



COPPE/UFRJ

SIMULAÇÃO FLUIDODINÂMICA DE EVAPORADORES POR CONTATO
DIRETO

Fábio Pereira de Aguiar Barros

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Rio de Janeiro

Março de 2009

SIMULAÇÃO FLUIDODINÂMICA DE EVAPORADORES POR CONTATO
DIRETO

Fábio Pereira de Aguiar Barros

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Aprovada por:

Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Prof. Cristiano Piacsek Borges, D.Sc.

Dr. Flávio Barboza Campos, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MARÇO DE 2009

Barros, Fábio Pereira de Aguiar

Simulação Fluidodinâmica de Evaporadores por Contato Direto/Fábio Pereira de Aguiar Barros. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2009.

XIV, 121 p.: il.; 29, 7cm.

Orientador: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Química, 2009.

Referências Bibliográficas: p. 112 – 121.

1. Evaporação por Contato Direto. 2. Transferência de Calor e Massa. 3. Simulação Fluidodinâmica. 4. Escoamento multifásico. I. Lage, Paulo Laranjeira da Cunha. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

SIMULAÇÃO FLUIDODINÂMICA DE EVAPORADORES POR CONTATO
DIRETO

Fábio Pereira de Aguiar Barros

Março/2009

Orientador: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Programa: Engenharia Química

Simulações fluidodinâmicas de evaporadores por contato direto (ECD) foram realizadas para um sistema ar-água. Campos de escoamento transientes e tridimensionais, em colunas de borbulhamento com geometria cilíndrica, foram considerados. O software CFX 11.0 da ANSYS foi utilizado. Um modelo disponível na literatura para a transferência simultânea de calor e massa durante a formação e ascensão de bolhas superaquecidas, em uma coluna quiescente de líquido, foi utilizado para determinar os coeficientes de transporte de calor e massa na fase gasosa e, incluir os efeitos de transporte de calor e massa entre as fases, durante a formação, na simulação do ECD. A partir da literatura pesquisada foi possível verificar que a incorporação da etapa de formação de bolhas na simulação do ECD, nunca foi realizada. Os resultados das simulações foram comparados com dados experimentais reportados na literatura. A retenção gasosa global e os processos de transferência de calor e massa entre as fases foram corretamente preditos pela modelagem utilizada. Entretanto, verificou-se que alguns ajustes na modelagem, como por exemplo a descrição real do distribuidor de gás, são necessários a fim de prever com maior precisão o comportamento hidrodinâmico médio na coluna.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

FLUID DYNAMIC SIMULATIONS OF DIRECT CONTACT EVAPORATORS

Fábio Pereira de Aguiar Barros

March/2009

Advisor: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Department: Chemical Engineering

Fluid dynamics simulations were performed for the direct contact evaporation process of a air-water system. The calculations were carried out for transient, three-dimensional flow fields in a cylindrical bubble column. The commercial code CFX 11.0 from ANSYS was used in this work. The heat and mass transfer coefficients were determined from a model, from the literature, for simultaneous heat and mass transfer during the formation and ascension of superheated bubbles. This model was also used to include the heat and mass transfer during the formation in fluid dynamics simulations of direct contact evaporation processes. From the literature review, this effect has never been accounted for before. The results of the fluid dynamics simulation were compared with existing experimental data. The obtained results showed that the modeling used in this work was appropriate to describe the global gas hold-up in the column and the heat and mass transfer processes between liquid and gas phases. However, the results also showed that the model used in this work needs some adjustments to properly describes the average hydrodynamic flow in the column.

Sumário

Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xiii
1 Introdução e Objetivos	1
1.1 Contexto e Motivação	1
1.2 Objetivo	3
2 Revisão Bibliográfica	5
2.1 Evaporação por Contato Direto	5
2.2 Caracterização da Hidrodinâmica do Evaporador por Contato Direto	7
2.2.1 O Processo de Borbulhamento	7
2.2.2 O Padrão de Escoamento	8
2.2.3 Aspectos Hidrodinâmicos Importantes	8
2.2.4 Regimes de Borbulhamento	9
2.3 Simulação Fluidodinâmica Aplicada a Colunas de Borbulhamento . .	10
2.4 Transferência de Calor e Massa em Colunas de Borbulhamento	15
2.4.1 Coeficiente de Transferência de Calor e Massa na Fase Líquida	15
2.4.2 Coeficiente de Transferência de Calor e Massa na Fase Gasosa	16
2.4.3 Modelos Termofluidodinâmicos	17
3 Modelagem Matemática	18
3.1 Introdução	18
3.2 Modelo Euleriano	19
3.2.1 Conservação de Massa e Espécie	19
3.2.2 Conservação de Quantidade de Movimento	20

3.2.3	Modelagem da Força de Arrasto	21
3.2.4	Modelagem da Turbulência	24
3.2.5	Conservação de Energia	26
3.2.6	Modelagem da Densidade de Área Interfacial	27
3.2.7	Condições Iniciais e de Contorno	28
3.2.8	Procedimento Numérico	29
3.3	Modelo Lagrangeano	29
3.3.1	Condições de Contorno	30
3.3.2	Procedimento Numérico para a Resolução do Modelo Lagrangeano	31
3.4	Modelo Simplificado para a Transferência de Calor e Massa no Interior de Bolhas Superaquecidas	32
3.4.1	Introdução	32
3.4.2	Formulação Matemática	33
3.4.3	Coeficiente de Transferência de Calor e Massa na Fase Gasosa	34
3.4.4	Procedimento Numérico para a resolução do Modelo Simplificado	36
3.5	Cálculo das Propriedades Físicas	36
3.6	Acoplamento entre os Modelos Euleriano e Lagrangeano	37
3.6.1	Introdução	37
3.6.2	Etapa de Formação das Bolhas	38
3.6.3	Etapa de Ascensão das Bolhas	40
3.7	Implementação da Transferência de Calor e Massa no CFX 11.0 da ANSYS	41
3.7.1	Introdução	41
3.7.2	Linearização da Equação para o Cálculo da Temperatura Interfacial	42
4	Resultados e Discussão	45
4.1	Introdução	45
4.2	Estudo da Transferência de Calor e Massa Durante a Formação e Ascensão de uma Bolha Superaquecida em uma Coluna de Líquido	45
4.3	Simulações Fluidodinâmicas	62

4.3.1	Introdução	62
4.3.2	Dados Experimentais	63
4.3.3	Dados para a Simulação Fluidodinâmica	66
4.3.4	Geometria e Malhas de Discretização	67
4.3.5	Implementação Numérica	69
4.3.6	Estudo da Convergência em Malha	72
4.3.7	Estudo da Hidrodinâmica: Condição 1	75
4.3.8	Estudo da Hidrodinâmica: Condição 2	83
4.3.9	Estudo da Transferência de Calor e Massa: Condição 1	89
4.3.10	Estudo da Transferência de Calor e Massa: Condição 2	98
5	Conclusões e Sugestões	107
5.1	Resumo e Conclusões	107
5.2	Sugestões	111
	Referências Bibliográficas	112

Lista de Figuras

2.1	Fotografia do escoamento em regime homogêneo (a) e em regime heterogêneo (b) em colunas de borbulhamento. Imagens extraídas de RODRIGUES [1] para uma coluna de borbulhamento de vidro com 7,3 cm de diâmetro e distribuidor tipo prato perfurado de aço inoxidável.	9
4.1	Evolução temporal da temperatura adimensional para os casos 1 a 3 (a) e 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE [2].	48
4.2	Evolução temporal do grau de saturação para os casos 1 a 3 (a) 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE [2].	49
4.3	Evolução temporal da média volumétrica da velocidade radial dentro da bolha para o modelo de CAMPOS e LAGE [2].	50
4.4	Evolução temporal do coeficiente de transferência de calor para os casos 1 a 3 (a) 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE [2]. . .	52
4.5	Evolução temporal do coeficiente de transferência de massa para os casos 1 a 3 (a) 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE [2]. . .	53
4.6	Evolução temporal do raio da bolha para os casos 1 a 3 (a) 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE [2].	54
4.7	Comparação entre os comportamentos do grau de saturação nas etapas de formação (a) e ascensão (b), para o modelo simplificado e o modelo detalhado de CAMPOS e LAGE. [2].	58
4.8	Comparação entre os comportamentos da temperatura adimensional nas etapas de formação (a) e ascensão (b), para o modelo simplificado e o modelo detalhado de CAMPOS e LAGE [2].	59

4.9	Comparação entre os comportamentos do raio da bolha nas etapas de formação (a) e ascensão (b) para o modelo simplificado e o modelo detalhado de CAMPOS e LAGE. [2].	60
4.10	Evolução temporal da temperatura da fase líquida (a) e da taxa mássica de água evaporada (b) em um ECD operando em quatro velocidades diferentes de injeção de ar na coluna (U_g) (extraído de RIBEIRO JR.e LAGE [3]).	64
4.11	Detalhes da geometria e malha (47.259 mil nós) utilizada na simulação fluidodinâmica do ECD.	69
4.12	Condições de contorno impostas nas simulações Eulerianas.	71
4.13	Gráficos de contorno no plano YZ ($X=0$) para a retenção gasosa. Resultados para três malhas distintas, M_{11} , M_{21} e M_{31} e para 1 s de simulação. No gráfico a unidade de z está em metros.	73
4.14	Perfis de retenção gasosa (a) e velocidade axial da fase líquida (b) em 1 s de simulação, sobre uma linha localizada no plano YZ ($X=0$ e $Z=17$ cm).	74
4.15	Gráficos de contorno para a retenção gasosa no plano YZ ($X=0$) para instantes de simulação iguais a 1; 4,2; 6,3; 8,1; 10,3 s.	76
4.16	Gráfico de contorno para a retenção gasosa no instante de tempo igual a 10,3 s e vetores de velocidade superficial da fase líquida, ambos sobre o plano YZ ($X=0$).	77
4.17	Gráficos de contorno para a retenção gasosa no plano YZ ($X=0$) para instantes de simulação iguais a 26; 30,5 e 96,5 s, e também para a média temporal da retenção gasosa.	78
4.18	Perfil de retenção gasosa sobre uma linha localizada no plano YZ ($X=0$) a 16 cm (a) e 26 cm (b) de altura.	80
4.19	Perfis da média temporal da retenção gasosa no plano XZ ($Y= 2,5$ cm) localizados a 16 e 26 cm da base. Resultados obtidos para a Condição 1 (Tabela 4.10).	81
4.20	Perfis do coeficiente de arrasto, calculado segundo o modelo de ISHII e ZUBER [4], e da retenção gasosa local, sobre uma linha localizada no plano YZ ($X=0$) localizada a 16 cm da base.	85

4.21	Gráficos de contorno para a retenção gasosa no plano YZ ($X=0$) para diferentes tempos de simulação.	86
4.22	Vetores de velocidade superficial da fase líquida no plano XY ($Z= 16$ cm) para diferentes instantes de tempo de simulação.	87
4.23	Gráficos de contorno para a retenção gasosa média temporal no plano XY para $Z=5, 16$ e 25 cm (a) e perfis da média temporal da retenção gasosa sobre uma linha localizada no plano YZ ($X=0$) em $Z=16$ cm (b).	88
4.24	Variação temporal da retenção gasosa média em um subvolume cilíndrico, cuja base se encontra no plano XY ($Z=5$ cm) e o topo no plano XY ($Z=20$ cm).	89
4.25	Campo inicial de pressão e fração de fase gasosa para a simulação do ECD incluindo os processos de transporte de calor e massa entre as fases.	91
4.26	Gráficos de contorno para a temperatura da fase gasosa no plano YZ ($X=0$) para diferentes tempos de simulação.	92
4.27	Gráficos de contorno para a fração mássica de água na fase gasosa no plano YZ ($X=0$) para diferentes tempos de simulação	92
4.28	Evolução temporal na saída da coluna das temperaturas das fases gasosa e líquida (a) e das frações mássicas de água na fase gasosa e de saturação de vapor de água (b).	94
4.29	Gráficos de contorno no plano YZ ($X=0$), ampliado na região da base da coluna, para a fração mássica de água na fase gasosa e temperatura da fase gasosa. Tempo de simulação igual a 10 s.	95
4.30	Gráficos de contorno no plano YZ ($X=0$), ampliados na região da base da coluna, para a fração mássica de água na fase gasosa e temperatura da fase gasosa. Simulação fluidodinâmica no qual foram desconsiderados os efeitos de troca de calor e massa na etapa de formação. Tempo de simulação igual a 10 s.	96
4.31	Campos iniciais de pressão e retenção gasosa para a simulação do ECD incluindo os processos de transporte de calor e massa entre as fases (plano YZ ($X=0$) com corte na altura $Z=30$ cm).	99

4.32	Gráficos de contorno para a retenção gasosa e para a temperatura da fase gasosa, no plano YZ ($X=0$), em diferentes tempos de simulação. .	100
4.33	Gráficos de contorno para a retenção gasosa e para a fração mássica de água na fase gasosa, no plano YZ ($X=0$) em diferentes instantes de simulação.	101
4.34	Evolução temporal em um plano XY ($Z=29$ cm) das temperaturas das fases gasosa e líquida (a) e das frações mássicas de água na fase gasosa e de saturação de vapor de água (b).	103
4.35	Gráficos de contorno para a fração mássica de água na fase gasosa e temperatura da fase gasosa no instante igual a 7 s (ampliação para uma região localizada nas proximidades da base da coluna).	104
4.36	Gráficos de contorno para a fração mássica de água na fase gasosa e temperatura da fase gasosa no instante igual a 7 s (ampliação para uma região localizada nas proximidades da base da coluna). Simulação na qual foram desconsiderados os efeitos da etapa de formação. .	104
4.37	Variação temporal da retenção gasosa média em um subvolume cilíndrico cuja base se encontra no plano XY ($Z= 5$ cm) e o topo no plano XY ($Z= 20$ cm). Resultados para as simulações com ou sem os processos de transporte de calor e massa entre as fases.	106

Lista de Tabelas

3.1	Valores dos parâmetros do modelo $k - \epsilon$	26
4.1	Condições fixas para a simulação da formação e ascensão de uma bolha em uma coluna de líquido	46
4.2	Temperatura da fase líquida e de injeção de gás na coluna	46
4.3	Valores máximo e mínimo para os coeficientes de transferência de calor 56	
4.4	Valores médios para os coeficientes de transferência de calor (média aritmética), desvio-padrão (DP) e coeficiente de variação (CV)	56
4.5	Valores máximo e mínimo para os coeficientes de transferência de massa 57	
4.6	Valores médios para os coeficientes de transferência de massa (média aritmética), desvio-padrão (DP) e coeficiente de variação (CV)	57
4.7	Erros entre os valores preditos pelo modelo simplificado e modelo completo para α_{sat}	61
4.8	Erros entre os valores preditos pelo modelo simplificado e modelo completo para T_{ad}	61
4.9	Condições experimentais para a simulação fluidodinâmica do ECD	66
4.10	Condições para as simulações fluidodinâmicas	67
4.11	Características geométricas das colunas utilizadas nas simulações fluidodinâmicas	68
4.12	Números de nós das malhas utilizadas nas simulações fluidodinâmicas 69	
4.13	Temperatura da fase líquida e de injeção de gás na coluna	83
4.14	Taxas mássicas totais nas etapas de formação e ascensão para 10 s de simulação	97
4.15	Valores experimentais e simulado para a retenção gasosa global na coluna (condição 1)	98

4.16 Valores experimentais e simulados para a retenção gasosa global na coluna (condição 2)	105
--	-----

Capítulo 1

Introdução e Objetivos

1.1 Contexto e Motivação

Do ponto de vista das operações unitárias, a evaporação pode ser definida como um processo de separação por aquecimento que envolve a remoção, mediante vaporização, do solvente em uma solução, a fim de obter-se um produto final mais concentrado [5].

Os evaporadores, equipamentos nos quais ocorre a evaporação, podem ser classificados em relação ao modo como a energia, na forma de calor, é transferida do fluido de aquecimento para a solução evaporante. Em geral, a transmissão de calor se dá de forma indireta, ou seja, um meio separa a solução evaporante do fluido de aquecimento. A transmissão de calor também pode ser efetuada de forma direta, ou seja, a partir da mistura da solução evaporante e do fluido de aquecimento. Equipamentos que operam desta última forma são denominados evaporadores por contato direto (ECD).

Nos ECDs, o contato entre os fluidos se dá por meio do gotejamento ou borbulhamento de um dos fluidos, denominado fase dispersa, no interior do outro fluido, denominado fase contínua. Colunas de borbulhamento (CB) são equipamentos nos quais um dado gás é borbulhado em uma coluna, quiescente ou não, de líquido. Quando o borbulhamento se dá com gás superaquecido tem-se a CB operando como ECD, ou seja, o ECD é uma coluna de borbulhamento não-isotérmica.

O ECD possui características que tornam a sua aplicação atraente em diversos processos industriais, dentre as quais destacam-se: facilidade de construção e opera-

ção, obtenção de altas áreas interfaciais para os fluxos de calor e massa, ausência de problemas de selagem devido à ausência de partes móveis, versatilidade de operação e facilidade no controle de temperatura. Além disso, o equipamento é compacto, ou seja, não ocupa uma grande área no chão de fábrica. Finalmente, devido a sua simplicidade operacional, a possibilidade de ocorrência de falhas é reduzida, bem como são reduzidos os tempos de parada necessários para a limpeza e manutenção [6]. Tais características têm promovido a disseminação do ECD em diversos processos industriais, com fortes perspectivas de aplicação na indústria alimentícia [6].

Apesar da simplicidade de operação e construção o projeto de uma CB, e por conseguinte de um ECD é, ainda hoje, um desafio, visto que a hidrodinâmica reinante no equipamento é complexa e dependente das características geométricas e operacionais da coluna e das propriedades físicas dos fluidos. Desta forma, durante muitos anos, o projeto da CB ficou restrito a modelos limitados por hipóteses simplificadoras e com um alto grau de empirismo [7].

Recentemente, com o advento da fluidodinâmica computacional, modelos foram propostos para descrever de forma mais detalhada o padrão de escoamento em colunas de borbulhamento. Diversos autores têm investigado a utilização da simulação fluidodinâmica para o projeto e *scale-up* de colunas de borbulhamento e o seu potencial em descrever adequadamente o escoamento tem sido corroborado por todos [7, 8, 9, 10, 11]. Por possibilitar uma descrição mais detalhada do escoamento, a simulação fluidodinâmica torna possível a realização de projetos mais precisos e confiáveis.

A simulação fluidodinâmica da CB é um campo vasto no qual ainda há muito para ser investigado. Os desafios estão relacionados à modelagem da turbulência, da transferência de calor e massa, das forças de interação entre as fases e da modelagem dos fenômenos de quebra e coalescência das bolhas [12].

Uma dos motivos que impedem a direta aplicação dos códigos CFD (comerciais ou não) na simulação do processo de evaporação por contato direto é a multitude de escalas de tamanho existentes no processo. Particularmente, o efeito dos grandes gradientes que afetam o transporte de calor e massa no interior das bolhas em formação não está incorporado aos códigos existentes para simulações de escoamentos bifásicos do tipo Euleriana-Euleriana, os quais consideram que as bolhas

são instantaneamente formadas no equipamento. Embora métodos de acompanhamento de fronteira livre possam ser modificados para incorporar a transferência de calor e massa pela interface das fases, isso tem que ser feito juntamente com a resolução das escalas do escoamento turbulento da fase contínua, requerendo um enorme esforço computacional. Há portanto, a necessidade de se incorporar modelos para a transferência simultânea de calor e massa entre as fases, durante as etapas de formação e ascensão de bolhas, em simulações bifásicas com modelos do tipo Euleriano-Euleriano.

RODRIGUES [1] incorporou os efeitos da transferência de massa entre as fases líquida e gasosa, na etapa de formação de bolhas, na simulação fluidodinâmica de uma coluna esgotadora de aromas. Ele obteve sucesso na metodologia aplicada para a inclusão da etapa de formação, de forma que encorajou a aplicação da mesma metodologia na simulação fluidodinâmica de uma coluna de borbulhamento não-isotérmica, ou seja, um evaporador por contato direto, o qual é o objetivo da presente dissertação.

1.2 Objetivo

O presente trabalho apresentou como objetivo geral, a simulação fluidodinâmica do processo de evaporação por contato direto em colunas de borbulhamento operando em regime homogêneo, incorporando, pela primeira vez, os efeitos de transferência de calor e massa durante a formação das bolhas. A fim de atingir o objetivo geral, duas etapas específicas tiveram que ser realizadas:

- Estudo da transferência de calor e massa entre as fases líquida e gasosa para avaliar a utilização de valores médios e constantes dos coeficientes de transporte de calor e massa internos à bolha, na simulação fluidodinâmica de evaporadores por contato direto.
- Simulação fluidodinâmica utilizando o software comercial CFX 11.0 da ANSYS, incluindo os fluxos mássico e de calor nas etapas de formação e ascensão das bolhas.

Os resultados das simulações fluidodinâmicas foram comparados com os dados experimentais obtidos por RIBEIRO JR. e LAGE [3] no Laboratório de Termofluido-

dinâmica, do Programa de Engenharia Química, do Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia da Universidade Federal do Rio de Janeiro.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Evaporação por Contato Direto

Conforme citado anteriormente, o ECD é em uma coluna de borbulhamento operando de forma não-isotérmica. O equipamento é de simples construção, tratando-se de uma coluna de líquido no qual borbulha-se gás superaquecido. Na base do equipamento encontra-se um dispositivo denominado distribuidor, onde são formadas as bolhas. Os distribuidores são constituídos por tubos perfurados ou placas metálicas perfuradas ou porosas [3].

Na operação do ECD, durante a passagem das bolhas, existe um fluxo natural de energia do interior da bolha para a sua superfície, o qual geralmente contribui com a maior fração do total de energia recebida pelo líquido. O restante é transferido pelo sistema de distribuição de gás na base da coluna. A energia da bolha pode ser transmitida tanto na forma de calor sensível, ocasionando um aumento de temperatura da fase líquida, quanto na forma de calor latente, promovendo a vaporização e gerando por conseguinte, um fluxo mássico de evaporado da superfície para o interior da bolha. A distribuição de energia entre as duas formas de transmissão depende da composição e da temperatura do líquido, uma vez que a quantidade do componente i passível de evaporação é proporcional a pressão de saturação de i na interface gás-líquido [13]. Consequentemente, quanto maior a temperatura da fase contínua, maior será a fração da energia total usada na vaporização, até que seja alcançada uma temperatura de equilíbrio, na qual quase toda a energia transmitir-se-á ao líquido como calor latente, sendo o transporte de calor sensível responsável

apenas pela compensação das perdas térmicas do equipamento. Se a concentração do componente i na fase líquida for grande, a fração da energia total disponibilizada para a vaporização, também neste caso, será maior, visto que a diferença entre a concentração (ou pressão parcial) do componente nas fases gasosa e líquida aumenta.

A ausência de superfície separando os fluidos é uma característica importante no ECD, o contato direto entre os fluidos permite alcançar eficiências de transmissão de calor da ordem de 95% [14]. Isto ocorre porque não há resistência à transferência de calor associada às paredes metálicas. A elevada eficiência de troca térmica pode ser verificada pela diferença de temperatura entre líquido e gás na saída do equipamento, a qual, em geral, varia de 2 a 5 °C [15, 16].

Ao contrário do que ocorre com os evaporadores tradicionais, no ECD não há redução gradual da eficiência de troca térmica em virtude de incrustações ou corrosão, o que possibilita o uso do mesmo na concentração de soluções corrosivas e/ou incrustantes [17].

A aplicação industrial de ECDs é uma realidade. O equipamento tem sido utilizado para concentrar soluções de ácido sulfúrico [15], soda cáustica, sulfato de alumínio, cloreto férrico [18], ácido fosfórico [19], sulfato de sódio, cloreto de cálcio, cloreto de magnésio e ortofosfatos [20].

O tratamento de soluções termolábeis é uma aplicação interessante para o ECD [21], uma vez que a evaporação ocorre a temperaturas bem mais baixas do que a temperatura de ebulição na pressão do sistema. Além disso, pontos de superaquecimento são praticamente eliminados devido à vigorosa agitação resultante do borbulhamento, o qual mantém a temperatura no equipamento praticamente uniforme. Tais características potencializam a aplicação dos ECDs na indústria alimentícia. Alguns exemplos podem ser citados, tais como: concentração de leite [22], concentração de soluções salinas para fabricação de pepinos em conserva [23], soluções aquosas de proteínas de peixe [21] e, mais recentemente, de sucos de frutas [24].

É preciso ressaltar, que por operar com contato direto entre os fluidos, a possibilidade de contaminação deve ser considerada. Na verdade a contaminação da fase gasosa é o grande “gargalo” que dificulta a disseminação do ECD no meio industrial, principalmente no ramo alimentício. Portanto, ou a contaminação é eliminada, o que limita a aplicação do processo a produtos com alto valor agregado, ou pode ser

tolerada, neste caso poderiam ser utilizados gases de exaustão que reduziriam consideravelmente o custo do processo. Para viabilizar a mistura, as correntes devem operar a pressões próximas, o que pode acarretar em custos adicionais ao processo [25]. Dependendo da tensão superficial da solução, o borbulhamento pode levar a formação intensa de espuma, podendo inviabilizar a operação do equipamento [18]. Em alguns casos, o arraste de líquido pelo gás borbulhado pode ser muito expressivo, de 10 a 100 vezes maior que nos evaporadores tradicionais [26].

2.2 Caracterização da Hidrodinâmica do Evaporador por Contato Direto

2.2.1 O Processo de Borbulhamento

O processo de borbulhamento consiste na geração de bolhas em orifícios submersos e pode ser dividido em duas etapas: formação e ascensão. Na etapa de formação, a bolha presa ao orifício do distribuidor cresce continuamente até que seja alcançado um certo volume crítico, quando ocorre então, o desprendimento da bolha. Após o desprendimento, a bolha inicia o seu movimento através da fase líquida em direção ao topo da coluna, o que corresponde à etapa de ascensão. Clift et al. [27] definem mais duas etapas, a de desprendimento, na qual há brusca mudança nas condições fluidodinâmicas internas, devido ao término da injeção, e a de afloramento, na qual a bolha desaparece após atingir o topo da coluna de líquido.

Embora a etapa de ascensão represente boa parte do tempo de residência da bolha no ECD, estudos experimentais evidenciam a importância da etapa de formação no processo de evaporação por contato direto [28, 29, 30, 31].

No evaporador, o intervalo de tempo necessário para se alcançar o regime pseudo-permanente, no qual algumas variáveis tais como a temperatura da fase líquida e a taxa mássica de evaporação permanecem constantes, é da ordem de horas. Por outro lado, o tempo de residência da bolha no equipamento é da ordem de segundos. Portanto, uma decomposição de escala temporal pode ser efetuada na modelagem e simulação do equipamento [32].

Evidências experimentais e estudos teóricos indicam que a resistência aos pro-

cessos de transmissão de calor e massa é maior na fase gasosa [33, 34, 28]. Portanto, negligenciar tal resistência pode levar a erros consideráveis no cálculo dos fluxos de calor e massa entre as fases [1].

2.2.2 O Padrão de Escoamento

O escoamento em colunas de borbulhamento é caracterizado por um amplo espectro de flutuações de velocidade e existência de vórtices de diferentes tamanhos. Evidências experimentais [35, 36] mostram que o escoamento em colunas de borbulhamento é dinâmico e caótico, ou seja, nunca alcança o estado estacionário. Portanto, o escoamento em colunas de borbulhamento é altamente complexo e requer modelos tridimensionais para reproduzir detalhes de sua estrutura.

O padrão de escoamento em colunas de borbulhamento é o resultado de uma multitude de fatores os quais surgem a partir do movimento individual de cada fase. Uma das razões para esta complexidade é a presença da fase gasosa na fase líquida, a qual causa a variação espacial do perfil de densidade da mistura bifásica, que promove, por sua vez, a variação do perfil de pressão, resultando, portanto, em um intenso movimento da fase líquida. Zonas de circulação são geradas em virtude do conjunto ascendente de bolhas, ou seja, ao alcançar o topo, a fase líquida arrastada pela fase gasosa, retorna para base da coluna.

2.2.3 Aspectos Hidrodinâmicos Importantes

Dois aspectos hidrodinâmicos da coluna de borbulhamento são de suma importância e estão diretamente relacionados: o regime de borbulhamento e a retenção gasosa (r_g).

O regime de borbulhamento é função primordial da velocidade superficial do gás e afeta diretamente os processos de transmissão de calor e massa [37, 38]. A retenção gasosa, definida como a fração de gás na mistura, é utilizada no cálculo do tempo de residência da fase dispersa e, juntamente com o diâmetro médio das bolhas, permite a determinação da área interfacial, sendo, portanto, um parâmetro-chave do equipamento [39, 40].

2.2.4 Regimes de Borbulhamento

Durante a operação do ECD existem dois regimes principais de borbulhamento: homogêneo e heterogêneo. O regime homogêneo de borbulhamento caracteriza-se pela presença de bolhas pequenas, com pouca variação de tamanho, que ascendem ao longo de uma trajetória praticamente vertical com pequenas oscilações transversais. Há pouca interação entre as bolhas e os fenômenos de quebra e coalescência são pouco pronunciados[41]. Neste regime, o tamanho das bolhas e a retenção gasosa dependem das características do distribuidor, das propriedades físicas do sistema gás-líquido e da altura da coluna de líquido [6]. Reações químicas e processos de transferência de calor e massa também influenciam o tamanho da bolha.

Com o aumento da velocidade superficial, tanto a frequência de formação quanto o diâmetro médio das bolhas aumentam, de forma que a distância média que separa as mesmas diminui, favorecendo a ocorrência dos fenômenos de quebra e coalescência, levando a uma grande variedade de tamanho de bolhas [42]. O equipamento passa assim a operar no regime heterogêneo. Neste caso, a distribuição de tamanhos de bolhas no seio do líquido difere totalmente daquela gerada pelo distribuidor, o qual, portanto, tem a sua importância reduzida [6]. Neste regime, a trajetória de ascensão das bolhas torna-se completamente irregular. Na Figura 2.1 são apresentadas duas fotografias para o regime de borbulhamento homogêneo e heterogêneo em colunas de borbulhamento.

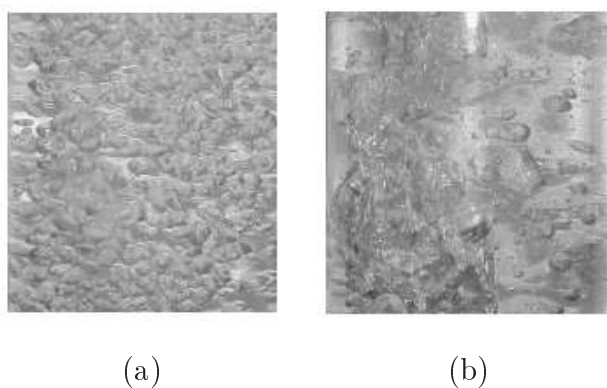


Figura 2.1: Fotografia do escoamento em regime homogêneo (a) e em regime heterogêneo (b) em colunas de borbulhamento. Imagens extraídas de RODRIGUES [1] para uma coluna de borbulhamento de vidro com 7,3 cm de diâmetro e distribuidor tipo prato perfurado de aço inoxidável.

A transição entre os regimes de borbulhamento não é um evento brusco, ocorrendo de forma gradual. Visualmente, a transição é indicada pela formação de uma pluma de bolhas coalescidas na região central da coluna. RIBEIRO JR. [6] fez uma extensa revisão da literatura à respeito do limite entre os regimes de operação e a sua dependência com os parâmetros de projeto do equipamento, das variáveis operacionais e das propriedades físico-químicas das duas fases.

2.3 Simulação Fluidodinâmica Aplicada a Colunas de Borbulhamento

Existem duas abordagens muito empregadas na simulação fluidodinâmica de escoamentos multifásicos, a saber: a abordagem Lagrangeana e a Euleriana. Enquanto a fase contínua é sempre modelada segundo a abordagem Euleriana, a fase dispersa pode ser modelada utilizando a abordagem Lagrangeana (com acompanhamento de partículas individuais ou grupos de partículas) ou como uma ou mais fases contínuas adicionadas (abordagem Euleriana).

A abordagem Lagrangeana para a simulação do escoamento multifásico com acoplamento bidirecional, necessita da solução simultânea das equações de conservação da fase contínua, na forma Euleriana, e das equações correspondentes à forma Lagrangeana para dezenas de milhares de partículas. Assim, a abordagem Lagrangeana não é muito utilizada devido ao enorme esforço computacional envolvido. O custo computacional para a abordagem Lagrangeana com acompanhamento de grupos de bolhas é menor, entretanto a qualidade do resultado é prejudicada.

A abordagem Euleriana-Euleriana descreve todas as fases como contínuas [43], sendo também chamada de modelo mult fluido (modelo de dois fluidos no caso bifásico). Neste caso, o escoamento é resolvido por meio de equações médias de conservação para cada fase. As interações entre as fases são modeladas por meio de termos de transporte.

Diversos trabalhos teóricos e experimentais [35, 36] corroboram o comportamento caótico e dinâmico dentro da coluna de borbulhamento, ou seja, o estado estacionário nunca é atingido. O grupo do Prof. Svendsen da Universidade de Trondheim, na Noruega, pioneiro na aplicação da simulação fluidodinâmica a colunas de bor-

bulhamento, em uma série de trabalhos publicados nos anos 90 [44, 45, 46, 47, 48] não obteve sucesso em descrever a hidrodinâmica da coluna. Nestes trabalhos os autores desconsideraram o caráter transiente do escoamento e utilizaram geometrias axialmente simétricas e bidimensionais, fatores que contribuíram para o insucesso do modelo.

SOKOLICHIN e EIGENBERGER [8] e BECKER et al. [49] utilizaram um modelo de dois fluidos considerando as equações de conservação de massa e momento e os efeitos do arrasto, sustentação e massa virtual para interação entre as fases. O modelo foi aplicado para uma coluna de seção retangular com espessura fina, permitindo considerar geometria bidimensional. Os autores, realizaram então, simulações dinâmicas considerando em alguns casos escoamento turbulento na fase líquida. A partir destes trabalhos foi possível verificar que uma coluna de borbulhamento nunca atinge o estado estacionário e que o padrão de circulação na mesma pode ser obtido através da média temporal das variáveis nas células de cálculo da malha computacional utilizada. Determinaram ainda que o modelo $k - \epsilon$ introduz 100 vezes mais dissipação viscosa do que o necessário para simular os dados experimentais. A partir desta análise, os autores recomendaram a utilização de simulações dinâmicas laminares com a viscosidade da fase líquida ajustada aos dados experimentais.

SOKOLICHIN e EIGENBERGER [50] e BORCHERS et al. [51] utilizaram um modelo Euleriano em simulações dinâmicas tridimensionais, resolvendo equações do movimento para a mistura (*Algebraic Slip Model*), com ou sem turbulência, e a equação da continuidade para a fase gasosa com um termo de dispersão baseado na turbulência. A velocidade relativa entre as fases foi considerada constante. Os termos convectivos de todas as equações foram discretizados utilizando um esquema TVD (*Total Variation Diminishing*) de alta ordem. Os resultados obtidos pelos autores foram comparados com dados experimentais. Ao contrário do que foi obtido por SOKOLICHIN e EIGENBERGER [8], SOKOLICHIN e EIGENBERGER [50] e BORCHERS et al. [51] concluíram que as simulações laminares bidimensionais não eram independentes da malha, ou seja, o refinamento da malha resultava sempre em maior detalhamento do escoamento, o que é característica da existência de turbulência. Além disso, também concluíram que simulações bidimensionais levavam a escoamento estacionário, devido aos altos valores de dissipação viscosa obtidos pelo

modelo $k - \epsilon$, o que contrariou os resultados experimentais obtidos até então, os quais, conforme citado anteriormente, indicaram comportamento dinâmico para o escoamento em colunas de borbulhamento. Por fim, SOKOLICHIN, e EIGENBERGER [8] recomendaram o uso de esquemas TVD já que o *upwind* elimina o caráter dinâmico do escoamento. SOKOLICHIN e EIGENBERGER [50] e BORCHERS et al. [51] recomendaram também o uso de um esquema de alta ordem para todos os termos convectivos, o modelo $k-\epsilon$ para a turbulência e simulações tridimensionais transientes.

A recomendação de SOKOLICHIN e EIGENBERGER [50] em usar simulações tridimensionais transientes se mostrou apropriada e foi adotada em diversos trabalhos [52, 53, 54, 55]. MUDDE e SIMONIN [9] e PFLEGER et al.[10] também constataram a necessidade do uso de simulações tridimensionais transientes.

A modelagem das forças de interação entre as fases (arrasto, sustentação, massa virtual e dispersão turbulenta) é uma outra questão amplamente investigada na literatura [9, 10, 54]. Que forças utilizar e como modelá-las ainda são assuntos passíveis de investigação. A modelagem correta das forças interfaciais e da turbulência é de fundamental importância para a predição adequada da física do problema. JOSHI [7] fez uma extensa revisão dos modelos disponíveis para modelagem das forças interfaciais e reforçou a necessidade de se aprofundar as questões relativas a correta modelagem destas forças.

Recentemente, MANDAR et al. [56] verificou a importância de se escolher adequadamente a combinação entre tamanho de bolha e modelo para o cálculo da força de arrasto. Estes autores utilizaram sete modelos diferentes para calcular a força de arrasto e concluíram que os mesmos só conseguiam prever corretamente aspectos da hidrodinâmica global dentro de certos limites. As simulações foram realizadas para geometrias cilíndricas tridimensionais. Neste mesmo trabalho, os autores concluíram que a contribuição da força de massa virtual na simulação da hidrodinâmica local era insignificante porque os efeitos de aceleração e desaceleração são restritos a pequenas regiões nas extremidades da coluna. Tal fato é corroborado por SOKOLICHIN, EIGENBERGER e LAPIN [57]. Concluíram também, que o coeficiente de dispersão turbulenta possui papel importante na predição da hidrodinâmica local, além disso, observaram a importância de se considerar o coeficiente da força

de *lift* como função do tamanho da bolha (foram escolhidos dois valores distintos e constantes do coeficiente de lift baseados no trabalho de KULKARNI [58]).

Em contrapartida, no que tange ao comportamento da força de massa virtual, MUDDE e SIMONIN [9], utilizando uma simulação tridimensional transiente com termo de dispersão na equação de conservação de quantidade de movimento do gás, chegaram a conclusão de que a força de massa virtual é essencial para modelar o período de oscilação do escoamento de uma pluma de bolhas em uma coluna de seção retangular. O que reforça a recomendação de JOSHI [7] à respeito do aprofundamento das investigações da modelagem e aplicação das forças interfaciais na simulação fluidodinâmica de colunas de borbulhamento.

A existência ou não de um termo de dispersão de bolhas na equação de conservação de quantidade de movimento da fase gasosa é um ponto de discordância entre diversos autores, alguns o utilizaram [59, 53, 52] e outros não [60].

