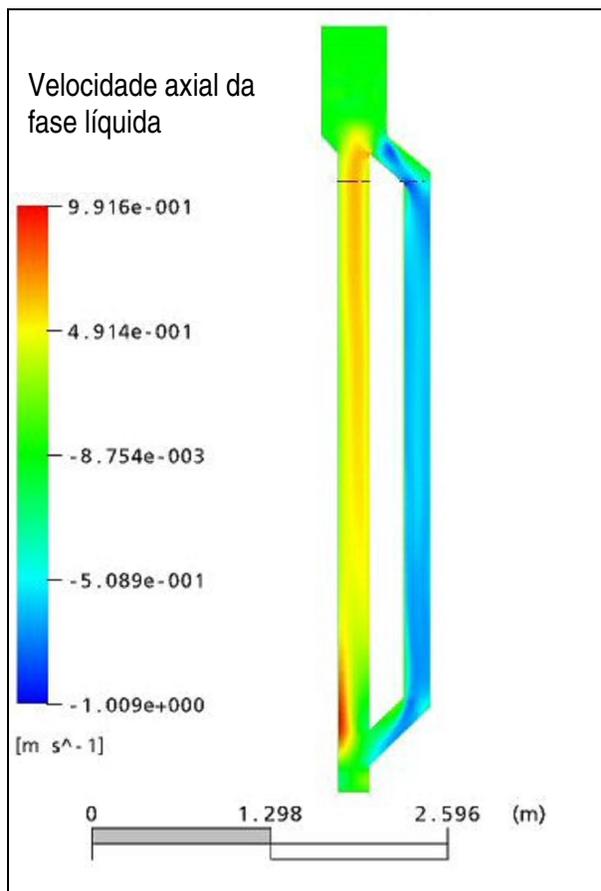


Figura 4.10 – Perfil de vel. da fase líquida

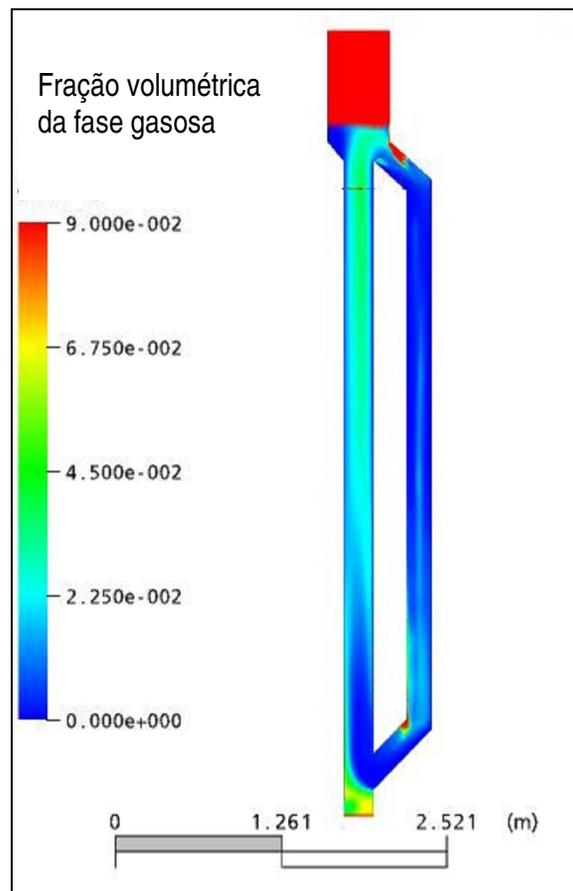


Figura 4.11 – Perfil de fração vol. da fase gasosa

A Figura 4.11 denota uma região de maior fração volumétrica logo na entrada da coluna devido ao *loop* e também mostra como a simetria radial se enfraquece em determinadas alturas da coluna. O conhecimento do comportamento dessas zonas de concentração é potencialmente importante caso haja uma reação fortemente exotérmica acontecendo no sistema, pois, os pontos de alta concentração da fase dispersa são os mesmos locais de maiores taxas de reação e podem indicar a possibilidade de zonas quentes do reator nessas regiões.

Pode-se observar em mais detalhes o comportamento do perfil de fração volumétrica do gás através da ilustração de planos transversais à coluna em diferentes alturas (Figura 4.12).

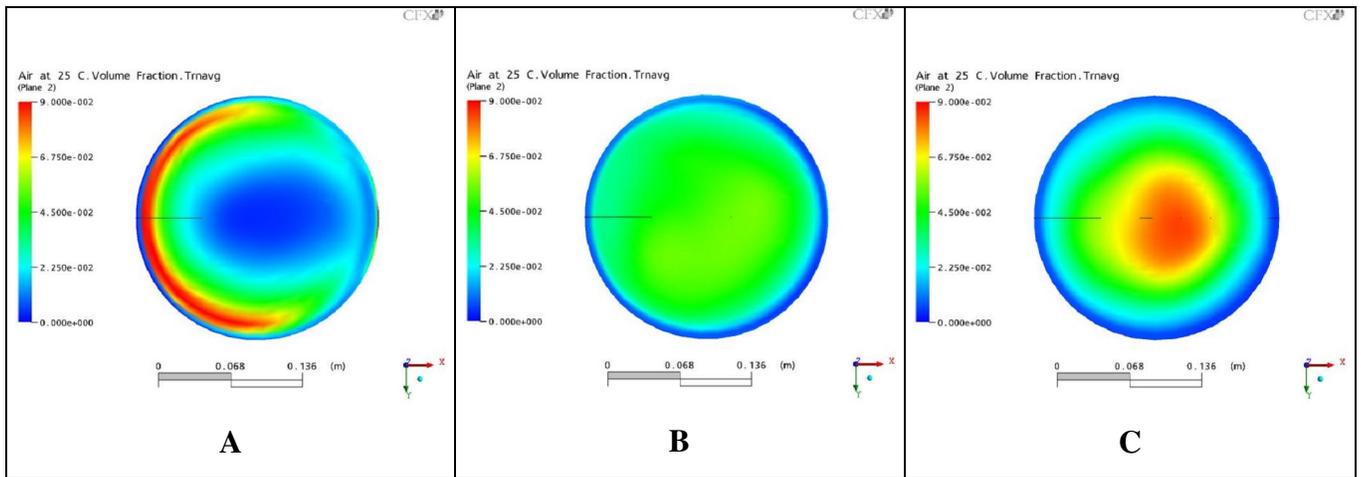


Figura 4.12 – Planos transversais de fração volumétrica de gás. (A = 0,8m; B = 2,4m; C = 4,6m)

Além das regiões previamente comentadas, houve também aparecimento de vórtices em locais próximos às conexões do *loop* (Em destaque nas figuras 4.13 e 4.14), alterando significativamente a fluidodinâmica do sistema nessas vizinhanças.

