

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

Adriano Martins Hissanaga

**IMPLEMENTAÇÃO DE UM MODELO UNIDIMENSIONAL PARA O  
ESCOAMENTO BIFÁSICO LÍQUIDO-GÁS EM DUTOS COM  
TRANSFERÊNCIA DE MASSA INTERFACIAL**

Florianópolis

2017



Adriano Martins Hissanaga

**IMPLEMENTAÇÃO DE UM MODELO UNIDIMENSIONAL PARA O  
ESCOAMENTO BIFÁSICO LÍQUIDO-GÁS EM DUTOS COM  
TRANSFERÊNCIA DE MASSA INTERFACIAL**

Dissertação submetida ao Programa de  
Pós-Graduação em Engenharia Mecânica  
para a obtenção do grau de Mestre em  
Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Emilio Ernesto Pala-  
dino

Florianópolis

2017

Catálogo na fonte elaborada pela biblioteca da  
Universidade Federal de Santa Catarina

A ficha catalográfica é confeccionada pela Biblioteca Central.

Tamanho: 7cm x 12 cm

Fonte: Times New Roman 9,5

Maiores informações em:

<http://www.bu.ufsc.br/design/Catalogacao.html>

Adriano Martins Hissanaga

**IMPLEMENTAÇÃO DE UM MODELO UNIDIMENSIONAL PARA O  
ESCOAMENTO BIFÁSICO LÍQUIDO-GÁS EM DUTOS COM  
TRANSFERÊNCIA DE MASSA INTERFACIAL**

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de “Mestre em Engenharia Mecânica”, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

Florianópolis, 21 de Novembro 2017.

---

Prof. Jonny Carlos da Silva, Dr.,  
Coordenador do Curso

---

Prof. Emilio Ernesto Paladino, Dr.,  
Orientador

**BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. António Fábio Carvalho da Silva, Dr.,  
Presidente

---

Prof. Fernando Henrique Milanese, Dr.,  
Membro

---

Prof. Natan Padoin, Dr.,  
Membro



# AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer primeiramente à minha família: meu pai Newton Hissanaga, minha irmã Vanessa Himelstein e minha madrastra Dirce Takigawa, por todo apoio e dedicação.

Em segundo lugar, mas não menos importante, gostaria de agradecer o meu orientador Emilio Paladino, que nunca mediu esforços para ajudar, sempre acreditou em meu trabalho e esteve disponível para tudo que precisasse.

Adicionalmente, gostaria de agradecer meus amigos da graduação e que continuaram comigo na pós-graduação: Diego Pelegrin, Leticya Coelho, Indyanara Bianchet, Elaine Fabre e Angelo Oliveira. Os amigos de UFSC João Moura, Bruno Valerim, Silmara Oliveira, e também o pessoal do SINMEC: Conrado, Josi, Thaisa, Tati, Victor, Rafael, entre tantos outros.

Um brinde aos amigos da Anete: Lucas Cunha, Lucas Matias, Raphael Knabben, Raphael Cunha, Natalia Silveira, Veronica Martendal, Francielly Chaves e André Schlichting; e também aos amigos de infância (do prédio): David Rodrigues, Felipe Silveira, Lucas Matos e Tiago Muza.





# SUMÁRIO

<b>Lista de Figuras</b>	<b>v</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xi</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>xiii</b>
<b>Resumo</b>	<b>xix</b>
<b>Abstract</b>	<b>xxi</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Contexto e Motivação . . . . .	1
1.2 Objetivo . . . . .	2
1.2.1 Objetivos Específicos . . . . .	3
1.2.2 Organização da Dissertação . . . . .	4
<b>2 Fundamentação Teórica e Revisão da Literatura</b>	<b>5</b>
2.1 Breve Introdução aos Escoamentos Multifásicos . . . . .	5
2.1.1 Padrões de Escoamentos Bifásicos Gás-Líquido em Dutos . . . . .	6
2.1.2 Modelagem Matemática dos Escoamentos Multifásicos . . . . .	9
2.2 Escoamentos com Bifásicos com Formação de Golfadas . . . . .	14
2.2.1 Simulação Numérica dos Escoamentos com Formação de Golfadas . . . . .	15
2.2.2 Revisão Bibliográfica do Modelo de Captura de Golfadas ( <i>Slug Capturing</i> ) . . . . .	17
<b>3 Metodologia</b>	<b>21</b>
3.1 Método dos Volumes Finitos Aplicado ao Modelo de Dois-Fluidos Unidimensional . . . . .	21

3.1.1	Integração Sobre um Volume Finito . . . . .	22
3.1.2	Integração Temporal . . . . .	27
3.1.3	Obtenção do Sistema de Equações Algébricas . . . . .	28
3.2	Método dos Volumes Finitos Aplicado ao Modelo de Dois- Fluidos Particularizado . . . . .	31
3.2.1	Conservação da Massa por Fase . . . . .	31
3.2.2	Conservação da Quantidade de Movimento por Fase . . . . .	34
3.2.3	Implementação do Método PRIME para o Acopla- mento Pressão-Velocidade . . . . .	36
3.2.4	Conservação das Espécies Químicas . . . . .	39
3.2.5	Aplicação das Condições de Contorno . . . . .	41
3.3	Algoritmo de Solução . . . . .	42
<b>4</b>	<b>Verificação da Metodologia Proposta</b>	<b>45</b>
4.1	Problema da Advecção de um Pulso . . . . .	46
4.2	Problema da Torneira d'Água . . . . .	50
4.3	Problema da Decantação . . . . .	57
<b>5</b>	<b>Escoamento Vertical Líquido-Gás Disperso com Transferência de Massa Interfacial</b>	<b>63</b>
5.1	Aparato e Condições Experimentais . . . . .	64
5.2	Modelo Matemático . . . . .	66
5.2.1	Relações de Fechamento . . . . .	67
5.2.2	Integração dos Termos de Transferência Interfacial . . . . .	70
5.2.3	Determinação das Condições de Entrada . . . . .	72
5.3	Solução em Regime Permanente e Comparação com Dados da Literatura . . . . .	74
5.3.1	Influência do Parâmetro $k_L$ . . . . .	78
<b>6</b>	<b>Escoamento Gás-Líquido Horizontal com Formação de Golfadas e Transferência de Massa Interfacial</b>	<b>81</b>
6.1	Modelo Matemático . . . . .	82
6.2	Método Numérico . . . . .	89
6.2.1	Integração dos Termos Particulares . . . . .	89
6.2.2	Tratamento Numérico das Golfadas . . . . .	91
6.3	Validação Numérica e Resultados Preliminares . . . . .	96
6.3.1	Validação Qualitativa . . . . .	96
6.3.2	Validação Quantitativa . . . . .	100

6.4	Resultados Considerando a Transferência de Massa Interfacial . . . . .	106
6.4.1	Influência sobre a Frequência Mediana das Golfadas	106
6.4.2	Influência sobre o Comprimento Médio das Golfadas	109
6.4.3	Influência sobre as Velocidades Médias das Golfadas	113
6.4.4	Perfis Médios de Composição . . . . .	116
6.4.5	Perfis Médios de Pressão . . . . .	120
6.4.6	Formação das Golfadas sobre Diferentes Condições de Transferência de Massa Interfacial . . . . .	122
<b>7</b>	<b>Conclusões e Sugestões</b>	<b>125</b>
7.1	Conclusões deste Trabalho . . . . .	125
7.2	Sugestões para Trabalhos Futuros . . . . .	126
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>129</b>
<b>A</b>	<b>Breve Dedução das Equações do Modelo de Dois-Fluidos</b>	<b>133</b>
A.1	Dedução a Partir da Formulação Genérica . . . . .	133
A.2	Particularização para a Conservação da Massa por Fase . . .	137
A.3	Particularização para a Conservação da Quantidade de Movimento . . . . .	137
A.4	Conservação das Espécies . . . . .	138



# LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Padrões de Escoamentos Bifásicos Gás-Líquido Verticais	7
Figura 2.2	Padrões de Escoamentos Bifásicos Gás-Líquido Horizontais	8
Figura 2.3	Mapa de Padrões de Escoamentos Bifásicos Gás-Líquido Horizontais	9
Figura 2.4	Transferência de Massa Interna e Externa sobre Esfera	12
Figura 2.5	Escoamento com Golfadas – Orientação Oblíqua	14
Figura 2.6	Unidade da Golfada	15
Figura 2.7	Golfada Transladada pelo <i>Slug Tracking</i>	16
Figura 2.8	Golfada Capturada pelo <i>Slug Capturing</i>	17
Figura 2.9	Limite da Formulação Matemática Bem-Posta no Mapa de Padrões de Escoamento Horizontal	19
Figura 3.1	Posições das Variáveis no MVF	22
Figura 3.2	Limites da Região TVD de 1ª e 2ª Ordens	25
Figura 3.3	Composição do Volume	34
Figura 3.4	Composição dos Fluxos de Massa sobre os Volumes Centrados nas Faces	35
Figura 3.5	Volumes para Variáveis Escalares e Vetoriais	41
Figura 4.1	Problema da Advecção de um Pulso – Comparação dos Campos de Variável Transportada Frente ao Refino de Malha – Esquemas Upwind/Euler (U/E) $\times$ TVD Van Leer/Crank-Nicolson (VL/CN) – $t=0,6$ s	48
Figura 4.2	Problema da Advecção de um Pulso – Comparação dos	

	Campos de Variável Transportada – Diferentes Esquemas – $t=0,6$ s .....	48
Figura 4.3	Problema da Advecção de um Pulso – Comparação dos Campos de Variável Transportada – Esquemas <i>Upwind</i> /Euler (U/E) $\times$ TVD/Crank-Nicolson (TVD/CN) .....	49
Figura 4.4	Problema da Advecção de um Pulso – Comparação dos Campos de Variável Transportada – Esquemas TVD/Euler (TVD/E) (U/E) $\times$ TVD/Crank-Nicolson (TVD/CN) – $N=100$ .....	49
Figura 4.5	Diagrama do Problema <i>Water Faucet</i> .....	50
Figura 4.6	Problema da Torneira d'Água – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica – Esquema <i>Upwind</i> /Euler (U/E) – Formulação (1) $\times$ Formulação (2) .....	54
Figura 4.7	Problema da Torneira d'Água – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica – Esquema TVD Van Leer/Euler (VL/E) – Formulação (1) $\times$ Formulação (2) .....	54
Figura 4.8	Problema da Torneira d'Água – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica – Esquemas <i>Upwind</i> /Euler (U/E) $\times$ TVD Van Leer/Crank-Nicolson (VL/CN) – Refino de Malha .....	55
Figura 4.9	Problema da Torneira d'Água – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica – Esquemas <i>Upwind</i> /Euler (U/E) $\times$ TVD Van Leer/Crank-Nicolson (VL/CN) .....	55
Figura 4.10	Problema da Torneira d'Água – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica – Esquemas TVD Van Leer/Euler (VL/E) $\times$ TVD Van Leer/Crank-Nicolson (VL/CN) .....	56
Figura 4.11	Problema da Torneira d'Água – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica – Esquemas <i>Upwind</i> /Euler (U/E) $\times$ TVD/Crank-Nicolson (TVD/CN) .....	56
Figura 4.12	Teste de Decantação .....	57
Figura 4.13	Problema da Decantação – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica da Fase Gasosa – Esquemas <i>Upwind</i> /Euler (U/E) $\times$ Resultados da Literatura .....	59
Figura 4.14	Problema da Decantação – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica da Fase Gasosa Frente ao Refino de	

	Malha – Esquemas <i>Upwind</i> /Euler (U/E) × Esquema TVD Van Leer/Euler (VL/E) – $t=0,8$ s .....	59
Figura 4.15	Problema da Decantação – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica da Fase Gasosa – Esquemas TVD Van Leer/Crank-Nicolson (VL/CN) × <i>Upwind</i> /Euler (U/E) ..	60
Figura 4.16	Problema da Decantação – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica da Fase Gasosa – Esquemas TVD Van Leer/Crank-Nicolson (VL/CN) × Van Leer/Euler (VL/E) .	61
Figura 4.17	Problema da Decantação – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica da Fase Gasosa – Esquemas TVD Van Leer/Crank-Nicolson (VL/CN) com $C=0,5$ × Van Leer/Euler (VL/E) com $C=0,1$ .....	61
Figura 5.1	Esquema do Aparato Experimental – Coluna de Bolhas ..	65
Figura 5.2	Composição do Coeficiente de Transferência de Massa Interfacial $k_L a$ .....	68
Figura 5.3	Coluna de Bolhas – Comparação dos Resultados de Fra- ção Volumétrica da Fase Gasosa Obtidos com os Resul- tados Experimentais e Numéricos da Literatura – Expe- rimentos 16, 17 e 19 .....	75
Figura 5.4	Coluna de Bolhas – Comparação dos Resultados de Fra- ção Molar de $CO_2$ da Fase Gasosa Obtidos com os Resul- tados Experimentais e Numéricos da Literatura – Expe- rimentos 15, 16, 17 e 19 .....	76
Figura 5.5	Coluna de Bolhas – Comparação dos Resultados de Fra- ção Molar de $CO_2$ da Fase Gasosa Obtidos com Diferen- tes Valores de $k_L$ – Experimentos 16, 17 e 19 .....	79
Figura 5.6	Coluna de Bolhas – Comparação dos Resultados de Fra- ção Volumétrica da Fase Gasosa Obtidos com Diferentes Valores de $k_L$ – Experimentos 16, 17 e 19 .....	80
Figura 6.1	Seção Transversal do Duto com Estratificação .....	84
Figura 6.2	Transporte Sobre a Cauda da Golfada .....	91
Figura 6.3	Transporte Sobre o Nariz da Golfada .....	92

Figura 6.4	Tela de Acompanhamento das Variáveis.....	97
Figura 6.5	Mecanismo de Formação da Golfada.....	99
Figura 6.6	Mecanismo de Formação da Golfada Observado.....	99
Figura 6.7	Comparação dos Resultados de Frequência Média das Golfadas Obtidos Frente ao Refino de Malha.....	100
Figura 6.8	Comparação dos Resultados de Frequência Média das Golfadas Obtidos Frente ao Refino de Malha – Esquema Van Leer/Euler.....	101
Figura 6.9	Comparação dos Resultados de Comprimento Médio das Golfadas Obtidos Frente ao Refino de Malha.....	102
Figura 6.10	Comparação dos Resultados de Velocidade Média do Nariz das Golfadas Obtidos Frente ao Refino de Malha.....	102
Figura 6.11	Comparação dos Resultados de Velocidade Média da Cauda das Golfadas Obtidos Frente ao Refino de Malha.....	103
Figura 6.12	Histograma do Comprimento das Golfadas.....	103
Figura 6.13	Comparação dos Resultados de Velocidade Média do Nariz das Golfadas Obtidos Frente ao Refino de Malha – Caso 2.....	104
Figura 6.14	Limites de Formação de Golfadas e de Problema Bem-Posto.....	105
Figura 6.15	Histograma do Comprimento das Golfadas – Corrente Líquida Livre e Corrente Gasosa Concentrada de $\text{CO}_2$ – $Y_L^{\text{CO}_2} = 0$ e $Y_G^{\text{CO}_2} = 0,50$ .....	111
Figura 6.16	Histograma do Comprimento das Golfadas – Correntes Concentradas em Equilíbrio – $Y_L^{\text{CO}_2} = 7,46 \cdot 10^{-4}$ e $Y_G^{\text{CO}_2} = 0,50$ .....	111
Figura 6.17	Histograma do Comprimento das Golfadas – Corrente Líquida Concentrada e Corrente Gasosa Livre de $\text{CO}_2$ – $Y_L^{\text{CO}_2} = 7,46 \cdot 10^{-4}$ e $Y_G^{\text{CO}_2} = 0$ .....	112
Figura 6.18	Resultados de Composição Média na Fase Líquida – Corrente Líquida Livre de $\text{CO}_2$ .....	117



Figura 6.19	Resultados de Composição Média na Fase Gasosa – Corrente Líquida Livre de CO <sub>2</sub> .....	117
Figura 6.20	Resultados de Composição Média na Fase Líquida – Corrente Gasosa Livre de CO <sub>2</sub> .....	118
Figura 6.21	Resultados de Composição Média na Fase Gasosa – Corrente Gasosa Livre de CO <sub>2</sub> .....	118
Figura 6.22	Resultados de Composição Média na Fase Líquida – Correntes em Equilíbrio .....	119
Figura 6.23	Resultados de Composição Média na Fase Gasosa – Correntes em Equilíbrio .....	119
Figura 6.24	Comparação dos Resultados de Pressão Média com Transferência de Massa – Corrente Líquida Livre de CO <sub>2</sub> .....	120
Figura 6.25	Comparação dos Resultados de Pressão Média com Transferência de Massa – Corrente Gasosa Livre de CO <sub>2</sub> .....	121
Figura 6.26	Comparação dos Resultados de Pressão Média com Transferência de Massa – Correntes em Equilíbrio .....	121
Figura 6.27	Perfis de Formação das Golfadas – Corrente Líquida Livre de CO <sub>2</sub> e $K_L = 10^{-2}$ m/s .....	123
Figura 6.28	Perfis de Formação das Golfadas – Corrente Gasosa Livre de CO <sub>2</sub> e $K_L = 10^{-2}$ m/s .....	123



# LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1	Particularização das Equações de Conservação do Modelo de Dois-Fluidos Unidimensional . . . . .	11
Tabela 2.2	Resumo dos Estudos de <i>Slug Tracking</i> . . . . .	20
Tabela 3.1	Esquemas de Interpolação de Alta Ordem (TVD) . . . . .	25
Tabela 5.1	Condições Experimentais de Entrada na Simulação de Coluna de Bolhas . . . . .	72
Tabela 5.2	Condições Numéricas de Entrada na Simulação de Coluna de Bolhas . . . . .	74
Tabela 5.3	Coluna de Bolhas – Comparação dos Resultados de Fração Molar de CO <sub>2</sub> da Fase Gasosa Obtidos e dos Resultados Experimentais e Numéricos da Literatura – Saída da Coluna . . . . .	77
Tabela 5.4	Coluna de Bolhas – Comparação dos Valores de $k_L$ Determinados por Correlação e dos Valores Apresentados na Literatura . . . . .	78
Tabela 5.5	Coluna de Bolhas – Comparação dos Resultados de Velocidade Superficial da Fase Gasosa Obtidos e dos Resultados Experimentais da Literatura – Saída da Coluna . . . . .	78
Tabela 6.1	Comparação dos Resultados de Frequência Mediana das Golfadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Líquida Livre de CO <sub>2</sub> e Equilíbrio . . . . .	108
Tabela 6.2	Comparação dos Resultados de Frequência Mediana das Golfadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Gasosa Livre de CO <sub>2</sub> e Equilíbrio . . . . .	108

Tabela 6.3	Comparação dos Resultados de Comprimento Mediano das Golfadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Líquida Livre de CO <sub>2</sub> e Equilíbrio . . . . .	110
Tabela 6.4	Comparação dos Resultados de Comprimento Mediano das Golfadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Gasosa Livre de CO <sub>2</sub> e Equilíbrio . . . . .	110
Tabela 6.5	Comparação dos Resultados de Velocidade Mediana do Nariz das Golfadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Líquida Livre de CO <sub>2</sub> e Equilíbrio . . . . .	114
Tabela 6.6	Comparação dos Resultados de Velocidade Mediana da Cauda das Golfadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Líquida Livre de CO <sub>2</sub> e Equilíbrio . . . . .	114
Tabela 6.7	Comparação dos Resultados de Velocidade Mediana do Nariz das Golfadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Gasosa Livre de CO <sub>2</sub> e Equilíbrio . . . . .	115
Tabela 6.8	Comparação dos Resultados de Velocidade Mediana da Cauda das Golfadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Gasosa Livre de CO <sub>2</sub> e Equilíbrio . . . . .	115

# LISTA DE SÍMBOLOS

## Símbolos Romanos

$A$	Área	$m^2$
$a_I$	Área Interfacial Específica	$1/m$
$a_w$	Área Específica Molhada pela Parede	$1/m$
$b$	Constante Positiva na Equação 3.8	$\text{var}/s$
$C_k^i$	Concentração Molar da Espécie $i$ na Fase $k$	$\text{mol}/m^3$
$C_D^{(\cdot)}$	Coefficiente de Arraste Referente à Morfologia $(\cdot)$	–
$D$	Difusividade Mássica	$m^2/s$
$\mathcal{D}_{(\cdot)}$	Condutância Difusiva na Face $(\cdot)$	$\text{kg}/s$
$d$	Diâmetro do Domínio	$m^2/s$
$d_B$	Diâmetro Médio das Bolhas	$m$
$\dot{f}$	Pseudovazão Mássica	$\text{kg}/s$
$g$	Aceleração da Gravidade	$m/s^2$
$H$	Altura referente ao domínio	$m$
He	Constante de Henry	–
$h_L$	Altura de Líquido no Duto	$m$
$J$	Fluxo Difusivo	$\text{var}/m^2 \cdot s$
$K$	Coefficiente de Transferência de Massa Global	$m/s$
$k$	Coefficiente de Transferência de Massa no Filme/Unilateral	$m/s$

$L$	Comprimento do Domínio	m
$M$	Massa do Volume de Controle	kg
$\mathcal{M}_k$	Termo Fonte na Equação de Conservação de Quantidade de Movimento Unidimensional na Fase k	kg · m/s
$M^{\text{mol}}$	Massa Molar	kg/mol
$\dot{m}_{(\cdot)}$	Vazão Mássica na Face ( $\cdot$ )	kg/s
$\mathcal{N}_k$	Termo Fonte na Equação de Conservação das Espécies Unidimensional na Fase k	mol/s
$p$	Pressão	Pa
$p_{(\cdot)}$	Pressão na Fase ( $\cdot$ ) = $k$ ou Interface ( $\cdot$ ) = $k, I$	Pa
$R$	Constante Universal dos Gases Perfeitos	J/K · mol
$\mathcal{R}_k^{i'''}$	Taxa de Geração da Espécie Química $i$ na Fase k	mol/s
$r_{(\cdot)}$	Razão dos Gradientes sobre a Face ( $\cdot$ )	–
$S$	Termo Fonte	var/m <sup>3</sup> · s
$T$	Temperatura	K
$\mathbf{T}$	Tensor Tensão	N/m <sup>2</sup>
$t$	Tempo	s
$\mathcal{T}$	Tensor Tensão Viscoso	K
tol	Tolerância	var/s
$u$	Componente Axial de Velocidade	m/s
$u_s$	Velocidade Superficial	m/s
$V$	Volume	m <sup>3</sup>
$\mathbf{v}$	Vetor Velocidade	m/s
$x$	Direção Axial	m
$Y_k^i$	Fração Mássica da Espécie $i$ na Fase k	–
$Y_k^i$	Fração Molar da Espécie na Fase k	–

## Símbolos Gregos

$\alpha$	Fração Volumétrica da Fase	–
$\beta$	Coefficiente do Esquema Sweby	–
	Ângulo oposto à interface de líquido no duto circular	rad
$\phi$	Variável Transportada	var
$\Gamma$	Vazão Mássica Interfacial	kg/s
$\Gamma''$	Fluxo Mássico Interfacial	kg/m <sup>2</sup> · s
$\gamma$	Ângulo de Orientação Oblíqua do Duto	rad
$\Pi$	Difusividade Genérica	m <sup>2</sup> /s
$\theta$	Fator de Implicitude do Esquema Temporal	–
$\Psi$	Função Limitadora de Fluxo	–
$\mu$	Viscosidade Dinâmica	Pa · s
$\rho$	Massa Específica	kg/m <sup>3</sup>
$\sigma$	Tensão Superficial	N/m

## Subscritos

$E$	Referente ao Centro do Volume à Leste
$e$	Referente à Face Leste
$G$	Referente à Fase Gás
$j$	Referente à Fase $j \neq k$
$k$	Referente à Fase $k$
$L$	Referente à Fase Líquida
$P$	Referente ao Centro do Volume Central
$W$	Referente ao Centro do Volume à Oeste
sat	Referente à Saturação
$w$	Referente à Face Oeste
	Referente à Parede ( <i>wall</i> )
$x$	Referente à Componente axial do vetor: $v_x = \hat{i} \cdot \mathbf{v}$
$xx$	Referente à Componente xx do tensor: $T_{xx} = \hat{i} \cdot \mathbf{T} \cdot \hat{i}$



## Sobrescritos

$(\cdot)^{ef}$	Efetivo
$(\cdot)^i$	Referente ao Componente $i$
$(\cdot)^T$	Turbulento
$(\cdot)^\phi$	Referente à variável $\phi$
$\overline{(\cdot)}$	Valor da face dado pela média dos volumes adjacentes
$\widetilde{(\cdot)}$	Valor da face dado pelo esquema TVD
$(\cdot)''$	Fluxo
$(\cdot)^*$	Valor da Iteração Anterior
$(\cdot)^0$	Valor do Tempo Anterior
$(\cdot)^\theta$	Referente à Implementação Temporal $\theta$
$(\cdot)^{TVD}$	Referente à Implementação do Esquema TVD
$\alpha$	Referente à Conservação da Massa
$u$	Referente à Conservação da Quantidade de Movimento
$Y$	Referente à Conservação das Espécies

## Números Adimensionais

$Eo$	Número de Eötvös
$Pe$	Número de Péclet
$Re$	Número de Reynolds
$Sc$	Número de Schmidt
$Sh$	Número de Sherwood



# RESUMO

Este trabalho objetiva a implementação de um modelo unidimensional para escoamentos multifásicos em dutos, com foco no padrão de golfadas (*slug*), incluindo o fenômeno de transferência de massa interfacial em sistemas multicomponentes. O modelo é baseado no Método dos Volumes Finitos aplicado ao Modelo de Dois-Fluidos na sua forma unidimensional. Foram implementados esquemas de alta ordem para os termos advectivos (TVD) e formulações temporais implícitas (Euler e Crank-Nicolson). O modelo desenvolvido foi validado a partir de diversas soluções *benchmark* disponíveis na literatura, com diferentes graus de complexidade, a fim de validar a implementação numérica do mesmo. O modelo foi posteriormente aplicado ao escoamento bifásico líquido-gás disperso em uma coluna de bolhas, que foi o único caso encontrado na literatura apresentando resultados experimentais e incluindo o fenômeno de transferência de massa interfacial. Neste caso, o modelo apresentou ótima concordância com os resultados presnetes na literatura. Finalmente, foram implementados os modelos de fechamento necessários para a análise da formação e propagação de golfadas em dutos horizontais, onde modelo foi também validado para escoamento neste padrão, sem incluir a transferência de massa interfacial. Posteriormente, o modelo foi utilizado para verificar a influência da transferência de massa interfacial sobre parâmetros importantes do escoamento neste padrão, como a frequência e velocidade de propagação das golfadas, em um sistema água-CO<sub>2</sub>-ar. Verificou-se que para as taxas de transferência interfacial observadas neste sistema, este fenômeno não tem influência significativa nos parâmetros de frequência e velocidade de propagação das golfadas. No entanto, os resultado apontam que, em sistemas com maior taxa de transferência de massa interfacial como em hidrocarbonetos com componentes-chave leves, a transferência de massa interfacial poderia afetar de forma mais significativa a estrutura do escoamento em padrão de golfadas.



# ABSTRACT

This work aims at the implementation of a one-dimensional model for multiphase flows in ducts, focusing on the slug flow regime, including the interfacial mass transfer phenomena in multicomponent systems. The model is based on the Finite Volume Method applied to the Two-Fluid Model in its one-dimensional form. High-order schemes for the advective terms (TVD) and implicit temporal formulations (Euler and Crank-Nicolson) were implemented. The developed model was validated from several benchmark solutions available in the literature, with different degrees of complexity, in order to validate the numerical implementation. The model was later applied to the two-phase liquid-gas flow in a bubble column, which was the only case found in the literature presenting experimental results and including the interfacial mass transfer phenomena. In this case, the model presented excellent agreement with the preset results in the literature. Finally, the closure models needed to analyze the formation and propagation of slugs in horizontal ducts were implemented, where the model was also validated for the slug flow regime, not including interfacial mass transfer. Later, the model was used to verify the influence of the interfacial mass transfer on important flow parameters in this regime, such as the frequency and velocity of the slugs, in a water-CO<sub>2</sub>-air system. It was verified that for the interfacial transfer rates observed in this system, this phenomena does not have significant influence on the parameters of frequency and velocity of the slugs. However, the results indicate that, in systems with higher interfacial mass transfer rate such as hydrocarbons with light components, the interfacial mass transfer could affect more significantly the structure in the slug flow regime.



# INTRODUÇÃO

## 1.1 Contexto e Motivação

Os escoamentos multifásicos podem ser definidos, de forma sucinta, como um escoamento com ocorrência de duas ou mais fases imiscíveis entre si. Essa classe de escoamento está presente em uma larga gama de aplicações industriais, como em sistemas de transformação de energia, nas indústrias nuclear, de petróleo e demais aplicações.

Uma aplicação de destaque dos escoamentos multifásicos dá-se na indústria petrolífera, no transporte de misturas multifásicas de reservatórios para instalações *onshore* ou *offshore* através dutos. Atualmente, o processamento dos fluidos *in situ* é uma prática considerada muito onerosa devido aos custos de construção e de manutenção de complexas plataformas *offshore* que incluam as devidas instalações de processamento.

Dentre os padrões de escoamentos multifásicos observados no transporte de óleo e gás, destaca-se o com formação de golfadas. Esse padrão de escoamento caracteriza-se pela alternância entre grandes bolhas de gás e golfadas de líquido, de frequência flutuante aleatória. A intermitência característica dessa classe de escoamento resulta em perdas de carga e vazões variáveis nos dutos e por conseguinte nos equipamentos à jusante, como separadores. Isso acarreta no comprometimento de partes do projeto devido às condições operacionais adversas impostas pela ocorrência golfadas, geralmente em detrimento da eficiência e/ou

dimensões da planta de processamento, além de problemas estruturais decorrentes desta flutuações. Por estes motivos, o escoamento em padrão com formação de golfadas tem recebido importante atenção na literatura.

Através do uso de ferramentas computacionais, é possível prever a ocorrência e a fenomenologia de formação e propagação das golfadas em dutos, bem como seus parâmetros característicos. Um aspecto importante na modelagem matemática dos escoamentos multifásicos em dutos é o compromisso entre o esforço computacional e a acurácia do modelo proposto. Tendo em vista que os dutos de transporte de óleo e gás podem alcançar centenas de quilômetros de extensão, os modelos unidimensionais tornam-se uma boa escolha na simulação de escoamentos multifásicos sob essas circunstâncias. A abordagem através do modelo de dois fluidos unidimensional é encontrada em diversos trabalhos publicados na literatura bem como em *softwares* comerciais disponíveis, tais como o OLGAs (*oil and gas simulator*) da Schlumberger, entre outros.

Entretanto, os atuais estudos focam na dinâmica de formação e propagação das golfadas sem considerar a transferência de massa interfacial. Deve-se ter em vista a possível ocorrência de componentes-chave voláteis ou condensáveis nas fases líquida e gasosa, respectivamente, de modo que a transferência de massa interfacial possa influenciar a dinâmica das golfadas.

De um modo geral, os modelos unidimensionais encontrados na literatura para aplicação a escoamentos bifásicos em dutos consideram um equilíbrio local de fases, associando as taxas de transferência de massa interfacial às taxas de variação das variáveis termodinâmicas como temperatura e pressão, mas não consideram a resistência à transferência de massa interfacial, como função das diferenças entre as composições (à rigor, atividades químicas) das fases. Desta forma, o presente trabalho procura incorporar o fenômeno de transferência de massa interfacial no modelo de dois fluidos unidimensional buscando, no caso de aplicação a escoamento em padrão com formação de golfadas, verificar a influência deste fenômeno nas características do escoamento no referido padrão.

## 1.2 Objetivo

O objetivo geral deste trabalho é a implementação de um modelo unidimensional para a simulação de escoamentos multifásicos em dutos



incorporando os efeitos da transferência de massa interfacial. As equações do modelo de dois-fluidos unidimensional são discretizadas através do método dos volumes finitos. Foram incorporadas diferentes relações de fechamento, a fim de capacitar o algoritmo desenvolvido à simulação de diferentes padrões de escoamento em dutos.

O algoritmo desenvolvido foi validado com testes numéricos encontrados na literatura. O módulo de transferência de massa foi validado a partir da simulação da absorção de  $\text{CO}_2$  em um escoamento líquido-gás disperso vertical (coluna de bolhas), onde o algoritmo foi capaz de simular a dinâmica da transferência de massa com ótima concordância em relação aos resultados experimentais encontrados na literatura. Adicionalmente, o algoritmo foi capaz de simular a ocorrência de golfadas em um escoamento gás-líquido horizontal, novamente com boa concordância em relação aos resultados experimentais na literatura, validando a metodologia também para escoamentos com formação de golfadas.

Por fim, foram simuladas diferentes condições operacionais incluindo os efeitos de transferência de massa, a fim de avaliar sua influência sobre a dinâmica bem como dos parâmetros médios dos escoamentos com formação de golfadas. Vale ressaltar que nenhum trabalho deste tipo foi encontrado na literatura. Além disso, neste trabalho foram implementadas funções de interpolação de alta ordem espacial (TVD) e temporal (Crank-Nicolson), em complemento à literatura, que apresenta sempre o esquema espacial *Upwind* e temporal de Euler.

### 1.2.1 Objetivos Específicos

- implementar um algoritmo no âmbito do modelo de dois-fluidos unidimensional para a simulação de escoamentos multifásicos em dutos;
- implementar esquemas de interpolação de alta ordem para os termos advectivos (TVD), bem como implementar uma formulação temporal  $\theta$  genérica, onde  $\theta = 1$  corresponda ao esquema de Euler e  $\theta = 0,5$  ao esquema de Crank-Nicolson;
- implementar um módulo de transferência de massa;
- validar o algoritmo proposto com testes numéricos presentes na literatura;

- validar o algoritmo proposto com um caso real com transferência de massa, especificamente a absorção de  $\text{CO}_2$  em um escoamento gás-líquido disperso vertical;
- validar o algoritmo proposto com um caso real de escoamento horizontal com formação de golfadas, sem transferência de massa;
- simular um escoamento horizontal com formação de golfadas, incluindo os efeitos de transferência de massa.

## 1.2.2 Organização da Dissertação

A dissertação encontra-se organizada nos seguintes capítulos

- **Capítulo 2** – são apresentados o fundamentos teóricos dos escoamentos multifásicos, com especial atenção ao modelo de dois-fluidos unidimensional.
- **Capítulo 3** – o modelo de dois fluidos unidimensional e em sua formulação genérica é discretizado através do método dos volumes finitos, visando descrever a formulação adotada neste trabalho.
- **Capítulo 4** – o algoritmo desenvolvido neste trabalho é testado com problemas numéricos a fim de verificar sua validade.
- **Capítulo 5** – o algoritmo desenvolvido neste trabalho é testado com um experimento real de transferência de massa em uma coluna de bolhas, visando validar o módulo de transferência de massa desenvolvido neste trabalho.
- **Capítulo 6** – o algoritmo desenvolvido neste trabalho é utilizado para a simulação de um escoamento com formação de golfadas, com e sem transferência de massa.
- **Capítulo 7** – são apresentados as conclusões desta dissertação e sugestões para trabalhos futuros.

# FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO DA LITERATURA

Este capítulo apresenta fundamentação teórica e a revisão da literatura sobre os escoamentos bifásicos gás-líquido horizontais com formação de golfadas. Na primeira seção são apresentados os conceitos básicos dos escoamentos multifásicos. Na segunda parte, o foco é voltado para os escoamentos bifásicos gás-líquido com formação de golfadas, que é o escopo deste trabalho.

## 2.1 Breve Introdução aos Escoamentos Multifásicos

Segundo Paladino (2005), um sistema multifásico pode ser definido como uma região no espaço onde coexistem dois ou mais fluidos imiscíveis separados por uma interface conexa, desconexa ou uma combinação conexa-desconexa. Os escoamentos multifásicos podem ser encontrados em diversas áreas tecnológicas, em especial nas indústrias alimentícia, química, petroquímica, de conversão de energia, entre outras.

Mais especificamente, os escoamentos bifásicos limitam-se à presença de duas fases, sejam elas quaisquer uma das possíveis combinações líquido-líquido, líquido-sólido, líquido-gasoso ou gás-sólido. Este estudo será focado nos escoamentos bifásicos gás-líquido tendo em vista na aplicação nas indústrias de óleo e gás, sem não incluir complexidades

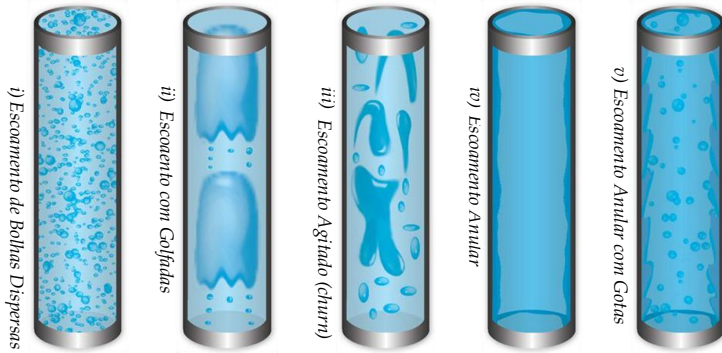
adicionais resultantes da aplicação de modelos com maior número de fases.