Há ainda a questão da existência de um termo de dispersão adicional na equação de conservação de massa da fase gasosa [61]. PFLEGER, GOMES e GILBERT [10] investigaram o uso do termo de dispersão na equação de conservação de massa do gás, e puderam concluir que o mesmo não era necessário.

DEEN, SOLBERG e HJERTAGER [54] conseguiram prever a dispersão tridimensional de uma pluma de bolhas. Os autores utilizaram um modelo Euleriano, a turbulência foi considerada usando-se o modelo LES (*Large Eddy Simulation*), um termo de dispersão tridimensional na equação de conservação de quantidade de movimento do gás foi utilizado, as forças de arrasto, *lift* (sustentação) e massa virtual foram consideradas. Os autores demonstraram que a força de *lift* foi essencial para modelar a dispersão das bolhas. Entretanto, conforme constatado por SOKOLICHIN, EIGENBERGER e LAPIN [57], ainda não existe uma base teórica sólida para a modelagem da força de *lift* e também não existem evidências experimentais claras a respeito de sua direção e magnitude. A utilização da força de *lift* está associada a um ajuste empírico da distribuição de gás a dados experimentais. Em seu trabalho, SOKOLICHIN e EIGENBERGER [57] consideraram somente a força de arrasto como fundamental para a simulação fluidodinâmica do escoamento em colunas de borbulhamento, devido às dificuldades então existentes sobre a modelagem das forças de massa virtual e *lift*, neste trabalho os autores ressaltaram que a mesma

pertence a um tipo de força que precisa de validação experimental.

Outro ponto bastante analisado [60, 59, 53, 52] é a importância da turbulência induzida por bolhas e se ela é melhor modelada através de um modelo de comprimento de mistura [62, 63] ou através de uma modificação do modelo $k - \epsilon$ [64, 65, 66].

PFLEGER, GOMES, GILBERT et al. [10] levantaram a hipótese da turbulência induzida por bolhas ser importante, neste trabalho usaram apenas o modelo $k - \epsilon$ padrão. Já PFLEGER e BECKER [52] usaram um modelo $k - \epsilon$ modificado para incluir a turbulência induzida por bolhas. A comparação com dados experimentais mostrou que os perfis de velocidade foram preditos corretamente enquanto que os de retenção gasosa não.

A turbulência induzida por cisalhamento é até hoje investigada, ou seja, a modelagem não se encontra completamente estabelecida. PAN, DUDUKOVIC e CHANG [60] incluíram um modelo [62] para a turbulência induzida por bolhas, mas nenhum para a turbulência induzida pelo cisalhamento, assumindo que para baixas velocidades superficiais de gás (menor que 3 cm s^{-1}) fosse possível resolver todas as escalas do escoamento. Resultados razoáveis foram obtidos. DEEN, SOLBERG e HJERTAGER [54] também usaram um modelo para turbulência induzida por bolhas [62] e compararam a utilização do modelo $k - \epsilon$ com o modelo LES (*Large Eddy Simulation*) de SMAGORINSKI [67] para modelar a turbulência da fase líquida. Os autores concluíram que o impacto da turbulência induzida por bolhas na modelagem era pequeno.

A respeito da turbulência induzida pelo cisalhamento, o modelo $k - \epsilon$ dá bons resultados [50], mas por vezes impede a resolução de algumas escalas do escoamento, conforme relatado por DEEN, SOLBERG e HJERTAGER [54]. Recentemente, MANDAR et al. [56] analisaram os seguintes modelos para a turbulência, a saber: o modelo $k - \epsilon$, RSM (*Reynolds Stress Modeling*) e LES (*Large Eddy Simulation*). Os autores concluíram que para obter informações médias do escoamento no modelo tridimensional deve-se preferir o modelo $k - \epsilon$, pois os modelos RSM e LES não apresentaram ganhos significativos na predição do escoamento, além do maior esforço computacional envolvido. Para a avaliação das propriedades instantâneas, os autores recomendaram o modelo de turbulência LES.

2.4 Transferência de Calor e Massa em Colunas de Borbulhamento

RODRIGUES [1] estudou o aumento de escala do processo de esgotamento de aromas em colunas de borbulhamento, utilizando fluidodinâmica computacional. Este foi o primeiro trabalho na literatura a incluir, na simulação fluidodinâmica de colunas de borbulhamento, os efeitos de transporte de massa entre as fases na etapa de formação. Ao contrário do que vinha sendo realizado por outros autores, RODRIGUES [1] não considerou a bolha instantaneamente formada no equipamento, o que representa uma séria restrição presente nos outros modelos da literatura. Ele utilizou o modelo Lagrangeano proposto por RIBEIRO JR, BORGES e LAGE [68] para incorporar os efeitos de transferência de massa na etapa de formação na simulação da coluna. Os resultados das simulações apresentaram excelente concordância com os dados experimentais reportados por RIBEIRO JR, BORGES e LAGE [24], o que validou a metodologia utilizada em seu trabalho.

Na abordagem Euleriana-Euleriana para a simulação fluidodinâmica de colunas de borbulhamento, a modelagem dos termos de transporte de calor e massa entre as fases é feita, via de regra, com a utilização de coeficientes de transferência de calor e massa em cada uma delas.

2.4.1 Coeficiente de Transferência de Calor e Massa na Fase Líquida

São diversas as metodologias disponíveis para a obtenção do coeficiente de transferência de calor e massa na fase líquida. Os procedimentos envolvem soluções da teoria da camada limite, soluções numéricas e correlações empíricas. Existe na literatura uma gama de correlações empíricas para o cálculo destes coeficientes, RIBEIRO R. [6] realizou uma extensa revisão sobre correlações disponíveis para o cálculo dos coeficientes de transporte de calor e massa na fase líquida.

2.4.2 Coeficiente de Transferência de Calor e Massa na Fase Gasosa

No caminho oposto do que ocorre com a fase líquida, não existe na literatura um conjunto significativo de correlações para os coeficientes de transporte na fase gasosa. IGUCHI et al. [33] e FILLA et al. [69] obtiveram valores para os coeficientes dentro das bolhas, ambos relataram as dificuldades experimentais para se realizar medições no interior das mesmas. As correlações obtidas por FILLA et al. [69] para os coeficientes de transferência de massa, possuem faixa de aplicação muito estreitas.

Recentemente, DAOUS e AL-ZAHRANI [70] propuseram uma metodologia teórico-experimental para obter os valores dos coeficientes de transferência de calor e massa no interior de bolhas. Um modelo para a evaporação por contato direto, no caso de bolhas ascendendo em um líquido com temperatura uniforme, foi utilizado. Algumas considerações foram feitas para fins de desenvolvimento do modelo, a saber: 1) a resistência à transferência de calor na fase líquida foi considerada desprezível e 2) a temperatura na interface gás-líquido foi considerada igual a temperatura da fase líquida. Valores experimentais de temperatura da fase gasosa e de umidade do ar, na entrada, e na saída da coluna, juntamente com o modelo desenvolvido, permitiram derivar equações pelas quais os coeficientes de transporte puderam ser calculados. Os autores estudaram os efeitos da velocidade superficial sobre o comportamento dos coeficientes. Eles utilizaram uma coluna cilíndrica de 1,52 metros de altura e 15 cm de diâmetro. A distribuição de ar foi realizada por meio de um único orifício próximo à base da coluna. O modelo falha ao desconsiderar que o processo de borbulhamento é composto por duas etapas (formação e ascensão), e que as mesmas possuem características completamente diferentes no que tange aos processos de transferência de calor e massa entre as fases. Portanto, ao negligenciar esta característica, o modelo leva a valores equivocados dos coeficientes de transferência de calor e massa na fase gasosa. Mas adiante, na Seção 4.2, serão apresentadas justificativas que desencorajam a utilização de coeficientes de transporte na etapa de formação.

RODRIGUES [1] relatou que o uso de correlações para o cálculo de coeficientes de transferência de massa na fase gasosa não é recomendado, isto se deve ao número reduzido de correlações existentes e às estreitas faixas de aplicação das mesmas. Neste

mesmo trabalho, RODRIGUES [1] calculou, a partir do modelo Lagrangeano de RIBEIRO JR., BORGES e LAGE [68], valores para os coeficientes de transporte de massa na fase gasosa. Os valores foram aplicados em uma simulação fluidodinâmica de uma coluna isotérmica esgotadora e os resultados se mostraram concordantes com dados experimentais obtidos por RIBEIRO JR. , BORGES e LAGE [24], conforme citado anteriormente. Portanto, o modelo de CAMPOS e LAGE [2] para mistura bifásica ar-água, cuja extensão para o caso de misturas multicomponentes foi realizado por RIBEIRO JR., BORGES e LAGE [68], mostrou ser uma alternativa viável para determinação dos coeficientes de transferência de calor e massa no interior da fase gasosa.

A determinação do coeficiente de transferência de calor na fase gasosa por meio de modelos termofluidodinâmicos é encontrada em alguns trabalhos da literatura. Entretanto, a maioria dos modelos possui aplicações restritas à etapa de ascensão, além de outras limitações: desconsideração da contribuição convectiva no interior da bolha, propriedades físicas constantes etc.

2.4.3 Modelos Termofluidodinâmicos

RIBEIRO JR. [6] realizou uma extensa revisão sobre modelos matemáticos para a transferência simultânea de calor e massa em bolhas, considerando as etapas de ascensão e formação. Como resultado de sua pesquisa, concluiu que, dentre os inúmeros modelos existentes na literatura, o modelo desenvolvido por CAMPOS e LAGE [2] para a transferência de calor e massa em bolhas é o mais adequado e recomendou a sua utilização, visto que considera ambas as etapas do processo de borbulhamento, inclui a variação do tamanho das bolhas, considera os termos convectivos e variações nas propriedades físicas das substâncias.

Capítulo 3

Modelagem Matemática

3.1 Introdução

Conforme detalhado no Capítulo 2, a modelagem fluidodinâmica do processo de evaporação por contato direto deve envolver, de alguma forma, os fenômenos de transferência de calor e massa nas etapas de formação e ascensão das bolhas. Também foi abordado no Capítulo 2 que, devido ao alto custo computacional envolvido o tratamento Lagrangeano da fase gasosa é proibitivo, sendo a abordagem Euleriana a mais utilizada. Entretanto, a maioria dos estudos restringe-se à determinação da hidrodinâmica do equipamento, considerando as fases como componentes puros e insolúveis entre si. A incorporação da transferência de calor e massa entre as fases vem sendo objeto de alguns estudos [43], porém, limitados à etapa de ascensão.

O modelo bifásico Euleriano empregado no presente trabalho, implementado no *software* CFX 11.0 da ANSYS, foi acoplado a um modelo Lagrangeano disponível na literatura para a formação e ascensão de bolhas, a saber: o modelo proposto por CAMPOS e LAGE [2]. O acoplamento entre os modelos permitiu a inclusão dos efeitos de transferência de calor e massa nas etapas de formação e ascensão. Na etapa de ascensão os efeitos de troca de calor e massa foram modelados por meio da utilização de coeficientes de transporte entre as fases, ao passo que na etapa de formação, os efeitos foram modelados por meio da inclusão de termos fonte nas equações de conservação de massa e energia da fase líquida.

No presente capítulo, a modelagem do processo foi dividida em três partes. A primeira é dedicada à descrição do modelo fluidodinâmico Euleriano. Na segunda,

é descrito o modelo Lagrangeano utilizado para a determinação dos parâmetros necessários para modelar a transferência de calor e massa nas etapas de formação e ascensão. Na terceira e última parte, o acoplamento entre os modelos Lagrangeano e Euleriano é descrito.

3.2 Modelo Euleriano

O modelo de dois fluidos usa equações médias de conservação de massa, energia e de quantidade de movimento para a descrição do escoamento bifásico. A descrição destas equações para a transferência de calor e massa para sistemas multifásicos não isotérmicos em escoamentos turbulentos é apresentada a seguir.

3.2.1 Conservação de Massa e Espécie

Seja r_α a fração volumétrica da fase α em uma mistura com duas fases. Pela sua definição, temos que:

$$\sum_{\alpha=1}^2 r_\alpha = 1 \quad (3.1)$$

A conservação de massa total em cada fase pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = \dot{m}_{\alpha,\beta} A_{\alpha,\beta} + S_\alpha^m \quad (3.2)$$

onde ρ_α e \mathbf{u}_α representam, respectivamente, a massa específica e a velocidade da fase α . $A_{\alpha,\beta}$ é a densidade de área interfacial, ou seja, é quociente da divisão da área interfacial pelo volume da mistura bifásica, S_α^m (o sobrescrito m indica massa) é o termo fonte de massa por unidade de volume da mistura bifásica, $\dot{m}_{\alpha,\beta}$ é o fluxo mássico líquido entre as fases, que é decomposto nas seguintes parcelas:

$$\dot{m}_{\alpha,\beta} = \dot{m}_{\alpha,\beta}^+ - \dot{m}_{\beta,\alpha}^+ \quad (3.3)$$

onde $\dot{m}_{\alpha,\beta}^+$ é o fluxo mássico bruto transferido da fase β para a fase α (o sobrescrito $+$ indica valor necessariamente não-negativo) e $\dot{m}_{\beta,\alpha}^+$ é o fluxo mássico bruto transferido da fase α para a fase β . A descrição do fluxo de massa entre as fases será detalhada mais adiante, na modelagem da transferência interfacial de massa nas etapas de ascensão e formação (ver Seção 3.6).

A equação de conservação de massa para um componente i na fase α é descrita por:

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha Y_{\alpha,i})}{\partial t} + \nabla \cdot (Y_{\alpha,i} r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = \dot{m}_{\alpha,\beta,i} A_{\alpha,\beta} + S_{\alpha,i}^m \quad (3.4)$$

onde $Y_{\alpha,i}$ é a fração mássica do componente i na fase α , $S_{\alpha,i}^m$ é o termo fonte de massa do componente i por unidade de volume da mistura bifásica e $\dot{m}_{\alpha,\beta,i}$ é o fluxo mássico líquido do componente i trocado entre as fases, que é decomposto nas seguintes parcelas:

$$\dot{m}_{\alpha,\beta,i} = \dot{m}_{\alpha,\beta,i}^+ - \dot{m}_{\beta,\alpha,i}^+ \quad (3.5)$$

onde $\dot{m}_{\alpha,\beta,i}^+$ é o fluxo mássico bruto do componente i transferido da fase β para a fase α (o sobrescrito $+$ indica valor necessariamente não-negativo) e $\dot{m}_{\beta,\alpha,i}^+$ é o fluxo mássico do componente i transferido da fase α para a fase β .

3.2.2 Conservação de Quantidade de Movimento

A equação de conservação de quantidade de movimento para a fase α é descrita por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha) &= -r_\alpha \nabla P_\alpha + \nabla \cdot [r_\alpha \mu_\alpha (\nabla \mathbf{u}_\alpha + \nabla \mathbf{u}_\alpha^T)] \\ &+ \mathbf{M}_\alpha + r_\alpha \rho_\alpha g + A_{\alpha,\beta} (\dot{m}_{\alpha,\beta}^+ \mathbf{u}_\beta - \dot{m}_{\beta,\alpha}^+ \mathbf{u}_\alpha) \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde g é a aceleração da gravidade, μ_α é a viscosidade dinâmica efetiva da fase α e \mathbf{M}_α representa a força total que age na fase α devido à interação com outras fases, sendo dado por:

$$\mathbf{M}_\alpha = M_{\alpha,\beta} \quad (3.7)$$

onde $M_{\alpha,\beta}$ representa a transferência de quantidade de movimento da fase β para a fase α devido às forças interfaciais. Estas forças são iguais e opostas, isto é, $M_{\alpha,\beta} = -M_{\beta,\alpha}$.

O termo $\dot{m}_{\alpha,\beta}^+ \mathbf{u}_\beta$ representa a transferência de quantidade de movimento associada à transferência de massa da fase β para a fase α , da mesma forma, o termo $\dot{m}_{\beta,\alpha}^+ \mathbf{u}_\alpha$ representa a transferência de quantidade de movimento que ocorre devido à transferência de massa da fase α para a fase β . Para fechar o equacionamento considera-se que as fases estão submetidas ao mesmo campo de pressão, isto é, $P_\alpha = P, \forall \alpha$.

Deste ponto em diante, a seguinte notação será obedecida: a letra α se referirá à fase contínua e, por conseguinte, a letra β se referirá à fase dispersa.

As forças interfaciais têm origem em diversos fenômenos. Entretanto, no presente trabalho, a única força de interação considerada entre as fases foi a força de arrasto hidrodinâmico, portanto:

$$M_\alpha = M_{\alpha,\beta}^{FA} \quad (3.8)$$

onde $M_{\alpha,\beta}^{FA}$ é a força interfacial devido ao arrasto.

A força de arrasto hidrodinâmico entre as fases é calculada pela seguinte equação:

$$M_{\alpha,\beta}^{FA} = \frac{1}{2} \rho_\alpha A_{\alpha,\beta} C_{D,\beta} |\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha| (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha) \quad (3.9)$$

onde $C_{D,\beta}$ é o coeficiente de arrasto da fase β .

Considerando partículas esféricas:

$$A_{\alpha,\beta} = \frac{3r_\beta}{2D_\beta^{st}} \quad (3.10)$$

onde D_β^{st} é o diâmetro médio de Sauter da partícula, cujo valor foi obtido a partir do modelo Lagrangeano de CAMPOS e LAGE [2].

Substituindo a Equação 3.10 na Equação 3.9, obtém-se a seguinte equação para a força de arrasto:

$$M_{\alpha,\beta}^{FA} = \frac{3}{4} r_\beta \rho_\alpha \frac{C_{D,\beta}}{D_\beta^{st}} |\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha| (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha) \quad (3.11)$$

Dois modelos foram utilizados para o cálculo do coeficiente de arrasto da fase β , a saber: o modelo de GRACE, WAIREGI e NGUYEN [71] e o modelo de ISHII e ZUBER [4].

3.2.3 Modelagem da Força de Arrasto

O modelo de GRACE, WAIREGI e NGUYEN [71] para o cálculo do coeficiente de arrasto para partículas fluidas deformadas é descrito por:

$$C_{D,\beta}^\infty(\text{ellipse}) = \frac{4}{3} \frac{g D_\beta^{st}}{U_T^2} \frac{\rho_\alpha - \rho_\beta}{\rho_\alpha} \quad (3.12)$$

onde $C_{D,\beta}^\infty$ é o coeficiente de arrasto para uma partícula escoando isoladamente e U_T é a velocidade terminal que é calculada da seguinte forma:

$$U_T = \frac{\mu_\alpha}{\rho_\alpha D_\beta^{st}} M^{-0,149} (J - 0,857) \quad (3.13)$$

onde M é o número de Morton, sendo igual a:

$$M = \frac{\mu_\alpha^4 g (\rho_\alpha - \rho_\beta)}{\rho_\alpha^2 \sigma^3} \quad (3.14)$$

onde σ é a tensão superficial.

Na Equação 3.13, J é calculado da seguinte forma:

$$J = \begin{cases} 0,94H^{0,751} & 2 < H \leq 59,3 \\ 3,42H^{0,441} & H > 59,3 \end{cases} \quad (3.15)$$

onde H é obtido a partir da seguinte equação:

$$H = \frac{4}{3} Eo M^{-0,149} \left(\frac{\mu_\alpha}{\mu_{ref}} \right)^{-0,14} \quad (3.16)$$

onde Eo é o número de Eötvös e $\mu_{ref} = 0,0009 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ é a viscosidade de referência da água [71].

A implementação do modelo de GRACE, WAIREGI e NGUYEN [71] no CFX 11.0 da ANSYS seleciona automaticamente os regimes de bolha esférica, bolha deformada (elipsoidal) ou *spherical cap* (forma de cogumelo). A seleção do regime de bolha é realizada de acordo com o seguinte procedimento:

$$C_{D,\beta}^\infty(dist) = \min[C_{D,\beta}(elipse), C_{D,\beta}(cap)] \quad (3.17)$$

$$C_{D,\beta}^\infty = \max[C_{D,\beta}(esfera), C_{D,\beta}(dist)] \quad (3.18)$$

onde:

$$C_{D,\beta}^\infty(esfera) = \max \left[\frac{Re}{24} (1 + 0,15Re^{0,687}), 0,44 \right] \quad (3.19)$$

onde Re é o número de Reynolds da partícula que é definido da seguinte forma:

$$Re = \frac{\rho_\alpha |\mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u}_\beta| D_\beta^{st}}{\mu_\alpha} \quad (3.20)$$

$$C_{D,\beta}^\infty(cap) = \frac{8}{3} \quad (3.21)$$

A correlação de Schiller-Naumann foi utilizada para calcular o coeficiente de arrasto na região de transição entre o regime de Stokes e o regime de Newton. Nesta região, tanto os efeitos viscosos quanto os inerciais são importantes.

No regime de Newton, os efeitos inerciais se tornam mais importantes do que os efeitos viscosos, desta maneira, o coeficiente de arrasto se torna constante e igual a 0,44, ou seja, é independente do número de Reynolds.

Os valores de $C_{D,\beta}^\infty$, calculados pelas Equações 3.12, 3.19 e 3.21, são válidos para o caso de escoamento de uma bolha isolada. Entretanto, é preciso considerar o efeito de população, ou seja, considerar a presença de outras partículas no escoamento. No CFX 11.0 da ANSYS, para o modelo de GRACE, WAIREGI e NGUYEN [71], o efeito de população é considerado por meio de um fator de correção aplicado ao coeficiente de arrasto, a saber:

$$C_{D,\beta} = r_\alpha^p C_{D,\beta}^\infty \quad (3.22)$$

onde p é o fator de correção, r_α é a fração volumétrica da fase contínua. O sobrescrito ∞ indica que a bolha está escondo em um meio no qual os efeitos de população e parede não são considerados.

No presente trabalho, o valor do fator de correção p foi inicialmente considerado igual a -2. A escolha deste valor teve como base o procedimento adotado por RIBEIRO JR. e LAGE [72]. Desta maneira, a expressão para a força de arrasto hidrodinâmico incluindo o efeito de população assume a seguinte forma:

$$M_{\alpha,\beta}^{FA} = \frac{3}{4} r_\beta r_\alpha^p \rho_\alpha \frac{C_{D,\beta}^\infty}{D_\beta^{st}} |\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha| (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha) \quad (3.23)$$

O modelo de ISHII e ZUBER [4] para o cálculo do coeficiente de arrasto para partículas fluidas deformadas é descrito por:

$$C_{D,\beta}(Ellipse) = E(r_\beta) C_{D,\beta}^\infty \quad (3.24)$$

$$C_{D,\beta}^\infty = \frac{2}{3} Eo^{\frac{1}{2}} \quad (3.25)$$

$$E(r_\beta) = \frac{1 + 17,67 f(r_\beta)^{\frac{6}{7}}}{18,67 f(r_\beta)} \quad (3.26)$$

$$f(r_\beta) = \frac{\mu_\alpha}{\mu_m} (1 - r_\beta)^{\frac{1}{2}} \quad (3.27)$$

onde μ_m , a viscosidade de mistura, é calculada da seguinte maneira:

$$\mu_m = \mu_\alpha (1 - r_\beta^{-2,5} \mu^*) \quad (3.28)$$

onde μ^* é calculado da seguinte maneira:

$$\mu^* = \frac{\mu_\beta + 0,4\mu_\alpha}{\mu_\beta + \mu_\alpha} \quad (3.29)$$

A implementação do modelo de ISHII e ZUBER [4] no CFX 11.0 da ANSYS seleciona automaticamente os regimes de bolha esférica, bolha deformada (elipsoidal) ou *spherical cap* (forma de cogumelo). A seleção do regime de bolha é realizada de acordo com o seguinte procedimento:

$$C_{D,\beta} = \begin{cases} C_{D,\beta}(esfera) & \text{se } C_{D,\beta}(esfera) \geq C_{D,\beta}(elipse) \\ \min(C_{D,\beta}(elipse), C_{D,\beta}(cap)) & \text{se } C_{D,\beta}(esfera) < C_{D,\beta}(elipse) \end{cases} \quad (3.30)$$

onde, a equação de Schiller-Naumann é utilizada para calcular o coeficiente de arrasto da esfera:

$$C_{D,\beta}(esfera) = \frac{24}{Re_m} (1 + 0,15 Re_m^{0,687}) \quad (3.31)$$

onde Re_m é o número de Reynolds baseado na viscosidade de mistura (μ_m), sendo calculado da seguinte forma:

$$Re = \frac{\rho_\alpha |\mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u}_\beta| D_\beta^{st}}{\mu_m} \quad (3.32)$$

Na Equação 3.30, $C_{D,\beta}(cap)$ é calculado da seguinte forma:

$$C_{D,\beta}(cap) = (1 - r_\beta)^2 C_{D,\beta}^\infty \quad (3.33)$$

3.2.4 Modelagem da Turbulência

A viscosidade dinâmica efetiva da fase contínua, μ_α , na Equação 3.6, para o caso de escoamentos turbulentos, pode ser dividida em uma parte laminar e outra turbulenta:

$$\mu_\alpha = \mu_{\alpha,lam} + \mu_{\alpha,turb} \quad (3.34)$$

onde a viscosidade turbulenta é calculada da seguinte maneira:

$$\mu_{\alpha,turb} = C_{\mu} \rho_{\alpha} \frac{k_{\alpha}^2}{\epsilon} \quad (3.35)$$

Conforme observado na Seção 2.3, o modelo $k - \epsilon$ é a abordagem mais utilizada e aceita no tratamento de escoamentos turbulentos [50, 10]. Este modelo introduz duas equações de transporte adicionais nos cálculos, que são usadas para calcular a energia cinética turbulenta, k , e a taxa de dissipação de energia, ϵ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial(r_{\alpha}\rho_{\alpha}k_{\alpha})}{\partial t} + \nabla \cdot (r_{\alpha}\rho_{\alpha}\mathbf{u}_{\alpha}k_{\alpha}) &= -r_{\alpha}(P_{turb,\alpha} - \rho_{\alpha}\epsilon_{\alpha}) \\ + \nabla \cdot (r_{\alpha}\Gamma_{\alpha,k}\nabla k_{\alpha}) & \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(r_{\alpha}\rho_{\alpha}\epsilon_{\alpha})}{\partial t} + \nabla \cdot (r_{\alpha}\rho_{\alpha}\mathbf{u}_{\alpha}\epsilon_{\alpha}) &= r_{\alpha}\frac{\epsilon_{\alpha}}{k_{\alpha}}(C_{\epsilon 1}P_{turb,\alpha} - C_{\epsilon 2}\rho_{\alpha}\epsilon_{\alpha}) \\ + \nabla \cdot (r_{\alpha}\Gamma_{\alpha,\epsilon}\nabla\epsilon_{\alpha}) & \end{aligned} \quad (3.37)$$

onde:

$$\Gamma_{\alpha,k} = \mu_{\alpha,lam} + \frac{\mu_{\alpha,turb}}{\sigma_k} \quad (3.38)$$

$$\Gamma_{\alpha,\epsilon} = \mu_{\alpha,lam} + \frac{\mu_{\alpha,turb}}{\sigma_{\epsilon}} \quad (3.39)$$

$P_{turb,\alpha}$ é o termo de produção de energia turbulenta devido às forças viscosas, e é modelado da seguinte maneira:

$$P_{turb,\alpha} = \mu_{turb,\alpha}\nabla\mathbf{u}_{\alpha} : (\nabla\mathbf{u}_{\alpha} + \nabla\mathbf{u}_{\alpha}^T) - \frac{2}{3}\nabla \cdot \mathbf{u}_{\alpha}(3\mu_{turb,\alpha}\nabla \cdot \mathbf{u}_{\alpha} + \rho_{\alpha}k_{\alpha}) \quad (3.40)$$

Foram utilizados os valores padrão para os parâmetros do modelo $k - \epsilon$, que são apresentados na Tabela 3.1.

Um modelo algébrico para a turbulência da fase dispersa foi utilizado. Esse modelo considera que a viscosidade cinemática turbulenta, $\nu_{turb,\beta}$, é proporcional a viscosidade cinemática turbulenta da fase contínua, $\nu_{turb,\alpha}$.

$$\nu_{turb,\beta} = \frac{\nu_{turb,\alpha}}{\psi} \quad (3.41)$$

Tabela 3.1: Valores dos parâmetros do modelo $k - \epsilon$

Constantes	Valores Adimensionais
$C_{\epsilon 1}$	1,44
$C_{\epsilon 2}$	1,92
σ_k	1,0
σ_ϵ	1,3
C_μ	0,8

onde ψ é um fator associado a quão rápido a partícula responde a flutuações causada pela turbulência da fase contínua. Para sistemas gás-líquido, o tempo de relaxação da bolha é pequeno quando comparado com o tempo de dissipação da turbulência de forma que o valor de ψ pode ser considerado igual a 1.

3.2.5 Conservação de Energia

A conservação de energia em cada fase pode ser escrita da seguinte forma:

Para a fase contínua:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha H_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha (\rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha H_\alpha) - \lambda_\alpha \nabla T_\alpha) \\ = A_{\alpha,\beta} \dot{Q}_\alpha + S_\alpha^e \end{aligned} \quad (3.42)$$

Para a fase dispersa:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(r_\beta \rho_\beta H_\beta)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\beta (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta H_\beta) - \lambda_\beta \nabla T_\beta) \\ = A_{\alpha,\beta} \dot{Q}_\beta + S_\beta^e \end{aligned} \quad (3.43)$$

onde, S_α^e e S_β^e são termos fonte de energia por unidade de volume da mistura bifásica, respectivamente, para as fases α e β . Q_α e Q_β , que satisfazem $Q_\alpha + Q_\beta = 0$, são calculados da seguinte maneira:

- Para o processo de evaporação: $\dot{m}_{\alpha,\beta}^+ = 0$ e $\dot{m}_{\beta,\alpha}^+ \neq 0$, ou seja, não há transferência de massa da fase dispersa para a fase contínua.

$$\dot{Q}_\alpha = \dot{q}_\alpha - \dot{m}_{\beta,\alpha}^+ H_{\alpha,I} \quad (3.44)$$

$$\dot{Q}_\beta = \dot{q}_\beta + \dot{m}_{\beta,\alpha}^+ H_{\alpha,I} + \dot{m}_{\beta,\alpha}^+ \Delta H_{vap}^I \quad (3.45)$$

e

$$\dot{q}_\alpha + \dot{q}_\beta + \dot{m}_{\beta,\alpha}^+ \Delta H_{vap}^I = 0 \quad (3.46)$$

- Para o processo de condensação: $\dot{m}_{\beta,\alpha}^+ = 0$ e $\dot{m}_{\alpha,\beta}^+ \neq 0$, ou seja, não há transferência de massa da fase contínua para a fase dispersa.

$$\dot{Q}_\alpha = \dot{q}_\alpha + \dot{m}_{\alpha,\beta}^+ H_{\beta,I} + \dot{m}_{\alpha,\beta}^+ \Delta H_{cond}^I \quad (3.47)$$

$$\dot{Q}_\beta = \dot{q}_\beta - \dot{m}_{\alpha,\beta}^+ H_{\beta,I} \quad (3.48)$$

e

$$\dot{q}_\alpha + \dot{q}_\beta + \dot{m}_{\alpha,\beta}^+ \Delta H_{cond}^I = 0 \quad (3.49)$$

pois $\Delta H_{vap}^I = H_{\beta,I} - H_{\alpha,I} = -\Delta H_{cond}^I$.

As Equações 3.46 e 3.49 representam balanços de energia na interface gás-líquido, respectivamente, para o processo de evaporação e condensação.

Nas Equações 3.42 a 3.49, o subscrito I é relativo à interface gás-líquido. H é a entalpia específica da fase, T é a temperatura, λ é a condutividade térmica, \dot{Q} é o fluxo total de calor trocado entre as fases, S_α^e e S_β^e são, respectivamente, os termos fonte de energia, por unidade de volume da mistura bifásica, nas fases α e β , \dot{q} é o fluxo de calor sensível entre as fases, ΔH_{cond}^I é o calor de condensação do vapor d'água e ΔH_{vap}^I é o calor de vaporização da água. As entalpias de mudança de fase foram calculadas nas condições de interface.

3.2.6 Modelagem da Densidade de Área Interfacial

Uma característica muito importante do modelo fluidodinâmico do escoamento bifásico líquido-gasoso é a maneira como se considera a variação da densidade de área interfacial com a fração de fase (retenção gasosa local). A tendência é que a área interfacial aumente juntamente com a fração de fase, entretanto, este aumento não pode ocorrer indefinidamente, a partir de certo ponto em vez de aumentar com a

fração de fase, a área interfacial passa a diminuir até que somente reste a fase gasosa. A correta descrição do comportamento da área interfacial com a fração de fase é fundamental na modelagem dos processos de transferência entre as fases, conforme pode ser observado nas equações apresentadas para o modelo Euleriano, nas Seções 3.2.1 a 3.2.5. No presente trabalho, optou-se por tratar de maneira assimétrica o comportamento da área interfacial com a fração de fase. O seguinte critério foi adotado:

$$A_{\alpha,\beta} = \begin{cases} \frac{3r_g}{2D_{\beta}^{st}} & r_{\beta} \leq 0,5 \\ 0 & r_{\beta} > 0,5 \end{cases} \quad (3.50)$$

Portanto, os processos de transferência de calor e massa entre as fases, modelados por meio dos termos: \dot{Q}_{α} (Equação 3.42), \dot{Q}_{β} (Equação 3.44), $\dot{m}_{\alpha,\beta}$ (Equação 3.2) e $\dot{m}_{\alpha,\beta,i}$ (Equação 3.4), somente são considerados relevantes em regiões nas quais a retenção gasosa é menor ou igual a 50 %. Por isso, em regiões com alta concentração de gás, como por exemplo nas intermediações da entrada, a transferência de calor e massa entre as fases não pode ser modelada por meio da utilização dos termos listados anteriormente. Desta forma, no caso destas regiões, deve-se adotar uma outra alternativa para modelar o transporte de calor e massa entre as fases, como por exemplo, o uso de termos fonte nas equações de conservação. Mais adiante, na Seção 3.6 que trata da modelagem da transferência de calor e massa entre as fases nas etapas de formação e ascensão, ficará mais claro a necessidade de se modelar a transferência de calor e massa na etapa de formação por meio de termos fonte.

3.2.7 Condições Iniciais e de Contorno

Em todas as simulações hidrodinâmicas do ECD, a condição inicial foi a de repouso para a fase líquida, a retenção gasosa foi igualada a zero e a temperatura da fase líquida foi considerada como sendo igual a temperatura da fase líquida obtida experimentalmente para um ECD operando em regime pseudo-estacionário. A fase gasosa entra pela parte inferior da coluna através de uma fração total da área disponível. A condição de entrada da fase gasosa depende da etapa de formação das bolhas.

Na saída da coluna, a condição de contorno imposta permitiu a saída de ambas

as fases e o retorno (devido à oscilações na altura da mistura bifásica contida no domínio) somente da fase gasosa (nas condições de saída). Entretanto, a fim de se evitar o transbordamento da fase líquida, foi adicionado, na parte superior da coluna, um pequeno volume totalmente preenchido por ar na mesma temperatura da fase contínua e isento de vapor d'água. As paredes da coluna foram consideradas adiabáticas e empregou-se a condição de não escorregamento para ambas as fases. Maiores detalhes sobre as condições iniciais e de contorno podem ser obtidos nas Seções 4.3.3, 4.3.4 e 4.3.5.

3.2.8 Procedimento Numérico

As Equações 3.1 a 3.42 que compõem o modelo de dois fluidos foram resolvidas em conjunto com as condições de contorno e iniciais utilizando o código comercial de fluidodinâmica CFX 11.0 da ANSYS. Este código computacional utiliza um método de solução baseado na técnica dos volumes finitos.

3.3 Modelo Lagrangeano

A incorporação da etapa de formação das bolhas foi realizada através do acoplamento da simulação tridimensional transiente Euleriana-Euleriana, com um modelo Lagrangeano desenvolvido por CAMPOS e LAGE [2] para a transferência simultânea de calor e massa, durante as etapas de formação e ascensão de bolhas superaquecidas em uma coluna de líquido. Além de permitir a incorporação dos efeitos de transferência de calor e massa na etapa de formação, o modelo Lagrangeano possibilitou a obtenção dos coeficientes de transferência de calor e massa no interior da fase gasosa.

De acordo com o modelo de CAMPOS e LAGE [2], a bolha é considerada esférica durante todo o tempo de residência na fase líquida e o fluxo mássico difusivo é apropriadamente descrito pela lei de Fick. Na etapa de formação, a injeção de gás é modelada como uma fonte pontual localizada no centro da bolha. Variações nas propriedades físicas, bem como variações no raio da bolha, são consideradas. É importante ressaltar que o modelo de CAMPOS e LAGE permite obter os perfis dinâmicos de temperatura, concentração e de velocidade internos a bolha e além

disso, também permite obter o raio da bolha.

O modelo consiste das seguintes equações simplificadas de conservação de massa e energia para a bolha:

$$\frac{\partial(\rho_b)}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \rho_b v_b)}{\partial r} = \rho_{inj} Q_{inj} \delta(r) \quad (3.51)$$

$$\frac{\partial(\rho_b Y_{b,i})}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial \left[r^2 \rho_b \left(Y_{b,i} v_b - D_i \frac{\partial Y_{b,i}}{\partial r} \right) \right]}{\partial r} = \rho_{inj} Q_{inj} Y_{i,inj} \delta(r) \quad (3.52)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_b C_{pb}) T_b}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \rho_b v_b C_{pb} T_b)}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \lambda_b \frac{\partial T_b}{\partial r})}{\partial r} - \\ (\langle C_{p1}^0 - C_{p2}^0 \rangle) \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 T_b \rho_b D_1 \frac{\partial Y_{b,1}}{\partial r})}{\partial r} = \rho_{inj} Q_{inj} \delta(r) \sum_{i=1}^2 Y_{inj,i} \langle C_{pi}^0 T_{inj} \rangle \end{aligned} \quad (3.53)$$

onde o subscrito 1 se refere a água e o 2 se refere ao ar, v_b é a velocidade radial do ar no interior da bolha, Q_{inj} é a vazão volumétrica de injeção de ar no orifício, Y_i e D_i são, respectivamente, a fração mássica do componente i na fase gasosa e o coeficiente de difusão do componente i na mistura gasosa, T_b é a temperatura da bolha, δ é o delta de Dirac, λ_b é a condutividade térmica da mistura gasosa dentro da bolha e ρ_b é a densidade da mistura gasosa dentro da bolha. Os símbolos C_{pb} e C_{pi}^0 referem-se, respectivamente, às capacidades caloríficas da mistura gasosa e do componente i puro. O índice inj refere-se às condições de injeção. As Equações 3.51 a 3.53 são válidas para as etapas de formação e ascensão. Para a etapa de ascensão basta fazer $Q_{inj} = 0$.

