

UNICAMP - UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS FEQ - FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA DPQ - DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS LMSPQ - LABORATÓRIO DE MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS

# <u>Simulação Tridimensional com Sistema</u> Gás-Líquido em Colunas de Bolhas

Celso Murilo dos Santos

Orientador: Prof Dr. Milton Mori Co-orientador: Dr. Marcos A. d'Avila

Campinas-SP Novembro-2005



UNICAMP - UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS FEQ - FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA DPQ - DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS LMSPQ - LABORATÓRIO DE MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS

# Simulação Tridimensional com Sistema

# Gás-Líquido em Colunas de Bolhas

Celso Murilo dos Santos

Orientador: Prof Dr. Milton Mori Co-orientador: Dr. Marcos A. d'Avila

Dissertação de mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química

Campinas-SP Novembro-2005

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

Sa59s	Santos, Celso Murilo dos Simulação tridimensional com sistema gás-líquido em colunas de bolhas /Celso Murilo dos SantosCampinas, SP: [s.n.], 2005.
	Orientadores: Milton Mori, Marcos Akira d'Ávila Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.
	<ol> <li>Escoamento multifásico. 2. Gás - Escoamento. 3. Gases líquidos. 4. Modelos matemáticos. 5. Métodos de simulação.</li> <li>Métodos dos volumes finitos. I. Mori, Milton. II. d'Ávila, Marcos Akira, Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.</li> </ol>

Titulo em Inglês: Three-dimensional simulation of gas-liquid in bubble columns Palavras-chave em Inglês: Bubble columns, Multiphase flow, Gas-liquid, Mathematic models, Simulation methods, Finite volumes method. Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos Titulação: Mestre em Engenharia Química Banca examinadora: Waldir Pedro Martignoni e Henrique Soares Cerqueira Data da defesa: 01/12/2005 Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida pelo Engenheiro Químico Celso Murilo dos Santos e aprovada em 01 de dezembro de 2005 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

10

Prof. Dr. Milton Mori - Orientador

Dr. Waldir Pedro Martignoni

21

Dr. Henrique Soares Cerqueira

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendido pelo Engenheiro Químico Celso Murilo dos Santos.

Prof. Dr. Milton Mori - Orientador

Os beduínos rezam para Alá,... Porém, a noite sempre amarram seus camelos.

Autor desconhecido

Agradeço em primeiro lugar à Deus, pelo dom da vida, pela saúde, pela serenidade,...

Aos meus pais (Seu Celso e Dona Cida) que sempre torceram pela felicidade dos filhos.

Aos meus irmãos, pela presença (embora longe fisicamente), pela amizade e companheirismo.

Danieli (Dani), minha querida esposa, a qual vim conhecê-la e amá-la, aqui em Campinas, e que tem me acompanhado e me ajudado tanto nesta caminhada. Quem me apoiou, ajudou e estimulou nesta etapa da minha vida.

Ao professor Henry, que me proporcionou o primeiro contato com a Fluidodinâmica Computacional.

Aos colegas de trabalho na SIX<sup>1</sup>, em especial ao Eng Waldir, que com muita amizade me recebeu e proporcionou um tempo de estágio muito bom. Ao Eng Kenzo, pela amizade, e ao Eng Marcos Sugaya, que me convidou para continuar com um dos temas do estágio no mestrado.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Superintendência da Industrialização do Xisto

Celso Murilo dos Santos

Ao professor Milton Mori, que me recebeu em Campinas e proporcionou-me condições para o desenvolvimento deste trabalho.

Ao Pesquisador Marcos Akira d'Ávila, meu co-orientador e companheiro nesta pesquisa, que tanto tem me ajudado, orientando-me em diversas etapas desta pesquisa.

Ao colega Renato, pela ajuda com a geração de malha numérica tridimensional, com o software ICEM<sup>®</sup>.

Aos colegas e amigos do LMSPQ (Alexandre, Ana Rita, Carolina, Cléber, Daniel, Fabio, Graça, Jaci, Karla, Karolline, Liliane, Renato, Roberto, Takeo), os quais convivemos e trocamos muitas experiências.

À PETROBRAS, pelo apoio financeiro.

À todos que direta ou indiretamente contribuíram para a possibilidade do desenvolvimento deste trabalho.

# Sumário

4.2.2. Sistema Água-Ar e Óleo-Ar41
4.3. Condições iniciais e de contorno
4.4. Parâmetros de Simulação46
5. Resultados e Discussões48
5.1. Transitoriedade48
5.1.1. Similaridade entre os perfis de Velocidade Axial
e Fração Volumétrica49
5.2. Influência da Fase Contínua54
5.2.1. Efeito da fase contínua para $d_b = 4,13$ mm55
5.2.2. Efeito da fase contínua para $d_b = 6,75$ mm58
5.3. Influência da Velocidade Axial de entrada59
5.3.1. Sistemas com mesmo diâmetro ( $d_b = 6,75$ mm)60
5.3.2. Sistemas com diferentes diâmetros61
5.4. Influência do Diâmetro63
5.4.1. Sistema Água-Ar63
5.4.2. Influência do Diâmetro para alta viscosidade65
5.5. Influência do Modelo de Arraste65
5.5.1. Modelos de arraste padrões65
5.5.2. Variações do modelo de Grace
5.6. Turbulência nas duas fases77
5.7. Comparação simulação versus experimental79
6. Conclusões e Sugestões87
6.1. Conclusões87
6.2. Sugestões para atividades futuras89
Referencias Bibliográficas90
Apêndice
Apêndice 1 - Força <i>lift</i> 95
Apêndice 2 - Força de aceleração mássica

# Lista de Figuras

Figura 1.1 - Coluna retangular com um furo na base2
Figura 1.2 - Esquema de fluxo bi e tridimensional3
Figura 1.3 - Perfis instantâneos e médios de Fração
Volumétrica no ponto [0; 1,32; 0]3
Figura 1.4 - Regime de bolhas homogêneo e heterogêneo4
Figura 1.5 – Forma das bolhas em função dos números
adimensionais6
Figura 3.1 - Volume numérico31
Figura 4.1 - Esquema experimental apresentado por Chen et
al. (1998)
Figura 4.2 - Geometria e malha do sistema sem tubos44
Figura 4.3 - Geometria e malha do sistema com tubos45
Figura 5.1 - Mapas de Fração volumétrica do gás(1) e
Velocidade Axial do líquido(2) para Água-Ar 2 cm s $^{-1}$ em
vários tempos: (A)0, (B)2, (C)4, (D)6, (E)8, (F)10,
(G)12, (H)14, (I)16, (J)18, (L)20, (M)30, (N)40, (O)50,
(P)60, (Q)70, (R)80, (S)90, (T)100 segundos51
Figura 5.2 - Fração volumétrica do gás e Velocidade Axial
do líquido em função do tempo, valores instantâneos e
médios, no ponto [0; 1,32; 0]52
Figura 5.3 - Fração volumétrica do gás em função do tempo,
valores instantâneos e médios, no ponto [0; 1,32; 0]:52
Figura 5.4 - Perfil médios de (A) Fração Volumétrica e (B)
Velocidade Axial ao longo da coluna para diferentes
alturas (h) em relação à base da coluna53
Figura 5.5 - Vetores de velocidade do líquido para o
sistema Água-Ar 5 cm s-1 d <sub>b</sub> =4,13mm55
Figura 5.6 - Perfis médios de Fração volumétrica e
Velocidade Axial para os sistemas Água-Ar e Óleo-Ar ( $U_e$ =

5 cm s <sup>-1</sup> , $d_b$ = 4,13 mm) em várias alturas: (A) 1,70 m, (B)
1,32 m, (C) 0,89 m, (D) 0,51 m56
Figura 5.7 - Mapa de cores de $\epsilon_{dm}$ para sistemas com $d_b$ =4,13
mm
Figura 5.8 - Perfis médios de velocidade axial do líquido e
fração volumétrica dos sistemas Água-Ar e Óleo-Ar
(d <sub>b</sub> =6,75 mm)
Figura 5.9 - Velocidade terminal das bolhas, para os dois
sistemas (Água-Ar e Óleo-Ar) em função do diâmetro das
bolhas, (Eq.( 35 ))59
Figura 5.10 - Fração Volumétrica e Velocidade Axial do
sistema Água-Ar d <sub>b</sub> =6,75 mm, $U_e$ = 2, 5 e 10 cm s <sup>-1</sup> 60
Figura 5.11- Fração Volumétrica para o sistema Óleo-Ar, d_b
=6,75 mm
Figura 5.12 - Fração volumétrica (A) e Velocidade Axial(B)
médios em função da posição radial para o sistema Água-
Ar, U <sub>e</sub> =2, 5 e 10 cm s <sup>-1</sup> com diâmetro segundo a correlação
Eq.( 57 )
Figura 5.13 - Fração volumétrica média do sistema Óleo-Ar,
${ m U_e}$ =2 e 5 cm s $^{-1}$ com diâmetro segundo a correlação Eq.( 57
)
Figura 5.14 - Fração Volumétrica (A) e Velocidade Axial(B)
médios em função da posição radial para o sistema Água-Ar
para $d_b = 4,13$ e 6,75 mm64
Figura 5.15 - Perfis médios de Velocidade Axial (Vel) e de
Fração Volumétrica (FV) para o sistema Óleo-Ar com $d_b$
=6,75 e 4,13 mm; em várias alturas:66
Figura 5.16 - Fração volumétrica (A) e Velocidade Axial(B)
médios em função da posição radial para o sistema Água-
Ar, $U_e$ =5 cm s <sup>-1</sup> $d_b$ = 4,13 com modelos de arraste
diferentes68
Figura 5.17 - Mapas de isocurvas de Fração Volumétrica
média a 0,15 (1), Velocidade Axial média a +0,2 (2) e

Velocidade Axial média a -0,2 (3), para os modelos de Arraste Grace (A), Ishii-Zuber (B) e Schiller-Naumann (C) para o sistema Água-Ar, .....69 Figura 5.18 - Fração Volumétrica do gás em função do tempo, valores instantâneos e médios, no ponto [0; 1,32; 0], para modelos de Grace com o expoente: (A) p=-0,5 e (B) Figura 5.19 - Perfis médios de Fração Volumétrica do gás para os diferentes valores do expoente p do modelo de Grace em diferentes alturas: (A) 1,70 m, (B) 1,32 m, (C) 0,89 m, (D) 0,51 m.....72 Figura 5.20 - Perfis médios de Velocidade Axial do líquido para os diferentes valores do expoente p do modelo de Grace em diferentes alturas: (A) 1,70 m, (B) 1,32 m, (C) 0,89 m, (D) 0,51 m.....73 Figura 5.21 - Mapas de isocurvas de Fração Volumétrica média a 0,15 (1), Velocidade Axial média a -0,2 (2) e Velocidade Axial média a -0,2 (3), para diferentes valores do expoente p do modelo de Grace (A) -0,5, (B) 0 Figura 5.22 - Mapas de Cores do perfil de Fração Volumétrica média para o sistema Água-Ar,  $U_e = 5$  cm s<sup>-1</sup>  $d_b =$ 4,13 mm, com modelo de Grace, p= +1,0 em varias alturas: (A)0,51m, (B)0,89m, (C)1,32m e (D)1,70m......76 Figura 5.23 - Fração Volumétrica do gás em função do tempo, valores instantâneos e médios, no ponto [0; 1,32; 0], para fase dispersa com modelo de turbulência......77 Figura 5.24 - Perfis médios de Velocidade Axial do líquido e fração volumétrica do gás em diferentes alturas: (A) 1,70 m, (B) 1,32 m, (C) 0,89 m, (D) 0,51 m, para sistema Figura 5.25 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e perfil médio de: (A) Velocidade axial do líquido

(h=1,32m) e (B) Fração Volumétrica do gás (h=0,89m), do
sistema Água-Ar, $U_e = 2 \text{ cm s}^{-1}$ , $d_b = 6,75 \text{mm} \dots $
Figura 5.26 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e
perfis médio de Fração Volumétrica do sistema Água-Ar, $U_e$
= 5 cm s <sup>-1</sup> , $d_b$ =4,13 e 6,75 mm, h=0,89m81
Figura 5.27 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e
perfis médio de: (A) Velocidade axial do líquido
(h=1,32m) e (B) Fração Volumétrica do líquido (h=0,89m)do
sistema Água-Ar, $U_e = 10 \text{ cm s}^{-1}$ , $d_b = 4,00 \text{ e} 6,75 \text{ mm} \dots 82$
Figura 5.28 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e
perfis médios de (A) Velocidade axial do líquido e (B)
Fração Volumétrica do gás, para o sistema Óleo-Ar, $U_e$ = 2
cm $s^{-1}$ , $d_b = 6,75$ mm, na altura de 1,32m
Figura 5.29 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e
perfis médios de Fração Volumétrica do sistema Óleo-Ar $U_e$
= 5 cm s <sup>-1</sup> , $d_b$ = 4,13 e 6,75 mm, h=1,32m84
Figura 5.30 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e
perfis médios de Fração Volumétrica do sistema Água-Ar $U_e$
= 5 cm s <sup>-1</sup> , $d_b$ = 4,13 e 6,75 mm, h=0,89 m, para os três
modelos de arraste85
Figura 5.31 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e
perfis médios de Fração Volumétrica do gás para os
diferentes valores do expoente p do modelo de Grace.
Sistema Água-Ar $U_e$ = 5 cm s <sup>-1</sup> , d <sub>b</sub> = 4,13 mm, h=0,89m85
Figura 5.32 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e
Perfis médios de Fração Volumétrica do gás para o sistema
Água-Ar $U_e$ = 5 cm s <sup>-1</sup> , d <sub>b</sub> = 4,13 mm, h=0,89m, Com e sem
turbulência da fase gasosa86

# Lista de Tabelas

Tabela 4.1	1 – Propriedade dos fluidos
Tabela 4.	2 - Altura da coluna onde são deitas as leituras
por Cher	n Chen et al, (1998)40
Tabela 4.3	3 - Diâmetro das bolhas42
Tabela 4.4	4 - Parâmetros das Malhas (Quantidade de nós)42
Tabela 4.5	5 - Experimentos numéricos43

#### Resumo

Colunas de bolhas são equipamentos de simples operação, mas que apresentam uma fluidodinâmica 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 mais diversas áreas industriais, nas 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.

Neste trabalho foram realizadas simulações tridimensionais do escoamento transiente em coluna de bolhas utilizando o pacote computacional de CFD CFX<sup>®</sup> 5.7 (ANSYS<sup>®</sup>). Este pacote utiliza o método dos volumes finitos para solucionar as equações governantes de transporte em escoamento multifásico, utilizando a abordagem Euleriana-Euleriana, que mostrou-se adequada para este estudo.

Os estudos de casos foram feitos para verificar a influência das propriedades da fase contínua (viscosidade e tensão superficial), da fase dispersa (diâmetro das bolhas) e dos modelos de arraste. Obteve-se resultados de velocidades axial da fase contínua ( $U_{ym}$ ) e de fração volumétrica da fase dispersa ( $\epsilon_{dm}$ ), que foram comparados com dados experimentais disponíveis na literatura.

Através dos resultados de simulação verificou-se que quanto maior a velocidade de entrada do gás, maior o gradiente nos perfis de velocidade axial e de fração volumétrica. O efeito do diâmetro das bolhas depende das características da fase contínua. Dentre os modelos de arraste testados, os de Grace e Ishii-Zuber foram os que apresentaram melhor concordância com os dados experimentais. Os efeitos da fase contínua foram avaliados para dois diâmetros de bolhas  $(d_b)$ : 4,13 e 6,75 mm. Foi observado, para o caso com menor diâmetro, que os valores dos perfis de  $\varepsilon_{dm}$  para o sistema mais viscoso foram superiores aos do sistema menos viscoso, enquanto que para o caso com  $d_b$ =6,75 mm foi observado o contrário, ou seja, os valores de  $\varepsilon_{dm}$ foram maiores para o sistema menos viscoso. Foi observada boa concordância com dados experimentais para os casos com velocidade de entrada de gás $(U_e)$  de 2 cm s<sup>-1</sup> e 5 cm s<sup>-1</sup> para o sistema menos viscoso e  $U_e$  de 2 cm s<sup>-1</sup> para o sistema mais viscoso.

## Abstract

Bubble columns are equipments of simple operation, but presents a complex fluidodynamic. Its basic operation consists of the injection of a gas (disperses phase) in the bottom of the column in a liquid medium (continuous phase). As reactors, they are used in a variety of chemical processes, such as Fischer-Tropsch synthesis, oxidation reactions, alkylation reactions, effluent treatment, fermentation, reactions, protein production, and more recently, in cell cultures.

