

SIMULAÇÕES DE MÚLTIPLAS BOLHAS

Franco Barbi, Universidade Federal de Uberlândia/ Mflab, frcbarbi@gmail.com

Aristeu da Silveira Neto, Universidade Federal de Uberlândia/ Mflab, aristeus@mecanica.ufu.br

Millena Martins Villar, Universidade Federal de Uberlândia/ Mflab, mmvillar@mecanica.ufu.br

Resumo. *Escoamento do tipo coluna de bolhas é presente em diversos processos industriais e seu correto entendimento é crucial para o dimensionamento adequado dos sistemas multifásicos. Devido à grande complexidade do escoamento, a maioria das informações disponíveis para a sua modelagem foram obtidas através de empirismo e análises de escalas. Com o recente avanço computacional, aumenta-se a viabilidade de soluções e desenvolvimentos de complexos modelos matemáticos/numéricos para fins de obtenção de informações de escoamentos borbulhantes. Este trabalho apresenta resultados de simulações numéricas de uma população de bolhas em ascensão com o método Volume of Fluid, no código AMR3D*

Palavras chave: *Volume of fluid, coluna de bolhas, Adaptive Mesh Refinement*

1. INTRODUÇÃO

O rápido avanço computacional alavancou nas últimas décadas o uso de modelos numéricos para a simulação de escoamentos e a obtenção de informações úteis para a engenharia. Escoamentos de colunas de bolhas estão presentes em diversas aplicações industriais, e os esforços para se modelar e prever esses escoamentos geraram diversas formas de se simular um escoamento bifásico. A vasta literatura científica sobre o tema apresenta uma gama de modelos matemáticos e numéricos para a simulação de uma coluna de bolhas, cada um com suas simplificações. O modelo à dois fluidos, ou Euler-Euler, utiliza uma formulação Euleriana separada para cada fase fluida, e termos fontes são responsáveis por descrever como ocorre a transferência de quantidade de movimento entre as fases em função dos campos conhecidos. Modelos Euler-Lagrange utilizam formulação Euleriana para uma fase contínua, enquanto a fase dispersa (bolhas ou gotas) são modeladas como partículas Lagrangianas. Ambos os modelos citados requerem modelos adicionais para que a transferência de quantidade de movimento seja consistente. Esses modelos usualmente representam forças de arrasto, sustentação e massa virtual, e dependem de coeficientes empíricos.

Em uma classe mais detalhada de métodos a dinâmica da interface é modelada. Métodos como o Volume of Fluid (VOF) de Hirt e Nichols (1981), que utiliza da advecção de uma função coloração para a representação das fases e interfaces, e o método Front Tracking de Unverdi e Tryggvason (1992), que marca a interface através de uma malha independente que é advectada por um campo de velocidades. Com o aumento expressivo da capacidade computacional disponível, torna-se viável o uso de resultados de simulações refinadas para a medição de forças interfaciais.

Através de muita experimentação (virtual ou material), modelos constitutivos para os coeficientes das forças são propostos e aperfeiçoados. O trabalho de Dijkhuizen et. al. (2010) utiliza simulações numéricas e experimentação material para calcular coeficientes de arrasto em bolhas de diferentes formatos e regimes de ascensão, e uma correção foi proposta às correlações de Mei et. al (1994). Recentemente, Roghair et. al. (2011) e Roghair et. al. (2013) contribuíram com correlações para coeficientes de arrasto em função da fração de vazio, com medições realizadas em população de bolhas ascendentes. Os pesquisadores utilizaram domínios cúbicos periódicos, e representação da interface pelo método Front Tracking.

Este trabalho apresenta alguns resultados de simulações de populações de bolhas realizadas com o código AMR3D, que contempla com o método VOF em ambiente paralelo. Também é apresentado o resultado do desenvolvimento de um algoritmo de identificação, necessário para se obter informações de uma bolha específica ao longo de uma simulação.

2. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA E MÉTODOS NUMÉRICOS

O escoamento viscoso, incompressível, isotérmico e tridimensional é modelado através das equações de Navier-Stokes e a equação da continuidade, representadas pelas Eqs. (1) e (2):

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0 \quad (1)$$

$$\rho(\phi) \left[\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \cdot (\vec{V} \vec{V}) \right] = -\vec{\nabla} p + \vec{\nabla} \cdot [\mu(\phi) (\vec{\nabla} \vec{V} + \vec{\nabla}^T \vec{V})] + f, \quad (2)$$

onde $\vec{V}$ representa o vetor velocidade, p a pressão, ρ a massa específica, μ a viscosidade e f representa um campo de força interfacial, que só não assume valores nulos na região da interface entre as fases. Nota-se na Eq. (2) que a massa específica é uma função de uma função indicadora ϕ , que é responsável por determinar a disposição das fases e as interfaces do escoamento. Assim, os campos de massa específica e viscosidade são definidos por:

$$\rho(\phi) = \rho_d \phi + \rho_c (1 - \phi) \quad (3)$$

$$\mu(\phi) = \mu_d \phi + \mu_c (1 - \phi) \quad (4)$$

Nas Eqs. (3) e (4), os índices c e d referem-se às fases contínua e dispersa, respectivamente. O campo escalar definido por ϕ assume valor 1 para regiões de fase dispersa e valor 0 para região de fase contínua. A interface entre as fases é localizada onde o campo de ϕ assume valores entre 0 e 1.

O código AMR3D (*Adaptive Mesh Refinement* 3D) utiliza uma hierarquia de malhas bloco-estruturadas refinadas localmente, que consiste em blocos de malhas retangulares com espaçamentos sequencialmente menores. Esses blocos sequenciais serão formados a partir da identificação de pontos onde os erros da solução na malha mais grosseira (malha base) é elevado devido a fenômenos localizados como alta turbulência, vorticidade e presença de interface. O método Multigrid-Multinível é utilizado na resolução dos sistemas lineares provenientes das equações governantes discretizadas, garantindo uma elevada taxa de convergência e boa acurácia. O acoplamento pressão-velocidade empregado é um método de projeção. Para o avanço temporal, o código utiliza um método semi-implícito de segunda ordem, como proposto por Ascher et. al. (1997). O método VOF é utilizado para a representação de interfaces entre fases fluidas distintas.

O método VOF de Hirt e Nichols (1981) é um dos mais antigos métodos utilizados na representação de escoamentos com a presença de interface entre diferentes fluidos. Conhecida como função coloração, a função C (que é um escalar) é responsável por definir em que posições do domínio se encontra os diferentes tipos de fluido e $a(s)$ interface(s) que $o(s)$ separa(m), como indicado pela Eq. (5). Considerando um sistema bifásico gás/líquido descrito em uma malha cartesiana, a função C assume valor unitário para os volumes que contém a fase líquida, e zero para os volumes da fase gasosa. A interface entre as fases é descrita através de volumes que armazenam valores intermediários da função C , representando uma fração volumétrica de certa fase contida no volume em questão. A função C é advectada a partir do campo de velocidades do escoamento, como representa a Eq. (6).

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \vec{V}) C = 0 \quad (5)$$

Para a advecção da função coloração, utiliza-se o esquema PLIC – *Piecewise Linear Interface Calculation*. Esse esquema promove a reconstrução da interface entre as fases em cada passo de tempo, sendo todo o processo de reconstrução e advecção realizados por cálculos geométricos. Essa é uma maneira eficaz de se transportar o campo da função escalar C garantindo uma boa conservação de volume entre as fases.

O cálculo da força interfacial é realizado pelo CSF – *Continuous Surface Force* apresentado por Brackbill et. al. (1992). Nesse método, a força interfacial é calculada a partir da curvatura k , da tensão superficial σ , de uma função δ concentrada em uma dada interface e da normal n :

$$f = \sigma k \delta n \quad (6)$$

Como as fases são marcadas por um campo escalar, não é possível diferenciar bolhas em uma população representada por C sem que exista um algoritmo que identifique cada bolha e atribua um número de acesso a elas. Dessa forma, um algoritmo foi proposto para que o acesso a uma certa bolha seja possível para o levantamento de informações de interesse relativas à bolha. O algoritmo consiste em tratar os volumes que compõem uma bolha como grafos, e a identificação das mesmas é feita através de uma busca em largura (ou busca em amplitude). A extensão do algoritmo para ambiente paralelo foi implementada utilizando comunicações não blocantes (MPI), em que foi preciso a implementação de um algoritmo de detecção de término.