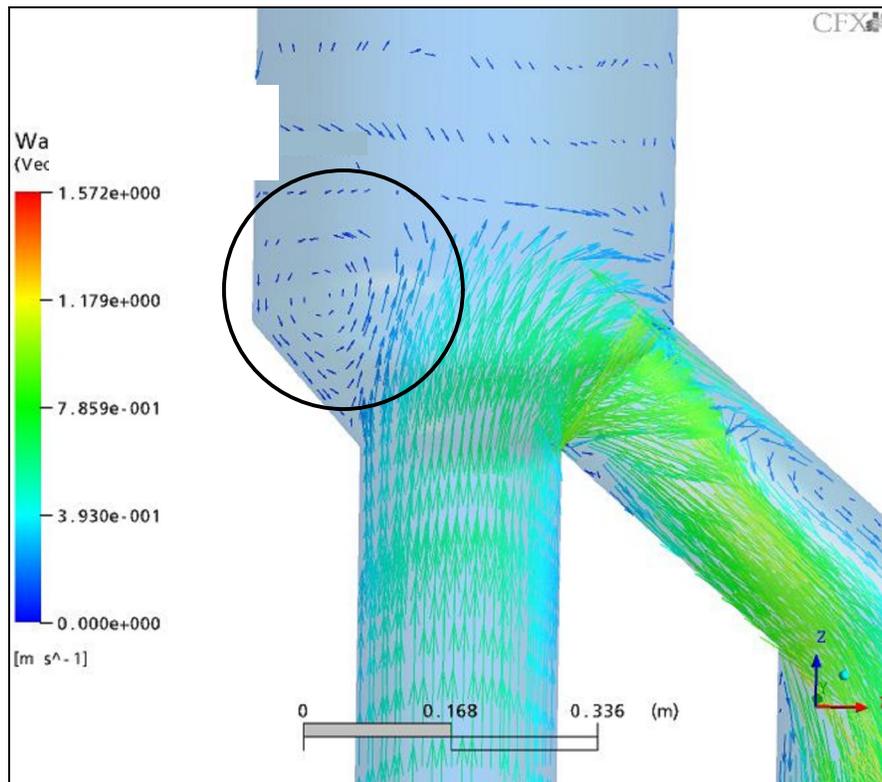


Figura 4.13 – Mapas de vetores de velocidade da fase líquida (Topo da coluna)

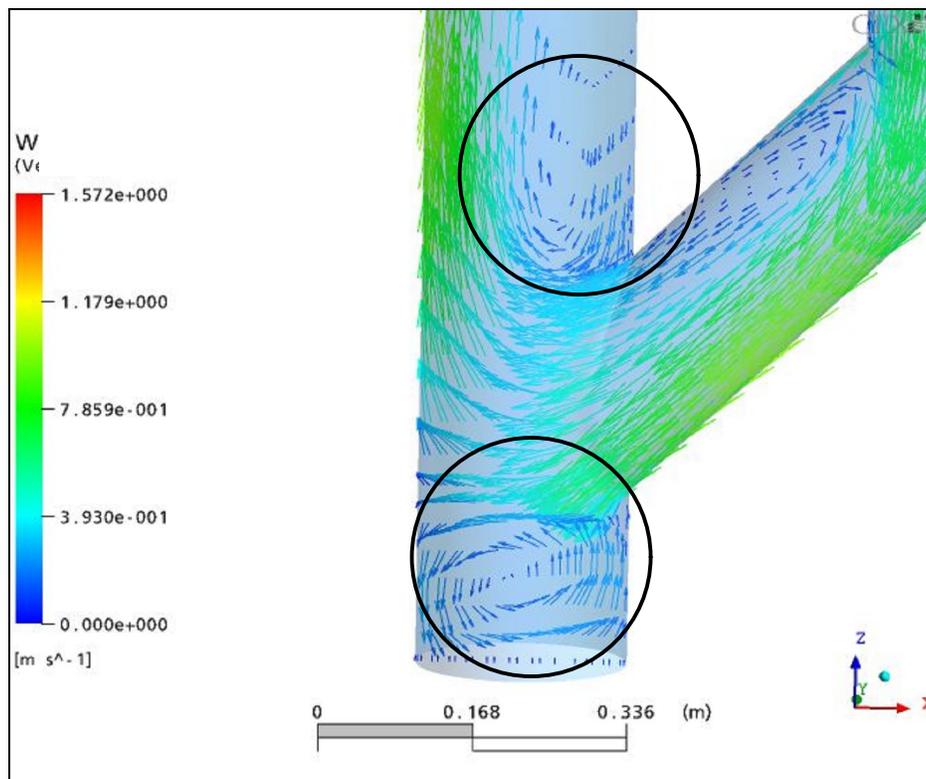


Figura 4.14 – Mapas de vetores de velocidade da fase líquida (Base da coluna)

4.1.4. – Resultados de velocidade axial da fase líquida

Apesar de não haver contrapartida experimental para os resultados de velocidade axial da fase contínua, e baseado nos bons resultados de fração volumétrica obtidos (Principalmente nas simulações com $U_G = 3,2$ cm/s, que possuem maior concordância com dados experimentais), é possível extrair importantes conclusões acerca do comportamento das colunas de bolhas comparando-se os perfis de velocidade axial obtidos nas simulações. As figuras 4.15 a 4.17 mostram os resultados obtidos.