3.3.1 Condições de Contorno

As condições de contorno para as equações do modelo Lagrangeano são dadas pelas equações de balanço de massa e de energia na superfície da bolha, ou seja, na interface gás-líquido, as quais são obtidas integrando-se as equações de conservação para um volume de controle situado na superfície e tomando-se o limite, das expressões obtidas, quando a altura desse volume tende a zero. As equações de contorno são representadas nas expressões abaixo:

$$\frac{-\dot{m}_{ev}}{4\pi R_b^2} = \rho_b \left(v_I - \frac{dR_b}{dt} \right) \text{ em } r = R_b(t) \quad (3.54)$$

$$\rho_b D_{1,I} \frac{\partial Y_{b,1}}{\partial r} = \frac{-\dot{m}_{ev}}{4\pi R_b^2} (1 - Y_{I,1}) \text{ em } r = R_b(t) \quad (3.55)$$

$$\lambda_b \frac{\partial T_b}{\partial r} = \frac{-\dot{m}_{ev}}{4\pi R_b^2} \Delta H_{vap}(T_I) + h_l(T_I - T_l) \text{ em } r = R_b(t) \quad (3.56)$$

onde R_b é o raio da bolha em um dado instante de tempo, \dot{m}_{ev} é a taxa de vaporização, $D_{1,I}$ é o coeficiente de difusão do componente 1 nas condições da superfície, $Y_{1,I}$ é a fração mássica de água na interface, $\Delta H_{vap}(T_I)$ é o calor latente de vaporização e h_l é o coeficiente convectivo de transmissão de calor da interface para o seio do líquido. Para o cálculo do coeficiente h_l , foi utilizada a correlação de CALDERBANK e MOO-YOUNG [73]. De forma a prever o desprendimento da bolha do orifício e a sua ascensão, as Equações 3.51 a 3.53 foram resolvidas juntamente com um modelo dinâmico da bolha. Em seu trabalho, RIBEIRO JR. [6] apresenta detalhes sobre o modelo dinâmico utilizado. Para a etapa de formação foi utilizado uma modificação do modelo de DAVIDSON e SCHÜLER [74]. Para a ascensão, um balanço de forças mais detalhado foi realizado, levando em consideração os efeitos inerciais, de massa virtual, empuxo e arrasto. O cálculo da fração mássica de água e da temperatura na interface (superfície da bolha) foi efetuado com a hipótese de equilíbrio interfacial.

3.3.2 Procedimento Numérico para a Resolução do Modelo Lagrangeano

As equações do modelo Lagrangeano de CAMPOS e LAGE [2] para a fase dispersa, foram adimensionalizadas e discretizadas no espaço, empregando-se o método dos volumes finitos com fluxos convectivo-difusivos avaliados pelas funções de interpolação apresentadas por PATANKAR [75]. O sistema de equações ordinárias resultante foi resolvido usando-se a subrotina DASSL [76].

3.4 Modelo Simplificado para a Transferência de Calor e Massa no Interior de Bolhas Superaquecidas

3.4.1 Introdução

Conforme citado no Capítulo 2, o cálculo dos coeficientes de transporte de calor e massa na fase gasosa deve ser feito utilizando-se um modelo termofluidodinâmico. O modelo Lagrangeano de CAMPOS e LAGE [2] para a transferência simultânea de calor e massa em bolhas superaquecidas foi escolhido para este propósito, visto que fornece informações detalhadas sobre os fenômenos de transporte que ocorrem dentro da bolha, além do mais, já foi validado contra dados experimentais [72].

Contudo, não existem garantias de que os coeficientes médios de transporte de calor e massa no interior da fase gasosa, obtidos a partir do modelo Lagrangeano detalhado de CAMPOS e LAGE [2], sejam adequados para modelar os fluxos de calor e massa entre as fases nas etapas de formação e ascensão das bolhas.

Para avaliar a confiabilidade dos coeficientes de transporte, antes de efetivamente utilizá-los no modelo Euleriano da simulação fluidodinâmica do ECD, foi desenvolvido um modelo simplificado (a parâmetros concentrados) para a transferência simultânea de calor e massa em bolhas superaquecidas. O modelo simplificado não fornece informações detalhadas sobre os fenômenos de transporte que ocorrem dentro da bolha mas, sim, informações médias, tais como: temperatura, fração mássica de água e raio da bolha. No modelo simplificado, os coeficientes de transporte médios obtidos a partir do modelo Lagrangeano de CAMPOS e LAGE [2] são utilizados para calcular o fluxo de calor e massa entre a bolha e a fase líquida.

Tanto o modelo simplificado quanto o modelo detalhado calculam os perfis dinâmicos das médias volumétricas da temperatura e fração mássica de água no interior da bolha, nas etapas de formação e ascensão. É importante ressaltar que o modelo detalhado fornece informações sobre a evolução temporal dos perfis radiais das variáveis (temperatura, fração mássica de água e velocidade) dentro da bolha e que as informações médias são calculada por meio de integração no volume da bolha.

A comparação entre as evoluções temporais das variáveis médias internas a bo-

lha, obtidas pelos modelos detalhado e simplificado, permite extrair informações importantes sobre a eficácia de se utilizar coeficientes médios na modelagem dos fluxos de calor e massa entre as fases, maiores detalhes sobre estas comparações podem ser obtidos na Seção 4.2.

3.4.2 Formulação Matemática

A formulação matemática do modelo simplificado para a formação e ascensão de uma bolha em um sistema com um único componente volátil está baseada na conservação de massa e de energia na bolha. O modelo é concebido a partir de uma análise a parâmetros concentrados dos processos de transferência de calor e massa na bolha. Considera-se que o gás está saturado na interface. O sistema ar-água foi considerado. As equações de conservação de massa global, espécie e energia foram empregadas:

$$\frac{d [\rho_b^s(t) V_b^s(t)]}{dt} = \dot{m}_{vap}(t) + \dot{m}_{inj} \quad (3.57)$$

$$\frac{d [Y_{b,1}^s(t) \rho_b^s(t) V_b^s(t)]}{dt} = \dot{m}_{vap}(t) + Y_{inj,1} \dot{m}_{inj} \quad (3.58)$$

$$\frac{d [\rho_b^s(t) V_b^s(t) C_{pb}^s(t) (T_b^s(t) - T_r)]}{dt} = -\dot{Q}_b(t) + \dot{m}_{inj} C_{p,inj} (T_{inj} - T_r) \quad (3.59)$$

A este sistema de equações diferenciais, juntam-se duas outras equações: a equação de estado de gás ideal, Equação 3.60, para o cálculo da densidade no interior da bolha, e a Equação 3.61, para o cálculo da temperatura da interface, que é obtida a partir do balanço de energia na interface.

$$\rho_b^s(t) = \frac{MM_b P}{R T_b^s(t)} \quad (3.60)$$

$$T_I(t) = T_b^s(t) - \frac{\dot{Q}_b(t)}{\langle h_b \rangle A_b(t)} \quad (3.61)$$

Nas Equações 3.57 a 3.61, o subscrito s refere-se ao modelo simplificado, ρ_b^s é a densidade média da mistura dentro da bolha, V_b^s é o volume da bolha, $C_{p,b}^s$ é a capacidade calorífica média da mistura gasosa dentro da bolha, $C_{p,inj}$ é a capacidade calorífica da mistura gasosa injetada no orifício, $\langle h_b \rangle$ é o coeficiente de transferência

de calor interno à bolha, T_b^s é a temperatura média dentro da bolha, $Y_{b,1}^s$ é a fração média mássica do volátil (água) na bolha, \dot{m}_{vap} é a taxa mássica evaporada, \dot{m}_{inj} é a vazão mássica de gás injetado, \dot{Q}_b é a taxa de calor cedida pelo gás, MM_b é a massa molar média da mistura gasosa e R é a constante do gases ideais. O índice 1 refere-se a água e o 2 refere-se ao ar. Por fim, T_r é a temperatura de referência. É importante ressaltar que, por ser um modelo a parâmetros concentrados, as variáveis obtidas pelo modelo simplificado são semelhantes às médias volumétricas das variáveis correspondentes no modelo Lagrangeano de CAMPOS e LAGE [2].

Juntam-se às Equações 3.57 a 3.61 do modelo simplificado, equações auxiliares para as definições de \dot{m}_{vap} e \dot{Q}_b , a saber:

$$\dot{Q}_b(t) = \dot{m}_{vap}(t) \Delta H_I^{vap}(t) + h_l A_b(t) [T_I(t) - T_l(t)] \quad (3.62)$$

$$\dot{m}_{vap}(t) = \langle k_b \rangle A_b(t) [\rho_I(t) Y_I^{sat} - \rho_b^s Y_{b,1}^s] \quad (3.63)$$

onde A_b é a área superficial da bolha, $\langle k_b \rangle$ é o coeficiente de transferência de massa na bolha, ρ_I é a densidade da mistura gasosa calculada nas condições da interface, h_l é o coeficiente de transferência de calor na fase líquida que é estimado a partir da correlação de CALDERBANK e MOO-YOUNG [73], ΔH_I^{vap} é o calor de vaporização da água calculado na temperatura da interface. Y_I^{sat} é a fração mássica na bolha nas condições da interface o qual é calculada utilizando a hipótese de equilíbrio interfacial utilizando a lei de Raoult:

$$Y_I^{sat} = \frac{P^{sat}(T_I)}{P} \quad (3.64)$$

Detalhes sobre como $P^{sat}(T_I)$ e ΔH_I^{vap} são calculados podem ser vistos na Seção 3.5.

3.4.3 Coeficiente de Transferência de Calor e Massa na Fase Gasosa

O modelo de CAMPOS e LAGE [2] é um modelo detalhado, ou seja, ao contrário do modelo simplificado, ele determina os perfis radiais das variáveis envolvidas nos processos de transferência de calor e massa entre a bolha e a fase líquida. Por ser

detalhado, sem ser excessivamente complexo, o modelo de CAMPOS e LAGE torna possível a obtenção dos coeficientes de transferência de calor e massa na fase gasosa, respectivamente, $h_b(t)$ e $k_b(t)$.

Uma vez obtidos, por meio do modelo detalhado de CAMPOS e LAGE, os perfis dinâmicos radiais de temperatura e fração mássica de água dentro da bolha, a variação temporal do raio da bolha e o calor sensível cedido pela bolha para a fase líquida, é possível calcular os valores médios volumétricos da concentração de água e temperatura dentro da bolha. Para tanto, utilizou-se as seguintes equações:

$$\langle c_{b,1} \rangle (t) = \frac{3}{R_b^3(t)} \int_0^{R_b(t)} Y_{b,1}(r,t) \rho_b(r,t) r^2 dr \quad (3.65)$$

$$\langle T_b \rangle (t) = \frac{\int_0^{R_b(t)} \rho_b(r,t) C_{p,b}(r,t) T_b(r,t) r^2 dr}{\int_0^{R_b(t)} C_{p,b}(r,t) T_b(r,t) r^2 dr} \quad (3.66)$$

Os coeficientes de transferência de calor e massa são definidos como sendo o quociente da divisão do fluxo da grandeza em questão (calor ou massa) pela força motriz (temperatura ou concentração). Desta maneira, tendo-se em mãos $\langle c_{b,1} \rangle (t)$ e $\langle T_b \rangle (t)$, definidos anteriormente, é possível calcular os valores dos coeficientes da seguinte forma:

$$h_b(t) = \frac{\dot{Q}_b(t)}{A_b(t) [\langle T_b \rangle (t) - T_I(t)]} \quad (3.67)$$

$$k_b(t) = \frac{\dot{m}_{vap}(t)}{A_b(t) [c_{I,1}(t) - \langle c_{b,1} \rangle (t)]} \quad (3.68)$$

Nas Equações 3.67 e 3.68, $c_{I,1}$ é a concentração mássica de água na interface e T_I é a temperatura da interface, ambos valores também fornecidos pelo modelo detalhado de CAMPOS e LAGE [2]. Tendo-se os valores instantâneos dos coeficientes, é possível, por meio de uma integração, calcular as médias temporais dos mesmos, que por sua vez são os valores efetivamente utilizados nas simulações fluidodinâmicas do ECD. As médias temporais foram calculadas da seguinte forma:

$$\langle h_b \rangle = \frac{1}{t_f - t_i} \int_{t_i}^{t_f} h_b(t) dt \quad (3.69)$$

$$\langle k_b \rangle = \frac{1}{t_f - t_i} \int_{t_i}^{t_f} k_b(t) dt \quad (3.70)$$

onde t_i e t_f são, respectivamente, os tempos inicial e final das etapas de formação ou ascensão.

As médias temporais dos coeficientes de transporte de calor (Equação 3.69) e massa (Equação 3.70) foram calculadas por meio de integração trapezoidal durante os tempos de ascensão e formação da bolha.

O coeficiente convectivo de transferência de calor para a fase contínua foi estimado a partir da correlação de CALDERBANK e MOO-YOUNG [73]:

$$h_l = 0,31 \rho_l C_{pl} \left[\frac{(\rho_l - \rho_g) \mu_l g}{\rho_l^2} \right]^{\frac{1}{3}} \left(\frac{C_{pl} \mu_l}{\lambda_l} \right)^{-\frac{2}{3}} \quad (3.71)$$

3.4.4 Procedimento Numérico para a resolução do Modelo Simplificado

O sistema de equações diferenciais, Equações 3.57 a 3.59, foi resolvido, para as etapas de ascensão e formação, utilizando-se a subrotina DASSL [76]. As condições iniciais do sistema de equações diferenciais, para a etapa de ascensão, foram obtidas a partir dos valores obtidos da simulação do modelo Lagrangeano de CAMPOS e LAGE [2].

3.5 Cálculo das Propriedades Físicas

As simulações Eulerianas do ECD, as simulações Lagrangeanas utilizando o modelo detalhado de CAMPOS e LAGE [2] e o modelo simplificado foram efetuadas utilizando o sistema água-ar. As propriedades físicas das substâncias puras foram obtidas de LAGE [77]. A lei dos gases ideais foi empregada para calcular a densidade da mistura gasosa e a condutividade térmica foi estimada pela equação de WASSILJEW modificada por MASON e SEXENA [78]. A capacidade calorífica foi calculada considerando comportamento de solução ideal. Para cada componente, a capacidade calorífica média foi obtida a partir de sua definição, usando a temperatura do gás e a temperatura do líquido como limites. A massa molecular média da mistura gasosa foi calculada a partir da média ponderada pela fração molar das massa moleculares de cada substância. A equação de WAGNER foi usada para calcular a pressão de vapor d'água, conforme descrito em REID, PRAUNSNITZ e

POLING [78].

3.6 Acoplamento entre os Modelos Euleriano e Lagrangeano

3.6.1 Introdução

A incorporação da etapa de formação de bolhas na simulação fluidodinâmica do ECD foi realizada por meio do acoplamento entre o modelo Euleriano, implementado no CFX 11.0 da ANSYS, com o modelo Lagrangeano de CAMPOS e LAGE [2].

O modelo Euleriano resolve equações de conservação médias para ambas as fases as quais, por sua vez, são consideradas como meios interpenetrantes, desta maneira os termos de transporte entre as fases devem ser modelados. Conforme citado no Capítulo 2, os efeitos de transferência de calor e massa entre as fases devem ser considerados tanto na etapa de formação quanto na etapa de ascensão.

O modelo Lagrangeano, ou detalhado, resolve as equações de conservação dentro da bolha, tornando possível a obtenção dos perfis, ou valores médios, da concentração de água e temperatura na bolha, além da evolução dinâmica do raio da mesma. A taxa mássica evaporada de água e a taxa de calor perdido (na forma sensível e latente) pela fase gasosa, nas etapas de formação e ascensão, também são fornecidas pelo modelo. Portanto, tendo-se em mãos os valores instantâneos das taxas de calor e massa é possível, por meio de uma integração temporal, obter os valores totais de massa e energia trocados entre as fases em cada uma das etapas.

Assim, o modelo Lagrangeano é capaz de fornecer informações detalhadas sobre os processos de transferência de calor e massa, tanto na etapa de formação quanto na etapa de ascensão, justamente as informações necessárias para a inclusão destes fenômenos na simulação Euleriana do ECD. Entretanto, o modelo Lagrangeano foi desenvolvido para uma única bolha ascendendo em uma coluna de líquido. A questão, que será esclarecida mais adiante, é como estender os resultados do modelo Lagrangeano de tal forma que estes possam ser aplicados na modelagem do escoamento de uma pluma gasosa (algo equivalente ao escoamento de um conjunto de bolhas) na simulação fluidodinâmica do ECD.

Resumidamente, os seguintes parâmetros foram utilizados no acoplamento Lagrangeano-Euleriano:

- Parâmetros relativos a etapa de formação:
 - massa total evaporada por bolha, ao longo da formação (M_{evap}^{form}).
 - quantidade total de calor cedido ao líquido por bolha, ao longo da formação (Q^{form}).
 - frequência de formação de bolhas (f).
 - temperatura da fase gasosa ao final da formação, a qual foi considerada como sendo a temperatura de entrada da fase gasosa na simulação fluidodinâmica do ECD (T_g^{form}).
 - raio da bolha ao final da formação, o qual foi considerado como sendo o raio da bolha na simulação fluidodinâmica do ECD (R_b^{form}).
 - fração mássica de água na bolha ao final da formação, que foi considerada como sendo a fração mássica no ar de entrada na simulação fluidodinâmica Euleriana do ECD ($Y_{g,1}^{form}$).
 - altura da zona de formação (Z_f).
- Parâmetros relativos a etapa de ascensão:
 - Coeficientes médios de transferência de calor e massa, respectivamente, $\langle h_b \rangle$ (Equação 3.69) e $\langle k_b \rangle$ (Equação 3.70).

3.6.2 Etapa de Formação das Bolhas

Para incluir a transferência de calor e massa durante a formação de bolhas na modelagem Euleriana-Euleriana, o modelo Lagrangeano detalhado de CAMPOS e LAGE [2] foi utilizado para calcular as taxas mássica e de calor trocadas entre as fases ao longo desta etapa.

Uma região denominada zona de formação (para maiores detalhes veja a seção 4.3.4) foi definida no domínio de cálculo do modelo Euleriano. A zona de formação (ver Figura 4.11) consiste de um cilindro cujo diâmetro é igual ao da região de entrada e, cuja altura, Z_f , foi prevista pelo modelo Lagrangeano, estando esta

diretamente relacionada com a altura necessária para que ocorra o desprendimento da bolha do orifício de injeção de ar.

O modelo Lagrangeano calcula a massa total evaporada por bolha ao longo da formação (M_{evap}^{form}). Com este valor, foi possível determinar a taxa mássica total evaporada na etapa de formação (\dot{m}_{evap}^{form}), a saber:

$$\dot{m}_{evap}^{form} = M_{evap}^{form} \times f \times N_o \quad (3.72)$$

onde N_o é o número de orifícios na placa perfurada no distribuidor de ar.

Com o valor de \dot{m}_{evap}^{form} , foi possível calcular a vazão mássica modelada de entrada de ar na coluna, $\dot{m}_{g,ent}$, ou seja, a vazão corrigida de modo a considerar os efeitos da transferência de massa entre as fases na etapa de formação:

$$\dot{m}_{g,ent} = \dot{m}_{g,inj} + \dot{m}_{evap}^{form} \quad (3.73)$$

onde $\dot{m}_{g,inj}$ é a vazão mássica de ar injetada na coluna sem considerar os efeitos da etapa de formação, ou seja, é a vazão mássica de ar real que entra na coluna nos procedimentos experimentais.

Da mesma maneira foi possível calcular a taxa total de calor cedido pela fase gasosa à fase líquida (\dot{Q}_{form}) durante a etapa de formação:

$$\dot{Q}_{form} = Q^{form} \times f \times N_o \quad (3.74)$$

Com \dot{Q}_{form} e \dot{m}_{evap}^{form} definidos, foi possível incluir os efeitos de transporte de calor e massa entre as fases ao longo da formação, na simulação Euleriana-Euleriana do ECD.

No modelo Euleriano para a simulação do ECD, os efeitos da troca de calor e massa na etapa de formação, na fase líquida, foram incorporados por meio de termos fonte nas equações de transporte, válidos somente na região denominada zona de formação, a saber:

$$S_l^m = -\frac{\dot{m}_{evap}^{form}}{V_f} \quad (3.75)$$

$$S_l^e = \frac{\dot{Q}_{form} + \dot{Q}_d}{V_f} \quad (3.76)$$

onde V_f é o volume da zona de formação e \dot{Q}_d é a taxa de calor fornecida pelo distribuidor à fase líquida. Segundo RIBEIRO JR. [6], em alguns casos, dependendo da velocidade de injeção de gás na coluna, \dot{Q}_d pode representar mais de 50% do total de calor recebido pela fase líquida. O valor de \dot{Q}_d foi obtido dos dados experimentais de RIBEIRO JR. e LAGE [3]. É importante ressaltar que: $S_\alpha^m = S_l^m$ e $S_\alpha^e = S_l^e$.

Ao contrário do procedimento adotado para a fase líquida, no qual foram utilizados termos fonte nas equações de transporte, optou-se por corrigir a condição de entrada da fase gasosa a fim de considerar os efeitos da etapa de formação sobre a mesma.

Portanto, $Y_{g,1}^{form}$ e T_g^{form} , fornecidos pelo modelo Lagrangeano, foram considerados, respectivamente, a temperatura e a fração mássica de água no gás de entrada na simulação fluidodinâmica do ECD.

3.6.3 Etapa de Ascensão das Bolhas

A evaporação por contato direto tem natureza complexa, pois, além de apresentar uma resistência térmica na fase contínua, há também resistência ao transporte de calor e massa na fase gasosa. Além disso, a interface desempenha papel importante pois é onde ocorre a mudança de fase. Visto que os fenômenos de transferência de calor e massa são acoplados, a transferência de calor afeta a transferência de massa e vice-versa, isto torna a modelagem ainda mais complexa.

Vários modelos têm sido propostos para descrever a transferência simultânea de calor e massa entre as fases, através da interface. No modelo de dupla resistência, expressões globais para o fluxo de calor e massa são desenvolvidas a partir de expressões dos fluxos em cada filme, o qual separa o seio de cada fase da interface. As espessuras dos filmes não guardam relação entre si e dependem das condições hidrodinâmicas reinantes.

No modelo de duplo filme as seguintes hipóteses são válidas:

- fora dos filmes há completa turbulência, portanto as composições e temperatura no seio são constantes.
- existem finos filmes estagnados em cada fase nas intermediações da interface, nos quais ocorrem gradientes de temperatura e concentração e a transferência,

nestes filmes, se dá por mecanismos difusivos.

- há equilíbrio termodinâmico na interface.

Os fluxos através da interface são modelados por meio de coeficientes de transporte, onde todos os efeitos, a menos da força motriz, são agregados nestes coeficientes. Os coeficientes de transporte estão em função da capacidade de difusão da espécie, das propriedades físicas dos fluidos e das características do escoamento da mistura (responsável pelo comprimento característico da difusão).

No caso da transferência de massa, existe somente a resistência ao fluxo na fase gasosa, visto que a fase líquida é constituída por água pura. Desta forma, o fluxo mássico na interface pode ser equacionado da seguinte forma:

$$\dot{m}_{\beta,\alpha} = \langle k_b \rangle (\rho_{\beta,I} Y_{\beta,I,1}^{sat} - \rho_{\beta} Y_{\beta,1}) \quad (3.77)$$

onde $\rho_{\beta,I}$ é a densidade da fase gasosa calculada nas condições da interface, $Y_{\beta,I,1}^{sat}$ é a fração mássica de água na fase gasosa calculada nas condições da interface por meio da hipótese de equilíbrio termodinâmico (lei de Raoult, semelhante ao que foi aplicado na Equação 3.64).

O fluxo de calor cedido pela fase gasosa para a interface é modelado da seguinte forma:

$$\dot{q}_{\beta} = - \langle h_b \rangle (T_{\beta} - T_I) \quad (3.78)$$

3.7 Implementação da Transferência de Calor e Massa no CFX 11.0 da ANSYS

3.7.1 Introdução

No CFX 11.0 da ANSYS não existe nenhum modelo para a transferência simultânea de calor e massa em um sistema multifásico e multicomponente que considere a descontinuidade do fluxo de calor na interface. Portanto, foi necessário utilizar um artifício para que o software considerasse esta descontinuidade.

3.7.2 Linearização da Equação para o Cálculo da Temperatura Interfacial

Partindo da hipótese de equilíbrio interfacial e realizando um balanço de energia na interface é possível obter uma expressão para determinar a temperatura interfacial em função das outras variáveis envolvidas no processo, a saber: pressão, composição, temperatura da fase líquida, temperatura da fase gasosa etc.

Entretanto, devido a não-linearidades presentes em alguns termos da expressão resultante, como por exemplo nos termos para o cálculo do calor latente de vaporização e da pressão de vapor, faz-se necessário utilizar um procedimento iterativo para encontrar o valor da temperatura interfacial.

Devido a complexidade do problema e da dificuldade em se programar equações no CFX 11.0 da ANSYS, no presente trabalho a expressão resultante para o cálculo da temperatura da interface foi linearizada, ou seja, uma equação aproximada para o cálculo da temperatura interfacial foi implementada no CFX 11.0 da ANSYS.

A temperatura da interface gás-líquido, na simulação Euleriana-Euleriana, pode ser calculada utilizando a equação de conservação de energia na interface:

$$T_I = T_g - \frac{\dot{q}_g}{\langle h_b \rangle} \quad (3.79)$$

onde T_I é a temperatura da interface, T_g é a temperatura da fase gasosa, $\langle h_b \rangle$ é o coeficiente médio de transferência de calor na fase gasosa. O fluxo de calor da fase gasosa para a fase líquida, \dot{q}_g , pode ser calculado da seguinte forma:

$$\dot{q}_g = \dot{m}_{vap} \Delta H_I^{vap} + h_l [T_I - T_l] \quad (3.80)$$

onde h_l é o coeficiente de transferência de calor na fase líquida calculado utilizando a correlação de CALDERBANK e MOO-YOUNG [73] e T_l é a temperatura da fase líquida. A taxa mássica de evaporação, $\dot{m}_{vap}(t)$, é calculada da seguinte forma:

$$\dot{m}_{vap}(t) = \langle k_b \rangle [\rho_{g,I} Y_{g,1,I}^{sat} - \rho_g Y_{g,1}] \quad (3.81)$$

onde $\langle k_b \rangle$ é o coeficiente médio de transferência de massa na fase gasosa, $\rho_{g,I}$ é a densidade do gás nas condições de interface gás-líquido, $Y_{g,1,I}^{sat}$ é a fração mássica de

água na fase gasosa calculada utilizando a hipótese de equilíbrio termodinâmico na interface.

Substituindo a Equação 3.81 na Equação 3.80 e o resultado desta substituição na Equação 3.79, e após sucessivas manipulações algébricas, é possível encontrar a seguinte expressão:

$$T_I = T_g - \frac{\langle k_b \rangle}{\langle h_b \rangle} \rho_{g,I} Y_{g,1,I}^{sat} \Delta H_I^{vap} + \frac{\langle k_b \rangle}{\langle h_b \rangle} \rho_g Y_{g,1} \Delta H_I^{vap} - \frac{h_l}{\langle h_b \rangle} (T_I - T_l) \quad (3.82)$$

Os termos não lineares da Equação 3.82 são nomeados da seguinte forma:

$$F_1 = \frac{\langle k_b \rangle}{\langle h_b \rangle} \rho_{g,I} Y_{g,1,I}^{sat} \Delta H_I^{vap} \quad (3.83)$$

$$F_2 = \frac{\langle k_b \rangle}{\langle h_b \rangle} \rho_g Y_{g,1} \Delta H_I^{vap} \quad (3.84)$$

As não-linearidades presentes nas Equações 3.83 e 3.84 se originam nos cálculos dos termos relativos ao calor de vaporização (ΔH_I^{vap}) e fração mássica de água na interface ($Y_{g,1,I}^{sat}$).

As linearizações de F_1 e F_2 são realizadas por meio da utilização da série de Taylor truncada no segundo termo em torno do ponto T_{IO} :

$$F_1(T_I) = F_1(T_{IO}) + \left(\frac{dF_1}{dT_I} \right)_{T_I=T_{IO}} (T_I - T_{IO}) = b_1 + a_1 (T_I - T_{IO}) \quad (3.85)$$

$$F_2(T_I) = F_2(T_{IO}) + \left(\frac{dF_2}{dT_I} \right)_{T_I=T_{IO}} (T_I - T_{IO}) = b_2 + a_2 (T_I - T_{IO}) \quad (3.86)$$

onde:

$$b_1 = F_1(T_{IO}) \text{ e } b_2 = F_2(T_{IO}) \quad (3.87)$$

$$a_1 = \left(\frac{dF_1}{dT_I} \right)_{T_I=T_{IO}} \text{ e } a_2 = \left(\frac{dF_2}{dT_I} \right)_{T_I=T_{IO}} \quad (3.88)$$

As derivadas das Equações 3.85 e 3.86 foram calculadas com o auxílio do software MAPLE 10.0 da Maplesoft. Com exceção de T_I , todas as outras variáveis foram consideradas constantes.

Substituindo as Equações 3.85 e 3.86 na Equação 3.82 e fazendo sucessivas manipulações algébricas a fim de isolar T_I , obtém-se:

$$T_I = T_g + \frac{1}{C} \left[-D + E + \frac{h_l}{\langle h_b \rangle} T_l \right] \quad (3.89)$$

onde as constantes C , D e E são calculados da seguinte forma:

$$C = 1 + \frac{\langle k_b \rangle}{\langle h_b \rangle} a_1 - \frac{\langle k_b \rangle}{\langle h_b \rangle} \rho_g Y_{g,1} a_2 + \frac{h_l}{\langle h_b \rangle} \quad (3.90)$$

$$D = \frac{\langle k_b \rangle}{\langle h_b \rangle} (b_1 - a_1 T_{IO}) \quad (3.91)$$

$$E = \frac{\langle k_b \rangle}{\langle h_b \rangle} \rho_g Y_{g,1} (b_2 - a_2 T_{IO}) \quad (3.92)$$

As Equações 3.89 a 3.92 foram implementadas no CFX 11.0 da ANSYS com o intuito de calcular a temperatura da interface gás-líquido na simulação fluidodinâmica do ECD.

Capítulo 4

Resultados e Discussão

4.1 Introdução

Este capítulo é dividido em duas partes, na primeira, são abordados os resultados obtidos no estudo da transferência de calor e massa entre as fases, ao longo das etapas de formação e ascensão de uma bolha isolada. Este estudo permitiu avaliar a adequabilidade dos parâmetros médios obtidos na simulação Lagrangeana. A segunda parte é dedicada a avaliação das simulações fluidodinâmicas do ECD. Análises da hidrodinâmica e dos processos de transferência de calor e massa foram feitas.

4.2 Estudo da Transferência de Calor e Massa Durante a Formação e Ascensão de uma Bolha Superaquecida em uma Coluna de Líquido

Todos os resultados apresentados nesta seção, a não ser que seja indicado de outra maneira, incluindo os valores médios dos coeficientes de transferência de calor e massa, foram obtidos a partir do modelo Lagrangeano detalhado desenvolvido por CAMPOS e LAGE [2]. Na Tabela 4.1 estão expostas as condições operacionais fixas utilizadas nas simulações dos modelos Lagrangeano detalhado e simplificado. A Tabela 4.2 apresenta os casos estudados para investigar o comportamento do processo frente a variações na temperatura do líquido na coluna, casos 1, 2 e 3 e na temperatura de injeção de gás, casos 4, 5 e 6 . É importante ressaltar que as

Tabela 4.1: Condições fixas para a simulação da formação e ascensão de uma bolha em uma coluna de líquido

Parâmetros	valores
Diâmetro do orifício do distribuidor, d_o (mm)	0,50
Vazão de ar injetado no orifício, \dot{m}_{inj} (kg s ⁻¹)	$1,109 \times 10^{-6}$
Pressão, P (kPa)	102,75
Massa inicial de água no evaporador (kg)	1,06
Altura de borbulhamento, \hat{H}_{borb} (cm)	28,03
Fração mássica de água no ar injetado, $Y_{inj,1}$	$3,76 \times 10^{-3}$

condições analisadas garantem o regime homogêneo de borbulhamento.

Conforme a bolha ascende na coluna de líquido, um fluxo de calor é gerado devido à diferença de temperatura entre o ar superaquecido e a fase líquida. O calor possui dois destinos, uma parte é utilizada para aquecer o líquido e a outra é destinada a vaporização da água na superfície da bolha, portanto, um fluxo de massa é gerado para o interior da mesma. Com o decorrer do tempo, a temperatura média da bolha diminui e a fração mássica média de água na bolha aumenta, desta forma, a bolha caminha em direção ao equilíbrio termo-mássico.

A temperatura adimensional, T_{ad} , e o grau de saturação, α_{sat} , são calculados da seguinte maneira:

$$T_{ad} = \frac{T_b - T_l}{T_{inj} - T_l} \quad (4.1)$$

Tabela 4.2: Temperatura da fase líquida e de injeção de gás na coluna

Casos	$T_{g,inj}$ (K)	T_l (K)
1	500	310
2	500	330
3	500	360
4	360	340
5	600	340
6	840	340

$$\alpha_{sat} = \frac{Y_{b,1}}{Y_{sat}} \quad (4.2)$$

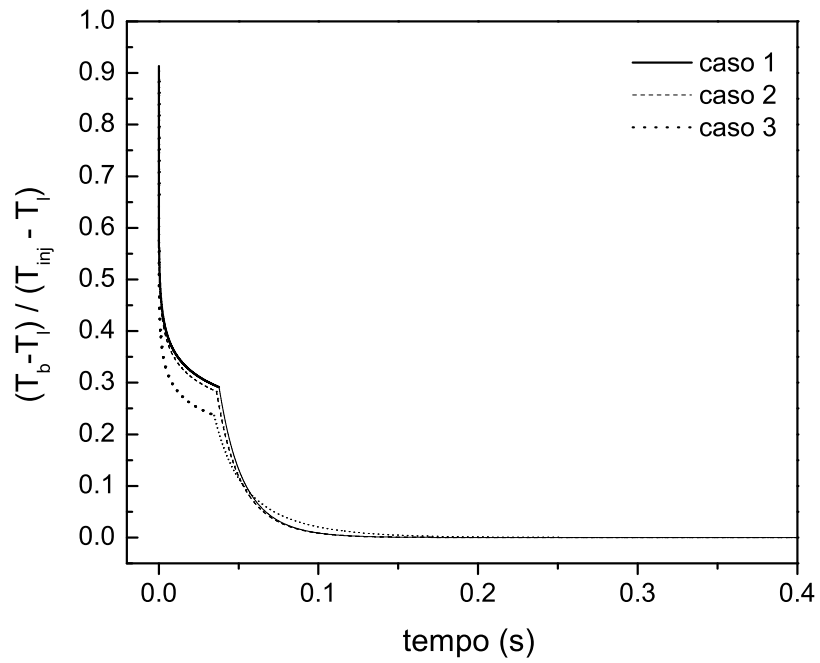
onde Y_{sat} é a fração mássica de saturação de água calculada na temperatura da fase líquida.

As Figuras 4.1 e 4.2 ilustram, respectivamente, o comportamento transiente de T_{ad} e de α_{sat} para todos os casos da Tabela 4.2.

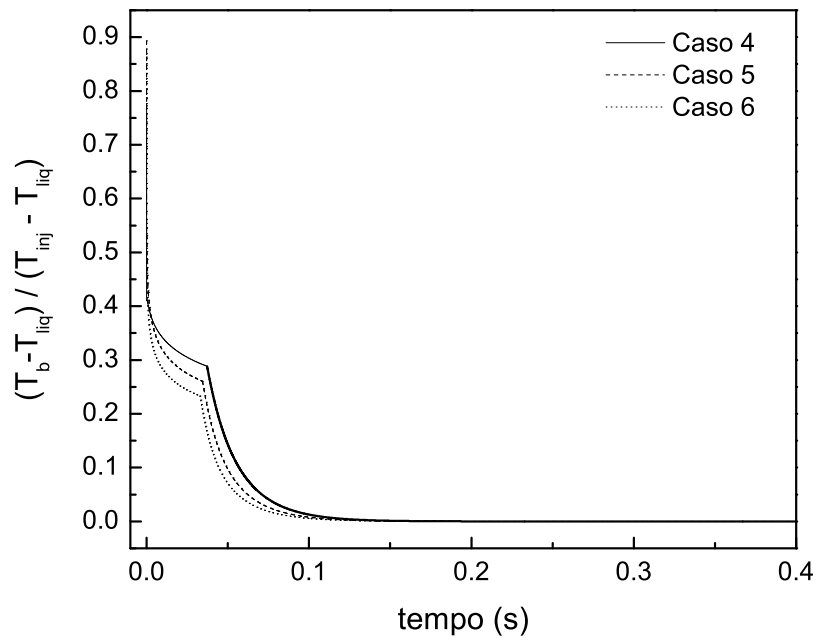
Nas Figuras 4.1 e 4.2, tanto para o grau de saturação quanto para a temperatura adimensional, a variação temporal é intensa no início das etapas de formação e ascensão, tornando-se suave ao final das mesmas. A redução da temperatura média na bolha e o aumento da fração mássica de água na bolha, promovem a diminuição, respectivamente, dos fluxos de calor e de massa. Portanto, as taxas de variação da temperatura e da fração mássica de água diminuem, visto que estão intimamente relacionadas aos fluxos de calor e massa. Desta maneira, a forma dos perfis transientes do grau de saturação e da temperatura adimensional, é explicada, ou seja, altos gradientes no início das etapas, promovem altos fluxos que por sua vez provocam a queda acentuada da temperatura e fração mássica de água, a forte queda inicial é amenizada devido ao resfriamento e adição de água na bolha, que faz com que os gradientes não sejam tão intensos quanto no início, tornando mais suaves, portanto, a queda dos perfis da temperatura adimensional e do grau de saturação.

No que tange ao comportamento da temperatura adimensional e do grau de saturação, frente a variações na temperatura da fase líquida, é possível observar, nas Figuras 4.1a e 4.2a (casos 1 a 3), que a etapa de formação é de extrema importância, tanto para o processo de transferência de massa quanto para o processo de transferência de calor, o que está em plena concordância com o que foi relatado no Capítulo 2. Ao final da etapa de formação, os valores para a temperatura adimensional estão na faixa de 0,24 a 0,29 e os valores do grau de saturação estão na faixa de 0,69 a 0,77. Também é possível observar a importância da etapa de formação nos casos de 4 a 6, Figuras 4.1b e 4.2b.

