



AVALIAÇÃO DA MODELAGEM DO TRANSPORTE DE ÁREA INTERFACIAL EM ESCOAMENTOS DISPERSOS USANDO BALANÇO POPULACIONAL

Lucilla Coelho de Almeida

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
Setembro de 2012

AVALIAÇÃO DA MODELAGEM DO TRANSPORTE DE ÁREA INTERFACIAL
EM ESCOAMENTOS DISPERSOS USANDO BALANÇO POPULACIONAL

Lucilla Coelho de Almeida

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.

Examinada por:

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

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Prof. Su Jian, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
SETEMBRO DE 2012

Almeida, Lucilla Coelho de

Avaliação da modelagem do transporte de área interfacial em escoamentos dispersos usando balanço populacional/Lucilla Coelho de Almeida. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2012.

XVI, 134 p.: il.; 29,7cm.

Orientador: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Química, 2012.

Referências Bibliográficas: p. 122 – 129.

1. Escoamentos polidispersos. 2. Balanço populacional. 3. Área interfacial. I. Laranjeira da Cunha Lage, Paulo. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

À minha família.

Agradecimentos

Em primeiro lugar, agradeço ao professor e orientador Paulo Lage, pelo enorme conhecimento transmitido e pela paciência e dedicação com que me orientou ao longo destes três anos.

Aos colegas do LTFD, em especial ao Antônio Samel, Fábio Santos e Luiz Fernando, pelas construtivas conversas que tivemos ao longo de muitos encontros às sextas-feiras.

Aos colegas do LASME, Camila, Lívia e Professor Su, pelo apoio, acolhimento e divertidos almoços.

À ESSS, pela confiança em mim depositada. Aos colegas da ESSS, em especial à equipe de EOS no Cenpes, pelo suporte constante. À Clarissa e ao João Aguirre, pela torcida e por terem a incrível capacidade de transformar momentos difíceis em motivos para boas risadas.

Aos meus tios-padrinhos-pais, Antônio e Maria José, minha avó Cleusa e meus irmãos Rodrigo e Diego, por todo carinho, compreensão e apoio incondicional. Tenho muita sorte de fazer parte desta família. Ao meu avô Milton e tia Magdalena, por toda ajuda que me deram. Aos meus sogros, Ana Lúcia e Rafael, e cunhado Leonardo, pelos valiosos conselhos e construtivas conversas na cozinha.

Aos meus pais, Elair e Milton, in memoriam, por terem, ao longo dos dezoito anos que estiveram comigo, feito o possível e impossível por mim.

Por fim, ao meu marido Rafael, por estar sempre ao meu lado, me incentivando, compartilhando angústias e dúvidas. Sem você, eu nada teria conseguido.

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

AVALIAÇÃO DA MODELAGEM DO TRANSPORTE DE ÁREA INTERFACIAL EM ESCOAMENTOS DISPERSOS USANDO BALANÇO POPULACIONAL

Lucilla Coelho de Almeida

Setembro/2012

Orientador: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Programa: Engenharia Química

Neste trabalho avaliou-se o modelo de transporte de área interfacial a fim de investigar a influência das simplificações e hipóteses adotadas no seu desenvolvimento na preditibilidade do modelo. Para tal, os resultados de densidade de área interfacial e fração de gás obtidos com a solução numérica de um problema unidimensional utilizando a equação de transporte de área interfacial com um grupo de bolhas foram comparados com dados experimentais existentes na literatura e com resultados obtidos pelo modelo de balanço populacional utilizando os mesmos modelos de quebra e coalescência. O modelo de balanço populacional foi resolvido pelo método DQMOM. O modelo de transporte de área interfacial mostrou-se muito sensível às suas hipóteses simplificadoras. Os resultados de variação de área interfacial obtidos com o modelo de transporte de área interfacial ficaram na faixa compreendida entre 50% a 200% dos valores obtidos com o modelo de balanço populacional. Assim, não é justificável o seu uso para a modelagem de escoamentos dispersos no lugar do modelo de balanço populacional, pois a redução de complexidade não compensa os erros introduzidos.

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

INTERFACIAL AREA TRANSPORT MODELING EVALUATION FOR
DISPERSED FLOWS USING POPULATION BALANCE

Lucilla Coelho de Almeida

September/2012

Advisor: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Department: Chemical Engineering

In this study the interfacial area transport model was evaluated in order to investigate the influence of the simplifications and assumptions adopted during its development in the predictability of the model. The interfacial area density and gas fraction obtained for an one-dimensional problem using the one-group interfacial area transport equation were compared to experimental data obtained in the literature and to results obtained by the population balance model using the same breakage and coalescence models. The population balance model was solved by the DQMOM method. The interfacial area transport model showed to be very sensitive to their simplifying assumptions. The results of interfacial area variation obtained from the interfacial area model were in the range of 50% to 200% of the values obtained with the population balance model. It is therefore not justified its use for modeling dispersed flows in place of the population balance model, because the complexity reduction does not compensate for the errors introduced.

Sumário

Lista de Símbolos e Abreviaturas	a
Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	x
1 Introdução	1
1.1 Contexto e Motivação	1
1.2 Objetivos	2
1.3 Organização do texto	3
2 Modelagem de escoamentos multifásicos polidispersos	5
2.1 Escoamentos multifásicos	5
2.2 Modelagem de escoamentos multifásicos polidispersos	6
2.3 Balanço Populacional	7
2.4 Formulação da equação de Balanço Populacional	9
2.4.1 Função de distribuição da densidade numérica de partículas	9
2.4.2 Taxa de variação do vetor de estado das partículas	10
2.4.3 O teorema de transporte de Reynolds generalizado	10
2.4.4 A equação de balanço populacional	11
2.5 Modelagem dos processos de quebra e coalescência	13
2.5.1 Modelagem dos termos referentes aos processos de quebra	13
2.5.2 Modelagem dos termos referentes às coalescências	14
2.5.3 Simplificações adotadas	15
2.6 Solução da equação de balanço populacional	17
2.6.1 Métodos numéricos para solução da equação de balanço populacional	17
2.6.2 O Método DQMOM	21
2.6.3 O algoritmo PD	28
3 O Modelo de Transporte de Área Interfacial	30
3.1 Desenvolvimento da equação de transporte de área interfacial	30

3.1.1	Equação de transporte com um grupo de bolhas	33
3.1.2	Equação de transporte com dois grupos de bolhas	36
3.2	Formulação da equação de transporte da concentração de área interfacial	39
3.2.1	A equação de transporte de número	39
3.2.2	Equação de transporte para o volume	40
3.2.3	Equação de conservação de massa	41
3.2.4	Equação de transporte de área interfacial	44
3.2.5	Equação de transporte de área interfacial com 1 grupo	49
4	Modelagem dos mecanismos de interação entre bolhas	51
4.1	Mecanismos de quebra e coalescência	51
4.1.1	Modelagem da quebra	51
4.1.2	Modelos de coalescência	54
4.2	Mecanismos adotados neste trabalho	56
4.2.1	Quebras induzidas pelo impacto de vórtices turbulentos	57
4.2.2	Coalescência devido à colisões randômicas	59
4.2.3	Coalescência devido à captura de bolhas na esteira de outras	62
5	Implementação dos modelos	65
5.1	Modelagem do escoamento	65
5.1.1	Relações básicas	65
5.1.2	O procedimento de média	65
5.1.3	A equação de conservação de massa da fase líquida	66
5.1.4	A equação de conservação de massa da fase gasosa	67
5.1.5	A equação de <i>drift-flux</i>	68
5.1.6	Equação de transporte de área interfacial	69
5.1.7	Modelagem da pressão	70
5.2	Modelagem da turbulência	70
5.3	Estimativa do parâmetro de distribuição do modelo de <i>drift-flux</i>	71
5.4	Implementação do modelo de transporte de área interfacial unidimensional	72
5.4.1	Conjunto de equações resolvidas no modelo de transporte de área interfacial	72
5.4.2	Considerações preliminares	73
5.4.3	Tratamento dos termos referentes a quebra e coalescência	73
5.4.4	Equação final de transporte de área interfacial	75
5.5	Implementação do modelo de balanço populacional	75
5.5.1	Cálculo da fração de vazio	75
5.5.2	Cálculo da concentração de área interfacial	76

5.5.3	Conjunto de equações resolvidas no modelo de balanço populacional	76
5.5.4	Solução da equação de balanço populacional pelo método DQ-MOM	76
5.5.5	Adimensionalização das equações	77
5.5.6	A distribuição inicial das bolhas	78
5.5.7	Inicialização dos pesos e abscissas do método DQMOM	79
5.6	Constantes dos modelos de quebra e coalescência	80
5.7	Procedimento numérico	81
6	Resultados	83
6.1	Casos testes	83
6.1.1	Condições avaliadas	83
6.1.2	A constante C_0	85
6.1.3	A razão r_0	85
6.2	Convergência do DQMOM	90
6.3	Evolução dos pesos e abscissas	94
6.4	Avaliação dos mecanismos de interação entre partículas	103
6.5	Comparação entre os modelos	110
6.6	Análise de sensibilidade no modelo de transporte de área interfacial	113
6.7	Sumário dos resultados	117
7	Conclusões e sugestões	120
7.1	Conclusões	120
7.2	Sugestões para trabalhos futuros	121
	Referências Bibliográficas	122
A	Cálculo da distribuição inicial das bolhas	130
A.1	A distribuição Gama	130
A.2	Cálculo dos parâmetros da distribuição Gama inicial	130
B	Cálculo dos pesos e abscissas da distribuição inicial	132
B.1	Cálculo dos pesos e abscissas de uma distribuição adimensionalizada $g(y)$	132
B.2	Pesos e abscissas da distribuição inicial das bolhas, $f(V)$, a partir dos pesos e abscissas da distribuição $g(y)$	133

Lista de Figuras

2.1	Representação do processo de coalescência representando a drenagem do filme entre partículas (a) resultando na coalescência ou (b) na separação das partículas - adaptado de SILVA [6]	14
2.2	Transformação de coordenadas utilizada no termo de nascimento por coalescência	26
2.3	Transformação de coordenadas utilizada no termo de nascimento por quebra	27
3.1	Mecanismos de interação entre dois grupos de bolhas - adaptado de ISHII e HIBIKI [3]	32
3.2	Possíveis interações entre dois grupos de bolhas - adaptado de HIBIKI e ISHII [56]	37
3.3	Ilustração do processo de quebra e coalescência - adaptado de (KIM <i>et al.</i> [61])	47
4.1	Classificação dos modelos de quebra - adaptado de LIAO e LUCAS [62]	53
4.2	Classificação dos modelos de coalescência - adaptado de LIAO e LUCAS [69]	56
4.3	Esquema de duas bolhas esféricas se aproximando	60
5.1	Volume de controle	66
5.2	Modelo de <i>drift-flux</i> vs. dados experimentais para diferentes abordagens de cálculo da constante de distribuição, C_0 (reproduzido de KIM <i>et al.</i> [49])	72
6.1	Condições experimentais avaliadas - transição de regime por MISHIMA e ISHII [85]	84
6.2	Distribuição Gama adimensionalizada - Caso $A - 1$	87
6.3	Distribuição Gama adimensionalizada - Caso $A - 2$	87
6.4	Distribuição Gama adimensionalizada - Caso $A - 3$	87
6.5	Distribuição Gama adimensionalizada - Caso $A - 4$	88
6.6	Distribuição Gama adimensionalizada - Caso $A - 5$	88

6.7	Distribuição Gama adimensionalizada - Caso $B - 1$	88
6.8	Distribuição Gama adimensionalizada - Caso $B - 2$	89
6.9	Distribuição Gama adimensionalizada - Caso $B - 3$	89
6.10	Distribuição Gama adimensionalizada - Caso $B - 4$	89
6.11	Distribuição Gama adimensionalizada - Caso $B - 5$	90
6.12	Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concen- tração de área interfacial para o caso $A - 1$ com $r_0 = 0,1$	91
6.13	Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concen- tração de área interfacial para o caso $A - 1$ com $r_0 = 0,5$	91
6.14	Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concen- tração de área interfacial para o caso $B - 1$ com $r_0 = 0,1$	92
6.15	Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concen- tração de área interfacial para o caso $B - 1$ com $r_0 = 0,5$	92
6.16	Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concen- tração de área interfacial para o caso $A - 5$ com $r_0 = 0,1$	92
6.17	Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concen- tração de área interfacial para o caso $A - 5$ com $r_0 = 0,5$	93
6.18	Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concen- tração de área interfacial para o caso $B - 5$ com $r_0 = 0,1$	93
6.19	Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concen- tração de área interfacial para o caso $B - 5$ com $r_0 = 0,5$	93
6.20	Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso $A - 1$ com $r_0 = 0,1$	95
6.21	Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso $A - 1$ com $r_0 = 0,5$	96
6.22	Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso $B - 1$ com $r_0 = 0,1$	97
6.23	Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso $B - 1$ com $r_0 = 0,5$	98
6.24	Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso $A - 5$ com $r_0 = 0,1$	99
6.25	Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso $A - 5$ com $r_0 = 0,5$	100
6.26	Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso $B - 5$ com $r_0 = 0,1$	101
6.27	Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso $B - 5$ com $r_0 = 0,5$	102
6.28	Influência dos mecanismos na variação da concentração de área inter- facial - Caso $A - 1$ - (a) IAM (b) DQMOM com $r_0 = 0,1$	105

6.29	Influência dos mecanismos na variação da concentração de área interfacial - Caso $A - 2$ - (a) IAM (b) DQMOM com $r_0 = 0, 1$	106
6.30	Influência dos mecanismos na variação da concentração de área interfacial - Caso $A - 3$ - (a) IAM (b) DQMOM com $r_0 = 0, 1$	107
6.31	Influência dos mecanismos na variação da concentração de área interfacial - Caso $A - 4$ - (a) IAM (b) DQMOM com $r_0 = 0, 1$	108
6.32	Influência dos mecanismos na variação da concentração de área interfacial - Caso $A - 5$ - (a) IAM (b) DQMOM com $r_0 = 0, 1$	109
6.33	Comparação entre os modelos para o caso $A - 1$	111
6.34	Comparação entre os modelos para o caso $A - 2$	111
6.35	Comparação entre os modelos para o caso $A - 3$	112
6.36	Comparação entre os modelos para o caso $A - 4$	112
6.37	Comparação entre os modelos para o caso $A - 5$	113
6.38	Análise de sensibilidade do IAM em relação a variação de área nos processos de quebra e coalescência - Caso $A - 1$	115
6.39	Análise de sensibilidade do IAM em relação a variação de área nos processos de quebra e coalescência - Caso $A - 2$	115
6.40	Análise de sensibilidade do IAM em relação a variação de área nos processos de quebra e coalescência - Caso $A - 3$	116
6.41	Análise de sensibilidade do IAM em relação a variação de área nos processos de quebra e coalescência - Caso $A - 4$	116
6.42	Análise de sensibilidade do IAM em relação a variação de área nos processos de quebra e coalescência - Caso $A - 5$	117

Lista de Tabelas

6.1	Casos analisados	85
6.2	Parâmetros da distribuição Gama inicial para cada caso analisado . .	86
6.3	Comparação entre a variação da densidade de área interfacial obtida para cada modelo nos casos estudados	119

Lista de Símbolos e Abreviaturas

a	frequência de coalescência
A	área frontal da bolha líder
a_{CT}	frequência de coalescência por colisões randômicas
a_{CW}	frequência de coalescência por capturas nas esteiras
A_I	Área da partícula
a_I	concentração de área interfacial
B	termo fonte da equação de balanço populacional referente ao nascimento de partículas
b	frequência de quebra
C_0	parâmetro de distribuição do modelo de <i>drift-flux</i>
C_{CT}	constante da frequência de coalescência por colisões randômica
C_{CW}	constante da frequência de coalescência por capturas nas esteiras
C_D	coeficiente de arraste
C_Q	constante da frequência de quebra
\mathbf{d}	vetor de variáveis internas
D	termo fonte da equação de balanço populacional referente à morte de partículas
D_b	diâmetro da bolha
D_{bc}	diâmetro crítico da bolha gerada na nucleação
D_{crit}	diâmetro crítico que limita os dois grupos de bolhas
D_d	coeficiente de difusão anisotrópica no espaço interno

D_e	diâmetro equivalente ao volume
D_{efet}	diâmetro efetivo de uma bolha
$\dot{\mathbf{d}}$	taxa de variação das variáveis internas
D_{SM}	diâmetro médio de Sauter
\mathbf{D}_x	coeficiente de difusão anisotrópica no espaço externo
f	função de densidade numérica das partículas
f_{CT}	frequência de colisão randômica
\mathbf{F}_σ	Força de tensão superficial
\mathbf{F}_t	Força de inércia das bolhas movidas devido à vórtices turbulentos
G	termo fonte da equação de balanço populacional referente à taxa de variação das propriedades das partículas
\mathbf{g}	gravidade
H	termo fonte da equação de balanço populacional referente à taxa de quebras e coalescências
h	taxa líquida de nascimento de partículas
J	termo fonte da equação de balanço populacional referente à taxa de nucleação de partículas
j_g	velocidade superficial do gás
j_l	velocidade superficial do líquido
L_{CT}	distância média para uma colisão randômica entre duas bolhas
L_{CT}	distância média viajada para uma colisão randômica acontecer
L_{W1}	comprimento da esteira de uma bolha de diâmetro D_1
m	massa da partícula com volume V
\bar{M}	massa molecular do gás
n	densidade numérica de partículas
N_T	número total de partículas
N_{W1}	número de bolhas de diâmetro D_2 da esteira de uma bolha de diâmetro D_1

P	função densidade de probabilidade na quebra de partículas
p	pressão
R	constante universal dos gases
r_0	razão entre o desvio padrão e a média da distribuição
R_{CW}	taxa de coalescência por unidade de volume da mistura pela captura de bolhas em esteiras de outras bolhas
\Re	domínio Real
Re	número de Reynolds
R_j	taxa líquida de nascimento de partículas por interações entre partículas
R_{ph}	taxa líquida de nascimento de partículas por mudanças de fase
T	temperatura
t	tempo
t_b	tempo característico da quebra
t_{CT}	tempo médio da coalescência por colisões randômicas
t_W	tempo médio para que as bolhas de diâmetro D_2 levam para colidir com a sua bolha predecessora de diâmetro D_1
$\bar{\mathbf{u}}_{rW}$	velocidade relativa média entre a boha líder e a bolha em sua esteira
\mathbf{u}_r	velocidade relativa entre a boha líder e a fase líquida
\mathbf{u}_{rW}	velocidade relativa entre a boha líder e a bolha em sua esteira
\mathbf{u}_t	flutuação turbulenta de velocidade
V	volume da partícula
\mathbf{v}_{α_i}	velocidade característica das partículas de volume V_α
V_d	velocidade de deslizamento entre fases
\mathbf{v}_g	velocidade do gás
\mathbf{v}_g	velocidade média volumétrica da fase dispersa
\mathbf{v}_I	velocidade média das partículas ponderada pela área interfacial

\mathbf{v}_l	velocidade do líquido
\mathbf{v}_m	velocidade da mistura
$\mathbf{v}_{m,g}$	velocidade média das partículas ponderada pela massa
\mathbf{v}_{pm}	velocidade média das partículas ponderada pelo número de partículas
V_{W1}	volume da esteira de uma bolha de diâmetro D_1
w_α	peso α no domínio das variáveis internas
We	número de Weber
We_{crit}	número de Weber crítico
\mathbf{x}	vetor de variáveis externas
$\langle \xi \rangle$	média na área da grandeza ξ
$\langle \langle \xi \rangle \rangle$	média na área ponderada pela fração de gás da grandeza ξ
$\bar{\xi}$	média volumétrica grandeza ξ
$\dot{\mathbf{x}}$	taxa de variação das variáveis externas
\mathbf{y}	vetor de propriedades da fase contínua

Letras gregas

η	fração de vórtices com energia suficiente para quebrar as bolhas
ρ_g	fração de vazío da fase gasosa
α_l	fração de gás de líquido
α_{max}	fração de gás máxima
β	razão entre comprimento e a largura da esteira
χ	variância de uma distribuição
δ	número de pares idênticos na coalescência
η_{ph}	taxa de volume gerado por nucleação por unidade de volume da mistura
Γ	função Gama
Γ_g	taxa total de ganho de massa da fase gasosa por unidade de volume da mistura

μ_k	momento k da distribuição de partículas
$\Omega_{\mathbf{d}}$	domínio das variáveis internas
$\Omega_{\mathbf{x}}$	domínio das variáveis externas
ϕ_B	taxa de variação da área interfacial devido à quebras
ϕ_{CT}	taxa de variação da área interfacial devido à coalescências induzidas por colisões randômicas
ϕ_{CW}	taxa de variação da área interfacial devido à coalescências provocadas pela captura de bolhas em esteiras de outras bolhas
ϕ_j	taxa líquida de variação de área interfacial devido à quebras e coalescências
ϕ_{ph}	taxa líquida de variação de área interfacial devido à nucleações
ψ	propriedade extensiva qualquer
Ψ	fator de forma das partículas
ρ_g	massa específica da fase gasosa
ρ_l	massa específica da fase líquida
ρ_m	massa específica da mistura
σ	tensão superficial
ϑ	número médio de partículas gerado na quebra
ϑ	number of daughters upon breakage
ξ_α	abscissa α no domínio das variáveis internas
ζ_α	abscissa ponderada α no domínio das variáveis internas

Siglas

BDF	<i>Backward-Differentiation-Formula</i>
DASSLC	<i>Differential-Algebraic System Solver in C</i>
DQMOM	<i>Direct Quadrature Method of Moments</i>
PD	algoritmo Produto-Diferença
QMOM	<i>Quadrature Method of Moments</i>

Subscritos

0 referente ao início

DW referente à quebras

DW referente à coalescências colisões randômicas turbulentas

DW referente à coalescências por capturas nas esteiras

Sobrescritos

b referente à quebras

c referente à coalescências

Capítulo 1

Introdução

1.1 Contexto e Motivação

Escoamentos polidispersos estão presentes nas mais variadas áreas industriais. O projeto, predição do envelope operacional e controle desses sistemas dependem da disponibilidade de modelos realísticos e acurados para escoamentos com mais de uma fase. As dificuldades na modelagem de escoamentos bifásicos advêm da existência da interface entre as fases, constantemente em movimento e deformável. O modelo de dois fluidos, formulado por ISHII [1], é considerado por HIBIKI e ISHII [2] o modelo macroscópico mais acurado para lidar com escoamentos bifásicos.

No modelo de dois fluidos, cada fase é modelada usando um conjunto de equações de conservação de massa, *momentum* e energia. Entretanto, como as fases não são independentes, o transporte de massa, *momentum* e energia através da interface é considerado através de termos fonte para cada par de fases. Esses termos de transporte interfacial são proporcionais à sua força motriz e à densidade de área interfacial disponível para as trocas, definida como a área de interface por unidade de volume da mistura (ISHII e HIBIKI [3]). Fica evidente, então, a importância da modelagem da concentração de área interfacial para correta predição do comportamento de escoamentos bifásicos.

Como a área interfacial disponível para transferências depende da estrutura interna do escoamento bifásico, esta varia dramaticamente conforme o regime de escoamento. Convencionalmente, a concentração de área interfacial é obtida através de correlações empíricas para cada regime de escoamento. Apesar de serem bastante úteis para aplicação no modelo de dois fluidos, a dependência dessas correlações no regime de escoamento torna este método bastante impreciso. ISHII *et al.* [4] listaram as principais limitações desta abordagem:

1. Os critérios de transição entre regimes são relações algébricas concebidas para escoamentos estacionários completamente desenvolvidos, de forma a não refletirem o caráter dinâmico das alterações na estrutura interfacial. Assim, efeitos de entrada e de desenvolvimento do escoamento não são levados em consideração de forma adequada.
2. Os critérios para determinação do regime de escoamento, de transição entre regimes e as correlações para determinação da concentração de área interfacial para cada regime são válidos, em geral, para faixas de operação e geometrias próximas às empregadas em suas obtenções.
3. Trata-se de um método de duas etapas - determinação do regime de escoamento e especificação da concentração de área interfacial para dado regime. Assim, os erros combinados de cada etapa podem ser bastante significativos.

Como a concentração de área interfacial está fortemente ligada à densidade numérica de partículas e varia com as interações entre partículas, a abordagem de balanço populacional é uma escolha promissora para a modelagem da área interfacial em escoamentos polidispersos para o acoplamento com o modelo de dois fluidos. Entretanto, em aplicações industriais, onde o interesse está no comportamento médio do sistema, a abordagem de acompanhar a distribuição numérica de partículas pode ser muito detalhada e dispendiosa.

KOCAMUSTAFAOGULLARI e ISHII [5] sugeriram que a concentração de área interfacial pudesse ser descrita por uma equação de transporte, baseada na equação integro-diferencial da função de distribuição de partículas, sendo até mesmo capaz de modelar o comportamento do escoamento bifásico através das transições de regime. Durante o desenvolvimento desta equação de transporte de área interfacial, diversas hipóteses e simplificações foram adotadas. Como o método de balanço populacional pode ser muito detalhado e dispendioso para algumas aplicações, o método da equação de transporte de área interfacial vem ganhando popularidade.

1.2 Objetivos

Como o modelo de transporte de área interfacial é atrativo devido ao seu baixo custo computacional, o principal objetivo deste trabalho é avaliar a influência das hipóteses e simplificações adotadas no desenvolvimento da equação de transporte de área interfacial.

Para isto, os resultados obtidos com a solução numérica de um caso teste unidimensional utilizando a equação de transporte de área interfacial foram comparados com dados experimentais existentes na literatura e com resultados obtidos resolvendo-se a equação de balanço populacional utilizando os mesmos modelos para a quebra e a coalescência das partículas.

Dessa forma, foi investigado se as hipóteses e simplificações adotadas na dedução da equação de transporte de área interfacial permitem que a mesma continue representando os fenômenos de interação entre as fases corretamente ou se somente é capaz de reproduzir os dados experimentais devido ao ajuste de parâmetros do modelo.

1.3 Organização do texto

No Capítulo 2 é apresentada uma breve revisão de balanço populacional, com a dedução da equação de balanço populacional para qualquer problema genérico envolvendo partículas. A forma geral de tratamento dos termos referentes a quebra e coalescência é apresentada em seguida. Algumas simplificações e hipóteses são introduzidas para que a equação de balanço populacional seja adequada para o problema em questão. Na segunda parte deste capítulo, uma pequena revisão dos métodos numéricos existentes para solução da equação de balanço populacional é apresentada, enquanto que o método escolhido para a solução da equação de balanço populacional neste trabalho é descrito e sua formulação é apresentada de forma detalhada, juntamente com o algoritmo utilizado para sua inicialização.

No Capítulo 3, uma revisão sobre o modelo de transporte de área interfacial é apresentada, descrevendo sua evolução desde a sua proposição. Em seguida, a formulação da equação de transporte de área interfacial é apresentada de forma detalhada, apontando cada uma das simplificações e hipóteses adotadas. Na última parte deste capítulo, a equação de transporte de área interfacial para um grupo de bolhas, que foi utilizada na modelagem do problema selecionado, é fornecida.

O Capítulo 4 abrange a modelagem das interações entre as partículas. No início do capítulo, uma revisão resumida dos modelos de quebra e coalescência de partículas fluidas é fornecida. Em seguida, os modelos de quebra e coalescência que serão utilizados para a modelagem do problema selecionado e comparação entre os modelos de área interfacial e balanço populacional são apresentados de forma detalhada.

O Capítulo 5 apresenta a implementação de ambos modelos. As equações utilizadas para modelar o escoamento são apresentadas nas suas formas unidimensionais e as demais relações utilizadas para a obtenção dos parâmetros necessários à simulação são fornecidas. As técnicas numéricas utilizadas para a simulação do caso teste são detalhadas neste capítulo.

No Capítulo 6 são apresentados e discutidos os resultados obtidos utilizando cada um dos métodos para a solução de um caso teste. Os resultados são comparados entre si e com dados obtidos da literatura.

As conclusões do trabalho e as sugestões para trabalhos futuros são apresentadas no Capítulo 7.

Capítulo 2

Modelagem de escoamentos multifásicos polidispersos

2.1 Escoamentos multifásicos

Escoamentos multifásicos são encontrados nas mais diversas áreas da engenharia. Sua utilização se estende desde a indústria de petróleo à farmacêutica. Sendo assim, seu entedimento e modelagem é de extrema importância.

O termo escoamento multifásico compreende os escoamentos em que mais de uma fase estão presentes. Os escoamentos multifásicos são classificados de acordo com a distribuição espaço-temporal das fases, definindo padrões (ou regimes) de escoamento. Para escoamentos bifásicos, pode-se classificar os escoamentos em quatro regimes distintos:

- Disperso, onde uma fase encontra-se dispersa na outra em forma de pequenas bolhas ou gotas. Estas gotas e bolhas podem ser monodispersas (com propriedades aproximadamente iguais entre si) ou polidispersas.
- Estratificado, onde duas fases encontram-se separadas por uma interface bem definida.
- Anular, onde uma camada de fluido composta por uma das fases se forma nas paredes internas de um duto e a outra fase escoar pelo centro.
- Intermitente, que engloba todos os escoamentos não classificados nas categorias anteriores.

Nesta dissertação, somente o escoamento disperso gás-líquido será considerado.

2.2 Modelagem de escoamentos multifásicos polidispersos

Escoamentos multifásicos polidispersos são escoamentos em que uma das fases encontra-se dispersa na outra em forma de gotas ou bolhas, que apresentam características diferentes umas das outras, que são caracterizadas por diferentes valores das variáveis internas, por exemplo, sua massa, volume, idade, etc.

Para a modelagem de escoamentos multifásicos, o uso de um único balanço de massa e de quantidade de movimento não são suficientes para representar todas as fases envolvidas (SILVA [6]). Em todas as abordagens existentes para a simulação de escoamentos polidispersos, as equações para a fase contínua devem ser resolvidas. Para o tratamento da fase dispersa, diversas abordagens existem.

Duas abordagens se destacam na literatura. Na abordagem Lagrangeana, os elementos da fase dispersa tem suas trajetórias acompanhadas. Na abordagem Euleriana, a fase dispersa é tratada de forma similar à fase contínua, de forma que as duas fases são vistas como interpenetrantes.

O modelo Euleriano utiliza equações de conservação médias para descrever as propriedades médias de ambas as fases, sendo obtidas pela promediação das equações de conservação usando médias volumétricas temporal ou amostral SILVA [6].

A formulação Euleriana mais geral é o modelo de dois fluidos, no qual cada fase é considerada separadamente e o modelo é formulado em termos de dois conjuntos de equações de conservação de massa, *momentum* e energia, um para cada fase. Porém, a introdução de duas equações de *momentum* em uma formulação leva a dificuldades consideráveis devido a complicações matemáticas e incertezas na especificação dos termos de interação entre fases (ISHII [1], RAMKRISHNA [7]).

O modelo de *drift-flux* é uma simplificação do modelo de dois fluidos e sua utilização pode reduzir significativamente as dificuldades de se especificar as interações entre as fases. A formulação do modelo de *drift-flux* é baseada em equações de balanço para a mistura e não requer a solução das equações da continuidade e de quantidade de movimento de cada fase. Estas simplificações, por outro lado, permitem a sua vasta aplicação na engenharia, já que em geral as informações desejadas são da mistura como um todo, e não das suas fases individuais.

O aspecto mais importante do modelo de *drift-flux* é sua redução significativa do número de equações necessárias quando comparado ao modelo de dois fluidos. O modelo de *drift-flux* é expresso em termos de três equações: a equação de continuidade da mistura e as equações de conservação de *momentum*.

Como o modelo de *drift-flux* tem uma equação a menos que o modelo de dois fluidos devido à eliminação de uma equação de conservação de *momentum* em relação ao conjunto original, o movimento relativo entre as fases deve ser suplementado por uma equação constitutiva adicional.

2.3 Balanço Populacional

A análise de sistemas particulados tem o objetivo de sintetizar o comportamento de uma população de partículas, cuja presença pode afetar o comportamento do sistema em estudo. Tais partículas podem ser sólidos, gotas, bolhas ou até mesmo células e se distinguem umas das outras por um número de variáveis, que podem ser contínuas ou discretas.

O balanço populacional tem sua importância pelo fato do comportamento do sistema ser dependente do número e natureza das partículas estudadas. Ao mesmo tempo, como o comportamento das partículas pode depender de variáveis associadas ao meio em que estão presentes, é comum ser necessário o acoplamento entre a equação de balanço populacional e as equações que governam as variáveis de importância do meio.

Na formulação do balanço populacional assume-se que existe uma densidade numérica de partículas definida em todos pontos do espaço de estado das partículas, que compreende suas coordenadas externas (responsáveis pela localização das partículas no espaço físico) e suas coordenadas internas (responsáveis por diferenciar as partículas quanto às suas propriedades, como tamanho, massa, forma, idade, etc). O número de partículas em cada região do espaço de estados é obtido pela integração da densidade numérica sobre a região desejada.

O estado de uma partícula pode mudar de forma determinística, caracterizada por um campo de velocidades no espaço de estado, ou de forma randômica, cuja taxa de variação pode ser caracterizada por uma velocidade ou tensor de difusão (RAMKRISHNA e MAHONEY [8]). Caso só haja movimento das partículas através do espaço de estado, o número total de partículas no sistema deve se manter constante.

Por outro lado, existem maneiras pelas quais pode-se mudar o número de partículas de um dado estado. O nascimento de partículas pode ocorrer devido a processos de quebra, agregação e nucleação. Processos de quebra e agregação também contribuem para a morte de partículas de um dado estado, já que partículas que quebram ou coalescem com outras partículas deixam de existir após tais processos. Dessa forma, a modelagem fenomenológica desses processos é essencial para a aplicação do balanço populacional.

A equação de balanço populacional é então uma representação do balanço numérico de partículas em um estado particular, sendo em geral acoplada com as equações de conservação para a fase contínua. A equação de balanço populacional leva em conta as várias formas com que as partículas de certo estado podem se formar ou desaparecer do sistema (RAMKRISHNA [7]).

A aplicação de balanço populacional é bastante antiga. A equação de Boltzmann, centenária, pode ser considerada uma aplicação de uma equação de balanço populacional de moléculas em um espaço de estado cujas coordenadas são a posição e a velocidade das partículas. Entretanto, a generalização do balanço populacional para incluir diversas coordenadas internas, conseqüentemente diversificando a aplicação de balanço populacional, é relativamente recente (RAMKRISHNA e MAHONEY [8]).

Os trabalhos de HULBURT e KATZ [9], RANDOLPH e LARSON [10], FREDRICKSON *et al.* [11], RAMKRISHNA e BORWANKER [12] e RAMKRISHNA [13] são exemplos de aplicações de balanço populacional com variadas coordenadas internas e aplicações. Para a formulação mais geral, recomenda-se o livro de RAMKRISHNA [7], que apresenta uma descrição matemática formal e generalizada do assunto, possibilitando a fácil compreensão do tema e estendendo a modelagem de balanço populacional para os mais vastos processos que envolvem a interação entre partículas.

A aplicação de balanço populacional tem tido um interesse crescente de cientistas e engenheiros das mais diversas áreas. Aplicações cobrindo uma ampla faixa de sistemas dispersos podem ser citadas, como:

- dispersões sólido-líquido: bioreatores, leitos fluidizados, polimerizações, sistemas em que cristalizações são importantes;
- dispersões líquido-líquido: extrações líquido-líquido, sistemas de separação

água-óleo;

- dispersões gás-líquido: reatores nucleares, evaporadores, flotores, colunas de bolhas;
- dispersões gás-sólido: ciclones, transporte pneumático;

Um dos principais desafios à aplicação de balanço populacional é a correta modelagem dos processos de agregação, morte e nucleação de partículas. Diversos foram os autores que focaram na modelagem fenomenológica destes processos. Para uma revisão das diversas modelagens existentes na literatura sugere-se o trabalho de ARAUJO [14]. Os mecanismos considerados nesta dissertação estão detalhados no Capítulo 4.

2.4 Formulação da equação de Balanço Populacional

Esta seção apresenta, de forma detalhada, o desenvolvimento da equação de balanço populacional, com as simplificações adotadas para a aplicação neste trabalho.

2.4.1 Função de distribuição da densidade numérica de partículas

É comum a distinção entre as coordenadas externas $\mathbf{x} \equiv (x_1, x_2, x_3)$, vetor posição da partícula, e as coordenadas internas $\mathbf{d} \equiv (d_1, d_2, \dots, d_d)$, que representam d diferentes quantidades associadas à partícula. O vetor de estado da partícula (\mathbf{x}, \mathbf{d}) considera tanto as coordenadas externas quanto internas.

Pode-se também definir o domínio das coordenadas internas, $\Omega_{\mathbf{d}}$, e o domínio das coordenadas externas, $\Omega_{\mathbf{x}}$, que é o conjunto de pontos no espaço físico em que as partículas estão presentes. No presente estudo, $\mathbf{d} \equiv [V]$, em que V é o volume das partículas.

O vetor $\mathbf{y}(\mathbf{x}, t)$ engloba todas as variáveis da fase contínua que afetam as partículas:

$$\mathbf{y}(\mathbf{x}, t) = (y_1(\mathbf{x}, t), y_2(\mathbf{x}, t), \dots, y_n(\mathbf{x}, t)) \quad (2.1)$$

Seja $f(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ a função distribuição de densidade numérica de partículas, contínua e especificando a densidade numérica esperada de partículas no tempo t , em uma região do espaço cujo volume de controle é centrado em \mathbf{x} e possui espessura $\delta\mathbf{x}$, com propriedades compreendidas entre \mathbf{d} e $\mathbf{d} + \delta\mathbf{d}$. A função de

densidade numérica é assumida suficientemente suave para permitir a diferenciação em relação a qualquer um de seus argumentos quantas vezes for preciso.

O número (médio) de partículas em todo o sistema é dado pela seguinte equação:

$$N_T(t) = \int_{\Omega_x} \int_{\Omega_d} f(\mathbf{d}, \mathbf{x}, t) dV_d dV_x \quad (2.2)$$

onde dV_d e dV_x são volumes infinitesimais no espaço das coordenadas internas e externas, respectivamente.

2.4.2 Taxa de variação do vetor de estado das partículas

O espaço de estados das partículas pode variar com o tempo. Mudanças nas coordenadas externas representam movimento através do espaço físico, enquanto as mudanças nas coordenadas internas refletem movimento através do espaço abstrato.

É conveniente definir velocidades $\dot{\mathbf{d}}(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ para a coordenada interna e $\dot{\mathbf{x}}(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ para as coordenadas externas (RAMKRISHNA [7]). Com a definição das velocidades através dos espaços de coordenadas externas e internas, é possível escrever o fluxo (numérico) de partículas, ou seja, o número de partículas que escoam por unidade de tempo e unidade de área normal à direção da velocidade. Dessa forma, $f(\mathbf{d}, \mathbf{x}, t)\dot{\mathbf{x}}(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ representa o fluxo de partículas através do espaço físico e $f(\mathbf{d}, \mathbf{x}, t)\dot{\mathbf{d}}(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ representa o fluxo de partículas através do espaço das coordenadas internas.

Por simplicidade, as dependências em relação ao tempo, às variáveis internas e externas e às variáveis da fase contínua serão suprimidas nas equações abaixo.

2.4.3 O teorema de transporte de Reynolds generalizado

Considera-se $\psi(\mathbf{d}, \mathbf{x}, t)$ uma propriedade extensiva associada a uma única partícula localizada em (\mathbf{d}, \mathbf{x}) pertencente ao corpo material $\Lambda_0 = \Lambda_{d_0} \times \Lambda_{x_0}$ em um tempo de referência arbitrário $t = 0$. Conforme o tempo progride, o corpo Λ_0 se deforma continuamente e é representado por $\Lambda(t) = \Lambda_d(t) \times \Lambda_x(t)$. A quantidade total da propriedade extensiva ψ associada a todas as partículas do corpo $\Lambda(t)$, denotada por $\Psi(t)$, é dada por:

$$\Psi(t) = \int_{\Lambda_x(t)} \int_{\Lambda_d(t)} \psi(\mathbf{d}, \mathbf{x}) f(\mathbf{d}, \mathbf{x}, t) dV_d dV_x \quad (2.3)$$

Usando uma generalização do teorema de transporte de Reynolds do espaço físico tridimensional para o espaço \mathfrak{R}^n , pode-se escrever

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Lambda_x(t)} \int_{\Lambda_d(t)} \psi f dV_d dV_x = \\ \int_{\Lambda_x(t)} \int_{\Lambda_d(t)} \frac{\partial}{\partial t} (\psi f) + \nabla_x \cdot (\dot{\mathbf{x}} \psi f) + \nabla_d \cdot (\dot{\mathbf{d}} \psi f) dV_d dV_x \end{aligned} \quad (2.4)$$

2.4.4 A equação de balanço populacional

Considerando-se um corpo $\Lambda(t)$, no espaço de estados das partículas, inicialmente em Λ_0 e continuamente se deformando no tempo e espaço, a única forma pela qual o número de partículas pode mudar é através de processos de nascimento e morte. Assume-se que estes processos ocorrem a uma taxa líquida de $h(\mathbf{d}, \mathbf{x}, t)$ por unidade do espaço de estado das partículas, de forma que a conservação numérica pode ser escrita como:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Lambda_x(t)} \int_{\Lambda_d(t)} f(\mathbf{d}, \mathbf{x}, t) dV_d dV_x = \int_{\Lambda_x(t)} \int_{\Lambda_d(t)} h(\mathbf{d}, \mathbf{x}, t) dV_d dV_x \quad (2.5)$$

Aplicando-se o teorema de Reynolds descrito na seção anterior (Equação 2.4) com $\psi \equiv 1$, obtém-se:

$$\int_{\Lambda_x(t)} \int_{\Lambda_d(t)} \left[\frac{\partial}{\partial t} f + \nabla_x \cdot (\dot{\mathbf{x}} f) + \nabla_d \cdot (\dot{\mathbf{d}} f) - h \right] dV_d dV_x = 0 \quad (2.6)$$

Como o corpo é arbitrário, chega-se à equação do balanço populacional:

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \nabla_x \cdot (\dot{\mathbf{x}} f) + \nabla_d \cdot (\dot{\mathbf{d}} f) = h \quad (2.7)$$

A equação de balanço populacional (Equação 2.7) descreve o comportamento de partículas cujos estados variam de forma determinística, de forma que a especificação do espaço de estado da partícula e do meio é suficiente para determinar a taxa de variação das partículas. Existem situações, entretanto, em que o estado da partícula pode mudar randomicamente. RAMKRISHNA [7] apresenta uma abordagem matemática para levar em conta o deslocamento esperado das partículas se movendo randomicamente no espaço de estado durante um intervalo de tempo infinitesimal.

Para tal, define-se duas matrizes quadradas, $\mathbf{D}_x(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$, de ordem 3, e $\mathbf{D}_d(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ de ordem d , que representam os coeficientes de difusão anisotrópica nos espaços externo e interno, respectivamente. Assim, a equação de balanço

populacional generalizada proposta por RAMKRISHNA [7] é:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f + \nabla_x \cdot (\dot{\mathbf{x}}f) + \nabla_d \cdot (\dot{\mathbf{d}}f) = h \\ + \nabla_x \cdot [\mathbf{D}_x \cdot \nabla_x \cdot (\mathbf{D}_x^T f)] + \nabla_d \cdot [\mathbf{D}_d \cdot \nabla_d \cdot (\mathbf{D}_d^T f)] \end{aligned} \quad (2.8)$$

Normalmente o efeito de difusividade é associado a variações estocásticas de estado, como as provenientes do movimento browniano ou devido à turbulência.

É comum agrupar-se os termos referentes às mudanças no espaço interno. Assim, define-se $G(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ como o divergente do fluxo das variáveis internas em seu respectivo estado:

$$G = -\nabla_d \cdot [\dot{\mathbf{d}}f] + \nabla_d \cdot [\mathbf{D}_d \cdot \nabla_d \cdot (\mathbf{D}_d^T f)] \quad (2.9)$$

onde o primeiro termo representa o transporte convectivo de partículas no espaço interno e o segundo termos representa o transporte difusivo no espaço interno.

O termo fonte da equação de balanço populacional pode então incorporar a taxa de variação das propriedades da partícula, $G(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$, o termo referente à nucleação, $J(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$, e os termos referentes aos processos de interação entre partículas (nascimentos e mortes referentes a quebra e coalescência), $H(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$, de forma que a equação de balanço populacional pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \nabla_x \cdot \dot{\mathbf{X}}f = \nabla_x \cdot [\mathbf{D}_x \cdot \nabla_x \cdot (\mathbf{D}_x^T f)] + H + G + J \quad (2.10)$$

O primeiro termo representa o acúmulo de partículas no espaço de estado das partículas, o segundo termo representa o transporte convectivo no espaço físico, enquanto que o terceiro termo representa o transporte difusivo no espaço físico.

