



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
CENTRO TECNOLÓGICO  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA E ENGENHARIA  
DE ALIMENTOS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA  
QUÍMICA

**DANIEL DA CUNHA RIBEIRO**

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO DE  
SISTEMAS MULTIFÁSICOS EM REATORES AGITADOS  
MECANICAMENTE**

FLORIANÓPOLIS

2012



**DANIEL DA CUNHA RIBEIRO**

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO DE  
SISTEMAS MULTIFÁSICOS EM REATORES AGITADOS  
MECANICAMENTE**

Tese de Doutorado Submetida ao Programa de Pós-  
Graduação em Engenharia Química do Centro Tecnológico  
da Universidade Federal de Santa Catarina, como requisito  
à obtenção do Título de Doutor Em Engenharia Química

**Orientador:** Prof. Dr. Pedro Henrique Hermes de Araújo

Florianópolis

2012



**Modelagem e simulação do escoamento de sistemas multifásicos em reatores agitados mecanicamente**

Por

**Daniel da Cunha Ribeiro**

Tese julgada para obtenção do título de **Doutor em Engenharia Química**, área de Concentração de **Desenvolvimento de Processos Químicos e Biotecnológicos**, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Santa Catarina.

Prof. Dr. Pedro Henrique Hermes de Araujo

**Orientador**

Prof. Dr. Leonel Teixeira Pinto

**coordenador**

**Banca Examinadora:**

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Cintia Soares

Dr. André Lourenço Nogueira

Prof. Dr. Emílio Ernesto Paladino

Prof. Dr. Leonardo Paes Rangel

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Karolline Ropelato

**Florianópolis, 29 de junho de 2012**



Dedico as próximas páginas à minha família: Ana Paula, que me permite todos os dias voltar a por os pés no chão e Luiza, sou apenas um amador do seu amor. Acrescento dedicatória especial a duas pessoas importantes que caíram durante o processo: meu sogro, com quem convivi mais que meu pai (justificando a expressão *Father-in-law*) e minha avó. Ambos foram balizadores da minha definição de espírito.





## **AGRADECIMENTOS**

Agradecer a todas as pessoas que contribuíram em um processo de uma década seria impossível, mas gostaria de destacar:

Minha família, que sempre esteve do meu lado nos infundáveis acessos de mal humor.

Meu orientador, Pedro e sua esposa Claudia. Mais que orientaram, foram incentivadores e amigos.

À ESSS, no nome do diretor Marcus Reis, que na sua visão entende que uma empresa só é melhor se seu quadro for melhor qualificado e, portanto, sempre apoiando as iniciativas de crescimento técnico.

Como aluno do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química não poderia deixar de citar o grande Edevilson Silva, sempre pronto para ajudar a todos.



"Entendo por razão, não a faculdade de raciocinar, que pode ser bem ou mal utilizada, mas o encadeamento das verdades que só pode produzir verdades, e uma verdade não pode ser contrária a outra."

Gottfried Wilhelm Von Leibnitz

πάντα ῥεῖ

Ἡράκλειτος ὁ Ἐφέσιος



## RESUMO

Reatores agitados mecanicamente são amplamente usados na indústria química para promover diversos tipos de processos, tais como dissolução, dispersão, reações homogêneas ou heterogêneas. Apesar de todo avanço obtido nos últimos 50 anos, seu projeto e otimização ainda é baseado somente em correlações empíricas e semi-empíricas, o que demanda um grande número de experimentos. Invariavelmente, os experimentos envolvem altos custos. De forma a tentar reduzir tais custos, ferramentas computacionais vêm sendo usadas. Como o desempenho deste tipo de equipamento é calcado no escoamento gerado no seu interior a escolha por técnicas de dinâmica dos fluidos computacional (CFD) é natural. Através de modelos CFD é possível obter o padrão de escoamento sem incorrer em suposições sobre a geometria como nas correlações empíricas. Neste trabalho, modelos CFD são aplicados em tais sistemas, de forma a alcançar o objetivo principal do estudo que foi investigar a razão que leva à diminuição do diâmetro das partículas com o aumento do espaço entre o fundo do reator e o impelidor. O modelo de turbulência tem papel preponderante, principalmente, em sistemas sem chicanas onde a componente tangencial da velocidade é predominante. Modelos de turbulência recentes foram avaliados em diversas configurações geométricas e operacionais. Após verificação de modelos o sistema utilizado por PINTO (2006) no Laboratório de Controle de Processos do Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos da UFSC foi investigado para avaliar o motivo porque o diâmetro médio de gotas diminui com o aumento do espaço livre entre o agitador e o fundo do tanque (*clearance*). Os resultados indicam que ao se concentrar na região acima do agitador a fase orgânica experimenta maior concentração da dissipação de energia cinética turbulenta e conseqüentemente maior quebra.



## ABSTRACT

Stirred tank reactors are widely used in the chemical industry to promote several types of processes such as dissolution, dispersion, homogeneous or heterogeneous reactions. Despite all progress made in the last 50 years, its design and optimization is still based only on empirical and semi-empirical correlations which requires eventually a large number of experiments that involve high costs. aiming to reduce such costs, computational tools have been used. As the performance of such equipment is centered in the flow generated inside reactor the choice of techniques for computational fluid dynamics (CFD) is natural. Through CFD models is possible to obtain the flow pattern without incurring any assumptions about the geometry and the empirical correlations. In this study, CFD models are applied in such systems to reach the main goal of this investigation: why droplet mean diameter decreases with the increase of the clearance? Among several points to be investigated, the turbulence model plays a major role especially in systems without baffles where the tangential component of velocity is predominant. Recent turbulence models have been evaluated in various geometric and operating configurations. After verification of the model with experimental data, the system used by PINTO (2006) in Process Control Laboratory of the Chemical and Food Engineering Department of UFSC have been investigated to assess the reason why the average drop diameter decreases with increasing clearance between the stirrer and the tank bottom. One can conclude from the results that the concentration of the organic phase in the region above the agitator experiences higher concentration of turbulent kinetic energy dissipation and consequently greater breakage.



## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2-1 – Sistema de agitação típico. ....	43
Figura 2-2 – Principais dimensões de um tanque agitado. ....	45
Figura 2-3 – Formação de vórtices em tanques com chicanas (JAKOBSEN, 2008). ....	53
Figura 2-4 – Efeito da presença das chicanas sobre a forma da superfície livre (CIOFALO et al., 1996). ....	54
Figura 2-5 – Relação entre o perfil de velocidade tangencial (a esquerda) e a forma da superfície livre, à direita (CIOFALO et al., 1996). ....	55
Figura 2-6 – Comparativo entre agitadores radiais (esquerda) e axiais (direita). De cima para baixo: esboço, plano de contornos de velocidade; linhas de corrente (SPOGIS, 2002; JAKOBSEN, 2008). ....	59
Figura 2-7 – Espectro de energia da turbulência em função do inverso do tamanho dos vórtices (WILCOX, 1998). ....	64
Figura 2-8 – Exemplo de medida de velocidade em um ponto do escoamento ao longo do tempo (WILCOX, 1998). ....	65
Figura 4-1 – Estudo de malha turbina Rushton: variação da velocidade em um ponto da descarga do agitador com o refino da malha. ....	102
Figura 4-2 – Estudo de malha turbina Rushton: variação do número de Potência com o refino da malha. ....	103
Figura 4-3 – Detalhes da malha superficial na turbina Rushton: a esquerda, malha das paredes do tanque; a direita, malha do agitador. ....	104
Figura 4-4 – Detalhes da malha volumétrica na turbina Rushton: a esquerda, plano vertical cortando o centro do agitador; a direita, plano horizontal cortando o centro do agitador. Elementos verdes são tetraedros e elementos vermelhos são prismas. ....	104
Figura 4-5 – Estudo de malha: variação da velocidade em um ponto com o refino de malha ....	106
Figura 4-6 – Estudo de malha: variação do número de potência com o nível de refino da malha. ....	107
Figura 4-7 – Estudo de malha: variação do perfil da superfície livre com o nível de refino da malha. ....	108

Figura 4-8 – Detalhes da malha superficial: a esquerda, a malha da parede do tanque e topo; a direita, malha no agitador. ....	109
Figura 4-9 – Detalhes da malha volumétrica: a esquerda, um plano vertical que passa no centro do agitador; a direita, um plano horizontal que passa no plano do agitador. Elementos verdes são tetraedros e elementos vermelhos são prismas. ....	109
Figura 4-10 – Discretização baseada em elementos: relação entre os pontos de integração e o centro do volume de controle. As linhas sólidas são os limites dos elementos. O volume de controle é centrado nos vértices e é reconhecido pela região cinza. ....	111
Figura 5-1 – Tanque utilizado nos ensaios experimentais. ....	117
Figura 5-2 – Aparato experimental: (a) Agitador mecânico; (b) Impelidor de hélice marinha e (c) Medidor. ....	118
Figura 5-3 – Aparato experimental completo. ....	119
Figura 6-1 – Identificação da geometria e cotas características. ....	124
Figura 6-2 – Posição de tomada dos perfis axial e radial. ....	125
Figura 6-3 – Padrão de escoamento no tanque sem chicanas agitado por uma turbina Rushton (da esquerda para a direita): SST CC; BSL-EARSM CC; BSL-EARSM. ....	126
Figura 6-4 – Comparação dos perfis da superfície livre obtida nas simulações numéricas (presente trabalho e HAQUE <i>et al.</i> (2006)) e experimentos (CIOFALO <i>et al.</i> , 1996). ....	127
Figura 6-5 – Comparação dos perfis de velocidade tangencial numérico (presente trabalho e ALCAMO <i>et al.</i> (2005)) e experimento (VELLA <i>et al.</i> , 2003) ....	128
Figura 6-6 – Comparação de perfis de velocidade radial e experimento (VELLA <i>et al.</i> , 2003) ....	129
Figura 6-7 – Local de captação de coordenadas experimentais do vórtice. (a) Plano YZ (b) Linhas do plano YZ. ....	131
Figura 6-8 – Contornos de fração volumétrica (vermelho: água; azul: ar): comparação entre os resultados para a forma da superfície livre em função da rotação: 580, 750 e 920 RPM. ....	135
Figura 6-9 – Comparação entre o modelo CFD e os dados experimentais para o caso de <i>clearance</i> a 50 mm. ....	136

Figura 6-10 – Contornos de fração volumétrica de água: comparação entre três alturas de agitador: $c = 33$ mm; $c = 50$ mm; $c = 66$ mm.....	137
Figura 6-11 – Comparação entre os dados experimentais e os resultados de CFD para a posição da superfície livre para o caso de rotação a 750 RPM.....	140
Figura 6-12 – Módulo da velocidade da água para sistema ar-água com diferentes velocidades de rotação do agitador a 50 mm do fundo do tanque: (a) 580 RPM; (b) 750 RPM; (c) 920 RPM.....	141
Figura 6-13 – Dissipação da energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes velocidades de rotação do agitador do fundo do tanque: (a) 580 RPM; (b) 750 RPM; (c) 920 RPM.....	143
Figura 6-14 – Energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes velocidades de rotação do agitador a 50 mm do fundo do tanque: (a) 580 RPM; (b) 750 RPM; (c) 920 RPM.....	145
Figura 6-15 – Módulo da velocidade da água para sistema ar-água com diferentes alturas do agitador a 750 RPM: (a) 33 mm; (b) 50 mm; (c) 66 mm. ....	147
Figura 6-16 – Dissipação da energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes alturas do agitador a 750 RPM: (a) 33 mm; (b) 50 mm; (c) 66 mm.....	149
Figura 6-17 – Energia cinética tubulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes alturas do agitador a 750 RPM: (a) 33 mm; (b) 50 mm; (c) 66 mm.....	151
Figura 6-18 – Distribuição de tamanho de partícula: casos operando a 750 RPM, variando o clearance: 33 mm (azul), 50 mm (verde), 66 mm (vermelho).....	155
Figura 6-19 – Campo de fração mássica da Moda 1: $c = 33$ mm; $c = 50$ mm; $c = 66$ mm. ....	162
Figura 6-20 – Campo de fração mássica da moda 2: $c = 50$ mm; $c = 66$ mm. ....	162
Figura 6-21 – Campo de fração mássica de moda 3: $c = 66$ mm. ....	163
Figura 6-22 – Aparato experimental (adaptado de YANG <i>et al.</i> , 2000). ....	165
Figura 6-23 – Posicionamento dos pontos de amostragem. ....	167

Figura 6-24 – Tamanho de partícula nos vários pontos de amostragem de uma suspensão com <i>holdup</i> de 5% (YANG <i>et al.</i> , 2000). .....	168
Figura 6-29 – Maquete virtual do sistema utilizado (YANG <i>et al.</i> , 2000). .....	170
Figura 6-30 – Malha computacional do sistema utilizado (YANG <i>et al.</i> , 2000). .....	171
Figura 6-31 – Ampliação na malha computacional volumétrica próxima à parede do tanque: em vermelho, prismas; em azul, tetraedros. ....	172
Figura 6-32 – Estrutura de escoamento da suspensão dentro do tanque – Campo de vetores velocidade: plano longitudinal.....	176
Figura 6-33 – Estrutura de escoamento da suspensão dentro do tanque – Campo de vetores velocidade: plano paralelo ao agitador. ....	177
Figura 6-34 – Estrutura de escoamento da dispersão dentro do tanque a 650 RPM – Vetores velocidade e perfis de velocidade axial com o raio. ....	178
Figura 6-35 – Campos de velocidade para os dois casos de maior velocidade: 550 e 650 RPM. ....	179
Figura 6-36 – Resultados para a dissipação da energia cinética turbulenta. De cima para baixo: 250, 350, 450, 550 e 650 RPM. ....	181
Figura 6-37 – Agitador a 250 RPM: à esquerda, plano longitudinal com a fração volumétrica de ar; a direita, iso-superfície de fração volumétrica igual 0,5.....	182
Figura 6-38 – Agitador a 350 RPM: à esquerda, plano longitudinal com a fração volumétrica de ar; a direita, iso-superfície de fração volumétrica igual 0,5.....	183
Figura 6-39 – Agitador a 450 RPM: à esquerda, plano longitudinal com a fração volumétrica de ar; a direita, iso-superfície de fração volumétrica igual 0,5.....	184
Figura 6-40 – Agitador a 550 RPM: à esquerda, plano longitudinal com a fração volumétrica de ar; à direita, iso-superfície de fração volumétrica igual 0,5.....	185
Figura 6-41 – Agitador a 650 RPM: à esquerda, plano longitudinal com a fração volumétrica de ar; a direita, iso-superfície de fração volumétrica igual 0,5.....	186

Figura 6-42 – Altura média da interface em relação ao fundo do tanque em função da agitação.....	187
Figura 6-43 – Comportamento do diâmetro médio de Sauter nos três pontos de amostragem ao longo das iterações considerando somente o modelo de quebra.....	188
Figura 6-44 – Campo de fração volumétrica ( <i>holdup</i> ) de monômero a uma rotação do agitador de 250 RPM.....	189
Figura 6-45 – Comportamento do diâmetro médio de Sauter nos três pontos de amostragem ao longo das iterações com os modelos de quebra e coalescência levados em conta.....	190



## LISTA DE TABELAS

Tabela 4-1 – Número de nós e elementos nos níveis de refino de malha para o caso da turbina Rushton. ....	102
Tabela 4-2 – Número de nós e elementos nos níveis de refino de malha para o caso da hélice marinha .....	105
Tabela 5-1 – Condições de operação do tanque agitado montado com hélice marinha.....	120
Tabela 6-1 – Resultados obtidos em laboratório da altura do vórtice no ponto (de 1 a 4), dada uma velocidade de rotação e distância do impelidor ao fundo do reator.....	133
Tabela 6-2 – Comparação entre o modelo CFD e os dados medidos experimentalmente para o caso do <i>clearance</i> de 50 mm .....	136
Tabela 6-3 – Comparação entre os dados experimentais e os resultados de CFD para a posição da superfície livre para o caso de rotação a 750 RPM.....	139
Tabela 6-4 – Resultados numéricos do módulo da velocidade da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes velocidades de rotação do agitador a 50 mm do fundo do tanque.....	142
Tabela 6-5 – Resultados numéricos de dissipação da energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes velocidades de rotação do agitador a 50 mm do fundo do tanque. ....	144
Tabela 6-6 – Resultados numéricos de energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes velocidades de rotação do agitador a 50 mm do fundo do tanque.....	146
Tabela 6-7 – Resultados numéricos do módulo da velocidade da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes alturas do agitador a 750 RPM.....	148
Tabela 6-8 – Resultados numéricos de dissipação de energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes alturas do agitador a 750 RPM. ....	150
Tabela 6-9 – Resultados numéricos de energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes alturas do agitador a 750 RPM.....	152
Tabela 6-10 – Volumes dos Isovolumes de $\varepsilon=0,02$ [m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]. ....	153

Tabela 6-11 – Estatísticas das DTP em função da altura do agitador.	156
Tabela 6-12 – Redistribuição das DTP ao redor das modas.....	158
Tabela 6-13 – Propriedades físicas dos fluidos. ....	158
Tabela 6-14 – Número de Stokes para cada moda de cada posição do agitador.....	159
Tabela 6-15 – Análise da forma das partículas. ....	161
Tabela 6-16 – Propriedades físicas do estireno e da água a 25 °C. ....	168
Tabela 6-17 – Critérios de qualidade da malha. ....	172
Tabela 6-18 – Tempo de relaxação e número de Stokes para as classes de tamanho utilizadas. ....	173

## LISTA DE SÍMBOLOS

$(u, v, w)$	Componentes do vetor velocidade [m/s]
<b>A</b>	Vetor área [m <sup>2</sup> ]
$A_1, A_2, A_3, A_4$	Constantes do modelo EARSM
$a_{ij}$	Tensor anisotropia
<b>B</b>	Largura da chicana [m]
<b>C</b>	Espaço livre entre agitador e fundo ( <i>clearance</i> ) [m]
$C_\mu, C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}$	Constantes do modelo k- $\varepsilon$
$C_D$	Coefficiente de arraste
$c_{r1}, c_{r2}, c_{r3}$	Constantes do modelo de correção de curvatura
$C_{scale}$	Parâmetro de ajuste do modelo de correção de curvatura
<b>D</b>	Diâmetro do agitador [m] ou módulo limitado do tensor taxa de deforma- ção [1/s]
$d_p$	Diâmetro da fase dispersa ou particu- lada [m]
$E(\kappa)$	Energia dos turbilhões de comprimen- to de onda $\kappa$ [m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]
<b>Eo</b>	Número de Eotvos
$F_1$ e $F_2$	Funções de mescla dos modelos BSL
$F_i$	Forças interfaciais [N/m <sup>3</sup> ]
$f_i$	Fração volumétrica de classe de ta- manho
$f_r, f_{rot}, \tilde{f}_r$	Funções corretoras de curvatura
<b>g</b>	Aceleração da gravidade [m/s <sup>2</sup> ]
<b>H</b>	Altura de líquido [m]
$H_b$	Cota vertical da interface no eixo [m]
$H_w$	Cota vertical da interface na parede do reator [m]
<b>k</b>	Energia cinética turbulenta [m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]
<b>N</b>	Velocidade de agitação [rev/s] ou função N do modelo EARSM
$N_f$	Número de fases
$N_p$	Número de potência
$Oh = \mu_d / (\rho_d \sigma d)^{1/2}$	Número de Ohnesorge
<b>p</b>	Pressão [Pa]

$P$	Potencia [W]
$P_k$	Produção de k [ $m^2/s^3$ ]
$r$	Direção radial [m]
$\mathbf{R}$	Vetor direção do volume a montante do ponto de integração
$r_c$	Raio crítico de transição entre o vórtice livre e forçado [m]
$Re = \rho D^2 N / \mu$	Número de Reynolds
$S_{cfg}$	Termo-fonte devido à força centrífuga [ $N/m^3$ ]
$S_{Cor}$	Termo-fonte devido à força de Coriolis [ $N/m^3$ ]
$S_i$	Termo-fonte resultante da quebra e coalescencia [ $kg/m^3s$ ]
$S_{ij}$	Tensor taxa de deformação [1/s]
$S_{lg}$	Fluxo mássico entre fases [ $kg/m^3s$ ]
$S_M$	Termo-fonte devido a forças externas [ $N/m^3$ ]
$St$	Número de Stokes
$T$	Diâmetro do tanque [m]
$t$	Tempo [s]
$t_f$	Tempo característico do escoamento [s]
$t_k$	Escala de tempo de Kolmogorov [s]
$t_p$	Tempo de relaxação da partícula [s]
$\mathbf{U}$	Vetor velocidade [m/s]
$u_i u_j$	Tensor de Reynolds [ $m^2/s^2$ ]
$W$	Largura do agitador [m]
$We = \rho u d / \sigma$	Número de Weber
$Y$	Fração mássica
$z$	Direção axial [m]

## LISTA DE SÍMBOLOS GREGOS

$\mu$	Viscosidade dinâmica [Pa s]
$\alpha$	Fração volumétrica
$\beta$	Fator de mescla do esquema de advecção
$\beta_1, \dots, \beta_6$	Coefficientes do modelo EARSM
$\beta_3, \sigma_{k3}, \sigma_{\omega 3}, a_3, \beta, \sigma_{\omega 2}$	Constantes do modelo BSL
$\delta_{ij}$	Tensor identidade

$\varepsilon$	Dissipação da energia cinética turbulenta [ $\text{m}^2/\text{s}^3$ ]
$\epsilon_{ijk}$	Tensor de Levi-Civita
$\kappa$	Número de onda dos vórtices [ $1/\text{m}$ ]
$\nu$	Viscosidade cinemática [ $\text{m}^2/\text{s}$ ]
$\rho$	Densidade [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]
$\sigma$	Coefficiente de tensão superficial [N/m]
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	Números de Prandtl do modelo k- $\varepsilon$
$\tau$	Tensor tensão [Pa]
$\tau_t$	Escala de tempo integral [s]
$\phi$	<i>holdup</i>
$\omega$	Frequência da turbulência [1/s] ou velocidade angular de rotação [rad/s]
$\Omega$	Tensor vorticidade [1/s]
$\Omega^{CC}$	Contribuição do modelo de correção de curvatura a vorticidade [1/s]
$\Omega^{\text{rot}}$	Velocidade angular do agitador [rad/s]

## LISTA DE ÍNDICES

$i$	Índice de fase
$T$	Matriz transposta
$c$	Valor crítico ou fase contínua
$d$	Fase dispersa
$g$	Fase gasosa
$l$	Fase líquida
$D$	Desvio ou <i>drift</i>
$S$	Deslizamento ou <i>slip</i>
$p$	Fase particulada (mesmo que dispersa)
$ef$	Propriedade efetiva
$t$	Propriedade turbulenta
$n$	Enésima iteração
$ip$	Ponto de integração
$up$	Esquema tipo upwind
$M$	Propriedade de mistura



