



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO TECNOLÓGICO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE MATERIAIS

Marcelo Antonio Ecco

**Desenvolvimento de um modelo numérico para a
transferência de massa em bolhas isoladas de CO₂/CH₄ através de uma
abordagem Euleriana - Lagrangeana**

Florianópolis
2025

Marcelo Antonio Ecco

**Desenvolvimento de um modelo numérico para a
transferência de massa em bolhas isoladas de CO₂/CH₄ através de uma
abordagem Euleriana - Lagrangeana.**

Trabalho de Conclusão de Curso submetido ao curso de Engenharia de Materiais do Centro Tecnológico da Universidade Federal de Santa Catarina como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia de Materiais.

Orientador: Prof. Emilio Ernesto Paladino
Coorientador: Prof. Rafael Franklin Lazaro de Cerqueira

Florianópolis

2025

A Ecco, Marcelo

Desenvolvimento de um modelo numérico simplificado para avaliação da transferência de massa de CO₂ em águas marinhas profundas / Marcelo A Ecco ; orientador, Emilio Ernesto Paladino, coorientador, Rafael Franklin Lazaro Cerqueira, 2025.

51 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Graduação em Engenharia de Materiais, Florianópolis, 2025.

Inclui referências.

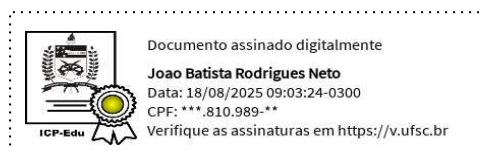
1. Engenharia de Materiais. 2. CFD. 3. Coluna de bolhas. 4. Transferencia de massa. 5. Euler-Lagrange. I. Paladino, Emilio Ernesto. II. Cerqueira, Rafael Franklin Lazaro. III. Universidade Federal de Santa Catarina. Graduação em Engenharia de Materiais. IV. Título.

Marcelo Antonio Ecco

**Desenvolvimento de um modelo numérico para a
transferência de massa em bolhas isoladas de CO₂/CH₄ através de uma abordagem
Euleriana - Lagrangeana.**

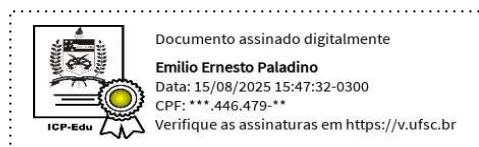
Este Trabalho de Conclusão de Curso foi julgado adequado para obtenção do título de Bacharel e aprovado em sua forma final pelo Curso Engenharia de Materiais.

Local auditório SINMEC, 10 de julho de 2025.



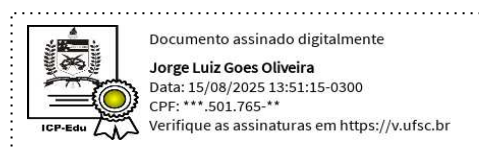
Coordenação do Curso

Banca examinadora



Prof. Emilio Ernesto Paladino, Dr.(a)

Orientador(a)



Prof. Jorge Luiz Goes Oliveira, Dr.(a)

Instituição UFSC



Prof. Thiago Cardoso De Souza, Dr.(a)

Instituição UFSC

Florianópolis, 2025.

RESUMO

Este trabalho apresenta o desenvolvimento e a aplicação de um modelo numérico para avaliar a hidrodinâmica e a transferência de massa de uma bolha de gás, composta por CO_2 e CH_4 , ascendendo em água sob condições de alta pressão e baixa temperatura, simulando o ambiente submarino para a separação de gases. Utiliza-se a abordagem Euler-Lagrange, implementada na biblioteca de código aberto OpenFOAM, na qual a fase líquida é tratada como um contínuo euleriano e a bolha como uma fase discreta lagrangeana. Para alcançar os objetivos propostos, desenvolve-se um submodelo customizado para simular a dissolução do CO_2 na fase contínua, considerando a transferência de massa na interface, regida pela Lei de Henry, e o consequente encolhimento da bolha. O modelo descreve a dinâmica da bolha a partir das forças de arrasto, empuxo e massa virtual. As simulações analisam o efeito de variações no diâmetro e concentração de CO_2 iniciais da bolha. Os resultados quantificam a taxa de dissolução do gás e a evolução temporal da velocidade e do tamanho da bolha, fornecendo dados fundamentais sobre a física do processo. O estudo estabelece uma base teórica para futuras simulações de colunas de bolhas.

Palavras-chave: Coluna de bolhas, Dissolução de CO_2 , Euler-Lagrange, OpenFOAM.

ABSTRACT

This work presents the development and application of a numerical model to evaluate the hydrodynamics and mass transfer of a gas bubble, composed of CO₂ and CH₄, rising in water under high-pressure and low-temperature conditions, simulating the submarine environment for gas separation. The Euler-Lagrange approach is used, implemented in the open-source library OpenFOAM, in which the liquid phase is treated as an Eulerian continuum and the bubble as a Lagrangian discrete phase. To achieve the proposed objectives, a custom submodel is developed to simulate the dissolution of CO₂ into the continuous phase, considering mass transfer at the interface, governed by Henry's Law, and the consequent bubble shrinkage. The model describes the bubble's dynamics based on drag, buoyancy, and virtual mass forces. The simulations analyze the effect of variations in the initial bubble diameter and CO₂ concentration. The results quantify the gas dissolution rate and the temporal evolution of the bubble's velocity and size, providing fundamental data on the process physics. The study establishes a theoretical basis for future simulations of bubble columns.

Keywords: Bubble columns, CO₂ dissolution, Euler-Lagrange, OpenFOAM.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Diagrama de Grace	18
Figura 2: Representação esquemática das concentrações na interface prevista pela Teoria de dois Filmes	20
Figura 3: Estratégias de acoplamento das fases.....	26
Figura 4: Esquematização operacional do modelo de nuvens	37
Figura 5: Velocidade vertical vs tempo por composição e tamanho de bolha	39
Figura 6: Diâmetro da bolha vs tempo por composição e tamanho de bolha.....	40
Figura 7: Velocidade vs tempo para o período de aceleração inicial de uma bolha de 4.5mm	41
Figura 8: Fração mássica (interior da bolha) vs altura por composição e tamanho de bolha.....	42
Figura 9: Taxa de transferência percentual de CO ₂ vs altura por composição e tamanho de bolha.....	43
Figura 10: Valor de f(d) vs tempo	47
Figura 11: Taxa de transferência percentual de CO ₂ vs fração mássica da bolha ...	48
Figura 12: Distância Crítica por tamanho inicial de bolha	49
Figura 13: Transferência total de CO ₂ vs altura por composição e tamanho de bolha	50

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CFD	Dinâmica Dos Fluidos Computacional
EDPs	Equações diferenciais parciais
E-L	Euler-Lagrange
FVM ou FVM	Método Dos Volume Finitos
OpenFOAM	Open Field Operation and Manipulation
SINMEC	Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
1.1	OBJETIVOS	11
1.1.1	Objetivo geral	11
1.1.2	Objetivos específicos.....	11
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	12
2.1	ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS	12
2.2	COLUNAS DE BOLHAS.....	13
2.3	HIDRODINÂMICA DE BOLHA ISOLADA	15
2.4	SEPARAÇÃO POR SOLUBILIDADE E TRANSFERÊNCIA DE MASSA GÁS-LÍQUIDO	18
2.5	DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL (CFD).....	20
2.6	MODELAGEM EULER-LAGRANGE (E-L).....	23
2.6.1	Fase Contínua (Referencial Euleriano)	24
2.6.2	Fase Dispersa (Referencial Lagrangeano).....	24
2.6.3	Acoplamento entre fases	25
2.7	OPENFOAM.....	26
3	MATERIAIS E MÉTODOS	28
3.1	CONTEXTO DA PESQUISA	28
3.2	CONDIÇÕES DE CONTORNO E MODELAGEM MATEMÁTICA.....	29
3.2.1	Considerações iniciais e condições de contorno	29
3.2.2	Modelagem da fase Lagrangeana	31
3.2.3	Modelagem da fase Euleriana.....	33
3.3	OPENFOAM.....	33
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	35
4.1	CONFIGURAÇÃO DO SOLVER PARA A ABORDAGEM EULER-LAGRANGE ...	35
4.2	IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO NUMÉRICO.....	36
4.3	ANÁLISE DA DINÂMICA DA BOLHA	38
4.4	ANÁLISE DA DINÂMICA DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA PERCENTUAL	42
4.4.1	Observação Experimental.....	42
4.4.2	Desenvolvimento do Modelo Matemático para a Taxa de Transferência Percentual	44
4.4.3	Análise do Modelo Logístico	45
4.4.4	Implicações finais.....	47
5	CONCLUSÃO	52
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	53

1 INTRODUÇÃO

A indústria do petróleo e gás desempenha um papel crucial na economia global, sendo uma das principais fontes de energia e matérias-primas para diversos setores. No entanto, um dos desafios significativos enfrentados por esta indústria é a purificação do gás natural extraído de poços de petróleo, especialmente aqueles localizados *offshore*. O gás proveniente desses poços frequentemente consiste em uma mistura de dióxido de carbono (CO_2) e gás natural (majoritariamente CH_4). A presença de CO_2 no gás natural reduz drasticamente seu valor comercial, de modo que é preferível economicamente queimar o gás extraído ou injetá-lo novamente no subsolo. Isso ocorre porque as técnicas tradicionais de separação frequentemente são caras demais para justificar a purificação e o transporte para a costa.

Neste contexto, o presente projeto propõe o desenvolvimento de uma nova abordagem para a separação do gás natural e do CO_2 utilizando um processo de absorção em colunas de bolhas e empregando água como solvente sob altas pressões e baixas temperaturas. Esta técnica visa explorar as propriedades de solubilidade do CO_2 na água, ansiando promover uma separação eficiente e econômica. A utilização de água como solvente apresenta vantagens significativas devido à sua abundância, baixo custo e ausência de toxicidade.

A Dinâmica dos Fluidos Computacional, em inglês Computational Fluid Dynamics (CFD), tem se mostrado uma ferramenta poderosa para diversos campos da engenharia nas últimas décadas, possibilitando que vários cenários e parâmetros sejam testados rapidamente e por uma fração do custo. Diante disso, essa ferramenta foi empregada neste trabalho a fim de modelar os principais fenômenos físicos presentes no fenômeno em questão, utilizando a abordagem Euler-Lagrange. O software escolhido para tal foi o OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation), que constitui-se de uma biblioteca em C++ de código aberto, com grande utilização em simulações numéricas de escoamentos. A partir da biblioteca, foi desenvolvido um modelo numérico para a simulação de uma única bolha em um reservatório com água estagnada a altas pressões e temperaturas.

Este estudo foi realizado no Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor (SINMEC) e servirá de base para entender a física fundamental presente no escoamento multifásico examinado, testar os modelos

numéricos implementados, além de ser uma referência inicial para os próximos trabalhos no assunto.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo geral

Simular numericamente, utilizando a abordagem Euler-Lagrange implementada no software OpenFOAM, a hidrodinâmica e termodinâmica de uma única bolha de gás, sendo o gás composto por uma mistura de CO_2 e CH_4 , ascendendo em água sob condições de alta pressão e baixa temperatura, representativas do ambiente submarino.

1.1.2 Objetivos específicos

- Configurar um *solver* para utilizar a abordagem Euler-Lagrange no OpenFOAM de forma a simular a ascensão da bolha única;
- Implementar um modelo numérico de transferência de massa;
- Analisar a evolução temporal da velocidade e o tamanho da bolha bem como determinar sua velocidade terminal e os efeitos da transferência de massa no movimento;
- Analisar a cinética e quantificar o processo de transferência de massa.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS

O escoamento multifásico descreve o movimento simultâneo de duas ou mais fases distintas, como misturas de gás-líquido, sólido-líquido ou gás-sólido. Caracteristicamente, uma fase atua como uma matriz contínua, enquanto a outra se apresenta de forma dispersa, como bolhas em um líquido ou partículas em um gás (ROSA 2009).

Tais escoamentos são onipresentes em diversos processos industriais, a exemplo de escoamentos em colunas de destilação, fornos de unidades de coque e craqueamento catalítico e poços com alta relação de gás-óleo, tornando seu estudo fundamental para diversas aplicações (CERQUEIRA, 2015).

Para Ferreira (2023), escoamentos multifásicos apresentam uma certa complexidade em sua modelagem, principalmente devido à existência de interfaces separando as diferentes fases. Tais interfaces podem ser múltiplas, deformáveis e móveis, o que origina uma descontinuidade nos valores das propriedades físicas dos fluidos, causando um escoamento bastante complexo em suas vizinhanças.

Para melhor compreender e modelar esses sistemas complexos, os escoamentos multifásicos podem ser classificados segundo diferentes critérios. A primeira camada de complexidade vem da variedade de combinações possíveis, como gás-líquido, líquido-líquido e gás-líquido-sólido. Além disso, surgem complicações adicionais pela possibilidade de múltiplos regimes de escoamento, como *jet flow*, *slug flow*, *churn-turbulent flow*, *bubbly flow*. Cada regime possui escalas de comprimento características, e a transição entre eles pode fazer com que um único cenário abranja diversas escalas relevantes. Consequentemente, existem duas abordagens de modelagem principais: regimes segregados (como o "*slug flow*") são tratados como duas fases contínuas acopladas por uma interface, enquanto outros são melhor representados por uma fase contínua e uma dispersa (bolhas, gotas ou partículas), cada abordagem exigindo formulações matemáticas distintas (WANG, 2019).

Fundamentalmente, o comportamento global do sistema é governado pelo acoplamento interfacial, ou seja, pelas trocas de massa, quantidade de movimento e energia que ocorrem através dessas interfaces dinâmicas. Adicionalmente, os

fenômenos multifásicos frequentemente envolvem múltiplas escalas de comprimento e tempo, desde a dinâmica microscópica da interface (e.g., filme líquido ao redor de uma bolha) até o comportamento macroscópico do escoamento no equipamento como um todo. Em sistemas com fases dispersas, interações como colisões entre os elementos dispersos e a influência mútua de suas esteiras também desempenham um papel importante no comportamento coletivo (TABORDA et al., 2021).

Essas complexidades intrínsecas representam desafios significativos para a modelagem matemática e a simulação computacional via Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD). É necessária a formulação de modelos matemáticos específicos para descrever as interações na interface (e.g., forças interfaciais, transferência de massa e calor, modelos de coalescência/quebra). Ainda que a CFD multifásica enfrente obstáculos como o alto custo computacional e a falta de modelos de fechamento universais, seu uso é frequentemente justificado. A vantagem reside no fato de que as simulações de CFD estudam diretamente as equações governantes, o que diminui a dependência de modelos de fechamento e perfis assumidos para descrever o sistema físico (WANG, 2019).