Os termos difusivos estão relacionados a fenômenos não modelados neste trabalho, e portanto não serão considerados, assim como a nucleação de partículas. Além disso, a única coordenada interna considerada é o volume da partícula (o problema de balanço é monovariado), a equação de balanço populacional empregada neste trabalho fica na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \nabla \cdot (f\mathbf{v}) = -\frac{\partial}{\partial V} \left(f \frac{dV}{dt} \right) + H \quad (2.11)$$

O termo fonte H do lado direito da Equação 2.11 representa a taxa de surgimento e desaparecimento de partículas por unidade de volume da mistura devido às inte-

rações entre as partículas (como quebras e coalescências). Além disso, $\frac{dV}{dt}$ substitui o termo $\dot{\mathbf{d}}$ e $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}}$.

2.5 Modelagem dos processos de quebra e coalescência

As partículas em uma dispersão podem interagir entre si, agregando-se para gerar partículas maiores, ou podem quebrar, gerando partículas menores. Assim, para a correta modelagem de um sistema contendo partículas, os termos fontes devido aos fenômenos de quebra e coalescência, representados na Equação (2.11) por H , devem ser modelados. Neste trabalho, a variação do número de partículas ocorre apenas através destes fenômenos, já que mudanças de fase não são consideradas.

O termo H é composto pelos termos de nascimento por quebra, B^b , nascimento por coalescência, B^c , e pelos termos de morte por quebra, D^b , e morte por coalescência, D^c :

$$H = B^b + B^c - D^b - D^c \quad (2.12)$$

2.5.1 Modelagem dos termos referentes aos processos de quebra

O processo de quebra é a ruptura de uma partícula em pelo menos duas outras (ARAÚJO [14]). A quebra de partículas pode ocorrer devido a colisões ou por influência do campo de escoamento. A primeira é mais comum em partículas sólidas, onde a colisão com outras partículas ou paredes leva as partículas a serem lascadas devido ao atrito na superfície. O segundo mecanismo ocorre em partículas fluidas pela interação com um campo de escoamento turbulento ([6]).

As taxas de nascimento e morte por quebra que fazem parte do termo fonte da equação de balanço populacional podem ser modelados conforme a proposta de RAMKRISHNA [7]:

$$B^b(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \int_{\Omega_{\mathbf{d}}} \vartheta(\mathbf{d}', \mathbf{x}', \mathbf{y}, t) b(\mathbf{d}', \mathbf{x}', \mathbf{y}, t) \times P(\mathbf{d}, \mathbf{x} | \mathbf{d}', \mathbf{x}', \mathbf{y}, t) f(\mathbf{d}', \mathbf{x}', t) dV_{\mathbf{d}'} dV_{\mathbf{x}'} \quad (2.13)$$

e

$$D^b(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = b(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) f(\mathbf{d}, \mathbf{x}, t) \quad (2.14)$$

onde $\vartheta(\mathbf{d}', \mathbf{x}', \mathbf{y}, t)$ é o número médio de partículas formadas pela quebra da partícula de estado $(\mathbf{d}', \mathbf{x}')$, que deve ser maior ou igual a 2; $P(\mathbf{d}, \mathbf{x} | \mathbf{d}', \mathbf{x}', \mathbf{y}, t)$ é a função de densidade de probabilidade das partículas formadas pela quebra de uma partícula de estado $(\mathbf{d}', \mathbf{x}')$ vir a possuir o estado (\mathbf{d}, \mathbf{x}) ; $b(\mathbf{d}', \mathbf{x}', \mathbf{y}, t)$ é a frequência de quebra, ou seja, a fração de partículas de estado (\mathbf{d}, \mathbf{x}) que quebram em uma unidade de tempo.

A modelagem da quebra consiste em especificar os termos ϑ , P e b . Diversos são os modelos existentes na literatura para a modelagem destes termos, que em geral são específicos para cada tipo de aplicação. Uma breve revisão bibliográfica será apresentada no Capítulo 4, assim como a descrição detalhada da modelagem utilizada nesta dissertação. Uma excelente compilação e análise dos diversos modelos existentes para quebras pode ser encontrado no trabalho de ARAUJO [14].

2.5.2 Modelagem dos termos referentes às coalescências

Em uma dispersão, as partículas estão em constante movimento e podem colidir umas com as outras. Estas colisões podem ou não resultar em coalescências. Para que a coalescência ocorra é necessário que o filme existente entre as partículas seja drenado até sua ruptura. A Figura 2.1 mostra um esquema simplificado do processo de colisão, resultando ou não em coalescência. Os termos de nascimento e morte

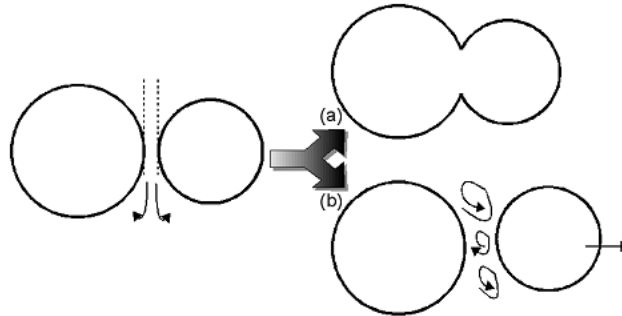


Figura 2.1: Representação do processo de coalescência representando a drenagem do filme entre partículas (a) resultando na coalescência ou (b) na separação das partículas - adaptado de SILVA [6]

por agregação que fazem parte do termo fonte da equação de balanço populacional

podem também ser modelados conforme proposto por RAMKRISHNA [7]:

$$B^c(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \frac{1}{\delta} \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \int_{\Omega_{\mathbf{d}}} a(\mathbf{d}'', \mathbf{x}''; \mathbf{d}', \mathbf{x}'; \mathbf{y}, t) f(\mathbf{d}'', \mathbf{x}'', t) f(\mathbf{d}', \mathbf{x}', t) \times \left| \frac{\partial(\mathbf{d}'', \mathbf{x}'')}{\partial(\mathbf{d}, \mathbf{x})} \right| dV_{\mathbf{d}'} dV_{\mathbf{x}'} \quad (2.15)$$

$$D^c(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \int_{\Omega_{\mathbf{d}}} a(\mathbf{d}, \mathbf{x}; \mathbf{d}', \mathbf{x}'; \mathbf{y}, t) f(\mathbf{d}, \mathbf{x}, t) f(\mathbf{d}', \mathbf{x}', t) dV_{\mathbf{d}'} dV_{\mathbf{x}'} \quad (2.16)$$

onde o termo $\frac{1}{\delta}$ corrige a redundância decorrente da múltipla consideração de pares idênticos e o termo $\left| \frac{\partial(\mathbf{d}'', \mathbf{x}'')}{\partial(\mathbf{d}, \mathbf{x})} \right|$ corresponde ao jacobiano da transformação de coordenadas:

$$\frac{\partial(\mathbf{d}'', \mathbf{x}'')}{\partial(\mathbf{d}, \mathbf{x})} = \begin{vmatrix} \frac{\partial \mathbf{x}_1''}{\partial \mathbf{x}_1} & \frac{\partial \mathbf{x}_1''}{\partial \mathbf{x}_2} & \frac{\partial \mathbf{x}_1''}{\partial \mathbf{x}_3} & \frac{\partial \mathbf{x}_1''}{\partial \mathbf{d}_1} & \dots & \frac{\partial \mathbf{x}_1''}{\partial \mathbf{d}_n} \\ \frac{\partial \mathbf{x}_2''}{\partial \mathbf{x}_1} & \frac{\partial \mathbf{x}_2''}{\partial \mathbf{x}_2} & \frac{\partial \mathbf{x}_2''}{\partial \mathbf{x}_3} & \frac{\partial \mathbf{x}_2''}{\partial \mathbf{d}_1} & \dots & \frac{\partial \mathbf{x}_2''}{\partial \mathbf{d}_n} \\ \frac{\partial \mathbf{x}_3''}{\partial \mathbf{x}_1} & \frac{\partial \mathbf{x}_3''}{\partial \mathbf{x}_2} & \frac{\partial \mathbf{x}_3''}{\partial \mathbf{x}_3} & \frac{\partial \mathbf{x}_3''}{\partial \mathbf{d}_1} & \dots & \frac{\partial \mathbf{x}_3''}{\partial \mathbf{d}_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial \mathbf{d}_1''}{\partial \mathbf{x}_1} & \frac{\partial \mathbf{d}_1''}{\partial \mathbf{x}_2} & \frac{\partial \mathbf{d}_1''}{\partial \mathbf{x}_3} & \frac{\partial \mathbf{d}_1''}{\partial \mathbf{d}_1} & \dots & \frac{\partial \mathbf{d}_1''}{\partial \mathbf{d}_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial \mathbf{d}_n''}{\partial \mathbf{x}_1} & \frac{\partial \mathbf{d}_n''}{\partial \mathbf{x}_2} & \frac{\partial \mathbf{d}_n''}{\partial \mathbf{x}_3} & \frac{\partial \mathbf{d}_n''}{\partial \mathbf{d}_1} & \dots & \frac{\partial \mathbf{d}_n''}{\partial \mathbf{d}_n} \end{vmatrix} \quad (2.17)$$

A modelagem da coalescência consiste em escrever a frequência de agregação, $a(\mathbf{d}'', \mathbf{x}''; \mathbf{d}', \mathbf{x}'; \mathbf{y}, t)$, devido aos mecanismos físicos considerados no problema. Diversas são as propostas na literatura para a modelagem da frequência de coalescência, e novamente o trabalho de ARAUJO [14] é uma excelente referência. No Capítulo 4 serão apresentados, de forma detalhada, os dois mecanismos de coalescência utilizados nesta dissertação.

2.5.3 Simplificações adotadas

Devido à complexidade da modelagem da equação de balanço populacional, algumas simplificações são frequentemente adotadas no desenvolvimento de funções de quebra e coalescência e estão muito bem detalhas no trabalho de DAMIAN [15].

Uma hipótese bastante adotada é a de agregação local, que considera que a posição \mathbf{x} da partícula formada na coalescência é igual às posições \mathbf{x}' e \mathbf{x}'' das

partículas que coalescem. Dada esta hipótese e integrando-se no volume físico as equações 2.15 e 2.16, fica-se com:

$$B^c(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \frac{1}{\delta} \int_{\Omega_{\mathbf{d}}} a(\mathbf{d}''; \mathbf{d}'; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) f(\mathbf{d}'', \mathbf{x}, t) f(\mathbf{d}', \mathbf{x}, t) \left| \frac{\partial(\mathbf{d}'')}{\partial(\mathbf{d})} \right| dV_{\mathbf{d}'} \quad (2.18)$$

$$D^c(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{d}}} a(\mathbf{d}; \mathbf{d}'; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) f(\mathbf{d}, \mathbf{x}, t) f(\mathbf{d}', \mathbf{x}, t) dV_{\mathbf{d}'} \quad (2.19)$$

onde $a(\mathbf{d}''; \mathbf{d}'; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ é agora a frequência de coalescência de partículas de estados $(\mathbf{d}', \mathbf{x})$ e $(\mathbf{d}'', \mathbf{x})$ integrada no volume físico.

Além disso, considerando-se a hipótese de agregação local, o jacobiano de transformação de coordenadas pode ser simplificado como:

$$\left| \frac{\partial(\mathbf{d}'')}{\partial(\mathbf{d})} \right| = \begin{vmatrix} \frac{\partial \mathbf{d}_1''}{\partial \mathbf{d}_1} & \dots & \frac{\partial \mathbf{d}_1''}{\partial \mathbf{d}_d} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial \mathbf{d}_d''}{\partial \mathbf{d}_1} & \dots & \frac{\partial \mathbf{d}_d''}{\partial \mathbf{d}_d} \end{vmatrix} \quad (2.20)$$

Em problemas monovariados, ao se usar como variável interna alguma variável que possua a propriedade aditiva, como massa ou volume, o jacobiano de transformação de coordenadas se torna unitário. Este é o caso do problema avaliado nesta dissertação.

É comum a adoção da hipótese de quebra instantânea nos casos em que a escala de tempo da quebra é muito menor do que a escala de evolução da população. Assim, da mesma forma que foi feito na coalescência, as posições da partícula mãe e das partículas filhas são consideradas iguais. Adotando esta hipótese na equação de nascimento por quebra 2.13:

$$B^b(\mathbf{d}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{d}}} \vartheta(\mathbf{d}', \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) b(\mathbf{d}', \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \times P(\mathbf{d}, \mathbf{d}', \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) f(\mathbf{d}', \mathbf{x}, t) dV_{\mathbf{d}'} \quad (2.21)$$

onde $b(\mathbf{d}', \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ é agora a frequência de quebra de partículas de estado (\mathbf{d}, \mathbf{x}) integrada no volume físico.

Substituindo os termos fontes da equação de balanço populacional (Equação 2.11) com as simplificações apontadas anteriormente, e considerando que o problema é monovariado, sendo a única variável interna o volume das partículas, V , obtém-se a forma final da equação de balanço populacional usada nesta dissertação:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} f + \nabla \cdot (f \mathbf{v}) + \frac{\partial}{\partial V} \left(f \frac{dV}{dt} \right) \\
= & \int_V^\infty \vartheta(V', \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) b(V', \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) P(V, V', \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) f(V', \mathbf{x}, t) dV_{V'} \\
& + \frac{1}{2} \int_0^V a(V - V'; V'; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) f(V - V', \mathbf{x}, t) f(V', \mathbf{x}, t) dV_{V'} \\
& \quad - b(V, \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) f(V, \mathbf{x}, t) \\
& - \int_0^\infty a(V; V'; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) f(V, \mathbf{x}, t) f(V', \mathbf{x}, t) dV_{V'} \quad (2.22)
\end{aligned}$$

2.6 Solução da equação de balanço populacional

2.6.1 Métodos numéricos para solução da equação de balanço populacional

A equação de balanço populacional é uma equação integro-diferencial com presença de termos não-lineares. Soluções analíticas só são encontradas para alguns casos, em geral mais simplificados e não realísticos. Alguns trabalhos com soluções analíticas da equação de balanço populacional merecem ser citados: PATIL e ANDREWS [16], LAGE [17], MCCOY e MADRAS [18].

Para casos reais, técnicas numéricas precisam ser utilizadas para a solução da equação de balanço populacional. SILVA [6] classifica os métodos numéricos utilizados em cinco categorias distintas: métodos estocásticos, métodos dos resíduos ponderados, métodos das classes, métodos dos momentos e métodos híbridos.

Métodos de Monte Carlo

De forma geral, os métodos de Monte Carlo são baseados em realizações artificiais do comportamento do sistema. Através da geração de números aleatórios para calcular as funções de probabilidade do sistema, o cálculo das funções integrais e diferenciais é substituído pela simulação estocástica do sistema (DAMIAN [15]). Assim, a abordagem estocástica, ao contrário da abordagem determinística, modela os fenômenos de interação entre partículas como processos discretos e aleatórios

(SILVA [6]). Apesar de serem extremamente flexíveis, os métodos estocásticos são computacionalmente custosos, já que um número muito grande de realizações é necessário para simular a evolução de uma população.

Método dos Resíduos Ponderados

O método dos Resíduos Ponderados é uma técnica geral para solução de equações diferenciais parciais. Aproxima-se a função que é a solução da equação através da sua expansão em uma base de funções conhecidas. A solução é obtida pela substituição da expansão funcional da função de distribuição em funções de base, com seus coeficientes a determinar, na equação a ser resolvida. Esses resíduos, convenientemente ponderados por funções peso, formam um conjunto de equações linearmente independentes em termos dos coeficientes da expansão. As formulações se diferenciam em relação à base utilizada, que podem possuir suporte local ou global. Funções globais são geralmente utilizadas em problemas estacionários e quando uma forma aproximada da solução está disponível (SILVA [6]). A técnica de elementos finitos, por sua vez, usa bases locais e permite soluções mais gerais. Escolhas possíveis para a função peso incluem as funções delta de Dirac (método de colocação) ou as próprias funções de base (formulação de Galerkin). Uma revisão sobre os métodos de resíduos ponderados pode ser encontrada em RAMKRISHNA [7].

Método das Classes

O Método das Classes representa a distribuição da população em um número finito de classes, discretizando o domínio das variáveis internas. Cada classe é representada por um valor constante da variável interna, de forma que todas as partículas desta classe possuam as mesmas propriedades. Matematicamente, cada classe é representada por uma função delta de Dirac em um ponto no domínio interno, chamado pivô (DAMIAN [15]). Assim, a equação integro-diferencial de balanço populacional é transformada em um sistema de equações diferenciais ordinárias.

O Método das Classes possui a facilidade do acoplamento com uma solução de CFD, já que as classes resultantes da discretização do domínio são resolvidas como equações de transporte adicionais acopladas às simulações fluidodinâmicas. Entretanto, alguns autores (KUMAR e RAMKRISHNA [19], LO [20]) reportaram a necessidade da utilização de um número muito grande de classes para se representar

uma distribuição de tamanho de partículas com boa precisão, o que pode elevar significativamente o custo computacional.

Método dos Momentos

O método dos momentos faz uso dos momentos da distribuição das partículas, conforme a Equação 2.23, para simular sistemas dispersos.

$$\mu_k = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^k f(\mathbf{x}, \xi, t) d\xi \quad (2.23)$$

Na maior parte das aplicações em engenharia, não se está interessado em acompanhar a função de distribuição das partículas, mas em momentos desta distribuição. Por exemplo, o momento de ordem zero ($k = 0$) representa a densidade numérica total das partículas. O momento de ordem 1 ($k = 1$) é a densidade mássica das partículas se a variável interna for a massa das partículas ($d \doteq m$) e a fração volumétrica de partículas caso a variável interna seja o volume das partículas ($d \doteq V$). Os momentos fracionários também fornecem informações que constantemente são de interesse. O momento $2/3$, por exemplo, fornece informações sobre a área interfacial do sistema.

No método dos momentos, a função de distribuição é substituída por um conjunto de momentos de baixa ordem, suficientes para calcular as propriedades físicas do sistema simulado (FRIEDLANDER [21]). Assim, acompanha-se diretamente os momentos de baixa ordem ao invés da distribuição de partículas, não se necessitando de conhecimentos sobre a última. Dessa forma, as equações para evolução só envolvem funções dos momentos.

A principal vantagem do método dos momentos é seu baixo custo computacional e simplicidade. Por outro lado, o método só possui forma fechada para poucos casos, já que constantemente a equação referente ao momento μ_k envolve momentos de ordem superior, levando a um problema de fechamento ou à necessidade de formas matemáticas especiais para representar alguns fenômenos. A necessidade da formulação do fechamento é uma restrição severa deste método.

Métodos híbridos

Por fim, existem alguns métodos que possuem características do Método dos Momentos e do Método das Classes, conhecidos como métodos híbridos. MCGRAW

[22] propôs um método baseado no Método dos Momentos, onde as equações para a evolução dos momentos têm fechamento pelo uso de uma aproximação por quadratura. Este método, conhecido como QMOM - *Quadrature Method of Moments*, satisfaz a condição de fechamento para um grande número de problemas sem a necessidade de assumir formas matemáticas especiais para a função distribuição das partículas, especificando os pesos e abscissas da aproximação por quadratura em termos dos momentos de menor ordem da distribuição. Ao contrário do método das classes, as abscissas podem se mover livremente por todo domínio da variável interna.

A Equação (2.24) mostra a aproximação dos momentos pela quadratura de Gauss-Christoffel com N pontos que calcula exatamente os $2N$ primeiros momentos ($k = 0, \dots, 2N - 1$):

$$\mu_k = \int_{-\infty}^{+\infty} v^k f(\mathbf{x}, \xi, t) dv = \sum_{\alpha=1}^N \xi_{\alpha}^k w_{\alpha} \quad (2.24)$$

Os primeiros $2N$ momentos de interesse são determinados a partir de N abscissas e N pesos. Para o cálculo dos pesos e abscissas, MCGRAW [22] utiliza o algoritmo Produto-Diferença (PD) de GORDON [23], que permite calcular os N pesos e N abscissas da quadratura de Gauss-Christoffel com a informação dos $2N$ primeiros momentos.

MARCHISIO *et al.* [24, 25] continuaram a estender o QMOM para o cálculo da evolução de uma população de partículas contendo termos de quebra e coalescência. MARCHISIO *et al.* [26] mostrou a capacidade de acoplamento do método QMOM com códigos de CFD, com a vantagem de ser necessário um pequeno número de equações adicionais (3-4 pontos de quadratura). SILVA [6], entretanto, aponta dois fatores limitantes do método QMOM: (1) se aplicado a distribuições multivariadas, o método perde sua simplicidade e eficiência computacional e (2) ao acompanhar apenas os momentos da distribuição de partículas, o método não representa de forma realística sistemas polidispersos com forte acoplamento entre as variáveis internas e as velocidades das fases. Além disso, DAMIAN [15] cita como dispendiosa a necessidade de se utilizar o algoritmo PD em cada ponto da malha a cada passo de tempo.

O método DQMOM - *Direct Quadrature Method of Moments*, foi desenvolvido por MARCHISIO e FOX [27] e baseia-se na idéia de acompanhar diretamente os pesos e abscissas da aproximação por quadratura ao invés de acompanhar os momentos da distribuição. A função de distribuição é representada pelo somatório

de funções delta de Dirac, conforme a Equação (2.25):

$$f(\mathbf{x}, \xi, t) = \sum_{\alpha=1}^N w_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \delta(\xi - \xi_{\alpha}(\mathbf{x}, t)) \quad (2.25)$$

A população de partículas é representada por um conjunto de N fases dispersas, onde cada fase é caracterizada por uma abscissa ξ_{α} , que representa o valor da propriedade considerada em cada fase, e um peso w_{α} , que representa a densidade numérica da fase α . A Equação (2.25) é substituída diretamente na equação de balanço populacional. Após a aplicação de $2N$ integrais, usualmente os $2N$ primeiros momentos, chega-se à $2N$ equações de transporte para os pesos e abscissas.

A grande vantagem do método DQMOM é que o algoritmo PD só é necessário uma vez, na inicialização dos pesos e abscissas. MARCHISIO e FOX [27] desenvolveram a formulação para os casos de crescimento, dispersão, nucleação, quebra e coalescência e difusão pura para casos monovariados. Apresentaram também a formulação do DQMOM para casos multivariados, apesar de não publicarem testes.

SANYAL *et al.* [28] compararam os resultados dos métodos das classes, QMOM e DQMOM para a solução de colunas de borbulhamento e concluíram que o DQMOM apresentou o melhor desempenho dentre os métodos avaliados. SILVA *et al.* [29] compararam diversos métodos para solução de balanço populacional quanto à acurácia e eficiência, incluindo o Método das Classes, QMOM e DQMOM, e concluíram que o método DQMOM se mostrou mais eficiente computacionalmente, sendo o mais adequado para o acoplamento com CFD.

Conforme exposto brevemente, alguns métodos disponíveis para solução da equação de balanço populacional, como o método das Classes e os métodos de Monte Carlo são computacionalmente custosos para simulação de casos reais, enquanto que métodos como o MOM são viáveis computacionalmente, mas se mostraram inacurados para certos casos avaliados. Assim, o método DQMOM foi selecionado para ser aplicado na solução da equação de balanço populacional desta dissertação. Os detalhes da formulação do DQMOM para o problema selecionado serão apresentados na seção a seguir.

2.6.2 O Método DQMOM

Será apresentada nesta seção a formulação do método DQMOM para a solução da equação de balanço populacional que será utilizada nesta dissertação, apresentada

na Equação 2.22. A formulação mais geral do método é encontrada em MARCHISIO e FOX [27].

A equação a ser resolvida, em termos da coordenada interna (a dependência espacial foi sumprimida por simplicidade), é:

$$\frac{\partial f(V)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (f(V)v_i) = S(V) \quad (2.26)$$

onde $S(V)$ são os termos fontes (crescimento, quebras e coalescências) contendo integrais e derivadas com relação a V .

No método DQMOM, a função de distribuição das partículas com o volume como variável interna, V , é representada pelo somatório de funções delta de Dirac:

$$f(V) = \sum_{\alpha=1}^N w_{\alpha} \delta(V - V_{\alpha}) \quad (2.27)$$

onde N é o número de funções delta e w_{α} é o peso da classe α que tem volume V_{α} .

Substituindo a Equação 2.27 na Equação 2.26, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{\alpha=1}^N w_{\alpha} \delta(V - V_{\alpha}) \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(v_{\alpha_i} \sum_{\alpha=1}^N w_{\alpha} \delta(V - V_{\alpha}) \right) = S(V) \quad (2.28)$$

Assim:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^N \delta(V - V_{\alpha}) \left[\frac{\partial w_{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial (v_{\alpha_i} w_{\alpha})}{\partial x_i} \right] \\ & + \sum_{\alpha=1}^N \left[w_{\alpha} \frac{\partial \delta(V - V_{\alpha})}{\partial t} + v_{\alpha_i} w_{\alpha} \frac{\partial \delta(V - V_{\alpha})}{\partial x_i} \right] = S(V) \end{aligned} \quad (2.29)$$

Utilizando a regra da cadeia:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^N \delta(V - V_{\alpha}) \left[\frac{\partial w_{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial (v_{\alpha_i} w_{\alpha})}{\partial x_i} \right] \\ & - \sum_{\alpha=1}^N \delta'(V - V_{\alpha}) \left[w_{\alpha} \frac{\partial V_{\alpha}}{\partial t} + v_{\alpha_i} w_{\alpha} \frac{\partial V_{\alpha}}{\partial x_i} \right] = S(V) \end{aligned} \quad (2.30)$$

Somando e subtraindo $\sum_{\alpha=1}^N \delta' (V - V_\alpha) V_\alpha \left[\frac{\partial w_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial (v_{\alpha_i} w_\alpha)}{\partial x_i} \right]$ na Equação 2.30, tem-se:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^N \delta (V - V_\alpha) \left[\frac{\partial w_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial (v_{\alpha_i} w_\alpha)}{\partial x_i} \right] \\ & - \sum_{\alpha=1}^N \delta' (V - V_\alpha) \left[\frac{(\partial w_\alpha V_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial (v_{\alpha_i} w_\alpha V_\alpha)}{\partial x_i} \right] \\ & + \sum_{\alpha=1}^N \delta' (V - V_\alpha) \left[V_\alpha \frac{\partial w_\alpha}{\partial t} + V_\alpha \frac{\partial (v_{\alpha_i} w_\alpha)}{\partial x_i} \right] = S(V) \end{aligned} \quad (2.31)$$

Definindo a abscissa ponderada ζ_α como $\zeta_\alpha = w_\alpha V_\alpha$:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^N \left[\delta (V - V_\alpha) + V_\alpha \delta' (V - V_\alpha) \right] \left(\frac{\partial w_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial (v_{\alpha_i} w_\alpha)}{\partial x_i} \right) \\ & - \sum_{\alpha=1}^N \delta' (V - V_\alpha) \left(\frac{\zeta_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial (v_{\alpha_i} \zeta_\alpha)}{\partial x_i} \right) = S(V) \end{aligned} \quad (2.32)$$

O termo fonte será tratado mais tarde neste texto. Convém ressaltar que como o termo fonte $S(V)$ não contém derivadas ou integrais com relação a \mathbf{x} ou t , sua forma exata não é importante neste momento.

Define-se:

$$A_\alpha = \frac{\partial w_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial (v_{\alpha_i} w_\alpha)}{\partial x_i} \quad (2.33)$$

e

$$B_\alpha = \frac{\partial \zeta_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial (v_{\alpha_i} \zeta_\alpha)}{\partial x_i} \quad (2.34)$$

Aplicando as definições dadas nas equações 2.33 e 2.34, a Equação 2.32 pode ser reescrita como:

$$\sum_{\alpha=1}^N \left[\delta (V - V_\alpha) + V_\alpha \delta' (V - V_\alpha) \right] A_\alpha - \sum_{\alpha=1}^N \delta' (V - V_\alpha) B_\alpha = S_V \quad (2.35)$$

Esta equação pode ser agora utilizada para a determinação de A_α e B_α aplicando-se a transformação dos momentos.

Em geral, qualquer conjunto independente de momentos pode ser utilizado no DQMOM. Na maior parte dos problemas, deseja-se conhecer os momentos zero e um, de forma que são quase sempre incluídos neste conjunto de momentos independentes. Momentos fracionários podem fornecer informações importantes para as propriedades físicas de interesse. Como a área interfacial é uma das

informações de interesse neste trabalho, e está relacionada ao momento 2/3, usou-se momentos fracionários no que se segue.

Os momentos fracionários da função distribuição de partículas são dados por:

$$\mu_{k/p} = \int_0^{\infty} V^{\frac{k}{p}} f(V) dV = \sum_{\alpha=1}^N w_{\alpha} V_{\alpha}^{\frac{k}{p}} \quad (2.36)$$

A função delta apresenta as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} V^{\frac{k}{p}} \delta(V - V_{\alpha}) dV &= V_{\alpha}^{\frac{k}{p}} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} V^{\frac{k}{p}} \delta'(V - V_{\alpha}) dV &= -\frac{k}{p} V_{\alpha}^{\frac{k}{p}-1} \end{aligned} \quad (2.37)$$

Dessa forma, passando a transformação dos momentos fracionários na Equação 2.35, fica-se com:

$$\left(1 - \frac{k}{p}\right) \sum_{\alpha=1}^N \left(V_{\alpha}^{\frac{k}{p}} A_{\alpha}\right) + \frac{k}{p} \sum_{\alpha=1}^N V_{\alpha}^{\frac{k}{p}-1} B_{\alpha} = \bar{S}_{\frac{k}{p}}^{(N)} \quad (2.38)$$

onde os momentos dos termos fonte são dados por:

$$\bar{S}_{\frac{k}{p}}^{(N)} = \int_{-\infty}^{+\infty} V^{\frac{k}{p}} S(V) dV \quad (2.39)$$

Para o caso estudado, o termo fonte é referente à expansão das bolhas e aos nascimentos e mortes devido à quebras e coalescências, ou seja:

$$\bar{S}_{\frac{k}{p}}^{(N)} = \bar{S}_{\frac{k}{p}}^e + \bar{B}_{\frac{k}{p}}^c + \bar{B}_{\frac{k}{p}}^b - \bar{D}_{\frac{k}{p}}^c - \bar{D}_{\frac{k}{p}}^b \quad (2.40)$$

O termo de expansão

O termo fonte relativo à expansão das bolhas é dado por:

$$S^e = -\frac{\partial}{\partial V} \left(f \frac{dV}{dt} \right) \quad (2.41)$$

Passando a transformação dos momentos na Equação 2.41:

$$\bar{S}_{\frac{k}{p}}^e = -\int_0^{\infty} V^{\frac{k}{p}} \frac{\partial}{\partial V} \left(f \frac{dV}{dt} \right) dV = \frac{k}{p} \int_0^{\infty} V^{\frac{k}{p}-1} f \frac{dV}{dt} dV \quad (2.42)$$

Rearranjando a Equação 2.42, tem-se:

$$\bar{S}_{\frac{k}{p}}^e = \frac{k}{p} \int_0^{+\infty} V^{\frac{k}{p}} f \frac{d}{dt} (\ln V) dV \quad (2.43)$$

Aplicando a aproximação da função distribuição de partículas dada na Equação 2.27, obtem-se:

$$\bar{S}_{\frac{k}{p}}^e = \frac{k}{p} \sum_{\alpha=1}^N w_{\alpha} V_{\alpha}^{\frac{k}{p}} \frac{d}{dt} \ln V_{\alpha} \quad (2.44)$$

Assumindo que a lei dos gases ideais é válida para um sistema isotérmico sem transporte de massa, tem-se que:

$$\frac{d \ln V_{\alpha}}{dt} = -\frac{d}{dt} \ln p \quad (2.45)$$

Assim:

$$\bar{S}_{\frac{k}{p}}^e = -\frac{k}{p} \sum_{\alpha=1}^N w_{\alpha} V_{\alpha}^{\frac{k}{p}} \frac{d}{dt} \ln p \quad (2.46)$$

O termo de nascimento por coalescência

O termo de nascimento por coalescência, B^c , apresentado na Equação 2.22 é:

$$B^c(V) = \frac{1}{\delta} \int_0^V a(V', V - V') f(V - V') f(V') dV' \quad (2.47)$$

Aplicando a integral dos momentos:

$$\begin{aligned} B_{\frac{k}{p}}^c &= \int_0^{\infty} B^c(V) V^{\frac{k}{p}} dV \\ &= \frac{1}{\delta} \int_0^{\infty} \int_0^V V^{\frac{k}{p}} a(V', V - V') f(V - V') f(V') dV' dV \end{aligned} \quad (2.48)$$

A ordem de integração pode ser trocada invertendo-se adequadamente os domínios de integração, conforme pode ser visualizado na 2.2. Assim:

$$B_{\frac{k}{p}}^c = \frac{1}{\delta} \int_0^{\infty} \int_{V'}^{\infty} V^{\frac{k}{p}} a(V', V - V') f(V - V') f(V') dV dV' \quad (2.49)$$

Como $V = V' + V''$, para cada V' fixo, tem-se que $dV = dV''$. Além disso, quando $V \rightarrow V'$, $V'' \rightarrow 0$ e quando $V \rightarrow \infty$, $V'' \rightarrow \infty$. Assim, a integração no domínio $V' \leq V < \infty$ pode ser transformada para $0 \leq V'' < \infty$. Dessa forma, a Equação

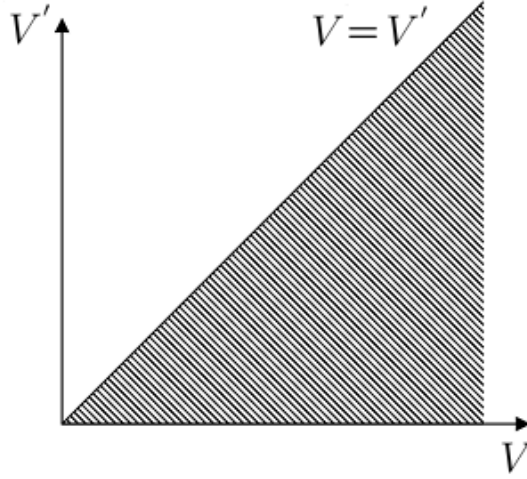


Figura 2.2: Transformação de coordenadas utilizada no termo de nascimento por coalescência

2.49 é reescrita como:

$$B_{\frac{k}{p}}^c = \frac{1}{\delta} \int_0^\infty \int_0^\infty (V' + V'')^{\frac{k}{p}} a(V', V'') f(V'') f(V') dV'' dV' \quad (2.50)$$

O termo de morte por coalescência

O termo de morte por coalescência, conforme a Equação 2.22, é dado por:

$$D^c(V) = \int_0^\infty a(V, V') f(V) f(V') dV' \quad (2.51)$$

Aplicando a transformação de momentos na Equação 2.51, fica-se com:

$$\bar{D}_{\frac{k}{p}}^c = \int_0^\infty \int_0^\infty V^{\frac{k}{p}} f(V) f(V') a(V, V') dV dV' \quad (2.52)$$

O termo de nascimento por quebra

O termo de nascimento devido a quebra, B^b , apresentado na Equação 2.22, tem domínio de integração que vai de V a ∞ :

$$B^b(V) = \int_V^\infty \vartheta(V') b(V') P(V, V') f(V') dV' \quad (2.53)$$

Aplicando-se a integral dos momentos, tem-se:

$$\begin{aligned} \bar{B}_{\frac{k}{p}}^b &= \int_0^\infty B^b(V) V^{\frac{k}{p}} dV \\ &= \int_0^\infty \int_V^\infty V^{\frac{k}{p}} \vartheta(V') b(V') P(V, V') f(V') dV' dV \end{aligned} \quad (2.54)$$

A ordem de integração pode ser trocada invertendo-se adequadamente os domínios de integração, conforme pode ser visualizado na 2.3: Logo,

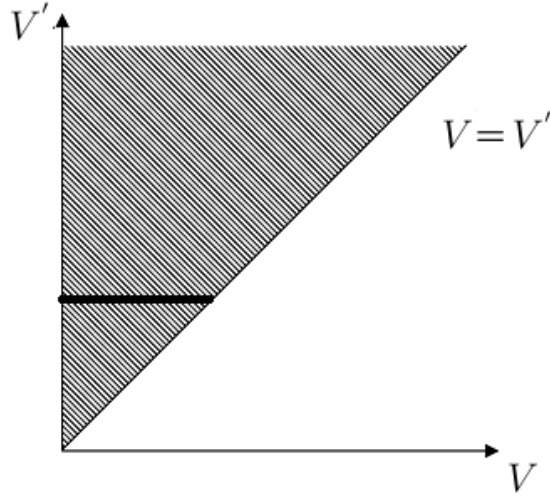


Figura 2.3: Transformação de coordenadas utilizada no termo de nascimento por quebra

$$\bar{B}_{\frac{k}{p}}^b = \int_0^\infty \vartheta(V') b(V') f(V') \left[\int_0^{V'} V^{\frac{k}{p}} P(V, V') dV \right] dV' \quad (2.55)$$

O termo de morte por quebra

O termo de morte por quebra, apresentado na Equação 2.22, é dado por:

$$D^b(V) = b(V) f(V) \quad (2.56)$$

Aplicando a transformação de momentos na Equação 2.56, fica-se com:

$$\bar{D}_{\frac{k}{p}}^b = \int_0^\infty V^{\frac{k}{p}} b(V) f(V) dV \quad (2.57)$$

Forma final do termo fonte relativo à expansão, quebra e coalescência

Usando a aproximação por quadratura dada na Equação 2.27, obtem-se a forma final do termo fonte relativo à expansão e aos nascimentos e mortes devido às interações

entre as partículas:

$$\begin{aligned}
\bar{S}_{\frac{k}{p}}^{\text{interações entre partículas}} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\gamma=1}^N (V_{\alpha} + V_{\gamma})^{\frac{k}{p}} a(V_{\alpha}, V_{\gamma}) w_{\alpha} w_{\gamma} \\
&\quad - \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\gamma=1}^N V_{\alpha}^{\frac{k}{p}} a(V_{\alpha}, V_{\gamma}) w_{\alpha} w_{\gamma} \\
&\quad + \sum_{\alpha=1}^N \vartheta(V_{\alpha}) b(V_{\alpha}) w_{\alpha} \int_0^{V_{\alpha}} V^{\frac{k}{p}} P(V, V_{\alpha}) dV \\
&\quad - \sum_{\alpha=1}^N V_{\alpha}^{\frac{k}{p}} b(V_{\alpha}) w_{\alpha} \tag{2.58}
\end{aligned}$$

2.6.3 O algoritmo PD

GORDON [23] desenvolveu uma metodologia para o cálculo de uma quadratura Gaussiana cuja função peso é uma distribuição arbitrária cujo suporte pertence ao intervalo $[0, \infty)$. A quadratura de Gordon é utilizada por MARCHISIO e FOX [27] para a inicialização do algoritmo de solução da equação de balanço populacional.

A quadratura de Gordon com N pontos pode ser obtida para qualquer distribuição contínua ou discreta cujos os primeiros $2N$ momentos possam ser calculados e utilizados no algoritmo produto-diferença (PD).

O procedimento do algoritmo PD está descrito em LAGE [30]. O primeiro passo do algoritmo PD é a construção de uma matriz triangular superior, $\mathbf{H}_{(2N+1) \times (2N+1)}$, recursivamente definida como:

$$\left\{ \begin{array}{l} H_{i,1} = \delta_{i,1}, \\ H_{i,2} = (-1)^{i-1} \mu_{i-1}, \\ H_{i,j} = H_{i,j-1} H_{i+1,j-2} - H_{i,j-2} H_{i+1,j-1} \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} i = 1, \dots, 2N+1 \\ i = 1, \dots, 2N \\ \begin{array}{l} j = 3, \dots, 2N+1 \\ i = 1, \dots, 2N+2-j \end{array} \end{array} \right.$$

De \mathbf{H} , o vetor λ é obtido como:

$$\lambda_i = \frac{H_{1,j+1}}{H_{1,i} H_{1,i-1}}, \quad i = 1, \dots, 2N, \quad \text{onde } H_{1,0} = 1 \tag{2.59}$$

Uma matriz tridiagonal simétrica é obtida através de somas e produtos dos λ_j :

$$\begin{bmatrix} X_1 & Y_2 & \dots & \dots & 0 \\ Y_2 & X_2 & Y_3 & & \vdots \\ \vdots & Y_3 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & X_{N-1} & Y_N \\ 0 & \dots & \dots & Y_N & X_N \end{bmatrix} \quad (2.60)$$

Onde

$$\begin{cases} X_1 = \lambda_2 \\ X_i = \lambda_{2i-1} + \lambda_{2i} & i = 2, \dots, N \\ Y_i = -(\lambda_{2i-2}\lambda_{2i-1})^{1/2} \end{cases} \quad (2.61)$$

As abscissas da quadratura são os autovalores da matriz tridiagonal e seus pesos são definidos a partir dos autovetores da matriz tridiagonal $(l_{i,j})$:

$$\begin{cases} I_j = \xi_j \\ w_j = \lambda_1 l_{1,j}^2 & j = 1, \dots, N \end{cases} \quad (2.62)$$

Capítulo 3

O Modelo de Transporte de Área Interfacial

3.1 Desenvolvimento da equação de transporte de área interfacial

Como a concentração de área interfacial está relacionada ao número de partículas, KOCAMUSTAFAOGULLARI e ISHII [5] propuseram uma equação de transporte para a concentração de área interfacial baseada na equação de transporte da densidade numérica de partículas desenvolvida por REYES [31] para partículas fluidas esféricas dispersas não-reativas.

KOCAMUSTAFAOGULLARI e ISHII [5] obtiveram a equação de transporte de área interfacial através do momento em área da equação da densidade numérica de partículas. A grande vantagem desta abordagem, segundo estes autores, é que mudanças na estrutura bifásica são previstas mecanisticamente com a introdução da equação de transporte de área interfacial, substituindo então os mapas de regime e critérios de transição entre regimes.

Assim como o modelo de balanço populacional, a utilização da equação de transporte de área interfacial requer a modelagem dos termos fonte e sumidouro de área interfacial, intrinsecamente ligados ao conhecimento dos mecanismos que podem levar à variação do número de partículas. Sendo assim, diversos pesquisadores vêm trabalhando em modelos fenomenológicos para estes processos de quebra e coalescência. Uma excelente compilação dos modelos de quebra e coalescência pode ser encontrada no trabalho de ARAUJO [32].

Diversos autores focaram no desenvolvimento de métodos de medição dos pa-

rômetros locais de escoamentos bifásicos a fim de permitir a obtenção de um conjunto de dados acurados de concentração de área interfacial, fração de vazio e velocidades que permitissem o desenvolvimento dos modelos para os mecanismos de interação entre partículas.

HIBIKI *et al.* [33, 34], HIBIKI e ISHII [35, 36], e KIM *et al.* [37] são alguns exemplos de trabalhos que utilizaram sensores duplos ou quádruplos de condutividade, anemometria de fio quente e métodos de processamento de imagens para a obtenção de características locais de escoamentos verticais gás-líquido dispersos. BARTEL *et al.* [38], HIBIKI *et al.* [39, 40] são alguns exemplos de pesquisas que focaram na medição da concentração de área interfacial em escoamentos gás-líquido dispersos subresfriados com ebulição. TAKAMASA *et al.* [41] trabalharam na medição da concentração de área interfacial e fração de vazio em condições de microgravidade. ISHII *et al.* [42] e HIBIKI *et al.* [43] foram alguns dos pesquisadores que fizeram medições de concentração de área interfacial e fração de vazio em escoamentos gás-líquido dispersos descendentes para obterem maior conhecimento acerca das estruturas interfaciais neste tipo de escoamento.

Formulação com 1 e 2 grupos de bolhas

A formulação da equação de transporte de área interfacial com somente um grupo de bolhas é obtida através da integração da equação de densidade numérica sobre o volume de todas as partículas. Esta abordagem é válida quando se lida com partículas com formatos e tamanhos semelhantes, que apresentam características semelhantes de transporte, isto é, o sistema é aproximadamente monodisperso. Em sistemas bifásicos gás-líquido, bolhas com diversos formatos e tamanhos coexistem, dependendo do regime de escoamento. Dessa forma, o modelo matemático deve levar em consideração as diferenças no transporte dessas diferentes bolhas, já que o arraste pode ser bastante diferente para bolhas com formatos distintos.

ISHII *et al.* [44] propuseram, em 1998, a abordagem de classificar as bolhas em dois grupos distintos: o primeiro composto por bolhas esféricas e distorcidas e o segundo grupo compreendido por bolhas em formato de balas e bolhas grandes do regime de golfadas, resultando em duas equações de transporte para a densidade numérica das bolhas. Esta formulação é conhecida como formulação de dois grupos.

Na formulação de dois grupos, o limite de integração de cada uma das equações de transporte da densidade numérica de bolhas é limitado pelo volume crítico

que define a transição entre os dois grupos de bolhas. Dessa forma, as equações resultantes para o transporte de área interfacial envolvem as interações entre partículas de um mesmo grupo e interações entre grupos. ISHII e ZUBER [45] propõem o diâmetro crítico que limita os grupos como:

$$D_{crit} = 4\sqrt{\frac{\sigma}{g\Delta\rho}} \quad (3.1)$$

onde σ é a tensão superficial das bolhas, g é a gravidade e $\Delta\rho$ é a diferença de massa específica entre a fase contínua e as bolhas.