## LISTA DE ABREVIACOES

SST	<i>Shear Stress Transport</i>
CC	<i>Curvature Correction</i>
BSL	<i>Baseline</i>
EARSM	<i>Explicit Algebraic Reynolds Stress Model</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
RPM	Rotaes por minuto
DTP	Distribuio de Tamanho de Particulas
PVA	Acetato de polivinila
CAD	<i>Computer Aided Design</i>
CAE	<i>Computer Aided Engineering</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
PBE	<i>Population Balance Equation</i>
ASM	<i>Algebraic Slip Modelou Algebraic Stress Model</i>
MUSIG	<i>Multiple Size Groups</i>
VOF	<i>Volume of Fluid</i>
FM	Frao Volumrica
DEM	<i>Discrete Element Modeling</i>
AMG	<i>Algebraic MultiGrid</i>
SFR	<i>Single Frame of Reference</i>
MFR	<i>Multiple Frame of Reference</i>
PVA	lcool Polivinilico
GGI	<i>Generalized Grid Interface</i>



# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO E OBJETIVOS.....</b>	<b>36</b>
1.1	Introdução.....	36
1.2	Objetivos .....	41
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....</b>	<b>42</b>
2.1	O tanque agitado .....	42
2.1.1	Os componentes .....	42
2.1.2	Relações geométricas .....	45
2.1.3	Número adimensionais.....	46
2.2	Modelagem fluidodinâmica de escoamentos em tanques agitados.....	48
2.3	Mecânica dos fluidos computacional .....	52
2.4	Efeito das chicanas .....	53
2.5	Efeito do fundo do tanque.....	57
2.6	Efeito do tipo de agitador.....	58
2.7	Modelos de turbulência .....	60
2.8	Modelos multifásicos .....	68
2.9	Conclusões deste capítulo.....	73
<b>3</b>	<b>MODELAGEM MATEMÁTICA.....</b>	<b>76</b>
3.1	Conservação da massa .....	77
3.2	Conservação da quantidade de movimento .....	78
3.3	Modelos de escoamento multifásico.....	79
3.3.1	Escoamentos de superfície livre – modelo homogêneo .....	79
3.3.2	Escoamento polidisperso – modelo de mistura.....	80

3.3.3	Escoamento polidisperso – Modelo MUSIG .....	83
<b>3.4</b>	<b>Modelos de turbulência.....</b>	<b>87</b>
3.4.1	<i>k-ε</i> padrão (LAUNDER e SPALDING, 1972).....	87
3.4.2	<i>Baseline</i> (MENTER, 1993).....	89
3.4.3	Shear Stress Transport (MENTER, 1994).....	90
3.4.4	Explicit Algebraic Reynolds Stress Model (WALLIN e JOHANSSON, 2000) .....	91
3.4.5	Correção de curvatura (SPALART e SHUR, 1997). 93	
<b>4</b>	<b>MÉTODOS NUMÉRICOS.....</b>	<b>98</b>
<b>4.1</b>	<b>Malha computacional.....</b>	<b>99</b>
4.1.1	Análise da independência de malha para o tanque sem chicanas e turbina Rushton.....	101
4.1.2	Análise da independência de malha para o tanque sem chicanas e hélice marinha.....	105
<b>4.2</b>	<b>Discretização das equações .....</b>	<b>110</b>
<b>4.3</b>	<b>Esquemas de interpolação .....</b>	<b>110</b>
4.3.1	Cálculo do falso passo de tempo .....	110
4.3.2	Esquema de advecção compressivo .....	111
4.3.3	Fluxo mássico .....	112
4.3.4	Acoplamento das equações de fração volumétrica e Navier-Stokes.....	113
4.3.5	Modelagem do movimento relativo agitador-reator .....	113
<b>5</b>	<b>DELINEAMENTO EXPERIMENTAL .....</b>	<b>116</b>
<b>6</b>	<b>RESULTADOS.....</b>	<b>122</b>
<b>6.1</b>	<b>Análise de modelos de turbulência.....</b>	<b>122</b>
6.1.1	Padrão de escoamento .....	125
6.1.2	Superfície Livre.....	126

6.1.3	Perfil de velocidade tangencial .....	128
6.1.4	Perfil de velocidade radial .....	129
6.1.5	Conclusões da comparação dos modelos de turbulência .....	130
<b>6.2</b>	<b>Verificação do modelo de turbulência no sistema agitado por hélice marinha .....</b>	<b>131</b>
6.2.1	Análise da influência da velocidade de rotação do impelidor sobre a superfície livre.....	134
6.2.2	Análise da influência da altura do impelidor sobre superfície livre .....	137
6.2.3	Conclusões.....	140
<b>6.3</b>	<b>Análise dos campos turbulentos e de velocidade média na fase líquida .....</b>	<b>141</b>
6.3.1	Análise da influência da velocidade de rotação do impelidor sobre os campos turbulentos e velocidade .....	141
6.3.2	Análise da influência da altura do agitador sobre os campos turbulentos e velocidade .....	147
6.3.3	Análise da abrangência do campo turbulento .....	153
6.3.4	Conclusões.....	154
<b>6.4</b>	<b>Análise da influência da altura do agitador sobre a DTP .....</b>	<b>154</b>
<b>6.5</b>	<b>Análise fluidodinâmica de uma suspensão de estireno em água – turbina Rushton.....</b>	<b>164</b>
6.5.1	Aparato Experimental.....	165
6.5.2	Pontos de amostragem .....	167
6.5.3	Propriedades físicas .....	168
6.5.4	Maquete virtual do reator e malha .....	169
6.5.5	Modelo matemático .....	172
6.5.6	Resultados para o campo de velocidades – estrutura de escoamento.....	175

6.5.7	Resultados para o campo de velocidades – efeito do grau de agitação.....	178
6.5.8	Resultados para a dissipação da energia cinética turbulenta .....	179
6.5.9	Resultados para o nível de líquido no tanque.....	181
6.5.10	Análise da homogeneidade do tanque.....	188
6.5.11	Conclusões .....	190
<b>7</b>	<b>CONCLUSÕES E SUGESTÕES .....</b>	<b>192</b>
<b>7.1</b>	<b>Conclusões do trabalho .....</b>	<b>192</b>
<b>7.2</b>	<b>Sugestões .....</b>	<b>193</b>
	<b>REFERÊNCIAS .....</b>	<b>196</b>

# 1 INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

## 1.1 INTRODUÇÃO

A agitação em tanques é a operação unitária base de muitos processos químicos. Sua principal função é promover a mistura de componentes de forma a se processar o produto desejado: obter soluções, emulsões e suspensões, potencializar a transferência de massa entre duas fases ou transferir oxigênio a microorganismos, fomentar reações químicas homogêneas e heterogêneas, entre outros (TATTERSON, 2003).

Na maior parte destes casos, o regime de escoamento encontrado é turbulento e é responsável em promover o aumento das taxas de transferência de calor e massa (WILCOX, 1998).

Do ponto de vista operacional, tanques agitados mecanicamente oferecem flexibilidade sem igual e grande controle sobre vários processos de transporte. A busca pelo melhor desempenho de um reator é o procedimento de ajuste da sua geometria e de parâmetros de operação. Entretanto, um grande número de parâmetros geométricos pode ser manipulado, dificultando a seleção da melhor configuração. Muitos testes de bancada e piloto são necessários para mapear de forma ampla a faixa de operação desejada e converter esse conhecimento em um modelo empírico ou semi-empírico. Esse tem sido o estado da arte no projeto de reatores agitados (JOSHI *et al.*, 2011).

Ainda assim, o modelo empírico obtido não é confiável de se extrapolar além do que foi testado e, portanto, seu uso é limitado se a tarefa é o aumento de escala ou a otimização de um equipamento industrial. Esse fato é ainda mais importante quando o processo envolve um sistema heterogêneo. Nestes sistemas, a densidade de área interfacial não é escalonada como é o volume do reator. Nos tanques agitados onde duas ou mais fases estão presentes, um desafio maior é posto à sua modelagem matemática, pois, além da presença da interface entre as fases pertinentes ao processo, existe outra interface entre a fase líquida e o gás (em geral, ar) acima, formando uma superfície livre.

Em resumo, ainda que com todo conhecimento empírico adquirido no último meio século, desde os trabalhos pioneiros de Rushton *et al.* (1950), o grande obstáculo tem sido obter relações quantitativas entre os parâmetros do reator e os objetivos do processo de uma maneira mais global.

No caso onde o tanque agitado apresenta chicanas, essa dificuldade pode ser contornada considerando que a superfície livre é quase estática já que as chicanas evitam a formação de vórtice central, melhorando a mistura (HAQUE *et al.*, 2006). Do ponto de vista de modelagem do escoamento, pode-se assumir a superfície livre como sendo uma parede com deslizamento livre. Ainda assim, é importante ter em conta no modelo a influência da agitação sobre a deformação da superfície livre (BHATTACHARYA *et al.*, 2007).

Nos casos com chicanas, o perfil de velocidades no interior do líquido é complexo. Entretanto, duas regiões são claramente distintas: a região próxima ao agitador e a região longe do agitador (RANADE, 2002). Na região próxima ao agitador, o perfil de velocidades será ditado pela sua característica: axial ascendente, axial descendente, radial ou mista. Já longe do agitador, velocidades muito menores são encontradas, o que permite que a superfície livre fique praticamente imóvel e plana ou que apareçam zonas mortas não promovendo a mistura.

Quando não há presença de chicanas, a superfície livre pode influenciar de sobremaneira o processo de mistura. O que parece ser uma desvantagem pode ser desejável em algumas situações, tais como: forçar partículas flutuantes descenderem ou removerem bolhas de gás do líquido, reduzindo, assim, a formação de espuma (ALCAMO *et al.*, 2005) ou a influência sobre o processo físico-químico no seio do líquido. Em alguns processos, a inclusão de chicanas é proibitiva. Na polimerização em suspensão, a fase orgânica no seu estágio “pegajoso” (em altas taxas de conversão do monômero a viscosidade é muito alta) pode se aderir às chicanas, onde o escoamento apresenta baixas velocidades (ARAUJO, 1999). Na cristalização, as chicanas promovem atrito nas partículas reduzindo a taxa de crescimento dos cristais (BRAVI *et al.*, 2003). Assim, do ponto de vista dos processos em tanque agitados sem chicanas, a correta descrição da forma da superfície livre é o cerne de qualquer modelo.

O perfil da superfície livre é diretamente relacionado com o perfil de velocidade formado no interior do líquido. Como principal característica em tanques sem chicanas, a componente tangencial da velocidade é predominante. A modelagem matemática deste tipo de escoamento deve, portanto, considerar essa diferença de magnitude entre as componentes da velocidade. É o que se chama anisotropia. Este contexto impõe grandes desafios à modelagem deste escoamento (WILCOX, 1998).

Em resumo, conhecer o padrão do escoamento em função da geometria e parâmetros operacionais é essencial para o projeto e otimização de tanques agitados. Essa tarefa pode ser conduzida através de ferramentas para solução numérica das equações diferenciais de conservação de um fluido, ou Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD, em inglês).

Frequentemente, os processos conduzidos em tanques agitados envolvem ao menos duas fases (além do ar/gás/vapor acima que forma a superfície livre) sólido-líquido, líquido-líquido ou gás-líquido. Processos que caem nestas categorias são, por exemplo, cristalização e polimerização em emulsão ou suspensão. Nestes processos a distribuição de tamanho de partícula (DTP) e a transferência de calor e massa frequentemente afetam a qualidade do produto (PINTO, 2006).

No caso da polimerização em suspensão, por exemplo, o conhecimento das condições de mistura no reator é um fator crítico, pois a distribuição de tamanho das partículas (DTP) produzidas em suspensão está diretamente relacionada às condições de mistura. Segundo Vivaldo-Lima *et al.* (1997), a mais importante tarefa na operação prática de polimerização em suspensão é o controle da DTP final, particularmente nos casos de poliestireno expansível (EPS), onde as próprias partículas produzidas ao longo do processo fazem parte do produto final. Portanto, o estudo da influência da geometria do reator e das condições de mistura sobre a DTP durante a polimerização em suspensão em condições de operação similares a utilizada na indústria é extremamente relevante para um melhor controle sobre o processo. Além disso, a aplicação de um modelo que correlacione as variáveis de operação e geometria do reator em um processo de polimerização em suspensão é extremamente importante, pois tornaria possível prever a DTP final através do modelo, minimizando problemas que possam ocorrer ao passar de um reator em escala piloto para um reator industrial. Aliar a modelagem da DTP ao escoamento de forma direta é o grande desafio desta área.

A grande motivação na modelagem de escoamentos polidispersos é a não existência, na prática, de escoamentos monodispersos. Não raro, a distribuição de tamanhos desse tipo de escoamento é variável com o tempo.

O senso comum na modelagem de escoamentos multifásicos dispersos é a adoção de um diâmetro médio constante para descrever a morfologia da fase dispersa. Essa aproximação é razoável quando se

procura resultados globais de sistemas que se comportam, na média, como se todas as partículas tivessem o mesmo tamanho. Entretanto, em escoamentos onde se objetiva observar segregação das partículas, por exemplo, a hipótese de que o sistema se comporta como se a fase dispersa tivesse apenas um tamanho não é válida. Exemplos deste tipo são:

- reatores de leito fluidizado
- separadores ciclônicos e hidrocilônicos
- filtração
- flotação
- peneiramento
- tanques agitados com fase dispersa
- Etc...

Em alguns casos, onde a concentração volumétrica da fase dispersa é baixa (~1%), pode-se utilizar uma abordagem Lagrangeana para descrever essa fase. Nesta abordagem, o escoamento da fase não é calculado em todos os pontos da malha computacional, mas somente onde as linhas de trajetória da fase passam. Assim, equações de trajetória mais simples (equações diferenciais ordinárias) surgem permitindo o modelamento da DTP fase dispersa sem onerar o tempo computacional.

Outra técnica é chamada de *Discrete Element Modeling* (DEM) introduzida por Cundall e Strack (1979). A diferença dessa abordagem para a Lagrangeana clássica é que cada partícula é rastreada ao invés da trajetória. Assim, DEM enxerga a partícula enquanto o Lagrangeano clássico enxerga a trajetória que um conjunto de partículas faz. A grande desvantagem desta abordagem é o custo computacional onerado devido à escala do problema. Quanto maior o equipamento e/ou menor a partícula, maior a demanda por processamento e memória. Hoje, um problema com 1 milhão de partículas é factível, porém, já consome massivamente recurso computacional. Lee *et al.* (2012) reportam que uma simulação para 9000 partículas leva 1h para simular 1s do processo.

Assim, para resolver escoamentos polidispersos concentrados, atualmente, a melhor opção ainda é a abordagem Euleriana. Nesta abordagem, cada fase é tratada como um meio contínuo interpenetrante, podendo, assim, serem aplicadas as equações de Navier-Stokes para a descrição da velocidade de cada fase em cada ponto do domínio.

Em alguns sistemas, ainda pode não valer a hipótese de que a distribuição de tamanho de partículas (DTP) seja constante ao longo do tempo. Exemplos são inúmeros:

- partículas sólidas que se agregam (partículas pequenas ou molhadas)
- suspensões e emulsões (sistemas líquido-líquido)
- colunas de borbulhamento (sistemas gás-líquido)

Nestes casos, a aplicação da equação de balanço populacional (PBE) se faz necessária. O objetivo do PBE é acompanhar a evolução da DTP ao longo do tempo e do espaço quando acoplado ao CFD. Na PBE, os termos mais importantes são os devidos aos mecanismos de quebra, coalescência e nucleação.

Apesar da larga gama de aplicação, a fenomenologia inerente a estes processos é muito pouco conhecida, ainda que muito estudada. Menos ainda pode-se dizer de sua modelagem. Mesmo assim, é possível aplicar com relativo sucesso, os modelos que são o estado da arte em quebra e coalescência em escoamentos polidispersos.

A correta descrição de escoamentos polidispersos é fundamental para a descrição da densidade de área interfacial entre as fases presentes. Essa área será a base de todos os fenômenos de transferência entre fases tais como massa, calor e quantidade de movimento.

Uma aplicação típica que envolve todos esses fenômenos é a dispersão de duas fases imiscíveis. Em geral, ocorre em tanques agitados mecanicamente e operam em batelada. A agitação mecânica é o principal agente de quebra da fase dispersa, seja pela geração de cisalhamento ou turbulência. Neste tipo de equipamento, em escala industrial, a fração volumétrica, ou *hold-up*, da fase dispersa pode passar de 50%.

A dispersão é o processo de preparação de vários sistemas, tais como: reativos como a polimerização em suspensão (ARAUJO, 1999; YANG *et al.*, 2000; PINTO, 2006); emulsões água-óleo; farmacêutica; de alimentos, etc (LAURENZI *et al*, 2009). Essa variedade de aplicações justifica o estudo deste processo.

No presente estudo, o foco será a modelagem do escoamento de uma dispersão de duas fases líquidas imiscíveis em um tanque agitado levando em conta os efeitos da superfície livre formada entre a dispersão e o ar em tanques com ou sem chicanas agitados mecanicamente.

## 1.2 OBJETIVOS

O objetivo deste trabalho é contribuir na modelagem do escoamento turbulento de sistemas líquido-líquido com superfície livre que ocorre em tanques com e sem chicanas agitados por dois tipos de agitadores: um radial e outro, axial.

Além disso, reunir e testar modelos de turbulência que potencialmente podem ser aplicados na modelagem do escoamento em tanques sem chicanas.

Portanto, os objetivos deste projeto são:

- a) Avaliar modelos de turbulência recentes em sistemas de agitação em tanques sem chicanas e comparar seus resultados com resultados de modelos consagrados e dados experimentais;
- b) Levantar dados experimentais do comportamento da superfície livre em tanque agitado do Laboratório de Controle de Processos da EQA/UFSC;
- c) Aplicar o modelo considerado mais adequado em a) no sistema utilizado em b);
- d) Adicionar ao modelo obtido em c) o modelo Drift-Flux para explicar a diminuição do diâmetro médio de gota com o aumento do clearance, observado experimentalmente por Pinto (2006);
- e) acoplar ao modelo fluido-dinâmico obtido em c) um balanço populacional de forma a descrever a polidispersidade da fase dispersa.

A originalidade do trabalho está nos itens a), d), e e). Apesar de diversos trabalhos experimentais contendo métodos de aumento de escala estar disponíveis na literatura aberta, nenhum deles apresenta generalidade suficiente para serem aplicados em qualquer sistema. Além disso, as regras empíricas estabelecidas para aumento de escala de tanques agitados são aplicáveis em sistemas homogêneos (ou monofásicos). É pouco explorado o uso de ferramentas numéricas do tipo CFD na avaliação de tanques agitados. Em geral, se aplica um método de compartimentos (ALEXOPOULOS et al., 2002) ou uma abordagem desacoplada entre CFD e DTP. Sendo assim, este trabalho visa contribuir nesta área através do estudo numérico destes sistemas.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo está organizado em seções de acordo com temas relevantes do presente estudo.

A Seção 2.1 aborda o sistema de agitação nos seus aspectos constitutivos, geométricos e operacionais.

A Seção 2.2 traz um apanhado da aplicação de técnicas CFD em tanques agitados dos últimos 15 anos focando nos modelos de turbulência utilizados, no tratamento da superfície livre líquido-ar e casos com fase líquida dispersa em outra fase líquida.

A Seção 2.3 lista uma série de referências sobre fundamentos das técnicas de CFD.

As Seções 2.4 a 2.6 tratam de aspectos geométricos específicos (chicanas, forma do fundo do tanque e tipo de agitador, respectivamente) dos sistemas de agitação e seus efeitos sobre o padrão de escoamento.

A Seção 2.7 revê conceitos de turbulência e o estado da arte de sua modelagem, destacando os modelos utilizados neste estudo e os situando no contexto geral da modelagem da turbulência.

A Seção 2.8 resume os modelos de escoamento multifásico relevantes para o estudo. O foco é analisar a superfície livre e a fase dispersa líquida presente na dispersão.

Finalmente, a Seção 2.9 resume as conclusões de cada seção de forma a orientar a construção do modelo de escoamento.

### 2.1 O TANQUE AGITADO

O escoamento em tanques agitados é o foco deste estudo. Por isso, esta seção apresenta as principais características de um sistema típico, incluindo os componentes, relações geométricas e número adimensionais.

#### 2.1.1 Os componentes

O sistema apresentado na Figura 2-1 representa um arranjo típico de tanque agitado. O conjunto tem como componentes básicos:

- tanque;
- agitador e motor;
- chicanas;
- encamisamento;
- alimentação;
- saída;
- tampo.

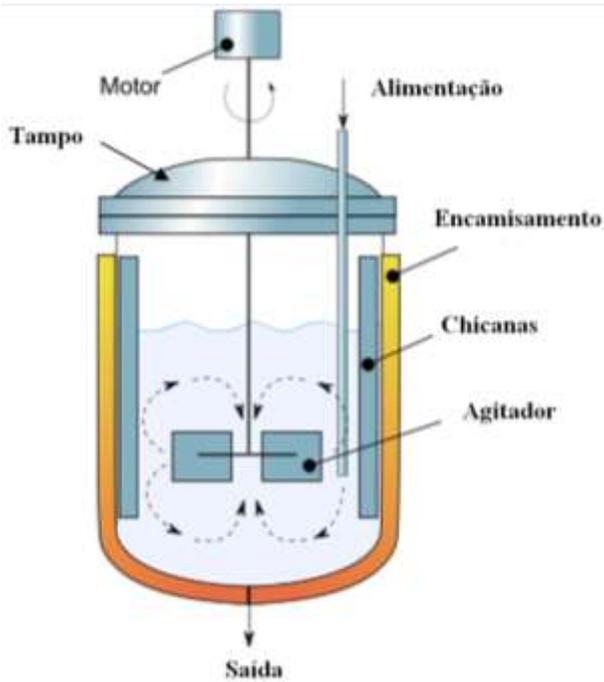


Figura 2-1 – Sistema de agitação típico.

O tanque tem a função de conter as substâncias relevantes ao processo. As paredes do tanque podem ser feitas de vários materiais dependendo do objetivo do processo e da natureza dos componentes da mistura. Em geral, em laboratório, quando as paredes podem ser feitas de vidro para facilitar a visualização do interior. Entretanto, é muito co-

num o uso de material metálico quando o sistema requer pressões maiores que atmosférica.

O encamisamento ao redor das paredes do tanque tem como função controlar a temperatura da mistura. Em alguns casos, fornece calor para que o processo se inicie como em alguns casos de reações (ARAUJO, 1999). Em outros casos, quando a reação é exotérmica, é utilizado para remover energia do sistema. Em casos especiais, como quando o tanque apresenta grandes dimensões ou uma reação altamente exotérmica está presente, o encamisamento para dentro do tanque em forma de serpentina. Em sistemas que operam em temperatura ambiente ou que não requerem controle rigoroso de temperatura, este componente é dispensável.