3. RESULTADOS

Primeiramente será apresentado um resultado de verificação do algoritmo de identificação em paralelo. O teste consiste em liberar duas bolhas de diferentes volumes do repouso, como mostra a Fig. (1). Denomina-se Bolha 1 a de volume igual à $6,97 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3$, inicialmente posicionada à esquerda/acima da Bolha 2, de volume igual à $5,23 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3$. Foram utilizados 16 processadores nesta simulação. As Figs. 2 - (a) e (b) mostram os volumes calculados para cada bolha e a posição x e z dos centróides das bolhas. Os resultados estão satisfatórios, uma vez que os volumes calculados diferem dos volumes teóricos em algo na ordem de 10^{-11} m^3 , e as posições dos centróides estão consistentes com o resultados.

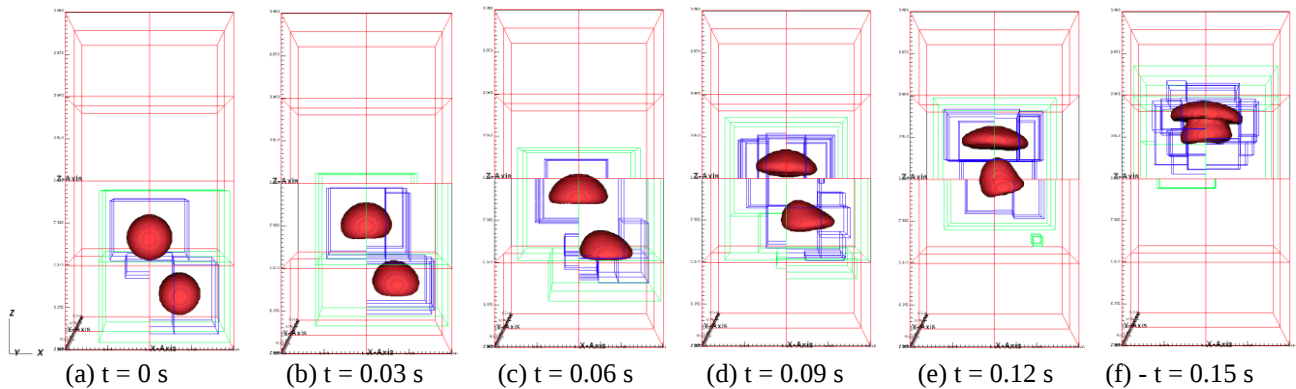
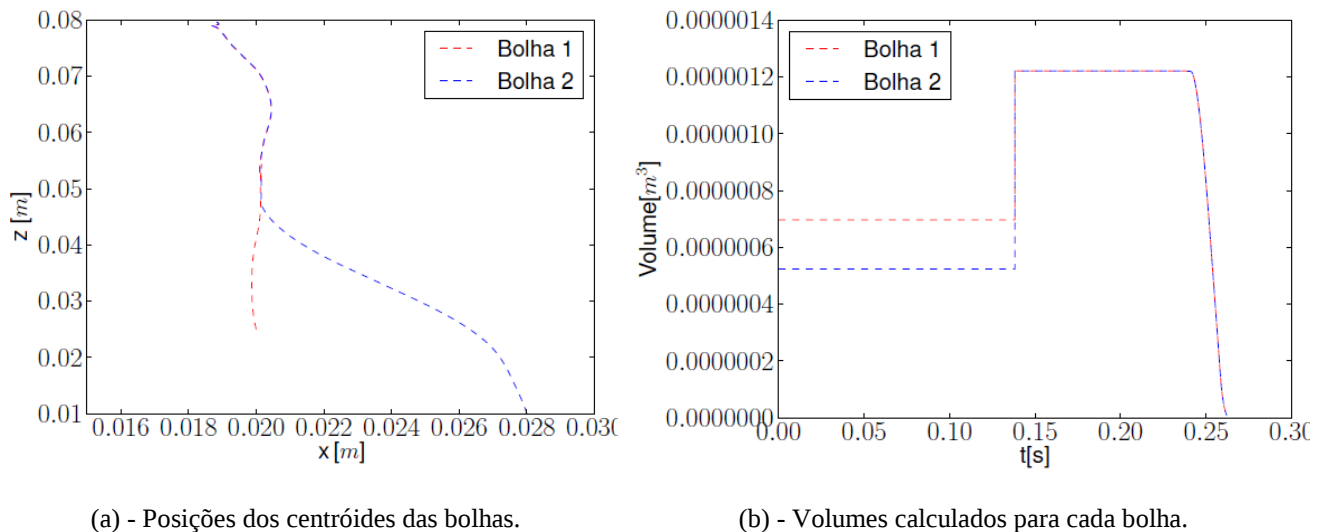


