### 3 Modelagem Matemática

Neste capítulo apresenta-se o modelo matemático utilizado para prever o escoamento no regime de golfada em uma tubulação circular horizontal. Considera-se uma unidade básica, e utiliza-se um referencial sobre a golfada, i.e., deslocando-se com a mesma.

Como já foi mencionado na Introdução, o Modelo VOF (Volume of Fluid), incluído no pacote comercial FLUENT<sup>TM</sup>, foi utilizado para prever a posição da interface. Considera-se o escoamento isotérmico e não há transferência de massa fases. Adicionalmente. ambos fluidos foram considerados entre incompressíveis. Para representar o regime de escoamento turbulento, selecionouse o modelo de turbulência de duas equações diferenciais  $\kappa$ - $\varepsilon$  RNG com lei da parede padrão. Este modelo foi selecionado por ter sido utilizado por Kumara et al. (2008), apresentando excelente concordância com dados experimentais. Adicionalmente, cálculos preliminares realizados mostraram que para o presente caso de interesse, o modelo apresenta resultados idênticos ao modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$ tradicional, porém com melhor desempenho.

#### 3.1 Modelo VOF

O modelo VOF (*Volume of Fluid*), desenvolvido originalmente por Hirt e Nichols (1981), pode modelar dois ou mais fluidos imiscíveis resolvendo um conjunto único de equações de conservação de massa e de quantidade de movimento linear. Neste trabalho consideramos somente a presença de duas fases. O método VOF é baseado na utilização de uma variável auxiliar, denominada fração volumétrica  $\alpha$ , a qual identifica em que região de cálculo, cada fase pode ser encontrada. A fração volumétrica da fase i é definida como  $\alpha_i = 0$  na ausência do fluido i,  $\alpha_i = 1$  quando só existe o fluido i,  $0 < \alpha_i < 1$  na região de interface, a qual contém as duas fases. Logo o somatório das saturações de cada fase deve ser igual a um.

$$\sum_{i} \alpha_{i} = 1 \tag{3.1}$$

Na presença de somente duas fases, a interface pode ser definida pelo conhecimento da fração volumétrica de uma das fases,  $\alpha_1$ , pois de acordo com a Eq. (3.1),  $\alpha_2 = I - \alpha_I$ . Para a determinação da interface, considera-se um referencial coincidente com a mesma, consequentemente a derivada material da fração volumétrica na interface é nula, isto é,

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \vec{u} \bullet \nabla \alpha_1 = 0 \tag{3.2}$$

onde  $\vec{u}$  é o vetor da velocidade.

Todos os campos de variáveis e propriedades são compartilhados por todas as fases, e representam valores médios. As propriedades e variáveis de interesse são inteiramente representativas de uma fase ou de uma mistura das fases, dependendo do valor da fração volumétrica. As propriedades da mistura, como a densidade ( $\rho$ ) e a viscosidade molecular ( $\mu$ ), são calculadas levando-se em conta a quantidade de cada fase na mistura:

$$\rho = \alpha_1 \ \rho_1 + \alpha_2 \ \rho_2 \tag{3.3}$$

$$\mu = \alpha_1 \ \mu_1 + \alpha_2 \ \mu_2 \tag{3.4}$$

O campo de velocidade e pressão do regime turbulento é governado pelas equações médias de Reynolds para a continuidade e quantidade de movimento linear, as quais podem ser expressas como segue:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \, \vec{u}) + \nabla \bullet (\rho \, \vec{u}) = 0 \tag{3.5}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \, \vec{u}) + \nabla \bullet (\rho \, \vec{u} \, \vec{u}) = -\nabla \, p + \rho \, \vec{g} + \nabla \bullet \left[ \mu_{ef} \, 2 \, \underline{\underline{S}} \right] + \rho \, \vec{g} + \vec{F} \tag{3.6}$$

onde  $\vec{u}$  e p são os valores médios no tempo do vetor velocidade e pressão,  $\vec{g}$  é o vetor aceleração da gravidade,  $\mu_{ef} = \mu + \mu_t$  é a viscosidade efetiva e  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta e  $\underline{S}$  é o tensor de deformação médio,

$$\underline{\underline{S}} = \frac{1}{2} \left( \nabla \, \vec{u} + \nabla \, \vec{u}^{\,T} \right) \tag{3.7}$$