Os “bicos” que aparecem nos perfis apresentados nas Figuras 4.1 e 4.2, podem ser explicados pela interrupção da injeção de ar, que gera uma variação abrupta no valor da velocidade média no interior da bolha, conforme pode ser observado na Figura 4.3, a qual apresenta a evolução temporal da média volumétrica da velocidade radial da

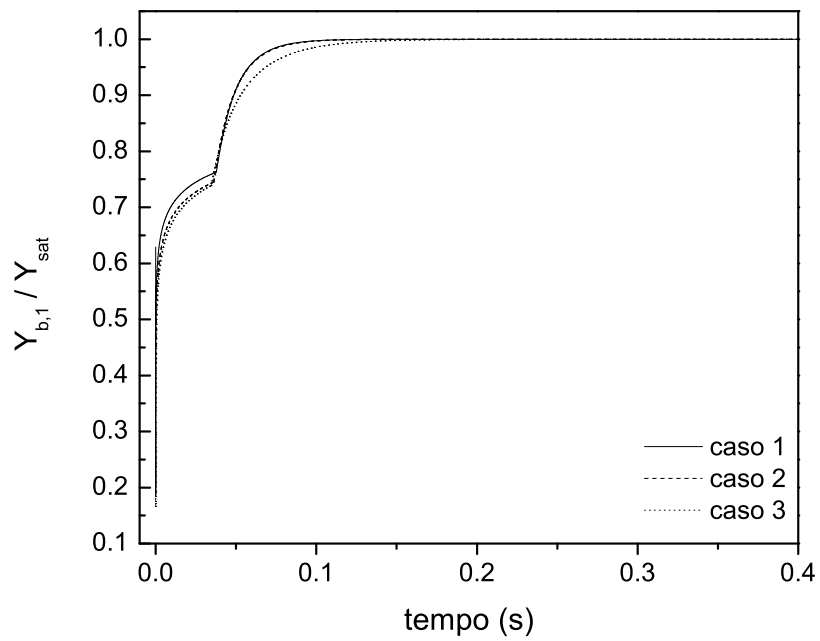


(a)

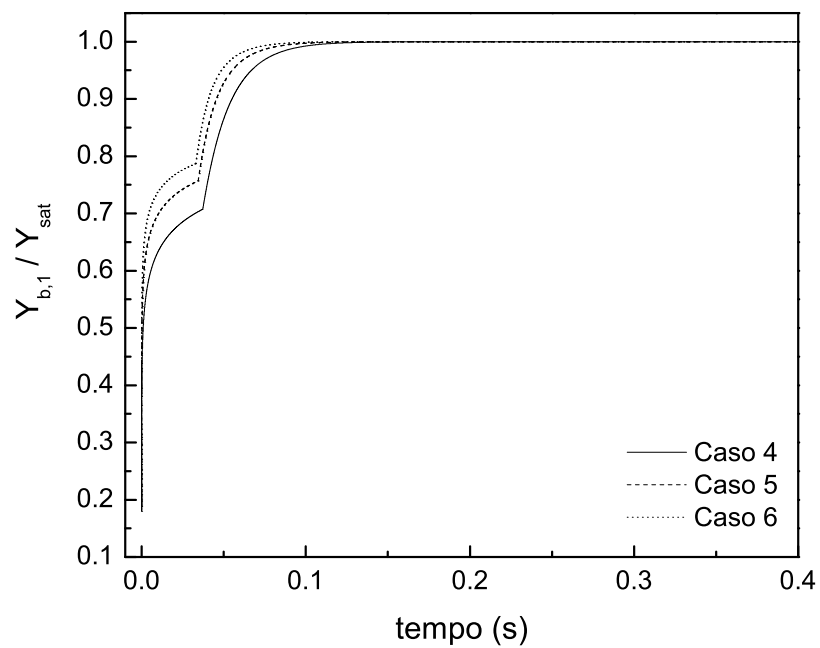


(b)

Figura 4.1: Evolução temporal da temperatura adimensional para os casos 1 a 3 (a) e 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE [2].



(a)



(b)

Figura 4.2: Evolução temporal do grau de saturação para os casos 1 a 3 (a) 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE [2].

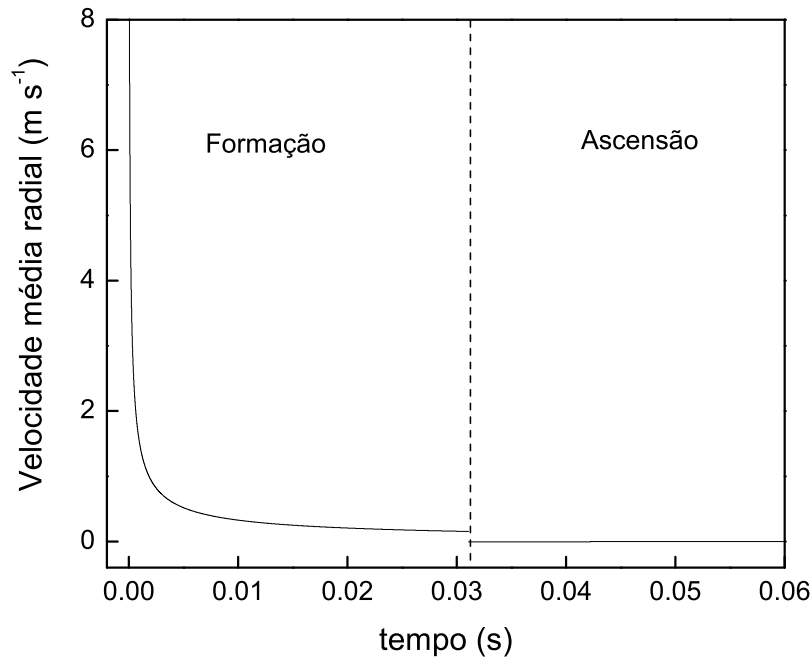


Figura 4.3: Evolução temporal da média volumétrica da velocidade radial dentro da bolha para o modelo de CAMPOS e LAGE [2].

mistura gasosa dentro da bolha para o caso 2. Durante a etapa de formação, a injeção de ar quente compensa parcialmente a perda de calor da bolha para a fase líquida e promove a diluição da massa de água evaporada. Com o desprendimento, estes efeitos cessam, promovendo uma mudança nas taxas de variação da temperatura e da fração mássica, explicando portanto, o surgimento dos bicos nos respectivos perfis.

As Figuras 4.4 e 4.5 ilustram, respectivamente, o comportamento transiente dos coeficientes de transferência de calor e massa frente à variações nas temperaturas da fase líquida e de injeção. Fica evidenciada uma acentuada queda no início da etapa de formação, em todos os casos, que se suaviza ao longo do tempo. Na etapa de formação, os valores dos coeficientes de transferência de calor variam, em média, cerca de duas ordens de grandeza, enquanto os coeficientes de transferência de massa variam cerca de quatro ordens de grandeza. Por outro lado, ao longo da etapa de ascensão, a variação de ambos os coeficientes, em todos os casos estudados, é bem menos intensa quando comparadas com as variações obtidas na formação.

O modelo desenvolvido por CAMPOS e LAGE [2] considera as contribuições di-

fusivas e convectivas nos fluxos de calor e massa na direção radial, conforme pode ser observado nas Equações 3.51 a 3.53. A acentuada variação dos coeficientes ao longo da etapa de formação da bolha, está associada, primordialmente, à importância da contribuição convectiva, a qual pode ser analisada por meio da evolução temporal da velocidade média da mistura gasosa no interior da bolha (Figura 4.3).

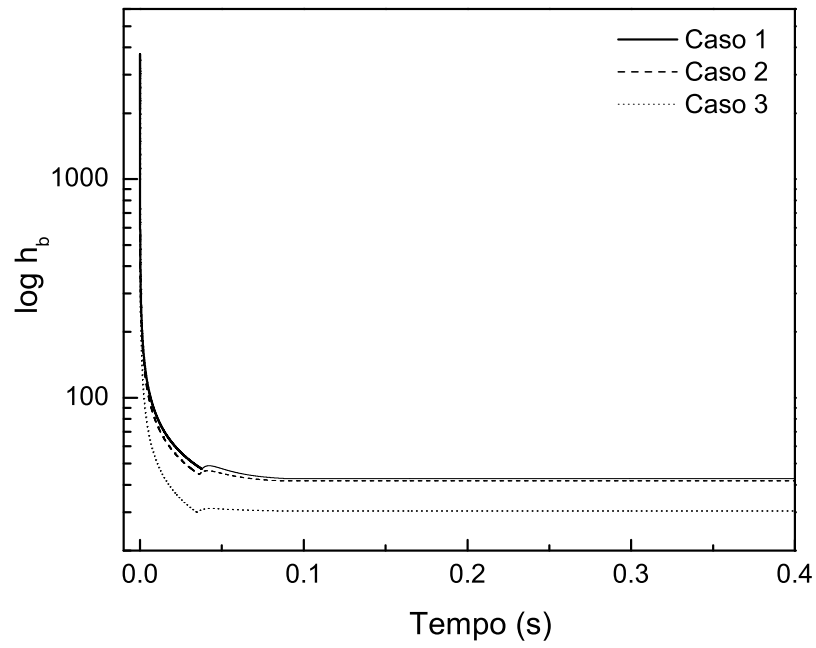
No início da etapa de formação, o gás é injetado em uma bolha de pequeno volume, garantindo, portanto, altas velocidades radiais e altos fluxos convectivos. Com o aumento do volume da bolha e para uma vazão constante de injeção, a velocidade radial do gás diminui. Ao término da formação, a velocidade é praticamente igual a zero e os processos de transferência de calor e massa ocorrem primordialmente devido à efeitos difusivos.

Após o desprendimento, a velocidade radial varia somente devido a variações no volume da bolha, ocasionada por mudanças em sua temperatura ou massa. A Figura 4.6 apresenta a evolução temporal do raio da bolha para os casos de 1 a 6.

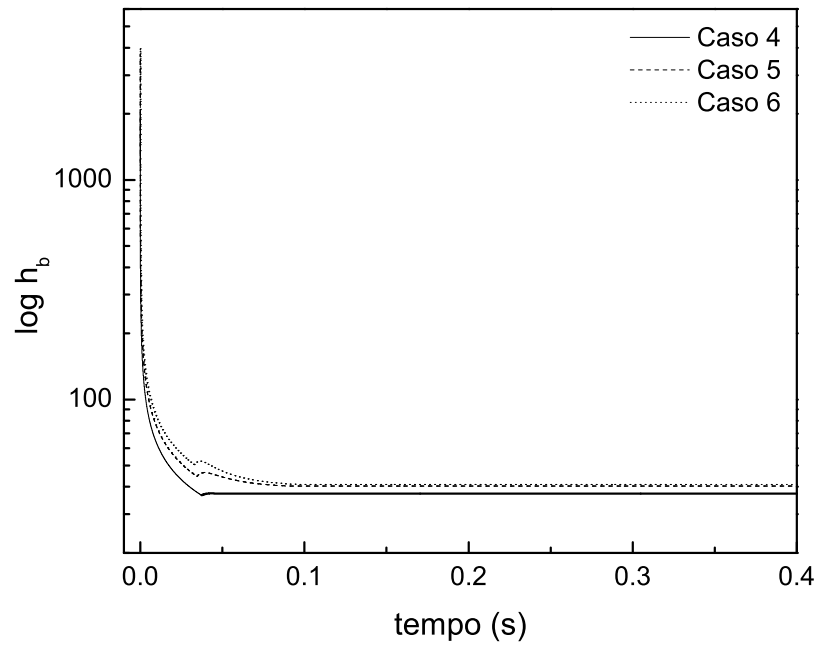
Observa-se na Figura 4.6a, que nos casos 1 e 2, houve uma contração da bolha nos instantes iniciais da etapa de ascensão, enquanto que para o caso 3, ao invés de contração, houve uma leve expansão no volume da bolha.

A contração do volume da bolha na etapa de ascensão, que ocorre nos casos 1 e 2, é resultado do aumento da densidade da mistura gasosa, o qual ocorre devido à queda da temperatura média na bolha, que por sua vez, não é mais compensada pela injeção de ar. Em ambos os casos a entrada de massa devido à vaporização não compensa o efeito da redução da temperatura. Curiosamente, para o caso 3, não ocorre contração, pelo contrário ocorre uma leve expansão. Isto se deve ao alto valor da temperatura da fase líquida, que está acima da temperatura do estado pseudo-estacionário do sistema, que além de promover uma menor contração, produz uma alta taxa de vaporização, que compensa a queda de temperatura média na bolha, estes dois efeitos combinados conduzem ao aumento do volume da bolha.

Para os casos 4 a 6, nos quais a temperatura do líquido permanece constante, observa-se que quanto maior a temperatura de injeção do gás, maior é o volume da bolha ao final da formação. Isto se deve aos maiores volumes de ar injetado para o interior da bolha, pois as simulações foram feitas a vazão mássica de ar constante no orifício. Observa-se ainda que, para os casos 5 e 6, houve contração do raio ao

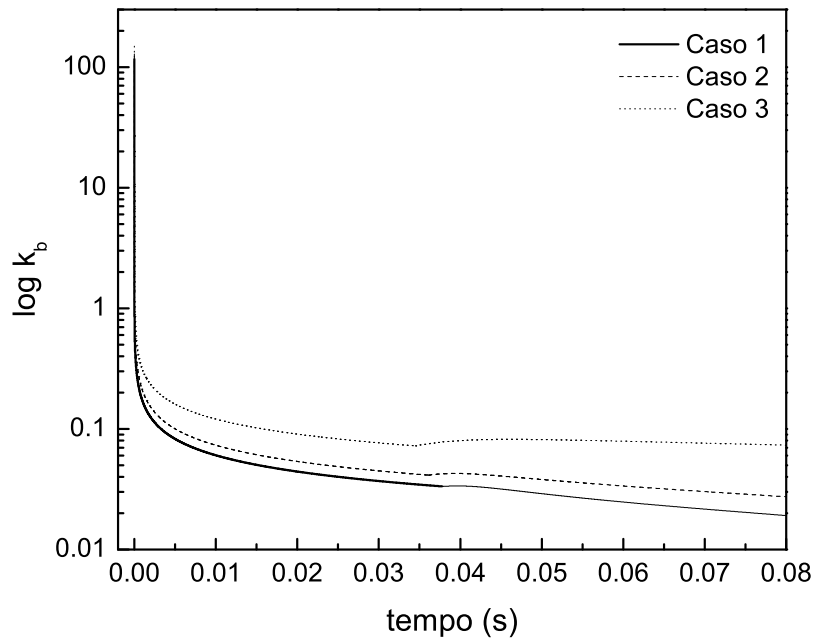


(a)

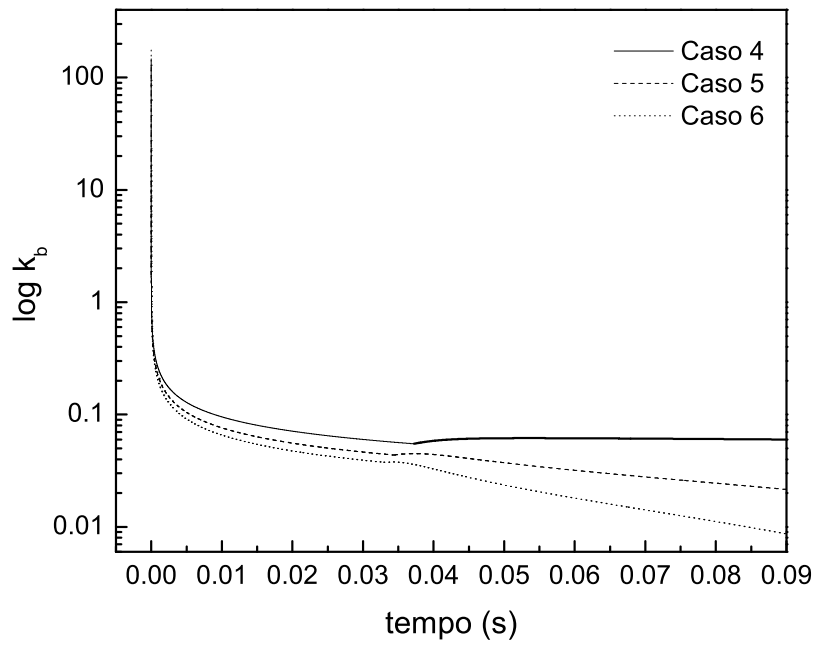


(b)

Figura 4.4: Evolução temporal do coeficiente de transferência de calor para os casos 1 a 3 (a) 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE [2].

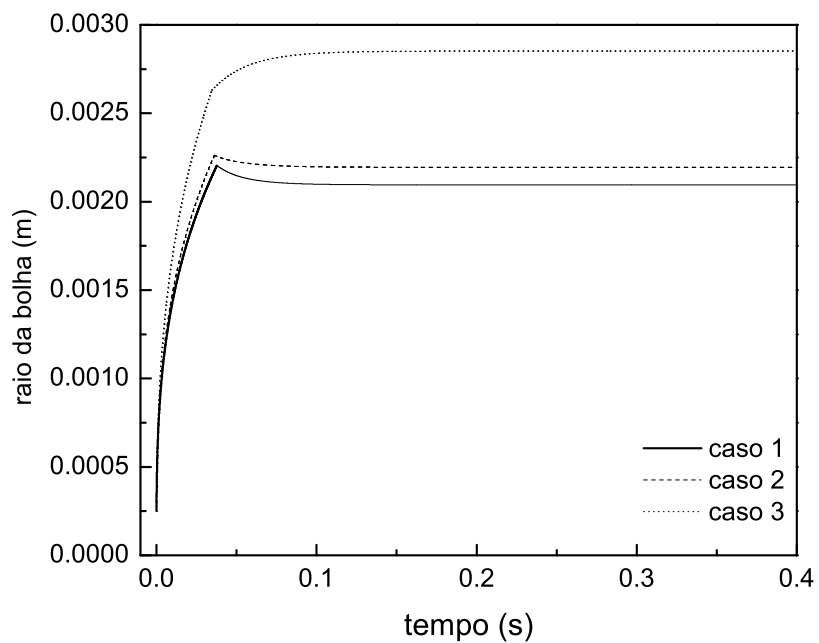


(a)

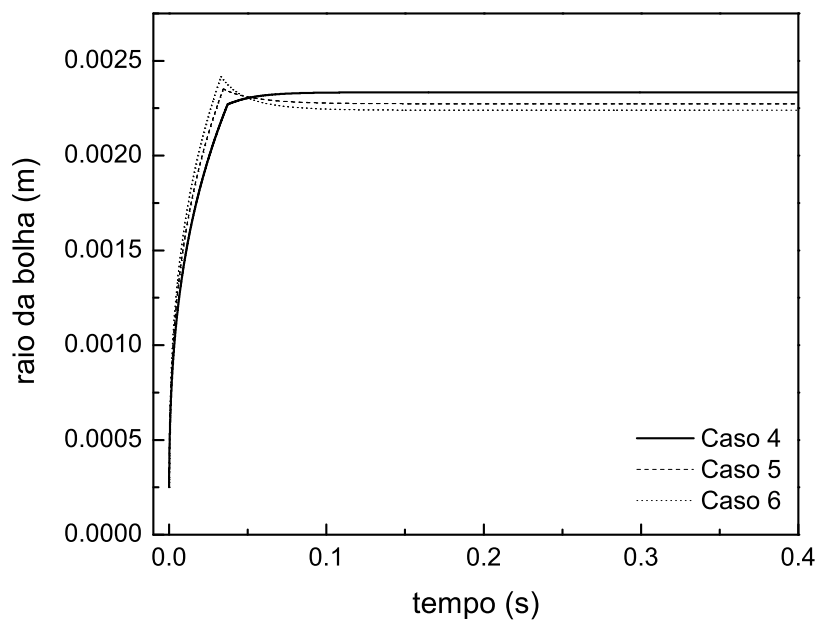


(b)

Figura 4.5: Evolução temporal do coeficiente de transferência de massa para os casos 1 a 3 (a) 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE [2].



(a)



(b)

Figura 4.6: Evolução temporal do raio da bolha para os casos 1 a 3 (a) 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE [2].

longo da ascensão, e que para o caso 4 ocorreu uma leve expansão. A contração ocorre devido a um aumento na densidade ocasionada pela redução considerável na temperatura da bolha: no caso 5, de 600 para 340 K e no caso 6, de 840 para 340 K. No caso 4, a temperatura de injeção não está muito acima da temperatura da fase líquida, o que faz com que a redução da temperatura ao longo das etapas não seja tão acentuada quanto nos casos 5 e 6. Portanto, a contração que deveria ocorrer devido ao aumento da densidade é compensada pela entrada de vapor de água devido à vaporização na bolha, acarretando em uma leve expansão da mesma.

Nos casos 1 a 6, a contração ou expansão da bolha ocorre até que os fenômenos de transferência de calor e massa cessem, quando então, o raio da bolha permanece constante, já que o modelo despreza a variação da pressão hidrostática.

Para os casos estudados, observa-se que os coeficientes de transferência de calor praticamente não variaram na etapa de ascensão, conforme pode ser observado na Tabela 4.3, a qual apresenta os valores máximos e mínimos do coeficiente de transferência de calor, e também na Tabela 4.4, a qual apresenta os valores médios do coeficiente de transferência de calor (média aritmética), o desvio padrão (DP) e o coeficiente de variação (CV). O Coeficiente de variação é uma maneira de se expressar a variabilidade dos dados sem que os mesmos sejam influenciados pela ordem de grandeza, sendo definido pelo quociente da divisão do desvio-padrão pela média. A média e o desvio-padrão, nas Tabelas 4.4 e 4.6, foram calculados em um conjunto total de aproximadamente 10.000 dados (instantes de tempo). Em todos os casos observa-se que a dispersão em torno da média dos valores dos coeficientes de transferência de calor, na etapa de ascensão não ultrapassou 11%

A Tabela 4.5 apresenta os valores máximo e mínimo dos coeficientes de transferência de massa. A Tabela 4.6 apresenta os valores médios do coeficiente de transferência de massa, o desvio padrão (DP) e o coeficiente de variação (CV). Conforme pode ser observado nestas tabelas, os valores dos coeficientes de transferência de massa, quando comparados com os valores do coeficiente de transferência de calor, possuem uma maior amplitude de variação na etapa de ascensão. Os valores oscilaram na faixa de 3 a 77%, sendo o maior valor obtido para o caso 6.

Para os casos analisados nesta seção, a contração e a expansão durante a etapa de ascensão, podem ser consideradas pequenas quando comparadas a variação de

Tabela 4.3: Valores máximo e mínimo para os coeficientes de transferência de calor

Casos	$Max(h_b)$ $W\ m^{-2}\ s^{-1}$		$Min(h_b)$ $W\ m^{-2}\ s^{-1}$	
	Asc.	Form.	Asc.	Form.
1	48,76	3720	42,72	47,10
2	46,26	3530	41,74	44,50
3	31,08	3237	29,87	29,88
4	37,34	2027	36,60	36,62
5	46,44	3731	40,36	44,62
6	52,34	3997	41,04	50,41

volume ao longo da etapa de formação. Como os valores das velocidades no interior da bolha estão muito próximos de zero, ver Figura 4.3, pode-se concluir que o transporte na etapa de ascensão é predominantemente difusivo em todos os casos. Como o raio praticamente não varia, o comprimento característico da difusão também não varia. Além disso, as variações das propriedades físicas decorrentes das variações na temperatura e concentração são menores nesta etapa. A conjunção destes fatores, leva a valores de coeficientes de transferência de calor e massa praticamente constantes na etapa de ascensão.

As Tabelas 4.7 e 4.8 apresentam os valores dos erros máximo e médio, respec-

Tabela 4.4: Valores médios para os coeficientes de transferência de calor (média aritmética), desvio-padrão (DP) e coeficiente de variação (CV)

Casos	$\langle h_b \rangle$ $W\ m^{-2}\ s^{-1}$		DP		CV	
	Asc.	Form.	Asc.	Form.	Asc.	Form.
1	44,93	81,31	2,32	817	0,0517	10,0
2	43,39	76,62	1,74	781	0,0400	10,20
3	30,51	53,47	0,30	721	0,0098	13,5
4	37,21	61,94	0,11	509	0,0030	8,208
5	42,58	76,86	2,41	814	0,0565	10,6
6	44,86	86,52	4,49	865	0,1001	10,0

Tabela 4.5: Valores máximo e mínimo para os coeficientes de transferência de massa

Casos	$Max(k_b)$ $m s^{-1}$		$Min(k_b)$ $m s^{-1}$	
	Asc.	Form.	Asc.	Form.
1	0,0338	116,4	0,0160	0,0335
2	0,0429	128,1	0,0241	0,0415
3	0,0823	148,7	0,0640	0,0726
4	0,0616	133,4	0,0549	0,0549
5	0,0449	146,1	0,0198	0,0436
6	0,0378	174,8	0,0070	0,0376

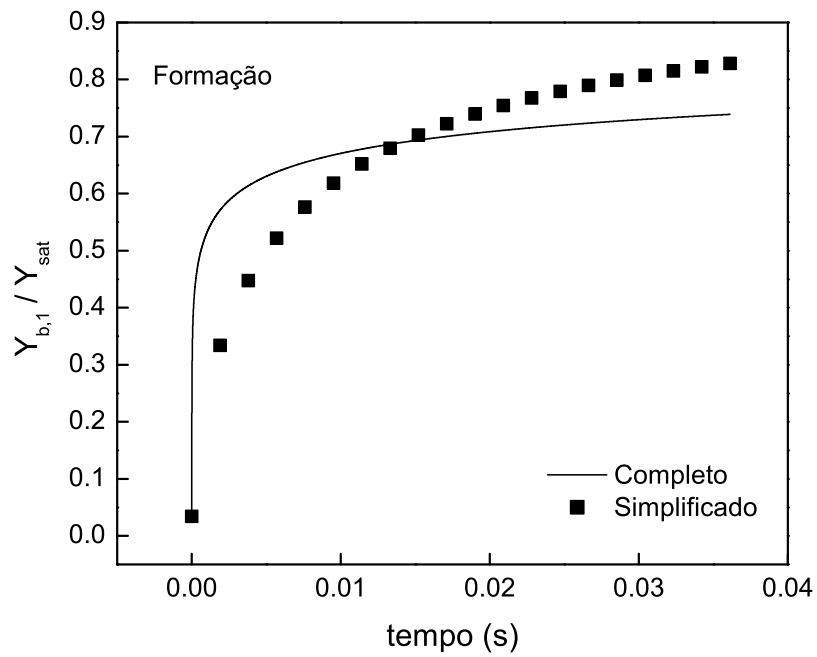
tivamente, para o grau de saturação e temperatura adimensional. O erros foram definidos como sendo o módulo da diferença entre os valores obtidos pelos modelos completo e simplificado. A estatística foi elaborada em um conjunto de aproximadamente 15 mil pontos (instantes de tempo).

As Figuras 4.7, 4.8 e 4.9, mostram os comportamentos das variáveis do processo para os modelos detalhado e simplificado, nas etapas de formação e ascensão. Os resultados apresentados nestas figuras foram obtidos utilizando-se as condições operacionais do caso 2.

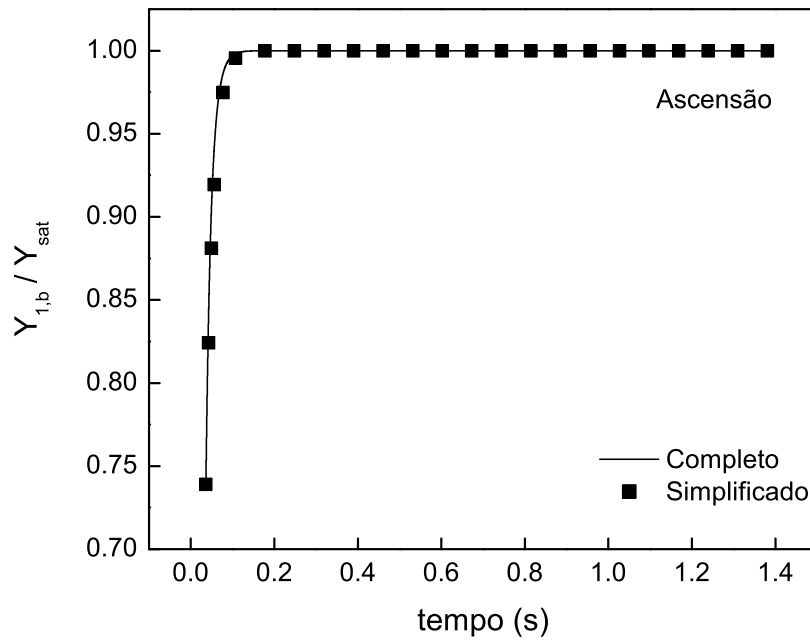
Para a etapa de formação, com exceção do raio da bolha, a utilização de valores

Tabela 4.6: Valores médios para os coeficientes de transferência de massa (média aritmética), desvio-padrão (DP) e coeficiente de variação (CV)

Casos	$\langle k_b \rangle$ $m s^{-1}$		DP		CV	
	Asc.	Form.	Asc.	Form.	Asc.	Form.
1	0,0238	0,0605	0,0069	3,5	0,290	57,4
2	0,0329	0,0749	0,0071	3,8	0,216	50,3
3	0,0743	0,1220	0,0062	4,2	0,083	34,5
4	0,0606	0,0951	0,0021	3,4	0,034	36,1
5	0,0309	0,0796	0,0104	4,362	0,337	54,79
6	0,0182	0,0707	0,0141	5,3	0,771	74,9

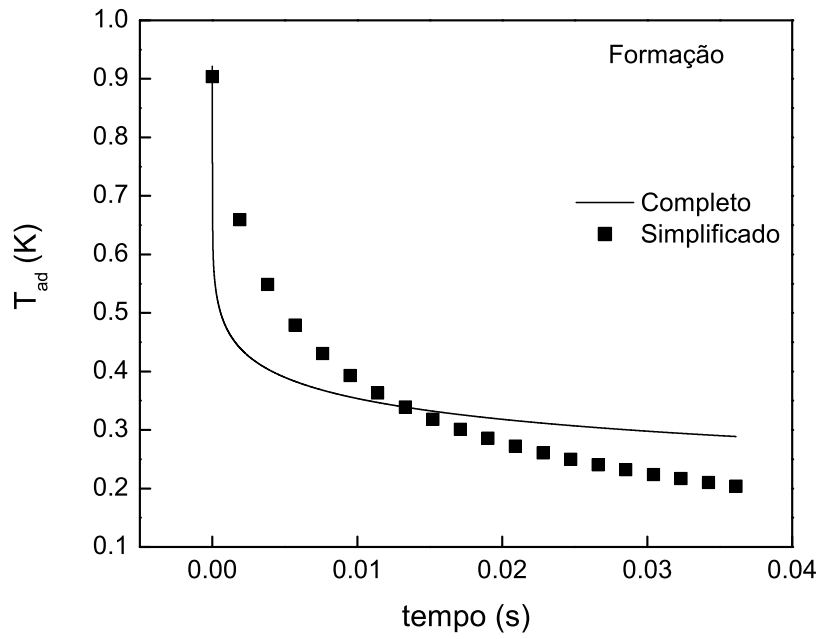


(a)

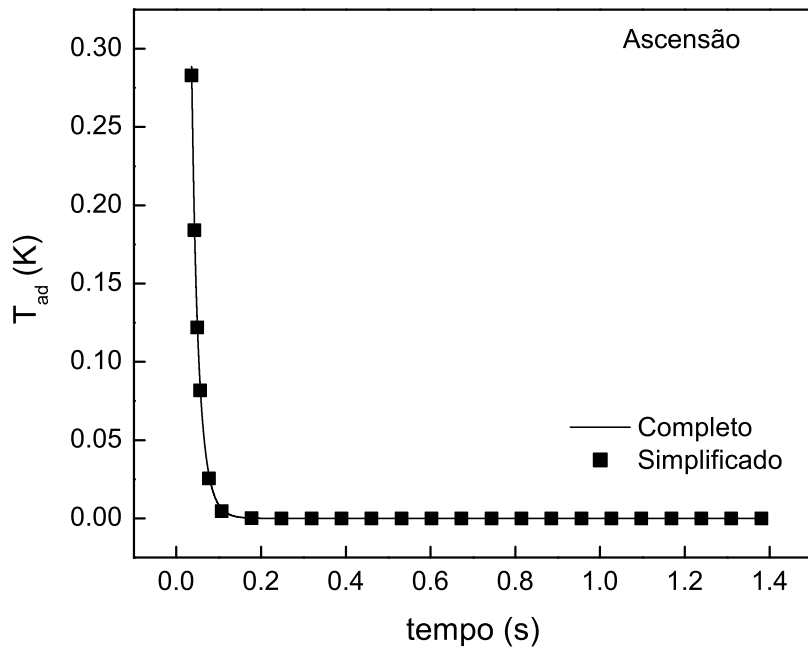


(b)

Figura 4.7: Comparação entre os comportamentos do grau de saturação nas etapas de formação (a) e ascensão (b), para o modelo simplificado e o modelo detalhado de CAMPOS e LAGE. [2].

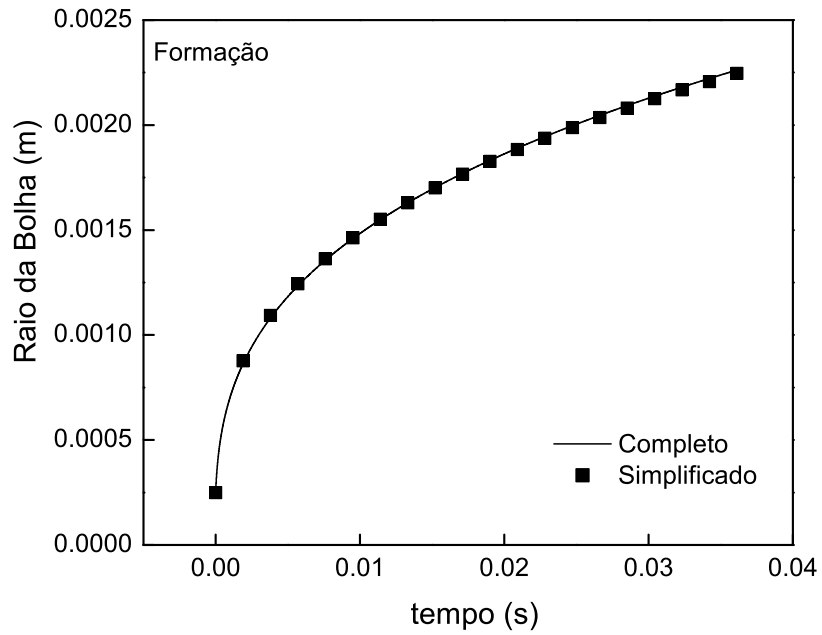


(a)

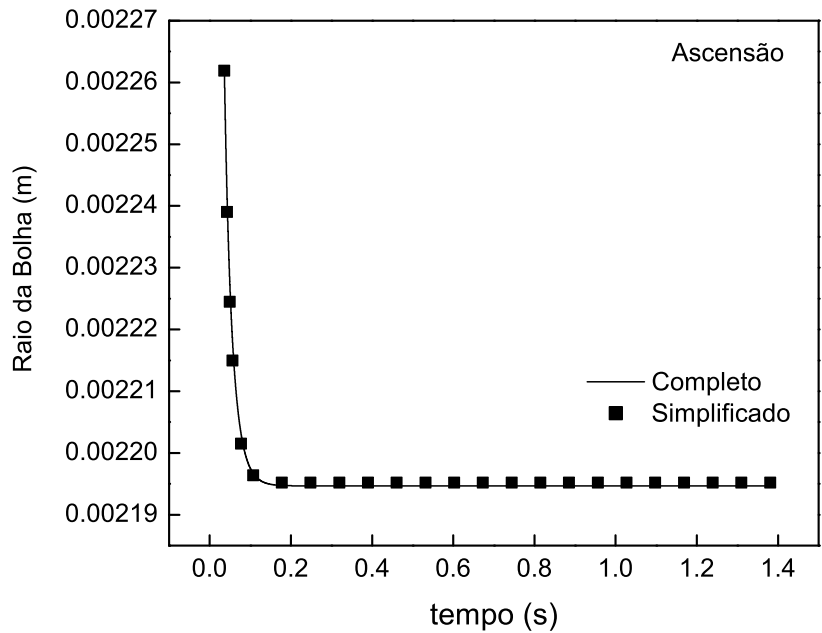


(b)

Figura 4.8: Comparação entre os comportamentos da temperatura adimensional nas etapas de formação (a) e ascensão (b), para o modelo simplificado e o modelo detalhado de CAMPOS e LAGE [2]. 59



(a)



(b)

Figura 4.9: Comparação entre os comportamentos do raio da bolha nas etapas de formação (a) e ascensão (b) para o modelo simplificado e o modelo detalhado de CAMPOS e LAGE. [2].

Tabela 4.7: Erros entre os valores preditos pelo modelo simplificado e modelo completo para α_{sat}

Casos	% Erro		% Erro	
	Máximo α_{sat}		Médio α_{sat}	
	Asc.	Form.	Asc.	Form.
1	2,98	73,32	0,68	59,64
2	2,44	31,00	0,54	16,47
3	0,78	15,56	0,15	8,49
4	0,29	20,95	0,03	11,66
5	3,37	29,91	0,74	15,60
6	5,73	40,72	1,41	19,36

médios constantes para os coeficientes no modelo simplificado, calculados segundo as Equações 3.69 e 3.70, levou a predição inadequada do comportamento transiente das variáveis. O caso 3 foi o que apresentou melhor desempenho na predição da fração mássica, com erro médio inferior a 9%. Entretanto, para este mesmo caso, o erro da temperatura média foi maior do que 18%. A melhor predição da temperatura foi obtida para o caso 6, cujo erro médio foi igual a 16%.

No que tange ao comportamento do raio, é possível observar na Figura 4.9 que o modelo simplificado mostrou boa concordância com os resultados do modelo deta-

Tabela 4.8: Erros entre os valores preditos pelo modelo simplificado e modelo completo para T_{ad}

Casos	% Erro		% Erro	
	Máximo T_{ad}		Médio T_{ad}	
	Asc.	Form.	Asc.	Form.
1	0,73	69,13	0,15	54,97
2	0,58	37,38	0,12	17,22
3	0,28	38,18	0,05	18,26
4	0,08	45,22	0,02	23,04
5	0,77	36,19	0,16	17,11
6	1,22	38,32	0,25	16,36

lhado na etapa de formação. Isto se deve ao fato da queda de temperatura da bolha e a vaporização de água afetarem menos o raio do que a injeção de gás durante a etapa de formação das bolhas.

Os desvios apresentados pelo grau de saturação e temperatura adimensional, em relação ao modelo completo, podem ser justificados pela grande variação dos coeficientes de transporte ao longo da formação, que pode alcançar quatro ordens de grandeza (ver Figura 4.4).

Para a etapa de ascensão, a utilização de valores médios para os coeficientes de transporte no modelo simplificado apresentou boa concordância com o comportamento predito pelo modelo detalhado. Isto se deve ao fato dos coeficientes variarem pouco na etapa de ascensão. Mesmo para o caso 6, onde houve o maior desvio no valor do coeficiente de transferência de massa (verificar o valor do coeficiente de variação na Tabela 4.6), o erro médio obtido para o grau de saturação foi inferior a 2%, enquanto o erro médio para a temperatura adimensional foi inferior a 1%. Portanto, o uso de coeficientes de transporte constantes no modelo simplificado gerou, para a etapa de ascensão, valores concordantes com os apresentados pelo modelo completo proposto por CAMPOS e LAGE [2]. Cabe ressaltar que o modelo de CAMPOS e LAGE [2] foi validado experimentalmente.

Desta maneira, concluí-se que a utilização de valores médios adequados para os coeficientes de transporte em um modelo a parâmetros concentrados (simplificado) permite a correta predição dos valores das variáveis na etapa de ascensão de bolhas, indicando que uma aproximação equivalente pode ser feita na simulação fluidodinâmica do ECD.