O agitador é o principal agente de promoção do escoamento e suas características ditam o padrão de movimento do fluido. Maiores detalhes serão abordados na Seção 2.6 Ele é acoplado a um motor que fornece energia ao eixo. O motor é o responsável pelo controle do grau de agitação (RPM) do sistema.

As chicanas têm como função impedir o movimento de corpo rígido do líquido. Ao impedir este movimento, as taxas de transferência são aumentadas (NUNEZ *et al.*, 2002) às expensas de um maior requerimento de potência do motor (TATTERSON, 2003). Maiores detalhes serão discutidos na Seção 2.4.

Em sistemas contínuos ou semi-batelada uma entrada ou uma saída ou ambos estão presentes. Nestes sistemas, a perfeita localização é sempre um ponto chave no projeto de tanques agitados (ASSIRELLI *et al.*, 2002). No presente estudo, estes componentes não estão presentes por se tratarem de sistemas em batelada.

O tampo tem como função isolar o interior do tanque do ambiente deixando somente a haste do agitador passar e, assim, complementando a função da parede do tanque. Este componente está presente sempre que a mistura for volátil ou que necessite uma atmosfera controlada no interior do tanque. Também, no presente caso, este item não é utilizado.

Inúmeras variações e outros componentes não são raros em sistemas de agitação como utilizar mais de um agitador. Entretanto, essas situações não serão abordadas. Recomenda-se referenciar Paul *et al.* (2004) para maiores detalhes.

## 2.1.2 Relações geométricas

Tipicamente, as relações de tamanhos entre os diversos componentes do sistema de agitação apresentam um padrão. Esse padrão é baseado na experiência de operação destes sistemas. Porém a principal razão desse padrão existir é a facilidade de projetar e minimizar custos de fabricação dos componentes do sistema de agitação. Portanto, não há um desenho único ótimo para cada tipo de processo (JAKOBSEN, 2008). As dimensões costumam ser representadas por letras maiúsculas de acordo com a Figura 2-2 (NUNHEZ *et al.*, 2002).

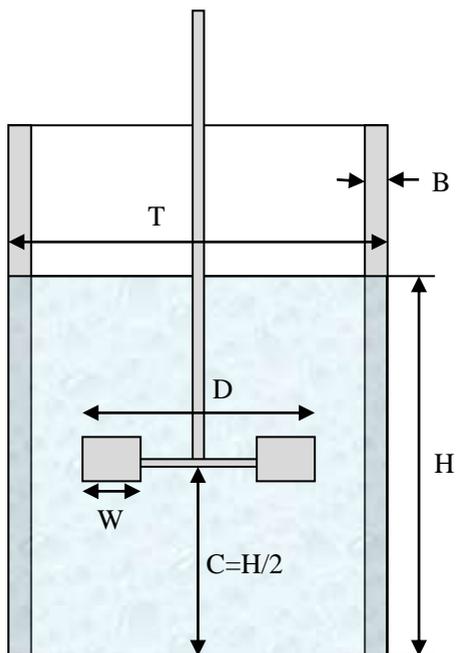


Figura 2-2 – Principais dimensões de um tanque agitado.

As relações geométricas padrões são as seguintes:

- $D/T = 1/4$  a  $1/2$  ( $1/3$  é o mais comum);
- $H/T = 1$ ;
- $C/T = 1/6$  a  $1/2$  ( $1/3$  é o mais comum);
- $B/T = 1/10$  a  $1/12$ ;
- $W/D = 1/4$  a  $1/6$ .

Onde

- B: largura da chicana;
- C: espaço livre entre o agitador e o fundo do tanque (*clearance*);
- D: diâmetro do agitador;
- H: altura do nível de líquido;
- W: largura da pá do agitador.

Outras dimensões podem ser incluídas na análise como a espessura das pás do agitador, o número de pás ou o número de chicanas. Quando outros tipos de agitadores forem considerados, outras dimensões podem ser relevantes.

No caso das hélices marinhas, duas variáveis são importantes: o passo da curvatura e o ângulo de torção da pá. Neste estudo, ambos os parâmetros permanecerão constantes.

### 2.1.3 Número adimensionais

Existem diversos número adimensionais que caracterizam diversos aspectos dos sistemas de agitação. Neste trabalho, o escoamento é isotérmico, sem transferência de massa ou reação, portanto os números apresentados nesta Seção estão relacionados ao movimento.

Os números adimensionais a seguir estão relacionados ao escoamento global do tanque agitado, podem o líquido conter ou não uma fase dispersa.

Número de Reynolds,  $Re$ : é a razão entre forças inerciais e viscosas. Tipicamente usado para avaliar se o escoamento encontra-se em regime laminar ou turbulento. Em tanques agitados é baseado no diâmetro do impelidor e velocidade de rotação. Experimentos (RUSHTON *et al.*, 1950) indicam que a transição laminar-turbulento ocorre entre  $\sim 10^2$  e  $10^4$ .

Número de Froude,  $Fr$ : é a razão entre forças inerciais e a gravidade. Sua utilidade aparece em sistemas sem chicanas, na medida em que quantifica o vórtice central. Seu valor crítico para o aparecimento do vórtice central é particular de cada caso (BUSCIGLIO *et al.*, 2011).

Número de Potência,  $Np$ : indica a razão entre a potência entregue pelo motor e a energia cinética efetiva. Também pode ser interpretada

como a resistência do fluido ao movimento e a inércia (EARLE e EARLE, 1983). Caracteriza cada sistema de acordo com os componentes presentes no sistema e o regime de escoamento. Para sistemas com chicanas é função do número de Reynolds e varia entre 10 e 1000 no regime laminar a 0,1 e 10 no regime turbulento. Nestes sistemas o número de potência é independente do Reynolds no regime turbulento. Já em sistemas sem chicanas o número de potência decresce mesmo em regime turbulento. Estudo detalhado deste parâmetro é realizado por Spogis (2002). Números de potência típicos são encontrados em Nunhez *et al.* (2002).

Quando a fase líquida apresenta uma mistura com uma fase dispersa outros números adimensionais são relevantes.

Número de Reynolds da partícula,  $Re_p$ : tem a mesma definição anterior excetuando-se em dois aspectos: o comprimento característico é o diâmetro da fase dispersa e a velocidade característica é a velocidade relativa entre as fases.

Número de Weber,  $We$ : é a relação entre as forças inerciais e a tensão superficial. Tem sua aplicação para avaliar deformação e/ou quebra de gotas/bolhas.

Número de Ohnesorge,  $Oh$ : é uma combinação dos dois números acima gerando uma relação entre as forças viscosas e as de inércia e tensão superficial.

Número de Eotvos,  $Eo$ : é a razão entre empuxo e tensão superficial. Também é conhecido por número de Bond. Sua aplicação é na avaliação da forma da fase dispersa.

Número de Stokes,  $St$ : é a razão entre o tempo de resposta de uma partícula e o tempo característico do escoamento em seu redor. É uma medida da inércia de uma partícula. Valores menores que a unidade mostram que a partícula tem baixa inércia e, portanto tende a seguir o movimento do fluido contínuo.

Os números acima são resumidos a seguir:

$$\text{Reynolds} \quad Re = \frac{D^2 N \rho}{\mu} \quad (2-1)$$

$$\text{Froude} \quad Fr = \frac{N^2 D}{g} \quad (2-2)$$

$$\text{Potência} \quad N_p = \frac{P}{\rho N^3 D^5} \quad (2-3)$$

$$\text{Reynolds-partícula} \quad Re_p = \frac{d_p \rho_c |\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_p|}{\mu_c} \quad (2-4)$$

$$\text{Weber} \quad We = \frac{d_p \rho |\mathbf{u}|}{\sigma} \quad (2-5)$$

$$\text{Ohnesorge} \quad Oh = \frac{\sigma}{Re \sqrt{We}} \quad (2-6)$$

$$\text{Eotvos} \quad Eo = \frac{g \Delta \rho d_p^2}{\sigma} \quad (2-7)$$

$$\text{Stokes} \quad St = \frac{t_p}{t_f} \quad (2-8)$$

## 2.2 MODELAGEM FLUIDODINÂMICA DE ESCOAMENTOS EM TANQUES AGITADOS

O estudo de tanques agitados é profícuo na literatura técnica. Assim, uma ampla revisão deste tema seria muito dispendiosa. Além disto, textos extensos sobre o tema estão disponíveis não somente em artigos de periódicos como em livros (ZLOKARNIK, 2001; NAUMAN, 2002; PAUL *et al.*, 2004; TATTERSON, 2003; OCHIENG, 2009; KING, 2010). Deste modo, esta revisão ater-se-á aos trabalhos cujo foco foram na modelagem e simulação numérica do escoamento no interior de reatores agitados mecanicamente.

Segundo a TECHNOLOGY VISION 2020 (1996), CFD foi identificado como uma das ferramentas críticas para alavancar novas tecnologias na indústria química.

Bakker e van den Akker (1994) e Armenante *et al.* (1997) aplicaram um modelo de Tensores de Reynolds Algébrico (ASM) em um tanque sem chicanas, mas fechado no topo impedindo a formação de uma superfície livre. Em ambos, o modelo foi aplicado em agitadores radiais e axiais. Devido aos recursos computacionais da época, a região do impelidor foi modelada com dados experimentais de LDV (*Laser Doppler Velocimetry*). Nesta abordagem, a região em torno do impelidor é definida como uma condição de contorno impondo valores médios de velocidade e turbulência experimentais. A diferença dos dois trabalhos foi na geometria utilizada. No primeiro, foram usadas chicanas e no segundo não. Mesmo com essas limitações em ambos os estudos, o

modelo ASM foi capaz de prever a tendência correta do perfil de velocidade tangencial.

Baseados nesta afirmação, Joshi e Ranade (2003) buscaram o que havia já desenvolvido na época e o que estaria por vir no horizonte até 2020. Segundo os autores, a modelagem da superfície livre é bem descrita por códigos baseados no método conhecido por *Volume-of-Fluid*, ou VOF (HIRT e NICHOLS, 1981). Por outro lado, CFD não era usado como ferramenta de projeto quando o ponto principal do processo envolvia superfície livre com arraste de gás. Ainda hoje poucos trabalhos acoplam a modelagem da superfície livre em tanques agitados (HAQUE *et al.*, 2006). Pode-se destacar neste tema o trabalho de Ciofalo *et al.* (1996), Haque *et al.* (2006), Glover e Fitzpatrick, (2007) e Abu-Farah *et al.* (2010).

Alcamo *et al.* (2005) aplicaram pioneiramente a Simulação de Grandes Escalas, ou *Large Eddy Simulation*, LES, em um sistema sem chicanas e fundo plano, agitado por uma turbina Rushton. Utilizando a abordagem LES se resolve as maiores escalas (tamanho ou frequência dos turbilhões) do escoamento turbulento e modela as menores escalas considerando-as possuir um caráter universal (WILCOX, 1998). Esse caráter universal permite utilizar modelos mais simples para prever o comportamento das pequenas escalas (SMAGORINSKY, 1963). Entretanto, para evitar a formação de vórtice, os autores lançam mão de um tampo sobre a superfície livre. Esse artifício permite que a simulação possa ser conduzida como monofásica (água). Os resultados de perfil médio de velocidade tangencial quando comparados a dados experimentais (VELLA *et al.*, 2003) mostram boa concordância. Entretanto, para a velocidade radial (principal componente em uma turbina Rushton) os resultados não foram tão conformes mesmo que mostrando a tendência correta. Levando em conta que cada solução LES levou 33 dias, talvez esse esforço não valha a pena para problemas de otimização.

Tendo em vista os resultados razoáveis, porém dispendiosos de Alcamo *et al.* (2005), Haque *et al.* (2006) propuseram modelar e simular o mesmo sistema utilizando a abordagem RANS ou *Reynolds Averaged Navier-Stokes*. Nesta abordagem, as equações do movimento são promediadas no tempo, podendo ser resolvidas em estado permanente, sem resolver explicitamente os turbilhões do escoamento turbulento. (WILCOX, 1998) Os autores concluíram que utilizando um modelo de turbulência de duas equações *Shear Stress Transport* ou SST (MENTER, 1994), a superfície livre é bem capturada, mas os perfis de

velocidade não, mostrando uma tendência a gerar um movimento de corpo rígido em todo o tanque. Nesta abordagem, somente um modelo de turbulência de segunda ordem baseado no transporte do Tensor de Reynolds (RST) fornece bons resultados, capturando tanto a região de vórtice livre quanto a de vórtice forçado. Por outro lado, a utilização de um modelo de transporte do Tensor de Reynolds cria algumas dificuldades, como:

- maior tempo de processamento: o modelo RST possui 7 equações diferenciais parciais (EDP) não lineares enquanto que o SST possui duas;
- convergência mais difícil: é notória a dificuldade de convergência de um sistema de equações onde o modelo RST está presente (RANADE, 2002);
- inadequado para escoamento próximo a parede: isso implica que algumas características importantes do escoamento podem ser mal resolvidas, como o número de potência (razão entre forças de arraste e forças de inércia) e o Nusselt;
- difícil acoplamento com cinéticas químicas: em geral, os modelos de cinéticas químicas em escoamento turbulento são baseadas em modelos de duas equações.

Glover e Fitzpatrick (2007) aplicaram o modelo VOF para capturar a forma do vórtice central de um tanque de fundo plano sem chicanas. O agitador é do tipo pá reta (radial) de oito lâminas. O modelo SST é usado para capturar os efeitos da turbulência sobre o escoamento. Com a baixa rotação (72 RPM) os efeitos da tensão superficial na superfície livre não são desprezíveis. Os autores mostraram que para um mesmo nível de refino, a malha hexaédrica e a malha tetraédrica apresentam resultados similares para o perfil da superfície livre. Entretanto, nenhuma das duas malhas mostrou concordância com dados experimentais. Pode-se concluir dos resultados apresentados que:

- utilizando-se uma malha grosseira, não importa o tipo de elemento se compõe a malha: falta um estudo de independência do refino da malha sobre os resultados;
- de estudos anteriores (CIOFALO *et al.*, 1996; HAQUE *et al.*, 2006) ficou claro que os modelos de duas equações são incapazes de capturar corretamente os perfis de velocidade.

Murthy e Joshi (2008) analisam o escoamento turbulento em um tanque com chicanas agitado por distintas turbinas através de medidas de LDA (*Laser Doppler Anemometry*) e duas abordagens CFD: RANS (k- $\epsilon$  e RST) e LES. A conclusão foi de que LES é extremamente preciso em todos os aspectos do escoamento. O RST prediz com acurácia somente as variáveis médias. Tanto o RST quanto o k- $\epsilon$  falham ao predizer quantidades turbulentas como a energia cinética turbulenta.

Abu-Farah *et al.* (2010) conduzem um estudo numérico e experimental de dispersão turbulenta de uma fase orgânica (ciclohexano) em água utilizando um tanque de fundo semi-esférico agitado por uma turbina Rushton. É levada em consideração a superfície livre entre a dispersão líquida e o ar. Portanto, do ponto de vista da modelagem, este é um estudo trifásico. A interação entre as fases aquosa e orgânica é modelada através do Modelo de Mistura (MANNINEN e TAVASSALO, 1996), também conhecido como *Drift-Flux Model* (ISHII, 1977) ou *Algebraic Slip Model*, abreviado por ASM (ANSYS CFX, 2010). Este modelo permite que duas fases distintas sejam descritas por um mesmo conjunto de equações de Navier-Stokes. A distinção de comportamento entre as fases é o cálculo da velocidade terminal das fases dispersas considerando que estas alcancem o equilíbrio instantaneamente. Esta estratégia é bem razoável como uma alternativa ao Balanço Populacional em se considerando que a DTP seja conhecida e o que se pretende analisar é o comportamento da população de partículas quando os processos de quebra e coalescência estão em equilíbrio. Ao analisar o sistema globalmente, os autores optam pelo modelo k- $\epsilon$  padrão (WILCOX, 1998), seguindo sugestões de Zakrzewska e Jaworski (2004) e Hartmann *et al.* (2004). Entretanto, estes últimos autores aplicaram o referido modelo de turbulência em um sistema com chicanas, cujo padrão de escoamento é razoavelmente bem predito por modelos de duas equações.

Na medida em que o volume de publicações acerca da modelagem e simulação numérica do escoamento em tanques agitados foi avançando, alguns autores se propuseram a avaliar a qualidade destas análises. Como qualquer processo de solução numérica de equações, vários critérios devem ser atendidos para garantir resultados com um mínimo de erros (MALISKA, 2004). Coroneo *et al.* (2011) conduzem um estudo mostrando o efeito do tamanho dos elementos na malha e esquemas de discretização dos termos das equações de conservação sobre parâmetros globais, velocidade média, turbulência e homogenei-

zação. Os autores concluem que com a abordagem RANS aliada a métodos numéricos adequados, é possível obter resultados aceitáveis não somente de quantidades médias, mas também nos parâmetros influenciados pela turbulência.

Joshi *et al.* (2011) revisam extensamente a literatura técnica sobre a aplicação de diferentes modelos de turbulência em tanques agitados por agitadores radiais assumindo fase única. Neste levantamento observa-se claramente que a Turbina Rushton é a mais escolhida (95% dos casos). Todos os outros casos são compostos pelo agitador de pá reta. Algumas conclusões deste trabalho são destacadas aqui:

- existe necessidade de medidas experimentais em regiões importantes do escoamento, como entre as pás do agitador;
- a avaliação da solução independente da malha é crucial para garantir acurácia dos resultados e assertar que um determinado modelo é de fato coerente ou não com a tendência física do escoamento;
- características locais do escoamento, tais como as macroinstabilidades, são importantes para o projeto de reatores. As macroinstabilidades, ou grandes vórtices, ocupam grande parte do reator e são responsáveis pelo transporte em longas distâncias de substâncias ou da energia, por exemplo. Portanto, é imprescindível que modelos que levam em consideração estas características.

Portanto, a obtenção de dados experimentais que correlacionam as variáveis de operação e de geometria do reator com a DTP e o desenvolvimento de um modelo matemático que pondere a influência de cada um destes parâmetros é extremamente importante, pois tornaria possível prever a DTP final através do modelo, minimizando problemas de reações ao passar de um reator escala piloto para um reator industrial.

## 2.3 MECÂNICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL

A mecânica dos fluidos computacional trata da solução numérica das equações do movimento na sua forma consagrada conhecida por Navier-Stokes. O tema mecânica dos fluidos computacional é muito vasto e está além do escopo deste texto tratá-lo pormenorizadamente. Segure-se ao leitor buscar outras obras que tratam exclusivamente do

tema tais como Anderson (1995), Ranade (2002), Maliska (2004), Hirsch (2007), Versteeg e Malalasekera (2007), Jakobsen (2008).

## 2.4 EFEITO DAS CHICANAS

A utilização de chicanas tem dois objetivos: mitigar a formação de um vórtice ao redor da haste do agitador e melhorar o transporte das espécies dentro do reator, evitando o movimento de corpo rígido. A presença de chicanas faz com que o movimento circular do líquido seja inibido, resultando em uma superfície livre quase plana. Além disso, o movimento axial é mais intenso o que leva a um aumento na taxa de mistura (CIOFALO *et al.*, 1996).

Por outro lado, as chicanas geram zonas mortas que em casos de fluido de alta viscosidade (reações de polimerização, por exemplo) promovem incrustações (Figura 2-3). Chicanas devem ser evitadas em processos onde as espécies são suscetíveis ao cisalhamento gerado pela ponta das chicanas, caso de cristais e micro-organismos.

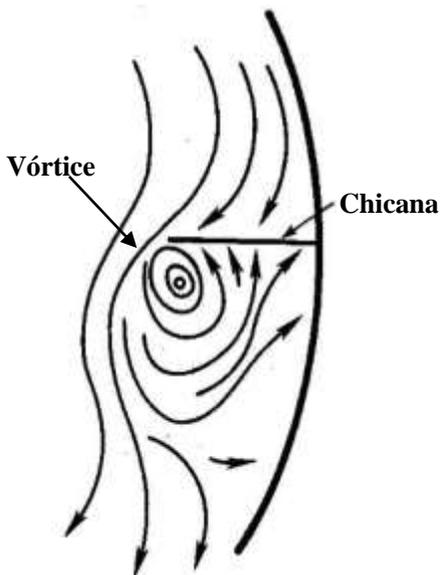


Figura 2-3 – Formação de vórtices em tanques com chicanas (JAKOBSEN, 2008).

O efeito das chicanas sobre o escoamento próximo do agitador é pequeno e, assim, pode-se dissociar o padrão de escoamento desta região da zona longe do agitador. Analisando o material sobre modelagem do escoamento em tanques agitados já publicado, observa-se uma tendência a se preferir sistemas com chicanas (JOSHI *et al.*, 2011).

As duas características macroscópicas do efeito da presença ou não das chicanas são ilustradas na Figura 2-4. À esquerda, a superfície livre se mantém plana, enquanto que na direita, a superfície forma um vórtice central. Para conservar a massa de líquido, o volume que é deslocado pela descida da interface no centro é elevado junto às paredes. É notório que a superfície livre não fica totalmente plana mesmo com a presença das chicanas. Indo além, a uma determinada rotação (ou melhor, número de Froude) até um vórtice pode surgir (BUSCIGLIO *et al.*, 2011) se o agitador for do tipo fluxo radial ou axial descendente. Isso acontece devido à força centrífuga gerada pelo agitador que empurra o fluido para as paredes do tanque criando uma depressão no centro. A força centrífuga é contraposta à força da gravidade que tende a manter a superfície livre plana. A medida do equilíbrio entre estas duas forças é expressa pelo número de Froude.

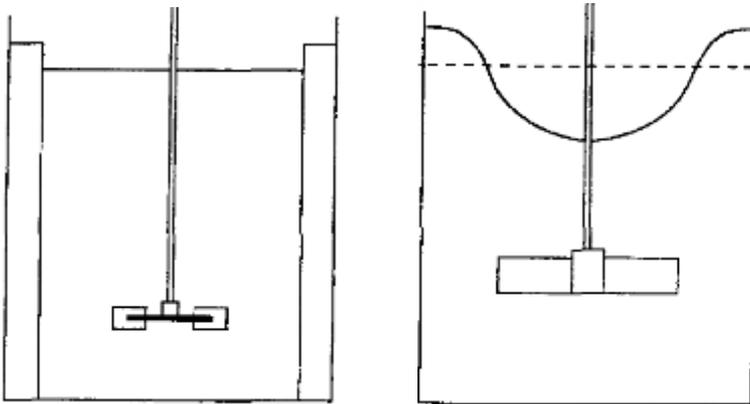


Figura 2-4 – Efeito da presença das chicanas sobre a forma da superfície livre (CIOFALO *et al.*, 1996).