 $\vec{F}$  é uma força externa por unidade de volume, que neste caso leva em conta os efeitos da tensão superficial ( $\sigma$ ) para ambas fases. A abordagem utilizada neste trabalho foi a CSF (*Continuum Surface Force*) desenvolvida por Brackbill et al. (1992). Para definir esta força, devemos considerar que a tensão superficial  $\sigma$  é constante ao longo da interface e que só agem forças normais à mesma. Com estas considerações pode ser demonstrado que a queda de pressão na interface depende da tensão superficial e a curvatura da interface, que por sua vez depende dos raios de curvatura da interface de cada fase  $r_1$  e  $r_2$ .

$$p_2 - p_1 = \sigma \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \tag{3.8}$$

onde  $p_2$  e  $p_1$ , são as pressões dos fluidos em cada lado da interface. De acordo com o modelo CSF, a curvatura da interface é determinada baseada nos gradientes da fração volumétrica em cada lado da interface. Definindo o vetor normal à superfície como:

$$\vec{n}_i = \nabla \alpha_i \tag{3.9}$$

pode-se definir a curvatura  $\gamma_i$ , como sendo igual ao divergente do vetor unitário de  $\vec{n}_i$  normalizado,  $\hat{\vec{n}}$ :

$$\gamma_i = \nabla \bullet \vec{\hat{n}}_i \quad ; \quad \vec{\hat{n}}_i = \frac{\vec{n}_i}{|\vec{n}_i|}$$
(3.10)

Assim, a força na interface por unidade de volume pode ser expressa usando o teorema da divergência, e pode ser acrescentada diretamente na equação de quantidade de movimento linear (Eq. 3.6).

$$\vec{F} = \sigma \frac{\rho \gamma_1 \nabla \alpha_1}{(\rho_1 + \rho_2)/2} \tag{3.11}$$

# 3.2 Modelo de Turbulência $\kappa$ – $\varepsilon$ RNG

O modelo de turbulência  $\kappa$ – $\varepsilon$  RNG (Yakhot et al., 1992) pertence à família de modelos baseados na hipótese de Boussinesq para as tensões turbulentas e no conceito da viscosidade turbulenta. Este modelo foi derivado utilizando uma técnica estatística rigorosa, chamada "Teoria do Grupo de Renormalização" (Renormalization Group Theory). O modelo resultante é bem similar ao modelo  $\kappa$ – $\varepsilon$  tradicional, porém algumas constantes do modelo são determinadas analiticamente ou deixam de ser constantes, como é o caso dos números de Prandtl da energia cinética turbulenta  $\kappa$  e de sua taxa de dissipação  $\varepsilon$ , que neste caso passam a ser determinados através de relações algébricas.

Através da Teoria do Grupo de Renormalização, utiliza-se uma decomposição de Fourier do campo de velocidades e este passa a ser expresso em termos de comprimento de onda e freqüência. A velocidade é decomposta em dois componentes, correspondendo aos modos a serem eliminados e aos modos a serem retidos. A viscosidade efetiva é então obtida pela teoria RNG através de um processo de eliminação de escala, resultando em uma equação diferencial para a viscosidade turbulenta, a qual após ser integrada, e aplicada para altos números de Reynolds, resulta na mesma equação para a viscosidade turbulenta que o modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$  tradicional, com um valor ligeiramente diferente para a constante  $C_\mu$ , sendo igual a:

$$\mu_t = \frac{C_\mu \rho \kappa^2}{\varepsilon} \quad ; \quad C_\mu = 0.0845 \tag{3.12}$$