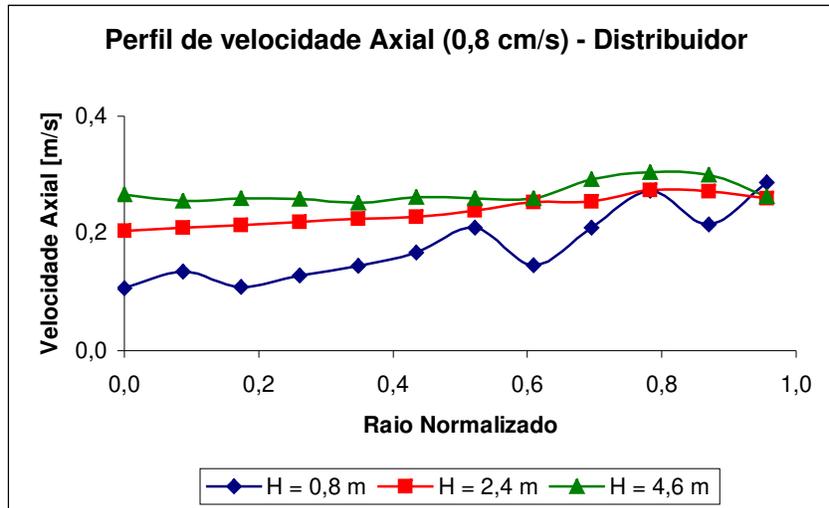


Figura 4.15 A - Velocidade Axial do líquido

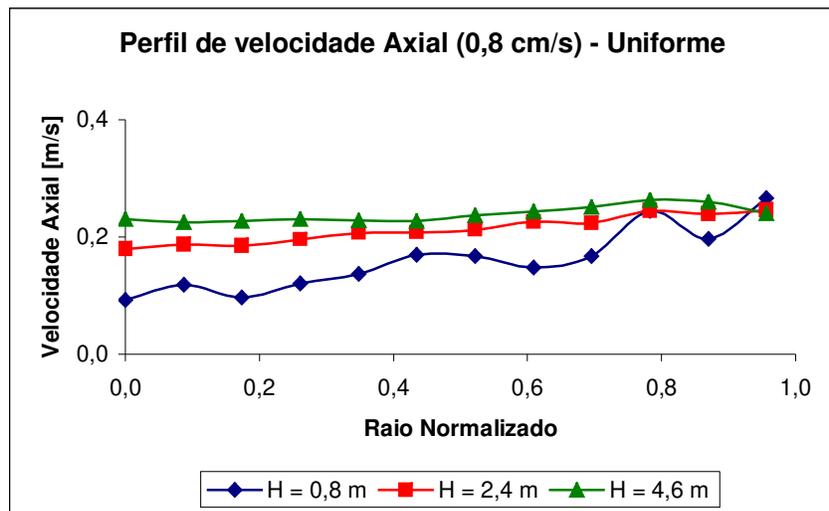


Figura 4.15 B – Velocidade Axial do líquido

Para as simulações das colunas com recirculação externa, os perfis de velocidade axial da fase líquida são bem comportados, não dependem muito do raio e também variam pouco devido ao distribuidor da fase gasosa usado nas simulações.

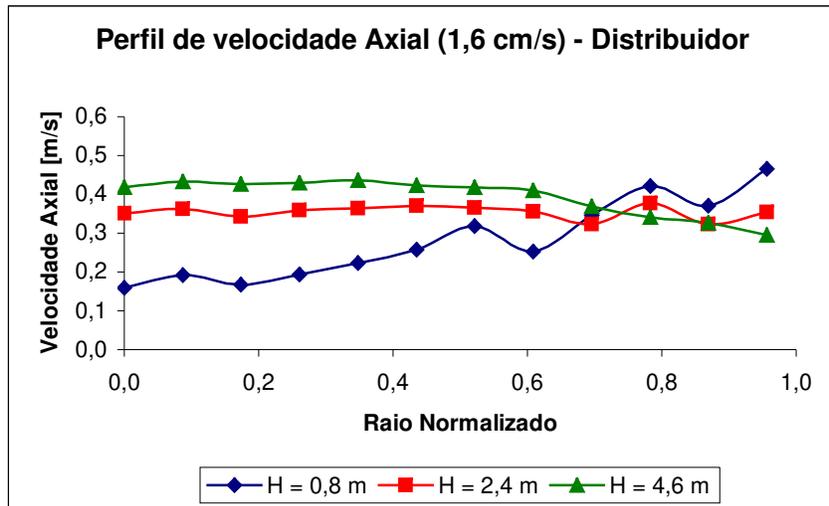


Figura 4.16 A – Velocidade Axial do líquido

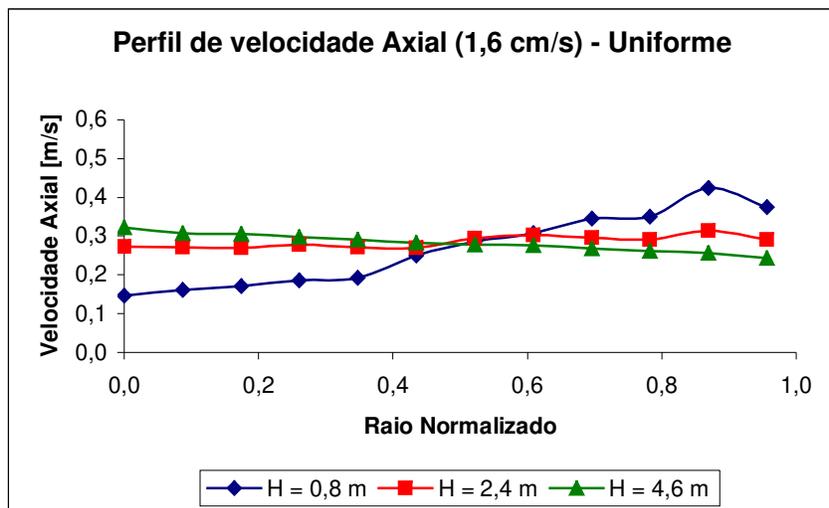


Figura 4.16 B – Velocidade Axial do líquido

Nas velocidades estudadas neste trabalho, os comportamentos dos perfis mostrados foram qualitativamente parecidos, variando apenas em sua magnitude devido aos diferentes valores de U_G , conforme pode ser visto comparando-se as Figuras 4,15 A, 4.16 A e 4.17 A (Casos com distribuidor) e as Figuras 4,15 B, 4.16 B e 4.17 B (Casos com entrada uniforme).