2.2 COLUNAS DE BOLHAS

Seguindo a introdução aos escoamentos multifásicos, esta seção foca no tipo de equipamento central para a aplicação que motiva este trabalho: a coluna de bolhas. Essencialmente, uma coluna de bolhas é um dispositivo gás-líquido que consiste em um vaso cilíndrico ou retangular preenchido com líquido, no qual o gás é introduzido pela base através de um distribuidor na forma de bolhas. Essas bolhas ascendem através da coluna líquida, promovendo um contato íntimo entre as fases. A simplicidade de construção (ausência de partes móveis complexas) e a eficiência na promoção de transferência de massa e calor tornam as colunas de bolhas equipamentos amplamente utilizados em diversas indústrias (TABORDA et al., 2021).

A fluidodinâmica computacional (CFD) surge como uma ferramenta poderosa para prever a estrutura do escoamento e as taxas de transferência nesses equipamentos. No entanto, a modelagem de reatores de fluxo borbulhante permanece um desafio significativo, pois a estrutura do escoamento é fortemente influenciada pelas bolhas, que estão em constante mudança. Seu tamanho se altera durante a subida devido à transferência de massa e às variações de pressão hidrostática, sem

menção as oscilações dinâmicas na forma e no movimento da bolha (MUNIZ; SOMMERFELD, 2020).

Os primeiros modelos matemáticos para colunas de bolhas foram criados na segunda guerra mundial e vem sendo aperfeiçoados desde então (OLSEN; SKJETNE, 2016). As aplicações industriais das colunas de bolhas são vastas e variadas, abrangendo desde reações químicas e processos bioquímicos até operações de separação física. Nesta última categoria, destacam-se os processos de absorção e dessorção gás-líquido, onde um componente é transferido seletivamente da fase gasosa para a líquida (absorção, como no caso da remoção de CO_2) ou vice-versa (dessorção ou *stripping*). A eficiência da coluna para essas operações depende intimamente de sua hidrodinâmica interna (TABORDA et al., 2022).

A hidrodinâmica dentro de uma coluna de bolhas é notoriamente complexa e difere significativamente do comportamento de uma bolha isolada. De acordo com Krishna e Van Baten (2003), o regime de escoamento em colunas de bolhas pode ser classificado como homogêneo ou heterogêneo. No regime homogêneo, as bolhas mantêm um tamanho e formato consistentes, enquanto no regime heterogêneo, coexiste uma variedade de tamanhos de bolha.

A hidrodinâmica complexa, particularmente a turbulência e a recirculação no regime heterogêneo, também governa a mistura da fase líquida e a transferência de massa global na coluna. A eficiência da transferência de massa é frequentemente caracterizada pelo coeficiente volumétrico de transferência de massa ($K_L a$). Este parâmetro agregado, que combina a resistência à transferência na interface (K_L) e a área interfacial disponível (a), quantifica a capacidade geral da coluna para transferir massa entre as fases e é essencial para o seu dimensionamento.

Compreender a complexidade da coluna de bolhas é fundamental para contextualizar o presente estudo. Embora este TCC se concentre na simulação de uma bolha única – análise essa que permite investigar a física fundamental das forças interfaciais locais e validar modelos numéricos em um cenário simplificado – é crucial reconhecer que o comportamento global da coluna emerge das interações coletivas de inúmeras bolhas nos regimes de escoamento descritos. Portanto, o estudo da bolha isolada, detalhado posteriormente na Seção 2.3, representa o primeiro passo necessário, fornecendo os "blocos de construção" e modelos validados que são pré-requisitos para futuras simulações mais realistas da coluna de bolhas como um todo.

2.3 HIDRODINÂMICA DE BOLHA ISOLADA

Tendo estabelecido o contexto da coluna de bolhas como o ambiente de aplicação, torna-se essencial analisar em detalhe o comportamento hidrodinâmico de seu componente fundamental: a bolha de gás isolada. Compreender como uma única bolha se move e interage com o líquido circundante é o primeiro passo para modelar sistemas mais complexos e validar as ferramentas de simulação.

É bem estabelecido por observações experimentais que, durante a ascensão, as bolhas executam um movimento oscilatório e mudam de forma, sendo raramente esféricas em colunas de bolhas (TABORDA; SOMMERFELD, 2021). A caracterização geométrica de uma bolha não esférica é frequentemente feita através de um diâmetro equivalente (d_b ou d_{eq}), correspondente ao diâmetro de uma esfera de mesmo volume V_b . A forma da bolha pode variar de esférica a elipsoidal, achatada, ou adquirir formas mais complexas como de calota esférica ("*spherical cap*"), com bordas instáveis ("*skirt bubble*"), dependendo do balanço entre as forças atuantes, especialmente as de tensão superficial, inércia e empuxo.

O movimento ascensional da bolha é governado pela Segunda Lei de Newton. A força resultante que determina a aceleração da bolha ($\vec{a}_b = d\vec{u}_b/dt$) é a soma vetorial de diversas forças interfaciais exercidas pelo líquido circundante mais a influência das forças de campo (i.e. gravidade). As mais significativas para este trabalho e de acordo com Taborda et al. (2021), são:

- Força de Empuxo ($\vec{F}_b$): É a força ascensional resultante da diferença de pressão hidrostática exercida pelo líquido sobre a superfície da bolha, dada pelo princípio de Arquimedes:

$$\vec{F}_B = (\rho_L - \rho_b)V_b\vec{g} \quad (1)$$

onde ρ_L e ρ_b são as densidades do líquido e do gás, respectivamente, V_b é o volume da bolha e $\vec{g}$ é a aceleração da gravidade.

- Força de Arrasto ($\vec{F}_D$): Representa a resistência do fluido ao movimento relativo da bolha. Atua em sentido oposto ao vetor velocidade relativa ($\vec{u}_{rel} = \vec{u}_b - \vec{u}_L$,

onde $\vec{u}_L$ é a velocidade local do líquido). Sua magnitude depende da densidade do líquido ρ_L , da área projetada da bolha (A_p), da magnitude da velocidade relativa ao quadrado e do coeficiente de arrasto (C_D):

$$\vec{F}_D = -\frac{1}{2}\rho_L C_D A_p |\vec{u}_{rel}| \cdot \vec{u}_{rel} \quad (2)$$

- Força de Massa Virtual ($\vec{F}_{VM}$): É uma força inercial que representa a inércia adicional experimentada pela bolha por ter que acelerar uma certa quantidade de líquido ao seu redor. Esta força se opõe à aceleração relativa entre a bolha e o fluido e é significativa em escoamentos onde a aceleração é alta (escoamentos transientes ou oscilatórios). Sua forma vetorial é:

$$\vec{F}_{VM} = C_{VM} \rho_L V_b \left(\frac{Du_L}{Dt} - \frac{du_b}{dt} \right) \quad (3)$$

onde C_{VM} é o coeficiente de massa virtual (geralmente adotado como 0.5 para bolhas esféricas), ρ_L é a densidade do líquido, V_b é o volume da bolha, $\frac{Du_L}{Dt}$ é a aceleração do campo de líquido e $\frac{du_b}{dt}$ é a aceleração da bolha.

Pode-se citar também outras forças atuantes no sistema hidrodinâmico, porém menos relevantes para o estudo em questão: Força de Sustentação e Força de Basset (TABORDA et al., 2021).

O somatório das forças atuantes e a Segunda Lei de Newton dão origem à equação do movimento. Aplicando a Segunda Lei de Newton:

$$m_b \vec{a}_b = \sum \vec{F}_i \quad (4)$$

onde $\sum \vec{F}_i$ inclui Empuxo, Arrasto etc. A solução numérica desta equação diferencial ao longo do tempo t permite rastrear a trajetória e a velocidade da bolha $\vec{u}_b(t)$.

O comportamento dinâmico (forma, trajetória, velocidade) de uma bolha isolada é governado por um balanço complexo entre forças. Este balanço é convenientemente expresso através de números adimensionais (PARK et al., 2017):

- Número de Reynolds da bolha (Re_b): Razão entre forças inerciais e viscosas.

$$Re_b = \frac{\rho_L |\overrightarrow{u_{rel}}| d_b}{\mu_L} \quad (5)$$

- Número de Eötvös (Eo): Razão entre forças de empuxo/gravitacionais e de tensão superficial. Indica a tendência da bolha a se deformar.

$$Eo = \frac{g(\rho_L - \rho_b) d_b^2}{\sigma} \quad (6)$$

- Número de Morton (Mo): Combina propriedades do fluido (μ_L , ρ_L , σ) e g , independe do tamanho ou velocidade da bolha. Caracteriza o "meio" em que a bolha se move.

$$Mo = \frac{g \mu_L^4 (\rho_L - \rho_b)}{\rho_L^2 \sigma^3} \quad (7)$$

Os três números adimensionais citados acima podem ser correlacionados pelo Diagrama de Grace (1973), apresentado na Figura 1 (GRACE, 1973 apud PARK et al., 2017). Essa é uma ferramenta clássica que mapeia a forma e o regime de trajetória (retilínea, oscilatória/ziguezague, instável) de bolhas isoladas em função desses três números adimensionais (geralmente Re_b vs Eo para diferentes faixas de Mo). Ele evidencia que bolhas pequenas (baixo Eo) tendem a ser esféricas e subir retilineamente, enquanto bolhas maiores (alto Eo) deformam-se e podem apresentar trajetórias complexas.

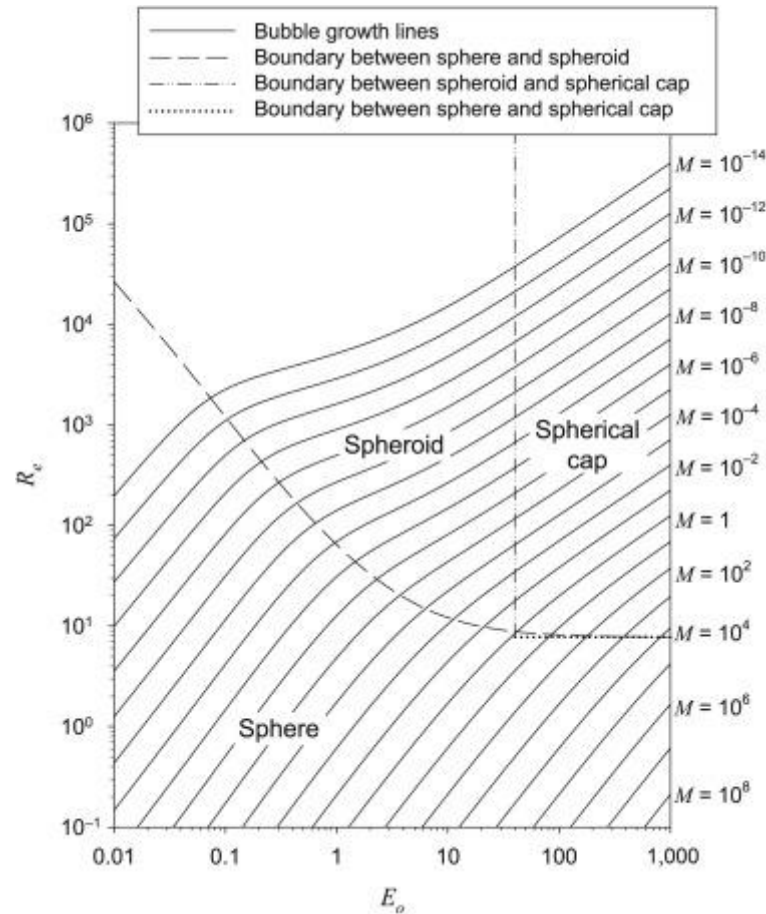


Figura 1: Diagrama de Grace

Fonte: Park et al. (2017)

Quando uma bolha atinge um estado de equilíbrio de forças (aceleração nula), ela ascende com uma velocidade terminal (U_T) constante. Esta velocidade é um parâmetro importante e depende fortemente do tamanho da bolha e dos números adimensionais E_o e Mo (que determinam a forma e o C_D correspondente), existindo diversas correlações na literatura para sua estimativa em diferentes regimes (MUNIZ; SOMMERFELD, 2020).

2.4 SEPARAÇÃO POR SOLUBILIDADE E TRANSFERÊNCIA DE MASSA GÁS-LÍQUIDO

Os tópicos anteriores descreveram a natureza dos escoamentos gás-líquido, o funcionamento das colunas de bolhas e a hidrodinâmica que governa a ascensão de bolhas individuais. Essa hidrodinâmica é fundamental porque ela cria e renova a interface entre as fases, através da qual ocorre o processo de separação de interesse

neste projeto. Este processo baseia-se na diferença de solubilidade dos componentes gasosos (principalmente CO_2 e CH_4) no líquido (água) e na taxa de transferência de massa através da interface gás-líquido.

O equilíbrio termodinâmico entre um gás e um líquido é descrito pela Lei de Henry. A lei pode ser formulada com base em diferentes correlações o que implica em diferentes coeficientes de Henry dependendo de quais variáveis estão sendo usadas. A forma adimensional da constante de Henry (H^{cc}) é usada para formular a lei onde as concentrações são representadas na forma de frações mássicas (SANDER, 2015). Nesses termos, a lei relaciona a fração mássica de um componente i na fase gasosa ($Y_{i,b}$) com sua fração mássica ($Y_{i,s}$) na fase líquida em condições de saturação na interface (TABORDA et al., 2021). A representação matemática dessa forma da lei é:

$$Y_{i,s} = H_i^{cc} \cdot Y_{i,b} \cdot \frac{\rho_b}{\rho_c} \quad (8)$$

onde H_i^{cc} é a constante de Henry para o componente i no solvente considerado, ρ_b é a densidade na da fase gasosa e ρ_c e a densidade do líquido.

Enquanto a Lei de Henry descreve o potencial de dissolução (o estado de equilíbrio), a taxa na qual o gás é efetivamente transferido para o líquido é governada pela cinética da transferência de massa. Um modelo conceitual clássico para descrever este processo é a Teoria de Dois Filmes, o qual assume que a resistência à transferência de massa através da interface gás-líquido está inteiramente contida em um filme fino adjacente a essa interface através dos quais o transporte de massa ocorre por difusão molecular. O modelo postula que a interface em si não oferece resistência, e que as concentrações das fases gasosa e líquida nela encontram-se em equilíbrio, sendo relacionadas pela Lei de Henry (WANG et al., 2018).

A representação esquemática da Teoria de Dois Filmes pode ser observada na Figura 2.