O efeito observado na superfície livre é consequência do perfil de velocidade tangencial formado no interior do líquido, conforme mostrado no esboço da Figura 2-5. No lado esquerdo, é possível observar duas

regiões de comportamento distinto da velocidade circunferencial. Do centro do reator até o raio crítico  $r_c$ , o perfil é linear e conhecido como vórtice forçado. Do raio crítico à parede, o perfil não linear é observado e é chamado de vórtice livre. Quando se observa a forma da superfície livre, o raio crítico indica o ponto de inflexão da superfície livre. Esta constatação explicita a relação entre o perfil de velocidades e a forma da superfície livre em tanques agitados sem chicanas.

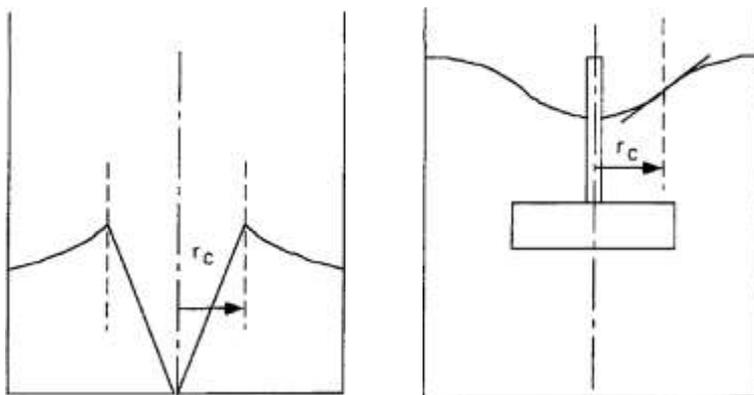


Figura 2-5 – Relação entre o perfil de velocidade tangencial (a esquerda) e a forma da superfície livre, à direita (CIOFALO et al., 1996).

O pioneiro na modelagem deste fenômeno foi Nagata (1975) ao aplicar a teoria do escoamento potencial, considerando que somente a componente tangencial da velocidade não é desprezível. Seja a região de vórtice forçado se comportando como um corpo rígido girando e a região de vórtice livre de momento da quantidade de movimento constante, obtém-se a componente tangencial da velocidade,  $w$ :

$$w = \omega r \therefore (r \leq r_c) \quad (2-9)$$

$$w = \frac{\omega r_c^2}{r} \therefore (r > r_c) \quad (2-10)$$

onde  $\omega$  é a velocidade angular do agitador e  $r$  a coordenada radial.

A partir destes perfis, é possível obter uma forma para a superfície livre:

$$z = \begin{cases} H_b + \frac{\omega^2 r_c^2}{2g} \left( 2 - \frac{r_c^2}{r^2} \right) \rightarrow \text{Região de vórtice livre} \\ H_b + \frac{\omega^2}{2g} r^2 \rightarrow \text{Região de vórtice forçado} \end{cases} \quad (2-11)$$

onde  $H_b$  é a altura do fundo do vórtice (próximo a haste do agitador),  $H_w$  é a altura da crista do vórtice (próximo a parede do reator),  $g$  é a aceleração da gravidade.

É notável que a descontinuidade do perfil de velocidade se converte em um ponto de inflexão na forma da superfície livre.

O raio crítico é obtido experimentalmente. Uma das formas de se calcular é proposta por Nagata (1975):

$$r_c = \frac{T}{2} \sqrt{\frac{T}{2} - \sqrt{\left(\frac{T}{2}\right)^2 - \frac{2g(H_w - H_b)}{\omega^2}}} \quad (2-12)$$

onde  $T$  é o diâmetro do tanque.

Com todas as hipóteses utilizadas, é de se supor que este modelo não tenha aplicabilidade universal. Em conclusão, o perfil de velocidade tangencial obtido por Nagata (1975) pode ser usado como um guia teórico. Busciglio *et al.* (2011) propuseram uma modificação quando o vórtice central atinge o agitador.

## 2.5 EFEITO DO FUNDO DO TANQUE

Assim como no caso anterior, onde há uma preferência a tanques com chicanas, existe uma preferência para reatores com fundo plano. Essa escolha se deve a facilidade de fabricação do reator em escala de bancada e piloto, além de permitir que se trabalhe com espaçamento entre agitador e fundo quase nulo. Já em escala industrial tanques de fundo não plano (ovais, elipsoidais, semi-esféricos, etc...) são preferidos devido a facilidade de manutenção (mais fácil de esvaziar), e por não formar regiões potencialmente mortas.

Dohi *et al.* (2004) concluem de suas observações que o escoamento produzido em tanques agitados dependem fortemente não só da geometria do agitador mas também da forma do fundo.

Outros trabalhos que envolvem tanques com fundo não plano são os que estudam sistemas que envolvem suspensões sólido-líquido (OSHINOWO e BAKKER, 2002). Os trabalhos citados a seguir não realizam um estudo do efeito do fundo do tanque, mas apenas mostram exemplos de aplicação de CFD em tanques de fundo não-plano.

No que tange este estudo, pode-se destacar o trabalho de Abu-Farah *et al.* (2010) que usam um tanque sem chicanas com fundo semi-esférico. Os resultados das simulações mostram de maneira geral que se forma uma zona de menor agitação na região entre o agitador e o fundo do tanque. Na seção de resultados, poder-se-á observar que em um tanque de fundo plano a mesma região de baixa mistura é identificada.

Choi *et al.* (2004) utilizam um reator com chicanas de fundo semi-esférico para analisar a distribuição de tempo de residência. Para este tipo de estudo global, o modelo  $k-\epsilon$  se mostra adequado quando os resultados são comparados com dados experimentais.

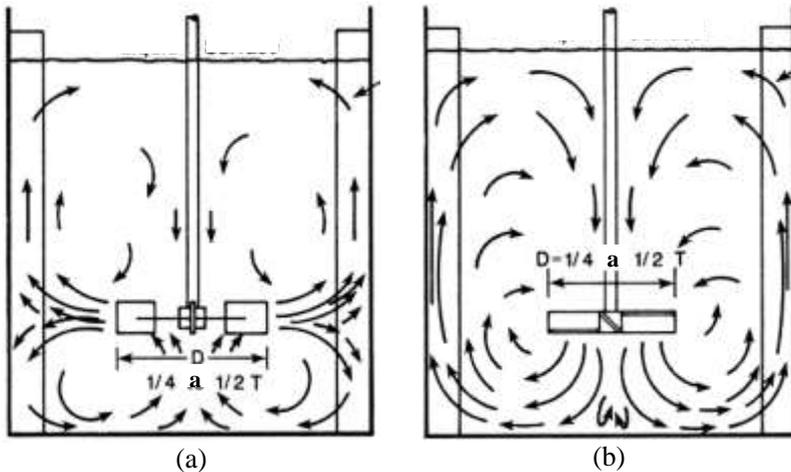
Aubin *et al.* (2004) avaliam modelos de turbulência a duas equações em um tanque com chicanas e fundo elíptico. Os autores reportam o insucesso em obter a solução para o caso do modelo RST.

Do que foi encontrado na literatura, um estudo do efeito da forma do fundo do reator com e sem chicanas seria interessante para analisar seus efeitos sobre o padrão de escoamento e sua influencia sobre parâmetros globais.

## 2.6 EFEITO DO TIPO DE AGITADOR

O componente mais importante para o delineamento da forma do escoamento, os agitadores são classificados em três grupos:

- **radiais**: predominantemente direcionam o fluxo radialmente (Figura 2-6(a), (c) e (e)). Em geral, são preferidos na dispersão gasosa e dissolução de materiais sólidos. Alguns exemplos são a turbina Rushton e turbina de pás retas;
- **axiais**: direcionam o fluxo ascendente ou descendente axialmente (Figura 2-6(b), (d) e (f)). São agitadores de baixo cisalhamento e baixo consumo de energia. Alguns exemplos são turbina de pás inclinadas e hélice marinha;
- **tangenciais**: produzem movimento rotacional exclusivamente. Tem nos processos que envolvem fluidos de alta viscosidade seu nicho. O exemplo clássico deste tipo de agitador é a Âncora;
- **mistos**: muitos fabricantes buscam desenhos de agitadores que aliam mais de uma característica de fluxo. Alguns modelos são conhecidos como de alta performance.



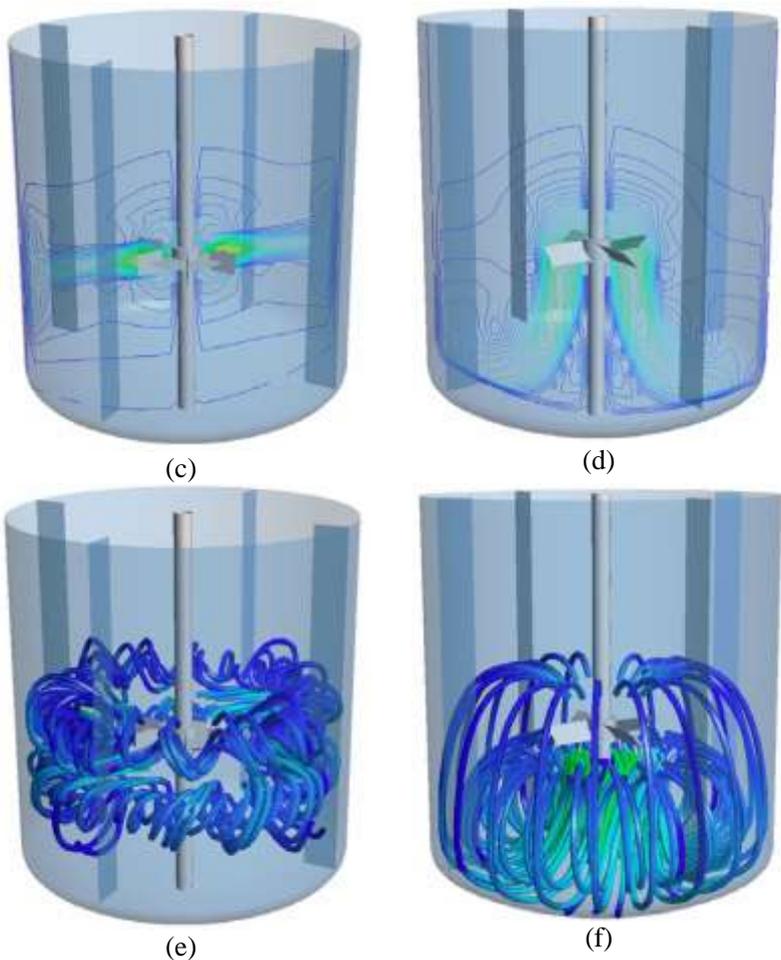


Figura 2-6 – Comparativo entre agitadores radiais (esquerda) e axiais (direita). De cima para baixo: esboço, plano de contornos de velocidade; linhas de corrente (SPOGIS, 2002; JAKOBSEN, 2008).

O padrão de escoamento que se espera dos agitadores radiais e axiais está ilustrado na Figura 2-6. Na Figura 2-6 (a) e (b), os vetores curvos indicam o padrão de escoamento para cada tipo de agitador. No caso do tipo radial, o agitador capta massa da direção axial em ambos os sentidos e a impulsiona em um jato coerente na direção da parede enquanto que no tipo axial a massa é captada acima do impelidor e impul-

sionada para baixo. Essa mesma descrição pode ser usada para a Figura 2-6 (c) e (d), onde são plotadas as linha de contorno da magnitude da velocidade. A Figura 2-6 (e) e (f) ilustra as linhas de corrente ao redor dos agitadores. É possível notar que no caso radial, dois grandes vórtices são formados, um acima e outro abaixo do plano do agitador. Esse par de vórtices é gerado pelas duas pontas de cada pá do agitador (neste caso as 6 pás da turbina Rushton). No caso axial, uma estrutura toroidal é formada a jusante do agitador devida ao retorno do jato descendente pela parede. Deste modo, é possível identificar claramente os dois tipos de agitadores pelo padrão de escoamento gerado.

No presente estudo, o agitador radial utilizado é a turbina Rushton enquanto que o axial é a hélice marinha. O primeiro tipo de impelidor é largamente usado o que resulta na disponibilidade grande de dados experimentais. Suas principais características são a alta produção de turbulência e cisalhamento. Assim, sua aplicação recai em casos de transferência de massa. A hélice marinha é um tipo especial de impelidor axial já que é o que apresenta o maior fluxo ou bombeamento e o menor cisalhamento entre os agitadores padrão. Portanto, suas aplicações são em processos onde, por exemplo, o quebraamento de partículas deve ser evitado.

## 2.7 MODELOS DE TURBULÊNCIA

Como foi visto na primeira parte desta revisão, o modelo de turbulência empregado é a chave para a obtenção de perfis locais de velocidade coerentes com o observado experimentalmente. Em resumo:

- Modelos a duas equações: são empregados com sucesso quando o objetivo são parâmetros globais como a distribuição dos tempos de residência ou quando o tanque possui chicanas.
- Modelos de transporte dos Tensores de Reynolds: são aplicáveis em todas as situações, inclusive onde há anisotropia, mas não apresentam acurácia próximo as paredes. Uma alternativa a esse comportamento é aplicar uma versão *Baseline* (BSL) do RST. Não foi encontrado na literatura nenhum exemplo deste modelo. Um problema comum encontrado nesta revisão é a dificuldade de convergência deste modelo.
- Modelos de Tensores de Reynolds em equilíbrio local (*Algebraic Stress Model*, ASM): também conhecidos como Modelo

Algébrico de Tensores de Reynolds, é uma simplificação do anterior. Tem grande potencial (e de acordo com que se viu nesta revisão, inexplorado) em tanques sem chicanas já que trata intrinsecamente da anisotropia.

- Abordagem LES: nesta abordagem, naturalmente são tratadas as maiores escalas do escoamento turbulento. As menores escalas são tratadas, em geral, com modelos algébricos de dissipação viscosa. Com os recursos atuais, ainda é um modelo dispendioso devido as restrições de malha refinada e passo de tempo pequeno que onera os processos de projeto e otimização. Algumas simulações apresentadas (ALCAMO *et al.*, 2005) indicaram que os resultados não ficaram totalmente conforme com os dados experimentais. Pode-se crer que a malha não é adequada na maioria dos casos.
- Abordagem híbrida LES-RANS: existem duas principais abordagens híbridas: a *Detached Eddy Simulation* (DES) e a *Scale-Adaptive Simulation* (SAS). Na primeira, a ideia é utilizar RANS próximo às camadas-limite e LES nas regiões longe (ou descoladas) da parede. Já no SAS, uma abordagem URANS (*Unsteady RANS*) que usa a escala de comprimento de Von Karman para mapear as regiões descoladas e instáveis do escoamento onde estruturas menores são resolvidas. (ANSYS CFX, 2010).
- Abordagem completa, DNS (*Direct Numerical Simulation*): este método consiste em resolver todo o espectro de escalas turbulentas.

No escopo deste estudo, as abordagens transientes (URANS, LES, DES, SAS, DNS) não são consideradas. Entretanto para um estudo mais aprofundado da estrutura do escoamento gerado pelos agitadores, esses modelos podem dar melhor resultado. Tampouco este trabalho pretende delinear todos os aspectos da turbulência. Ótimos textos disponíveis podem fornecer ao leitor uma análise mais profunda do assunto, entre eles: Lumley e Tennekes (1972), Hinze (1975), Wilcox (1998), Batchelor (2000), Pope (2000), Davidson (2004).

A solução do escoamento turbulento em todo seu espectro chama-se Simulação Numérica Direta ou DNS. A ideia desta abordagem é resolver todo o espectro de escalas turbulentas. Em outras palavras, se

propõe a resolver as equações de Navier-Stokes com um nível de discretização suficiente para capturar todas as escalas do escoamento turbulento. Na prática, mesmo com os recursos disponíveis hoje, simular um caso real é proibitivo. Como referência, o tamanho da malha a ser utilizada é proporcional a  $Re^{9/2}$ . Em outras palavras, apenas escoamento com  $Re$  relativamente baixos são possíveis. Usando uma expressão de Wilcox (1998), para um  $Re = 10^6$ , a malha exigida seria de  $133 \times 10^9$ ! Além da questão da malha, os passos de tempo devem ser muito baixos, da ordem da escala de tempo de Kolmogorov,  $t_K = (\nu/\varepsilon)^{1/2}$  (WILCOX, 1998). Devido a estas limitações, poucos grupos investem nesse tipo de abordagem. Neste tema podem-se destacar os trabalhos de Gillissen e van den Akker (2009) e Sbrizzai *et al.* (2006).

Sbrizzai *et al.* (2006) aplicaram DNS em um sistema sem chicanas agitado por um impelidor radial (Rushton 8 pás). O objetivo foi analisar a dispersão turbulenta de partículas (lagrangeanas) no reator operando a  $Re \approx 1600$ . A essas baixas rotações a deformação da superfície livre é mínima. O tamanho do elemento de malha utilizado é três vezes maior que a escala de Kolmogorov (WILCOX, 1998) calculada para este caso (48,5  $\mu\text{m}$ ). Não há justificativas claras a respeito desse valor, mas é fato que as exigências que fazem da simulação ser do tipo DNS não são satisfeitas. Além disso, os resultados devem ser analisados com cuidado já que apenas três revoluções do agitador foram simuladas, diminuindo a precisão do processo de média.

Um reator com chicanas agitado por um impelidor radial (Rushton 6 pás) é usado por Gillissen e van den Akker (2009). Os autores visavam criar um *benchmark* para as simulações numéricas de tanques agitados. Operando a um  $Re = 5000$ , foi utilizada uma malha com 109 elementos e um tempo total de 20 revoluções. As simulações levaram um mês para ser concluída em 128 CPUs. Este é o primeiro caso de DNS que atende todos os requisitos desta metodologia.

Um passo antes da DNS é a abordagem LES. Nesta abordagem, as menores escalas (dissipativas) não são resolvidas, mas modeladas através de alguma expressão (chamados modelos da escala sub-malha) mais simples já que as estruturas turbulentas nesta faixa de tamanho são ditas “universais” e isotrópicas. Conforme mais recursos computacionais se tornam disponíveis, esta abordagem se torna popular. A grande desvantagem de LES em relação à DNS é quando o transporte molecular está em jogo, pois este tipo de transporte é dominado pelas escalas de turbulência dissipativas. Em LES, a malha faz o papel de um filtro. To-

das as estruturas do escoamento de tamanho maior que o elemento de malha são resolvidas. O que for menor, será modelado através de um modelo sub-malha. Assim como na DNS, existem requerimentos para a escolha do tamanho dos elementos, já que o modelo de sub-malha a ser aplicado só será válido para a faixa de tamanho próxima aos turbilhões dissipativos.

Para que se tenha mais clara a diferença entre os dois modelos, vejamos a Figura 2-7. Neste gráfico estão plotados a energia dos turbilhões ( $E(\kappa)$ ) contra o inverso do tamanho dos turbilhões,  $\kappa$ , ou número de onda. Portanto, à esquerda estão as maiores estruturas que estão relacionadas aos maiores tamanhos encontrados em cada equipamento ou ao elemento motriz. No caso específico de um tanque agitado, se relaciona este tamanho (também conhecido como injetor de energia) com o diâmetro do agitador. A partir desta escala, em um processo de cascata, os turbilhões vão ficando cada vez menores e com menor energia até chegar a uma escala característica, a escala de Kolmogorov, a partir da qual a energia (cinética) é dissipada em energia térmica.

No caso da DNS, todas as escalas, inclusive as dissipativas, são resolvidas, não necessitando supor (ou modelar) nada acerca da estrutura turbulenta do escoamento. Em LES, a escolha do tamanho do elemento determina um filtro (linha dupla vertical na Figura 2-7) que define o tamanho das estruturas resolvidas (a esquerda da linha dupla na Figura 2-7) e das estruturas modeladas (a direita da linha dupla). No caso mais simples RANS, todo o espectro é modelado seja por uma equação algébrica (por exemplo, o comprimento de mistura de Prandtl) ou um sistema de equações de transporte como o modelo RST. Em outras palavras, a turbulência é descrita por grandezas globais, sendo necessários, então ajustes para cada situação.

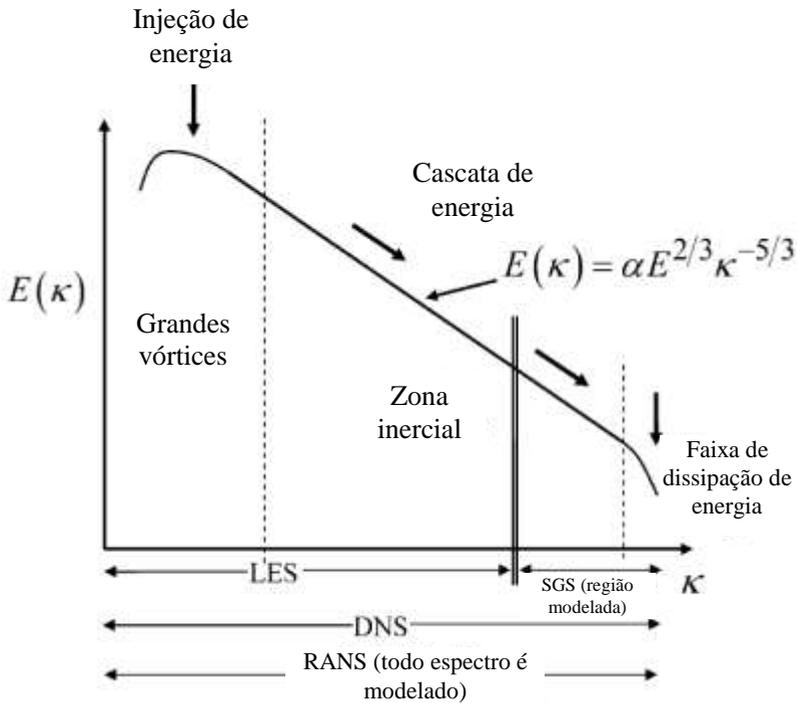


Figura 2-7 – Espectro de energia da turbulência em função do inverso do tamanho dos vórtices (WILCOX, 1998).

À primeira vista, os modelos RANS somente apresentam desvantagens. Entretanto, do ponto de vista de engenharia são muito úteis. Apesar de ser possível capturar cada estrutura do espectro da turbulência, na maioria dos casos o conhecimento desta estrutura não é relevante. Tendo em mente as hipóteses básicas de formulação de cada modelo, é possível empregá-los de forma a obter seu melhor desempenho para extrair as informações globais do escoamento que são necessárias para projetos e análise de processos. Em outras palavras, é preciso conhecer *a priori* a natureza do escoamento antes de se escolher o modelo de turbulência RANS. Como consequência, pode-se afirmar que não existe um modelo universal. Ou ainda (WILCOX, 1998): “(...) um modelo ideal

deve conter um mínimo de complexidade para capturar a essência dos fenômenos relevantes.”