Utilizando a Equação 3.1 para sistemas bifásico ar-água sob pressão atmosférica, o valor do diâmetro crítico é de aproximadamente $10mm$.

ISHII *et al.* [44] classificaram os possíveis mecanismos de interação em cinco categorias: coalescência promovida por colisões randômicas devido à turbulência do meio; coalescência devido à captura de bolhas em esteiras de outras bolhas; quebra devido ao impacto de vórtices turbulentos; quebra por cisalhamento de pequenas bolhas das extremidades de bolhas do formato de balas e a quebra de grandes bolhas com formato de balas devido a instabilidades na superfície das bolhas, conforme a Figura 3.1. A interação pode ocorrer entre bolhas do mesmo grupo ou entre bolhas de grupos distintos.

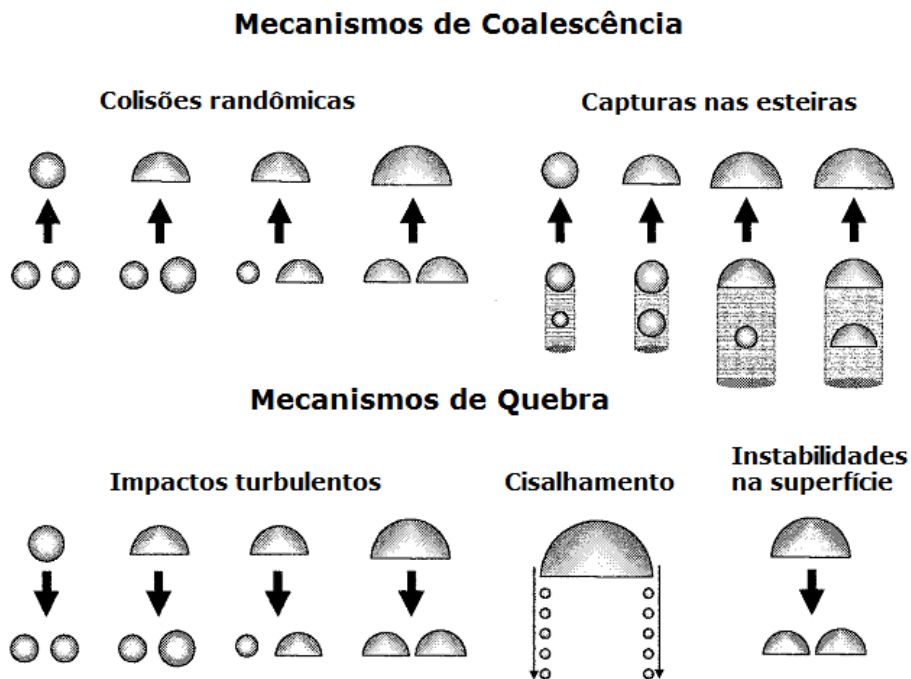


Figura 3.1: Mecanismos de interação entre dois grupos de bolhas - adaptado de ISHII e HIBIKI [3]

3.1.1 Equação de transporte com um grupo de bolhas

Quando a fração volumétrica de gás é baixa, bolhas com formato de balas ou bolhas do regime de golfadas não estão presentes e a formulação de um grupo pode ser utilizada.

Nos primeiros estágios de desenvolvimento da equação de transporte de área interfacial, o foco principal foi o estudo de escoamentos de bolhas dispersas com o objetivo de desenvolver uma equação de transporte de área interfacial com os termos fonte e sumidouro propriamente modelados.

Para este tipo de escoamento, WU *et al.* [46] consideraram três mecanismos para coalescência e quebra de bolhas: coalescência devido à colisões randômicas promovidas pela turbulência do meio líquido, coalescência devido à entrada de bolhas nas esteiras de outras bolhas e a quebra de bolhas devido ao impacto de vórtices turbulentos. Eles obtiveram uma formulação unidimensional da equação de transporte de área interfacial através da promediação sobre a área transversal. Dispondo de dados experimentais da distribuição axial da concentração de área interfacial sob diversas condições de escoamento, WU *et al.* [46] puderam ajustar os parâmetros do modelo. Os resultados obtidos por eles utilizando as modelagens propostas para os termos fonte e sumidouro da equação de transporte de área interfacial tiveram boa concordância com os dados experimentais disponíveis.

Apesar da formulação de WU *et al.* [46] ter modelado apropriadamente os termos fonte e sumidouro da equação de transporte de área interfacial, foi assumido no estudo a hipótese de que a fase gasosa é incompressível. Estudos posteriores mostraram que o aumento na concentração de área interfacial devido à redução da pressão ao longo do escoamento não deve ser ignorado em escoamentos gás-líquido borbulhantes verticais.

HIBIKI e ISHII [2] publicaram um artigo cujo objetivo principal fora desenvolver modelos para os termos fonte e sumidouro da equação de transporte de área interfacial para escoamentos borbulhantes adiabáticos, validando-os dados experimentais obtidos pelo mesmo grupo. De acordo com HIBIKI e ISHII [2], a contribuição do mecanismo de coalescência devido à captura das bolhas nas esteiras de outras teria um papel importante em escoamentos borbulhantes próximos à transição para o escoamento em golfadas, assim como em escoamentos com bolhas em tubulações de pequenos diâmetros e vazões muito baixas. No entanto, para vazões relativamente altas, as bolhas que são capturadas na esteiras são

facilmente removidas destas regiões pela turbulência da fase líquida, de forma que a contribuição deste mecanismo para a redução da área interfacial é mínima.

Dessa forma, HIBIKI e ISHII [2] consideraram que a coalescência ocorre somente devido às colisões randômicas, sendo este o único mecanismo do termo sumidouro da equação de área interfacial, enquanto que o mecanismo considerado para o termo fonte foram as quebras ocasionadas por impactos de vórtices turbulentos. Os resultados obtidos empregando a equação de transporte de área interfacial unidimensional com as modelagens propostas para os termos fonte e sumidouro apresentaram boa concordância com dados experimentais, com desvio relativo médio de 11,6%.

HIBIKI *et al.* [47] focaram na modelagem de escoamentos verticais adiabáticos com bolhas dispersas em tubulações com diâmetros relativamente pequenos, nas quais a razão entre os diâmetros das bolhas e o diâmetro da tubulação é relativamente alta e o movimento radial das bolhas é restrito pela presença das paredes da tubulação. Os autores mostraram que ao se utilizar os termos fontes propostos por HIBIKI e ISHII [2], em que o único mecanismo de coalescência considerado é o induzido por colisões randômicas entre as bolhas, a redução de área interfacial é desprezível. Por outro lado, observações experimentais mostram um decréscimo significativo na concentração de área interfacial medida, de forma que um novo mecanismo de coalescência deve ser introduzido.

HIBIKI *et al.* [47] propõem que o mecanismo dominante de coalescência seja o motivado pela captura de bolhas nas esteiras de outras, já que o movimento radial das bolhas é bastante restringido pelas paredes. HIBIKI *et al.* [47] também argumentam que, para baixas velocidades do líquido, a quebra das bolhas é desprezível devido à fraca turbulência. Assim, o único mecanismo considerado é o que representa a coalescência induzida por entradas nas esteiras, baseado no modelo de WU *et al.* [46].

ISHII *et al.* [48] publicaram um estudo com a avaliação do modelo unidimensional da equação de transporte de área interfacial com um grupo de bolhas, cujo termo fonte levava em consideração a quebra por impacto de vórtices turbulentos, a coalescência por colisões randômicas e a coalescência por entradas nas esteiras. Estes termos foram modelados utilizando os mecanismos propostos por WU *et al.* [46]. Os autores utilizaram dados experimentais de escoamentos no regime de bolhas dispersas em tubulações de três diferentes diâmetros, com escoamento ar-água vertical, para ajustar os coeficientes do modelo e assim avaliar sua preditibilidade.

A concordância obtida foi bastante razoável, com erros dentro da faixa de erros de medição. As maiores discordâncias foram encontradas na região de transição para o regime de golfadas, sugerindo que a formulação com dois grupos de bolhas seria necessária para a correta predição da transição entre regimes de escoamento.

KIM *et al.* [49] publicaram comparações entre os resultados obtidos com a equação de transporte de área interfacial com um grupo de bolhas, considerando a quebra por impacto de vórtices turbulentos, coalescência por colisões randômicas e coalescência por capturas nas esteiras, e dados obtidos por sensores duplos de condutividade no escoamento ar-água disperso sob pressão atmosférica desenvolvidos por KIM [50] em sua tese de doutorado. Os autores obtiveram boa concordância entre os dados experimentais e as análises utilizando o modelo de *drift-flux* acoplado à equação de transporte de área interfacial.

SUN *et al.* [51] focaram na análise de escoamentos no regime de bolhas dispersas em tubulações com diâmetros relativamente elevados, considerando que os estudos de WU *et al.* [46] em tubulações de diâmetros elevados foi bastante limitado. Assim, obtiveram dados experimentais em tubulações com diâmetros de 101,6 mm e os compararam com a equação de transporte de área interfacial com os termos fonte e sumidouro modelados conforme WU *et al.* [46], considerando a quebra por impacto de vórtices turbulentos e a coalescência por colisões randômicas e entradas nas esteiras. A concordância foi relativamente boa, com erros da ordem de 10%, aumentando com o aparecimento de bolhas no formato de balas, indicando mais uma vez a relevância da utilização da equação de transporte de área interfacial com dois grupos de bolhas para a região de transição entre regimes.

HIBIKI e ISHII [52] propuseram aprimorar a equação de transporte de área interfacial com um grupo de bolhas com os termos fonte e sumidouro modelados de acordo com HIBIKI e ISHII [2]. Os autores ponderam que as variáveis ajustáveis do termo fonte por quebra de bolhas por impacto de vórtices turbulentos e do termo sumidouro por coalescência de bolhas por colisões randômicas são funções das deformações das bolhas, da distribuição da velocidade das bolhas e do volume excluído, e que os erros propagados devido à incerteza destas variáveis são consideráveis. HIBIKI e ISHII [52] propuseram correlações para estas variáveis ajustáveis, dadas pelo produto da fração de vazio e da taxa de dissipação de energia por unidade de massa, já que o volume excluído é função da fração de vazio, a deformação das bolhas é função do número de Weber e a distribuição de velocidades é função da taxa de dissipação de energia e do diâmetro das bolhas. Os coeficientes dessas correlações são determinados através de dados experimentais.

Os resultados obtidos utilizando-se estas novas correlações para as variáveis ajustáveis reproduziram melhor as tendências para a concentração de área interfacial ao longo do escoamento do que os resultados obtidos considerando-se estas variáveis constantes, aumentando consideravelmente a acurácia da equação de transporte de área interfacial proposta por HIBIKI e ISHII [2].

HIBIKI *et al.* [40] propuseram um modelo de espessura da camada de bolhas para a formulação da equação de transporte de área interfacial com 1 grupo de bolhas para escoamentos subresfriados com ebulição, particionando o escoamento em duas regiões: uma região bifásica com ebulição, onde a fração de vazio é admitida uniforme e uma região monofásica só com líquido para levar em consideração a não-uniformidade na distribuição das fases. Os resultados foram comparados com dados experimentais e se mostraram úteis para estimar o perfil de fração de vazio e a camada com bolhas neste tipo de escoamento.

BAE *et al.* [53] estudaram escoamentos bifásico subresfriados com ebulição e propuseram o uso da equação de transporte de área interfacial com 1 grupo de bolhas com um termo fonte adicional para o desprendimento de bolhas, incluindo a modelagem do diâmetro com que a bolha se desprende e a frequência com que isso ocorre. Os resultados, quando comparados com dados experimentais, mostraram uma boa concordância, evidenciando que o termo fonte para nucleação nas paredes aquecidas aprimora a preditibilidade do modelo de transporte de área interfacial.

Com o interesse de projetar e operar de forma segura sistemas bifásicos para operarem em missões espaciais no futuro, VASAVADA *et al.* [54] publicaram um artigo com a avaliação do método de transporte de área interfacial com 1 grupo de bolhas para escoamentos bifásicos sob gravidade reduzida, utilizando os mecanismos para quebras e coalescências presentes em escoamentos bifásicos sob gravidade reduzida propostos pelo mesmo grupo em um artigo anterior VASAVADA *et al.* [55]. Os resultados obtidos numericamente mostraram boa concordância quando confrontados com dados experimentais.

3.1.2 Equação de transporte com dois grupos de bolhas

No segundo estágio de desenvolvimento do modelo de transporte de área interfacial, a transição entre escoamentos com bolhas dispersas e escoamentos no regime de golfadas foi o principal foco. Para o desenvolvimento dos modelos com dois grupos de bolhas é necessário que, além dos termos fonte e sumidouro provenientes de

quebras e coalescências entre bolhas do grupo 1, sejam também modeladas as interações entre bolhas do grupo 2 e os termos de acoplamento entre grupos, conforme a figura 3.2.

No total, é necessário modelar 8 combinações diferentes de interações entre

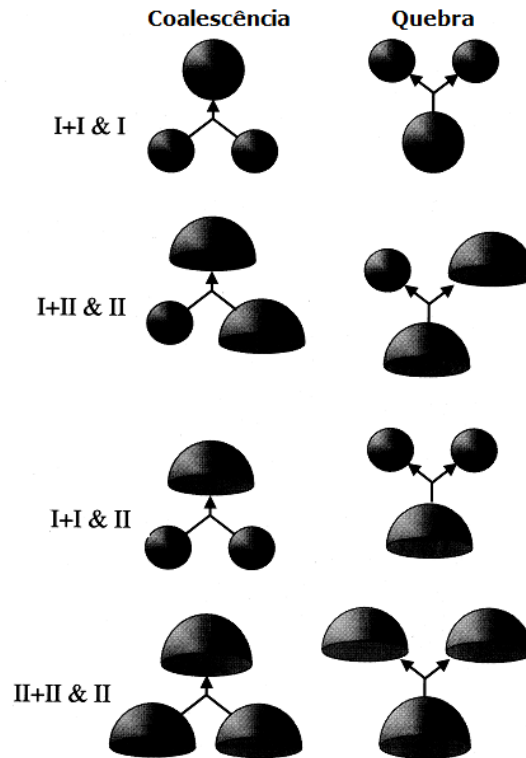


Figura 3.2: Possíveis interações entre dois grupos de bolhas - adaptado de HIBIKI e ISHII [56]

bolhas: coalescência de bolhas do grupo 1 com bolhas do grupo 1; quebra de bolhas do grupo 1 em bolhas do grupo 1; coalescência de uma bolha do grupo 1 e uma bolha do grupo 2 para gerar uma bolha do grupo 2; quebra de uma bolha do grupo 2 em uma bolha do grupo 1 e uma bolha do grupo 2; coalescência de bolhas do grupo 1 em uma bolha do grupo 2; quebra de uma bolha do grupo 2 em bolhas do grupo 1; coalescência de bolhas do grupo 2 em uma bolha do grupo 2 e quebra de bolhas do grupo 2 em bolhas do grupo 2.

HIBIKI e ISHII [56] desenvolveram a equação de transporte de área interfacial com dois grupos de bolhas para escoamentos adiabáticos em um duto com diâmetro moderado para capturar a transição entre o regime disperso e o regime intermitente, modelando os termos de acoplamento entre grupos. Três mecanismos de interação entre bolhas foram considerados: coalescência devido a colisões randômicas, coalescência devido à captura nas esteiras e a quebra devido ao impacto

de vórtices turbulentos. Os resultados obtidos com a formulação de dois grupos concordaram bem com a concentração de área interfacial medida experimentalmente com desvios relativos de 3,61%, demonstrando que a abordagem de dois grupos é bastante promissora para ser aplicada em escoamentos bifásicos.

FU e ISHII [57] publicaram um artigo com foco no desenvolvimento de modelos mecanísticos para as interações entre partículas para a modelagem dos termos fonte e sumidouro da equação de transporte interfacial com dois grupos, incluindo cinco mecanismos principais: cisalhamento de pequenas bolhas da extremidade de bolhas de formato de bala, coalescências devido à captura de bolhas em esteiras de outras bolhas, quebras devido ao impacto de vórtices turbulentos, coalescências devido a colisões randômicas provocadas pelo impacto de vórtices turbulentos e quebra de bolhas devido a instabilidades em sua superfície.

No mesmo volume da revista, os autores publicaram um segundo artigo com a avaliação da equação de transporte de área interfacial com dois grupos de bolhas utilizando os modelos propostos e compararam os resultados com dados experimentais [58]. Os resultados mostraram uma transição suave entre os regimes de escoamento disperso e de golfadas. FU e ISHII [58] também discutiram a generalidade do modelo de transporte de área interfacial e a sua capacidade de cobrir uma ampla faixa de regimes de escoamento, desde regime borbulhante disperso ao regime intermitente.

SUN *et al.* [59] publicaram um artigo com a modelagem dos mecanismos de interação entre bolhas na equação de transporte de área interfacial com 2 grupos para escoamentos ar-água confinados. Os mesmos cinco mecanismos principais utilizados por FU e ISHII [57] foram considerados. A avaliação dos modelos propostos foi publicada em um artigo subsequente [60], que mostrou que a concordância dos resultados obtidos com a solução da equação de transporte de área interfacial com 2 grupos de bolhas para um escoamento unidimensional e estacionário foi bastante razoável.

Em praticamente todos os trabalhos revisados, tanto os que utilizaram a equação de transporte de área interfacial com um grupo de bolhas quanto com dois grupos de bolhas, as constantes dos termos referentes a quebras e coalescências foram ajustadas utilizando dados experimentais, e seus valores diferem consideravelmente entre os trabalhos revisados.

3.2 Formulação da equação de transporte da concentração de área interfacial

3.2.1 A equação de transporte de número

A equação de balanço populacional pode ser muito detalhada para aplicações práticas, onde o foco principal se encontra no comportamento médio das partículas fluidas, de forma que trabalhar com a equação de transporte da densidade numérica de partículas de cada volume seria muito dispendioso.

Dessa forma, uma formulação mais macroscópica pode ser bastante útil. Para tal, integra-se a Equação 2.11 sobre o volume de todos os tamanhos de partículas, de $V_1 = V_{min}$ até $V_2 = V_{max}$:

$$\begin{aligned} \int_{V_1}^{V_2} \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{V_1}^{V_2} \nabla \cdot (f\mathbf{v}) dV + \int_{V_1}^{V_2} \frac{\partial}{\partial V} \left(f \frac{dV}{dt} \right) dV \\ = \int_{V_1}^{V_2} \sum_j S_j dV + \int_{V_1}^{V_2} S_{ph} dV \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde S_j representa a taxa líquida de variação na função de distribuição da densidade numérica de bolhas devido a quebra e coalescência e S_{ph} representa a taxa líquida de variação da função distribuição de bolhas devido a nucleação.

$n(\mathbf{x}, t)$ é a densidade numérica de partículas de todos os volumes, definida por:

$$n(\mathbf{x}, t) = \int_{V_1}^{V_2} f(V, \mathbf{x}, t) dV \quad (3.3)$$

Derivando-se n com relação ao tempo, pode-se reescrever o primeiro termo da Equação 3.2:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{d}{dt} \int_{V_1}^{V_2} f dV = \int_{V_1}^{V_2} \frac{\partial}{\partial t} f dV \quad (3.4)$$

Para o segundo termo da Equação 3.2, define-se a velocidade média local das partículas ponderada pelo número de partículas como:

$$\mathbf{v}_{pm}(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{\int_{V_1}^{V_2} f(V, \mathbf{x}, t) \mathbf{v}(V, \mathbf{x}, t) dV}{\int_{V_1}^{V_2} f(V, \mathbf{x}, t) dV} \quad (3.5)$$

Assim,

$$\nabla \cdot (n\mathbf{v}_{pm}) = \nabla \cdot \left(\int_{V_1}^{V_2} f\mathbf{v} dV \right) = \int_{V_1}^{V_2} \nabla \cdot (f\mathbf{v}) dV \quad (3.6)$$

Para reescrever o terceiro termo do lado esquerdo na Equação 3.2, o teorema fundamental do cálculo é utilizado. Admitindo-se que não há nenhuma partícula nos limites considerados para o volume das partículas, o termo é igualado a zero:

$$\int_{V_1}^{V_2} \frac{\partial}{\partial V} \left(f \frac{dV}{dt} \right) dV = f(V_2) \frac{dV_2}{dt} - f(V_1) \frac{dV_1}{dt} = 0 \quad (3.7)$$

Voltando à Equação 3.2, tem-se:

$$\int_{V_1}^{V_2} \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{V_1}^{V_2} \nabla \cdot (f \mathbf{v}) dV + \int_{V_1}^{V_2} \frac{\partial}{\partial V} \left(f \frac{dV}{dt} \right) dV = \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n \mathbf{v}_{pm}) \quad (3.8)$$

De forma que a equação de transporte para o número de partículas é:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n \mathbf{v}_{pm}) = \sum_j R_j + R_{ph} \quad (3.9)$$

onde R_j é a taxa líquida de nascimento de partículas devido à interações entre partículas e R_{ph} é a taxa líquida de nascimento de partículas devido à mudanças de fase:

$$R(\mathbf{x}, t) = \int_{V_1}^{V_2} S(V, \mathbf{x}, t) dV \quad (3.10)$$

3.2.2 Equação de transporte para o volume

A equação para transporte do volume de partículas (ou da fração de vazio) é obtida multiplicando-se a Equação 2.11 pelo volume da partícula e integrando-se sobre o volume de todos os tamanhos de partículas:

$$\begin{aligned} \int_{V_1}^{V_2} V \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{V_1}^{V_2} V \nabla \cdot (f \mathbf{v}) dV + \int_{V_1}^{V_2} V \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV \\ = \int_{V_1}^{V_2} V (\sum_j S_j + S_{ph}) dV \end{aligned} \quad (3.11)$$

Como t , V e \mathbf{x} são variáveis independentes:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_1}^{V_2} (fV) dV + \nabla \cdot \left[\int_{V_1}^{V_2} (fV \mathbf{v}) dV \right] + \int_{V_1}^{V_2} V \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV \\ = \int_{V_1}^{V_2} V (\sum_j S_j + S_{ph}) dV \end{aligned} \quad (3.12)$$

Define-se a fração da fase gasosa como:

$$\alpha_g(\mathbf{x}, t) \equiv \int_{V_1}^{V_2} V f(V, \mathbf{x}, t) dV \quad (3.13)$$

e a velocidade média volumétrica da fase dispersa como:

$$\mathbf{v}_g(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{\int_{V_1}^{V_2} V f(V, \mathbf{x}, t) \mathbf{v}(V, \mathbf{x}, t) dV}{\int_{V_1}^{V_2} V f(V, \mathbf{x}, t) dV} \quad (3.14)$$

Esta definição só é igual à velocidade média mássica da fase se a densidade da fase dispersa, ρ_g , for independente da coordenada V ou se a velocidade da partícula não depender de seu volume.

Logo:

$$\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) + \int_{V_1}^{V_2} V \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV = \int_{V_1}^{V_2} \left(\sum_j S_j V + S_{ph} V \right) dV \quad (3.15)$$

Como o volume é conservado nos processos de quebra e coalescência, tem-se que:

$$\int_{V_1}^{V_2} \sum_j S_j V dV = 0 \quad (3.16)$$

O segundo termo do lado direito da Equação 3.15 contabiliza o volume gerado por mudança de fase por nucleação, η_{ph} :

$$\eta_{ph} = \int_{V_1}^{V_2} S_{ph} V dV \quad (3.17)$$

3.2.3 Equação de conservação de massa

Para se chegar na equação de conservação de massa das partículas, multiplica-se a Equação 2.11 pela massa das partículas de volume V , $m(V)$, e integra-se sobre o volume de todos os tamanhos de partículas:

$$\begin{aligned} \int_{V_1}^{V_2} m(V) \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{V_1}^{V_2} m(V) \nabla \cdot (f \mathbf{v}) dV + \int_{V_1}^{V_2} m(V) \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV \\ = \sum_j \int_{V_1}^{V_2} m(V) S_j dV + \int_{V_1}^{V_2} m(V) S_{ph} dV \end{aligned} \quad (3.18)$$

Por definição, o termo fonte de massa devido a nucleação é dada por:

$$\int_{V_1}^{V_2} m(V) S_{ph} dV \equiv \rho_g \eta_{ph} \quad (3.19)$$

Como $m(V) = \rho_g V$ e ρ_g independe da coordenada interna V , tem-se que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{V_1}^{V_2} m(V) f dV \right] + \nabla \cdot \left[\int_{V_1}^{V_2} m(V) (f \mathbf{v}) dV \right] + \rho_g \int_{V_1}^{V_2} V \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV \\ = \rho_g \sum_j \int_{V_1}^{V_2} V S_j dV + \rho_g \eta_{ph} \end{aligned} \quad (3.20)$$

O primeiro termo da Equação 3.20 pode ser reescrito como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{V_1}^{V_2} m(V) f dV \right] = \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g \alpha_g) \quad (3.21)$$

Definindo a velocidade média das partículas ponderada pela massa como:

$$\mathbf{v}_{m,g} \equiv \frac{\int_{V_1}^{V_2} m(V) f \mathbf{v} dV}{\int_{V_1}^{V_2} m(V) f dV} = \frac{\rho_g \int_{V_1}^{V_2} V f \mathbf{v} dV}{\rho_g \int_{V_1}^{V_2} V f dV} \equiv \mathbf{v}_g \quad (3.22)$$

O segundo termo da Equação 3.20 é reescrito como:

$$\nabla \cdot \left[\int_{V_1}^{V_2} m(V) (f \mathbf{v}) dV \right] \equiv \nabla \cdot [\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_{m,g}] = \nabla \cdot [\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g] \quad (3.23)$$

Pela conservação de volume (Equação (3.16)), o termo fonte de massa devido a quebra e coalescência é zero:

$$\rho_g \sum_j \int_{V_1}^{V_2} V S_j dV = 0 \quad (3.24)$$

Assim:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_g \alpha_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) + \rho_g \int_{V_1}^{V_2} V \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV = \rho_g \eta_{ph} \quad (3.25)$$

A Equação (3.25) pode ser escrita em sua forma mais usual:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_g \alpha_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) = \underbrace{\rho_g \left[- \int_{V_1}^{V_2} V \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV + \eta_{ph} \right]}_{\equiv \Gamma_g} \quad (3.26)$$

onde Γ_g é o ganho de massa da fase gasosa por unidade de volume da mistura. Descontando o ganho por nucleação, tem-se:

$$-\rho_g \int_{V_1}^{V_2} V \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV = \Gamma_g - \rho_g \eta_{ph} \quad (3.27)$$

que é o ganho de massa que inclui a massa transportada pela interface. Este ganho de massa por unidade da fase gasosa seria dado por:

$$-\frac{\rho_g}{\alpha_g} \int_{V_1}^{V_2} V \frac{\partial}{\partial V} (f\dot{V}) dV = \frac{1}{\alpha_g} (\Gamma_g - \rho_g \eta_{ph}) \quad (3.28)$$

E o ganho similar para uma única partícula seria:

$$\frac{1}{V} \frac{dm(V)}{dt} = \frac{1}{V} \frac{d(\rho_g V)}{dt} \quad (3.29)$$

Estas quantidades podem ser igualadas caso o ganho de massa de uma única partícula não varie com o volume da partícula. Assumindo que não ocorra transferência de massa para a bolha, tem-se que:

$$\frac{1}{\rho_g V} \frac{d(\rho_g V)}{dt} = \frac{1}{\rho_g} \frac{d\rho_g}{dt} + \frac{1}{V} \frac{dV}{dt} \quad (3.30)$$

Assumindo que o gás é ideal:

$$\rho_g = \frac{p\bar{M}}{RT} \quad (3.31)$$

e

$$\frac{d\rho_g}{dt} = \frac{\bar{M}}{R} \frac{d\left(\frac{p}{T}\right)}{dt} \quad (3.32)$$

Então,

$$\frac{1}{\rho_g} \frac{d\rho_g}{dt} = \frac{1}{\frac{p}{T}} \frac{d\left(\frac{p}{T}\right)}{dt} \quad (3.33)$$

que é independente do volume.

Da mesma forma,

$$V = \frac{nRT}{p} \quad (3.34)$$

e

$$\frac{dV}{dt} = nR \frac{d\left(\frac{p}{T}\right)}{dt} \quad (3.35)$$

Então,

$$\frac{\frac{dV}{dt}}{V} = \frac{1}{\frac{T}{p}} \frac{d\left(\frac{p}{T}\right)}{dt} \quad (3.36)$$

que também é independente do volume. Assim, a hipótese anterior é válida e a igualdade pode ser aplicada, de forma que:

$$\frac{1}{V} \frac{d(\rho_g V)}{dt} = \frac{1}{\alpha_g} (\Gamma_g - \eta_{ph} \rho_g) \quad (3.37)$$

Assim, tem-se que:

$$\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = \frac{1}{\rho_g} \left(\frac{\Gamma_g - \eta_{ph} \rho_g}{\alpha_g} - \frac{d\rho_g}{dt} \right) \quad (3.38)$$

Retornando à equação de transporte da fração da fase gasosa (3.15) e integrando por partes o terceiro termo do lado esquerdo da Equação 3.15, tem-se:

$$\int_{V_1}^{V_2} V \frac{\partial}{\partial V} (f\dot{V}) dV = \left[V(f\dot{V}) \right]_{V_1}^{V_2} - \int_{V_1}^{V_2} f\dot{V} dV \quad (3.39)$$

Como, por hipótese, não há transferência de massa, o fluxo em V_1 e em V_2 também é nulo. Multiplicando e dividindo por V :

$$- \int_{V_1}^{V_2} f\dot{V} dV = - \int_{V_1}^{V_2} f \frac{\dot{V}}{V} V dV = - \frac{\dot{V}}{V} \int_{V_1}^{V_2} fV dV = - \frac{\dot{V}}{V} \alpha_g \quad (3.40)$$

Logo:

$$\int_{V_1}^{V_2} V \frac{\partial}{\partial V} (f\dot{V}) dV = - \left(\frac{\dot{V}}{V} \right) \alpha_g \quad (3.41)$$

Dessa forma, retornando à Equação 3.15, fica-se então com a forma final da equação de transporte da fração de gás:

$$\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) - \frac{\alpha_g}{\rho_g} \left(\frac{\Gamma_g - \eta_{ph} \rho_g}{\alpha_g} - \frac{d\rho_g}{dt} \right) = \eta_{ph} \quad (3.42)$$

Como a derivada de ρ_g é substantiva, a equação anterior pode ser escrita como:

$$\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) - \frac{\Gamma_g}{\rho_g} + \frac{\alpha_g}{\rho_g} \left(\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla \rho_g \right) = 0 \quad (3.43)$$

ou, multiplicando por ρ_g :

$$\frac{\partial (\alpha_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) = \Gamma_g \quad (3.44)$$

3.2.4 Equação de transporte de área interfacial

A equação de transporte da concentração de área interfacial pode ser obtida seguindo a mesma abordagem utilizada nas formulações anteriores. Multiplicando a Equação 2.11 pela área superficial das partículas de volume V , $A_I(V)$, e integrando sobre todos os volumes de partículas:

$$\begin{aligned} \int_{V_1}^{V_2} A_I(V) \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{V_1}^{V_2} A_I(V) \nabla \cdot (f \mathbf{v}) dV + \int_{V_1}^{V_2} A_I(V) \frac{\partial}{\partial V} \left(f \frac{dV}{dt} \right) dV \\ = \int_{V_1}^{V_2} A_I \left(\sum_j S_j + S_{ph} \right) dV \end{aligned} \quad (3.45)$$

Como t, V, \mathbf{x} são variáveis independentes:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_1}^{V_2} (f A_I) dV + \nabla \cdot \left[\int_{V_1}^{V_2} (f A_I \mathbf{v}) dV \right] + \int_{V_1}^{V_2} A_I(V) \frac{\partial}{\partial V} \left(f \frac{dV}{dt} \right) dV \\ = \int_{V_1}^{V_2} A_I \left(\sum_j S_j + S_{ph} \right) dV \end{aligned} \quad (3.46)$$

Definindo a concentração de área interfacial de partículas de todos os volumes como:

$$a_I(\mathbf{x}, t) = \int_{V_1}^{V_2} f(V, \mathbf{x}, t) A_I(V) dV \quad (3.47)$$

e a velocidade média das partículas ponderada pela área como:

$$\mathbf{v}_I(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{\int_{V_1}^{V_2} f(V, \mathbf{x}, t) A_I(V) \mathbf{v}(V, \mathbf{x}, t) dV}{\int_{V_1}^{V_2} f(V, \mathbf{x}, t) A_I(V) dV} \quad (3.48)$$

tem-se:

$$\frac{\partial a_I}{\partial t} + \nabla \cdot (a_I \mathbf{v}_I) + \int_{V_1}^{V_2} A_I(V) \frac{\partial}{\partial V} \left(f \frac{dV}{dt} \right) dV = \int_{V_1}^{V_2} A_I \left(\sum_j S_j + S_{ph} \right) dV \quad (3.49)$$

Integrando-se o terceiro termo da Equação 3.49 por partes:

$$\int_{V_1}^{V_2} A_I(V) \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV = \left[A_I f \dot{V} \right]_{V_1}^{V_2} - \int_{A_1}^{A_2} f \dot{V} dA_I \quad (3.50)$$

O primeiro termo do lado direito da Equação 3.50 se anula pela condição de compatibilidade ao se considerar que não há transferência de massa (fluxo de partículas é nulo nos limites do intervalo). O segundo termo é simplificado pela hipótese de que a variação de volume é independente do volume das bolhas, de tal forma que:

$$\int_{V_1}^{V_2} A_I(V) \frac{\partial}{\partial V} (f \dot{V}) dV = -\frac{\dot{V}}{V} \int_{A_1}^{A_2} f V dA_I \quad (3.51)$$

Logo,

$$\frac{\partial a_I}{\partial t} + \nabla \cdot (a_I \mathbf{v}_I) - \frac{\dot{V}}{V} \int_{A_1}^{A_2} f V dA_I = \int_{V_1}^{V_2} A_I \left(\sum_j S_j + S_{ph} \right) dV \quad (3.52)$$

Para desaparecer com o termo $\frac{\dot{V}}{V} \int_{V_1}^{V_2} fV dA_I$ da Equação 3.52, define-se um diâmetro equivalente ao volume, D_e , e um diâmetro equivalente à área, D_s , como:

$$V \equiv \frac{\pi}{6} D_e^3 \quad (3.53)$$

$$A_I \equiv \pi D_s^2 \quad (3.54)$$

A razão $\frac{D_s}{D_e}$ é considerada constante para possibilitar a simplificação da equação. Esta razão é um fator de forma, podendo ser considerado constante para partículas com formas similares. Esta aproximação é razoável para bolhas esféricas e bolhas em formato de capacete. No entanto não é apropriada para bolhas no regime intermitente. Assim:

$$D_s = k D_e \quad (3.55)$$

$$dA_I = 2\pi D_s dD_s \quad (3.56)$$

$$dV = \frac{\pi}{2k^3} D_s^2 dD_s \quad (3.57)$$

Então:

$$\int_{A_1}^{A_2} fV dA_I = \frac{2}{3} a_I \quad (3.58)$$

Ou,

$$-\frac{\dot{V}}{V} \int_{A_1}^{A_2} fV dA_I = -\frac{2}{3} a_I \frac{1}{\alpha_g} \left(\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) - \eta_{ph} \right) \quad (3.59)$$

Combinando estes termos com a Equação 3.49 e a Equação 3.52, a equação de transporte de área interfacial pode ser obtida como:

$$\frac{\partial a_I}{\partial t} + \nabla \cdot (a_I \mathbf{v}_I) - \frac{2}{3} a_I \frac{1}{\alpha_g} \left(\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) - \eta_{ph} \right) = \int_{V_1}^{V_2} \left(\sum_j S_j + S_{ph} \right) A_I dV \quad (3.60)$$

Para o fechamento da equação de transporte de área interfacial é preciso especificar relações constitutivas para os termos de surgimento e sumidouro de área interfacial. Para tal definimos a taxa líquida de variação de densidade de área interfacial como:

$$\int_{V_1}^{V_2} S_j A_I dV = \phi_j \quad (3.61)$$

ϕ_j pode ser expressa em termos da variação de área superficial de uma partícula fluida após um determinado processo de interação como:

$$\phi_j = R_j \Delta A_I \quad (3.62)$$

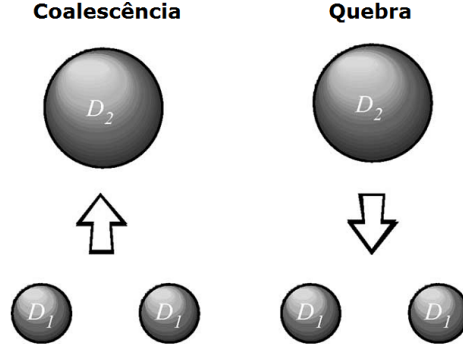


Figura 3.3: Ilustração do processo de quebra e coalescência - adaptado de (KIM *et al.* [61])

onde R_j é modelado para cada mecanismo de interação e ΔA_I depende do mecanismo de interação.

Para especificar ΔA_I , KIM *et al.* [61] consideram um processo binário de quebra e coalescência entre partículas de mesmo tamanho conforme a Figura 3.3.

Como o volume total deve ser conservado, temos que:

$$V_2 = 2V_1 \quad (3.63)$$

Logo,

$$\frac{4}{3}\pi \frac{D_2^3}{8} = 2 \frac{4}{3}\pi \frac{D_1^3}{8} \quad (3.64)$$

Ou,

$$D_2 = 2^{1/3}D_1 \quad (3.65)$$

onde o subscrito 1 e 2 se referem às partículas de menor e maior volume, respectivamente.

Assumindo que o processo de interação é um processo binário e as partículas esféricas, a mudança de área superficial após cada processo de interação pode ser obtida. Para o processo de coalescência:

$$2A_1 \rightarrow A_2$$

$$\Delta A = A_2 - 2A_1 = \frac{\pi}{4}4^{1/3}D_1^2 - 2\frac{\pi}{4}D_1^2 = 1,5874A_1 - 2A_1 = -0,413A_1 \quad (3.66)$$

Para o processo de quebra:

$$A_2 \rightarrow 2A_1$$

$$\Delta A = 2A_1 - A_2 = 2\frac{\pi}{4}d_1^2 - \frac{\pi}{4}D_2^2 = 2\frac{\pi}{4}\frac{D_2^2}{2^{2/3}} - \frac{\pi}{4}D_2^2 = 0,2599A_2 \quad (3.67)$$

onde o sinal de menos ou mais é usado para indicar redução ou ganho de área superficial após o processo de interação, respectivamente.

KIM [50] reescreve a densidade numérica de partículas, dada na Equação 3.3, através de a_I e α_g , sendo que:

$$a_I = nA_I \quad (3.68)$$

$$\alpha_g = nV \quad (3.69)$$

$$n = \frac{\alpha_g}{V} = \frac{6}{\pi D_e^3} \alpha_g \quad (3.70)$$

Essas relações são válidas para distribuições monodispersas. Multiplicando e dividindo por $6^2\alpha_g^2a_I^3$, a densidade numérica de partículas pode ser escrita como função da concentração de área interfacial e da fração de vazio como:

$$n = \frac{6^3\alpha_g^3}{a_I^3} \frac{a_I^3}{6^2\pi D_e^3\alpha_g^2} = \frac{D_{SM}^3}{D_e^3} \frac{1}{36\pi} \frac{a_I^3}{\alpha_g^2} = \Psi \frac{a_I^3}{\alpha_g^2} \quad (3.71)$$

onde o diâmetro médio de Sauter é dado por:

$$D_{SM} = \frac{6\alpha_g}{a_I} \quad (3.72)$$

e Ψ é um fator de forma, definido por:

$$\Psi = \frac{1}{36\pi} \left(\frac{D_{SM}^3}{D_e^3} \right) \quad (3.73)$$

Retornando a Equação 3.62, pode-se escrever:

$$\phi_j = R_j \Delta A_I = R_j K A_I = R_j K \frac{a_I}{n} = R_j \frac{K}{\Psi} \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 \quad (3.74)$$

A variação de área interfacial após os processos de interação entre as partículas é dependente do processo, sendo diferente para as quebras e coalescências. No entanto, KIM [50] faz $K = \frac{1}{3}$, provavelmente uma média entre os valores obtidos anteriormente. Esta aproximação não é muito coerente e pode ser fonte de discordâncias entre as simulações e dados experimentais.

Similarmente para o processo de nucleação:

$$\phi_{ph} = R_{ph}\Delta A_I = R_{ph}(A_{I_c} - 0) = R_{ph}\pi D_{bc}^2 \quad (3.75)$$

onde A_{I_c} é a área interfacial gerada no processo de nucleação, dependente de D_{bc} , diâmetro crítico da bolha, que pode ser determinado dependente do processo de nucleação.

Utilizando as relações constitutivas dadas acima e substituindo-as na Equação 3.50, obtém-se a seguinte equação para o transporte de área interfacial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_I}{\partial t} + \nabla \cdot (a_I \mathbf{v}_I) = & \frac{2}{3} \left(\frac{a_I}{\alpha_g} \right) \left(\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) - \eta_{ph} \right) \\ & + \frac{1}{3\Psi} \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 \sum_j R_j + \pi D_{bc}^2 R_{ph} \end{aligned} \quad (3.76)$$

onde o lado esquerdo representa a variação temporal e a convecção da concentração de área interfacial. Do lado direito da Equação 3.62 estão as taxas de variação da concentração de área interfacial devido às variações nos volumes das partículas causadas por mudanças na pressão, interações entre partículas e nucleação, respectivamente.

R_j deve ser modelado independentemente, baseado nos mecanismos de interação das partículas. Assim, modelos mecânicos para as taxas de aparecimento e sumidouro de partículas nos processos de quebra e coalescência, e nos fenômenos de nucleação e condensação devem ser estabelecidos como relações constitutivas para a solução das equações de transporte.

3.2.5 Equação de transporte de área interfacial com 1 grupo

Quando os fenômenos de transporte das partículas de interesse não variam significativamente para um sistema bifásico, e as partículas mantêm formato similar após as interações entre as partículas, pode-se modelar o fenômeno de transporte de área interfacial através de uma única equação de transporte.

Nesta dissertação será considerado um sistema bifásico de bolhas dispersas em um meio contínuo, em que todas as bolhas podem ser caracterizadas como um único grupo. Assume-se que as bolhas são esféricas e sujeitas a arrastes similares.

Assim, é possível afirmar que $D_{Sm} \approx D_e$ e portanto,

$$\Psi \approx \frac{1}{36\pi} = 8,85 \times 10^{-3} \quad (3.77)$$

Desprezando-se a nucleação, η_{ph} , a equação final de transporte de área interfacial para 1 grupo de bolhas é dada por:

$$\frac{\partial a_I}{\partial t} + \nabla \cdot (a_I \mathbf{v}_I) = \frac{2}{3} \left(\frac{a_I}{\alpha_g} \right) \left(\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) \right) + \sum \phi_j \quad (3.78)$$

Esta equação, em sua forma unidimensional, será utilizada neste trabalho para avaliação da sua capacidade de modelar o transporte de área interfacial frente ao modelo de balanço populacional com os mesmos mecanismos para quebra e coalescência, apresentados no Capítulo 4.

Capítulo 4

Modelagem dos mecanismos de interação entre bolhas

4.1 Mecanismos de quebra e coalescência

Como não faz parte do escopo desta dissertação avaliar os mecanismos de quebra e coalescência existentes, apenas uma breve revisão sobre a modelagem de quebra e coalescência será apresentada.

4.1.1 Modelagem da quebra

LIAO e LUCAS [62] sugerem a divisão dos mecanismos de quebra de partículas fluidas em quatro categorias distintas: (1) flutuações turbulentas e colisões, (2) cisalhamento viscoso, (3) erosão por cisalhamento e (4) instabilidades na interface.

Quebra devido a flutuações turbulentas e colisões

A partícula fluida deforma-se devido às flutuações turbulentas no líquido que a rodeia ou devido a colisões com vórtices turbulentos. Quando a amplitude da deformação é próxima da necessária para tornar a superfície da partícula instável, a mesma se deforma em uma direção, formando um "pescoço" que fica cada vez mais estreito e por fim se fragmenta em duas ou mais partículas filhas.

Diversos critérios para a quebra são propostos na literatura. LIAO e LUCAS [62] propuseram classificá-los em cinco diferentes possibilidades:

1. A energia cinética turbulenta da partícula é maior que um dado valor crítico;
2. As flutuações de velocidade ao redor da superfície da partícula são maiores que um valor crítico;

3. A energia cinética dos vórtices que colidem é maior que um valor crítico;
4. A força inercial do vórtice que colide é maior que as forças interfaciais da menor partícula filha formada;
5. Combinação dos dois últimos critérios.