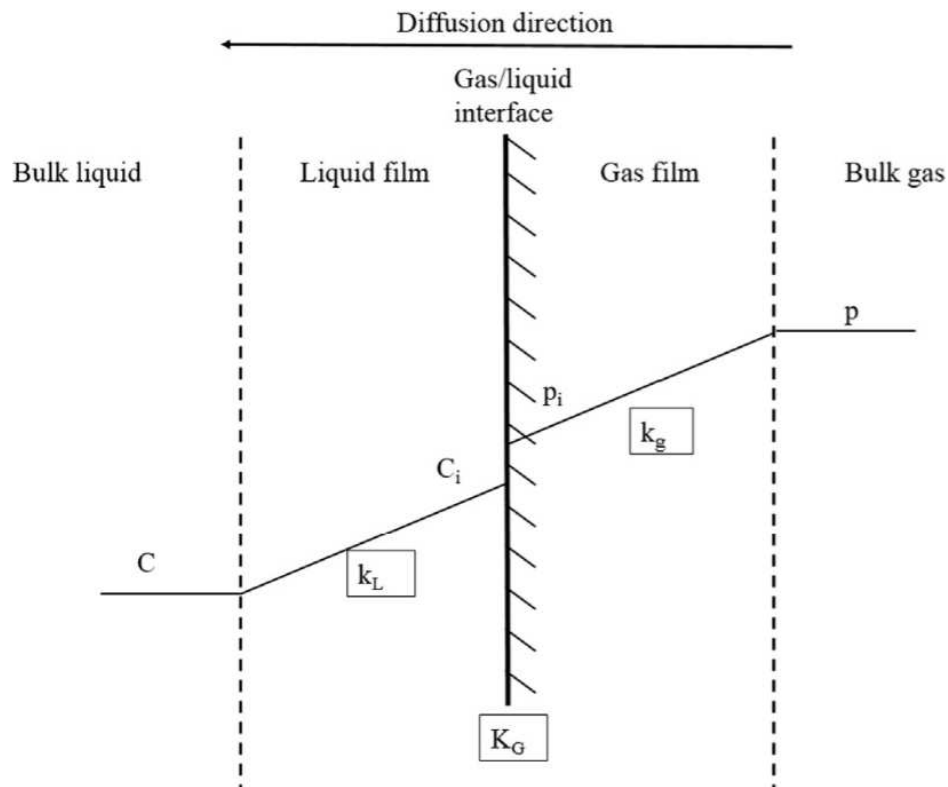


Figura 2: Representação esquemática das concentrações na interface prevista pela Teoria de dois Filmes

Fonte: Wang et al. (2018)

O diagrama acima relaciona as variáveis componentes da Teoria de Dois Filmes, onde C_i é a concentração na interface líquida, C é a concentração no seio do líquido, p_i é a pressão na interface gasosa, p é a pressão no seio do gás, k_L (m/s) é o coeficiente de transferência de massa na fase líquida e k_g (mol/(Pa·s·m²)) é o coeficiente na fase gasosa.

2.5 DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL (CFD)

Após a descrição dos fenômenos físicos relevantes para o escoamento gás-líquido em colunas de bolhas, a dinâmica da bolha isolada e os mecanismos de transferência de massa, é necessário introduzir a metodologia utilizada para investigar esses sistemas numericamente: a Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD). A CFD é um ramo da mecânica dos fluidos que utiliza métodos numéricos e algoritmos computacionais para resolver as equações matemáticas que governam o escoamento

de fluidos, a transferência de calor e outros fenômenos relacionados, permitindo a simulação do comportamento do fluido e a predição quantitativa de suas propriedades (como campos de velocidade, pressão, temperatura, concentração de espécies, etc.) (WEN et al., 2020).

A base da CFD reside na solução numérica das equações governantes fundamentais da dinâmica dos fluidos, que expressam as leis de conservação de massa, quantidade de movimento e energia. Conforme apresentado por Taborda e Sommerfeld (2021), para escoamentos isotérmicos e incompressíveis de um fluido Newtoniano, as equações chave são a equação da Continuidade (conservação de massa) e as equações de Navier-Stokes (conservação de quantidade de movimento):

- Equação da Continuidade:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (9)$$

- Equações de Navier-Stokes:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u} + \vec{f} \quad (10)$$

onde $\vec{u}$ é o vetor velocidade do fluido, t é o tempo, ρ é a densidade, p é a pressão, μ é a viscosidade dinâmica e $\vec{f}$ representa forças de campo (como a gravidade) ou termos fonte.

Para problemas envolvendo transferência de calor ou massa, equações adicionais de conservação de energia ou espécies são incluídas como a equação de transporte escalar (TABORDA et al., 2021):

$$\frac{\partial(\alpha_c \rho_c \phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c \rho_c \phi) = \nabla[\alpha_c D \nabla(\rho_c \phi)] + S \quad (11)$$

onde ϕ uma quantidade escalar por unidade de massa, D é a difusividade do componente, α_c é a porcentagem de fase líquida na célula, ρ_c é a densidade do líquido e S é o termo fonte (consumo ou produção) do componente.

Estas são equações diferenciais parciais (EDPs) não lineares, cuja solução analítica só é conhecida para casos muito simplificados. A CFD oferece um meio de

obter soluções aproximadas para geometrias e condições complexas de interesse prático.

O processo típico de uma análise CFD envolve três etapas principais:

- **Pré-processamento:** Definição da geometria do domínio de interesse e geração de uma malha computacional (ou *grid*), que discretiza o domínio contínuo em um número finito de pequenos volumes ou elementos. Definição das propriedades dos fluidos, dos modelos físicos a serem utilizados (e.g., turbulência, multifásico) e das condições de contorno (valores ou gradientes das variáveis nas fronteiras do domínio);
- **Solução (*solver*):** Aplicação de métodos de discretização (como o Método dos Volumes Finitos) para transformar as EDPs governantes em um sistema de equações algébricas sobre os nós ou volumes da malha. Este sistema, geralmente de grande porte e não linear, é então resolvido iterativamente por algoritmos numéricos até que a convergência seja alcançada (i.e., os erros ou resíduos das equações estejam abaixo de uma tolerância definida);
- **Pós-processamento:** Análise e visualização dos resultados numéricos obtidos. Isso inclui a geração de gráficos de contorno (campos de pressão, velocidade), vetores de velocidade, linhas de corrente, além da extração de dados quantitativos (forças, vazões, médias, perfis) e a comparação com dados experimentais ou teóricos para validação e verificação.

Dentre os métodos de discretização, o Método dos Volumes Finitos (MVF ou FVM), amplamente utilizado em CFD, é a base do software OpenFOAM empregado neste trabalho. Para Maliska (2023) a função do MVF é converter as equações diferenciais parciais em um sistema de equações algébricas lineares, geralmente na forma $A[\phi]=b$.

Neste sistema, **A** é a matriz de coeficientes, que resulta da linearização dos termos na malha computacional. O vetor **b**, por sua vez, agrupa todos os termos fontes, como constantes, condições de contorno e componentes não linearizáveis. É importante ressaltar que as técnicas numéricas utilizadas para resolver este sistema algébrico são independentes do método de discretização que o gerou (MALISKA, 2023).

A CFD oferece vantagens significativas em relação à experimentação tradicional, como a redução de custos e tempo, a capacidade de obter dados detalhados em todo o domínio (difíceis de medir experimentalmente), a facilidade de realizar estudos paramétricos e otimizações, e a possibilidade de simular condições extremas ou perigosas (WEN et al., 2020). No entanto, a CFD também possui limitações. Os resultados são sempre aproximações da realidade, sujeitos a erros numéricos (de discretização, arredondamento, convergência) e, fundamentalmente, às limitações dos modelos físicos empregados (e.g., modelos de turbulência, modelos de fechamento para escoamentos multifásicos). O custo computacional (tempo de CPU e memória RAM) pode ser elevado, especialmente para problemas complexos, transientes ou tridimensionais com malhas refinadas. Por isso, a validação dos resultados de CFD contra dados experimentais ou soluções analíticas, sempre que possível, é uma etapa indispensável.

Em suma, a CFD fornece um poderoso conjunto de ferramentas para a análise de escoamentos fluidos. No entanto, para aplicá-la a problemas complexos como o escoamento gás-líquido em colunas de bolhas, é necessário empregar modelos específicos que capturem a interação entre as fases, como será discutido nas próximas seções.

2.6 MODELAGEM EULER-LAGRANGE (E-L)

Dentre as abordagens de CFD para escoamentos multifásicos discutidas conceitualmente, a metodologia Euler-Lagrange (E-L) é particularmente adequada para situações em que a fase dispersa (bolhas, gotas ou partículas) é composta por elementos discretos e o interesse reside em rastrear seu comportamento individualmente, ou quando a fase dispersa é suficientemente diluída.

O método computacional Euler/Lagrange trata a fase fluida como um contínuo e as bolhas são modeladas como massas pontuais singulares (MUNIZ; SOMMERFELD, 2020). Como as bolhas são consideradas entidades individuais, que são rastreadas através do campo de escoamento, o nível de detalhe na modelagem de processos específicos, como transferência de massa, encolhimento de bolhas, coalescência ou quebra, é potencialmente alto, enquanto o esforço computacional permanece viável (TABORDA et al., 2021).

2.6.1 Fase Contínua (Referencial Euleriano)

A fase líquida, água no caso deste trabalho, é tratada como um contínuo, e suas propriedades (campos de velocidade $\vec{u}_L$, pressão p_L , etc.) são descritas pelas equações de conservação de massa e quantidade de movimento (Equações de Navier-Stokes, apresentadas na Seção 2.5). resolvidas sobre uma malha computacional fixa. A presença e o movimento da fase dispersa (a bolha) influenciam a fase contínua através de um termo fonte, $\vec{S}_{QM}$, adicionado à equação de conservação de quantidade de movimento do fluido (FERREIRA, 2023):

$$\rho_L \left(\frac{\partial \vec{u}_L}{\partial t} + (\vec{u}_L \cdot \nabla) \vec{u}_L \right) = -\nabla p_L + \mu_L \nabla^2 \vec{u}_L + \rho_L \vec{g} + \vec{S}_{QM} \quad (12)$$

O termo $\vec{S}_{QM}$ representa a força por unidade de volume exercida pela fase dispersa sobre a fase contínua, em concordância com a terceira Lei de Newton (ação e reação). Ele é calculado somando-se as forças interfaciais (como arrasto, massa virtual associada à aceleração do fluido etc., mas com sinal oposto) de todas as partículas/bolhas p presentes em um determinado volume de célula da malha Euleriana (ΔV_{cell}), e dividindo pelo volume da célula:

$$\vec{S}_{QM} = - \frac{\sum_{p \in cell} \vec{F}_{p \rightarrow f}}{\Delta V_{cell}}$$

onde $\vec{F}_{p \rightarrow f}$ são as forças relevantes que a partícula p exerce sobre o fluido.

Desta forma, o efeito da fase discreta é acoplado de volta às equações da fase contínua. Em escoamentos turbulentos, a presença das bolhas também pode modular a turbulência do líquido, o que exigiria modelos adicionais (não abordados neste trabalho inicial).

2.6.2 Fase Dispersa (Referencial Lagrangeano)

Cada elemento da fase dispersa é rastreado individualmente através do domínio computacional. A trajetória da partícula é determinada pela integração da sua

velocidade $\vec{u}_b$, e a velocidade é obtida pela integração da sua aceleração $\vec{a}_b$, calculada pela Segunda Lei de Newton (conforme detalhado na Seção 2.3).

As forças interfaciais $\sum \vec{F}_i$ (Empuxo $\vec{F}_B$, Arrasto $\vec{F}_D$, Massa Adicional $\vec{F}_{VM}$, Gradiente de Pressão $\vec{F}_{PG}$, Sustentação $\vec{F}_L$, etc.) que compõem o lado direito dependem crucialmente das propriedades locais da fase contínua ($\vec{u}_L$, p_L , ρ_L , μ_L , ∇p_L , $\nabla \times \vec{u}_L$, etc.) na posição instantânea da bolha ($\vec{x}_b(t)$). Como essas propriedades são calculadas e armazenadas nos nós ou centros das células da malha Euleriana, é necessário um esquema de interpolação para estimar os valores do campo contínuo na posição exata da bolha Lagrangeana a cada passo de tempo (FERREIRA, 2023).

2.6.3 Acoplamento entre fases

O acoplamento interfásico ou acoplamento de fases é o conceito fundamental que descreve a interação mútua em um escoamento multifásico. Essa interação se manifesta através de três mecanismos principais: a transferência de massa (por exemplo, em processos de evaporação e condensação), a transferência de quantidade de movimento (através de forças interfaciais) e a transferência de energia (como a troca de calor entre as fases) (FERREIRA, 2023).

As interações entre as fases podem ser classificadas em três estratégias de resolução conforme apresentado na Figura 3.

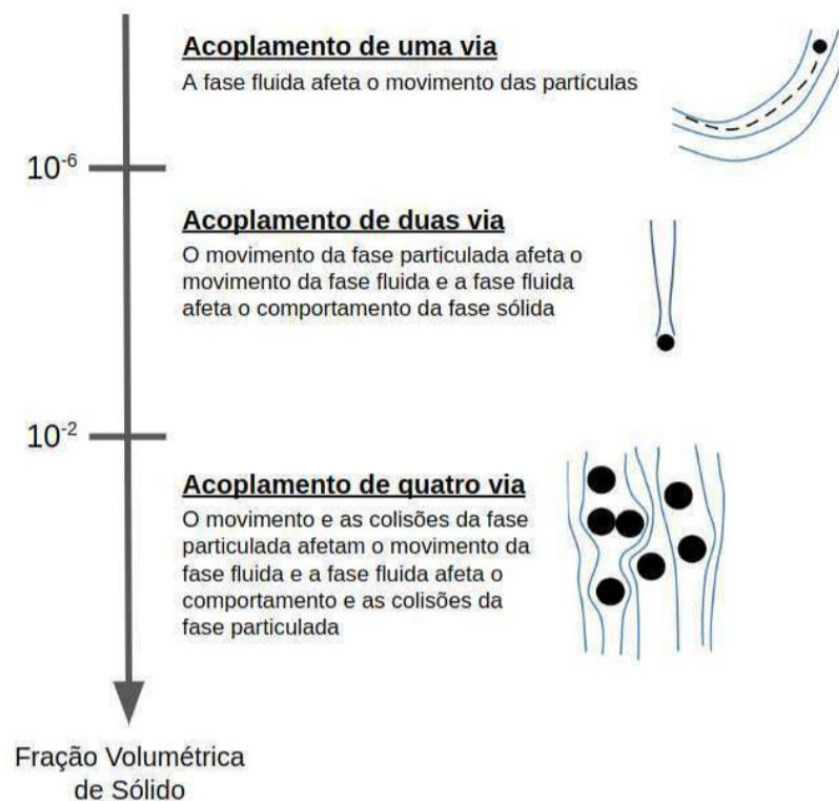


Figura 3: Estratégias de acoplamento das fases

Fonte: Ferreira (2023)

2.7 OPENFOAM

Dentre as opções de software para a implementação e solução numérica do modelo Euler-Lagrange (E-L), descrito na seção anterior, pode-se citar a plataforma OpenFOAM® (*Open Field Operation and Manipulation*). OpenFOAM não é um software monolítico, mas sim uma extensa biblioteca de classes orientadas a objeto escritas em C++, projetada para criar executáveis customizados, conhecidos como *solvers* (solucionadores), para a solução numérica de problemas de mecânica dos fluidos computacional (CFD) e campos contínuos em geral.