O conceito matemático por trás dos modelos RANS foi concebido por Reynolds (1895) a partir de seu clássico experimento do escoamento de água em um tubo. Ele percebeu que o campo de velocidade instantânea poderia ser decomposto em dois campos: um campo de velocidade média no tempo e um campo flutuante, ou:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) + \mathbf{u}'(\mathbf{x}, t) \quad (2-13)$$

Para ilustrar este conceito supõe-se que o gráfico da Figura 2-8 represente a medida instantânea da velocidade em um ponto do escoamento ao longo do tempo.

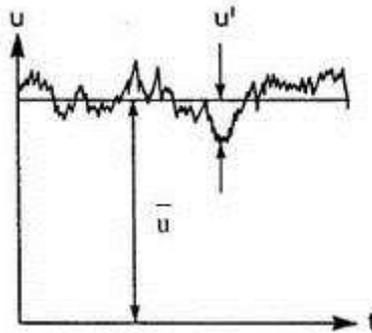


Figura 2-8 – Exemplo de medida de velocidade em um ponto do escoamento ao longo do tempo (WILCOX, 1998).

Portanto, a média  $\bar{\mathbf{u}}$  é tomada em um intervalo de tempo arbitrário, mas suficientemente grande para se obter uma média estatisticamente representativa. Quando se usa a hipótese de turbulência estacionária, este intervalo de tempo é, em tese, infinito. Na prática, o intervalo equivale ao tempo do processamento do fenômeno. Esta é a abordagem utilizada nesta tese.

Quando esta média é tomada em um intervalo de tempo finito e da ordem das variações lentas do escoamento (não relacionadas com as

flutuações turbulentas, mais rápidas) diz-se que o modelo é RANS não permanente ou URANS (*Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes*). Esta abordagem não será utilizada nesta investigação.

No contexto de modelos RANS, pode-se classificar os modelos em quatro grandes classes:

1. Modelos algébricos ou a Zero Equação;
2. Modelos a Uma Equação;
3. Modelos a Duas Equações;
4. Modelos de Transporte dos Tensores de Reynolds

A seguir, uma breve descrição de cada classe.

**Modelos Algébricos.** Estes modelos são, em sua grande maioria, baseados no conceito de comprimento de mistura de Prandtl. Esse comprimento de mistura é utilizado para o cálculo de uma viscosidade turbulenta via expressão algébrica. A viscosidade turbulenta comporta toda a fenomenologia da turbulência. Este nome vem da analogia com a viscosidade dinâmica. Essa analogia também é conhecida por aproximação de Boussinesq (ANSYS CFX, 2010). Essa aproximação também é utilizada nos modelos a uma e a duas equações. Atualmente, são nulos os exemplos de aplicação deste tipo de modelo na Indústria de Processamento Químico. Estes modelos podem ser uma boa opção para condição inicial, mas nunca para uma solução final de um equipamento real.

**Modelos a Uma Equação.** A variável transportada nesta classe de modelos é, em geral, a própria viscosidade turbulenta advinda da aproximação de Boussinesq ou a energia cinética turbulenta. Este tipo de modelo de turbulência tem sua aplicação mais popular em escoamentos aerodinâmicos. Portanto, sua aplicação em equipamentos industriais não é recomendada.

**Modelos a Duas Equações.** Esta é a classe, de longe, mais popular de todas as aplicações de CFD. Estes modelos aliam boa convergência, baixa demanda de memória e respostas razoáveis quando o que interessa é o comportamento global do escoamento. Uma lista longa de modelos se enquadra nesta categoria. Dentro desta categoria, o modelo  $k-\epsilon$  se destaca como um padrão tácito de aplicações práticas. A grande deficiência deste modelo é sua grande sensibilidade a escoamentos rotativos e com grandes curvaturas nas linhas de corrente. Outro ponto fraco deste modelo é na descrição do escoamento próximo a paredes. Essa

deficiência se deve ao fato da equação para a dissipação da energia cinética turbulenta não ser integrável até a parede, pois a equação de  $\varepsilon$  não reproduz corretamente os processos viscosos próximos a parede. Outro modelo comumente usado é o  $k-\omega$ . Este foi o primeiro modelo a duas equações desenvolvido por Kolmogorov em 1942 (WILCOX, 1998). A segunda variável,  $\omega$ , do modelo é conhecida como frequência da turbulência. Por esta variável ser integrável até a parede (seu valor na parede é nulo) é uma ótima opção para escoamentos confinados. Por outro lado, sua deficiência é exatamente longe das paredes. Uma combinação dos pontos fortes dos dois modelos foi proposta por Menter (1994), criando o modelo SST (*Shear Stress Transport*). Além das vantagens dos dois modelos anteriores, o modelo é capaz de prever pontos de descolamento em superfícies lisas através da inclusão no modelo dos efeitos do transporte da tensão cisalhante turbulenta. Na prática, isso evita a sobrepredição da viscosidade turbulenta. Fisicamente, o processo de difusão turbulenta (de espécies, de energia, etc...) não é sobrepredito como no caso do  $k-\varepsilon$ . Maiores detalhes serão apresentados no capítulo de modelos.

**Modelo de Transporte de Tensores de Reynolds.** Também conhecido como fechamento de segunda ordem é de longe o modelo RANS mais preciso. Ao contrário das alternativas anteriores, não usa a aproximação de Boussinesq para condensar toda informação da turbulência em um parâmetro. Ao invés disso, resolve o transporte de cada componente do tensor tensão turbulento (ou de Reynolds) permitindo, assim, prever o comportamento tridimensional da turbulência. Em outras palavras, este modelo naturalmente trata de escoamentos rotacionais, curvaturas nas linhas de corrente, fluxos secundários, etc. Sendo assim, sete equações diferenciais parciais devem ser resolvidas simultaneamente. Em consequência, muito esforço computacional e dificuldade de convergência são agregados ao sistema de equações. Sua formulação pode ser encontrada no capítulo 6 de Wilcox (1998). Uma simplificação às equações de transporte — aproximação dos termos de transporte a uma situação de equilíbrio local (WALLIN e JOHANSSON, 2000) — leva a uma versão algébrica do modelo de Tensores de Reynolds (ASM). Esta versão foi pouco empregada até o momento por ser reconhecidamente de difícil implementação devido aos componentes do tensor serem funções implícitas de outros componentes. Somente duas aplicações em tanques agitados foram encontradas (BAKKER e VAN DEN AKKER, 1994; ARMENANTE *et al.*, 1997). Uma solução para a dificuldade de implementação do ASM é explicitar os tensores em fun-

ção de outros parâmetros (taxa de deformação, vorticidade, etc...). Esta solução chamada de *Explicit Algebraic Stress Model* (WALLIN e JOHANSSON, 2000) ou *Explicit Algebraic Reynolds Stress Model* (EARSM) permite manter algumas características originais do modelo diferencial, mas com um custo computacional reduzido. Este é um dos modelos utilizados nesta tese. Não foram encontradas aplicações deste modelo em tanques agitados. Sua formulação será descrita no capítulo de Modelos.

O modelo semi-empírico de Correção de Curvatura (SPALART e SHUR, 1997; SMIRNOV e MENTER, 2008) é um artifício nos modelos de turbulência (principalmente nos baseados em viscosidade turbulenta) para levar em conta os efeitos de curvatura e rotação do escoamento. Este modelo foi empregado com sucesso em casos de um duto rotativo, um duto curvo, hidrociclone, um compressor centrífugo e escoamento em ponta de asa (SMIRNOV e MENTER, 2008). Este modelo pareceu promissor para o presente caso e será investigado nesta tese. Sua formulação será apresentada no Capítulo de Modelos.

## 2.8 MODELOS MULTIFÁSICOS

Sistemas heterogêneos escoando em tanques agitados impõem dois tipos de desafio na modelagem:

1. captura da forma da superfície livre, principalmente nos casos sem chicana;
2. descrição da evolução da densidade de área interfacial entre a fase dispersa e a fase contínua em todo tanque.

Um terceiro desafio surge quando as duas situações acima fazem parte do mesmo problema. Em casos de três fases como esse, são necessários modelos de interação de segunda ordem em locais onde as três fases coexistem. Por exemplo, qual o comportamento de uma gota de óleo dispersa em água quando atinge a superfície livre? Não há muito conhecimento nesta área ainda. Entretanto, tentativas de modelar o escoamento trifásico já foram publicadas, utilizando a hipótese que essas interações de segunda ordem são desprezíveis. Mesmo interações de primeira ordem entre duas fases dispersas não são completamente compreendidas.

Wang *et al.* (2006) analisam um sistema líquido-líquido-sólido em um tanque com chicanas agitado por uma turbina Rushton, conside-

rando que a interação entre gotas e partículas sólidas é idêntica a de bolhas de gás e partículas sólidas.

Murthy *et al.* (2007) simulam o escoamento líquido-gás-sólido em um tanque com chicanas agitado por diferentes turbinas. Os autores desprezam as interações entre as fases dispersas.

Abu-Farah *et al.* (2010) apresentam o primeiro exemplo de aplicação de um escoamento líquido-líquido-gás com formação de superfície livre conforme o foco deste trabalho. Os autores levam em consideração a DTP final das gotas assumindo que quebra e coalescência estão em equilíbrio. Hipótese essa pertinente quando se busca o estado permanente do escoamento. A desvantagem é que não se pode utilizar esta abordagem quando não se tem conhecimento prévio da DTP através de experimentos. A crítica a este estudo fica por conta do uso do modelo de turbulência  $k-\epsilon$  que é inadequado para um escoamento em tanque sem chicanas.

**Superfície Livre.** Um modelo de superfície livre deve conter um esquema numérico para descrever a forma e a localização da superfície, um algoritmo de evolução no tempo e espaço e permitir a aplicação das condições de salto na superfície. Duas classes de modelos se destacam:

- métodos de interface: a interface é rastreada de maneira semelhante a um método lagrangeano;
- métodos de volume: uma equação de transporte é utilizada para manter o volume constante de uma das fases.

No primeiro método, uma “nuvem” de pontos é usada para descrever a interface. A densidade de pontos desta nuvem é definida inicialmente pelo usuário e grandemente influencia na qualidade dos resultados. Esta nuvem é imersa na malha euleriana onde o escoamento é resolvido. Então, um balanço de forças locais é aplicado em cada ponto de forma a obter sua posição em cada intervalo de tempo. Este método é computacionalmente eficiente já que requer poucos cálculos para obter a evolução da superfície livre. Entretanto, não é conservativo em sua natureza e, portanto, deve ser usado com cuidados especiais.

Já os métodos de volume usam a própria malha euleriana para capturar a interface através de uma variável indicadora de fase. Nos elementos de malha em que o fluido preenche completamente, seu valor é unitário. Nos elementos ausentes de fluido, seu valor é nulo. Nos elementos onde a ocupação é parcial, seu valor vem do balanço de volume

da equação de transporte do indicador de fase. O indicador de fase pode ser promediado, coincidindo-se com a fração volumétrica ou pontos, preenchendo os elementos da malha de acordo com sua quantidade local.

Entre os mais populares estão o método *Volume-of-Fluid* (VOF) de Hirt e Nichols (1981) e o *Level-Set* de Osher e Sethian (1988). Os dois métodos são similares, mas há uma diferença de como é definida a interface, enquanto o VOF usa a fração volumétrica, o *Level-Set* usa a distância para a interface. Numericamente, o *Level-Set* tem um comportamento mais suave e contínuo permitindo o cálculo preciso de gradientes espaciais sobre a interface (como, por exemplo, para calcular a curvatura local). Mas o seu indicador deve ser reinicializado periodicamente, tornando o processo não conservativo em massa (ZWART, 2005). Essa é outra diferença marcante entre estes dois métodos: o VOF força a conservação da massa em cada instante de tempo. No presente estudo, o método VOF foi escolhido devido a essa característica. Mais detalhes de sua implementação estarão no Capítulo de Modelos.

**Densidade de Área Interfacial.** Este tema é vasto e de forma alguma se pretende discorrê-lo todo aqui. Mas no que diz respeito à classe de equipamento tratado neste texto alguns aspectos são analisados. Dependendo da morfologia do escoamento multifásico que ocorre no sistema, diferentes tratamentos são necessários. Neste caso específico, tem-se, além da interface da superfície livre discutida anteriormente, uma fase dispersa em outra contínua. As duas formas clássicas de se modelar o escoamento multifásico disperso são:

- Euleriana
- Lagrangeana

Na Euleriana, cada fase é considerada como um meio contínuo e todas compartilham o mesmo espaço no domínio. Esta abordagem considera as fases como contínuos interpenetrantes. Emerge deste conceito um conjunto de equações de Navier-Stokes para cada fase.

A abordagem Lagrangeana prevê que as fases dispersas sejam descritas por uma equação de trajetória, muito mais simples que as equações de Navier-Stokes. Entretanto, essa descrição, em sua forma clássica, só é válida em concentrações volumétricas muito baixas, a não ser que modelos de colisão entre partículas sejam considerados.

A fase dispersa pode ser considerada:

- monodispersa ou polidispersa;
- fluida ou sólida.

O primeiro item diz respeito a como o modelo aborda a distribuição de tamanho da fase dispersa. A fase monodispersa é aquela cuja DTP é descrita por um valor médio fixo. A fase polidispersa é aquela cuja DTP é um conjunto de classes de tamanho podendo ou não variar de acordo com as condições do escoamento. Na prática, a maioria das fases dispersas são polidispersas a não ser que sejam cuidadosamente classificadas. Entretanto, atualmente, quando se fala em modelagem de escoamentos multifásicos com fins práticos de engenharia, se pensa em fases dispersas com diâmetro médio constante, monodispersas. Há dois motivos se deve esse fato: falta de recursos computacionais (cada classe de tamanho requer um conjunto de equações de Navier-Stokes a mais) e; falta de modelos bem estabelecidos para descrever a fase polidispersa (quando a quebra e a coalescência estão em jogo). A descrição Lagrangeana naturalmente pode descrever fases polidispersas mas sua limitação quanto a concentração da fase dispersa a impede de ser usada mais amplamente. Recentemente, métodos tipo *Discrete Element Method* (CUNDALL E STRACK, 1979) vêm ganhando espaço na análise de processos multifásico dispersos. Neste método, cada partícula ou conjunto homogêneo de partículas é rastreado através de um balanço de forças. A desvantagem deste método é quando o sistema contém muitas partículas aumentando muito o requerimento de memória. Além do mais, este método é intrinsecamente transiente, tornando as simulações longas.

O segundo item diz respeito a se a fase dispersa se deforma com o campo de escoamento local (fluida) ou é uma partícula rígida. Em função deste comportamento diferentes conjuntos de modelos para os fenômenos interfaciais (arraste, transferência de calor e massa) são propostos na literatura. No que diz respeito ao tema este estudo, a fase dispersa é fluida. Modelos de arraste para este tipo de escoamento serão apresentados no Capítulo de Modelos.

A alternativa do ponto de vista Euleriano é o emprego de Equação de Balanço Populacional (*Population Balance Equation*, PBE) para descrever a fase polidispersa. Nesta abordagem cada equação de balanço populacional é uma equação de transporte para a classe de tamanho (RAMKRISHNA, 2000).

Embora, tradicionalmente CFD e PBE venham sendo estudadas de forma paralela, elas estão intimamente ligadas quando o assunto é escoamento multifásico. Além disso, CFD é importante quando se quer uma descrição espacial da PBE. Os termos advectivos da PBE passam a ser variáveis no espaço. Assim, na última década, a solução acoplada das duas modelagens vem aparecendo com mais frequência na literatura. O problema de acoplamento passa pelo fato de resolver a PBE de forma eficiente dentro de um loop de CFD. Ou seja, em geral, se tem um código CFD e se deseja inserir nele uma PBE.

Existem várias maneiras de se fazer esse acoplamento. Alguns autores — (DAMIAN, 2007) e (SILVA, 2008) — fazem um amplo apanhado sobre esse acoplamento. Basicamente, pode-se resumir este acoplamento no seguinte processo: dada uma DTP inicial, CFD calcula os campos de velocidade, pressão e turbulência na fase contínua, que por sua vez são usados pela PBE para calcular a nova DTP. Esse processo iterativo vai se repetindo até a convergência. Pode-se também incluir energia (temperatura), composição, etc.

Ainda existe a possibilidade de se modelar a velocidade da fase dispersa de maneira homogênea ou heterogênea ao longo da DTP. A abordagem homogênea lança mão de apenas um sistema de Navier-Stokes para descrever a velocidade da fase dispersa. Em outras palavras, todas as partículas experimentam o mesmo campo de velocidade e os termos de transferência interfacial usam o diâmetro médio de Sauter local. Com essa abordagem, não é possível obter, por exemplo, a segregação por tamanhos. Esse fato é verdade principalmente quando o sistema é composto de gás contínuo e líquido ou sólido disperso onde o tempo de relaxação das partículas é comparável à escala de tempo inercial. A grande vantagem desta abordagem é que ela permite ter um campo de diâmetros e, por tanto, distintas densidades de área interfacial, que por sua vez, influenciam nos termos de troca através da interface.

Já a abordagem heterogênea, pode ainda ser classificada de completa, onde todas as classes de tamanho possuem seu campo de velocidade, ou incompleta, onde grupos de classe de tamanho compartilham o mesmo campo de velocidade. A abordagem heterogênea incompleta utilizando o método das classes dentro do código ANSYS CFX é conhecida como MUSIG (*Multiple Size Group Model*) não homogêneo (LO *et al.*, 2000). A motivação deste método é a redução do custo computacional gerado no heterogêneo completo (FRANK *et al.*, 2005).

Outro desafio a ser superado em um balanço populacional é a descrição dos processos de quebra e coalescência. Araujo (2006) faz um extenso apanhado dos modelos disponíveis na literatura. A discussão destes modelos está além do escopo deste texto.

Uma alternativa mais simples para levar em consideração a DTP da fase polidispersa é o modelo *Drift-Flux* ou *Algebraic Slip Model* (ASM). Nesta abordagem, o escoamento multifásico é considerado como um escoamento de uma mistura homogênea. Os distintos tamanhos são tratados através de balanços locais de forças de arraste e peso para se obter uma velocidade de deslizamento de cada fase dispersa em relação ao meio contínuo. Até onde se pode verificar, o ASM foi empregado em tanques agitados sem chicanas somente por Abu-Farah *et al.* (2010).

Do ponto de vista físico, os modelos de balanço populacional e ASM não são equivalentes. O primeiro trata da evolução de tamanhos de uma fase polidispersa, podendo considerar ou não os transportes advectivo e difusivo de cada classe. O segundo é uma simplificação do modelo de dois fluidos de Ishii (1975). Essa simplificação permite a adição de mais fases ao modelo sem onerar demasiadamente o tempo computacional ou acrescentar dificuldades à convergência. Por outro lado, quando a distribuição de tamanhos da fase polidispersa não apresenta mudanças (por exemplo, os processos de quebra e coalescência se encontram em equilíbrio) o ASM pode ser empregado como um modelo de movimento de um escoamento polidisperso.

## 2.9 CONCLUSÕES DESTE CAPÍTULO

Da revisão realizada neste capítulo, foi observado que:

- tanques com chicanas, independente do agitador, podem ser modelados com modelos a duas equações para capturar o comportamento do escoamento médio e parâmetros globais;
- tanques sem chicanas apresentam um desafio maior para a modelagem do escoamento com respeito a estrutura da turbulência. Poucas referências acerca deste sistema foram encontradas;
- o estudo da superfície livre em tanques sem chicanas passam necessariamente por uma modelagem da turbulência adequa-

da, pois a forma da interface é diretamente dependente do padrão de escoamento no interior do tanque;

- o grande desafio desta área de conhecimento é o acoplamento do escoamento de superfície livre com a fase líquida sendo heterogênea. Uma referência foi encontrada utilizando o modelo ASM.
- poucas referências foram encontradas acerca da aplicação da PBE em códigos CFD.



### 3 MODELAGEM MATEMÁTICA

Este capítulo trata da modelagem matemática empregada para analisar o escoamento no interior de tanques agitados. De acordo com a conclusão do que foi revisto na literatura no capítulo anterior, aqui serão expostos os modelos e uma breve descrição de cada um deles.

O equacionamento é baseado em dois tipos de equações: leis fundamentais de conservação e modelos de fechamento. Os casos considerados aqui são todos isotérmicos, não necessitando da equação de conservação de energia. Assim, as equações fundamentais são (PINTO e LAGE, 2001):

- conservação da massa: princípio de Lavoisier;
- conservação da quantidade de movimento: segunda lei de Newton.

Nos casos de escoamentos multifásicos, a conservação da massa é aplicada a cada uma das fases ou a uma das fases e a massa global. A conservação de quantidade de movimento pode ser aplicada em cada uma das fases ou, através de um Modelo Homogêneo (ANSYS CFX, 2010), considerar todos os fluidos viajando a mesma velocidade (arraste infinito). Um caso típico de aplicação do Modelo Homogêneo é quando há um escoamento estratificado, como é o caso de escoamento de superfície livre. Mesmo em caso onde há uma fase dispersa em uma contínua, é possível aplicar este modelo quando a inércia das partículas dispersas é pequena.

Em todos os casos onde o foco foi calcular a posição da superfície livre, o Modelo Homogêneo é prontamente aplicado.

Nos casos onde a fase dispersa está presente, o modelo *Algebraic Slip Model* ou ASM (MANNINEN e TAIASSALO, 1996) foi aplicado conforme Abu-Farah *et al.* (2010). Este modelo também é conhecido por Modelo de Mistura (ISHII e HIBIKI, 2006).

Os modelos de fechamento ficam por conta de descrever a turbulência. Após revisão da literatura e seguindo a proposta deste estudo de buscar obter respostas rápidas para o escoamento dois modelos de turbulência modificados serão utilizados:

- SST com correção de curvatura

- BSL-EARSM com correção de curvatura

### 3.1 CONSERVAÇÃO DA MASSA

A conservação da massa para cada fase é dada por (ANSYS CFX, 2010):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i) + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \mathbf{u}_i) = 0 \quad (3-1)$$

onde,

$\alpha_i$  é a fração volumétrica da fase  $i$ ;

$\rho_i$  é a densidade da fase  $i$ ;

$\mathbf{u}_i$  é o vetor velocidade da fase  $i$ .

Considera-se para esta equação que não haja termos-fonte de massa nem transferência de massa entre quaisquer fases  $i$ .

Para o Modelo Homogêneo, considera-se que cada fase  $i$  experimenta o mesmo campo de velocidades:

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{u}, 1 \leq i \leq N_f \quad (3-2)$$

onde  $N_f$  é o número de fases do problema.