In this work, three-dimensional simulations of the transient flow in bubble columns was performed using the computational package CFD CFX<sup>®</sup> 5.7 (ANSYS<sup>®</sup>). This package uses the finite volumes method to solve the governing equations of transport in multiphase flow using the Eulerian-Eulerian approach, which showed to be adequate for this study. The case studies were carried out in order to verify the influence of the properties of the continuous phase (viscosity and superficial tension), the dispersed phase (diameter of the bubbles) and the drag models. Results of axial velocity of the continuous phase ( $U_{ym}$ ) and holdup of the dispersed phase ( $\varepsilon_{dm}$ ), were obtained and compared with available experimental data in the literature.

It was verified that the larger the inlet gas velocity, the larger is the gradient in the axial velocity and holdup profiles. The effect of the bubble diameter accurs in a different way, according to the characteristics of the continuous phase. Among the drags models tested, the Grace and Ishii-Zuber models were the ones that presented better agreement with the experimental data. The effects of the continuous phase were evaluated for two bubbles diameters: (d<sub>b</sub>) 4,13 and 6,75 mm. For the case with smaller diameter, it was observed that the  $\varepsilon_{dm}$  values for the more viscous system were superior to the less viscous system, while for the case with d<sub>b</sub> =6,75 mm the opposite was observed, in other words, the  $\varepsilon_{dm}$  values were larger for the less viscous system. It was observed a good agreement with the experimental data for inlet gas velocities of 2 cm s<sup>-1</sup> and 5 cm s<sup>-1</sup> for the more viscous system and U<sub>e</sub> de 2 cm s<sup>-1</sup> for less viscous system.

## Nomenclaturas

#### Letras latinas

área interfacial entre as fases "c" e "d", [m<sup>2</sup>]  $A_{cd}$ área da seção transversal da coluna,  $[m^2]$  $A_{st}$ diferencial dos componentes cartesianos, [ ] dn constante de referência da turbulência, [ ] С coeficiente de arraste para partícula em forma de C<sub>D(cap)</sub> cap, [kg m<sup>3</sup> s<sup>-1</sup>] C<sub>D(elipse)</sub> coeficiente de arraste para partícula elipsoidal, [kg  $m^3 s^{-1}$ ] C<sub>D(esfera)</sub> coeficiente de arraste para partícula esférica,  $[kg m^3 s^{-1}]$  $C_{\epsilon_1}, C_{\epsilon_2}$  constantes, [] diâmetro das bolhas, [mm] db número de Eotvos, [ ] Ео constante de proporcionalidade do modelo Zero  $f_{\mu}$ Equation, []  $\rightarrow$ vetor gravidade,  $[m s^{-2}]$ q geração de turbulência,  $[m^2 s^{-2}]$ k comprimento da escala turbulenta, [] 1, número de Morton, [] М força de arraste,  $[N = kg m s^{-2}]$  $M_{c}$ forças interfaciais,  $[N = kg m s^{-2}]$  $M_{\alpha}$ 

somatório de todas as forças interfaciais, [N =  $M_{\alpha\beta}$ kg m s<sup>-2</sup>]  $M^{D}_{\alpha\beta}$ força de arraste (Drag force,),  $[N = kg m s^{-2}]$  $M_{\alpha\beta}^{L}$ forca lift (lift force),  $[N = kg m s^{-2}]$  $M^{LUB}_{\alpha\beta}$ força de lubrificação da parede (wall lubrification force),  $[N = kg m s^{-2}]$  $M_{\alpha\beta}^{VM}$ força de massa virtual (virtual mass force), [N =  $kg m s^{-2}$ ]  $M_{\alpha\beta}^{TD}$ forca de dispersão turbulenta (turbulence dispersion force),  $[N = kg m s^{-2}]$  $M_{S}$ força de pressão sólida (solids pressure force),  $[N = kg m s^{-2}]$ número de iterações, [ ] n número de volumes do sistema, [] Ν densidade de bolhas do modelo de Grace, [ ] р pressão modificada,  $[Pa = N m^{-2}]$ Ρ′ produção da turbulência,  $[kg m^{-1} s^{-3}]$ Pk vazão,  $[kq m^{-3}]$ Q número de Reynolds, [ ] Re Rep número de Reynolds da partícula, [] Re número de Reynolds da fase gasosa no orifício, [] número de Reynolds das bolhas, [ ] Re\_ máximo empacotamento da fase dispersa, [ ]  $r_{dm}$ S termo fonte, [??]

$S_{_{M\!lpha}}$	forças externas, $[N = kg m s^{-2}]$
$S_{\scriptscriptstyle ui}$	superfície de integração, [m²]
t	tempo, [s]
Т	temperatura, [K]
$\stackrel{\rightarrow}{U}$	vetor velocidade, $[m \ s^{-1}]$
$U_{d_0}$	velocidade superficial da fase gasosa, [m s $^{-1}$ ]
Ue	velocidade de entrada na base da coluna, [m s $^{-1}$ ]
$U_Y$	velocidade axial da fase contínua, [m s $^{-1}$ ]
$U_{ym}$	velocidade axial média da fase contínua, [m s $^{-1}$ ]
$U_t$	velocidade turbulenta, $[m s^{-1}]$
U <sub>T</sub>	velocidade terminal de ascensão de uma bolha, [m $\rm s^{-1}]$
V	volume de integração, [m <sup>-3</sup> ]
$V_D$	volume do domínio, [m <sup>-3</sup> ]

#### Letras gregas

- $\alpha$  fase contínua, []
- $\beta$  fase dispersa, [ ]
- $\delta$  matriz identidade, []
- $\in$  dissipação turbulenta, [m<sup>2</sup> s<sup>-3</sup>]
- $\epsilon_{\rm c}$  fração volumétrica da fase contínua, []
- $\epsilon_d$  fração volumétrica da fase dispersa, []
- $\epsilon_{dm}$  fração volumétrica média da fase dispersa, []
- $\mu_{c}$   $\qquad$  viscosidade da fase contínua, [kg m^{-1} s^{-1}]

$$\begin{split} \mu_{\text{eff}} & \text{viscosidade efetiva turbulenta, } [\text{kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}] \\ \mu_{\text{m}} & \text{viscosidade modificada, } [\text{kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}] \\ \mu_{\text{ref}} & \text{viscosidade de referência, } [\text{kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}] \\ \mu_t & \text{viscosidade turbulenta, } [\text{kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}] \\ \nu & \text{tensão superficial, } [\text{N m}^{-1}] \\ \rho_c & \text{densidade da fase contínua, } [\text{kg m}^{-3}] \\ \sigma_{\text{k}}, \sigma_1 & \text{constantes, } [] \\ \left(\Gamma_{\alpha\beta}^+ U_{\beta} - \Gamma_{\beta\alpha}^+ U_{\alpha}\right) & \text{indução pela transferência de massa, } [\text{kg m}^{-1}] \\ \end{split}$$

#### Sobrescrito

→ A	vetor A, [ ]
$A^{T}$	transposta da matriz A, [ ]
φ	propriedade genérica, [ ]

#### Subscrito

b	bolhas , [ ]
С	fase contínua, [ ]
d	fase dispersa, [ ]
g	fase gasosa, [ ]
1	fase liquida, [ ]
m	propriedade média, [ ]
М	Quantidade de movimento, [ ]
t	Turbulento, [ ]

#### Siglas

CARPT-CT	Computer	Automatec	l Radioactive	e Particle
Tr	acking – Co	mputed Top	ography	

- CDS Central Differencing Scheme
- CFD Computacional Fluid Dynamics
- eff propriedade efetiva
- ref valor de referência de uma propriedade
- RMS desvio mínimo quadrático (root mean square)
- TEM tempo de estabilização da média
- UDS Upwind Differencing Scheme

#### Expressões

max(a,b)	número	maior	entre	а	е	b;
min(a,b)	número	menor	entre	а	е	b;

#### Símbolos e operadores

- abla ullet operador divergente
- $\nabla($ ) operador gradiente
- ⊗ produto tensorial
- $\Gamma$  coeficiente de transporte
- $\sum$  somatório

### 1. Introdução

#### 1.1. Introdução à Coluna de Bolhas

Reatores de coluna de bolhas são largamente utilizados em processos industrias devido à sua simplicidade de construção e operação. Eles consistem basicamente em uma coluna (que normalmente possui uma seção circular), onde há a injeção de um gás em sua parte inferior, que ao subir promove o movimento da fase líquida. Os reatores de coluna de bolhas apresentam, como vantagens, o fato de não possuírem partes móveis, além de propiciar uma boa área interfacial entre as fases líquida e gasosa, caracterizando um bom transporte entre as fases (Sanyal et al, 1999), o que favorece tanto as reações químicas quanto as biológicas.

Uma característica global nos escoamentos em uma coluna é que estes são ascendentes no centro e descendentes próximo à parede. O movimento das bolhas nestes sistemas não possui um regime estacionário (ou permanente), como pode ser observado na Figura 1.1. Nesta figura, pode ser observado que a nuvem de bolhas oscila constantemente, como mostrado na literatura (Jakobsen et al, 2005; Sokolichin et al, 1999; 2003), caracterizando um al, comportamento Yang et fluidodinâmico transiente. perfis experimentais Os apresentados na literatura são médias de tempos na ordem de horas, devido às limitações dos métodos experimentais, como mostrados por Chen et al, (1998,1999) e Sanyal et al, (1999). É reconhecido que as médias temporais das propriedades medidas apresentam valores constantes após um determinado período de tempo (Krisha et al, (2001), van Baten et al, (2004, a)).



Figura 1.1 - Coluna retangular com um furo na base (Jakobsen et al, 2005).

As regiões pertinentes a uma coluna de bolhas podem ser observadas na Figura 1.2, em um esquema bidimensional e outro tridimensional, onde destacam-se as regiões de recirculação, os fluxos ascendentes e descendentes das fases, a pluma<sup>2</sup> central, os vórtices<sup>3</sup>, as bolhas de diferentes diâmetros, e a região de ascensão de bolhas rápidas (região esta observada experimentalmente). Mais detalhes da ascensão das bolhas será apresentada na Revisão Bibliográfica. A fase líquida, ao descer, arrasta consigo as bolhas pequenas que por ventura estão na região próxima à parede.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Região uniforme, com movimentação sinuosa, "tipo a fumaça de uma vela".
<sup>3</sup> Regiões de recirculação de fluidos.



Figura 1.2 - Esquema de fluxo bi e tridimensional (Jakobsen et al, 2005).

às Devido oscilações, os perfis instantâneos de velocidade e fração volumétrica das colunas de bolhas tornamse instáveis, desta maneira, é necessário o cálculo da média dos parâmetros para uma melhor avaliação. Estes por sua vez apresentam uma maior estabilidade, como mostrado na Figura 1.3. Esta metodologia também foi adotada por van Baten et velocidade al,(2004,a), para os valores de е fração volumétrica.



Figura 1.3 - Perfis instantâneos e médios de Fração Volumétrica no ponto [0; 1,32; 0]

As colunas de bolhas operam segundo dois regimes de escoamento: o regime homogêneo e o heterogêneo. O regime homogêneo é caracterizado por apresentar todas as bolhas com o mesmo diâmetro. Esta condição ocorre quando as bolhas estão com baixa velocidade e baixa fração volumétrica, como mostra o esquema de Sie et al,(1999) na Figura 1.4. Com o aumento da fração volumétrica das bolhas elas começam a coalescer (formando bolhas maiores) e posteriormente a quebrar, fazendo com que neste meio existam bolhas de diversos diâmetros, o que caracteriza o regime heterogêneo.



Figura 1.4 - Regime de bolhas homogêneo e heterogêneo.

As bolhas, por serem partículas fluidas, podem apresentar diferentes formas dentro de uma coluna (Clift, et al, 1978). As três formas básicas são: esférica, elipsoidal ou a forma de capa esférica (cap), esta, tem a forma típica de uma "água viva". A modelagem destas três formas é dependente de números adimensionais para uma coluna de bolhas, que são os números de Eotvos (*Eo*), Morton (*M*) e Reynolds da bolha ( $Re_{x}$ ), dados respectivamente por:

$$Eo = \frac{g\Delta\rho d_b^2}{\sigma} \tag{1}$$

$$M = \frac{\mu_1^4 g \Delta \rho}{\rho_1^2 \sigma^3} \tag{2}$$

$$Re_{\infty} = \frac{\rho_c U_g d_b}{\mu_c} \tag{3}$$

Onde: g é a aceleração da gravidade,  $\rho_1$  é a massa específica do líquido,  $\rho_g$  é a massa específica do gás,  $\Delta \rho$  é a diferença entre as massas específicas das fases,  $d_b$  é o diâmetro das bolhas,  $\sigma$  é a tensão superficial entre as fases  $\mu_1$  é a viscosidade do líquido,  $\mu_q$  é a viscosidade do gás.

A relação entre esses números adimensionais e a forma das bolhas é apresentado na Figura 1.5.

Este trabalho tem como objetivos contribuir com o entendimento dos fenômenos envolvidos em colunas de bolhas, verificando a influência de alguns parâmetros na fluidodinâmica deste tipo de escoamento, como: vazão de entrada do gás, tamanho das bolhas, influência da fase contínua, análise da influência de três modelos de arraste nos perfis médios de fração volumétrica do gás e de velocidade axial do líquido, além de corroborar os modelos com dados experimentais da literatura.



Figura 1.5 - Forma das bolhas em função dos números adimensionais.

Para alcançar estes objetivos utilizou-se o software comercial CFX 5.7<sup>®</sup> da ANSYS<sup>®</sup>, que utiliza a técnica dos volumes finitos, sendo utilizada a abordagem Euleriana-Euleriana, e modelos de interpolação de alta ordem.

#### 1.2. Síntese dos capítulos

Para uma melhor seqüência do conteúdo, esta dissertação está dividida em 6 capítulos:

Capítulo 1. Introdução

Uma introdução sobre as colunas de bolhas, descrevendo os principais aspectos fenomenológicos.

Neste capítulo é apresentado uma revisão dos principais artigos na área de coluna de bolhas, com seus aspectos mais importantes, que foram utilizados como fundamento para o desenvolvimento deste trabalho.

#### Capítulo 3. Fundamentação Teórica

É mostrado neste capítulo, os modelos utilizados nas simulações numéricas, assim como também da técnica de volumes finitos, utilizada pelo código.

#### Capítulo 4. Metodologia

Os procedimentos utilizados neste trabalho estão explanados neste capítulo, como a descrição do caso estudado, a metodologia para a escolha das malhas, as condições de contorno e os parâmetros das simulações.

#### Capítulo 5. Resultados e Discussões

Neste capítulo são discutidos os resultados, procurando fazer uma ligação entre cada parâmetro estudado com os resultados obtidos.

#### Capítulo 6. Conclusões e Sugestões.

As principais conclusões obtidas neste trabalho, além de sugestões para a realização de trabalhos futuros são apresentados neste capítulo.

### 2. Revisão Bibliográfica

Neste capítulo estão apresentados os trabalhos publicados na literatura referentes a estudos de simulação numérica utilizando CFD para aplicações em coluna de bolhas. Ainda, são discutidos alguns trabalhos experimentais que foram de grande utilidade.

A predição dos fenômenos físicos e químicos no interior de um reator de coluna de bolhas se encontra no "estado da arte" devido, principalmente, à sua fluidodinâmica. Dentre elas estão os fenômenos de turbulência e a presença de escoamento multifásico, onde coexistem os reagentes (gás), o produto (líquido) e o catalisador (sólido), que geralmente se encontra uniformemente distribuído ao longo do reator. Devido à complexidade do escoamento no interior desses reatores, o controle adequado depende do conhecimento detalhado do comportamento hidrodinâmico das bolhas (Joshi et al, 2001).

As aplicações deste tipo de reator são encontradas em diversos processos, como: síntese de Fischer-Tropsch, processos de química fina, reações de oxidação, reações de alquilação, tratamento de efluentes, reações de fermentação e produção de proteínas (Sanyal et al, 1999). São utilizados também em hidrogenação, halogenação, hidrohalogenação, hidroformilação, entre outras (Joshi et al, 2001).

Os estudos de simulação numérica geralmente utilizam para a modelagem das fases (líquida e gasosa) os modelos Euleriano-Euleriano (modelagem da população de bolhas) e

Euleriano-Lagrangeano (modelagem de todas bolhas as individualmente). Os problemas para esse tipo de reatores estão sendo estudados em três frentes, sendo: 1ª formulações de interfaces (força de arraste (que será estudado neste trabalho), força lift, força de aceleração mássica (Sokolichin et al, 2004)); 2ª - fechamento dos problemas de viscosidade turbulenta (modelos de turbulência); 3<sup>ª</sup> - modelagem de correlações levantadas com os procedimentos das médias de Reynolds (Joshi et al, 2001) e pressão (Sokolichin et al, 2004). Para o escoamento onde a fase dispersa contém fração volumétrica alta, a formulação Lagrangeana é impraticável. Costuma-se, então, usar а abordagem Euleriana-Euleriana, que considera a fase dispersa como um contínuo interpenetrante, que utiliza a decomposição Reynolds fazendo uma média temporal nas equações de governantes e considerando que não há flutuação na densidade em ambas as fases, o que transforma a fase dispersa em uma fase contínua (Meier, 1998).

