2 Modelagem Matemática

O modelo selecionado para investigar o escoamento bifásico no interior do misturador é o modelo *Euleriano-Euleriano* (Ishii e Hibiki, 2006). Neste modelo, as grandezas de interesse são grandezas médias nas regiões ocupadas por cada fase.

$$\langle Z_{\alpha} \rangle (\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\forall_{\alpha}} \int_{\forall_{\alpha}} Z_{\alpha} d\forall$$
 (2.1)

onde \forall é o volume; Z é uma grandeza genérica qualquer, α é a fase.

O modelo é obtido a partir da integração das equações de conservação (massa, e energia) e balanço de quantidade de movimento na região ocupada por cada fluido, resultando em um conjunto de equações para cada fase. Estas equações envolvem termos de interações interfaciais, fazendo-se necessária a utilização de equações de fechamento para determinar estas interações, as quais são geralmente empíricas.

Neste trabalho se considerou o escoamento bifásico (ar-água), isotérmico e sem mudanças de fase. Considerou-se ainda que ambas as fases são incompressíveis, com propriedades termofísicas constantes, e se comportam como fluido Newtoniano. Sendo assim as equações de conservação reduzem-se às equações de conservação da massa e de quantidade de movimento.

Como o escoamento de interesse é tipicamente turbulento, empregou-se um modelo baseado na média de Reynolds para estimar o campo de velocidade, pressão e fração volumétrica das fases, i.e., todas as variáveis apresentadas são valores médios temporais de acordo com a média de Reynolds

$$\overline{\langle Z_{\alpha} \rangle} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} \langle Z_{\alpha} \rangle \, dt \tag{2.2}$$

O modelo selecionado para representar a turbulência foi o modelo de turbulência SST k-ω (*Shear Stress Transport*) de Menter (1994), o qual será detalhado mais adiante.

Para facilitar a apresentação, as variáveis médias na fase são apresentadas sem o símbolo < >. A barra representando a média de Reynolds também foi omitida.

A equação de conservação de massa para uma fase α é:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(r_{\alpha} \rho_{\alpha} \right) + \nabla \bullet \left(r_{\alpha} \rho_{\alpha} \vec{U}_{\alpha} \right) = 0$$
(2.3)

onde, $r_{\alpha} = \forall_{\alpha}/\forall$ é a fração volumétrica da fase α , \vec{U}_{α} é o vetor velocidade da fase α ; ρ_{α} é densidade da fase α . A equação de balanço da quantidade de movimento para a fase α pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(r_{\alpha} \rho_{\alpha} \vec{U}_{\alpha} \right) + \nabla \bullet \left(r_{\alpha} \left(\rho_{\alpha} \vec{U}_{\alpha} \vec{U}_{\alpha} \right) \right) =$$

$$= -r_{\alpha} \nabla p_{\alpha} + r_{\alpha} \rho_{\alpha} \vec{g} + \nabla \bullet \left[r_{\alpha} \left(\underline{\tau_{\alpha}} + \underline{\tau_{\alpha}^{t}} \right) \right] + M_{\alpha\beta}$$
(2.4)

onde p_{α} é a pressão na fase α , $\underline{\tau_{\alpha}}$ é o tensor viscoso da fase α e $\underline{\tau_{\alpha}^{t}}$ é a tensão turbulenta. $M_{\alpha\beta}$ é a força total imposta à fase α devido à interação com a outra fase β .

Para fluido Newtoniano e utilizando a hipótese de Boussinesq, as tensões viscosa e turbulenta são

$$\underline{\underline{\tau}_{\alpha}} + \underline{\underline{\tau}_{\alpha}}^{t} = \mu_{\alpha,ef} \left[\nabla \vec{U}_{\alpha} + \left(\nabla \vec{U}_{\alpha} \right)^{T} \right]$$
(2.5)

onde a viscosidade efetiva, $\mu_{\alpha,ef} = \mu_{\alpha} + \mu_t$, sendo μ_{α} a viscosidade molecular da fase a e μ_t a viscosidade turbulenta, a qual é determinada para a fase contínua.

Diferentes modelos podem ser utilizados para estimar as forças interfaciais, que compõem M_{α} . A seguir os modelos considerados neste trabalho são apresentados.