Uma das características mais distintivas do OpenFOAM é sua natureza *open-source* (código aberto), distribuído sob a Licença Pública Geral GNU (GPL). Isso oferece vantagens significativas para a pesquisa acadêmica e o desenvolvimento tecnológico, como a ausência de custos de licença, a transparência total do código (permitindo auditoria e compreensão profunda dos algoritmos e modelos implementados), e uma grande flexibilidade para modificar ou estender

funcionalidades existentes e desenvolver novos modelos ou *solvers* customizados para necessidades específicas. A plataforma utiliza predominantemente o Método dos Volumes Finitos (MVF) para a discretização espacial das equações governantes (FERREIRA, 2023).

Diversos *solvers* pré-definidos no OpenFOAM já incorporam funcionalidades Euler-Lagrange, embora muitas vezes focados em aplicações específicas (como combustão, spray, ou partículas sólidas densas) e podendo requerer adaptações ou customizações para um caso particular como o da bolha única em líquido com todas as forças relevantes.

A flexibilidade do OpenFOAM permite ao usuário selecionar e configurar os modelos de força desejados (arrasto, sustentação, etc.) através dos dicionários de entrada ou, se necessário, implementar modelos customizados diretamente no código-fonte.

Após a execução da simulação, a análise e visualização dos resultados (campos da fase contínua e trajetórias/propriedades da fase discreta) são comumente realizadas com softwares de pós-processamento como o ParaView, que possui integração nativa com o formato de dados do OpenFOAM. Ferramentas de linha de comando e *function objects* do próprio OpenFOAM também permitem extrair dados quantitativos específicos durante ou após a simulação.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 CONTEXTO DA PESQUISA

O presente estudo se insere na pesquisa “Separação por absorção de CO₂ e gás natural utilizando água como solvente” desenvolvida pelo Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor (SINMEC) iniciada em 2023.

O projeto propõe uma maneira inovadora para a separação do dióxido de carbono do gás natural produzido no pré-sal brasileiro através de um processo de absorção a alta pressão e baixa temperatura em coluna de bolhas utilizando água como solvente. Assim, em um único processo, sem regeneração de solvente, pode-se agregar valor monetário ao gás natural extraído e capturar o CO₂ separado, que é descartado junto com o solvente (água) através da reinjeção em reservatórios.

Processos tradicionais de separação de CO₂ do gás natural são realizados em pressões relativamente baixas, resultando em grandes volumes de gás a ser tratado, demandando grandes espaços nas plataformas e expressiva quantidade de energia para sua recompressão, aumentando indiretamente a pegada de carbono. O processo proposto pode ser realizado a altas pressões, inclusive no leito marinho, reduzindo a demanda por espaço em plataforma e, de forma significativa, o custo de recompressão do CO₂. Desta forma, imprimem-se reduções expressivas na pegada de carbono da cadeia extrativa e no espaço necessário em plataformas para tratamento do gás produzido.

Considerando o contexto apresentado, é necessário desenvolver testes de base para dar suporte à pesquisa. Será realizada, portanto, uma simulação onde uma bolha de gás contendo uma mistura de CO₂ e gás natural percorre uma porção de água a altas pressões e temperaturas baixas.

Os atributos importantes para a escolha do software a ser utilizado para a simulação citada acima foram transparência e flexibilidade do código, bem como a disponibilidade e acessibilidade. Diante disso ficou definida a utilização da biblioteca/software de código aberto OpenFOAM.

Antes de iniciar as simulações foram verificadas as condições previstas para o fenômeno físico e se, de fato, poderiam ser reproduzidas pelo software. Foi

constatado que não havia um modelo para dissolução de gás na biblioteca do OpenFOAM. Portanto seguiu-se para as etapas de desenvolvimento do novo modelo.

Para a implementação do modelo foi definida a abordagem Euler-Lagrange devido a sua aptidão para sistemas multicomponente dispersos e, conseqüentemente, para a dinâmica detalhada de uma única bolha.

3.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO E MODELAGEM MATEMÁTICA

3.2.1 Considerações iniciais e condições de contorno

Assim como em qualquer modelo numérico, é necessário fazer algumas simplificações com relação ao fenômeno físico real. Dentre elas, as principais considerações deste trabalho são elencadas a seguir:

- Regime transiente;
- Acoplamento de 2 vias;
- A fase discreta é composta por uma partícula esférica multicomponente;
- A partícula dispersa tem todos os efeitos de transferência aplicados ao volume cujo centro da partícula está localizado (*point particles*);
- A bolha é considerada perfeitamente esférica e rígida;
- A bolha é constituída por CO_2 e CH_4 , sendo CH_4 modelado como um gás inerte;
- O gás da bolha é considerado como uma mistura perfeita;
- Há redução da partícula;
- A fase contínua foi tratada como um fluido incompressível;
- Há redução do conjunto de forças que atuam sobre a bolha selecionando somente as mais relevantes (arrasto, empuxo e massa virtual);
- Não foram considerados os efeitos das forças causadas pela transferência de massa.
- Não foram considerados os efeitos da salinidade na água;
- Não foram considerados os efeitos da pressão hidrostática;

Além disso, um domínio suficientemente grande foi escolhido para que as paredes não interfiram no escoamento da bolha. Do mesmo modo, os volumes devem

ser grandes o suficiente em relação ao tamanho da bolha ($\frac{d}{\Delta x} < 1$) para que não ocorram erros numéricos, visto que a fase dispersa é modelada como *point particles*.

Outra consideração importante tomada foi a consideração do gás CH₄ (presente no fenômeno físico real) como um gás totalmente inerte, isto é, sem nenhuma difusão para o meio, de forma a simplificar a simulação.

Por fim, devido à falta de referência na bibliografia, optou-se por utilizar a constante de Henry definida para pressão atmosférica. No entanto, é bem estabelecida a correlação positiva entre pressão e solubilidade para CO₂ em água (HAYNES, 2011).

Assumiu-se para as simulações deste trabalho as seguintes condições de contorno para parâmetros de modelagem computacional e físicos/termodinâmicos:

Parâmetros de modelagem computacional:

- Discretização espacial de 0.1m;
- Discretização temporal de 0.01s;
- Malha computacional tridimensional com base quadrada de 1m x 1m e comprimento de 20m;
- Os dados são coletados a cada 0.1s.

Parâmetros físicos e termodinâmicos:

- Diâmetro inicial da bolha fixado em 1.5, 3 e 4.5 mm;
- Concentração de CO₂ fixada em 70, 50 e 30% em massa;
- Densidade do gás fixa e igual a 1.8 kg/m³;
- Velocidade inicial da bolha igual a zero;
- Densidade do fluido fixa e igual a 1000 kg/m³;
- Velocidade do fluido zero em todo o volume;
- Livre entrada e saída para o campo de espécies químicas (CO₂);
- Temperatura fixada em 4°C;
- Pressão atmosférica.

3.2.2 Modelagem da fase Lagrangeana

3.2.2.1 Dinâmica das partículas

Para a dinâmica da bolha foi usada a segunda Lei de Newton levando em conta as principais forças atuantes na bolha: arrasto, empuxo e massa virtual. A equação completa é descrita abaixo:

$$m_b \frac{d\vec{u}_b}{dt} = \vec{F}_D + \vec{F}_B + \vec{F}_{VM}$$

$$m_b \frac{d\vec{u}_b}{dt} = -\frac{1}{2} \rho_L C_D A_p |\vec{u}_{rel}| \cdot \vec{u}_{rel} + (\rho_L - \rho_b) V_b \vec{g} + C_{VM} m_b \frac{\rho_c}{\rho_b} \left(\frac{Du_c}{Dt} - \frac{du_b}{dt} \right) \quad (13)$$

O parâmetro Cd representa o coeficiente de arrasto da partícula, e seu valor depende crucialmente do número de Reynolds (Re) do escoamento. Para escoamentos com número de Reynolds alto ($Re > 1000$), o coeficiente para uma esfera se torna aproximadamente constante, adotando-se o valor de $Cd \approx 0.44$. É importante notar que na faixa de Reynolds intermediário ($1 < Re < 1000$), este valor não é constante e foi adotado um valor de acordo com a equação abaixo:

$$Cd = \frac{Re}{24} (1 + 0.15 Re^{0.687}) \quad (14)$$

O coeficiente de massa virtual C_{VM} é assumido como sendo 0.5. Esse valor é muito comum na literatura e corresponde ao coeficiente de massa virtual para uma esfera rígida (MUNIZ; SOMMERFELD, 2020).

3.2.2.2 Transferência de massa interfacial

O processo de transferência de massa tem como força motriz a diferença de concentração entre os meios. Para o processo de dissolução de massa a seguinte equação foi tomada:

$$\dot{m}_{p \rightarrow l} = K_L A_b (Y_{i,s} - Y_{i,inf}) \quad (15)$$

onde $\dot{m}_{p \rightarrow L}$ é a vazão mássica da partícula para o líquido e A é a área superficial da bolha.

A fração mássica na superfície da bolha ($Y_{i,s}$) pode ser definida usando a lei de Henry que proporciona a relação $Y_{i,s} = Y_{i,b} H_i^{cc} \frac{\rho_b}{\rho_c}$ sendo $Y_{i,b}$ e H_i^{cc} a fração mássica no interior da bolha e a constante de Henry, na sua versão adimensional, para o componente i , e por último a razão da densidade da bolha com relação ao líquido. Já $Y_{i,inf}$ a concentração do componente i no seio do líquido é calculada interpolando os valores em torno do centro da bolha. A constante K_L é calculada usando a correlação $K_L = \frac{Sh \times D_{ab}}{d_b}$ que por sua vez depende as seguintes variáveis: Sh (número de Sherwood), D_{ab} (difusividade do CO_2 na água nas condições propostas) e d_b (diâmetro da bolha). O número de Sherwood foi calculado usando a correlação: $Sh = 2.0 + 0.6 \cdot Re^{1/2} \cdot Sc^{1/3}$.

Por fim a constante de Henry em sua forma adimensional pode ser calculada usando o valor da constante em termos da concentração molar e pressão parcial do gás (H^{cp}), e uma equação de conversão: $H^{cc} = RT \times H^{cp}$ (SANDER, 2015). Para as condições deste trabalho foram usadas equações de regressão exponencial feitas por (Versteeg & Swaaij, 1988) a partir de dados experimentais, para encontrar os valores da constante de Henry H^{cp} e difusividade D_{ab} nos pontos de interesse (e.i. Temperatura de 4°C).

3.2.2.3 Redução do diâmetro

Devido à perda de massa, o volume da bolha deve ser recalculado de modo a manter a densidade do gás no interior da bolha constante. Portanto um novo diâmetro deve ser calculado para o novo instante de tempo. Isso é feito usando a seguinte relação:

$$\rho_b \frac{dV_b}{dt} = \frac{dm_b}{dt}$$

onde V_b é o volume, m_b é a massa, ρ_b é a densidade referentes à bolha e t é o tempo. Discretizando os termos e rearranjando a equação temos que:

$$D_b^{i+1} = \sqrt[3]{\frac{6}{\pi \rho_b} m_b^{i+1}} \quad (16)$$

onde m_b^{i+1} é a massa da partícula calculada para o instante $i+1$ e D_b^{i+1} é o diâmetro da bolha para o mesmo instante.

3.2.3 Modelagem da fase Euleriana

Por sua vez, para o cálculo de transporte dos elementos na fase contínua, cada componente possui sua equação de transporte. Naturalmente os termos fontes são providenciados de maneira individualizada pelo cálculo de transferência de massa das partículas, de modo que cada componente i na partícula possui um campo escalar e equações de transporte próprios. Os campos escalares representam a fração mássica de cada componente na célula e, portanto, o somatório dos campos escalares de cada componente deve ser igual a 1 para todos os volumes do domínio. A equação de transporte é dada a seguir:

$$\frac{\partial(\alpha_c \rho_c Y_{i,c})}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c \rho_c Y_{i,c}) = \nabla [\alpha_c D_i \nabla (\rho_c Y_{i,c})] + S_{Y,i} \quad (17)$$

onde $Y_{i,c}$ é a fração mássica presente no fluido, D_i é a difusividade e $S_{Y,i}$ é o termo fonte todos com relação ao componente i .

O termo fonte de transferência de massa, é calculado para cada *substep* lagrangeano de modo que o resultado para um intervalo de tempo euleriano é:

$$S_{Y,i} = \frac{1}{V_{cell} \Delta t_e} \sum_i^n \dot{m}_{p \rightarrow L|i} \quad (18)$$

onde Δt_e representa um intervalo de tempo euleriano, $\dot{m}_{p \rightarrow L|i}$ é a transferência de massa calculada para a partícula em um *substep* i lagrangeano.

3.3 OpenFOAM

A implementação e solução numérica do modelo Euler-Lagrange (E-L), descrito na seção anterior, para simular a dinâmica da bolha única neste trabalho, serão realizadas utilizando a biblioteca OpenFOAM v12, disponibilizado na plataforma oficial da *The OpenFOAM Foundation*.

Para a simulação de escoamentos multifásicos utilizando a abordagem Euler-Lagrange, o OpenFOAM oferece um conjunto de bibliotecas e *solvers* específicos. A biblioteca *lagrangian* fornece a base para o rastreamento das partículas/bolhas, incluindo classes para representar as nuvens de partículas, modelos para as forças interfaciais (arrasto, sustentação, massa virtual, etc.), esquemas de interpolação para obter dados do campo Euleriano na posição Lagrangiana, e modelos para interação partícula-parede.

O OpenFOAM trabalha com um sistema modular e flexível de adição de parâmetros e condições de contorno denominado *fvModels*. Os *fvModels* representam uma funcionalidade crucial para a incorporação de fontes e sumidouros de termos em equações de transporte. Em essência, eles permitem que os usuários modelem uma vasta gama de fenômenos físicos que não são intrinsecamente parte do *solver* principal que está sendo utilizado, injetando termos fontes adicionais nas equações governantes (como as de quantidade de movimento, energia ou espécies químicas) em regiões específicas do domínio da simulação.

Essa abordagem oferece um alto grau de modularidade e extensibilidade aos *solvers* padrão do OpenFOAM. Ao invés de modificar o código-fonte de um *solver* para adicionar uma nova física, o usuário pode simplesmente configurar um ou mais *fvModels* em um dicionário de entrada, localizado tipicamente no diretório *system* ou *constant* do caso.

