

SIMULAÇÃO DA DINÂMICA DE COLUNA DE BOLHAS

R. V. P. REZENDE¹, A. A. ULSON DE SOUZA¹ e S. M. A. GUELLI ULSON DE SOUZA¹

¹ Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos E-mail para contato: rezendervp@gmail.com

RESUMO –Escoamentos gás-líquido são comuns em vasta gama de operações unitárias, e há um grande interesse na otimização e melhor entendimento da dinâmica destes sistemas. Muitos trabalhos vêm sendo desenvolvidos com este objetivo e questões ainda permanecem abertas, principalmente em relação aos modelos de fechamento da densidade de força interfacial. O trabalho emprega uma abordagem tensorial para o cálculo da densidade de força interfacial associada ao modelo de arrasto padrão para descrever o comportamento dinâmico e oscilante de uma coluna de bolhas plana. O modelo foi implementado no simulador comercial ANSYS CFX e os resultados instantâneos e da média temporal são comparados com a literatura. A dinâmica oscilatória pode ser capturada com precisão, indicando frequências características de 0,04 e 0,05Hz. Os perfis médios de velocidade também tiveram boa concordância com a literatura. A associação do modelo tensorial e o modelo de arrasto padrão se mostrou eficaz na descrição deste problema complexo

1. INTRODUÇÃO

Colunas de bolhas é um termo genérico aplicado a uma vasta gama de equipamentos industriais em que ocorre a interação gás-líquido e a fase gasosa encontra-se dispersa no meio líquido contínuo. E tanto sob uma ótica experimental, matemática e computacional é um problema extremamente complexo de se analisar. E várias questões emergem de uma análise destas como qual o melhor modelo de partícula empregar; quais correlações empregar; quais forças devem ou não se considerar na iteração gás-líquido; qual o modelo de turbulência é mais adequado e se uma abordagem 2D é possível, por exemplo.

O padrão de dispersão, o perfil de fração volumétrica de gás, são parâmetros importantes na determinação de taxas de transferência de massa e calor. Mesmo de posse de modelos e correlações excelentes para os processos de transferência de massa ou calor, sem a correta descrição da dinâmica entre as fases a solução adequada destes processos é limitada pela solução do comportamento fluidodinâmico.

Este problema é muito estudado na literatura dado a sua importância prática. Trabalhos experimentais, matemáticos e/ou numéricos (Bech, 2005a, b; Becker, *et al.*, 1999; Becker, *et al.*, 1994; Borchers, *et al.*, 1999; Delnoij, *et al.*, 1997; Pfleger e Becker, 2001; Pfleger, *et al.*, 1999; Sanada, *et al.*, 2009; Sato, *et al.*, 1981a, b; Sato e Sekoguchi, 1975; Sokolichin e Eigenberger, 1994, 1999; Vikas, *et al.*, 2011; Zhang, *et al.*, 2006) se ocupam com diversas nuances como modulação da turbulência e processos de quebra e coalescência, por exemplo, sendo comuns duas questões: padrão de dispersão da pluma de gás, e a dinâmica da pluma.



A pluma de gás tende a oscilar e muitas vezes em um movimento oscilatório harmônico e nem sempre em uma simulação 2D este comportamento é reproduzido, no entanto, Bech (2005a, b) demonstra que com o uso do modelo de turbulência adequado e calibrado, e a força de dispersão turbulenta, o padrão oscilatório pode ser capturado.

Neste trabalho uma abordagem tensorial é empregada na modelagem do termo de densidade interfacial. O modelo de arrasto é mantido com sua forma funcional padrão e com coeficiente de arrasto constante. O modelo é uma modificação do modelo proposto por Rezende, *et al.* (2012) para superfícies livres e desenvolvido em Rezende (2014) para escoamentos dispersos.

O modelo 2D foi resolvido numericamente no simulador ANSYS CFD R12.1 e uma análise para tempos longos foi efetuada para o cálculo dos campos médios das variáveis de interesse e captura das frequências características de oscilação da pluma.