2.1

Forças Interfaciais de Transferência de Quantidade de Movimento Linear

A transferência interfacial de quantidade de movimento linear devido às forças interfaciais agindo na fase α , referente à interação com a outra fase β , possui o mesmo módulo e direções opostas da força que atua em β devido a fase α

$$M_{\alpha\beta} = -M_{\beta\alpha} \tag{2.6}$$

Diversos tipos de forças interfaciais podem ser considerados dependendo da aplicação. Por exemplo, a força interfacial total atuante entre as fases, pode ser composta de força de arraste $(M^{D}_{\alpha\beta})$, força de sustentação $(M^{L}_{\alpha\beta})$, força de lubrificação da parede $(M^{LUB}_{\alpha\beta})$, força de massa virtual $(M^{VM}_{\alpha\beta})$, força de dispersão turbulenta $(M^{TD}_{\alpha\beta})$, etc.

$$M_{\alpha\beta} = M^{D}_{\alpha\beta} + M^{L}_{\alpha\beta} + M^{LUB}_{\alpha\beta} + M^{VM}_{\alpha\beta} + M^{TD}_{\alpha\beta} + \dots$$
(2.7)

A força de lubrificação da parede é uma força que tende a afastar as bolhas da parede.

A força de massa virtual aparece devido à aceleração relativa de uma parcela de massa da fase contínua que é arrastada pela fase dispersa adquirindo a sua velocidade.

A força de dispersão turbulenta descreve o efeito das flutuações turbulentas de velocidade do líquido nas bolhas.

No presente trabalho, considerou-se apenas forças interfaciais devido ao arraste e sustentação que, de acordo com o trabalho de Riera-Ortiz et al (2011), são as mais significativas na transferência de quantidade de movimento linear. Riera-Ortiz et al (2011) obteve bons resultados ao considerar somente estas duas forças, que serão descritas mais detalhadamente a seguir. Riera-Ortiz et al (2011) mostrou ainda que a inclusão da força de dispersão turbulenta não reduz significativamente o erro no *hold-up*, ao mesmo tempo que aumenta a demanda computacional.

2.1.1 Força de arraste

A força de arraste interfacial é proporcional à diferença de velocidades entre as fases.

$$M^{D}_{\alpha\beta} = c^{D}_{\alpha\beta} \left(\vec{U}_{\beta} - \vec{U}_{\alpha} \right)$$
(2.8)

onde o coeficiente de arraste é:

$$c_{\alpha\beta}^{D} = \frac{C_{D}}{8} A_{\alpha\beta} \rho_{\alpha} \left| \vec{U}_{\beta} - \vec{U}_{\alpha} \right|$$
(2.9)

sendo C_D o coeficiente de arraste adimensional. $A_{\alpha\beta}$ é a área superficial por unidade de volume, assumindo-se que a fase β está presente como partículas esféricas de diâmetro médio d_{β} .

$$A_{\alpha\beta} = \frac{6r_{\beta}}{d_{\beta}} \tag{2.10}$$

Neste trabalho utilizou-se o modelo de Ishii-Zuber (Ishii e Zuber, 1979) para calcular o coeficiente de arraste adimensional C_D uma vez que este considera efeitos de distorção das bolhas, correlaciona bem os dados na faixa de operação das simulações (Santos et al., 2007), e não depende de parâmetros ajustáveis pelo usuário, o que aumenta a confiabilidade no modelo para extrapolações.

De acordo com o modelo de Ishii-Zuber, para o regime de partículas esféricas, o coeficiente de arraste é função de um número de Reynolds modificado, Re_m , sendo calculado da seguinte maneira

$$C_D(esfera) = \frac{24}{\text{Re}_m} \left(1 + 0.15 \,\text{Re}_m^{0.687} \right)$$
(2.11)

com

$$\operatorname{Re}_{m} = \frac{\rho_{l} \left| \vec{U}_{g} - \vec{U}_{l} \right| d_{b}}{\mu_{m}}$$
(2.12)

36

$$\mu_m = \mu_l \left(1 - \frac{r_g}{r_{dm}} \right)^{-2.5r_{dm}\mu_*} \qquad ; \qquad \mu_* = \frac{\mu_g + 0.4\mu_l}{\mu_g + \mu_l} \qquad (2.13)$$

onde d_b é o diâmetro da bolha, \vec{U}_l , \vec{U}_g são os vetores velocidade das fases líquido (contínua) e gás (dispersa), e μ_l , μ_g são as viscosidades das fases líquido e gás, respectivamente. r_g é a fração volumétrica da fase gás. r_{dm} é uma definição de valor máximo de empacotamento, que é uma medida de fração volumétrica. Seu valor padrão para fases fluidas dispersas, como no caso presente, é igual a 1.