### 2.1.1 Padrões de Escoamentos Bifásicos Gás-Líquido em Dutos

Um dos aspectos mais desafiantes de lidar com escoamentos multifásicos é o fato que este pode tomar diversas morfologias. Nos escoamentos bifásicos gás-líquido em dutos verticais, a força gravitacional toma um papel importante na hidrodinâmica do escoamento. Estes tendem a ser mais simétricos, uma vez que a força peso age de forma homogênea sobre o plano horizontal. Os diferentes padrões de escoamentos bifásicos gás-líquido verticais são ilustrados na Figura 2.1 e podem ser classificados como:

- Escoamento de Bolhas Dispersas (*Bubbly Flow*): apresentam bolhas de gás dispersas em uma fase contínua líquida. A forma das bolhas variam de esféricas a destorcidas e geralmente são pequenas em relação ao diâmetro do duto.
- Escoamento com Golfadas (*Slug Flow*): devido a agitação do meio, as bolhas coalescem formando uma bolha alongada de dimensão do diâmetro do duto, denominada bolha de Taylor. Ocorre a alternância de bolhas de Taylor e golfadas de líquido, que geralmente contém bolhas de gás dispersas.
- Escoamento Agitado (*Churn Flow*): devido a agitação do escoamento bem como as grandes dimensões das bolhas de Taylor, estas começam a romper-se, levando a um escoamento caótico e instável.
- Escoamento Anular (*Annular Flow*): a fase gasosa concentra-se no centro do duto em elevadas velocidades, enquanto a fase gasosa forma uma fina camada nas paredes do duto.
- Escoamento Anular com Gotas: é possível que, devido a elevada velocidade relativa entre as fases, o centro gasoso arranque porções da camada líquida, formando gotas na fase gasosa.

Os escoamentos bifásicos gás-líquido horizontais exibem formas diferentes daquelas observadas em escoamentos bifásicos verticais, uma vez que a força gravitacional age perpendicularmente à direção do escoamento. Dessa forma, são mais complexos que os escoamentos bifásicos

**Figura 2.1** – Padrões de escoamentos Bifásicos Gás-Líquido Verticais

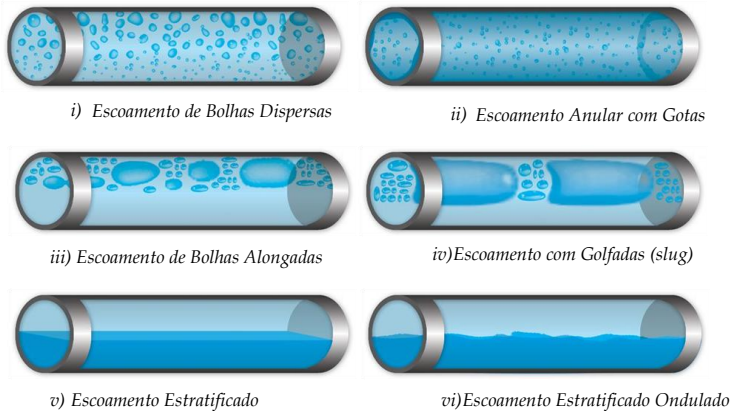
Fonte: adaptado de Bratland (2010)

verticais, uma vez que a axissimetria geralmente não é observada nestes tipos de escoamento. Os diferentes padrões de escoamentos bifásicos gás-líquido horizontais são ilustrados na Figura 2.2 e podem ser classificados como:

- Escoamento de Bolhas Dispersas (*Bubbly Flow*): a fase gasosa aparece na forma de bolhas distribuídas na fase líquida contínua. As bolhas tendem a subir ao topo do duto devido ao efeito do empuxo. Entretanto, quando a velocidade do líquido é elevada, as bolhas podem ser mais uniformemente distribuídas no líquido.
- Escoamento de Bolhas Alongadas (*Plug Flow*): com o aumento da vazão da fase gasosa, as bolhas passam a permanecer no topo do duto na forma de capas devido ao empuxo.
- Escoamento Estratificado (*Stratified Flow*): quando as velocidades das fases são relativamente baixas. O líquido escoar na parte de baixo do duto devido a gravidade, enquanto a gravidade escoar no topo.
- Escoamento Estratificado Ondulado (*Wavy Flow*): com o aumento da velocidade da fase gasosa, as forças cisalhantes sobre a fase líquida causa a formação de ondas na interface líquido-vapor.

- Escoamento com Golfadas (*Slug Flow*): a amplitude das ondas cresce até que as cristas batam o topo do duto, resultando num bloqueio da fase gasosa.
- Escoamento Anular com Gotas: similar ao caso vertical.

**Figura 2.2** – Padrões de Escoamentos Bifásicos Gás-Líquido Horizontais



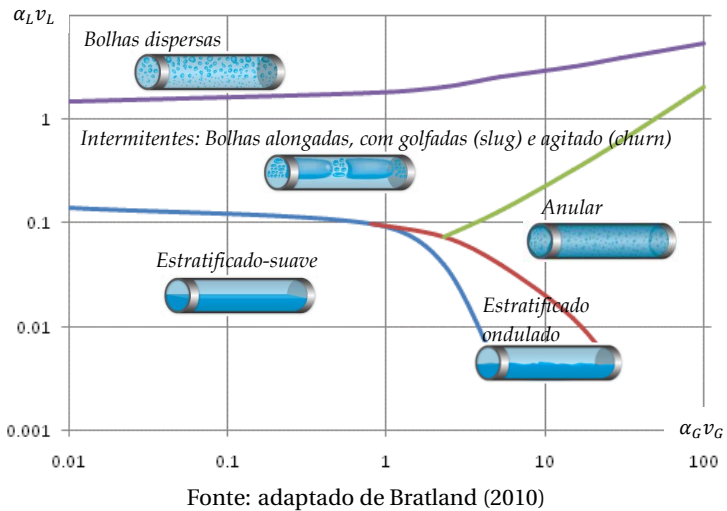
Fonte: adaptado de Bratland (2010)

Vale ressaltar que a maior parte dos trabalhos publicados na literatura são realizados em geometrias horizontais ou verticais, resultando nos padrões apresentados nas Figuras 2.1 e 2.2. Entretanto, vale ressaltar que os dutos de transporte de óleo e gás reais geralmente seguem a inclinação do terreno, resultando numa combinação horizontal/vertical/oblíqua.

A previsão do padrão de escoamento pode ser efetuada através da consulta em mapas de padrões de escoamento, conforme ilustrado na Figura 2.3 para um escoamento bifásico ar-água horizontal. Entretanto, estes mapas são obtidos empiricamente e dependem das configurações e condições operacionais do sistema.

Tendo em vista a frequente observação dos escoamentos bifásicos horizontais com formação de golfadas nas indústrias de óleo e gás bem como sua larga faixa de apresentação, como pode ser verificado na Figura 2.3, este padrão de escoamento será estudado neste trabalho.

**Figura 2.3** – Mapa de Padrões de Escoamentos Bifásicos Gás-Líquido Horizontais



## 2.1.2 Modelagem Matemática dos Escoamentos Multifásicos

O modelo matemático dos escoamentos multifásicos consiste nas equações de conservação para cada fase, além das condições de contorno referentes às interfaces, resultando na formulação dita local e instantânea. Essa formulação é a mais geral e poderia, em teoria, descrever todo e qualquer tipo de escoamento multifásico. Entretanto, a aplicação dessa formulação é muito limitada, sendo geralmente aplicada a sistemas com geometria interfacial simples, como no caso de uma ou algumas bolhas ou em escoamentos de superfície livre. A solução das equações na formulação local e instantânea é análoga à solução direta das equações de Navier-Stokes (DNS) nos escoamentos turbulentos, de modo que as dificuldades matemáticas encontradas na obtenção de soluções sejam proibitivas na maior parte dos problemas práticos e estejam além das capacidades computacionais atuais. Além disso, o detalhamento microscópico do escoamento é raramente necessário para problemas aplicados à engenharia, onde os aspectos macroscópicos do escoamento são muito mais importantes.

Por outro lado, através de formulações médias adequadas, pode-se

obter valores médios que eliminam as flutuações presentes na solução das equações da formulação local e instantânea. Por outro lado, também de forma análoga à descrição do fenômeno da turbulência, informações do escoamento em nível microscópico que são perdidas no processo de obtenção das equações médias, tem influência no parâmetro macroscópicos e devem ser incorporado através de modelos matemáticos de fechamento.

O modelo de dois-fluidos resulta da aplicação de médias nas equações da formulação local e instantânea e sua dedução pode ser encontrada na literatura, como em Ishii e Hibiki (2011), ou na breve descrição dada no Apêndice A. Este modelo baseia-se no conceito de fases interpenetrantes, onde ambas as fases coexistem em todo o domínio físico ponderadas por suas respectivas frações volumétricas.

Em se tratando da modelagem e simulação do transporte de misturas multifásicas em dutos, a aplicação do modelo de dois-fluidos unidimensional é uma prática comumente utilizada tendo em vista a razão de aspecto do domínio de cálculo e o fato de que as variações axiais são, normalmente, as de interesse do ponto de vista dos processos de transporte. Este modelo resulta da aplicação da média sobre seção do duto das equações do modelo de dois-fluidos tridimensional e sua dedução pode ser encontrada na literatura, como em Ishii e Hibiki (2011). As equações de conservação descritas através do modelo de dois-fluidos unidimensional podem ser escritas na forma de uma equação de transporte genérica dada por,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k \phi_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k \alpha_k u_k \phi_k) = \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_k J_k^\phi) + S_k^\phi \quad (2.1)$$

em que  $\rho_k$  é a massa específica da fase  $k$ ,  $\alpha_k$  é a fração volumétrica da fase  $k$ ,  $\phi_k$  é a variável transportada respectiva à equação de conservação,  $u_k$  é a velocidade da fase  $k$ ,  $J_k^\phi$  é o fluxo difusivo interno à respectiva fase,  $S_k^\phi$  é o termo fonte,  $\Gamma_k$  é a vazão mássica interfacial recebido pela fase.

As variáveis particularizadas das equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécies químicas descritas pela Equação 2.1 são apresentadas na Tabela 2.1, em que  $\tau_{k,xx}^{ef}$  é uma tensão axial efetiva interna e sobre a fase,  $\mathcal{M}_k$  é o somatório das demais tensões sobre a fase,  $X_k^i$  é a fração mássica de um componente  $i$  na fase,  $J_{k,x}^f$  é um fluxo difusivo axial efetivo interno sobre a fase e  $\mathcal{N}_k^i$  é o somatório dos demais fluxos do componente  $i$ .



**Tabela 2.1** – Particularização das Equações de Conservação do Modelo de Dois-Fluidos Unidimensional

Equação de Conservação	$\phi_k$	$J_k^\phi$	$S_k^\phi$
Massa Global	1	0	$\Gamma_k$
Quantidade de Movimento	$u_k$	$\tau_{k,xx}^{ef}$	$\mathcal{M}_k$
Espécies Químicas	$X_k^i$	$J_{k,x}^{i,ef}$	$\mathcal{N}_k$

Fonte: elaborado pelo autor.

O termo fonte da equação de conservação da massa da fase k pode ser descrito (em base molar) por,

$$\Gamma_k = \sum_i \Gamma_k^{i''} a_I \quad \Gamma_k^{i''} = K_k (C_k^{i,\text{sat}} - C_k^i) \quad (2.2)$$

em que  $\Gamma_k^{i''}$  é o fluxo mássico do componente i recebido pela fase k,  $a_I$  é a área interfacial específica,  $K_k$  é um coeficiente de transferência de massa global,  $C_k^i$  é a concentração molar do componente i na fase k e  $C_k^{i,\text{sat}}$  é a concentração mássica do componente i na fase k em equilíbrio com a fase j.

O fluxo mássico (em base molar) pode ser descrito por meio da diferença de concentrações molares das fases gasosa ou líquida em relação às concentrações de saturação das respectivas fases (Cussler, 2007), dados por,

$$\Gamma_G^{i''} = K_G (C_G^{i,\text{sat}} - C_G^i) \quad \Gamma_L^{i''} = K_L (C_L^{i,\text{sat}} - C_L^i) \quad (2.3)$$

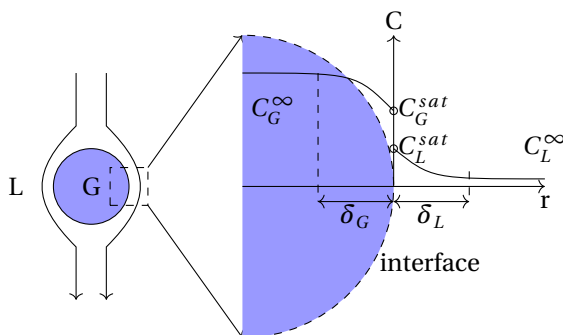
em que  $K_G$  e  $K_L$  são os coeficientes de transferência de massa globais levando em conta as diferenças de concentração das fases gás e líquido, respectivamente;  $C_G^{i,\text{sat}}$  e  $C_L^{i,\text{sat}}$  são as concentrações das fases gás e líquido em equilíbrio com as concentrações das fases líquido e gás  $C_L^i$  e  $C_G^i$ , respectivamente.

A vazão mássica interfacial total  $\Gamma_k$  é dada pela soma das vazões mássicas dos componentes  $\Gamma_k^i$ ; e a soma das vazões totais é nula, isto é, não há acúmulo de massa na interface, conforme,

$$\sum_i \Gamma_k^i = \Gamma_k \quad \sum_k \Gamma_k = 0 \quad (2.4)$$

Para ilustrar melhor a fenomenologia da transferência de massa interfacial, a Figura 2.4 apresenta um exemplo para uma bolha de gás em um meio líquido. O fluxo de massa é proporcional à diferença das concentrações longe da interface, indicados em sobrescrito por  $\infty$ , e as concentrações de saturação, indicadas em sobrescrito por sat. A constante de proporcionalidade é o coeficiente de transferência de massa global  $K$ .

**Figura 2.4** – Transferência de Massa Interna e Externa sobre Esfera



Fonte: elaborado pelo autor

Neste trabalho, no qual foram analisados sistemas água-CO<sub>2</sub>, a relação de equilíbrio será dada pela Lei de Henry, dado que o CO<sub>2</sub> é pouco solúvel em água. Além disso, optou-se pela diferença de concentrações molares da fase líquida para o cálculo do fluxo mássico, uma vez que a resistência à transferência de massa do lado líquido é geralmente muito superior à resistência do lado gasoso. Portanto, as relações no cálculo dos fluxos de massa serão dadas por,

$$\text{He} = \frac{C_L^{i,\text{sat}}}{C_G^{i,\text{sat}}} \quad C_L^i = \frac{\rho_L Y_L^i}{M_{\text{CO}_2}^{\text{mol}}} \quad (2.5)$$

$$C_L^{i,\text{sat}} = \text{He} \frac{\rho_G Y_G^i}{M_{\text{CO}_2}^{\text{mol}}} \quad \Gamma_L^{i''} = \frac{K_L}{M_{\text{CO}_2}^{\text{mol}}} (\text{He} \rho_G Y_G^i - \rho_L Y_L^i) \quad (2.6)$$

em que He é a constante de Henry,  $M_{\text{CO}_2}^{\text{mol}}$  é a massa molar do CO<sub>2</sub>. As relações acima permitem descrever o fluxo de massa do componente i em base molar; para converter em base mássica, basta multiplicar pela

massa molar do componente  $i$ ; portanto, o termo  $M_{\text{CO}_2}^{\text{mol}}$  desaparece das equações supracitadas.

O termo fonte da equação de conservação da quantidade de movimento da fase  $k$  pode ser descrito por,

$$\mathcal{M}_k = \underbrace{\mathcal{M}_k^p + \mathcal{M}_k^o + \mathcal{M}_k^w}_{\text{termos de fase}} + \underbrace{\mathcal{M}_k^d + \mathcal{M}_k^\Gamma + \mathcal{M}_k^{p_i}}_{\text{termos de interface}} \quad (2.7)$$

em que  $\mathcal{M}_k^p$  é a força referente à pressão da fase,  $\mathcal{M}_k^o$  refere-se à força peso,  $\mathcal{M}_k^d$  refere-se à força de arraste interfacial,  $\mathcal{M}_k^w$  refere-se à força de atrito com a parede,  $\mathcal{M}_k^\Gamma$  refere-se ao transporte de quantidade de movimento devido à transferência de massa interfacial e  $\mathcal{M}_k^{p_i}$  refere-se à força devido a diferença de pressão interfacial. Os termos supracitados podem ser descritos por,

$$\mathcal{M}_k^p = \alpha_k \frac{\partial p_k}{\partial x} \quad \mathcal{M}_k^o = \rho_k \alpha_k g_x \quad (2.8)$$

$$\mathcal{M}_k^d = F_{k,I} a_I \quad \mathcal{M}_k^w = \tau_{k,w} a_w \quad (2.9)$$

$$\mathcal{M}_k^\Gamma = \Gamma_k (u_j - u_k) \quad \mathcal{M}_k^{p_i} = (p_{k,I} - p_k) \frac{\partial \alpha_k}{\partial x} \quad (2.10)$$

onde  $p_k$  é a pressão da fase  $k$ ,  $g_x$  é a componente axial da gravidade,  $F_{k,I}$  é uma força de arraste agindo sobre a interface,  $\tau_{k,w}$  é a tensão agindo sobre a parede,  $a_w$  é a área específica molhada pela parede,  $u_j$  é a velocidade da fase  $j \neq k$  e  $p_{k,I}$  é a pressão interfacial.

Note que a soma das parcelas de advecção e de arraste referentes ao transporte interfacial de quantidade de movimento são nulas, conforme,

$$\sum_k \mathcal{M}_k^\Gamma = 0 \quad \sum_k \mathcal{M}_k^d = 0 \quad (2.11)$$

E finalmente, o termo fonte da equação de conservação das espécies químicas pode ser descrito por,

$$\mathcal{N}_k^i = \Gamma_k^i + \mathcal{R}_k^{i''' } \quad (2.12)$$

em que  $\mathcal{R}_k^{i''' }$  é a taxa geração do componente  $i$  na fase  $k$  devido a uma reação química, por exemplo.

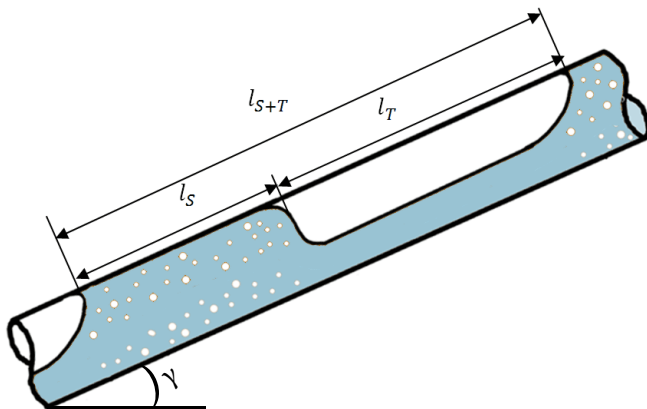
Esse modelo de dois-fluidos unidimensional é geral e será utilizado para descrever a transferência de massa nas duas morfologias de escoamento.

mentos bifásicos presentes nessa dissertação, nomeadamente as morfologias dispersa e estratificada.

## 2.2 Escoamentos com Bifásicos com Formação de Golfadas

O padrão de golfadas é caracterizado pela alternância entre bolsas de gás de tamanho expressivo, denominadas bolhas de Taylor, e golfadas de líquido com pequenas bolhas de gás dispersas em seu interior. A Figura 2.5 apresenta um escoamento com formação de golfadas e orientado obliquamente pelo ângulo  $\gamma$ , onde  $l_S$  é o comprimento da golfada,  $l_T$  é o comprimento da bolha de Taylor, e  $l_{S+T}$  é o comprimento total da unidade de repetição.

**Figura 2.5** – Escoamento com Golfadas – Orientação Oblíqua



Fonte: adaptado de Bratland (2010).

O padrão com formação de golfadas pode ser originado pelas próprias condições hidrodinâmicas do escoamento, como na orientação horizontal, ou ser induzido pelo terreno, como nas orientações oblíquas e vertical. A intermitência aleatória característica dessa classe de escoamento resulta em diversos problemas operacionais nas plantas de processamento de óleo e gás. Por este e demais motivos, o escoamento em

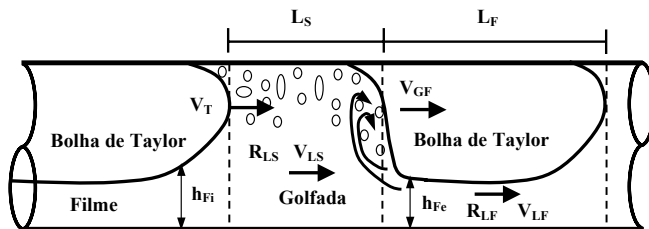
padrão com formação de golfadas tem recebido importante atenção na literatura, com ênfase na previsão da ocorrência e/ou determinação de parâmetros médios e instantâneos das golfadas.

## 2.2.1 Simulação Numérica dos Escoamentos com Formação de Golfadas

No âmbito dos modelos unidimensionais, há três abordagens presentes na literatura para a modelagem de escoamentos com formação de golfadas: o modelo de célula unitária (*unit cell model*), o modelo de acompanhamento de golfada (*slug tracking model*) e o modelo de captura de golfada (*slug capturing model*).

O modelo mais simple baseia-se no conceito de célula unitária, cuja concepção ilustra-se na Figura 2.6. Esta célula é a unidade de repetição deste modelo e é composta pelas regiões de golfada (de comprimento  $L_S$ ) e de bolha (de Taylor) sobre um filme líquido (de comprimento  $L_F$ ). Considerando um referencial Lagrangiano acompanhando a célula unitária, é possível realizar balanços na célula em regime permanente, uma vez que a célula encontra-se estacionária em relação ao referencial. Este tipo de modelo reduz a intermitência aleatória característica das golfadas a uma simples periodicidade regular através da recorrência de correlações empíricas, permitindo a predição de parâmetros médios das golfadas no duto, como fração de líquido e perda de carga média.

Figura 2.6 – Unidade da Golfada

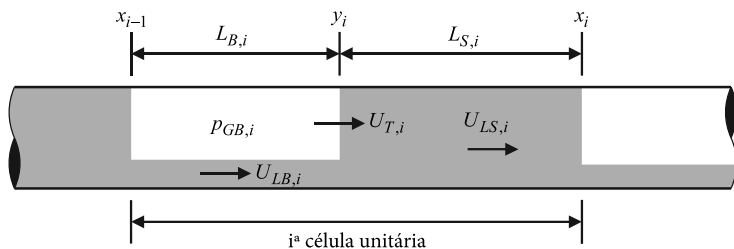


Fonte: adaptado de Omgba-Essama (2004).

Os modelos de acompanhamento de golfadas (*slug tracking*) consideram a propagação de um número discreto de células unitárias no duto,

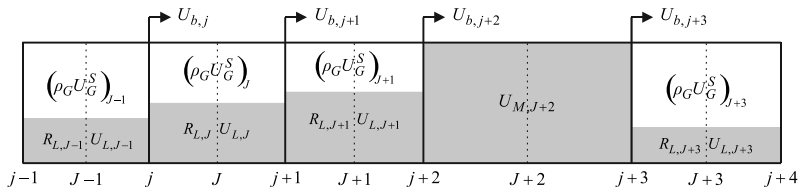
em referencial Lagrangiano, onde os nós computacionais seguem as velocidades de translação do corpo da golfada e das regiões de bolha, conforme ilustrado na Figura 2.7. Esses modelos necessitam de uma distribuição de golfadas inicialmente conhecida no duto, o que implica que as golfadas já devem ter sido formadas por algum mecanismo. Dessa forma, ambos os modelos de célula unitária quanto o de acompanhamento de golfadas necessitam, a priori, de informações prévias e/ou modelos adicionais para a obtenção de resultados de simulação.

**Figura 2.7** – Golfada Transladada pelo *Slug Tracking*



Fonte: adaptado de Almeida et al. (2016).

Por outro lado, nos modelos de captura de golfadas (*slug capturing*), a formação da golfada desenvolve-se naturalmente como parte do cálculo transiente, a partir de uma condição inicial qualquer. Dessa forma, não são necessários modelos fenomenológicos adicionais para a transição do padrão estratificado para o de golfadas, o que é uma grande vantagem sobre os demais modelos de simulação de golfadas. Ademais, é possível prever a ocorrência ou não de golfadas no duto a partir da simulação pelo modelo *slug capturing*, não sendo necessário recorrer a mapas empíricos de padrões de escoamento (como o ilustrado na Figura 2.3). Este modelo é baseado num referencial Euleriano, conforme ilustrado na Figura 2.8, onde foi empregada um arranjo de malha desencontrado (volumes centrados em  $j$  para velocidade e em  $J$  para demais variáveis). Optou-se por este modelo neste estudo, tendo em vista as suas amplas vantagens sobre os demais modelos.

**Figura 2.8** – Golfada Capturada pelo *Slug Capturing*

Fonte: adaptado de Almeida et al. (2016).

## 2.2.2 Revisão Bibliográfica do Modelo de Captura de Golfadas (Slug Capturing)

Segundo Issa e Kempf (2003), no método *slug capturing*, o regime com formação de golfadas é previsto de forma mecânica e automática a partir do crescimento das instabilidades hidrodinâmicas do escoamento. Os padrões estratificado, com formação de golfadas e de transição são modelados de forma idêntica, isto é, com os mesmos conjuntos de equações e relações de fechamento. Os autores foram os primeiros a mostrar de forma conclusiva que, através do modelo numérico proposto, o desenvolvimento das golfadas ocorre naturalmente a partir do crescimento das instabilidades hidrodinâmicas em um escoamento estratificado. Dessa forma, embora a formação das golfadas seja um fenômeno intrinsecamente tridimensional, o modelo unidimensional proposto é capaz de capturar a fenomenologia de formação e transporte das golfadas.

Quanto a metodologia numérica do *slug capturing*, usualmente é empregado o método dos volumes finitos sobre as equações de conservação baseadas no modelo de dois-fluidos unidimensional, aplicando-se o esquema de interpolação *Upwind* para os termos advectivo e formulação temporal baseada no esquema de Euler implícito. Em relação ao arranjo de malha computacional, opta-se pelo espaçamento uniforme e arranjo desencontrado, cujos volumes de controle para a conservação da quantidade de movimento estão deslocados em relação aos volumes para a conservação das demais variáveis, como apresentado na Figura 2.8.

Bonizzi e Issa (2003) estenderam a metodologia de Issa e Kempf (2003) incluindo os efeitos do entranhamento de bolhas de gás sobre a golfada, a partir da introdução de uma nova equação para o transporte das bolhas dispersas no líquido. A fase líquida junto às bolhas dispersas foi tratada

como uma única fase, de modo que as equações de conservação passam a ser válidas para esta mistura, baseado no modelo *drift flux*. Neste modelo, as velocidades de cada fase são obtidas a partir da velocidade da mistura e de uma equação algébrica para a diferença de velocidades das fases. Os autores observaram que a inclusão de um modelo de aeração das golfadas resulta em diferenças insignificantes para dutos horizontais e com maior influência para geometrias oblíquas. Simultaneamente, Bonizzi (2003) estudou o entranhamento no sistema trifásico gás-óleo-água, considerando gotas de óleo em água e vice-versa, através de um modelo análogo ao utilizado no entranhamento de bolhas de ar em água.

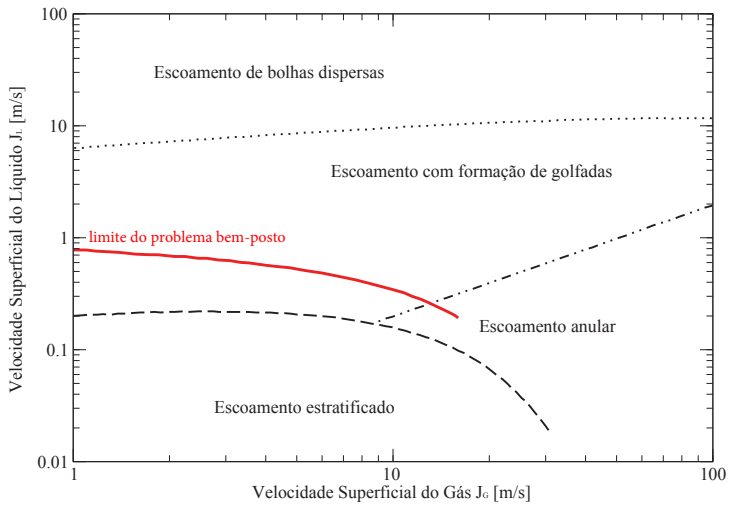
Por outro lado, embora os estudos de Issa e Kempf (2003) e Bonizzi e Issa (2003) mostrem que o *slug capturing* seja capaz de simular a formação e propagação das golfadas, os autores observaram que, sob determinadas condições, o refino de malha não leva à convergência dos resultados médios, como a frequência de formação das golfadas, por exemplo; esse comportamento indesejado caracteriza um problema matematicamente mal posto, neste caso, um problema com múltiplas soluções. A característica bem ou mal-posta do problema resulta do processo de modelagem, ou seja, para dadas as relações de fechamento do modelo matemático, existe uma faixa onde o problema é bem-posto sob o ponto de vista matemático. Bonizzi (2003) apresenta uma discussão sobre a formulação bem e mal-posta e apresenta os limites de velocidades superficiais onde o problema formulado possui característica bem-posta, conforme apresentado pela Figura 2.9.

De modo a contornar as limitações matemáticas do método, Montini (2010) estende a aplicabilidade da técnica *slug capturing* através da introdução de diferentes relações de fechamento, buscando também uma melhor descrição física do problema.

Até então, os autores focaram na simulação hidrodinâmica da formação das golfadas, deixando de lado a transferência interfacial de calor e massa. Sob essa perspectiva, Simões, Carneiro e Nieckele (2014) incorporaram a equação de conservação da energia no modelo proposto por Issa e Kempf (2003), visando a simulação de escoamentos não-isotérmicos com formação de golfadas. Os autores estudaram a transferência de calor externa e interna (interfacial) considerando os padrões estratificado e com formação de golfadas, obtendo resultados com boa concordância em relação a correlações empíricas bem como com dados experimentais



**Figura 2.9** – Limite da Formulação Matemática Bem-Posta no Mapa de Padrões de escoamento Horizontal



Fonte: adaptado de Di Salvo (2014).

disponíveis.

Ademais, os autores até então também negligenciaram a formação de golfadas em dutos verticais. A fim de incluir também essa orientação, Di Salvo (2014) conduziu um estudo utilizando o modelo de dois-fluidos unidimensional para simular o escoamento com formação de golfadas em dutos verticais, contemplando também a fenomenologia da formação de golfadas induzidas por terreno (*severe slugging*), o que até então não havia sido realizado na literatura. Utilizando relações de fechamento adequadas, o autor observou que o *slug capturing* era capaz de capturar a física da geração da golfada em um escoamento vertical, de um filme líquido escorrendo pela parede até resultar a estrangulação do duto, quando ocorre a formação da golfada. Um resumo dos esquemas que aplicam o método *slug tracking* é apresentado na Tabela 2.2.

Mais recentemente, Almeida et al. (2016) mostrou que é possível associar os métodos de *slug capturing* para a região de formação das golfadas e posterior transporte através do método de *slug tracking*, resultando numa abordagem híbrida. Os autores compararam os resultados desta

**Tabela 2.2** – Resumo dos Estudos de *Slug Tracking*

Autores	Termos Advectivos	Acoplamento p-v	Malha ( $\Delta x/D$ )	Courant (-)
Issa e Kempf (2003)	Upwind	PISO <sup>1</sup>	0,4	0,5
Bonizzi e Issa (2003)	Upwind	PISO	0,4	0,5
Montini (2010)	Upwind	PISO	0,4	0,5
Di Salvo (2014)	Upwind	PISO	1,9 <sup>2</sup>	
Simões, Carneiro e Nieckele (2014)	Upwind	PRIME	0,45	
Este Estudo	TVD	PRIME	1,2	0,5

Fonte: elaborado pelo autor. <sup>1</sup> o PISO (*Pressure- Implicit with Splitting of Operators*) é um algoritmo baseado no SIMPLE com um passo adicional de correção da pressão. <sup>2</sup> o estudo de Di Salvo (2014) contemplou a orientação vertical.

abordagem *versus* o método de *slug capturing* puro, obtendo resultados concordantes em um tempo de simulação 54 % menor em favor da primeira. Entretanto, este estudo carece de validação com dados experimentais, conforme enfatizado pelos autores e recomendado para trabalhos futuros.

## METODOLOGIA

Este capítulo apresenta a metodologia empregada neste trabalho. Na primeira seção, uma equação de transporte para uma variável genérica, no contexto do modelo de dois-fluidos unidimensional é discretizada a partir do método dos volumes finitos, com especial atenção à implementação dos esquemas TVD sobre os termos advectivos e da formulação temporal  $\theta$ .

Na segunda seção deste capítulo, as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e espécies químicas no âmbito do modelo de dois-fluidos unidimensional são discretizadas, porém mantendo os termos correspondentes aos modelos de fechamento, dependentes da morfologia de fases, a serem discretizados posteriormente nos capítulos de aplicação prática para os padrões disperso (coluna de bolhas) e estratificado (com formação de golfadas).

### 3.1 Método dos Volumes Finitos Aplicado ao Modelo de Dois-Fluidos Unidimensional

Essa seção fica a cargo de apresentar os conceitos básicos do método dos volumes finitos aplicado ao modelo de dois-fluidos unidimensional,

através de uma formulação genérica da equação de transporte dada por,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k \phi_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k \alpha_k u_k \phi_k) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Pi_k \alpha_k \frac{\partial \phi_k}{\partial x} \right) + S^{\phi_k} \quad (3.1)$$

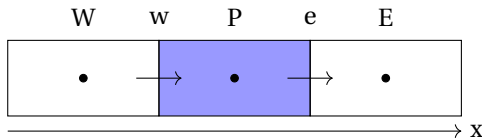
em que  $\Pi_k$  é a difusividade da variável transportada na fase k e  $S^{\phi}$  é um termo fonte da variável transportada na fase k, que inclui também os termos de transferência interfacial. Nas subseções, o subscrito indicador de fase k será inibido para melhor leitura.

As etapas de aplicação do método dos volumes finitos dividem-se em: (i) integração sobre um volume finito, (ii) aplicação das funções de interpolação para os termos advectivos e difusivos, (iii) integração do termo fonte, (iv) integração no tempo (quando fenômeno transiente), (v) aplicação das condições de contorno, (vi) obtenção do sistema de equações algébricas e finalmente (vii) solução do sistema de equações e obtenção da solução numérica. Cada etapa será descrita brevemente nas seções a seguir.

### 3.1.1 Integração Sobre um Volume Finito

Na nomenclatura usualmente utilizada no Método de Volumes Finitos, o volume de integração possui centro no ponto 'P' e é limitado à esquerda pela face localizada no ponto 'w' (*west*, oeste) e à direita pela face localizada no ponto 'e' (*east*, leste). Os volumes vizinhos à esquerda e à direita são centrados nos pontos 'W' e 'E', respectivamente. A Figura 3.1 apresenta o esquema de localização das variáveis no MVF.

**Figura 3.1** – Posições das Variáveis no MVF



Fonte: elaborado pelo autor.

A integração da Equação 3.1 sobre o volume finito centrado em 'P' é realizada na direção axial (x) entre os limites de integração dados pelas

faces nas posições ‘w’ e ‘e’, e também na direção transversal y e z, ou seja, na área orientada normalmente pelo eixo das abscissas x. A forma integrada é expressa por,

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \alpha \phi) dV + (\rho \alpha u A \phi)_e - (\rho \alpha u A \phi)_w = \left( \Pi \alpha A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left( \Pi \alpha A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w + S^\phi \Delta V \quad (3.2)$$

Entretanto, as variáveis são, a princípio, definidas nos centros dos volumes de controle, e por conseguinte há dificuldades na especificação dos termos advectivos e dos termos difusivos nas faces. As variáveis nas faces dos volumes de controle podem ser relacionadas às variáveis nos centros dos volumes de controle por meio de esquemas de interpolação.