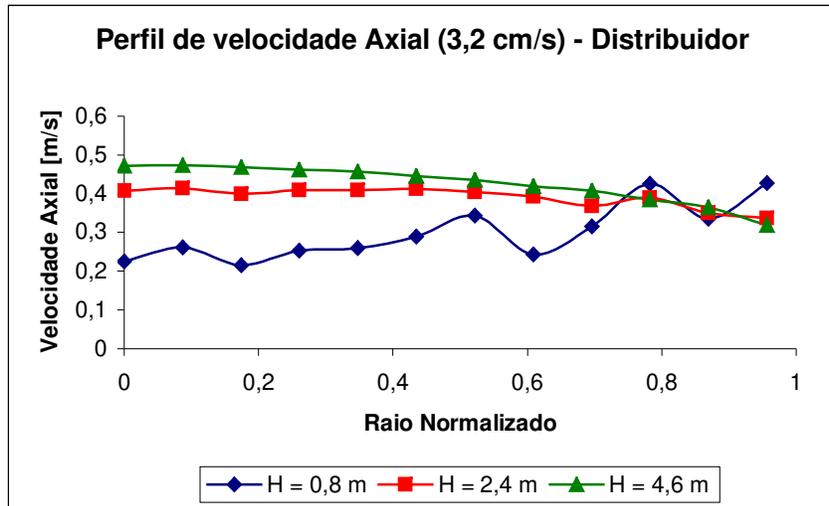


Figura 4.17 A – Velocidade Axial do líquido

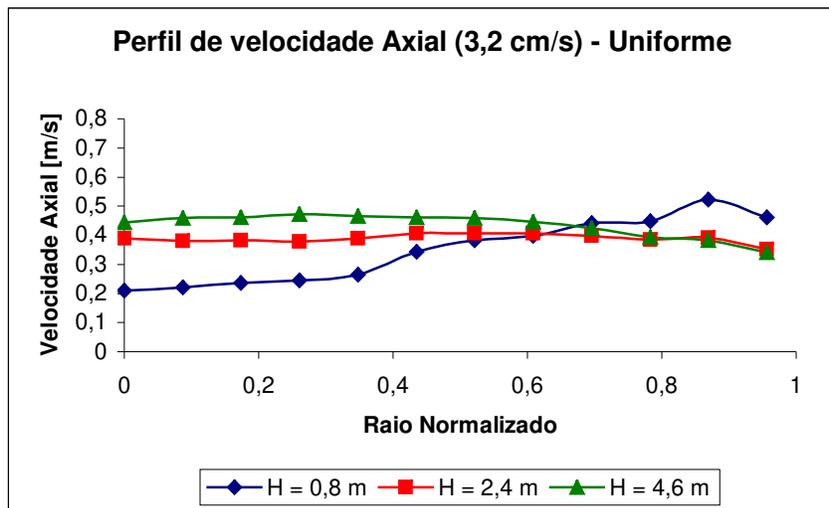


Figura 4.17 B – Velocidade Axial do líquido

4.2. – Comparação dos resultados com colunas sem loop externo

Os resultados comparativos mostrados nas figuras 4.18 e 4.19 referem-se a simulações feitas com malhas computacionais contendo distribuidores de fase gasosa.

Observando o comportamento dos perfis de velocidade axial da fase líquida mostrados anteriormente, quando comparados com dados de simulações de uma coluna com as mesmas dimensões, porém sem o *loop* externo, que corresponde à forma usualmente utilizada na literatura para estudos em colunas de bolhas, nota-se que há uma mudança significativa no comportamento dessa variável devido ao *loop*. O comportamento geralmente encontrado em colunas de bolhas sem *loop* externo apresenta fluxo ascendente no centro e descende próximo às paredes (Fig. 4.19 A), e com a introdução do *loop*, este é substituído por um fluxo ascendente em todo o corpo principal da coluna (Fig. 4.18 A).

A mudança no comportamento dessa variável induz alterações nos perfis de fração volumétrica da coluna já que o gás tende a ser arrastado com o líquido na direção de seu fluxo (Figuras. 4.18 B e 4.19 B). Como na coluna com o *loop* externo todo o fluxo de líquido está na mesma direção, os perfis de fração volumétrica de gás são mais achatados em relação aos perfis das colunas sem recirculação externa nas quais há fluxo de líquido em contato circulando em direções opostas.

Além das mudanças qualitativas esperadas nos perfis de fração volumétrica devido às alterações geométricas, houve também mudanças quantitativas importantes nos resultados, alterando a quantidade total de gás presente no corpo principal da coluna (*total gas holdup*), sendo essa uma variável muito importante na representação e no *design* desse tipo de equipamento.

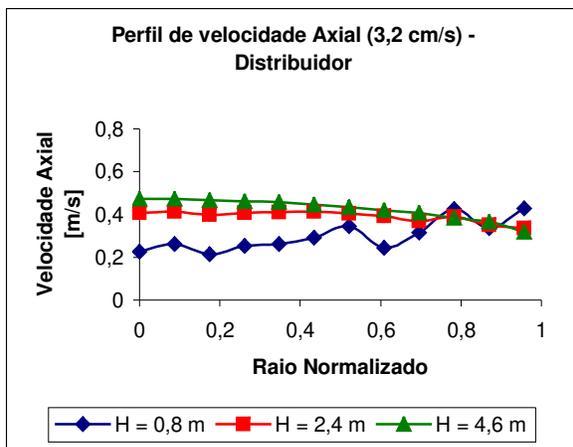


Figura 4.18 A – Perfis de vel. Axial do líquido

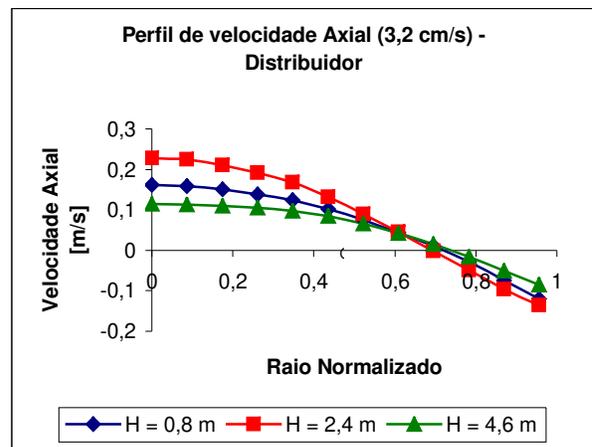


Figura 4.19 A – Perfis de vel. axial do líquido

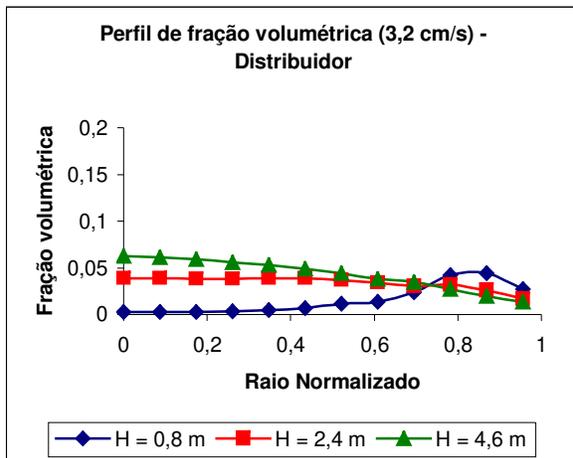


Figura 4.18 B – Perfis de fração vol. do gás

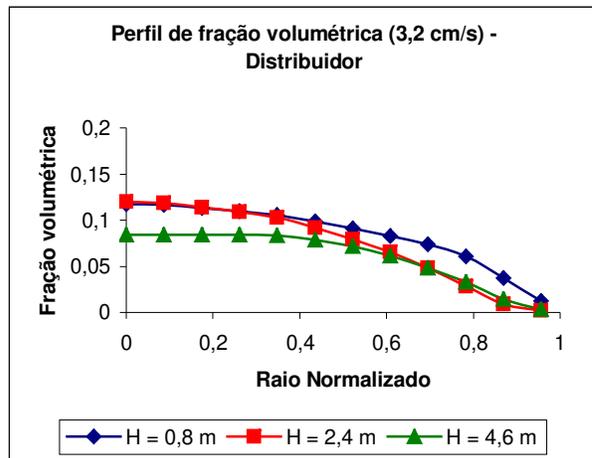
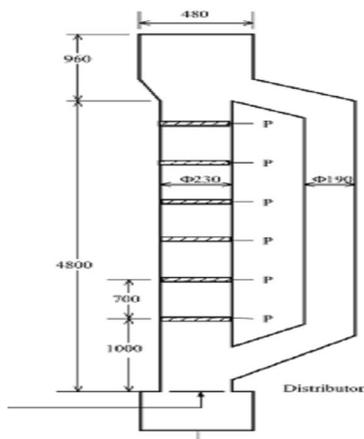
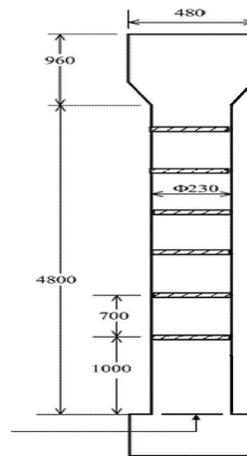