2. MODELO MATEMÁTICO

O modelo emprega a abordagem euleriana conhecida como modelo de dois fluidos, ou modelo heterogêneo (Drew, 1983; Drew e Passman, 1999; Rezende, 2008, 2014). Os balanços de massa, quantidade de movimento e conservação de volume são representados respectivamente por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(r_{\alpha} \left\langle \rho_{\alpha} \right\rangle \right) + \nabla \cdot \left(r_{\alpha} \left\langle \rho_{\alpha} \right\rangle \left\langle \mathbf{u}_{\alpha} \right\rangle \right) = 0 \quad , \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(r_{\alpha} \left\langle \rho_{\alpha} \right\rangle \left\langle \mathbf{u}_{\alpha} \right\rangle \right) + \nabla \cdot \left(r_{\alpha} \left\langle \rho_{\alpha} \right\rangle \left\langle \mathbf{u}_{\alpha} \right\rangle \otimes \left\langle \mathbf{u}_{\alpha} \right\rangle \right) = -\nabla \left(r_{\alpha} \left\langle p \right\rangle \right) + \dots$$

$$\dots + \nabla \cdot \left[r_{\alpha} \mu_{\alpha} \left\langle \nabla \mathbf{u}_{\alpha} + \nabla \mathbf{u}_{\alpha}^{T} \right\rangle \right] + r_{\alpha} \left\langle \rho_{\alpha} \right\rangle \mathbf{g} + \mathbf{M}_{\alpha},$$
(2)

$$\sum_{\alpha}^{2} n = 1$$
(2)

$$\sum_{\alpha=1} r_{\alpha} = 1 .$$
(3)

Enquanto a densidade de força interfacial \mathbf{M}_{α} é dividia em duas parcelas: uma dada pelo arrasto padrão como coeficiente de arrasto constante igual a 0,44,

$$\mathbf{F}_{D} = \frac{3}{4} \frac{C_{D}}{d_{p}} r_{\beta} \rho_{\alpha} \left\| \mathbf{u}_{\beta} - \mathbf{u}_{\alpha} \right\| \left(\mathbf{u}_{\beta} - \mathbf{u}_{\alpha} \right), \tag{4}$$

e outra de natureza tensorial baseada na Hipótese de Boussinesq e abordagem similar a abordagem subgrid (Smagorinsky, 1963):

$$\mathbf{F}_{\alpha\beta} = -C_T \tilde{\Delta} \Big[\left\langle \overline{\mathbf{D}} \right\rangle_i \cdot \nabla r_i \Big] , \qquad (5)$$



onde $\tilde{\Delta} = \frac{\mu_{mix}}{\|\nabla r_i\|} \frac{6r_d}{d_p}$; e C_T uma constante de fechamento, feita igual a um. A viscosidade de

mistura é dada por Ishii e Mishima (1984): $\mu_{mix} = \mu_c \left(1 - \frac{r_d}{r_{dm}}\right)^{-2.5r_{dm}\mu_*}$, onde $\mu_* = \frac{\mu_d + 0.4\mu_c}{\mu_d + \mu_c}$; assim,

$$\mathbf{F}_{\alpha\beta} = -C_T \frac{\mu_{mix}}{\|\nabla r_i\|} \frac{6r_d}{d_p} \left\langle \begin{bmatrix} \partial_x u_i & \partial_y u_i \\ \partial_x v_i & \partial_y v_i \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \partial_x v_i & \partial_y u_i \\ \partial_x v_i & \partial_y u_i \end{bmatrix} \right\rangle \cdot \begin{bmatrix} \partial_x r_i \\ \partial_y r_i \end{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}_k.$$
(6)

Nenhum modelo de turbulência foi empregado e o termo $\mathbf{F}_{\alpha\beta}$ adiciona flutuações à força de arrasto não necessariamente alinhadas a mesma podendo induzir movimentos transversais também.

2.1. Setup





A Figura 1 apresenta o domínio de cálculo do problema com suas dimensões. As



paredes possuem condição de não escorregamento e a superficie livre acima, condição de degassing. A região de entrada com 2mm de largura de gás abaixo possui velocidade normal igual 0,167m/s resultando em uma velocidade superficial de 0,167cm/s para uma coluna com 4cm de profundidade e uma vazão volumétrica de 0,81/min de ar. Para o CFX o domínio precisa ter uma espessura, mesmo em 2D, e esta espessura é de 1mm.