O modelo resultante para altos números de Reynolds, utilizando-se a hipótese de isotropia local é análogo ao modelo  $\kappa$ – $\varepsilon$  tradicional, com diferentes valores para as constantes empíricas. Yakhot e Orzag (1986) afirmam existir sérias razões para questionar a validade da hipótese de isotropia local em escoamentos turbulentos fortemente cisalhantes, indicando a adição do seguinte termo de sorvedouro na equação de dissipação,  $R_{\varepsilon}$ 

$$R_{\varepsilon} = 2 \,\mu \, S_{ij} \, \frac{\overline{\partial u_{k}^{'}}}{\partial x_{i}} \, \frac{\partial u_{k}^{'}}{\partial x_{i}} \tag{3.13}$$

onde  $u_k'$  corresponde às flutuações dos componentes do vetor velocidade e  $S_{ij}$  é o tensor taxa de deformação do escoamento médio, definido na Eq. (3.7). Yakot e Orzag (1986) propõem um modelo para este termo, baseado na escala de expansão  $\eta$ , a qual é definida como a razão da turbulência para a escala de deformação média, sendo igual a

$$R_{\varepsilon} = R_{\varepsilon}^{*} \rho \frac{\varepsilon^{2}}{\kappa} \quad ; \quad R_{\varepsilon}^{*} = \frac{C_{\mu} \eta^{3} (1 - \eta / \eta_{0})}{1 + \beta \eta^{3}} \quad ; \quad \eta = S \frac{\kappa}{\varepsilon}$$
 (3.14)

com  $\beta$  = 0,012 e  $\eta_0$  = 4,38.

As equações de transporte para a energia cinética turbulenta  $\kappa$  e sua taxa de dissipação  $\varepsilon$  para este modelo são:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \kappa) + \nabla \bullet (\rho \vec{u} \kappa) = \nabla \bullet [\lambda_{\kappa} \mu_{ef} \nabla \kappa] + G_{\kappa} - \rho \varepsilon \tag{3.15}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \, \varepsilon) + \nabla \bullet (\rho \, \vec{u} \, \varepsilon) = \nabla \bullet \left[ \lambda_{\varepsilon} \, \mu_{ef} \, \nabla \, \varepsilon \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} G_{\kappa} - C_{2\varepsilon}^* \rho \, \frac{\varepsilon^2}{\kappa}$$
(3.16)

onde os parâmetros  $\lambda_{\kappa}$ ,  $\lambda_{\varepsilon}$ , são os inversos dos números de Prandtl de  $\kappa$  e  $\varepsilon$  respectivamente, e podem ser obtidos a partir das seguintes expressões:

$$\left| \frac{\lambda_{\kappa/\varepsilon} - 1,3929}{\lambda_0 - 1,3929} \right|^{0,6321} \left| \frac{\lambda_{\kappa/\varepsilon} + 2,3929}{\lambda_0 + 2,3929} \right|^{0,3679} = \frac{\mu}{\mu_{ef}}$$
 (3.17)

onde  $\lambda_0 = 1$ . Para altos números de Reynolds  $\lambda_{\kappa} = \lambda_{\varepsilon} = 1,393$ ; o que corresponde a números de Prandtl iguais a  $\sigma_{\kappa} = \sigma_{\varepsilon} = 0,72$ .

Nestas equações,  $G_{\kappa}$  representa a geração de energia cinética turbulenta devido aos gradientes da velocidade média

$$G_{\kappa} = \mu_t S^2$$
 ;  $S = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}}$  (3.18)

onde  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta, S é o módulo do tensor deformação do escoamento médio.

O parâmetro  $C_{2\varepsilon}^*$  incorpora a constante empírica  $C_{2\varepsilon}$  do modelo tradicional

juntamente com a contribuição de sorvedouro da Eq. (3.16), sendo dado por:

$$C_{2\varepsilon}^* = C_{2\varepsilon} + R_{\varepsilon}^* \tag{3.19}$$

As constantes  $C_{I\varepsilon}$  e  $C_{2\varepsilon}$  também são determinadas pela Teoria do Grupo de Normalização e são iguais a  $C_{I\varepsilon}=1,42$  e  $C_{2\varepsilon}=1,68$ . Note que nas regiões onde  $\eta<\eta_0$ , o termo  $R_{\varepsilon}^*$  fornece contribuição positiva e  $C_{2\varepsilon}^*$  se torna maior que  $C_{2\varepsilon}$ . Uma maior destruição de  $\varepsilon$  tende a diminuir  $\varepsilon$ , e aumentar  $\kappa$  tendendo a aumentar a viscosidade turbulenta. Contudo, nas regiões de grandes taxas de tensão turbulenta ( $\eta>4,38$ ), o sinal de  $C_{2\varepsilon}^*$  é invertido e a viscosidade turbulenta diminui mais neste modelo comparativamente ao modelo tradicional. Portanto, o modelo RNG responde melhor aos efeitos de deformações rápidas e linhas de corrente com curvatura do que o modelo  $\kappa-\varepsilon$  padrão.