Os termos difusivos são de natureza elíptica e podem ser descritos por esquemas de diferenças centradas nas faces. O esquema centrado mais simples possui *stencil* de dois pontos e ordem de aproximação de  $\Delta x^2$ . Como exemplo, o fluxo difusivo sobre a face leste pode ser calculado por,

$$\left( \Pi \alpha A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = (\Pi \alpha A)_e \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (3.3)$$

Os termos advectivos são de natureza parabólica, ou seja, dependem da direção da velocidade do escoamento. Desta forma, maiores cuidados na interpolação das variáveis devem ser tomados, para evitar oscilações ou excessiva difusão numérica (ver, por ex. Maliska (2004), Cap. 4). O esquema de interpolação mais simples é denominado esquema *upwind*, em que, como exemplo, o fluxo advectivo sobre a face leste é dado por,

$$(\rho \alpha u A \phi)_e = \begin{cases} (\rho \alpha u A)_e \phi_P + \mathcal{O}(\Delta x), & \text{se } u_e > 0 \\ (\rho \alpha u A)_e \phi_E + \mathcal{O}(\Delta x), & \text{se } u_e < 0 \end{cases} \quad (3.4)$$

Contudo, o esquema de interpolação *upwind* é conhecido por dissipar a variável nas regiões de elevados gradientes, por meio de um mecanismo numérico denominado ‘difusão numérica’. Uma possível solução para contornar o problema da difusão numérica é utilizar esquemas de ordem superior (como o QUICK, LUD, entre outros). É possível generali-

zar os esquemas de interpolação dos termos advectivos através do uso de uma função limite  $\psi$ , conforme a expressão dada por,

$$\phi_f = \phi_u + \frac{1}{2}\psi_f(\phi_d - \phi_u) \quad (3.5)$$

onde  $\phi_f$  é o valor da variável transportada sobre a face 'f',  $\phi_u$  é o valor da variável transportada à montante (*upwinded*),  $\phi_d$  é o valor da variável à jusante (*downwinded*) e  $\psi_f$  é uma função limitante que depende do esquema a ser utilizado.

A depender da formulação escolhida, a função  $\psi$  pode assumir tanto valores fixos (*upwind*  $\psi = 0$ , diferenças centradas  $\psi = 1$ ) quanto ser função das variáveis no domínio. É possível escrever a razão ' $r$ ' dos gradientes à montante e à jusante da fronteira ' $f$ ', dada por,

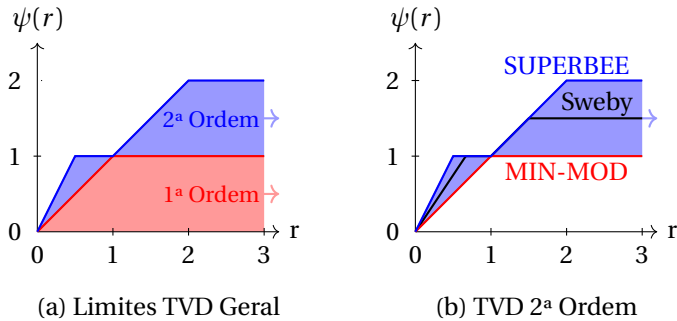
$$r_f = \frac{\Delta\phi_u}{\Delta\phi_d} = \frac{\phi_u - \phi_{uu}}{\phi_d - \phi_u} \quad (3.6)$$

em que  $r_f$  é a razão dos gradientes sobre a face f,  $\phi_{uu}$  é o valor à montante do valor a montante  $\phi_u$ , orientado pela velocidade na fase f  $u_f$ .

Finalmente, a forma de relacionar as variáveis  $\psi(r)$  é o que difere os diferentes esquemas de interpolação para os termos advectivos. Por exemplo, para o esquema QUICK,  $\psi(r) = (3+r)/4$ . Porém, esquemas de alta ordem podem apresentar oscilações não-físicas nas regiões de elevado gradiente. Essas oscilações consistem em um fenômeno numérico denominado 'oscilações numéricas'.

Uma forma de contornar a ocorrência de oscilações numéricas é através do uso dos esquemas de interpolação TVD (*Total Variation Diminishing*), que são esquemas que preservam a monotonicidade da advecção. Esses esquemas permitem capturar gradientes elevados com erro na ordem de ' $\Delta x^2$ ' sem a ocorrência de oscilações numéricas na solução. As regiões TVD num diagrama  $\psi \times r$  são aquelas que preservam a monotonicidade da solução. É possível traçar uma infinidade de curvas  $\psi(r)$  dentro da região monotônica, sendo que cada curva refere-se a um esquema TVD diferente. A Figura 3.2 apresenta a região TVD de 1ª e 2ª ordem (a), bem como os limites inferior e superior da região TVD de 2ª ordem, denominados MIN-MOD e SUPERBEE, respectivamente (b).

A Tabela 3.1 apresenta alguns esquemas de interpolação de alta ordem (TVD) encontrados na literatura. De acordo com Versteeg e Malalaskera (2007), todos os esquemas de 2ª ordem apresentam desempenho

**Figura 3.2** – Limites da Região TVD de 1ª e 2ª Ordens

Fonte: adaptado de Versteeg e Malalaskera (2007)

semelhante, de modo que a escolha do esquema a ser utilizado seja meramente a gosto do usuário. Neste trabalho serão testados os esquemas da formulação  $\beta$ , dado pelo esquema Sweby. Essa formulação permite variar entre os esquemas *upwind*, MINMOD e SUPERBEE apenas atribuindo diferentes valores de  $\beta$  (0, 1 e 2, respectivamente). Neste trabalho, o nome ‘Sweby’ será atribuído quando  $\beta = 1,5$ . Além deles, também será testado o esquema Van Leer.

**Tabela 3.1** – Esquemas de Interpolação de Alta Ordem (TVD)

	Função Limite $\Psi(r)$
<b>Funções Suaves</b>	
Van Leer	$(r +  r )/(1 + r)$
Van Albada	$(r + r^2)/(1 + r^2)$
<b>Funções Lineares</b>	
MIN-MOD	$\max[0, \min(r, 1)]$
Sweby	$\max[0, \min(\beta r, 1), \min(r, \beta)]$
SUPERBEE	$\max[0, \min(2r, 1), \min(r, 2)]$
QUICK-TVD	$\max[0, \min(2r, (3 + r)/4, 2)]$
UMIST	$\max[0, \min(2r, (1 + 3r)/4, (3 + r)/4, 2)]$

Fonte: adaptado de Versteeg e Malalaskera (2007)

Após a discretização dos termos de transporte (advectivo e difusivo), a próxima etapa é o tratamento do termo fonte. A integração do termo

fonte no volume pode ser descrita tanto na forma explícita quanto na forma implícita, conforme dado por,

$$\int_V S dV = \underbrace{-S_P^* \phi_P^* + S_C^*}_{\text{forma explícita}} = \underbrace{-S_P \phi_P + S_C}_{\text{forma implícita}} \quad (3.7)$$

em que  $\phi_P^*$  é o valor de  $\phi_P$  na iteração anterior,  $S_P^*$  e  $S_C^*$  são os fatores que multiplicam  $\phi_P^*$  e 1 no termo fonte não-linearizado, respectivamente.  $S_P$  e  $S_C$  são os fatores que multiplicam  $\phi_P$  e 1 no termo fonte linearizado, respectivamente. Aqui o termo ‘explícito’ e ‘implícito’ são descritos em relação ao ciclo iterativo.

Neste trabalho, os termos fonte podem ser descritos conforme a relação geral dada por,

$$S = b_j \phi_j - b_k \phi_k \quad (3.8)$$

em que  $b_j$  e  $b_k$  são constantes consideradas positivas nesta análise.

Dessa forma, as parcelas implícita e explícita do termo fonte serão descritos conforme as relações dadas por,

$$S_P = b_k \quad S_C = b_j \phi_j^* \quad (3.9)$$

Para finalizar a discretização espacial, resta a etapa de aplicação das condições de contorno. A abordagem a ser tomada neste trabalho consiste na aplicação de volumes fictícios. As variáveis destes volumes serão calculadas de forma explícita, isto é, não farão parte do sistema linear de forma direta, sendo corrigidos explicitamente a cada iteração. As condições de contorno serão de variável prescrita na entrada e saída localmente parabólica, conforme as relações dadas por,

$$(\phi_P)_w = \phi_{f,w} \quad (\phi_P)_e = \phi_W^* \quad (3.10)$$

em que  $(\phi_P)_w$  é o valor no volume fictício de entrada,  $\phi_{f,w}$  é o valor prescrito na entrada,  $(\phi_P)_e$  é o valor no volume fictício na saída e  $\phi_W^*$  é o valor no último volume físico do domínio.

Com o procedimento detalhado nesta seção, é possível obter a solução de problemas em estado estacionário excluindo o termo transiente da formulação dada pela Equação 3.1. Caso deseje-se obter a solução de um fenômeno transiente, deve-se efetuar a integração temporal de todos os termos desta equação, que será realizado na subseção a seguir.



### 3.1.2 Integração Temporal

Em problemas transientes, é necessária a integração temporal para a obtenção da solução no domínio do tempo. É possível reescrever a Equação 3.2 isolando o termo temporal e posteriormente integrando no tempo, conforme,

$$\int_V \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \alpha \phi) dt dV + \int_t^{t+\Delta t} [(\rho \alpha u A \phi)_e - (\rho \alpha u A \phi)_w] dt + \int_t^{t+\Delta t} \left[ \left( \Pi \alpha A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left( \Pi \alpha A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w + S^\phi \Delta V \right] dt \quad (3.11)$$

O termo de variação temporal pode ser integrado no volume e no tempo, considerando uma distribuição homogênea da variável ‘ $\phi$ ’ no volume de integração, resultando em,

$$\int_V \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \alpha \phi) dV = \rho_P \alpha_P \phi_P \Delta V - \rho_P^0 \alpha_P^0 \phi_P^0 \Delta V \quad (3.12)$$

em que  $\rho_P$ ,  $\alpha_P$ ,  $\phi_P$  são a massa específica, fração volumétrica e variável transportada no instante atual, respectivamente. O sobrescrito  $(\cdot)^0$  representa as variáveis no instante anterior e  $\Delta V$  é o volume de integração.

Do Teorema da do Valor Médio do Cálculo Integral,

$$\int_t^{t+\Delta t} f(t) dt = f(t_0) \Delta t \quad (3.13)$$

em que  $f(t)$  é uma função contínua em  $[t, t + \Delta t]$ ,  $\Delta t$  é um passo de tempo,  $t_0$  é um tempo intermediário pertencente ao intervalo  $[t, t + \Delta t]$ .

Considerando os termos da Equação 3.11, a integração de uma função sobre um intervalo tempo pode ser avaliada a partir de um valor médio, conforme a Equação 3.13. É necessário agora um esquema de inter-

polação para o tempo, cujos esquemas de dois pontos podem ser expressos por,

$$f(t_0) = \begin{cases} f(t) & \text{explícito } (\theta = 0) \\ \theta f(t + \Delta t) + (1 - \theta)f(t) & \text{implícito } (\theta > 0) \\ f(t + \Delta t) & \text{totalmente implícito } (\theta = 1) \end{cases} \quad (3.14)$$

em que  $\theta$  é um valor entre 0 e 1, sendo possível defini-lo informalmente como um 'grau de implicitude' do esquema temporal. Note que a formulação  $\theta$  permite descrever os três esquemas apenas através da atribuição de valores para a variável  $\theta$ .

Os esquemas explícitos resultam num conjunto de equações, que permitem uma solução a partir do procedimento de marcha, o que é computacionalmente mais simples e mais rápido. Entretanto, essa formulação é condicionalmente estável. Por outro lado, os esquemas implícitos resultam num sistema de equações que deve ser resolvido através de algum *solver* linear. Uma vantagem é que os esquemas implícitos são, em geral, incondicionalmente estáveis.

Neste trabalho, serão utilizados os esquemas totalmente implícito ( $\theta = 1$ ) e Crank-Nicolson ( $\theta = 0,5$ ) para o termo temporal. É possível mostrar que este último possui ordem de aproximação de  $\Delta t^2$ , conforme a Equação 3.15.

$$f(t_0) = \frac{1}{2} [f(t + \Delta t) + f(t)] + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (3.15)$$

Finalmente, após a discretização de todos os termos, é possível obter o sistema de equações algébricas, como será apresentado na subseção a seguir.

### 3.1.3 Obtenção do Sistema de Equações Algébricas

Nesta subseção, o sistema de equações algébricas resultante do processo de discretização pelo método dos volumes finitos será finalmente obtido. Após a integração espacial, aplicação das funções de interpolação e integração temporal, é possível obter o sistema (ou conjunto) de equações algébricas discretizadas. O sistema linear obtido por esta formulação consiste em uma matriz tridiagonal, que pode convenientemente ser re-

solvido diretamente com o algoritmo TDMA. A forma final do sistema de equações é dado pela bem conhecida expressão,

$$A_P \phi_P = A_E \phi_E + A_W \phi_W + B \quad (3.16)$$

em que  $A_P$ ,  $A_E$ ,  $A_W$  são os coeficientes da matriz do sistema linear que multiplicam  $\phi_P$ ,  $\phi_E$ ,  $\phi_W$ , respectivamente.  $B$  representa o vetor independente. Estes coeficientes são dados por,

$$A_W = \mathcal{D}_w + \max(\dot{m}_w, 0) \quad (3.17)$$

$$A_E = \mathcal{D}_e + \max(-\dot{m}_e, 0) \quad (3.18)$$

$$A_P = \frac{M_P}{\Delta t} + A_E + A_W + (\dot{m}_e - \dot{m}_w) + S_P \quad (3.19)$$

$$B = \frac{M_P^0}{\Delta t} \phi_P^0 + S_C \quad (3.20)$$

onde  $\mathcal{D}_w$  e  $\mathcal{D}_e$  são as condutâncias difusivas nas faces leste e oeste,  $\dot{m}_w$  e  $\dot{m}_e$  são as vazões mássicas nas faces leste e oeste,  $M_P$  e  $M_P^0$  são as massas do volume de integração nos tempos atual e anterior,  $S_P$  e  $S_C$  são as parcelas implícita e explícita do termo fonte. Deve-se dividir a Equação 3.11 por  $\theta \Delta t$  para obter a matriz na forma dos coeficientes supracitados.

As massas dos volumes de controle nos instantes atual e anterior são dados por,

$$M_P = \rho_P \alpha_P \Delta V \quad M_P^0 = \rho_P^0 \alpha_P^0 \Delta V \quad (3.21)$$

As vazões mássicas nas faces leste e oeste são dadas pelas por,

$$\dot{m}_e = \rho_e \alpha_e u_e A \quad \dot{m}_w = \rho_w \alpha_w u_w A \quad (3.22)$$

As difusividades nas faces leste e oeste são dadas por,

$$\mathcal{D}_e = \frac{\Pi_e \alpha_e A}{x_E - x_P} \quad \mathcal{D}_w = \frac{\Pi_w \alpha_w A}{x_P - x_W} \quad (3.23)$$

Essa formulação é apresentada em diversos livros-texto, como em Patankar (1980) e Versteeg e Malalaskera (2007), porém considerando o esquema upwind para os termos advectivos e formulação de Euler totalmente implícita no tempo. A implementação do esquema TVD para os termos advectivos e formulação temporal  $\theta$  será realizada a partir dos

termos fonte, de modo a (i) manter a mesma formulação geral, conforme as Equações 3.17 a 3.20 e (ii) manter a mesma formulação para todos os esquemas de interpolação no tempo e no espaço, onde qualquer implementação adicional pode ser facilmente incorporada a partir de adições nos termos fonte. Dessa forma, o termo implícito será dividido nas parcelas referentes ao esquema temporal e aos demais termos fonte da variável de balanço, conforme a relação dada por,

$$S_p = S_p^\theta + S_p^\phi \quad (3.24)$$

onde  $S_p^\theta$  é o termo de correção sobre  $A_p$  referente a implementação da formulação temporal  $\theta$  e  $S_p^\phi$  é a parcela implícita do termo fonte.

O termo explícito será dividido nas parcelas referentes ao esquema espacial, temporal e demais termos fonte, dado por,

$$S_C = S_C^{\text{TVD}} + S_C^\theta + S_C^\phi \quad (3.25)$$

onde  $S_C^{\text{TVD}}$  é o termo de correção explícito referente a implementação do esquema TVD,  $S_C^\theta$  é o termo de correção explícito referente a implementação da formulação temporal  $\theta$  e  $S_C^\phi$  é a parcela explícita do termo fonte.

As parcelas implícita e explícita do termo fonte referente à discretização do esquema temporal são dadas pelas relações,

$$S_p^\theta = \frac{1-\theta}{\theta} \frac{M_p}{\Delta t} \quad (3.26)$$

$$S_C^\theta = \frac{1-\theta}{\theta} \left[ \frac{M_p^0}{\Delta t} \phi_p^0 - (\dot{m}_e^0 \phi_e^0 - \dot{m}_w^0 \phi_w^0) + D_e^0 (\phi_E^0 - \phi_P^0) - D_w^0 (\phi_P^0 - \phi_W^0) + S_p^0 \phi_p^0 + S_C^0 \right] \quad (3.27)$$

A parcela do termo fonte referente à implementação do esquema de alta ordem espacial (TVD) é dada por,

$$S_C^{\text{TVD}} = \frac{1}{2} |\dot{m}_e| \Psi_e (\phi_p^* - \phi_E^*) + \frac{1}{2} |\dot{m}_w| \Psi_w (\phi_p^* - \phi_W^*) \quad (3.28)$$

onde  $\Psi_e$  e  $\Psi_w$  são a função limite  $\Psi$  avaliada sobre as faces leste e oeste,  $\phi_p^*$ ,  $\phi_E^*$  e  $\phi_W^*$  são as variáveis nos centros dos volumes P, E e W avaliadas

na iteração anterior. Note que essa implementação do esquema TVD consiste em uma correção atrasada (*deferred correction*).

Por fim, a formulação apresentada até aqui pode ser aplicada na solução de qualquer problema monofásico ou multifásico considerando uma formulação unidimensional. Lembrado que problemas monofásicos,  $\alpha_k = 1$ . Na próxima seção, a discretização apresentada será particularizada para as demais equações de conservação, bem como a implementação do acoplamento pressão-velocidade pelo método PRIME proposto por Maliska (2004). Além do problema da resolução do acoplamento pressão-velocidade, no contexto do modelo de dois fluidos, no qual um conjunto de equações de conservação é resolvido para cada fase, deve ser também resolvido o problema do acoplamento entre as variáveis de cada fase, caracterizado fisicamente pelos termos de transferência interfacial. Além disso, em problemas bifásicos, a presença de cada fase no volume de controle, caracterizada pela fração volumétrica, também deve ser resolvida. Assim será também discutido na próxima seção, o procedimento para a resolução deste acoplamento.

## 3.2 Método dos Volumes Finitos Aplicado ao Modelo de Dois-Fluidos Particularizado

Nesta seção, o método dos volumes finitos aplicado a uma equação de transporte genérica, no âmbito do modelo de dois-fluidos desenvolvido na seção anterior será estendido a partir da particularização de cada equação de conservação, nomeadamente da massa global, da quantidade de movimento e das espécies químicas.

### 3.2.1 Conservação da Massa por Fase

A Equação de Conservação de Massa para uma fase  $k$  pode ser descrita conforme,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k \alpha_k u_k) = \Gamma_k \quad (3.29)$$

Integrando espacialmente entre os limites ‘w’ e ‘e’ referentes às faces do volume centrado no ponto P; e integrando no tempo na forma ‘ $\theta$ ’,

posteriormente dividindo por ' $\theta \Delta t$ ', resulta na expressão integrada dada por,

$$\frac{1}{\theta} \frac{\Delta V}{\Delta t} (\rho_P \alpha_P - \rho_P^0 \alpha_P^0) + (\rho \alpha u A)_e - (\rho \alpha u A)_w = \Gamma \Delta V - \frac{1-\theta}{\theta} (\dot{m}_e^0 - \dot{m}_w^0) + \frac{1-\theta}{\theta} \Gamma^0 \Delta V \quad (3.30)$$

note que os subscritos referentes à fase 'k' foram inibidos apenas para simplificar a notação.

Os termos advectivos sobre as faces leste e oeste podem ser descritos por,

$$\dot{m}_e = (\rho \alpha u A)_e = \bar{\rho}_e u_e A_e \tilde{\alpha}_e = \dot{f}_e \tilde{\alpha}_e \quad (3.31)$$

$$\dot{m}_w = (\rho \alpha u A)_w = \bar{\rho}_w u_w A_w \tilde{\alpha}_w = \dot{f}_w \tilde{\alpha}_w \quad (3.32)$$

em que  $\tilde{\alpha}_e$  e  $\tilde{\alpha}_w$  são os valores nas faces leste e oeste avaliadas pelo esquema TVD utilizado.

Os termos advectivos referentes à formulação  $\theta$  sobre as faces leste e oeste podem ser descritos por,

$$\dot{m}_e^0 = \bar{\rho}_e^0 u_e^0 A_e \tilde{\alpha}_e^0 \quad \dot{m}_w^0 = \bar{\rho}_w^0 u_w^0 A_w \tilde{\alpha}_w^0 \quad (3.33)$$

As massas específicas nas faces são calculadas por uma média aritmética simples, conforme as relações dadas por,

$$\bar{\rho}_e = \frac{\rho_P + \rho_E}{2} \quad \bar{\rho}_w = \frac{\rho_P + \rho_W}{2} \quad (3.34)$$

As velocidades são conhecidas nas faces e podem ser prontamente utilizadas no cálculo das pseudovazões mássicas. As frações volumétricas, como são variáveis transportadas, serão discretizadas por um esquema TVD, sendo possível discretizar a equação na forma dada por,

$$A_P \alpha_P = A_E \alpha_E + A_W \alpha_W + B \quad (3.35)$$

Onde os coeficientes são dados por,

$$A_W = \max(\dot{f}_w, 0) \quad (3.36)$$

$$A_E = \max(-\dot{f}_e, 0) \quad (3.37)$$

$$A_P = \frac{M'_P}{\Delta t} + A_E + A_W + (\dot{f}_e - \dot{f}_w) + S_P^\theta \quad (3.38)$$

$$B = \frac{M_P^{0'}}{\Delta t} \alpha_P^0 + S_C^\alpha + S_C^{\text{TVD}} + S_C^\theta \quad (3.39)$$

Os termos de massa são dados pelas relações,

$$M'_P = \rho_P \Delta V \quad (3.40) \quad M_P^{0'} = \rho_P^0 \Delta V \quad (3.41)$$

O termo fonte, neste caso, refere-se à transferência de massa interfacial e é dado por,

$$S_C^\alpha = \Gamma \Delta V \quad (3.42)$$

O termo fonte referente à implementação do esquema TVD é dado por,

$$S^{\text{TVD}} = \frac{1}{2} |\dot{f}_e| \Psi_e (\alpha_P - \alpha_E) + \frac{1}{2} |\dot{f}_w| \Psi_w (\alpha_P - \alpha_W) \quad (3.43)$$

Os termos fonte referentes à implementação do esquema temporal  $\theta$  são dados por,

$$S_P^\theta = \frac{1-\theta}{\theta} \frac{M'_P}{\Delta t} \quad (3.44)$$

$$S_C^\theta = \frac{1-\theta}{\theta} \left[ \frac{M_P^{0'}}{\Delta t} \alpha_P^0 - (\dot{m}_e^0 - \dot{m}_w^0) + \Gamma^0 \Delta V \right] \quad (3.45)$$

Esse procedimento será utilizado para determinação da fração volumétrica da fase gasosa ( $\alpha_G$ ). A fração volumétrica da fase líquida ( $\alpha_L$ ) será determinada a partir da conservação do volume, conforme a relação dada por,

$$\alpha_G + \alpha_L = 1 \quad (3.46)$$

### 3.2.2 Conservação da Quantidade de Movimento por Fase

A Conservação de Quantidade de Movimento para uma fase genérica 'k' pode ser descrita por,

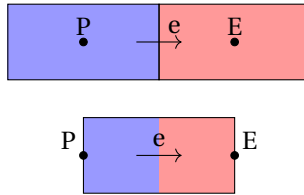
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k u_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k \alpha_k u_k u_k) = -\alpha_k \frac{\partial p}{\partial x} + S^{u_k} \quad (3.47)$$

Aqui será deduzida a equação discretizada para um volume centrado sobre a face 'e', tendo em vista que a malha desencontrada foi utilizada. Integrando espacialmente entre os limites 'P' e 'E' referentes às faces do volume centrado no ponto 'e'; e no tempo na forma  $\theta$ , posteriormente dividindo por ' $\theta \Delta t$ ', resulta em,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\theta} \left( \frac{M_e u_e - M_e^0 u_e^0}{\Delta t} \right) + (\dot{m}_E u_E) - (\dot{m}_P u_P) = -\frac{1}{\theta} \left[ \alpha_e \left( \frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \Delta V \right] + S^{u_e} \Delta V \\ + \frac{1-\theta}{\theta} [ -(\dot{m}_E^0 u_E^0 - \dot{m}_P^0 u_P^0) + S^{u,0} \Delta V ] \quad (3.48) \end{aligned}$$

Levando-se em conta que o volume centrado em 'e' é composto por meia parte do volume centrado em 'P' e meia parte do volume centrado em 'E', conforme a Figura 3.3.

**Figura 3.3** – Composição do Volume



Considerando que as densidades das fases e frações volumétricas são armazenadas nos centros dos volumes de controle (P e E, neste caso), a massa do volume centrado em 'e' pode ser calculada por,

$$M_e = \frac{M_P + M_E}{2} = \frac{\rho_P \alpha_P \Delta V + \rho_E \alpha_E \Delta V}{2} \quad (3.49)$$

Os termos advectivos podem ser descritos pelo produto de um fluxo de massa  $\dot{m}$  e uma variável transportada  $\phi$ . Há duas abordagens possíveis



para o cálculo dos fluxos de massa nas faces dos volumes da velocidade:  
 (i) considerando os valores conhecidos, dado por,

$$\dot{m}_p = (\rho \alpha u A)_p = \rho_p \alpha_p \tilde{u}_p A \quad (3.50)$$

e (ii), considerando a continuidade dos fluxos no volume P, conforme recomendado por Bonizzi (2003) e dado por,

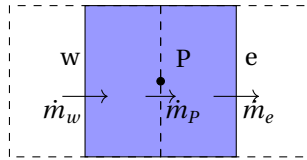
$$\dot{m}_p = \frac{1}{2} (\dot{m}_w + \dot{m}_e) \quad (3.51)$$

A abordagem (ii) é análoga a considerar os fluxos e o acúmulo uniforme em todo o volume centrado em 'P', conforme apresentado pela relação,

$$\frac{1}{2} \frac{dM_p}{dt} = \dot{m}_p - \dot{m}_w = \dot{m}_e - \dot{m}_p \quad (3.52)$$

A Figura 3.4 auxilia na visualização da composição dos fluxos para a abordagem (ii).

**Figura 3.4** – Composição dos Fluxos de Massa sobre os Volumes Centrados nas Faces



A comparação das duas abordagens é apresentada na Capítulo 4. Por ora, basta levar em conta que a abordagem (ii) será utilizada, tendo em vista que a primeira leva a instabilidades numéricas decorrentes dos desbalanços dos fluxos de massa sobre os volumes de balanço de quantidade de movimento.

Em relação a implementação do esquema TVD, tendo em vista que não há grandes gradientes de velocidade no domínio, não foi implementado esse esquema para o balanço de quantidade de movimento. Dessa forma, os termos advectivos serão discretizados por um esquema *upwind*.

Após a aplicação das funções de interpolação, resulta no sistema de equações dado pela relação,

$$A_P u_e = A_E u_{ee} + A_W u_w + B \quad (3.53)$$

Onde os coeficientes são dados por,

$$A_W = \max(\dot{m}_P, 0) \quad (3.54)$$

$$A_E = \max(-\dot{m}_E, 0) \quad (3.55)$$

$$A_P = \frac{M_e}{\Delta t} + A_E + A_W + (\dot{m}_E - \dot{m}_P) + S_P^\theta + S_P^u \quad (3.56)$$

$$B = \frac{M_e^0}{\Delta t} u_e^0 + S_C^\theta + S_C^u \quad (3.57)$$

Os termos fonte referentes à implementação do esquema temporal  $\theta$  são dados por,

$$S_P^\theta = \frac{1-\theta}{\theta} \frac{M_e^0}{\Delta t} \quad (3.58)$$

$$S_C^\theta = \frac{1-\theta}{\theta} \left[ \left( \frac{M_e^0}{\Delta t} + \dot{m}_E^0 - \dot{m}_P^0 \right) u_w^0 - (\dot{m}_E^0 u_E^0 - \dot{m}_P^0 u_P^0) + S_P^0 u_e^0 + S_C^0 \right] \quad (3.59)$$

A equação da quantidade de movimento será resolvida de forma explícita para a obtenção das velocidades  $\hat{u}$ , sendo posteriormente corrigidas com o gradiente de pressão obtido da conservação da massa global.

### 3.2.3 Implementação do Método PRIME para o Acoplamento Pressão-Velocidade

O método PRIME (*pressure implicit, momentum explicit*) é um método de acoplamento pressão-velocidade no qual os termos da equação da quantidade de movimento são tratados de forma explícita, exceto o termo de pressão; este será mantido na forma implícita na equação de conservação da massa, conforme citado por Maliska (2004). Reescre-

vendo a Equação 3.53 explicitando o termo do gradiente de pressão tem-se,

$$A_P u_e = A_E u_{ee} + A_W u_w + \hat{B} - \frac{1}{\theta} \left[ \frac{\Delta V}{A_P^u} \left( \alpha \frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \right] \quad (3.60)$$

Pode-se isolar a velocidade  $u_e$ , resultando em,

$$u_w = \frac{A_E u_e + A_W u_{ww} + \hat{B}}{A_P} - \frac{1}{\theta} \left[ \frac{\Delta V}{A_P^u} \left( \alpha \frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \right] \quad (3.61)$$

Assim definindo uma velocidade  $\hat{u}$  calculada de forma explícita,

$$u_w = \hat{u}_w - \frac{1}{\theta} \left[ \frac{\Delta V}{A_P^u} \left( \alpha \frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \right] \quad (3.62)$$

Basta substituir as velocidades  $\hat{u}$  na equação do Balanço de Massa da fase 'k', repetido por conveniência,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\theta} \frac{\Delta V}{\Delta t} (\rho_k \alpha_k - \rho_k^0 \alpha_k^0)_P + (\rho_k \alpha_k u_k A)_e - (\rho_k \alpha_k u_k A)_w = \Gamma_k \Delta V \\ + \frac{1-\theta}{\theta} [-(\dot{m}_e^0 - \dot{m}_w^0) + \Gamma_k^0 \Delta V] \end{aligned} \quad (3.63)$$

Após a substituição das velocidades  $\hat{u}$  e inibindo o índice referente à fase, o balanço de massa para a fase 'k' resulta em,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\theta} \frac{M_P - M_P^0}{\Delta t} + (\hat{m}_e - \hat{m}_w) + \frac{1-\theta}{\theta} (\dot{m}_e^0 - \dot{m}_w^0) \\ + (\bar{\rho}_e \tilde{\alpha}_e A) \left[ -\frac{1}{\theta} \frac{\Delta V}{A_P^u} \left( \alpha \frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \right] - (\bar{\rho}_w \tilde{\alpha}_w A) \left[ -\frac{1}{\theta} \frac{\Delta V}{A_P^u} \left( \alpha \frac{\partial p}{\partial x} \right)_w \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.64)$$

As vazões mássicas explícitas podem ser calculadas por,

$$\hat{m}_w = \bar{\rho}_w \tilde{\alpha}_w \hat{u}_w A \quad (3.65) \quad \hat{m}_e = \bar{\rho}_e \tilde{\alpha}_e \hat{u}_e A \quad (3.66)$$

onde  $\tilde{\alpha}_w$  e  $\tilde{\alpha}_e$  são os valores de  $\alpha$  calculados nas faces através do mesmo esquema de interpolação utilizada na conservação da massa da referida fase. Isso é um aspecto muito importante para manter a consistência numérica da formulação.

Os termos de de pressão podem ser discretizadas por diferenças centrais, conforme,

$$\left(\alpha \frac{\partial p}{\partial x}\right)_w = \bar{\alpha}_w \frac{p_P - p_W}{\Delta x} \quad \left(\alpha \frac{\partial p}{\partial x}\right)_e = \bar{\alpha}_e \frac{p_E - p_P}{\Delta x} \quad (3.67)$$

onde  $\bar{\alpha}_w$  e  $\bar{\alpha}_e$  são os valores médios, que podem ser estimados por,

$$\bar{\alpha}_w = \frac{\alpha_W + \alpha_P}{2} \quad \bar{\alpha}_e = \frac{\alpha_P + \alpha_E}{2} \quad (3.68)$$

Finalmente, é possível obter o sistema de equações dado por,

$$A_P^p p_P = A_E^p p_E + A_W^p p_W + B^p \quad (3.69)$$

Onde os coeficientes da matriz são finalmente dados por,

$$A_W = (\bar{\rho}_w \tilde{\alpha}_w A) \left( \frac{\Delta V^{u_w}}{A_P^{u_w}} \frac{\bar{\alpha}_w}{\Delta x} \right) \quad (3.70)$$

$$A_E = (\bar{\rho}_e \tilde{\alpha}_e A) \left( \frac{\Delta V^{u_e}}{A_P^{u_e}} \frac{\bar{\alpha}_e}{\Delta x} \right) \quad (3.71)$$

$$A_P = A_E + A_W + S_P^p + S_P^\theta \quad (3.72)$$

$$B^p = - \left( \frac{M_P - M_P^0}{\Delta t} + \hat{m}_e - \hat{m}_w \right) + S_C^p + S_C^\theta \quad (3.73)$$

Caso a fase de balanço seja a fase líquida, o termo fonte referente à pressão é dado por,

$$S_P^p = 0 \quad S_C^p = 0 \quad (3.74)$$

O termo de correção referente à formulação  $\theta$  é dado por,

$$S_C^\theta = - \frac{1 - \theta}{\theta} \left( \frac{M_P - M_P^0}{\Delta t} + \hat{m}_e^0 - \hat{m}_w^0 \right) \quad (3.75)$$

Por outro lado, se a fase de balanço for a fase gasosa, é possível descrever a massa específica do termo de acúmulo através da lei dos gases ideais e mantê-la implícita no sistema linear. Dessa forma, os termos fontes referentes à pressão são dados por,

$$S_P^p = \alpha_P \frac{M_G^{\text{mol}}}{RT_G} \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad S_C^p = \frac{M_P}{\Delta t} \quad (3.76)$$

onde  $M_G^{\text{mol}}$  é a massa molar do gás em função da composição,  $R$  é a constante dos gases ideais e  $T_G$  é a temperatura do gás.

Os termos de correção referentes à formulação  $\theta$  são dados por,

$$S_C^\theta = -\frac{1-\theta}{\theta} \left( \frac{M_P - M_P^0}{\Delta t} + \dot{m}_e^0 - \dot{m}_w^0 - \frac{M_P}{\Delta t} \right) \quad (3.77)$$

$$S_P^\theta = \frac{1-\theta}{\theta} \alpha_P \frac{M_G^{\text{mol}}}{R T_G} \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (3.78)$$

A solução do campo de pressões pode ser obtido a partir da equação de conservação da massa global, ou seja, a partir da soma das equações de conservação de massa das fases. Entretanto, como pode existir uma diferença muito grande densidades entre as fases, é possível que os termos de uma das equações de conservação da massa sejam dominantes frente a fase de menor densidade. Dessa forma, Issa e Kempf (2003) recomendam somar das equações de conservação da massa normalizada pela massa específica da fase, conforme dado por,

$$\frac{1}{\rho_L} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\rho_L \alpha_L) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_L \alpha_L u_L) \right] + \frac{1}{\rho_G^{\text{ref}}} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\rho_G \alpha_G) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_G \alpha_G u_G) \right] = 0 \quad (3.79)$$

onde  $\rho_G^{\text{ref}}$  é um valor de referência de massa específica do gás. Neste trabalho, optou-se por utilizar o valor de referência de ar puro à temperatura ambiente ( $1,225 \text{ kg/m}^3$ ).

Entretanto, o mesmo sistema de equações para a pressão pode ser obtido dividindo cada coeficiente obtido nas Equações 3.70 à 3.73 pela referida massa específica ( $\rho_L$  para o líquido e  $\rho_G^{\text{ref}}$  para o gás). Por exemplo, para o coeficiente  $A_P$ , vale a relação dada por,

$$A_P^p = \frac{A_P^{p,L}}{\rho_L} + \frac{A_P^{p,G}}{\rho_G^{\text{ref}}} \quad (3.80)$$

### 3.2.4 Conservação das Espécies Químicas

Neste trabalho será abordado o escoamento bifásico gás-liquido multicomponentes. Assim, a Equação de Conservação das Espécies Químicas

é descrita por,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k Y_k^i) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k \alpha_k u_k Y_k^i) = S_k^\phi \quad (3.81)$$

Integrando no espaço e no tempo, inibindo os índices referentes à fase (k) e componente químico (i), resulta na forma dada por,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\theta} \left( \frac{M_P Y_P - M_P^0 Y_P^0}{\Delta t} \right) + \dot{m}_e Y_e - \dot{m}_w Y_w = S^Y \Delta V \\ + \frac{1-\theta}{\theta} \left[ -(\dot{m}_e^0 Y_e^0 - \dot{m}_w^0 Y_w^0) + S^{Y^0} \Delta V \right] \end{aligned} \quad (3.82)$$

Resulta no sistema de equações dado por,

$$A_P Y_P = A_E Y_E + A_W Y_W + B \quad (3.83)$$

Onde os coeficientes da matriz são dados por,

$$A_W = \max(\dot{m}_w, 0) \quad (3.84)$$

$$A_E = \max(\dot{m}_e, 0) \quad (3.85)$$

$$A_P = \frac{M_P^0}{\Delta t} + A_E + A_W + S_P^\theta + S_P^Y \quad (3.86)$$

$$B = \frac{M_P^0}{\Delta t} \phi_P^0 + S_C^Y + S_C^{\text{TVD}} + S_C^\theta \quad (3.87)$$

Onde o termo fonte referente à implementação do esquema TVD é dado por,

$$S_C^{\text{TVD}} = \frac{1}{2} |\dot{m}_e| \Psi_e(Y_P - Y_E) + \frac{1}{2} |\dot{m}_w| \Psi_w(Y_P - Y_W) \quad (3.88)$$

E as parcelas implícita e explícita do termo fonte referentes à implementação do esquema  $\theta$  são dadas por,

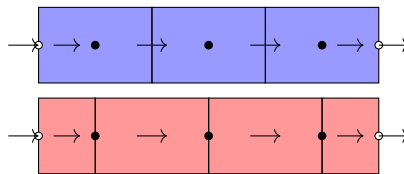
$$S_P^\theta = \frac{1-\theta}{\theta} \frac{M_P}{\Delta t} \quad (3.89)$$

$$S_C^\theta = \frac{1-\theta}{\theta} \left[ \frac{M_P^0}{\Delta t} \phi_P^0 - (\dot{m}_e^0 - \dot{m}_w^0) \right] \quad (3.90)$$

### 3.2.5 Aplicação das Condições de Contorno

Antes da implementação das condições de contorno, é importante definir a localização das variáveis escalares ( $\alpha_k, p, Y_k^i$ ) bem como variáveis vetoriais ( $u_k$ ). Neste trabalho, optou-se por dividir o domínio de acordo com a Figura 3.5, onde os volumes vermelhos referem-se ao balanço de quantidade de movimento e os volumes azuis ao balanço das demais variáveis (massa e espécies químicas).