No regime de partículas distorcidas, o coeficiente adimensional de arraste é praticamente constante e independente do número de Reynolds, porém depende da forma da partícula, através do grupo adimensional de Eötvös, *Eo*, que representa uma razão entre as forças gravitacionais e tensões superficiais.

$$Eo = \frac{g \,\Delta\rho \, d_b^2}{\sigma} \tag{2.14}$$

onde g é a aceleração da gravidade, σ é a tensão superficial, d_b é o diâmetro da bolha e $\Delta \rho$ é a diferença entre as massas específicas das fases.

A forma da bolha também depende do número de Reynolds (razão entre forças inerciais e forças viscosas) e número de Morton, <u>Mo</u> (razão entre o produto de forças gravitacionais e viscosas pelo produto entre a força de inércia e tensão superficial).

$$Mo = \frac{g \,\mu^4 \Delta \rho}{\rho^2 \,\sigma^3} \tag{2.15}$$

Na Figura 2.1 é possível verificar uma correlação gráfica generalizada para as formas das partículas em termos do Número de Eötvös, <u>*Eo*</u>, e do número de Morton, <u>*Mo*</u>, versus número de Reynolds, <u>*Rem*</u>. Também há esboços dos formatos das bolhas descritas na mesma figura.

Para o regime de bolhas dispersas, o modelo de Ishii-Zuber representa a concentração de partículas presentes no sistema por meio da introdução de um fator multiplicativo para o coeficiente de arraste de uma única partícula C_{De}.

Para partículas com forma elipsoidal, o coeficiente de arraste é dado por

$$C_D(elipse) = E(r_g)C_{D\infty}$$
 onde $C_{D\infty} = \frac{2}{3}Eo^{\frac{1}{2}}$ (2.16)

е

$$E(r_g) = \frac{\left(1 + 17,67 f(r_g)^{6/7}\right)}{18,67 f(r_g)} \quad \text{com} \quad f(r_g) = \frac{\mu_l}{\mu_m} \left(1 - r_g\right)^{1/2}$$
(2.17)



Figura 2.1 - Correlação entre números adimensionais e formas das partículas. (Clift, Grace e Weber, 1978)

Já para o caso de partículas com a forma de touca (*cap*), o coeficiente de arraste é representado por

$$C_D(cap) = (1 - r_g)^2 C_{D\infty}$$
 onde $C_{D\infty} = \frac{8}{3}$ (2.18)

A seleção entre uma ou outra correlação é feita da seguinte forma:

Se
$$C_D(esfera) \ge C_D(elipse) \Longrightarrow C_D = C_D(esfera)$$
 (2.19)

Se
$$C_D(esfera) < C_D(elipse) \Rightarrow C_D = \min(C_D(esfera), C_D(cap))$$
 (2.20)

2.1.2 Força de sustentação

A força de sustentação é uma força que age na partícula numa direção ortogonal à direção do escoamento longe da partícula. Esta força tem um papel central no movimento lateral das partículas. Segundo Leal (1980), um dos trabalhos pioneiros sobre migração lateral das partículas se deve a Sege e Silberberg, que em 1962 observaram que as partículas com empuxo neutro migravam para uma posição equivalente a 0,6r, sendo 'r' o raio do tubo. Essa migração ocorre devido a um balanço de forças determinada pela taxa de deformação do escoamento e pela interação do escoamento com as paredes do tubo.

A força de sustentação pode ser formada por dois mecanismos físicos distintos: se a partícula possui rotação própria (partículas sólidas) ou se a partícula está submetida a um escoamento externo com taxa de deformação, onde há vorticidade.