Figura 4.19 B – Perfis de fração vol. do gás



Resultados para coluna com *Loop Externo*



Resultados para coluna sem *Loop Externo*

4.2.1. – Fração volumétrica Total de gás (Total Gas Holdup)

Nas figuras deste item é possível observar as relações entre os valores de *total gas holdup* dos equipamentos para diferentes velocidades superficiais de entrada de gás nas colunas simuladas com entrada uniforme e com distribuidor de pratos perfurados.

Observando a Figura 4.20 nota-se uma linearidade entre o valor da propriedade com as velocidades superficiais de entrada de gás. Esse comportamento é esperado para colunas operando no regime homogêneo (Wild et al., 2003) e a inserção do *loop* externo não altera a forma dessa relação.

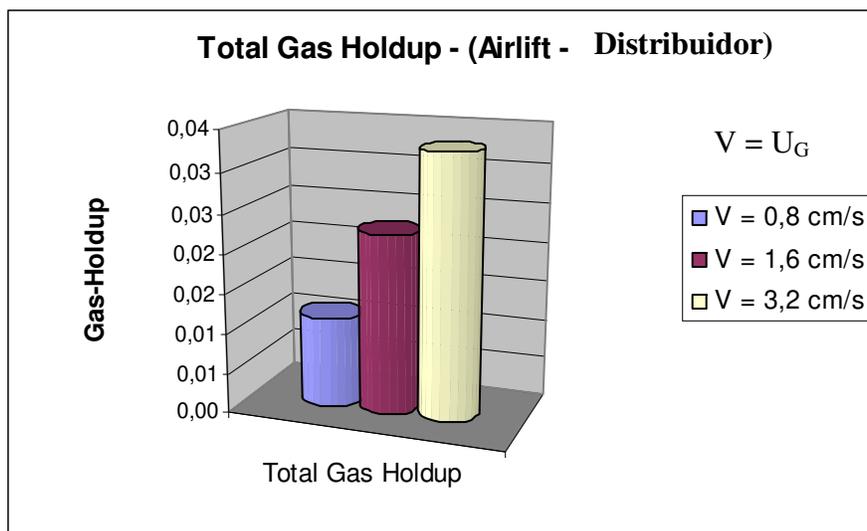


Figura 4.20 – Total Gas holdup. Variação com a velocidade de entrada

Uma característica bastante interessante que foi observada ao comparar valores de *total gas holdup* entre colunas com e sem recirculação externa é uma diminuição média no valor dessa variável devido à inserção do *Loop* externo na coluna. Esse comportamento é atribuído à mudança dos perfis de velocidade axial da fase líquida, conforme mostram as comparações nas figuras 4.18 A e 4.19 A. Isto é devido à porção de líquido descendente próximo às paredes nas colunas sem recirculação externa, que acaba por arrastar a fase gasosa, mantendo-a

assim mais tempo na coluna e por conseguinte aumentando a fração volumétrica total do gás (Figura 4.21).

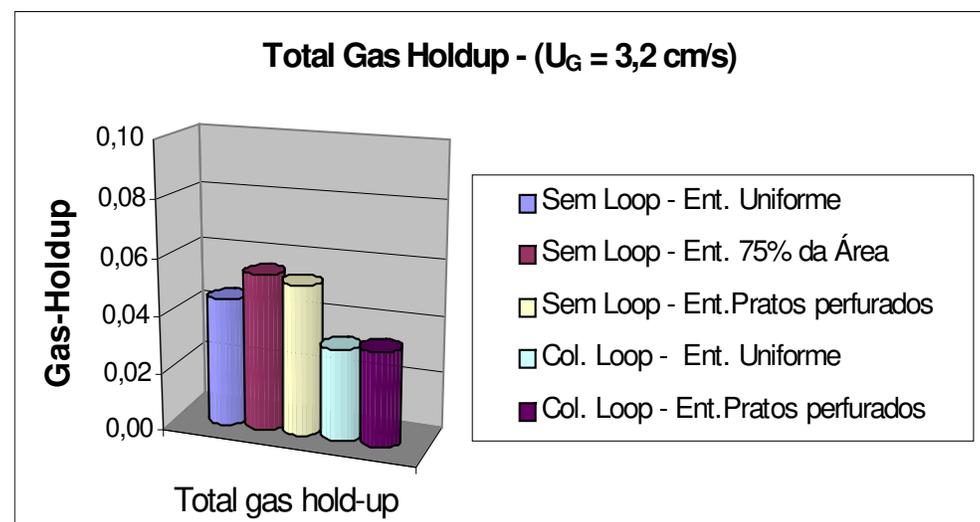


Figura 4.21 – *Total Gas holdup*. Comparação entre colunas

Este comportamento do *gas holdup* foi atribuído principalmente à mudança da geometria da coluna e não ao aumento na quantidade total de líquido (uma vez que a inserção do *loop* aumenta o volume total da coluna), devido ao fato de haver trabalhos indicando a independência do valor desta propriedade em função do diâmetro das colunas, isto é, em função da quantidade inicial de líquido nas colunas, principalmente para colunas com dimensões acima de certos valores mínimos (Kantarci et al, 2005), critérios estes cumpridos pelas colunas utilizadas neste trabalho.

A influência do distribuidor de fase gasosa no valor de *total gas holdup* aparentemente não é pronunciada, sendo preciso fazer mais averiguações para se obter uma resposta conclusiva.

Nas figuras 4.22 e 4.23 há um detalhamento maior do comportamento médio do *gas holdup* ao longo dos 5 metros das colunas. Cada valor nas figuras referidas (eixo das abscissas) representa o valor médio da fração volumétrica calculado no trecho representado no eixo das ordenadas.