Quebra devido ao cisalhamento viscoso

Forças de cisalhamento viscoso na fase contínua provocam um gradiente de velocidade ao redor da interface, levando à deformação da partícula fluida, que pode levar à quebra. O mecanismo de quebra pode ser proposto como um balanço entre as tensões viscosas externas e a força de tensão superficial, em geral expresso em termos do número capilar adimensional. Quando este número excede um valor crítico, as partículas não conseguem manter sua forma e rompem em duas ou mais partículas.

Erosão por cisalhamento

Este mecanismo de quebra é caracterizado por um número de pequenas partículas sendo arrancadas de uma partícula de maior tamanho. O processo também é conhecido como quebra por erosão.

No caso de escoamentos altamente viscosos, o desprendimento destas pequenas partículas é determinado pelo balanço entre a força de cisalhamento viscoso e a tensão superficial nas "saias" destas partículas maiores. Quando a velocidade é alta o suficiente, tais saias se tornam instáveis e ocorre o desprendimento de um grande número de bolhas (LIAO e LUCAS [62]). Para escoamentos gás-líquido, entretanto, como a ação das forças viscosas sobre a interface é desprezível, o processo de cisalhamento é causado pelo escoamento do gás no interior da bolha com formato de bala (FU e ISHII [57]).

Quebra devido a instabilidades na superfície

Mesmo em casos em que não há escoamento entre a fase contínua e a dispersa, a quebra pode ser causada por instabilidades na superfície, como é o caso da instabilidade de Rayleigh-Taylor.

Diversos pesquisadores dedicaram-se à análise e à modelagem da quebra por cada um dos quatro mecanismos descritos acima. Dessa forma, um grande número de modelos para a frequência de quebra e distribuição das partículas filhas geradas foram propostos. A figura 4.1 apresenta alguns destes modelos para a frequência de quebra e sua classificação dentre as quatro categorias propostas.

Não faz parte do escopo deste trabalho avaliar os modelos existentes para os mecanismos de quebra. Uma excelente revisão e análise dos modelos de quebra existentes pode ser encontrado em ARAUJO [14] e ARAUJO [32].

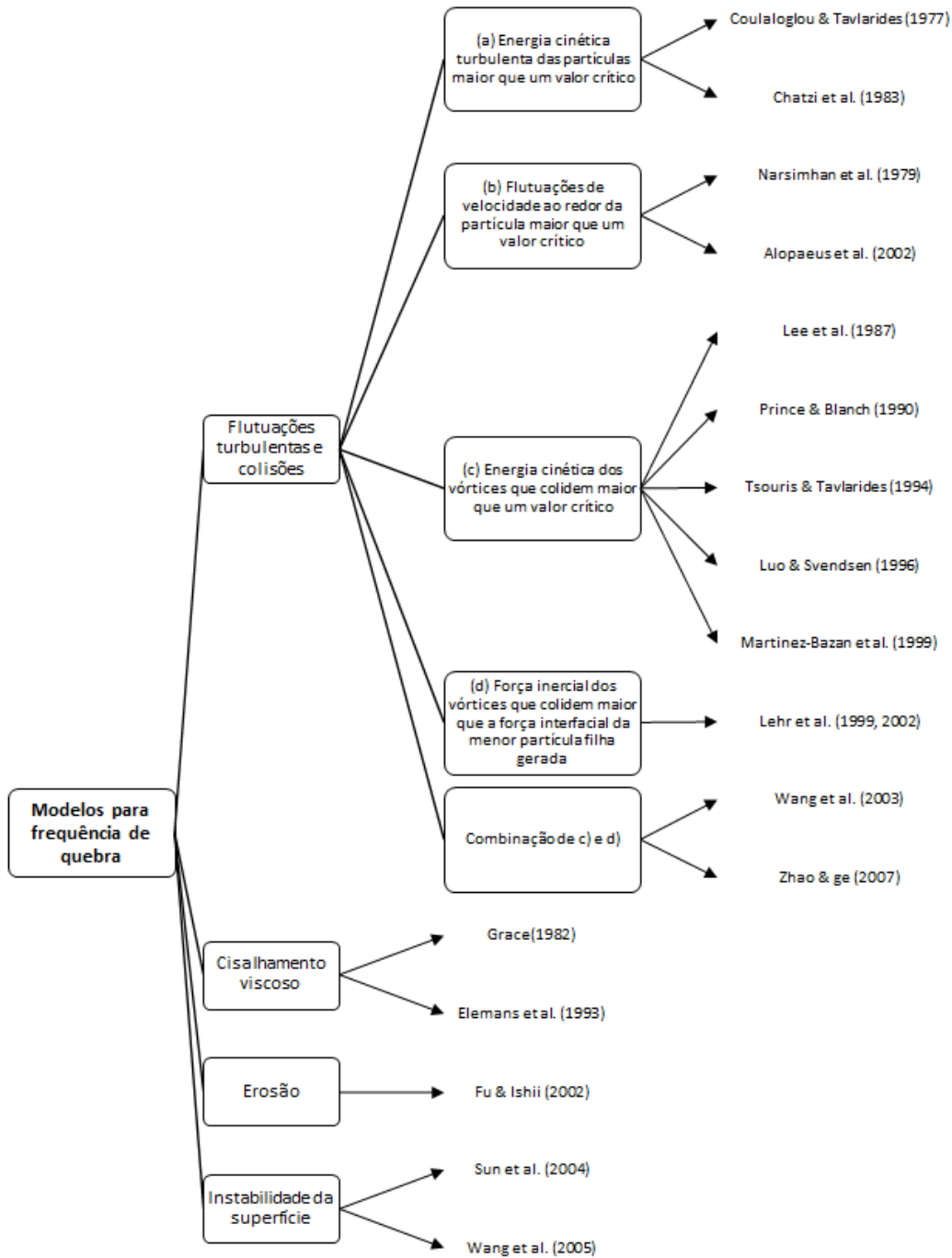


Figura 4.1: Classificação dos modelos de quebra - adaptado de LIAO e LUCAS [62]

4.1.2 Modelos de coalescência

Comparado com a quebra, a coalescência é considerada mais complexa (CHESTERS [63]), pois envolve não só interações entre a partícula e o meio que a rodeia, mas também interações entre as partículas que se encontram.

Existem três teorias principais para o processo de coalescência. A mais popular é o modelo de drenagem de filme. Após a colisão, as duas partículas fluidas são mantidas como partículas individuais por um filme de líquido aprisionado entre elas. As forças atrativas entre elas promovem a drenagem do filme até que o mesmo colapse, permitindo que a coalescência ocorra (SHINNAR e CHURCH [64]).

Assume-se que a coalescência ocorre em três etapas: primeiro há a colisão entre duas partículas que são empurradas uma contra a outra. Em seguida, o filme formado entre as duas partículas é drenado até que atinja uma espessura crítica na qual as forças moleculares atrativas passam a dominar, levando ao terceiro estágio do mecanismo, que é a ruptura das bolhas e sua coalescência (COULALOGLOU e TAVLARIDES [65], PRINCE e BLANCH [66], CHESTERS [63]). Como a duração da colisão é finita, a coalescência ocorre se o tempo de contato for suficiente para que a drenagem do filme chegue à espessura crítica para ruptura.

Por outro lado, HOWARTH [67], que focou no estudo de gotas, pondera que a força de atração entre duas interfaces em colisão, em geral de natureza molecular, é muito mais fraca que as forças turbulentas, argumentando que a ocorrência ou não da coalescência depende do impacto das colisões. Assim, quando a velocidade de aproximação das partículas é maior que um certo valor, a coalescência ocorre.

LEHR e ET AL. [68], por outro lado, estudaram bolhas e criaram o modelo de velocidade crítica de aproximação, que é um modelo empírico baseado em observações experimentais de que mesmo aproximações entre bolhas com baixas velocidades podem levar à coalescência, enquanto que colisões em alta velocidade não levam à coalescência das bolhas.

Qualquer que seja a teoria utilizada para o processo de coalescência, a colisão entre partículas ocorre devido ao movimento relativo existente entre elas, que pode ocorrer devido a diversos mecanismos. LIAO e LUCAS [69] classificam tais mecanismos em cinco classes:

1. induzido por flutuações turbulentas da fase contínua;
2. induzido por gradientes de velocidade do escoamento;

3. devido ao empuxo ou outras forças de corpo;
4. devido à captura de partículas em um vórtice;
5. devido à interações nas esteiras ou trajetórias helicoidais/zigzag.

Como nem todas as colisões levam à coalescência, o conceito de eficiência de uma colisão é introduzido. Assim, a frequência de coalescência é modelada através do produto da frequência de coalescência e da eficiência da colisão. Os principais modelos para a coalescência são apresentados na Figura 4.2.

Não faz parte do escopo deste trabalho avaliar os modelos de coalescência. Novamente, os trabalhos de ARAUJO [14] e ARAUJO [32] são uma excelente referência.

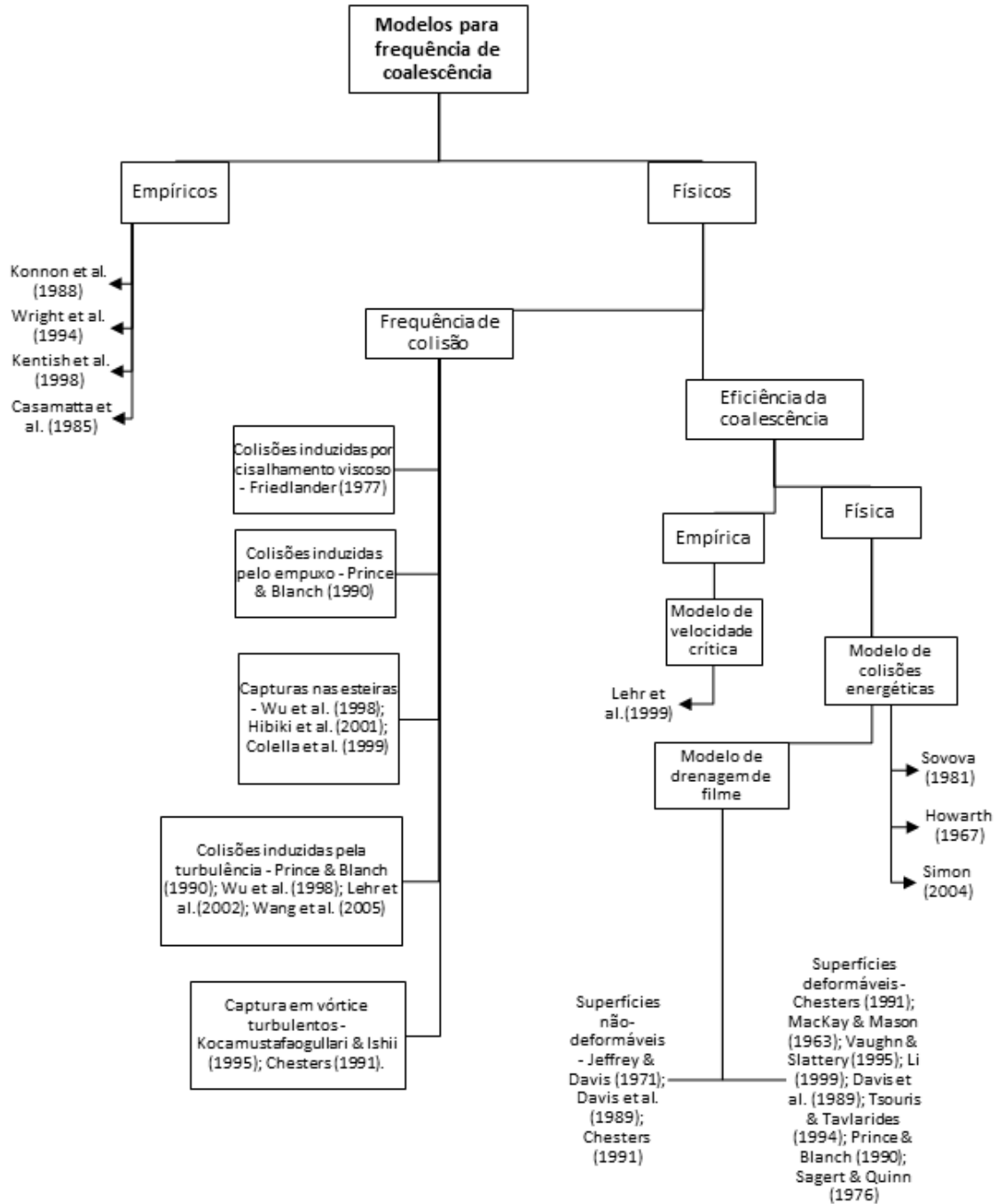


Figura 4.2: Classificação dos modelos de coalescência - adaptado de LIAO e LUCAS [69]

4.2 Mecanismos adotados neste trabalho

Como no presente estudo foca-se na comparação entre dois diferentes modelos para a área interfacial, não sendo parte do trabalho avaliar os mecanismos de quebra e coalescência, somente três mecanismos de interação entre bolhas são adotados. São eles: (1) quebra pelo impacto de vórtices turbulentos; (2) coalescência induzida por

colisões randômicas; (3) coalescência induzida pela captura de uma bolha na esteira de outra.

A escolha destes mecanismos se deve ao fato de terem sido utilizados no trabalho cujos modelo e dados experimentais serão utilizados para comparação.

Esta seção tem o objetivo de apresentar os modelos que serão utilizados tanto na equação de transporte de área interfacial quanto na equação de balanço populacional.

4.2.1 Quebras induzidas pelo impacto de vórtices turbulentos

O modelo utilizado para modelagem da quebra nesta dissertação é baseado no modelo fenomenológico proposto por COULALOGLOU e TAVLARIDES [65], que é fundamentado na natureza turbulenta da dispersão. A premissa básica adotada por este modelo é de que uma bolha que se deforma irá quebrar caso a energia cinética transmitida para a bolha por vórtices turbulentos exceder a energia superficial desta bolha.

A frequência de quebra

A frequência de quebra de uma bolha de volume V é dada pelo produto do inverso do tempo de quebra pela fração das bolhas que quebram:

$$b(V) = \left(\frac{1}{\text{tempo de quebra}} \right) (\text{fração das bolhas que quebram}) \quad (4.1)$$

A quebra binária devido ao impacto de vórtices turbulentos é resultado da força inercial dos vórtices turbulentos do meio contínuo, F_t , enquanto que a força que tenta inibir esta quebra é a força de tensão superficial, F_σ . Quando a força inercial dos vórtices que colidem com a bolha supera a força de tensão superficial que age na interface das bolhas, a bolha se quebra.

Na modelagem deste fenômeno assume-se que a quebra é binária, ou seja, a quebra de uma bolha resulta na formação de duas novas bolhas idênticas. Para que duas bolhas filhas sejam separadas por um comprimento característico D igual ao diâmetro da bolha, D_b , em um intervalo de tempo igual a t_b , faz-se um simples balanço de quantidade de movimento:

$$F_t - F_\sigma \propto \frac{\rho_l D_b^3 D_b}{t_b^2} \quad (4.2)$$

onde F_t é a força inercial do vórtice turbulento e F_σ é a força de tensão superficial de uma bolha de diâmetro D_b .

Para o cálculo da força inercial do vórtice turbulento, faz-se mais uma vez um balanço de forças, onde a massa utilizada é a referente a um vórtice de tamanho comparável à bolha. Assim:

$$F_t \propto \rho_l D_b^2 u_t^2 \quad (4.3)$$

em que u_t é a flutuação turbulenta da velocidade entre dois pontos separados por uma distância D_b , o que implica que somente vórtices com tamanhos equivalentes ao tamanho da bolha podem levar à quebra das bolhas. Supõe-se que a inércia das bolhas é dominada pela força de massa virtual devido à elevada razão entre as densidades do líquido e do gás. Assim, a massa específica empregada nas equações 4.2 e 4.3 é a massa específica do líquido, ρ_l .

A força de tensão superficial é dada por:

$$F_\sigma \propto \sigma D_b \quad (4.4)$$

Dessa forma, substituindo as equações 4.3 e 4.4 na equação 4.2 é possível chegar no tempo médio de quebra das bolhas:

$$t_b \propto \frac{D_b}{u_t} (1 - We^{-1})^{\frac{1}{2}} \quad (4.5)$$

onde adota-se o número adimensional de Weber, definido como $We \equiv \frac{\rho_l u_t^2 D_b}{\sigma}$.

Existe, entretanto, um número de Weber crítico, We_{crit} , onde as forças coesivas e de ruptura se equalizam, abaixo do qual a quebra devido ao impacto de vórtices turbulentos não ocorre. Assim, a frequência de quebra é dada por:

$$b(V) \propto \frac{1}{t_b} \approx \frac{u_t}{D_b} \left[\max \left(1 - \frac{We_{crit}}{We}, 0 \right) \right]^{1/2} \quad (4.6)$$

Desse modo, em condições em que as vazões de líquido e de gás são baixas, por exemplo, não ocorrerá quebra de bolhas devido ao impacto de vórtices turbulentos, já que $We < We_{crit}$. Por outro lado, nos casos em que $We > We_{crit}$, a frequência de quebra aumenta com o aumento de We . Os valores reportados na literatura para We_{crit} variam bastante. PRINCE e BLANCH [66] sugerem $We_{crit} = 2,3$ em um sistema ar-água.

Para finalizar o modelo é necessário incluir a eficiência da quebra, já que nem todas as bolhas atingidas por vórtices turbulentos quebram. Assume-se que a fração das bolhas que quebram é proporcional à fração dos vórtices turbulentos com energia cinética turbulenta superior à energia superficial das bolhas e que a distribuição de energia cinética das bolhas é a mesma dos turbilhões (COULALOGLOU e TAVLARIDES [65]).

COULALOGLOU e TAVLARIDES [65] assumem uma distribuição exponencial para a média quadrática das flutuações de velocidade e, portanto, para a energia cinética dos vórtices. A fração de vórtices com energia suficiente para a ruptura das bolhas é dada então pela fração de vórtices com velocidades superiores à velocidade crítica:

$$\eta \propto \exp\left(-\frac{u_{t,crit}^2}{u_t^2}\right) \quad (4.7)$$

em que $u_{t,crit}$ é a velocidade turbulenta crítica obtida de We_{crit} e u_t é a velocidade turbulenta de um vórtice de tamanho D_b .

Reescrevendo-se a equação 4.7 em termos de número de Weber e aplicando esta eficiência à equação 4.5, chega-se à forma final para a frequência de quebra de bolhas de volume V devido ao impacto de vórtices turbulentos:

$$b(V) = C_B \left(\frac{u_t}{D_b}\right) \exp\left(-\frac{We_{crit}}{We}\right) \left[\max\left(1 - \frac{We_{crit}}{We}, 0\right)\right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.8)$$

em que C_B é um parâmetro ajustável, obtido experimentalmente.

4.2.2 Coalescência devido à colisões randômicas

Para modelagem do mecanismo de coalescência devido a colisões randômicas assume-se que as colisões são binárias e que as bolhas que interagem são vizinhas e apresentam aproximadamente o mesmo tamanho. Essa hipótese é justificada pelo fato de que interações entre longas distâncias são provocadas por vórtices grandes que transportam grupos de bolhas sem que haja movimento relativo significativo entre elas (PRINCE e BLANCH [66]; COULALOGLOU e TAVLARIDES [65]).

Conforme representado na Figura 4.3, o intervalo médio para a colisão entre duas bolhas esféricas vizinhas é definido por:

$$t_{CT} = \frac{L_{CT}}{u_t} \quad (4.9)$$

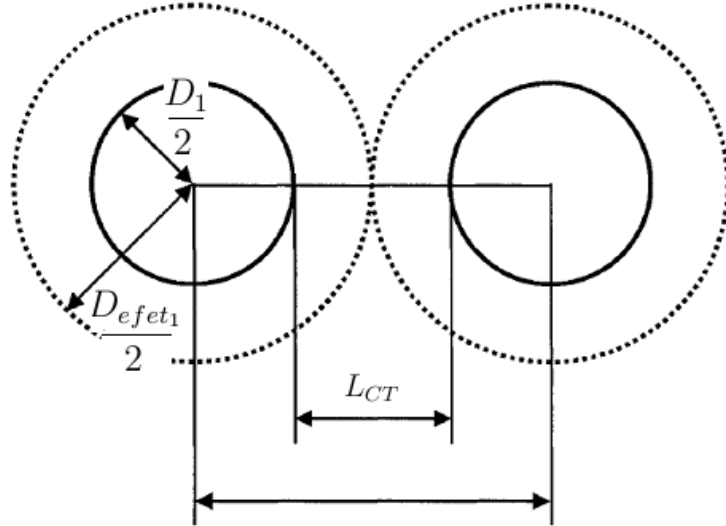


Figura 4.3: Esquema de duas bolhas esféricas se aproximando

onde u_t é velocidade média de aproximação entre as bolhas, e L_{CT} representa a distância média viajada pelas bolhas para que uma colisão aconteça.

Sendo D_{efet} o diâmetro efetivo, definido pelo volume de mistura que contém uma bolha, e D_b o diâmetro da bolha, a distância média pode ser calculada por:

$$L_{CT} \approx \frac{(D_{efet1} - \delta' D_1) + (D_{efet2} - \delta' D_2)}{2} \quad (4.10)$$

onde um fator δ' é introduzido para representar o efeito médio de oscilações no movimento das bolhas. O diâmetro efetivo, D_{efet} pode ser expresso em termos do diâmetro das bolhas e a fração de vazio local como:

$$D_{efet} \propto \frac{D_b}{\alpha_g^{1/3}} \quad (4.11)$$

Substituindo a equação 4.11 na equação 4.10 tem-se:

$$L_{CT} = \frac{(D_1 + D_2) \left(1 - \delta'' \alpha_g^{1/3}\right)}{2\alpha_g^{1/3}} \quad (4.12)$$

onde um fator coletivo δ'' leva em consideração os efeitos combinados dos movimentos das bolhas e da aproximação dada pela equação 4.11.

Quando a fração volumétrica de gás tende a zero, D_b é desprezível frente a D_{efet} , e δ' não tem papel importante. Por outro lado, δ'' é bastante significativo

quando a fração de vazio é alta e o diâmetro médio de bolhas se torna comparável ao diâmetro efetivo. Quando a fração de vazio se aproxima do limite de empacotamento ($\alpha_g \cong \alpha_{max}$), a distância a ser viajada tende a zero, de forma que $\delta'' = \alpha_{max}^{-1/3}$. Usando este valor assintótico como uma aproximação para δ'' , a distância média a ser viajada para uma colisão fica:

$$L_{CT} = \frac{D_1 + D_2}{2\alpha_g^{1/3}} \left(1 - \left(\frac{\alpha_g}{\alpha_{max}} \right)^{1/3} \right) \quad (4.13)$$

Dessa forma, a frequência de colisão randômica de duas bolhas, f_{CT} , é:

$$f_{CT} = \frac{1}{t_{CT}} \propto \frac{u_t}{\frac{D_1+D_2}{2}} \alpha_g^{1/3} \left(\frac{\alpha_{max}^{1/3}}{\alpha_{max}^{1/3} - \alpha_g^{1/3}} \right) \quad (4.14)$$

No entanto, as bolhas não se movem sempre uma em direção à outra, de forma que é considerada na frequência de colisão uma probabilidade de que a bolha esteja se movendo em relação a uma bolha vizinha, P_C . Ao se considerar uma estrutura hexagonal fechada, onde as partículas se distribuem de forma que a distância para qualquer uma de suas vizinhas é igual, P_C é dada por:

$$P_C \approx \frac{D_b^2}{D_{efet}^2} = \alpha_g^{2/3}, \quad \alpha_g < \alpha_{g_{crit}} \quad e \quad P_C = 1, \quad \alpha_g > \alpha_{g_{crit}} \quad (4.15)$$

onde $\alpha_{g_{crit}}$ é a fração de vazio quando a bolha central não pode passar através do espaço livre entre bolhas vizinhas.

Como as bolhas vizinhas estão em movimento constante com relação à bolha de interesse, e não fixas em uma posição, a fração de vazio crítica pode ser muito próxima do limite máximo de empacotamento, o que leva à:

$$P_C \propto \left(\frac{\alpha_g}{\alpha_{max}} \right)^{2/3} \quad (4.16)$$

Assim, a frequência de colisão por é dada por:

$$f_{CT} \propto \frac{u_t}{\frac{D_1+D_2}{2}} \alpha_g \left(\frac{1}{\alpha_{max}^{1/3} \left(\alpha_{max}^{1/3} - \alpha_g^{1/3} \right)} \right) \quad (4.17)$$

O modelo ainda está incompleto da forma atual, pois quando a distância média é muito grande, não ocorre a colisão pois o movimento relativo entre as bolhas vizinhas é limitado por vórtices de tamanhos comparáveis aos tamanhos das bolhas. Assim, para considerar este efeito, KIM [50] sugere um fator a ser multiplicado na equação

4.17:

$$m \equiv 1 - \exp\left(-C \frac{\bar{L}}{L_t}\right) \quad (4.18)$$

onde C é um parâmetro ajustável dependente das propriedades dos fluidos e \bar{L} é o tamanho médio dos vórtices capazes de unir bolhas vizinhas, que são assumidos da mesma ordem de tamanho do tamanho médio de bolhas, $\frac{D_1 + D_2}{2}$, já que vórtices menores não provém movimento considerável para uma bolha e vórtices maiores transportam grupos de bolhas sem movimento relativo significativo entre elas.

Assim, a frequência de colisão por colisões randômicas de bolhas é dada por:

$$f_{CT} \propto \frac{u_t}{\frac{D_1+D_2}{2}} \alpha_g \left[\frac{1}{\alpha_{max}^{1/3} (\alpha_{max}^{1/3} - \alpha_g^{1/3})} \right] \left[1 - \exp\left(-C \frac{\alpha_{max}^{1/3} \alpha_g^{1/3}}{\alpha_{max}^{1/3} - \alpha_g^{1/3}}\right) \right] \quad (4.19)$$

Ocorrendo uma colisão, pode ou não ocorrer a coalescência. Assim, uma eficiência de colisão é sugerida por muitos autores, como por exemplo o modelo de drenagem de filme (KIRKPATRICK e LOCKETT [70]). Entretanto, no modelo de KIM [50] é empregada uma eficiência de coalescência constante, obtida experimentalmente, C_{CT} , para levar em consideração essa possibilidade de não ocorrer a coalescência após cada colisão.

Assim, a forma final da frequência de coalescência por colisões randômicas é dada por:

$$a_{CT} = C_{CT} \frac{u_t}{\frac{D_1+D_2}{2}} \alpha_g \left[\frac{1}{\alpha_{max}^{1/3} (\alpha_{max}^{1/3} - \alpha_g^{1/3})} \right] \left[1 - \exp\left(-C \frac{\alpha_{max}^{1/3} \alpha_g^{1/3}}{\alpha_{max}^{1/3} - \alpha_g^{1/3}}\right) \right] \quad (4.20)$$

4.2.3 Coalescência devido à captura de bolhas na esteira de outras

Quando bolhas entram na esteira de uma outra bolha (bolha condutora), irão acelerar e podem colidir com a bolha condutora (STEWART [71]). KIM [50] propõe, em sua tese de doutorado, uma modelagem para taxa de coalescência por captura nas esteiras baseada nas pesquisas realizadas por diversos pesquisadores que focaram no estudo deste mecanismo (STEWART [71], OTAKE *et al.* [72]).

Para escoamentos dispersos, em que a bolha é assumida esférica, o escoamento ao redor desta bolha é idêntico ao escoamento ao redor de uma esfera sólida sob o mesmo número de Reynolds (CLIFT *et al.* [73]). Dessa forma, assume-se que a estrutura da esteira da bolha condutora é análoga a de uma esteira ao redor

de uma esfera s33lida. Assim, para uma bolha com diâmetro D_1 , o volume efetivo da sua esteira, V_{W1} , na qual uma bolha pode entrar e vir a colidir com a bolha condutora, pode ser aproximado por:

$$V_{W1} \approx \frac{\pi D_1^2}{4} \left(L_{W1} - \frac{D_1}{2} \right) \quad (4.21)$$

O n33mero de bolhas de volume V_2 no interior desta regi33o de esteira da bolha de diâmetro D_1 33 dado por:

$$N_{W1} = n_2 V_{W1} \approx \frac{n_2 \pi D_1^2}{4} \left(L_{W1} - \frac{D_1}{2} \right) \quad (4.22)$$

Assumindo que o tempo que as bolhas na regi33o da esteira levam para colidir com a predecessora 33 ajustado atrav33s de uma distribuiç33o normal, o intervalo de tempo m33dio, no qual 50% das bolhas de diâmetro D_2 colidem com a sua bolha predecessora de diâmetro D_1 33 t_W . A taxa de coalesc33ncia por entradas de bolhas de volume V_2 nas esteiras de bolhas de volume V_1 por unidade de volume da mistura, R_{CW} , deve satisfazer:

$$R_{CW} \propto \frac{1}{2} n_1 \frac{N_{W1}}{t_W} \approx \frac{1}{2} \frac{\pi}{4} D_1^2 n_1 n_2 \frac{\left(L_{W1} - \frac{D_1}{2} \right)}{t_W} \approx \frac{\pi}{8} D_1^2 n_1 n_2 \bar{u}_{rW} \quad (4.23)$$

onde \bar{u}_{rW} 33 a velocidade relativa m33dia entre a bolha l33der e a bolha que est33 em sua esteira.

KIM [50] prop33e o uso da express33o da velocidade relativa na esteira adimensionalizada de SCHLICHTING e GERSTEN [74]:

$$\frac{u_{rW}}{u_r} \approx \left(\frac{C_D A}{\beta^2 z^2} \right)^{1/3} \quad (4.24)$$

onde u_{rW} 33 a velocidade relativa entre a bolha l33der e a bolha na regi33o de esteira, u_r 33 a velocidade relativa entre a bolha l33der e a fase l33quida cont33nua, C_D 33 o coeficiente de arraste da bolha l33der, A 33 a 33rea frontal da bolha l33der, β 33 a raz33o entre o comprimento e a largura da esteira e z 33 a dist33ncia na direç33o do escoamento do centro da bolha l33der.

Integrando-se a equaç33o 4.24 sobre o comprimento efetivo da esteira, a velocidade m33dia relativa na regi33o de esteira 33 dada por:

$$\bar{u}_{rW} \approx u_r F \left(\frac{L_{W1}}{D_1} \right) C_D^{1/3} (D_1) \quad (4.25)$$

De acordo com TSUCHIYA e TAGUCHI [75], o comprimento efetivo da esteira é aproximadamente 5 – 7 vezes o diâmetro da bolha, assim tanto $\frac{L_{W1}}{D_1}$ quanto $F\left(\frac{L_{W1}}{D_1}\right)$ são tratados como constantes.

A forma final para a taxa de coalescência por volume da mistura devido ao mecanismo de entrada de bolhas nas esteiras de outras é dada por:

$$R_{CW} = C_{CW} D_1^2 u_r(D_1) C_D^{1/3}(D_1) n_1 n_2 \quad (4.26)$$

onde $C_{CW} = \frac{\pi}{8} F\left(\frac{L_{W1}}{D_1}\right)$ é um coeficiente ajustável que leva em consideração a razão entre o comprimento efetivo da esteira e o tamanho da bolha.

Para o cálculo da velocidade terminal da bolha líder em relação à fase líquida, u_r , é usada a expressão de ISHII e CHAWLA [76], onde é feito um balanço de forças entre as forças de empuxo e de arraste:

$$u_r(D_1) = \left(\frac{g D_1 \Delta \rho}{3 C_D(D_1) \rho_l} \right)^{1/2} \quad (4.27)$$

onde

$$C_D(D_1) = \frac{24}{Re_{D_1}} (1 + 0,1 Re_{D_1}^{0,75}) \quad (4.28)$$

e

$$Re_{D_1} = \frac{(1 - \alpha_g) \rho_l u_r D_1}{\mu_l} \quad (4.29)$$

Assim, a frequência de coalescência por capturas de bolhas de diâmetro D_2 nas esteiras de bolhas com diâmetro D_1 é dada por:

$$a_{CW_{12}} = \frac{R_{CW}}{n_1 n_2} = C_{CW} D_1^2 u_r(D_1) C_D^{1/3}(D_1) \quad (4.30)$$

A expressão para a frequência de coalescência, dada pela equação 4.30 não é simétrica. É preciso fazer a média $a_{CW_{21}}$ para a obtenção de uma expressão simétrica para a frequência de coalescência, ou seja:

$$a_{CW} = \frac{C_{CW}}{2} \left(D_1^2 u_r(D_1) C_D^{1/3}(D_1) + C_{CW} D_2^2 u_r(D_2) C_D^{1/3}(D_2) \right) \quad (4.31)$$

Capítulo 5

Implementação dos modelos

5.1 Modelagem do escoamento

5.1.1 Relações básicas

Por definição, existe a restrição dada por:

$$\alpha_g + \alpha_l = 1 \quad (5.1)$$

A densidade da mistura é dada por:

$$\alpha_g \rho_g + \alpha_l \rho_l = \rho_m \quad (5.2)$$

e a velocidade da mistura é dada por:

$$\mathbf{v}_m \rho_m = \mathbf{v}_g \rho_g \alpha_g + \mathbf{v}_l \rho_l \alpha_l \quad (5.3)$$

5.1.2 O procedimento de média

Avaliações experimentais realizadas por KIM [50] mostraram que o diâmetro das bolhas é aproximadamente uniforme em cada seção transversal do duto. Assim, no presente estudo, o modelo de transporte de área interfacial e o modelo de balanço populacional serão avaliados em sua forma unidimensional, assumindo que o escoamento é estacionário e isotérmico, sem nucleação.

Médias utilizadas

Para a obtenção das equações unidimensionais são empregadas as seguintes médias, onde A é a seção transversal do duto:

Média na área, $\langle \xi \rangle$:

$$\langle \xi \rangle \equiv \frac{1}{A} \int_A \xi dA \quad (5.4)$$

Média na área ponderada pela fração de vazio, $\langle \langle \xi \rangle \rangle$:

$$\langle \langle \xi \rangle \rangle \equiv \frac{\int_A \alpha \xi dA}{\int_A \alpha dA} = \frac{\langle \alpha \xi \rangle}{\langle \alpha \rangle} \quad (5.5)$$

A média volumétrica, $\bar{\xi}$:

$$\bar{\xi} \equiv \frac{1}{V} \int_V \xi dV \quad (5.6)$$

5.1.3 A equação de conservação de massa da fase líquida

A equação de conservação da fase líquida é dada por:

$$\frac{\partial(\alpha_l \rho_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \mathbf{v}_l) = 0 \quad (5.7)$$

Considerando a densidade do líquido constante, tem-se:

$$\frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \mathbf{v}_l) = 0 \quad (5.8)$$

Para se chegar na equação unidimensional, integra-se no volume, conforme a Figura

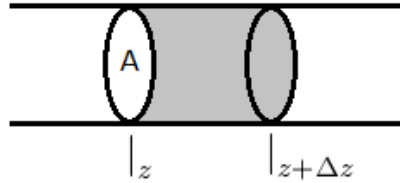


Figura 5.1: Volume de controle

5.1, e divide-se pelo volume:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_V \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} dV + \frac{1}{V} \int_V \nabla \cdot (\alpha_l \mathbf{v}_l) dV = 0 \Rightarrow \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{V} \int_V \alpha_l dV \right] + \frac{1}{V} \oint_{\partial V} \alpha_l \mathbf{v}_l \cdot \tilde{\mathbf{n}} dA = 0 \end{aligned} \quad (5.9)$$

Assumindo que o escoamento ocorre na direção z , com z aumentando no sentido do escoamento, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{V} \int_V \alpha_l dV \right] + \frac{1}{V} \left[\int_A [\alpha_l \mathbf{v}_l]_{z+\Delta z} dA - \int_A [\alpha_l \mathbf{v}_l]_z dA \right] = 0 \quad (5.10)$$

Utilizando as médias definidas na seção anterior e fazendo $\lim_{\Delta z \rightarrow 0}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\alpha}_l}{\partial t} + \frac{A}{V} [\langle \alpha_l \rangle \langle \langle \mathbf{v}_l \rangle \rangle |_{z+\Delta z} - \langle \alpha_l \rangle \langle \langle \mathbf{v}_l \rangle \rangle |_z] = 0 \Rightarrow \\ \frac{\partial \bar{\alpha}_l}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (\langle \alpha_l \rangle \langle \langle \mathbf{v}_l \rangle \rangle) = 0 \end{aligned} \quad (5.11)$$

Assumindo que o escoamento é estacionário, fica-se com:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\langle \alpha_l \rangle \langle \langle \mathbf{v}_l \rangle \rangle) = 0 \quad (5.12)$$

Pela definição de velocidade superficial, $\mathbf{j}_l = \alpha_l \mathbf{v}_l$, e

$$\langle j_l \rangle = \frac{1}{A} \int_A \alpha_l \mathbf{v}_l dA = \langle \alpha_l \rangle \langle \langle \mathbf{v}_l \rangle \rangle \quad (5.13)$$

Logo:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\langle j_l \rangle) \Rightarrow \langle j_l \rangle = \text{cte} \quad (5.14)$$

5.1.4 A equação de conservação de massa da fase gasosa

Para se chegar na equação unidimensional da equação de conservação de massa da fase gasosa, apresentada na equação 3.44 com $\Gamma_g = 0$, integra-se no volume da Figura 5.1 e divide-se pelo volume:

$$\frac{1}{V} \int_V \frac{\partial(\alpha_g \rho_g)}{\partial t} dV + \frac{1}{V} \int_V \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) dV = 0 \quad (5.15)$$

A integral no volume do segundo termo da equação 5.15 pode ser convertida em uma integral de superfície com o auxílio do Teorema de Gauss:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} \int_V \alpha_g \rho_g dV + \frac{1}{V} \oint_V \alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g \cdot \hat{n} dA = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{V} \int_V \alpha_g \rho_g dV \right] + \frac{1}{V} \left[\int_A [\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g]_{z+\Delta z} dA - \int_A [\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g]_z dA \right] = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\alpha_g \rho_g}) + \frac{A}{V} [[\langle \alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g \rangle]_{z+\Delta z} - [\langle \alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g \rangle]_z] = 0 \end{aligned} \quad (5.16)$$

Fazendo $\lim_{\Delta z \rightarrow 0}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\alpha_g \rho_g}) + \frac{\partial}{\partial z} [\langle \rho_g j_g \rangle] = 0 \quad (5.17)$$

Pois $j_g = \alpha_g v_g$. Para escoamentos estacionários fica:

$$\frac{\partial}{\partial z} [\langle \rho_g j_g \rangle] = 0 \quad (5.18)$$

Como:

$$\mathbf{j}_g \equiv \langle \mathbf{j}_g \rangle + \mathbf{j}'_g \quad (5.19)$$

onde $\langle \mathbf{j}'_g \rangle = 0$. e

$$\rho_g \equiv \langle \rho_g \rangle + \rho'_g \quad (5.20)$$

onde $\langle \rho'_g \rangle = 0$.

Assim:

$$\langle \rho_g \mathbf{j}_g \rangle = \langle \rho_g \rangle \langle \mathbf{j}_g \rangle + \langle \rho'_g \mathbf{j}'_g \rangle \quad (5.21)$$

Se o termo de correlação, $\langle \rho'_g \mathbf{j}'_g \rangle$ for desprezado, a equação 5.18 pode ser escrita por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} [\langle j_g \rangle \langle \rho_g \rangle] &= 0 \Rightarrow \\ \langle \rho_g \rangle \frac{\partial \langle j_g \rangle}{\partial z} &= - \langle j_g \rangle \frac{\partial \langle \rho_g \rangle}{\partial z} \Rightarrow \\ \frac{\partial}{\partial z} \ln \langle j_g \rangle &= - \frac{\partial}{\partial z} \ln \langle \rho_g \rangle \end{aligned} \quad (5.22)$$

Assumindo que a lei dos gases ideais é válida, o escoamento é isotérmico e que a pressão não varia na área:

$$\frac{\partial}{\partial z} \ln \langle j_g \rangle = - \frac{\partial}{\partial z} \ln p \quad (5.23)$$

5.1.5 A equação de *drift-flux*

O modelo de *drift-flux*, simplificado em relação ao modelo de dois fluidos, foi selecionado para modelar o escoamento disperso neste trabalho pelo simples fato de ter sido utilizado por KIM [50] para ajustar as constantes do modelo de área interfacial.

A equação de *drift-flux*, em um escoamento gás-líquido disperso, obtida de ZUBER e FINDLAY [77], em sua forma unidimensional é dada por:

$$\langle \alpha_g \rangle (C_0 \langle j \rangle + \langle \langle V_d \rangle \rangle) - \langle j_g \rangle = 0 \quad (5.24)$$

onde o fator de forma, C_0 , é dado por:

$$C_0 \equiv \frac{\langle \alpha_g j \rangle}{\langle \alpha_g \rangle \langle j \rangle} \quad (5.25)$$

onde $j = j_f + j_g$ é a velocidade superficial da mistura, V_d é a velocidade de deslizamento entre as fases e o parâmetro C_0 é o responsável por descrever a distribuição da fase dispersa em um escoamento bifásico.

A velocidade de deslizamento média para o regime de bolhas distorcidas, proposta por ISHII [78], é dada pela equação 5.26 e será utilizada nesta dissertação:

$$\langle\langle V_d \rangle\rangle = \sqrt{2} \left(\frac{\sigma g \Delta \rho}{\rho_l^2} \right)^{1/4} (1 - \langle\alpha_g \rangle)^{1,75} \quad (5.26)$$

5.1.6 Equação de transporte de área interfacial

Com a hipótese de diâmetro uniforme das bolhas, a velocidade média interfacial ponderada pela concentração de área interfacial pode ser aproximada como a velocidade média do gás ponderada pela fração de vazio se a circulação interna na bolha for desconsiderada.

$$\langle\langle v_I \rangle\rangle \equiv \frac{\langle a_I v_I \rangle}{\langle a_I \rangle} \approx \frac{\langle \alpha_g v_g \rangle}{\langle \alpha_g \rangle} \equiv \langle\langle v_g \rangle\rangle \quad (5.27)$$

A forma unidimensional da equação de transporte de área interfacial estacionária é obtida aplicando-se procedimento similar à equação 3.78, que leva a:

$$\frac{\partial}{\partial z} [\langle a_I \rangle \langle\langle v_g \rangle\rangle] = \frac{2 \langle a_I \rangle}{3 \langle \alpha_g \rangle} \frac{\partial}{\partial z} [\langle \alpha_g \rangle \langle\langle v_g \rangle\rangle] + \langle \phi_B \rangle - \langle \phi_{CT} \rangle - \langle \phi_{CW} \rangle \quad (5.28)$$

As expressões exatas para os termos da equação 5.28 envolvem muitas covariâncias que complicam o problema unidimensional. Tais covariâncias representam as diferenças entre a média de um produto e o produto da média de duas variáveis. Faz-se uma forte aproximação ao negligenciar tais covariâncias na dedução da equação 5.28. De acordo com KIM [50], tais correlações podem ser desprezadas para escoamentos onde o perfil de um dado parâmetro for aproximadamente uniforme em cada área transversal. De acordo com KIM [50], para as condições analisadas, os parâmetros são aproximadamente uniformes em uma dada seção transversal, conforme observação de dados experimentais, e tal aproximação é válida.

O segundo termo da equação 5.28 pode então ser escrito como função da pressão utilizando-se a relação dada na equação 5.23, sob as hipóteses de gás ideal e de escoamento isotérmico. Assim tem-se:

$$\frac{2 \langle a_I \rangle}{3 \langle \alpha_g \rangle} \frac{\partial}{\partial z} [\langle \alpha_g \rangle \langle\langle v_g \rangle\rangle] = \frac{2 \langle a_I \rangle \langle\langle v_g \rangle\rangle}{3 p} \left(-\frac{\partial p}{\partial z} \right) \quad (5.29)$$

A equação de transporte de área interfacial unidimensional, com valores médios na área transversal dos parâmetros aplicados aos termos fonte e sumidouro é aplicável, sendo dada por:

$$\frac{\partial}{\partial z} [\langle a_I \rangle \langle\langle v_g \rangle\rangle] = \frac{2}{3} \left(\frac{\langle a_I \rangle \langle\langle v_g \rangle\rangle}{p} \right) \left(-\frac{\partial p}{\partial z} \right) + \langle \phi_B \rangle - \langle \phi_{CT} \rangle - \langle \phi_{CW} \rangle \quad (5.30)$$

Por conveniência, a partir deste ponto, as notações para as médias serão suprimidas. Todos os valores utilizados serão valores médios.

5.1.7 Modelagem da pressão

Assumindo que o gradiente de pressão ao longo do duto é aproximadamente constante, a pressão em cada ponto pode ser obtida em cada posição axial pela medição da perda de carga utilizando uma aproximação de primeira ordem, tal que:

$$P_z = P_0 \left(1 - \frac{z - z_0}{P_0} \left| \frac{dP}{dz} \right|_{medido} \right) \quad (5.31)$$

5.2 Modelagem da turbulência

Para o cálculo dos termos relativos a quebra e coalescência, é necessário que a velocidade turbulenta, u_t , seja especificada. Considerando-se que a turbulência é isotrópica e homogênea, KOCAMUSTAFAOGULLARI e ISHII [5] calculam a flutuação média de velocidade das bolhas como sendo proporcional à diferença de velocidade entre dois pontos que distam entre si por uma escala de comprimento D_b .