A expressão da força de sustentação para uma partícula sólida em um escoamento 3D é dada por (Rosa, 2012):

$$\vec{F}_L = C_L \frac{1}{2} \rho_f \frac{\pi D_p^2}{4} D_p \left[\left(\vec{U}_p - \vec{U}_f \right) \times \vec{\omega}_f \right]$$
(2.21)

onde $\vec{\omega}_{f}$ é a vorticidade do fluido,

$$\vec{\omega}_f = \nabla \times \vec{U}_f \tag{2.22}$$

e C_L é o coeficiente de sustentação, dado por

$$C_{L} = \frac{4,1126}{\sqrt{\operatorname{Re}_{s}}} f\left(\operatorname{Re}_{p}, \operatorname{Re}_{s}\right)$$
(2.23)

Re_s é o número de Reynolds devido a taxa de deformação do escoamento (*shear flow Reynolds number*) e Re_p é o número de Reynolds da partícula, definido pela velocidade relativa entre a partícula e o fluido, sendo $f(\text{Re}_p, \text{Re}_s)$ uma função de correção para Re_p na faixa de 0,1 < Re_p < 100. Os números de Reynolds são definidos de acordo com:

$$\operatorname{Re}_{s} = \frac{\rho_{f} D_{p}^{2} |\omega_{f}|}{\mu_{f}}$$
(2.24)

$$\operatorname{Re}_{p} = \frac{\rho_{f} D_{p} \left| \vec{U}_{p} - \vec{U}_{f} \right|}{\mu_{f}}$$
(2.25)

e a função de correção é

$$f(\operatorname{Re}_{p}, \operatorname{Re}_{s}) = \begin{cases} \operatorname{para} \operatorname{Re}_{p} \leq 40 \rightarrow \left(1 - 0.3314\sqrt{\zeta}\right) e^{-\left(\frac{\operatorname{Re}_{p}}{10}\right)} + 0.3314\sqrt{\zeta} \\ \operatorname{para} \operatorname{Re}_{p} > 40 \rightarrow \left(0.0524\sqrt{\operatorname{Re}_{p}\zeta}\right) \end{cases}$$
(2.26)

sendo

$$\zeta = 0.5 \frac{\text{Re}_s}{\text{Re}_p} \tag{2.27}$$

O estudo de Legendre e Magnaudet (1998) revelou que a distribuição de velocidade tangencial na superfície da bolha tem um papel fundamental na força de sustentação e depende fortemente dos efeitos viscosos. Os cálculos numéricos referentes ao coeficiente de sustentação mostram um comportamento distinto para Reynolds baixo e alto

$$Re_{p} > 5 \rightarrow C_{L}^{h,Re} = \frac{2}{3} \frac{1 + 16 \operatorname{Re}_{p}^{-1}}{1 + 29 \operatorname{Re}_{p}^{-1}},$$

$$Re_{p} < 5 \rightarrow C_{L}^{l,Re} = \frac{6}{\sqrt{\operatorname{Re}_{s}}} \frac{2,255}{\left(1 + \frac{0,2 \operatorname{Re}_{p}^{2}}{\operatorname{Re}_{s}}\right)}$$
(2.28)

Legendre e Magnaudet sugerem uma única expressão analítica para o coeficiente de sustentação em uma bolha / gota para a faixa de $0.1 < \text{Re}_p < 500$,

$$C_L(\operatorname{Re}_p, \operatorname{Re}_s) = \sqrt{\left(C_L^{h,\operatorname{Re}}\right)^2 + \left(C_L^{l,\operatorname{Re}}\right)^2}$$
(2.29)

Para regime de baixo Re_p o coeficiente de sustentação $(C_L^{l,\mathbf{Re}})$ depende de Re_p e Re_s . Já para o caso de alto Re_p , $C_L^{h,\mathbf{Re}}$ depende fracamente do Re_p e tende para o valor constante de 0,667 para Re_p acima de 1.000. No presente trabalho a faixa de Re_p variou de 0,02 a 30.000 porém, a maior parte do escoamento ficou na faixa entre 10 e 3.000.

Os cálculos de Legendre e Maganaudet (1998) aplicam-se para uma interface gás-líquido livre de impurezas, caso contrário, as condições de contorno de tensão nula na interface e ausência de rotação na esfera de fluido não se aplicam.

2.2 Distribuição da fase dispersa

Como apresentado na seção anterior, as forças interfaciais, devido à interação entre as fases, dependem do diâmetro das bolhas. Consequentemente, o tipo de distribuição de diâmetros da fase dispersa pode influenciar no escoamento, e diferentes aproximações podem ser consideradas.