#### 3.2.1 Lei da Parede

O modelo  $\kappa$ – $\varepsilon$  RNG para altos números de Reynolds não pode ser aplicado na região próxima à parede. De acordo com recomendação de Launder e Spalding (1974), empregou-se nesta região a lei da parede.

A lei da parede é derivada assumindo equilíbrio entre a taxa de produção e destruição de energia cinética turbulenta nas regiões próximas às superfícies sólidas. Consiste em especificar um perfil de velocidade logarítmico na zona totalmente turbulenta e um perfil linear na zona da subcamada laminar como segue:

$$y^{+} < 11.5 \Rightarrow u^{+} = y^{+}$$
  
 $y^{+} \ge 11.5 \Rightarrow u^{+} = \frac{1}{k_{v}} \ln(Ey^{+})$  (3.20)

onde  $u^+$  e  $y^+$  são a velocidade e distância normal à parede adimensionais, respectivamente

$$y^{+} = \frac{\rho u^{*} y}{\mu} \quad ; \quad u^{+} = \frac{u}{u^{*}}$$
 (3.21)

sendo u o componente de velocidade tangencial à parede, y é a distância à parede e  $u^*$  a velocidade de atrito, baseada na tensão cisalhante  $\tau_S$  na superfície

$$u^* = \sqrt{\frac{\tau_S}{\rho}} \tag{3.22}$$

E é uma constante empírica igual a 9,793 e  $k_v$  =0,4187 é a constante de von Kármán.

De forma a garantir conservação de massa para um fluido incompressível, impõe-se na região da parede, gradiente nulo do componente de velocidade normal  $u_n$  à parede.

$$\frac{\partial u_n}{\partial y} = 0 \tag{3.23}$$

De acordo com a hipótese de equilíbrio entre produção e destruição de energia cinética turbulenta, pode-se estimar a velocidade de atrito em função da energia cinética turbulenta

$$u^* = \sqrt{\frac{\tau_S}{\rho}} = C_{\mu}^{1/2} \kappa \tag{3.24}$$

Considerando-se ainda que a tensão cisalhante na parede seja aproximadamente constante, na região próxima a parede, prescreve-se gradiente normal de energia cinética nulo nas paredes.

$$\frac{\partial \kappa}{\partial y} = 0 \tag{3.25}$$

Ainda de acordo com a hipótese de equilíbrio entre destruição e produção de  $\kappa$  na região da parede, tem-se que a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta pode ser obtida a partir de:

$$\varepsilon = \frac{C_{\mu}^{3/4} \kappa^{3/2}}{k_{\nu} y} \tag{3.26}$$

# 3.3 Condições de Contorno

Para analisar uma unidade básica de uma golfada utilizou-se um referencial sobre a bolha, consequentemente, é necessário impor uma velocidade na parede, igual e de direção contrária à velocidade de deslocamento da bolha, como mostrado na Fig. 3.1. Este procedimento foi utilizado por Ujang et al. (2008) obtendo resultados razoáveis. Naturalmente que esta velocidade depende da determinação do campo de velocidades da golfada, e deve ser ajustada a partir da solução obtida. No entanto, existem correlações empíricas que podem ser utilizadas para auxiliar na estimativa inicial desta velocidade.

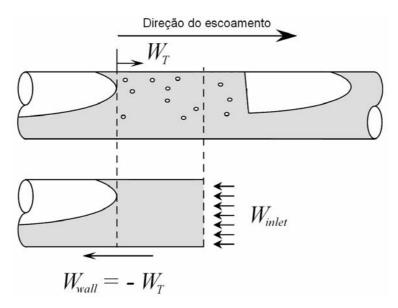


Figura 3.1- Esquema de velocidades, para um referencial sobre a golfada.