**Figura 3.5** – Volumes para Variáveis Escalares e Vetoriais



Fonte: elaborado pelo autor.

As variáveis nos pontos contorno (bolas brancas e setas fora do domínio) são determinadas explicitamente e não participam do sistema de equações. As demais variáveis (bolas pretas e setas dentro do domínio) participam do sistema de equações e relacionam-se a seus respectivos volumes de controle. Note que os volumes laterais de velocidade correspondem a metade dos demais volumes.

A condição de contorno de entrada (fronteira oeste) é de variável prescrita, exceto para a pressão, conforme as relações dadas por,

$$\phi_P = \phi_{f,w} \qquad u_P = u_{f,w} \qquad (3.91)$$

onde  $\phi_{f,w}$  e  $u_{f,w}$  são os valores prescritos das variáveis escalares e vetoriais na entrada.

Seguindo o arranjo dado pela Figura 3.5, a pressão na entrada seria requerida para a determinação de duas variáveis: (i) no cálculo da velocidade do primeiro volume e (ii) na determinação da massa específica da fase gasosa na entrada. De modo a contornar o cálculo da velocidade no primeiro volume (primeira seta dentro do domínio físico), optou-se especificar a velocidade neste volume, conforme as relações dadas por,

$$A_P^{u_P} = 1 \qquad B_P^{u_P} = u_{f,w}$$

Esse procedimento seria análogo à aplicação de um esquema *Upwind* no primeiro volume de controle da quantidade de movimento. Optou-se por esse procedimento por três motivos: (i) simplicidade e generalização, (ii) esta velocidade não é usada no cálculo das vazões mássicas nas faces dos volumes das variáveis escalares e (iii) o cálculo dessa velocidade por balanço resultou em instabilidades nos testes numéricos posteriores.

O único empecilho agora será o cálculo da massa específica da fase gasosa. A pressão será extrapolada explicitamente a partir dos volumes internos, de modo que,

$$p_P = 2p_E^* - p_{EE}^* \quad (3.92)$$

onde  $p_P$  é a pressão na entrada (face oeste).

A condição de contorno de saída (fronteira oeste) é de derivada prescrita e nula, exceto para a pressão, conforme as relações dadas por,

$$\phi_P = \phi_W^* \quad u_P = u_W^* \quad (3.93)$$

Em relação ao último volume de velocidade, este será discretizado a equação de balanço de quantidade de movimento uma vez que esta penúltima velocidade define o fluxo mássico de saída.

### 3.3 Algoritmo de Solução

Por fim, pode-se estabelecer um algoritmo de solução do problema multifásico conforme a numeração abaixo:

1. Calcular  $\hat{u}_G$  e  $\hat{u}_L$  através das Equações da Conservação da Quantidade de Movimento Explícitas, sem o termo de pressão;
2. Calcular o  $p$  através da Equação da Conservação da Massa Global;
3. Calcular  $u_G$  e  $u_L$  através das equações de correção das velocidades (Equações da Conservação da Quantidade de Movimento com o termo de pressão);
4. Calcular  $\alpha_G$  através da Equação da Conservação da Massa para a Fase Gasosa;
5. Determinar  $\alpha_L$  através da Equação de Conservação do Volume;
6. Determinar as demais variáveis escalares através de suas respectivas equações da conservação;



7. Verificar convergência;
8. Caso seja verificada a convergência, avançar no tempo. Caso contrário, iterar novamente.



CAPÍTULO

# 4

## VERIFICAÇÃO DA METODOLOGIA PROPOSTA

Nesta seção, a metodologia desenvolvida para este trabalho é verificada e validada a partir de problemas-teste apresentados na literatura. Os testes escolhidos da literatura para este capítulo foram:

- Teste de Advecção Transiente: visa validar a implementação dos termos advectivos (TVD) e temporais ( $\theta$ ) de alta ordem;
- Teste da Torneira d'Água: visa validar a implementação do problema multifásico, do acoplamento entre as equações de balanço de massa e quantidade de movimento com termo fonte gravitacional;
- Teste da Decantação: visa uma validação global da metodologia, da implementação do acoplamento pressão-velocidade e do tratamento numérico nas regiões de elevada fração de uma das fases.

A metodologia desenvolvida neste trabalho foi capaz de simular com sucesso todos os problemas escolhidos da literatura.

## 4.1 Problema da Advecção de um Pulso

O problema da advecção de um pulso consiste no transporte advectivo transiente de um pulso ao longo do domínio e permite avaliar a implementação dos esquemas TVD para os termos advectivos, bem como o esquema temporal  $\theta$ . O modelo matemático da advecção de um pulso consiste em,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) = 0 \quad (4.1)$$

A condição inicial consiste na distribuição homogênea da variável transportada  $\phi$  e é dada por,

$$\phi(\forall x, t = 0) = 0 \quad (4.2)$$

As condições de contorno são entrada de variável prescrita (face oeste) e saída localmente parabólica (face leste), conforme,

$$\phi(x = 0, \forall t) = 1 \quad \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{x=L, \forall t} = 0 \quad (4.3)$$

A solução para o tempo de 0,6 segundos foi obtida para três malhas ( $N=25, 50$  e  $100$  volumes), considerando um número de Courant constante e igual a 0,5. Inicialmente foram considerados os esquemas *Upwind* para os termos advectivos e Euler totalmente implícito no tempo (U/E) *versus* o esquema TVD Van Leer para os termos advectivos e Crank-Nicolson no tempo (VL/CN), a fim de avaliar o comportamento da solução frente a refinamentos sucessivos de malha. A Figura 4.1 apresenta os resultados obtidos para essa análise, onde se pode observar que o refino de malha leva a solução numérica a aproximar-se da solução analítica, com efeito mais pronunciado para o esquema de mais alta ordem (VL/CN).

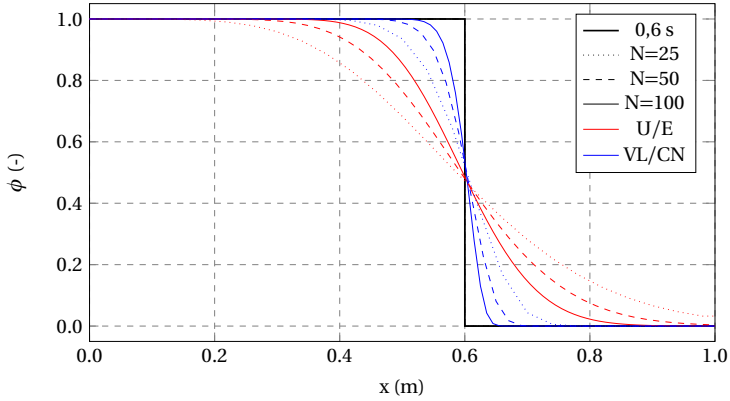
Um segundo teste consiste avaliar a implementação de diferentes esquemas TVD para os termos advectivos, nomeadamente MINMOD (MM), Sweby (S), SUPERBEE (SB) e Van Leer (VL), combinados com o esquema temporal Crank-Nicolson (CN). Adicionalmente, o esquema *Upwind* foi combinado com os esquemas temporais de Euler totalmente implícito (E) e Crank-Nicolson (CN). A Figura 4.2 apresenta o comparativo dos diferentes esquemas supracitados, considerando-se uma malha de  $N=100$  volumes e novamente tempo de 0,6 segundos. Observa-se que o esquema

de interpolação *Upwind* para os termos advectivos apresentou uma solução bem dissipada mesmo para a malha mais refinada ( $N=100$  volumes) e mesmo quando considerado o esquema temporal Crank-Nicolson. Além disso, observa-se um comportamento qualitativo semelhante entre os esquemas TVD, conforme esperado e descrito em Versteeg e Malalaskera (2007). Dessa forma, o esquema TVD Van Leer será escolhido para as demais análises deste problema.

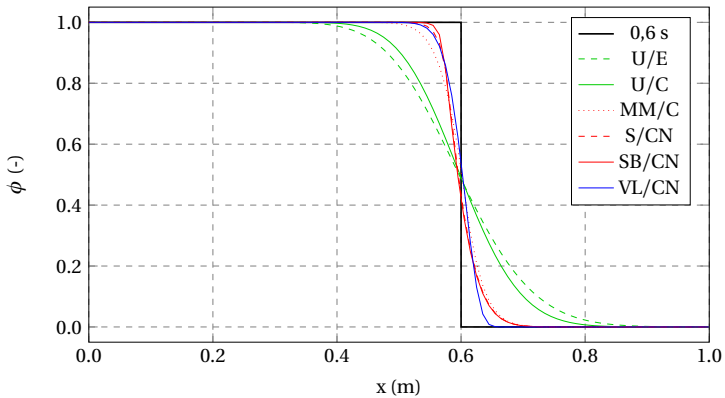
A solução transiente é apresentada na Figura 4.3, para os esquemas *Upwind* para os termos advectivos e formulação temporal de Euler totalmente implícito *versus* esquema TVD Van Leer para os termos advectivos e formulação temporal de Crank-Nicolson. Conforme esperado, observa-se que os esquemas de mais alta ordem (VL/CN) apresentam solução com menor dissipação dos gradientes frente aos usuais esquemas de primeira ordem (U/E).

Por fim, foi testada a influência da formulação temporal de Crank-Nicolson *versus* Euler totalmente implícito para o esquema TVD Van Leer, conforme a Figura 4.4. Observa-se que a menor dissipação dos gradientes é um efeito combinado das formulações espaciais (TVD) e temporais (Crank-Nicolson). Nota-se ainda que a dissipação numérica (caso *Upwind*) propaga-se aumentando com o tempo. Desta forma, na análise de processos transientes longos, que envolvem fenômenos de propagação de ondas, como é o caso do escoamento em padrão de golfadas, é de fundamental importância a utilização de esquemas de alta ordem mesmo com malhas refinadas.

**Figura 4.1** – Problema da Advecção de um Pulso – Comparação dos Campos de Variável Transportada Frente ao Refino de Malha – Esquemas Upwind/Euler (U/E)  $\times$  TVD Van Leer/Crank-Nicolson (VL/CN) –  $t=0,6$  s

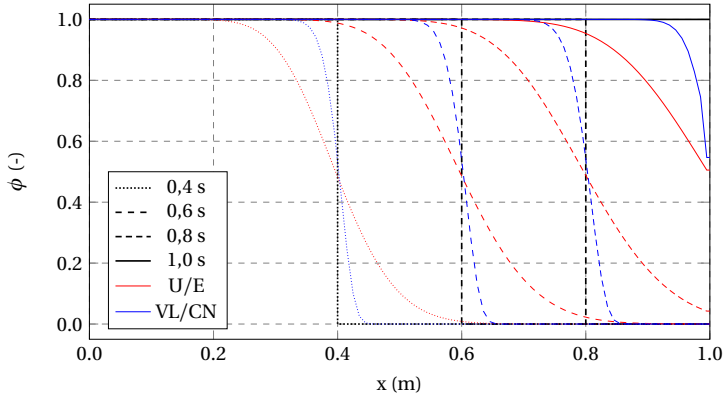


**Figura 4.2** – Problema da Advecção de um Pulso – Comparação dos Campos de Variável Transportada – Diferentes Esquemas –  $t=0,6$  s



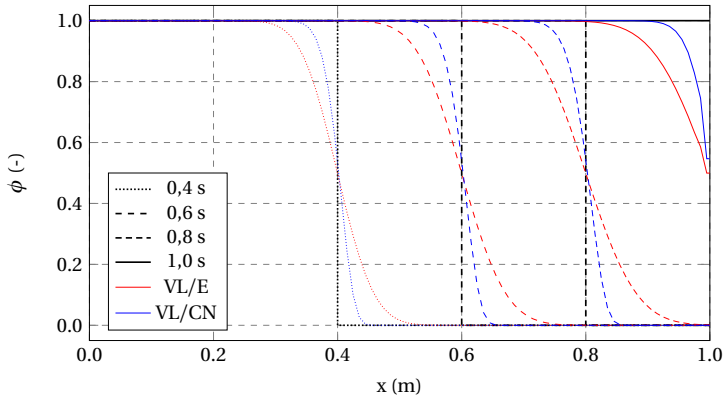
Fonte: elaborado pelo autor

**Figura 4.3** – Problema da Advecção de um Pulso – Comparação dos Campos de Variável Transportada – Esquemas *Upwind*/Euler (U/E) × TVD/Crank-Nicolson (TVD/CN)



Fonte: elaborado pelo autor

**Figura 4.4** – Problema da Advecção de um Pulso – Comparação dos Campos de Variável Transportada – Esquemas TVD/Euler (TVD/E) (U/E) × TVD/Crank-Nicolson (TVD/CN) – N=100



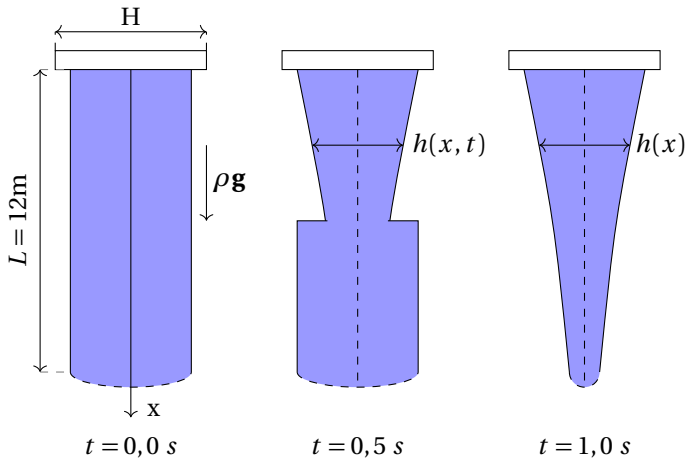
Fonte: elaborado pelo autor

## 4.2 Problema da Torneira d'Água

O problema da torneira d'água (*water faucet*) consiste em uma coluna de líquido que, devido a ação da força peso, acelera e forma um jato de seção transversal decrescente. Esse problema, que possui solução analítica, permite validar a implementação dos balanços de massa e quantidade de movimento, mais precisamente na interação entre as variáveis  $\alpha$  e  $u$ . Na sua versão transiente, o problema equivale a um fechamento parcial instantâneo da 'torneira', gerando assim a propagação de uma onda de fração volumétrica.

Embora não seja, a rigor, um problema multifásico, um modelo análogo ao modelo de dois-fluidos pode ser implementado na solução deste problema. A Figura 4.5 apresenta uma ilustração do problema da torneira d'água.

**Figura 4.5** – Diagrama do Problema *Water Faucet*



Fonte: elaborado pelo autor

Para a aplicação do modelo análogo ao de dois-fluidos sobre o problema da torneira d'água, é necessário definir uma fração volumétrica  $\alpha$ , aqui definido para o jato líquido conforme,

$$\alpha_L = \frac{h}{H} \quad (4.4)$$



A formulação do problema da torneira d'água consiste nas equações de conservação de massa e de quantidade de movimento na fase líquida, dadas por,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_L \alpha_L) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_L \alpha_L u_L) = 0 \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_L \alpha_L u_L) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_L \alpha_L u_L u_L) = -\rho_L \alpha_L g \quad (4.6)$$

O domínio do problema consiste numa coluna d'água de 12 metros de comprimento, sob ação da gravidade de 9,81 m/s<sup>2</sup>. As condições iniciais são fração volumétrica uniforme de 0,8 e velocidade uniforme de 10 m/s, conforme,

$$\alpha_L(\forall x, t = 0) = 0,8 \quad u_L(\forall x, t = 0) = 10 \text{ m/s} \quad (4.7)$$

As condições de contorno para a fração volumétrica e velocidade são do tipo variável prescrita na entrada e análogas às condições iniciais, conforme,

$$\alpha_L(x = 0, \forall t) = 0,8 \quad u_L(x = 0, \forall t) = 10 \text{ m/s} \quad (4.8)$$

As condições de contorno para a fração volumétrica e velocidade são do tipo variáveis localmente parabólicas na saída, conforme,

$$\left( \frac{\partial \alpha}{\partial x} \right)_{x=L, \forall t} = 0 \quad \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=L, \forall t} = 0 \quad (4.9)$$

A Figura 4.6 apresenta os resultados para as formulações (1) e (2) considerando o esquema *Upwind* para os termos advectivos e formulação temporal de Euler totalmente implícito. Observa-se que a formulação (2) apresentou um *overshoot* da fração volumétrica devido ao desbalanço existente nos fluxos de massa sobre os volumes de quantidade de movimento.

Um primeiro ponto a ser discutido é sobre a presença de oscilações na solução mesmo quando aplicado o esquema *Upwind* sobre os termos advectivos. Considere duas formulações possíveis para cálculo da vazão mássica sobre as faces dos volumes de balanço de quantidade de movimento apresentadas na Subseção 3.2.2: a formulação (1), onde o fluxo mássico é dado pela média dos fluxos sobre as faces adjacentes (faces dos volumes de balanço de massa) e a formulação (2), onde o fluxo mássico

é calculado com as variáveis disponíveis nas faces e velocidades interpoladas. As Equações 4.2 e 4.2 apresentam as abordagens (1) e (2) o cálculo da vazão mássica sobre um ponto 'P' (ou seja, face leste do volume de quantidade de movimento centrado em 'e'), respectivamente.

$$\dot{m}_p = \frac{\dot{m}_e + \dot{m}_w}{2} \qquad \dot{m}_p = (\rho_p \alpha_p \bar{u}_p A) \qquad (4.10)$$

Curiosamente, neste trabalho, observou-se que a partir da implementação de um esquema TVD Van Leer, a solução das duas formulações foram coincidentes, conforme apresentado pela Figura 4.7. Dessa forma, mesmo que tomada uma formulação sem o devido cuidado do cálculo das vazões mássicas de forma consistente, a implementação de um esquema TVD pode, de certo modo, corrigir essa inconsistência, uma vez que o cálculo das variáveis através de um esquema TVD é mais preciso que o esquema *Upwind*. Entretanto, de modo a evitar oscilações, será sempre tomada a formulação (1) neste trabalho. Para ambas as análises supracitadas, foi utilizada uma malha grosseira de N=120 volumes.

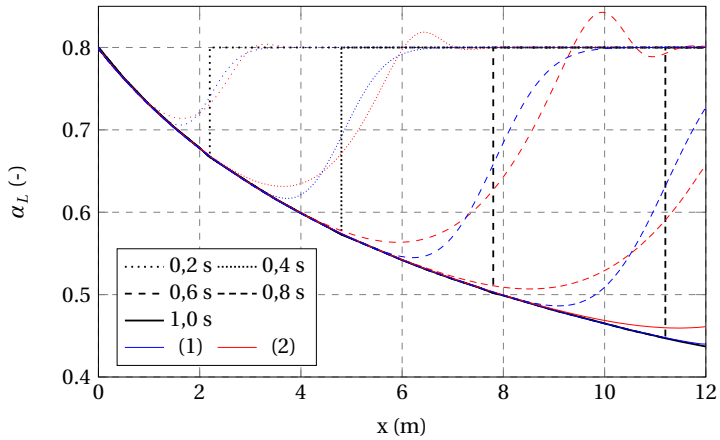
A próxima etapa será verificar se o refino de malha leva a solução numérica a aproximar-se da solução analítica do problema. Como se trata de um problema de propagação de onda, o esquema de interpolação no tempo também terá importante influência no erro observado na solução. A Figura 4.8 apresenta uma comparação entre os esquemas *Upwind* para os termos advectivos e formulação temporal de Euler totalmente implícito *versus* esquema TVD Van Leer e formulação temporal de Crank-Nicolson, considerando diferentes refinamentos de malha. Observa-se que a combinação do esquema TVD Van Leer para os termos advectivos e formulação temporal de Crank-Nicolson com a malha mais grosseira (N=120) apresentou eficiência equivalente na captura do gradiente, quando em comparação com o esquema *Upwind* e formulação temporal de Euler totalmente implícito com a malha mais refinada (N=480).

A fim de avaliar a solução numérica em todo transiente, a Figura 4.9 apresenta a solução do esquema TVD Van Leer e formulação temporal de Crank-Nicolson *versus* esquema *Upwind* e formulação temporal de Euler, para uma malha de N=480 volumes, onde se observa, indiscutivelmente, a qualidade dos resultados obtidos a partir da formulação TVD Van Leer/Crank-Nicolson.

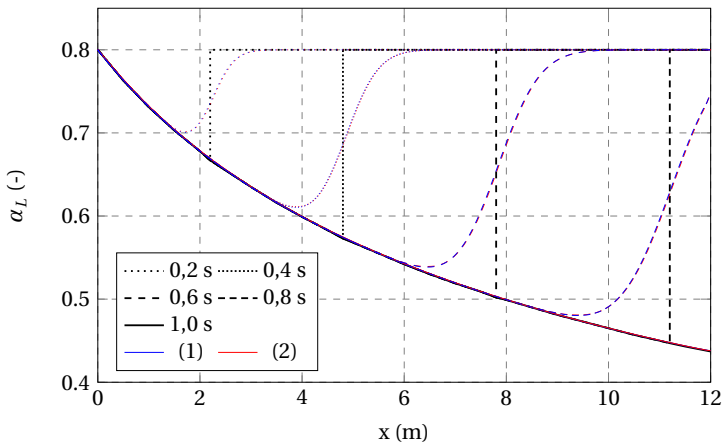
Por fim, avaliou-se a implementação do esquema temporal Crank-Nicolson *versus* o esquema temporal de Euler totalmente implícito, am-

bos aliados ao esquema TVD Van Leer para os termos advectivos. Os resultados obtidos são apresentados pela Figura 4.10. Observa-se que, como esperado, a implementação da formulação temporal de Crank-Nicolson melhora a captura do gradiente presente na solução analítica. Adicionalmente, testou-se o desempenho dos diferentes esquemas TVD aliados a formulação temporal de Crank-Nicolson na captura do gradiente da solução analítica. Novamente, observou-se comportamento qualitativamente semelhante, conforme observado na Figura 4.11.

**Figura 4.6** – Problema da Torneira d'Água – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica – Esquema *Upwind*/Euler (U/E) – Formulação (1) × Formulação (2)

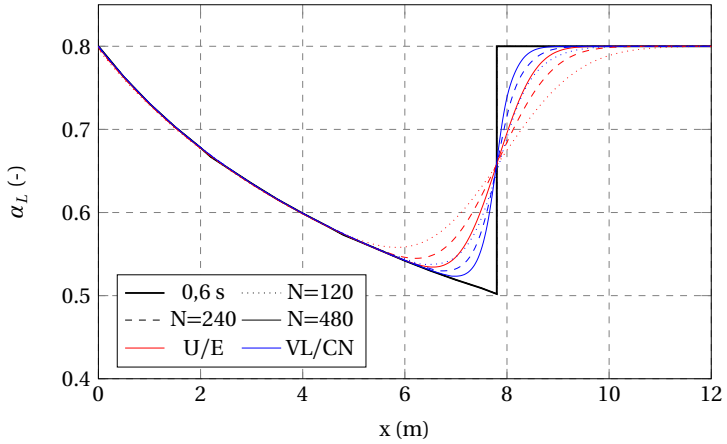


**Figura 4.7** – Problema da Torneira d'Água – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica – Esquema TVD Van Leer/Euler (VL/E) – Formulação (1) × Formulação (2)



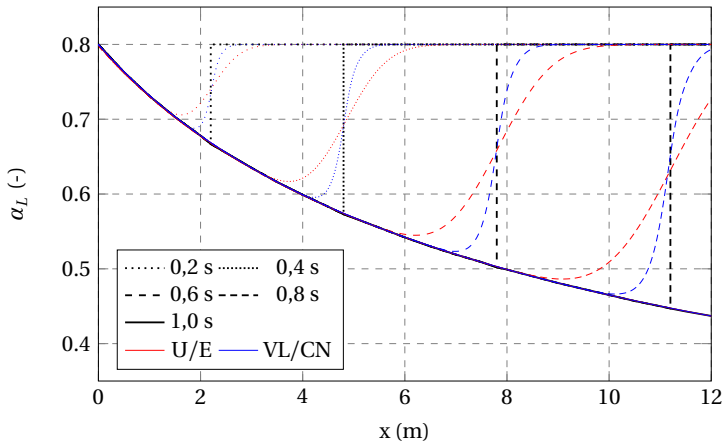
Fonte: elaborado pelo autor

**Figura 4.8** – Problema da Torneira d'Água – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica – Esquemas *Upwind*/Euler (U/E) × TVD Van Leer/Crank-Nicolson (VL/CN) – Refino de Malha



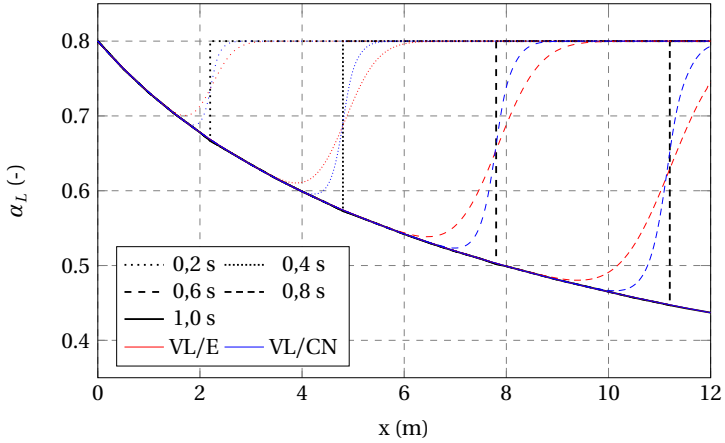
Fonte: elaborado pelo autor

**Figura 4.9** – Problema da Torneira d'Água – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica – Esquemas *Upwind*/Euler (U/E) × TVD Van Leer/Crank-Nicolson (VL/CN)



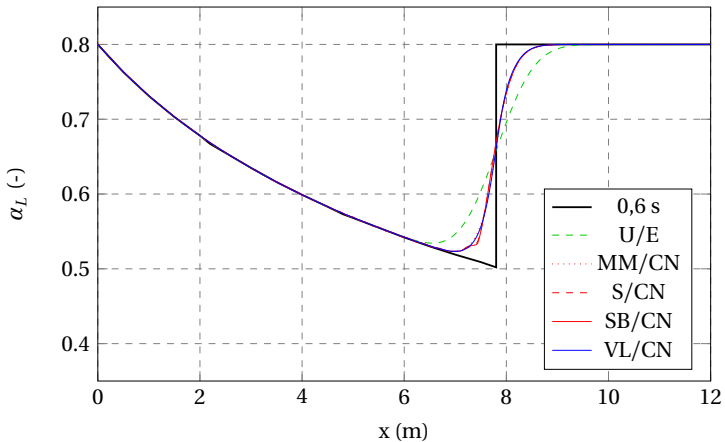
Fonte: elaborado pelo autor

**Figura 4.10** – Problema da Torneira d'Água – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica – Esquemas TVD Van Leer/Euler (VL/E) × TVD Van Leer/Crank-Nicolson (VL/CN)



Fonte: elaborado pelo autor

**Figura 4.11** – Problema da Torneira d'Água – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica – Esquemas *Upwind*/Euler (U/E) × TVD/Crank-Nicolson (TVD/CN)

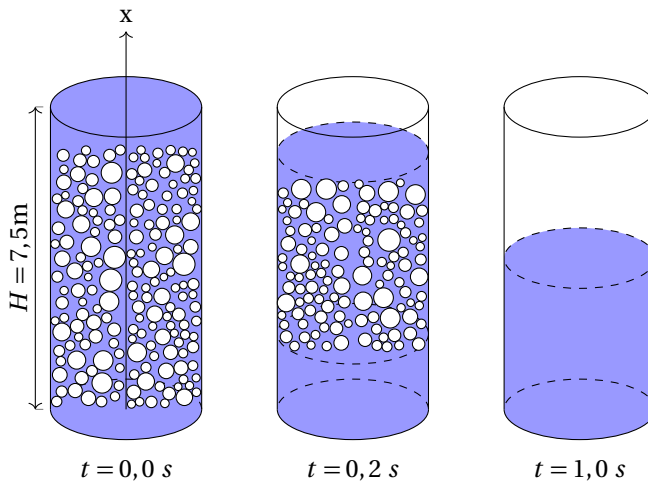


Fonte: elaborado pelo autor

### 4.3 Problema da Decantação

O problema da decantação consiste em uma coluna preenchida com água e ar dispersos homogeneamente e em igual fração volumétrica inicial. Devido a ação da gravidade, que gerará um gradiente de pressão vertical e o conseqüente empuxo sobre a fase menos densa, ocorre a separação das fases, cuja condição estratificada é alcançada no estado estacionário. Este teste permite avaliar a interação entre as forças peso e de pressão, além de verificar o comportamento do modelo em regiões com fração elevada de alguma das fases ( $\alpha_k \rightarrow 1$  e  $\alpha_j \rightarrow 0$ ). A Figura 4.12 apresenta uma ilustração do problema da decantação.

**Figura 4.12** – Teste de Decantação



Fonte: elaborado pelo autor

O modelo matemático do problema da decantação consiste nas equações de balanço de massa e quantidade de movimento para cada a fase, representadas por ( $k=L,G$ ),

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k \alpha_k u_k) = 0 \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k u_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k \alpha_k u_k u_k) = -\alpha_k \frac{\partial p}{\partial x} - \rho_k \alpha_k g \quad (4.12)$$

O domínio do problema consiste numa coluna de 7,5 metros de comprimento, ocupada inicialmente por água ( $\rho_L=1000 \text{ kg/m}^3$ ) e ar ( $M_{ar}=28,97 \text{ g/mol}$ ) à temperatura ambiente ( $T=20 \text{ }^\circ\text{C}$ ), sob ação da gravidade ( $g=9,81 \text{ m/s}^2$ ).

As condições iniciais das fases são frações volumétrica idênticas e velocidades nulas, conforme as relações dadas por,

$$\alpha_L(\forall x, t=0) = 0,5 \quad \alpha_G(\forall x, t=0) = 0,5 \quad (4.13)$$

$$u_L(\forall x, t=0) = 0 \text{ m/s} \quad u_G(\forall x, t=0) = 0 \text{ m/s} \quad (4.14)$$

As condições de contorno são de velocidades nulas nas faces e dadas por,

$$u_L(x=0, \forall t) = 0 \text{ m/s} \quad u_G(x=0, \forall t) = 0 \text{ m/s} \quad (4.15)$$

$$u_L(x=L, \forall t) = 0 \text{ m/s} \quad u_G(x=L, \forall t) = 0 \text{ m/s} \quad (4.16)$$

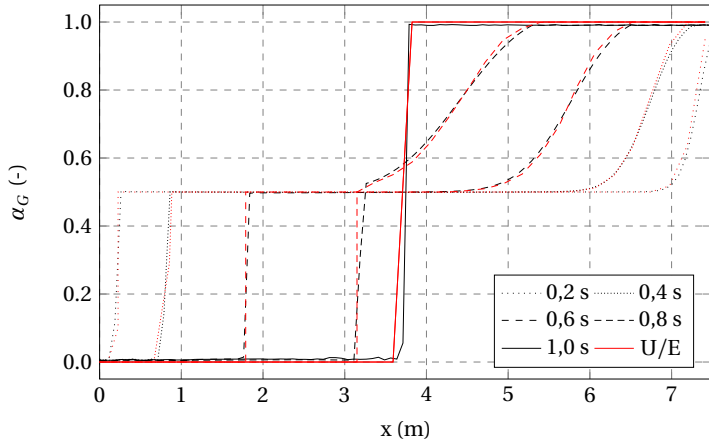
note que não são necessárias condições de contorno para as frações volumétricas, uma vez que o transporte desta variável é nulo nestas faces.

Inicialmente adotou-se a formulação apresentada por Paillère, Corre e Garcia Cascales (2003), ou seja, um esquema *Upwind* para os termos advectivos e formulação temporal de Euler totalmente implícito, com malha fixa de  $N=100$  volumes. Esse procedimento foi realizado a fim de validar a solução numérica obtida neste trabalho, pois assim pode ser diretamente comparada com os resultados obtidos por Paillère, Corre e Garcia Cascales (2003), conforme a Figura 4.13.

Após validar a solução obtida com a formulação apresentada por Paillère, Corre e Garcia Cascales (2003), procedeu-se com o refino de malha com os esquemas TVD Van Leer para os termos advectivos e formulação temporal de Crank-Nicolson *versus* esquema *Upwind* para os termos advectivos e formulação temporal de Euler totalmente implícito, conforme a Figura 4.14 para o tempo de 0,8 segundos. Observa-se que a solução com esquemas de alta ordem apresentou uma solução com muito menor dissipação numérica, quando comparada com a solução obtida por Paillère, Corre e Garcia Cascales (2003).

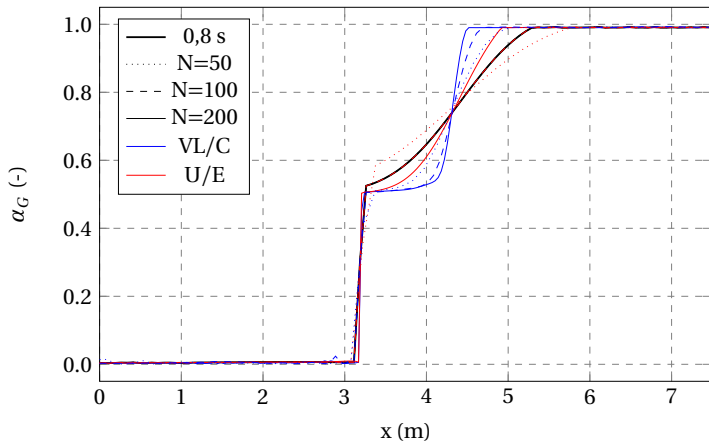


**Figura 4.13** – Problema da Decantação – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica da Fase Gasosa – Esquemas *Upwind*/Euler (U/E) × Resultados da Literatura (U/E) × Resultados da Literatura



Fonte: elaborado pelo autor

**Figura 4.14** – Problema da Decantação – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica da Fase Gasosa Frente ao Refino de Malha – Esquemas *Upwind*/Euler (U/E) × Esquema TVD Van Leer/Euler (VL/E) –  $t=0,8$  s



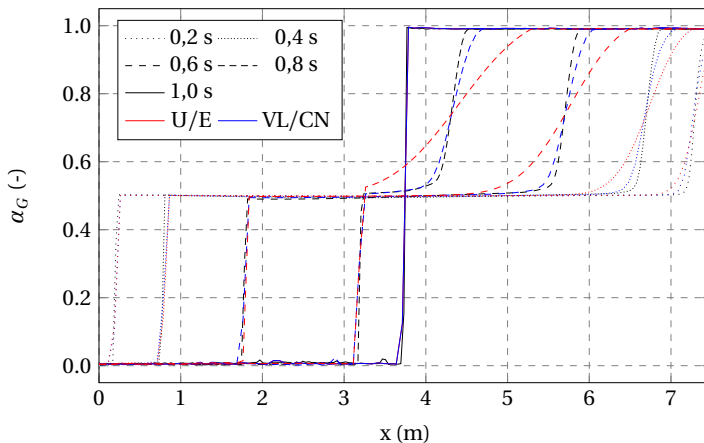
Fonte: elaborado pelo autor

A partir daqui, será considerada como referência a solução obtida pelo esquema TVD Van Leer para os termos advectivos e formulação temporal de Crank-Nicolson para a malha mais refinada ( $N=200$  volumes). A Figura 4.15 apresenta um comparativo das soluções transientes obtidas pelos esquemas TVD Van Leer para os termos advectivos e formulação temporal de Crank-Nicolson *versus* o esquema *Upwind* para os termos advectivos e formulação temporal de Euler totalmente implícito.