Uma primeira aproximação, mais simples, consiste em considerar que a fase dispersa é formada por bolhas com diâmetro uniformemente distribuído.

Um segundo modelo mais realista considera o escoamento formado de bolhas de múltiplos diâmetros, as quais podem se quebrar ou coalescer. Neste caso, de acordo com Tomiyama (1998), a força de sustentação agindo nas bolhas muda sua direção, dependendo do tamanho das bolhas, levando a uma separação radial dos diferentes tamanhos de bolhas no escoamento vertical. Esta separação radial, das bolhas pequenas e grandes, com respeito ao diâmetro crítico de bolha da correlação de Tomiyama para a força de sustentação, somente consegue ser capturado por um modelo de escoamento multifásico onde se permite que as bolhas de tamanhos diferentes se movimentem com diferentes campos de velocidade.

O modelo não homogêneo com bolhas de vários tamanhos disponível no CFX chama-se MUSIG (*Multiple Size Group*) (Frank, 2008). Neste modelo a fase gasosa

dispersa é dividida em um número 'N', chamado de grupos de velocidade, ou fases, onde cada um dos grupos de velocidade é caracterizado pelo seu próprio campo de velocidade. Assim a distribuição dos tamanhos das bolhas é representada pela divisão da faixa de diâmetros das bolhas em cada grupo de velocidade em um número M_i de classes de bolhas (Figura 2.2).



Figura 2.2 - Grupos de velocidade e subdivisão de classes de tamanhos de bolha do espectro de tamanho de bolhas no modelo MUSIG (Frank, 2008)

O ponto de partida do modelo MUSIG, é a equação de balanço populacional. Se consideramos que n(m,t) representa o número provável de partículas de massa m no tempo t, a equação de balanço populacional pode ser expressa como:

$$\frac{\partial}{\partial t}n(m,t) + \frac{\partial}{\partial x}(U(m,t)n(m,t)) = B_B - D_B + B_C - D_C$$
(2.30)

onde, B_B , D_B , B_C e D_C representam, respectivamente, as taxas de nascimento de bolhas devido à quebra de bolhas grandes, de morte devido à quebra em bolhas menores, do nascimento devido à coalescência de bolhas pequenas e de morte devido à coalescência com outras bolhas. Estas taxas podem ser expressas como:

$$B_B = \int_{m}^{\infty} g(m_j; m_i) n(m_j, t) dm_j$$
(2.31)

$$D_B = n(m_i, t) \int_0^m g(m_i; m_j) dm_j$$
(2.32)

$$B_{C} = \frac{1}{2} \int_{0}^{m} Q(m_{i} - m_{j}; m_{j}) n(m_{i} - m_{j}, t) n(m_{i}, t) dm_{j}$$
(2.33)

$$D_{C} = n(m_{i}, t) \int_{0}^{\infty} Q(m_{i}; m_{j}) n(m_{j}, t) dt$$
(2.34)

onde $g(m_i;m_j)$ representa a frequência específica de quebra (taxa na qual as bolhas com massa m_i se quebram em bolhas com massas m_j e $m_i - m_j$) e $Q(m_i;m_j)$ representa a frequência específica de coalescência (taxa na qual as bolhas com massa m_i coalescem com bolhas de massa m_j para formar bolhas com massa $m_i + m_j$).

O passo seguinte do modelo MUSIG é discretizar a equação de balanço populacional em grupos com tamanhos diferentes. De acordo com Tomiyama (1998), a subdivisão em grupos deve ser baseada na física do movimento das bolhas de diferentes tamanhos, ou seja, diferentes comportamentos para os diferentes grupos de bolhas, com respeito às forças de sustentação e dispersão turbulenta. No entanto, esta subdivisão não é trivial. Considerando-se que uma distribuição de grupos de bolhas por massa, prioriza-se os grupos com maior diâmetro, já que a massa é proporcional ao diâmetro elevado ao cubo. Uma distribuição com progressão geométrica da massa favorece o grupo com menos massa. No presente trabalho, optou-se por subdividir os grupos através de uma distribuição linear dos diâmetros, visando não favorecer nem o grupo mais pesado, nem o mais leve. Dessa forma, os grupos foram criados, a partir da definição do maior e menor tamanho de bolha (d_{max} e d_{min} , respectivamente) presente no escoamento. Cada grupo consiste em um conjunto de bolhas com diâmetro de acordo com:

$$d_{i} = d_{min} + \frac{(d_{max} - d_{min})}{N} \left(i - \frac{1}{2}\right)$$
(2.35)