Aplicando a equação da conservação da massa, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i) + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \mathbf{u}) = 0 \quad (3-3)$$

A restrição de que a soma das frações volumétricas é a unidade:

$$\sum_1^{N_f} \alpha_i = 1 \quad (3-4)$$

### 3.2 CONSERVAÇÃO DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO

A equação da quantidade de movimento para o escoamento de duas ou mais fases é dado por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i \mathbf{u}_i) + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i) \\ = -\alpha_i \nabla p - \nabla \cdot (\alpha_i \bar{\boldsymbol{\tau}}_i) + \alpha_i \rho_i \mathbf{g} + \mathbf{F}_i \\ + \mathbf{S}_i \end{aligned} \quad (3-5)$$

onde,

$p$  é a pressão;

$\bar{\boldsymbol{\tau}}_i$  é o tensor tensão do fluido;

$\mathbf{g}$  é a aceleração da gravidade;

$\mathbf{F}_i$  são forças devidas a transferência interfacial de quantidade de movimento entre as fases;

$\mathbf{S}_i$  são termos-fonte devido à forças de campo externas, como, por exemplo, força de Lorentz, força de Coriolis ou força centrífuga.

No Modelo Homogêneo, este conjunto de equações é somado sobre todas as fases utilizando a definição (3-2) e considerando fluido newtoniano.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) \\ = \nabla \cdot (\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) - \nabla p + \rho \mathbf{g} \\ + \mathbf{S}_M \end{aligned} \quad (3-6)$$

onde,

$\rho = \sum_1^{N_f} \alpha_i \rho_i$  é a densidade média local;

$S_M$  são termos-fonte devidos a forças de campo externo como na (3-5)

$\mu = \sum_1^{N_f} \alpha_i \mu_i$  é a viscosidade dinâmica média local.

As regras de mistura acima são válidas para misturas ideais. No contexto deste estudo, essas regras serão aplicadas tanto no caso de superfície livre (o que não traz grande imprecisão, já que o volume ocupado pela superfície livre é pequeno) quanto no caso da dispersão líquido-líquido. No caso particular da dispersão, regras de mistura mais precisas (VERMEULEN *et al.*, 1955) podem ser usadas.

### 3.3 MODELOS DE ESCOAMENTO MULTIFÁSICO

Os modelos apresentados aqui tratam dos dois fenômenos que fazem parte do escopo deste trabalho: a modelagem da forma da superfície livre e a modelagem da dispersão de fases imiscíveis.

#### 3.3.1 Escoamentos de superfície livre – modelo homogêneo

Como comentado no capítulo anterior, este trabalho utiliza-se um modelo tipo VOF (*Volume of Fluid*) com um esquema de captura de interface. A equação de VOF é uma equação cuja propriedade transportada é uma variável contínua de indicador de fase. Ao resolver uma equação de transporte, esquemas de advecção de alta ordem são necessários para a captura adequada da posição da interface. Quando se aplica uma equação de transporte de uma variável contínua que possui fisicamente descontinuidades, o esquema de advecção deve conter algum artifício para aproximar o campo resultante em algo próximo do real. Este estudo utiliza o esquema de Zwart *et al.* (2003) que apresenta características compressivas independentes do passo de tempo utilizado, conforme apresentado na Seção 4.3.2.

Um modelo de superfície livre usualmente utiliza como base o Modelo Homogêneo. Assim, a equação de conservação da quantidade de movimento resultante é a soma de cada equação de cada fase conforme Equação (3-6).

Já a equação do balanço de massa é usualmente a somatória das equações de todas as fases. Entretanto, para fins de implementação nu-

mérica, ela não é ideal (ZWART *et al.*, 2003). Neste contexto Zwart *et al.* (2003) propõem o uso de uma equação da continuidade do volume. Esta consiste em, antes de proceder com a soma sobre todas as fases, dividir a equação da massa para cada fase por  $\rho_i$ .

Considerando que o sistema de superfície livre neste trabalho trata-se de líquido-gás, substituiu-se os índices de fase para melhor leitura, o sistema de equações final é:

$$\frac{\partial(\alpha_l \rho_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \mathbf{u}) = S_{lg} \quad (3-7)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = S_{lg} \left( \frac{1}{\rho_g} - \frac{1}{\rho_l} \right) \quad (3-8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) - \nabla p + \rho \mathbf{g} \quad (3.6)$$

$$\alpha_l + \alpha_g = 1 \quad (3-9)$$

Nota-se que a Equação (3-6) não muda em relação a seção anterior. A Equação (3-7) representa fisicamente a Equação (3-3), apenas com a indicação explícita da fase, assim como a Equação (3-4) em relação à (3-9). O parâmetro  $S_{lg}$  é o termo-fonte de massa que cruza a interface. No presente caso este termo é sempre nulo. O escoamento é considerado incompressível para as duas fases.

### 3.3.2 Escoamento polidisperso – modelo de mistura

A modelagem da dispersão de partículas em um meio contínuo pode ser abordada em vários níveis. Em geral, escolhe-se o mais simples que permite observar os efeitos globais dos fenômenos mais importantes.

Um parâmetro importante na escolha do modelo é a morfologia do escoamento ou como a interface entre as fases se conforma. Uma das escolhas possíveis foi apresentada no item anterior para o escoamento de superfície livre.

Para o escoamento de partículas dispersas em um meio contínuo muitas abordagens são possíveis conforme pode-se observar em Gidas-pow (1994), Ishii e Hibiki (2006), Brennen (2009), Rosa (2011). Neste texto, foi escolhido o modelo conhecido como *Algebraic Slip Model* (ASM) ou *Drift-Flux Model*. Esse modelo foi introduzido por Ishii (1977) e aprimorado por Manninen e Taivassalo (1996). Ele será aplicado no caso estudado por Pinto (2006) com hélice marinha conforme Abu-Farah *et al.* (2010) o aplicou em um tanque agitado por uma turbina Rushton. A escolha pelo ASM no caso de Pinto (2006) se deve ao fato de se buscar explicar o comportamento dinâmico da DTP final já conhecida não requerendo modelar processos de quebra e coalescência, ao menos nesta primeira abordagem.

Já para o caso com turbina Rushton estudado por Yang *et al.* (2000) será aplicado o modelo MUSIG (LO *et al.*, 2000) com os modelos padrões do ANSYS CFX (2010). Também por ser uma primeira abordagem, não foram conduzidos estudos de efeito dos modelos de quebra e coalescência, modelo de turbulência ou número de classes sobre os resultados finais deste caso particular.

### 3.3.2.1 *Algebraic Slip Model (ASM)*

O conceito por trás do ASM é considerar que o escoamento multifásico se comporta como uma mistura ao invés de cada fase independente. Como consequência é possível simplificar grandemente o sistema de equações do escoamento multifásico. Essa simplificação vem do conhecimento a priori do comportamento local de cada fase (ISHII e HIBIKI, 2006). Esse modelo é apropriado quando a escala de tempo para se alcançar uma velocidade de deslizamento de equilíbrio (velocidade terminal) é pequena. Em outras palavras, esse modelo é aplicável a partículas cuja inércia é baixa. O número adimensional que rege este comportamento é o Stokes. Como será visto no Capítulo de Resultados, o número de Stokes das partículas geradas por Pinto (2006) permite seu uso.

Isto posto, resumem-se as restrições deste modelo:

- forças além da de arraste são desprezíveis;
- partículas alcançam sua velocidade terminal rapidamente.

Como no caso dos modelos de superfície livre, o ASM tem por base o modelo Homogêneo que trata todas as fases como um todo atra-

vés de equações globais de conservação de massa e quantidade de movimento (e energia, quando for o caso). A diferença neste caso é que cada fase dispersa é descrita através de uma equação de massa cuja velocidade possui uma contribuição da mistura  $\mathbf{u}$  e uma velocidade de “deriva” (ou *drift*, em inglês).

$$\mathbf{u}_{D,i} = \mathbf{u}_i - \mathbf{u} \quad (3-10)$$

Esta velocidade pode ser encarada como uma velocidade relativa entre a fase  $i$  e a velocidade do centro de massa da mistura.

Definindo a velocidade de deslizamento (*slip*, em inglês), ou a velocidade relativa da fase  $i$  e da fase contínua:

$$\mathbf{u}_{S,i} = \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_c \quad (3-11)$$

As duas velocidades acima, de desvio e deslizamento, estão relacionadas através da expressão abaixo:

$$\mathbf{u}_{D,i} = \mathbf{u}_{S,i} - \sum_i Y_i \mathbf{u}_{S,i} \quad (3-12)$$

onde  $Y_i$  é a fração mássica da fase  $i$ .

Assim, substituindo a (3-10) na (3-3) e considerando a fração mássica no lugar na fração volumétrica, obtém-se:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho Y_i (\mathbf{u} + \mathbf{u}_{D,i})] = 0 \quad (3-13)$$

Vale notar que o uso de fração volumétrica ou mássica é indistinguível em termos matemáticos. Depende muito da filosofia de implementação do código em questão. Por exemplo, o ANSYS Fluent utiliza a formação com fração volumétrica, conforme Ishii e Hibiki (2006), pois usa a implementação do modelo de dois fluidos (ISHII, 1975). Enquanto que o ANSYS CFX utiliza o ferramental de fluidos multi-componentes.

Para fechar o sistema de equações, deve ser calculada a velocidade relativa. Ela é obtida da equação da quantidade de movimento de cada fase após sua manipulação algébrica em conjunto com a equação global de forma a eliminar o termo de gradiente de pressão. Considerando que:

- a fase dispersa alcança a velocidade terminal rapidamente, então o termo transiente da velocidade relativa pode ser desprezado;
- a seguinte aproximação é feita:  $(\mathbf{u}_i \cdot \nabla)\mathbf{u}_i \approx (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$ ;
- as tensões viscosas e de difusão aparente são omitidas pois são pequenas quando comparadas aos outros termos.

Com essas simplificações se obtém uma equação de equilíbrio simplificada que permite calcular algebricamente a velocidade relativa dada uma lei de arraste viscoso. A forma final da expressão algébrica de equilíbrio é:

$$|\mathbf{u}_{s,i}|\mathbf{u}_{s,i} = -\frac{4}{3} \frac{d_p}{\rho_c C_D} (\rho_i - \rho) \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + [\mathbf{u} \cdot \nabla]\mathbf{u} - \mathbf{g} \right) \quad (3-14)$$

Os efeitos de turbulência são desprezados na obtenção da velocidade relativa. Entretanto, indiretamente, eles são levados em conta através do termo difusivo da equação da massa de cada fase dispersa através de uma aproximação de Boussinesq (viscosidade turbulenta) como no caso de um escoamento multicomponente (ANSYS CFX, 2010).

### 3.3.3 Escoamento polidisperso – Modelo MUSIG

O modelo MUSIG é o algoritmo desenvolvido por Lo *et al.* (2000) para acoplar de forma eficiente as equações de balanço populaci-

onal (PBE) e as equações de conservação de CFD. Portanto, o modelo MUSIG permite que o código CFD lide com fases polidispersas que apresentem DTP variável. A variação da DTP pode se dar de várias formas, tais quais (RAMKRISHNA, 2000):

- quebra;
- coalescência e/ou agregação;
- nucleação;
- expansão/contração.

Os dois últimos mecanismos não estão implementados no ANSYS CFX (2010), mas podem ser incorporados via codificação do usuário. Para o presente caso, nenhum dos dois mecanismos é relevante (Yang *et al.*, 2000).

### 3.3.3.1 A equação de fração de tamanho

Esta seção tem a intenção de apresentar a equação final do modelo MUSIG que é a equação de fração de tamanho. Esta equação é desenvolvida a partir da PBE para incorporar a fração volumétrica da fase dispersa e converter a densidade numérica de partículas em fração de tamanho. (ANSYS CFX, 2010) A equação final é:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_d \alpha_d f_i) + \nabla \cdot (\rho_d \alpha_d \mathbf{u}_d f_i) = S_i \quad (3-15)$$

onde

$f_i$  é a fração de tamanho da classe  $i$ ;

$d$  se refere a uma propriedade global da fase dispersa;

$S_i$  são os termos-fonte devidos a quebra e coalescência.

Os termos-fonte  $S_i$  representam o surgimento ou desaparecimento líquido de uma classe de tamanho  $i$  devido aos processos de quebra e coalescência. As quatro formas de contribuição para este termo-fonte são:

- taxa de surgimento devido a quebra de partículas maiores;
- taxa de desaparecimento devido a quebra da classe  $i$ ;
- taxa de surgimento devido a coalescência de partículas menores;
- taxa de desaparecimento devido a coalescência com outras partículas.

Pelo princípio da conservação, a soma das taxas devidas a quebra sobre todas as classes é nula. O mesmo vale para a coalescência.

A seguir são apresentadas breves descrições dos processos de quebra a coalescência e os modelos utilizados.

### 3.3.3.2 *Processo de quebra*

O processo de quebra, resumidamente, é o resultado de um desequilíbrio entre as tensões do escoamento que atuam sobre a partícula e a tensão superficial. O número adimensional que mede esse equilíbrio é o número de Weber (HINZE, 1955).

$$We = \frac{\rho|\mathbf{u}|d}{\sigma} \quad (3-16)$$

onde  $\rho$  é a densidade da fase dispersa,  $\mathbf{u}$  é uma velocidade relativa entre as fases,  $d$  é um tamanho característico da interface e  $\sigma$  é o coeficiente de tensão superficial.

Ou seja, a quebra é esperada ocorrer sempre que o  $We$  ultrapassar um valor crítico. Esse valor crítico é relacionado de alguma forma com o número de Ohnesorge,  $Oh$ : (ARAÚJO, 2006)

$$Oh = \frac{\mu_d}{\sqrt{\rho_d \sigma d}} \quad (3-17)$$

onde  $\mu_d$  é a viscosidade da fase dispersa.

Supondo que a partícula esteja imersa em um escoamento turbulento homogêneo e isotrópico, Kolmogorov (1949) e Hinze (1955) chegaram a um número de Weber igual a:

$$We = \frac{2\rho\varepsilon^{2/3}d^{5/3}}{\sigma} \quad (3-18)$$

onde  $\varepsilon$  é a dissipação da energia cinética turbulenta da fase contínua próxima a interface.

Assim, a teoria mostra que a quebra é relacionada com a dissipação de energia cinética turbulenta que é obtida pelos modelos de turbulência. Os modelos de turbulência serão formulados na próxima seção.

O propósito do desenvolvimento acima foi chegar em (3-18) para mostrar a relação entre o processo de quebra e a turbulência. Porém, vale comentar que experimentalmente outros mecanismos de quebra foram observados além do desequilíbrio de tensões na superfície. Estes outros mecanismos estão além do escopo do trabalho. Eles podem ser encontrados em Araujo (2006).

O modelo utilizado neste trabalho foi desenvolvido por Luo e Svendsen (1996). O modelo foi baseado na teoria de Kolmogorov-Hinze, apresentada acima.

### 3.3.3.3 *Processo de coalescência*

A coalescência é ainda mais complexa que a quebra. Araujo (2006) faz amplo apanhado de teoria e modelagem deste fenômeno.

Resumidamente a coalescência é um processo de três etapas onde (ARAUJO, 2006):

1. partículas colidem;
2. drenagem do filme da fase contínua entre as partículas;
3. ruptura das superfícies das partículas.

Existem várias classes de modelos, mas os principais adotam uma frequência de colisão e uma eficiência de coalescência para calcular o núcleo da taxa. A frequência de colisão mede o tempo em que as partículas ficam próximas o suficiente para que ocorra a coalescência enquanto a eficiência de coalescência é uma probabilidade condicional

para que a coalescência se conclua (o filme de líquido é drenado e se rompe).

Baseado neste conceito Prince e Blanch (1990) desenvolveram um modelo de coalescência onde três sub-mecanismos influenciam na frequência de colisão.

1. interação com o campo turbulento do escoamento ao redor da partícula;
2. interação com o campo gravitacional (empuxo);
3. interação com o campo cisalhante do escoamento ao redor da partícula.

Este modelo é o mais utilizado na literatura quando a coalescência está em jogo (ARAUJO, 2006).

### 3.4 MODELOS DE TURBULÊNCIA

Conforme foi observado na revisão de literatura, o escoamento em tanques agitados compõe um desafio para os modelos de turbulência. Modelos de Turbulência a Duas Equações são, de longe, os mais utilizados por sua robustez e economia na obtenção de resultados para escoamentos completamente turbulentos. Em algumas situações, seu resultado é até aceitável do ponto de vista de engenharia, como no caso de tanques com chicanas. Por outro lado, notoriamente não são os mais adequados para escoamento com forte anisotropia, como é o caso de escoamentos em tanques agitados, principalmente os sem chicanas. O modelo empírico de SPALART e SHUR (1997) foi recentemente incorporado a códigos comerciais (SMIRNOV e MENTER, 2008) apresentando resultados promissores em escoamentos com as mesmas características do objeto de estudo desta tese. A seguir serão apresentados os três modelos empregados neste estudo: o  $k-\varepsilon$  padrão, SST e BSL-EARSM, além do modelo de Correção de Curvatura.

#### 3.4.1 $k-\varepsilon$ padrão (LAUNDER e SPALDING, 1972)

Este modelo é de longe o padrão quando se deseja modelar um escoamento completamente turbulento em aplicações de engenharia. Robustez, economia e uma precisão razoável fazem deste modelo muito versátil e popular.

O modelo se baseia na solução de duas equações de transporte: uma para a energia cinética turbulenta e outra para a sua dissipação. A energia cinética turbulenta parte de suposição de que a flutuação do campo instantâneo de velocidades,  $\mathbf{u}'(\mathbf{x}, t)$ , é isotrópica. Em outras palavras, a flutuação é a mesma em todas as direções. Pode-se então definir uma variável escalar energia cinética turbulenta associada ao campo flutuante de forma que:

$$k = \frac{2}{3} \sqrt{|\mathbf{u}'|^2} \quad (3-19)$$

Este modelo é baseado no conceito de viscosidade turbulenta que entra nos termos difusivos das equações de transporte como um acréscimo à difusividade. Na equação do movimento, a viscosidade dinâmica é substituída por uma viscosidade efetiva:

$$\mu_{ef} = \mu + \mu_t \quad (3-20)$$

Sendo a viscosidade turbulenta,  $\mu_t$ , definida por:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3-21)$$

onde  $C_\mu$  é uma constante ajustada empiricamente;  $\varepsilon$  é a dissipação da energia cinética turbulenta.

As equações para  $k$  e  $\varepsilon$  são:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (3-22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \varepsilon) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (3-23)$$

onde  $\sigma_k$ ,  $\sigma_\varepsilon$ ,  $C_{\varepsilon 1}$  e  $C_{\varepsilon 2}$  são constantes.

O termo de produção  $P_k$  é devido às forças viscosas e é definido por:

$$P_k = \mu_t S^2 \quad (3-24)$$

onde  $S$  é o módulo do tensor taxa de deformação médio.

### 3.4.2 *Baseline* (MENTER, 1993)

A ideia básica por trás do modelo BSL é poder mesclar as vantagens do modelo  $k$ - $\varepsilon$  longe das paredes e o modelo  $k$ - $\omega$  próximo às paredes. Para isso, Menter (1993) transforma o modelo  $k$ - $\varepsilon$  para uma formulação  $k$ - $\omega$  para, após isso, somar as duas equações. Então, o modelo  $k$ - $\omega$  é multiplicado pela função de mescla  $F_1$  e o modelo  $k$ - $\varepsilon$  transformado é multiplicado pela função  $1-F_1$ .  $F_1$  é uma função que identifica a camada limite: seu valor é um próximo a superfície da parede e zero fora da camada limite. A função  $F_1$  é calculada através de uma fórmula para a distância até a parede em cada nó do domínio.

A forma final das equações do modelo BSL é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k3}} \right) \nabla k \right] + P_k - \beta \rho k \omega \quad (3-25)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\omega) \\
= \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 3}} \right) \nabla \omega \right] \\
+ (1 - F_1) 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla k \cdot \nabla \omega + a_3 \frac{\omega}{k} P_k \\
- \beta_3 \rho \omega^2
\end{aligned} \tag{3-26}$$

Onde  $\beta_3, \sigma_{k3}, \sigma_{\omega 3}, a_3, \beta, \sigma_{\omega 2}$  são constantes do modelo (ANSYS CFX, 2010). A função  $F_1$  pode ser encontrada em ANSYS CFX (2010). O termo  $P_k$  é a produção de turbulência devido a forças viscosas. Sua definição pode ser revista em Wilcox (1998).

A viscosidade turbulenta é definida por:

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \tag{3-27}$$

### 3.4.3 Shear Stress Transport (MENTER, 1994)

O modelo *Shear Stress Transport* (SST) é baseado no modelo *Baseline* (BSL). O SST propõe uma modificação na definição da viscosidade turbulenta através de um limitador de forma a incorporar o comportamento do transporte da tensão cisalhante turbulenta. Esse limitador atua em regiões de gradiente de pressão adverso onde a tensão cisalhante turbulenta apresenta uma diminuição, o que não é previsto pelo modelo BSL.

$$\mu_t = \frac{a_1 k \rho}{\max(a_1 \omega, S F_2)} \tag{3-28}$$

onde  $a_1$  é uma constante e  $S$  é a magnitude da taxa de deformação. A função  $F_2$  pode ser encontrada em ANSYS CFX (2010).

### 3.4.4 Explicit Algebraic Reynolds Stress Model (WALLIN e JOHANSSON, 2000)

Este modelo pode ser encarado como uma extensão dos modelos a Duas Equações como o BSL e o SST. Neste modelo a formulação de cálculo dos tensores turbulentos (ou de Reynolds) é não linear, em oposição a aproximação de Boussinesq, que é linear. De forma equivalente, pode-se dizer que o problema da turbulência deixa de ser um cálculo de viscosidade turbulenta e sim o cálculo direto dos componentes do tensor tensão turbulento. A definição do tensor de Reynolds para um escoamento incompressível é:

$$\overline{u_i u_j} = k \left( a_{ij} + \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) \quad (3-29)$$

onde o termo não linear é representado por  $a_{ij}$ , o tensor anisotropia, e  $k$  é o traço do tensor  $\overline{\mathbf{uu}}$ , também conhecido como energia cinética turbulenta.