Posteriormente, avaliou-se a solução obtida pelo esquema TVD Van Leer para os termos advectivos e formulação temporal de Crank-Nicolson frente a solução obtida pelo obtida pela formulação temporal de Euler totalmente implícito, para todo o transiente, conforme a Figura 4.16. A solução obtida com a formulação temporal de Crank-Nicolson apresentou uma menor dissipação dos gradientes.

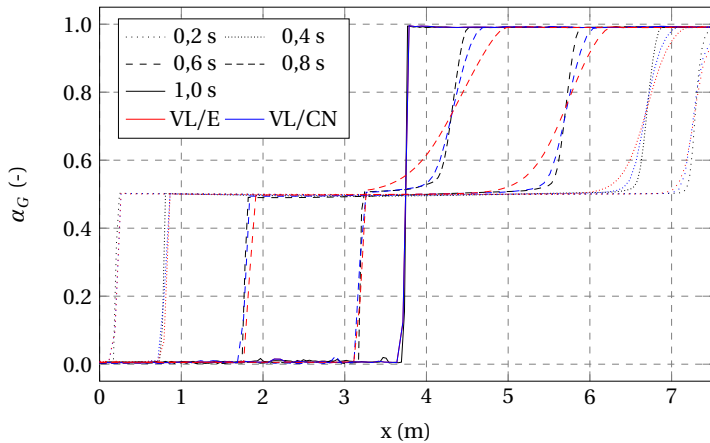
Por fim, foi avaliado se a solução com formulação temporal de Euler e número de Courant mais baixo ( $C=0,1$ ) converge para a solução da formulação temporal de Crank-Nicolson com um número de Courant mais elevado ( $C=0,5$ ), o que ocorreu na prática conforme a Figura 4.17.

**Figura 4.15** – Problema da Decantação – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica da Fase Gasosa – Esquemas TVD Van Leer/Crank-Nicolson (VL/CN)  $\times$  *Upwind*/Euler (U/E)



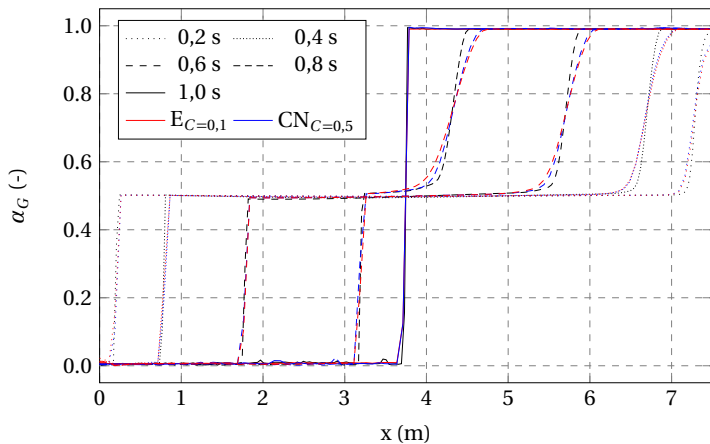
Fonte: elaborado pelo autor

**Figura 4.16** – Problema da Decantação – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica da Fase Gasosa – Esquemas TVD Van Leer/Crank-Nicolson (VL/CN)  $\times$  Van Leer/Euler (VL/E)



Fonte: elaborado pelo autor

**Figura 4.17** – Problema da Decantação – Comparação dos Campos de Fração Volumétrica da Fase Gasosa – Esquemas TVD Van Leer/Crank-Nicolson (VL/CN) com  $C=0,5$   $\times$  Van Leer/Euler (VL/E) com  $C=0,1$



Fonte: elaborado pelo autor



CAPÍTULO

# 5

## **ESCOAMENTO VERTICAL LÍQUIDO-GÁS DISPERSO COM TRANSFERÊNCIA DE MASSA INTERFACIAL**

Neste capítulo, o modelo numérico desenvolvido neste trabalho será utilizado para a simulação de um escoamento bifásico líquido-gás disperso em uma coluna de bolhas, incluindo os efeitos da transferência de massa interfacial. Essa aplicação visa validar a implementação do módulo de transferência de massa aplicado ao modelo de dois-fluidos, tendo em vista a disponibilidade de dados experimentais e numéricos na literatura, para este problema.

Na primeira seção é apresentada uma breve introdução às colunas de bolhas e também o aparato experimental utilizado por Deckwer, Adler e Zaidi (1978) para a obtenção dos resultados experimentais que serão utilizados para a validação do modelo numérico. Vale ressaltar que os dados de fração volumétrica e composição estão disponíveis em diversas posições axiais do domínio e conforme Rzehak e Krepper (2016), o trabalho de Deckwer, Adler e Zaidi (1978) é o único trabalho da literatura que disponibiliza todos os dados necessários para a simulação e validação da

transferência de massa em um escoamento multifásico.

Na segunda seção, os termos de transferência interfacial do modelo de dois-fluidos unidimensional são particularizados para um escoamento líquido-gás disperso vertical, cada qual com sua respectiva discretização pelo método dos volumes finitos. Além disso, um procedimento de determinação das condições de entradas é implementado, em oposição ao procedimento realizado por Rzehak e Krepper (2016) em seu estudo numérico o que, como será visto, representa de forma mais adequada os campos de fração volumétrica na entrada da coluna.

Na terceira seção são apresentados os resultados obtidos por este trabalho, com ótima concordância em relação aos resultados experimentais de Deckwer, Adler e Zaidi (1978), e com especial atenção à melhor adesão do modelo proposto neste trabalho quando comparado com os resultados obtidos por Rzehak e Krepper (2016).

## 5.1 Aparato e Condições Experimentais

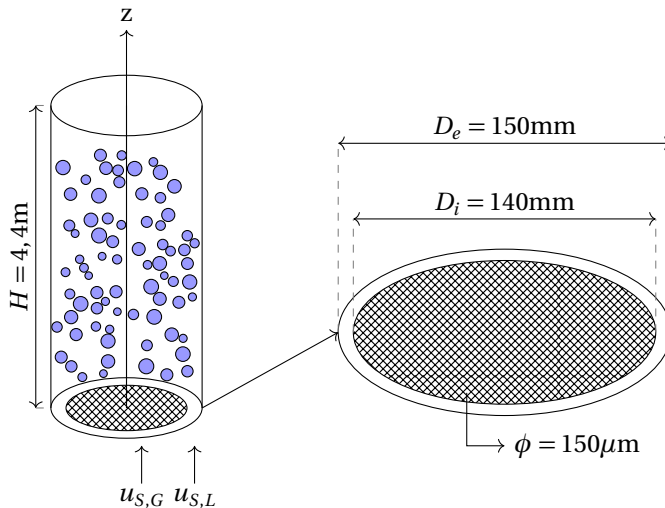
As colunas de bolhas podem ser descritas, de forma sucinta, como uma coluna carregada com líquido equipada com um aerador na base, por onde verte a fase gasosa na forma de pequenas bolhas. As colunas de bolhas são equipamentos caracterizados pelo contato íntimo gás-líquido, que resultam em elevadas taxas de transferência interfacial de calor, massa e quantidade de movimento.

Os autores Deckwer, Adler e Zaidi (1978) realizaram um estudo de absorção e desabsorção de  $\text{CO}_2$  em um escoamento vertical líquido-gás disperso em uma coluna de bolhas, considerando os regimes cocorrente e contracorrente. Foram avaliadas duas colunas denominadas BC I e BC II, de altura 7,2 e 4,4 metros e diâmetros internos de 20 e 15 centímetros, respectivamente. A coluna BC II possui altura de 4,4 metros de altura e 150 milímetros de diâmetro interno. O gás entra por meio de um aerador do tipo prato de vidro de sinterizado, um disco de 140 milímetros de diâmetro. O aerador possui poros de dimensão 150 micrômetros. O líquido entra por meio de um anel externo ao aerador, com diâmetro externo de 150 milímetros. Um esquema da coluna de bolhas é apresentado pela Figura 5.1, onde  $H$  é a altura da coluna e  $D_e$  e  $D_i$  são os diâmetros externo e interno do anel de alimentação da corrente líquida e  $\phi$  é o diâmetro

do aerador de alimentação da fase gasosa. A temperatura da coluna foi mantida constante a 14 graus Celsius.

Posteriormente, Rzehak e Krepper (2016) utilizaram os dados experimentais fornecidos por Deckwer, Adler e Zaidi (1978) para a modelagem e simulação a transferência de massa na coluna de bolhas. Foram considerados os resultados experimentais obtidos a partir da coluna BC II. Os autores reiteraram que todos os trabalhos até sua publicação comparam resultados de simulação com dados experimentais somente para quantidades integrais (ou médias) de fração volumétrica de gás, composição ou valores de coeficiente de transferência de massa  $k_L a$ . Isso se deve à dificuldade intrínseca de medição dos valores de fração volumétrica e composição das fases em diferentes posições na coluna. Além disso, outros dados são necessários para o fechamento das equações do modelo de dois-fluidos, como por exemplo o diâmetro das bolhas. De acordo com Rzehak e Krepper (2016), foi realizada uma pesquisa nos bancos de dados *Web of Science* e *Scopus*, e apenas a publicação de Deckwer, Adler e Zaidi (1978) disponibilizava todos os dados necessários para a simulação e validação dos resultados a partir de dados em diferentes posições axiais.

**Figura 5.1** – Esquema do Aparato Experimental – Coluna de Bolhas



Fonte: elaborado pelo autor e baseado no aparato experimental de Deckwer, Adler e Zaidi (1978).

## 5.2 Modelo Matemático

As equações a seguir representam o modelo de dois-fluidos unidimensional particularizado para as equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécies químicas e que permite modelar o escoamento com transferência de massa interfacial em uma coluna de bolhas a partir de uma abordagem 1D. O referido modelo é dado por,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k \alpha_k u_k) = \Gamma_k \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k u_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k \alpha_k u_k u_k) = \mathcal{M}_k^p + \mathcal{M}_k^p + \mathcal{M}_k^d + \mathcal{M}_k^w + \mathcal{M}_k^\Gamma + \mathcal{M}_k^{p_i} \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k Y_k^i) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k \alpha_k u_k Y_k^i) = \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_k J_k^i) + \Gamma_k^i \quad (5.3)$$

Quanto á transferência de massa interfacial, será considerado que a transferência de massa interfacial deve-se apenas à transferência do  $\text{CO}_2$ . Dessa forma, o termo fonte da equação de conservação das espécies é igual, em módulo, ao termo fonte da equação de conservação da massa das fases. Além disso, a vazão mássica interfacial será dada pelo produto de um fluxo de massa e uma área específica interfaciais, conforme,

$$\Gamma_k^i = \Gamma_k \quad \Gamma_k = \Gamma_k'' a_I \quad (5.4)$$

Além disso, considerando um problema bifásico, o fluxo de massa para uma fase é igual em módulo e com sinal oposto ao fluxo para a outra fase. O fluxo de massa será descrito por uma resistência referente ao lado líquido, portanto,

$$\Gamma_G'' = -\Gamma_L'' \quad \Gamma_L'' = k_L(\text{He} \rho_G Y_G - \rho_L Y_L) \quad (5.5)$$

Quanto aos termos na equação de conservação da quantidade de movimento, neste trabalho foi considerado que as fases compartilham um único campo de pressão ( $p_k = p_{k,I} = p$ ) e que o atrito com a parede é desprezível frente aos demais termos, por serem as velocidades superficiais relativamente baixas. Os demais termos permanecem como na formulação original, repetidas aqui por conveniência e dados por,

$$\mathcal{M}_k^p = -\alpha_k \frac{\partial p}{\partial x} \quad \mathcal{M}_k^\rho = -\rho_k \alpha_k g \quad (5.6)$$



$$\mathcal{M}_k^d = F_{k,I} a_I \qquad \mathcal{M}_k^w = 0 \qquad (5.7)$$

$$\mathcal{M}_k^\Gamma = \Gamma_k (u_j - u_k) \qquad \mathcal{M}_k^{P_I} = 0 \qquad (5.8)$$

A próxima etapa é a particularização dos termos de transferência interfacial para coluna de bolhas, dadas pelas relações de fechamento.

## 5.2.1 Relações de Fechamento

As relações de fechamento permitem descrever os termos de transferência de massa interfacial através de modelos matemáticos contendo as variáveis conhecidas na formulação do problema. A área interfacial específica é aquela sob a qual os fenômenos de transferência interfacial ocorrem e pode dada por,

$$a_I = \frac{\text{área superficial das bolhas em um volume}}{\text{volume}} = \frac{6\alpha_G}{d_b} \qquad (5.9)$$

O coeficiente de transferência de massa interfacial  $k_L$  pode obtido a partir de uma correlação válida em função de números adimensionais, válida para uma partícula esférica conforme a Equação 5.10

$$\text{Sh} = \frac{k_L d_B}{D_L^i} = f(\text{Re}, \text{Sc}) \qquad (5.10)$$

onde Sh é o número de Sherwood,  $k_L$  é o coeficiente de transferência de massa do lado líquido,  $d_B$  é o diâmetro das bolhas,  $D_L^i$  é a difusividade do componente ‘i’ na fase líquida, Re é o número de Reynolds e Sc é o número de Schmidt.

Neste trabalho, o coeficiente de troca de massa interfacial será calculado através da Equação 5.11, proposta por Polyaniin et al. (2011) e dada por,

$$\text{Sh} = 1,2 + \sqrt{0,64 + 1,273 \left(1 - \frac{2,828}{\sqrt{\text{Re}}}\right) \text{Pe}} \qquad (5.11)$$

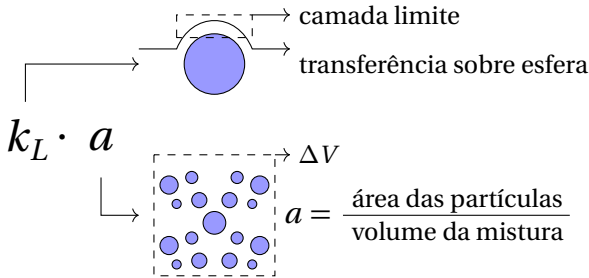
O coeficiente de transferência de massa em relação ao lado líquido é dado e função das propriedades da fase líquida. O número de Reynolds deve ser calculado com a velocidade relativa entre as fases. As demais relações são dadas por,

$$\text{Re} = \frac{\rho_L |u_G - u_L| d_B}{\mu_L} \qquad \text{Sc} = \frac{\mu_L}{\rho_L D_L^i} \qquad (5.12)$$

$$\text{Pe} = \text{Re} \cdot \text{Sc} \qquad k_L = \text{Sh} \frac{D_L^i}{d_B} \qquad (5.13)$$

A Equação 5.11 origina a partir da solução obtida por Lochiel e Calderbank (1964), aplicado o método de assíntotas proposto por Polyaniin e Dil'man (1990) para elevados números de Péclet, que é o caso deste trabalho. Vale ressaltar que a correlação dada pela Equação 5.11 é válida para bolhas individuais; entretanto, no caso de uma coleção de bolhas, a extrapolação da fenomenologia dos processos de transferência interfacial será feita a partir da definição da densidade de área interfacial, conforme apresentado pela Equação 5.9. Dessa aforma, é possível sintetizar o termo de transferência interfacial  $k_L a$  conforme a ilustração dada pela Figura 5.2.

**Figura 5.2** – Composição do Coeficiente de Transferência de Massa Interfacial  $k_L a$



Fonte: elaborado pelo autor

O termo de transferência de massa pode ser descrito por,

$$\Gamma_L = k_L \frac{6\alpha_G}{d_B} (\text{He} \rho_G Y_G - \rho_L Y_L) \qquad (5.14)$$

Já considerando a transferência de quantidade de movimento interfacial, a relação de fechamento para bolhas é dada por,

$$\mathcal{M}_k^d = -\frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_d}{d_B} \rho_L |u_k - u_j| (u_k - u_j) \qquad (5.15)$$

Onde o coeficiente de arrasto sobre uma bolha pode ser dado pela correlação de Ishii e Zuber (1979) e dada por,

$$C_D = \text{máx}[C_D^B, \min(C_D^T, C_D^E)] \quad (5.16)$$

e as demais relações são dadas por,

$$C_D^B = \frac{24}{\text{Re}}(1 + 0.1\text{Re}^{0,75}) \quad C_D^T = \frac{2}{3}\sqrt{\text{Eo}} \quad (5.17)$$

$$C_D^E = \frac{8}{3} \quad \text{Eo} = \frac{(\rho_L - \rho_G)gd_B^2}{\sigma_B} \quad (5.18)$$

onde  $C_D^B$ ,  $C_D^T$  e  $C_D^E$  são os coeficientes de arraste para as formas de bolha esférica, touca e elipse. Eo é o número de Eötvos e  $\sigma_B$  é a tensão superficial.

O modelo final da dinâmica das colunas de bolha com transferência de massa interfacial é dado por,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_L \alpha_L) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_L \alpha_L u_L) = 6k_L \frac{\alpha_G}{d_B} (\text{He} \rho_G Y_G - \rho_L Y_L) \quad (5.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_G \alpha_G) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_G \alpha_G u_G) = -6k_L \frac{\alpha_G}{d_B} (\text{He} \rho_G Y_G - \rho_L Y_L) \quad (5.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_L \alpha_L u_L) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_L \alpha_L u_L u_L) = & -\alpha_L \frac{\partial p}{\partial x} - \rho_L \alpha_L g \\ & - \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_G}{d_B} \rho_L |u_L - u_G| (u_L - u_G) \end{aligned} \quad (5.21)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_G \alpha_G u_G) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_G \alpha_G u_G u_G) = & -\alpha_k \frac{\partial p}{\partial x} - \rho_G \alpha_G g \\ & - \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_G}{d_B} \rho_L |u_G - u_L| (u_G - u_L) \end{aligned} \quad (5.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_L \alpha_L Y_L) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_L \alpha_L u_L Y_L) = 6k_L \frac{\alpha_G}{d_B} (\text{He} \rho_G Y_G - \rho_L Y_L) \quad (5.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_G \alpha_G Y_G) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_G \alpha_G u_G Y_G) = -6k_L \frac{\alpha_G}{d_B} (\text{He} \rho_G Y_G - \rho_L Y_L) \quad (5.24)$$

## 5.2.2 Integração dos Termos de Transferência Interfacial

O termo particularizado da equação de conservação da massa da fase gasosa pode ser dado por,

$$\Phi = -\Gamma_L = -6k_L \frac{\alpha_G}{d_B} (\text{He} \rho_G Y_G - \rho_L Y_L) \quad (5.25)$$

Integrando o referido no volume, resulta na relação dada por,

$$\int_V -\Gamma_L dV = \left[ -6k_L \frac{\alpha_G}{d_B} (\text{He} \rho_G Y_G - \rho_L Y_L) \right]_P \Delta V \quad (5.26)$$

É possível separar o termo integrado em suas parcelas implícita  $S_P^{\alpha_G}$  e explícita  $S_C^{\alpha_G}$  e lembrando que toda a equação foi dividida por  $\theta$  devido à formulação temporal, resultando em,

$$S_P^{\alpha_G} = \frac{1}{\theta} \left[ 6 \frac{k_L}{d_B} \text{He} (\rho_G)_P^* (Y_G)_P^* \right] \Delta V \quad (5.27)$$

$$S_C^{\alpha_G} = \frac{1}{\theta} \left[ 6 \frac{k_L}{d_B} (\rho_L)_P (Y_L)_P^* \right] \Delta V \quad (5.28)$$

Note que o termo particularizado da equação de conservação das espécies na fase líquida é o mesmo que o de conservação da massa global da fase líquida, portanto o valor integral será o mesmo e a integração aqui será omitida para evitar repetição. Para a conservação das espécies na fase gasosa, é possível separar nas partes implícita  $S_P^{Y_i}$  e explícita  $S_C^{Y_i}$  do termo fonte conforme,

$$S_P^{Y_G} = \frac{1}{\theta} \left[ k_L \frac{6(\alpha_G)_P^*}{d_B} \text{He}(\rho_G)_P^* \right] \Delta V \quad (5.29)$$

$$S_C^{Y_G} = \frac{1}{\theta} \left[ k_L (\rho_L)_P (Y_L)_P^* \right] \Delta V \quad (5.30)$$

Para a conservação das espécies químicas na fase líquida, o procedimento é análogo e será omitido aqui, sendo os coeficientes dados por,

$$S_P^{Y_L} = \frac{1}{\theta} \left[ k_L \frac{6(\alpha_G)_P^*}{d_B} (\rho_L)_P \right] \Delta V \quad (5.31)$$

$$S_C^{Y_L} = \frac{1}{\theta} \left[ k_L \frac{6(\alpha_G)_P^*}{d_B} \text{He}(\rho_G)_P^* (Y_G)_P^* \right] \Delta V \quad (5.32)$$

Já em relação à conservação quantidade de movimento, o termo fonte particularizado será dado por,

$$\Phi = -\rho_k \alpha_k g + F_{k,I} a_I \quad (5.33)$$

Integrando termo a termo, atentando-se ao fato que os volumes de conservação da quantidade de movimento estão deslocados devido ao arranjo desencontrado, resulta para força gravitacional,

$$\int_V -\rho_k \alpha_k g dV = [-\rho_k \alpha_k g]_e \Delta V = -M_e g \quad (5.34)$$

onde se optou descrever em função da massa do volume  $M_e$  por ela estar prontamente disponível, devido ao cálculo no termo transiente.

Posteriormente, integrando o termo de arraste, resulta em,

$$\int_V F_{k,I} a_I dV = \left[ \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_G}{d_B} \rho_L |u_j - u_k| (u_j - u_k) \right]_e \Delta V \quad (5.35)$$

Reorganizando os termos em parte implícita  $S_P^{u_k}$  e parte explícita  $S_C^{u_k}$  e lembrando que toda a equação foi dividida por  $\theta$  devido à formulação temporal, resulta em,

$$S_P^{u_k} = \frac{1}{\theta} \left[ \frac{3}{4} C_D \frac{(\alpha_G)_e^*}{d_B} (\rho_L)_e |(u_j)_e^* - (u_k)_e^*| \right] \Delta V \quad (5.36)$$

$$S_C^{u_k} = \frac{1}{\theta} \left[ \frac{3}{4} C_D \frac{(\alpha_G)_e^*}{d_B} \rho_L |(u_j)_e^* - (u_k)_e^*| (u_j)_e^* \Delta V - M_e g \right] \quad (5.37)$$

onde a fração volumétrica nas faces pode ser calculada por uma média simples entre os valores dos volumes adjacentes, dado por,

$$(\alpha_G)_e = \frac{(\alpha_G)_P + (\alpha_G)_E}{2} \quad (5.38)$$

### 5.2.3 Determinação das Condições de Entrada

Em relação às condições de contorno na entrada, a corrente líquida apresenta-se livre de CO<sub>2</sub> dissolvido ( $Y_L^{CO_2} = 0$ ), enquanto a corrente gasosa é composta por ar e CO<sub>2</sub> em várias composições. O diâmetro médio das bolhas fornecido por Deckwer, Adler e Zaidi (1978) é de 2,86 milímetros. As demais condições experimentais na entrada encontram-se na Tabela 5.1.

**Tabela 5.1** – Condições Experimentais de Entrada na Simulação de Coluna de Bolhas

Exp.	$u_{s,L}^{in}$ (cm/s)	$u_{s,G}^{in}$ (cm/s)	$y_G^{CO_2,in}$ (-)	$p^{out}$ (kPa)
15	4,72	1,64	0,766	102,0
16	4,72	2,75	0,835	102,7
17	4,72	3,42	0,673	103,9
18	4,72	4,01	0,560	107,2
19	4,72	4,63	0,478	109,6
20	4,72	5,16	0,425	110,7

Fonte: Deckwer, Adler e Zaidi (1978)

Entretanto, as condições de entrada apresentadas na Tabela 5.1 não são suficientes para a simulação no modelo de dois-fluidos, uma vez que são necessários os dados de fração volumétrica e velocidades das fases. Os autores Rzehak e Krepper (2016) determinam a fração volumétrica

da fase gasosa na entrada através da extrapolação dos resultados experimentais de Deckwer, Adler e Zaidi (1978). Esse procedimento, porém, resulta na oscilação das variáveis no primeiro volume de controle, devido ao desbalanço das velocidades de entrada  $u_w$  e de saída  $u_e$  resultante das equações. Os autores Rzehak e Krepper (2016) notaram a ocorrência de tais oscilações, porém não apresentaram nenhuma discussão e tampouco resolveram o problema.

Neste trabalho propõe-se um tratamento mais adequado da condição de contorno na entrada do domínio, de forma que a combinação de velocidades e frações volumétricas calculadas na condição de contorno conservem a massa e quantidade de movimento. As frações volumétricas e velocidades de entrada serão calculadas a partir da solução das equações de conservação da quantidade de movimento, negligenciando os termos temporal e advectivo, são,

$$-\alpha_G \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{3}{4} \rho_L C_D \frac{\alpha_G}{d_B} |u_G - u_L| (u_L - u_G) - \rho_G \alpha_G g = 0 \quad (5.39)$$

$$-\alpha_L \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{3}{4} \rho_L C_D \frac{\alpha_G}{d_B} |u_G - u_L| (u_G - u_L) - \rho_L \alpha_L g = 0 \quad (5.40)$$

Esse procedimento baseia-se na hipótese de equilíbrio mecânico das fases na entrada, isto é, considera-se que a velocidade relativa na entrada da coluna é igual a velocidade terminal. Na ausência de modelos específicos para a região de formação de bolhas, a hipótese de equilíbrio mecânico se apresenta como a mais adequada.

É possível eliminar o termo de pressão dividindo cada equação por sua respectiva fração volumétrica e subtraindo a Equação 5.39 da Equação 5.40, o que resulta na Equação 5.41.

$$\frac{3}{4} \rho_L C_D \frac{\alpha_G}{d_B} |u_G - u_L| (u_L - u_G) \left( \frac{1}{\alpha_G} + \frac{1}{\alpha_L} \right) - (\rho_G - \rho_L) g = 0 \quad (5.41)$$

A solução da Equação 5.41 permite obter as frações volumétricas e velocidades de equilíbrio na entrada da coluna. Neste trabalho foi utilizada a ferramenta *Solver* do Excel, devido a sua fácil e rápida implementação. Os resultados são apresentados na Tabela 5.2. Adicionalmente são

apresentados os dados de fração mássica de  $\text{CO}_2$  da fase gasosa na entrada da coluna, que são necessários nas equações de conservação das espécies químicas.

**Tabela 5.2** – Condições Numéricas de Entrada na Simulação de Coluna de Bolhas

Exp.	$\alpha_L^{in}$ (-)	$\alpha_G^{in}$ (-)	$u_L^{in}$ (cm/s)	$u_G^{in}$ (cm/s)	$Y_G^{\text{CO}_2}$ (-)
15	0,94029	0,05971	5,0197	27,4662	0,83260
16	0,89889	0,10111	5,2509	27,1974	0,88491
17	0,87351	0,12649	5,4035	27,0385	0,75770
18	0,85093	0,14907	5,5468	26,9009	0,65914
19	0,82697	0,17303	5,7076	26,7591	0,58182
20	0,80631	0,19369	5,8538	26,6408	0,52897

Fonte: elaborado pelo autor a partir de dados obtidos por Deckwer, Adler e Zaidi (1978)

De posse dos dados de entrada da coluna de bolhas será possível realizar a simulação da dinâmica da transferência de massa.

### 5.3 Solução em Regime Permanente e Comparação com Dados da Literatura

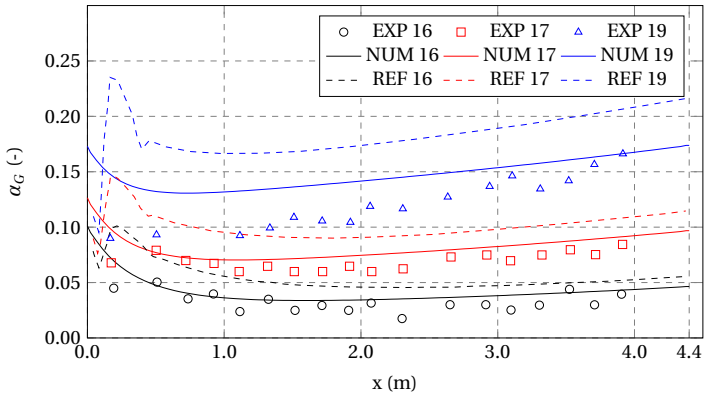
Nesta seção, todos os experimentos de absorção de  $\text{CO}_2$  em cocorrente estudados pela coluna BC II de Deckwer, Adler e Zaidi (1978) serão simulados para a obtenção da solução em regime permanente e os resultados obtidos serão comparados com os experimentais apresentados por estes autores e também com os dados numéricos simulados por Rzehak e Krepper (2016), obtidos a partir de um modelo 2D axissimétrico.

Para todos os resultados apresentados abaixo, ‘NUM’ refere-se aos resultados numéricos obtidos neste trabalho, ‘EXP’ aos resultados experimentais obtidos por Deckwer, Adler e Zaidi (1978) e ‘REF’ aos resultados numéricos obtidos por Rzehak e Krepper (2016). Os resultados de fração volumétrica e fração molar de  $\text{CO}_2$  na fase gasosa são apresentados pelas Figuras 5.3 e 5.4, respectivamente. Observa-se uma boa concordância dos resultados obtidos neste trabalho com os resultados experimentais e,



certamente, melhor concordância que os resultados de Rzehak e Krepper (2016). Um primeiro ponto a ser tratado é a incompatibilidade dos dados numéricos e experimentais de fração volumétrica da fase gasosa para o experimento 19. Uma possível explicação para tal comportamento é que ocorra coalescência de bolhas na região próxima ao aerador, devido às elevadas velocidades superficiais da fase gasosa. As bolhas formadas de maior diâmetro possuem velocidade terminal superior às bolhas menores, resultando num decréscimo da fração volumétrica da fase naquela região. Embora os dados de fração volumétrica da fase gasosa não concordem bem com os resultados experimentais, os resultados para a fração molar de  $\text{CO}_2$  na fase gasosa parecem não ser afetados pela heterogeneidade do escoamento.

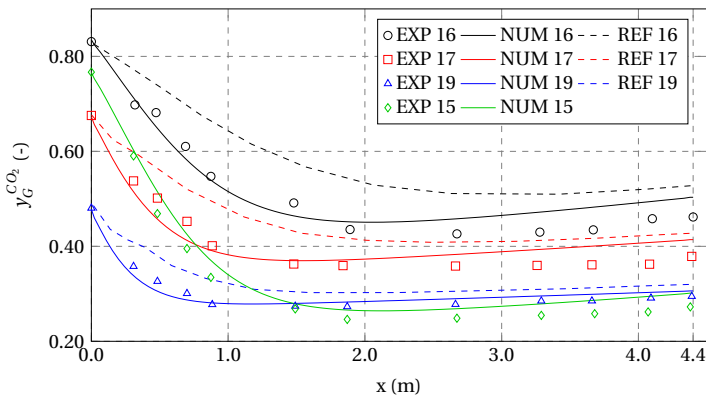
**Figura 5.3** – Coluna de Bolhas – Comparação dos Resultados de Fração Volumétrica da Fase Gasosa Obtidos com os Resultados Experimentais e Numéricos da Literatura – Experimentos 16, 17 e 19



Fonte: elaborado pelo autor

Em relação aos demais resultados, o decréscimo da fração volumétrica e da fração molar de  $\text{CO}_2$  na fase gasosa indica o processo de absorção pela fase líquida. A inversão do fluxo de massa, ou seja, o final da absorção e início da desabsorção é marcado por um ponto mínimo da fração molar de  $\text{CO}_2$  na fase gasosa. A partir desse ponto, a fração de gás aumenta devido a dois fenômenos: a desabsorção e expansão da

**Figura 5.4** – Coluna de Bolhas – Comparação dos Resultados de Fração Molar de  $\text{CO}_2$  da Fase Gasosa Obtidos com os Resultados Experimentais e Numéricos da Literatura – Experimentos 15, 16, 17 e 19



Fonte: elaborado pelo autor

fase gasosa devido ao gradiente de pressão. O primeiro efeito é observado através do acréscimo da fração molar de  $\text{CO}_2$  na fase gasosa, enquanto o segundo é observado através do decréscimo da massa específica do gás devido ao gradiente da pressão.

Ademais, os resultados de fração molar de  $\text{CO}_2$  na fase gasosa apresentaram uma subida acentuada a partir do início da desabsorção, marcada pelo ponto mínimo de fração molar de  $\text{CO}_2$ . O modelo proposto no cálculo do coeficiente de transferência de massa interfacial  $k_L$  não leva em conta o sentido da transferência de massa (absorção ou desabsorção), que deve ter alguma influência sobre o processo, tendo em vista que os dados experimentais indicam uma desabsorção menos acentuada que o verificado na simulação. Os autores Deckwer, Adler e Zaidi (1978) comentam em seu trabalho que os coeficientes  $k_L$  calculados para a desabsorção são muito inferiores aos coeficientes da absorção, embora não os apresente em seu trabalho original. Para efeitos de comparação, a Tabela 5.3 apresenta os resultados de fração molar de  $\text{CO}_2$  na fase gasosa na saída da coluna e para todos os experimentos. Todos os resultados apresentam desvios positivos de fração molar de  $\text{CO}_2$  na fase gasosa, indicando que a desabsorção ocorre de forma mais pronunciada na simulação em com-

paração ao observado experimentalmente. Além disso, observa-se boa concordância dos resultados numéricos quando comparados com os resultados experimentais de Deckwer, Adler e Zaidi (1978), e erros inferiores em relação aos obtidos por Rzehak e Krepper (2016).

**Tabela 5.3** – Coluna de Bolhas – Comparação dos Resultados de Fração Molar de CO<sub>2</sub> da Fase Gasosa Obtidos e dos Resultados Experimentais e Numéricos da Literatura – Saída da Coluna

Exp.	$y_G^{CO_2, NUM}$ [-]	$y_G^{CO_2, EXP}$ [-]	erro $NUM$ [%]	$y_G^{CO_2, REF}$ [-]	% erro $REF$ [%]
15	0,301	0,274	9,819	-	-
16	0,502	0,467	7,554	0,528	13,015
17	0,414	0,377	9,785	0,428	13,441
18	0,351	0,324	8,484	-	-
19	0,308	0,293	5,136	0,320	9,220
20	0,280	0,269	4,055	-	-

Fonte: elaborado pelo autor.

Para fins de comparação, a Tabela 5.4 apresenta os resultados de coeficiente de transferência de massa interfacial ' $k_L$ ' calculados neste trabalho através da correlação dada pela Equação 5.11, frente aos coeficientes obtidos por Deckwer, Adler e Zaidi (1978). Note que a razão dos coeficientes de transferência de massa é de aproximadamente 2. Um efeito direto disso é verificado ao utilizar o coeficiente de transferência de massa menor e dado por Deckwer, Adler e Zaidi (1978): a transferência de massa interfacial é menos intensa que o observado experimentalmente e os resultados de composição correlacionam mal. Esse efeito pode ser observado na Figura 5.4 com os dados obtidos por Rzehak e Krepper (2016), que observou uma melhor aderência dos resultados numéricos em relação aos dados experimentais, quando multiplicando o coeficiente de transferência de massa por um fator 2. Isso fortalece a ideia de que o coeficiente calculado neste trabalho é o mais correto na simulação da dinâmica de transferência de massa na coluna de bolhas.

Os resultados de velocidade superficial na saída da coluna para os diferentes experimentos são apresentados na Tabela 5.5. Observa-se boa concordância com os resultados experimentais, embora os resultados numéricos obtidos apresentem desvios sempre positivos, tendo em vista

**Tabela 5.4** – Coluna de Bolhas – Comparação dos Valores de  $k_L$  Determinados por Correlação e dos Valores Apresentados na Literatura

Exp.	$k_L^{NUM}$ ( $10^{-3}$ m/s)	$k_L^{EXP}$ ( $10^{-3}$ m/s)	$k_L^{NUM}/k_L^{EXP}$ (-)
15	0,361	0,202	1,790
16	0,360	0,213	1,688
17	0,356	0,177	2,006
18	0,352	0,182	1,931
19	0,348	0,165	2,107
20	0,345	0,175	1,969

Fonte: elaborado pelo autor.

que a desabsorção promove um aumento na fração volumétrica da fase gasosa. Essa desabsorção ocorre de forma mais acentuada que o previsto experimentalmente, resultando em maiores valores de fração volumétrica da fase gasosa na saída e consequentemente maiores valores de velocidade superficial do gás.