A relação entre a massa e diâmetro para um grupo particular é dada por

$$m = \frac{\pi}{6} \rho_d d^3 \tag{2.36}$$

2.2.1 Quebra de bolhas

Luo e Svendsen (1996) desenvolveram um modelo teórico para a quebra de gotas e bolhas em suspensões turbulentas. O modelo se baseia na teoria de turbulência isotrópica e probabilidade. A frequência em que uma bolha de massa m_i

se quebra em uma bolha de massa m_j é dada por:

$$g(m_i;m_j) = 0.923 F_B \left(1 - r_g \left(\frac{\varepsilon_l}{d_i^2}\right)^{1/3} \int_{\xi_{\min}}^1 \frac{(1 + \xi)^2}{\xi^{11/3}} e^{-\chi} d\xi \right)$$
(2.37)

onde,

$$\chi = \frac{12\left(f_{BV}^{2/3} + \left(1 - f_{BV}\right)^{2/3} - 1\right)\sigma}{\beta\rho_l \varepsilon_l^{2/3} d_i^{5/3} \xi^{11/3}}$$
(2.38)

$$f_{BV} = \frac{m_j}{m_i} \qquad ; \quad \xi = \frac{\eta}{d_i} \tag{2.39}$$

 ξ é o tamanho adimensional dos turbilhões no *subrange* inercial da turbulência isotrópica

$$\eta = \left(\frac{1}{\varepsilon_l} \upsilon_l^3\right)^{1/4} \tag{2.40}$$

O limite mínimo de integração é dado por:

$$\xi_{\min} = 11, 4\frac{\eta}{d_i} \tag{2.41}$$

Adicionalmente, F_B é um coeficiente de calibração, neste trabalho foi adotado, por recomendação do manual do CFX, $F_B = 1$, $\beta = 2$, ε_l é a taxa de dissipação dos turbilhões da fase contínua (líquido), υ_l é a viscosidade cinemática da fase líquido, r_g é a fração volumétrica da fase dispersa (gás) e σ é a tensão superficial.

2.2.2 Coalescência de bolhas

O modelo de Prince e Blanch (1990) assume que a coalescência entre duas bolhas ocorre em três passos. Primeiro, as bolhas colidem retendo uma pequena quantidade de líquido entre elas. Este filme de líquido separando as bolhas é drenado até que se atinja uma espessura crítica. Este filme se rompe e as bolhas se unem. A coalescência é então modelada pela taxa de colisão entre duas bolhas θ_{ij} e uma eficiência η_{ij} de colisão relacionada ao tempo requerido para a coalescência,

$$Q(m_i;m_j) = \left(\theta_{ij}^T + \theta_{ij}^B + \theta_{ij}^S\right)\eta_{ij}$$
(2.42)

Os sobescritos T, B e S, na equação acima representam os termos referentes às contribuições da turbulência, flutuação e cisalhamento, respectivamente.

A eficiência de colisão é modelada comparando-se o tempo requerido para a coalescência t_{ij} com o tempo real durante a colisão τ_{ij} ,

$$\eta_{ij} = e^{-\frac{t_{ij}}{\tau_{ij}}}$$
 (2.43)

$$t_{ij} = \left(\frac{\rho_l \ d_{ij}^3}{2 \ \sigma}\right)^{1/2} \ln\left(\frac{h_0}{h_f}\right)$$
(2.44)

$$\tau_{ij} = \frac{\left(d_{ij} / 2\right)^{2/3}}{\varepsilon_l^{1/3}}$$
(2.45)

onde h_0 é a espessura inicial do filme de líquido, h_f é a espessura crítica onde a ruptura ocorre e d_{ij} é o diâmetro equivalente da nova bolha, dado pela equação abaixo, em função do diâmetro das duas bolhas d_i e d_j que coalesceram

$$d_{ij} = \left(\left(\frac{1}{d_i} + \frac{1}{d_j} \right) \right)^{-1}$$
(2.46)