Assim, a velocidade turbulenta pode ser estimada pela relação proposta por BATCHELOR [79]:

$$u_t = 1,4\epsilon^{1/3} D_b^{1/3} \quad (5.32)$$

Nesta dissertação, a taxa de dissipação turbulenta de energia por unidade de volume da mistura, ϵ , será aproximada pela relação proposta por WU *et al.* [46]:

$$\epsilon = f_{fric} \frac{1}{D_h} v_m^3 \quad (5.33)$$

em que v_m é a velocidade média da mistura e D_h é o diâmetro hidráulico da seção em que a mistura escoar. O fator de fricção para o escoamento bifásico, f_{fric} é dado por TODREAS e KAZIMI [80]:

$$f_{fric} = f_f \left(\frac{\mu_m}{\mu_f} \right)^{0,25} = \frac{0,316}{Re_m^{0,25}} \left(\frac{\mu_m}{\mu_f} \right)^{0,25} \quad (5.34)$$

onde f_f é o fator de fricção monofásico, Re_m é o número de Reynolds da mistura e μ_m é a viscosidade da mistura, calculada de acordo com ISHII e CHAWLA [76], como:

$$\mu_m = \frac{\mu_f}{1 - \alpha_g} \quad (5.35)$$

5.3 Estimativa do parâmetro de distribuição do modelo de *drift-flux*

KIM [50] obteve um valor para a constante C_0 do modelo de *drift-flux* através de uma abordagem que utilizou dados experimentais e teoria. A seção a seguir abordará, de forma simplificada, a metodologia utilizada por KIM [50].

A metodologia utilizada por KIM [50]

KIM [50] calculou C_0 de duas formas. Primeiro ele estimou o valor de C_0 utilizando a equação 5.25. Para tal, KIM [50] utilizou valores de α_g e v_g obtidos através de medições experimentais para calcular os valores de $j_g = \alpha_g v_g$, $j_l = (1 - \alpha_g)v_l$ e $j = j_l + j_g$. Com os valores de j e α_g , a constante C_0 é estimada calculando as médias em área presentes na sua definição. Com este valor de C_0 , KIM [50] calcula a velocidade média de deslizamento entre as fases utilizando a equação 5.24.

No segundo procedimento, a velocidade de deslizamento é calculada utilizando a expressão dada na equação 5.26 e a constante C_0 é estimada utilizando a equação 5.24, ambas utilizando os dados experimentais disponíveis.

Os dois valores calculados para a constante C_0 são comparados e o valor final de C_0 é obtido através da média entre os dois valores obtidos pelos procedimentos descritos acima. KIM *et al.* [49] publicaram um gráfico com os resultados de $\frac{j_g}{\alpha_g}$ por j obtidos por cada uma das duas estimativas do C_0 e com o seu valor médio $C_{0,avg} = 1,076$, além de dados experimentais, que está reproduzido na figura 5.2.

A abordagem utilizada

Ao utilizar o valor do parâmetro de distribuição, C_0 , proposto e utilizado por KIM [50] em sua tese de doutorado e nos trabalhos seguintes, constatou-se que o valor da fração de vazio no contorno não satisfazia o valor experimental quando calculada através da equação (5.24) utilizando os valores experimentais para a velocidade superficial do gás e do líquido reportada por KIM [50] em conjunto com a expressão utilizada pelos mesmo autores para o cálculo da velocidade de deslizamento (equação 5.26).

Duas abordagens foram então adotadas para o parâmetro de distribuição C_0 :

1. Na primeira, o valor de C_0 proposto por KIM [50] foi adotado e a fração de vazio no contorno foi recalculada através das expressões 5.24 e 5.26.

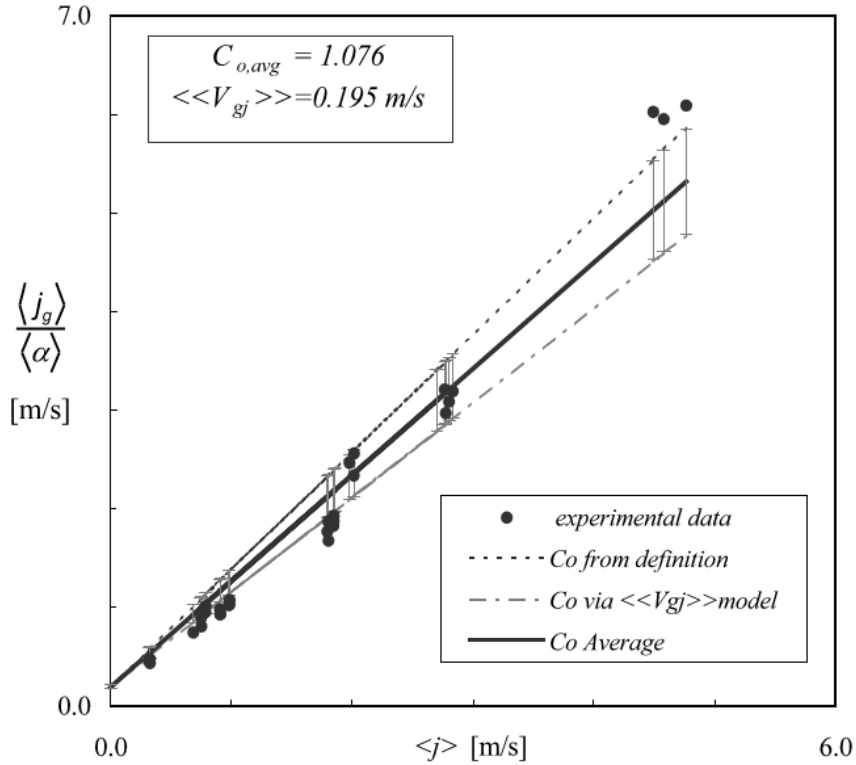


Figura 5.2: Modelo de *drift-flux* vs. dados experimentais para diferentes abordagens de cálculo da constante de distribuição, C_0 (reproduzido de KIM *et al.* [49])

2. Como abordagem alternativa, o valor de fração de vazio obtido experimentalmente foi mantido e o valor de C_0 foi recalculado de forma a satisfazer o valor de C_0 no contorno. Assim, um valor de C_0 foi obtido para cada condição experimental.

Dessa forma, para cada uma das cinco condições experimentais avaliadas, dois valores de C_0 foram empregados nas simulações.

5.4 Implementação do modelo de transporte de área interfacial unidimensional

5.4.1 Conjunto de equações resolvidas no modelo de transporte de área interfacial

Na implementação do modelo de transporte de área interfacial, o conjunto de equações, fechado, a ser resolvido é composto por:

1. Cálculo da velocidade do líquido através da equação de conservação da fase líquida (equação 5.14);

2. Cálculo da velocidade do gás através da equação de conservação da fase gasosa (equação 5.22);
3. Cálculo da fração de vazio através da equação de *drift-flux* (equação 5.24);
4. Cálculo da concentração de área interfacial através da equação de transporte de área interfacial (equação 5.30).

5.4.2 Considerações preliminares

Algumas relações importantes, já apresentadas ao longo dos capítulos anteriores, serão repetidas aqui por conveniência.

Diâmetro médio de Sauter como função da fração volumétrica de gás e concentração de área interfacial:

$$D_{SM} = \frac{6\alpha_g}{a_I} \quad (5.36)$$

Densidade numérica das bolhas como função da fração volumétrica de gás e concentração de área interfacial:

$$n = \Psi \frac{a_I^3}{\alpha_g^2} \quad (5.37)$$

Fator de forma:

$$\Psi = \frac{1}{36\pi} \left(\frac{D_{SM}^3}{D_e^3} \right) \quad (5.38)$$

5.4.3 Tratamento dos termos referentes a quebra e coalescência

Os termos fontes devido a interações entre as partículas são obtidos utilizando-se as frequências de quebra e coalescência deduzidas no Capítulo 4, considerando que todas as bolhas possuem um mesmo diâmetro D_{SM} , calculado a partir da fração volumétrica de gás e da área interfacial da dispersão.

Variação da área interfacial devido a quebras

A taxa de variação do número de partículas devido a quebras é dada por:

$$R_B = nb = nC_B \left(\frac{u_t}{D_{SM}} \right) \exp \left(-\frac{We_{crit}}{We} \right) \left(1 - \frac{We_{crit}}{We} \right)^{1/2}$$

A taxa de variação da área interfacial devido a quebras é:

$$\phi_B = \frac{1}{3\Psi} \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 R_B = \frac{C_B}{18} \left(\frac{a_I^2}{\alpha_g} u_t \right) \exp \left(-\frac{We_{crit}}{We} \right) \left(1 - \frac{We_{crit}}{We} \right)^{1/2} \quad (5.39)$$

Variação da área interfacial devido à coalescência pelo impacto de vórtices turbulentos

A taxa de variação do número de partículas devido à coalescências provocadas por colisões randômicas é dada por:

$$R_{CT} = n a_{CT} = n C_{CT} \frac{u_t}{D_{SM}} \alpha_g \frac{1}{\alpha_{max}^{1/3} (\alpha_{max}^{1/3} - \alpha^{1/3})} \times \left[1 - \exp \left(-C \frac{\alpha_{max}^{1/3} \alpha^{1/3}}{\alpha_{max}^{1/3} - \alpha^{1/3}} \right) \right] \quad (5.40)$$

Assim, a taxa de variação na área interfacial devido a colisões induzidas por colisões randômicas é:

$$\begin{aligned} \phi_{CT} &= \frac{1}{3\Psi} \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 R_{CT} \\ &= \frac{1}{3\Psi} \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 n C_{CT} \frac{u_t}{D_{SM}} \alpha_g \left(\frac{1}{\alpha_{max}^{1/3} (\alpha_{max}^{1/3} - \alpha_g^{1/3})} \right) \left(1 - \exp \left(-C \frac{\alpha_{max}^{1/3} \alpha_g^{1/3}}{\alpha_{max}^{1/3} - \alpha_g^{1/3}} \right) \right) \\ &= \frac{1}{3\pi} C'_{CT} a_I^2 u_t \left(\frac{1}{\alpha_{max}^{1/3} (\alpha_{max}^{1/3} - \alpha_g^{1/3})} \right) \left(1 - \exp \left(-C \frac{\alpha_{max}^{1/3} \alpha_g^{1/3}}{\alpha_{max}^{1/3} - \alpha_g^{1/3}} \right) \right) \end{aligned} \quad (5.41)$$

onde $C'_{CT} = \left(\frac{C_{CT}\pi}{6} \right)$

Taxa de variação de área interfacial devido a capturas nas esteiras

A taxa de variação no número de partículas devido a coalescências provocadas pela captura de uma bolha na esteira de outra é:

$$R_{CW} = n^2 a_{CW} = n^2 C_{CW} C_D^{1/3} D_{SM}^2 u_r \quad (5.42)$$

E a taxa de variação na área interfacial devido à coalescências provocadas pela captura de uma bolha na esteira da outra é:

$$\phi_{CW} = \frac{1}{3\Psi} \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 n^2 C_{CW} C_D^{1/3} D_{SM}^2 u_r \quad (5.43)$$

Substituindo as relações dadas pelas equações (5.36) e (5.37), tem-se:

$$\phi_{CW} = \frac{1}{3\Psi} \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 \left(\Psi \frac{a_I^3}{\alpha_g^2} \right)^2 C_{CW} C_D^{1/3} \left(\frac{6\alpha_g}{a_I} \right)^2 u_r \quad (5.44)$$

Utilizando a aproximação para o fator de forma, $\Psi = \frac{1}{36\pi}$, fica-se com:

$$\phi_{CW} = \frac{1}{3\pi} C_{CW} C_D^{1/3} u_r a_i^2 \quad (5.45)$$

5.4.4 Equação final de transporte de área interfacial

Dessa forma, combinando a equação 5.30 com os termos fontes dados pelas equações 5.44, 5.41 e 5.39, a equação de transporte de área interfacial unidimensional e estacionária é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} (a_I v_g) &= \frac{2}{3} \left(\frac{a_I v_g}{p} \right) \left(-\frac{\partial p}{\partial z} \right) \\ &+ \frac{C_B}{18} \left(\frac{a_I^2 u_t}{\alpha_g} \right) \exp \left(-\frac{We_{crit}}{We} \right) \left(1 - \frac{We_{crit}}{We} \right)^{1/2} \\ &- \frac{1}{3\pi} C'_{CT} a_I^2 u_t \frac{1}{\alpha_{max}^{1/3} (\alpha_{max}^{1/3} - \alpha_g^{1/3})} \left[1 - \exp \left(-C \frac{\alpha_{max}^{1/3} \alpha_g^{1/3}}{\alpha_{max}^{1/3} - \alpha_g^{1/3}} \right) \right] \\ &- \frac{1}{3\pi} C_{CW} C_D^{1/3} u_r a_i^2 \end{aligned} \quad (5.46)$$

5.5 Implementação do modelo de balanço populacional

5.5.1 Cálculo da fração de vazio

Como a variável interna considerada neste trabalho é o volume das bolhas, V , a fração da fase gasosa é igual momento 1 da função de densidade numérica de bolhas:

$$\alpha_g = \mu_{3/3} = \int_0^\infty V^{3/3} f(V) dV \quad (5.47)$$

No método DQMOM, a função de distribuição das partículas é representada pelo somatório das funções delta de Dirac (Equação 2.27). Assim, aplicando-se os momentos fracionários tem-se que:

$$\alpha_g = \mu_{3/3} = \int_0^\infty V^{3/3} f(V) dV = \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha V_\alpha^{\frac{3}{3}} \quad (5.48)$$

Como a abscissa ponderada é definida como $\zeta_\alpha = w_\alpha V_\alpha$, a fração de gás é obtida diretamente pelo somatório das abscissas ponderadas, ou seja:

$$\alpha_g = \sum_{\alpha=1}^N \zeta_\alpha \quad (5.49)$$

5.5.2 Cálculo da concentração de área interfacial

Como a relação entre a área de uma bolha e seu volume é dada por:

$$A(V) = \pi D_B^2(V) = \pi \left(\frac{6}{\pi V} \right)^{2/3} \quad (5.50)$$

A concentração de área interfacial é calculada através do momento $\frac{2}{3}$ da função da densidade numérica de bolhas quando o volume é a variável interna, pois:

$$\begin{aligned} a_I &= \int_0^\infty A(V)^2 f(V) dV = \int_0^\infty \pi \left(\frac{6}{\pi V} \right)^{2/3} f(V) dV \\ &= \pi \left(\frac{6}{\pi} \right)^{2/3} \int_0^\infty V^{2/3} f(V) dV = \pi \left(\frac{6}{\pi} \right)^{2/3} \mu_{2/3} \end{aligned} \quad (5.51)$$

5.5.3 Conjunto de equações resolvidas no modelo de balanço populacional

Na implementação do modelo de balanço populacional, as incógnitas a serem resolvidas são:

1. Cálculo da velocidade do líquido através da equação de conservação da fase líquida (equação 5.14);
2. Cálculo da velocidade do gás através da Equação de *drift-flux* (equação 5.24);
3. Cálculo da fração de vazio do somatório das abscissas ponderadas, conforme a equação 5.49;
4. Cálculo da concentração de área interfacial como o momento $2/3$ da distribuição de bolhas, conforme a equação 5.51.

5.5.4 Solução da equação de balanço populacional pelo método DQMOM

Conforme apresentado no Capítulo 2, no método DQMOM, a função de distribuição das bolhas é representada por funções delta de Dirac (conforme equação 2.27) e os momentos fracionários da equação de balanço populacional, dada pela equação 2.26,

são calculados conforme equação 2.36.

Chega-se assim ao sistema de equações dado pela equação 2.38, onde as equações de transporte para os pesos e abscissas ponderadas são dadas pelas equações 2.33 e 2.34 e o termo fonte é calculado conforme a equação 2.58.

Adotando-se a hipótese de que o escoamento é estacionário, o sistema de equações lineares a ser resolvido é dado por:

$$\begin{aligned}
& \left(1 - \frac{k}{p}\right) \sum_{\alpha=1}^N V_{\alpha}^{k/p} A_{\alpha} + \frac{k}{p} \sum_{\alpha=1}^N V_{\alpha}^{k/p-1} B_{\alpha} \\
& \quad = \frac{k}{p} \sum_{\alpha=1}^N w_{\alpha} V_{\alpha}^{k/p} \frac{v_{\alpha}}{p} \frac{-dp}{dz} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\gamma=1}^N (V_{\alpha} + V_{\gamma})^{k/p} a(V_{\alpha}, V_{\gamma}) w_{\alpha} w_{\gamma} \\
& \quad - \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\gamma=1}^N V_{\alpha}^{k/p} a(V_{\alpha}, V_{\gamma}) w_{\alpha} w_{\gamma} \\
& + \sum_{\alpha=1}^N \vartheta(V_{\alpha}) b(V_{\alpha}) w_{\alpha} \int_0^{V_{\alpha}} V^{k/p} P(V, V_{\alpha}) dV \\
& \quad - \sum_{\alpha=1}^N V_{\alpha}^{k/p} b(V_{\alpha}) w_{\alpha}
\end{aligned} \tag{5.52}$$

onde as equações de transporte para os pesos e abscissas ponderadas são:

$$A_{\alpha} = \frac{\partial (v_{\alpha} w_{\alpha})}{\partial z} \tag{5.53}$$

e

$$B_{\alpha} = \frac{\partial (v_{\alpha} \zeta_{\alpha})}{\partial z} \tag{5.54}$$

e as frequências de coalescência e de quebra foram apresentadas no Capítulo 4.

5.5.5 Adimensionalização das equações

Para evitar problemas numéricos no tratamento de quantidades muito pequenas ou muito grandes, optou-se por normalizar as variáveis do DQMOM.

A relação entre os pesos e abscissas dimensionais e adimensionais é determinada a partir da informação do momento 0, μ_0^0 , e do momento 1, μ_1^0 , na condição inicial (índice superior ⁰). É importante ressaltar que momento zero é equivalente

ao número total de bolhas na condição inicial, $\mu_0^0 = N_{T_0}$, e o momento 1 é a fração de gás na condição inicial, $\mu_1^0 = \alpha_{g_0}$. Assim:

$$V_\alpha^{adm} = \frac{\mu_0^0}{\mu_1^0} V_\alpha = \frac{N_{T_0}}{\alpha_{g_0}} V_\alpha \quad (5.55)$$

$$w_\alpha^{adm} = \frac{w_\alpha}{\mu_0^0} = \frac{w_\alpha}{N_{T_0}} \quad (5.56)$$

$$\zeta_\alpha^{adm} = \frac{\zeta_\alpha}{\mu_1^0} = \frac{\zeta_\alpha}{\alpha_{g_0}} \quad (5.57)$$

Definindo:

$$a = \frac{N_{T_0}}{\alpha_{g_0}} \quad (5.58)$$

O sistema de equações do DQMOM a ser resolvido, adimensionalizado e dividido por N_{T_0} , considerando que a quebra é sempre binária, gerando duas bolhas idênticas com mesmo volume, é dado por:

$$\begin{aligned} & \left(1 - \frac{k}{p}\right) \sum_{\alpha=1}^N \left(\frac{V_\alpha^{adm}}{a}\right)^{k/p} \left(v_\alpha \frac{w_\alpha^{adm}}{\partial z} + w_\alpha^{adm} \frac{\partial v_\alpha}{\partial z}\right) \\ & + \frac{k}{p} \sum_{\alpha=1}^N \left(\frac{V_\alpha^{adm}}{a}\right)^{k/p-1} \left(\frac{v_\alpha \zeta_\alpha^{adm}}{a} \frac{\partial v_\alpha}{\partial z} + \frac{\zeta_\alpha^{adm}}{a} \frac{\partial v_\alpha}{\partial z}\right) \\ & = \frac{k}{p} \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha^{adm} \left(\frac{V_\alpha^{adm}}{a}\right)^{k/p} \frac{v_\alpha}{p} \frac{dp}{dz} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\gamma=1}^N \frac{1}{a^{k/p}} (V_\alpha^{adm} + V_\gamma^{adm})^{k/p} a_{\alpha\gamma} w_\alpha^{adm} w_\gamma^{adm} N_{T_0} \\ & - \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\gamma=1}^N \left(\frac{V_\alpha^{adm}}{a}\right)^{k/p} a_{\alpha\gamma} w_\alpha^{adm} w_\gamma^{adm} N_{T_0} \\ & + \sum_{\alpha=1}^N 2b_\alpha \left(\frac{1}{2} \frac{V_\alpha^{adm}}{a}\right)^{k/p} w_\alpha^{adm} \\ & - \sum_{\alpha=1}^N \left(\frac{V_\alpha^{adm}}{a}\right)^{k/p} b_\alpha w_\alpha^{adm} \end{aligned} \quad (5.59)$$

5.5.6 A distribuição inicial das bolhas

Foi proposta uma distribuição em volume normalizada pelo número total de bolhas no início, $\tilde{f}(V)$, de forma que a relação entre a distribuição normalizada e a não normalizada é dada por:

$$f(V) = N_{T_0} \tilde{f}(V) \quad (5.60)$$

A relação entre os momentos da distribuição não normalizada, μ_k e os momentos da distribuição normalizada, $\tilde{\mu}_k$, é dada por:

$$\mu_k = \int_0^\infty V^k f(V) dV = \int_0^\infty V^k N_{T_0} \tilde{f}(V) = N_{T_0} \int_0^\infty V^k \tilde{f}(V) = N_{T_0} \tilde{\mu}_k \quad (5.61)$$

Supondo que a fração de vazio é conhecida no contorno, a seguinte relação entre a fração de vazio no contorno, α_{g_0} , e o momento 1 da distribuição normalizada pode ser escrita:

$$\alpha_{g_0} = \int_0^\infty V f(V) dD = N_{T_0} \int_0^\infty V \tilde{f}(V) dD = N_{T_0} \tilde{\mu}_1 \quad (5.62)$$

Com a concentração de área interfacial conhecida no contorno, a_{I_0} , e sendo as bolhas esféricas, é possível escrever uma relação entre o momento 2/3 da distribuição normalizada e a área interfacial no contorno:

$$a_{I_0} = \int_0^\infty A(V) f(V) dV = \pi \left(\frac{6}{\pi} \right)^{2/3} N_{T_0} \int_0^\infty V^{2/3} \tilde{f}(V) dD = \pi \left(\frac{6}{\pi} \right)^{2/3} N_{T_0} \tilde{\mu}_{2/3} \quad (5.63)$$

A distribuição Gama

A distribuição Gama foi selecionada para representar a população inicial de bolhas normalizada pelo número de bolhas no início devido à facilidade no cálculo analíticos de seus momentos.

$$f_G(V) = \frac{V^{c-1} e^{-V/b}}{b^c \Gamma(c)} \quad (5.64)$$

As propriedades da função distribuição Gama e o procedimento para o cálculo dos parâmetros da distribuição Gama inicial (o parâmetro de forma, c , e o fator de escala, b), além do número total de bolhas no início são apresentados em detalhes no Apêndice A.

5.5.7 Inicialização dos pesos e abscissas do método DQMOM

O método DQMOM representa uma distribuição, seja ela qual for, por N abscissas e N pesos e evolui a distribuição no espaço e no tempo, conservando seus $2N$ primeiros momentos. Assim, é preciso especificar os pesos e abscissas que representam a respectiva distribuição na condição inicial.

Para tal, foi utilizado um procedimento baseado no algoritmo Produto-Diferença (PD) desenvolvido por GORDON [23], conforme proposto por MCGRAW [22] e descrito no capítulo 2. O algoritmo PD calcula os pesos e abscissas para o cálculo da quadratura ótima (gaussiana tendo como função peso a própria distribuição) a partir dos $2N$ primeiros momentos da distribuição, através da solução de um

problema de autovalor.

O procedimento para o cálculo dos pesos e abscissas da distribuição inicial é apresentado em detalhes no Apêndice B.

5.6 Constantes dos modelos de quebra e coalescência

Para a avaliação dos modelos frente a dados experimentais, é necessário se conhecer os parâmetros ajustáveis dos modelos. Os coeficientes utilizados neste trabalho foram obtidos de KIM [50].

Para ajustar os coeficientes, o mecanismo dominante para cada condição experimental foi identificado. Em escoamentos onde a velocidade superficial do líquido é alta, espera-se que a interação entre bolhas seja fortemente afetada pela turbulência. Em condições onde ambas as velocidades superficiais do líquido e do gás são elevadas, os mecanismos dominantes são a coalescência por colisões randômicas e a quebra por impacto de vórtices turbulentos. Por outro lado, em condições próximas às transições entre regimes, com alta fração de vazio, o mecanismo de coalescência por capturas nas esteiras se torna mais significativo.

Assim, KIM [50] obteve os coeficientes que melhor ajustavam os resultados experimentais obtidos ao utilizar a equação de transporte de área interfacial com um grupo de bolhas, conforme a equação 5.46. Tais coeficientes foram utilizados nas avaliações dos modelos de transporte de área interfacial avaliados nesta dissertação e estão resumidos a seguir:

- Coeficientes relativos à modelagem da coalescência por colisões randômicas:

$$\begin{aligned}C'_{CT} &= 0,003; \\ C_{CT} &= \frac{C'_{CT}6}{\pi} \\ C &= 3,0 \\ \alpha_{max} &= 0,75\end{aligned}$$

- Coeficientes relativos à modelagem da coalescência por capturas nas esteiras:

$$C_{TW} = 0,042$$

- Coeficientes relativos à modelagem da quebra induzida por impacto de vórtices turbulentos:

$$C_B = 0,026$$

$$We_{crit} = 8,0$$

5.7 Procedimento numérico

O sistema final de equações a ser resolvido para cada um dos modelos de transporte de área interfacial é composto por equações diferenciais ordinárias. Este tipo de sistema pode ser resolvido através de um código integrador numérico. Neste trabalho optou-se por utilizar o integrador DASSLC (*Differential-Algebraic System Solver in C*) devido à sua conhecida robustez e acurácia.

DASSLC

O pacote DASSLC (*Differential-Algebraic System Solver in C*) é um solucionador de equações algébrico-diferenciais escrito na linguagem de programação C. O algoritmo de integração usado pela DASSLC é uma extensão do código da DASSL de PETZOLD [81]. O algoritmo de setup utilizado pela DASSLC é baseado no código DAWRS, pacote solucionador de equações algébrico-diferenciais em computadores paralelos (SECCHI [82], SECCHI *et al.* [83]).

O propósito da DASSLC é resolver numericamente um problema de valor inicial em um sistema de equações algébrico-diferenciais com a seguinte forma:

$$\begin{cases} F(t, y, \dot{y}, u) = 0 \\ y(t_0) = y_0 \\ \dot{y}(t_0) = \dot{y}_0 \end{cases} \quad (5.65)$$

onde $F : \mathfrak{R} \times \mathfrak{R}^N \times \mathfrak{R}^N \times \mathfrak{R}^r \rightarrow \mathfrak{R}^N$ é uma função não-linear, $y(t) \in \mathfrak{R}^N$ é o vetor das variáveis desconhecidas, $\dot{y}(t) \in \mathfrak{R}^N$ é o vetor com as derivadas em relação ao tempo das variáveis desconhecidas e $u(t) \in \mathfrak{R}^r$ é o vetor de entrada. Sistemas de equações diferenciais ordinárias são incluídas nesta formulação como casos especiais de equações algébrico-diferenciais.

A DASSLC usa um esquema de diferenciação para trás (*backward-differentiation-formula* - BDF) com pivô fixo e passos de tempo variáveis para a solução de equações algébrico-diferenciais de ordem zero e um.

Os critérios de convergência adotados na solução dos sistemas de equações para o modelo de balanço populacional e para o modelo de transporte de área interfacial foram bastante rígidos (tolerâncias absolutas e relativas de 10^{-10}). Dessa forma, a solução numérica é virtualmente livre de erros de integração numérica.

Capítulo 6

Resultados

6.1 Casos testes

A fim de avaliar as aproximações e hipóteses adotadas na dedução da equação de transporte de área interfacial com 1 grupo de bolhas, formulada no Capítulo 3, os resultados obtidos utilizando o modelo de área interfacial serão confrontados com os resultados obtidos com a modelagem usando balanço populacional, apresentada no Capítulo 2, para os mesmos mecanismos de quebra e coalescência, apresentados no Capítulo 4.

Apesar do grande número de publicações relacionadas a avaliações do modelo de transporte de área interfacial com 1 e 2 grupos, poucos são os artigos que contém um conjunto de dados experimentais completo, com todos os parâmetros necessários para a avaliação da modelagem do transporte de área interfacial.

6.1.1 Condições avaliadas

Os dados experimentais escolhidos para a comparação entre os modelos foram os de KIM [50] em sua tese de doutorado. O trabalho de KIM [50] teve os seguintes objetivos: formular a equação de transporte de área interfacial para escoamentos de bolhas dispersas, modelar mecanisticamente as interações entre bolhas a serem utilizadas como termos fonte e sumidouro na equação de transporte de área interfacial e desenvolver técnicas de medição para escoamentos bifásicos, gerando uma base de dados para ser utilizada na avaliação do modelo de transporte de área interfacial. Os dados experimentais e os resultados obtidos com o modelo de transporte de área interfacial foram posteriormente publicados por KIM *et al.* [49].

Os experimentos foram realizados em um duto vertical retangular, construído em acrílico no Laboratório de Termo-Hidráulica e Segurança de Reatores da

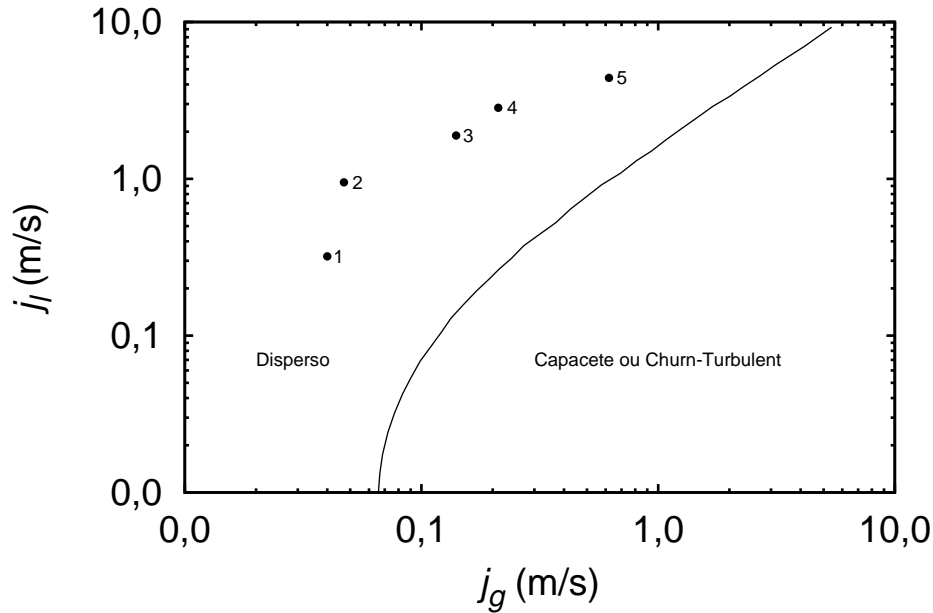


Figura 6.1: Condições experimentais avaliadas - transição de regime por MISHIMA e ISHII [85]

Universidade de Purdue, com seção de 200 por 10mm e diâmetro hidráulico de 19mm. Os parâmetros locais do escoamento bifásico foram adquiridos por sensores duplos de condutividade minituarizados, desenvolvidos e avaliados em uma série de publicações do mesmo grupo (WU e ISHII [84] e KIM *et al.* [61]), e posicionados em 6 posições axiais diferentes. Em cada estação de medição, a malha de medição é composta por 36 pontos, distribuídos em 1/4 da área total de escoamento.

KIM [50] avaliou 9 condições experimentais diferentes. Entretanto, para somente 5 dessas condições, todos os dados necessários para a avaliação da equação de transporte de área interfacial puderam ser extraídos de sua tese.

Assim, cinco condições experimentais diferentes, todas no regime de escoamento disperso, conforme o mapa de regime proposto por MISHIMA e ISHII [85], foram utilizadas para a comparação entre os modelos realizada neste trabalho e estão representadas na figura 6.1.

A tabela 6.1 resume as condições experimentais avaliadas, apresentando os valores obtidos experimentalmente para velocidades superficiais do gás e do líquido na segunda estação de medição, posicionada em $z = 0,6621m$, onde $z = 0$ é a posição em que o gás é injetado. A opção por utilizar estes valores como dados de entrada é uma tentativa de evitar os possíveis efeitos de entrada e desenvolvimento

do escoamento. A pressão e concentração de área interfacial também são conhecidas nesta posição e utilizadas como dados de entrada.

Dados experimentais para a fração de gás, concentração de área interfacial

Tabela 6.1: Casos analisados

Caso	\mathbf{j}_l (m/s)	\mathbf{j}_g (m/s)	α_0 (°)	\mathbf{a}_l (1/m)	\mathbf{p} (Pa)	$\frac{d\mathbf{p}}{dz}$ (Pa/m)	KIM [50]
1	0,32	0,04	0,084	186,89	30603,60	9250,38	<i>Run 1</i>
2	0,95	0,05	0,038	87,72	35073,44	11636,70	<i>Run 3</i>
3	1,89	0,14	0,059	125,06	38464,37	11521,98	<i>Run 5</i>
4	2,84	0,21	0,050	151,23	36275,59	13219,94	<i>Run 7</i>
5	4,40	0,62	0,078	188,53	52254,53	20676,09	<i>Run 9</i>

e pressão foram disponibilizados por KIM [50] para diferentes alturas ao longo do escoamento e serão utilizados nas comparações realizadas e são apresentadas na tabela 6.1 para $z = 0,6621$.

6.1.2 A constante C_0

Conforme justificado no capítulo 5, a fração de vazio no contorno obtida experimentalmente por KIM [50] não era satisfeita caso o parâmetro da distribuição, C_0 , proposto por KIM [50] fosse utilizado.

Neste trabalho, optou-se por duas abordagens:

1. Calcular a fração de vazio utilizando a constante C_0 proposta por KIM [50] e desprezar o valor experimental. Os casos em que C_0 obtido por KIM [50] foram adotados recebem o prefixo *A*.
2. Calcular um valor para C_0 em cada caso, de forma que a fração de vazio no contorno seja satisfeita. Os casos que utilizaram esta abordagem recebem o prefixo *B*.

Assim, o número de casos analisados é multiplicado por dois, conforme apresentado na tabela 6.2.

6.1.3 A razão r_0

O aparato experimental desenvolvido por KIM [50] permite uma distribuição monodispersa no início. Dois valores para a razão entre o desvio padrão e a média da distribuição Gama no contorno, r_0 , foram avaliados, sendo eles:

- $r_0 = 0,1$, que é um valor aceitável para uma distribuição ser considerada monodispersa;
- $r = 0,5$, para analisar a sensibilidade do modelo de balanço populacional à polidispersão.

Assim, para cada condição avaliada com o modelo de área interfacial, dois casos foram simulados com o modelo de balanço populacional. Os parâmetros da distribuição Gama inicial (Equação A.1) para cada um dos 10 casos simulados são apresentados na tabela 6.2.

Tabela 6.2: Parâmetros da distribuição Gama inicial para cada caso analisado

Caso	a_I	α_g	C_0	$r_0 = 0,1$			$r_0 = 0,5$		
				N_{T_0}	b	c	N_{T_0}	b	c
A-1	186,89	0,068	1,076	12734082	$5,345e^{-11}$	100	13765182	$1,235e^{-9}$	4
A-2	87,72	0,036	1,076	4488218	$8,021e^{-11}$	100	4854368	$1,854e^{-9}$	4
A-3	125,06	0,058	1,076	5008635	$1,158e^{-10}$	100	5420560	$2,675e^{-9}$	4
A-4	151,23	0,060	1,076	8327550	$7,205e^{-11}$	100	9009009	$1,665e^{-9}$	4
A-5	189,00	0,111	1,076	4870557	$2,279e^{-10}$	100	5269654	$5,266e^{-9}$	4
B-1	186,89	0,084	0,773	8206330	$1,0236e^{-10}$	100	8879492	$2,365e^{-9}$	4
B-2	87,72	0,038	1,024	4186866	$9,076e^{-11}$	100	4530281	$2,097e^{-9}$	4
B-3	125,06	0,059	1,067	4978902	$1,185e^{-10}$	100	5383997	$2,740e^{-9}$	4
B-4	151,23	0,050	1,308	12272950	$4,074e^{-11}$	100	13278096	$9,414e^{-10}$	4
B-5	189,00	0,078	1,544	9844755	$7,923e^{-11}$	100	10649918	$1,831e^{-9}$	4

As distribuições Gama adimensionalizadas iniciais para os casos $A-1$, $A-2$, $A-3$, $A-4$ e $A-5$, para os dois valores de r_0 , são apresentadas nas Figuras 6.2, 6.3, 6.4, 6.5 e 6.6, respectivamente, enquanto que as distribuições Gama adimensionalizadas utilizadas para a inicialização dos casos $B-1$, $B-2$, $B-3$, $B-4$ e $B-5$, para os dois valores diferentes de r_0 , são apresentadas nas Figuras 6.7, 6.8, 6.9, 6.10 e 6.11.

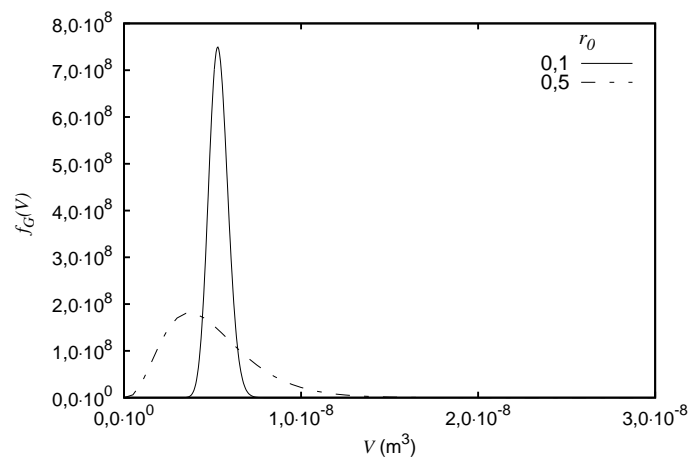


Figura 6.2: Distribuição Gama adimensionalizada - Caso A – 1

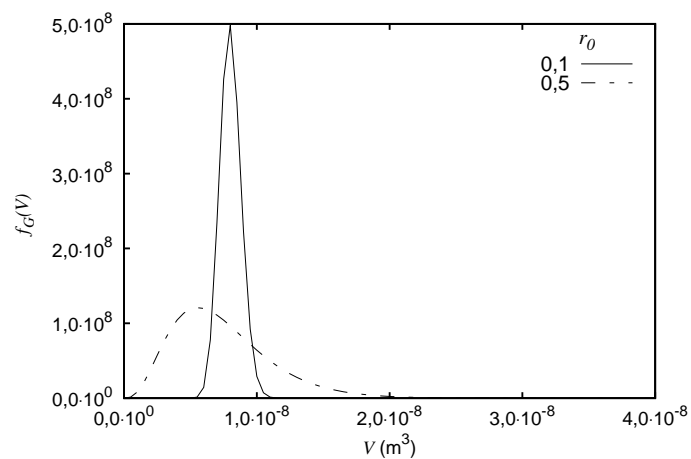


Figura 6.3: Distribuição Gama adimensionalizada - Caso A – 2

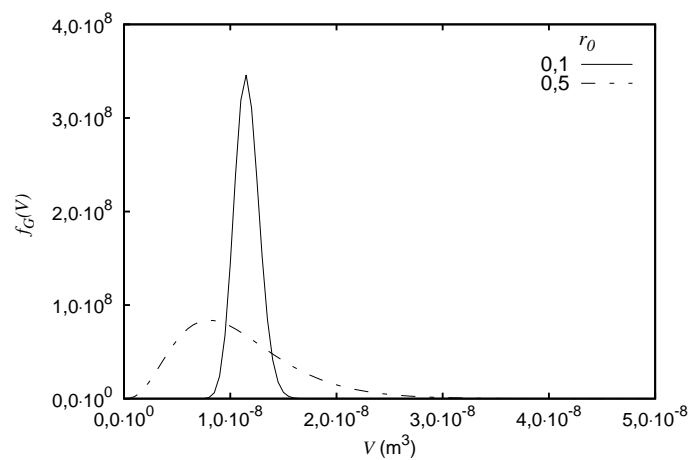


Figura 6.4: Distribuição Gama adimensionalizada - Caso A – 3

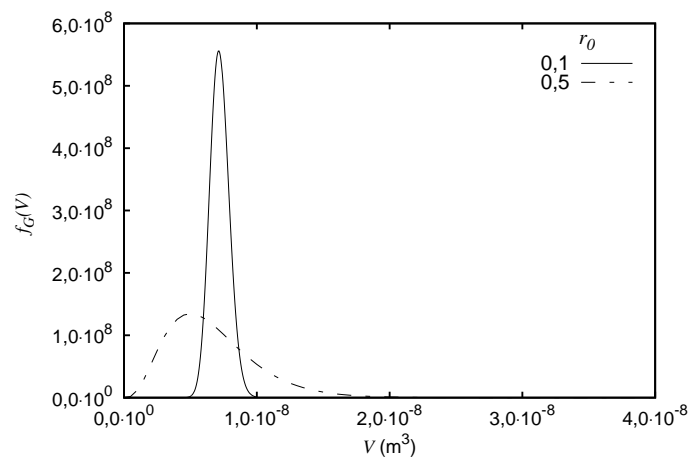


Figura 6.5: Distribuição Gama adimensionalizada - Caso A – 4

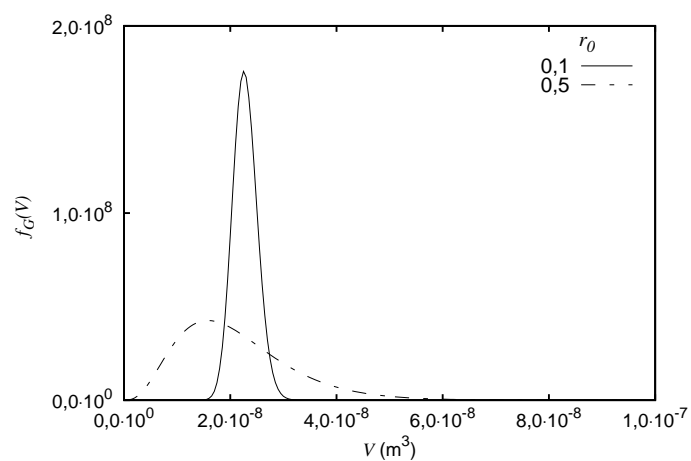


Figura 6.6: Distribuição Gama adimensionalizada - Caso A – 5

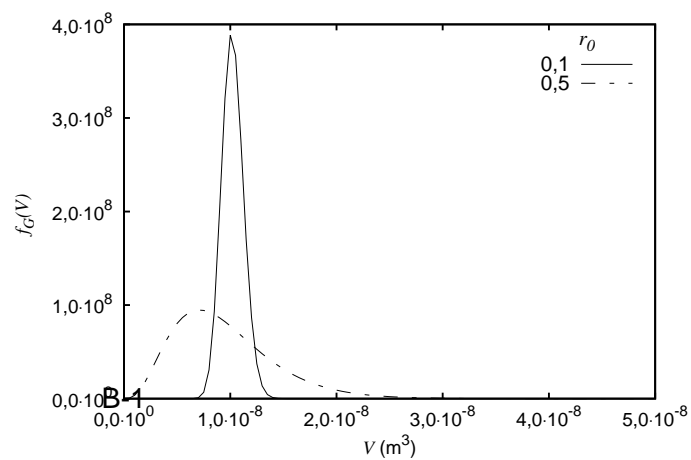


Figura 6.7: Distribuição Gama adimensionalizada - Caso B – 1

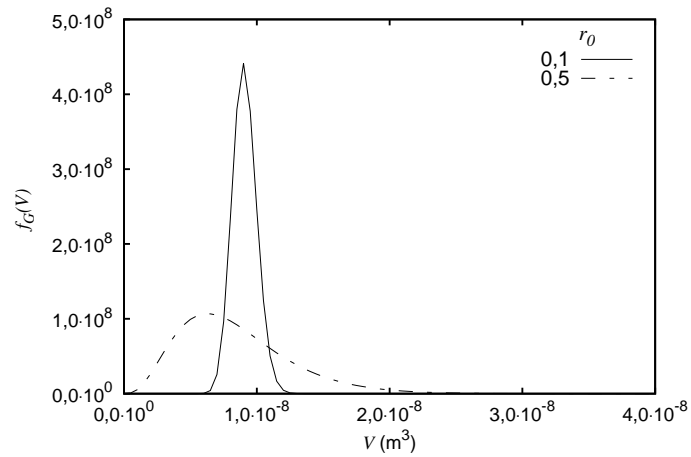


Figura 6.8: Distribuição Gama adimensionalizada - Caso $B - 2$

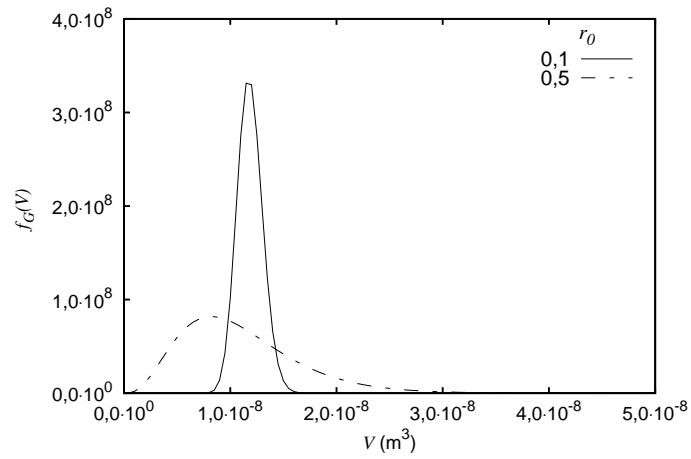


Figura 6.9: Distribuição Gama adimensionalizada - Caso $B - 3$

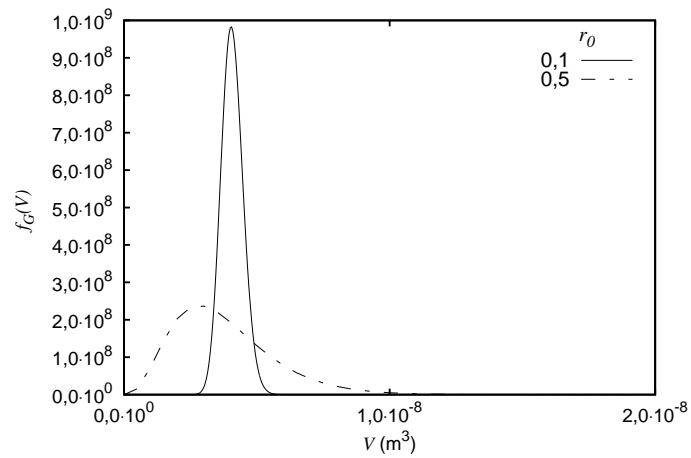


Figura 6.10: Distribuição Gama adimensionalizada - Caso $B - 4$

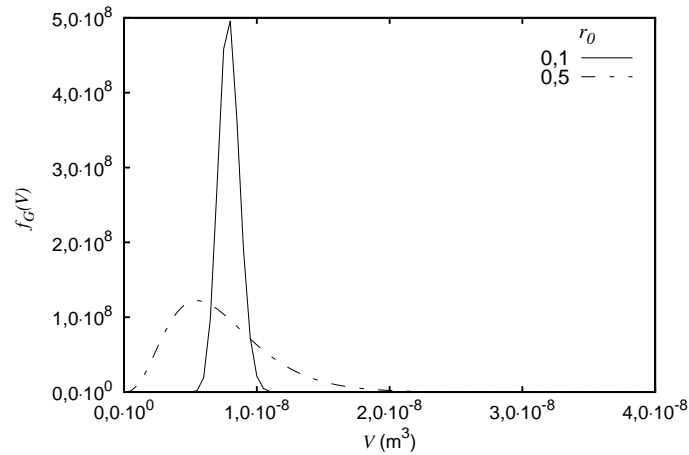


Figura 6.11: Distribuição Gama adimensionalizada - Caso $B - 5$

6.2 Convergência do DQMOM

Antes de avaliar a concordância entre os métodos de área interfacial, é necessário avaliar a convergência dos métodos numéricos utilizados. A rotina DASSLC é conhecida no meio científico pela sua acurácia na solução de sistemas de equações algébrico-diferenciais. Critérios de convergência bastante rígidos, conforme visto na seção 5.7, foram adotados nas análises desta dissertação, permitindo uma solução numérica virtualmente livre de erros de integração. Entretanto, ainda existe o erro de quadratura do método DQMOM. O objetivo desta seção é avaliar a convergência do método DQMOM. Para tal, simulações com 1, 2, 3 e 4 pontos de quadratura foram realizadas.