4.3 Simulações Fluidodinâmicas

4.3.1 Introdução

Nesta seção serão detalhados os resultados das simulações computacionais utilizadas na investigação da fluidodinâmica e da transferência de calor e massa entre as fases, no processo de evaporação por contato direto. O objetivo das simulações fluidodinâmicas desenvolvidas no presente trabalho foi validar, utilizando dados experimentais da literatura, o modelo e a metodologia utilizada para incorporar os

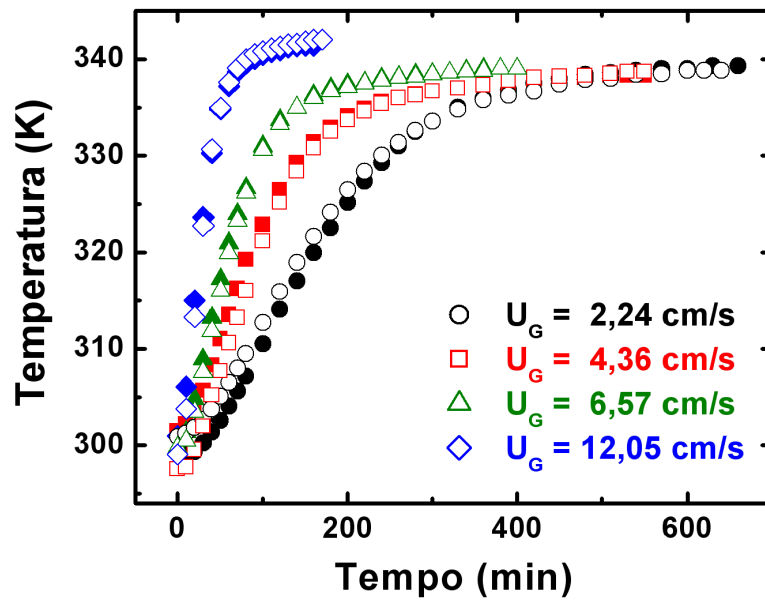
efeitos da transferência de calor e massa nas etapas de formação e ascensão. As características geométricas e operacionais do evaporador foram baseadas no aparato experimental utilizado por RIBEIRO JR. e LAGE [3]. Porém, antes da discussão dos resultados obtidos, detalhes experimentais e de implementação numérica serão abordados.

4.3.2 Dados Experimentais

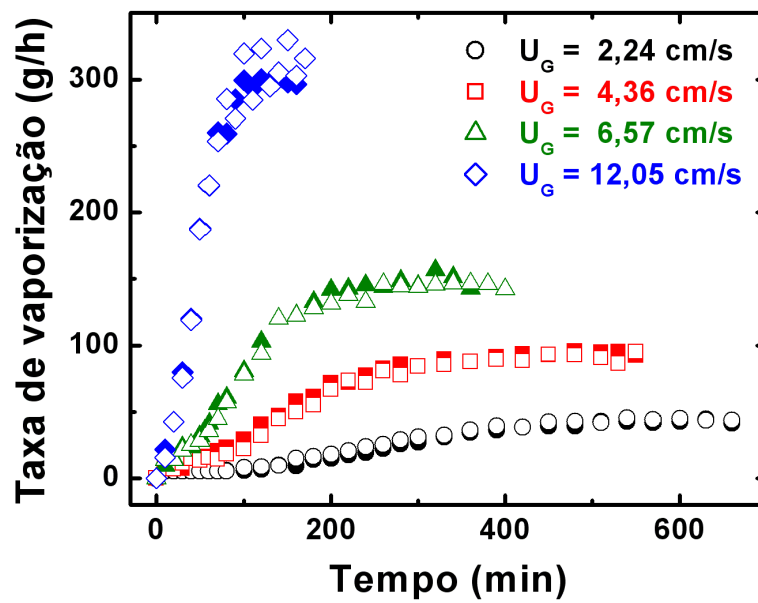
Simulações fluidodinâmicas de evaporadores por contato direto operando em regime homogêneo, foram realizadas de acordo com as condições experimentais utilizadas por RIBEIRO JR. e LAGE [3], os quais borbulharam ar superaquecido em uma coluna d'água. Para realizar os experimentos, utilizaram uma coluna de vidro com 7,3 cm de diâmetro e 70 cm de altura. Os experimentos foram conduzidos em três valores diferentes de velocidade superficial de injeção de ar na coluna (calculadas na temperatura da fase líquida no estado pseudo-estacionário). Uma placa perfurada de aço inoxidável, com 89 furos de 0,50 mm de diâmetro cada, foi utilizada como distribuidor.

As Figuras 4.10a e 4.10b apresentam, respectivamente, os dados experimentais obtidos por RIBEIRO JR. e LAGE [3] para a evolução temporal da temperatura da fase líquida e da taxa mássica de evaporação de água, na operação do ECD em quatro velocidades de injeção de ar (U_g) diferentes. Nos valores de $U_g = 2,24 \text{ cm s}^{-1}$ e $U_g = 4,36 \text{ cm s}^{-1}$, o ECD operou no regime homogêneo de borbulhamento. É possível observar, na Figura 4.10, que para $U_g = 2,24 \text{ cm s}^{-1}$ o estado pseudo-estacionário (estado no qual a temperatura da fase líquida e a taxa mássica de evaporação de água alcançam valores constantes no tempo) é alcançado em um tempo de operação igual a aproximadamente 400 minutos. Para $U_g = 4,36 \text{ cm s}^{-1}$ o mesmo estado é alcançado em 300 minutos de operação.

As simulações fluidodinâmicas de evaporadores por contato direto apresentam custo computacional elevado (claro que é preciso considerar os recursos computacionais envolvidos). Algumas dezenas de segundos simulados podem representar alguns meses de tempo real necessário para proceder a simulação. Portanto, a menos que se disponha de tempo e recursos computacionais de altíssimo desempenho, a descrição completa da dinâmica do evaporador, desde sua partida até o momento em que este



(a)



(b)

Figura 4.10: Evolução temporal da temperatura da fase líquida (a) e da taxa mássica de água evaporada (b) em um ECD operando em quatro velocidades diferentes de injeção de ar na coluna (U_g) (extraído de RIBEIRO JR.e LAGE [3]).

alcança o estado pseudo-estacionário, não é viável.

Contudo, a simulação fluidodinâmica do ECD pode ser realizada, conforme visto na seção 2.2.1, efetuando-se uma decomposição em escala temporal. Ainda que seja inviável a simulação completa da dinâmica operacional do ECD, é possível estudar as características hidrodinâmicas e de transferência de calor e massa entre as fases que ocorrem em uma escala temporal da ordem de segundos. Basta selecionar nas curvas de operação do ECD, Figura 4.10, um instante específico simular o comportamento instantâneo do mesmo. Embora um único ponto seja selecionado, importantes informações a respeito do comportamento termofluidodinâmico podem ser extraídas, tais como: distribuição espacial da temperatura da fase gasosa e da fração mássica de água na fase gasosa, comportamento transiente do campo de retenção gasosa média na coluna, análise do comportamento da retenção total, etc.

Na Tabela 4.9 são apresentados os dados experimentais obtidos por RIBEIRO JR. e LAGE [3] na operação, em regime homogêneo, de um ECD para duas velocidades superficiais de injeção de ar: 2,24 e 4,36 cm s^{-1} . Foram selecionados dois tempos de operação no regime pseudo-estacionário, um para cada velocidade de injeção. Nesta Tabela, t_{op} é o tempo de operação do ECD, $T_{g,inj}$ é a temperatura de injeção de ar na coluna, T_l é a temperatura da fase líquida, \hat{H}_{borb} é a altura de borbulhamento da mistura bifásica, \hat{H}_l é a altura de líquido na coluna sem borbulhamento, m_{liq} é a massa de líquido na coluna, P_{op} é a pressão de operação, $\dot{m}_{g,inj}$ é a vazão mássica de ar injetado na coluna, $\langle r_g \rangle_{col}$ é a retenção gasosa média na coluna e \dot{Q}_d é a taxa de calor fornecido pelo sistema de distribuição de ar para a fase líquida. Nesta tabela também são apresentados os desvios-padrão (DP) para as variáveis medidas experimentalmente. Os valores do DP indicam a excelente reprodutibilidade dos dados experimentais obtidos por RIBEIRO JR. e LAGE [3], a exceção ficou por conta da retenção gasosa global. O alto desvio-padrão associado a esta variável está relacionado ao método experimental adotado para a medição da mesma, o qual está sujeito a uma série de fontes de erro (para maiores detalhes veja [6]). Em ambas as condições a fração mássica de água no ar injetado, $Y_{inj,1}$, foi igual a $3,76 \times 10^{-3}$.

Tabela 4.9: Condições experimentais para a simulação fluidodinâmica do ECD

Variáveis	Condição 1	Condição 2
U_g (cm s ⁻¹)	2,24	4,36
t_{op} (min)	570	420
$T_{g,inj}$ (K)	503,4 (DP=1,8)	487,7 (DP=0,7)
T_l (K)	339,0 (DP=0,4)	337,9 (DP=0,3)
\hat{H}_{borb} (m)	0,280 (DP=0,02)	0,252 (DP=0,02)
\hat{H}_l (m)	0,253 (DP=0,02)	0,239 (DP=0,02)
m_l (kg)	1,05 (DP=0,01)	0,90 (DP=0,01)
$\langle r_g \rangle_{col}$	0,098 (DP=0,028)	0,152 (DP=0,049)
$\dot{m}_{g,inj}$ (kg s ⁻¹)	$0,99 \times 10^{-4}$	$1,99 \times 10^{-4}$
P_{op} (kPa)	102,7	104,7
\dot{Q}_d (W)	24,03 (DP=1,6)	45,50 (DP=1,1)

4.3.3 Dados para a Simulação Fluidodinâmica

Conforme detalhado no Capítulo 3, as condições experimentais selecionadas na Tabela 4.9 não podem ser utilizadas diretamente na simulação fluidodinâmica. Antes, é preciso corrigir os parâmetros de entrada da fase gasosa na coluna e adicionar os termos fonte nas equações de transporte de calor e massa da fase líquida, a fim de considerar os efeitos da etapa de formação.

A transferência de calor e massa entre as fases na etapa de ascensão foi modelada utilizando-se o conceito de coeficientes de transporte. De acordo com a metodologia explicitada no Capítulo 3, os valores destes coeficientes foram obtidos, por meio do modelo Lagrangeano de CAMPOS e LAGE [2], utilizando-se as condições selecionadas na Tabela 4.9.

Na Tabela 4.10, $T_{g,ent}$ é a temperatura de injeção de ar modelada (equivale a T_g^{form} apresentado na Seção 3.6), $Y_{g,1,ent}$ é a fração mássica de água no ar injetado modelada (equivale a $Y_{g,1}^{form}$ apresentado na Seção 3.6), S_l^m é o termo fonte de massa por unidade de volume da mistura bifásica adicionado na equação de continuidade da fase líquida (Equação 3.75), S_l^e é o termo fonte de energia, por unidade de volume da mistura bifásica, adicionado na equação de conservação de energia da fase líquida (Equação 3.76), D_b^{st} é o diâmetro médio de Sauter, que é utilizado para o cálculo

Tabela 4.10: Condições para as simulações fluidodinâmicas

Aplicação	Variáveis	Condição 1	Condição 2
Fase Gasosa (ar)	$T_{g,ent}$ (K)	384,4	391,6
	$Y_{g,1,ent}$	0,13	0,10
	$\dot{m}_{g,ent}$ (kg s ⁻¹)	$1,13 \times 10^{-4}$	$2,21 \times 10^{-4}$
Fase Líquida (água)	T_l (K)	339,0	337,9
Termos Fonte (Formação)	S_l^m (kg m ⁻³ s ⁻¹)	1,16	1,57
	S_l^e (W m ⁻³)	$105,4 \times 10^3$	$645,8 \times 10^3$
Coeficientes de Transporte	$\langle k_b \rangle$ (m s ⁻¹)	$3,87 \times 10^{-2}$	$3,26 \times 10^{-2}$
	$\langle h_b \rangle$ (W m ⁻² K ⁻¹)	43,50	37,94
	h_l (W m ⁻² K ⁻¹)	$10,48 \times 10^3$	$10,41 \times 10^3$
Morfologia	D_b^{st} (m)	$4,63 \times 10^{-3}$	$5,54 \times 10^{-3}$

da área interfacial, este diâmetro é calculado a partir do valor de R_b^{form} (Seção 3.6). Todas as outras variáveis presentes nesta tabela foram definidas anteriormente. É necessário ainda, fornecer valores de algumas variáveis advindas do modelo Lagrangeano utilizadas para calcular os termos fonte de energia (S_l^e) e massa (S_l^m), a saber:

- Condição 1: $f=28,2$ s⁻¹, $Q^{form} = -8,95 \times 10^{-3}$ J e $M_{evap}^{form} = 5,51 \times 10^{-9}$ kg.
- Condição 2: $f=31,8$ s⁻¹, $Q^{form} = -1,27 \times 10^{-2}$ J e $M_{evap}^{form} = 7,86 \times 10^{-9}$ kg.

É importante destacar que todas as variáveis oriundas do modelo Lagrangeano foram calculadas a uma temperatura constante da fase líquida, cujos valores para as condições 1 e 2 estão expostos na Tabela 4.9.

4.3.4 Geometria e Malhas de Discretização

Para realizar as simulações foram adotadas as características geométricas da unidade experimental utilizada no trabalho de RIBEIRO JR. e LAGE [3], que consiste de um cilindro de vidro com 7,3 cm de diâmetro. O domínio de cálculo é o que pode ser chamado de domínio fluido, ou seja, os cálculos são realizados somente na região onde existem fluidos, as paredes sólidas do equipamento são modeladas por meio de condições de contorno. Desta maneira, a altura da geometria utilizada para o cálculo

Tabela 4.11: Características geométricas das colunas utilizadas nas simulações fluidodinâmicas

Condição	D_c (cm)	\hat{H}_c (cm)	Z_F
1	7,3	35	0,49
2	7,3	80	0,59

computacional foi a altura de borbulhamento obtida nos experimentos, incluindo-se uma altura adicional para permitir a simulação da interface gás-líquido.

A geometria implementada foi subdividida em duas regiões, a saber: formação e ascensão, visto que estas etapas possuem características distintas no que diz respeito aos processos de transferência de calor e massa entre as fases (Capítulo 2).

A altura da região de formação (zona de formação) foi obtida por meio do modelo Lagrangeano de CAMPOS e LAGE [2] (conforme detalhado no Capítulo 3). De modo a evitar o refinamento excessivo da malha na região do distribuidor de gás, devido à diferença de escala entre os orifícios do distribuidor e o comprimento global da coluna, a entrada de ar foi modelada como sendo uma região circular plana (sem orifícios) onde a área correspondeu a 76% da área total disponível para injeção de ar. O valor da fração da área disponível para a entrada do gás (76%) foi obtido experimentalmente, pois, devido ao arranjo experimental os orifícios na placa se situam dentro de uma região circular com diâmetro aproximadamente igual a 6,4 cm.

A Figura 4.11 apresenta detalhes da geometria e da malha (47.259 mil nós) utilizadas nas simulações fluidodinâmicas. É possível observar o refinamento definido nas proximidades da parede da coluna, onde ocorrem grandes gradientes. Na figura mais a esquerda, nas proximidades da base, o detalhe em azul escuro representa a zona de formação.

Os valores do diâmetro da coluna (D_c), da altura da coluna (\hat{H}_c) e da altura da zona de formação (Z_F) são apresentados na Tabela 4.11. Há de se notar que a altura da coluna \hat{H}_c é bem maior que a altura de borbulhamento \hat{H}_{borb} . Isto está relacionado ao fato de como foi imposta a condição de contorno na saída da coluna, a qual será detalhada na Seção 4.3.5.

Com as geometrias selecionadas, malhas estruturadas hexaédricas foram defini-

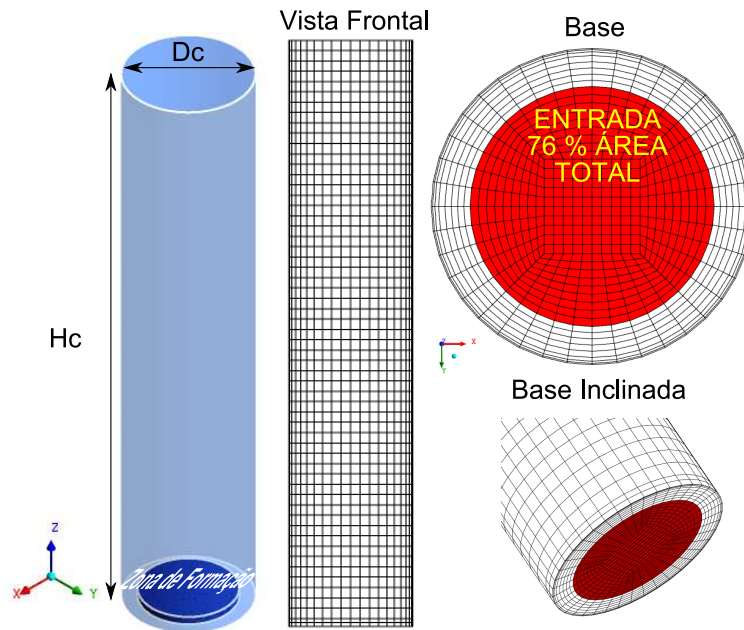


Figura 4.11: Detalhes da geometria e malha (47.259 mil nós) utilizada na simulação fluidodinâmica do ECD.

Tabela 4.12: Números de nós das malhas utilizadas nas simulações fluidodinâmicas

Condição	Malha	Número de Nós
1	M ₁₁	25.347
	M ₂₁	47.259
	M ₃₁	110.112
2	M ₁₂	71.100

das a fim de obter-se um maior controle sobre o tamanho dos volumes das células de cálculo. Para a condição 1, a fim de realizar o estudo de convergência da malha, três malhas de tamanhos distintos foram utilizadas.

Na Tabela 4.12 são apresentados os números de nós das malhas utilizadas nas simulações fluidodinâmicas das condições 1 e 2.

4.3.5 Implementação Numérica

Uma vez selecionadas as condições experimentais, as geometrias e as malhas, foi possível realizar as simulações fluidodinâmicas do ECD utilizando-se o código comercial CFX 11.0 da ANSYS. As simulações foram tridimensionais transientes usando o método de integração no tempo BDF (*Backward Differentiation Formula*) de segunda

ordem. Os passos de tempo utilizados foram da ordem de 10^{-3} s para simulações puramente fluidodinâmicas e 10^{-4} para simulações envolvendo transferência de calor e massa entre as fases. Cada iteração no tempo foi considerada convergida quando os resíduos máximos de todas as equações alcançaram valores inferiores a 5×10^{-5} . Com o escoamento desenvolvido, ou seja, com a fase gasosa estabilizada no topo da coluna, foram necessárias de 9 a 10 iterações em cada passo de tempo para que o critério de convergência fosse atingido. Eventualmente, quando ocorreram mudanças bruscas no padrão de escoamento, como por exemplo, o surgimento de um vórtice, um número maior de iterações foi necessário (30 a 40 iterações). Foi utilizado o esquema *High Resolution (upwind)* adaptativo que pode chegar a segunda ordem para a discretização dos termos convectivos.

A água foi considerada um fluido incompressível e a fase gasosa foi considerada gás ideal. As propriedades físicas de ambas as fases foram calculadas de acordo com o procedimento reportado na Seção 3.5. O equilíbrio termodinâmico entre as fases foi calculado de acordo com a lei de Raoult, conforme apresentado na Equação 3.64. A pressão de vapor (presente na lei de Raoult) foi calculada utilizando a equação de WAGNER conforme descrito em REID, PRAUNSNITZ e POLING [78]. Por meio da consideração do equilíbrio interfacial e de um balanço de energia na interface (ver Equações 3.46 e 3.49) foi possível calcular a temperatura na interface. O procedimento para a implementação da equação para o cálculo da temperatura da interface no CFX 11.0 da ANSYS foi descrito em detalhes na Seção 3.7.2.

O modelo para o coeficiente de arrasto proposto por GRACE, WAIREGI e NGUYEN [71] foi utilizado na simulação fluidodinâmica da condição 1 (ver Tabela 4.10), neste caso o fator de correção para o efeito de população (p) foi considerado igual a -2. Na simulação da condição 2 (ver Tabela 4.10), tanto o modelo de GRACE, WAIREGI e NGUYEN [71] (com $p=-0,5$) quanto o modelo de ISHII e ZUBER [4] foram utilizados para calcular o coeficiente de arrasto.

A Figura 4.12 apresenta os detalhes referentes às condições de contorno impostas nas simulações. Nesta figura, $\langle T_g \rangle_{saida}$ é temperatura média da fase gasosa na região de saída, $\langle T_l \rangle_{saida}$ é a temperatura média da fase líquida na região de saída e $\langle Y_{g,1} \rangle_{saida}$ é a fração mássica de água na fase gasosa média na região de saída.

Na entrada da coluna, conforme pode ser observado na Figura 4.12, há somente

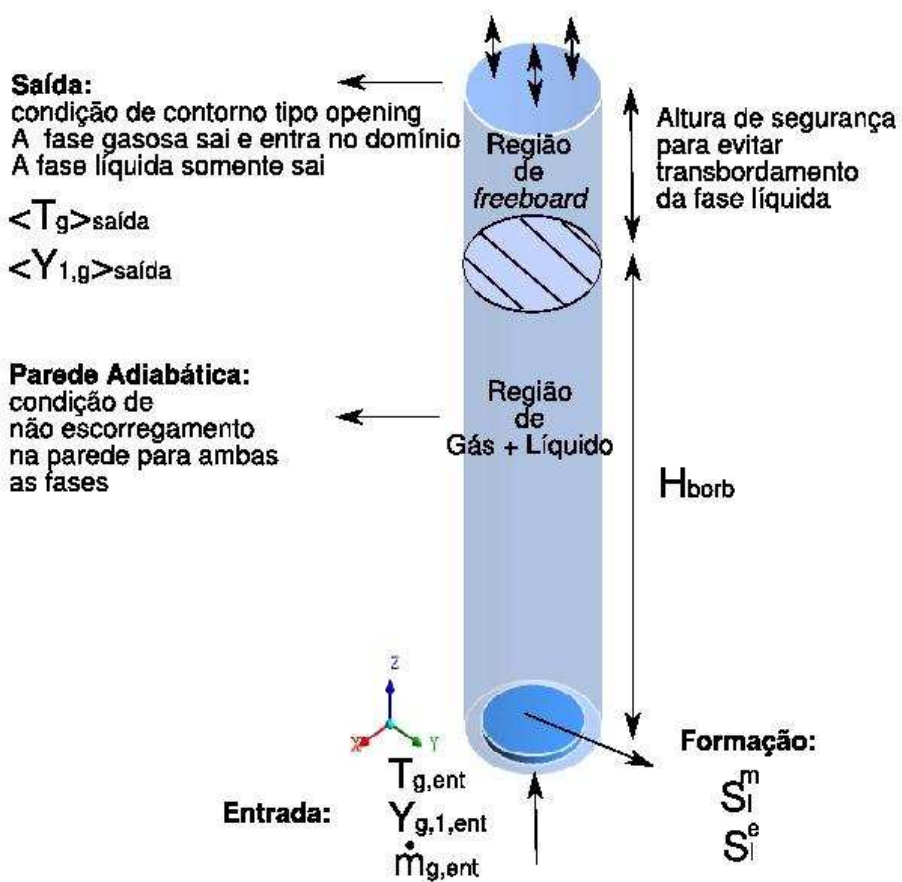


Figura 4.12: Condições de contorno impostas nas simulações Eulerianas.

injeção de ar, cujas condições de entrada foram explicitadas na Tabela 4.10

A condição de contorno na região de saída foi especificada de modo a permitir a saída ou entrada da fase gasosa e somente a saída da fase líquida. Entretanto, para este tipo de condição de contorno (*opening*), pode ocorrer o transbordamento da fase líquida como consequência da entrada de gás na coluna (pela base). Tal comportamento é indesejado, pois dificulta a reprodução dos experimentos (retenção gasosa global e padrão de escoamento). Por isso, foi adicionada uma altura de segurança à altura de borbulhamento, de forma que $\hat{H}_c > \hat{H}_{borb}$. O subvolumen adicionado foi completamente preenchido por gás puro, sendo denominado região de *freeboard*.

Quando o escoamento na região de saída foi para fora do domínio, ar e água saíram com os valores locais de velocidade, temperatura e fração mássica de água na fase gasosa. Entretanto, foi preciso especificar os valores das mesmas variáveis na fase gasosa para o caso de escoamento para dentro do domínio (pela região de saída). Neste caso, a temperatura e a fração mássica de água no ar foram, respectivamente, $\langle T_g \rangle_{saida}$ e $\langle Y_{g,1} \rangle_{saida}$. A pressão de saída foi considerada igual a pressão atmosférica.

O campo de pressão inicial na coluna foi considerado como sendo o campo de pressão hidrostática. A coluna inicialmente foi considerada completamente preenchida pela fase líquida imóvel. Considerou-se a fase gasosa em equilíbrio térmico com a fase líquida e com fração mássica de água igual a zero. É importante notar que a condição inicial estabelecida para a temperatura e fração mássica de água no ar impõem uma partida hipotética da simulação, ou seja, não há qualquer relação com os dados experimentais reportados por RIBEIRO JR. e LAGE [3]. Entretanto, embora hipotética, trata-se de uma partida consistente fisicamente.

4.3.6 Estudo da Convergência em Malha

Com o intuito de identificar a malha com a melhor relação entre tempo computacional e acurácia de solução, para a simulação fluidodinâmica do ECD, foi realizado um estudo de convergência em malha. Para tanto, foram realizadas, para o caso 1, simulações puramente fluidodinâmicas, ou seja, sem considerar os efeitos da transferência de calor e massa entre as fases.

São apresentados na Figura 4.13, para três malhas distintas (Tabela 4.12), grá-

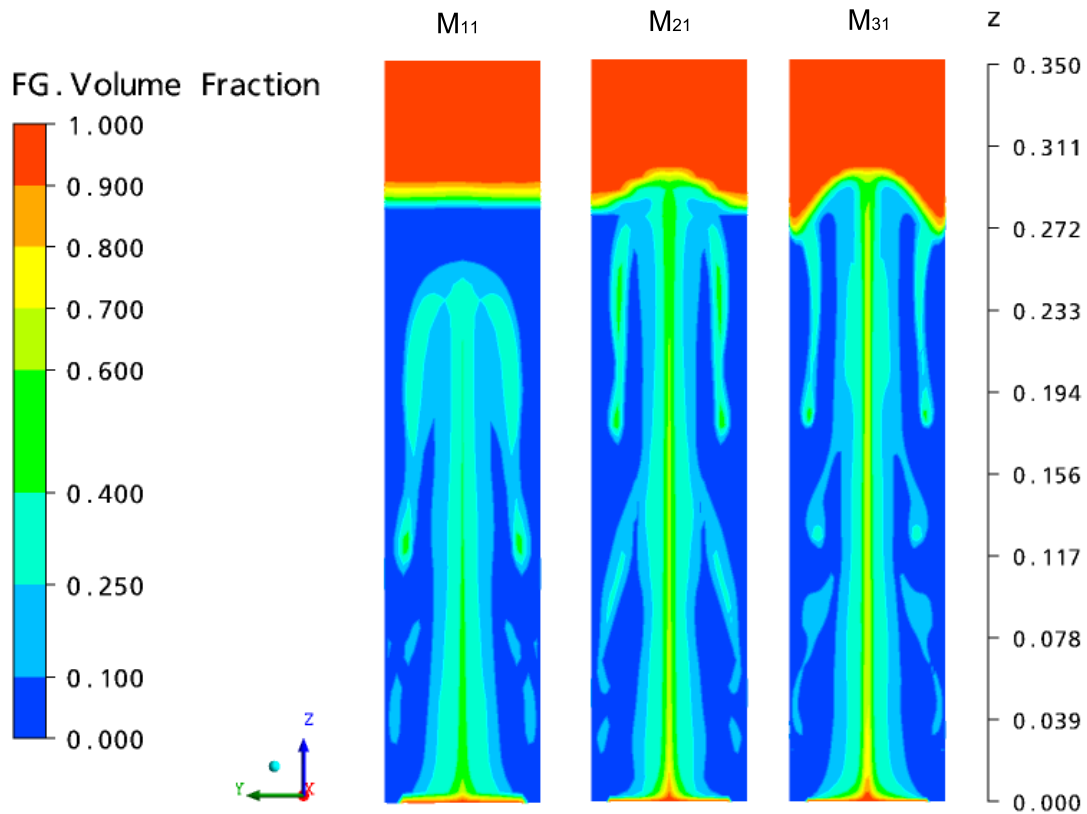
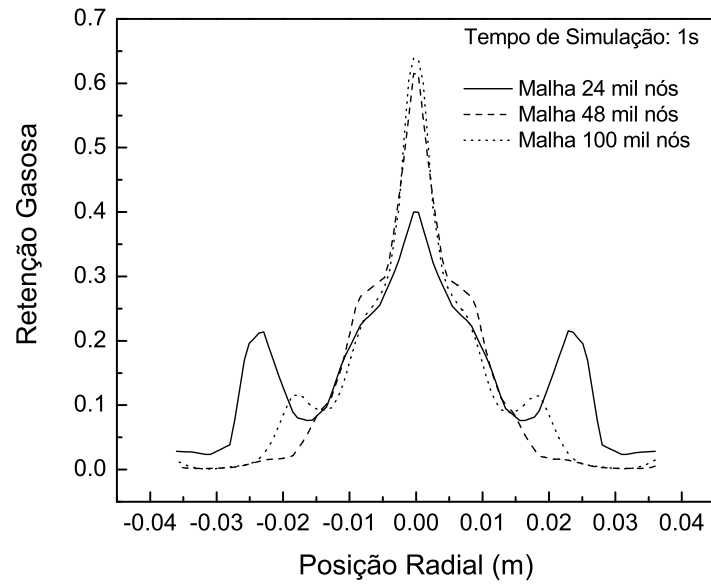


Figura 4.13: Gráficos de contorno no plano YZ ($X=0$) para a retenção gasosa. Resultados para três malhas distintas, M_{11} , M_{21} e M_{31} e para 1 s de simulação. No gráfico a unidade de z está em metros.

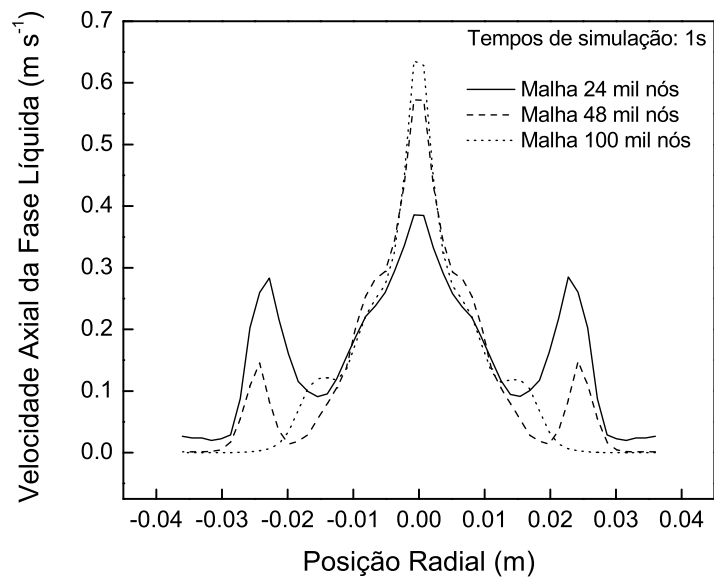
figos de contorno para a retenção gasosa no plano YZ ($X=0$). Os passos de tempo utilizados para a integração temporal das simulações das malhas M_{11} , M_{21} e M_{31} foram, respectivamente, iguais a: $1,5 \times 10^{-3}$; $3,0 \times 10^{-3}$ e $1,5 \times 10^{-3}$ s. Os resultados foram obtidos para um instante de tempo igual a 1 s de simulação.

É possível observar que os resultados das simulações para as malhas M_{21} e M_{31} estão de acordo, a menos de pequenos detalhes (pequenas variações na forma das plumas são esperadas em virtude dos erros de integração temporal e pelo ganho de detalhes com o refinamento).

Na Figuras 4.14 são apresentados, para 1 s de simulação, os perfis de retenção gasosa e velocidade axial da fase líquida sobre uma linha localizada no plano YZ ($X=0$) a 17 cm de altura. É possível observar qualitativamente, que para as malhas M_{21} e M_{31} os perfis são muito semelhantes, corroborando desta forma, as observações feitas anteriormente para os gráficos de contorno (Figura 4.13).



(a)



(b)

Figura 4.14: Perfis de retenção gasosa (a) e velocidade axial da fase líquida (b) em 1 s de simulação, sobre uma linha localizada no plano YZ ($X=0$ e $Z=17$ cm).

Portanto, é possível concluir que a utilização da malha M_{21} é adequada para capturar de modo satisfatório os aspectos hidrodinâmicos do escoamento em um ECD operando em regime homogêneo, preservadas as características operacionais e geométricas.

4.3.7 Estudo da Hidrodinâmica: Condição 1

Antes de dar início, efetivamente, à simulação fluidodinâmica do ECD, foram realizadas simulações puramente hidrodinâmicas, onde o ar e a água escoaram na coluna sem haver troca de calor e massa entre eles. Ou seja, o objetivo da simulação puramente hidrodinâmica foi estudar e desenvolver o padrão de escoamento, antes de dar partida aos processos de transferência de calor e massa entre as fases. Esta estratégia foi adotada em virtude da dificuldade apresentada pelo *solver* do CFX 11.0 da ANSYS em lidar com a partida simultânea da hidrodinâmica e dos processos de transporte de calor e massa entre as fases.

Para as rodadas hidrodinâmicas da condição 1, passos de tempo da ordem de 10^{-3} s foram utilizados para que o critério de convergência fosse atingido. Entretanto, pagou-se um preço ao se utilizar um passo de tempo dessa ordem de grandeza, o número de Courant máximo no domínio de cálculo oscilou entre 1,4 e 2. Para evitar valores de Courant maiores que um e resolver, desta forma, a dinâmica do escoamento adequadamente seria necessário utilizar valores de passo de tempo menores que 10^{-3} s. Entretanto, a versão do *solver* do CFX 11.0 da ANSYS, utilizada para simular a fluidodinâmica da condição 1, continha um *bug* no esquema de interpolação para simulações bifásicas transientes. Este *bug* promovia um aumento do erro de interpolação com a diminuição do passo de tempo. Portanto, é importante ressaltar, que para a condição 1 os resultados foram obtidos sob esta restrição, ou seja, não foi possível utilizar passos de tempo menores a fim de resolver a dinâmica do escoamento com Courant máximo menor que 1. Além disso, o impedimento de se utilizar passos de tempo pequenos, pode ter tido influência decisiva na dificuldade encontrada em se partir simultaneamente a hidrodinâmica e os processos de transferência de calor e massa entre as fases. Destaca-se que o *bug* já foi devidamente corrigido, e as rodadas da condição 2 foram realizadas com a versão atualizada do *solver*.

Por limitações de tempo e recursos computacionais disponíveis, não foi possível refazer as rodadas da condição 1 utilizando o *solver* corrigido. Entretanto, isto não significa que os resultados obtidos para a condição 1 não possam ser utilizados, pelo contrário, visto que a dinâmica foi resolvida dentro dos limites aceitáveis para o Courant máximo no domínio de cálculo.

O escoamento em colunas de borbulhamento é caótico e transiente, ou seja, nunca alcança o estado estacionário [36, 1]. Gráficos de contorno para a retenção gasosa, utilizando um corte no plano YZ ($X=0$), são apresentados na Figura 4.15, em diferentes tempos de simulação. Inicialmente a pluma gasosa ascende pelo eixo central da coluna, como pode ser observado no tempo de simulação igual a 1s. Enquanto ascende, a pluma arrasta consigo certa quantidade da fase líquida que ao alcançar a interface, onde ocorre o desengajamento do gás (região de *freeboard*), retorna para a base da coluna, estabelecendo um perfil de circulação. Tal movimentação, de ambas as fases, desenvolve um padrão caótico de escoamento na coluna.

À medida que o tempo passa, a pluma tende a oscilar lateralmente, conforme pode ser observado no tempo de simulação igual a 4,2 s (Figura 4.15). Tal compor-

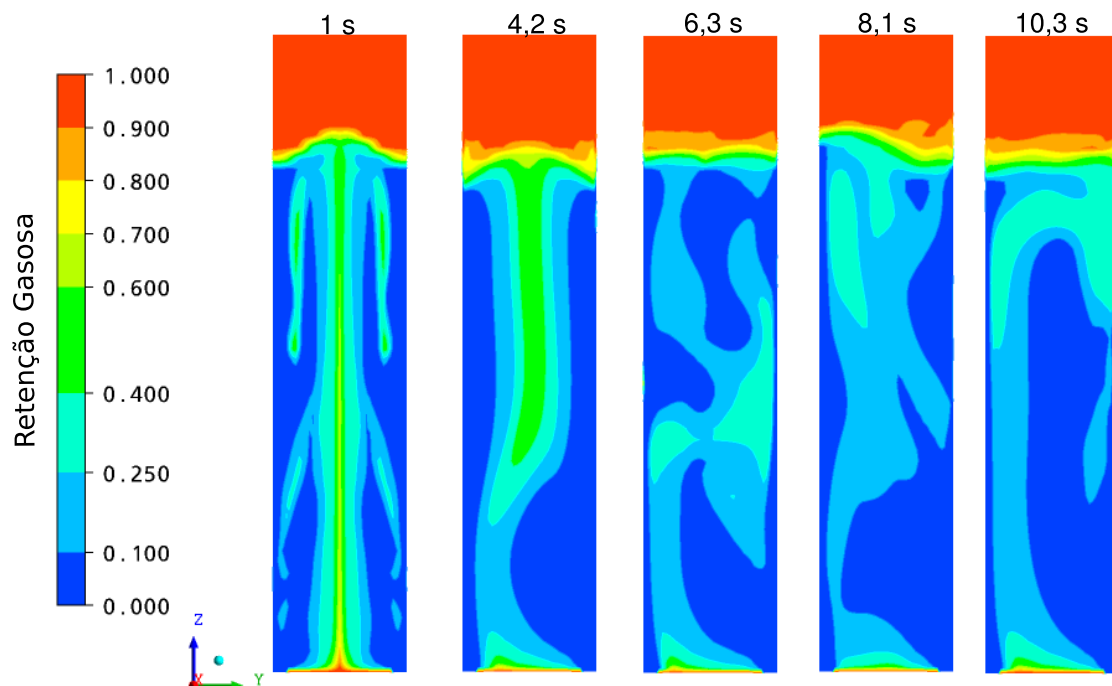


Figura 4.15: Gráficos de contorno para a retenção gasosa no plano YZ ($X=0$) para instantes de simulação iguais a 1; 4,2; 6,3; 8,1; 10,3 s.

tamento surge em virtude do desbalanceamento das forças laterais que permitiam nos instantes iniciais, devido ao caráter simétrico da geometria e das condições de contorno, que a pluma permanecesse estabilizada no eixo central. O deslocamento lateral é acompanhado pela presença de um vórtice na fase líquida. Vórtices aparecem e desaparecem constantemente na coluna e a sua movimentação no equipamento é caótica.