A malha empregada foi uma malha cartesiana não uniforme formada por ~57mil nós, com refino maior junto à linha de centro passando pela entrada, e junto às paredes. O passo de tempo empregado foi de 0,001s para um tempo físico de 165s, perfazendo um tempo de computação de pouco menos de 2 meses em uma CPU desktop i7 a 3.4GHz com 16 GB de RAM. A estatística transiente é feita a partir de 65s de tempo físico, sendo este tempo inicial empregado para inicialização e estabilização do problema. Os fluidos empregados são água $(\rho_l = 997 kg/m^3 e \mu_l = 8,889 \cdot 10^{-3} Pa \cdot s)$, e ar $(\rho_l = 1,185 kg/m^3 e \mu_l = 1,831 \cdot 10^{-5} Pa \cdot s)$.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A comparação do perfil da pluma é apresentada na Figura 2. A forma sinusoidal e as amplitudes são muito similares. Deve-se lembrar de que a imagem na esquerda tem-se uma medida instantânea enquanto a direita é o resultado de equações promediadas que retornam sempre resultados de campos médios.



Pfleger et al (1999)Este trabalhoFigura 2 – Comparação dos resultados para o perfil da pluma de gás.

Esta comparação qualitativa é mais bem embasada na comparação dos perfis médios de velocidade na coluna. As linhas de amostragem são indicadas na Figura 12, e os resultados apresentados na Figura 3 e comparados aos resultados experimentais de Pfleger, *et al.* (1999) e numéricos de Bech (2005b).





Figura 3 – Perfis de velocidade médios amostrados em H= 13, 25 e 37 cm por um período de 100s com uma taxa de amostragem de 50 amostras por segundo (0,02Hz).



De forma geral, eles tendem a se ajustar melhor às regiões intermediárias (\pm 5cm), sendo mais concordantes ao centro para H=12cm; junto às paredes em H=25cm; e ao centro em H=37cm. Os resultados de Bech (2005b) também apresentam boa concordância, mas junto às paredes tendem a divergir dos pontos experimentais, possivelmente pelo tratamento da parede dada pela abordagem LES empregada no trabalho.

A amostragem de longo tempo – LTA – é necessária para que estes perfis se tornem cada vez mais simétricos (numéricos ou experimentais). Qualquer desvio neste comportamento com uma injeção centralizada indica ainda que o número de amostras precisa ser maior. E na Figura 3 todos os resultados, incluído o deste trabalho apresentam certo grau de assimetria.

A amostragem pontual da componente vertical de velocidade de líquido é apresentada na Figura 4. O sinal apresenta um comportamento oscilatório harmônico com uma amplitude entre 0,2-0,25m/s.



Figura 4 – Amostragem temporal da componente vertical de velocidade de líquido.

O período de oscilação é determinado por meio da aplicação de uma FFT obtendo-se assim, as frequências características do sinal. A Figura 5 apresenta o espetro de frequências e dois picos são nítidos: um em 0,04Hz e outro em 0,05Hz, sendo este último mais intenso. Estas duas frequências características indicam um comportamento bimodal com períodos de 25s e 20s, respectivamente. Pfleger, *et al.* (1999) reportam períodos entre 15 e 20s, com frequências variando entre 0,067-0,05Hz; enquanto Becker, *et al.* (1999) reportam períodos entre 16-19s com frequências variando entre 0,0625 - 0,0526Hz.

Estes resultados indicam que o modelo associado reproduz quantitativamente o comportamento experimental da coluna de bolhas em duas dimensões, tal como obtido por Bech (2005a, b), mas sem o uso de um modelo de turbulência nem da força de dispersão turbulenta, sem a qual a pluma não oscilaria. O período reportado é de 12,2s com uma frequência de 0,0852Hz e muito dependente da calibração do modelo de turbulência.





Figura 5 – Espectro de frequências obtidas por aplicação de uma FFT ao sinal de velocidade amostrado no ponto indicado na Figura 1.

4. CONCLUSÕES

Uma abordagem tensorial associada ao termo de arrasto padrão no modelo de fluidos foi desenvolvida e aplicada na análise de uma coluna de bolhas planar. O modelo foi capaz de capturar com boa precisão o comportamento oscilatório da pluma de gás, bem como as frequências características de oscilação próximas a de outros trabalhos da literatura validando o modelo.

5. REFERÊNCIAS

BECH, K., Dynamic simulation of a 2D bubble column. *Chemical Engineering Science, v. 60.* (19), p. 5294-5304, 2005a.

<u>LES of a Rectangular Bubble Column.</u> Paper presented at the Fourth International Conference on CFD in the Oil and Gas, Metallurgical & Process Industries - SINTEF NTNU, Trondhein, Noruega, 2005b, 6-8 June.