A figura 4.22 mostra o comportamento da fração volumétrica para a coluna com a recirculação externa e malha do distribuidor de fase gasosa para as três velocidades superficiais de entrada de gás utilizadas neste trabalho. Os valores são maiores na base da coluna, próximos a entrada de gás, e decrescem bastante logo após a conexão inferior do *loop* com o corpo principal da coluna. No trecho intermediário da coluna, as concentrações se mantêm praticamente constantes e voltam a diminuir entre as alturas de 4 e 5 metros, onde há a conexão com a parte superior do *loop* e a interface com a atmosfera.

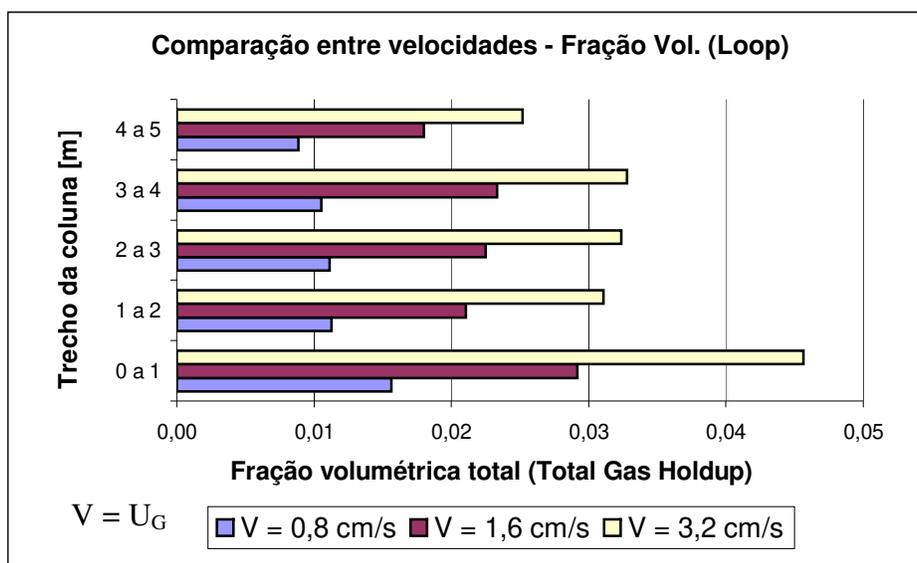


Figura 4.22 – *Gas holdup* em porções da coluna – Diferentes velocidades.

Já para as colunas sem a recirculação externa, o perfil médio do valor do *gas holdup* decresce de maneira mais linear à medida que se avança axialmente pela coluna (Figura 4.23).

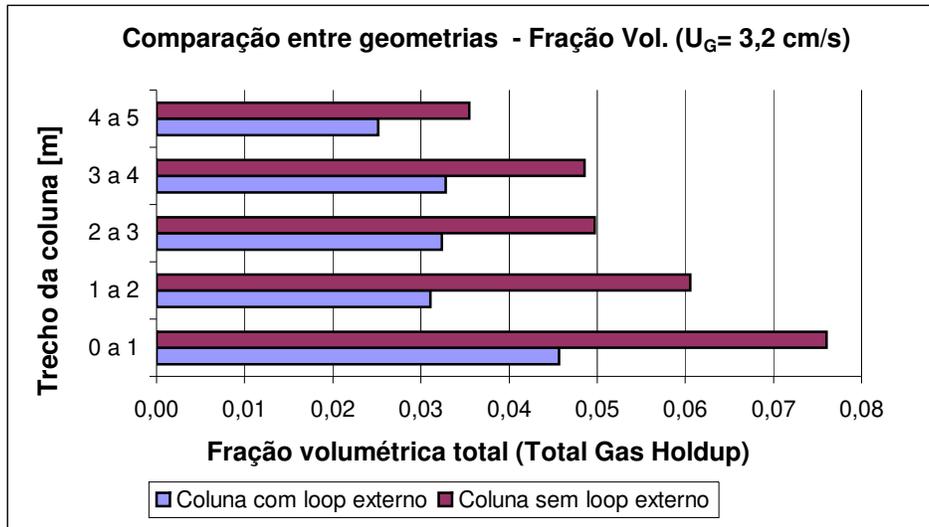


Figura 4.23 – *Gas holdup* em porções da coluna – Diferentes colunas.

O conhecimento destes comportamentos (Diminuição dos valores totais médios em colunas com reciclo, e distribuição de concentrações ao longo da coluna) conforme indicado anteriormente é importante em projetos de reatores, pois as zonas de concentração de fase gasosa poderiam exprimir os locais de maiores taxas de reação e zonas quentes do reator (Reações exotérmicas), por exemplo. Estudos analisando a influência da geometria do *loop* (Local de conexão, largura do tubo) podem ser propostos para incluir esse efeito na determinação da recirculação ideal de projetos de reatores.

5. – CONCLUSÕES E PROPOSTAS PARA TRABALHOS FUTUROS

5.1. – Conclusões

Analisando os resultados obtidos ao longo de todo o trabalho foi possível tirar importantes conclusões acerca da abordagem utilizada e sua aplicabilidade em trabalhos acadêmicos e industriais:

- ✓ A abordagem euleriana-euleriana apresenta uma boa aproximação para os sistemas estudados.
- ✓ Conforme descrito também por outros autores há necessidade de modelos de arraste que considerem deformações na geometria das bolhas.
- ✓ Os sistemas de médias temporais são a forma atual mais útil para comparar dados relevantes em colunas de bolhas, já que é sabido o comportamento altamente oscilatório/transitório dos perfis de velocidade axial da fase líquida e fração volumétrica.
- ✓ As simulações com malhas contendo os furos do prato perfurado mostraram-se factíveis, eliminando a necessidade de suposições arbitrárias de área de entrada do gás e melhorando a descrição dos perfis de fração volumétrica de gás. A utilização dessa abordagem, no entanto, deve ser cuidadosamente considerada devido ao aumento do esforço numérico necessário para se obter a solução desejada.
- ✓ Os efeitos notados nas variáveis analisadas (fração volumétrica do gás e velocidade axial da fase líquida) devido ao *loop* externo em relação às colunas padrão estudadas na literatura (tubo cilíndrico vertical) foram apreciáveis. No equipamento com o *loop* externo, o perfil de velocidade axial da fase líquida é ascendente, diferindo qualitativamente das colunas cilíndricas verticais que possuem fluxo ascendente no centro da coluna e descendente nas regiões próximas às paredes. Além disso, houve alterações nos perfis radiais de fração

volumétrica ao longo da coluna, acarretando em um decréscimo do valor da fração volumétrica total de gás da coluna devido à interação com o fluxo modificado da fase líquida.

✓ Os resultados mostraram que a metodologia utilizada no trabalho é adequada, sendo capaz de prever comportamentos importantes nos equipamentos bifásicos em questão.

5.2. – Trabalhos futuros

À luz dos promissores resultados obtidos neste trabalho, e na busca de representar sistemas em maior escala e com características para aplicações industriais, sugere-se alguns tópicos que não foram contemplados no presente trabalho.