Para o tempo de simulação igual a 10,3 s; a pluma gasosa apresenta um acentuado deslocamento lateral (gráfico de contorno na extrema direita da Figura 4.15), isto se deve ao surgimento de uma grande célula de circulação (vórtice) da fase líquida que se estende por praticamente toda a coluna. Este grande vórtice pode ser observado na Figura 4.16, na qual são apresentados, no plano YZ ($X=0$), os gráficos de contorno para a retenção gasosa e os vetores da velocidade superficial da fase líquida.

Gráficos de contorno no plano YZ ($X=0$) para a retenção gasosa, nos instantes de tempo iguais a 26; 30,5 e 96,5 s, são apresentados na Figura 4.17. Esta figura também apresenta o gráfico de contorno para a retenção gasosa média temporal

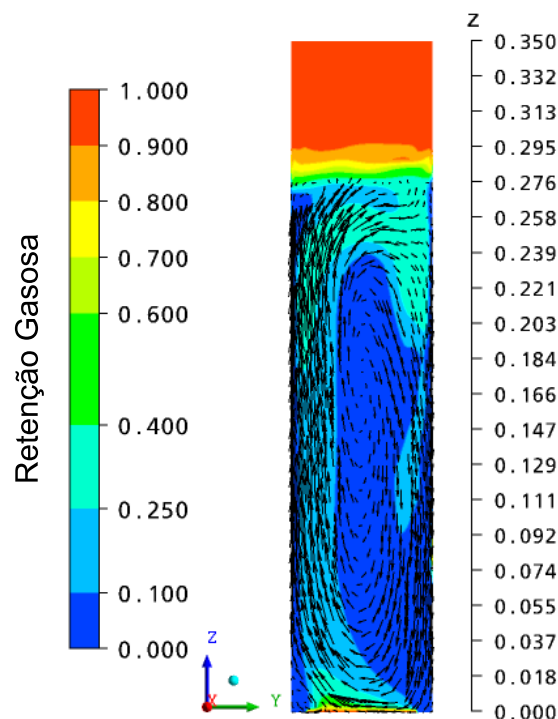


Figura 4.16: Gráfico de contorno para a retenção gasosa no instante de tempo igual a 10,3 s e vetores de velocidade superficial da fase líquida, ambos sobre o plano YZ ($X=0$).

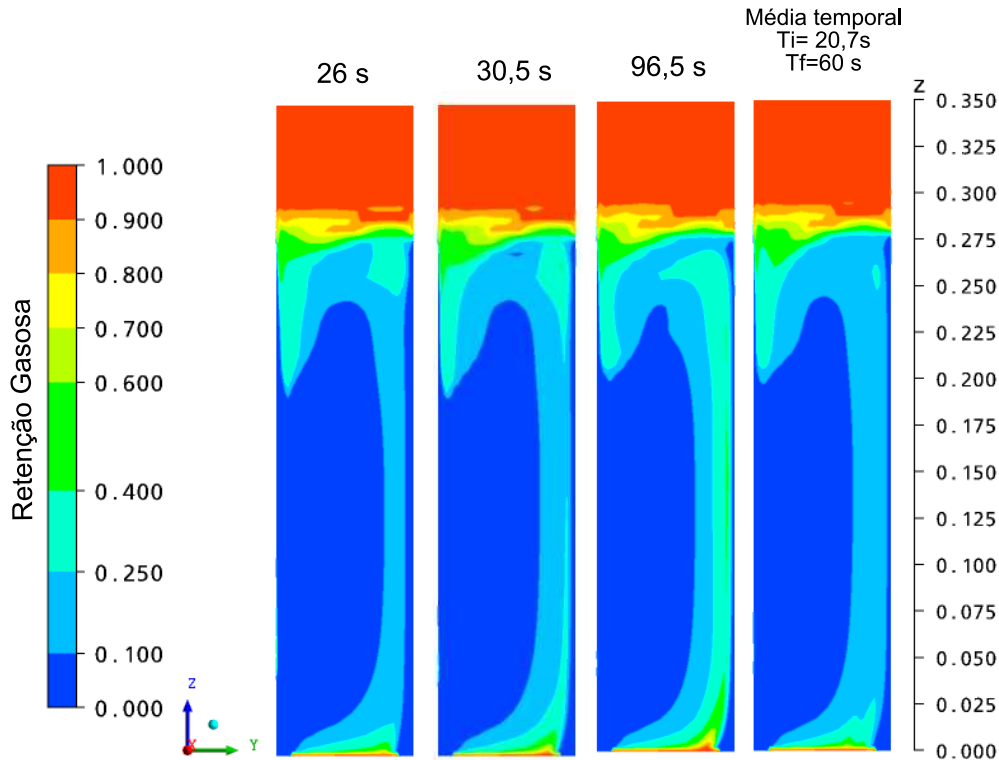


Figura 4.17: Gráficos de contorno para a retenção gasosa no plano YZ ($X=0$) para instantes de simulação iguais a 26; 30,5 e 96,5 s, e também para a média temporal da retenção gasosa.

entre os instantes 20,7 e 60 s, respectivamente, o tempo inicial, T_i , e o tempo final, T_f , para a contabilização da média.

É possível observar aos 26 segundos de simulação, o acentuado deslocamento lateral da pluma gasosa. Portanto, do mesmo modo que observado na Figura 4.16, a fase líquida se movimenta no equipamento por meio de uma grande célula de circulação. Nos instantes subsequentes, esta configuração do padrão do escoamento não desaparece, como seria esperado devido ao seu caráter caótico, ao invés disso, a estrutura estabiliza, conforme pode ser observado nos instantes iguais a 30,5 e 96,5 s de simulação. É possível concluir, ao se visualizar o comportamento da média temporal da retenção gasosa, que o deslocamento assimétrico acentuado da pluma foi consistente, perdurando por todo o tempo de contabilização da média (aproximadamente 40 s). Os gráficos de contorno para os campos instantâneos de retenção gasosa indicam uma importante característica nos resultados da simulação: a quebra de simetria, ou seja, tem-se um domínio simétrico, condições de contorno simétricas, portanto, o escoamento deveria manter a simetria da modelagem, mas

não foi isto o que ocorreu. Mais adiante serão abordados os motivos que podem explicar este comportamento.

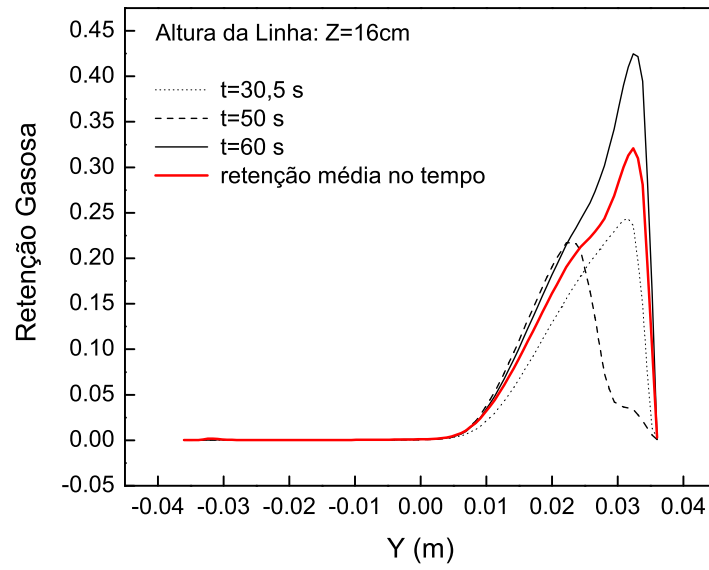
Outra característica apresentada nos resultados foi a assimetria do comportamento médio da pluma gasosa (ver gráfico de contorno mais a direita na Figura 4.17). Ou seja, o caráter caótico do movimento foi eliminado, tal característica está associada a certas simplificações da modelagem as quais serão abordadas, em maior profundidade, mais adiante.

Na Figura 4.18a, que apresenta a evolução temporal do perfil de retenção gasosa sobre uma linha localizada no plano YZ ($X=0$) a 16 cm de altura, a quebra de simetria também pode ser observada. O acompanhamento dinâmico dos perfis de retenção gasosa sobre esta linha, nos instantes iguais a 30,5; 50 e 60 s, confirma o comportamento assimétrico dinâmico da pluma.

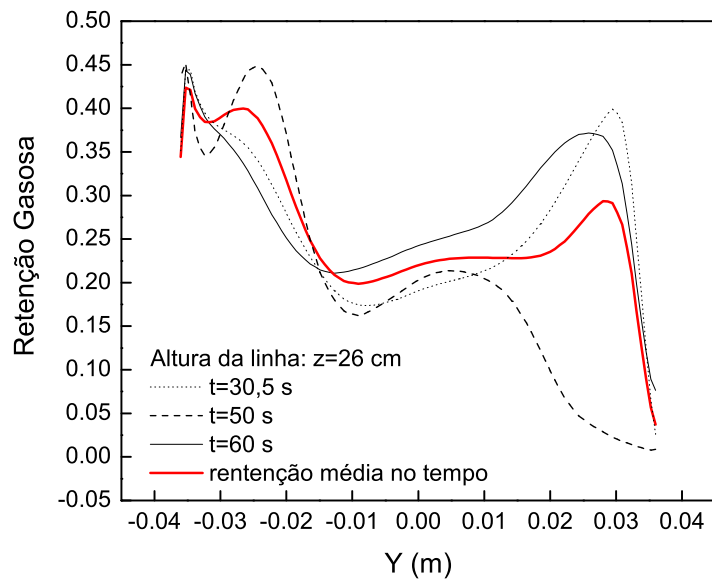
Na Figura 4.18b, é possível acompanhar o perfil de retenção gasosa sobre uma linha localizada no plano YZ ($X=0$) mas agora, a uma altura igual a 26 cm, ou seja, nas proximidades do topo. Nesta altura, o comportamento da pluma continua assimétrico, tanto em termos do perfil médio quanto dos perfis dinâmicos. Entretanto, a assimetria não é tão acentuada quanto nos perfis obtidos para a altura igual a 16 cm. Isto se deve ao arraste que a fase líquida realiza sobre a fase gasosa ao retornar à base da coluna.

A Figura 4.19 apresenta o comportamento da média temporal da retenção gasosa, no plano XZ ($Y=2,5$ cm, não passa pelo eixo central da coluna), sobre duas linhas localizadas a 16 e 26 cm da base. A análise desta figura permite concluir que a assimetria neste plano é bem menos acentuada do que a apresentada no plano YZ ($X=0$). Contudo, a oscilação da pluma gasosa, devido à quebra de simetria, não foi suficiente para garantir o comportamento médio simétrico nesta direção.

Embora o comportamento da pluma tenha sido dinâmico, a média temporal tendeu a um comportamento estacionário e assimétrico. Intervalos crescentes de tempo para o cálculo da média foram utilizados e a mesma convergiu para o campo apresentado na Figura 4.17 (gráfico na extrema direita). O comportamento estacionário assimétrico das variáveis médias do escoamento também foi observado por RODRIGUES [1], o qual simulou a fluidodinâmica de colunas de borbulhamento isotérmicas operando em regime homogêneo.



(a)



(b)

Figura 4.18: Perfil de retenção gasosa sobre uma linha localizada no plano YZ ($X=0$) a 16 cm (a) e 26 cm (b) de altura.

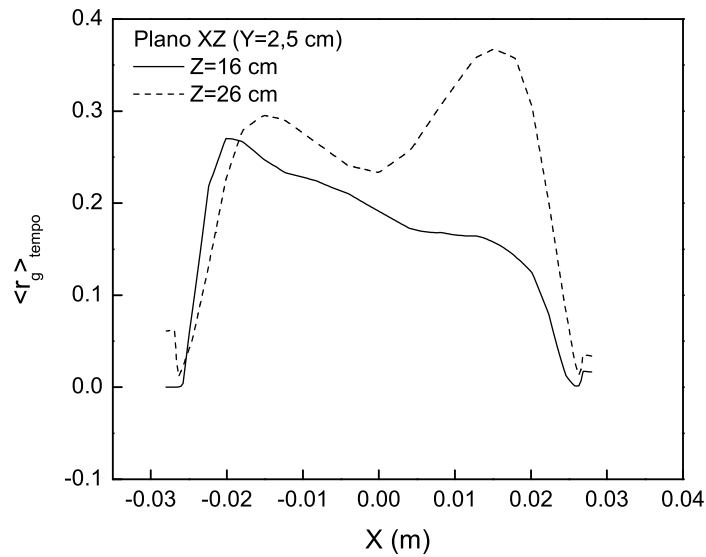


Figura 4.19: Perfis da média temporal da retenção gasosa no plano XZ ($Y = 2,5$ cm) localizados a 16 e 26 cm da base. Resultados obtidos para a Condição 1 (Tabela 4.10).

Por outro lado, o comportamento simétrico das variáveis médias é relatado em diversos trabalhos da literatura [79, 80, 57, 45]. Recentemente, no Laboratório de Termofluidodinâmica, do Programa de Engenharia Química da COPPE/UFRJ, SILVA et al [81] obtiveram perfis radiais médios da retenção gasosa em colunas operando tanto no regime homogêneo quanto no regime heterogêneo. Os perfis radiais médios foram obtidos utilizando sensores eletroresistivos. Em todos os casos os perfis apresentaram comportamento simétrico para a média temporal da retenção gasosa. Eles utilizaram quatro sensores posicionados no plano central da coluna (plano que obrigatoriamente contém o eixo central).

A quebra de simetria apresentada nos resultados da simulação (comportamento instantâneo) está associada a aspectos numéricos, ou seja, devido ao caráter não-linear do modelo, pequenas perturbações podem ser propagadas a tal ponto de influenciar a solução macroscópica do escoamento, gerando o comportamento caótico. As perturbações numéricas podem surgir na resolução do modelo em virtude de variações bruscas e acentuadas que ocorrem no escoamento, como por exemplo, o surgimento de um vórtice.

A existência de tais perturbações numéricas puderam ser observadas na prá-

tica, pois, no decorrer da resolução do modelo foi possível acompanhar a evolução temporal dos resíduos máximos advindos da resolução das equações de transporte. Eventualmente, os resíduos das equações hidrodinâmicas apresentavam “picos” (perturbações), os quais estavam associados a variações no padrão de escoamento.

Por outro lado, aspectos relacionados a modelagem do processo podem explicar a ocorrência de resultados médios assimétricos. Algumas considerações foram feitas a fim de tornar a simulação fluidodinâmica do ECD viável. A primeira e, provavelmente, a mais significativa consideração, foi a forma como o distribuidor de ar foi modelado. O distribuidor real é constituído de 89 furos regularmente espaçados em uma placa perfurada de aço inoxidável. Na simulação, a configuração do distribuidor não levou em conta os orifícios, devido ao alto custo computacional que seria necessário para simulá-lo. Tal simplificação transformou uma condição de contorno assimétrica em uma simétrica.

Trabalhos na literatura [82, 83] têm estudado a importância de se modelar corretamente o distribuidor. A fim de se obter uma descrição adequada do padrão de escoamento, principalmente no que diz respeito ao comportamento instantâneo das variáveis locais, os autores têm investigado, o tamanho, o número e a posição dos orifícios. Por enquanto os resultados não são plenamente conclusivos, mas apontam na direção da necessidade de se modelar adequadamente os distribuidores.

A segunda consideração diz respeito ao fato de que somente a força de arrasto foi utilizada na modelagem da transferência de quantidade de movimento entre as fases. Outras forças interfaciais poderiam ter sido consideradas, como por exemplo a força de sustentação (*lift*), a força de massa virtual e a força de lubrificação na parede. Em especial, a força de sustentação (*lift*) poderia impedir a existência de soluções médias assimétricas, visto que é uma força radial cujo sentido depende do tamanho da bolha. Ainda, segundo JOSHI [7], a força de sustentação depende da rotação da bolha em torno do seu eixo, velocidade relativa entre as fases, gradiente de velocidade na fase líquida, gradiente de pressão, variantes na forma da bolha etc. Portanto, de acordo com as características anteriormente apresentadas, a consideração da força de sustentação na modelagem e simulação do ECD poderia ser interessante, visto que a mesma atuaria na direção radial.

A inclusão da força de sustentação, entre outras, na modelagem e simulação do

Tabela 4.13: Temperatura da fase líquida e de injeção de gás na coluna

Casos	D_b^{form} (mm)	D_b^{exp} (mm)
1	4,63	$5,2 \pm 0,7$
2	5,54	$7,5 \pm 1,0$

ECD não foi possível porque o *solver* utilizado apresentou severas dificuldades em alcançar o critério de convergência quando tais forças foram consideradas.

4.3.8 Estudo da Hidrodinâmica: Condição 2

Segundo RIBEIRO JR. e LAGE [72], a condição 2, no qual a velocidade de injeção de ar na coluna é igual $4,36 \text{ cm s}^{-1}$, é um caso típico de operação no início do regime de transição, ou seja, os fenômenos de quebra e coalescência começam a adquirir relevância. Como resultado, o diâmetro de bolha predito pelo modelo Lagrangeano é diferente do diâmetro observado experimentalmente por RIBEIRO JR. e LAGE [72]. Na Tabela 4.13, são apresentados valores dos diâmetros obtidos experimentalmente (D_b^{exp}) e pelo modelo Lagrangeano de CAMPOS e LAGE [2] ($D_b^{form} = 2 \times R_b^{form}$), para as condições 1 e 2. Para a condição 1, no qual o ECD opera no regime homogêneo, o diâmetro calculado pelo modelo detalhado de CAMPOS e LAGE [2] apresentou concordância com o resultado experimental obtido por RIBEIRO JR. e LAGE [72]. Esta concordância está associada ao fato de que nesta condição operacional a extensão dos fenômenos de quebra e coalescência é reduzida. Para a condição 2, a extensão do processo de coalescência das bolhas é evidenciada pelo fato do diâmetro calculado pelo modelo de CAMPOS e LAGE [2] ser 26% menor que o diâmetro obtido experimentalmente por RIBEIRO JR. e LAGE [72]. As distribuições de tamanho de bolhas que corroboram as afirmações feitas acima sobre o fenômeno de coalescência, para as condições 1 e 2, podem ser encontradas em RIBEIRO JR. [6].

Conforme anteriormente citado a única força interfacial considerada na modelagem do ECD, para a condição 1, foi a força de arrasto. O modelo proposto por GRACE, WAIREGI e NGUYEN [71] foi utilizado para calcular o coeficiente de arrasto juntamente com uma lei de potência para corrigir o efeito de população. O fator de correção do efeito da presença de outras bolhas no escoamento (ver Equ-

ção 3.22) foi ajustado para ser igual a -2. O valor negativo do expoente é adequado para escoamentos nos quais o tamanho de bolha é pequeno e o aumento da retenção gasosa promove a redução da velocidade terminal das bolhas, ou seja, o arrasto aumenta com a retenção gasosa, o que é característico do regime homogêneo de borbulhamento, no qual resultados experimentais [84, 85] indicam que a velocidade de ascensão do conjunto de bolhas é menor do que a referente à bolha isolada. A presença de bolhas vizinhas confere restrições ao espaço de escoamento do fluido em torno da bolha, o que resulta em maiores gradientes de velocidade e, consequentemente, em maiores tensões de cisalhamento, aumentando a força de arraste.

Ao contrário do que ocorre com bolhas pequenas, para um escoamento com bolhas grandes, o aumento da retenção gasosa tende a reduzir a força de arrasto. Este comportamento pode ser explicado pelo fato de que bolhas grandes, ao ascenderem em conjunto, exibem velocidades terminais consideravelmente maiores do que as alusivas à ascensão isolada, conforme indicam as observações experimentais [86, 87, 88, 89]. Esse efeito é resultado da interação da bolha em ascensão com a esteira daquela que a precedeu.

Portanto, ao simular a hidrodinâmica da condição 2, é preciso utilizar um modelo que consiga reproduzir adequadamente o efeito da redução da força de arrasto com o aumento da retenção gasosa, visto que o diâmetro obtido experimentalmente é maior que o diâmetro calculado pelo modelo Lagrangeano utilizado na simulação.

O modelo de ISHII e ZUBER [4], descrito na Seção 3.2.2, é adequado para este propósito, pois foi desenvolvido para o escoamento de um conjunto de bolhas, ao contrário do modelo de GRACE, WAIREGI e NGUYEN [71] cujo efeito de população é corrigido por uma lei de potência, pois este modelo foi concebido para o escoamento de uma bolha isolada.

Na Figura 4.20 são apresentados os perfis do coeficiente de arrasto, calculado segundo o modelo de ISHII e ZUBER [4], e da retenção gasosa local. Ambos foram traçados sobre uma linha no plano YZ ($X=0$ cm) localizada a 16 cm da base. Estes resultados foram obtidos a partir da simulação puramente fluidodinâmica do ECD. Nesta figura, é possível observar que o coeficiente de arrasto é menor em regiões de alta concentração de fase gasosa, associadas a bolhas grandes. Para regiões de menor concentração de fase gasosa, associadas a bolhas pequenas, o efeito é inverso, ou seja,

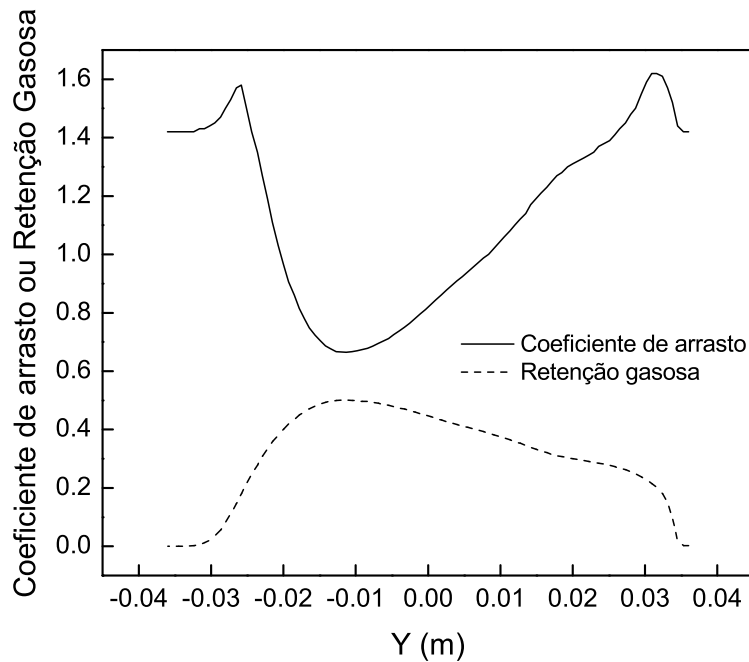


Figura 4.20: Perfis do coeficiente de arrasto, calculado segundo o modelo de ISHII e ZUBER [4], e da retenção gasosa local, sobre uma linha localizada no plano YZ ($X=0$) localizada a 16 cm da base.

o coeficiente de arrasto aumenta. As explicações para estes efeitos foram expostas anteriormente. Portanto, o modelo de ISHII e ZUBER [4], ao contrário do modelo de GRACE, WAIREGI e NGUYEN [71], associado a uma lei de potência, consegue capturar os efeitos do regime de escoamento na região inicial do regime de transição, sendo desta forma, o modelo selecionado para as simulações fluidodinâmicas do ECD para a condição 2.

A fim de corroborar a afirmação de que o modelo de GRACE, WAIREGI e NGUYEN [71] não é adequado para a condição 2, foi realizada uma simulação utilizando este modelo mas com um fator de correção para população igual a -0,5, ou seja, a intensidade da correção da força de arrasto com o aumento da retenção gasosa foi reduzida quando comparada com a correção utilizada para a condição 1 (numa tentativa de reproduzir os efeitos relativos às bolhas maiores). Mesmo diante da redução do fator de correção da população, o modelo de GRACE, WAIREGI e NGUYEN [71] apresentou resultados ruins no que diz respeito a predição da retenção gasosa global da coluna, o valor foi aproximadamente 30% maior que o valor

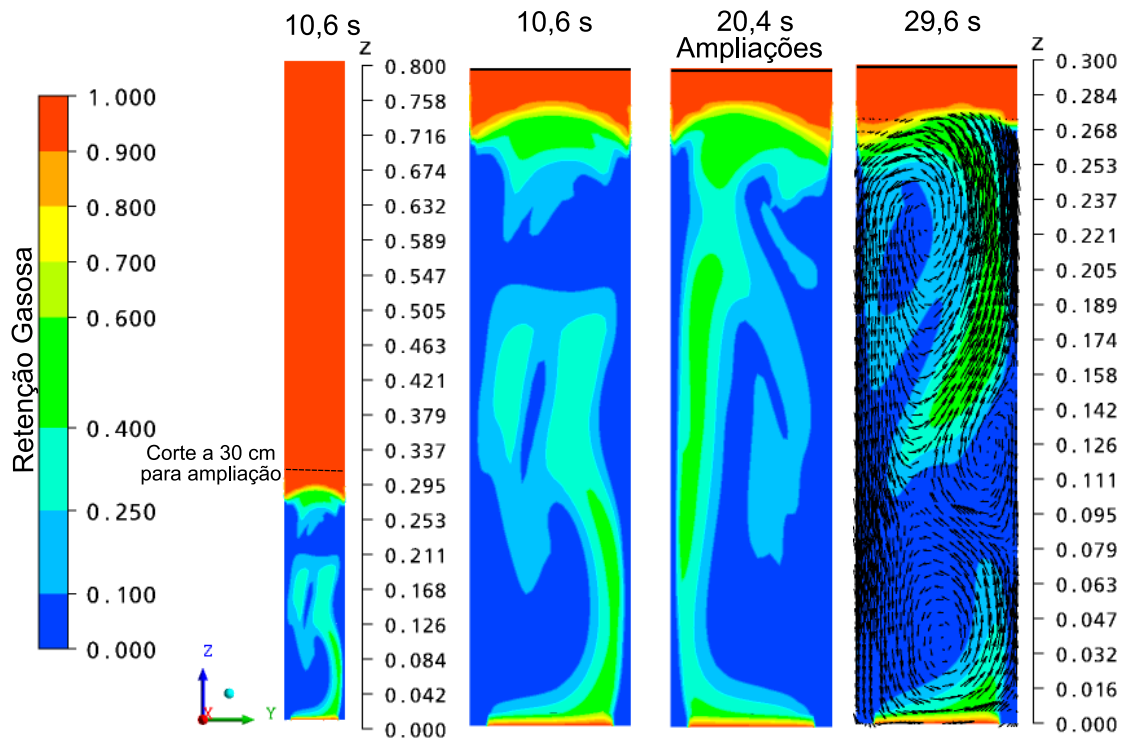


Figura 4.21: Gráficos de contorno para a retenção gasosa no plano YZ ($X=0$) para diferentes tempos de simulação.

reportado por RIBEIRO JR. e LAGE [3] em seus experimentos.

São apresentados na Figura 4.21, gráficos de contorno no plano YZ ($X=0$) para a retenção gasosa obtida na simulação usando o modelo de ISHII e ZUBER [4], em três tempos distintos de simulação, a saber: 10,6; 20,4 e 29,6 s. O gráfico de contorno mais a esquerda, apresenta a retenção gasosa em toda a extensão da coluna, é possível observar a grande altura atribuída à região de gás puro, que serviu à princípio para impedir o transbordamento da fase líquida, mesmo que a altura de estabilização da pluma gasosa fosse significativamente grande. Os demais gráficos de contorno são ampliações de uma região com corte em $Z=30$ cm no plano YZ ($X=0$).

Os gráficos de contorno apresentados na Figura 4.21, evidenciam o comportamento caótico do escoamento, tendo em vista a distribuição desordenada da fase gasosa ao longo do tempo de simulação. Novamente, o deslocamento lateral da pluma gasosa ocorre devido à existência de vórtices na fase líquida, conforme pode ser observado no gráfico de contorno para o tempo de simulação igual a 29,6 s.

A Figura 4.22 apresenta um corte no plano XY ($Z=16$ cm) sobre o qual são

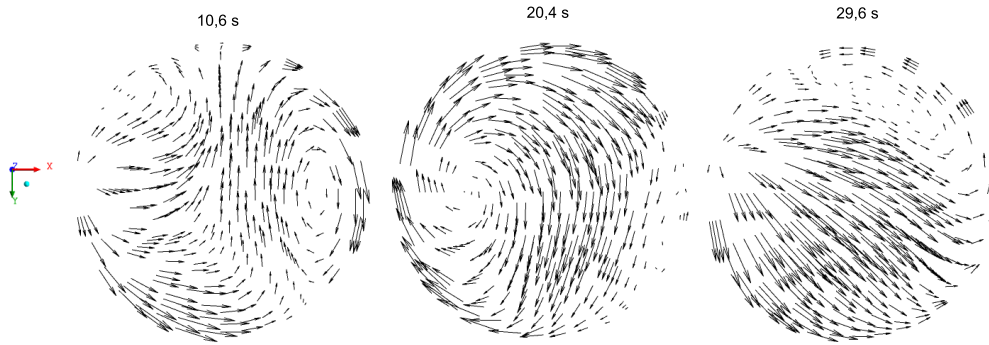


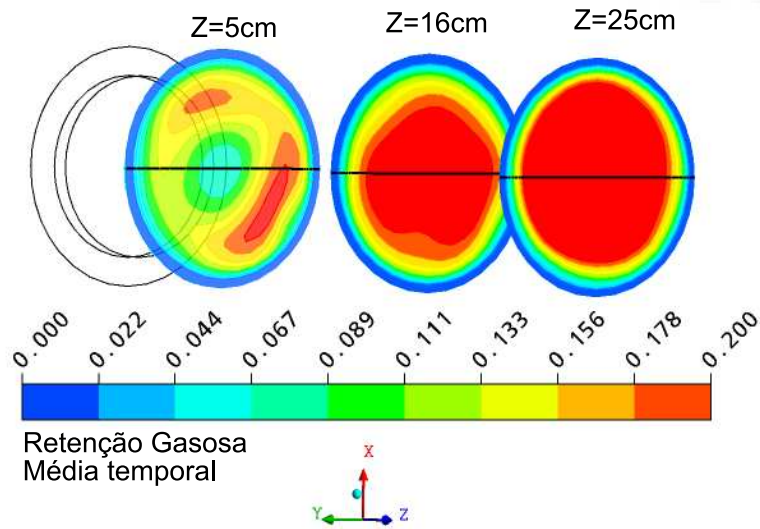
Figura 4.22: Vetores de velocidade superficial da fase líquida no plano XY ($Z=16$ cm) para diferentes instantes de tempo de simulação.

traçados vetores de velocidade superficial da fase líquida, para três tempos de simulação diferentes. Nesta figura o padrão caótico do escoamento também pode ser observado, visto que não é possível identificar um mesmo padrão para a distribuição dos vetores nos três tempos analisados.

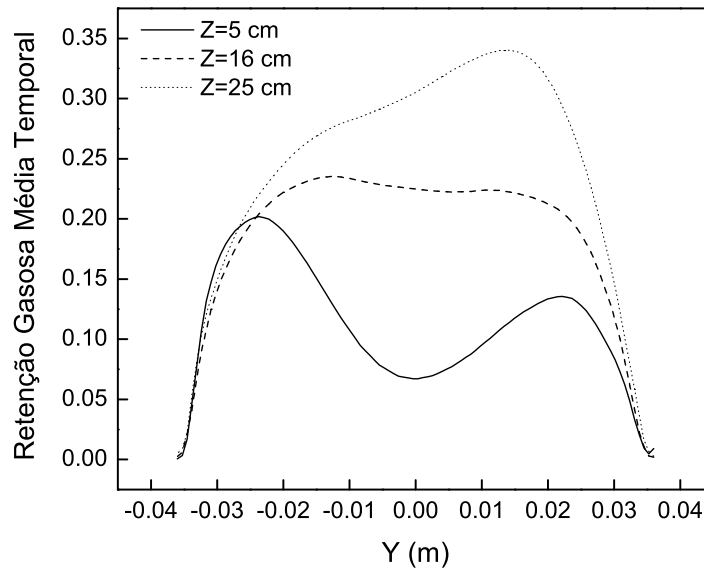
A Figura ??a apresenta o gráficos de contorno para a retenção gasosa média temporal no plano XY para $Z=5$, 16 e 25 cm. A média foi calculada em um intervalo de tempo igual a 15 segundos.

Ao contrário do que foi observado na simulação fluidodinâmica da condição 1, os cortes para $Z=16$ cm e $Z=25$ cm, ilustram o caráter quase-simétrico do escoamento para a condição 2, com a pluma gasosa tendendo a se concentrar no centro da coluna (comportamento médio) e a fase líquida tendendo a escoar pelas paredes. Em $Z=5$ cm, nas proximidades da entrada, o comportamento do escoamento foi assimétrico. Este comportamento também pode ser observado na Figura ??b, na qual são apresentados perfis da média temporal da retenção gasosa sobre uma linha localizada no plano YZ ($X=0$) em $Z=16$ cm. O comportamento mais simétrico da condição 2 pode ser explicada por dois fatores: 1) a velocidade de injeção para a condição 2 é maior, portanto, as variações no escoamento são mais intensas e 2) o modelo de ISHII e ZUBER [4] foi utilizado para para o cálculo da força de arrasto, promovendo um comportamento diferente (quando comparado com o modelo de GRACE, WAIREGI e NGUYEN [71]) da força de arrasto frente a variações na retenção gasosa, conforme explicado anteriormente.

A Figura 4.24 apresenta a variação temporal da retenção gasosa média em um subvolume cilíndrico, cuja base se encontra no plano XY ($Z=5$ cm) e o topo no plano



(a)



(b)

Figura 4.23: Gráficos de contorno para a retenção gasosa média temporal no plano XY para $Z=5$, 16 e 25 cm (a) e perfis da média temporal da retenção gasosa sobre uma linha localizada no plano YZ ($X=0$) em $Z=16$ cm (b).

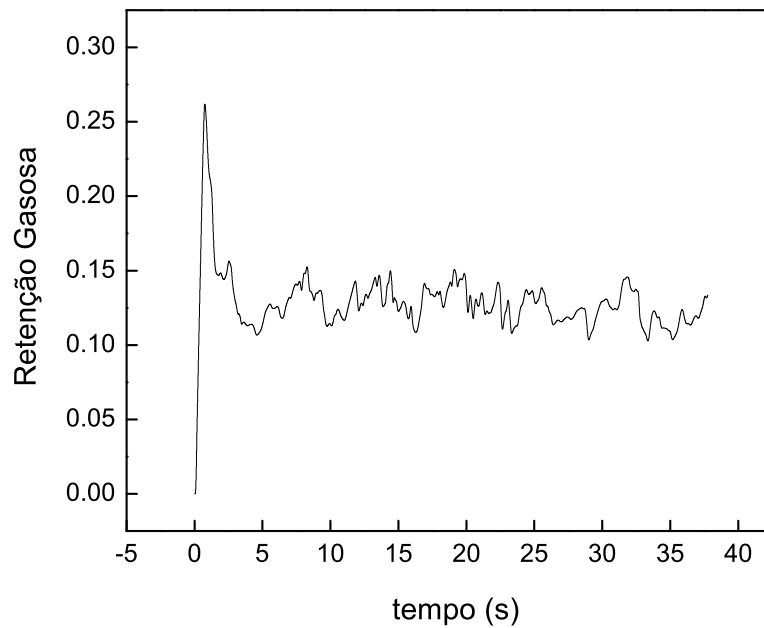


Figura 4.24: Variação temporal da retenção gasosa média em um subvolume cilíndrico, cuja base se encontra no plano XY ($Z=5\text{cm}$) e o topo no plano XY ($Z=20\text{ cm}$).

XY ($Z=20\text{ cm}$). Nesta figura é possível identificar que a retenção gasosa na coluna de borbulhamento apresentou oscilações quase periódicas. Resultado semelhante foi obtido por RODRIGUES [1]. É possível observar, que a partir de 5 s, as oscilações passam a ocorrer, o período de oscilação está em torno de 6 a 7 s, ou seja, eventuais médias temporais que se destinem a capturar o comportamento estacionário das variáveis médias do escoamento, devem ser realizadas em tempos de 2 a 5 vezes maiores do que estes.

4.3.9 Estudo da Transferência de Calor e Massa: Condição 1

A estratégia adequada para incluir os processos de transferência de calor e massa nas simulações fluidodinâmicas de evaporadores por contato direto requer, primeiramente, que se realize uma simulação puramente fluidodinâmica, ou seja, sem incluir os processos de transferência de calor e massa entre as fases. Uma vez que o padrão hidrodinâmico esteja estabelecido, e corretamente resolvido, pode-se então dar partida nos processos de transporte de calor e massa entre as fases.

As condições iniciais para a simulação do ECD, o qual considera os processos de transporte de calor e massa entre as fases, para a condição 1, são as seguintes: $T_g^0 = 384,4$ K; $T_l^0 = 339$ K e $Y_{g,1}^0 = 0,13$. Onde T_g^0 e T_l^0 são, respectivamente, as temperaturas da fase gasosa e da fase líquida no instante inicial e $Y_{g,1}^0$ é a fração mássica de água na fase gasosa no instante inicial. Os valores dos parâmetros advindos do modelo Lagrangeano e das propriedades físicas da fase líquida foram avaliados na temperatura da fase líquida, que permanece constante. O ar, conforme citado anteriormente, foi considerado gás ideal e os valores de suas propriedades físicas dependem dos valores locais da temperatura, pressão e fração mássica de água, estas considerações também são válidas para as simulações considerando transferência de calor e massa na condição 2 (Seção 4.3.10).

A seguinte estratégia foi seguida: para realizar a simulação fluidodinâmica injetou-se ar em uma coluna de líquido estacionária. A temperatura de injeção do ar, especificamente para a condição 1, foi igual a 384,4 K, a fração mássica de água no ar foi igual a 0,13 (ambos os valores reportados na Tabela 4.10). A temperatura da fase líquida foi considerada igual a 339 K. Portanto, ao final da simulação puramente hidrodinâmica tem-se a seguinte situação hipotética: água a 339 K, ar distribuído na coluna a 384,4 K e com uma fração mássica de água igual a 0,13. Ou seja tem-se uma diferença significativa de temperatura entre as fases e a fração mássica de água no ar está relativamente distante do valor necessário para a sua completa saturação na temperatura da fase líquida (aproximadamente 0,17).

Na Figura 4.25 são apresentadas os campos iniciais de pressão e fração de fase para a simulação do ECD na condição 1. É possível observar o comportamento assimétrico da pluma. O campo de pressão no instante inicial é praticamente igual ao campo de pressão hidrostática como seria esperado para o escoamento em colunas de borbulhamento, visto que a retenção gasosa global, em geral, é da ordem de 10 % e a densidade da fase gasosa é 1000 vezes menor que a densidade da fase líquida.