Alguns dados experimentais publicados na literatura apresentam informações sobre o comportamento dos fluidos em uma coluna de bolhas. Geralmente é observado que as características do perfil de velocidade média do escoamento é independente da velocidade de entrada do gás. Este perfil é caracterizado por apresentar velocidades axiais do líquido positivo (ascendente) no centro da coluna e negativa (descendente) próxima à parede. Por outro lado os perfis de fração volumétrica médios são sensíveis à velocidade de entrada do gás, sendo que quanto maior sua velocidade, maior a diferença de fração volumétrica entre a parede e o centro do reator (Chen et al, 1999). Esta tendência também foi confirmada qualitativamente através de simulações feitas por

diversos pesquisadores, como, Sanyal et al, (1999) e van Baten et al, (2004, a) que também salientaram a importância de simulações tridimensionais para o estudo dos efeitos fluidodinâmicos em uma coluna de bolhas, pois o movimento dos fluidos é essencialmente tridimensional. Em outro trabalho experimental, observou-se uma particularidade: há uma região no centro da coluna, onde a velocidade máxima da fase líquida não está no centro da coluna, mas em uma posição próxima ao centro, como mostrado por Chen et al, (1998) para o sistema Água-Ar e Óleo-Ar com velocidade de entrada do gás de 2 e 5 cm s<sup>-1</sup>, sendo este efeito também observado no trabalho de Sanyal et al, (1999), tal como observado na Figura 1.2 para a região de fluxo de bolhas rápidas.

al, (1998) fizeram estudos experimentais Chen et utilizando uma coluna de bolhas cilíndrica, para a obtenção dos dados de fração volumétrica, velocidade radial e axial dos fluidos utilizando a técnica CARPT-CT (Computer Automated Radioactive Particle Tracking - Computed Topography), que consiste em utilizar partículas radioativas como traçadores. As leituras foram feitas ao longo do tempo, onde foram obtidos valores médios das propriedades, feitas em diferentes alturas ao longo da coluna. O líquido utilizado foi água e óleo viscoso (Drakeol<sup>®</sup> 10, viscosidade de 30 cP), e para a fase dispersa o ar. No ano seguinte, Chen et al, (1999) publicaram um trabalho muito similar a este, porém com a presença de tubos internos, os quais representariam a presença de tubos para a troca de calor em um reator real. Com esta configuração geométrica não existe na literatura nenhum trabalho computacional. Neste mesmo ano, e utilizando a mesma técnica para medidas experimentais, Sanyal et al, (1999) realizaram experimentos em coluna sem tubos, tal como

Chen et al, (1998). Essas leituras foram feitas durante duas horas com aproximadamente dois milhões de pontos em toda a coluna a cada instante, com duas velocidades (12 cm s $^{-1}$  e 2 cm  $s^{-1}$ ) de entrada do gás para o sistema Água-Ar. Para a parte numérica Sanyal et al, (1999) utilizaram o software FLUENT® com a abordagem Euleriana-Euleriana, ambos os fluidos como incompressíveis, diâmetro das bolhas fixo em 5 mm, modelo de turbulência  $k-\epsilon$  padrão para a fase líquida e o coeficiente de arraste foi o de esferas rígidas. Os resultados foram apresentados na altura de 53 cm da base da coluna, onde já havia um perfil desenvolvido do escoamento. Como resultado obtiveram perfis de velocidade axial do líquido, condizendo qualitativamente com o experimental, pois foram obtidas velocidades positivas no centro e negativa próxima à parede. Os casos simulados apresentaram valores no perfil médio de velocidade axial acima do valor experimental no centro da coluna e com boa concordância na região próxima à parede. Foi observado que a discrepância entre os valores experimentais e simulados são menores para os sistemas com velocidade mais alta (12 cm  $s^{-1}$ ), aproximadamente 13 %. Enquanto que para o sistema com velocidade mais baixa (2 cm s<sup>-1</sup>) esta relação ficou em aproximadamente 44 %. Chen et al, (1998 e 1999), verificaram experimentalmente a influência da viscosidade do líquido е da tensão superficial líquido-gás utilizando líquidos diferentes em suas colunas. Este efeito também foi observado por Maretto et al, (1999) que utilizaram diferentes de catalisador. Nestes trabalhos pode-se concentrações verificar que o aumento da viscosidade do meio e a diminuição da tensão superficial líquido-qás diminui a fração do gás na coluna. A diminuição da fração volumétrica é atribuída ao favorecimento da coalescência das bolhas pequenas, o que diminui a fração de gás na coluna (Maretto et al, 1999), sendo este efeito atribuído ao aumento do empuxo das bolhas

maiores, e conseqüentemente, a subida mais rápida dessas bolhas. Uma outra conseqüência é que quando a viscosidade é baixa (próxima ou inferior à da água) há a formação de um ponto de inflexão no perfil de fração volumétrica global em função da velocidade superficial de entrada do gás, que representa o momento em que as bolhas começam a coalescer. O mesmo não acontece no caso em que a viscosidade é maior e a tensão superficial menor, o que pode ser observado nos trabalhos de Swart et al, (1995), Chen et al, (1998), Krishna, 2001 e van Baten et al, (2003).

No trabalho numérico publicado por van Baten et al, (2003) foi utilizado um modelo de coeficiente de arraste para o regime heterogêneo, que corresponde a uma situação onde há coalescência, e com isso, a existência de uma população de tamanho de bolhas<sup>4</sup>. Neste modelo, o diâmetro da bolha não foi diretamente computado neste coeficiente, pois este modelo considera uma velocidade média de ascensão da população de bolhas a baixas velocidades superficiais da fase gasosa( $U_{d_a}$ ), sendo esta velocidade obtida experimentalmente para cada condição. Com este modelo, os autores chegaram a bons resultados analisando a fração volumétrica global do sistema. Eles ressaltaram que o sistema analisado é válido apenas para os casos onde o aumento na velocidade de ascensão do gás não acarreta um aumento no tamanho médio das bolhas (na verdade há coalescência e quebra das bolhas, mas é assumido que isso se dá próximo à saída do gás). Os resultados apresentados mostram uma grande influência da parede sobre o escoamento da fase líquida, sendo observado que em coluna com diâmetro de 5,1 cm, a diferença obtida para os valores de velocidade do

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Bolhas de diferentes diâmetros.
#### Capítulo 2 - Revisão Bibliográfica

gás em relação à do líquido foi 100 %, enquanto que na coluna com diâmetro de 1 m esta relação foi de apenas 30 %.

Sokolichin et al, (1999) realizaram experimentos com uma coluna retangular e simularam em malhas bidimensional e tridimensional. Eles mostraram as oscilações de um sistema tridimensional medido experimentalmente. Simulando este mesmo caso com geometria 2D e com modelo de turbulência  $k-\epsilon$ , a estabilização do perfil de velocidade de recirculação do líquido foi em aproximadamente 23 s. No trabalho publicado por van Baten et al, (2004, b) também foi utilizado o modelo  $k-\epsilon$  e foi obtido essas oscilações similares nos perfis de velocidade e fração volumétrica.

A influência da concentração de inertes<sup>5</sup> na corrente de entrada do gás sobre a velocidade do gás, a conversão global, e a fração volumétrica global em um reator, para uma reação genérica foram analisados numericamente por van Baten et al, (2004, a). Os autores verificaram que com o aumento da concentração de inertes há um aumento nos valores da velocidade, fração de gás e conversão.

Yang et al, (2003) utilizaram em seus estudos numéricos bidimensionais um modelo de coeficiente de arraste para fluxos heterogêneos (mais de um tamanho de bolha). Os autores simularam as estruturas dos fluxos heterogêneos, e os comportamentos dos clusters (aglomerados) foram capturados, mostrando o curso do movimento das bolhas, obtendo uma boa concordância com os dados experimentais em uma coluna com 9 cm de diâmetro.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Componentes que não reagem.

Zhang et al, (2001) obtiveram em seu trabalho perfis de fluxo de massa para simulação bi e tridimensionais, utilizando um sistema hexaédrico (duto de seção quadrada). Esses perfis apresentaram-se com valores muito semelhantes até 6 s, depois começaram a divergir, e aos 30 s, embora apresentassem comportamento semelhante, a diferença entre os valores destes perfis foi de aproximadamente 60 %.

Sokolichin et al, (2004) em artigo de revisão afirmaram que para simulações, uma força deve ser considerada como uma força pertinente pelo modelo matemático, somente se ela satisfazer duas condições: a existência desta força é verificada experimentalmente, e a consideração desta força no matemático influência modelo tem uma importante nos resultados de simulação. Somente duas forças atendem estes requisitos, que são a pressão (que faz a bolha subir) e a força de arraste (que não deixa com que a bolha acelere indefinidamente). Forças como: força lift, e força de aceleração mássica podem ser desprezadas (ver Apêndice). A principal questão de interesse é a própria modelagem da turbulência (será mostrado na página 16) devido à sua influência sobre a viscosidade e a dispersão da mistura. Uma modelagem 3D é necessária para a real captura dos efeitos de instabilidade da velocidade e a flutuação dos vórtices.

Jakobsen et al, (2005), afirmaram que, para a modelagem população de bolhas de diferentes diâmetros, de uma 0 entendimento dos fenômenos de quebra e coalescência das bolhas, e a modelagem deste equilíbrio ainda não são suficientemente entendidos. Os fechamentos dos modelos de coalescência também estão limitados devido à falta de entendimento dos critérios formulação precisos de da coalescência.

# 3. Fundamentação Teórica

Neste capítulo serão apresentados os modelos utilizados simulações desta dissertação: as equações da para as continuidade e da quantidade de movimento, as equações de fechamento para a continuidade e para a transferência de entre as quantidade de movimento fases, modelo de turbulência, esquema de interpolação e acoplamento pressão velocidade.

# 3.1. Modelagem matemática

# 3.1.1. Equações de conservação

As equações instantâneas de conservação da continuidade e de quantidade de movimento são dadas por:

Continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \rho \stackrel{\rightarrow}{U} \right) = 0 \tag{4}$$

Quantidade de movimento:

$$\frac{\partial \rho \vec{U}}{\partial t} + \nabla \bullet \left( \rho \vec{U} \vec{U} \right) = \nabla \bullet \left( - p\delta + \mu \left( \nabla \vec{U} + \nabla \vec{U}^{T} \right) \right) + S_{M} \quad (5)$$

Onde  $\delta$  é a matriz identidade,  $\nabla \stackrel{\rightarrow^T}{U}$  é a transposta do tensor gradiente de velocidade.

Uma das fontes de geração de quantidade de movimento é a força gerada pela diferença de massa específica na ação da gravidade (peso ou empuxo), que é dada por:

$$S_{M,Buoy} = (\rho - \rho_{ref})\vec{g}$$
 (6)

Neste trabalho, por ser considerado apenas sistemas isotérmicos, os fenômenos de transferência de energia não foram considerados.

#### 3.1.2. Turbulência

Turbulência são flutuações na velocidade do escoamento que ocorrem no espaço e no tempo, sendo tridimensionais e em várias escalas, por isso são muito complexas de ser entendidas e modeladas. Este fenômeno ocorre quando as forças viscosas de um fluido são pequenas quando comparadas com as forças de inércia, sendo caracterizado por um Número de Reynolds muito alto.

Para todos os escoamentos (inclusive onde há turbulência), a equação de Navier-Stokes descreve bem os escoamentos sem a necessidade de informações adicionais. Porém, quando há a discretização dessas equações em grandes volumes de controle, há a necessidade de adicionarmos a estas

#### Capítulo 3 - Fundamentação Teórica

equações, os modelos de turbulência. As equações de Navier-Stokes também podem ser utilizadas para simulação com escoamento turbulento, onde é chamado de Simulação Numérica Direta (*Direct Numerical Simulation (DNS)*), desde que a malha numérica seja muito refinada, o que gera um esforço computacional muito grande. Atualmente, o que é feito, é a utilização de modelos estatísticos para a modelagem da turbulência, sendo que para escoamentos de coluna de bolhas a literatura recomenda a utilização do modelo  $k-\epsilon$ , o que pode ser observado nos trabalhos de vários autores como Sanyal et al, (2001), Sokolichin et al, (1999), Krisha et al, (2001), van Baten et al, (2003) Sokolichin et al, (2004), entre outros. Estes trabalhos têm abordado esta questão e utilizado o modelo de turbulência apenas para a fase líquida.

# 3.1.2.1. Modelo "Zero Equation"

Os modelos de turbulência simples calculam valores globais de viscosidade turbulenta  $(\mu_t)$  utilizando a velocidade média e as dimensões da geometria, através de uma fórmula empírica. Desta forma, não é adicionado nenhum termo na equação de transporte, por isso é chamado de Zero Equação (Zero Equation).

A viscosidade turbulenta para o caso de turbulência simples é dada pela equação algébrica:

$$\mu_t = \rho f_{\mu} U_t l_t \tag{7}$$

7

Onde:  $f_{\mu}$  é a constante de proporcionalidade;  $U_t$  é a velocidade turbulenta; e  $l_t$  é o comprimento da escala turbulenta, relacionado através da equação:

$$l_{t} = \frac{\left(V_{D}\right)^{\frac{1}{3}}}{7}$$
 (8)

Com  $V_D$  sendo o volume de todo o domínio de cálculo

3.1.2.2. Modelo 
$$k \in$$

O modelo de turbulência  $k-\epsilon$  é baseado na geração k e na dissipação  $\epsilon$  da turbulência, o qual insere duas novas variáveis na equação da continuidade, transformando a equação de movimento (5) para:

$$\frac{\partial \rho \vec{U}}{\partial t} + \nabla \bullet \left( \rho \vec{U} \vec{U} \right) - \nabla \bullet \left( \mu_{eff} \nabla \vec{U} \right) = \nabla P' + \nabla \bullet \left( \mu_{eff} \nabla \vec{U} \right)^{T} + B, \quad (9)$$

onde B é a soma das forças de campo,  $\mu_{eff}$  é a viscosidade efetiva turbulenta e P' é a pressão modificada, que é calculada pela equação a seguir.

$$P' = P + \frac{2}{3} \rho k \quad . \tag{10}$$

O modelo de  $k-\epsilon$  está baseado na geração e dissipação dos turbilhões, que afetam a viscosidade como é mostrado na equação a seguir:

$$\boldsymbol{\mu}_{eff} = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\mu}_{t}, \qquad (11)$$

onde a viscosidade turbulenta  $(\mu_t)$  é dada pela equação a seguir, com  $C_{\mu}$  como constante de referência da turbulência igual a 0,09.

$$\mu_t = C_{\mu} \rho \, \frac{k^2}{\epsilon} \tag{12}$$

Os valores de k e de  $\in$  vêm diretamente das equações diferenciais de energia cinética de transporte turbulento e fluxo de dissipação de turbulência:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \overrightarrow{U} k\right) = \nabla \cdot \left[\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right] + P_k - \rho \in (13)$$
e
$$\frac{\partial(\rho \in)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \overrightarrow{U} \epsilon\right) = \nabla \cdot \left[\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}\right] + \frac{3}{k} (C_{\epsilon l} P_k - C_{\epsilon 2} \rho \epsilon), (14)$$

onde  $C_{\varepsilon_1}, C_{\varepsilon_2}, \sigma_k$  e  $\sigma_1$  são constantes,  $P_k$  é a produção de turbulência devido à flutuação das forças viscosas, sendo modelado por

$$P_{k} = \mu_{t} \nabla \vec{U} \bullet \left( \nabla \vec{U} + \nabla \vec{U}^{T} \right) - \frac{2}{3} \nabla \bullet \vec{U} \left( 3\mu_{t} \nabla \bullet \vec{U} + \rho k \right) + P_{kb} \quad (15)$$

Para escoamentos incompressíveis,  $\nabla \bullet \vec{U}$  é muito pequeno e o segundo termo do lado direito da equação (15) não contribui significativamente com o produto. Para escoamentos compressíveis,  $\nabla \bullet \vec{U}$  é grande somente em regiões com alto gradiente de velocidade, como em zonas de choques. O termo  $3\mu_{\epsilon}$  é baseado na suposição "frozen stress", isto previne que o valor de k e  $\epsilon$  fiquem muito grandes em zonas de choques.