A contribuição da turbulência para a frequência de colisões é modelada como:

$$\theta_{ij}^{T} = F_{CT} S_{ij} \left(u_{ii}^{2} + u_{ij}^{2} \right)^{1/2}$$
(2.47)

onde a área da seção transversal das partículas em colisão é definida por:

$$S_{ij} = \frac{\pi}{4} \left(d_i + d_j \right)^2 \tag{2.48}$$

A velocidade turbulenta é dada por:

$$u_{ii} = \sqrt{2}\varepsilon_l^{1/3} d_i^{1/3} \tag{2.49}$$

E F_{CT} é o fator de calibração. Neste trabalho foi adotado, por recomendação do manual do CFX, $F_{CT} = 1$.

A contribuição da flutuação para a frequência de colisão é modelada por:

$$\theta_{ij}^{B} = F_{CB}S_{ij} \left| U_{rj} - U_{ri} \right|$$
(2.50)

onde F_{CB} é o fator de calibração, neste trabalho foi adotado F_{CB} =1, por recomendação do manual do CFX, e,

$$U_{ri} = \sqrt{\frac{2,14\sigma}{\rho_l d_i} + 0,505 \, g d_i} \tag{2.51}$$

A contribuição do cisalhamento para a frequência de colisão é, correntemente, desconsiderada (ANSYS CFX, User Manual, 2010).

2.3

Turbulência

A turbulência é inerentemente tridimensional e consiste em movimentos e velocidades aleatórios no espaço e no tempo. Uma definição de turbulência é dada por Hinze (1975) como "... uma condição irregular de fluxo no qual as várias quantidades mostram uma variação aleatória, no tempo e nas coordenadas espaciais, de modo que, estatisticamente valores médios distintos podem ser discernidos". O número de Reynolds tem sido tradicionalmente utilizado para caracterizar a transição de escoamento determinístico para escoamentos estocásticos ou caóticos.

O trabalho de Riera-Ortiz et al (2011) mostrou que, para a determinação do *hold-up*, o modelo *k-* ε sozinho, se mostrou mais eficiente que o modelo *k-* ω . Ou seja, para a determinação do *hold-*up, um modelo que represente bem a turbulência no interior do escoamento se mostrou mais importante. Porém, no presente trabalho, se buscou identificar, além da fração de ar no interior do modelo, a perda de carga imposta ao escoamento ao passar pelo interior do misturador e, desta forma buscouse um modelo de turbulência que pudesse representar bem também a parcela da

turbulência próxima às paredes do misturador e pelos furos internos.

O modelo de turbulência SST $k \cdot \omega$ (*Shear Stress Transport*), descrito por Menter (1994), é um modelo de viscosidade turbulenta de duas equações que se tornou muito popular. Este é um modelo de duas equações que combina as melhores características dos modelos $k \cdot \varepsilon$ e $k \cdot \omega$, onde k é a energia cinética turbulenta e ε sua taxa de dissipação, enquanto que ω é a taxa de dissipação específica. O modelo SST $k \cdot \omega$ mistura a formulação robusta e precisa do modelo $k \cdot \omega$ próximo à parede com a independência do modelo $k \cdot \varepsilon$ na corrente livre.

Os modelos k- ε e k- ω são multiplicados por uma função de mistura e somados. Esta função de mistura F_1 vale um (conduzindo ao modelo k- ω padrão) na extremidade interna da camada de limite turbulenta e tem um valor zero (correspondendo ao modelo k- ε padrão) na parte externa à camada. Desta forma, a energia cinética turbulenta k e taxa de dissipação específica ω do modelo de SST são determinadas pela solução das seguintes equações de conservação:

$$\frac{\partial(\rho_l r_l k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_l r_l U_{l_i} k)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_k \mu_l) \frac{\partial k}{\partial X_j} \right]$$

$$+ \widetilde{P}_k - \beta^* \rho_l k \omega$$
(2.52)

$$\frac{\partial(\rho_{l} r_{l} \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_{l} r_{l} U_{l_{i}} \omega)}{\partial x_{i}} = \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\left(\mu + \sigma_{\omega} \mu_{l} \right) \frac{\partial \omega}{\partial X_{j}} \right] + \alpha S^{2} - \beta \omega^{2} + (1 - F_{1}) 2 \sigma_{d} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial X_{j}} \frac{\partial \omega}{\partial X_{j}}$$

$$(2.53)$$

No que diz respeito a turbulência em escoamento com bolhas dispersas, basta se considerar a fase líquida contínua, baseando-se na grande diferença entre as massas específicas e na pequena escala do gás disperso (Ziegenhein et al., 2013). Portanto, estas equações se aplicam somente à fase contínua e, portanto todas as variáveis destas equações se referem somente à esta fase.