Uma vez definidas as condições iniciais e as condições de contorno (ver Tabela 4.10 e Seção 4.3.5), foi possível dar partida aos processos de transporte de calor e massa entre as fases.

A Figura 4.26 apresenta gráficos de contorno para a temperatura da fase gasosa, no plano YZ ($X=0$), em diferentes tempos de simulação. Inicialmente o campo

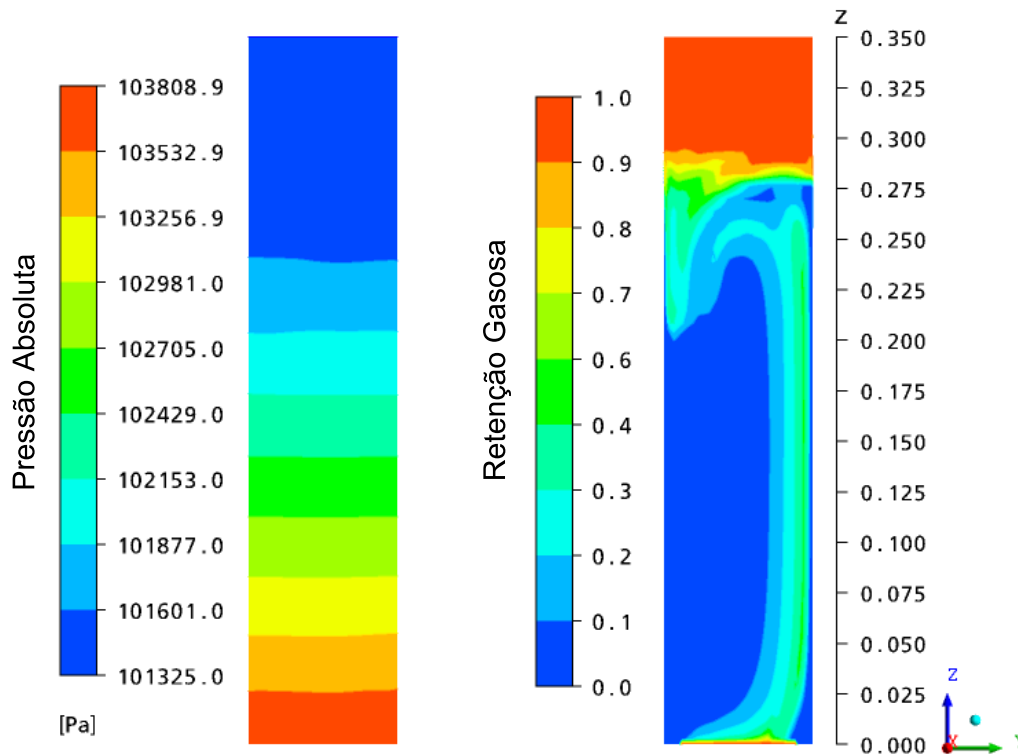


Figura 4.25: Campo inicial de pressão e fração de fase gasosa para a simulação do ECD incluindo os processos de transporte de calor e massa entre as fases.

de temperatura da fase gasosa é uniforme e seu valor é igual a 384,4 K. Após 0,1 s de simulação (aproximadamente 3 % do tempo de residência da fase gasosa no equipamento, que é igual a 3,15 s), com exceção da região do topo que concentra gás puro e da região nas proximidades da base da coluna, a temperatura da fase gasosa diminuiu cerca de 40 K, o que demonstra a intensidade da transferência de calor entre as fases. Aos 4 s de simulação, valor pouco acima do tempo de residência da fase gasosa no equipamento, praticamente toda a fase gasosa existente na coluna já está na temperatura da fase líquida.

Na Figura 4.27, são apresentados gráficos de contorno para a fração mássica de água na fase gasosa, no plano YZ ($X=0$), em diferentes tempos de simulação. A taxa mássica de vaporização, do mesmo modo que a taxa de calor, é intensa, visto que após os mesmos 0,1 s de simulação, praticamente em todo o domínio de cálculo, a fase gasosa atingiu a fração mássica de saturação de água na temperatura da fase líquida, cujo valor é igual a 0,175. Aos 4 s de simulação, praticamente toda a fase gasosa existente na coluna sofreu o efeito da troca de massa entre as fases, inclusive a região de gás puro (*freeboard*, ver Figura 4.12).

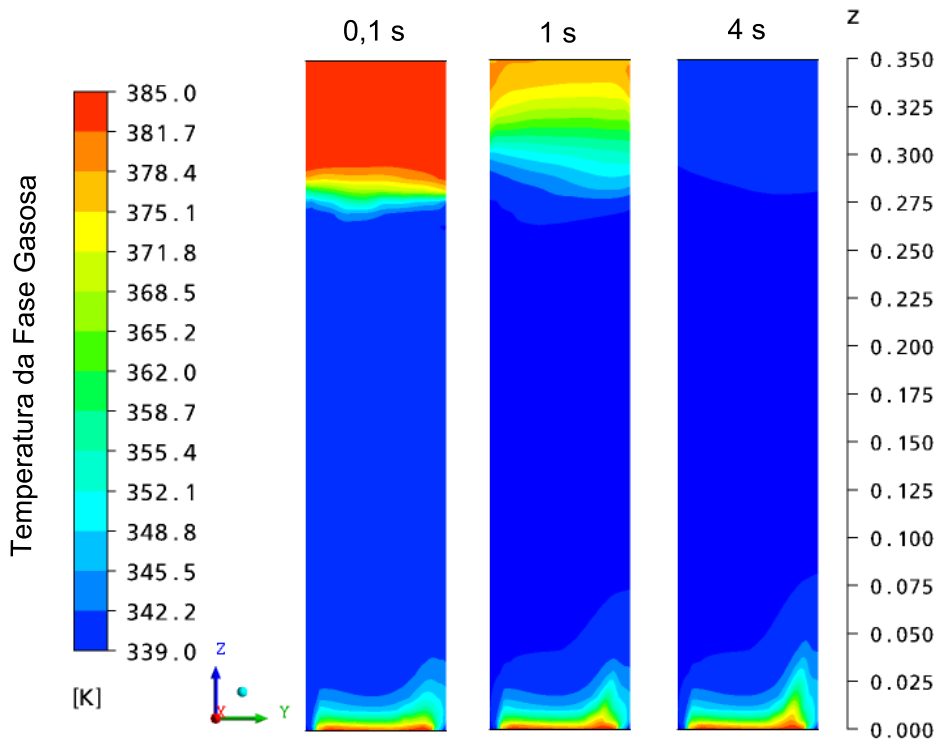


Figura 4.26: Gráficos de contorno para a temperatura da fase gasosa no plano YZ ($X=0$) para diferentes tempos de simulação.

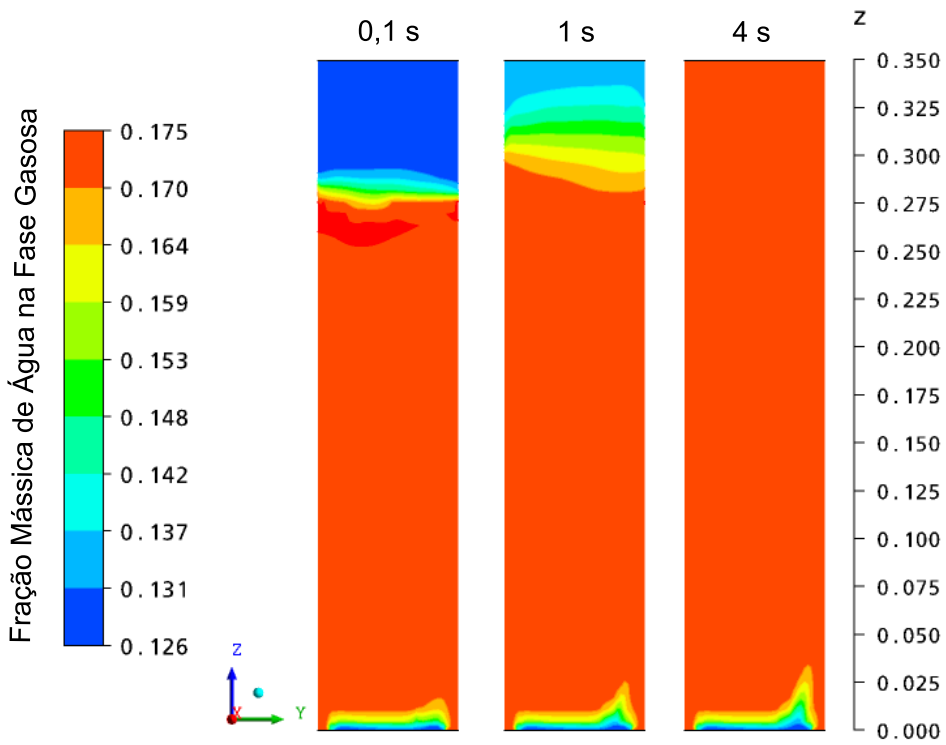


Figura 4.27: Gráficos de contorno para a fração mássica de água na fase gasosa no plano YZ ($X=0$) para diferentes tempos de simulação

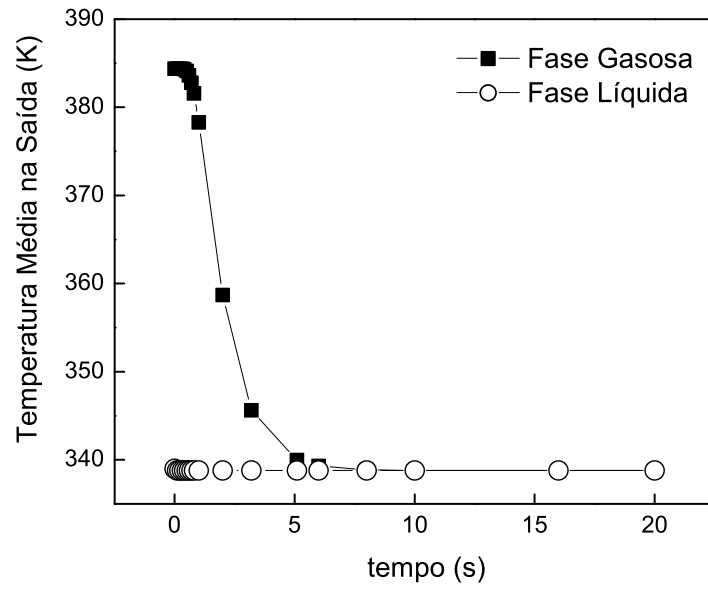
É importante ressaltar que para a região de *freeboard* os efeitos de resfriamento e saturação da fase gasosa com vapor de água se dão por meio de um mecanismo de renovação de fase, ou seja, a fase gasosa que troca calor e massa com a fase líquida ascende e empurra o ar da região de *freeboard*, inicialmente aquecido e não saturado, para fora da coluna.

Os resultados da evolução temporal dos campos de temperatura da fase gasosa e de fração mássica de água na fase gasosa corroboram as afirmações feitas na Seção 4.3.2 em relação às diferentes escalas de tempo envolvidas no comportamento dinâmico de colunas de borbulhamento. Os fenômenos de transporte de calor e massa entre as fases se estenderam por todo o domínio de cálculo em aproximadamente um tempo de residência da fase gasosa no equipamento (da ordem de segundos).

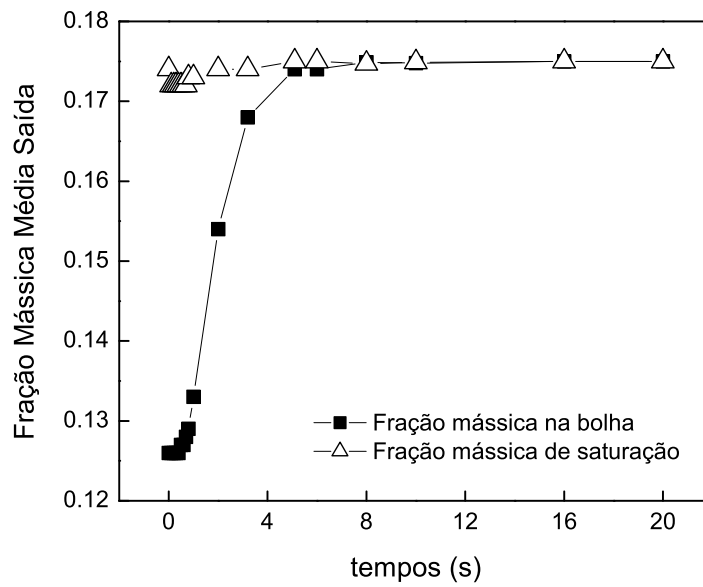
Na Figura 4.28a são apresentados os comportamentos dinâmicos da temperatura da fase gasosa e temperatura da fase líquida na região de saída da coluna. Na Figura 4.28b são apresentados os comportamentos dinâmicos da fração mássica de água e fração mássica de saturação de água na fase gasosa, também na região de saída da coluna. Experimentalmente, dados semelhantes poderiam ser obtidos com sensores apropriados posicionados no topo da coluna. O que há de interessante nestes resultados é o fato de que, após aproximadamente 6 s de simulação (aproximadamente dois tempos de residência da fase gasosa na coluna), a fase gasosa saturada com vapor d'água deixa a coluna em equilíbrio térmico com a fase líquida. O equilíbrio térmico entre as fases foi observado por RIBEIRO JR. e LAGE [3] em seus experimentos.

Apesar de não haver dados quantitativos à respeito da fração mássica de água na fase gasosa na saída da coluna, RIBEIRO JR. e LAGE [3] comprovaram que a taxa mássica de evaporação é limitada pela quantidade de energia disponível. Portanto, se a fase gasosa alcançou o equilíbrio térmico com a fase líquida na saída da coluna (tanto na simulação quanto nos experimentos o equilíbrio térmico foi observado), significa que a mesma cedeu toda a sua energia para fins de evaporação e aquecimento da fase contínua. Como isto demonstra que o contato entre as fases é muito bom, não é absurdo supor que a fase gasosa atinja a saturação. Cálculos realizados por RIBEIRO JR. e LAGE [72] corroboram que o gás na saída da coluna está praticamente saturado em seus experimentos [3].

Na Figura 4.29 são apresentados, respectivamente, detalhes dos gradientes de



(a)



(b)

Figura 4.28: Evolução temporal na saída da coluna das temperaturas das fases gasosa e líquida (a) e das frações mássicas de água na fase gasosa e de saturação de vapor de água (b).

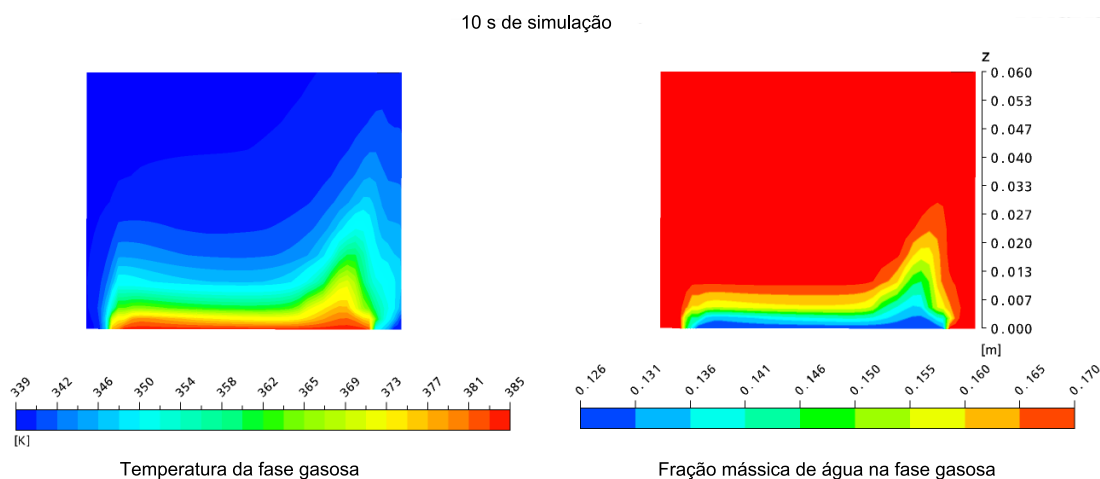


Figura 4.29: Gráficos de contorno no plano YZ ($X=0$), ampliado na região da base da coluna, para a fração mássica de água na fase gasosa e temperatura da fase gasosa. Tempo de simulação igual a 10 s.

fração mássica de água na fase gasosa e de temperatura da fase gasosa nas proximidades da região de entrada aos 10 s de simulação. Pode-se observar que ambos os gradientes se propagaram até uma altura aproximadamente igual a 5 cm. Como a altura de borbulhamento, para este caso, está em torno de 28 cm, significa que em aproximadamente 82 % do volume da coluna os fenômenos de transferência de calor e massa entre as fases ocorrem em uma magnitude muitas vezes menor do que no volume associado aos primeiros 5 cm de altura. Portanto, pode-se considerar que uma grande parcela do volume da coluna é na verdade volume “morto”, não se prestando a realizar a sua tarefa primordial, que é a transferência de calor e massa entre as fases. Comportamento semelhante foi observado por RODRIGUES [1].

Na Figura 4.30 são apresentados detalhes dos gradientes de fração mássica de água na fase gasosa e de temperatura da fase gasosa, nas proximidades da região de entrada, aos 10 s de simulação. Estes gráficos de contorno foram obtidos a partir de uma simulação desconsiderando os efeitos de troca de calor e massa na zona de formação.

Pode-se observar nas Figuras 4.29 e 4.30, que as alturas necessárias para que o equilíbrio termo-mássico seja alcançado, nos casos considerando ou não a formação, são praticamente iguais. Ou seja, embora na simulação sem etapa de formação não haja correção da condição de entrada da fase gasosa, os fluxos de calor e massa entre as fases são grandes o suficiente de forma a garantir que o equilíbrio termo-mássico

seja alcançado nas intermediações da entrada. Isso pode ser explicado pelo fato de que ao não se considerar a etapa de formação, a diferença de estado entre a fase gasosa injetada e a fase líquida, passa a ser muito grande, ou seja, a diferença de temperatura entre as fases passa a ser maior e o grau de saturação da fase gasosa menor.

A Tabela 4.14 apresenta os valores para as taxas mássicas totais trocadas entre as fases nas etapas de ascensão, \dot{m}_{evap}^{asc} , e formação, \dot{m}_{evap}^{form} . É possível observar nesta tabela que o valor de \dot{m}_{evap}^{asc} é no mínimo três vezes maior para a simulação que desconsidera a etapa de formação, o que confirma as afirmações feitas no parágrafo anterior.

Embora a taxa mássica aumente para o caso simulado sem a etapa de formação, a mesma ainda não é suficiente para reproduzir a taxa mássica trocada entre as fases na etapa de formação, é possível observar, também na Tabela 4.14, que \dot{m}_{evap}^{form} é no mínimo 1,4 vezes maior que \dot{m}_{evap}^{asc} (caso sem formação). Portanto, a etapa de formação é importante e não deve ser desprezada, o que está de acordo com as observações experimentais reportadas na Seção 2.2.1.

A determinação da altura no qual os processos deixam efetivamente de ocorrer, é importante para o projeto de ECDs. Seria, por exemplo, interessante investigar a possibilidade de se trabalhar com um arranjo de evaporadores com pequena razão

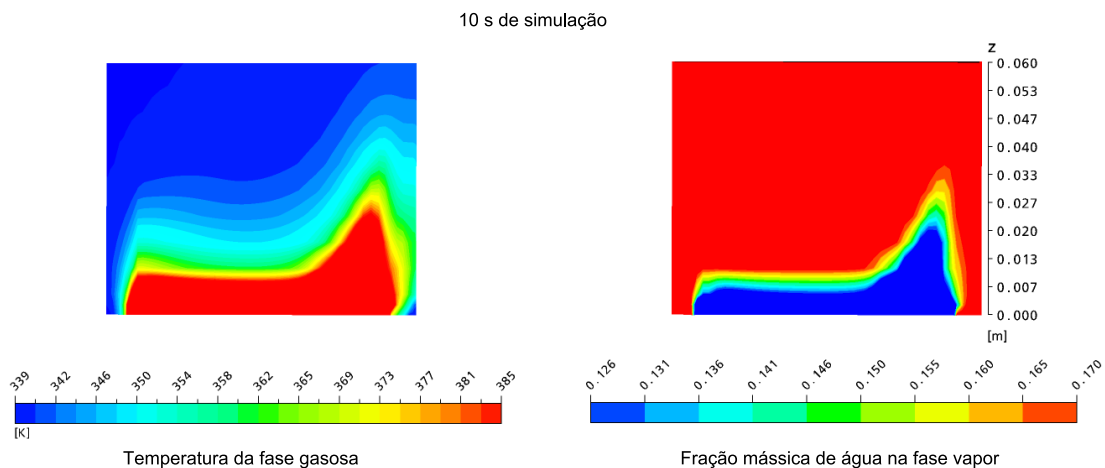


Figura 4.30: Gráficos de contorno no plano YZ ($X=0$), ampliados na região da base da coluna, para a fração mássica de água na fase gasosa e temperatura da fase gasosa. Simulação fluidodinâmica no qual foram desconsiderados os efeitos de troca de calor e massa na etapa de formação. Tempo de simulação igual a 10 s.

Tabela 4.14: Taxas mássicas totais nas etapas de formação e ascensão para 10 s de simulação

Simulação	\dot{m}_{evap}^{asc} (kg s ⁻¹)	\dot{m}_{evap}^{form} (kg s ⁻¹)
Sem Formação	$9,54 \times 10^{-6}$	0
Com Formação	$2,99 \times 10^{-6}$	$1,38 \times 10^{-5}$

altura/diâmetro, de forma a otimizar o volume útil dos mesmos.

Uma outra medida importante é a retenção gasosa global na coluna (média no volume). Os valores experimentais, obtidos por RIBEIRO JR. e LAGE [3], para a retenção gasosa global e altura de borbulhamento, foram apresentados na Tabela 4.9. Para calcular a retenção gasosa global foi preciso definir uma altura de borbulhamento nos resultados das simulações, por isso foi elaborado um procedimento para a identificação da interface gás-líquido nos mesmos.

A interface é caracterizada, dentre outras coisas, pelo aumento contínuo e acentuado da retenção gasosa. Adotou-se como critério de localização da altura de borbulhamento nos resultados da simulação, a retenção gasosa média na área em um dado plano XY (corte transversal). Considerou-se a altura de borbulhamento obtida pela simulação (H_{borb}^{sim}) o valor de Z (altura) para o qual a retenção média no plano XY fosse igual a 50 %.

Uma vez definida a altura de borbulhamento (ou a altura no qual se localiza a interface gás-líquido), foi construído um subvolume cilíndrico cuja base coincide com a base da coluna e o topo está localizado a uma altura igual a H_{borb}^{sim} . Com o subvolume construído, foi possível calcular o valor da retenção gasosa global na coluna.

A Tabela 4.15 apresenta os resultados das retenções gasosas globais na coluna, para os experimentos e para a simulação fluidodinâmica, com e sem transferência de calor e massa. É possível observar que o valor obtido pelas simulações fluidodinâmica estão de acordo com o valor reportado nos experimentos de RIBEIRO JR. e LAGE [3]. Ou seja, o modelo fluidodinâmico conseguiu prever de forma satisfatória a retenção gasosa global na coluna.

A predição adequada da retenção gasosa global na coluna é de grande valia, sendo este parâmetro de fundamental importância para o projeto e modelagem do ECD.

Tabela 4.15: Valores experimentais e simulado para a retenção gasosa global na coluna (condição 1)

Caso	Retenção	Valores
Experimentos	$\langle r_g \rangle_{min}$	0,077
	$\langle r_g \rangle_{col}$	0,098
	$\langle r_g \rangle_{max}$	0,117
Simulação puramente hidrodinâmica	$\langle r_g \rangle_{col}$	0,100
Simulação com Transf. de Calor e Massa	$\langle r_g \rangle_{col}$	0,098

Entretanto, cabe ressaltar, que tal valor foi obtido sob circunstâncias de escoamento assimétrico, conforme relatado na Seção 4.3.7. Contudo, a correta predição da retenção gasosa global é um indicativo de que a abordagem utilizada para a inclusão dos processos de transferência de calor e massa na simulação do ECD é adequada, ressaltando-se a necessidade de se realizar alguns ajustes na modelagem.

Também foram obtidos os valores da retenção gasosa global para as simulações utilizando as malhas M_{11} (25.347 nós) e M_{31} (110.112 nós). Para a malha M_{11} , $\langle r_g \rangle_{col} = 0,099$ e para a malha M_{31} , $\langle r_g \rangle_{col} = 0,098$. Portanto, em termos globais, não foi possível identificar diferenças nos desempenhos das malhas. Entretanto, o estudo realizado na Seção 4.3.6 indicou diferenças significativas no que diz respeito aos comportamentos instantâneos locais da pluma gasosa, os quais são de fundamental importância no estudo e análise dos processos de transferência de calor e massa na simulação fluidodinâmica do ECD. Além disso é possível concluir que a retenção gasosa global não foi afetada pela partida dos processos de transferência de calor e massa entre as fases. O efeito térmico sobre a retenção gasosa não foi observado porque a simulação já inclui os efeitos de formação das bolhas.

4.3.10 Estudo da Transferência de Calor e Massa: Condição

2

As condições iniciais para a simulação do ECD, a qual considera os processos de transporte de calor e massa entre as fases, para a condição 2, são as seguintes: $T_g^0 = 391,6$ K; $T_l^0 = 337,9$ K e $Y_{g,1}^0 = 0,10$.

A partida dos processos de transferência de calor e massa na condição 2, seme-

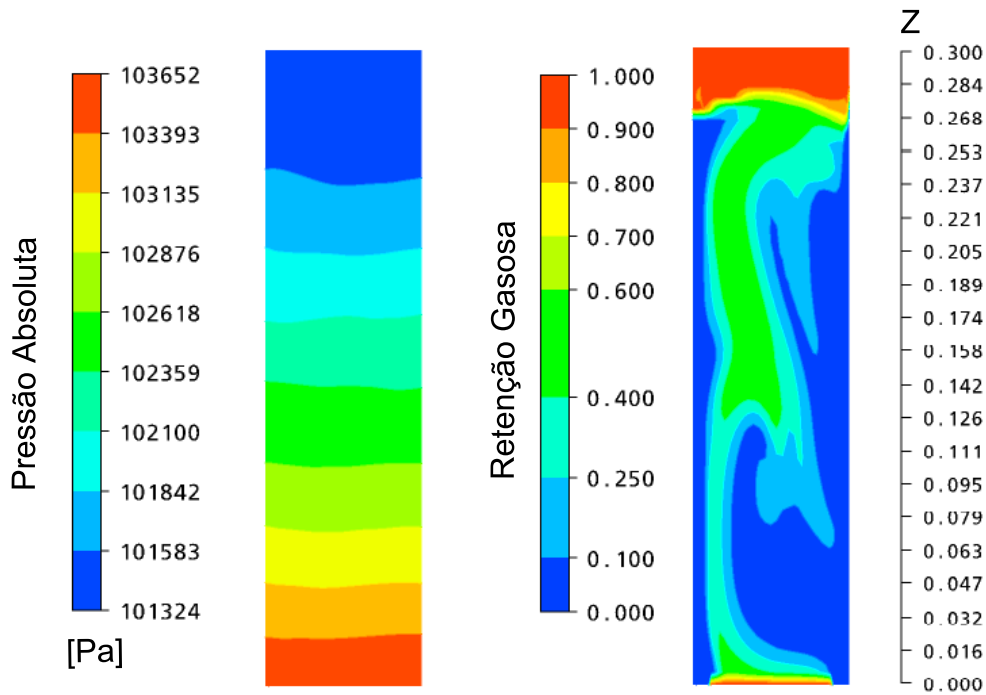


Figura 4.31: Campos iniciais de pressão e retenção gasosa para a simulação do ECD incluindo os processos de transporte de calor e massa entre as fases (plano YZ ($X=0$) com corte na altura $Z=30$ cm).

lhantemente ao que ocorreu na condição 1, se deu a partir de campos hipotéticos de temperatura e fração mássica de água na fase gasosa.

Na Figura 4.31 são apresentadas as condições iniciais dos campos de pressão e fração de fase no ECD para a simulação da condição 2. É possível observar o comportamento assimétrico da pluma nas proximidades da base (conforme salientado na Seção 4.3.8). Como na condição 1 (ver Figura 4.25), o campo de pressão no instante inicial é praticamente igual ao campo de pressão hidrostática. É importante observar que tanto para a condição 1 quanto para a condição 2, os campos hidrodinâmicos selecionados, como condição inicial para a simulação do ECD, incluindo os processos de transferência de calor e massa entre as fases, foram aqueles nos quais o comportamento do padrão de escoamento alcançou o estado quase periódico. Os gráficos de contorno apresentados na Figura 4.31 são ampliações de um corte realizado na altura $Z=30$ cm no plano YZ ($X=0$), pois para alturas maiores do que 30 cm tem-se a denominada região de *freeboard* ou de desengajamento de gás, que foi utilizada com o intuito de evitar o transbordamento da fase líquida.

A Figura 4.32, apresenta os gráficos de contorno para a retenção gasosa e para

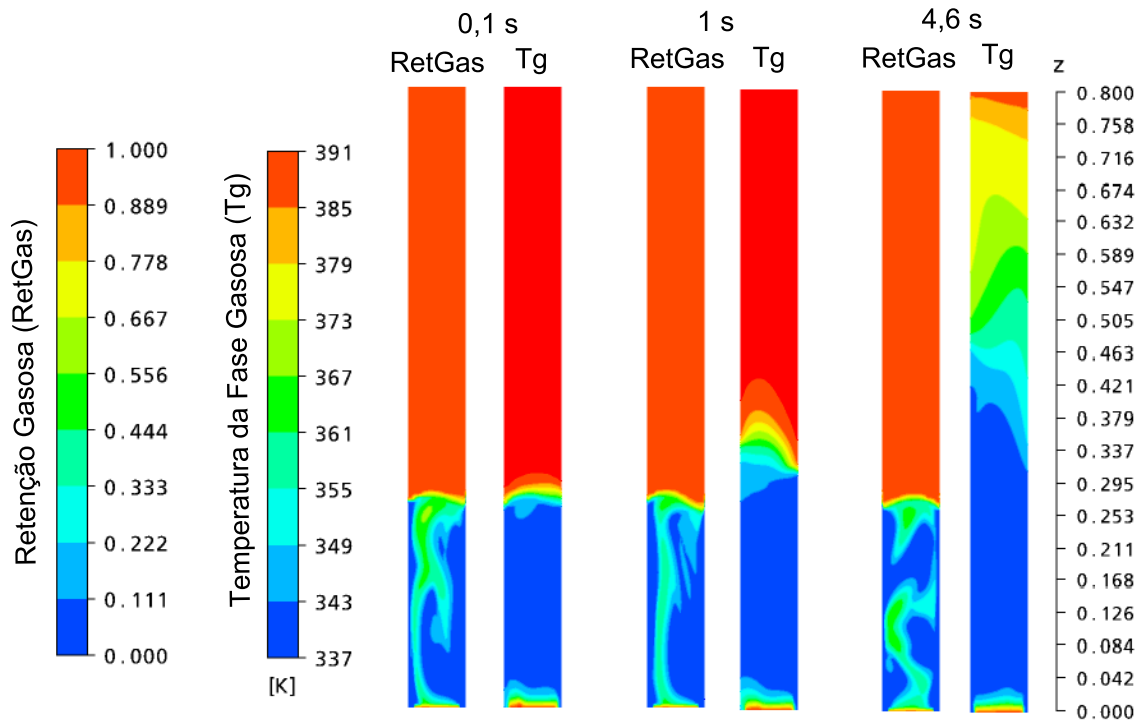


Figura 4.32: Gráficos de contorno para a retenção gasosa e para a temperatura da fase gasosa, no plano YZ ($X=0$), em diferentes tempos de simulação.

a temperatura da fase gasosa em diferentes tempos de simulação. Após 0,1 s de simulação, com exceção da região de *freeboard* (a grande região em vermelho presente nos gráficos de contorno para a retenção gasosa local) e da região nas proximidades da base da coluna, a temperatura da fase gasosa diminuiu aproximadamente 54 K, o que demonstra a intensidade da troca de calor entre as fases, ou seja, poucos segundos de simulação foram suficientes para que o equilíbrio térmico entre as fases fosse alcançado em toda a extensão da região de escoamento bifásico na coluna. Na região de *freeboard* não ocorre o processo de transporte de calor entre as fases, visto que não há fase líquida, por isso o processo de resfriamento da fase gasosa se dá pelo mecanismo de renovação da fase, ou seja, a fase gasosa que trocou calor com a fase líquida ascende na coluna empurrando para fora a fase gasosa aquecida na região de gás puro. Em 4,6 s de simulação, é possível observar que o processo de renovação alcançou toda a região de gás puro, embora não esteja completo. Portanto, após a completa renovação do gás contido na região de *freeboard*, a fase gasosa deixará a coluna em equilíbrio térmico com a fase líquida.

A Figura 4.33 apresenta os gráficos de contorno para a retenção gasosa e para

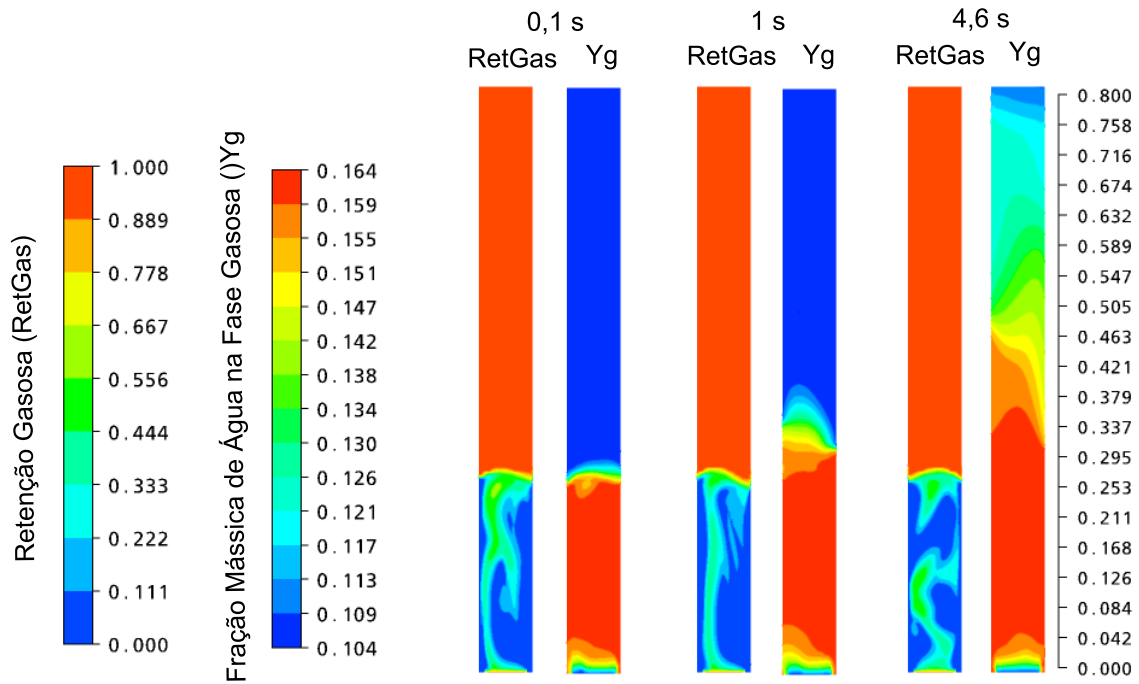


Figura 4.33: Gráficos de contorno para a retenção gasosa e para a fração mássica de água na fase gasosa, no plano YZ ($X=0$) em diferentes instantes de simulação.

a fração mássica de água na fase gasosa, no plano YZ ($X=0$). Do mesmo modo que ocorreu para o transporte de calor entre as fases, a taxa de transferência de massa foi intensa, pois após 0,1 s de simulação, com exceção da região de *freeboard*, a fase gasosa praticamente alcançou o valor da fração mássica de saturação de água na temperatura da fase líquida. Conforme explicado nos parágrafos anteriores, a fase gasosa contida na região de *freeboard* somente alcançará a fração mássica de saturação de água, cujo valor é igual a 0,17, por meio do mecanismo de renovação de fase. Em 4,6 s de simulação, o processo de renovação alcançou toda a região de gás puro, e serão necessários mais uns poucos segundos de simulação para que toda a fase gasosa contida nesta região alcance o equilíbrio mássico com a fase líquida.

Na Figura 4.34a, são apresentados os comportamentos dinâmicos da temperatura da fase gasosa e da temperatura da fase líquida no plano XY ($Z=29$ cm). Na Figura 4.34b, são apresentados os comportamentos dinâmicos da fração mássica de água e da fração mássica de saturação de água na fase gasosa, também no plano XY ($Z=29$ cm). Experimentalmente, dados semelhantes poderiam ser obtidos com sensores apropriados posicionados em uma altura $Z=29$ cm. O que há de interessante nestes resultados é o fato de que após 2 s de simulação (aproximadamente dois tempos de

residência da fase gasosa em um subvolume no domínio de cálculo cuja base está em $Z=0$ cm e o topo em $Z=29$ cm), a fase gasosa saturada de água deixa a coluna em equilíbrio térmico com a fase líquida. O equilíbrio térmico entre as fases foi observado por RIBEIRO JR. e LAGE [3] em seus experimentos, também para a condição 2.

Conforme concluiu-se para a condição 1, os resultados reportados para a evolução temporal dos campos de temperatura e de fração mássica de água da fase gasosa, corroboram as afirmações feitas na Seção 4.3.2, em relação às diferentes escalas de tempo envolvidas no processo.

A Figura 4.35 apresenta os gráficos de contorno da fração mássica de água e temperatura da fase gasosa no instante de tempo igual a 7 s. Os gráficos são representativos de uma região ampliada da base da coluna.

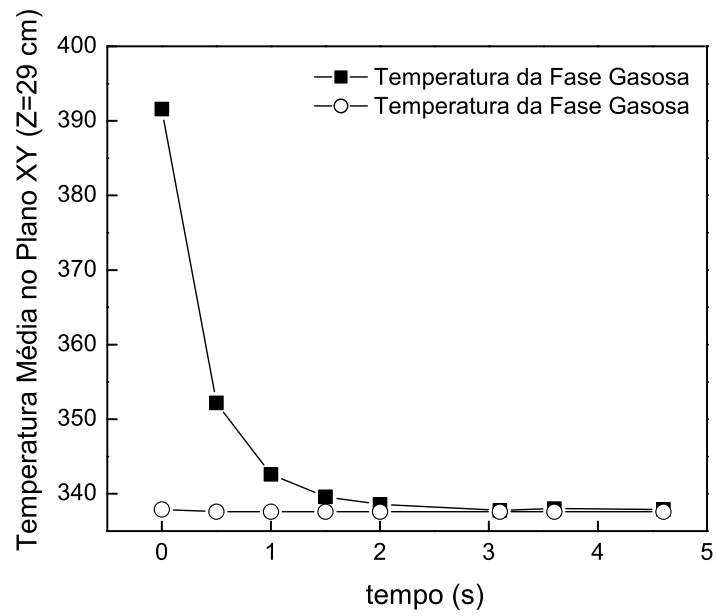
Novamente, conforme observado para a condição 1, os gradientes de temperatura e fração mássica se propagaram até uma altura aproximadamente igual a 5 cm. Portanto, conclui-se, que também para a condição 2, em conformidade com o que foi obtido para a condição 1, há um grande volume do equipamento que não foi utilizado para a transferência de calor e massa entre as fases, processos primordiais na operação do ECD.