#### 3.1.3. Escoamento Multifásico

Existem duas abordagens para os modelos de transporte multifásico: a Euleriana e a Lagrangeana. Na abordagem Euleriana o campo de escoamento é obtido considerando os fluidos envolvidos como contínuos, enquanto que na abordagem Lagrangeana, o campo de escoamentos é obtido pelo cálculo de elementos de fluido individuais. Para escoamento em coluna de bolhas (sistema bifásico), pode-se calcular o campo de escoamento considerando cada bolha individualmente, em um meio líquido (fase contínua). Esta é chamada de abordagem Euleriana-Lagrangeana. Normalmente, esta abordagem é recomendada quando há poucas bolhas e quando a fase dispersa apresenta diferentes propriedades como tamanho, composição química, entre outros. Quando são consideradas as duas fases contínuas, mesmo que uma delas seja dispersa, esta é chamada de abordagem Euleriana-Euleriana. Nesta abordagem, não é considerada cada bolha individualmente, mas uma média de todas as bolhas contidas em um volume da malha numérica como um fluido interpenetrante com a fase contínua. Portanto, neste caso não há um aumento do esforço computacional com o aumento do número de bolhas. Desta forma, esta abordagem é utilizada em sistemas onde há altas frações volumétricas de bolhas como os casos estudados neste trabalho.

Na modelagem Euleriana-Euleriana, a força de arraste<sup>6</sup> pode ser considerada de duas formas. A força de arraste pode ser total (chamada de força de arraste infinita por alguns autores, como Noriler, 2003), onde neste caso as duas fases

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Força com que o gás arrasta o líquido em seu movimento de ascensão, será explanado no item 3.1.4.

#### Capítulo 3 - Fundamentação Teórica

compartilham o mesmo campo de velocidade, e é chamada de modelagem homogênea. No caso da força de arraste não ser total (valor finito), cada fase possui um campo de velocidade distinto, assim, o campo de velocidade é obtido através da solução das equações da continuidade e quantidade de movimento para cada fase. Esta dissertação foi desenvolvida utilizando o modelo Euleriano-Euleriano com modelagem heterogênea para o campo de velocidade.

Para a modelagem multifásica Euleriana-Euleriana heterogênea tem-se as equações de conservação para casa fase considerada.

Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \varepsilon_{\alpha} \rho_{\alpha} \right) + \nabla \bullet \left( \varepsilon_{\alpha} \rho_{\alpha} \vec{U}_{\alpha} \right) = S_{MS\alpha} + \sum_{\beta=1}^{N_{p}} \Gamma_{\alpha\beta}$$
 (16)

Quantidade de movimento:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \varepsilon_{\alpha} \rho_{\alpha} \vec{U}_{\alpha} \right) + \nabla \cdot \left( \varepsilon_{\alpha} \left( \rho_{\alpha} \vec{U}_{\alpha} \vec{U}_{\alpha} \right) \right) = \varepsilon_{\alpha} \nabla \rho_{\alpha} + \left( \varepsilon_{\alpha} \mu_{\alpha} \left( \nabla \vec{U}_{\alpha} + \left( \nabla \vec{U}_{\alpha} \right)^{T} \right) \right) + \sum_{\beta=1}^{N_{p}} \left( \Gamma_{\alpha\beta}^{+} \vec{U}_{\beta} - \Gamma_{\beta\alpha}^{+} \vec{U}_{\alpha} \right) + S_{M\alpha} + M_{\alpha}$$

$$(17)$$

Onde,  $S_{M\alpha}$  são as forças externas,  $\left(\Gamma_{\alpha\beta}^{+}U_{\beta} - \Gamma_{\beta\alpha}^{+}U_{\alpha}\right)$  a indução pela transferência de massa,  $M_{\alpha}$  são as forças interfaciais, que é dado por:  $M_{\alpha} = \sum_{\substack{\beta \neq \alpha}} M_{\alpha\beta}$ , o qual considera todas as forças interfaciais e é dado por:

$$M_{\alpha\beta} = M_{\alpha\beta}^{D} + M_{\alpha\beta}^{L} + M_{\alpha\beta}^{LUB} + M_{\alpha\beta}^{VM} + M_{\alpha\beta}^{TD} + M_{S} + \dots \qquad (18)$$

Aonde,  $M_{\alpha\beta}^{D}$  é a força de arraste (Drag force,),  $M_{\alpha\beta}^{L}$  é a força lift (lift force),  $M_{\alpha\beta}^{LUB}$  é a força de lubrificação da parede (wall lubrification force),  $M_{\alpha\beta}^{VM}$  é a força de massa virtual (virtual mass force),  $M_{\alpha\beta}^{TD}$  é a força de dispersão turbulenta (turbulence dispersion force) e  $M_{s}$  é a força de pressão do sólido (solids pressure force),que é usada somente se a fase particulada for um sólido denso.

As forças *lift*, lubrificação, massa virtual e dispersão turbulenta, não foram consideradas neste trabalho. Seguindo a recomendação de Sokolichin et al, (2004), em seu recente artigo de revisão, foi considerado apenas o efeito da força de arraste  $M^{D}_{\alpha\beta}$ , que é reconhecido por diversos autores por ser o principal efeito de transferência de quantidade de movimento em escoamentos de coluna de bolhas.

### 3.1.4. Equações de Fechamento

As equações de fechamento são aplicadas para os dois grupos de equações distintamente (continuidade e quantidade de movimento).

Para a continuidade, a soma das frações volumétricas da fase contínua e dispersa é igual a 1.

$$\sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} = \varepsilon_{c} + \varepsilon_{d} = 1$$

Para a transferência de quantidade de movimento, o referido fechamento é dado pela transferência de quantidade

de movimento, que é dado pela força de arraste entre as fases.

No sistema de colunas de bolhas, a quantidade de movimento existente no sistema é fornecida pela ascensão da fase dispersa (d, gasosa), que ao subir, devido à força de empuxo, fornece energia (quantidade de movimento) para a fase contínua (c, líquida).

A força de arraste é a força que a fase dispersa age sobre a fase contínua e é dada por:

$$M_{c} = \frac{C_{D}}{8} A_{cd} \rho_{c} \left( \overrightarrow{U}_{c} - \overrightarrow{U}_{d} \right) \left| \overrightarrow{U}_{d} - \overrightarrow{U}_{c} \right|$$
(19)

Onde,  $A_{\alpha\beta}$  é a área de transferência interfacial dado pelo modelo de partícula como sendo relação da área interfacial por unidade de volume, podendo esta partícula ser sólida ou fluida. Onde é considerado um diâmetro médio de partículas esféricas (d<sub>d</sub>), a área entre essas duas fases é dada por:

$$A_{cd} = \frac{6\varepsilon_d}{d_d} \tag{20}$$

A expressão para o coeficiente de arraste ( $C_D$ (Drag coefficient)) pode variar dependendo do sistema (sólidos ou fluidos e de alta ou baixa concentrações). Nos itens a seguir são dadas algumas correlações para o cálculo do coeficiente da força de arraste utilizados neste trabalho.

O modelo de Schiller-Naumann considera as partículas como esferas rígidas, portanto não é contemplada a deformação das bolhas, o que representa uma grande limitação, e é dado pela seguinte equação:

$$C_{D} = max \left( \frac{24}{Re_{p}} \left( 1 + 0,15 \ Re_{p}^{0,687} \right); \quad 0,44 \right)$$
(21)

Na equação acima  $Re_p$  é o número de Reynolds da partícula, que é adimensional e indica a razão entre os efeitos inerciais e viscosos que agem na partícula, que é expressa por:

$$Re_{p} = \frac{\rho_{c} \left| \vec{U}_{d} - \vec{U}_{c} \right| d_{d}}{\mu_{c}} , \qquad (22)$$

onde a densidade ( $\rho_{\rm c}$ ) e a viscosidade ( $\mu_{\rm c}$ ) são propriedades da fase contínua.

#### 3.1.4.2. Ishii-Zuber

O modelo de Ishii-Zuber considera o coeficiente de arraste para os formatos de partícula, esférico e distorcido, sendo que estas distorções ocorrem em partículas líquidas ou gasosas e podem ser subdivididas em duas formas: elipsoidal e *cap*. O coeficiente de arraste para partículas esféricas ( $C_{\scriptscriptstyle D(esfera)})$  é dado por:

$$C_{D(esfera)} = \frac{24}{Re_{m}} \left( 1 + 0,15 \ Re_{m}^{0,687} \right)$$
 (23)

Com o número de Reynolds, semelhante ao do modelo Schiller-Naumann, porém com a viscosidade modificada, como mostra na Equação (24).

$$Re_{m} = \frac{\rho_{c} \left| \vec{U}_{d} - \vec{U}_{c} \right|}{\mu_{m}}$$
 (24)

na qual:

$$\mu_m = \mu_c \left( 1 - \frac{\varepsilon_d}{r_{dm}} \right)^{-2.5\varepsilon_d \mu *}, \qquad (25)$$

onde  $r_{\rm dm}$  é o máximo empacotamento da fase dispersa e

$$\mu^* = \frac{\mu_{dm} + 0, 4\mu_c}{\mu_{d+}\mu_c}$$
(26)

No caso de partículas elipsoidais, o coeficiente de arraste  $C_{\rm D(elipse)}$  é dado por:

$$C_{D(elipse)} = E(\varepsilon_{d})C_{D0} \qquad (27)$$

com

$$C_{Dx} = \frac{2}{3} E o^{\frac{1}{2}}$$
 (28)

$$E(\varepsilon_{d}) = \frac{\left(1 + 17,67f(\varepsilon_{d})^{6/7}\right)}{18,67f(\varepsilon_{d})}$$
(29)

$$f(\varepsilon_{d}) = \frac{\mu_{c}}{\mu_{m}} \left(1 - \varepsilon_{d}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(30)

Para partículas com formato de *cap* o coeficiente de arraste  $(C_{D(cap)})$  é calculado de acordo com a equação abaixo:

$$C_{D(cap)} = (1 - \varepsilon_d)^2 C_{D\infty}$$
 (31)

$$C_{D\infty} = \frac{8}{3} \tag{32}$$

O valor do coeficiente de arraste final  $(C_{D})$ , é obtido através das seguintes condições:

Se 
$$C_{D(esfera)} \ge C_{D(elipse)}$$
  
 $C_{D} = C_{D(esfera)}$  (33)  
Se  $C_{D(esfera)} < C_{D(elipse)}$   
 $C_{D} = min(C_{D(elipse)}, C_{D(cap)})$ 

# 3.1.4.3. Modelo de Grace

Assim como no modelo de Ishii-Zuber, o modelo de Grace considera o efeito da forma da fase dispersa nos cálculos do coeficiente de arraste. Este modelo considera que a bolha possui tensão interfacial constante.

Para o modelo de Grace a equação para o  $C_{D(elipse)}$  é dado por:

$$C_{D(elipse)} = \frac{4}{3} \frac{gd\Delta\rho}{\underset{U_T}{\rightarrow} \rho_C}$$
 (34)

Onde  $U_{\rm T}$  é a velocidade terminal de ascensão de uma bolha e é dada por:

$$\vec{U}_T = \frac{\mu_c}{\rho_c d_b} M^{-0.149} (J - 0.857)$$
 (35)

Com o número de Morton(M) sendo:

$$M = \frac{\mu_c^4 g \Delta p}{\rho^2 \sigma^3}, \quad e \tag{36}$$

$$J = \begin{cases} 94 \ H^{0,751} & 2 < H \le 59,3 \\ 3,42 \ H^{0,441} & H > 59,3 \end{cases}, \text{ com}$$
(37)

$$H = \frac{4}{3} E_{o} M^{-0.149} \left( \frac{\mu_{o}}{\mu_{ref}} \right)^{-0.14}$$
 (38)

Usando como  $\mu_{\text{ref}}\text{=}$  0.0009 kg m $^{-1}$  s $^{-1}$  que é o valor para a água.

Para a forma *cap* o modelo de Grace utiliza um número constante.

$$C_{D(cap)} = \frac{8}{3} \tag{39}$$

O valor do  $C_{\scriptscriptstyle D(esfera)}$  para o modelo de Grace é dado para duas faixas de número de Reynolds.

$$\begin{cases} Se & Re << 1 & C_{D(esfera)} = \frac{24}{Re} \\ Se & 1000 < Re < 1 & C_{D(esfera)} = 0,44 \end{cases}$$
(40)

Para escolher qual valor entre os valores de  $C_D$  que será empregado, o sistema diluído utiliza o menor valor entre o  $C_D$ da elipse, e o do *Cap* o maior entre este e o da esfera. Como mostrado nas equações a seguir:

$$C_{D(dist)} = \min(C_{D(elipse)}, C_{D(cap)})$$
 (41)

 $C_{D(diluido)} = \max(C_{D(esfera)}, C_{D(dist)})$  (42)

Para sistema denso (com muitas bolhas) o modelo é uma função de correção para o coeficiente de arraste de Grace para sistema diluído (com poucas bolhas), onde o valor do coeficiente depende da forma da bolha. O valor do coeficiente de arraste é dado por:

$$C_{D} = \varepsilon_{c}^{p} C_{D(diluido)} \quad , \qquad (43)$$

onde "p" é um coeficiente que considera os efeitos da densidade de bolhas. Recomendam-se, para sistemas com bolhas pequenas, números que variam de 0 a -1, e para bolhas de grande diâmetro, valores positivos podendo chegar até 4, em alguns casos.

# 3.2. Volumes finitos

O uso de técnicas numéricas para a solução de problemas complexos da engenharia e da física é hoje uma realidade, graças ao vertiginoso desenvolvimento de computadores de alta velocidade e de grande capacidade de armazenamento. Em função disponibilidade computacional, dessa que cresce exponencialmente, o desenvolvimento de algoritmos para a solução dos mais diversos problemas vem recebendo enorme atenção dos analistas numéricos e engenheiros, fazendo aumentar, também em taxas acentuadas, o número de pesquisadores e usuários da simulação numérica. Além disso, a versatilidade e generalidade dos métodos numéricos para a engenharia, simulação de problemas de е а relativa simplicidade de aplicação dessas técnicas, são outros fatores motivadores para seu uso (Maliska, 2004).

Todo método que, para obter as equações aproximadas, de equações de conservação de uma dada propriedade física que satisfaça a conservação desta propriedade em nível de volumes elementares é um método de volumes finitos. Existem duas maneiras de se obter as equações aproximadas no método dos volumes finitos. A primeira é a realização de balanços da propriedade em questão nos volumes elementares, ou volumes finitos, e a segunda é integrar sobre o volume elementar, no espaço e no tempo, as equações na forma conservativa. Forma conservativa, ou forma divergente, é aquela em que na equação diferencial os fluxos estão dentro do sinal da derivada e, na primeira integração, aparecem os fluxos nas fronteiras do volume elementar, equivalente, portanto, ao balanço(Maliska, 2004).

#### 3.2.1. Discretização Numérica

Soluções analíticas das equações de conservação, como a equação de Navier-Stokes, são possíveis de serem obtidas somente em condições ideais de fluxos. Para se obter equações para fluxos reais, a aproximação numérica deve ser adotada, substituindo as expressões por equações algébricas, que são resolvidas por um método numérico.

## 3.2.2. Discretização das equações governamentes

Esta aproximação envolve a discretização<sup>7</sup> do domínio <sup>8</sup> em pequenos volumes finitos de controle, que juntos formam uma malha numérica. As equações governantes são integradas sobre cada volume de controle para que as propriedades (massa, energia e quantidade de movimento) sejam conservadas na soma de todos os volumes. Na Figura 3.1 é mostrado um volume numérico, o qual faz parte de um todo, onde a soma de todos os volumes formam o domínio.

A equação da continuidade pode ser expressa em notação indicial como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left( \rho U_{j} \right) = 0 \qquad (44)$$

A equação da conservação da quantidade de movimento é expressa em notação indicial como:

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup> Divisão

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup> O todo, parte inteira

Celso Murilo dos Santos

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho U_{i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left( \rho U_{j} U_{i} \right) = \frac{\partial P}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left( \mu_{eff} \left( \frac{\partial U_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial U_{j}}{\partial x_{i}} \right) \right)$$
(45)



Figura 3.1 - Volume numérico

Ao integrar estas equações sobre o volume de controle, e aplicando o teorema da divergência de Gauss para converter alguns volumes em superfícies integrais. Para volumes de controle que não deformam no tempo as derivadas no tempo podem ser tiradas das integrais de volume, e obtêm-se as seguintes equações:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V} \rho dV + \int_{s} \rho U_{j} dn_{j} = 0 \qquad (46)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V} \rho U_{i} dv + \int_{S} \rho U_{J} U_{i} dn_{j} = \int_{S} P dn_{j} + \int_{S} \mu_{eff} \left( \frac{\partial U_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial U_{j}}{\partial x_{i}} \right) dn_{j} + \int_{V} S_{U_{i}} dV$$

$$(47)$$

Onde V e  $S_{U_i}$  são respectivamente o volume e a superfície de integração e  $dn_j$  é o diferencial dos componentes cartesianos do vetor normal saindo da superfície. As integrais de superfície são as integrações dos fluxos, considerando que as integrais de volume representam os termos de fonte ou de acúmulo.