Dentre os *fvModels*, de maior interesse para este trabalho é o modelo *Clouds*. Esse modelo permite a incorporação de "nuvens" de partículas Lagrangianas em *solvers* que, a princípio, foram projetados para uma única fase contínua (Euleriana). O *fvModel Clouds* calcula os termos fonte que representam a troca de quantidade de movimento, calor e massa entre as partículas e o fluido. Esses termos são então "injetados" de volta nas equações da fase contínua resolvidas pelo *solver*, modificando o escoamento do fluido.

Os submodelos da classe *Cloud* no OpenFOAM são o alicerce de sua arquitetura Lagrangiana modular, funcionando como "blocos de montar" de física que podem ser combinados para criar uma simulação de partículas personalizada. Em vez

de ter uma única classe com toda a física codificada, a classe *Cloud* atua como um gerenciador que delega tarefas a esses submodelos especializados, que o usuário seleciona e configura no dicionário *cloudProperties*. Essa abordagem confere uma enorme flexibilidade ao sistema, permitindo que a mesma estrutura de *fvModel* seja usada para uma vasta gama de problemas.

Esses submodelos cobrem todo o ciclo de vida e comportamento das partículas. Isso inclui desde a sua criação no domínio, através de modelos de injeção (ex: *coneInjection*), a determinação de sua trajetória por meio de modelos de força (ex: *sphereDrag*, *gravity*), e o seu comportamento ao atingir fronteiras, definido por modelos de interação (ex: *rebound*, *escape*). Físicas adicionais, como transferência de calor (*RanzMarshall*), mudança de fase (*evaporation*) e colisões, também são encapsuladas como submodelos, permitindo ao usuário construir uma simulação multifásica complexa de forma estruturada e eficiente.

No caso do presente estudo, foi desenvolvido um submodelo customizado baseado no modelo de base *PhaseChangeModel* suportado pela classe *ReactingCloud* o qual está configurado para lidar com transferência de massa entre as partículas e a fase continua.

Após a execução da simulação, a análise e visualização dos resultados foi realizada com o software de pós-processamento *ParaView*. O *ParaView* é uma ferramenta de código aberto para visualização e análise de grandes volumes de dados científicos. O processamento e elaboração de gráficos foi realizada usando Python e bibliotecas como *pandas*, *matplotlib* dentre outras.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 CONFIGURAÇÃO DO SOLVER PARA A ABORDAGEM EULER-LAGRANGE

Tendo em vista que a abordagem escolhida foi a de Euler-Lagrange, buscou-se inicialmente um *solver* na biblioteca do OpenFOAM que seria mais adequado para simular o cenário proposto neste trabalho, ou seja, capaz de representar uma bolha de modo lagrangeano em um fluido calculado de modo euleriano.

Dentre as opções disponíveis dois *solver* apresentavam os requisitos compatíveis com os objetivos do estudo, foram eles: *incompressibleDenseParticleFluid* e *multicomponentFluid*. Para fins de verificação da

capacidade do *solver* de resolução da dinâmica da bolha, uma simulação com apenas uma bolha e sem trocas de massa foi feita para cada *solver*.

O primeiro mais simples, porém, sem nenhuma implementação de troca de massa prévia, portanto, uma maior parte do código teria que ser modificada para que os objetivos fossem atendidos. O segundo, mais complexo, porém com capacidade de trabalhar com *reactingParcel* que já tem implementado modelos de troca de massa com o meio, nesse caso apenas um submodelo de troca de massa precisou ser implantado. Diante do exposto optou-se pelo segundo caminho, que apresentaria menos complicação para a integração do novo modelo de transferência de massa ao restante do código.

Depois de escolhido o *solver*, analisou-se a biblioteca de exemplos à procura de um cenário similar ao objetivo do estudo, tendo sido verificada a ausência de simulações com esse intuito.

Seguiu-se, portanto, para a etapa de configuração do *solver multicomponentFluid*. O *solver* em si necessita que sejam definidos padrões de resolução termodinâmicos e de transporte para resolver a fase contínua, sendo escolhidos para este trabalho *heRhoThermo* e *laminar*, respectivamente.

Para a configuração do modelo lagrangeano de nuvens as seguintes condições foram adotadas. As forças consideradas foram empuxo, arrasto e massa virtual. A partícula foi introduzida manualmente na parte inferior do tanque. O modelo de composição química adotado foi o *singlePhaseMixture*. E por fim o modelo de troca de fases adotado foi desenvolvido pelo autor e apresentado no item seguinte.

Os métodos de discretização numérica e resolução dos sistemas lineares para os modelos acima podem ser encontrados no Apêndice A.

4.2 IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO NUMÉRICO

O *solver* descrito acima foi configurado de forma que pudesse comportar um modelo de transferência de massa de uma partícula gasosa para um líquido de modo a ser coerente com o modelo de transferência de massa desenvolvido neste trabalho, o qual trata-se de uma implementação da classe *PhaseChangeModel*, um submodelo para modelar mudanças de fase, auxiliar da classe *ReactingParcel*.

A integração dos submodelos com o modelo de nuvens e posteriormente com o *sol/ver* bem como a dinâmica operacional do código é representada no fluxograma ilustrado na Figura 4.

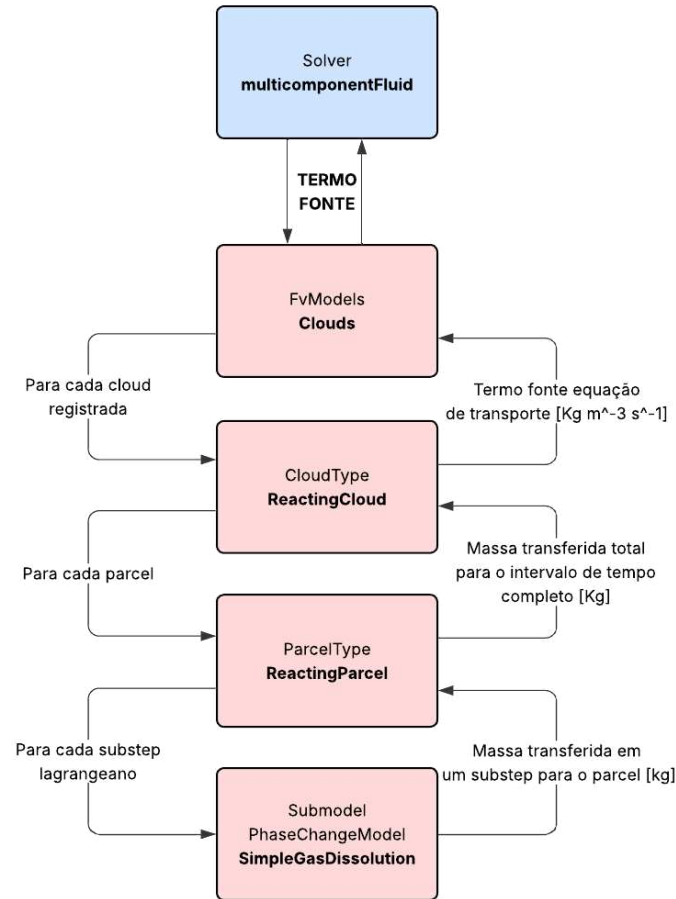


Figura 4: Esquematização operacional do modelo de nuvens

Fonte: Autoria própria

O quadro em azul representa o *sol/ver*, que opera com uma modelagem euleriana, e os quadros em laranja representam o modelo lagrangeano de partículas. Como é padrão para o OpenFOAM, o *sol/ver* se limita apenas a “pedir” se existe um termo fonte para a equação de transporte que está sendo resolvida. Em resposta, o modelo lagrangeano, que no momento da resolução das equações de transporte já está atualizado, visto que, o código do OpenFOAM inicializa e atualiza os *fvModels* antes de cada iteração dos campos eulerianos, retorna os valores solicitados.

Dentro do modelo de nuvens (*Clouds*), a funcionalidade da classe *ReactingCloud* está presente no código padrão do OpenFOAM e possibilita a

implementação de submodelos para troca de fases capazes de trocar massa com campos escalares. Esses modelos precisam estender de uma classe base *PhaseChangeModel* e implementar na função “*calculate*” a lógica para o modelo de transferência de massa, de modo que a função deve retornar a quantidade de massa perdida (+) ou adquirida (-) de cada fase presente no *parcel*. Esse protocolo de implementação foi utilizado e o cálculo da transferência de massa foi feito de modo a respeitar a modelagem especificada no item 3.2.2.2.

Esquemas de interpolação, propriedades das fases contínua e discreta bem como alguns números adimensionais como o Número de Reynolds são providenciados pelo framework do OpenFOAM. Os parâmetros adicionados e calculados para o modelo foram a difusividade do CO₂ (D_{ab}) e o Número de Sherwood (Sh), ambos usados para o cálculo do K_L .

4.3 ANÁLISE DA DINÂMICA DA BOLHA

Com o modelo numérico de transferência de massa pronto, realizaram-se algumas simulações para analisar a hidrodinâmica, a cinética e quantificar o processo de transferência de massa para o cenário proposto. Ao todo, nove simulações foram feitas combinando 3 diâmetros de bolhas (1,5, 3,0 e 4,5mm) com 3 concentrações de CO₂ (30, 50 e 70%).

Para avaliar o impacto da composição do gás e do diâmetro inicial na hidrodinâmica do sistema, a evolução da velocidade vertical das bolhas foi extraída de todas as simulações realizadas. A Figura 5 apresenta os perfis de velocidade vertical em função do tempo para cada caso estudado.

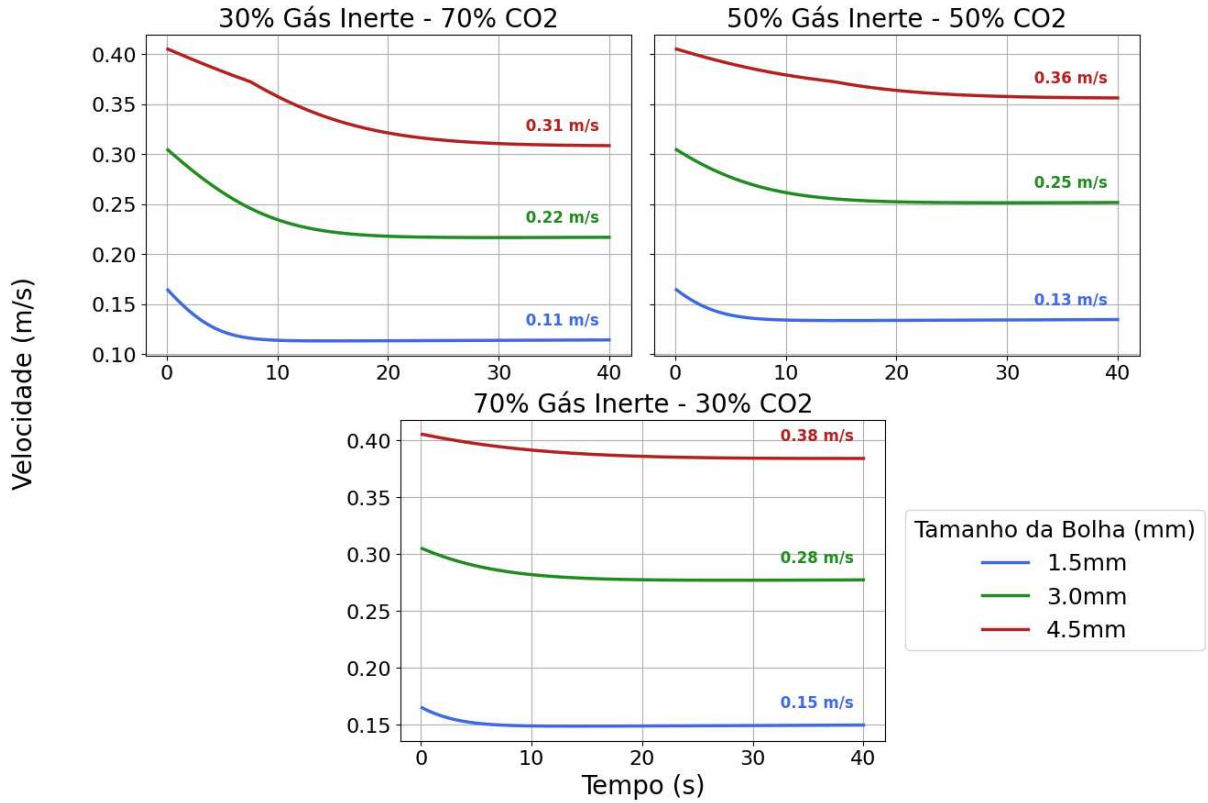


Figura 5: Velocidade vertical vs tempo por composição e tamanho de bolha

Fonte: Autoria própria

A análise da Figura 5 revela que as curvas de velocidade apresentam uma aproximação assintótica a um valor constante, conhecido como velocidade terminal. Este fenômeno ocorre no ponto em que a aceleração da bolha se torna nula, resultando em um equilíbrio dinâmico de forças. Neste estado, a força ascensional de empuxo se iguala à força de arrasto, que se opõe ao movimento. As demais forças, como o peso do gás, são consideradas desprezíveis, e a força de massa virtual torna-se nula, uma vez que atua somente na presença de aceleração. A partir desse balanço de forças, pode-se demonstrar que a velocidade terminal é proporcional à uma função do diâmetro da bolha:

$$\frac{1}{2}\rho_L C_D A_p U_{term}^2 = \rho_L V_b \vec{g}$$

$$U_{term} = \sqrt{2 \frac{V_b}{A_p} \cdot \frac{g}{C_D}} \quad (19)$$

onde $\frac{V_b}{A_p} \propto \frac{1}{d}$ e $C_D \propto F(d)$, sendo $F(d)$ uma função desconhecida que varia com o diâmetro da bolha. A evolução do diâmetro com relação ao tempo é demonstrada na Figura 6.