Para reduzir o número de gráficos, os casos 1 e 5 foram selecionados para serem reportados. A escolha destes dois casos se deve ao fato de que o caso 1 é o que apresenta a maior influência dos mecanismos de coalescência e o caso 5 é o que apresenta maior variação de área interfacial e a quebra é o mecanismo de interação dominante.

O comportamento de convergência com o aumento do número de pontos de quadratura foi verificado em todos os casos avaliados. Para exemplificar, a convergência do DQMOM para os casos $A - 1$, $B - 1$, $A - 5$ e $B - 5$ são apresentados nas Figuras 6.12 a 6.19.

Como pode ser verificado nas Figuras 6.12 a 6.19, as diferenças entre os valores de fração de vazio e concentração de área interfacial obtidos utilizando-se 2 e 3 pontos de quadratura, considerando todos os mecanismos de interação entre partículas, foram muito pequenas. As diferenças entre os valores de fração de vazio

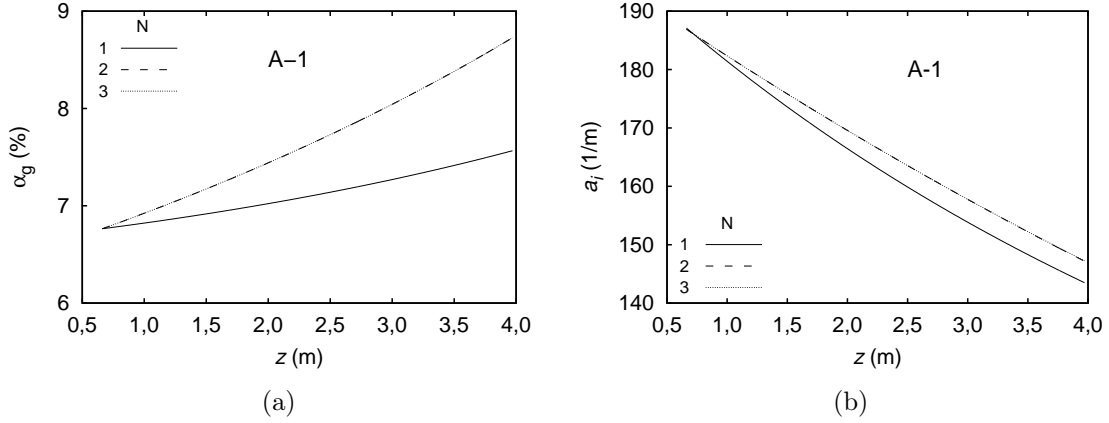


Figura 6.12: Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concentração de área interfacial para o caso $A - 1$ com $r_0 = 0, 1$

e concentração de área interfacial obtidos com 3 e 4 pontos de quadratura são praticamente nulas. Porém, o aumento do custo computacional quando se aumenta N de 3 para 4 é considerável. Dessa forma, foi adotado $N = 3$ para as comparações entre os modelos e demais avaliações do modelo de balanço populacional.

É interessante notar que as avaliações realizadas com $N = 1$ apresentam resultados para a fração de gás consideravelmente diferentes dos resultados obtidos com 2 ou mais pontos de quadratura. Tal fato é esperado, já que com a adoção de momentos fracionários $\frac{k}{3}$, a fração de gás só passa a ser conservada para $k \geq 2$. Ou seja, ao menos 2 pontos de quadratura devem ser utilizados para garantir a conservação da fração de vazio do gás. Com $N = 2$, a conservação o número de bolhas (μ_0), densidade de área interfacial ($\mu_{2/3}$) e volume (μ_1) são garantidas.

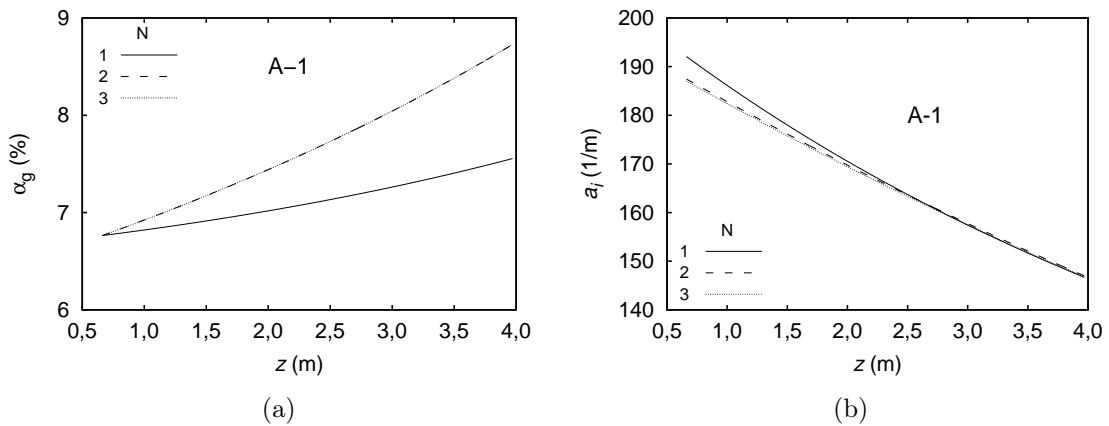


Figura 6.13: Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concentração de área interfacial para o caso $A - 1$ com $r_0 = 0, 5$

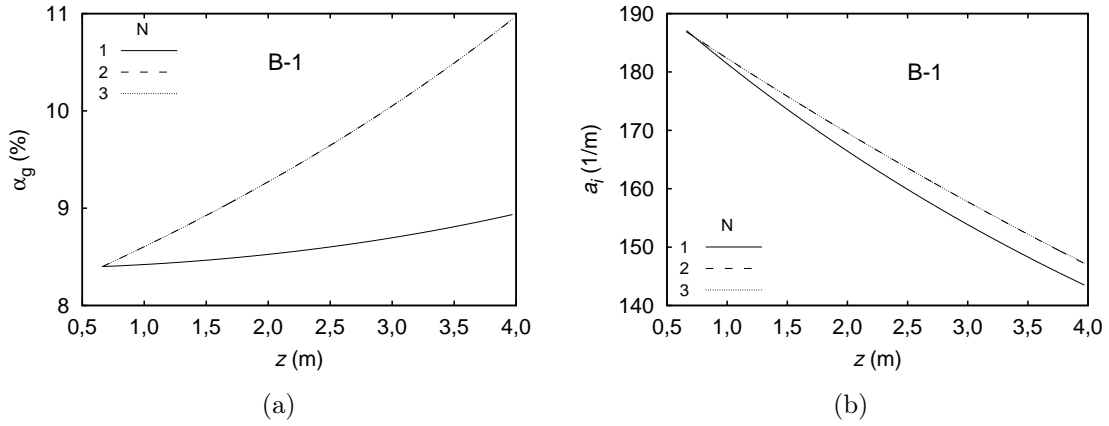


Figura 6.14: Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concentração de área interfacial para o caso $B - 1$ com $r_0 = 0, 1$

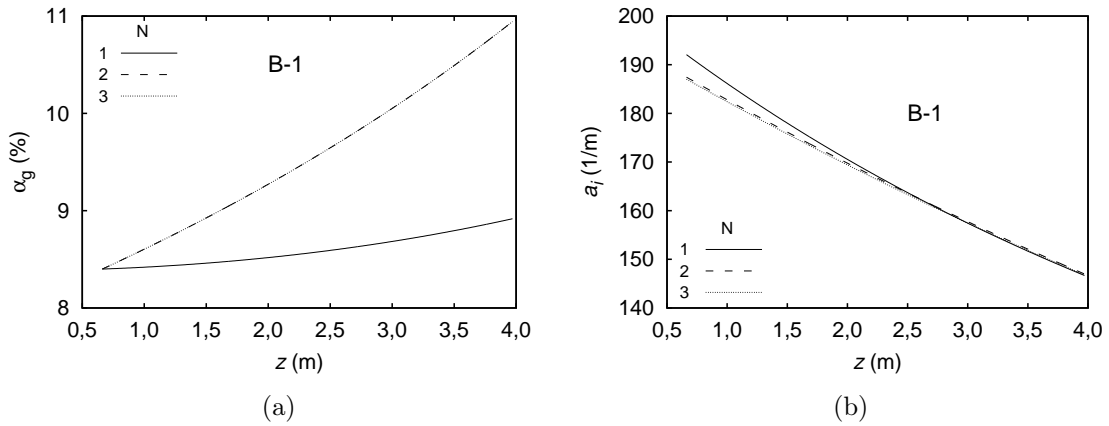


Figura 6.15: Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concentração de área interfacial para o caso $B - 1$ com $r_0 = 0, 5$

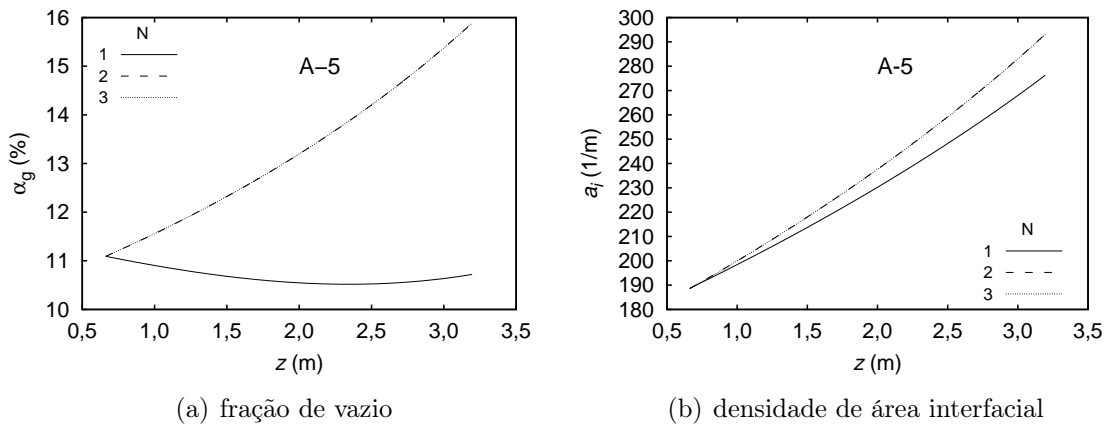


Figura 6.16: Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concentração de área interfacial para o caso $A - 5$ com $r_0 = 0, 1$

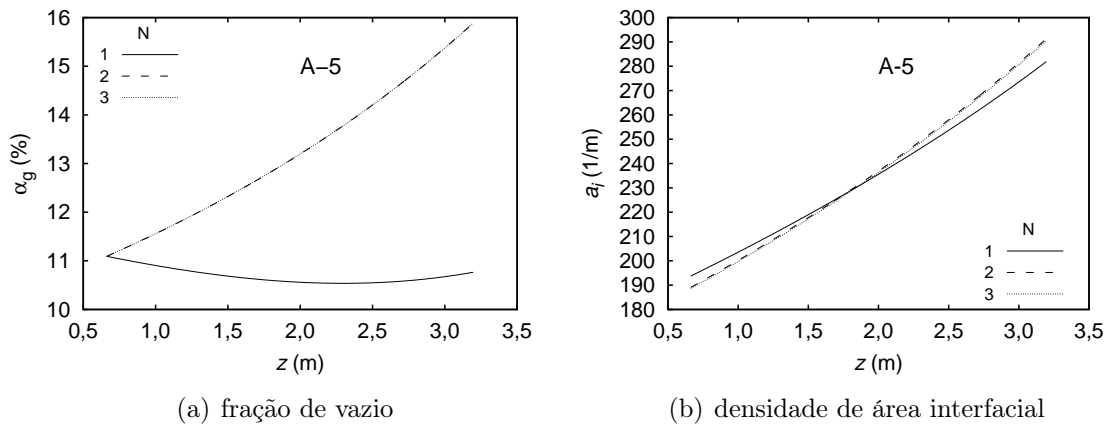


Figura 6.17: Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concentração de área interfacial para o caso $A - 5$ com $r_0 = 0,5$

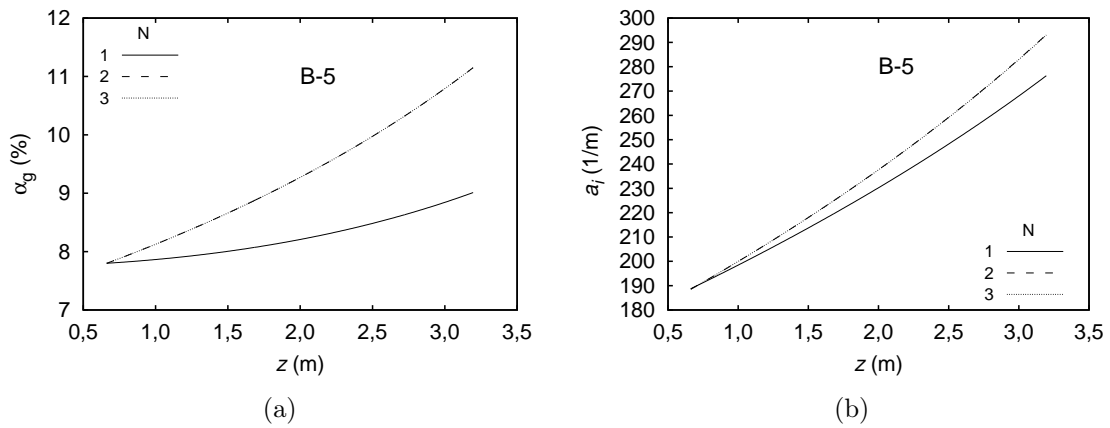


Figura 6.18: Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concentração de área interfacial para o caso $B - 5$ com $r_0 = 0,1$

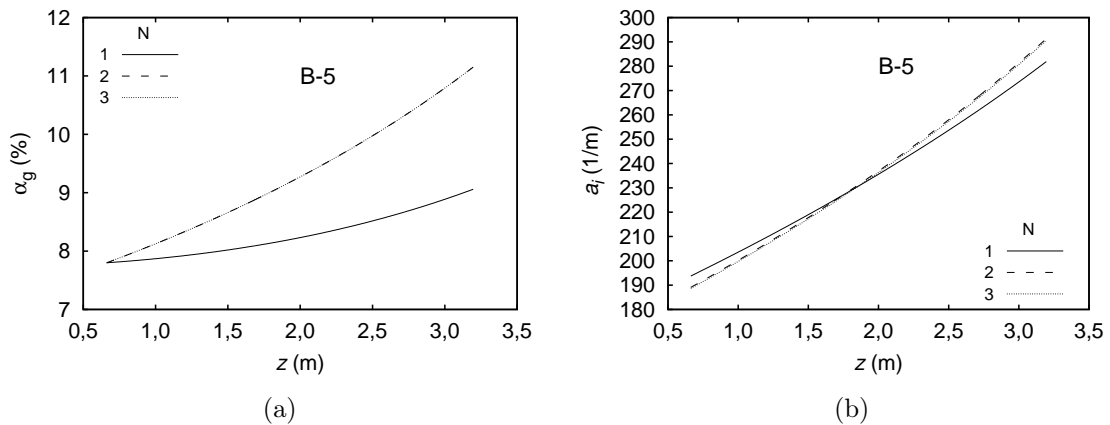


Figura 6.19: Convergência do DQMOM para a (a) fração de vazio e (b) concentração de área interfacial para o caso $B - 5$ com $r_0 = 0,5$

6.3 Evolução dos pesos e abscissas

As figuras 6.20 a 6.25 apresentam a evolução dos pesos e abscissas para os casos 1 e 5, considerando somente a expansão das bolhas (E), a expansão e a quebra das bolhas (E + B), e a expansão e coalescência das bolhas (E+C), para a solução do DQMOM com 3 pontos de quadratura.

A expansão somente faz com que as bolhas aumentem de tamanho, não alterando o número de bolhas. Assim, as abscissas aumentam (Figuras 6.20a, 6.21a, 6.22a, 6.23a, 6.26a, 6.27a, 6.24a, 6.25a) enquanto que os pesos se mantêm constantes (Figuras 6.20b, 6.21b, 6.22b, 6.23b, 6.26b, 6.27b, 6.24b, 6.25b) quando somente a expansão está presente para todos os casos analisados.

No caso 1, como as velocidades são baixas e a quebra não tem quase influência, as abscissas se comportam de forma muito semelhante quando a quebra é considerada junto com a expansão (Figuras 6.20c, 6.21c, 6.22c e 6.23c) e quando somente a expansão é levada em conta (Figuras 6.20a, 6.21a, 6.22a e 6.23a). Como o número de partículas praticamente não se altera devido à quebra, o peso referente a cada abscissa se mantêm praticamente constante, como pode ser visualizado nas Figuras 6.20d, 6.21d, 6.22d e 6.23d.

Por outro lado, a coalescência têm forte influência sobre a distribuição das bolhas. Tal comportamento se reflete na evolução das abscissas para o caso 1, conforme pode ser visualizado nas Figuras 6.20e, 6.21e, 6.22e e 6.23e, que crescem mais do que quando somente a expansão é considerada.

Como a quebra é o mecanismo de interação dominante no caso 5, as abscissas diminuem em relação ao caso só com expansão, evidenciando a diminuição do tamanho médio das bolhas, como pode ser verificado nas Figuras 6.26c, 6.27c, 6.24c e 6.25c. O peso da abscissa menor ganha maior importância, enquanto que o peso da abscissa maior decresce, conforme mostrado nas Figuras 6.26d, 6.27d, 6.24d e 6.25d.

O comportamento quando a coalescência está presentes junto com a expansão deve ser analisado com cuidado. Apesar das abscissas atingirem valores maiores do que quando só a expansão está presente, conforme mostram as Figuras 6.26e e 6.24e, o peso da abscissa de menor diâmetro ganha uma importância muito maior e a abscissa com diâmetro mais elevado tem importância quase nula, como

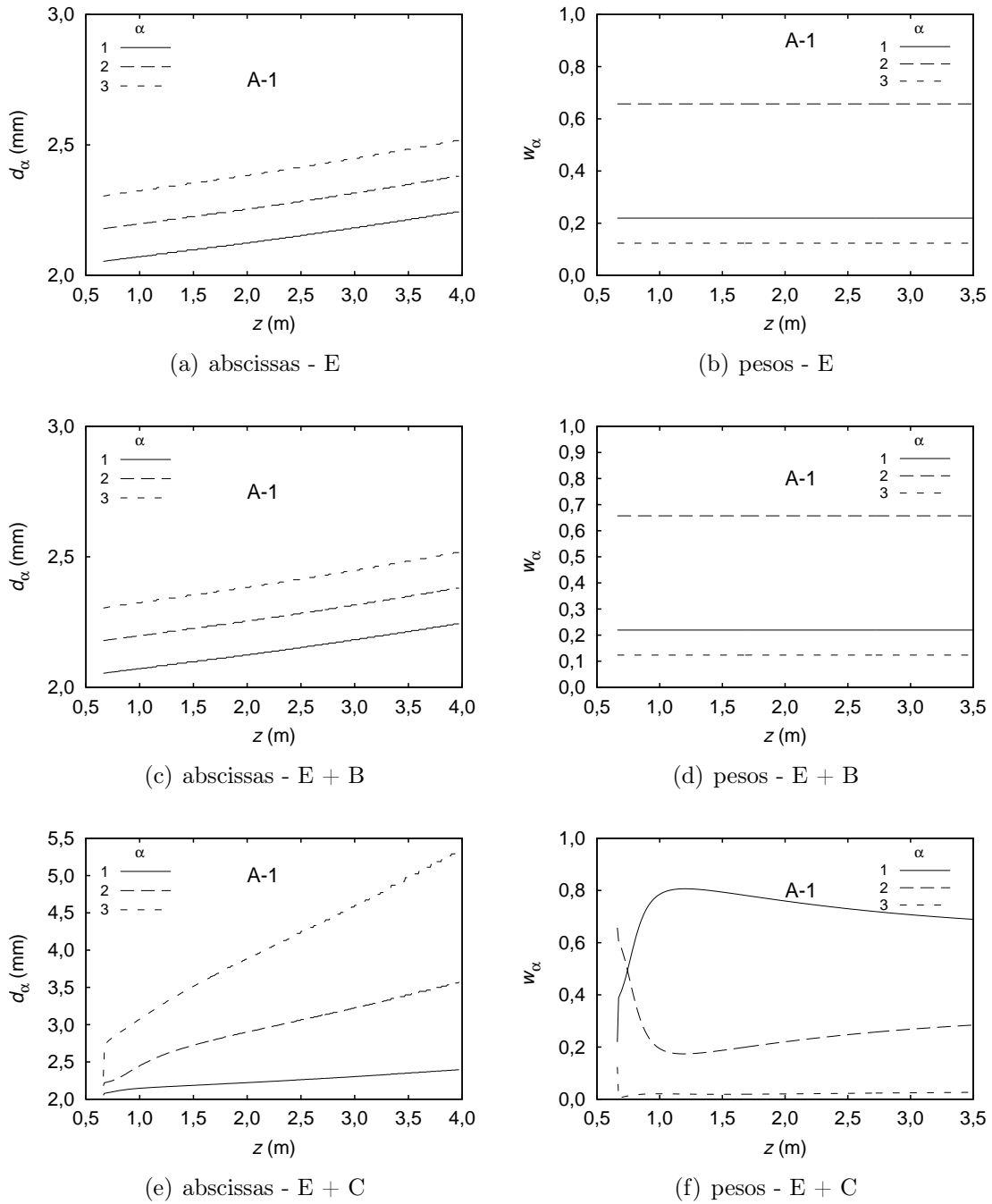
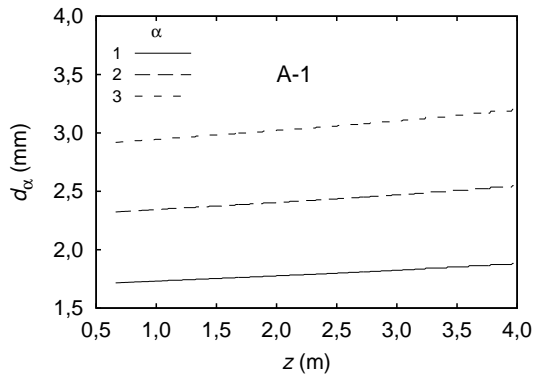


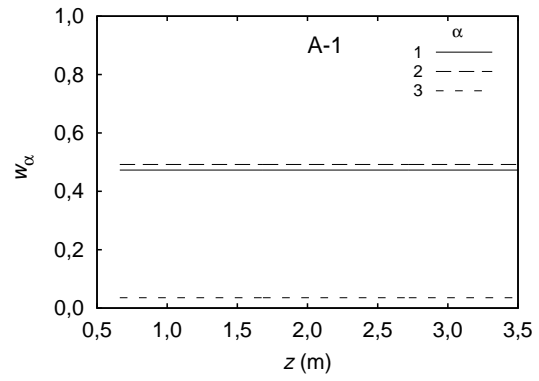
Figura 6.20: Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso $A - 1$ com $r_0 = 0, 1$

pode ser verificado nas Figuras 6.26f e 6.24f. Para os casos com $r_0 = 0, 5$, ou seja, para uma distribuição não monodispersa, as abscissas se comportam de forma semelhante ao caso só com expansão, exceto pela abscissa 3, que não tem quase importância, como pode ser visualizado nas Figuras 6.27e, 6.27f, 6.25e e 6.25f.

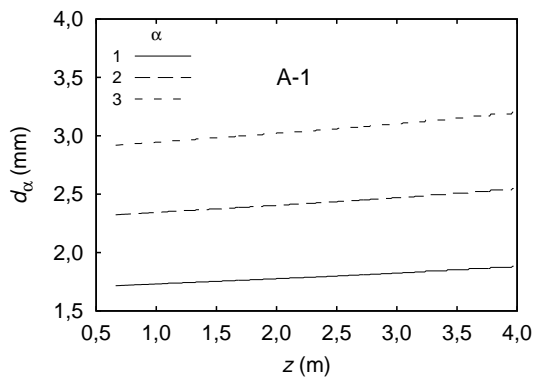
Fica evidente, então, que o método DQMOM é capaz de adaptar suas abscissas e pesos de forma a acompanhar a evolução da distribuição de partículas,



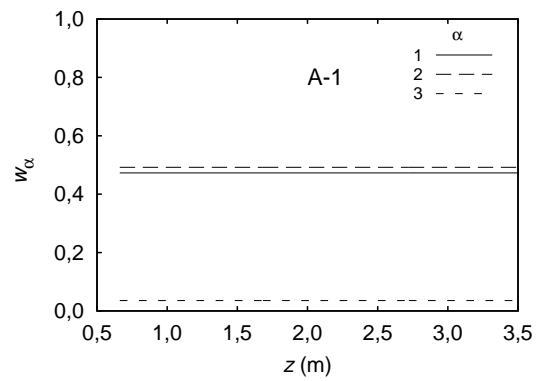
(a) abscissas - E



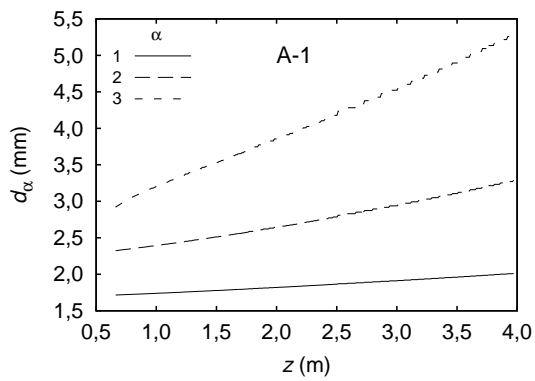
(b) pesos - E



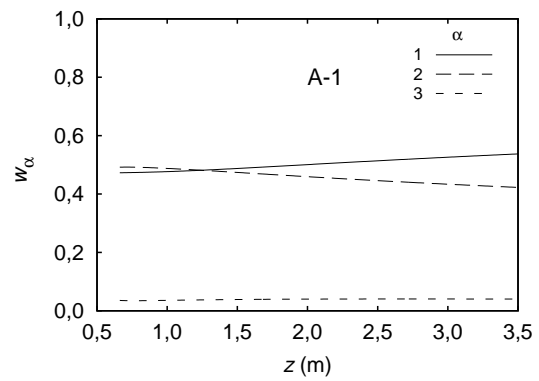
(c) abscissas - E + B



(d) pesos - E + B



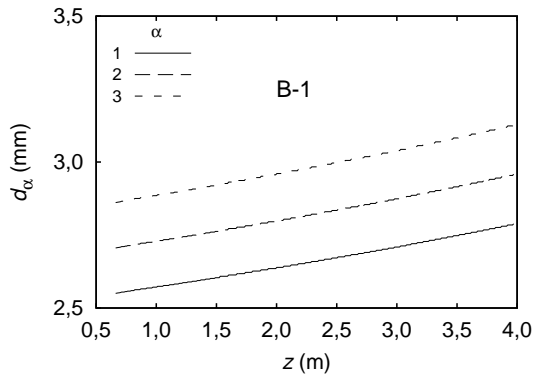
(e) abscissas - E + C



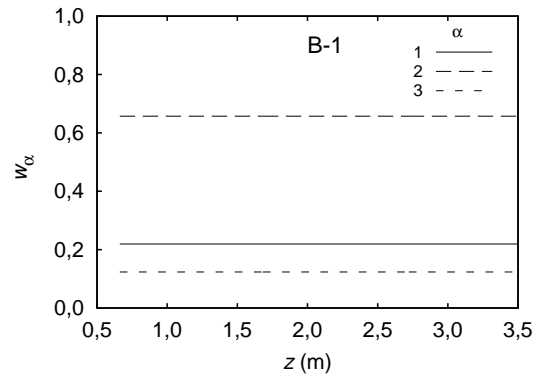
(f) pesos - E + C

Figura 6.21: Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso A-1 com $r_0 = 0,5$

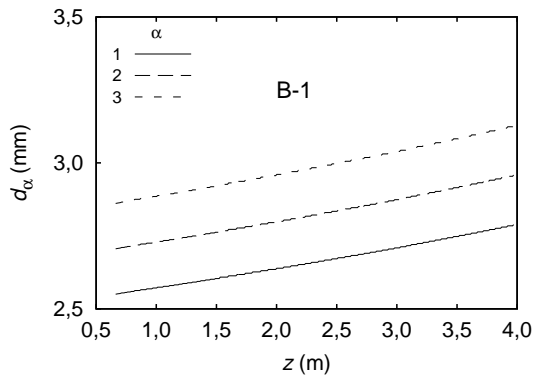
influenciada pela quebra e coalescência.



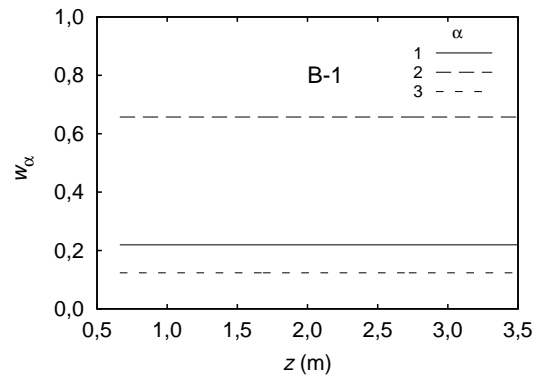
(a) abcissas - E



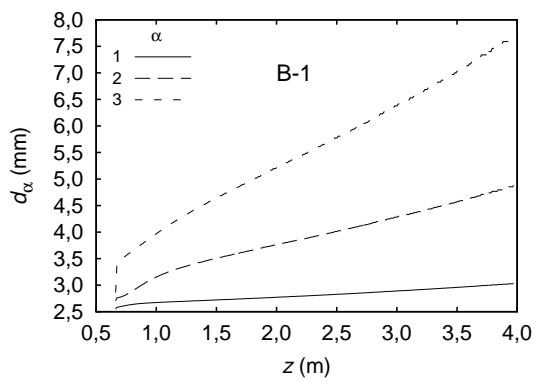
(b) pesos - E



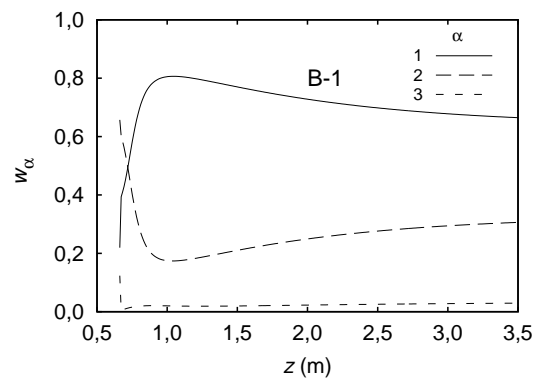
(c) abcissas - E + B



(d) pesos - E + B

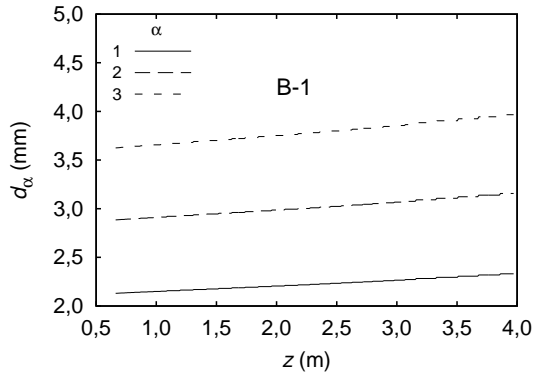


(e) abcissas - E + C

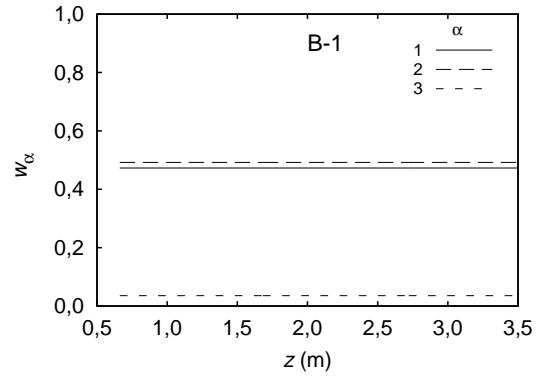


(f) pesos - E + C

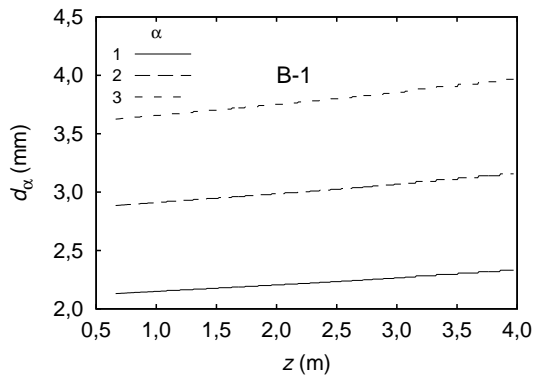
Figura 6.22: Evolução dos pesos, w_α , e abcissas em diâmetro, d_α , para o caso $B - 1$ com $r_0 = 0, 1$



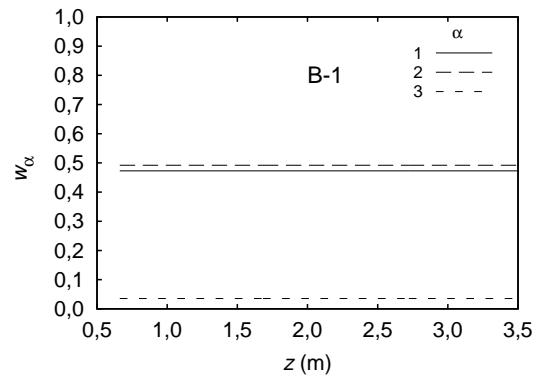
(a) abscissas - E



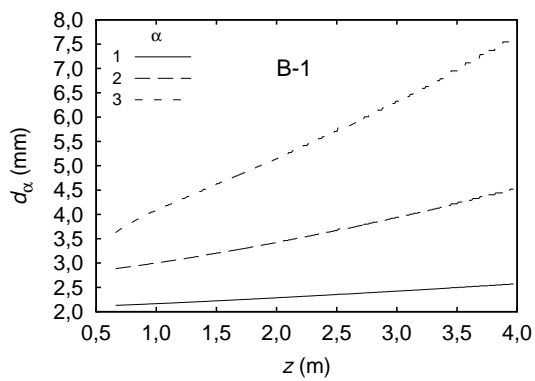
(b) pesos - E



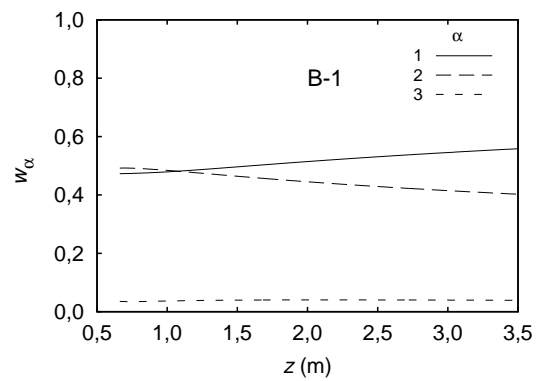
(c) abscissas - E + B



(d) pesos - E + B

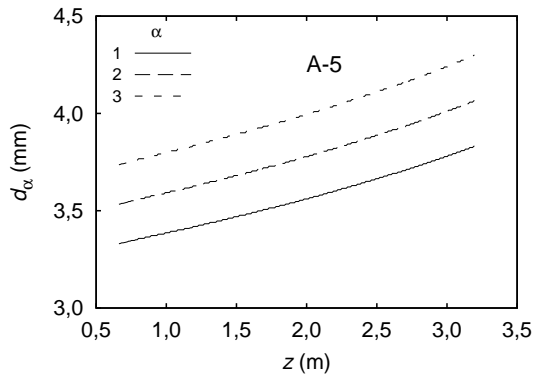


(e) abscissas - E + C

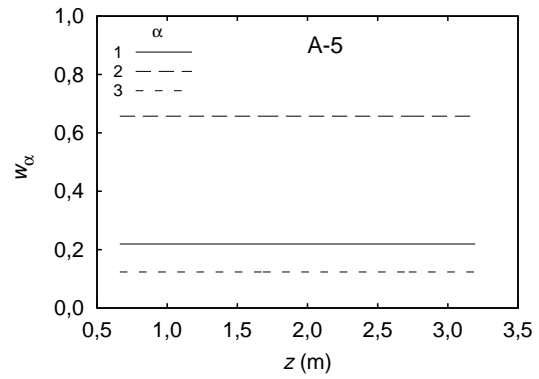


(f) pesos - E + C

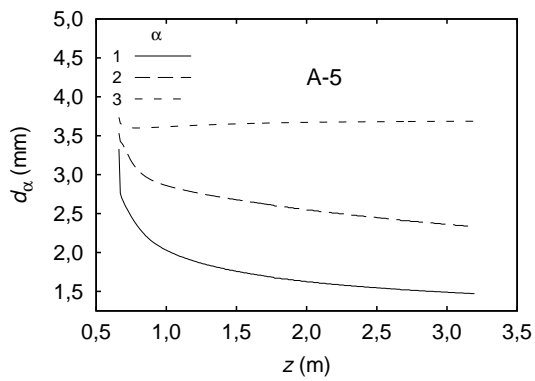
Figura 6.23: Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso $B - 1$ com $r_0 = 0,5$



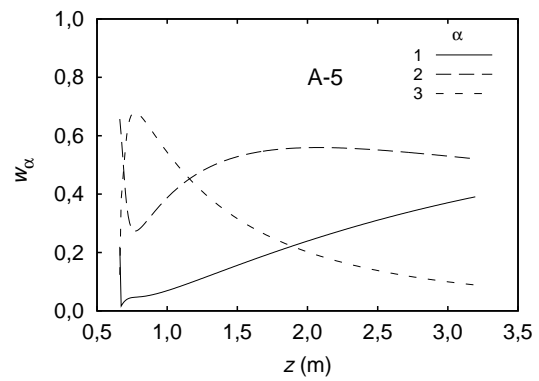
(a) abscissas - E



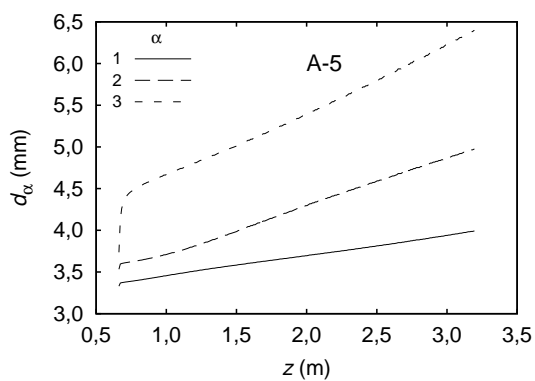
(b) pesos - E



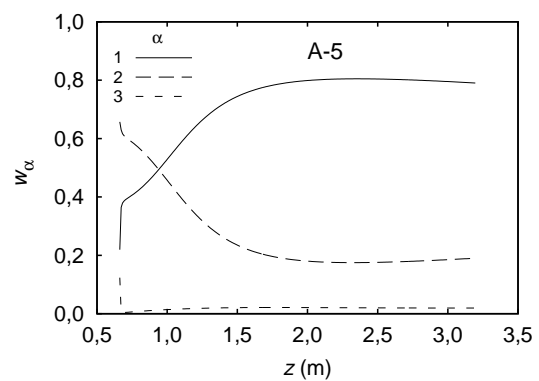
(c) abscissas - E + B



(d) pesos - E + B

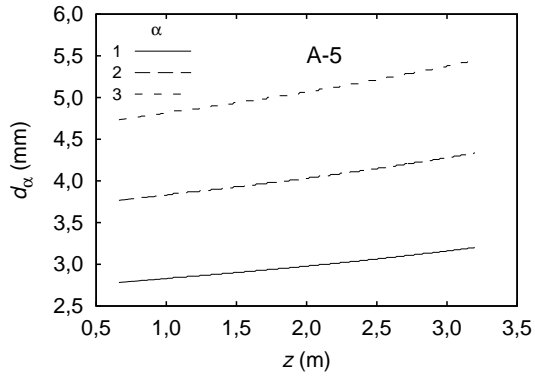


(e) abscissas - E + C

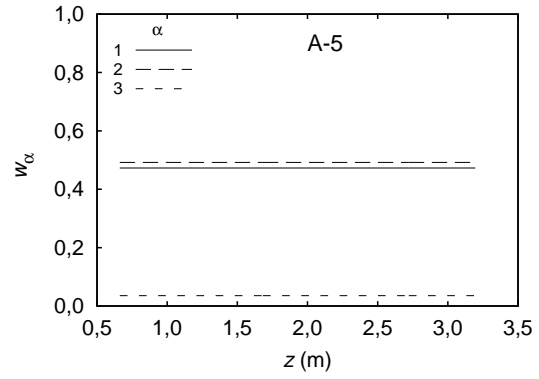


(f) pesos - E + C

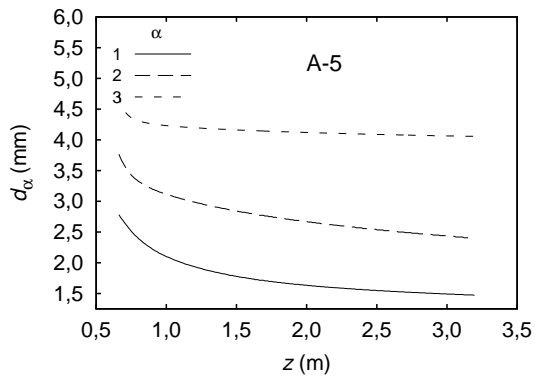
Figura 6.24: Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso A – 5 com $r_0 = 0, 1$