# 3.2.3. Função de interpolação

As funções de interpolação têm grande importância na resolução dos sistemas de equações, pois é ela que faz a conectividade das propriedades entre os volumes.

Para problemas puramente difusivos, o esquema de interpolação por diferenças centrais é aplicado com boa reprodutibilidade dos fenômenos físicos. Para casos onde há convecção, há a necessidade da utilização de esquemas de interpolação mais elaborados.

Para o entendimento do modelo de interpolação, considera-se um sistema dado pela propriedade genérica  $\phi$  e tendo  $\Gamma$  como sendo o coeficiente de transporte desta propriedade, em estado estacionário dado por:

$$\frac{\partial}{\partial} \left( \rho \, \vec{U} \, \phi \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma^{\phi} \, \frac{\partial}{\partial x} \right) \tag{48}$$

Considerando este sistema como sendo um sistema de transferência de calor onde:  $\phi$  é a temperatura,  $\Gamma^{\phi} = \rho \alpha$ ,  $\rho$  é a massa específica e  $\alpha$  é a difusividade térmica. A integração sobre o volume é dada por:

$$\rho \vec{U} \phi |_{e} - \rho \vec{U} \phi |_{w} = \Gamma^{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} |_{e} - \Gamma^{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} |_{w}$$
(49)

Onde os índices subscritos são os valores nas fronteiras do volume de controle onde devem ser avaliados os fluxos convectivos e difusivos. Os valores das propriedades são armazenadas nos pontos centrais de cada volume, o "centróide" (ponto *P*) na Figura 3.1, para se obter os valores nas fronteiras como é requerido na Equação (49).

Para isso existem funções de interpolações, sendo a mais simples o esquema por diferenças centrais ((CDS) *Central Differencing Scheme*). Para este caso, considerando uma malha numérica uniforme a equação nas fronteiras ficaria:

$$\rho \stackrel{\rightarrow}{U} \frac{\phi|_{E} + \phi|_{P}}{2} - \rho \stackrel{\rightarrow}{U} \frac{\phi|_{P} + \phi|_{W}}{2} = \Gamma^{\phi} \frac{\phi|_{E} + \phi|_{P}}{\nabla x} - \Gamma^{\phi} \frac{\phi|_{P} + \phi|_{W}}{\nabla x} \quad (50)$$

Pode-se rearranjar esta equação para se obter os valores no ponto, sendo dada por:

$$A_{_{P}}\phi_{_{P}} = A_{_{e}}\phi_{_{E}} + A_{_{W}}\phi_{_{W}}$$
, com:

$$A_{p} = \frac{2\Gamma^{\phi}}{\Delta x^{2}}$$

$$A_{e} = -\frac{\rho \vec{U}}{2\Delta x} + \frac{\Gamma^{\phi}}{\Delta x^{2}}$$

$$A_{w} = \frac{\rho \vec{U}}{2\Delta x} + \frac{\Gamma^{\phi}}{\Delta x^{2}}$$
(51)

Para que o valor de  $A_e$  seja positivo, considerando a velocidade positiva, tem-se que:

$$\frac{\rho \ U \Delta x}{\Gamma^{\phi}} \leq 2,$$

Onde o valor à esquerda é conhecido como número de Reynolds da célula. Para manter esta inequação sempre verdadeira à medida que a velocidade aumenta o valor de  $\Delta x$ deve diminuir, obtendo-se assim uma malha cada vez mais refinada. Se esta inequação não for mantida, o valor de  $A_e$ ficará negativo, e com isso poderá trazer problemas nas iterações do método iterativo para soluções do método linear além de gerar oscilações numéricas em regiões de grandes gradientes.

Para não haver estes tipos de problema é possível utilizar outros métodos como o *upwind (Upwind Differencing Scheme*(UDS)) que utiliza apenas os valores de um lado do sistema (Equação( 49 )). Para velocidade positiva, tem-se:

 $\phi_{W} = \phi_{W} = \phi_{P}$ 

Para velocidade negativa, tem-se:

$$\phi_w = \phi_P e \phi_e = \phi_E$$

Para uma maior precisão, é utilizado o modelo *higher upwind*, onde os valores nas fronteiras é dado em função de dois pontos e não apenas um:

$$\begin{split} \phi_w &= \frac{3}{2} \phi_W + \frac{1}{2} \phi_{WW} \\ \phi_e &= \frac{3}{2} \phi_P + \frac{1}{2} \phi_W \end{split} \tag{52}$$

Para o tempo, o esquema de interpolação é chamado de esquema de Euler, podendo ser de primeira ou de segunda ordem, que é muito similar ao esquema por diferenças centrais. O de primeira ordem é dado por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \int_{V} \rho \phi dv \right) = \rho V \left( \frac{\phi - \phi^{0}}{\Delta t} \right)$$
(53)

E o e segunda ordem por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \int_{v} \rho \phi dv \right) = \frac{\rho V}{\Delta t} \left( \frac{3}{2} \phi - 2 \phi^{\circ} + \frac{1}{2} \phi^{\circ \circ} \right)$$
(54)

Onde  $\phi^0$  e  $\phi^{00}$  são os valores imediatamente anterior, e anterior a este, para a interpolação no tempo, é considerado as propriedades no tempo  $\Delta t$  anterior e dois  $\Delta t$ respectivamente.

#### 3.2.4. Acoplamento Pressão-Velocidade

Na solução dos problemas envolvendo a pressão, esta é substituída pela pressão média e por sua variação local. O gradiente de pressão em uma dada direção, quando substituído na equação de conservação da quantidade de movimento axial, gera velocidades que satisfaçam a conservação da massa global, gerando assim um acoplamento denominado de acoplamento pressão velocidade (Maliska, 2004).

O modelo Rhie-Chow para o acoplamento pressão-velocidade utiliza uma única célula para fazer o acoplamento, e este efeito é transmitido para todo o restante do sistema. Unidimensionalmente é representado por:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_{i} + \frac{\Delta x^{3} A}{4 m} \left(\frac{\partial^{4} p}{\partial x^{4}}\right)_{i} = 0, \qquad (55)$$

onde:

$$m = \rho U_j \Delta n_j \tag{56}$$

A equação da continuidade é uma aproximação de segunda ordem por diferença central para a derivada de primeira ordem da velocidade. A derivada quarta da pressão age para redistribuir a influência da pressão. As várias derivadas melhoram a robustez e a modelagem quando a malha for refinada. A magnitude do segundo termo vai zerar o valor de  $\Delta x^3$ , relativo à derivada da velocidade, assim o valor da diferencial é recalculado rapidamente.

# 4. Metodologia

simulação numérica em Mecânica dos Α Fluidos е Transferência de Calor, conhecida como CFD (Computational Fluid Dynamics), teve um desenvolvimento impressionante nos últimos 20 anos. Inicialmente, como uma ferramenta para análise de problemas físicos em nível de investigação científica e, atualmente, como uma ferramenta poderosa para a solução de importantes problemas aplicados da engenharia (Maliska, 2004). Atualmente, existe uma grande variedade de pacotes comerciais de CFD. Usualmente, esses pacotes são em três partes: Pré-Processador, normalmente divididos Processador e Pós-Processador.

No Pré-Processador é feita a discretização da geometria em malha numérica, como pode ser observado mais adiante neste capítulo, além da descrição das propriedades dos fluidos, das condições de contorno, assim como modelos e aproximações do sistema.

O Processador é o módulo matemático, onde é realizada a solução numérica do sistema de equações. As equações para cada ponto discretizado da malha numérica e para cada tempo são resolvidas para sistemas transientes, ou apenas no espaço para o estado estacionário (regime permanente). Neste trabalho de dissertação, esta foi a parte que mais "consumiu" tempo, onde o tempo de simulação para cada caso foi de semanas. A simulação utilizando um computador Pentium IV 2533 Mhz, com 1 GB de memória Ram, e sistema operacional Windows NT, para o sistema Água-Ar com diâmetro das bolhas de 6,75 mm <u>utilizando o modelo de Grace padrão e entrada de gás de 5 e 2</u> *Celso Murilo dos Santos* 37

#### Capítulo 4 - Metodologia

cm s<sup>-1</sup>, até o tempo de 100 s levou 12 e 32 dias, respectivamente. Onde esta diferença de tempo pode ser atribuída ao número de iterações maior no caso a 2 cm s<sup>-1</sup>.

O Pós-Processamento consiste no módulo onde é feita a visualização científica dos resultados. Estes podem ser expressos em formas de mapa de superfícies, mapas de volumes, linhas de correntes, vetores entre outros, como pode ser observado no capítulo de resultados (Capítulo 5).

# 4.1. Sistema Estudado

Os resultados de simulação desta dissertação tiveram como base de comparação os dados experimentais publicados por Chen et al, (1998 e 1999), onde foram apresentados perfis das propriedades de interesse (fração volumétrica do gás e velocidade axial da fase contínua). Esses estudos foram realizados utilizando uma coluna com 44 cm de diâmetro, 2,43 m de altura e com furos para entrada de ar na parte inferior de 0,77 mm de diâmetro. O esquema deste sistema está mostrado Figura 4.1. O estudo de 1999 refere-se também à na verificação da influência da presença de tubos no interior desta coluna na hidrodinâmica do sistema, buscando aproximar o sistema a um reator com tubos de resfriamento para troca térmica. Em ambos os estudos, a fase dispersa (gás) foi o ar e a fase contínua (líquida) foi água ou óleo viscoso (Drakeol<sup>®</sup> 10, viscosidade de 30 cP), sendo a coluna inicialmente preenchida até a altura de 1,7 m. As leituras foram feitas em um longo período de tempo, obtendo-se um valor médio das propriedades nas alturas de 51 cm, 89 cm, 132 cm e 170 cm da base da coluna.

Nesta dissertação foram realizadas simulações com os sistemas utilizado por Chen et al, (1998). As propriedades desses dois fluidos e da tensão superficial entre os líquidos e o ar encontram-se na Tabela 4.1.



al. (1998).

	Água	Ar	Óleo
Massa específica (kg m <sup>-3</sup> )	997	1,185	860
Viscosidade (cP)	8.9×10 <sup>-1</sup>	1.831×10 <sup>-2</sup>	30
Tensão superficial (N m <sup>-1</sup> )	0,07	2	0,035

Os dados experimentais encontrados em Chen et al, (1998), dispõem de valores para os perfis de Fração Volumétrica do gás e Velocidade Axial do líquido em diferentes posições como é apresentado na Tabela 4.2. Por isto os dados de simulação apresentar-se-ão preferencialmente nas mesmas posições.

Sistema	Velocidade de Entrada do gás	Altura dos dados de Fração Volumétrica do gás	Altura dos dados de Velocidade axial do líquido	
	(cm s)	(m)	(m)	
Água-Ar	2	0,89	1,32	
Água-Ar	5	0,89	Não Apresenta	
Água-Ar	10	0,51; 0,89; 1,32 e 1,70	1,32	
Óleo-Ar	2	0,89	1,32	
Óleo-Ar	5	0,89	Não Apresenta	
Óleo-Ar	10	0,51; 0,89; 1,32 e 1,70	1,32	

Tabela 4.2 - Altura da coluna onde são deitas as leituras por Chen et al, (1998)

# 4.2. Casos estudados

### 4.2.1. Cálculo do diâmetro das bolhas

Nos trabalhos de Chen et al, (1998, 1999) não foi informado o diâmetro médio das bolhas nos sistemas. Na literatura há uma diversidade muito grande nas correlações que estimam o diâmetro médio de uma bolha (Perry's Chemical Engineers' handbook,1997., Treybal, 1980, entre outros). A correlação apresentada por (Treybal, 1980), é dada por:  $d_{p} = 0,0071 \, Re_{p}^{-0,05} \tag{57}$ 

Onde  $Re_0$  é o número de Reynolds da fase gasosa no orifício, o que indica que a influência do fluido da fase contínua (água ou óleo) não é considerado para o cálculo do diâmetro da bolha, o que representa uma grande simplificação. No entanto, esta foi a melhor correlação encontrada para estimar o tamanho de bolhas e consiste em um método mais adequado quando comparado aos trabalhos de simulação publicados na literatura (Sanyal et. al, 1999, entre outros).

A velocidade axial de entrada do gás na coluna  $(U_e)$  é função da vazão(Q) pela área da seção transversal da coluna $(A_{st})$ , dada por:

$$U = \frac{Q}{A_{st}} \tag{58}$$

# 4.2.2. <u>Sistema Água-Ar e Óleo-Ar</u>

Adotando a Eq.( 57 ) para estimar o tamanho de bolhas para os sistemas Água-Ar e Óleo-Ar com diferentes velocidades de entrada. Com esta correlação, foram obtidos os tamanhos de bolhas para as velocidades axiais estudadas (2, 5 e 10 cm s<sup>-1</sup>), esses tamanhos encontram-se na Tabela 4.3.

Para fazer a verificação do efeito da malha numérica sobre o escoamento, foram construídas 4 malhas numéricas sobre uma geometria reduzida na altura, que foi estipulada em 60 cm, em comparação com o tamanho da coluna de Chen et al, (1998). Como condição inicial, a altura da coluna de líquido na coluna foi de 30 cm. A malha foi construída com um maior refinamento na região próxima à parede para considerar os efeitos da camada limite. A quantidade de nós<sup>9</sup> utilizada para a discretização desta geometria nas três direções, estão mostradas na Tabela 4.4.

Velocidade axial(cm $s^{-1}$ )	Diâmetro da bolha (mm)
2	6,75
5	4,13
10	4,00

Tabela 4.3 - Diâmetro das bolhas

Tabela 4	4.4	-	Parâmetros	das	Malhas	(Quantidade	de	nós)
----------	-----	---	------------	-----	--------	-------------	----	------

Parâmetros	Malha O	Malha 1	Malha 2	Malha 3
Altura (h)	31	41	31	31
Teta (t)	6	6	10	6
Raio (r)	22	22	22	32
C(limite) (cl)	5	5	5	5

O sistema avaliado foi Água-Ar com velocidade de entrada do gás de 5 cm s<sup>-1</sup>. Os resultados obtidos nas diferentes malhas proporcionaram resultados similares. Assim, para as colunas de bolhas estudadas nesta dissertação, foi considerada uma malha com refinamento igual à malha O, que é a malha com menor número de nós. Essas malhas numéricas estão

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup> Número de pontos que é posto para discretizar uma curva (n pontos para dividir em "n-1" partes

apresentadas na Figura 4.2 (sem tubos) e Figura 4.3 (com tubos).

Na Figura 4.2, pode ser observada uma região concêntrica na base da coluna, que consiste na região da entrada de gás. Esta configuração foi adotada seguindo a metodologia descrita por van Baten et al, (2004, b), onde é recomendado que esta região possua 50 e 75% da área da base da coluna. Neste trabalho utilizou-se uma área com raio de 75 % ao da base, ou seja, uma área de 56 % da área da base.

Nas simulações foram observadas as influências do fluido da fase contínua em diferentes velocidades, além da influência do modelo de arraste sobre o sistema. Um último estudo foi realizado, para este mesmo sistema, utilizando o modelo de turbulência também para a fase gasosa, esses casos estão apresentados na Tabela 4.5.

Velocidade (cm s <sup>-1</sup> )	Líquido	Modelo de Arraste	
2	Óleo	Grace [Eq.( 42 )]	
<u>ــــــــــــــــــــــــــــــــــــ</u>	Água	Grace [Eq.( 42 )]	
	Óleo	Grace [Eq.( 42 )]	
5	Schiller-Naumann [Eq.( 21 )]		
	Água	Grace [Eq.( 42 )]	
		Grace [Eq.( 43 )]	
		Ishii-Zuber [Eq. ( 33 )]	
10	Óleo	Grace [Eq.( 42 )]	
	Água	Grace [Eq.( 42 )]	

Tabela 4.5 - Experimentos numéricos

Celso Murilo dos Santos



Figura 4.2 - Geometria e malha do sistema sem tubos.

(A) Malha - Base, (B) Malha - Axial, (C) Malha - Camada limite,
(D) Geometria - Detalhe da entrada (r=75%), (E) Malha - Detalhe da entrada (r=75%).