**Tabela 5.5** – Coluna de Bolhas – Comparação dos Resultados de Velocidade Superficial da Fase Gasosa Obtidos e dos Resultados Experimentais da Literatura – Saída da Coluna

Exp.	$u_{s,G}^{NUM}$ [cm/s]	$u_{s,G}^{EXP}$ [cm/s]	erro <sup>NUM</sup> [%]
15	0,77	0,75	3,12
16	1,28	1,20	6,51
17	2,64	2,49	6,17
18	3,73	3,55	5,09
19	4,74	4,59	3,29
20	5,55	5,42	2,32

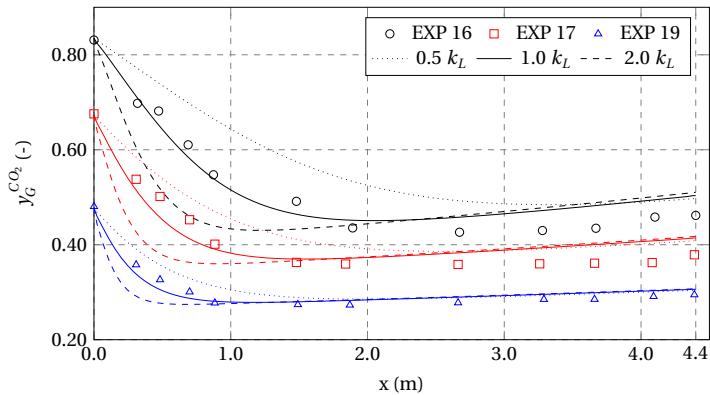
Fonte: elaborado pelo autor.

### 5.3.1 Influência do Parâmetro $k_L$

Nesta seção será realizado um estudo de influência do parâmetro coeficiente de transferência de massa interfacial  $k_L$  sobre os resultados

de fração volumétrica e fração molar de  $\text{CO}_2$  na fase gasosa, cujos resultados são apresentados pelas Figuras 5.5 e 5.6, respectivamente. O valor do coeficiente de transferência de massa interfacial  $k_L$  foi calculado pela Equação 5.11 e três fatores de multiplicação (0.5, 1.0 e 2.0) foram utilizados, a fim de verificar se os coeficientes  $k_L$  calculados eram condizentes com os dados experimentais de Deckwer, Adler e Zaidi (1978).

**Figura 5.5** – Coluna de Bolhas – Comparação dos Resultados de Fração Molar de  $\text{CO}_2$  da Fase Gasosa Obtidos com Diferentes Valores de  $k_L$  – Experimentos 16, 17 e 19

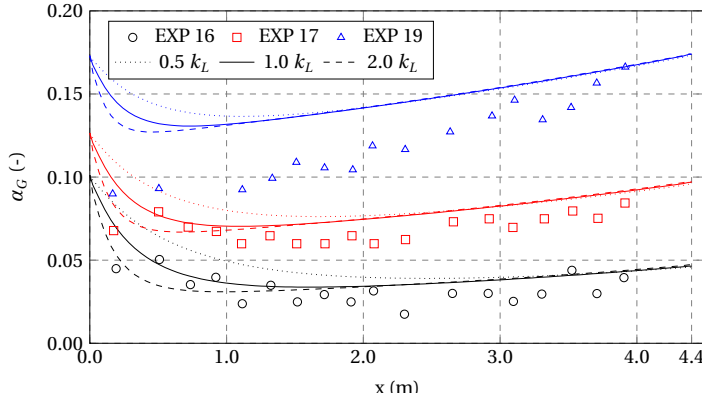


Fonte: elaborado pelo autor

Observa-se que o fator 1.0 apresentou uma melhor correlação dos dados de simulação em relação aos dados numéricos, para todos os experimentos. Dessa forma, pode-se afirmar que o valor de coeficiente de transferência de massa  $k_L$  calculado através da Equação 5.11 é condizente com os resultados experimentais obtidos por Deckwer, Adler e Zaidi (1978).

Além disso, é possível notar que os resultados na saída da coluna são insensíveis aos coeficientes de transferência de massa interfaciais  $k_L$  utilizados, sendo assim impossível validar esse coeficiente apenas com os dados de composição na saída. Dessa forma, são necessários dados experimentais de fração volumétrica e fração molar de  $\text{CO}_2$  em toda a coluna, conforme frisado por Rzehak e Krepper (2016).

**Figura 5.6** – Coluna de Bolhas – Comparação dos Resultados de Fração Volumétrica da Fase Gasosa Obtidos com Diferentes Valores de  $k_L$  – Experimentos 16, 17 e 19



Fonte: elaborado pelo autor

Um ponto importante a ser tratado é o significado físico que o parâmetro  $k_L$  traz consigo. Este parâmetro pode ser visto como uma ‘velocidade’ do processo em relação ao equilíbrio, sendo que quanto maior o valor de  $k_L$ , mais as curvas de fração volumétrica e fração molar de  $\text{CO}_2$  aproximam-se às curvas de equilíbrio.

A alteração da massa específica da fase gasosa dá-se por conta de dois efeitos com velocidades características diferentes, nomeadamente devido ao gradiente de pressão e à composição da fase gasosa. O gradiente de pressão atua sobre a massa específica da fase gasosa instantaneamente através da equação de estado, enquanto a composição altera-se em uma velocidade menor, ditada pelo coeficiente de transferência de massa  $k_L$ . Essa dinâmica entre o gradiente de pressão e composição dita o quão próximo a mistura multifásica encontra-se do equilíbrio.

Finalmente, conclui-se que o algoritmo desenvolvido neste trabalho a partir do modelo de dois-fluidos unidimensional pode simular a descrever a dinâmica da transferência de massa na coluna de bolhas construída por Deckwer, Adler e Zaidi (1978). Dessa forma, no próximo capítulo, essa mesma metodologia será aplicada a um escoamento horizontal com formação de golfadas.

CAPÍTULO

# 6

## ESCOAMENTO GÁS-LÍQUIDO HORIZONTAL COM FORMAÇÃO DE GOLFADAS E TRANSFERÊNCIA DE MASSA INTERFACIAL

Este capítulo tem por finalidade a implementação da metodologia proposta neste trabalho na solução de um escoamento bifásico gás-líquido horizontal com formação de golfadas, considerando o fenômeno da transferência de massa interfacial. Conforme relatado no Capítulo 2, a análise de escoamento em padrão de golfadas (*slug*) é modelada através de duas abordagens principais: a abordagem de *slug tracking*, baseada em um acompanhamento de um unidade de golfada, na qual todos os parâmetros (comprimento, frequência, entre outros) devem ser impostos; e a abordagem *slug capturing* que, partindo de um escoamento em padrão estratificado, é capaz de modelar o processo de formação de golfadas, permitindo assim calcular importantes parâmetros como comprimento, frequência e velocidade de propagação da golfada.

A primeira seção apresenta o modelo matemático e as relações de

fechamento para o padrão estratificado, a partir do qual se dá a formação de golfadas, bem como a implementação numérica dos termos particularizados das equações do modelo de dois-fluidos unidimensional. Além disso, esta seção apresenta o tratamento numérico utilizado para determinar a formação das golfadas e implementado neste trabalho, que difere das metodologias apresentadas na literatura.

A segunda seção apresenta a validação da metodologia proposta para o regime com formação de golfadas sem a incorporação da transferência de massa interfacial, tendo em vista a disponibilidade de resultados experimentais da literatura, que serão utilizados para a validação do modelo. Foram avaliados os comportamentos qualitativo e quantitativo dos resultados obtidos, com boa concordância aos dados experimentais.

Por fim, a terceira seção apresenta os resultados obtidos após a incorporação da transferência de massa interfacial, com diferentes composições de entrada bem como diferentes coeficientes de transferência de massa  $K_L$ .

## 6.1 Modelo Matemático

O modelo matemático dos escoamentos bifásicos gás-líquido com formação de golfadas e transferência de massa interfacial baseia-se no modelo de dois-fluidos unidimensional, dado pelas equações de conservação da massa, da quantidade de movimento e das espécies químicas, repetidas aqui por conveniência,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k \alpha_k u_k) = \Gamma_k \quad (6.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k u_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k \alpha_k u_k u_k) = \mathcal{M}_k^p + \mathcal{M}_k^p + \mathcal{M}_k^d + \mathcal{M}_k^w + \mathcal{M}_k^\Gamma + \mathcal{M}_k^{p_i} \quad (6.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k Y_k^i) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k \alpha_k u_k Y_k^i) = \Gamma_k^i \quad (6.3)$$

Quanto á transferência de massa interfacial, será considerado que deve-se apenas à transferência do  $\text{CO}_2$ . Dessa forma, o termo fonte da equação de conservação das espécies é igual, em módulo, ao termo fonte



da equação de conservação da massa das fases. Além disso, a vazão mássica interfacial será dada produto de um fluxo de massa e uma área específica interfaciais conforme,

$$\Gamma_k^i = \Gamma_k \qquad \Gamma_k = \Gamma_k'' a_I \qquad (6.4)$$

Além disso, considerando um problema bifásico, o fluxo de massa para uma fase é igual em módulo e com sinal oposto ao fluxo para a outra fase. O fluxo de massa será descrito por uma resistência referente ao lado líquido, portanto valem as relações repetidas por conveniência e dadas por,

$$\Gamma_G'' = -\Gamma_L'' \qquad \Gamma_L'' = K_L(\text{He}\rho_G Y_G - \rho_L Y_L) \qquad (6.5)$$

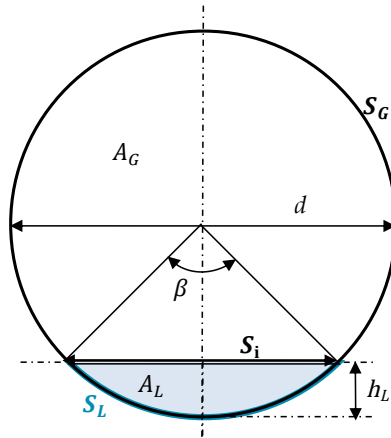
Quanto aos termos fonte na equação de conservação da quantidade de movimento, sua forma geral apresenta-se da mesma maneira que as equações previamente descritas e dados por,

$$\mathcal{M}_k^p = -\alpha_k \frac{\partial p_k}{\partial x} \qquad \mathcal{M}_k^p = -\rho_k \alpha_k g \qquad (6.6)$$

$$\mathcal{M}_k^d = F_{k,I} a_I \qquad \mathcal{M}_k^w = \tau_{k,w} a_{k,w} \qquad (6.7)$$

$$\mathcal{M}_k^\Gamma = \Gamma_k (u_j - u_k) \qquad \mathcal{M}_k^{p_i} = (p_{k,I} - p_k) \frac{\partial \alpha_k}{\partial x} \qquad (6.8)$$

No entanto, as equações de fechamento para estes termos dependem da morfologia das fases, neste caso escoamento estratificado, e também da geometria do problema. Em se tratando de escoamentos em dutos com diâmetros inferiores e velocidades fluidas superiores (em comparação ao caso da coluna de bolhas), devem ser incluídos os termos de atrito com as paredes do duto que, para cada fase, dependerá do perímetro molhado por esta. A Figura 6.1 apresenta as relações geométricas comumente utilizadas para caracterizar o escoamento estratificado em um duto, onde  $S_G$  e  $S_L$  são os perímetros molhados pelas fases gasosa e líquida, respectivamente;  $S_i$  é o perímetro interfacial,  $A_G$  e  $A_L$  são as áreas transversais ocupadas pelas fases gasosa e líquida, respectivamente;  $h_L$  é a altura de líquido no duto e  $\beta$  é o ângulo oposto ao lado dado pela interface  $S_i$ .

**Figura 6.1** – Seção Transversal do Duto com Estratificação

Fonte: adaptado de Bratland (2010)

As áreas específicas de transferência interfacial de massa e de quantidade de movimento são dadas por,

$$a_I = \frac{S_i \Delta x}{\Delta V} = \frac{S_i}{A} \quad (6.9)$$

As áreas específicas de transferência de quantidade de movimento com a parede são,

$$a_{G,w} = \frac{S_G \Delta x}{\Delta V} = \frac{S_G}{A} \quad a_{L,w} = \frac{S_L \Delta x}{\Delta V} = \frac{S_L}{A} \quad (6.10)$$

As relações geométricas podem ser facilmente descritas em função do ângulo central  $\beta$  com,

$$S_L = \frac{d}{2} \beta \quad S_G = \frac{d}{2} (2\pi - \beta) \quad (6.11)$$

$$S_i = d \operatorname{sen} \left( \frac{\beta}{2} \right) \quad h_L = \frac{d}{2} \left[ 1 - \cos \left( \frac{\beta}{2} \right) \right] \quad (6.12)$$

De posse de uma expressão para área do segmento circular ocupado por líquido  $A_L$ , é possível escrever a fração da fase líquida como um quociente entre a área ocupada por líquido e a área total da seção conforme,

$$A_L = \frac{d^2}{8}(\beta - \text{sen } \beta) \quad \alpha_L = \frac{A_L}{A} = \frac{1}{2\pi}(\beta - \text{sen } \beta) \quad (6.13)$$

Finalmente, o ângulo  $\beta$  pode ser obtido a partir da solução da equação transcendental dada por,

$$f(\beta) = \beta - \text{sen } \beta - 2\pi\alpha_L = 0 \quad (6.14)$$

É possível resolver a Equação 6.14 a partir de uma expressão explícita aproximada recomendada por Biberg (1999) e dada por,

$$\beta = 2\pi\alpha_L + 2\left(\frac{3\pi}{2}\right)^{1/3} \left[1 - 2\alpha_L + \alpha_L^{1/3} - (1 - \alpha_L)^{1/3}\right] + \mathcal{O}(10^{-3}) \quad (6.15)$$

Segundo Biberg (1999), o erro máximo absoluto é menor que 0,004 radianos para o ângulo  $\beta$  e menor que 0,2% do diâmetro interno do duto para os perímetros molhados. Uma abordagem mais precisa utiliza a solução da Equação 6.15 como estimativa inicial de algum método iterativo de solução, como o métodos de Newton ou de Halley. Entretanto, vale ressaltar que a cada iteração, todas as relações geométricas precisam ser recalculadas, portanto a utilização de um método iterativo a fim de melhorar a precisão da solução para o ângulo  $\beta$  não é uma prática muito atrativa. Neste trabalho, a solução obtida pela Equação 6.15 será considerada precisa o suficiente para a simulação da formação das golfadas.

As tensões das fases com a parede são calculadas através das relações dadas por,

$$\tau_L = f_L \frac{\rho_L |u_L|}{2} u_L \quad \tau_G = f_G \frac{\rho_G |u_G|}{2} u_G \quad (6.16)$$

em que o fator de atrito da fase líquida com a parede,  $f_L$ , pode ser calculado pelas expressões dadas por Hand (1991) para escoamento laminar e por Spedding e Hand (1997) para escoamento turbulento, dadas por,

$$f_L = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}_{sL}} & , \text{se } \text{Re}_L \leq 2100 \\ 0,0262(\alpha_L \text{Re}_{sL})^{-0,139} & , \text{se } \text{Re}_L > 2100 \end{cases} \quad (6.17)$$

O fator de atrito da fase gasosa com a parede,  $f_G$ , pode ser calculado pela equação de Hagen-Poiseuille para escoamento laminar e pela expressão dada por Taitel e Dukler (1976) para escoamento turbulento,

dadas por,

$$f_G = \begin{cases} \frac{16}{\text{Re}_G} & , \text{se } \text{Re}_G \leq 2100 \\ 0,046\text{Re}_G^{-0,2} & , \text{se } \text{Re}_G > 2100 \end{cases} \quad (6.18)$$

A força na interface será calculada com as propriedades físicas do gás, conforme a relação dada por,

$$F_{k,l} = f_i \frac{\rho_G |u_G - u_L|}{2} (u_j - u_k) \quad (6.19)$$

onde o fator de atrito interfacial,  $f_i$ , será calculado a partir de uma expressão análoga a utilizada para o cálculo do fator de atrito da fase gasosa, dada por,

$$f_i = \begin{cases} \frac{16}{\text{Re}_i} & , \text{se } \text{Re}_i \leq 2100 \\ 0,046\text{Re}_i^{-0,2} & , \text{se } \text{Re}_i > 2100 \end{cases} \quad (6.20)$$

Os números de Reynolds característicos são calculados pelas relações dadas por,

$$\text{Re}_L = \frac{\rho_L u_L D_{h,L}}{\mu_L} \quad \text{Re}_G = \frac{\rho_G u_G D_{h,G}}{\mu_G} \quad (6.21)$$

$$\text{Re}_i = \frac{\rho_G |u_G - u_L| D_{h,G}}{\mu_G} \quad \text{Re}_{sL} = \frac{\rho_L \alpha_L u_L D}{\mu_L} \quad (6.22)$$

em que  $D_{h,L}$  e  $D_{h,G}$  são os diâmetros hidráulicos das fases líquida e gasosa, respectivamente, e são dados por,

$$D_{h,L} = \frac{4A_L}{S_L} \quad D_{h,G} = \frac{4A_G}{S_G + S_i} \quad (6.23)$$

Note que o número de Reynolds  $\text{Re}_L$  calculado com a velocidade e diâmetro hidráulico da fase define o regime de escoamento (laminar ou turbulento). Porém, o número de Reynolds  $\text{Re}_{sL}$  calculado com a velocidade superficial da fase líquida e com o diâmetro do duto definem a expressão do fator de atrito.

De acordo com Simões, Carneiro e Nieckele (2014), a soma dos termos de pressão,  $\mathcal{M}_k^p + \mathcal{M}_k^{p_i}$ , pode ser reescrita por,

$$-\alpha_k \frac{\partial p_k}{\partial x} + (p_{k,I} - p_k) \frac{\partial \alpha_k}{\partial x} = -\alpha_k \frac{\partial p_{k,I}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} [\alpha_k (p_k - p_{k,I})] \quad (6.24)$$

Admite-se igualdade de pressão nos dois lados da interface e que sejam iguais à pressão média na seção, conforme as relações dadas por,

$$p_{L,I} = p_{G,I} = p \qquad -\alpha_k \frac{\partial p_{k,I}}{\partial x} = -\alpha_k \frac{\partial p}{\partial x} \quad (6.25)$$

Adicionalmente, admite-se que a diferença da pressão média e a pressão da interface seja dada pela pressão hidrostática, conforme,

$$\frac{\partial}{\partial x} [\alpha_k (p_k - p_{k,I})] = -\alpha_k \rho_k g \cos \beta \frac{\partial h_L}{\partial x} \quad (6.26)$$

Por fim, o modelo matemático será dado pelas equações de conservação da massa por fase,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_L \alpha_L) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_L \alpha_L u_L) = K_L (\text{He} \rho_G Y_G - \rho_L Y_L) \frac{S_i}{A} \quad (6.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_G \alpha_G) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_G \alpha_G u_G) = -K_L (\text{He} \rho_G Y_G - \rho_L Y_L) \frac{S_i}{A} \quad (6.28)$$

pelas equações de conservação da quantidade de movimento por fase,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_L \alpha_L u_L) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_L \alpha_L u_L u_L) = & -\alpha_L \frac{\partial p}{\partial x} - \rho_L \alpha_L g \sin \gamma \\ & - \rho_L \alpha_L g \cos \beta \frac{\partial h_L}{\partial x} - f_L \frac{\rho_L |u_L| u_L}{2} \frac{S_L}{A} - f_i \frac{\rho_G |u_G - u_L| (u_L - u_G)}{2} \frac{S_i}{A} \end{aligned} \quad (6.29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_G \alpha_G u_G) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_G \alpha_G u_G u_G) = & -\alpha_G \frac{\partial p}{\partial x} - \rho_G \alpha_G g \sin \gamma \\ & - \rho_G \alpha_G g \cos \beta \frac{\partial h_L}{\partial x} - f_G \frac{\rho_G |u_G| u_G}{2} \frac{S_G}{A} - f_i \frac{\rho_G |u_G - u_L| (u_G - u_L)}{2} \frac{S_i}{A} \end{aligned} \quad (6.30)$$

e pelas equações de conservação das espécies químicas por fase,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_L \alpha_L Y_L) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_L \alpha_L u_L Y_L) = K_L (\text{He} \rho_G Y_G - \rho_L Y_L) \frac{S_i}{A} \quad (6.31)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_G \alpha_G Y_G) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_G \alpha_G u_G Y_G) = -K_L (\text{He} \rho_G Y_G - \rho_L Y_L) \frac{S_i}{A} \quad (6.32)$$

## 6.2 Método Numérico

O método numérico referente a este capítulo é o mesmo que o utilizado nos capítulos anteriores. Dessa forma, apenas os termos particulares das equações serão discretizados.

### 6.2.1 Integração dos Termos Particulares

O termo particularizado da equação de conservação da massa das fases aqui descrito para a fase líquida, dado por,

$$\Phi = \Gamma_L = K_L(\text{He}\rho_G Y_G - \rho_L Y_L) \frac{S_i}{A} \quad (6.33)$$

Integrando no volume,

$$\int_V \Gamma_L dV = K_L[\text{He}(\rho_G)_p^* (Y_G)_p^* - \rho_L (Y_L)_p^*] \frac{S_i}{A} \Delta V \quad (6.34)$$

Observe que no caso das colunas de bolhas, a fração volumétrica da fase gasosa aparecia explicitamente no termo de transferência de massa, mais especificamente no termo de densidade de área interfacial. Entretanto, para este caso, não é possível escrever o termo de transferência de massa com a fração volumétrica da fase aparecendo explicitamente, tendo em vista da relação complexa entre o termo de área  $S_i = f(\alpha)$  dado na Equação 6.1. Dessa forma, o termo de transferência de massa será discretizado na forma explícita, dado por,

$$S_C^{\alpha_L} = \frac{1}{\theta} \left[ K_L[\text{He}(\rho_G)_p^* (Y_G)_p^* - \rho_L (Y_L)_p^*] \frac{S_i}{A} \Delta V \right] \quad (6.35)$$

Da relação  $\Gamma_L = -\Gamma_G$ , o termo fonte para a equação de conservação da fase gasosa será dado por,

$$S_C^{\alpha_G} = -S_C^{\alpha_L} \quad (6.36)$$

O termo particularizado na Equação 6.33 é o mesmo das equação de conservação das espécies químicas por fase, entretanto agora é possível separar nas partes implícita  $S_p$  e explícita  $S_C$  do termo fonte para a fase líquida, dados por,

$$S_P^{Y_i} = \frac{1}{\theta} \left[ K_L \rho_L \frac{S_i}{A} \Delta V \right] \quad S_C^{Y_i} = \frac{1}{\theta} \left[ K_L \text{He}(\rho_G)_P^* (Y_G)_P^* \frac{S_i}{A} \Delta V \right] \quad (6.37)$$

e também para a fase gasosa, dados por,

$$S_P^{Y_G} = \frac{1}{\theta} \left[ K_L \text{He}(\rho_G)_P^* \frac{S_i}{A} \Delta V \right] \quad S_C^{Y_G} = \frac{1}{\theta} \left[ K_L \rho_L (Y_L)_P^* \frac{S_i}{A} \Delta V \right] \quad (6.38)$$

Os termos particularizados da equação de conservação da quantidade de movimento são dados por,

$$\Phi = -\rho_k \alpha_k g \cos \beta \frac{\partial h_L}{\partial x} + \frac{\tau_{k,w} S_k}{A} + \frac{\tau_i S_i}{A} \quad (6.39)$$

Integrando termo a termo para um volume centrado na fase leste (e), resulta nas expressões dadas por,

$$\int_V -\rho_k \alpha_k g \cos \beta \frac{\partial h_L}{\partial x} dV = -M_e g \cos \beta \frac{(h_L)_E - (h_L)_P}{\Delta x} \quad (6.40)$$

$$\int_V -\frac{\tau_k S_k}{A} dV = -f_k \frac{(\overline{\rho_k})_e |(u_k)_e^*|}{2} (u_k)_e^* \frac{S_k}{A} \Delta V \quad (6.41)$$

$$\int_V \frac{\tau_i S_i}{A} dV = f_i \frac{(\overline{\rho_G})_e |(u_k)_e^*| - (u_j)_e^*|}{2} [(u_k)_e^* - (u_j)_e^*] \frac{S_i}{A} \Delta V \quad (6.42)$$

Reorganizando os termos em parte implícita  $S_P$  e parte explícita  $S_C$  e lembrando que toda a equação foi dividida por  $\theta$  a partir da formulação temporal, resulta em,

$$S_P^{u_k} = \frac{1}{\theta} \left[ f_k \frac{(\overline{\rho_k})_e |(u_k)_e^*|}{2} \frac{S_k}{A} \Delta V + f_i \frac{(\overline{\rho_G})_e |(u_j)_e^*| - (u_k)_e^*|}{2} \frac{S_i}{A} \Delta V \right] \quad (6.43)$$

$$S_C^{u_k} = \frac{1}{\theta} \left[ -M_e g \cos \beta \frac{(h_L)_E - (h_L)_P}{\Delta x} + f_i \frac{(\overline{\rho_G})_e |(u_j)_e^*| - (u_k)_e^*|}{2} (u_j)_e^* \frac{S_i}{A} \Delta V \right] \quad (6.44)$$

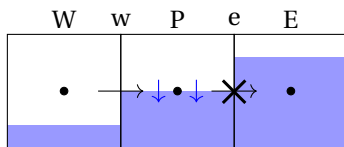


## 6.2.2 Tratamento Numérico das Golfadas

O processo de formação de golfadas a partir de um escoamento estratificado se dá, essencialmente, quando as ondas presente na interface crescem a partir da dinâmica do escoamento, a ponto tal de cobrir inteiramente a seção do duto. Nesse momento, gera uma desaceleração brusca da fase gasosa e, portanto, um aumento súbito da pressão, acelerando a golfada. Além disso, no contexto do modelo de dois-fluidos, este 'bloqueio' da seção implica em um valor nulo da fração local de gás. Do ponto de vista da solução numérica, estas variações bruscas de pressão e velocidade associadas as variações de fração volumétrica introduzem dificuldades na convergência da solução e devem receber um tratamento especial. Este tratamento constitui uma importante dificuldade na abordagem de captura das golfadas. Dessa forma, essa seção visa explicar a fenomenologia por trás das dificuldades numéricas intrínsecas da formação de golfadas em dutos horizontais.

Na parte anterior a golfada, ou seja, na formação da golfada sobre um volume centrado em 'E', ocorre uma constrição sobre a face oeste deste volume (ou face leste do volume anterior, centrado em 'P'). Há um acúmulo positivo de gás no volume centrado em 'P'; este acúmulo responde via de duas variáveis:  $\rho_G$  (e consequentemente  $p$ ) e  $\alpha_G$ , havendo assim uma dinâmica entre aumento da pressão ou decréscimo da fração de líquido naquela região. A Figura 6.2 ilustra esse fenômeno.

**Figura 6.2** – Transporte Sobre a Cauda da Golfada

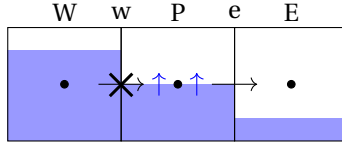


Fonte: elaborado pelo autor

De forma oposta, na parte posterior a golfada, ou seja, na formação da golfada sobre um volume centrado em 'W', ocorre uma constrição sobre a face leste deste volume (ou face oeste do volume posterior, centrado em 'P'). Há um acúmulo negativo de gás no volume centrado em 'P'; este acúmulo responde via de duas variáveis:  $\rho_G$  (e consequentemente  $p$ ) e

$\alpha_G$ , havendo assim uma dinâmica entre queda da pressão ou acréscimo da fração de líquido naquela região. A Figura 6.3 ilustra esse fenômeno.

**Figura 6.3** – Transporte Sobre o Nariz da Golfada



Fonte: elaborado pelo autor

Note que na condição limite formação da golfada ( $\alpha_G \rightarrow 0$ ), as equações de conservação da quantidade de movimento tornam-se singulares. Issa e Kempf (2003) recomendam que quando a fração volumétrica no centro do volume de conservação da quantidade de movimento chegue a algum valor limite  $\alpha_G^{crit}$ , seja aplicado um *setpoint* nulo da velocidade da fase gasosa. Isso é fisicamente consistente tendo em vista que devido a baixa fração volumétrica da fase, o transporte é nulo  $\dot{m} = \rho_G \alpha_G u_G A \sim 0$ , já que a fração volumétrica decresce mais rapidamente que a velocidade. Além disso, nas regiões de formação da golfada, a equação da pressão deve contabilizar apenas a fase líquida. Esses dois efeitos desejados podem ser facilmente implementados numericamente fazendo,

$$A_p^{u_G} = \infty \quad , \text{ se } (\alpha_G < \alpha_G^{crit}) \quad (6.45)$$

onde  $\alpha_G^{crit}$  é o valor limite em que se considera a presença da fase gasosa. Issa e Kempf (2003) recomendam o valor de 0,02 para a fração volumétrica crítica, sendo este o valor também adotado neste trabalho. Desta forma, a velocidade resultante do sistema de equações lineares para a fase gás será nula e além disso, quando introduzido na equação de conservação da massa global para a obtenção da pressão (ver Capítulo 3), a fase gasosa não terá influencia na determinação do valor da pressão.

A condição limite de formação de golfada é aplicada sobre os volumes centrados nas faces, para a conservação da quantidade de movimento, assim para um volume centrado na face leste ‘e’,

$$(\alpha_G)_e = \overline{(\alpha_G)_e} = \frac{(\alpha_G)_E + (\alpha_G)_P}{2} \quad (6.46)$$

Entretanto, utilizar os valores de fração volumétrica da iteração atual na condição limite faz com que o algoritmo não alcance a convergência sob determinadas circunstâncias, uma vez que a condição limite funciona como se fosse uma ‘chave’ *on-off* entre ciclos de interação consecutivos. Uma forma de evitar esses ciclo é utilizar os valores convergidos do tempo anterior, conforme,

$$(\alpha_G)_e = \overline{(\alpha_G)_e^0} = \frac{(\alpha_G)_E^0 + (\alpha_G)_P^0}{2} \quad (6.47)$$

Essa abordagem contorna o problema da convergência, porém faz com que as golfadas quebrem-se devido a esta ‘chave’ *on-off* atuar sobre passos de tempo consecutivos. Além disso, ao utilizar valores intermediários de número de Courant ( $C \sim 0,5$ ), essa abordagem resulta em instabilidades numéricas levando o algoritmo à divergência.

Desta forma, é proposta neste trabalho uma nova abordagem para o tratamento da formação da golfada. Primeiramente, tomou-se o menor valor como condição limite, uma vez que a constrição pode ser efetuada sobre qualquer face e dado por,

$$(\alpha_G)_e = \min[(\alpha_G)_P^0, (\alpha_G)_E^0] \quad (6.48)$$

A presença da golfada atuará sobre o termo  $A_P$  da equação de conservação da quantidade de movimento através de uma relação dada por,

$$A_P^{u_G} = A_P^{u_G} + f_\infty^{u_G} (A_P^{u_G})_\infty \quad (6.49)$$

onde  $f_\infty^{u_G}$  é uma função suave que varia de 0 a 1, e  $(A_P^{u_G})_\infty$  é um valor tão grande que faça com que  $u_G \rightarrow 0$  e que anule a dependência da fase gasosa na equação da pressão.

Em seguida, escolheu-se uma função  $f_\infty^{u_G}$  que fosse suave nas regiões próximas a  $\alpha_G^{\text{crit}}$ , dada por,

$$f_\infty^{u_G} = \begin{cases} 1 + \text{sen} \left[ \frac{\pi (\alpha_G)_e}{2 \alpha_G^{\text{crit}}} + \pi \right] & , \text{se } (\alpha_G)_e \leq \alpha_G^{\text{crit}} \\ 0 & , \text{se } (\alpha_G)_e > \alpha_G^{\text{crit}} \end{cases} \quad (6.50)$$

Outro problema a ser contornado foi definir um valor  $(A_p^{u_G})_\infty$  tal que zere a velocidade do gás e retire sua influência na equação da pressão, mas também que não varie bruscamente, o que resultaria em instabilidades numéricas. Isso foi realizado analisando os termos da equação da pressão normalizada dados por exemplo para  $A_E$ ,

$$A_E^p = \frac{A_E^G}{\rho_G^{\text{ref}}} + \frac{A_E^L}{\rho_L} \quad (6.51)$$

Analisando os termos  $A_E$ , onde aparecem explicitamente as dependências dos termos  $A_p^{u_k}$  centrados na face leste 'e',

$$A_E^L = [(\rho_L)_e (\bar{\alpha}_L)_e A_e] \left[ \frac{\Delta V}{A_p^{(u_L)_e}} \frac{(\bar{\alpha}_L)_e}{\Delta x} \right] \quad (6.52)$$

$$A_E^G = [(\rho_G)_e (\bar{\alpha}_G)_e A_e] \left[ \frac{\Delta V}{A_p^{(u_G)_e}} \frac{(\bar{\alpha}_G)_e}{\Delta x} \right] \quad (6.53)$$

Na formação da golfada, a influência do líquido é muito maior que a influência do gás, portanto,

$$\frac{A_E^L}{\rho_L} \gg \frac{A_E^G}{\rho_G^{\text{ref}}} \quad (6.54)$$

Isso implica na condição dada por,

$$\frac{(\bar{\alpha}_L)_e (\bar{\alpha}_L)_e}{A_p^{(u_L)_e}} \gg \frac{(\bar{\alpha}_G)_e (\bar{\alpha}_G)_e}{A_p^{(u_G)_e}} \quad (6.55)$$

Isolando o termo de dependência temporal, resulta em,

$$A_p^{(u_G)_e} \gg \frac{(\bar{\alpha}_G)_e (\bar{\alpha}_G)_e}{(\bar{\alpha}_L)_e (\bar{\alpha}_L)_e} A_p^{(u_L)_e} \quad (6.56)$$

Note que, na formação da golfada,  $\alpha_G \leq \alpha_G^{\text{crit}}$  e  $\alpha_L \geq 1 - \alpha_G^{\text{crit}}$ , portanto vale a relação dada por,

$$\left( \frac{\alpha_G^{\text{crit}}}{1 - \alpha_G^{\text{crit}}} \right)^2 > \frac{(\widetilde{\alpha}_G)_e (\overline{\alpha}_G)_e}{(\widetilde{\alpha}_L)_e (\overline{\alpha}_L)_e} \quad (6.57)$$

Finalmente, será definido um valor  $A_P^{(u_G)_e}$  para a formação da golfada, onde foi utilizado um fator de 1000 de modo que  $A_P^{(u_L)_e} / A_P^{(u_G)_e} \sim 1000$ , dado por,

$$A_P^{(u_G)_e} = 1000 \left( \frac{\alpha_G^{\text{crit}}}{1 - \alpha_G^{\text{crit}}} \right)^2 A_P^{(u_L)_e} \quad (6.58)$$

Esse procedimento foi testado e obteve-se sucesso em sua implementação, conseguindo obter soluções estáveis para um ampla gama de condições de escoamento.

## 6.3 Validação Numérica e Resultados Preliminares

Nesta seção será apresentada a validação numérica da metodologia proposta neste trabalho, no âmbito dos escoamentos bifásicos gás-líquido com formação de golfadas. A validação numérica será efetuada em duas etapas, nomeadamente a validação qualitativa e a validação quantitativa. A validação qualitativa permite simultaneamente avaliar os resultados e explicar a fenomenologia dos processos de formação e propagação das golfadas no duto. Já a validação quantitativa foi realizada a partir da comparação dos parâmetros médios obtidos numericamente com os resultados experimentais obtidos por Ujang et al. (2006) e finalmente corroborar com a metodologia proposta neste trabalho.

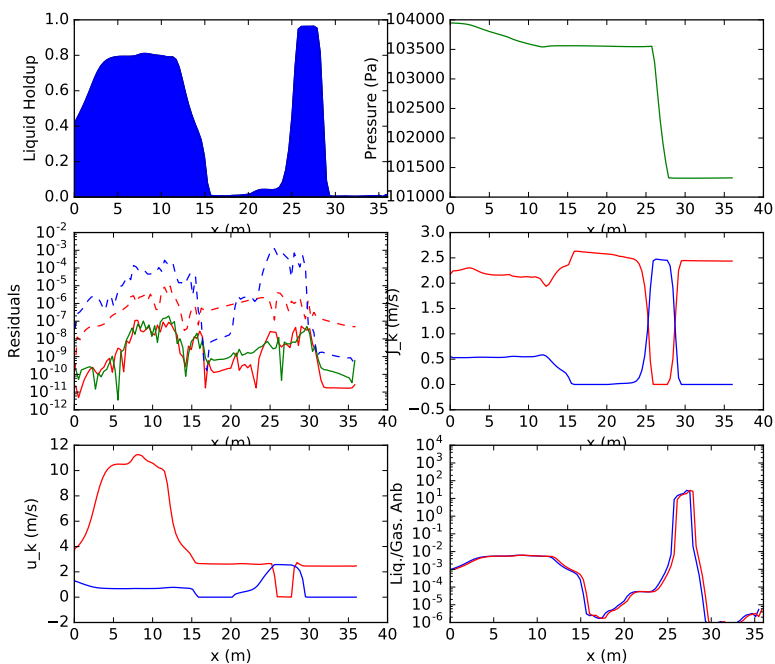
### 6.3.1 Validação Qualitativa

Nesta seção, a implementação do esquema obtido neste estudo foi testado a partir de resultados experimentais obtidos por Ujang et al. (2006). O domínio consiste em um duto de 37 metros de comprimento e seção circular com diâmetro interno de 78 milímetros. A fase gasosa consiste em ar puro escoando com velocidade superficial de 2,55 m/s, enquanto a fase líquida consiste em água pura escoando com velocidade superficial de 0,61 m/s. As viscosidades das fases líquida e gasosa são de  $1,1394 \cdot 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$  e  $1,7964 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ , respectivamente. A massa específica da fase líquida é de  $998,2 \text{ kg/m}^3$ , enquanto a da fase gasosa é calculada com a equação dos gases ideais, considerando ar puro ( $M_{\text{ar}}^{\text{mol}} = 28,9652 \text{ g/mol}$ ). A temperatura considerada foi de 298 K para ambas as fases saída a pressão atmosférica (101325 Pa).