Figura 1. Instantes da simulação de duas bolhas de diferentes tamanhos que coalescem. Caso teste para o algoritmo de identificação proposto.



(a) - Posições dos centróides das bolhas.

(b) - Volumes calculados para cada bolha.

Figura 2. Informações obtidas com o algoritmo de identificação em paralelo.

As simulações de população de bolhas foram realizadas em um domínio não periódico de $0,15 \text{ m} \times 0,15 \text{ m} \times 0,3 \text{ m}$, com condições de livre escorregamento nas faces laterais, ou seja, velocidade nula para as componentes normais à face, e derivada nula para as componentes tangenciais. Condições de Dirichlet para as três componentes de velocidade foram utilizadas na face de baixo, sendo que, para a componente normal w , utiliza-se uma função degrau periódica em pontos da face onde as bolhas são "injetadas" no domínio, como mostra a Fig.(3) - (b). Uma malha base de $32 \times 32 \times 64$, composta por 3 níveis de refinamento foi utilizada para as simulações. O critério de refinamento utilizado foi a posição da interface, através do gradiente de massa específica. A Fig. (3) - (a) mostra o domínio e a malha inicial.

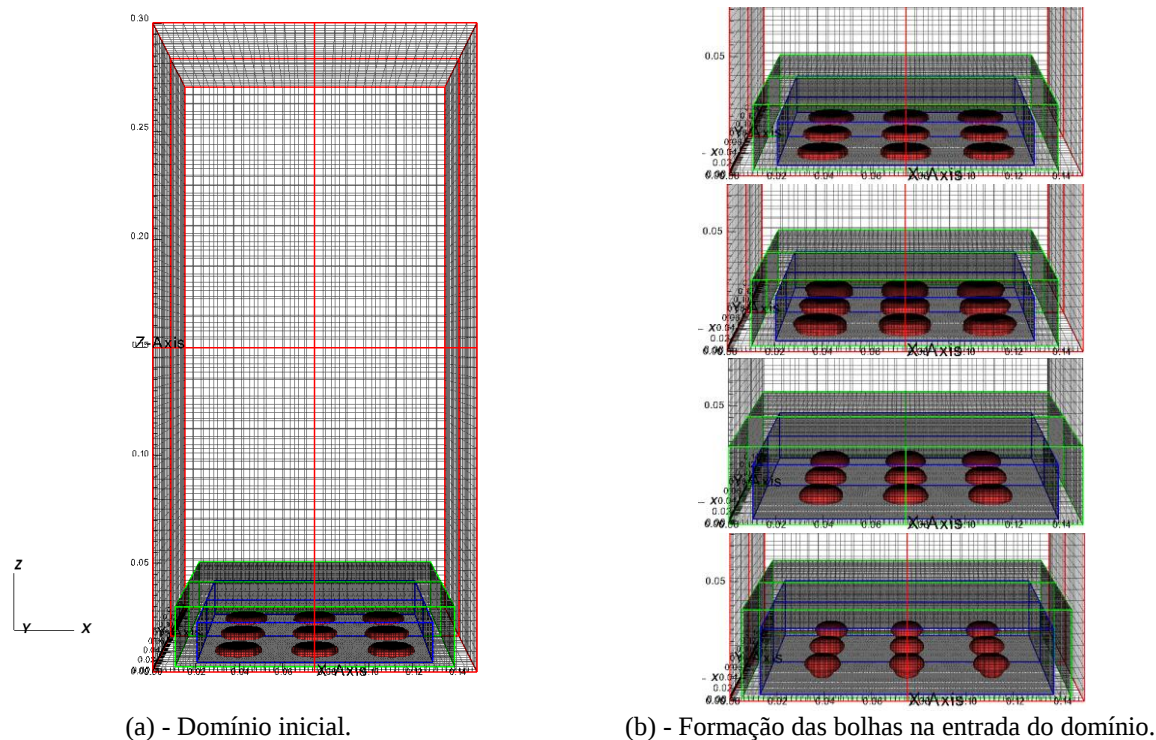
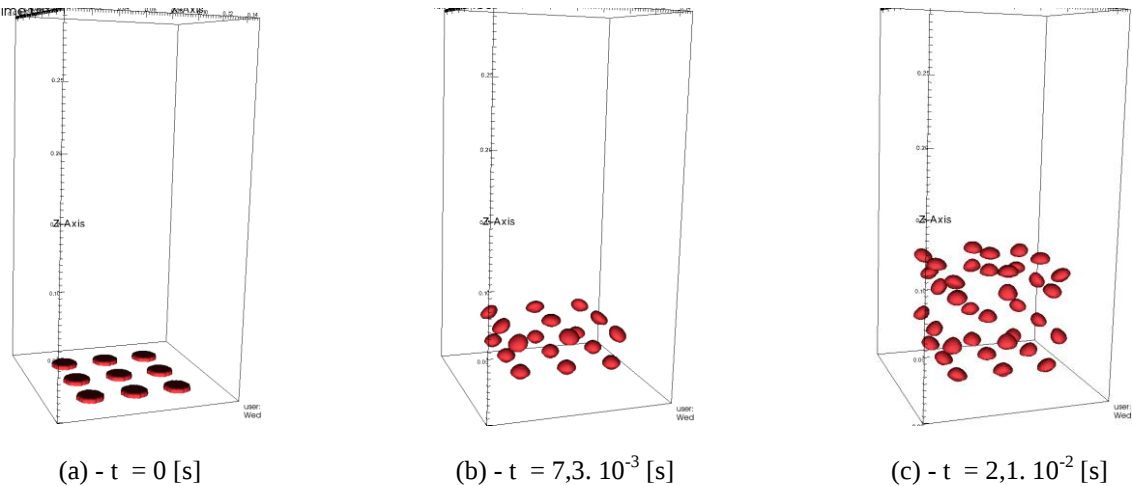


Figura 3. Malha, domínio e processo de formação das bolhas no caso apresentado.

As propriedades físicas utilizadas na simulação do escoamento são apresentados na Tab. (1). A Fig. (4)a apresenta instantes da simulação. É possível ver a formação de uma coluna de bolhas, em que as bolhas atingem um regime levemente pulsante de ascensão. Pode-se observar a "coalescência" entre algumas delas. Com o preenchimento do domínio por bolhas, e o alcance de um regime estatisticamente estacionário, o algoritmo de identificação será aplicado em um conjunto de bolhas para se analisar a interação entre as mesmas, as velocidades de deslocamento as trajetórias, cálculos de forças de arrasto e sustentação, e medição de volumes e diâmetros equivalentes.

Tabela 1. Propriedades do par de fluidos utilizados na simulação de população de bolhas.

Propriedades	Valor
Densidade da fase dispersa	1,225 [kg/m ³]
Densidade da fase contínua	100 [kg/m ³]
Viscosidade da fase dispersa	1,72. 10 ⁻⁵ [Pa.s]
Viscosidade da fase contínua	1,0. 10 ⁻³ [Pa.s]
Tensão superficial	0,07 [N/m]
Aceleração da gravidade	9,81 [m/s ²]