Figura 4.3 - Geometria e malha do sistema com tubos.

(A) Malha - Base, (B) Malha e Geometria - Axial, (C) Malha Camada limite e detalhe da base dos tubos, (D) Geometria - Detalhe dos tubos e malha da entrada, (E) Malha - Detalhe dos tubos.

# 4.3. Condições iniciais e de contorno

As Condições iniciais utilizadas foram:

- Altura inicial de líquido de 1,70m;
- Velocidade zero para ambas as fases.

As Condições de contorno utilizadas foram:

- ➢ Não deslizamento nas paredes.
- Entrada uniforme de gás, com velocidade axial calculada de acordo com a Eq. ( 58 ), em rampa de 1 cm s<sup>-1</sup> a cada segundo até atingir a velocidade desejada.
- Sistema aberto (opening), com condição de pressão atmosférica no topo da coluna para a saída do gás.

# 4.4. Parâmetros de Simulação

Os parâmetros de simulação utilizados nesta dissertação foram:

- Passo de tempo O passo de tempo utilizado foi do tipo degrau ((20 × 0,005s) + (990 × 0,001 s) + (n × 0,01 s), sendo n, o número de iterações suficiente para completar o tempo de simulação), seguindo a metodologia utilizada por Krishna et al, (2001), para evitar fluxo empistonado.
- Tempo de estabilização de 20 s após atingir a velocidade desejada. Considerando o maior valor da velocidade terminal de uma bolha para os sistemas

em estudo (0,25 cm s<sup>-1</sup>), ela levaria 8 segundos para percorrer os 2 metros de coluna de líquido. Para garantir este que este efeito seja transmitida para todo o sistema, foi considerado aproximadamente o dobro deste tempo.

- Esquema de interpolação diferente para o tempo e para o espaço:
  - Tempo Euler de primeira ordem; [Eq. ( 53)]
  - Espaço Upwind de 2ª ordem [Eq.( 52)]
- Iterações Limite máximo de 10 iterações por intervalo de tempo;
- Critério de convergência O desvio médio quadrático (root mean square, (RMS)) utilizado como critério de convergência foi de 5×10<sup>-5</sup>. O RMS é dado por:

$$RMS_{\phi} = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \frac{\left(\phi^{\circ} - \phi\right)^{2}}{N}}$$
 (59)

Onde  $\phi$  é uma propriedade extensiva no tempo t, normalmente utilizada como sendo a massa,  $\phi^0$  é o valor desta propriedade no tempo imediatamente anterior e N é o número de volumes do sistema.

# 5. Resultados e Discussões

Neste capítulo são apresentados os resultados e as discussões dos casos estudados, analisando a influência de cada parâmetro avaliado, que são: a transitoriedade das colunas de bolhas (seção 5.1); a influência da fase contínua, foram utilizados dois fluidos: óleo e áqua (seção 5.2); a influência da vazão, expressa sob a forma de velocidade axial de entrada para os casos com mesmo diâmetro e também a sua influência sobre o diâmetro das bolhas (seção 5.3); a influência do diâmetro das bolhas para  $U_e$  =5 cm s<sup>-1</sup>(seção 5.4); o efeito dos modelos de arraste no sistema com água para  $U_{\rm e}$  5 cm s<sup>-1</sup>, além de algumas variações no valor do coeficiente que quantifica o efeito da população de bolhas no modelo de Grace (seção 5.5); a turbulência na fase gasosa (seção 5.6) e a comparação das simulações com os dados experimentais publicados por Chen et al, (1998 e 1999) (seção 5.7). O modelo de arraste utilizado nas seções 5.1, 5.2, 5.3, 5.4 e 5.6 é o modelo de Grace com o coeficiente p = 0. Ressalta-se que todos os valores de Velocidade são da fase líquida e os valores de Fração Volumétrica são da fase gasosa, como apresentados pela literatura sobre este assunto.

# 5.1. Transitoriedade

A fluidodinâmica em colunas de bolhas apresenta comportamento altamente transiente. Assim, neste tipo de equipamento, grandes variações nas propriedades são observadas no espaço e no tempo. Em trabalhos experimentais publicados na literatura, como em Sanyal et al, (1999) e em Chen et al, (1998,1999), são apresentadas médias temporais das propriedades na ordem de horas, devido às limitações dos
equipamentos de medida. Assim, o campo de escoamento é sempre representado por valores temporais médios. Em trabalhos de CFD, também é usual apresentar valores temporais médios das propriedades, como, por exemplo, no trabalho de van Baten et al, (2004; a, b), onde os autores obtiveram oscilações pontuais das propriedades e fizeram médias temporais para tempos reais de simulação da ordem de 100s.

# 5.1.1. <u>Similaridade entre os perfis de Velocidade</u> Axial e Fração Volumétrica

A Figura 5.1-1 apresenta mapas de fração volumétrica de gás  $(\varepsilon_d)$  do sistema Água-Ar com velocidade de entrada de gás  $(U_e)$  de 2 cm s<sup>-1</sup> em diferentes tempos: 0, 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90 e 100 segundos. Nesta seqüência de mapas pode ser observado o caráter transiente do escoamento. Com o auxílio da linha tracejada na altura inicial do líquido, é possível observar a elevação da altura do líquido. Para este caso, a altura elevada não é tão expressiva devido à baixa velocidade de entrada da fase qasosa. Observa-se que o nível permanece constante para tempos maiores que 8 segundos. Os valores para os cálculos das propriedades médias foram feitas após 22 segundos do início do processo, que para este caso está na ordem de grandeza do tempo de residência de uma bolha no interior da coluna para esta condição. Na Figura 5.1-2 são apresentados os mapas de velocidade axial do líquido  $(U_v)$  para o mesmo sistema e nos mesmos tempos. Pode-se observar a semelhança entre os mapas de  $\varepsilon_d$  e de  $U_{v,r}$  onde os locais de maior fração volumétrica do gás, são também os locais de maior velocidade axial do líquido. Esta concordância nos perfis é fisicamente consistente, visto que a fluidodinâmica no interior da coluna

ocorre essencialmente devido ao arraste do líquido pelo gás. Também pode ser observado que os perfis de  $\varepsilon_d$  e de  $U_y$  variam ao longo do tempo de forma oscilatória.

A similaridade no comportamento transiente entre os perfis de  $\varepsilon_d$  e de  $U_v$  pode ser observada em vários trabalhos na literatura. No centro da coluna é um caso onde  $\varepsilon_{d}$  e  $U_{v,r}$ assumem valores máximos, devido ao efeito de arraste do gás sobre o líquido (Sanyal et al, (1999), Chen et al, (1998,1999)). Na Figura 5.2 são apresentados os perfis de velocidade axial (instantâneo( $U_v$ ) e médio temporais( $U_{vm}$ )) e fração volumétrica (instantâneo ( $\varepsilon_d$ ) e médio temporais ( $\varepsilon_{dm}$ )) para o caso Água-Ar,  $U_e = 5 \text{ cm s}^{-1} e d_b = 4,13 \text{ mm}$ , em um ponto localizado no centro da coluna na altura de 1,32 m. Pode-se observar que há semelhanças entre esses dois perfis. Os pontos de máximos e mínimos coincidem em praticamente todos os tempos, tanto para o perfil médio, quanto para o perfil instantâneo; sendo que o perfil de velocidade apresenta-se mais suavizado, sendo este função do arraste das bolhas.

Na Figura 5.3 são apresentados os valores de  $\varepsilon_d$  e  $\varepsilon_{dm}$  em função do tempo de simulação no mesmo ponto apresentado na Figura 5.2, para diâmetro das bolhas ( $d_b$ ) de 6,75 mm. Os valores médios foram obtidos logo após o tempo de estabilização do sistema (a partir de 22, 25 e 30 s para os caso com 2, 5 e 10 cm s<sup>-1</sup>, respectivamente). As Figura 5.3 (A,C e E) correspondem ao sistema Água-Ar e as Figura 5.3 (B,D e F) correspondem ao sistema Óleo-Ar, para as três  $U_e$  em estudo. Observa-se que o tempo para a partir do qual o valor da média não varia significativamente, chamado de tempo de estabilização da média (TEM), é pequeno e diminui com o aumento de  $U_e$ .



Figura 5.1 - Mapas de Fração volumétrica do gás(1) e Velocidade Axial do líquido(2) para Água-Ar 2 cm s<sup>-1</sup> em vários tempos: (A)0, (B)2, (C)4, (D)6, (E)8, (F)10, (G)12, (H)14, (I)16, (J)18, (L)20, (M)30, (N)40, (O)50, (P)60, (Q)70, (R)80, (S)90, (T)100 segundos



Figura 5.2 - Fração volumétrica do gás e Velocidade Axial do líquido em função do tempo, valores instantâneos e médios, no ponto [0; 1,32; 0]



(A), (C) e (E) sistema Água-Ar com 10, 5 e 2 cm s<sup>-1</sup>, respectivamente (B), (D) e (F) sistema Óleo-Ar com 10, 5 e 2 cm s<sup>-1</sup>, respectivamente

Na Figura 5.4-A estão mostrados os perfis de  $\varepsilon_{dm}$  para o caso Óleo-Ar com velocidade de 5 cm s<sup>-1</sup> e d<sub>b</sub> = 6,75 mm, em diferentes planos transversais ao longo da coluna. Na Figura 5.4-B, estão os perfis de  $U_{ym}$  para o mesmo caso. Esses perfis foram obtidos fazendo a média azimutal da média temporal das propriedades. Observa-se que os valores de fração volumétrica das bolhas e velocidade axial do líquido na região central da coluna são maiores em maiores alturas h.



Figura 5.4 - Perfil médios de (A) Fração Volumétrica e (B) Velocidade Axial ao longo da coluna para diferentes alturas (h) em relação à base da coluna.

Pode-se observar, na Figura 5.4-A, que os perfis de  $\varepsilon_b$ apresentam valores máximos na região central e menores próximo à parede. Ainda, quanto mais próximo à base da coluna, mais plano é o perfil. Nos perfis de velocidade (Figura 5.4-B) observa-se que a velocidade máxima (ascendente) também ocorre na região central da coluna, e a velocidade mínima (descendente) ocorre na região próxima à parede, conforme documenta a literatura para colunas de bolhas (Chen et al, (1998, 1999), Sanyal et al, (1999), van Baten et al, (2004, a) e Jakobsen et al, (2005)). Este efeito pode também ser observado na Figura 5.5, para o sistema Água-Ar  $U_e = 5 \text{ cm s}^{-1} e d_b = 4,13 \text{ mm}$ , onde os mapas de vetores para a velocidade do líquido a 114 s confirmam essas regiões do líquido: escoamento ascendentes no centro, descendentes próximo à parede e de recirculação tanto na parte inferior, quando na superior.

# 5.2. Influência da Fase Contínua

As propriedades da fase contínua (líquida) possuem grande influência na fluidodinâmica em uma coluna de bolhas, como: o diâmetro das bolhas (Eq.( 57 )), a velocidade terminal das bolhas (Eq. ( 35 )) e a transferência de quantidade de movimento entre as fases (Eq.( 9 )). Para avaliar esta influência os sistemas estudados foram Óleo-Ar e Água-Ar, ambos com  $U_e$  =5 cm s<sup>-1</sup>. Devido a sua inter-relação com outros parâmetros, este estudo foi subdividido em duas partes: a primeira com  $d_b$  =4,13 mm e a segunda com  $d_b$  =6,75 mm.



Figura 5.5 - Vetores de velocidade do líquido para o sistema Água-Ar 5 cm s-1 d\_b =4,13mm

### 5.2.1. Efeito da fase contínua para $d_b = 4,13 \text{ mm}$

Para o caso com diâmetro de 4,13 mm (Figura 5.6), observa-se uma maior recirculação no sistema mais viscoso, caracterizado pelos maiores valores nos perfis de  $\varepsilon_{\rm dm}$  (FV) e maiores gradientes de  $U_{ym}$  (Vel) na direção radial. Ao descer mais rapidamente a fase líquida arrasta consigo mais gás, havendo uma maior recirculação da fase gasosa, ou seja, a fase gasosa é mais facilmente arrastada pela recirculação do líquido descendo próximo às paredes, subindo novamente no centro, aumentando assim sua fração em toda a seção da



Figura 5.6 - Perfis médios de Fração volumétrica e Velocidade Axial para os sistemas Água-Ar e Óleo-Ar ( $U_e = 5 \text{ cm s}^{-1}, d_b = 4,13 \text{ mm}$ ) em várias alturas: (A) 1,70 m, (B) 1,32 m, (C) 0,89 m, (D) 0,51 m

coluna. O que para um sistema real, poderia acarretar em uma alteração do  $d_b$  e este, alterar a hidrodinâmica do sistema.

Pode-se observar que os perfis para essas condições não mudaram consideravelmente ao longo da coluna; no caso da  $U_{ym}$ do óleo, ela apresenta valores com pouca alteração na região central e, na região próxima à parede, apresentou ligeira alteração, indicando que nas regiões mais altas há um maior fluxo descendente de líquido próximo à parede. A diferença entre os valores de  $\varepsilon_{dm}$  entre os dois casos (Água-Ar e Óleo-Ar) mantiveram-se praticamente constantes na linha central para todos os casos, com valores em torno de 0,2.

Na Figura 5.7, são apresentados os mapas de fração volumétrica médios das bolhas na altura de 0,89 m para os sistemas Água-Ar e Óleo-Ar. Observa-se que para o sistema Água-Ar existe uma maior uniformidade da fase gasosa quando comparada ao sistema Óleo-Ar, além de apresentar valores menores, reafirmando a maior recirculação promovida pelo óleo, conforme mostrado na Figura 5.6.



Figura 5.7 – Mapa de cores de  $\varepsilon_{dm}$  para sistemas com  $d_b$  =4,13 mm (A) Água-Ar, (B) Óleo-Ar

#### 5.2.2. Efeito da fase contínua para $d_b = 6,75$ mm

O efeito da fase contínua na fluidodinâmica do sistema pode ser observado na Figura 5.8, onde são comparados os sistemas Água-Ar e Óleo-Ar com  $U_e = 5$  cm s<sup>-1</sup>, e  $d_b = 6,75$  mm, na altura h =0,89 m. Nesta Figura, observa-se que os perfis de  $U_{ym}$  para a população de bolhas são praticamente iguais, mostrando pequena influência da fase contínua (viscosidade e tensão interfacial) para este sistema, ao contrário do observado na Figura 5.6-C (para  $d_b = 6,75$  mm). Este resultado é fisicamente consistente pois os valores da velocidade terminal, para uma bolha individual( $U_T$ ) (Eq. ( 35 )), para ambos os sistemas são praticamente idênticos, e da ordem de 22 cm  $s^{-1}$ , como pode ser observado na Figura 5.9. Conferindo assim um baixo efeito da viscosidade e tensão superficial sobre a velocidade nestes sistemas, pois o ponto onde  $d_b = 6,75$ mm, é praticamente onde as duas curvas se encontram. Ao contrário, para o caso onde  $d_b = 4,13$  mm, a U<sub>T</sub> para o sistema com Água-Ar é na ordem de 24 cm s<sup>-1</sup> e para o sistema Óleo-Ar na ordem de 15 cm  $s^{-1}$ .



Figura 5.8 – Perfis médios de velocidade axial do líquido e fração volumétrica dos sistemas Água-Ar e Óleo-Ar ( $d_b=6,75$  mm)



Figura 5.9 - Velocidade terminal das bolhas, para os dois sistemas (Água-Ar e Óleo-Ar) em função do diâmetro das bolhas, (Eq.( 35 )).

Desta forma, pode -se relacionar os perfis de velocidade média com os valores de  $U_T$ , podendo com antecedência fazer uma avaliação preliminar sobre a semelhança ou não destes perfis.

# 5.3. Influência da Velocidade Axial de entrada

Outro fator importante que afeta a fluidodinâmica do sistema é a velocidade de entrada do gás. Este parâmetro indica a quantidade de gás que entra na coluna, como foi visto no Capítulo 4 (Eq. (58)). Este parâmetro foi estudado em duas partes: (1) considerando  $d_b = 6,75$  mm; (2) considerando o  $d_b$  obtido pela correlação dada pela Eq.(57).

#### 5.3.1. Sistemas com mesmo diâmetro (d<sub>b</sub> =6,75mm)

Na Figura 5.10 são apresentados os perfis de  $\varepsilon_{dm}$  e de  $U_{ym}$ para o sistema Água-Ar para as diferentes  $U_e$  do gás 2, 5 e 10 cm s<sup>-1</sup> na altura de 0,89 m. Pela figura, pode-se observar que os valores de  $\varepsilon_{dm}$  e de  $U_{ym}$  aumentam com o aumento de  $U_e$ , pois há uma maior quantidade de gás entrando no sistema e maior arraste do líquido pelo gás.