O acompanhamento das variáveis pode ser realizado em tempo real em uma tela de execução, mostrada na Figura 6.4, onde o primeiro quadro apresenta os resultados de fração de líquido (*liquid holdup*), o segundo apresenta os resultados de pressão (*pressure*), o terceiro apresenta os resíduos das equações de conservação (em vermelho os resíduos da equação de conservação da massa da fase gasosa/equação para a fração volumétrica da fase gasosa, em verde os resíduos da equação de conservação da massa global/equação para a pressão, em azul tracejado os resíduos da equação de conservação da quantidade de movimento da fase líquida/equação para velocidade da fase líquida, em vermelho tracejado os resíduos da equação de conservação da quantidade de movi-

mento da fase gasosa/equação para a velocidade da fase gasosa), o quarto quadro apresenta os resultados de velocidades superficiais das fases (em vermelho a velocidade superficial da fase gasosa e em azul a velocidade superficial da fase líquida), o quinto quadro apresenta as velocidades das fases (em vermelho a velocidade da fase gasosa e em azul a velocidade da fase líquida), e finalmente o sexto quadro apresenta o quociente dos coeficientes  $A_{NB}$  da fase líquida sobre od da fase gasosa na equação da pressão ( $A_E$  em azul e  $A_W$  em vermelho).

**Figura 6.4** – Tela de Acompanhamento das Variáveis



Fonte: elaborado pelo autor

Toda a fenomenologia do escoamento com formação de golfadas pode ser descrita a partir dos parâmetros de saída acompanhados ao longo do tempo, mostrados na Figura 6.4. Na região de entrada ( $L \leq 10$  m), a constrição sobre a fase gasosa ( $\partial \alpha_G / \partial x$  decrescente) resulta na aceleração do gás. A perda de carga nessa região se deve a um efeito combinado

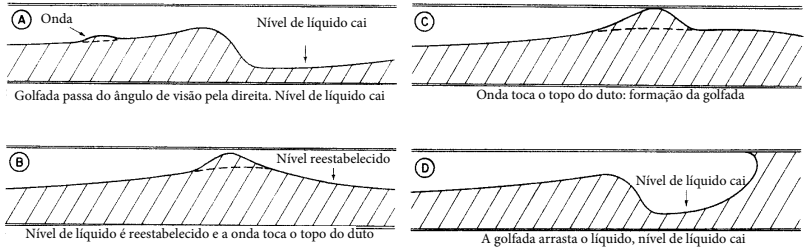
da aceleração do gás e da elevada fração de líquido na região, atentando-se ao fato de que elevadas frações de líquidos impõem elevadas perdas de carga no duto devido ao atrito com a parede. Após a região de entrada ( $10 \text{ m} \leq L \leq 25 \text{ m}$ ), na região da primeira bolha, a velocidade do gás cai devido a expansão ( $\partial \alpha_G / \partial x$  crescente). A velocidade da fase líquida cai e ocorre a transição para o regime laminar, impondo um elevado fator de atrito sobre a fase líquida. A perda de carga é mínima devido a baixa fração de líquido nessa região, que pode ser visualizado pelo platô no perfil de pressão. Na região da golfada ( $25 \text{ m} < L < 30 \text{ m}$ ), o líquido é acelerado pelo gás devido a elevada pressão sobre a cauda da golfada resultante do bloqueio de passagem da fase gasosa. A velocidade o gás cai para zero devido ao efeito do termo de correção na equação de conservação da quantidade de movimento na fase gasosa, dado pelo critério de formação da golfada. A grande perda de carga na região da golfada deve-se ao atrito com a parede, dado pela aceleração e elevada fração de líquido.

A respeito da fenomenologia de formação das golfadas, a Figura 6.5 apresenta sua a dinâmica de formação de acordo com Taitel e Dukler (1977), descrita em quatro etapas: (A) devido às instabilidades do escoamento, uma onda é formada sobre a fase líquida; (B) essa onda é transportada até a crista e (C) toca o topo do duto, barrando a passagem da fase gasosa; (D) por fim, isso leva à formação e posterior propagação da golfada, onde a fase líquida é acelerada e recolhe o líquido à jusante, resultando no seu crescimento. O mesmo mecanismo de formação da golfada foi observado a partir dos resultados numéricos, conforme a Figura 6.6, onde cada linha representa um tempo e sua respectiva altura indica a fração volumétrica da fase líquida.

Após a validação qualitativa dos resultados obtidos neste trabalho, será efetuada a etapa de validação quantitativa, a fim de comparar os resultados obtidos com os experimentais de Ujang et al. (2006).

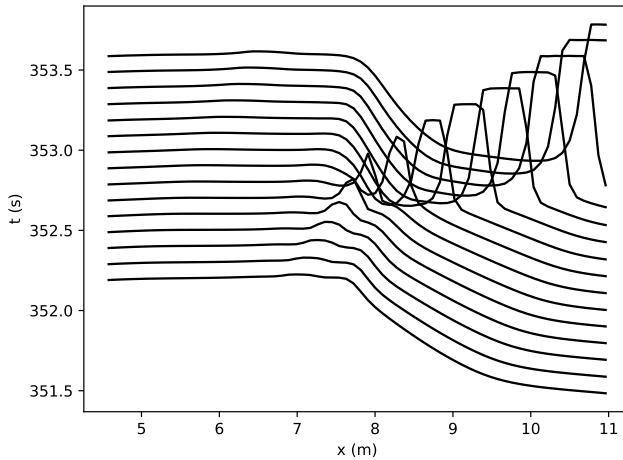


**Figura 6.5 – Mecanismo de Formação da Golfada**



Fonte: adaptado de Taitel e Dukler (1977).

**Figura 6.6 – Mecanismo de Formação da Golfada Observado**

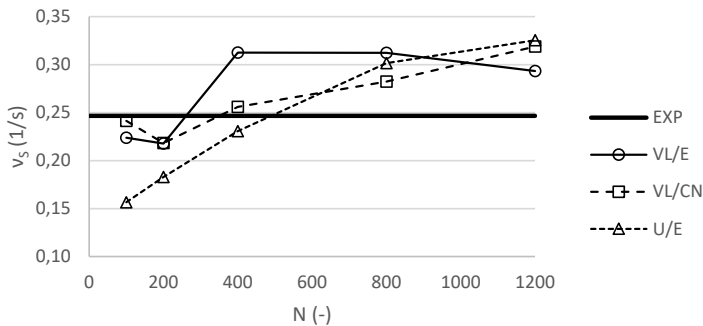


Fonte: elaborado pelo autor.

### 6.3.2 Validação Quantitativa

A etapa de validação numérica será efetuada com os dados experimentais de Ujang et al. (2006) para o caso 1 ( $u_{s,G} = 2,55$  m/s e  $u_{s,L} = 0,61$  m/s), na posição próxima à saída ( $x = 34,55$  m). Serão seguidas as orientações de Issa e Kempf (2003), que propõem que a convergência se dá a partir da comparação dos dados de frequência média com o refino de malha, conforme a Figura 6.7. Observa-se que os resultados de frequência média para a formulação Van Leer/Euler parecem convergir melhor em comparação com a formulação Van Leer/Crank-Nicolson; dessa forma, a escolha da formulação foi em favor da primeira. Acredita-se que formulação temporal de Crank-Nicolson associada ao critério de formação das golfadas possa levar a instabilidades na solução, embora as soluções numéricas pareçam convergir com refinamentos sucessivos de malha. A malha escolhida será a de 400 volumes, tendo em vista o compromisso entre tempo de simulação e precisão da solução numérica.

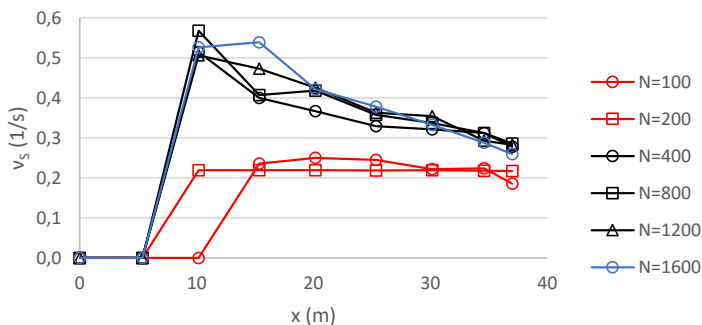
**Figura 6.7** – Comparação dos Resultados de Frequência Média das Golfadas Obtidos Frente ao Refino de Malha



Fonte: elaborado pelo autor.

Em especial para o esquema escolhido de Van Leer/Euler, foram traçadas as frequências médias das golfadas em diferentes posições axiais do duto, considerando malhas de  $N = 100$  a  $N = 1600$  volumes, conforme apresentado na Figura 6.8. Observa-se que nas posições mais próximas à saída, isto é, na região em que as golfadas já estão bem estabelecidas, os resultados convergem a partir da malha de  $N = 400$  volumes.

**Figura 6.8** – Comparação dos Resultados de Frequência Média das Golfadas Obtidos Frente ao Refino de Malha – Esquema Van Leer/Euler



Fonte: elaborado pelo autor.

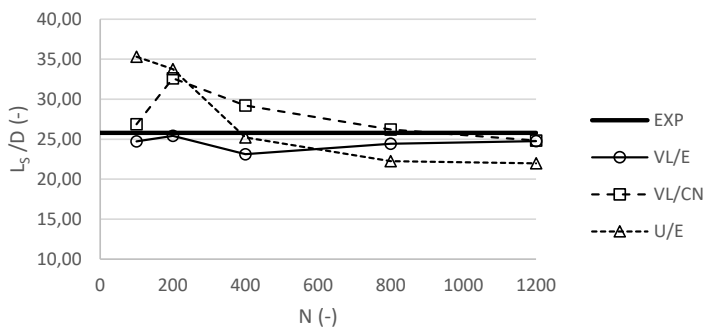
Os resultados refino de malha para o comprimento médio das golfadas é apresentado pela Figura 6.9. Observa-se que as formulações Van Leer/Euler e Van Leer/Crank-Nicolson convergem bem para a malha mais refinada, embora a variação da segunda seja maior com o refino sucessivo de malha. Mesmo para a malha mais grosseira ( $N = 100$ ), os resultados numéricos obtidos concordam relativamente bem com os resultados experimentais, exceto para a formulação Upwind/Euler.

Os resultados para velocidade média do nariz das golfadas são apresentados na Figura 6.10. Embora a solução continue a alterar-se a partir da malha de 400 volumes, esta alteração é pequena. Vale ressaltar que foi adotado o procedimento recomendado por Issa e Kempf (2003) em que se compara apenas a frequência média, e tendo em vista o compromisso de tempo de computação e precisão da solução numérica.

Os resultados de velocidade média da cauda das golfadas são apresentados na Figura 6.11, em que se verifica comportamento semelhante ao observado nos resultados de velocidade média do nariz das golfadas. Note que as velocidades da cauda e do nariz das golfadas são bem próximas (se não iguais), indicando a estabilização do tamanho das golfadas.

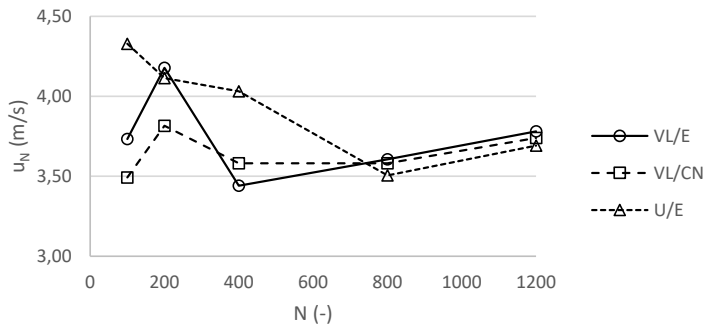
E finalmente, a Figura 6.12 apresenta o histograma do tamanho das golfadas para as diferentes formulações, considerando uma malha fixa de  $N = 400$  volumes. Note que embora os resultados numéricos obtidos com o esquema Van Leer/Euler não sejam exatamente iguais aos dados expe-

**Figura 6.9** – Comparação dos Resultados de Comprimento Médio das Golfadas Obtidos Frente ao Refino de Malha



Fonte: elaborado pelo autor.

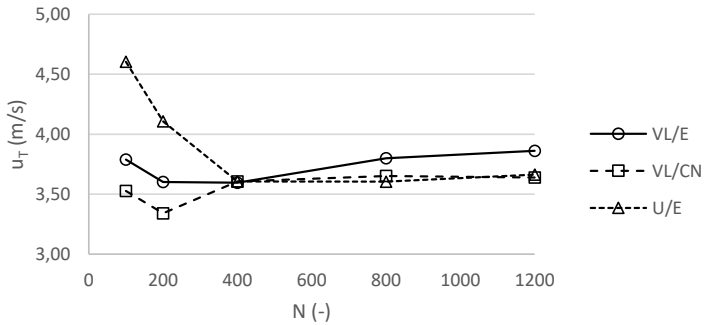
**Figura 6.10** – Comparação dos Resultados de Velocidade Média do Nariz das Golfadas Obtidos Frente ao Refino de Malha



Fonte: elaborado pelo autor.

rimentais observados por Ujang et al. (2006), ambos concordam muito bem. Deve-se ter em mente o comportamento estatístico do comprimento das golfadas, de modo que a distribuição pode não ser exatamente igual a observada numericamente. Observam-se algumas pequenas golfadas na solução numérica, na ordem de  $L/D \sim 5$ , e isso se deve a algumas quebras das golfadas na sua propagação, provavelmente, relacionadas ao critério de formação e seu tratamento numérico, discutido na Seção 6.2.2.

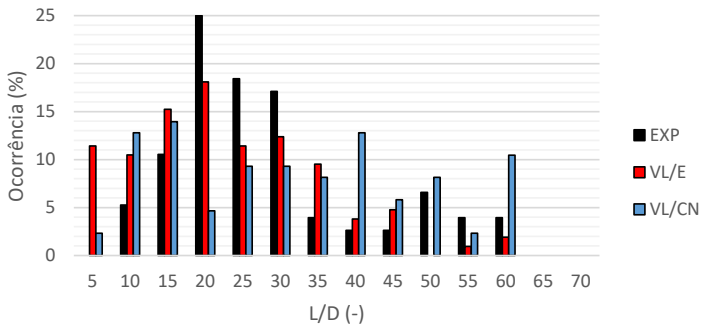
**Figura 6.11** – Comparação dos Resultados de Velocidade Média da Cauda das Golfadas Obtidos Frente ao Refino de Malha



Fonte: elaborado pelo autor.

Além disso, o esquema Van Leer/Crank-Nicolson aparenta distribuir o tamanho das golfadas, tendo em vista as maiores instabilidades intrínsecas a essa discretização e a combinação destas com as dificuldade no tratamento numérico da formação de golfadas.

**Figura 6.12** – Histograma do Comprimento das Golfadas



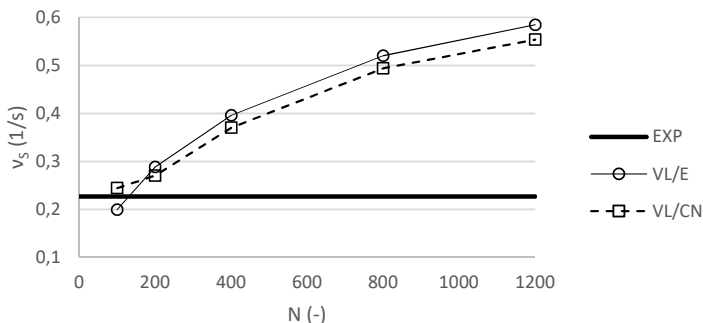
Fonte: elaborado pelo autor. Os dados experimentais foram obtidos de Ujang et al. (2006).

Uma segunda validação foi realizada com outro caso analisado por Ujang et al. (2006), denominado neste trabalho como caso 2. Consiste nas mesmas condições dadas no caso anterior, porém com uma maior a velocidade superficial do gás ( $u_{s,G} = 4,64$  m/s) e mesma velocidade superficial da fase líquida ( $u_{s,G} = 0,61$  m/s). A Figura 6.13 apresenta os resultados médios de frequência.

Observa-se que a frequência média aparenta não convergir com o refino de malha, sempre aumentando a cada refino. Isso se deve ao fato de que o problema na forma que é modelado/descrito matematicamente, pode adquirir comportamento mal-posto. A consequência disso é que os resultados não convergem com o refino de malha, devido a natureza matemática da discretização. O limite de problema bem-posto é dado por um critério e é apresentado, juntamente com os parâmetros dos casos 1 e 2, na Figura 6.14.

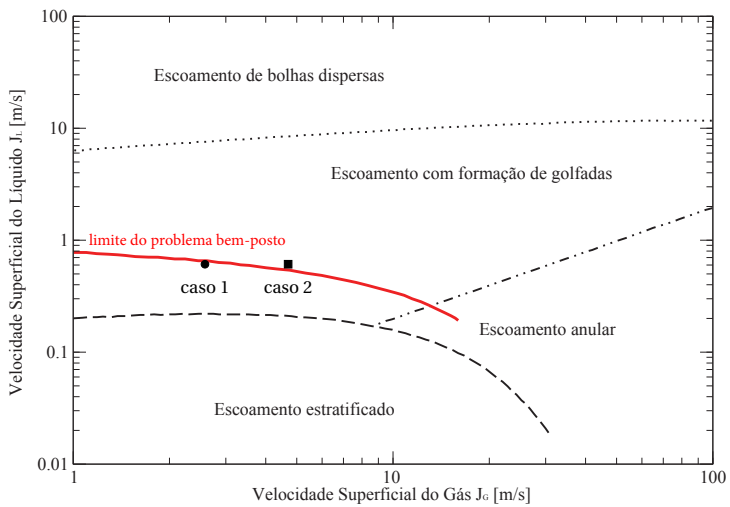
Embora o modelo deste trabalho seja limitado pelo critério de problema bem-posto, Montini (2010) dá orientações para a ampliação da aplicabilidade do modelo. Apesar disso, não sendo o escopo deste trabalho, este fato será ignorado e apenas o caso 1 será considerado daqui em diante.

**Figura 6.13** – Comparação dos Resultados de Velocidade Média do Nariz das Golfadas Obtidos Frente ao Refino de Malha – Caso 2



Fonte: elaborado pelo autor.

**Figura 6.14** – Limites de Formação de Golfadas e de Problema Bem-Posto



Fonte: adaptado de Di Salvo (2014).

## 6.4 Resultados Considerando a Transferência de Massa Interfacial

Nesta seção, o módulo de transferência de massa será ativado sobre as condições experimentais dadas pelo caso 1 de Ujang et al. (2006) ( $u_{S,G} = 2,55$  m/s e  $u_{S,L} = 0,61$  m/s). O objetivo principal deste estudo foi verificar o efeito da transferência de massa interfacial sobre os parâmetros fundamentais do escoamento em padrão de golfadas, como frequência de formação, comprimento e velocidade de propagação. A apresentação dos resultados será dividida em 2 etapas: a primeira considerando a transferência de massa de uma corrente gasosa com diferentes concentrações de  $\text{CO}_2$ ,  $Y_G^{\text{CO}_2} > 0$ , para uma corrente líquida livre de  $\text{CO}_2$ ,  $Y_L^{\text{CO}_2} = 0$ ; já a segunda, considera a transferência de massa de uma corrente líquida com diferentes concentrações,  $Y_L^{\text{CO}_2} > 0$ , para uma corrente gasosa livre,  $Y_G^{\text{CO}_2} = 0$ . Para ambos os casos, as soluções obtidas na posição próxima à saída ( $x = 34,55$  m) serão comparadas com a condição de equilíbrio, isto é, ambas as fases entram com quantidades de  $\text{CO}_2$  em equilíbrio de fases.

Em todos os casos, as análises foram realizadas para diferentes valores do coeficiente de transferência de massa interfacial, uma vez que não foram encontradas na literatura correlações para este parâmetro. Além disso, como descrito, o objetivo principal é determinar se o fenômeno de transferência de massa interfacial afeta os parâmetros de escoamento de golfadas. Desta forma, em todos os casos, os parâmetro obtido com  $K_L = 0$  m/s são incluídos para fins de comparação.

### 6.4.1 Influência sobre a Frequência Mediana das Golfadas

Os resultados de frequência mediana das golfadas são apresentados pela Tabela 6.1, considerando a corrente líquida de entrada livre de  $\text{CO}_2$ ; e pela Tabela 6.2, considerando a corrente gasosa de entrada livre de  $\text{CO}_2$ .

Para o caso de corrente líquida de entrada livre de  $\text{CO}_2$ , observa-se que para baixas concentrações de entrada de  $\text{CO}_2$  na fase gasosa,  $Y_G^{\text{CO}_2} = 0,05$ , a frequência das golfadas mantém-se praticamente constante, mesmo com o acréscimo no coeficiente de transferência de massa  $K_L$ . Isso é esperado tendo em vista que os efeitos resultantes de baixos fluxos de massa interfaciais são desprezíveis para a dinâmica das golfadas. Mesmo para elevadas concentrações de entrada de  $\text{CO}_2$  na fase gasosa,  $Y_G^{\text{CO}_2} =$



0,50, a frequência altera-se de forma pouco pronunciada. Acredita-se que nas condições dadas pelo sistema  $\text{CO}_2$  gasoso sendo absorvido em água, o fluxo de massa interfacial não seja intenso o suficiente para alterar de maneira significativa a frequência de formação das golfadas. Para os casos de alimentação de  $\text{CO}_2$  em equilíbrio nas fases, os resultados de frequência média das golfadas alteram-se de forma mais pronunciada, uma vez que mais  $\text{CO}_2$  está presente e disponível para a migração no sistema gás-líquido, em comparação com os outros casos. Neste caso, embora as fases entrem em equilíbrio de fases, as flutuações de pressão devido a formação e propagação das golfadas resulta no deslocamento do equilíbrio de fases, ocasionando a transferência de massa interfacial. Esse fenômeno, aliado ao elevado coeficiente de transferência de massa (que leva ao equilíbrio de fases mais rapidamente), pode afetar a dinâmica das golfadas. Isso é um forte indício que, sob condições operacionais que viabilizem uma transferência de massa mais intensa, a frequência das golfadas altere-se devido a esse fenômeno, mesmo quando as espécies presentes na alimentação encontrem-se em equilíbrio de fases.

Para o caso de corrente gasosa de entrada livre de  $\text{CO}_2$ , foi observada uma tendência similar, com menores variações de frequência com a alimentação em menor conteúdo de  $\text{CO}_2$ ,  $Y_L^{\text{CO}_2} = 0,63 \cdot 10^{-4}$ , e maiores variações com alimentação concentrada em  $\text{CO}_2$ ,  $Y_L^{\text{CO}_2} = 7,46 \cdot 10^{-4}$ . Em todos os casos, as variações observadas no caso de  $K_L = 0$  m/s não são, evidentemente, devidas a transferência de massa interfacial, mas devidas à influência da composição do gás na sua densidade.

**Tabela 6.1** – Comparação dos Resultados de Frequência Mediana das Gol-fadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Lí-quida Livre de CO<sub>2</sub> e Equilíbrio

$Y_L^{CO_2} (10^{-4})$	→	0	0	0	0	0,63	2,66	7,46
$Y_G^{CO_2}$	→	0	0,05	0,20	0,50	0,05	0,20	0,50
$\downarrow K_L (m/s)$		$\nu_s$	(1/s)					
$10^{-2}$	-	0,276	0,268	0,265	0,262	0,266	0,257	0,285
$10^{-3}$	-	0,276	0,268	0,263	0,261	0,269	0,261	0,267
$10^{-4}$	-	0,276	0,268	0,265	0,258	0,265	0,273	0,268
0	-	0,276	0,264	0,272	0,260	0,264	0,272	0,260

Fonte: elaborado pelo autor.

**Tabela 6.2** – Comparação dos Resultados de Frequência Mediana das Gol-fadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Ga-sosa Livre de CO<sub>2</sub> e Equilíbrio

$Y_L^{CO_2} (10^{-4})$	→	0	0,63	2,66	7,46	0,63	2,66	7,46
$Y_G^{CO_2}$	→	0	0	0	0	0,05	0,20	0,50
$\downarrow K_L (m/s)$		$\nu_s$	(1/s)					
$10^{-2}$	-	0,276	0,261	0,261	0,258	0,266	0,257	0,285
$10^{-3}$	-	0,276	0,253	0,270	0,279	0,269	0,261	0,267
$10^{-4}$	-	0,276	0,265	0,260	0,260	0,265	0,273	0,268
0	-	0,276	0,276	0,276	0,276	0,264	0,272	0,260

Fonte: elaborado pelo autor.

## 6.4.2 Influência sobre o Comprimento Médio das Golfadas

Os resultados de comprimento mediana das golfadas são apresentados pela Tabela 6.3, considerando a corrente líquida de entrada livre de  $\text{CO}_2$ ; e pela Tabela 6.4, considerando a corrente gasosa de entrada livre de  $\text{CO}_2$ .

Observa-se que resultados de comprimento médio variam bastante devido ao comportamento estatístico do tamanho das golfadas. Novamente, conforme esperado, baixas concentrações de alimentação de  $\text{CO}_2$  na fase gasosa,  $Y_G^{\text{CO}_2} = 0,05$ , resultam em um comprimento das golfadas praticamente constante, tendo em vista que baixos fluxos de massa interfacial. Para as demais condições e até mesmo para a condição de equilíbrio de fases na entrada, o tamanho das golfadas altera-se devido à transferência de massa interfacial. Novamente, isso é um indício de que mesmo que a alimentação esteja em equilíbrio de fases, a transferência de massa interfacial pode afetar na dinâmica de formação e propagação das golfadas.

O histograma do tamanho das golfadas para a entrada livre de  $\text{CO}_2$  na fase líquida,  $Y_L^{\text{CO}_2} = 0$ , e elevada fração mássica de  $\text{CO}_2$  na fase gasosa,  $Y_G^{\text{CO}_2} = 0,50$ , é apresentado na Figura 6.15. É possível observar que houve alguma influência da transferência de massa sobre o comprimento das golfadas, embora pouco pronunciada.

O histograma do tamanho das golfadas para a condição de elevada concentração de entrada na fase gasosa,  $Y_G^{\text{CO}_2} = 0,50$ , e em equilíbrio com a fase líquida,  $Y_L^{\text{CO}_2} = 7,46 \cdot 10^{-4}$ , é apresentado na Figura 6.16. Foi observada uma maior influência sobre o comprimento das golfadas, novamente, devido a maior presença de  $\text{CO}_2$  no sistema.

O histograma do tamanho das golfadas para a entrada livre de  $\text{CO}_2$  na fase gasosa,  $Y_G^{\text{CO}_2} = 0$ , e elevada fração mássica de  $\text{CO}_2$  na fase líquida,  $Y_L^{\text{CO}_2} = 7,46 \cdot 10^{-4}$ , é apresentado na Figura 6.17, onde foi observada alguma influência sobre o tamanho mediano das golfadas.

**Tabela 6.3** – Comparação dos Resultados de Comprimento Mediano das Golfadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Líquida Livre de CO<sub>2</sub> e Equilíbrio

$Y_L^{\text{CO}_2} (10^{-4})$	→	0	0	0	0	0,63	2,66	7,46
$Y_G^{\text{CO}_2}$	→	0	0,05	0,20	0,50	0,05	0,20	0,50
$\downarrow K_L$ (m/s)		$L_S/D$	(-)					
$10^{-2}$	-	18,91	20,54	20,91	24,40	21,02	24,19	19,75
$10^{-3}$	-	18,91	20,55	23,48	21,24	19,85	22,50	19,19
$10^{-4}$	-	18,91	20,50	20,80	22,32	20,24	20,19	21,70
0	-	18,91	22,11	18,74	21,56	22,11	18,74	21,56

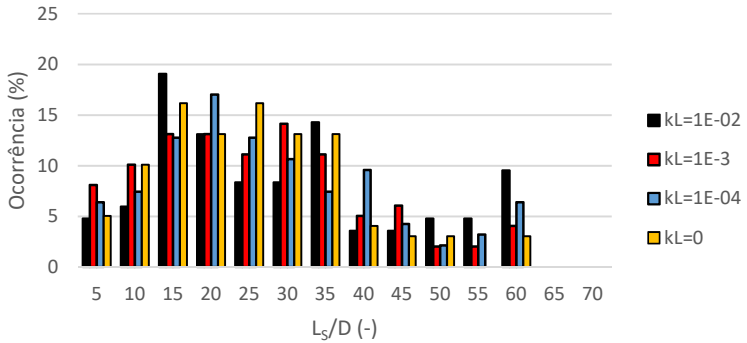
Fonte: elaborado pelo autor.

**Tabela 6.4** – Comparação dos Resultados de Comprimento Mediano das Golfadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Gasosa Livre de CO<sub>2</sub> e Equilíbrio

$Y_L^{\text{CO}_2} (10^{-4})$	→	0	0,63	2,66	7,46	0,63	2,66	7,46
$Y_G^{\text{CO}_2}$	→	0	0	0	0	0,05	0,20	0,50
$\downarrow K_L$ (m/s)		$L_S/D$	(-)					
$10^{-2}$	-	18,91	21,93	21,98	22,57	21,02	24,19	19,75
$10^{-3}$	-	18,91	22,74	18,31	18,02	19,85	22,50	19,19
$10^{-4}$	-	18,91	24,07	23,43	22,17	20,24	20,19	21,70
0	-	18,91	18,91	18,91	18,91	22,11	18,74	21,56

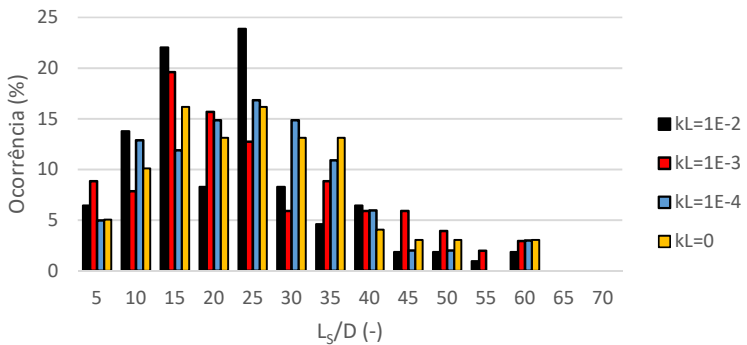
Fonte: elaborado pelo autor.

**Figura 6.15** – Histograma do Comprimento das Golfadas – Corrente Líquida Livre e Corrente Gasosa Concentrada de CO<sub>2</sub> –  $Y_L^{CO_2} = 0$  e  $Y_G^{CO_2} = 0,50$



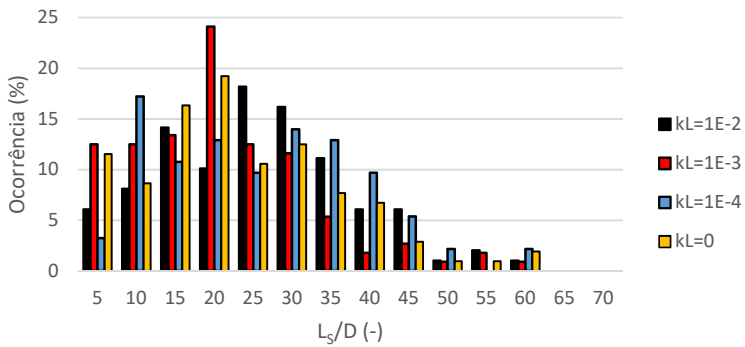
Fonte: elaborado pelo autor.

**Figura 6.16** – Histograma do Comprimento das Golfadas – Correntes Concentradas em Equilíbrio –  $Y_L^{CO_2} = 7,46 \cdot 10^{-4}$  e  $Y_G^{CO_2} = 0,50$



Fonte: elaborado pelo autor.

**Figura 6.17** – Histograma do Comprimento das Golfadas – Corrente Líquida Concentrada e Corrente Gasosa Livre de  $\text{CO}_2$  –  $Y_L^{\text{CO}_2} = 7,46 \cdot 10^{-4}$  e  $Y_G^{\text{CO}_2} = 0$



Fonte: elaborado pelo autor.

### 6.4.3 Influência sobre as Velocidades Médias das Golfadas

Os resultados de velocidade mediana do nariz e da cauda das golfadas são apresentados pelas Tabelas 6.5 e 6.6, considerando a corrente líquida de entrada livre de  $\text{CO}_2$ ; e pelas Tabelas 6.7 e 6.8, considerando a corrente gasosa de entrada livre de  $\text{CO}_2$ .

Para o caso de corrente líquida de entrada livre de  $\text{CO}_2$ , houve pouca influência sobre a velocidade de propagação do nariz das golfadas. A velocidade de propagação da cauda sofreu uma maior influência devido à transferência de massa ocorrer majoritariamente nas regiões anteriores à golfada, o seja, conforme esperado, o tamanho das golfadas não atingirá o equilíbrio, quando há transferência de massa interfacial. Para o caso de corrente gasosa de entrada livre de  $\text{CO}_2$ , foi observada uma tendência similar, embora com uma menor variação da velocidade de propagação da cauda.

Um fato observado foi que a maior velocidade de propagação da cauda ocorreu justamente na condição de maior transferência de massa do líquido para o gás, isto é,  $Y_G^{\text{CO}_2} = 0$ ,  $Y_L^{\text{CO}_2} = 7,46 \cdot 10^{-4}$  e  $K_L = 10^{-2}$ . Isto se deve ao fato de que uma grande transferência de massa do líquido para o gás na região próximo à entrada do duto resulta num acréscimo da pressão neste local, assim o gradiente de pressão na região anterior à golfada é maior quando em comparação à condição sem transferência de massa, resultando em uma maior velocidade de propagação da cauda. Consequentemente, esse pulso é transferido para o nariz da golfada, que também se acelera.

De forma oposta, a menor velocidade de propagação da cauda ocorreu justamente na condição de maior transferência de massa do gás para o líquido, isto é,  $Y_G^{\text{CO}_2} = 0,50$ ,  $Y_L^{\text{CO}_2} = 0$  e  $K_L = 10^{-2}$ . Neste caso, a transferência de massa do gás para o líquido na região próximo à entrada do duto resulta num decréscimo da pressão neste local, assim o gradiente de pressão na região anterior à golfada é menor quando em comparação à condição sem transferência de massa, resultando em uma menor velocidade de propagação da cauda.

**Tabela 6.5** – Comparação dos Resultados de Velocidade Mediana do Nariz das Golfadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Líquida Livre de CO<sub>2</sub> e Equilíbrio

$Y_L^{\text{CO}_2} (10^{-4})$	→	0	0	0	0	0,63	2,66	7,46
$Y_G^{\text{CO}_2}$	→	0	0,05	0,20	0,50	0,05	0,20	0,50
$\downarrow K_L$ (m/s)		$u_N$ (m/s)						
$10^{-2}$	-	3,36	3,36	3,36	3,32	3,39	3,40	3,39
$10^{-3}$	-	3,36	3,36	3,37	3,38	3,38	3,34	3,38
$10^{-4}$	-	3,36	3,40	3,37	3,39	3,37	3,37	3,38
0		3,36	3,36	3,37	3,41	3,36	3,37	3,41

Fonte: elaborado pelo autor.

**Tabela 6.6** – Comparação dos Resultados de Velocidade Mediana da Cauda das Golfadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Líquida Livre de CO<sub>2</sub> e Equilíbrio

$Y_L^{\text{CO}_2} (10^{-4})$	→	0	0	0	0	0,63	2,66	7,46
$Y_G^{\text{CO}_2}$	→	0	0,05	0,20	0,50	0,05	0,20	0,50
$\downarrow K_L$ (m/s)		$u_T$ (m/s)						
$10^{-2}$	-	3,64	3,65	3,40	3,37	3,67	3,69	3,64
$10^{-3}$	-	3,64	3,62	3,51	3,41	3,70	3,63	3,62
$10^{-4}$	-	3,64	3,66	3,40	3,67	3,67	3,62	3,67
0		3,64	3,41	3,62	3,42	3,41	3,62	3,42

Fonte: elaborado pelo autor.



**Tabela 6.7** – Comparação dos Resultados de Velocidade Mediana do Nariz das Golfadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Gasosa Livre de CO<sub>2</sub> e Equilíbrio

$Y_L^{CO_2} (10^{-4})$	→	0	0,63	2,66	7,46	0,63	2,66	7,46
$Y_G^{CO_2}$	→	0	0	0	0	0,05	0,20	0,50
$\downarrow K_L$ (m/s)		$v_N$	(m/s)					
$10^{-2}$	-	3,36	3,39	3,38	3,70	3,39	3,40	3,39
$10^{-3}$	-	3,36	3,38	3,42	3,66	3,38	3,34	3,38
$10^{-4}$	-	3,36	3,42	3,37	3,38	3,37	3,37	3,38
0		3,36	3,36	3,36	3,36	3,36	3,37	3,41

Fonte: elaborado pelo autor.