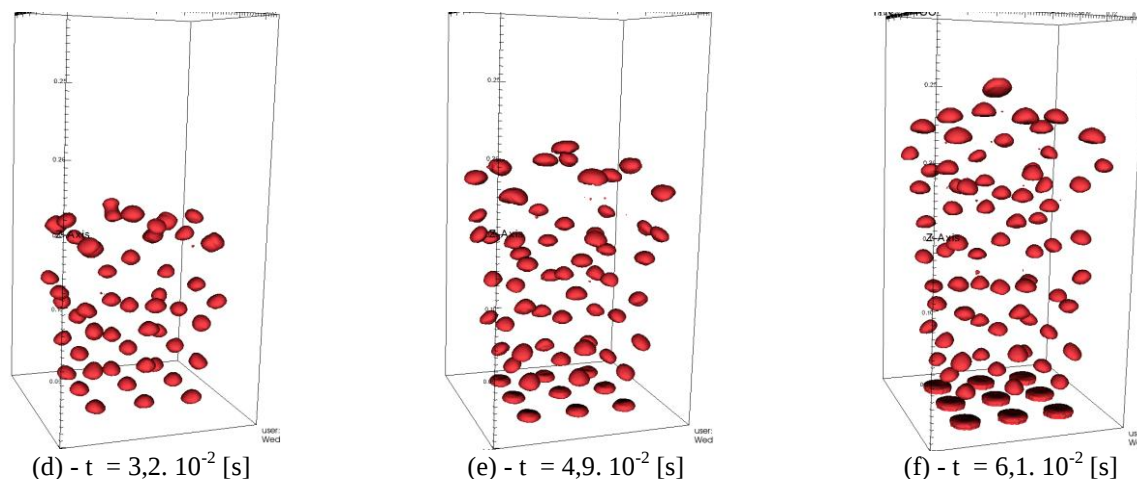


Figura 4. Instantes da simulação de uma população de bolhas injetadas em um domínio não periódico.

4. CONCLUSÕES

Com base nos resultados apresentados, considera-se que o código AMR3D está apto à simular e investigar escoamentos de população de bolhas em ascensão.

5. REFERÊNCIAS

- Ascher, U. M, Ruuth, S. J. E Wetton, B. T, 1997, "Implicit-explicit methods for time-dependent pde's". SIAM J. Numer.Anal. 32, 797-823.
- Brackbill, J. U., Kothe, D. B. e Zemach, C., 1992, "A continuum method for modeling surface tension", J. Computational Physics, v. 100, p. 335{354.
- Dijkhuizen, W., Roghair, I., Van Sint Annaland, M., Kuipers, J.A.M., 2010. "DNS of gas bubbles behaviour using an improved 3d front tracking model-drag force on isolated bubbles and comparison with experiments". Chemical Engineering Science 65 (4), 1415–1426.
- Hirt, C. W.; Nichols, B. D., 1981, "Volume of Fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries". J. Comput. Phys., v. 39, p. 201{225.
- Mei, R., Lawrence, C.J., Klausner, J.F., 1994. A note on the history force on a spherical bubble at finite Reynolds number. Physics of Fluids 6, 418–420.
- Roghair, I.; Lau, Y.; Deen, N.; Slagter, H.; Baltussen, M.; annaland, M. V. S.; kuipers, J., 2011, "On the drag force of bubbles in bubble swarms at intermediate and high reynolds numbers". Chemical Engineering Science, v. 66, n. 14, p. 3204 { 3211.
- Roghair, I., Baltussen, M.W., Van Sint Annaland, M., Kuipers, J.A.M, 2013, "Direct Numerical Simulations of the drag force of bi-disperse bubble swarms", Chemical Engineering Science, Volume 95, Pages 48-53, ISSN 0009-2509
- Unverdi, S. A.; Tryggvason, G., 1992, "A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows". Journal of Computational Physics, v. 100, p. 25{37.

6. AGRADECIMENTOS

Agradecimentos à CAPES, CNPQ, FAPEMIG e PETROBRAS

7. ABSTRACT

Bubble columns are present in various industrial processes and its correct understanding is crucial for the appropriate design of multiphase systems. Due to the complexity of the flow, the majority of the information available for its modeling were obtained by empiricism and scale analysis. With recent computational advances, the feasibility of solution and development of complex models to infer the problem is increased. This work presents results of simulations of a bubble swarm with the Volume of Fluid Method with the AMR3D code.

8. RESPONSABILIDADE PELAS INFORMAÇÕES

Os autores são os únicos responsáveis pelas informações incluídas neste trabalho.