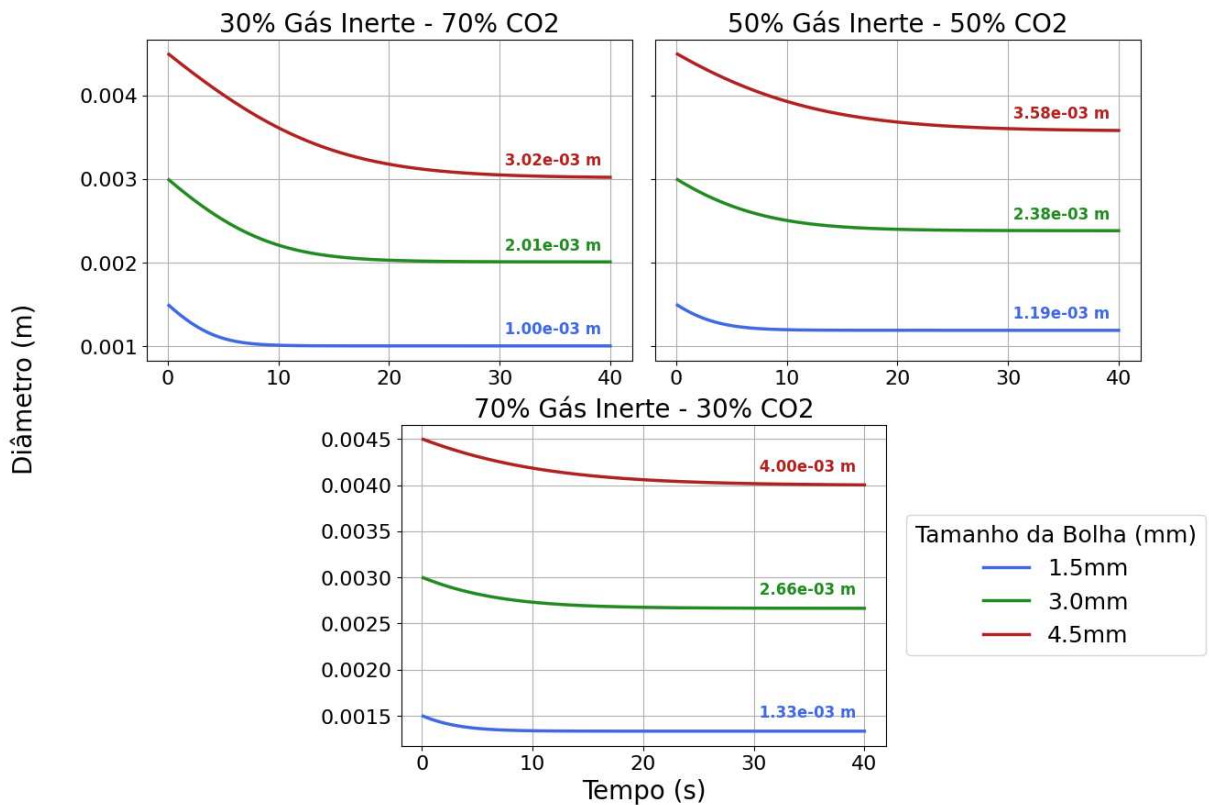


Figura 6: Diâmetro da bolha vs tempo por composição e tamanho de bolha

Fonte: Autoria própria

Outra consideração importante é que o intervalo de coleta de dados utilizado nas simulações principais não foi refinado o suficiente para capturar o período de aceleração inicial da bolha, que parte de uma velocidade nula. Por essa razão, realizou-se uma simulação à parte para analisar este processo. Com uma discretização temporal e intervalo de coleta de dados mais finos ($\Delta t = 0.001$ s) e um diâmetro inicial de 4.5mm, foi possível obter a curva de velocidade no período inicial com maior clareza (Figura 7). A bolha de 4.5mm possui a menor aceleração em comparação com as demais e o período inicial é o momento de maior aceleração, ainda assim, a velocidade terminal é atingida em um intervalo de tempo menor que a frequência de coleta de dados, que é de 0.1s.

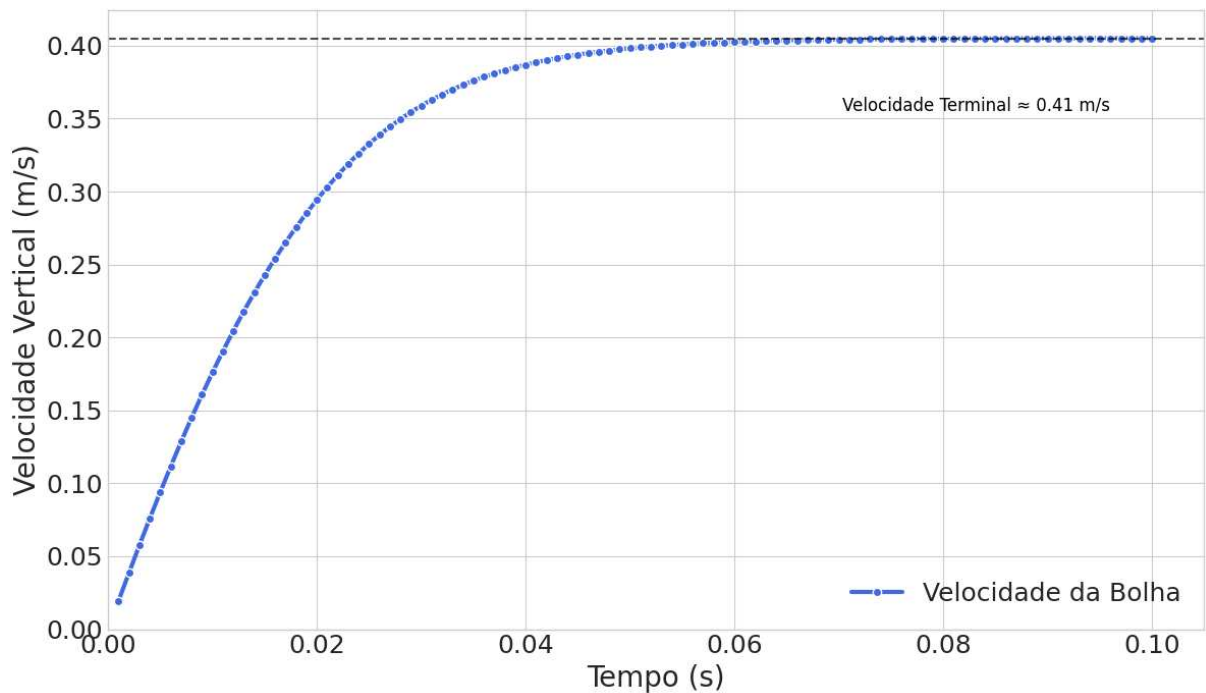


Figura 7: Velocidade vs tempo para o período de aceleração inicial de uma bolha de 4.5mm
 Fonte: Autoria própria

Levando em conta o que foi dito acima, é seguro dizer que a bolha está em sua velocidade terminal para todos os pontos, sendo assim pode-se assumir que a Figura 5 representa também a velocidade terminal da bolha por unidade de tempo.

Portanto, sendo a velocidade terminal igual a velocidade instantânea para os dados deste trabalho, e sabendo que a velocidade terminal depende do diâmetro da bolha. É possível concluir que a mudança na velocidade é resultado da perda de massa na bolha, visto que, a mudança no diâmetro é consequência da perda de massa.

Por fim é notável que algumas curvas na Figura 5, particularmente no caso de 4.5mm com 30% de CO_2 , não exibem um perfil perfeitamente suave. Tais comportamentos são um resultado direto da metodologia de cálculo do coeficiente de arrasto (detalhada na seção 3.2.2.1).

4.4 ANÁLISE DA DINÂMICA DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA PERCENTUAL

Nesta seção, a dinâmica da transferência de massa de CO_2 da fase gasosa para a fase líquida é analisada em detalhe. O objetivo é desenvolver um modelo físico-matemático capaz de explicar os resultados experimentais e, a partir dele, extrair conclusões sobre a otimização do processo em uma coluna de bolhas.

4.4.1 Observação Experimental

Para discutir os efeitos de transferência de massa é conveniente apresentar as variáveis com relação à distância, isso facilita a visualização de dimensão e escala para as colunas de bolhas. A Figura 8 ilustra a relação entre a concentração percentual de CO_2 remanescente na bolha com relação à altura percorrida na coluna, sendo que as linhas verticais representam a distância onde restam apenas 5% do percentual inicial de CO_2 na bolha.

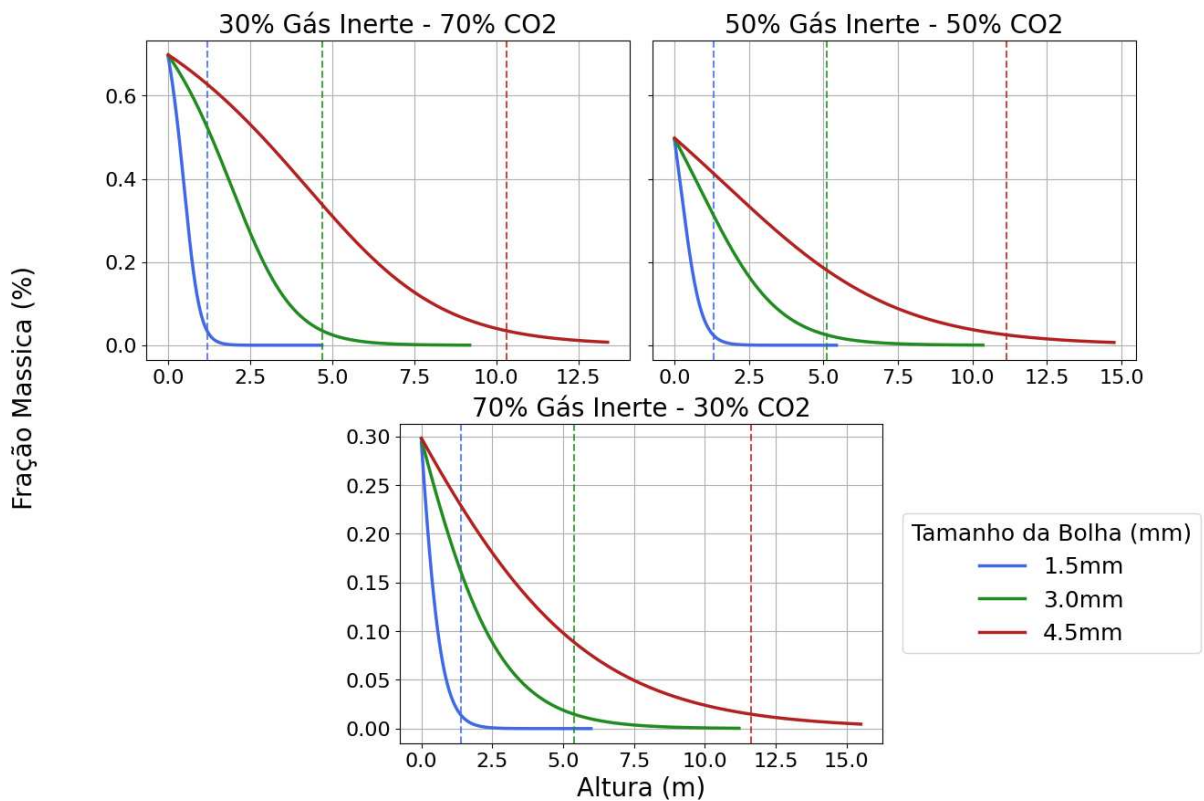


Figura 8: Fração mássica (interior da bolha) vs altura por composição e tamanho de bolha

Fonte: Autoria própria.

A análise da Figura 8 revela um comportamento claro e consistente em todas as condições de contorno: bolhas com diâmetros menores transferem seu conteúdo de CO_2 para o meio líquido de forma muito mais rápida e em uma altura de coluna significativamente menor, em essência, com maior eficiência.

Para compreender as razões por trás dessa observação, é interessante analisar a taxa de transferência de massa percentual, a representação gráfica de tal taxa ao longo da coluna é apresentada na Figura 9. Os itens 4.4.2 e 4.4.3 buscam modelar e explicar o comportamento observado na Figura 9.

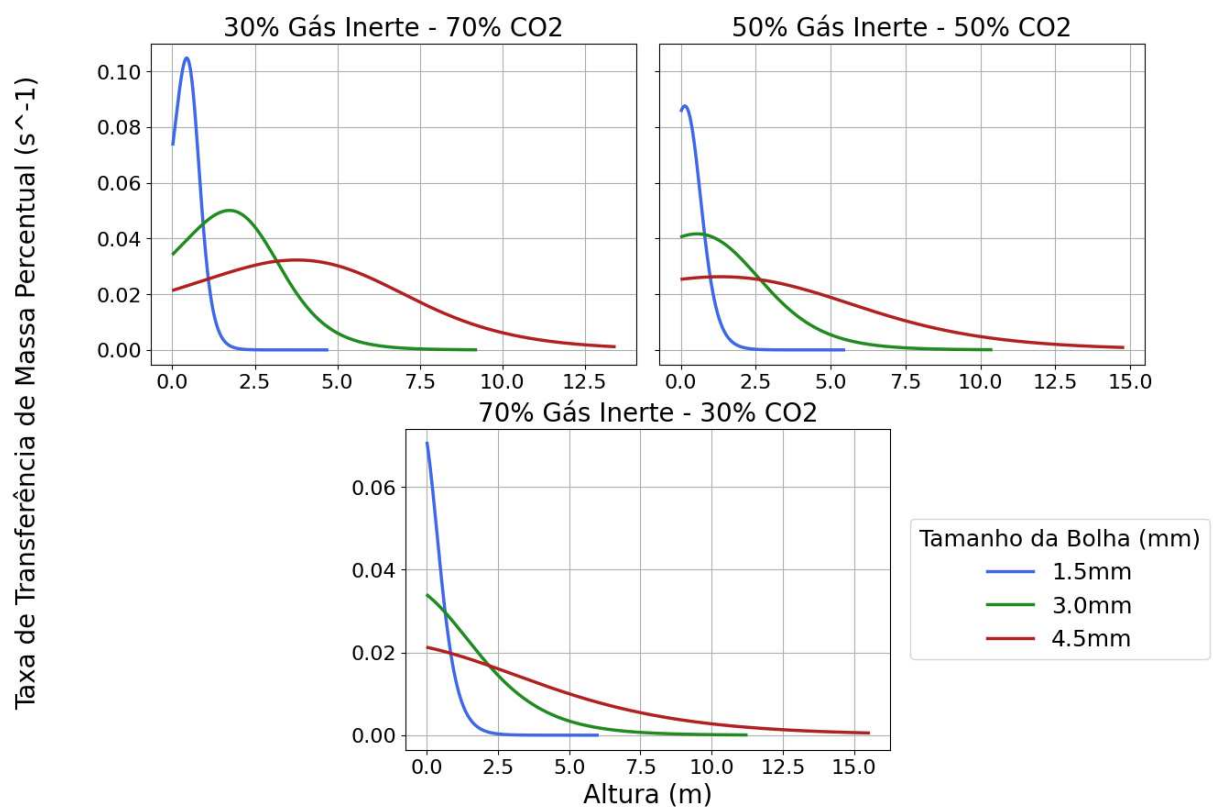


Figura 9: Taxa de transferência percentual de CO_2 vs altura por composição e tamanho de bolha

Fonte: Autoria própria

4.4.2 Desenvolvimento do Modelo Matemático para a Taxa de Transferência Percentual

A taxa de variação da fração mássica de um componente i , $\dot{Y}_i$, pode ser derivada da definição de massa do componente ($m_i = Y_i m_b$). Aplicando a regra do produto para a derivada no tempo, temos:

$$\dot{m}_i = \dot{Y}_i m_b + Y_i \dot{m}_b$$

rearranjando os termos de modo a isolar $\dot{Y}_i$ e considerando $\dot{m}_b = \dot{m}_i$ (toda a massa trocada é referente ao componente i) temos:

$$\dot{Y}_i = \frac{\dot{m}_i - Y_i \dot{m}_b}{m_b} = (1 - Y_i) \frac{\dot{m}_i}{m_b} \quad (20)$$

A partir da Equação (15), e considerando $Y_{i,inf} \approx 0$, uma aproximação válida para este trabalho, podemos interpretar a taxa de transferência de massa para um componente i da seguinte forma:

$$\dot{m}_i = -A_b Y_{i,s} f(d)$$

onde $f(d)$ é uma função que varia com o diâmetro da bolha e representa as propriedades do escoamento. Substituindo na equação para $\dot{Y}_i$ juntamente com a massa da bolha obtém-se:

$$\dot{Y}_i = -\frac{A_b Y_{i,s} f(d)}{\rho_b V_b} (1 - Y_i)$$

substituindo $Y_{i,s} = H_i^{cc} \cdot Y_i \cdot \frac{\rho_b}{\rho_c}$ (Equação (8)) temos:

$$\dot{Y}_i = -\frac{H_i^{cc} Y_i A_b f(d)}{\rho_c V_b} (1 - Y_i)$$

por fim com as constantes agrupadas em uma única constante ($C_i = \frac{H_i^{cc}}{\rho_c}$) e rearranjando a equação principal chega-se a seguinte equação diferencial:

$$\dot{Y}_i = \left(-C_i \frac{A_b}{V_b} f(d) \right) Y_i (1 - Y_i) \quad (21)$$

A Equação (21) modela o comportamento observado experimentalmente, ela pertence à uma família de equações diferenciais denominadas funções logísticas, as quais são usadas para descrever crescimentos/decaimentos exponenciais limitados por uma certa “capacidade de carga”.