Nesta definição  $k$  vem diretamente de um modelo de turbulência a Duas Equações. Na formulação utilizada aqui, o modelo BSL é o escolhido. Já o tensor anisotropia é derivado das equações de transporte dos tensores de Reynolds (RST) assumindo que a advecção e difusão dos tensores são desprezíveis. Esse processo gera uma relação implícita entre os componentes dos Tensores de Reynolds e o gradiente do campo de velocidades médio. Este modelo ficou conhecido como *Algebraic Reynolds Stress Model* (ARSM). Verificou-se que essa relação implícita é numericamente complicada de implementar e convergir devida a ausência de difusão. Por outro lado, uma expressão explícita para o tensor anisotropia não apresentou os mesmos problemas numéricos. Existem várias formulações EARSM (RUMSEY, 2012), entretanto, a formulação devida a Wallin e Johansson (2000) e Hellsten (2004) com modificações de ANSYS CFX (2010) em nível de implementação foi utilizada. O modelo aqui apresentado é baseado na relação pressão-deformação linear, e assim é chamado ARSM de solução quase-linear.

O tensor anisotropia é a solução da seguinte expressão algébrica implícita:

$$N\bar{a} = -A_1\bar{S} + (\bar{a}\bar{\Omega} - \bar{\Omega}\bar{a}) - A_2 \left( \bar{a}\bar{S} - \bar{S}\bar{a} - \frac{2}{3} tr\{\bar{a}\bar{S}\} \right) \quad (3-30)$$

$$\text{com } N = A_3 + A_4(P_k/\varepsilon)$$

Os coeficientes  $A_i$  são função dos coeficientes do modelo RST. Seus valores podem ser encontrados em ANSYS CFX (2010). Os tensores  $\bar{S}$  e  $\bar{\Omega}$  são os tensores taxa de deformação e vorticidade adimensionalizados pela escala de tempo da turbulência,  $k/\varepsilon$ . A solução numérica da (3-30) é o modelo conhecido por ARSM. Wallin e Johansson (2000) propõem a seguinte aproximação explícita para a solução da Eq (3-30).

$$\begin{aligned} a_{ij} = & \beta_1 S_{ij} + \beta_3 \left( \Omega_{ik}\Omega_{kj} - \frac{1}{3} II_{\Omega} \delta_{ij} \right) + \beta_4 (S_{ik}\Omega_{kj} - \Omega_{ik}S_{kj}) \\ & + \beta_6 \left( S_{ik}\Omega_{kl}\Omega_{lj} + \Omega_{ik}\Omega_{kl}S_{lj} - \frac{2}{3} IV \delta_{ij} \right. \\ & \left. - II_{\Omega} S_{ij} \right) \end{aligned} \quad (3-31)$$

Os coeficientes  $\beta_i$  são obtidos a partir da relação implícita de  $a_{ij}$  e possuem a seguinte definição:

$$\beta_1 = -N/Q \quad (3-32)$$

$$\beta_3 = -12 \cdot IV / (N \cdot Q \cdot (2N^2 - II_{\Omega})) \quad (3-33)$$

$$\beta_4 = -1/Q \quad (3-34)$$

$$\beta_6 = -6 \cdot N / (Q \cdot (2N^2 - II_{\Omega})) \quad (3-35)$$

onde o denominador  $Q$ , é definido como:

$$Q = (N^2 - 2II_\Omega)/A_1 \quad (3-36)$$

Os invariantes são definidos por:

$$II_\Omega = \Omega_{kl}\Omega_{lk} \quad (3-37)$$

$$IV = S_{kl}\Omega_{lm}\Omega_{mk} \quad (3-38)$$

Para o fechamento do modelo, é necessário encontrar a função  $N$ . Uma solução analítica para  $N$  pode ser encontrada considerando o escoamento bidimensional. Wallin e Johansson (2000) recomendam seu emprego também em caso tridimensional:

$$N = \begin{cases} A_3/3 + (P_1 + \sqrt{P_2})^{1/3} + \text{sign}(P_1 - \sqrt{P_2})|P_1 - \sqrt{P_2}|^{1/3} & \text{para } P_2 \geq 0 \\ A_3/3 + 2(P_1^2 - P_2)^{1/6} \cos\left[\frac{1}{3} \arccos\left(\frac{P_1}{\sqrt{P_1^2 - P_2}}\right)\right] & \text{para } P_2 < 0 \end{cases} \quad (3-39)$$

onde

$$P_1 = \left(\frac{A_3^2}{27} + \frac{A_1 A_4}{6} II_S - \frac{2}{3} II_\Omega\right) A_3 \quad (3-40)$$

$$P_2 = P_1^2 - \left(\frac{A_3^2}{9} + \frac{A_1 A_4}{3} II_S + \frac{2}{3} II_\Omega\right)^3 \quad (3-41)$$

### 3.4.5 Correção de curvatura (SPALART e SHUR, 1997)

O modelo de correção de curvatura introduzido por SPALART e SHUR (1997) é uma tentativa de aumentar a sensibilidade dos modelos

baseados na viscosidade turbulenta a situações onde fortes curvaturas das linhas de corrente e rotação do sistema estejam presentes. O modelo atua como um multiplicador do termo-fonte da equação de  $k$ . No caso de modelos baseados em Tensores de Reynolds, como no caso do EARSM, a correção de curvatura é uma correção na definição da vorticidade adimensional.

### 3.4.5.1 Correção de curvatura para modelos a duas equações

A aplicação da correção de curvatura consiste na multiplicação da função corretiva de Spalart e Shur (1997) diretamente no termo de produção de  $k$ . Isso é feito de forma a evitar a notória sobrepredição da viscosidade turbulenta dos modelos a Duas Equações. Assim,

$$P_k \rightarrow P_k f_r \quad (3-42)$$

onde  $f_r$  é a função limitadora da correção, assim definida:

$$f_r = \max[0, 1 + C_{scale}(\tilde{f}_r - 1)] \quad (3-43)$$

$$\tilde{f}_r = \max\{\min(f_{rot}, 1.25), 0\} \quad (3-44)$$

A função  $f_{rot}$  é a função corretora:

$$f_{rot} = (1 + c_{r1}) \frac{2r^*}{1 + r^*} [1 - c_{r3} t g^{-1}(c_{r2} \tilde{r})] - c_{r1} \quad (3-45)$$

Analisando a função  $f_r$  final, ela está limitada a uma faixa de valor entre nulo e 1,25. Quando  $f_r = 0$  significa que não há produção de turbulência e o escoamento está estabilizado. A situação típica deste evento é quando o escoamento mostra uma forte curvatura convexa. Já

quando  $f_r = 1,25$  há um aumento na produção de turbulência, por exemplo, quando o escoamento experimenta uma curvatura côncava. O valor máximo de 1,25 foi obtido em vários testes realizados por Smirnov e Menter (2008). Outro parâmetro ajustável é o fator de escala  $C_{scale}$ . Por default,  $C_{scale} = 1,0$  e como tal foi utilizado em todas as simulações.

Os argumentos  $r^*$  e  $\tilde{r}$  são definidos da seguinte forma:

$$r^* = \frac{S}{\Omega} \quad (3-46)$$

$$\tilde{r} = 2\Omega_{ik}S_{jk} \left[ \frac{DS_{ij}}{Dt} + (\epsilon_{imn}S_{jn} + \epsilon_{jmn}S_{in})\Omega_m^{rot} \right] \frac{1}{\Omega D^3} \quad (3-47)$$

onde o primeiro termo no colchete representa a segunda derivada da velocidade (ou a derivada substantiva do tensor taxa de deformação) e o segundo termo é uma medida da rotação do sistema. Além disso,

$\Omega_m^{rot}$  é o vetor velocidade de rotação do sistema;

$\epsilon_{ijk}$  é o tensor Levi-Civita.

Quando o sistema é rotativo, a definição da vorticidade deve incluir a contribuição deste movimento. Deste modo,

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + 2\epsilon_{mji}\Omega_m^{rot} \quad (3-48)$$

As magnitudes dos tensores taxa de deformação e vorticidade são dados por:

$$|\bar{S}|^2 = S^2 = 2S_{ij}S_{ij} \quad (3-49)$$

$$|\bar{\Omega}|^2 = \Omega^2 = 2\Omega_{ij}\Omega_{ij} \quad (3-50)$$

$$D^2 = \max(S^2, 0.09\omega^2) \quad (3-51)$$

A última definição é implementada em formato limitado para evitar os valores nulos da taxa de deformação que ocorrem em escoamentos livres.

As constantes  $c_{r1}$ ,  $c_{r2}$  e  $c_{r3}$  possuem os respectivos valores de 1,0, 2,0 e 1,0.

Detalhes da implementação numérica da derivada do tensor taxa de deformação podem ser encontrados em Smirnov e Menter (2008).

#### 3.4.5.2 Correção de curvatura para modelos baseados em tensores de Reynolds

Da mesma forma que os modelos a Duas Equações, os modelos baseados em Tensores de Reynolds devem ser estendidos para sistemas rotativos. Para incluir a correção de curvatura em modelos EARSM quase-lineares, é necessário alterar a definição do tensor vorticidade para incluir os termos entre colchetes da (3-47). Wallin e Johansson (2002) definem assim a vorticidade:

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2}\tau_t \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - C_{scale} \frac{\tau_t}{A_0} \Omega_{ij}^{CC} \quad (3-52)$$

onde  $\tau_t$  é a escala integral de tempo  $k/\varepsilon$  e  $C_{scale}$  é o mesmo do modelo de Spalart e Shur (1997) para modelos a Duas Equações.  $A_0$  é um parâmetro de ajuste com valor de -0,4.

A contribuição da correção de curvatura baseada no trabalho de Spalart e Shur (1997) é dada por:

$$\Omega_{ij}^{CC} = -\epsilon_{ijk}\omega_k^{S-S} \quad (3-53)$$

onde

$$\omega_k^{S-S} = \frac{S_{pt}S'_{iq}\epsilon_{pqk}}{2I_S} \quad (3-54)$$

e

$$S'_{ij} = \frac{DS_{ij}}{Dt} + (\epsilon_{imn}S_{jn} + \epsilon_{jmn}S_{in})\Omega_m^{rot} \quad (3-55)$$

$$S'_{ij} = \frac{DS_{ij}}{Dt} + (\epsilon_{imn}S_{jn} + \epsilon_{jmn}S_{in})\Omega_m^{rot} \quad (3-56)$$

## 4 MÉTODOS NUMÉRICOS

Este capítulo trata dos métodos numéricos empregados para solução das equações expostas no capítulo anterior.

O software utilizado em todas as simulações foi o ANSYS CFX versão 13.0 (2010). Este pacote discretiza as equações através do Método dos Volumes Finitos Baseados em Elementos (EbFVM). Este método é uma variação do Método dos Volumes Finitos (MVF) clássico (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007) utilizando a definição de elementos e fatores de forma do Método dos Elementos Finitos (MEF). (MALISKA, 2004) Esse método alia a vantagem do MVF de garantir a conservação da propriedade transportada e a habilidade do MEF de lidar com geometrias complexas. Os detalhes do EbFVM podem ser revistos em outras fontes (MALISKA, 2004)

O produto da aplicação de um método de discretização nas equações de conservação (que são equações diferenciais parciais) é um sistema algébrico não-linear de dimensão *Número de Variáveis x Número de Volumes de Controle*. Em outras palavras, um problema com uma malha com muitos volumes gera um sistema de equações muito grande. Por outro lado, as equações estão intimamente acopladas através de suas variáveis. A equação para a velocidade contém a pressão. A pressão não possui uma equação. Este problema é conhecido como acoplamento pressão-velocidade. Comumente este acoplamento é realizado através do balanço de massa para gerar uma equação para a pressão. Com este artifício, é necessário um procedimento iterativo dentro do laço do sistema. Além disso, este procedimento leva a perda de precisão na solução das equações. De forma a evitar a utilização deste artifício, este código utiliza a abordagem acoplada *multigrid* para resolver o sistema de equações algébrico de modo a manter a natureza acoplada das equações de conservação (MALISKA, 2004). São notórias as vantagens desta abordagem acoplada (ANSYS CFX, 2010): robustez, eficiência, generalidade e simplicidade. Por outro lado, traz a necessidade de alta disponibilidade de armazenamento do sistema (memória RAM).

O processo de discretização passa por três etapas:

1. malha computacional: o domínio de cálculo é subdividido em volumes de controle onde cada equação de conservação discretizada será resolvida;

2. discretização das equações: transformação do sistema de equações diferenciais parciais em equações algébricas;
3. interpolações: os termos discretizados requerem dados que não estão disponíveis *a priori*. Métodos de interpolação são aplicados para fechar o sistema algébrico.

Com o sistema algébrico linear montado, o solver resolve o sistema iterativamente. O ANSYS CFX (2010) utiliza como pré-condicionador a fatorização LU incompleta (ILU) acelerada por um método *Multigrid* Algébrico (AMG).

#### 4.1 MALHA COMPUTACIONAL

Um dos requerimentos de se discretizar equações diferenciais é definir no espaço/tempo do domínio de cálculo em quais pontos/volumes será aplicado o processo de discretização. No espaço, esse processo gera uma malha computacional. A princípio, a forma do volume de controle pode ser qualquer já que não há no processo de discretização qualquer restrição quanto à geometria do elemento. Essa flexibilidade facilita a discretização de equipamentos de geometria complexa. Na prática, alguns elementos são empregados, a saber:

- hexaedros;
- tetraedros;
- prismas;
- pirâmides.

Os códigos de CFD modernos conseguem manipular qualquer tipo de elemento acima sem nenhuma intervenção específica do usuário. Em geral, as malhas são diferenciadas entre hexaédricas e tetraédricas. Muitas vezes se classificam malhas hexaédricas como estruturadas e tetraédricas como não estruturadas. O conceito de estruturação de malha nada tem a ver com a forma do elemento, mas sim como cada elemento está conectado entre si dentro do sistema linear. Assim, é possível haver malhas estruturadas tetraédricas e malhas não estruturadas hexaédricas. Todos os solvers de CFD modernos usam malhas não estruturadas. As malhas Tetraédricas, quando aplicadas em problemas com superfícies sólidas (paredes) pode requerer elementos prismáticos para descrever camadas-limites. Os elementos piramidais surgem sem um comando direto do usuário, mas como um elemento conector entre camadas de

prismas e tetraedros e também entre hexaedros e tetraedros. Alguns comentários são relevantes acerca das diferenças entre eles.

- hexas: indicado para escoamentos com direção preferencial e cisalhantes; melhor elemento com respeito a consumo de memória e tempo de cálculo por elemento; por outro lado seu grau de automatização para sua geração é baixo;
- tetras: indicado para problemas que demandam automação na geração de malha; desempenho numérico é 50% pior que o Hexa; não indicado para camadas cisalhantes; qualidade é alcançada com quantidade;
- prismas: melhor desempenho que o Tetra nas camadas cisalhantes; ideal para automatização; facilmente combinável com Tetras; menos eficiente que o Hexa; não indicado para geometrias complexas.

Neste estudo optou-se por malhas híbridas tetra/prisma devido à complexidade da geometria dos agitadores. Além disso, Glover e Fitzpatrick (2007) mostraram que para um tanque agitado sem chicanas, resultados semelhantes são obtidos com malhas hexaédricas e tetraédricas.

O estudo de independência de malha foi conduzido de forma a minimizar os erros de discretização (Roache, 1998). Como os casos com e sem a presença de chicanas são topologicamente distintos, dois estudos de independência de malhas foram realizados.

O gerador de malha utilizado para esta tarefa foi o ANSYS ICEM CFD 13.0. Elementos tetraédricos foram usados para discretizar o volume do reator.

Em ambos os casos (turbina Rushton e hélice marinha) o mesmo procedimento foi adotado. Foram geradas cinco malhas com níveis de refino distintos. Os tamanhos relativos entre as diferentes porções da malha foram mantidos e somente um parâmetro global (um fator de escala,  $F$ ) foi alterado.

Dois parâmetros foram avaliados:

- o valor da magnitude da velocidade em um ponto na descarga do agitador;
- o número de potência.

O primeiro parâmetro serve como avaliação do escoamento local, enquanto o número de potência possui um caráter global. Poder-se-ia

utilizar inúmeros parâmetros, como, por exemplo, um perfil de velocidade ou a integral da dissipação da energia cinética turbulenta.

O número de potência é a razão entre forças de arraste e forças inerciais e é definido como (EARLE e EARLE, 1983):

$$N_P = \frac{P}{D^5 N^3 \rho} \quad (4-1)$$

onde  $P$  é a potencia consumida pelo agitador,  $D$  é o diâmetro do agitador,  $N$  é a velocidade de rotação do agitador.

A potência  $P$  é avaliada no CFD através do produto da integral do torque sobre toda superfície do agitador pela velocidade de rotação.

#### **4.1.1 Análise da independência de malha para o tanque sem chicanas e turbina Rushton.**

Para o caso do reator montado com uma turbina Rushton, as dimensões utilizadas foram extraídas dos trabalhos que se basearam no mesmo sistema (CIOFALO *et al.*, 1996; ALCAMO *et al.*, 2005; HAQUE *et al.*, 2006; BUSCIGLIO *et al.*, 2011). A rotação utilizada foi a de 139 RPM conforme estudo de malha conduzido por Haque *et al.* (2006). Também o número de nós foi baseado no trabalho de Haque *et al.* (2006), entretanto, ao contrário destes autores, o presente trabalho inclui próximas às paredes, cinco camadas de prismas para descrever o escoamento próximo às paredes. Além disso, um refino maior na região da superfície livre foi empregado.

A Tabela 4-1 lista o tamanho da malha para cada nível de refino. Note que para o solver do CFX utiliza o nó (ou vértice do elemento) como centro de seu volume de controle (Vide Figura 4-10).

Tabela 4-1 – Número de nós e elementos nos níveis de refino de malha para o caso da turbina Rushton.

<i>Nível de Refino</i>	<i>Fator de Escala, F</i>	<i>Número de Nós</i>	<i>Número de Elementos</i>
1	1,0	441887	1689635
2	0,9	540308	2085658
3	0,8	815709	3696129
4	0,7	1076177	4828926
5	0,6	1217325	5229726

A Figura 4-1 mostra como o refino de malha influencia a velocidade tomada em um ponto na descarga do agitador. Pode-se observar que para este parâmetro o refino da malha não melhora o resultado a partir do nível 3.

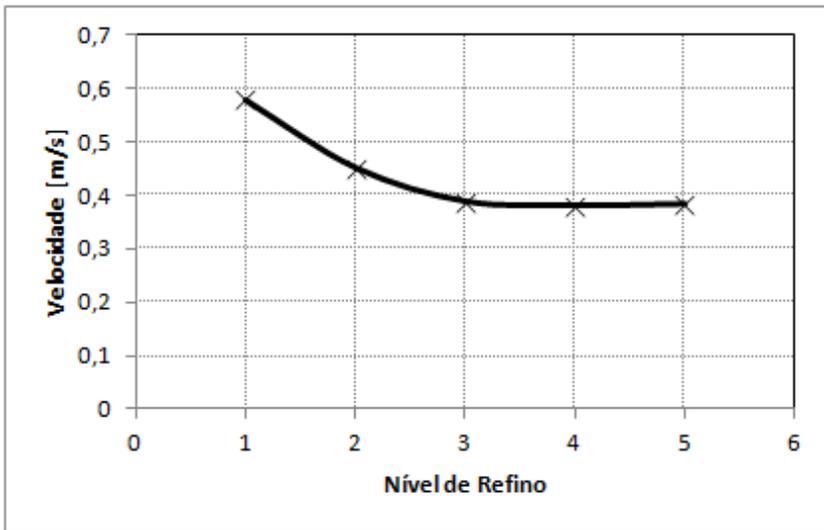


Figura 4-1 – Estudo de malha turbina Rushton: variação da velocidade em um ponto da descarga do agitador com o refino da malha.

A Figura 4-2 mostra como o refino de malha influencia o número de potência. Como foi descrito pela equação (4-1), este parâmetro avalia o quanto a malha ao redor do agitador influencia nos resultados. Note

que a partir do segundo nível de refino, o resultado não muda de forma apreciável.

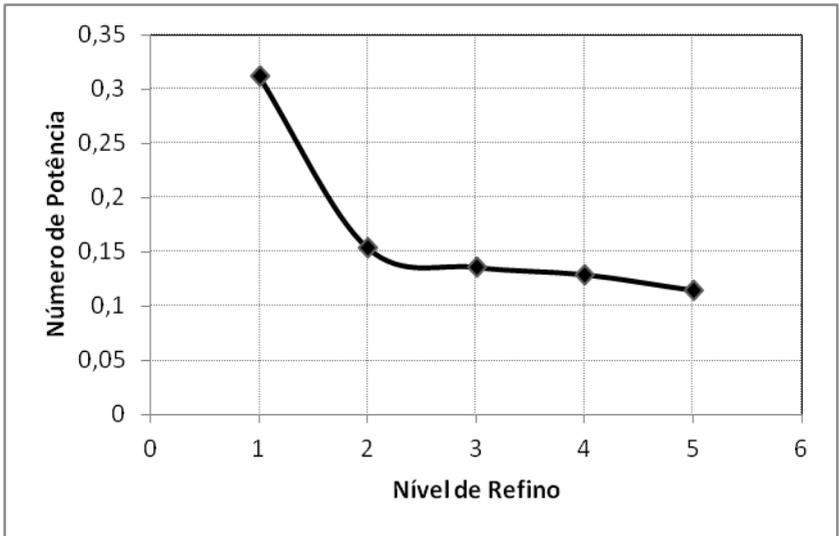


Figura 4-2 – Estudo de malha turbina Rushton: variação do número de Potência com o refino da malha.

Assim, pode-se concluir que o terceiro nível de refino ( $F=0,8$ ) produz resultados independentes da malha de acordo com os quesitos apresentados aqui. Este tamanho de malha é compatível com outros trabalhos publicados (ALCAMO *et al.*, 2005; HAQUE *et al.*, 2006; GLOVER e FITZPATRICK, 2007) que usam este mesmo sistema.

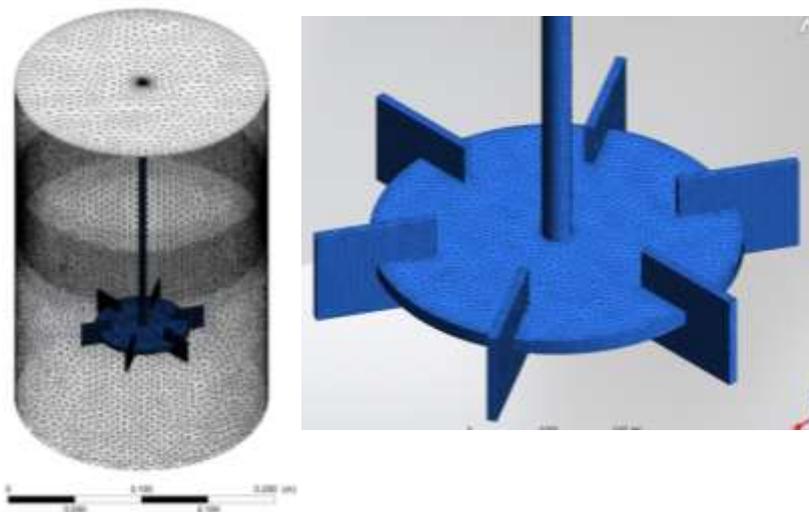


Figura 4-3 – Detalhes da malha superficial na turbina Rushton: a esquerda, malha das paredes do tanque; a direita, malha do agitador.