BECKER, S., et al., Dynamic flow behaviour in bubble columns. *Chemical Engineering Science*, v. 54. (21), p. 4929-4935, 1999.

BECKER, S., *et al.*, Gas—liquid flow in bubble columns and loop reactors: Part II. Comparison of detailed experiments and flow simulations. *Chemical Engineering Science*, *v.* 49. (24, Part 2), p. 5747-5762, 1994.

BORCHERS, O., *et al.*, Applicability of the standard k–ε turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns. Part II:: Comparison of detailed experiments and flow simulations. *Chemical Engineering Science*, v. 54. (24), p. 5927-5935, 1999.

DELNOIJ, E., *et al.*, Dynamic simulation of dispersed gas-liquid two-phase flow using a discrete bubble model. *Chemical Engineering Science*, *v. 52.* (9), p. 1429-1458, 1997.

DREW, D. A., Mathematical flow modeling of two-phase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics, v. 15.* p. 261-291, 1983.



DREW, D. A., & PASSMAN, S. L. *Theory of multicomponent fluids*. New York: Springer, 1999.

ISHII, M., & MISHIMA, K., Two-fluid model and hydrodynamic constitutive relactions. *Nuclear Engineering and Design, v. 82.* p. 107-126, 1984.

PFLEGER, D., & BECKER, S., Modelling and simulation of the dynamic flow behaviour in a bubble column. *Chemical Engineering Science, v. 56.* (4), p. 1737-1747, 2001.

PFLEGER, D., *et al.*, Hydrodynamic simulations of laboratory scale bubble columns fundamental studies of the Eulerian-Eulerian modelling approach. *Chemical Engineering Science*, *v. 54*. (21), p. 5091-5099, 1999.

REZENDE, R. V. P. Modelagem Matemática e Desenvolvimento de Metodologia Computacional para a simulação do Escoamento Bifásico de ar e Ferro-Gusa em Canal de Corrida de Alto-Forno. Dissertação (Mestrado). Engenharia Mecânica, Universidade federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2008. xxx, 156 p.

____. *Modelo de Fechamento para o Tensor de Interface no Modelo de Dois Fluidos: Modelagem Matemática e Simulação.* Tese (Doutorado). Engenharia Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2014. 255 p.

REZENDE, R. V. P., et al. Modelo de Fechamento para Densidade de Força Interfcial do Modelo de Dois Fluidos sem Decomposição de Forças sobre a Interface. Paper presented at the COBEQ 2012, Buzios, Rj, 2012, Setembro, 2012.

SANADA, T., *et al.*, Motion and coalescence of a pair of bubbles rising side by side. *Chemical Engineering Science*, *v.* 64. (11), p. 2659-2671, 2009.

SATO, Y., *et al.*, Momentum and heat transfer in two-phase bubble flow—I. Theory. *International Journal of Multiphase Flow, v. 7.* (2), p. 167-177, 1981a.

____, Momentum and heat transfer in two-phase bubble flow—II. A comparison between experimental data and theoretical calculations. *International Journal of Multiphase Flow, v. 7.* (2), p. 179-190, 1981b.

SATO, Y., & SEKOGUCHI, K., Liquid velocity distribution in two-phase bubble flow. *International Journal of Multiphase Flow, v. 2.* (1), p. 79-95, 1975.

SMAGORINSKY, J., General Circulation Experiments With the Primitive Equations. *Monthly Weather Review, v. 91.* (3), p. 99 -164, 1963.

SOKOLICHIN, A., & EIGENBERGER, G., Gas—liquid flow in bubble columns and loop reactors: Part I. Detailed modelling and numerical simulation. *Chemical Engineering Science*, v. 49. (24, Part 2), p. 5735-5746, 1994.

____, Applicability of the standard k– ϵ turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns: Part I. Detailed numerical simulations. *Chemical Engineering Science, v.* 54. (13–14), p. 2273-2284, 1999.

VIKAS, V., *et al.*, Modeling of bubble-column flows with quadrature-based moment methods. *Chemical Engineering Science*, *v. 66.* (14), p. 3058-3070, 2011.

ZHANG, D., *et al.*, Numerical simulation of the dynamic flow behavior in a bubble column: A study of closures for turbulence and interface forces. *Chemical Engineering Science*, *v*. *61.* (23), p. 7593-7608, 2006.