Para estimar a velocidade de translação da golfada, utilizou-se o Modelo de Deslizamento (Drift), o qual considera que as fases se deslocam com velocidades diferentes. De acordo com Zuber e Findlay (1965) o Modelo de Deslizamento descreve o escorregamento entre as fases como uma combinação de dois mecanismos: o Parâmetro de Distribuição  $C_0$  e a Velocidade de Drift,  $W_{drift}$ . O primeiro resulta do fato de que a distribuição das fases na seção transversal do duto pode ser não uniforme, conforme ilustrado na Fig. 3.2. O Parâmetro de Distribuição  $C_0$  igual a 1 corresponde à distribuição uniforme, típica de escoamentos homogêneos, Fig. 3.2a. Já para escoamentos verticais é comum haver concentração do gás do centro do duto, Fig. 3.2b, onde geralmente a

velocidade da mistura também tende a ser superior à velocidade do líquido. O segundo mecanismo resulta da tendência da fase gás migrar de forma ascendente pela fase líquida devido ao efeito de flutuação.

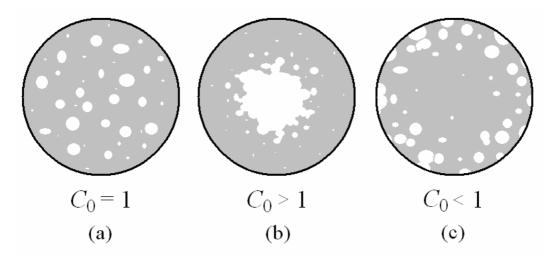


Figura 3.2- Exemplos de distribuição das fases na seção transversal de um duto

No Modelo de Deslizamento a velocidade da fase gasosa  $W_g$  está relacionada com a velocidade superficial média da mistura  $W_m$  da seguinte forma:

$$W_g = C_0 W_m + W_{drift} (3.27)$$

sendo a velocidade superficial média da mistura  $W_m$  igual a

$$W_m = w_{sl} + w_{sg} \quad \Rightarrow \quad W_m = \alpha_l W_l + \alpha_g W_g \tag{3.28}$$

onde  $W_l$  e  $W_g$  são as velocidades das fases líquida e gasosa,  $\alpha_l$  e  $\alpha_g$  são as frações volumétricas de cada fase, enquanto que  $w_{sl}$  e  $w_{sg}$  as velocidades superficiais do líquido e do gás, respectivamente, definidas em função da vazão volumétrica de cada fase  $Q_l$  e  $Q_g$  pela área total da seção transversal.

$$w_{sl} = \frac{Q_l}{A} \qquad ; \qquad w_{sg} = \frac{Q_g}{A} \tag{3.29}$$

É bem sabido que a velocidade de translação de uma bolha alongada  $W_T$  pode ser aproximada pela Eq. 3.27. Após haver realizado muitos estudos experimentais em bolhas se deslocando em líquido parado em distintas inclinações de uma tubulação, Nicklin et al. (1962) propuseram o parâmetro de

distribuição para golfadas como sendo sempre maior do que 1 porque está influenciado pelo perfil de velocidade do líquido à montante da bolha. De acordo com os autores, a velocidade de deslizamento  $W_{drift}$  pode ser definida como sendo  $C_1\sqrt{g\ D}$ , onde  $C_1$  é uma constante empírica e D é o diâmetro da tubulação. Então, a velocidade de translação da bolha pode ser estimada por:

$$W_T = C_0 W_m + W_{drift}$$
 ;  $W_{drift} = C_1 \sqrt{g D}$  (3.30)

Existem diversas discussões para estimar o valor do parâmetro de distribuição  $C_0$ . Taitel e Barnea (1990) analisaram uma golfada estável em tubulações horizontais, estimando o comprimento da mesma, e verificaram que o perfil das velocidades ao final da golfada líquida estável é um perfil completamente desenvolvido (Fig. 3.3), sendo a velocidade máxima axial igual a 1,2 vezes a velocidade da mistura.