No modelo SST a produção de energia cinética turbulenta \tilde{P}_k é limitada para prevenir um acúmulo de turbulência em regiões de estagnação, conforme abaixo:

$$\widetilde{P}_{k} = \min\left(\mu_{k}S^{2}; 10\beta^{*}\rho \ k \ \omega\right)$$
(2.54)

onde S é o modulo do tensor taxa de deformação

$$S = \frac{\partial U_{l_i}}{\partial x_j} \left(\frac{\partial U_{l_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_{l_j}}{\partial x_i} \right)$$
(2.55)

e β^* , α , $\beta \in \sigma$ são constantes empíricas, obtidas combinado as constantes empíricas dos modelos $\kappa - \varepsilon \in \kappa - \omega$ (Tabela 2.1).

A viscosidade turbulenta μ_t é dada por:

$$\mu_t = \frac{a_1 \rho k}{\max(a_1 \omega; S F_2)}$$
(2.56)

onde a_1 é uma constante empírica igual a 0,3. F_2 é a função de mistura para a viscosidade turbulenta no modelo SST, definida como:

$$F_2 = \tanh\left[\left(\arg_2\right)^2\right], \text{ onde : } \arg_2 = \max\left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}; \frac{500 \ \mu}{y^2 \ \rho \ \omega}\right)$$
(2.57)

A definição da viscosidade turbulenta apresenta um tratamento melhor para o transporte das tensões de Reynolds em camada limite sujeita à gradiente adverso de pressão. Esta definição está baseada na hipótese de Bradshaw (1967) que, para escoamento em camada limite, as tensões de Reynolds são proporcionais à energia cinética turbulenta.

O último termo do lado direito da Equação 2.52 é conhecido como termo de difusão cruzada. Menter (1994) demonstrou que introduzindo o termo de difusão cruzada na equação, a dependência da corrente livre do modelo k- ω é reduzida. O principal efeito de difusão cruzada em escoamentos livres é aumentar a produção de ω e, consequentemente, aumentar a dissipação de k.

A difusão cruzada está multiplicando a função de mistura F_1 , que é função da distância da parede. A função F_1 é definida como:

$$F_1 = \tanh\left[\left(\arg_1\right)^2\right] \tag{2.58}$$

$$\arg_{1} = \min\left[\max\left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^{*}\omega y}; \frac{500\nu}{y^{2}\omega}\right); \frac{4\rho\sigma_{\omega}k}{CD_{k\omega}y^{2}}\right]$$
(2.59)

onde y é a distância à parede e $CD_{k\omega}$ é a parte positiva do termo de difusão cruzada, dada por:

$$CD_{k\omega} = \max\left(2\rho\sigma_d \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial X_j} \frac{\partial \omega}{\partial X_j}; 10^{-10}\right)$$
(2.60)

As constantes empíricas do modelo, são obtida combinando as constantes empíricas dos modelos $\kappa - \varepsilon \in \kappa - \omega$. Seja ϕ uma constante do modelo SST e sejam $\phi_1 \in \phi_2$ constantes dos modelos $\kappa - \omega \in \kappa - \varepsilon$, respectivamente. As constantes ϕ são calculadas usando a função de mistura, entre as constantes ϕ_1 ($\kappa - \omega$) e ϕ_2 ($\kappa - \varepsilon$), que encontram-se na Tabela 2.1.

$$\phi = F_1 \phi_1 + (1 - F_1) \phi_2 \tag{2.61}$$

Tabela 2.1 – Constantes do modelo κ – ω SST

Constantes	β*	β	σk	σ_{ω}	σ_d	α
$\phi_l (\kappa - \omega)$	0,075	0,09	0,5	0,5	0,856	5/9
$\phi_2 (\kappa - \varepsilon)$	0,0828	0,09	1,0	0,856	0,856	0,44