Na Figura 4.36 são apresentados detalhes dos gradientes de temperatura e fração mássica de água da fase gasosa, nas proximidades da região de entrada, aos 7 s de simulação. Estes gráficos de contorno foram obtidos a partir de uma simulação desconsiderando os efeitos de troca de calor e massa na zona de formação.

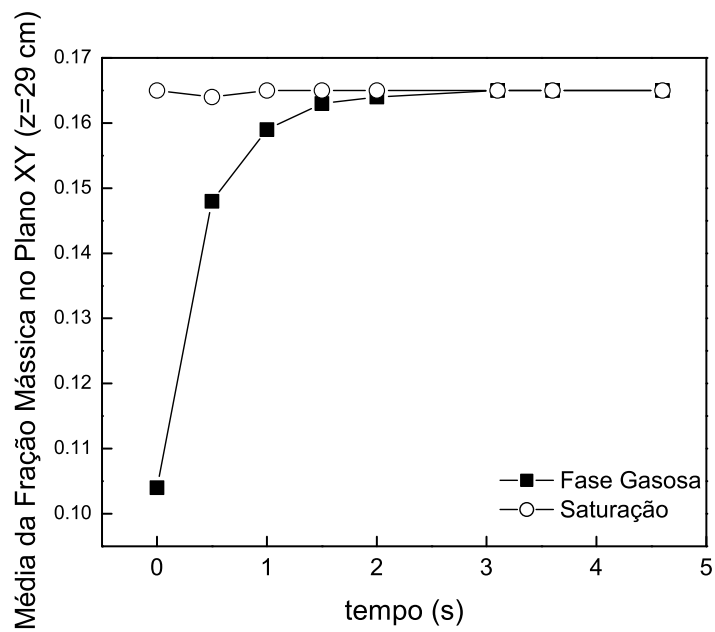
Pode-se observar nas Figuras 4.35 e 4.36, que as alturas necessárias para que o equilíbrio termo-mássico seja alcançado, nos casos considerando ou não a formação, são diferentes.

A altura para o alcance do equilíbrio termo-mássico para o caso que desconsidera a etapa de formação, foi igual a 6,2 cm, 24% maior que o valor obtido para a simulação em que a formação foi considerada. Portanto, na condição 2, a importância da etapa da formação é evidenciada pela menor altura, e conseqüentemente volume, necessária para que o equilíbrio termo-mássico seja alcançado.

A Tabela 4.16 apresenta os resultados das retenções gasosas globais na coluna, para os experimentos e para a simulação fluidodinâmica com e sem transferência de



(a)



(b)

Figura 4.34: Evolução temporal em um plano XY ($Z=29$ cm) das temperaturas das fases gasosa e líquida (a) e das frações mássicas de água na fase gasosa e de saturação de vapor de água (b).

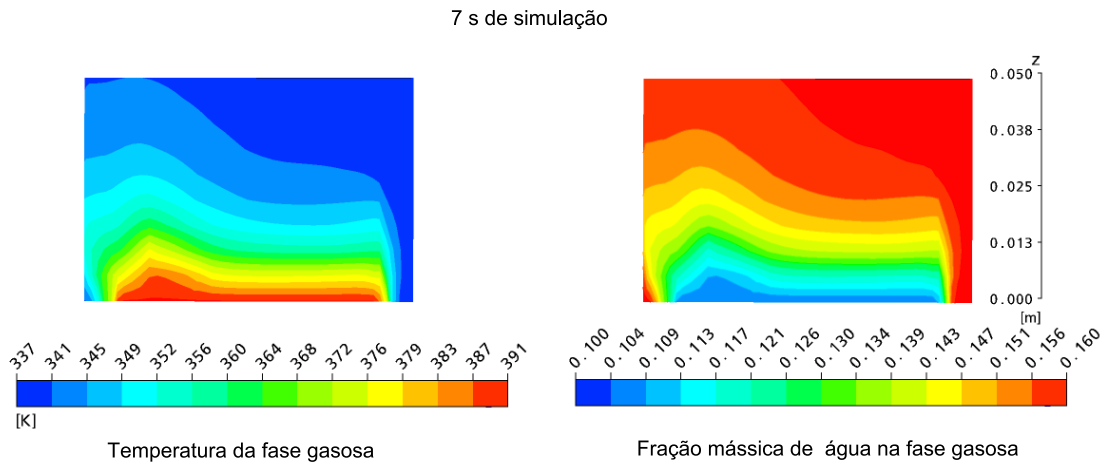


Figura 4.35: Gráficos de contorno para a fração mássica de água na fase gasosa e temperatura da fase gasosa no instante igual a 7 s (ampliação para uma região localizada nas proximidades da base da coluna).

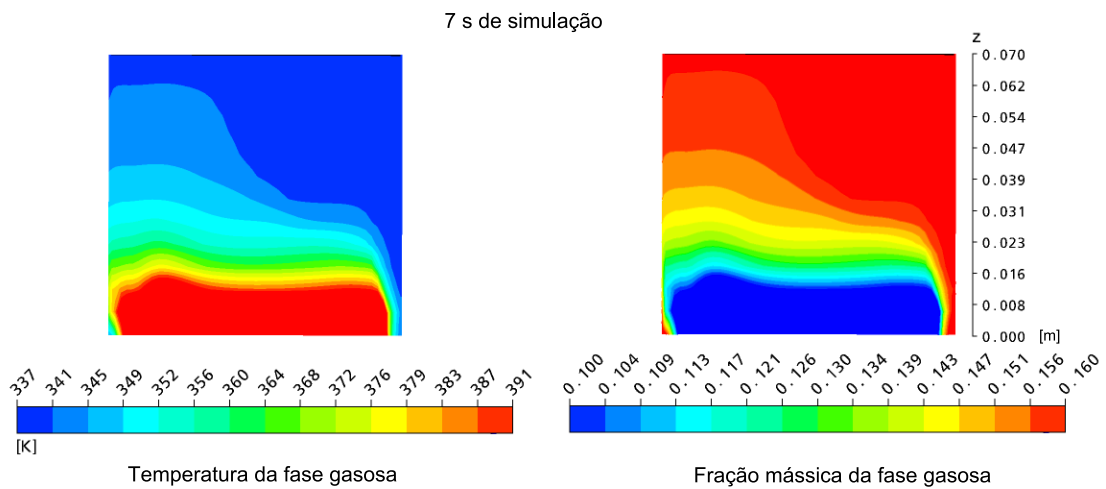


Figura 4.36: Gráficos de contorno para a fração mássica de água na fase gasosa e temperatura da fase gasosa no instante igual a 7 s (ampliação para uma região localizada nas proximidades da base da coluna). Simulação na qual foram desconsiderados os efeitos da etapa de formação.

calor e massa. É possível observar que os valores obtidos pelas simulações fluidodinâmicas estão de acordo com o valor reportado nos experimentos de RIBEIRO JR. e LAGE [3]. Ou seja, assim como na condição 1, o modelo fluidodinâmico conseguiu prever de forma satisfatória a retenção gasosa global na coluna.

A correta predição da retenção gasosa global na condição 2, reforça a afirmação feita na seção anterior à respeito da adequabilidade da abordagem utilizada para a

Tabela 4.16: Valores experimentais e simulados para a retenção gasosa global na coluna (condição 2)

Caso	Retenção	Valores
Experimentos	$\langle r_g \rangle_{min}$	0,116
	$\langle r_g \rangle_{col}$	0,152
	$\langle r_g \rangle_{max}$	0,185
Simulação puramente hidrodinâmica	$\langle r_g \rangle_{col}$	0,139
Simulação com Transf. de Calor e Massa	$\langle r_g \rangle_{col}$	0,140

inclusão dos processos de transferência de calor e massa na simulação do ECD.

A Figura 4.37 apresenta a variação temporal da retenção gasosa média em um subvolume cilíndrico cuja base se encontra no plano XY ($Z=5\text{cm}$) e o topo no plano XY ($Z=20\text{ cm}$), para a condição 2. São apresentados os resultados das simulações puramente fluidodinâmica e considerando a transferência de calor e massa entre as fases. É possível concluir ao se observar a figura, que o comportamento oscilatório pseudo-periódico é mantido quando os processos de transferência de calor e massa entre as fases é considerado.

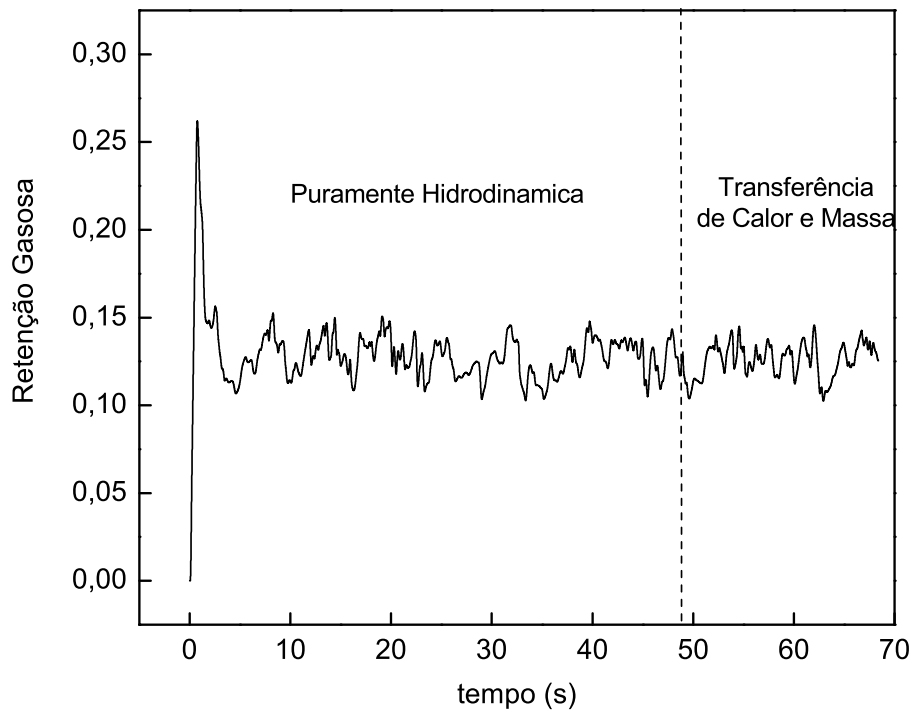


Figura 4.37: Variação temporal da retenção gasosa média em um subvolume cilíndrico cuja base se encontra no plano XY ($Z= 5$ cm) e o topo no plano XY ($Z= 20$ cm). Resultados para as simulações com ou sem os processos de transporte de calor e massa entre as fases.

Capítulo 5

Conclusões e Sugestões

5.1 Resumo e Conclusões

A inclusão dos efeitos de transferência de calor e massa, ao longo das etapas de formação e ascensão da bolha, na simulação fluidodinâmica Euleriana do ECD, foi realizada por meio do acoplamento com um modelo Lagrangeano da literatura [2] desenvolvido para a troca de calor e massa em bolhas.

A simulação do ECD foi realizada por meio de uma abordagem Euleriana-Euleriana, na qual as fases gasosa e líquida são consideradas meios interpenetrantes entre si. Além disso, o modelo utilizado foi considerado transiente, tridimensional e turbulento.

A abordagem Euleriana-Euleriana requer que os termos de transporte de quantidade de movimento, massa e energia entre as fases sejam modelados. O transporte de massa e energia são modelados por meio do conceito de coeficientes de transporte. Entretanto, coeficientes de transporte de calor e massa na fase gasosa são difíceis de serem obtidos experimentalmente, e por isso, as correlações existentes na literatura possuem estreita faixa de aplicação. Portanto, a determinação de tais coeficientes teve de ser feita utilizando-se um modelo termofluidodinâmico adequado. O modelo de CAMPOS e LAGE [2] foi escolhido por ser detalhado, ou seja, fornece informações sobre o escoamento da fase gasosa no interior da bolha, tais como: perfis radiais de velocidade, temperatura e fração mássica de água na fase gasosa, e mais a taxa mássica evaporada e a taxa de calor sensível e latente transferida entre a bolha e a fase líquida. Estas informações foram utilizadas no cálculo dos valores médios

constantes dos coeficientes de transferência de calor e massa na fase gasosa.

Um modelo simplificado para a transferência de calor e massa no interior de bolhas superaquecidas foi desenvolvido a fim de avaliar o uso dos coeficientes médios para a predição dos fluxos de calor e massa entre as fases.

O uso de coeficientes médios de transporte na fase gasosa na etapa de formação se mostrou inadequado, visto que não conseguiu prever as evoluções temporais da temperatura e da fração mássica de água no interior da bolha. Tal inadequação está associada à queda acentuada da contribuição convectiva no interior da bolha. Entretanto, o uso de coeficientes de transporte médios para a fase gasosa na etapa de ascensão mostrou-se adequado, conseguindo reproduzir as evoluções temporais da temperatura e da fração mássica de água na fase gasosa. Ao contrário do que ocorre na etapa de formação o transporte de calor e massa no interior da bolha na etapa de ascensão tem caráter amplamente difusivo (a contribuição convectiva é muito pequena) e, portanto, as variações dos valores instantâneos dos coeficientes são menos acentuadas.

Portanto, do estudo da transferência de calor e massa utilizando o modelo simplificado, conclui-se que a inclusão na simulação fluidodinâmica do ECD dos efeitos da transferência de calor e massa na etapa de formação deve seguir outra abordagem que utilize o conceito de coeficientes de transporte, ao passo que a etapa de ascensão pode e deve ser modelada utilizando tal abordagem.

A inclusão dos efeitos de transporte de calor e massa ao longo da etapa de formação na simulação fluidodinâmica do ECD, foi feita por meio da correção das condições de entrada da fase gasosa e pela inclusão de termos fonte de energia e massa nas equações de transporte da fase líquida. Os termos fonte foram calculados por meio do modelo Lagrangeano de CAMPOS e LAGE [2].

Uma vez definidas as maneiras adequadas de se modelar o transporte de calor e massa entre as fases, as simulações fluidodinâmicas do ECD foram realizadas. Verificou-se a necessidade de primeiramente desenvolver o perfil hidrodinâmico antes de efetivamente dar partida aos processos de transporte de calor e massa entre as fases. Dois casos foram simulados, a condição 1, com velocidade de injeção de gás igual a $2,24 \text{ cm s}^{-1}$, e a condição 2, com velocidade de injeção de gás igual a $4,36 \text{ cm s}^{-1}$. As condições experimentais da condição 1 garantem a operação do ECD no

regime homogêneo, enquanto que para a condição 2 o regime de operação encontra-se no início da região de transição de regime.

A simulação puramente hidrodinâmica da condição 1, utilizando o modelo de GRACE, WAIREGI e NGUYEN [71], para modelar o coeficiente de arrasto, e um fator de correção do efeito de população igual -2, apresentou como resultado um comportamento assimétrico da pluma gasosa, ou seja, uma grande célula de circulação da fase líquida que se estendeu por toda a coluna, permaneceu estabilizada e fez com que a pluma gasosa ficasse retida numa dada região próxima à parede. Tal comportamento não está de acordo com observações experimentais e simulações fluidodinâmicas reportadas na literatura, as quais relatam o comportamento simétrico das variáveis médias do escoamento em colunas de borbulhamento.

A modelagem do distribuidor desconsiderando a presença dos orifícios foi uma das grandes simplificações do presente trabalho para a modelagem do ECD. Trabalhos na literatura indicam que a correta modelagem do distribuidor é importante para se reproduzir o correto comportamento hidrodinâmico no equipamento. Por isso, há fortes indicativos de que o comportamento médio assimétrico da pluma gasosa pode estar relacionado a modelagem adotada para o distribuidor de ar. A reprodução exata do distribuidor considerando seus 89 furos exigiria uma malha extremamente refinada que, aliada a complexidade dos casos simulados e aos recursos computacionais disponíveis, inviabilizaram qualquer tentativa de reproduzir rigorosamente o comportamento real do distribuidor. O comportamento médio assimétrico também pode estar relacionado com a não inclusão de outras forças interfaciais, tal como a força de *lift*. Desta forma, a assimetria foi tolerada, mesmo por que a dinâmica do escoamento se manteve, ainda que o mesmo tenha perdido seu caráter caótico.

A simulação puramente hidrodinâmica da condição 2 exigiu a mudança da modelagem do coeficiente de arrasto, visto que neste caso o ECD opera na região de transição de regimes, ou seja, os fenômenos de quebra e coalescência começam a adquirir importância. O modelo de GRACE, WAIREGI e NGUYEN [71] foi utilizado, considerando um fator de correção de população igual a -0,5, entretanto a predição da retenção gasosa global foi cerca de 30% maior do que a reportada por RIBEIRO JR. e LAGE [3] em seus experimentos. O modelo de ISHII e ZUBER [4] foi escolhido para a modelagem do coeficiente de arrasto, visto que foi desenvolvido

para um conjunto de bolhas, não sendo necessário nenhum tipo de fator de correção para o efeito de população. Um estudo foi realizado e comprovou-se que o modelo de ISHII e ZUBER [4] é capaz de descrever os efeitos de bolhas grandes escoando em conjunto. Ao contrário do que aconteceu para a condição 1, o comportamento assimétrico da pluma gasosa para a condição 2 ficou restrito a uma região localizada nas proximidades da base da coluna.

Uma vez obtido o comportamento quase periódico da hidrodinâmica na coluna de borbulhamento, foi possível iniciar os processos de transferência de calor e massa na coluna, tanto para a condição 1 quanto para a condição 2. A evolução dinâmica dos campos de temperatura da fase gasosa e de fração mássica de água na fase gasosa indicaram a intensidade da troca de calor e massa entre as fases, pois, poucos segundos foram necessários para que os efeitos dos processos de transporte de calor e massa entre as fases se estendessem por todo o domínio de cálculo. Tal fato comprovou que é possível utilizar uma decomposição de escala temporal ao se modelar o ECD.

O monitoramento das variáveis do escoamento na saída da coluna ao longo do tempo, permitiu observar que a fase gasosa saiu da coluna completamente saturada de água e em equilíbrio térmico com a fase líquida. Este comportamento foi observado para as condições 1 e 2. Portanto, a simulação conseguiu prever o comportamento reportado por RIBEIRO JR. e LAGE [3] em seus experimentos.

Observou-se também nos resultados das simulações do ECD que o equilíbrio térmico e mássico é atingido poucos centímetros acima da região de entrada de gás. Portanto, grande parte do equipamento não é utilizado para fins de troca de calor e massa entre as fases.

Para as condições 1 e 2, foram realizadas simulações sem considerar os efeitos de transferência de calor e massa entre as fases na etapa de formação. Estas simulações permitiram verificar a importância da inclusão da etapa de formação na modelagem do ECD. Para a condição 1, a não consideração da etapa de formação levou a uma predição inadequada da taxa mássica total trocada entre as fases. Para a condição 2, a altura necessária para o alcance do equilíbrio termo-mássico aumentou em 24%.

No que diz respeito ao comportamento da retenção gasosa global, as simulações conseguiram prever os resultados reportados por RIBEIRO JR. e LAGE [3] em

seus experimentos, o que indica que a modelagem adotada no presente trabalho, embora incapaz de reproduzir as características simétrica do escoamento, se mostrou apropriada para prever o comportamento médio global da coluna, bem como as características do comportamento termo-mássico da fase gasosa.

5.2 Sugestões

De forma a dar continuidade a este trabalho são feitas algumas sugestões para trabalhos futuros.

Incluir na simulação a modelagem do distribuidor e outras forças interfaciais além do arrasto, a fim de descrever de forma mais realística o comportamento da pluma gasosa no equipamento. Medidas experimentais do campo de velocidade da fase líquida (por PIV ou LDA) e da retenção gasosa local (por meio de sensores eletroresistivos) também são necessárias a fim de validar com maior grau de precisão a hidrodinâmica instantânea e local do escoamento.

RIBEIRO JR. [6] também disponibilizou dados operacionais do ECD para sistema água, ar e acetato de etila. Seria interessante simular a fluidodinâmica também para este caso, por se tratar de um sistema multicomponente.

Por fim, visto que grande parte dos escoamentos industriais são heterogêneos seria interessante incluir na modelagem o efeito de mistura das interações bolha-bolha (quebra e coalescência) no modelo bifásico Euleriano-Euleriano através de balanço populacional.

Referências Bibliográficas

- [1] RODRIGUES, R. C., *Estudo do Aumento de Escala do Processo de Esgotamento de Aromas em Colunas de Borbulhamento Usando Fluidodinâmica Computacional*, Dissertação de M.Sc., Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, RJ, Brasil, 2005.
- [2] CAMPOS, F. B., LAGE, P. L. C., “Heat and mass transfer modeling during the formation and ascension os superheated bubbles”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 43, pp. 2283–2894, 2000.
- [3] RIBEIRO JR, C. P., LAGE, P. L. C., “Direct-contact evaporation in the homogeneous and heterogeneous bubbling regimes. Part I: experimental analysis”, *Internetenional Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 47, pp. 3825–3840, 2004.
- [4] ISHII, M., ZUBER, N., “Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particle flows”, *AIChE Journal*, v. 25, pp. 843–855, 1979.
- [5] MINTON, P. E., *Handbook of evaporation technology*. 1st ed. Noyes Publications, 1986.
- [6] RIBEIRO JR., C. P., *Desenvolvimento de um Processo Combinado de Evaporação por Contato Direto e Permeação de Vapor para Tratamento de Sucos*, Tese de D.Sc., Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, RJ, Brasil, 2005.
- [7] JOSHI, G., “Computational flow modelling and design of bubble column reactors”, *Chemical Engineering Science*, v. 56, pp. 5893–5933, 2001.

- [8] 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, n. 24b, pp. 5735–5746, 1994.
- [9] MUDDE, R. F., SIMONIN, O., “Two and three-dimensional simulations of bubble plume using a two-fluid model”, *Chemical Engineering Science*, v. 54, pp. 5061–5069, 1999.
- [10] PFLEGER, D., GOMES, S., GILBERT, N., et al., “Hydrodynamic simulations of laboratory scale bubble columns fundamental studies of the Eulerian-Eulerian modelling approach”, *Chemical Engineering Science*, v. 54, pp. 5091–5099, 1999.
- [11] EKAMBRA, K., DHOTRE, M. T., JOSHI, J. B., “CFD simulations of bubble column reactors: 1D, 2D and 3D approach”, *Chemical Engineering Science*, v. 60, pp. 6733–6746, 2005.
- [12] KULKARNI, A. A., EKAMBRA, K., JOSHI, J. B., “On the development of flow pattern in a bubble column reactor: Experimental and CFD”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, pp. 1049–1072, 2007.
- [13] BURDICK, E. M., ANDERSON, C. O., DUNCAN, W. E., “Application of submerged combustion to processing of citrus waste products”, *Chemical Engineering Progress*, v. 45, n. 9, pp. 539–544, 1949.
- [14] WATSON, B. R., “The combustion heating of liquids”, *Metals Engineering Quarterly*, v. 6, n. 4, pp. 56–60, 1966.
- [15] SWINDIN, N., “Recent developments in submerged combustion”, *Transactions of the Institute of Chemical Engineers*, v. 27, pp. 209–211, 1949.
- [16] WILLIAMS, R., WALKER, R. B., “Submerged combustion: lower costs, higher quality and faster throughput in acid pickling”, *Iron and Steel Engineer*, v. 74, n. 6, pp. 55–58, 1997.
- [17] WILKE, C. R., CHENG, C. T., LEDESMA, V. L., et al., “Direct contact heat transfer for seawater evaporation”, *Chemical Engineering Progress*, v. 59, n. 12, pp. 69–75, 1963.

- [18] CRONAN, C. S., “Submerged combustion flare anew”, *Chemical Engineering Science*, v. 63, n. 2, pp. 163–167, 1956.
- [19] WEISMAN, W. I., “Submerged combustion equipment”, *Industrial and Engineering Chemistry*, v. 53, n. 9, pp. 708–712, 1961.
- [20] WILLIAMS, A., “Submerged combustion for water plants”, *Mechanical Engineering*, v. 87, n. 7, pp. 34–37, 1965.
- [21] LUEDICKE JR., A. H., HENDRICKSON, B., PIGOTT, G. M., “A method for the concentration of proteinaceous solutions by submerged combustion”, *Journal of Food Science*, v. 44, n. 5, pp. 1469–1473, 1979.
- [22] ZAIDA, A. H., SARMA, S. C., GROVER, P. D., et al., “Milk concentration by direct contact heat exchange”, *Journal of Food Process Engineering*, v. 9, n. 1, pp. 63–79, 1986.
- [23] DURKEE, E. L., LOWE, E., BAKER, K. A., et al., “Field tests of salt recovery system for spent pickle brine”, *Journal of Food Science*, v. 38, n. 3, pp. 507–511, 1973.
- [24] RIBEIRO JR, C. P., LAGE, P. L. C., BORGES, C. P., “A Combined gas stripping vapour permeation process for aroma recovery”, *Journal of Membrana Science*, v. 238, pp. 9–19, 2004.
- [25] JACOBS, H. R., “Direct-contact heat transfer for process technologies”, *Journal of Heat Transfer*, v. 110, n. 4b, pp. 1259–1270, 1988.
- [26] REY, G., “Entrainment from submerged combustion evaporator”, *AIChE Journal*, v. 7, n. 2, pp. 299–302, 1961.
- [27] CLIFT, R., GRACE, J. R., WEBER, M. E., *Bubbles, Drops and Particles*. NewYork, Academic Press, 1978.
- [28] GRASSMAN, P. E., WYSS, E., “Bestimmung von Wärme-und Stoffübergangszahlen zwische Dampfblase und Flüssigkeit”, *Chemie Ingenieur Technik*, v. 34, pp. 755–759, 1962.

- [29] BHAGADE, S. S., GIRADKAR, J. R., MENE, P. S., “Studies on heat transfer during bubble formation”, *Indian Journal of Technology*, v. 11, pp. 281–283, 1973.
- [30] SCHMIT, H., “Bubble formation and heat transfer during dispersion of superheated steam in saturated water-I: bubble size and bubble detachment at single orifices”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 20, n. 6, pp. 647–654, 1977.
- [31] SCHMIT, H., “Bubble formation and heat transfer during dispersion of superheated steam in saturated water-II: heat transfer from superheated steam bubbles to saturated water during bubble formation.” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 20, n. 6, pp. 635–646, 1977.
- [32] CAMPOS, F. B., *Problema de Contorno Livre na Transferência Simultânea de Calor e Massa na Formação e Ascensão de Bolhas Superaquecidas*, Dissertação de M.Sc., Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, RJ, Brasil, 1997.
- [33] IGUCHI, M., MORITA, Z., TOKUNAGA, H., et al., “Heat transfer between bubbles and liquid during cold gas injection”, *ISIJ International*, v. 32, n. 7, pp. 865–872, 1992.
- [34] KOMAROV, S. V., SANO, M., “Bubble behaviour and heat transfer in preheated gas injection into liquid bath”, *ISIJ International*, v. 38, n. 10, pp. 1045–1052, 1998.
- [35] KUMAR, S. B., DEVANATHAN, N., MOSLEMIAN, D., et al., “Effect of scale on liquid recirculation in bubble columns”, *Chemical Engineering Science*, v. 49, pp. 5637–5652, 1994.
- [36] DEVANATHAN, N., DUDUKOVIC, M. P., LAPIN, A., et al., “Chaotic flow in bubble column”, *Chemical Engineering Science*, v. 50, pp. 2661–2667, 1995.

- [37] HEIJNEN, J. J., VAN'T RIET, K., “Mass transfer, mixing and heat transfer phenomena in low viscosity bubble column reactors”, *The Chemical Engineering Journal*, v. 28, n. 2, pp. B21–B42, 1984.
- [38] LIN, T. J., WANG, S. P., “Effects of macroscopic hydrodynamics on heat transfer in bubble columns”, *Chemical Engineering Science*, v. 56, pp. 1143–1149, 2001.
- [39] SHAH, Y. T., KELKAR, B. G., GODBOLE, D. P., et al., “Design parameters estimations for bubble column reactors”, *AIChE Journal*, v. 28, n. 3, pp. 353–379, 1982.
- [40] DECKWER, W. D., A. S., “Improved tools for bubble column reactor design and scale-up”, *Chemical Engineering Science*, v. 54, pp. 4825–4830, 1993.
- [41] LEE, S. Y., TSUI, Y. P., “Succeed at gas/liquid contacting”, *Chemical Engineering Progress*, v. 95, n. 7, pp. 23–49, 1999.
- [42] BI, H. T., GRACE, J. R., “Regime Transitions: analogy between gas-liquid co-current upward flow and gas-solid upward transport”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 22, pp. 1–19, 1996.
- [43] MEWE, D., WIEMANN, D., “Two-phase flow with mass transfer in bubble columns”, *Chemical Engineering Science*, v. 26, pp. 862–868, 2003.
- [44] TORVIK, R., SVENDSEN, H. F., “Modelling of slurry reactors. A fundamental approach”, *Chemical Engineering Science*, v. 45, pp. 2325–2332, 1990.
- [45] SVENDSEN, H. F., JACKOBSEN, H. A., TORVIK, R., “Local flow structure in internal loop and bubble column reactors”, *Chemical Engineering Science*, v. 47, pp. 3297–3304, 1992.
- [46] JACKOBSEN, H. A., SVENDSEN, H. F., HJARBO, K. W., “On the prediction of local flow structures in internal loop and bubble columns reactors using two fluid model”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 17S, pp. S531–S536, 1993.

- [47] GREVSKOTT, S., SANNAES, B. H., DUDUKOVIC, M. P., et al., “Liquid circulation, bubble size distribution and solid movement in two- and three-phase bubble columns”, *Chemical Engineering Science*, v. 51, pp. 1703–1713, 1996.
- [48] JACKOBSEN, H. A., SANNAES, B. H., GREVSKOTT, S., E. A., “Modelling of bubble driven vertical flow”, *Industrial and Engineering Chemical Research*, v. 36, pp. 4052–4074, 1997.
- [49] BECKER, S., SOKOLICHIN, A., EIGENBERGER, G., “Gas-liquid flow in bubble columns and loop reactors: Part II. Comparison of detailed experiments and flow simulations”, *Chemical Engineering Science*, v. 49, n. 24B, pp. 5747–5762, 1994.
- [50] SOKOLICHIN, A., EIGENBERGER, G., “Applicability of the standard k-epsilon turbulence model to the dynamic simulation on bubble columns”, *Chemical Engineering Science*, v. 54, pp. 2273–2284, 1999.
- [51] BORCHERS, O., BUSCH, C., SOKOLICHIN, A., et al., “Applicability of standard k-epsilon turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns. Part II. Comparison of detailed experiments and flow simulations”, *Chemical Engineering Science*, v. 54, n. 24, pp. 5927–5935, 1999.
- [52] PFLEGER, D., BECKER, S., “Modelling and simulation of the dynamic flow behaviour in a bubble column”, *Chemical Engineering Science*, v. 56, pp. 1737–1747, 2001.
- [53] DEEN, N. G., SOLBERG, T., HJERTAGER, B. H., “Numerical Simulation of the Gas-Liquid Flow in a Square Cross-sectioned Bubble Column”. In: *CHISA 14th International Congress of Chemical and Process Engineering*, Praga, Republica Tcheca, 2000.
- [54] DEEN, N. G., SOLBERG, T., HJERTAGER, B. H., “Large eddy simulation of the gas-liquid flow in a square cross-sectioned bubble column”, *Chemical Engineering Science*, v. 56, pp. 6341 – 6349, 2001.

- [55] KRISHNA, R., VAN BATEN, J. M., “Scaling up bubble column reactors with the aid of CFD”, *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, v. 79, n. A3, pp. 283–309, 2001.
- [56] MANDAR, V. T., ROY, T. S., JOSHI, J. B., “The CFD simulation of bubble column- an analysis of interphase forces and turbulence models”, *Chemical Engineering Journal*, v. 139, n. 3, pp. 589–614, 2008.
- [57] SOKOLICHIN, A., EIGENBERGER, G., “Simulation of buoyancy driven bubbly flow: Established simplifications and open question”, *AIChE Journal*, v. 50, n. 1, pp. 24–44, 2004.
- [58] KULKARNI, A. A., *Transporte Phenomena and Nonlinear Dynamics in Multiphase Systemns*, Tese de D.Sc., UICT, Mumbai, India, 2003.
- [59] SANYAL, J., VASQUEZ, S., ROY, S., et al., “Numerical simulation of gas-liquid dynamics in cylindrical bubble columns reactors”, *Chemical Engineering Science*, v. 54, n. 21, pp. 5071–5083, 1999.
- [60] PAN, Y., DUDUKOVIC, M. P., CHANG, M., “Dynamic simulation of bubbly flow in bubble columns”, *Chemical Engineering Science*, v. 54, n. 13-14, pp. 2481–2489, 1999.
- [61] HUA, J., WANG C., H., “Numerical simulation of bubble-driven liquid flows”, *Chemical Engineering Science*, v. 55, n. 19, pp. 4159–4173, 2000.
- [62] SATO, Y., SEKOGUCHI, K., “Liquid velocity distribution in two-phase bubble flow”, *International Journal Multiphase Flow*, v. 2, n. 133, pp. 79–95, 1975.
- [63] SATO, Y., SATADOMI, M., SEKOGUCHI, K., “Momentum and heat transfer in two-phase bubble flow I- Theory”, *International Journal Multiphase Flow*, v. 7, n. 2, pp. 167–177, 1981.
- [64] KATAOKA, I., SERIZAWA, A., “Basic equations of turbulence in gas-liquid two-phase flow”, *International Journal of Multiphase flow*, v. 15, n. 5, pp. 843–855, 1989.

- [65] LOPEZ DE BERTODANO, M., LAHEY, R. T., JONES, O. C., “Development of a k-epsilon model for bubbly two-phase flows”, *Journal of Fluids Engineering*, v. 116, n. 1, pp. 128–134, 1994.
- [66] ELGHOBASHI, S. E., ABOU-ARAB, T. W., “A two-equation turbulence model for two-phase flows”, *Physics of Fluids*, v. 26, n. 4, pp. 931–938, 1983.
- [67] SMAGORINSKY, J., “General circulation experiments with the primitive equations”, *Monthly Weather review*, v. 91, pp. 99–105, 1963.
- [68] RIBEIRO JR, C. P., BORGES, C. P., LAGE, P. L. C., “Modelling of direct contact evaporation using a simultaneous heat and multicomponent mass transfer model for superheated bubbles”, *Chemical Engineering Science*, v. 60, n. 6, pp. 1761–1772, 2005.
- [69] FILLA, M., DAVIDSON, J. F., BATES, J. F., et al., “Gas phase controlled mass transfer from a bubble”, *Trans IChemE*, v. 54, pp. 167–173, 1976.
- [70] DAOUS, M., AL-ZAHRANI, A., “A simple approach to measuring the gas phase heat and mass transfer”, *Chemical Engineering Technology*, v. 29, n. 12, pp. 1438–1443, 2006.
- [71] GRACE, J. R., WAIREGI, T., NGUYEN, T. H., “Shapes and velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids”, *Trans IChemE*, v. 54, pp. 167–173, 1976.
- [72] RIBEIRO JR, C. P., LAGE, P. L. C., “Direct-contact evaporation in the homogeneous and heterogeneous bubbling regimes. Part I: dynamic simulation”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 47, pp. 3841–3854, 2004.
- [73] CALDERBANK, P. H., MOO-YOUNG, M. B., “The continuous phase heat and mass-transfer properties of dispersions”, *Chemical Engineering Science*, v. 16, pp. 39–54, 1961.
- [74] DAVIDSON, J. F., SCHÜLER, B. O. G., “Bubble formation at an orifice in a viscous liquid”, *Transactions of the Institutions of Chemical Engineers*, v. 38, pp. 144–154, 1960.

- [75] PATANKAR, S. V., *Numerical heat transfer and fluid flow*. New York, McGraw-Hill, 1980.
- [76] PETZOLD, L. R., “DASSL code, version 1989, L316”, *Computing and Mathematics Research Division, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore*, 1989.
- [77] LAGE, P. L. C., *Vaporização de gotas multicomponentes em campos convectivos e radiantes*, Tese de D.Sc., Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, RJ, Brasil, 1992.
- [78] REID, R. C., PRAUNSNITZ, J. M., POLING, B. E., *The properties of gases and liquids*. 4th ed. New York, McGraw-Hill, 1987.
- [79] VEERA, V. P., L., K. K., B., J. J., “Gas hold-up profiles in foaming liquids in bubble columns”, *Chemical Engineering Journal*, v. 84, pp. 1304–1328, 2001.
- [80] VEERA, V. P., “Gamma ray tomography design for the measurement of hold-up profiles in two-phase bubble columns”, *Chemical Engineering Journal*, v. 84, pp. 247–256, 2001.
- [81] SILA, M. O., SILVA, M. V. L. R., LAGE, P. L. C., “On the usage of conductivity sensors to measure gas phase fraction in bubble columns”. In: *available on CD*, Florianópolis, Brasil, 2007.
- [82] AKHTAR, A. M., TAD, M. O., PAREEK, V. K., “Two-fluid Eulerian of bubble column reactors with distributors”, *Journal of Chemical Engineering of Japan*, v. 39, n. 8, pp. 831–841, 2006.
- [83] AKHTAR, A. M., TAD, M. O., PAREEK, V. K., “Simulations of bubble column reactors using volume of fluid approach: effect of air distributor”, *Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 85, n. 3, pp. 290–301, 2007.
- [84] VERSCHOORS, H., “Some aspects of the motion of swarm of gas bubbles rising through liquid column”, *Transactions of the International Institute of Chemical Engineer*, v. 28, pp. 52–57, 1950.

- [85] NICKLIN, D. J., “Two-phase bubble”, *Chemical Engineering Science*, v. 17, n. 9, pp. 693–702, 1962.
- [86] COPPOCK, P. D., MEIKLEJHON, G. T., “The behaviour of gas bubbles in relation to mass transfer”, *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, v. 29, pp. 75–86, 1951.
- [87] YIP, F. C., VENART, J. E. S., GOVIER, G. W., “The motion of small air bubbles in stagnant and flowing water”, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 48, n. 2, pp. 229–235, 1970.
- [88] HILLS, J. H., DARTON, R. C., “The rising velocity of a large bubble in a bubble swarm”, *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, v. 54, n. 4, pp. 258–264, 1976.
- [89] KRISHNA, R., URSEANU, M. I., VAN BATEN, J., M., “Rise velocity of a swarm of large bubbles in liquids”, *Chemical Engineering Science*, v. 26, n. 6, pp. 781–790, 1999.