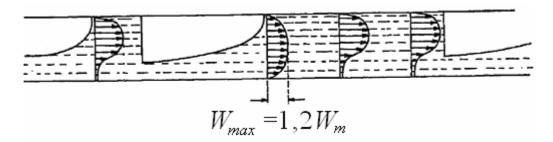


Figura 3.3- Estrutura dos perfis de velocidade dentro da golfada líquida.

Nicklin et al. (1962), Polonsky et al. (1999) e Shemer (2003) concordam que a constante  $C_0$  na Eq. 3.30 deve depender da relação  $W_{max}/W_m$  que acabamos de mencionar. Já Bendiksen (1984), utilizando uma base de dados experimentais para diversas vazões, estimou o valor de  $C_0$  em função do número de Froude crítico  $Fr_c$ 

$$C_0 = 1.05 \Rightarrow Fr_c < 3.5$$
;  $C_0 = 1.20 \Rightarrow Fr_c \ge 3.5$  (3.31)

onde  $Fr_c\,$  mede a relação entre a força inercial e a força gravitacional.

$$Fr_c = \frac{w_{sl}}{\sqrt{g D}} \tag{3.32}$$

Nota-se que o valor de  $C_0$  = 1,2 na Eq. 3.30 coincide com os outros autores,

mas, para valores de Froude crítico menores do que 3,5 ele cai para 1,05. Neste trabalho optou-se por trabalhar com a correlação de Bendiksen para definir a estimativa inicial da velocidade de translação da bolha, já que as vazões experimentais correspondem à faixa de Froude mencionada.

O valor sugerido para  $C_1$  por Bendiksen (1984) foi de 0,54. Ele também sugere que, para valores de Froude crítico acima de 3,5, a velocidade de "drift" sofre uma variação rápida quando uma bolha se desloca em um líquido em movimento, sendo igual a zero.

Vale ressaltar que durante o processo iterativo, a velocidade de translação da bolha foi sendo ajustada, até obter-se uma bolha estacionária no domínio computacional.

Na entrada do domínio de cálculo foi definido um perfil uniforme de velocidades ( $W_{inlet}$ ) (Fig. 3.1), tal como o sugerido por Ujang et al. (2008) e calculado segundo a velocidade de deslocamento da parede.

$$W_{wall} = -W_T \tag{3.33}$$

Neste trabalho, não foi considerada a entrada de bolhas dispersas no pistão de líquido, então, para um sistema de referência que acompanha a bolha gasosa, podemos dizer que a velocidade da mistura é igual à velocidade superficial da fase líquida ( $W_m = w_{sl}$ ), e que a fração volumétrica da água neste contorno será sempre igual a 1. A velocidade na entrada foi definida como

$$W_{inlet} = W_{wall} + W_m \tag{3.34}$$

Para as grandezas turbulentas, especificou-se as condições na entrada em função da intensidade de turbulência  $\zeta$  e da escala de comprimento  $\ell$  como:

$$\kappa = \frac{3}{2} (W_{inlet} \zeta)^2 \tag{3.35}$$

$$\varepsilon = C_{\mu}^{3/4} \frac{\kappa^{3/2}}{\ell} \tag{3.36}$$

A intensidade de turbulência  $\zeta$  foi definida sendo igual a 5% e a escala de comprimento  $\ell$  igual a 0,07 vezes o diâmetro da tubulação D, tal como o sugerido

pelo manual do usuário de FLUENT<sup>TM</sup>.

No plano de saída do domínio de cálculo, impôs-se uma pressão constante, a qual foi considerada como de referência. Para todas as outras grandezas considerou-se fluxo difusivo nulo  $(\partial/\partial z=0)$  para escoamento deixando o domínio. No caso de haver reversão do escoamento no plano de saída, considerou-se a fração volumétrica da água como sendo nula, de forma a encher a bolha com gás o tempo tudo, de igual forma, no caso dos parâmetros turbulentos, foram especificados aqueles definidos na entrada da tubulação. Nas paredes considerou-se a condição de não deslizamento e como já mencionado, um deslocamento da parede.