✓ Estudar sistemas operando no regime heterogêneo de fluidização, buscando modelos de quebra e coalescência de bolhas que sejam eficientes e aplicáveis a diversos casos.

✓ Realizar novos estudos geométricos nas colunas de bolhas com outros tipos de distribuidores de fase gasosa e também com tubos de resfriamento internos à coluna de bolhas.

✓ Incluir efeitos térmicos, reações químicas e modelos de transferência de massa entre as fases na modelagem de reatores de colunas de bolhas.

6. – BIBLIOGRAFIA

ANABTAWI MZA, ABU-EISHAH SI, HILAL N, NABHAN NBW. Hydrodynamic studies in both bi-dimensional and three-dimensional bubble columns with a single sparger. Chem. Eng. Process, v.1, p.1–6, 2002

ARAÚJO, J. F. M., Estudo dos modelos de quebra e coalescência para escoamentos polidispersos, Rio de Janeiro:COPPE/UFRJ, 2006,. 184 p. Tese (Mestrado)

BEHKISH A, MEN Z, INGA RJ, MORSI BI. Mass transfer characteristics in a large-scale slurry bubble column reactor with organic liquid mixtures. Chem. Eng. Sci., v.57, p.3307–24, 2002

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. Chem. Eng. Process, v.40, p.97–111, 2001

BUWA, VV, RANADE, VV. Dynamics of gas–liquid flow in a rectangular bubble column: experiments and single/multi-group CFD simulations. Chem. Eng. Sci., v.57, p.4715–36, 2002

CAMARASA, E.; VIAL, C.; PONCIN, S.; WILD, G.; MIDOUX, N.; BOUILLARD, J. *Influence of coalescence behaviour of the liquid and of gas sparging on hydrodynamics and bubble characteristics in a bubble column*, Chemical Engineering and Processing. v.38, p.329-344, 1999

"Charité - Universitätsmedizin Berlin." 13 Sept. 2006,
<<http://www.charite.de/biofluidmechanik/bilder/blasensaeule.gif>>

- CHEN, W, HASEGAWA T, TSUTSUMI A, OTAWARA K, SHIGAKI Y.
Generalized dynamic modeling of local heat transfer in bubble columns.
Chem. Eng. Journal, v.96, p.37–44, 2003
- CHEN, J.; GUPTA, P.; DEGALEESAN, S.; AL-DAHMAN, M. H.; DUDUKOVIC, M.
P.; TOSELAND, B. A. Gas holdup distributions in large-diameter bubble
columns measured by computed tomography. Flow Measurement and
Instrumentation, v.9, p.91–101, 1998.
- CHO YJ, WOO KJ, KANG Y, KIM SD. Dynamic characteristics of heat transfer
coefficient in pressurized bubble columns with viscous medium. Chem Eng
Process, v.41, p.699–706, 2002
- CLIF, R., GRACE, J.R., WEBER, M.E. *Bubbles, Drops, and Particles*. Montreal:
Academic Press, Inc. 1978, 380 p.
- DEGALEESAN, S, DUDUKOVIC M, PAN Y. Experimental study of gas induced
liquid-flow structures in bubble columns. AIChE J., v.47, p.1913–31, 2001
- DECKWER, W.D, LOUISI Y, ZAIDI A, RALEK M. Hydrodynamic properties of
the Fisher–Tropsch slurry process. Ind Eng Chem Process Des. Dev., v.19,
p.699–708, 1980
- DECKWER, W.D., *Bubble Column Reactors*. Chichester: John Wiley & Sons
Ltd.,1992, 532 p.
- DEEN, N.G., SOLBERG, T., HJERTAGER, B. H. Large eddy simulation of the
Gas-Liquid flow in a square cross-sectioned bubble column. Chem. Eng.
Science, v. 56, p.6341-6349, 2001

- DHOTRE, M.T, EKAMBARA K, JOSHI JB. CFD simulation of sparger design and height to diameter ratio on gas hold-up profiles in bubble column reactors. *Exp. Therm. Fluid Science*, v.28, p.407–21, 2004
- DHOTRE, M.T.; EKAMBARA, K., JOSHI, J. B. CFD simulations of bubble column reactors:1D, 2D and 3D approach. *Chem. Eng. Science*, v.60. p. 6733–6746, 2005.
- DHOTRE, M.T., JOSHI, J.B., Design of a gas distributor Three dimensional CFD simulation of a coupled system consisting of a gas chamber and a bubble column, *Chemical Engineering Journal*, v.125, p.149-163, 2007
- ESSADKI H, NIKOV I, DELMAS H. Electrochemical probe for bubble size prediction in a bubble column. *Exp. Therm. Fluid Science*, v.14, p.243–50, 1997
- FORRET, A.; SCHWEITZER, J. M.; GAUTHIER, T.; KRISHNA, R.; SCHWEICHC, D. Influence of scale on the hydrodynamics of bubble column reactors: an experimental study in columns of 0.1, 0.4 and 1m diameters, *Chemical Engineering Science* v. 58, p. 719 – 724, 2003.
- HAQUE, M.W.; NIGAM, K.D.P.; JOSHI, J.B. Optimum gas sparger design for bubble columns with a low height to diameter ratio. *Chemical Engineering Journal*, v.33, p.63–69, 1986.
- HYNDMAN CL, LARACHI F, GUY C. Understanding gas-phase hydrodynamics in bubble columns: a convective model based on kinetic theory. *Chem Eng Sci*. v.52, p.63–77, 1997
- ISHII, M. *Thermo-FluidDynamic Theory of Two-Phase Flow*. Eyrolles, Paris, 1975.

- JAKOBSEN, H., SANNES, B., GREVSKOTT, S., SVENDSEN, H., Modeling of vertical bubble-driven flows, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 36, No. 10, p 4052–4074, 1997.
- JOSHI, J. B. Computational flow modelling and design of bubble column reactors, *Chemical Engineering Science* v. 56, p. 5893–5933, 2001.
- KANTARCI, N.; BORAK, F.; ULGEN, K. O. Review Bubble column reactors, *Process Biochemistry* v.40, p.2263–2283, 2005.
- KRISHNA R, VAN BATEN JM. Mass transfer in bubble columns. *Catal. Today*, p.79–80:67–75, 2003
- LAPIN A, PAASCHEN T, JUNGHANS K, LU"BBERT A. Bubble column fluid dynamics, flow structures in slender columns with large-diameter ring-spargers. *Chem. Eng. Sci.*, v.57, p.1419–24, 2002
- LARACHI, F.; DESVIGNE,D.; DONNAT, L.; SCHWEICH, D. Simulating the effects of liquid circulation in bubble columns with internals. *Chemical Engineering Science*, v.61, p.4195–4206, 2006.
- LI H, PRAKASH A. Heat transfer and hydrodynamics in a three-phase slurry bubble column. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.36, p.4688–94, 1997
- LI H, PRAKASH A. Analysis of bubble dynamics and local hydrodynamics based on instantaneous heat transfer measurements in a slurry bubble column. *Chem. Eng. Sci.*, v.54, p.5265–5271, 1999
- LI H, PRAKASH A. Influence of slurry concentrations on bubble population and their rise velocities in three-phase slurry bubble column. *Powder Tech.*, v.113, p.158–67, 2000