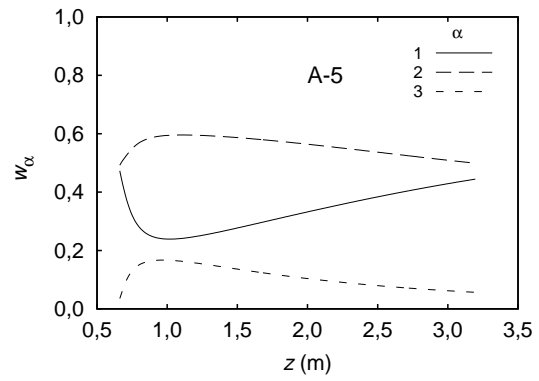
(a) abscissas - E



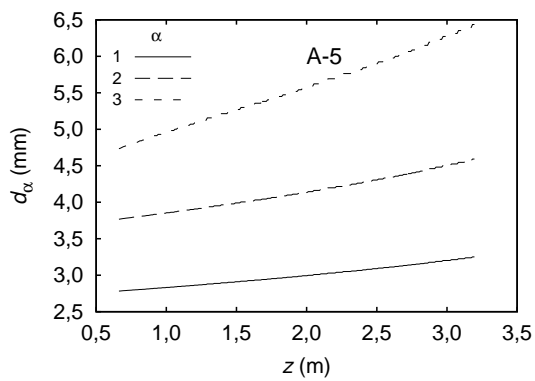
(b) pesos - E



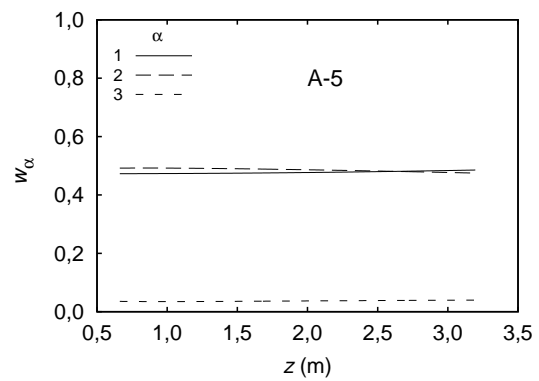
(c) abscissas - E + B



(d) pesos - E + B



(e) abscissas - E + C



(f) pesos - E + C

Figura 6.25: Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso A-5 com $r_0 = 0,5$

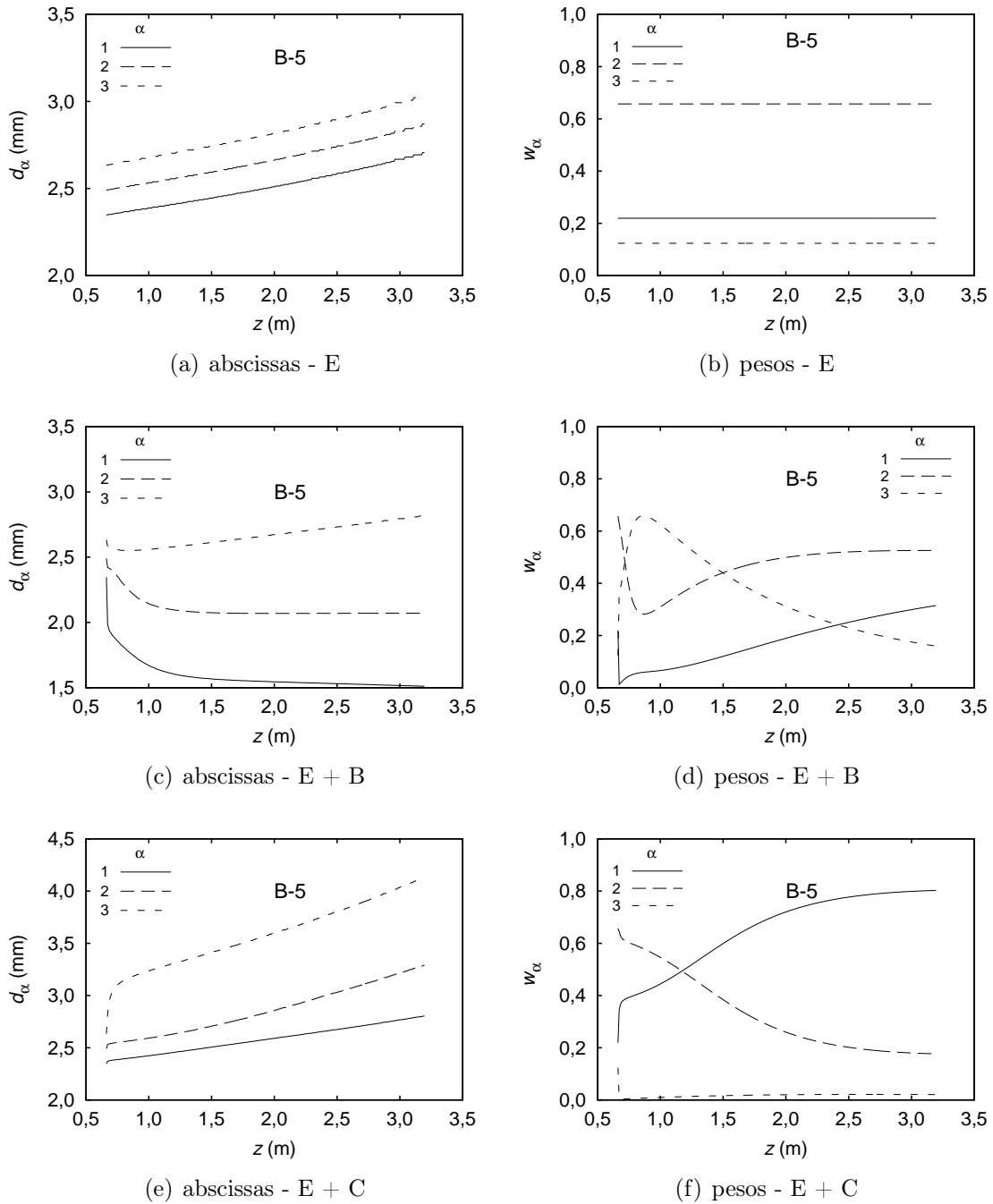
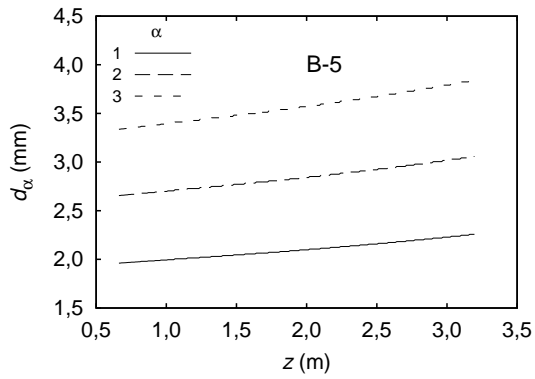
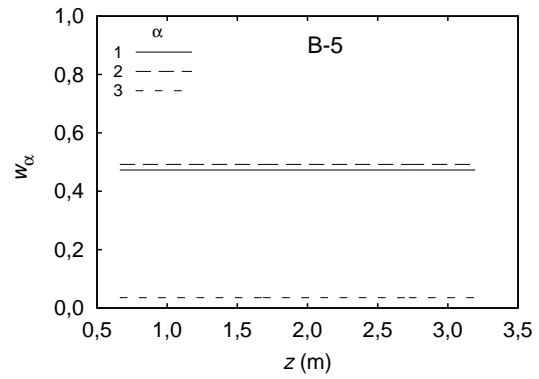


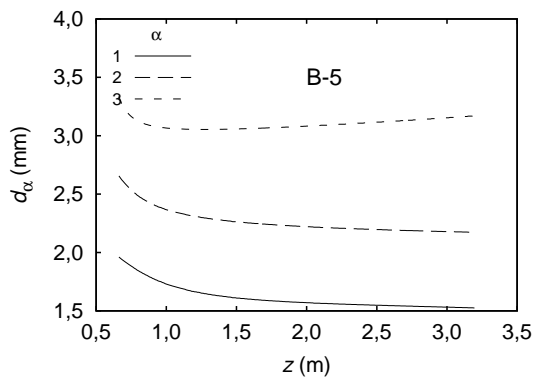
Figura 6.26: Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso $B - 5$ com $r_0 = 0, 1$



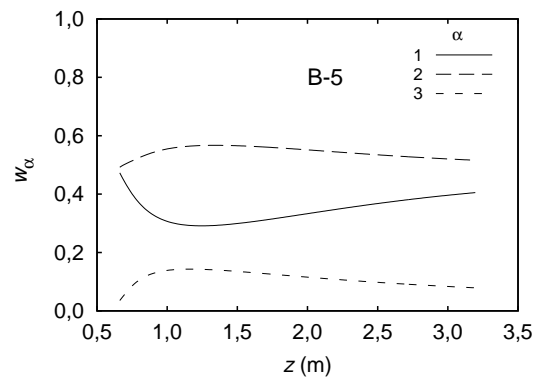
(a) abscissas - E



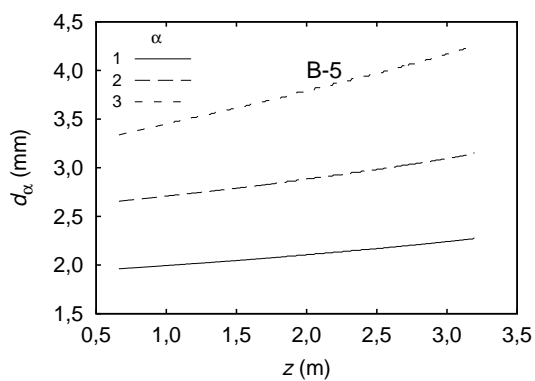
(b) pesos - E



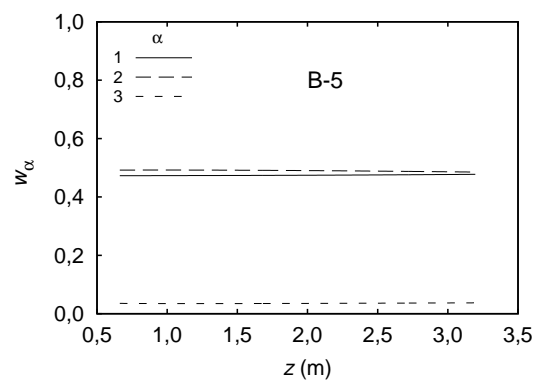
(c) abscissas - E + B



(d) pesos - E + B



(e) abscissas - E + C



(f) pesos - E + C

Figura 6.27: Evolução dos pesos, w_α , e abscissas em diâmetro, d_α , para o caso $B - 5$ com $r_0 = 0,5$

6.4 Avaliação dos mecanismos de interação entre partículas

Como as constantes dos termos fonte referentes aos modelos de quebra e coalescência foram ajustadas por KIM [50] utilizando o modelo de *drift-flux* com o parâmetro da distribuição, C_0 , com valor constante e igual a 1,076, somente os casos do tipo A serão avaliados nesta seção.

Os resultados para a concentração de área interfacial obtidos para as seguintes combinações dos mecanismos: expansão (E), quebra (B), coalescências por colisões turbulentas (CT), coalescências por capturas nas esteiras (CW) e com todos os mecanismos de interação mais a expansão (E + B + CT + CW) usando os modelos de balanço populacional (DQMOM) e de transporte de área interfacial (IAM) serão confrontados frente aos resultados experimentais e aos resultados obtidos por KIM [50].

As Figuras 6.28a, 6.29a, 6.30a, 6.31a e 6.32a apresentam os resultados do modelo de área interfacial, enquanto que as Figuras 6.28b, 6.29b, 6.30b, 6.31b e 6.32b apresentam os resultados obtidos pelo método de balanço populacional para os casos $A - 1$, $A - 2$, $A - 3$, $A - 4$ e $A - 5$, respectivamente. Para todos os casos estudados, as tendências para a concentração de área interfacial são as mesmas para cada mecanismo de interação nos dois métodos.

No caso 1, a quebra não tem praticamente influência, conforme esperado, já que as velocidades são baixas e não conseguem atingir o número de Weber crítico para que a quebra ocorra, conforme as Figuras 6.28a e 6.28b. A coalescência por colisões randômicas tem um pequeno efeito quando comparada com a coalescência por capturas nas esteiras, que é o mecanismo de interação dominante. Tal fato se deve às baixas velocidades, que não promovem a turbulência, limitando o encontro de bolhas por colisões randômicas.

Conforme as velocidades aumentam, a contribuição da quebra torna-se evidente, como nos casos $A - 4$ e $A - 5$. É interessante que com o aumento de velocidades do caso $A - 4$ para o caso $A - 5$, a importância da quebra aumenta significativamente. No caso $A - 5$, que possui as maiores velocidades dentre os casos analisados, a quebra é claramente o mecanismo que mais contribui para a variação de área interfacial, juntamente com a expansão das bolhas, conforme as Figuras 6.32a e 6.32b.

A contribuição do mecanismo de coalescência por colisões randômicas ganha

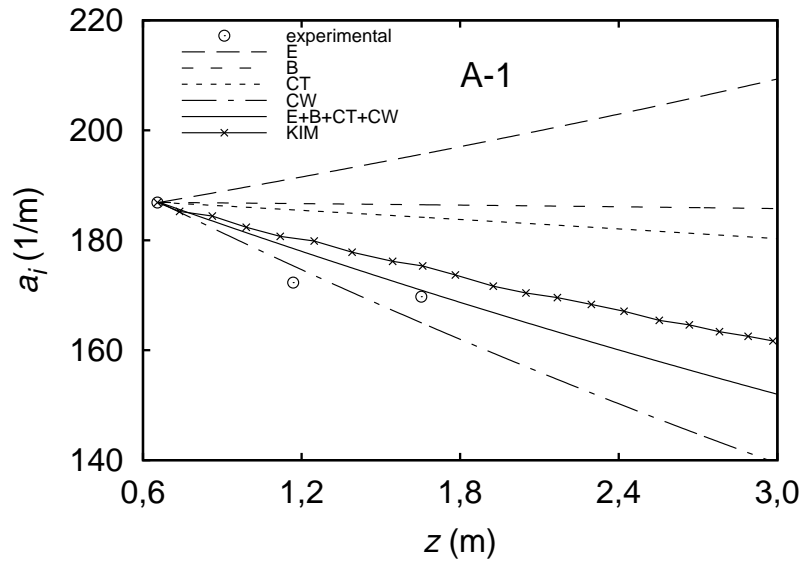
importância em relação à coalescência por captura nas esteiras no caso $A - 4$, quando as velocidades e as flutuações turbulentas aumentam, promovendo a colisão das bolhas, como pode ser visualizado nas Figuras 6.31a e 6.31b.

O modelo de área interfacial chega mais próximo dos dados experimentais do que o modelo de balanço populacional. Este fato é facilmente justificado pelo fato de que as constantes do modelo foram ajustadas para que o modelo de área interfacial fosse capaz de reproduzir estes dados experimentais. Nos casos $A - 2$ e $A - 3$, os resultados obtidos por KIM [50] são bastante diferentes dos comportamentos experimentais, conforme as Figuras 6.29a e 6.30a. Dessa forma, não era de se esperar que a equação de transporte de área interfacial e a equação de balanço populacional fossem capazes de reproduzir os dados experimentais, já que utilizaram as mesmas constantes ajustadas por KIM [50].

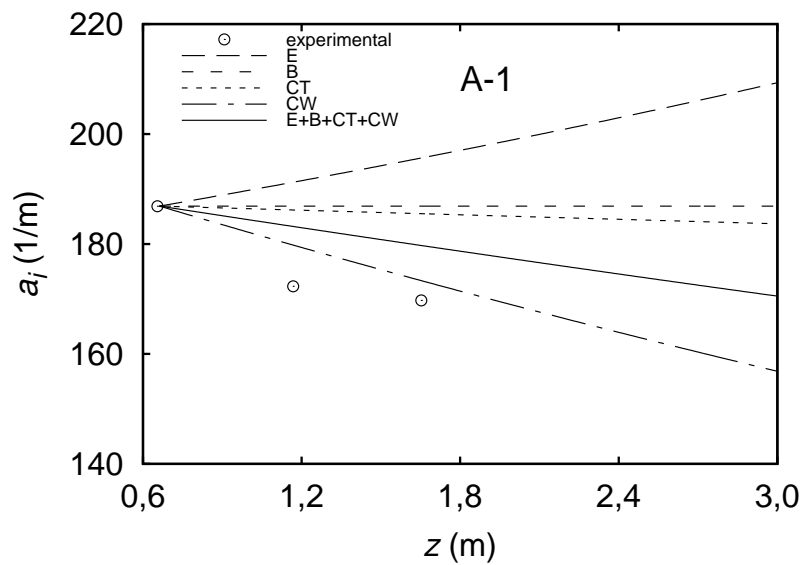
Convém apontar as diferenças entre os resultados obtidos para a concentração de área interfacial com o modelo de área interfacial resolvido nesta dissertação e os resultados obtidos por KIM [50], como apresentado nas Figuras 6.28a, 6.29a e 6.30a. Como ambos os trabalhos utilizaram a mesma equação de transporte de área interfacial, com os mesmos termos fonte para quebras e coalescências, tal discrepância precisa ser explicada.

Como o integrador utilizado neste trabalho é bastante robusto e as tolerâncias na integração foram muito pequenas, não se acredita que a diferença se deva a erros numéricos das simulações deste trabalho. Por outro lado, KIM [50] utilizou o método explícito de Euler de primeira ordem para resolver a equação de transporte de área interfacial, o que deve ter introduzido erros numéricos em sua solução. Esta suspeita é reforçada pelo resultados de um programa inicialmente implementado nesta dissertação utilizando o método explícito de Euler.

Além disso, o código disponibilizado por KIM [50] no apêndice de sua tese possui duas passagens que podem ser erros. A primeira delas é o termo de coalescência por capturas nas esteiras. No código disponibilizado por KIM [50], o coeficiente de arraste está sendo elevado a 1, enquanto que o correto é elevá-lo a $1/3$. A segunda incoerência encontrada é o fato de que o valor da massa específica utilizada no cálculo da fração de vazio pelo modelo de *drift-flux* é a massa específica do gás sob pressão atmosférica e não a massa específica local do gás. Não é possível, entretanto, afirmar que o código disponibilizado foi o código efetivamente utilizado.

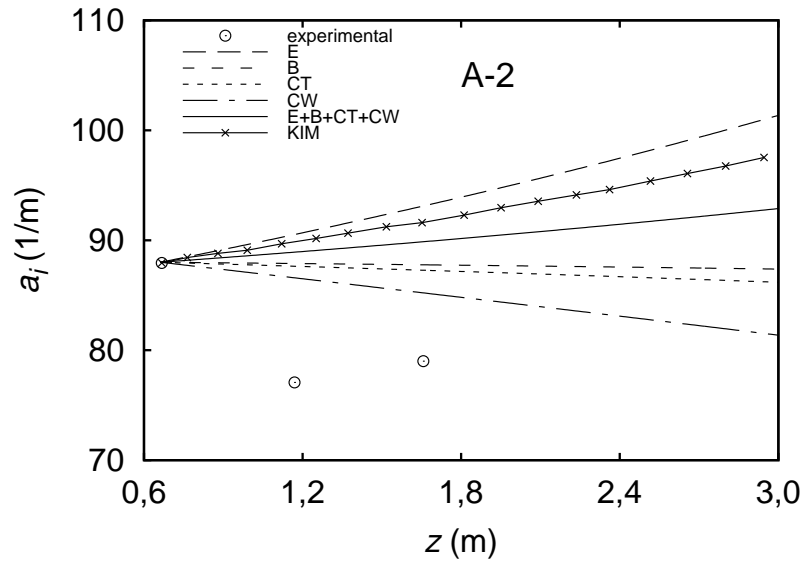


(a)

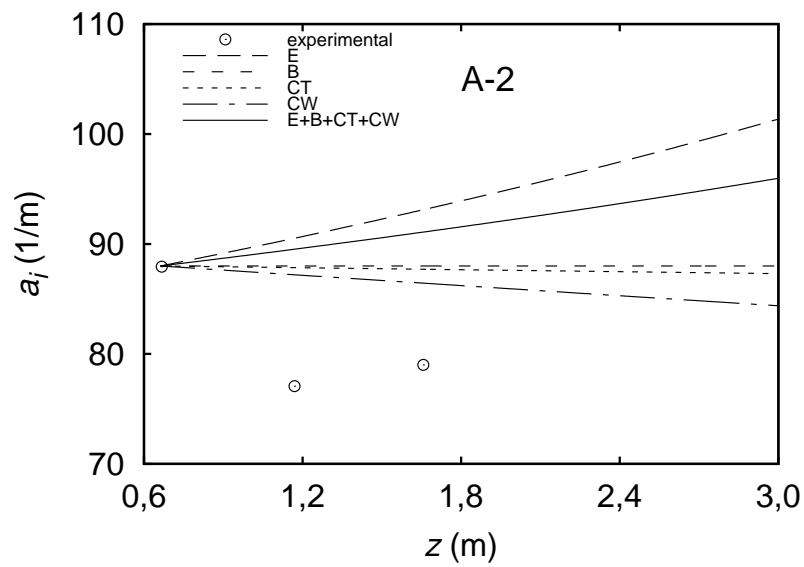


(b)

Figura 6.28: Influência dos mecanismos na variação da concentração de área interfacial - Caso A - 1 - (a) IAM (b) DQMOM com $r_0 = 0, 1$

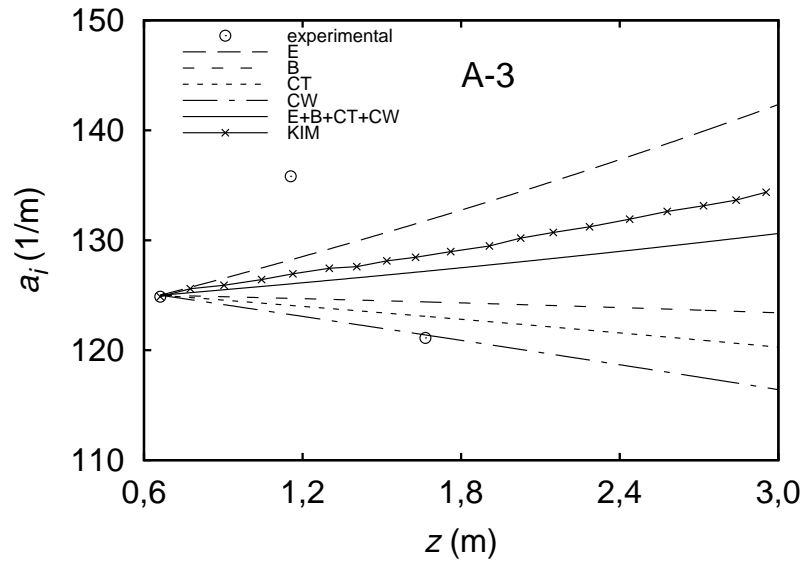


(a)

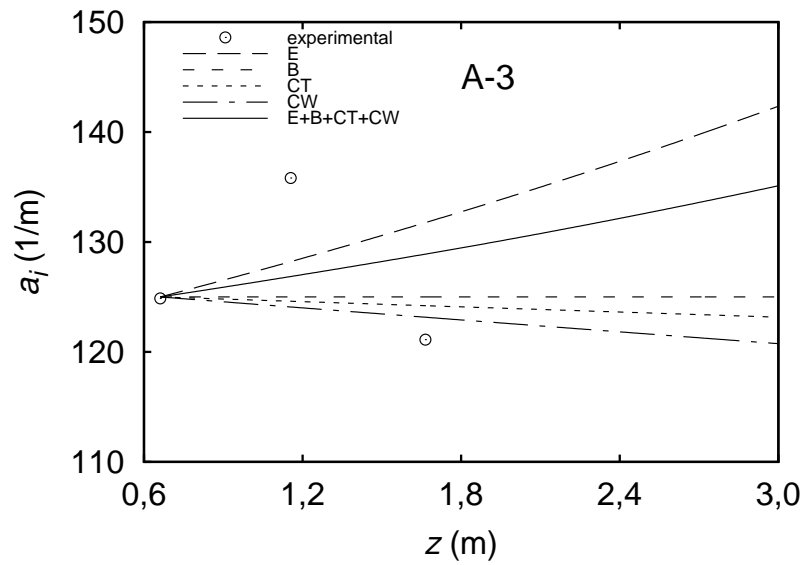


(b)

Figura 6.29: Influência dos mecanismos na variação da concentração de área interfacial - Caso A - 2 - (a) IAM (b) DQMOM com $r_0 = 0, 1$

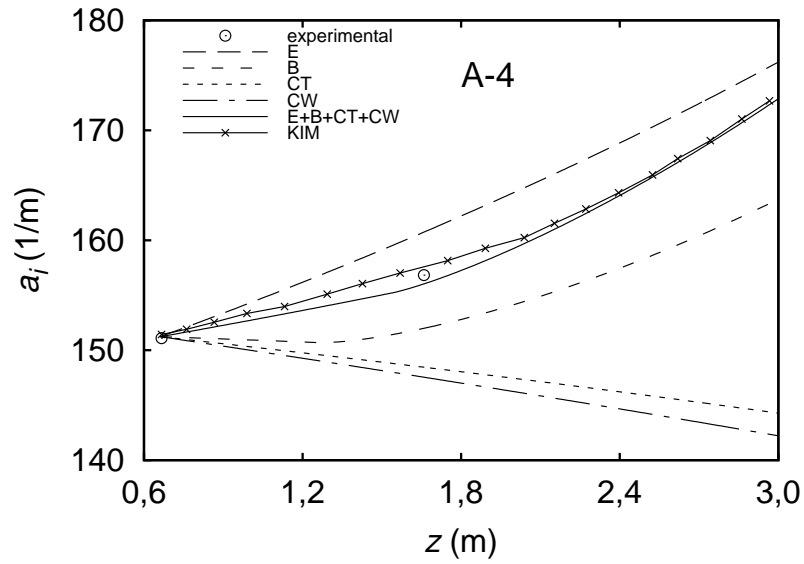


(a)

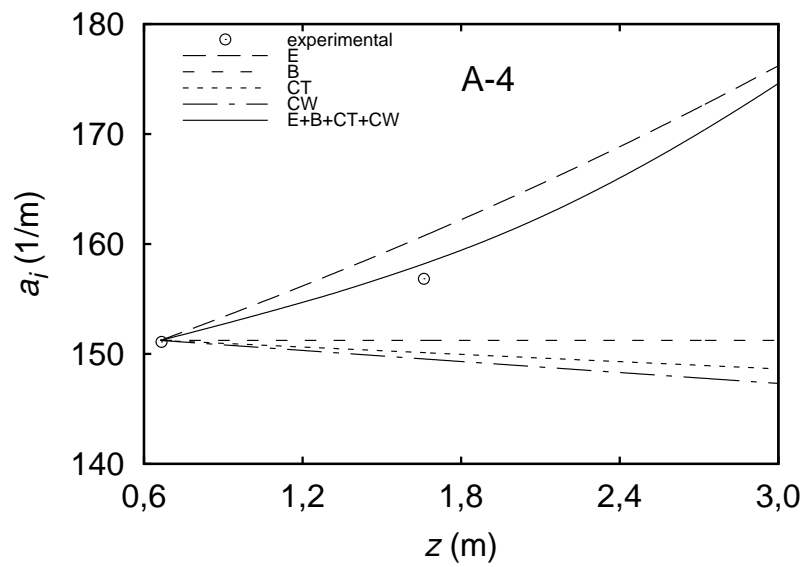


(b)

Figura 6.30: Influência dos mecanismos na variação da concentração de área interfacial - Caso A - 3 - (a) IAM (b) DQMOM com $r_0 = 0, 1$

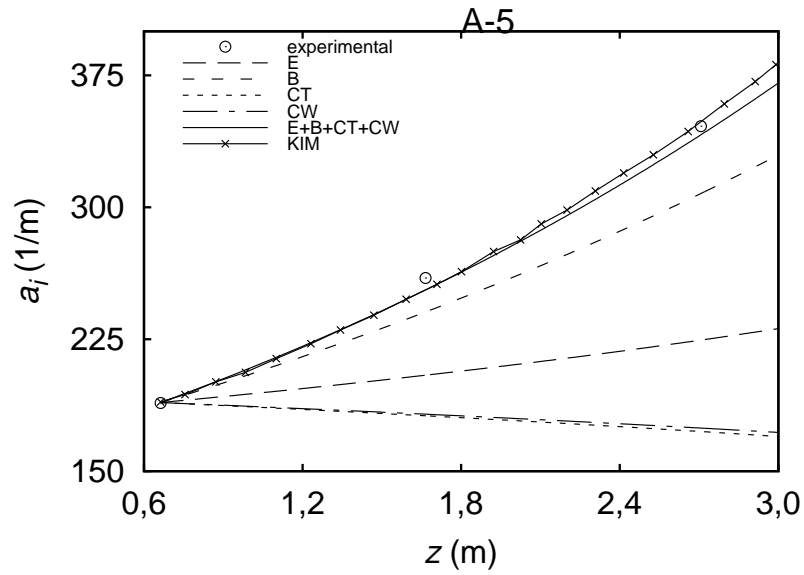


(a)

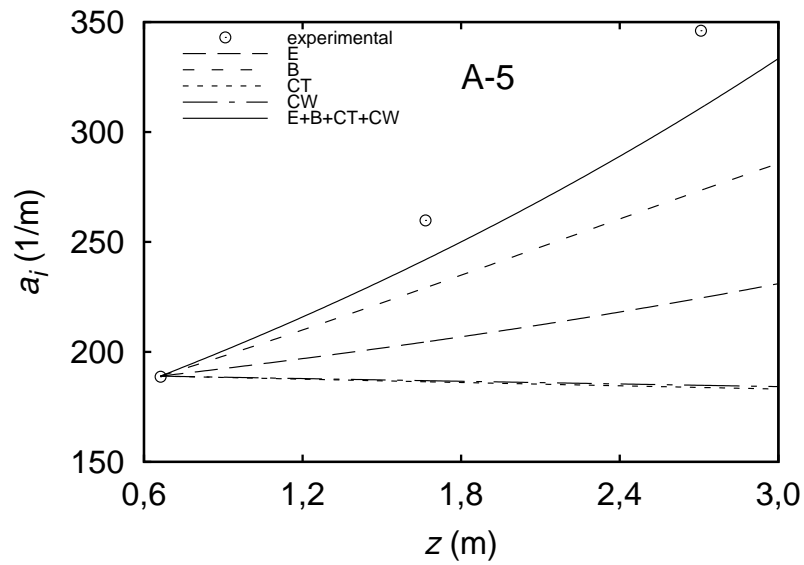


(b)

Figura 6.31: Influência dos mecanismos na variação da concentração de área interfacial - Caso A - 4 - (a) IAM (b) DQMOM com $r_0 = 0, 1$



(a)



(b)

Figura 6.32: Influência dos mecanismos na variação da concentração de área interfacial - Caso A - 5 - (a) IAM (b) DQMOM com $r_0 = 0, 1$

6.5 Comparação entre os modelos

O objetivo deste trabalho é comparar os dois modelos de transporte de área interfacial, independentemente dos modelos para os mecanismos de quebra e coalescência terem sido bem desenvolvidos ou não. Assumindo que os modelos de quebra e coalescência são válidos, o modelo de transporte de área interfacial é uma simplificação do modelo de balanço populacional. Esta seção avalia o erro introduzido nesta aproximação.

As Figuras 6.5, 6.5, 6.5, 6.5 e 6.5, apresentam a comparação entre os dois modelos para os casos $A - 1$, $A - 2$, $A - 3$, $A - 4$ e $A - 5$, respectivamente. De acordo com estas figuras, a variação da concentração de área interfacial quando somente a expansão é considerada é a mesma para ambos os modelos, já que a expansão só depende da variação da massa específica do gás, que por sua vez segue a mesma função da altura nos dois casos. Isto é evidência da correta implementação dos dois modelos.

Para todos os outros mecanismos, entretanto, existem diferenças entre os valores obtidos com o modelo de balanço populacional e o modelo de transporte de área interfacial, indicando que as aproximações adotadas no desenvolvimento da equação de transporte de área interfacial têm influência considerável na modelagem do problema do escoamento disperso.

Tais diferenças são mais pronunciadas nos mecanismos de maior importância em cada caso, como é o caso da coalescência por capturas nas esteiras no caso 1 (gráfico 6.5) e a quebra no caso 5 (gráfico 6.5).

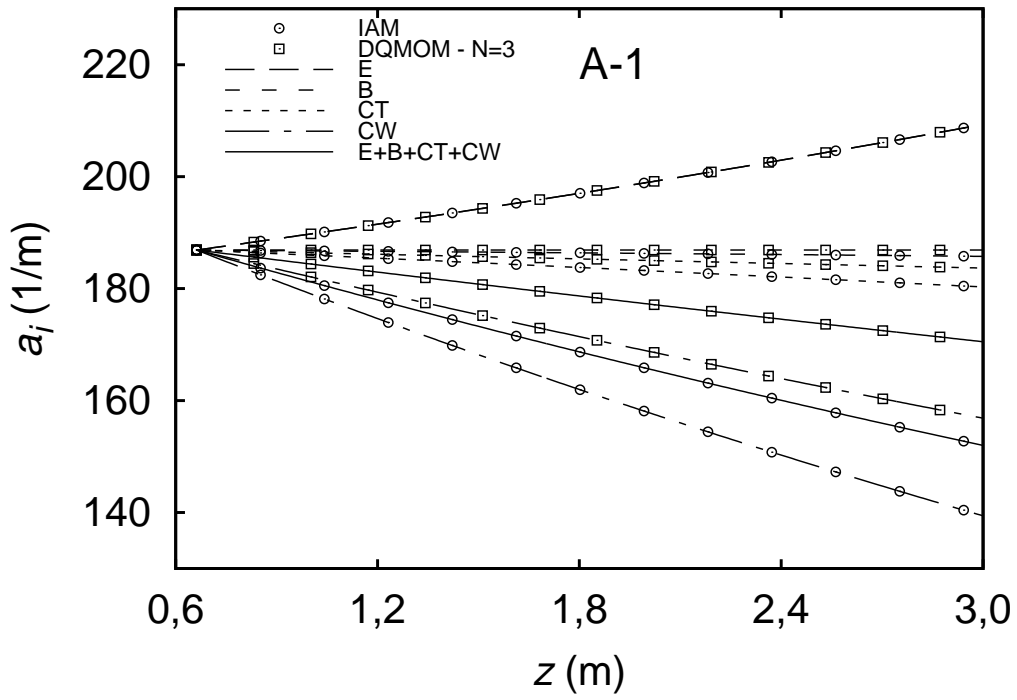


Figura 6.33: Comparação entre os modelos para o caso A – 1

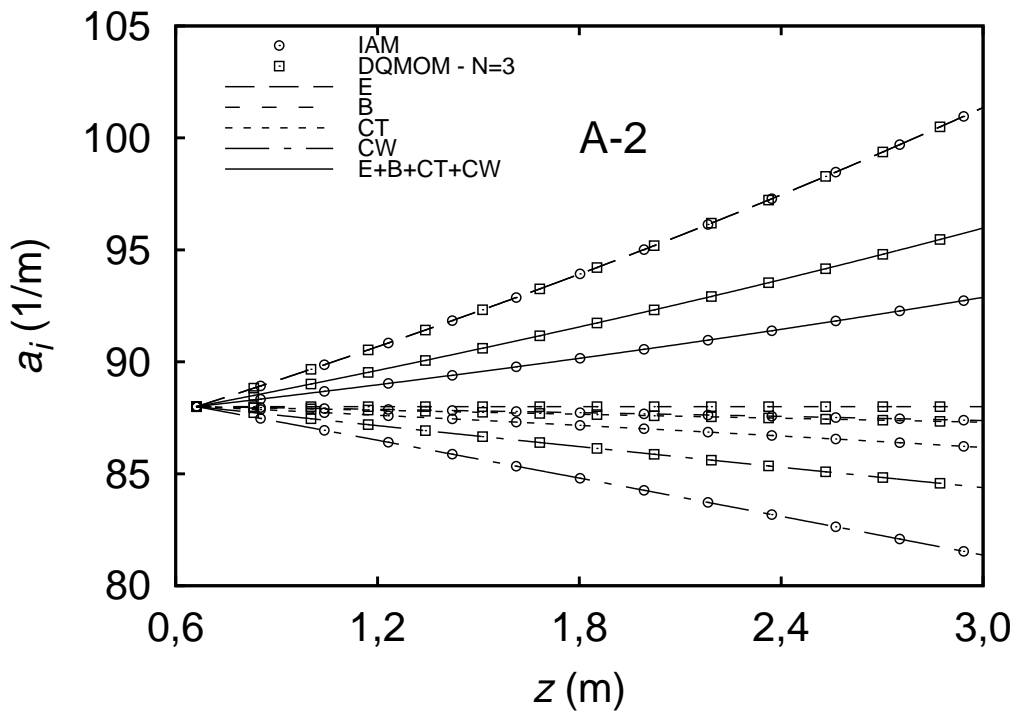


Figura 6.34: Comparação entre os modelos para o caso A – 2

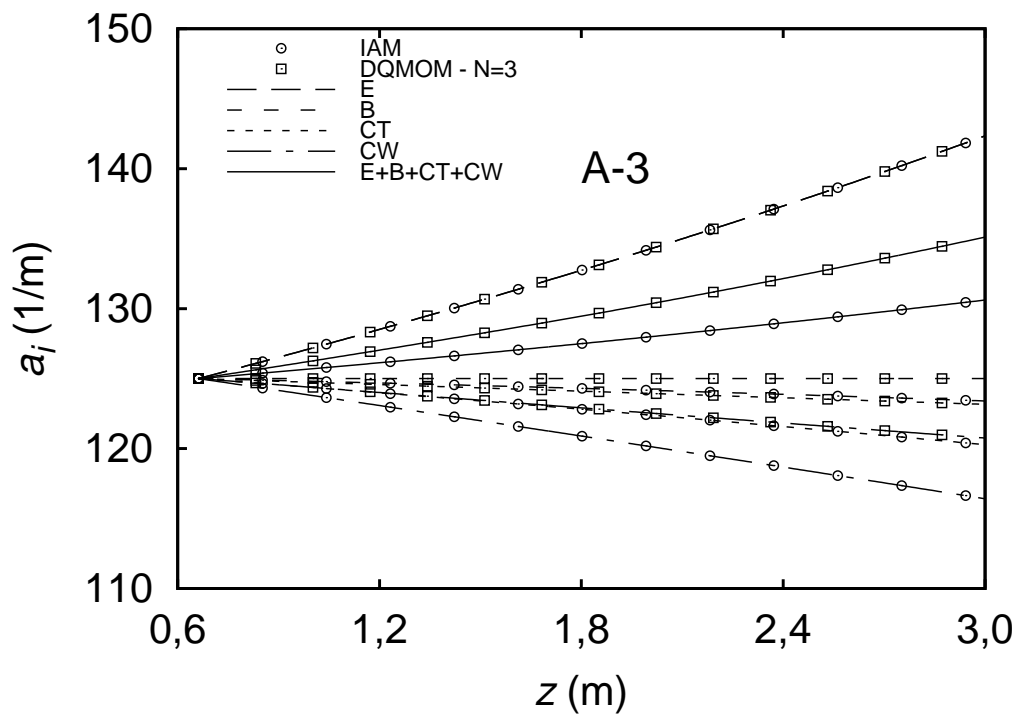


Figura 6.35: Comparação entre os modelos para o caso A – 3

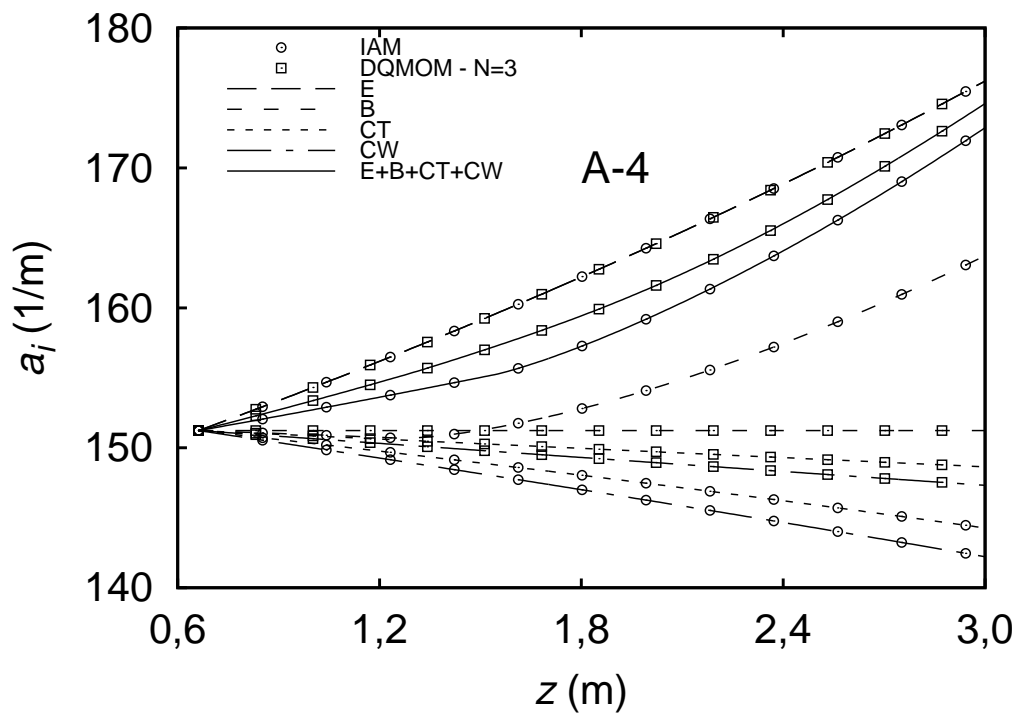


Figura 6.36: Comparação entre os modelos para o caso A – 4

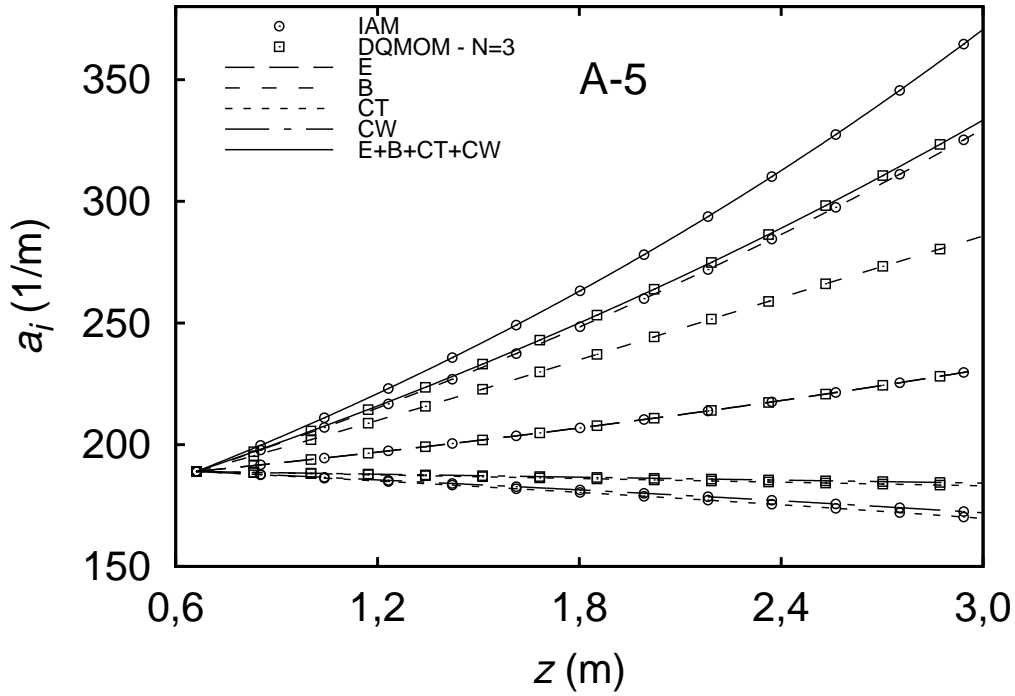


Figura 6.37: Comparação entre os modelos para o caso A – 5

6.6 Análise de sensibilidade no modelo de transporte de área interfacial

Como uma aproximação no desenvolvimento da equação de transporte de área interfacial é a de que as quebras e as coalescências modificam a concentração de área interfacial na mesma proporção, conforme apresentado no capítulo 3, uma avaliação que pode ser realizada é considerar esta variação de área diferente nos mecanismos de quebra e coalescência.