**Tabela 6.8** – Comparação dos Resultados de Velocidade Mediana da Cauda das Golfadas com Transferência de Massa Interfacial – Corrente Gasosa Livre de CO<sub>2</sub> e Equilíbrio

$Y_L^{CO_2} (10^{-4})$	→	0	0,63	2,66	7,46	0,63	2,66	7,46
$Y_G^{CO_2}$	→	0	0	0	0	0,05	0,20	0,50
$\downarrow K_L$ (m/s)		$v_T$	(m/s)					
$10^{-2}$	-	3,64	3,66	3,69	3,72	3,67	3,69	3,64
$10^{-3}$	-	3,64	3,68	3,68	3,71	3,70	3,63	3,62
$10^{-4}$	-	3,64	3,69	3,67	3,66	3,67	3,62	3,67
0		3,64	3,64	3,64	3,64	3,41	3,62	3,42

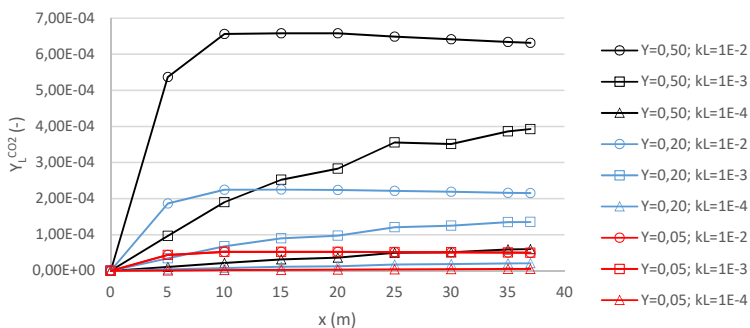
Fonte: elaborado pelo autor.

#### 6.4.4 Perfis Médios de Composição

Os resultados de perfis médios de composição nas fases líquida e gasosa são apresentados nas Figuras 6.18 e 6.19, considerando a corrente líquida de entrada livre de  $\text{CO}_2$ ; nas Figuras 6.20 e 6.21, considerando a corrente gasosa de entrada livre de  $\text{CO}_2$ ; e nas Figuras 6.22 e 6.23, considerando as correntes líquida e gasosa saturadas de  $\text{CO}_2$ .

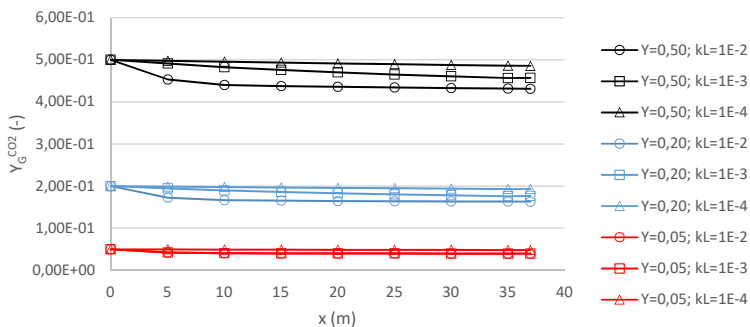
Conforme observado nas Figuras 6.18 e 6.20, a aplicação de elevados coeficientes de transferência de massa ( $K_L = 10^{-2}$  m/s) resultam num rápido estabelecimento do equilíbrio em posições próximas à entrada do duto, por volta de 10 metros, coincidindo com a posição de formação das golfadas. Entretanto, para os demais coeficientes de transferência de massa ( $K_L = 10^{-3}$  e  $10^{-4}$  m/s), o equilíbrio de fases não é atingido até a região de formação das golfadas. O fato do equilíbrio ser estabelecido antes ou após o ponto de formação das golfadas pode ser mais um parâmetro que influencia na dinâmica das mesmas.

**Figura 6.18** – Resultados de Composição Média na Fase Líquida – Corrente Líquida Livre de CO<sub>2</sub>



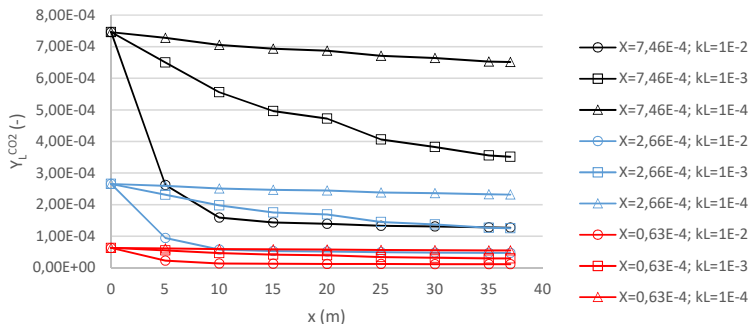
Fonte: elaborado pelo autor. Na figura,  $Y = Y_G^{CO_2}$ .

**Figura 6.19** – Resultados de Composição Média na Fase Gasosa – Corrente Líquida Livre de CO<sub>2</sub>



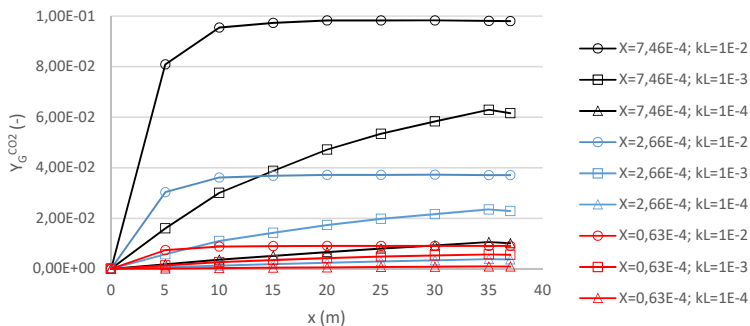
Fonte: elaborado pelo autor. Na figura,  $Y = Y_G^{CO_2}$ .

**Figura 6.20** – Resultados de Composição Média na Fase Líquida – Corrente Gasosa Livre de CO<sub>2</sub>



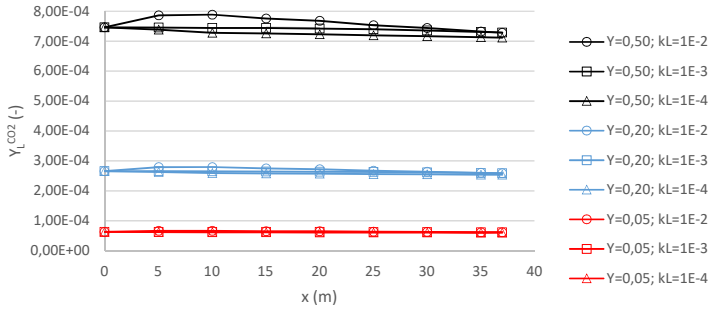
Fonte: elaborado pelo autor. Na figura,  $X = Y_L^{CO_2}$ .

**Figura 6.21** – Resultados de Composição Média na Fase Gasosa – Corrente Gasosa Livre de CO<sub>2</sub>



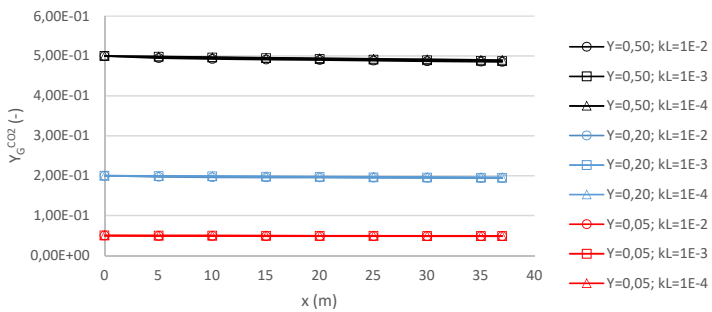
Fonte: elaborado pelo autor. Na figura,  $X = Y_L^{CO_2}$ .

**Figura 6.22** – Resultados de Composição Média na Fase Líquida – Correntes em Equilíbrio



Fonte: elaborado pelo autor. Na figura,  $Y = Y_G^{CO_2}$ .

**Figura 6.23** – Resultados de Composição Média na Fase Gasosa – Correntes em Equilíbrio



Fonte: elaborado pelo autor. Na figura,  $Y = Y_G^{CO_2}$ .

## 6.4.5 Perfis Médios de Pressão

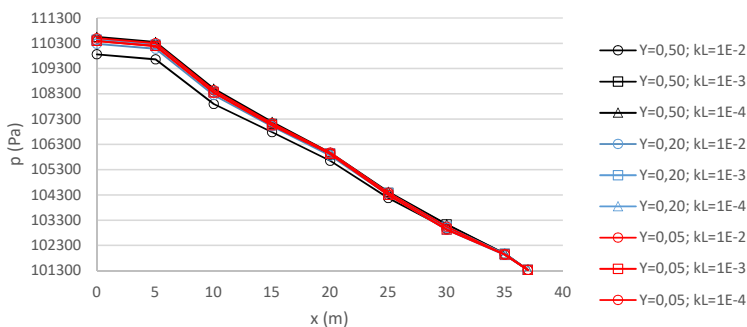
Os perfis médios de pressão são apresentados na Figura 6.24, considerando a corrente líquida de entrada livre de  $\text{CO}_2$ ; na Figura 6.25, considerando a corrente gasosa de entrada livre de  $\text{CO}_2$ ; e na Figura 6.26, considerando as correntes líquida e gasosa saturadas de  $\text{CO}_2$ .

Observa-se na Figura 6.24 que para a condição de maior transferência de massa interfacial do gás para o líquido,  $Y_G^{\text{CO}_2} = 0,50$  e  $K_L = 10^{-2}$  m/s, a variação de pressão é menor devido à perda de  $\text{CO}_2$  da fase gasosa para a fase líquida.

De forma oposta, como observado na Figura 6.25, para a condição de maior transferência de massa interfacial do líquido para o gás,  $Y_L^{\text{CO}_2} = 7,46 \cdot 10^{-4}$  e  $K_L = 10^{-2}$  m/s, a variação de pressão é maior devido ao ganho de  $\text{CO}_2$  da fase gasosa. Dessa forma, é possível afirmar que para condições mais intensas de transferência de massa interfacial, pode haver uma influência maior sobre a pressão.

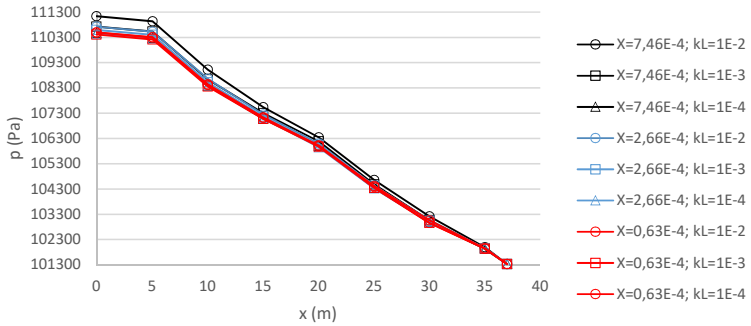
Para as demais condições, incluindo a alimentação de gás e líquido saturados de  $\text{CO}_2$  apresentada Figura 6.26, os dados de pressão média alteram-se pouco devido à transferência de massa pouco intensa.

**Figura 6.24** – Comparação dos Resultados de Pressão Média com Transferência de Massa – Corrente Líquida Livre de  $\text{CO}_2$



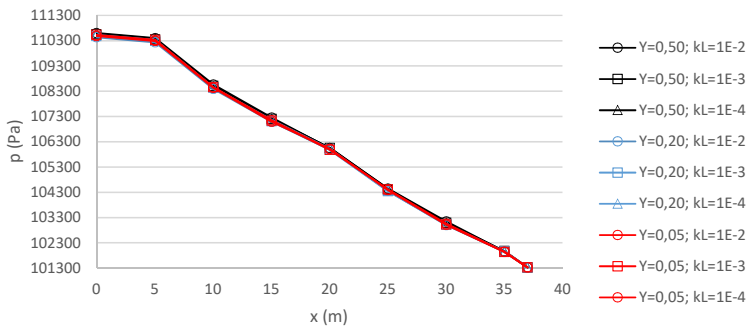
Fonte: elaborado pelo autor. Na figura,  $Y = Y_G^{\text{CO}_2}$ .

**Figura 6.25** – Comparação dos Resultados de Pressão Média com Transferência de Massa – Corrente Gasosa Livre de CO<sub>2</sub>



Fonte: elaborado pelo autor. Na figura,  $Y = Y_G^{CO_2}$ .

**Figura 6.26** – Comparação dos Resultados de Pressão Média com Transferência de Massa – Correntes em Equilíbrio



Fonte: elaborado pelo autor. Na figura,  $X = Y_L^{CO_2}$ .

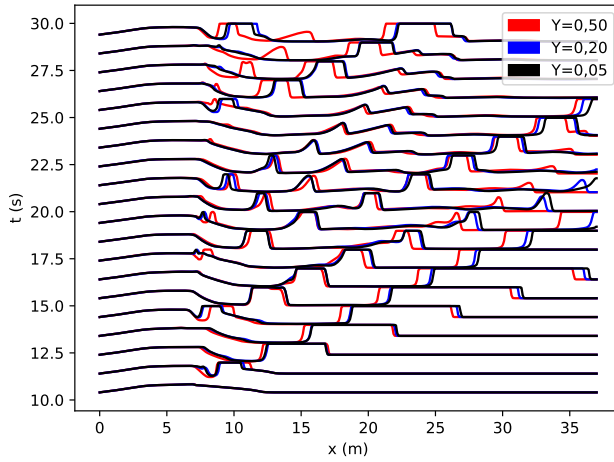
### 6.4.6 Formação das Golfadas sobre Diferentes Condições de Transferência de Massa Interfacial

Por fim, foi traçada a fração volumétrica da fase líquida nos primeiros 30 segundos de simulação, a fim de verificar a influência da transferência de massa sobre a dinâmica de formação das golfadas. A partir dos 30 segundos, o comportamento aleatório prevalece, não sendo mais possível comparar os resultados diretamente.

A Figura 6.27 apresenta os resultados de fração volumétrica da fase líquida para a condição de corrente líquida livre de  $\text{CO}_2$ ,  $Y_L^{\text{CO}_2} = 0$ , e máximo coeficiente de transferência de massa,  $K_L = 10^{-2}$  m/s. Conforme discutido na Subseção 6.4.3, a velocidade de propagação das golfadas é menor para a condição de máximo fluxo de massa da fase gasosa para a fase líquida ( $Y_G^{\text{CO}_2} = 0,50$ ), conforme visto pela curva vermelha na Figura 6.27, onde se observa também que a formação de golfada, ou seja, a transição estratificado-slug ocorre antes, em condições de alto fluxo de massa interfacial. De forma oposta, conforme discutido também na Subseção 6.4.3, a velocidade de propagação das golfadas é maior para a condição de máximo fluxo de massa da fase líquida para a fase gasosa, conforme apresentado na Figura 6.28, onde as curvas em ordem decrescente de velocidade (e de grandeza do fluxo interfacial líquido-gás) são de cor preta, azul e vermelha.

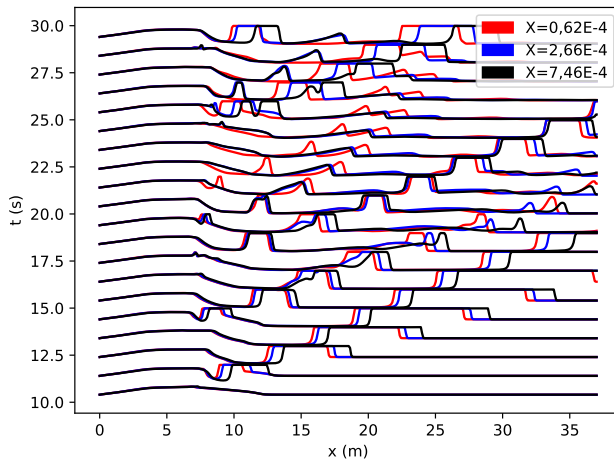


**Figura 6.27** – Perfis de Formação das Golfadas – Corrente Líquida Livre de  $\text{CO}_2$  e  $K_L = 10^{-2}$  m/s



Fonte: elaborado pelo autor. Na figura,  $Y = Y_G^{\text{CO}_2}$ .

**Figura 6.28** – Perfis de Formação das Golfadas – Corrente Gasosa Livre de  $\text{CO}_2$  e  $K_L = 10^{-2}$  m/s



Fonte: elaborado pelo autor. Na figura,  $X = Y_L^{\text{CO}_2}$ .



# CONCLUSÕES E SUGESTÕES

## 7.1 Conclusões deste Trabalho

Neste trabalho, foi desenvolvido um algoritmo para a solução do modelo de dois-fluidos unidimensional, com implementação de funções de alta ordem espacial e temporal. Este algoritmo foi capaz de simular diversos problemas testes presentes na literatura, bem como escoamentos multifásicos (bifásicos gás-líquido) reais, nos padrões disperso vertical e estratificado horizontal com formação de golfadas. Não foi encontrado na literatura um estudo que implemente funções de alta ordem espacial e temporal no âmbito do modelo de dois-fluidos unidimensional, sendo esta uma contribuição original oferecida por este estudo. Além disso, apesar de ser um fenômeno de extrema importância no âmbito de aplicações industriais, em particular nas indústrias do petróleo e petroquímica, são muito escassos os trabalhos na literatura que incluem o fenômeno de transferência de massa interfacial. Em particular, não foram encontrados trabalhos sobre escoamentos em padrão de golfadas que incluam este fenômeno, representando outra importante contribuição do trabalho.

Em relação à validação do módulo de transferência de massa, o algoritmo foi capaz de simular a transferência de massa interfacial em um escoamento vertical líquido-gás disperso no aparato denominado coluna de bolhas, sistema este estudado por Deckwer, Adler e Zaidi (1978). Os resultados obtidos neste estudo concordaram muito bem com os resultados

experimentais, com melhor aderência mesmo quando comparado com resultados numéricos presentes na literatura, apresentados por Rzehak e Krepper (2016). Dessa forma, além de validar a implementação do módulo de transferência de massa, a metodologia aqui desenvolvida mostrou-se superior à encontrada na literatura.

Já em relação à simulação dos escoamentos bifásicos horizontais com formação de golfadas e sem transferência de massa, observou-se que a implementação de funções de alta ordem espacial resultou em uma mais rápida convergência com o refino de malha, onde 400 volumes foram suficientes para o esquema Van Leer/Euler ( $\Delta x/D \sim 1,2$ ) frente 1200 volumes relativos ao usual esquema *Upwind*/Euler utilizado nos modelos de formação de golfadas, presentes na literatura ( $\Delta x/D \sim 0,4$ ), conforme Bonizzi e Issa (2003). Foi possível simular a formação de golfadas e validar com dados experimentais obtidos do estudo de Ujang et al. (2006), obtendo-se boa concordância entre os resultados.

Quanto a simulação destes escoamentos considerando a transferência de massa, observou-se que dadas as condições operacionais escolhidas neste estudos, os parâmetros não se alteram de maneira significativa, embora, para condições de alto fluxo de massa interfacial, foram observadas alterações sistemáticas. As condições operacionais escolhidas, bem como o componente volátil/condensável ( $\text{CO}_2$ ), resultam em uma transferência de massa interfacial pouco intensa. É possível que em sistemas reais com altas concentrações de componentes leves bem voláteis na corrente líquida, a intermitência característica dos escoamentos com formação de golfadas aliada às ondas de pressão, desloquem o equilíbrio dos sistemas químicos, resultando na transferência de massa interfacial. Este transporte pode efetivamente ocasionar a alteração dos parâmetros das golfadas.

## 7.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Este trabalho serve como base para estudos futuros relacionados à implementação do modelo de dois-fluidos unidimensional, em sua infinidade de aplicações práticas. Não foi encontrado na literatura qualquer outro trabalho que implemente funções de alta ordem espacial e temporal no âmbito do modelo de dois-fluidos unidimensional.

Mais especificamente, porém sem se limitar por essa via, este trabalho fornece um caminho para o estudo da transferência de massa interfacial em escoamentos bifásicos gás-líquido horizontais com formação de golfadas. Desta forma, abre-se uma grande gama de possibilidade para o desenvolvimento de futuros trabalhos, dentre as quais pode-se recomendar:

- A aplicação do modelo ao estudo de casos com transferência de massa interfacial mais intensa, procurando verificar como são afetados os parâmetros de formação e de propagação de golfadas;
- A incorporação de um modelo para o cálculo do coeficiente de transferência de massa  $K_L$  para o caso de escoamento gás-líquido horizontal com formação de golfadas;
- A implementação dos termos-fonte na formulação  $\theta$ , assim como outras formulações temporais e verificar a adaptabilidade à técnica de *slug tracking*;
- A realização de novos ensaios com algum caso real, como a evaporação/condensação de componentes leves em uma corrente de gás e óleo reais, através de modelos termodinâmicos mais apurados;
- A implementação de um módulo de transferência de calor e incorporação dos efeitos da temperatura sobre a termodinâmica de equilíbrio.



# REFERÊNCIAS

## BIBLIOGRÁFICAS

- ALMEIDA, V. R.; CONTE, M. G.; BARBUTO, F. A. A.; MORALES, R. E. M. **Numerical simulation of two-phase slug flow using a hybrid code based on slug tracking and slug capturing methodologies.** *Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering*, n. 1983, 2016.
- BIBERG, D. **Explicit approximation for the wetted angle in two-phase stratified pipe flow.** *Canadian Journal Of Chemical Engineering*, v. 77, n. 6, pp. 1221–1224, 1999.
- BONIZZI, M. **Transient one-dimensional modelling of multiphase slug flows.** pp. 1–310, 2003.
- BONIZZI, M.; ISSA, R. I. **A model for simulating gas bubble entrainment in two-phase horizontal slug flow.** *International Journal of Multiphase Flow*, v. 29, n. 11, pp. 1685–1717, 2003.
- BRATLAND, O. **Pipe Flow 2: Multi-phase Flow Assurance.** 2010.
- CUSSLER, E. L. **Diffusion Mass Transfer in Fluid Systems**, 3 edição. Cambridge University Press, Cambridge, 2007.
- DECKWER, W. D.; ADLER, I.; ZAIDI, A. **A comprehensive study on CO<sub>2</sub>-interphase mass transfer in vertical cocurrent and countercurrent gas-liquid flow.** *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 56, n. 1, pp. 43–55, fev, 1978.
- DI SALVO, F. R. **Mechanistic Models to Simulate Slug Flow in Horizontal and Vertical Pipes.** Ph.D. Thesis, Imperial College London, 2014.
- HAND, N. **Gas-liquid co-current flow flow in horizontal pipe.** Ph.D. Thesis, Queen's University Belfast, 1991.

- ISHII, M.; HIBIKI, T. **Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow**. Springer New York, New York, NY, 2011.
- ISHII, M.; ZUBER, N. **Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows**. *AIChE Journal*, v. 25, n. 5, pp. 843–855, sep, 1979.
- ISSA, R.; KEMPE, M. **Simulation of slug flow in horizontal and nearly horizontal pipes with the two-fluid model**. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 29, n. 1, pp. 69–95, jan, 2003.
- LOCHIEL, A.; CALDERBANK, P. **Mass transfer in the continuous phase around axisymmetric bodies of revolution**. *Chemical Engineering Science*, v. 19, n. 7, pp. 471–484, jul, 1964.
- MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**, 2a edição. LTC, Rio de Janeiro, 2004.
- MONTINI, M. **Closure relations of the one dimensional two fluid model for the simulation of slug flows**. Ph.D. Thesis, Imperial College London, 2010.
- OMGBA-ESSAMA, C. **Numerical Modelling of Transient Gas-Liquid Flows (Application to Stratified & Slug Flow Regimes)**. Ph.D. Thesis, Cranfield University, 2004.
- PAILLÈRE, H.; CORRE, C.; GARCIA CASCALES, J. **On the extension of the AUSM+ scheme to compressible two-fluid models**. *Computers & Fluids*, v. 32, n. 6, pp. 891–916, jul, 2003.
- PALADINO, E. E. **Estudo do Escoamento Multifásico em Medidores de Vazão do tipo Pressão Diferencial**. Ph.D. Thesis, Universidade Federal de Santa Catarina, 2005.
- PATANKAR, S. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow (Hemisphere Series on Computational Methods in Mechanics and Thermal Science)**, 1 edição. CRC Press, 1980.
- POLYANIN, A. D.; DIL'MAN, V. V. **The method of asymptotic analogies in the mass and heat transfer theory and chemical engineering science**. *Int. J. Heat Mass Transfer*, v. 33, n. 6, pp. 1057–1072, 1990.



- POLYANIN, A. D.; CHERNOUITSAN, A. I.; EGOROV, A.; MANZHIROV, A. V.; POLYANIN, V. D.; POPOV, V. D.; PUTYATIN, P. V.; REPINA, Y. V.; SAFRAI, V. M.; ZHUROV, A. I. **A Concise Handbook of Mathematics, Physics, and Engineering Sciences**, 1a edição. CRC Press Taylor & Francis Group, Boca Raton, FL, 2011.
- RZEHA, R.; KREPPER, E. **Euler-Euler simulation of mass-transfer in bubbly flows**. *Chemical Engineering Science*, v. 155, pp. 459–468, nov, 2016.
- SIMÕES, E. F.; CARNEIRO, J. N.; NIECKELE, A. O. **Numerical prediction of non-boiling heat transfer in horizontal stratified and slug flow by the Two-Fluid Model**. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, v. 47, pp. 135–145, 2014.
- SPEEDING, P.; HAND, N. **Prediction in stratified gas-liquid co-current flow in horizontal pipelines**. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 40, n. 8, pp. 1923–1935, 1997.
- TAITEL, Y.; DUKLER, A. E. **A model for predicting flow regime transitions in horizontal and near horizontal gas-liquid flow**. *AIChE Journal*, v. 22, n. 1, pp. 47–55, 1976.
- TAITEL, Y.; DUKLER, A. E. **A model for slug frequency during gas-liquid flow in horizontal and near horizontal pipes**. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 3, n. 6, pp. 585–596, 1977.
- UJANG, P. M.; LAWRENCE, C. J.; HALE, C. P.; HEWITT, G. F. **Slug initiation and evolution in two-phase horizontal flow**. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 32, n. 5, pp. 527–552, 2006.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics**, 2 edição. Pearson, 2007.



APÊNDICE

# A

## BREVE DEDUÇÃO DAS EQUAÇÕES DO MODELO DE DOIS-FLUIDOS

Esse apêndice apresenta uma breve dedução das equações do modelo de dois-fluidos a partir da formulação local e instantânea. Para maiores informações, consultar Ishii e Hibiki (2011).

### A.1 Dedução a Partir da Formulação Genérica

Partindo das equações de conservação da massa global, quantidade de movimento e espécies para sistemas monofásicos, dados por,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \nabla \cdot \mathbf{T} - \nabla p + \rho \mathbf{g} \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\partial \rho X_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} X_i) = \nabla \cdot \mathbf{J}_i + R_i''' \quad (\text{A.3})$$

Pode-se definir função indicadora de fase  $X_k$  dado um instante  $t$  conforme,

$$X_k(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} 1, & \text{se } \mathbf{r} \in \text{fase 'k'} \\ 0, & \text{se } \mathbf{r} \notin \text{fase 'k'} \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

A derivada material da função indicadora de fase sobre a própria interface é nula, dada a definição da mesma na Equação A.4. Dessa forma, vale a relação dada por,

$$\frac{D_I X_k}{D t} = \frac{\partial X_k}{\partial t} + \mathbf{u}_I \cdot \nabla X_k = 0 \quad (\text{A.5})$$

É possível multiplicar a equação de conservação de uma variável transportada genérica  $\phi_k$  pela função indicadora de fase  $X_k$ . Utilizando a relação da derivada material, resulta em,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \phi_k X_k) + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k \phi_k X_k) = \nabla \cdot (\mathbf{J}_k X_k) + S^{\phi_k} X_k \\ + [\rho_k \phi_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_I) - \mathbf{J}_k] \cdot \nabla X_k \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

onde  $\nabla X_k$  assume valores não-nulos apenas sobre a interface; este vetor é normal à interface.

Definindo a média temporal e a fração volumétrica fásica, dada pela média temporal da função indicadora de fase,

$$\frac{1}{\delta t} \int_t^{t+\delta t} \phi = \overline{\phi}^t \quad (\text{A.7})$$

$$\overline{X_k}^t = \alpha_k \quad (\text{A.8})$$

Definindo as médias fásica para a massa específica e mássica para a variável transportada, dadas por,

$$\overline{\phi_k}^{X_k} = \frac{\overline{X_k \phi_k}^t}{\overline{X_k}^t} \quad (\text{A.9})$$

$$\overline{\phi_k}^{\rho_k X_k} = \frac{\overline{\rho_k X_k \phi_k}^t}{\overline{\rho_k X_k}^t} \quad (\text{A.10})$$

E também fazendo a decomposição de Reynolds para a variável bem como para as velocidades,

$$\phi_k = \overline{\phi_k}^t + \phi_k' \quad (\text{A.11})$$

$$\mathbf{v}_k = \overline{\mathbf{v}_k}^t + \mathbf{v}_k' \quad (\text{A.12})$$

Além de considerar que a média da média é igual à própria média e que a média das flutuações é nula, dadas por,

$$\overline{\overline{\phi_k}^t} = \overline{\phi_k}^t \quad (\text{A.13}) \quad \overline{\phi_k'}^t = 0 \quad (\text{A.14})$$

Pode-se deduzir as relações para o termo temporal,

$$\overline{\rho_k \phi_k X_k}^t = \overline{\rho_k}^{X_k} \alpha_k \overline{\phi_k}^{\rho_k X_k} \quad (\text{A.15})$$

Para o termo advectivo, dividindo na parte média e de flutuação,

$$\overline{\rho_k \phi_k \mathbf{v}_k X_k}^t = \overline{\rho_k \phi_k}^t \overline{\mathbf{v}_k}^t X_k + \overline{\rho_k \phi_k' \mathbf{v}_k' X_k}^t \quad (\text{A.16})$$

a parte média,

$$\overline{\rho_k \phi_k}^t \overline{\mathbf{v}_k}^t X_k = \overline{\rho_k}^{X_k} \alpha_k \overline{\phi_k}^{\rho_k X_k} \overline{\mathbf{v}_k}^{\rho_k X_k} \quad (\text{A.17})$$

e a parte turbulenta pode ser descrito por um fluxo turbulento,

$$\overline{\rho_k \phi_k' \mathbf{v}_k' X_k}^t = \alpha_k \overline{\rho_k \phi_k' \mathbf{v}_k'}^{X_k} \quad (\text{A.18}) \quad \overline{\rho_k \phi_k' \mathbf{v}_k'}^{X_k} = -\mathbf{J}_k^T \quad (\text{A.19})$$

Para os termos difusivo e fonte,

$$\overline{\mathbf{J}_k X_k} = \alpha_k \overline{\mathbf{J}_k}^{X_k} \quad (\text{A.20}) \quad \overline{\mathbf{S}_k X_k} = \alpha_k \overline{\mathbf{S}_k}^{X_k} \quad (\text{A.21})$$

Finalmente, obtém-se a equação dada por,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho_k}^{X_k} \alpha_k \overline{\phi_k}^{\rho_k X_k}) + \nabla \cdot (\overline{\rho_k}^{X_k} \alpha_k \overline{\phi_k}^{\rho_k X_k} \overline{\mathbf{v}_k}^{\rho_k X_k}) = \nabla \cdot [\alpha_k (\overline{\mathbf{J}_k}^{X_k} + \mathbf{J}_k^T)] \\ + \alpha_k \overline{\mathbf{S}_k}^{X_k} + \overline{[\rho_k \phi_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_l) - \mathbf{J}_k] \cdot \nabla X_k}^t \quad (\text{A.22}) \end{aligned}$$

A partir daqui, serão apresentados modelos simples para a formulação genérica do modelo de dois-fluidos. É possível modelar o termo de transporte advectivo pela interface bem como o transporte interfacial advectivo da variável  $\phi_k$  por,

$$\overline{\rho_k(\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_I) \cdot \nabla X_k}^t = \sum_{j \neq k} \Gamma_{jk} \quad (\text{A.23})$$

$$\overline{\rho_k(\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_I) \phi_k \cdot \nabla X_k}^t = \sum_{j \neq k} \Gamma_{jk} (\overline{\phi_j}^{\rho_j X_j} - \overline{\phi_k}^{\rho_k X_k}) \quad (\text{A.24})$$

Adicionalmente, o fluxo difusivo interfacial pode ser modelado por,

$$\overline{\mathbf{J}_k \cdot \nabla X_k}^t = \sum_{j \neq k} C_{jk} a_{jk} (\overline{\phi_k}^{\rho_k X_k} - \overline{\phi_j}^{\rho_j X_j}) \quad (\text{A.25})$$

A partir daqui, serão inibidos todos os sobrescritos referentes às médias fásica, mássica e temporal, a fim de melhorar a leitura. Assim, as massas específicas serão sempre médias fásicas e as demais variáveis médias mássicas, **exceto** os termos indicados pela barra referente à média temporal. Feitas essas considerações, o modelo de dois-fluidos genérico pode ser descrito por,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \alpha_k \phi_k) + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \mathbf{v}_k \phi_k) &= \nabla \cdot [\alpha_k (\mathbf{J}_k + \mathbf{J}_k^T)] + \alpha_k S_k \\ &+ \sum_{j \neq k} (\Gamma_{jk} \phi_j - \Gamma_{kj} \phi_k) + \sum_{j \neq k} C_{kj} a_{kj} (\phi_j - \phi_k) \quad (\text{A.26}) \end{aligned}$$

Nas próximas seções, serão deduzidas as equações particularizadas do modelo de dois-fluidos.

## A.2 Particularização para a Conservação da Massa por Fase

Partindo da equação de conservação da massa por fase,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k) + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{v}_k) = 0 \quad (\text{A.27})$$

Executando o procedimento da seção anterior sobre a equação de conservação da massa resulta em,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k) + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \mathbf{v}_k) = \sum_{j \neq k} \Gamma_{jk} \quad (\text{A.28})$$

A obtenção da equação da conservação da massa pelo modelo de dois-fluidos é bem direta e não será muito explorada aqui.

## A.3 Particularização para a Conservação da Quantidade de Movimento

Partindo da equação de conservação da quantidade de movimento,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \mathbf{v}_k) + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) = \nabla \cdot \mathcal{T}_k - \nabla p + \rho_k \mathbf{g} \quad (\text{A.29})$$

Executando o procedimento da seção anterior, com especial atenção ao termo de pressão,

$$X_k \nabla p = \nabla(p X_k) - p \nabla X_k \quad (\text{A.30})$$

Resulta em,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k \mathbf{v}_k) + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) = & \nabla \cdot [\alpha_k (\mathbf{T}_k + \mathbf{T}_k^T)] - \nabla(\alpha_k p_k) + \rho_k \alpha_k \mathbf{g} \\ & + [\overline{\rho_k \mathbf{v}_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_I)}] \cdot \nabla X_k + \overline{p \nabla X_k} - \overline{\mathbf{T}_k \cdot \nabla X_k} \quad (\text{A.31}) \end{aligned}$$

Os termos contendo o gradiente da função indicadora podem ser escrito por,

$$\overline{p \nabla X_k} = p_{k,I} \nabla \alpha_k \quad (\text{A.32})$$

Separando o termo em duas parcelas referentes à tensão interfacial e tensão de arraste generalizada,

$$\overline{\mathbf{T}_k \cdot \nabla X_k} = \nabla \alpha_k \cdot \mathbf{T}_{k,I} + \mathbf{M}_k^d \quad (\text{A.33})$$

Realizando o procedimento análogo da seção anterior e reorganizando,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \alpha_k \mathbf{v}_k) + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) &= \nabla \cdot [\alpha_k (\mathbf{T}_k + \mathbf{T}_k^T)] - \alpha_k \nabla p_k + \rho_k \alpha_k \mathbf{g} \\ &+ \sum_{j \neq k} \Gamma_{jk} (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k) + (p_{k,I} - p_k) \nabla \alpha_k + \mathbf{M}_k^d - \nabla \alpha_k \cdot \mathbf{T}_{k,I} \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

## A.4 Conservação das Espécies

Partindo da equação de conservação das espécies químicas,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_k Y_k^i) + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{v}_k Y_k^i) = \nabla \cdot \mathbf{J}_k^i + R_k^{i''''} \quad (\text{A.35})$$

Executando o procedimento da seção anterior, resulta em,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \alpha_k Y_k^i) + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \mathbf{v}_k Y_k^i) &= \nabla \cdot [\alpha_k (\mathbf{J}_k^i + \mathbf{J}_k^{i,T})] + \alpha_k R_k^{i''''} \\ &+ \overline{[\rho_k Y_k^i (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_I) - \mathbf{J}_k^i] \cdot \nabla X_k} \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

Note que o fluxo total interfacial foi descrito pelos termos de troca de massa.

$$\overline{[\rho_k Y_k^i (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_I) - \mathbf{J}_k^i] \cdot \nabla X_k} = \sum_{j \neq k} \Gamma_{jk}^i \quad (\text{A.37})$$

Resulta na equação final,



$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \alpha_k Y_k^i) + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \mathbf{v}_k Y_k^i) = \nabla \cdot [\alpha_k (\mathbf{J}_k^i + \mathbf{J}_k^{i,T})] + \alpha_k R_k^{i''''} + \sum_{j \neq k} \Gamma_{jk}^i \quad (\text{A.38})$$