Figura 5.10 - Fração Volumétrica e Velocidade Axial do sistema Água-Ar  $d_b=6,75 \text{ mm}$ ,  $U_e=2$ , 5 e 10 cm s<sup>-1</sup>.

Na Figura 5.11 são apresentados perfis de  $\varepsilon_{dm}$  para o sistema Óleo-Ar na altura de 1,32 m. Neste sistema não foi possível obter o perfil de  $\varepsilon_{dm}$  para a  $U_e = 10$  cm s<sup>-1</sup>, pois houve "transbordamento" do líquido, ou seja, a fração de gás atingiu valores elevados acarretando a saída do líquido pelo topo da coluna. Assim, esses resultados foram desconsiderados.



Figura 5.11- Fração Volumétrica para o sistema Óleo-Ar,  $d_b = 6,75$  mm

### 5.3.2. Sistemas com diferentes diâmetros

Na Figura 5.12 são apresentados perfis de  $\varepsilon_{dm}$  e de  $U_{ym}$ para o sistema Água-Ar para os diâmetros obtidos de acordo com a Eq.( 57 ). Os valores de d<sub>b</sub> calculados estão mostrados na Tabela 4.3 (Capítulo 4). Pode-se observar que os perfis de  $\varepsilon_{dm}$  para as  $U_e$  de 5 e 10 cm s<sup>-1</sup> apresentam valores menores quando comparados aos valores da Figura 5.10. Essa alteração no perfil pode ser atribuída à menor força de empuxo das bolhas menores. O mesmo pode ser concluído para o caso apresentado na Figura 5.13, que mostra os perfis de  $\varepsilon_{dm}$  para o sistema Óleo-Ar utilizando o valor do diâmetro das bolhas com a mesma correlação.



Figura 5.12 - Fração volumétrica (A) e Velocidade Axial(B) médios em função da posição radial para o sistema Água-Ar,  $U_e = 2$ , 5 e 10 cm s<sup>-1</sup> com diâmetro segundo a correlação Eq.( 57 ).



Figura 5.13 - Fração volumétrica média do sistema Óleo-Ar,  $U_e = 2 e$ 5 cm s<sup>-1</sup> com diâmetro segundo a correlação Eq.( 57 ).

# 5.4. Influência do Diâmetro

O diâmetro das bolhas é uma propriedade que também influencia diretamente na fluidodinâmica do sistema. Nesta seção será mostrada a influência deste parâmetro para os sistemas Água-Ar e Óleo-Ar.

### 5.4.1. Sistema Água-Ar

Os efeitos do diâmetro das bolhas  $(d_b)$  foram analisados para  $U_e = 5 \text{ cm s}^{-1}$ . Foi utilizado um valor de  $d_b = 6,75 \text{ mm}$  (o maior valor de  $d_b$  para os casos estudados), e pela correlação Eq.(57), onde, para  $U_e = 5 \text{ cm s}^{-1}$ ,  $d_b = 4,13 \text{ mm}$ . Os perfis de  $\epsilon_{dm}$  e  $U_{ym}$  estão mostrados na Figura 5.14-A e Figura 5.14-B, respectivamente. O perfil de velocidade apresenta um maior gradiente para o caso com maior diâmetro, tanto no centro (mais positivo), quanto na região próxima à parede (mais negativo). Para este caso, o perfil de  $\epsilon_{dm}$  também é maior em toda a seção, indicando uma maior recirculação para o caso com maior diâmetro.



Figura 5.14 - Fração Volumétrica (A) e Velocidade Axial(B) médios em função da posição radial para o sistema Água-Ar para  $d_b = 4,13$  e 6,75 mm.

#### 5.4.2. Influência do Diâmetro para alta viscosidade

Para o sistema Óleo-Ar com  $U_e = 5$  cm s<sup>-1</sup>, a influência do tamanho das bolhas é fortemente observada nos perfis de  $\mathcal{E}_{dm}$ , e fracamente nos perfis de  $U_{ym}$  (Figura 5.15). O que indica que, para este sistema, há uma maior recirculação da fase dispersa para o menor diâmetro. Este efeito é atribuído à maior facilidade que o líquido tem para arrastar uma partícula menor do que uma partícula maior em sua descida próxima à parede (recirculação).

Observa-se também que o perfil de  $U_{ym}$  para  $d_b$  =6,75 mm é fortemente influenciado pela altura, aumentando sua velocidade ao longo da coluna, mostrando o efeito de aceleração das bolhas. No caso de  $d_b$  =4,13 mm, este efeito de aceleração das bolhas não é acentuado.

# 5.5. Influência do Modelo de Arraste

#### 5.5.1. Modelos de arraste padrões

Os modelo de arraste descrevem matematicamente a transferência de quantidade de movimento entre as fases em escoamentos multifásicos. Neste trabalho, foi estudado a influência de diferentes modelos de arraste no escoamento em uma coluna de bolhas. Os modelos testados foram: Schiller-Naumann (seção 3.1.4.1), Ishii-Zuber(IZ)(seção 3.1.4.2), e Grace (seção 3.1.4.3).



Figura 5.15 - Perfis médios de Velocidade Axial (Vel) e de Fração Volumétrica (FV) para o sistema Óleo-Ar com  $d_b$  =6,75 e 4,13 mm; em várias alturas: (A) 1,70 m, (B) 1,32 m, (C) 0,89 m, (D) 0,51 m

Na Figura 5.16-A são apresentados os perfis de  $\varepsilon_{dm}$  para o sistema Água-Ar,  $d_b$  =4,13 mm,  $U_e$  =5 cm s<sup>-1</sup>. Pode-se observar que o modelo de arraste de IZ prediz frações volumétricas maiores, o que implica um maior arraste.

A diferença entre os resultados obtidos mostra a grande influência dos modelos de arraste nas simulações. Os perfis de  $U_{ym}$  são apresentados na Figura 5.16-B. A maior recirculação é promovida pelo modelo de IZ, seguido pelo modelo de Grace e por último o modelo de Shiller-Naumann. Esses resultados concordam com os resultados mostrados na Figura 5.16-A, pois quanto maior o arraste de gás pelo líquido em sua descida próximo à parede, maior a fração volumétrica no sistema.

Pode ser observado que os modelos que contemplam a deformação das bolhas (Grace e IZ) apresentam resultados próximos, porém uma análise mais profunda ainda é necessária, pois os modelos foram avaliados apenas para  $U_e = 5$  cm s<sup>-1</sup>.

A origem de uma maior recirculação apresentada pelo modelo de IZ é mostrada na Figura 5.17, onde são apresentadas, para os modelos de Grace (A), IZ (B) e SN (C), isocurvas (3D) de (1) fração volumétrica média com valor de 0,15, (2) velocidade axial média de ascensão da fase líquida com valor de 0,2 m s<sup>-1</sup>, e (3) velocidade axial média da fase líquida com valor de -0,2 m s<sup>-1</sup>.

Pode-se verificar nesta figura a semelhança entre os perfis dos modelos de Grace e de IZ, quando compara-se as

67

isocurvas de  $\varepsilon_{dm}$  (Figura 5.17-A1 e B1) e  $U_{ym}$  de ascensão do líquido (Figura 5.17-A2 e B2). Na Figura 5.17-B1, pode ser observado o quanto esta região de fração volumétrica média de gás para o modelo de IZ é mais "largo" do que os perfis para os outros modelos. Desta maneira, conclui-se que o modelo de IZ dispersa mais as bolhas, fazendo que elas não fiquem tão concentradas no centro. Desta maneira elas são mais facilmente arrastadas pela fase contínua ao descer na região próxima à parede, cujas isocurvas são semelhantes para os três perfis da Figura 5.17-(A3,B3 e C3).



Figura 5.16 - Fração volumétrica (A) e Velocidade Axial(B) médios em função da posição radial para o sistema Água-Ar,  $U_e = 5$  cm s<sup>-1</sup>  $d_b =$ 4,13 com modelos de arraste diferentes.



Figura 5.17 - Mapas de isocurvas de Fração Volumétrica média a 0,15 (1), Velocidade Axial média a +0,2 (2) e Velocidade Axial média a -0,2 (3), para os modelos de Arraste Grace (A), Ishii-Zuber (B) e Schiller-Naumann (C) para o sistema Água-Ar, $U_e = 5 \ {\rm cm} \ {\rm s}^{-1} \ d_b = 4,13.$ 

#### 5.5.2. Variações do modelo de Grace

O modelo de arraste de Grace para sistema com grande densidade de bolhas Eq.(43)), tem um coeficiente "p" que é atribuído à densidade de partículas, este termo é para corrigir os efeitos de arraste de altas frações volumétricas de bolhas, como apresentado no Capítulo 3. No modelo padrão de Grace, este termo, é igual a zero. Para um maior entendimento deste modelo foram feitas algumas variações no valor deste expoente. Utilizou-se um valor negativo (-0,5) e um valor positivo (+1,0). Os sistemas estudados foram Água-Ar  $U_e = 5$  cm s<sup>-1</sup> com  $d_b = 4,13$  mm. Os casos apresentados anteriormente correspondem ao caso onde p=0.

Para os casos com valores de p = -0,5 e 1,0, as simulações foram iniciadas a partir do tempo de 114 s do caso com p=0. Os cálculos dos valores médios foram iniciados após 30 segundos de simulação com o novo valor. Os valores de  $\varepsilon_d$  e  $\varepsilon_{dm}$  no ponto [0; 1,32; 0] são apresentados na Figura 5.18, onde verifica-se que ao final do tempo de simulação a média para os dois casos não varia significativamente.

A Figura 5.19 apresenta os perfis de fração volumétrica para os casos com os três valores de p em quatro alturas diferentes da coluna(0,51 m; 0,89 m; 1,32 m e 1,70 m).

Verifica-se que o valor com p=-0,5 é o que apresenta maiores valores de  $\varepsilon_{dm}$  em toda a seção transversal. Seguido pelo valor zero, sendo que o valor de p= 1,0 é o que apresenta um menor valor de fração volumétrica em todas as

alturas. Logo, como  $\epsilon$  é sempre um número fracionário, quanto menor o valor de p, maior o valor de C\_D na Eq.( 43 ), o que concorda com os valores de  $\epsilon_{\rm dm}.$ 



Figura 5.18 - Fração Volumétrica do gás em função do tempo, valores instantâneos e médios, no ponto [0; 1,32; 0], para modelos de Grace com o expoente: (A) p=-0,5 e (B) p=1,0

A Figura 5.20 apresenta perfis de velocidade axial do líquido nas mesmas posições. Pode-se observar que o caso com p=1,0 apresentou velocidades mais elevadas em maiores alturas (1,32 e 1,70 m) e menores velocidades em alturas inferiores (0,51 e 0,89 m). Para p=-0,5, pode-se observar o inverso do observado para p=1,0, o que indica a influência do expoente p nos resultados.



Figura 5.19 - Perfis médios de Fração Volumétrica do gás para os diferentes valores do expoente p do modelo de Grace em diferentes alturas: (A) 1,70 m, (B) 1,32 m, (C) 0,89 m, (D) 0,51 m



Figura 5.20 - Perfis médios de Velocidade Axial do líquido para os diferentes valores do expoente p do modelo de Grace em diferentes alturas: (A) 1,70 m, (B) 1,32 m, (C) 0,89 m, (D) 0,51 m

A Figura 5.21 apresenta os mapas tridimensionais de isocurvas de (1) $\varepsilon_{dm}$ =0,15, (2) $U_{ym}$ =0,2 e (3) $U_{ym}$ =-0,2; para os 3 valores do expoente p (A)-0,5, (B)0 e (C)1,0. Verifica-se que para o valor p=-0,5 a fase gasosa apresenta-se mais distante do eixo central da coluna (Figura 5.21-A1), facilitando, desta maneira, o arraste pelo líquido que desce preferencialmente na região próxima à parede. Desta maneira, pode-se afirmar que a dispersão da fase gasosa aumenta a recirculação do gás, confirmando os perfis apresentados na Figura 5.19.

Nas isocurvas de  $U_{ym}$  mostradas na Figura 5.21-(A2,B2,C2) é observado que A2 e B2 são similares, enquanto que C2 (p=1,0) possui menor simetria em relação ao centro da coluna, o que pode acarretar em grandes desvios no cálculo da média azimutal, resultando em menores valores da velocidade axial média nesta direção. A assimetria é observada principalmente na região inferior da coluna, onde a média azimutal da velocidade apresentou menores valores, conforme apresentado na Figura 5.20. Isto é confirmado ao observar os mapas de  $\epsilon_{dm}$ na seção transversal em várias alturas, apresentados na Figura 5.22.



Figura 5.21 - Mapas de isocurvas de Fração Volumétrica média a 0,15 (1), Velocidade Axial média a -0,2 (2) e Velocidade Axial média a -0,2 (3), para diferentes valores do expoente p do modelo de Grace (A) -0,5, (B) 0 (C) 1,0, para o sistema Água-Ar,  $U_e = 5 \text{ cm s}^{-1} d_b = 4,13 \text{ mm}.$ 



Figura 5.22 - Mapas de Cores do perfil de Fração Volumétrica média para o sistema Água-Ar,  $U_e = 5 \text{ cm s}^{-1} d_b = 4,13 \text{ mm}$ , com modelo de Grace,p= +1,0 em varias alturas: (A)0,51m, (B)0,89m, (C)1,32m e (D)1,70m

### 5.6. Turbulência nas duas fases

Este estudo de caso teve o intuito de avaliar a importância da turbulência da fase dispersa. Neste caso foi utilizado o modelo de turbulência "Zero Equation" para a fase dispersa, e o modelo K- $\in$ , para a fase contínua. O sistema utilizado foi Água-Ar com  $U_e = 5$  cm s-1,  $d_b = 4,13$  mm e modelo de arraste de Grace com p=0.

Como no caso anterior, seção 5.5.2, esta simulação utilizou como valores iniciais o caso com modelo laminar para a fase gasosa, até 114 s. Na Figura 5.23 são apresentados os valores de  $\varepsilon_d$  e  $\varepsilon_{dm}$  para o ponto[0; 1,32; 0], e verifica-se que com o tempo simulado o valor médio não varia significativamente.



Figura 5.23 - Fração Volumétrica do gás em função do tempo, valores instantâneos e médios, no ponto [0; 1,32; 0], para fase dispersa com modelo de turbulência.

A Figura 5.24 apresenta os perfis de  $U_{ym}$  e de  $\varepsilon_{dm}$  em diversas alturas. Nesta figura, nas três alturas superiores (1,70 m; 1,32 m; e 0,89 m) tanto o valor de  $\varepsilon_{dm}$ , quanto da



Figura 5.24 - Perfis médios de Velocidade Axial do líquido e fração volumétrica do gás em diferentes alturas: (A) 1,70 m, (B) 1,32 m, (C) 0,89 m, (D) 0,51 m, para sistema com turbulência em ambas as fases

velocidade são maiores para o caso com turbulência em ambas as fases, embora fique bem mais expressiva para a velocidade. Pode-se observar que os valores de  $U_{ym}$  e  $\varepsilon_{dm}$  são maiores para o caso com turbulência na fase gasosa nas 3 alturas superiores. Na menor altura, h=0,51 m, os valores de  $\varepsilon_{dm}$  e  $U_{ym}$ são similares.

# 5.7. Comparação simulação versus experimental

Nesta seção são comparados os resultados obtidos por simulação com resultados experimentais da literatura, obtidos por Chen et al, (1998). Nas figuras que seguem, os símbolos cheios correspondem aos valores experimentais e os das curvas contínuas com símbolos abertos correspondem aos obtidos neste trabalho.

Comparando os casos com sistema Água-Ar( Figura 5.25, Figura 5.26 e Figura 5.27, sendo  $U_e = 2$ , 5 e 10 cm s<sup>-1</sup>, respectivamente) é constatado que para os casos com fluido contínuo de baixa viscosidade (água) o modelo utilizado fornece resultados próximos aos dos dados experimentais para 2 e 5 cm s<sup>-1</sup>. Para 10 cm s<sup>-1</sup> o perfil distancia-se bastante do resultado obtido por Chen et al, (1998).

Para o caso com  $U_e = 2$  cm s<sup>-1</sup> (Figura 5.25) é verificado que os valores simulados (tanto de  $\varepsilon_{dm}$  quanto de  $U_{ym}$ ) são próximos aos experimentais. Para o sistema Água-Ar as bolhas sofrem coalescência somente após uma determinada velocidade

(Krishna et al, (1999) afirmam que para uma coluna de 20cm de diâmetro o valor de transição para  $U_e$  =3,75 cm s<sup>-1</sup>. E este valor deve aumentar para colunas de diâmetros maiores). Assim o sistema Água-Ar,  $U_e$  =2 cm s<sup>-1</sup> ainda esta em regime homogêneo de escoamento.