4.4.3 Análise do Modelo Logístico

4.4.3.1 Origem dos Termos logísticos

Através da análise dos termos é possível entender a origem física e matemática que levaram ao comportamento observado e com isso ganhar um maior entendimento do processo.

De um modo mais geral, ao olharmos para a Equação (20) é possível perceber que a fração mássica é afetada, de uma forma mais direta, pela saída de massa do componente em questão ($\frac{\dot{m}_i}{m_b}$) mas também pela mudança de massa da bolha como um todo ($\frac{-Y_i \dot{m}_b}{m_b}$). Este segundo termo é responsável por modelar interações indiretas como, por exemplo, se houver perda de massa de um componente diferente de i ($\dot{m}_b$ negativo) a fração mássica do componente i (Y_i) deve aumentar de modo a acomodar o percentual perdido.

No caso em questão, onde $\dot{m}_i = \dot{m}_b$, os termos podem ser agrupados dando origem a relação $(1 - Y_i) \frac{\dot{m}_i}{m_b}$. Essa junção da origem ao primeiro fator do termo logístico, $(1 - Y_i)$, ele é pequeno quando $Y_i = 1$ e cresce à medida que Y_i se aproxima de 0. É este fator o principal responsável pela menor taxa de transferência de massa percentual observada nos instantes iniciais. Ele provém do fato de que para uma mesma taxa de transferência de massa $\dot{m}_i$, a mudança percentual na fração mássica cresce à medida que fração mássica Y_i restante na bolha diminui.

Portanto a menor taxa de transferência de massa percentual no início do processo não é provinda de origem física, mas sim de uma lógica matemática de proporcionalidade e, por isso, não deve ser confundido com a ideia de que menos CO₂ está saindo da bolha inicialmente.

Quanto ao fator Y_i , também presente na equação final, este sim tem uma origem física ele aparece porque a própria transferência de massa $\dot{m}_i$ é proporcional à fração mássica presente na bolha (Equação (15)).

4.4.3.2 Taxa de decaimento

Ao analisarmos o termo que governa a taxa de decaimento na equação, $r(t) = -C_i \frac{A_b}{V_b} f(d)$, vemos que este encapsula, de modo geral, três fatores físicos que controlam o processo: as propriedades dos fluidos são agrupadas na constante C_i ; a natureza hidrodinâmica do escoamento é representada pela função $f(d)$; e a dimensão física de proporcionalidade é dada pela razão entre área e volume $\frac{A_b}{V_b}$. Está última representa um maior contraste com a taxa de transferência de massa absoluta (Equação (15)), onde a área da bolha A_b que rege o processo.

Um aspecto crucial da Equação (21) é que a taxa de decaimento, $r(t)$, não é constante. Sua variabilidade temporal decorre do fato de que seus componentes, a razão área-volume $\left(\frac{V_b}{A_b}\right)$ e a função de escoamento $(f(d))$, dependem do diâmetro da bolha, que por sua vez é uma função do tempo, $d(t)$. Sendo assim, a análise temporal de cada componente é apresentada a seguir.

Primeiramente, o componente geométrico, $\frac{V_b}{A_b}$, para uma esfera, é inversamente proporcional ao seu diâmetro $\left(\propto \frac{1}{d}\right)$. Consequentemente, à medida que a bolha diminui de tamanho ao longo do tempo, o valor deste termo aumenta progressivamente.

O segundo componente, $f(d)$, encapsula interações hidrodinâmicas de elevada complexidade, cuja análise teórica aprofundada está fora do escopo deste trabalho. Contudo, foi possível isolar esta função numericamente, e seu comportamento ao longo do tempo é apresentado na Figura 10.

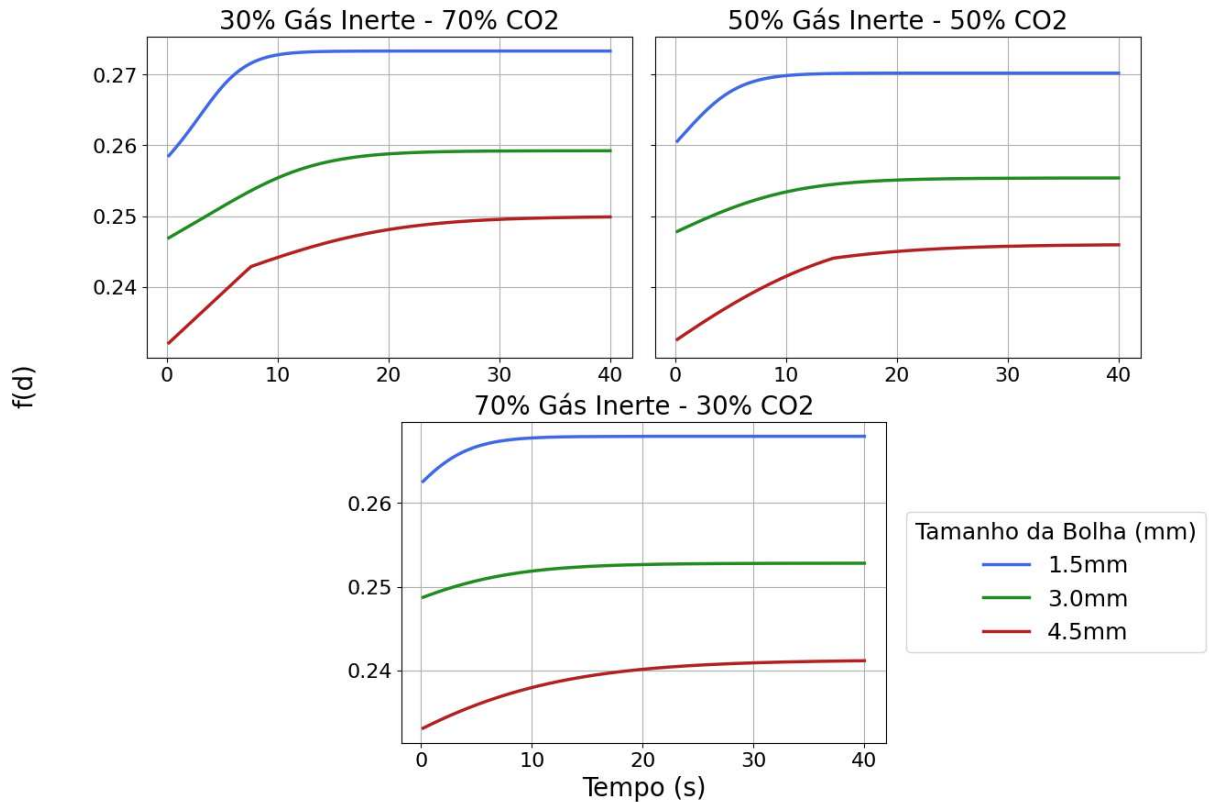


Figura 10: Valor de $f(d)$ vs tempo

Fonte: Autoria Própria

A Figura 10 revela que $f(d)$ é também uma função crescente no tempo. As descontinuidades observadas em seu perfil sugerem uma dependência com o regime de escoamento, possivelmente indicando transições associadas ao número de Reynolds (Re), o que é esperado.

Portanto, como ambos os fatores constituintes, $\frac{V_b}{A_b}$ e $f(d)$, são funções crescentes no tempo, conclui-se que o termo de decaimento acelera à medida que o tempo passa.

4.4.4 Implicações finais

A partir do modelo logístico desenvolvido nas seções anteriores, é possível extrair conclusões fundamentais sobre a dinâmica da transferência de massa. Esta seção se dedica a interpretar os resultados obtidos, correlacionando o comportamento teórico com os dados experimentais. A análise foca na eficiência de transferência, na

dinâmica do pico de massa percentual e nas implicações práticas para a otimização de colunas de bolhas.

Para uma taxa de decaimento/crescimento constante, o pico de transferência de massa percentual é regido pelo termo logístico $Y_i(1 - Y_i)$, o qual tem seu valor máximo intrinsecamente em $Y_i = 50\%$. No entanto, como o decaimento acelera à medida que o tempo passa, esse comportamento acaba postergando o pico de transferência de massa, tal comportamento é esperado para taxas que aceleram ao longo do tempo. A evolução da transferência de massa percentual com relação a fração mássica pode ser verificada na Figura 11.

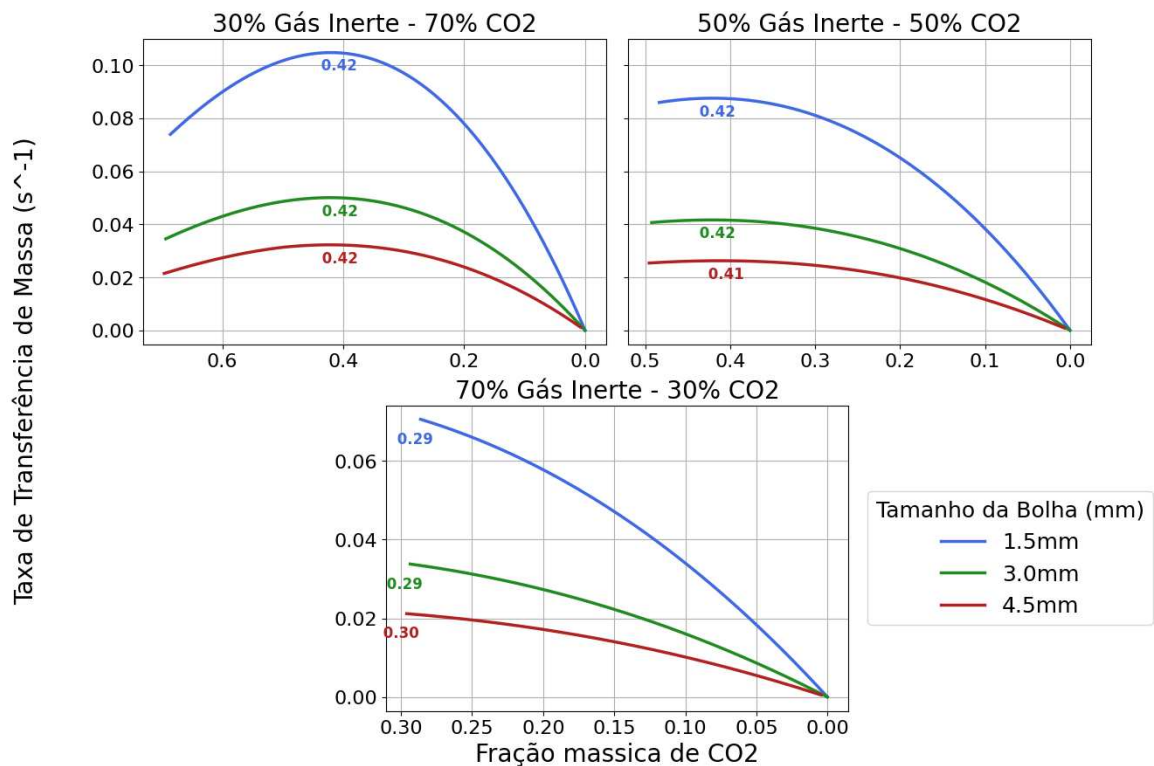


Figura 11: Taxa de transferência percentual de CO2 vs fração mássica da bolha

Fonte: Autoria própria

É possível perceber na Figura 11 que a transferência máxima é alcançada em torno dos 42% de fração mássica presente na bolha para todos os diâmetros iniciais, com exceto o caso em que a fração inicial começa em 30%. Esse comportamento sugere que as variações do termo de decaimento são muito similares.

Sobre a eficiência do processo, de acordo com o que foi exposto nos itens anteriores, é seguro afirmar que o fator mais expressivo no processo de transferência

de massa percentual é a relação entre área e volume. Devido à maior área superficial por unidade de volume e, por consequência, uma maior área por unidade de massa de CO_2 , a eficiência geométrica de bolhas pequenas é superior. Isso se traduz diretamente nas taxas de transferência de massa percentual significativamente mais elevadas para bolhas menores.

É interessante notar também o formato das curvas na Figura 9. A bolha menor (linha azul) exibe um pico de taxa de transferência logo no início e depois decai rapidamente, pois a concentração de CO_2 ($Y_{i,s}$) se esgota. Já a bolha maior (linha vermelha) apresenta uma taxa de transferência mais baixa, porém mais sustentada ao longo da coluna. Isso ocorre porque a menor relação A/V , garante que a massa seja trocada de maneira mais contínua ao longo do tempo.

Esses fatores levam à grande diferença na distância de transferência de massa, como é evidenciado pela Figura 8, e, de forma mais particular e quantitativa na Figura 12, onde foi denominado distância crítica a distância vertical percorrida pela bolha no momento em que a massa de CO_2 trocada com o meio atinge 95% do valor inicial.