- LI H, PRAKASH A. Survey of heat transfer mechanisms in a slurry bubble column. *Can. Journal of Chem. Eng.*, v.79, p.717–25, 2001
- LI H, PRAKASH A. Analysis of flow patterns in bubble and slurry bubble columns based on local heat transfer measurements. *Chem. Eng. Journal*, v.86, p.269–76, 2002
- LIN TJ, WANG, SP. Effects of macroscopic hydrodynamics on heat transfer in bubble columns. *Chem. Eng. Sci.*, v.56, p.1143–9, 2001
- LO, S., *Application of the MUSIG Model to Bubbly Flows*, AEAT-1096, AEATechnology, 1996.
- LUO X, LEE DJ, LAU R, YANG G, FAN L. Maximum stable bubble size and gas holdup in high-pressure slurry bubble columns. *AIChE J.*, v.45, p.665–85, 1999
- MAALEJ S, BENADDA B, OTTERBEIN M. Interfacial area and volumetric mass transfer coefficient in a bubble reactor at elevated pressures. *Chem. Eng. Sci.* v.58, p.2365–76, 2003
- MICHELE V, HEMPEL DC. Liquid flow and gas holdup-measurement and CFD modeling for two-and-three-phase bubble columns. *Chem. Eng. Sci.*, v.57, p.1899–908, 2002
- MUDDE, R.F.; SIMONIN, O. Two and three dimensional simulations of a bubble plume using a two fluid model. *Chemical Engineering Science*, v.54, p.5061–5069, 1999.
- PRAKASH A, MARGARITIS A, LI H. Hydrodynamics and local heat transfer measurements in a bubble column with suspension of yeast. *Biochem. Eng. Journal*. V.9, p.155–63, 2001

- PFLEGER, S.; GOMES, S.; GILBERT, N.; WAGNER, H.G. Hydrodynamic simulations of laboratory scale bubble columns: fundamental studies of the Eulerian–Eulerian modelling approach. *Chemical Engineering Science*, v. 54, p.5091–5099, 1999.
- RAFIQUE, M.; CHEN, P.; DUDUKOVIC, M.P. Computational modeling of gas-liquid flow in bubble columns. *Reviews in Chemical Engineering*, v.20, p.225-375, 2004.
- RANADE, V.V.; TAYALIA, Y. Modeling of fluid dynamics and mixing in shallow bubble column reactors: influence of sparger design. *Chemical Engineering Science*, v.56, p.1667–1675, 2001.
- SANTOS, C. M., DIONISIO, R. P., CERQUEIRA, H. S., SOUSA-AGUIAR, E. F., MORI, M., D´AVILA, M. A. , Three-Dimensional Gas-Liquid CFD Simulations in Cylindrical Bubble Columns. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, v.5, A90 , 2007
- SCHAFFER R, MARTEN C, EIGENBERGER G. Bubble size distributions in a bubble column reactor under industrial conditions. *Exp. Therm. Fluid Science* v.26, p.595–604, 2002
- SCHWARZ, M.P.; TURNER, W.J. Applicability of the standard k– ϵ turbulence model to gas stirred baths. *Applied Mathematical Modelling*, v.12, p.273–279, 1988.
- SHA, Z., LAARI, A., TURUNEN, I., Multi-Phase-Multi-Size-Group Model for the Inclusion of Population Balances into the CFD Simulation of Gas-Liquid Bubbly Flows, *Chem. Eng. Technol.*, v.29, n.5, 2006.
- SHIMIZU K, TAKADA S, MINEKAWA K, KAWASE Y. Phenomenological model for bubble column reactors: prediction of gas holdups and volumetric mass transfer coefficients. *Chem. Eng. Journal*, v.78, p.21–8, 2000

- SOKOLICHIN, A.; EIGENBERGER, G.; LAPIN, A.; LUBBERT, A. Dynamic numerical simulation of gas–liquid two-phase flows Euler/Euler versus Euler/Lagrange. *Chemical Engineering Science*, v.52 (4), p.611–626, 1997
- SOKOLICHIN, A.; EIGENBERGER, G. Applicability of the standard turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns: Part I. Detailed numerical simulations. *Chemical Engineering Science*, v.54, p.2273–2284, 1999
- SOKOLICHIN, A., EIGENBERGER, G., LAPIN, A. Simulation of buoyancy driven bubbly flow: established simplifications and open questions. *American Institute of Chemical Engineering Journal*, v.50, p.24–45, 2004
- TANG C, HEINDEL TJ. Time-dependent gas holdup variation in an air– water bubble column. *Chem Eng. Sci.*, v.59, p.623–32, 2004
- TENNEKES, H., AND LUMLEY, J. A First course in Turbulence. The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1972.
- THORAT BN, JOSHI JB. Regime transition in bubble columns: experimental and predictions. *Exp. Therm. Fluid Science*, v.28, p.423–430, 2004
- VANDU CO, KRISHNA R. Volumetric mass transfer coefficients in slurry bubble columns operating in churn-turbulent flow regime. *Chem. Eng. Process*, v.43, p.987–995, 2004
- VEERA UP, KATARIA KL, JOSHI JB. Effect of superficial gas velocity on gas hold-up profiles in foaming liquids in bubble column reactors. *Chem. Eng. Journal*, v.99, p.53–58, 2004
- VERMA AK, RAI S. Studies on surface to bulk ionic mass transfer in bubble column. *Chem. Eng. Journal*, v.94, p.67–72, 2003

- VERSTEEG, H.K. E MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. Addison-Wesley, 1996, 257 p
- WANG, T., LIN, J., HAN, M., ZHANG, T., WANG*, J. JIN, W., Influence of the gas distributor on the local hydrodynamic behavior of an external loop airlift reactor, *Chemical Engineering Journal*, v.102, p.51-59, 2004
- WILD, G.; PONCIN, S.; LI, H.; OLMOS, E. Some Aspects of the Hydrodynamics of Bubble Columns, *International Journal Of Chemical Reactor Engineering*, v.1 Review R7, 2003.
- XIA, Y.K., PENG, F.F, WOLFE, E. CFD simulation of alleviation of fluid back mixing by baffles in bubble column, *Minerals Engineering* v.19, p.925–937, 2006.