Figura 5.25 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e perfil médio de: (A) Velocidade axial do líquido (h=1,32m) e (B) Fração Volumétrica do gás (h=0,89m), do sistema Água-Ar,  $U_e = 2$  cm s<sup>-1</sup>, d<sub>b</sub> =6,75mm

Para os casos com 5 cm s<sup>-1</sup> (Figura 5.26), observa-se que os casos com os dois diâmetros obtiveram valores de fração volumétrica muito próximos ao experimental. Como nas *Celso Murilo dos Santos* 80

simulações não foi modelada a coalescência, espera-se um valor de fração volumétrica maior do que o valor experimental, indicando que o valor do diâmetro da bolha que condiz com esta expectativa é o de 6,75 mm. Esta  $U_e$  é considerada como  $U_e$  de transição, por isso já há um pouco de coalescência.



Figura 5.26 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e perfis médio de Fração Volumétrica do sistema Água-Ar,  $U_e = 5$  cm s<sup>-1</sup>, d<sub>b</sub> =4,13 e 6,75 mm, h=0,89m

Para os casos com velocidade de entrada de 10 cm s<sup>-1</sup> (Figura 5.27) o sistema está no regime heterogêneo de escoamento, acima da velocidade crítica, caracterizado pela quebra e coalescência de bolhas. Pode-se observar uma grande discrepância, principalmente para os perfis de  $\varepsilon_{dm}$ , entre os valores experimentais da literatura e os perfis médios obtidos por simulação provavelmente devido ao fato da coluna de bolhas estar no regime heterogêneo de bolhas. Portanto esta discrepância era esperada, que pode ser vista pela sobre-predição dos valores de  $\varepsilon_{dm}$ . Assim, neste regime de bolhas, a abordagem adotada neste trabalho é insuficiente para obter boas predições quantitativas de fração volumétrica.



Figura 5.27 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e perfis médio de: (A) Velocidade axial do líquido (h=1,32m) e (B) Fração Volumétrica do líquido (h=0,89m)do sistema Água-Ar,  $U_e = 10$  cm s<sup>-1</sup>,  $d_b = 4,00$  e 6,75 mm

Para o sistema Óleo-Ar, os resultados estão mostrados nas: Figura 5.28 e Figura 5.29 com  $U_e = 2$  e 5 cm s<sup>-1</sup>, respectivamente. O sistema Óleo-Ar, assim como vários trabalhos na literatura (Capítulo 2), mostram que o aumento da viscosidade e com a diminuição da tensão interfacial fazem

com que a coalescência das bolhas ocorra para  $U_e$  mais baixas, quando comparado com o sistema Água-Ar, isto é atribuído ao fato dos perfis de  $\varepsilon_{dm}$  para todos os casos simulados do sistema Óleo-Ar apresentarem valores maiores do que os de Chen et al, (1998).



Figura 5.28 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e perfis médios de (A) Velocidade axial do líquido e (B) Fração Volumétrica do gás, para o sistema Óleo-Ar,  $U_e = 2 \text{ cm s}^{-1}$ ,  $d_b = 6,75 \text{mm}$ , na altura de 1,32m

Para o caso com Óleo-Ar com  $U_e = 2$  cm s<sup>-1</sup> nota-se que houve uma ligeira sobre-predição dos valores de  $\varepsilon_{dm}$ , enquanto que para o sistema com menor viscosidade (Água-Ar) os valores

ficaram aquém do experimental, 0 que indica que а coalescência de bolhas pode ter ocorrido para este caso. Segundo os dados apresentados por Krisha et al, (2000), para este sistema a coalescência inicia-se com velocidades abaixo de 2 cm s<sup>-1</sup>. Similarmente, para o caso a 5 cm s<sup>-1</sup> (Figura 5.29), a sobre-predição dos valores para estes perfis foram ainda maiores para ambos d<sub>b</sub>, indicando que no sistema de Chen et al, (1998) houve coalescência das bolhas. O mesmo comportamento também pode ser observado para o perfil de  $U_{vm}$ .



Figura 5.29 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e perfis médios de Fração Volumétrica do sistema Óleo-Ar  $U_e = 5$  cm s<sup>-1</sup>, d<sub>b</sub> = 4,13 e 6,75 mm, h=1,32m

Nos testes realizados com os três modelos de arraste, os deformação para modelos que contemplam a as bolhas apresentaram resultados semelhantes, como comentado anteriormente. Ressalta-se, neste ponto, a proximidade dos perfis desses dois modelos com os dados experimentais (Figura 5.30). Nesta Figura, também é apresentado os valores para o sistema de Grace,  $d_b = 6,75$ mm, onde fica evidente que para este sistema, a correta modelagem do diâmetro das bolhas é de grande importância.


Figura 5.30 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e perfis médios de Fração Volumétrica do sistema Água-Ar  $U_e = 5$  cm s<sup>-1</sup>, d<sub>b</sub> = 4,13 e 6,75 mm, h=0,89 m, para os três modelos de arraste.

Na Figura 5.31 são apresentados os perfis de  $\varepsilon_{dm}$  e também os valores experimentais de Chen et al, (1998), onde verifica-se que o valor do expoente p da Eq.( 43 ) que mais se aproxima do valor experimental é p=-0,5.



Figura 5.31 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e perfis médios de Fração Volumétrica do gás para os diferentes valores do expoente p do modelo de Grace. Sistema Água-Ar  $U_e = 5$  cm s<sup>-1</sup>, d<sub>b</sub> = 4,13 mm, h=0,89m.

Na Figura 5.32 é mostrado o perfil médio de fração volumétrica para o sistema Água-Ar com  $U_e = 5$  cm s<sup>-1</sup>, d<sub>b</sub> =4,13 mm, para os sistemas com modelo laminar e com o modelo "Zero Equation" para a fase gasosa e os valores experimentais, onde verifica-se que, com a turbulência, a fração volumétrica da fase gasosa aumentou, alcançando os valores experimentais em praticamente toda a seção transversal da coluna.



Figura 5.32 - Valores experimentais (Chen et al, 1998) e Perfis médios de Fração Volumétrica do gás para o sistema Água-Ar  $U_e = 5$  cm s<sup>-1</sup>, d<sub>b</sub> = 4,13 mm, h=0,89m, Com e sem turbulência da fase gasosa.

# 6. Conclusões e Sugestões

### 6.1. Conclusões

Através dos resultados apresentados no Capítulo 5, podese concluir que:

✓ Escoamentos em colunas de bolhas apresentam comportamento oscilatório tanto nos campos de fração volumétrica, como no de velocidade. As oscilações dessas propriedades apresentam uma grande similaridade, e o perfil de velocidade é mais suave do que o de fração volumétrica.

✓ Os modelos de arraste utilizados para baixas velocidades (2 cm s<sup>-1</sup>) (modelo de Grace com p=0, esquema de interpolação de primeira ordem para o tempo e de segunda ordem para o espaço) representaram bem os fenômenos envolvidos, onde foi observada boa concordância com os dados da literatura (Chen et al, 1998).

✓ Para a velocidade de entrada  $U_e = 5 \text{ cm s}^{-1}$  os modelos apresentaram resultados satisfatórios. Para o sistema Água-Ar, os resultados foram bons qualitativamente e próximos quantitativamente. Para o sistema Óleo-Ar apenas qualitativamente, podendo isto ser atribuído ao fato da não modelagem da coalescência das bolhas para este sistema. ✓ Para os sistemas a 10 cm s<sup>-1</sup> a coalescência ocorre em ambos os sistemas. Verificou-se que para esta velocidade, a modelagem do regime heterogêneo, considerando a coalescência e a quebra das bolhas, é indispensável, principalmente para os perfis de fração volumétrica.

✓ A abordagem Euleriana-Euleriana representou bem os fenômenos.

✓ Os perfis de  $\epsilon_{dm}$  e de  $U_{ym}$  apresentaram maiores gradientes quanto maior a altura em relação à base da coluna para todos os casos estudados.

✓ O modelo de arraste de Ishii-Zuber promove um maior arraste do que o modelo de Grace, que por sua vez, maior do que o de Schiller-Naumann. Para o modelo de Grace, quanto menor o expoente p, maior o arraste, ocasionando maiores gradientes nos perfis de velocidade axial do líquido, além de maiores perfis de fração volumétrica em toda coluna. Sendo que os dois modelos que contemplam a deformação das bolhas alcançaram valores mais próximos ao experimental.

✓ A presença de turbulência na fase gasosa acarretou
o aumento da fração volumétrica média do gás e a velocidade
axial de ascensão do líquido.

### 6.2. Sugestões para atividades futuras

A seguir seguem algumas sugestões para trabalhos futuros, que foram consideradas importantes e não foram estudadas neste trabalho:

✓ Aquisição de dados, experimentais em sistemas, que se possa obter o real diâmetro das bolhas. Além de perfis de velocidade e de fração em vários planos, para várias  $U_e$  diferentes.

✓ Modelagem dos fenômenos de quebra e coalescência
para a fase dispersa, para o regime heterogêneo de bolhas.

 ✓ Verificar o efeito dos modelos de arraste e da turbulência na fase gasosa sobre os perfis médios de velocidade axial do gás.

 ✓ Modelar o sistema considerando a geometria de prato perfurado na entrada de gás.

 ✓ Realizar estudos em outras geometrias mais complexas. Por exemplo, realizar simulações com tubos de resfriamento e sistema com recirculação de líquido.

✓ Modelar sistemas considerando reações químicas e transferência de massa e energia.

## Referências Bibliográficas

BURNS, A. Computational Fluid Dynamics Modeling of Multi-Phase Flows. Apostila Alpha Beta Numerics.

CHEN, J., DEGALEESAN S., GUPTA P., AL-DAHHAN M. H., DUDUKOVIC M. P., TOSELAND B. A. Fluid dynamic parameters in bubble columns with internals. *Chemical Engineering Science*, n.54, p.2187-2197, 1999.

CHEN, J., GUPTA, P., DEGALEESAN S., AL-DAHHAN 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.

CLIFT, R., GRACE, J. R., WEBER, M. E. Bubbles, drops and particles. Academic Press, 1978.

GRUNERT W., ELMASIDES C., KODARIDES D. I., VERYKIOS X. E. XPS and Ftir study aj Ru/Al2O3 and Ru/TiO2 catalysis: reduction chacteristics and interaction with a methane-oxygen mixture. *Journal of Phisical Chemistry B*, v.103, p.5227-5239, 1999.

HINDERMANN, J. P., HUTCHINGS, G. J., KIENNERMANN, J. Mechanistics aspects of the formation of hidrocarbons and alcohols from CO hydrogenation. *Jounal Catalysis Review*, Science Engineering, v.35, p.1-127, 1993.

JAKOBSEN, H. A., LINDBORG, H., DORAO, C. A. Modeling of Bubble Column Reactors: Progress and Limitations. *Industries Chemical Research*, v.44, n.14, p.5107-5151, 2005.

JOSHI, J. B. Computational flow modelling and design of bubble column reactors. *Chemical Engineering Science*, v.56, p.5893-5933, 2001.

KRISHNA, R. A Scale-up Strategy for a Commercial Scale Bubble Column Slurry Reactor for Fischer-Tropsch Synthesis. Oil & Gas Science and Technology, v.55, n.4, p.359-393, 2000.

KRISHNA, R., URSEANU, M.I., VAN BATEN, J. M. Rise velocity of a swarm of large gas bubbles in liquids. *Chemical Engineering Science*, v.54 p.171-183, 1999.

KRISHNA, R, VAN BATEN, J. M, URSEANU, M. I, Ellenberger, J. Design and scale up.of a bubble slurry reactor for Fischer-Tropsch synthesis. *Chemical Engineering Science*, v.56 p.537-545, 2001.

LUNSFORD, J. H. Catalytic conversion of methane to more useful chemicals and fuels: a challenge for the 21 St century. *Catalysis Today*, v.29, p.165-174, 2000.

Manual do CFX® 5.7 - Solver Theory/Multiphase Theory.

#### Referencias Bibliográficas

MALISKA, C. R. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional. Rio de Janeiro, Brasil: LTC Editora, 2ª edição, 2004.

MARETTO, C., KRISHNA, R. Modelling of bubble column slurry reactor for Fischer-Tropsch Synthesis. *Catalysis Today*, v.52, p.279-289, 1999.

MEIER, H. F. Tese de doutorado, Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, (1998).

NORILER, D. Dissertação de mestrado, Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, (2003).

PERRY'S CHEMICAL ENGINEERS'HANDBOOK, 7th ed, The McGraw-Hill Companies, Inc., 1997.

SANYAL, J., VÁSQUEZ, S., ROY S., DUDUKOVIC, M. P. Numerical Simulation of gas-liquid dynamics in cylindrical bubble column reactors. *Chemical Engineering Science*, v.54 p.5071-5083, 1999.

SIE, S. T, KRISHNA, R. Fundamentals and selection of advanced Fischer-Tropsch reactors. *Applied Catalysis*, v.186, p.55-70, 1999.

SOKOLICHIN, A., EIGENBERG, G. Applicability of the standard  $k-\epsilon$  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., EIGENBERG, G., Lapin, A. Simulation of Buoyancy Driven Bubbly Flow: Established Simplifications and Open Questions. *Aiche Journal*, v.50, n.1, p.24-45, Janeiro, 2004.

SWART, J. W. A. DE, KRISHNA, R. Influence of particles concentration on the hydrodynamics of bubble column slurry reactors. *Trans Institution of Chemical Engineers*, v.73, p.308-313, 1995.

TREYBAL, R. E. Operações de transferência de massa. McGraw-Hill Book Co. Mexico, p.858. 1980.

VAN BATEN, J. M, ELLENBERGER, J, KRISHNA, R. Scale-up strategy for bubble column slurry reactors using CFD simulations. *Catalysis Today*. v.79-80, p.259-265, 2003.

VAN BATEN, J. M., KRISHNA, R. CFD Modeling of Bubble Column Reactor Including the Influence of Gas Contraction. *Chemical Engineering Technology*, v.27, n.12, p.1302-0308, 2004(a).

VAN BATEN, J. M., KRISHNA, R. Eulerian Simulation Strategy for Scaling up a Bubble Column Slurry Reactor for Fischer-Tropsch Synthesis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v.43, p.4483-4493, 2004 (b).

93

YANG, N., WANG, W., GE, W., LI, J. CFD simulation Of concurrent-up gas-solid flow in circulating fluidized beds with structure-dependent drag coefficient. *Chemical Engineering Journal*, n.96, p.71-80, 2003.

ZHANG, D. Z., VANDERHEYDEN, W. B. High-resolution threedimensional numerical simulation of a circulating fluidized bed. *Powder Technology*, n.116, p.133-141, 2001.

# Apêndice

No apêndice são mostrados alguns conceitos.

### Apêndice 1 - Força lift

Quando uma partícula esférica percorre um duto existe diferença de entre as pressões que agem sobre ela uma (pressão no centro e na parede da coluna). Esta distribuição assimétrica da pressão faz com que ela gire ao redor de si Para uma bolha o cálculo desta força é mais mesma. complicado, pois, a forma da bolha não é a de uma esfera. Ainda não há um consenso sobre a utilização desta força, mas sim um uso aleatório. Utilizando-a para ajustar as simulações resultados experimentais. Estudos mostram aos а forte influência desta força em colunas com diâmetros pequenos (alguns centímetros) e velocidade do líquido no centro a ordem de 1,2 m s<sup>-1</sup>. Este modelo é importante apenas no caso de simulação em estado estacionário, pois em regime transiente já é observada variação de velocidade radial, e obtendo um perfil de velocidade ascendente no centro e descendente próximo à parede.

Esta força se faz necessária para uma simulação 2-D, ela age como agente de ajuste de estado estacionário, no caso 3-D a própria transitoriedade do sistema supre este efeito.

## Apêndice 2 - Força de aceleração mássica

Quando uma bolha acelera ao subir por uma coluna de líquido, provocará no líquido que esta descendo (recirculando) uma aceleração, este efeito é chamado de Força da aceleração mássica. Esta força é bem aceita fisicamente, embora seja muito difícil de ser calculada e os modelos para o cálculo desta força são limitados. Alguns experimentos mostram que ela é extremamente fraca e que seu efeito é considerável em até 0,01 s do instante em que a bolha inicia seu movimento. Como os passos de tempo utilizado em simulações transientes são nesta mesma ordem, este efeito pode ser desconsiderado.