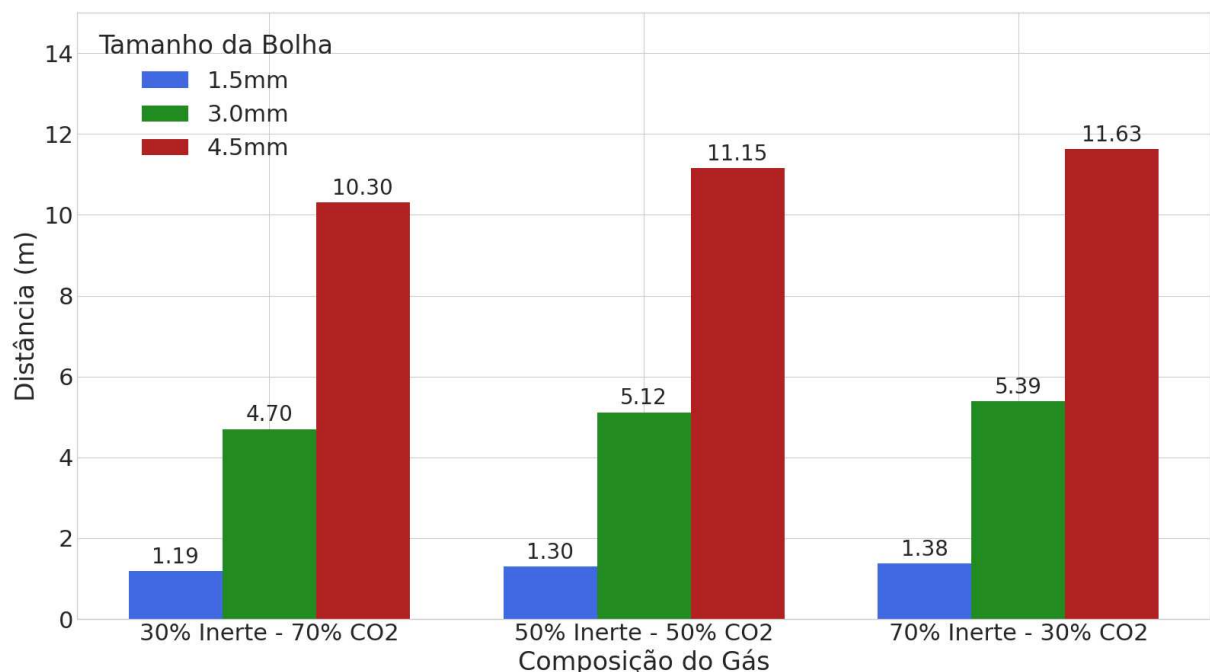


Figura 12: Distância Crítica por tamanho inicial de bolha

Fonte: Autoria própria

Por outro lado, ao analisarmos a transferência de massa absoluta, é possível perceber que as bolhas maiores transferem uma quantidade muito maior de massa e fazem isso mais rapidamente do que a bolha menor, isso é evidenciado na Figura 13.

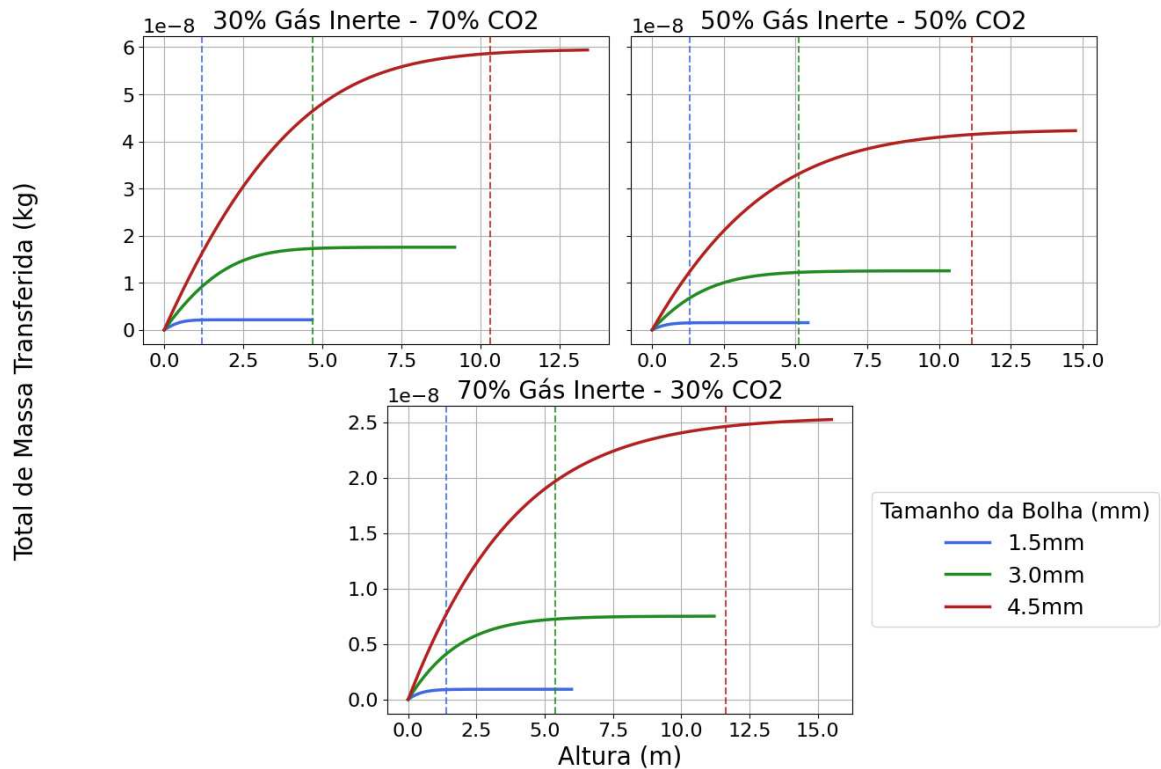


Figura 13: Transferência total de CO₂ vs altura por composição e tamanho de bolha

Fonte: Autoria própria

Portanto, diante dos dados apresentados é possível fazer uma análise sobre as condições ótimas para uma coluna de bolhas. Na maioria dos casos, se possível, o ideal é ter bolhas pequenas e em grande quantidade, isso garante a máxima troca de massa entre as fases da forma mais rápida. No entanto pode haver situações em que não seja possível atingir as condições ideais em colunas de bolhas, seja por limitação do aparato operacional seja por limitações físicas.

Portanto há de se pensar qual a prioridade para a coluna de bolhas, se a eficiência de extração (i.e. o percentual de CO₂ extraído) for a prioridade, é importante levar em consideração o tamanho das bolhas introduzidas e a distância na qual essas têm para se deslocarem pela coluna, de modo a garantir que haja tempo, e por consequência distância, suficientes para que o nível de extração de CO₂ seja atingido. Por outro lado, se a prioridade for, por exemplo, a velocidade de extração do CO₂,

pode ser mais interessante operar a coluna com bolhas maiores (se isso garantir algum tipo de vantagem, como maior vazão por exemplo) e somente em um regime onde a troca de massa seja alta, mesmo que isso implique em perdas de gás.

Para o contexto estudado, em que se almeja a purificação do gás natural, o primeiro cenário se revela como ideal, já que garante uma maior fração de CO_2 removida da mistura de gases.

5 CONCLUSÃO

Este trabalho se dedicou ao desenvolvimento e à aplicação de um modelo numérico para avaliar a transferência de massa de CO_2 de uma bolha de gás em ascensão sob condições de alta pressão e baixa temperatura, representativas do ambiente submarino. Utilizando a abordagem Euler-Lagrange na plataforma de código aberto OpenFOAM, foi possível alcançar com sucesso os objetivos propostos. O modelo customizado de transferência de massa, que considera a dissolução do CO_2 e o consequente encolhimento da bolha, proporcionou uma base, fornecendo dados quantitativos sobre a física fundamental do processo.

A partir do modelo elaborado, foram conduzidas nove simulações, combinando diâmetros iniciais de bolha de 1.5, 3.0 e 4.5 mm com concentrações de CO_2 de 30%, 50% e 70%. A análise dos resultados revelou uma clara correlação entre o tamanho da bolha e a eficiência da separação. Foi constatado que bolhas menores apresentam uma taxa de transferência de massa percentual significativamente mais elevada devido à sua maior razão área superficial/volume. Consequentemente, a simulação permitiu estimar a altura de coluna necessária para a remoção de 95% do CO_2 inicial, evidenciando que bolhas menores atingem este patamar em distâncias verticais consideravelmente menores.

As descobertas deste estudo têm implicações diretas para o projeto de sistemas de separação gás-líquido. Para o contexto de purificação do gás natural, onde se almeja a máxima remoção de CO_2 , o cenário ideal consiste na geração de bolhas de pequeno diâmetro, garantindo uma separação eficiente em colunas de altura factível. Este trabalho demonstra que a Dinâmica dos Fluidos Computacional, e em particular o OpenFOAM, é uma ferramenta poderosa e flexível para obter *insights* valiosos e dados de engenharia antes da construção e operação de protótipos físicos, reduzindo custos e tempo de desenvolvimento.

Por fim, os resultados aqui apresentados estabelecem uma base validada e servem como um ponto de partida fundamental para projetar colunas de bolhas experimentais com mais assertividade e eficiência. Como sugestão para trabalhos futuros, recomenda-se a expansão do modelo para simular múltiplas bolhas, incorporando fenômenos de interação como coalescência e quebra, além da utilização de dados experimentais para a validação das correlações de transferência de massa sob as condições de alta pressão específicas do processo.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- CERQUEIRA, R. F. L. **Estudo computacional da transferência de calor e de massa interfacial em partículas fluidas esféricas e deformadas**. 2015. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2015.
- FERREIRA, A. D. **Estudo da pirólise do bagaço da cana-de-açúcar em leito de jorro: modelagem, simulação e otimização CFD**. 2023. Tese (Doutorado em Engenharia de Processos) – Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2023.
- HAYNES, W. M. (Ed.). **CRC Handbook of Chemistry and Physics**. 91. ed. Boca Raton: CRC Press, 2011.
- KRISHNA, R.; VAN BATEN, J. M. Mass transfer in bubble columns. **Catalysis Today**, v. 79-80, p. 67–75, 2003. DOI: 10.1016/S0920-5861(03)00046-4.
- MALISKA, C. R. **Fundamentals of Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**. Cham: Springer Cham, 2023. <https://doi.org/10.1007/978-3-031-18235-8>
- MUNIZ, M.; SOMMERFELD, M. On the force competition in bubble columns: A numerical study. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 128, p. 103256, 2020. DOI: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2020.103256.
- OLSEN, J. E.; SKJETNE, P. Modelling of underwater bubble plumes and gas dissolution with an Eulerian-Lagrangian CFD model. **Applied Ocean Research**, v. 59, p. 193–200, 2016. DOI: 10.1016/j.apor.2016.06.001.
- PARK, S. H.; PARK, C.; LEE, J. Y.; LEE, B. A Simple Parameterization for the Rising Velocity of Bubbles in a Liquid Pool. **Nuclear Engineering and Technology**, v. 49, n. 4, p. 692–699, 2017. DOI: 10.1016/j.net.2016.12.006.
- ROSA, E. S. **Escoamento multifásico isotérmico: modelos de multifluidos e de mistura**. Porto Alegre: Bookman, 2009.
- SANDER, R. Compilation of Henry's law constants (version 4.0) for water as solvent. **Atmospheric Chemistry and Physics**, v. 15, n. 8, p. 4399–4981, 2015. DOI: 10.5194/acp-15-4399-2015.
- TABORDA, M. A.; KIPPING, R.; HAMPEL, U.; SOMMERFELD, M. Advanced analysis of bubble columns: Comparison of Euler/Lagrange simulations and experiments under CO₂ chemisorption conditions. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 170, p. 389–405, 2021. DOI: 10.1016/j.cherd.2021.04.020.
- TABORDA, M. A.; SOMMERFELD, M. Reactive LES-Euler/Lagrange modelling of bubble columns considering effects of bubble dynamics. **Chemical Engineering Journal**, v. 407, p. 127222, 2021. DOI: 10.1016/j.cej.2020.127222.
- TABORDA, M. A.; KOVÁTS, P.; ZÄHRINGER, K.; SOMMERFELD, M. The influence of liquid properties on flow structure, bubble dynamics and mass transfer in a laboratory bubble column: Experimental analysis versus numerical modelling and computation. **Chemical**

Engineering Research and Design, v. 185, p. 51–72, 2022. DOI: 10.1016/j.cherd.2022.06.041.

VERSTEEG, G. F.; VAN SWAIJ, W. P. M. Solubility and Diffusivity of Acid Gases (CO_2 , N_2O) in Aqueous Alkanolamine Solutions. **Journal of Chemical & Engineering Data**, v. 33, n. 1, p. 29–34, 1988.

WANG, C; XU, Z; LAI, C; SUN X. Beyond the standard two-film theory: Computational fluid dynamics simulations for carbon dioxide capture in a wetted wall column. **Chemical Engineering Science**, v. 184, p. 103–110, 2018. DOI: 10.1016/j.ces.2018.03.021.

WANG, M. Modelling Fluid Dynamics and Mass Transfer in Bubble Plumes using Lagrangian Particle Tracking. 2019. Dissertação (Mestrado) – Dalhousie University, Halifax, 2019.

WEN, T; LU, L; HE, W; MIN Y. Fundamentals and applications of CFD technology on analyzing falling film heat and mass exchangers: A comprehensive review. **Applied Energy**, v. 261, p. 114473, 2020. DOI: 10.1016/j.apenergy.2019.114473.

APÊNDICE A – ESQUEMAS NUMÉRICOS

Categoria	Nome (em fvSchemes)	Representação Matemática	Esquema (em fvSchemes)
Discretização Temporal			
	default	$\partial t \partial$	Euler
Gradiente			
	default	$\vec{\nabla}$	Gauss linear
Divergente			
	default	N/A	none
	div(phi,U)	$\vec{\nabla} \cdot (\phi U)$	Gauss upwind
	div(phiD,p)	$\vec{\nabla} \cdot (\phi D p)$	Gauss upwind
	div(phi,K)	$\vec{\nabla} \cdot (\phi K)$	Gauss upwind
	div(phi,Yi_h)	$\vec{\nabla} \cdot (\phi Y_i, h)$	Gauss upwind
	div((((rho*nuEff)*dev2(T(grad(U))))))	$\vec{\nabla} \cdot \bar{\tau}$	Gauss linear
Laplaciano			
	default	∇^2	Gauss linear orthogonal
Interpolação			
	default	N/A	linear
Gradiente de Superfície Normal			
	default	$\vec{n} \cdot \vec{\nabla}$	orthogonal