Assim, os valores encontrados para a variação da área após um processo de coalescência entre duas bolhas idênticas, conforme a equação 3.66, e para a variação da área após um processo de quebra gerando duas bolhas idênticas, conforme a equação 3.67, foram adotados ao invés do valor 1/3. Assim, a equação de transporte de área interfacial alternativa que foi avaliada e comparada com a equação de transporte de área interfacial de KIM [50] e com o modelo de balanço populacional é:

$$\frac{\partial a_I}{\partial t} + \nabla \cdot (a_I \mathbf{v}_I) = \frac{2}{3} \left(\frac{a_I}{\alpha_g} \right) \left(\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{v}_g) \right) - \frac{0,413}{\Psi} \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 \sum_j (R_{CT} + R_{CW}) + \frac{0,2599}{\Psi} \left(\frac{\alpha_g}{a_I} \right)^2 R_B \quad (6.1)$$

As figuras 6.38 a 6.42 apresentam a comparação entre os resultados obtidos para a variação da concentração de área interfacial quando só a quebra (B) e só a coalescência (C) estão presentes e quando todos os mecanismos atuam junto com a expansão das bolhas ($E + B + CT + CW$) para os modelos de balanço populacional e de transporte de área interfacial utilizando tanto a equação de transporte de área interfacial proposta por KIM [50] quanto sua versão modificada, apresentada na equação 6.1.

Como a variação de área interfacial devido à coalescência é maior na versão modificada da equação de transporte de área interfacial, para os casos em que a coalescência, seja por colisões randômicas ou capturas nas esteiras, tem um papel importante frente à quebra, os resultados obtidos com a equação de transporte de área interfacial são mais distantes dos resultados obtidos com o modelo de balanço populacional do que os resultados obtidos com a equação de transporte original, como pode ser verificado nas Figuras 6.38, 6.39 e 6.40.

Quando a quebra tem uma importância muito maior do que a coalescência, os resultados obtidos para a variação da concentração de área interfacial com a equação de transporte modificada são bem mais próximos dos resultados obtidos com o modelo de balanço populacional do que os resultados obtidos com a equação de transporte de área interfacial original, como pode ser visualizado na Figura 6.42.

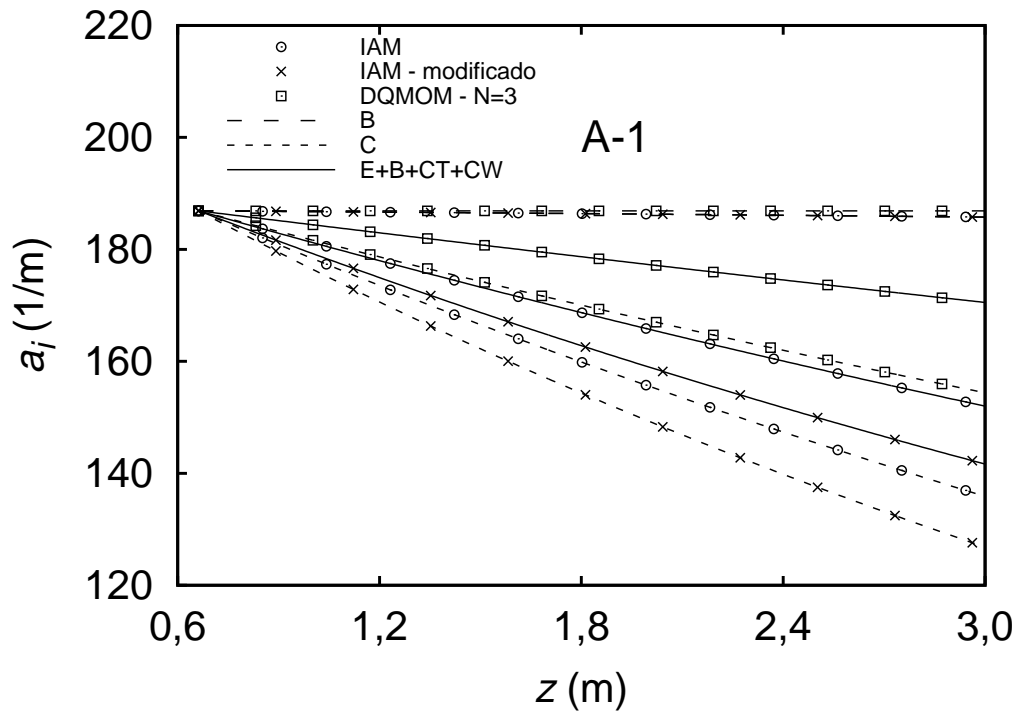


Figura 6.38: Análise de sensibilidade do IAM em relação a variação de área nos processos de quebra e coalescência - Caso A – 1

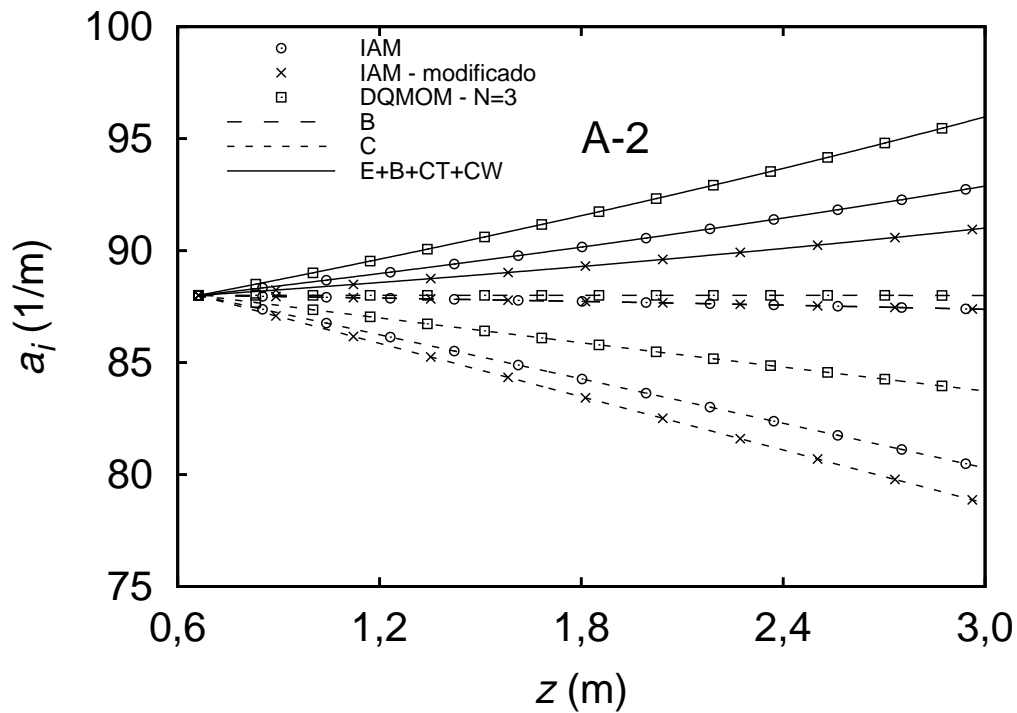


Figura 6.39: Análise de sensibilidade do IAM em relação a variação de área nos processos de quebra e coalescência - Caso A – 2

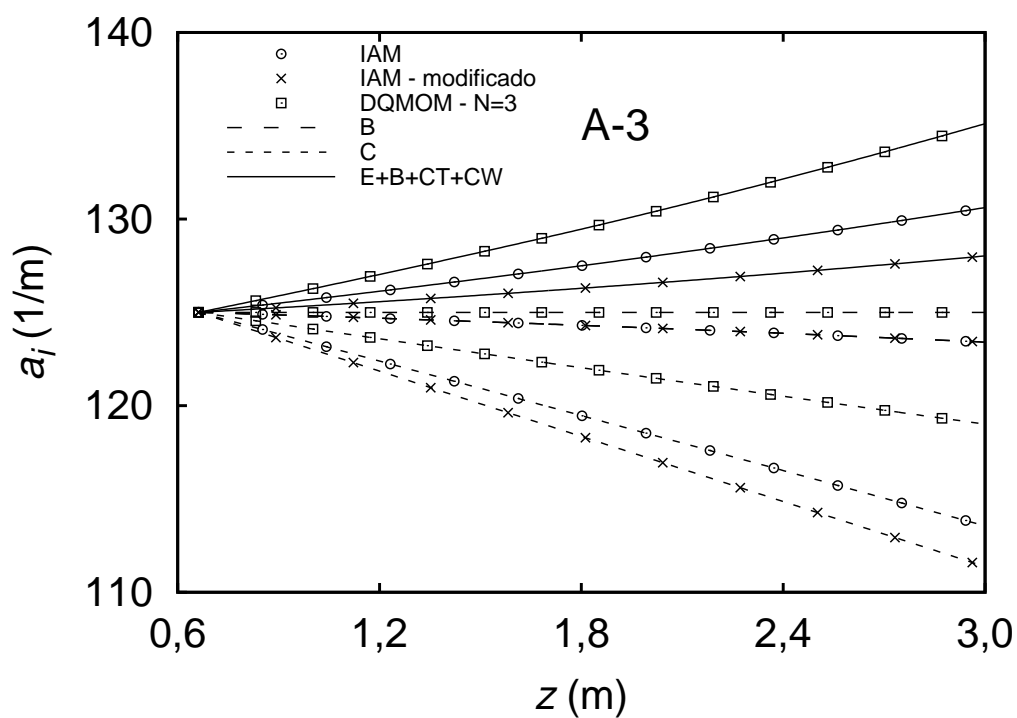


Figura 6.40: Análise de sensibilidade do IAM em relação a variação de área nos processos de quebra e coalescência - Caso A – 3

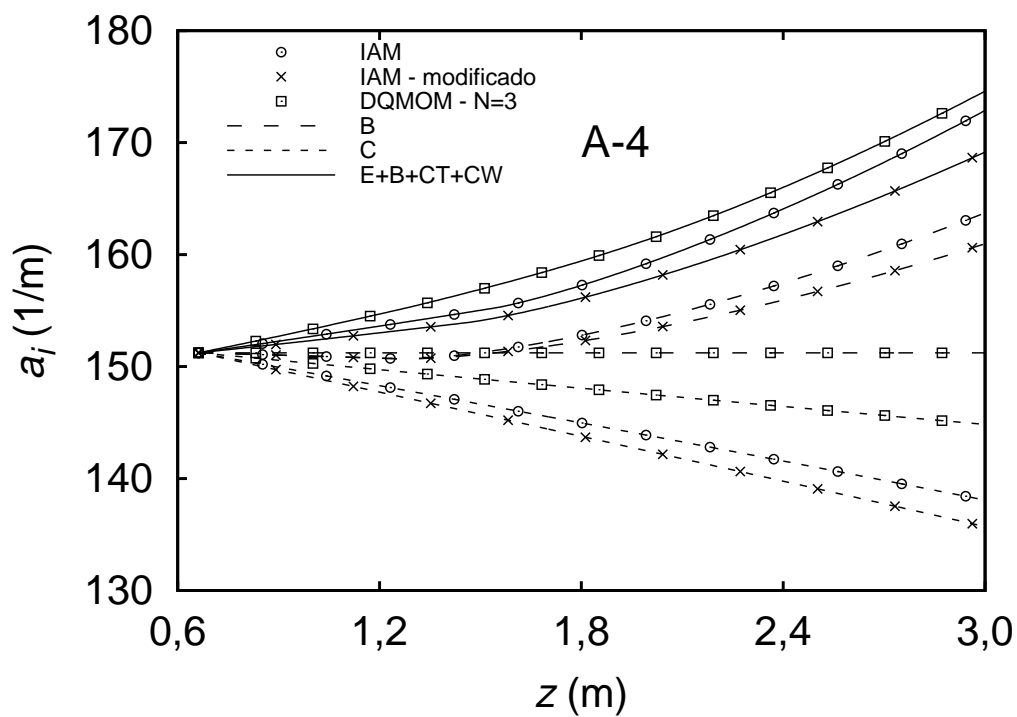


Figura 6.41: Análise de sensibilidade do IAM em relação a variação de área nos processos de quebra e coalescência - Caso A – 4

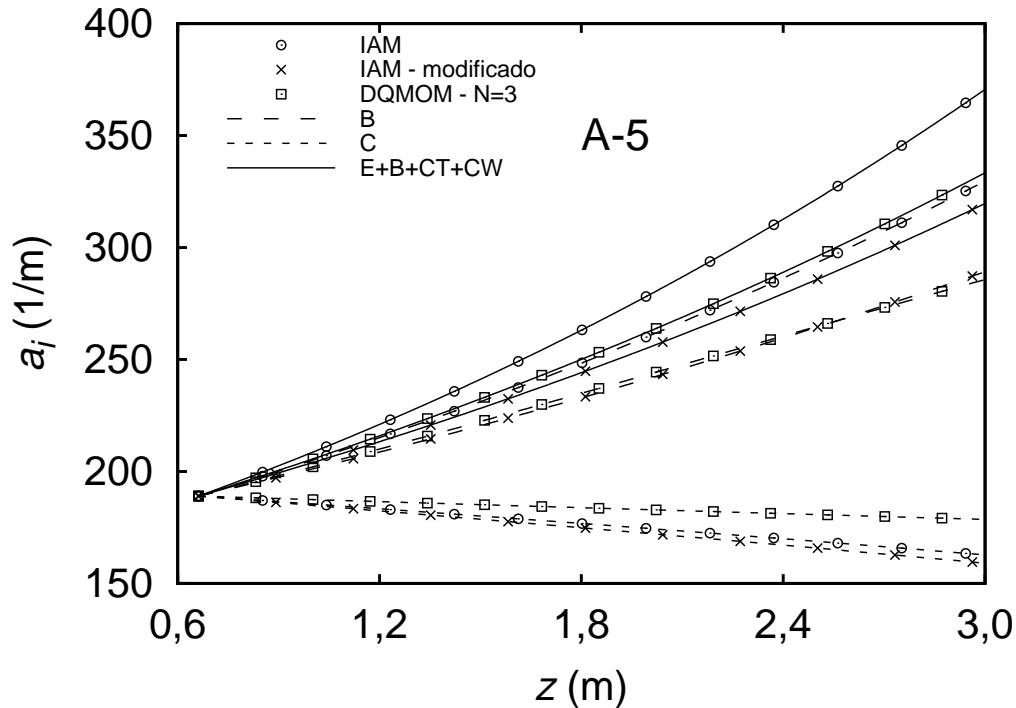


Figura 6.42: Análise de sensibilidade do IAM em relação a variação de área nos processos de quebra e coalescência - Caso A – 5

6.7 Sumário dos resultados

A tabela 6.3 resume os resultados obtidos. Para cada caso analisado, calculou-se na posição $z = 3 \text{ m}$, a variação de área interfacial relativa a área interfacial inicial quando todos os mecanismos de interação entre bolhas são considerados, para o modelo de balanço populacional, para o modelo de transporte de área interfacial proposto por KIM [50] e para o modelo de transporte de área interfacial modificado.

Para facilitar a análise, a razão entre a variação de área interfacial calculada pelo modelo de transporte de área interfacial e pelo modelo de balanço populacional foi calculada para cada caso, usando tanto o modelo de transporte de área interfacial de KIM [50] quanto a sua versão modificada. Os valores são apresentados na tabela 6.3.

A variação de área interfacial obtida pelo modelo de transporte de área interfacial atingiu valores de 54% a 207% do valor predito pelo modelo de balanço populacional.

O modelo de transporte de área interfacial mostrou-se sensível às suas hipóteses simplificadoras, como pode ser verificado na Tabela 6.3. A modificação dos coeficientes dos termos fonte de variação de área interfacial por quebra e coalescência altera substancialmente os resultados.

A modificação feita nas constantes que calculam a variação da área após um processo de quebra e coalescência levaria, a princípio, a uma melhoria na derivação do modelo de transporte de área interfacial, o que não se mostrou ser verdade. Os resultados não se aproximaram dos resultados obtidos para o modelo de balanço populacional, que é o modelo do qual o modelo de transporte de área interfacial foi derivado. Logo, há pouca chance do modelo de transporte de área interfacial ser melhorado por ajuste destes parâmetros.

É interessante ressaltar que obteve-se resultados aceitáveis com o DQMOM com apenas 2 pontos de quadratura. Assim, para a simulação de um escoamento disperso com o modelo de dois fluidos utilizando a abordagem MUSIG, em que todas as classes de bolhas tem a mesma velocidade, seria necessário resolver 2 conjuntos de equações de conservação, um para cada fase, e mais 4 equações adicionais para os pesos e abscissas, sendo que a equação de conservação de massa da fase gasosa se torna redundante, já que o conjunto de equações de transporte para as abscissas ponderadas a substitui. Utilizando-se o modelo de transporte de área interfacial, os mesmos 2 conjuntos de equações de conservação de massa, *momentum* e energia seriam resolvidos junto com a equação de transporte de área interfacial. As equações que demandam maior poder computacional para serem resolvidas são as de conservação de *momentum*, pela sua não-linearidade. Essas equações estão presentes nos dois modelos. As 2 equações adicionais do modelo de balanço populacional são computacionalmente pouco custosas frente à equação de *momentum*.

Conclui-se então, que não vale a pena usar o modelo de transporte de área interfacial no escoamento disperso no lugar do modelo de balanço populacional com o método DQMOM, já que a diminuição de custo computacional não compensa os erros introduzidos.

Por outro lado, para escoamentos em que o modelo de balanço populacional não é aplicável, o uso do modelo de transporte de área interfacial continua sendo uma opção.

Tabela 6.3: Comparação entre a variação da densidade de área interfacial obtida para cada modelo nos casos estudados

Caso	$\Delta a_I/a_{I_0}$			$\Delta a_I/\Delta a_I(\text{DQMOM})$	
	DQMOM	IAM	IAM Modificado	IAM	IAM Modificado
A-1	-0,121	-0,250	-0,320	2,070	2,642
A-2	0,123	0,076	0,047	0,616	0,385
A-3	0,126	0,069	0,039	0,554	0,308
A-4	0,199	0,189	0,157	0,952	0,791
A-5	0,848	1,071	0,767	1,264	0,905
B-1	-0,212	-0,363	-0,440	1,711	2,071
B-2	0,118	0,069	0,038	0,575	0,321
B-3	0,124	0,068	0,037	0,544	0,294
B-4	0,155	0,122	0,105	0,788	0,675
B-5	0,554	0,658	0,529	1,188	0,954

Capítulo 7

Conclusões e sugestões

7.1 Conclusões

No presente trabalho, a área interfacial e a fração volumétrica de gás para dez diferentes condições de escoamentos dispersos ar-água foram obtidas com o uso dos modelos de balanço populacional e de transporte de área interfacial com um grupo de bolhas, empregando os mesmos modelos para a quebra e coalescência. Os resultados foram comparados de forma a avaliar a influência das aproximações e hipóteses adotadas no desenvolvimento da equação de transporte de área interfacial.

O DQMOM com momentos fracionários apresentou convergência rápida com o aumento do número de pontos de quadratura. Com apenas 2 pontos de quadratura se garante a conservação simultânea da fração de gás e da densidade de área interfacial. Os resultados obtidos com 3 pontos de quadratura foram utilizados nas comparações com o modelo de transporte de área interfacial.

Os resultados para a variação de área através do modelo de transporte na posição $z = 3m$ variaram de 54% a 207% do valor predito pelo modelo de balanço populacional, que é o modelo do qual o modelo de transporte de área interfacial foi derivado, mostrando a influência das aproximações e hipóteses simplificadoras adotadas.

O modelo de transporte de área interfacial mostrou-se muito sensível às suas hipóteses simplificadoras. A modificação dos coeficientes dos termos fonte de variação de área interfacial por quebra e coalescência alterou substancialmente os resultados, que não se aproximaram dos resultados obtidos com o modelo mais completo (balanço populacional), demonstrando que há pouca possibilidade de melhoria do modelo de transporte de área interfacial pela modificação destes

parâmetros.

Dessa forma, para escoamentos dispersos, não se justifica o uso do modelo de transporte de área interfacial no lugar do modelo de balanço populacional com o DQMOM, já que a diminuição da complexidade no modelo não compensa os erros introduzidos pelas aproximações usadas na simplificação do modelo.

7.2 Sugestões para trabalhos futuros

Como os resultados obtidos com o uso do modelo de balanço populacional não foram capazes de reproduzir os dados experimentais, sugere-se como trabalho futuro a otimização das constantes dos modelos utilizados para os termos de quebra e coalescência usando dados experimentais. Assim, a comparação dos resultados obtidos com o modelo de balanço populacional e os dados experimentais seria mais coerente.

Para a otimização destas constantes, entretanto, é necessário um conjunto de dados experimentais mais amplo que o utilizado nesta dissertação. Assim, a segunda sugestão de trabalho seria a medição experimental de concentração de área interfacial, fração de gás, velocidades e pressão, de forma a obter um conjunto de dados que pudesse ser utilizado para trabalhos futuros envolvendo tanto a equação de transporte de área interfacial quanto o modelo de balanço populacional.

Como a modelagem foi realizada com o modelo de *drift-flux*, considerando o escoamento unidimensional e estacionário, sugere-se avaliar a equação de transporte de área interfacial com o modelo de dois fluidos completo, tridimensional.

Para tal, seria interessante implementar a equação de transporte de área interfacial com um grupo de bolhas em um pacote aberto de CFD, como o Openfoam, a fim de resolver o escoamento em sua forma tridimensional, acoplado com a equação de transporte de área interfacial, e comparar os resultados obtidos com a solução do mesmo escoamento utilizando a equação de balanço populacional.

Seria interessante comparar os resultados obtidos com esta implementação e os resultados obtidos utilizando a equação de transporte de área interfacial já implementada em softwares comerciais, como é o caso do Fluent.

Por fim, sugere-se implementar a equação de transporte de área interfacial com dois grupos de bolhas, a fim de avaliar a preditibilidade do modelo fora do regime de escoamento disperso e frente à mudança de regime.

Referências Bibliográficas

- [1] ISHII, M. *Thermofluid dynamic theory of two-phase flow*. Paris, Eyrolles, 1975.
- [2] HIBIKI, T., ISHII, M. “One group interfacial area transport of bubbly flows in vertical round tubes”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 43, pp. 2711–2726, 2000.
- [3] ISHII, M., HIBIKI, T. *Thermo-fluid Dynamics of Two-phase Flow*. New York, Springer, 2006.
- [4] ISHII, M., WU, Q., ASSAD, A., et al. “Interfacial Area Transport Equation for Two-fluid Model Formulation”, 1998.
- [5] KOCAMUSTAFAOGULLARI, G., ISHII, M. “Foundation of the interfacial area transport equation and its closure relations”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 38, n. 3, pp. 481–493, 1995.
- [6] SILVA, L. F. L. R. *Desenvolvimento de metodologias para simulação de escoamentos polidispersos usando código livre*. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2008.
- [7] RAMKRISHNA, D. *Population Balances Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*. New York, Academic Press, 2000.
- [8] RAMKRISHNA, D., MAHONEY, A. W. “Population balance modeling. Promise for the future”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 595–606, 2002.
- [9] HULBURT, H. M., KATZ, S. “Some problems in particle technology - A statistical mechanical formulation”, *Chemical Engineering Science*, v. 19, pp. 555–574, 1964.
- [10] RANDOLPH, A. D., LARSON, M. A. “A population balance for countable entities”, *Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 42, pp. 280–281, 1964.

- [11] FREDRICKSON, A. G., RAMKRISHNA, D., TSUCHIYA, H. M. “Statistics and dynamics of procaryotic cell populations”, *Mathematical Bioscience*, v. 1, pp. 327–374, 1967.
- [12] RAMKRISHNA, D., BORWANKER, J. D. “A puristic analysis of population balance”, *Chemical Engineering Science*, v. 28, pp. 14231435, 1973.
- [13] RAMKRISHNA, D. “The status of populations balances”, *Reviews in Chemical Engineering*, v. 3, pp. 4995, 1985.
- [14] ARAUJO, J. F. M. *Estudo dos modelos de quebra e coalescência para escoamentos polidispersos*. Dissertação de m.sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 2006.
- [15] DAMIAN, R. B. *Acoplamento de balanço populacional à simulação computacional de escoamentos multifásicos polidispersos*. Dissertação de m.sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 2007.
- [16] PATIL, D. P., ANDREWS, J. R. G. “An analytical solution to the population balance equation with coalescence and breakage - the special case with constant number of particles”, *Chemical Engineering Science*, v. 53, pp. 599–601, 1998.
- [17] LAGE, P. L. C. “Comments on the An analytical solution to the population balance equation with coalescence and breakage the special case with constant number of particles”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 4253–4254, 2002.
- [18] MCCOY, B. J., MADRAS, G. “Analytical solution for a population balance equation with aggregation and fragmentation”, *Chemical Engineering Science*, v. 58, pp. 30493051, 2003.
- [19] KUMAR, S., RAMKRISHNA, D. “On the solution of PBE by discretization I. A fixed pivot technique”, *Chemical Engineering Science*, v. 51, pp. 1311–1332, 1996.
- [20] LO, S. *Applications of the MUSIG model to bubbly flows*. Relatório técnico, AEA Technology, 1996.
- [21] FRIEDLANDER, S. K. *Smoke, dust and haze: Fundamentals of aerosol dynamics*. Oxford University Press., 2000.
- [22] MCGRAW, R. “Description of the aerosol dynamics by the quadrature method of moments”, *Aerosol Science and Technology*, v. 27, pp. 255–265, 1997.

- [23] GORDON, R. G. “Error bounds in equilibrium statistical mechanics”, *A.I.Ch.E. Journal*, v. 9, pp. 655–663, 1968.
- [24] MARCHISIO, D. L., PIKTURMA, J., FOX, R. O., et al. “Quadrature method of moments for population balances”, *A.I.Ch.E. Journal*, v. 49, pp. 1266–1276, 2003.
- [25] MARCHISIO, D. L., VIRGIL, R. D., FOX, R. O. “Quadrature method of moments for aggregation-breakage processes”, *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 258, pp. 322–334, 2003.
- [26] MARCHISIO, D. L., VIRGIL, R. D., FOX, R. O. “Implementation of the quadrature method of moments in CFD codes for aggregation-breakage problems”, *Chemical Engineering Science*, v. 58, pp. 3337–3351, 2003.
- [27] MARCHISIO, D. L., FOX, R. O. “Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments”, *Journal of Aerosol Science*, v. 36, pp. 43–73, 2005.
- [28] SANYAL, J., MARCHISIO, D. L., FOX, R. O., et al. “On the comparison between population balance models for CFD simulation of bubble columns”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 44, pp. 5063–5072, 2005.
- [29] SILVA, L., RODRIGUES, R., MITRE, J., et al. “Comparison of the accuracy and performance of quadrature based methods for population balance problems with simultaneous breakage and aggregation”, *Computers and Chemical Engineering*, v. X, pp. X, C.
- [30] LAGE, P. L. C. “The quadrature method of moments for continuous thermodynamics”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 31, pp. 782–799, 2007.
- [31] REYES, J. N. “Statically derived conservation equations for fluid particle flows”. In: *Proceedings of ANS Winter Meeting*, v. 5, pp. 12–19, San Francisco, CA, 1989.
- [32] ARAUJO, J. F. M. *Modelos de quebra e coalescência de gotas para o escoamento de emulsões*. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2010.
- [33] HIBIKI, T., HOGSETT, S., ISHII, M. “Local measurements of interfacial area, interfacial velocity and liquid turbulence in two phase flow”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 184, pp. 287–304, 1998.

- [34] HIBIKI, T., ISHII, M., XIAO, Z. “Axial interfacial area transport of vertical bubbly flows”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 44, pp. 1869–1888, 2001.
- [35] HIBIKI, M., ISHII, M. “Experimental study on interfacial area transport in bubbly two phase flows”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 42, pp. 3019–3035, 1999.
- [36] HIBIKI, T., ISHII, M. “Interfacial area concentration of bubbly flow systems”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 3967–3977, 2002.
- [37] KIM, S., ISHII, M., WU, Q., et al. “Interfacial structures of confined air-water two-phase bubbly flow”, *Experimental Thermal and Fluid Science*, v. 26, pp. 461–472, 2002.
- [38] BARTEL, M., ISHII, M., MASUKAWA, T., et al. “Interfacial area transport area measurements in subcooled flow boiling”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 210, pp. 135–155, 2001.
- [39] HIBIKI, T., MI, Y., SITU, R., et al. “Interfacial area transport of vertical upward bubbly two-phase flow in an annulus”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 46, pp. 4949–4962, 2003.
- [40] HIBIKI, T., SITU, R., MI, Y., et al. “Modeling of bubble layer thickness for formulation of one dimensional interfacial area transport equation in subsooled boiling two-phase flow”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 46, pp. 1409–1423, 2003.
- [41] TAKAMASA, T., IGUCHI, T., HAZUKU, T., et al. “Interfacial area transport of bubbly flow under microgravity environment”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 29, pp. 291–304, 2003.
- [42] ISHII, M., PARANJAPE, S. S., KIM, S., et al. “Interfacial structures and interfacial area transport in downward two-phase bubbly flow”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 30, pp. 779–801, 2004.
- [43] HIBIKI, T., GODA, H., KIM, S., et al. “Structure of vertical downward bubbly flow”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 47, pp. 1847–1862, 2004.
- [44] ISHII, M., WU, Q., ASSAD, A., et al. “Interfacial area transport equation for two fluid model formulation”. In: *Proceedings of IMuST Meeting*, 1998.
- [45] ISHII, M., ZUBER, N. “Drag Coefficient and Relative Velocity in Bubbly, Droplet or Particulate Flows”, *AIChE J.*, v. 25, pp. 843–855, 1979.

- [46] WU, Q., KIM, S., ISHII, M., et al. “One group interfacial area transport in vertical bubbly flow”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 41, pp. 1103–1112, 1998.
- [47] HIBIKI, T., TAKAMASA, T., ISHII, M. “Interfacial area transport of bubbly flow in a small diameter pipe”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, v. 38, n. 8, pp. 614–620, 2001.
- [48] ISHII, M., KIM, S., UHLE, J. “Interfacial area transport equation model development and benchmark experiments”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 45, pp. 3111–3123, 2002.
- [49] KIM, S., SUN, X., ISHII, M., et al. “Interfacial Area transport and evaluation of source and sink terms for confined air-water bubbly flow”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 219, pp. 61–75, 2002.
- [50] KIM, S. *Interfacial area transport equation and measurement of local interfacial characteristics*. Tese de D.Sc., School of Nuclear Engineering, Purdue University, 1999.
- [51] SUN, X., SMITH, T., KIM, S., et al. “Interfacial area of bubbly flow in a relatively large diameter pipe”, *Experimental Thermal and Fluid Science*, v. 27, pp. 97–109, 2002.
- [52] HIBIKI, T., ISHII, M. “Development of one group interfacial area transport equation in bubbly flow systems”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 45, pp. 2351–2372, 2002.
- [53] BAE, B., YUN, B., YOON, H., et al. “Analysis of subcooled flow with one-group interfacial area transport equation and bubble lift-off model”, *Nuclear Engineering and Design*.
- [54] VASAVADA, S., SUN, X., ISHII, M., et al. “Benchmarking of the one-dimensional one-group interfacial area transport equation for reduced-gravity bubbly flows”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 35, pp. 323–334, 2009.
- [55] VASAVADA, S., SUN, X., ISHII, M., et al. “Study of two-phase flows in reduced gravity using ground based experiments”, *Exp. Fluids*, v. 43, pp. 53–75, 2007.
- [56] HIBIKI, T., ISHII, M. “Two group interfacial area transport equations at bubbly to slug flow transition”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 202, pp. 39–76, 2000.

- [57] FU, X., ISHII, M. “Two-group interfacial area transport in vertical air-water flow I Mechanistic model”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 219, pp. 143–168, 2002.
- [58] FU, X., ISHII, M. “Two-group interfacial area transport in vertical air-water flow I Model evaluation”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 219, pp. 169–190, 2002.
- [59] SUN, X., KIM, S., ISHII, M., et al. “Modeling of bubble coalescence and disintegration in confined upward two-phase flow”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 230, pp. 3–26, 2004.
- [60] SUN, X., KIM, S., ISHII, M., et al. “Model evaluation of two-group interfacial area transport equation for confined upward flow”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 230, pp. 27–47, 2004.
- [61] KIM, S., SUN, X., ISHII, M., et al. “Interfacial area transport and evaluation of source and sink terms for confined air/water bubbly flow”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 219, pp. 61–75, 2002.
- [62] LIAO, Y., LUCAS, D. “A literature review of theoretical models for drop and bubble breakup in turbulent dispersions”, *Chemical Engineering Science*, v. 64, pp. 3389–3406, 2010.
- [63] CHESTERS, A. K. “The modeling of coalescence processes in fluid-liquid dispersions: A review of current understanding”, *Chemical Engineering Research and Design*, v. 69, pp. 254–270, 1991.
- [64] SHINNAR, R., CHURCH, J. M. “Predicting particle size in agitated dispersions”, *Industrial and Engineering Chemistry*, v. 52, pp. 253–256, 1960.
- [65] COULALOGLOU, C. A., TAVLARIDES, L. L. “Description of Interaction Processes in agitated liquid-liquid Dispersions”, *Chemical Engineering Science*, v. 32, pp. 1289–1297, 1977.
- [66] PRINCE, M. J., BLANCH, H. W. “Bubble Coalescence and Break-Up in Air-Sparged Bubble Columns”, *AIChE Journal*, v. 36, n. 10, pp. 1485–1499, 1990.
- [67] HOWARTH, W. J. “Coalescence of drops in a turbulent flow field”, *Chemical Engineering Science*, v. 19, pp. 33–38, 1964.
- [68] LEHR, F., ET AL. “Bubble-size distributions and flow fields in bubble columns”, *A.I.Ch.E. J.*, v. 48, pp. 2426–2443, 2002.

- [69] LIAO, Y., LUCAS, D. “A literatura review on mechanisms and models for the coalescence process of fluid particles”, *Chemical Engineering Science*, v. 65, pp. 2851–2864, 2010.
- [70] KIRKPATRICK, R. D., LOCKETT, M. J. “The influence of approach velocity on bubble coalescence”, *Chemical engineering Science*, v. 29, pp. 2363, 1974.
- [71] STEWART, C. W. “Bubble interaction in low-viscosity liquids”, *Int. J. Multiphase Flow*, v. 21, pp. 1037–1046, 1995.
- [72] OTAKE, T., TONE, S., NAKAO, K., et al. “Coalescence and breakup of bubbles in liquid”, *Chem. Eng. Sci.*, v. 32, pp. 377–383, 1977.
- [73] CLIFT, R., GRACE, J. R., WEBER, M. E. *Bubbles, Drops and Particles*. Academic Press, Inc., 1978.
- [74] SCHLICHTING, H., GERSTEN, K. *Boundary Layer Theory*. Springer, 2001.
- [75] TSUCHIYA, K. SHSAKI, K., TAGUCHI, K. “Large and small bubble interaction pattern in a bubble column”, *Int. J. Multiphase Flow*, v. 22, pp. 121–132, 1996.
- [76] ISHII, M., CHAWLA, T. C. *Local drag laws in dispersed two-phase flow*. In: Report ANL-79-105, NUREG/CR-1230, Argonne National Laboratory, 1979.
- [77] ZUBER, N., FINDLAY, J. “Average volumetric concentration in two-phase flow systems”, *J. Heat Trans.*, v. 87, pp. 453, 1965.
- [78] ISHII, M. *One-dimensional drift-flux model and constitutive equations for relative motion between phases in various two-phase flow regimes*. Argonne National Laboratory Report ANL-77/47., 1977.
- [79] BATCHELOR, B. K. “Pressure fluctuation in isotropic turbulence”, *Proc. Cambridge phil. Soc.*, v. 47, pp. 359–371, 1951.
- [80] TODREAS, N. E., KAZIMI, M. S. *Nuclear systems I*. Hemisphere Publishing Corp., 1990.
- [81] PETZOLD, L. R. *DASSL: Differential algebraic system solver*. Technical Report Category D2A2, Sandia National Laboratories, Livermore, California, 1983.

- [82] SECCHI, A. R. *Simulação dinâmica de processos químicos pelo método da relaxação em forma de onda em computadores paralelos*. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1992.
- [83] SECCHI, A. R., MORARI, M., BISCAIA JR., E. C. “Dawrs: A differential-algebraic system solver by the waveform relaxation method”. In: *Proceedings of The Sixth Distributed Memory Computing Conference (DMCC6)*.
- [84] WU, Q., ISHII, M. “Sensitivity study on double-sensor conductivity probe for the measurement of interfacial area concentration in bubbly flow”, *Int. J. Multiphase Flow*, v. 25, pp. 155–173, 1999.
- [85] MISHIMA, K., ISHII, M. “Flow regime transition criteria for upward two-phase flow in vertical tubes”, *Int. J. Heat Mass Trans.*, v. 27, pp. 723–737, 1984.

Apêndice A

Cálculo da distribuição inicial das bolhas

A.1 A distribuição Gama

A distribuição Gama é calculada como:

$$f_G(V) = \frac{V^{c-1}e^{-V/b}}{b^c\Gamma(c)} \quad (\text{A.1})$$

Seus momentos podem ser obtidos de forma analítica, conforme a equação A.2:

$$\mu_k^G = \frac{b^k\Gamma(k+c)}{\Gamma(c)} \quad (\text{A.2})$$

Além disso, a distribuição Gama possui o momento 1 (ou média) calculado por:

$$\mu_1^G = bc \quad (\text{A.3})$$

e a sua variância, χ , é dada por:

$$\chi^G = b^2c \quad (\text{A.4})$$

A.2 Cálculo dos parâmetros da distribuição Gama inicial

Para o cálculo dos parâmetros da distribuição Gama inicial (o parâmetro de forma, c , e o fator de escala, b), são utilizadas as seguintes relações:

Entre a fração de gás no contorno e o momento 1 da distribuição Gama em

volume:

$$\alpha_{g_0} = N_{T_0} \mu_1^G = N_{T_0} bc \quad (\text{A.5})$$

Entre a concentração de área interfacial no contorno e o momento 2/3 da distribuição Gama, conforme equação 5.63:

$$a_{I_0} = \pi \left(\frac{6}{\pi} \right)^{2/3} N_{T_0} \mu_{2/3}^G = N_{T_0} \pi \left(\frac{6}{\pi} \right)^{2/3} \frac{b^{2/3} \Gamma \left(\frac{2}{3} + c \right)}{\Gamma(c)} \quad (\text{A.6})$$

Definindo:

$$q = \pi \left(\frac{6}{\pi} \right)^{2/3} \quad (\text{A.7})$$

Sugere-se uma relação entre o desvio padrão e a média da distribuição no contorno, r_0 :

$$r_0 = \frac{\sqrt{b^2 c}}{bc} = \frac{1}{\sqrt{c}} \quad (\text{A.8})$$

De forma que a constante c é calculada diretamente da razão r_0 :

$$c = \frac{1}{\sqrt{r_0}} \quad (\text{A.9})$$

Calcula-se, então, a relação entre a concentração de área interfacial e a fração de gás no contorno, como:

$$\frac{a_{I_0}}{q \alpha_{g_0}} = \frac{b^{2/3} \Gamma \left(\frac{2}{3} + c \right)}{bc \Gamma(c)} = \frac{b^{-1/3} \Gamma \left(\frac{2}{3} + c \right)}{c \Gamma(c)} \quad (\text{A.10})$$

Assim, com o valor de c já calculado, b é obtido através de:

$$b = \left[q \frac{\alpha_{g_0}}{a_{I_0}} \frac{\Gamma \left(\frac{2}{3} + c \right)}{c \Gamma(c)} \right]^3 \quad (\text{A.11})$$

O número total de bolhas no contorno é calculado através da fração de gás no contorno e a média da distribuição, conforme a equação A.5:

$$N_{T_0} = \frac{\alpha_{g_0}}{bc} \quad (\text{A.12})$$

Assim, obtém-se os parâmetros b e c da distribuição Gama normalizada no contorno, assim como o número total de bolhas no contorno, N_{T_0} , de forma que a distribuição no contorno está completamente especificada.

Apêndice B

Cálculo dos pesos e abscissas da distribuição inicial

B.1 Cálculo dos pesos e abscissas de uma distribuição adimensionalizada $g(y)$

A fim de se diminuir os erros de truncamento, define-se uma distribuição adimensionalizada, $g(y)$, cujo momento zero, $\mu_0^{(g)}$, e momento um, $\mu_1^{(g)}$, são iguais a 1.

Assim:

$$\mu_0^{(g)} = \int_0^{\infty} g(y)dy = 1 \quad (\text{B.1})$$

e

$$\mu_1^{(g)} = \int_0^{\infty} yg(y)dy = 1 \quad (\text{B.2})$$

Como o momento zero da distribuição normalizada escolhida para representar a distribuição inicial das bolhas, $\tilde{f}(V)$, também é 1, tem-se:

$$\mu_0^{(g)} = \tilde{\mu}_0 \quad (\text{B.3})$$

$$\int_0^{\infty} g(y)dy = \int_0^{\infty} \tilde{f}(V)dV \quad (\text{B.4})$$

Assim,

$$\tilde{f}(V)dV = g(y)dy \quad (\text{B.5})$$

Substituindo esta relação na equação B.2 e supondo uma relação linear $y = KV$:

$$1 = \int_0^{\infty} y\tilde{f}(V)dV = K \int_0^{\infty} V\tilde{f}(V)dV = K\tilde{\mu}_1 \quad (\text{B.6})$$

Assim:

$$K = \frac{1}{\tilde{\mu}_1} \quad (\text{B.7})$$

Retornando à equação B.5, sabendo que $dy = KdV$, tem-se que:

$$g(y) = \frac{\tilde{f}(V)}{K} = \tilde{\mu}_1 \frac{f(V)}{\mu_0} \quad (\text{B.8})$$

$$g(y) = \frac{\mu_1}{\mu_0^2} f(V) \quad (\text{B.9})$$

Dessa forma é possível escrever os momentos de qualquer ordem da função $g(y)$ como função de momentos da função $\tilde{f}(V)$:

$$\mu_k^{(g)} = \int_0^\infty y^k g(y) dy \quad (\text{B.10})$$

$$\mu_k^{(g)} = \int_0^\infty \left(\frac{V}{\tilde{\mu}_1}\right)^k \frac{\tilde{\mu}_1}{\mu_0} f(V) \frac{dV}{\tilde{\mu}_1} \quad (\text{B.11})$$

$$\mu_k^{(g)} = \frac{1}{\tilde{\mu}_1^k \mu_0} \int_0^\infty V^k f(V) dV \quad (\text{B.12})$$

$$\mu_k^{(g)} = \frac{\mu_k}{\mu_0 \tilde{\mu}_1^k} \quad (\text{B.13})$$

$$\mu_k^{(g)} = \frac{\tilde{\mu}_k}{\tilde{\mu}_1^k} \quad (\text{B.14})$$

Estes momentos, $\mu_k^{(g)}$, são calculados e servem de entrada para o algoritmo PD, descrito no Capítulo 2, que retorna os pesos e abscissas da distribuição $g(y)$.

B.2 Pesos e abscissas da distribuição inicial das bo-lhas, $f(V)$, a partir dos pesos e abscissas da distribuição $g(y)$

Com a relação entre a distribuição $g(y)$ e a distribuição $f(V)$, dada pela equação B.8, é possível escrever a correspondência entre os pesos e abscissas das duas distribuições.

A relação entre seus pesos é obtida invocando as relações entre os momentos

zero das distribuições:

$$\int_0^\infty g(y)dy = \int_0^\infty \tilde{f}(V)dV \quad (\text{B.15})$$

$$\sum_i w_i^{(g)} = \sum_i w_i^{(\tilde{f})} = \sum_i \frac{w_i^{(f)}}{N_{T_0}} \quad (\text{B.16})$$

Assim:

$$\frac{w_i^{(f)}}{N_{T_0}} = w_i^{(\tilde{f})} = w_i^{(g)} \quad (\text{B.17})$$

A relação entre suas abcissas é obtida calculando-se o momento k da função $\tilde{f}(V)$ em função dos pesos e abcissas da função $g(y)$:

$$\begin{aligned} \mu_k^{(\tilde{f})} &= \int_0^\infty V^k \tilde{f}(V)dV = \int_0^\infty (\tilde{\mu}_1 y)^k g(y)dy \\ &= \sum_i \left(\tilde{\mu}_1 \xi_i^{(g)} \right)^k w_i^{(g)} = \sum_i \left(\tilde{\mu}_1 \xi_i^{(g)} \right)^k \frac{w_i^{(f)}}{N_{T_0}} \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

E calculando o momento k da função $\tilde{f}(V)$ em função dos pesos e abcissas da função $f(V)$:

$$\mu_k^{(\tilde{f})} = \int_0^\infty V^k \tilde{f}(V)dD = \frac{1}{N_{T_0}} \int_0^\infty V^k f(V)dV = \sum_i \left(V_i^{(f)} \right)^k \frac{w_i^{(f)}}{N_{T_0}} \quad (\text{B.19})$$

Assim:

$$\frac{V_i^{(f)}}{\tilde{\mu}_1} = \xi_i^{(g)} \quad (\text{B.20})$$

Os valores assim calculados dos pesos e abcissas são a condição de entrada do método DQMOM e suas evoluções são acompanhadas ao longo do escoamento.