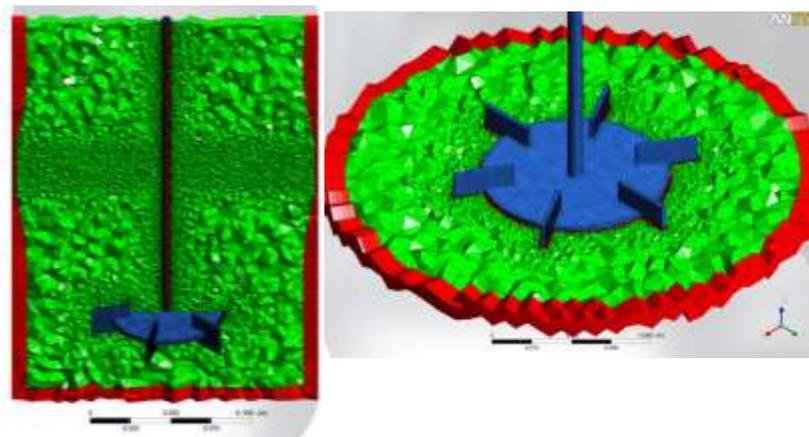


Figura 4-4 – Detalhes da malha volumétrica na turbina Rushton: a esquerda, plano vertical cortando o centro do agitador; a direita, plano horizontal cortando o centro do agitador. Elementos verdes são tetraedros e elementos vermelhos são prismas.

#### 4.1.2 Análise da independência de malha para o tanque sem chicanas e hélice marinha

Para o tanque montado com o agitador tipo hélice marinha, poucas referências de simulação numérica do escoamento estão disponíveis. Destaca-se o trabalho de Abu-Farah *et al.* (2010). Este trabalho, por outro lado, não apresenta estudo de independência de malha, mas comenta que o valor de tamanho do menor elemento de malha para o seu caso, cujo tanque tem 8 cm de diâmetro, é de 1 mm, perfazendo aproximadamente 1,3M de elementos.

Nesta análise parâmetros globais como o número de potência e parâmetros locais como o valor da velocidade em um ponto são utilizados como referência. Infelizmente não foram encontrados na literatura abertas medidas experimentais disponíveis para este tipo de agitador. Portanto, a análise é feita na convergência dos resultados para um valor que não é uma referência medida.

Para esta análise, cinco níveis de refino foram usados. Em todos os níveis, os critérios de qualidade exigidos pelo solver foram atendidos (ANSYS CFX, 2010). Suas características estão resumidas na Tabela 4-2.

Tabela 4-2 – Número de nós e elementos nos níveis de refino de malha para o caso da hélice marinha

<i>Nível de Refino</i>	<i>Fator de Escala, F</i>	<i>Número de Nós</i>	<i>Número de Elementos</i>
<b>1</b>	1,0	441887	1689635
<b>2</b>	0,9	540308	2085658
<b>3</b>	0,8	682568	2661985
<b>4</b>	0,7	887874	3507372
<b>5</b>	0,6	1186367	4779136

A seguir, o gráfico da Figura 4-5 mostra a variação da velocidade medida na descarga do agitador.

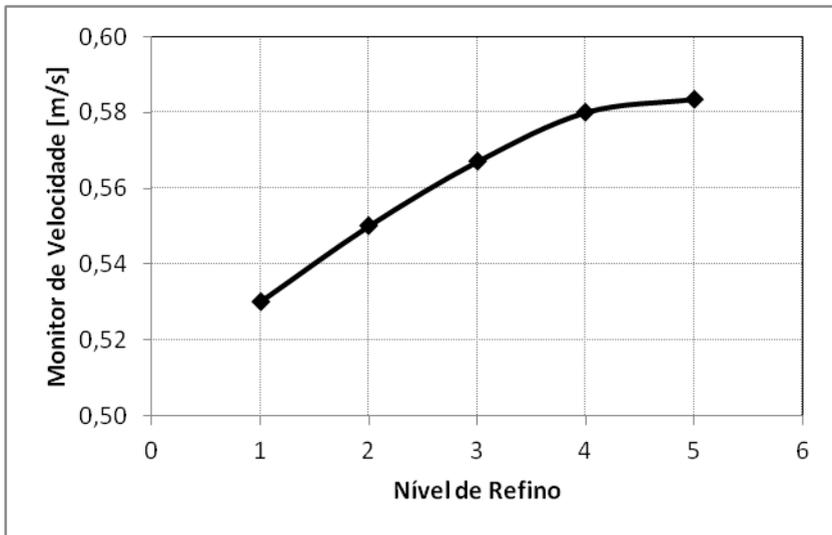


Figura 4-5 – Estudo de malha: variação da velocidade em um ponto com o refinamento de malha

É possível notar que a partir do quarto nível de refino ( $F=0,7$ ) a velocidade não muda de forma apreciável. Este nível de refino é compatível ao encontrado por Haque *et al.* (2006) e três vezes mais refinado ao usado por Abu-Farah *et al.* (2010).

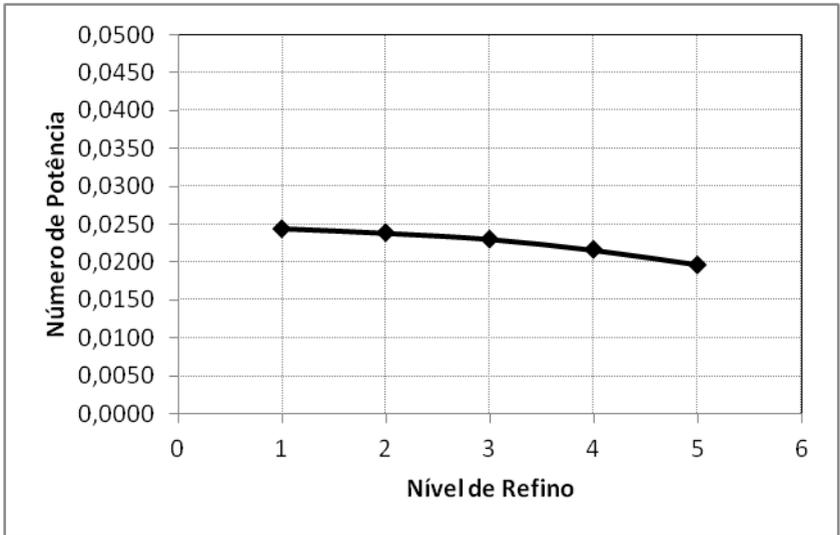


Figura 4-6 – Estudo de malha: variação do número de potência com o nível de refino da malha.

Conforme se nota na Figura 4-6, o número de potência é pouco afetado pelos níveis de malha utilizados aqui. Isso se deve ao fato da malha nas proximidades do impelidor, mesmo no menor nível de refino, já ser suficiente para capturar o provável valor correto.

A Figura 4-7 mostra um comparativo para o perfil da superfície livre.

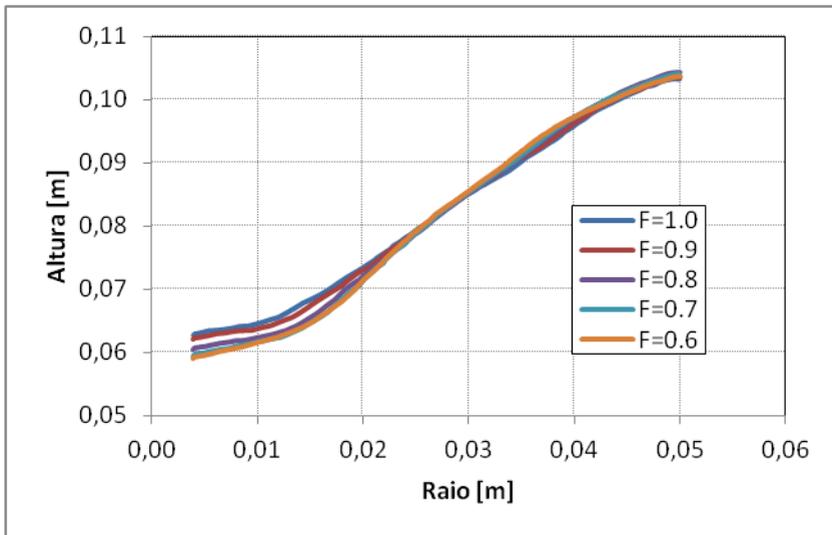


Figura 4-7 – Estudo de malha: variação do perfil da superfície livre com o nível de refinamento da malha.

Neste perfil, a convergência ocorre a partir de terceiro nível. Mesmo assim, a diferença entre as malhas não é apreciável. Isso se deve ao fato de este local da malha já ser mais refinado que os outros.

Da análise realizada a partir dos resultados de estudo de malha, pode-se concluir que o quarto nível de refinamento ( $F=0,7$ ) é suficiente para se obter campos com o mínimo erro de discretização. Detalhes desta malha são mostrados na Figura 4-8 e Figura 4-9.

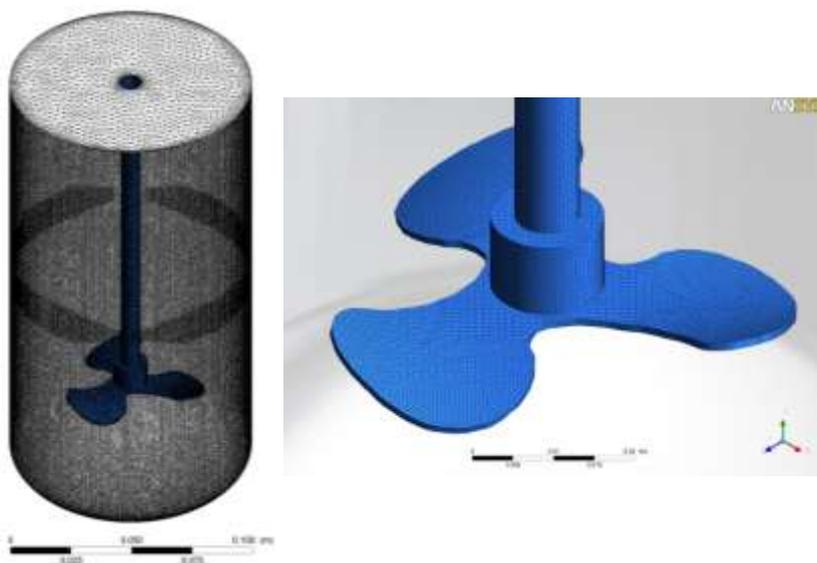


Figura 4-8 – Detalhes da malha superficial: a esquerda, a malha da parede do tanque e topo; a direita, malha no agitador.

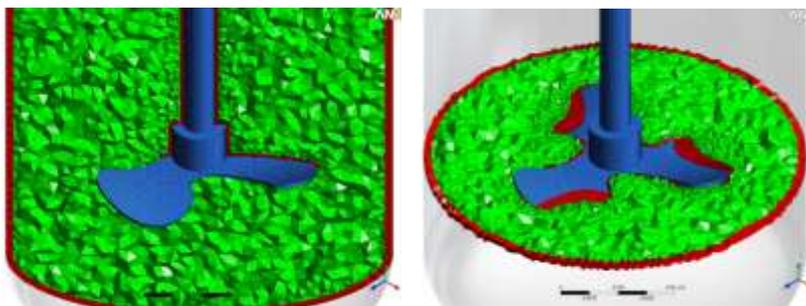


Figura 4-9 – Detalhes da malha volumétrica: a esquerda, um plano vertical que passa no centro do agitador; a direita, um plano horizontal que passa no plano do agitador. Elementos verdes são tetraedros e elementos vermelhos são prismas.

## 4.2 DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES

O processo de discretização passa pela integração das equações de conservação sobre cada volume de controle gerado na malha computacional. Conforme comentado anteriormente, o Método dos Volumes Finitos (MVF) é aplicado de forma a obter um sistema de equações algébricas aproximadas. A ordem de aproximação é o erro de discretização, avaliado na seção anterior. Este processo é discutido em várias fontes (MALISKA, 2004; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007) e não será reproduzido aqui.

## 4.3 ESQUEMAS DE INTERPOLAÇÃO

Esta seção apresentará os métodos para os termos das equações relevantes para os casos deste estudo. Outros termos podem ser analisados em outras fontes com Maliska (2004), Versteeg e Malalasekera (2007) e ANSYS CFX (2010).

### 4.3.1 Cálculo do falso passo de tempo

A discretização utilizada no ANSYS CFX não subtrai o termo transiente das equações mesmo quando se busca uma solução permanente. É o que se chama de falso transiente. É um procedimento que reconhecidamente confere mais estabilidade para o processo iterativo já que usa um termo que já se encontra nas equações para relaxar o processo iterativo. No ANSYS CFX (2010), este termo é discretizado pelo método de Euler.

A escolha do fator de relaxação passa a ter um significado físico, podendo ser calculado de acordo com a física do problema. Este novo fator de relaxação é chamado falso passo de tempo.

O cálculo do falso passo de tempo, em geral, é baseado em alguma escala de tempo característica do sistema ou fração dela. No caso de tanques agitados, um tempo característico é o período de rotação do agitador.

Spogis (2002) e ANSYS CFX (2010) recomendam usar 10% do período de rotação como passo. Este foi o valor utilizado em todas as simulações.

### 4.3.2 Esquema de advecção compressivo

A equação da fração volumétrica será utilizada para capturar a posição da interface gás-líquido, conforme visto no capítulo referente aos modelos. Essa equação discretizada tem a forma:

$$\frac{V}{\delta t} [(\rho_l \alpha_l)^{n+1} - (\rho_l \alpha_l)^n] + \sum_{ip} (\rho_l \mathbf{uA})_{ip}^{n+1} (\alpha_{l,ip})^{n+1} = 0 \quad (4-2)$$

onde  $n$  é a iteração atual e o índice  $ip$  significa ponto de integração. Os pontos de integração (Figura 4-10) são os pontos através dos quais o volume de controle se comunica com todos os vizinhos por meio dos fluxos das propriedades (MALISKA, 2004). O índice  $l$  se refere à fase líquida.

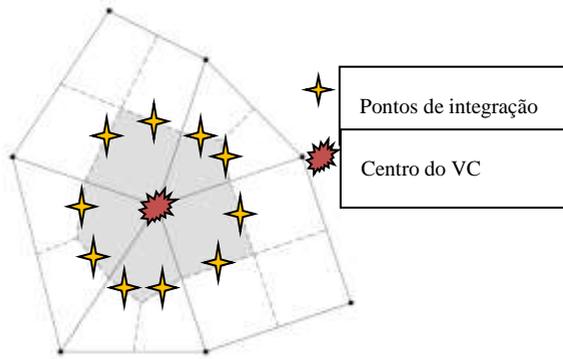


Figura 4-10 – Discretização baseada em elementos: relação entre os pontos de integração e o centro do volume de controle. As linhas sólidas são os limites dos elementos. O volume de controle é centrado nos vértices e é reconhecido pela região cinza.

O esquema de advecção é usado para avaliar a propriedade transportada em cada ponto de integração. Neste caso, o que se quer avaliar é a fração volumétrica do líquido. A fórmula para este cálculo é dada pelo algoritmo NAC (*Numerical Advection Correction*) de Barth e Jespersen (1989):

$$\alpha_{l,ip} = \alpha_{l,up} + \beta \nabla \alpha_l \cdot \mathbf{R} \quad (4-3)$$

onde  $\alpha_{l,up}$  é o valor da fração volumétrica no volume a montante (*upwind*) e  $\mathbf{R}$  é o vetor direção do volume a montante (*upwind*) para o ponto de integração.

Portanto, se  $\beta = 0$  o esquema se reduz ao UDS (*Upwind Differencing Scheme*). Se  $\beta = 1$  o esquema é um esquema UDS de segunda ordem puro. No esquema de alta resolução de ANSYS CFX (2010),  $\beta$  é variável entre 0 e 1 de acordo com o número de Peclet local.

Entretanto, para aplicações de superfície livre, o esquema de alta resolução ainda é demasiado difusivo. ANSYS CFX (2010) introduz um esquema antidifusivo (ou compressivo) empregando  $\beta > 1$ . A convergência deste esquema não é fortemente dependente do passo de tempo, permitindo soluções permanentes mais rápidas (ZWART, 2005).

### 4.3.3 Fluxo mássico

O termo de fluxo mássico deve ser tratado de forma a evitar o desacoplamento da velocidade e a pressão. O algoritmo de interpolação de Rhie e Chow (1983) provê este cuidado ao calcular a velocidade no ponto de integração através de:

$$\mathbf{u}_{ip} = \overline{\mathbf{u}_{ip}} + d_{ip} [(\nabla p - \rho \mathbf{g}) - \overline{(\nabla p - \rho \mathbf{g})}]_{ip} \quad (4-4)$$

onde

$$d_{ip} \propto -V/a \quad (4-5)$$

$$a \propto \rho V / \delta t + b \quad (4-6)$$

onde  $b$  é a soma dos coeficientes advectivos e difusivos provenientes da equação da quantidade de movimento. A barra superior indica a média sobre todos os volumes de controle vizinhos ao ponto de integração. O termo  $\overline{u_{ip}}$  representa a média das velocidades dos vértices (ou centro dos volumes de controle) adjacentes ao ponto de integração. Ele é obtido a partir de uma pseudo-equação da conservação da quantidade de movimento para o ponto de integração.

A razão de agrupar o gradiente de pressão é o empuxo é que em geral eles se equivalem em valor e seu agrupamento previne oscilações no campo de velocidade próximo a superfície livre (ZWART, 2005).

#### **4.3.4 Acoplamento das equações de fração volumétrica e Navier-Stokes**

Este artifício de implementação faz com que as equações para velocidade, pressão e fração volumétrica sejam resolvidas na mesma matriz. Esta abordagem tem se mostrado benéfica em termos de convergência, robustez e escalabilidade do processo iterativo quando, entre outros fenômenos, forças gravitacionais são importantes, como no caso de escoamentos de superfície livre (ZWART *et al.*, 2007).

#### **4.3.5 Modelagem do movimento relativo agitador-reator**

Nesta parte do modelo, diferentes abordagens foram empregadas de acordo com a configuração do reator:

- SFR (*Single Frame of Reference*): nesta abordagem o domínio como um todo gira enquanto que agitador e sua haste ficam paradas em relação ao referencial do laboratório.
- MFR (*Multiple Frames of Reference*): nesta abordagem somente uma porção de volume do reator ao redor do agitador gira em relação à referência parada e o resto do tanque em repouso.

Em ambas as abordagens as equações do movimento são modificadas de modo a incorporar os termos de aceleração devido à rotação do sistema: força de Coriolis e força centrífuga. Estas forças são adicionadas às equações de conservação da quantidade de movimento através de termos-fonte dados respectivamente por:

$$S_{Cor} = -2\rho\omega \times \mathbf{u} \quad (4-7)$$

$$S_{cfq} = -\rho\omega \times (\omega \times \mathbf{r}) \quad (4-8)$$

onde  $\rho$  é a densidade,  $\omega$  é a rotação do sistema,  $\mathbf{r}$  é o vetor raio e  $\mathbf{u}$  é o vetor velocidade.

A inclusão destas forças permite que soluções em estado permanente sejam obtidas sem a necessidade do movimento das condições de contorno de fato.

A diferença entre as abordagens é onde serão aplicados os termos de aceleração. No SFR, os termos-fonte aparecem em todos os volumes de controle do domínio, já que neste modelo o domínio gira como um todo. No MFR, somente em volumes determinados previamente (em geral, uma parcela arbitrária do volume ao redor as partes móveis do equipamento) contém estes termos-fonte.

A abordagem SFR pode ser utilizada somente nos casos sem chicanas porque todas as paredes externas devem ser superfícies de revolução. No caso com chicanas isso não é possível já que se todo domínio girar, as chicanas giram também em relação a um referencial inercial.

A alternativa para um reator com chicanas é usar o MFR. Ao empregar este método, surge um problema que é modelar os fluxos que cruzam a interface entre o volume que gira (neste caso, em torno do agitador) e o volume que permanece estacionário. O ANSYS CFX (2010) emprega uma abordagem de superfície de controle chamada *General Grid Interface* (GGI). O GGI é um algoritmo de intersecção baseado na física do problema e permite liberdade total na escolha da malha de cada um dos lados da interface, inclusive o não casamento das áreas da interface. Apesar do GGI, o MFR adiciona erros de discretização devido a descontinuidade da malha embora não afete a convergência.

Outra escolha a se fazer ao empregar o MFR é decidir entre três modelos (ANSYS CFX, 2010):

- *Frozen rotor*;
- *Stage*;
- *Transient Rotor-Stator*.

O modelo *Frozen rotor*, também conhecido por *Mixing Model*, como o próprio nome diz, é uma abordagem onde os componentes em cada lado da interface são fixos. O movimento do lado rotativo é obtido através dos termos de aceleração nas equações de movimento. Este modelo é o que possui o menor custo computacional e permite soluções permanentes ou quasi-estacionárias com erro de aproximação pequeno quando a interação entre os componentes estacionários e rotativos é pequena.

O modelo *Stage* realiza uma média por faixas circunferenciais da interface. Este modelo é uma aproximação para o transiente e é aplicável principalmente quando rotações muito altas estão presentes, como no caso de compressores e turbinas.

O terceiro modelo é empregado somente em simulações transientes, já que ele movimentava a malha a cada passo de tempo. Essa abordagem modela o movimento real dos componentes.

O estudo do impacto da escolha desses modelos sobre os resultados já foi bem investigada na literatura e resumida por Ranade (2002). Para os propósitos desta tese, o modelo *Frozen rotor* atende as expectativas de precisão.

## 5 DELINEAMENTO EXPERIMENTAL

A seguir são apresentados os aparatos utilizados para verificação experimental da forma da superfície livre.

Os experimentos foram realizados nas dependências do Laboratório de Controle de Processos do Departamento de Engenharia Química, da Universidade Federal de Santa Catarina, cujas instalações fornecem toda a estrutura necessária para a realização dos mesmos, bem como para análise de resultados e seu tratamento.

A base para os parâmetros operacionais utilizados neste estudo experimental foram as reações de polimerização em suspensão realizadas no estudo de Pinto (2006). O tanque agitado encamisado, de vidro, sem chicanas e com capacidade nominal de um litro, como mostrado na Figura 5-1, é o mesmo utilizado por Pinto (2006). A parte superior deste reator é aberta, de tal modo que é possível observar diretamente o vórtice formado pela agitação do líquido em seu interior.



Figura 5-1 – Tanque utilizado nos ensaios experimentais.

O agitador mecânico RW20 Digital IKA, que pode ser visto na Figura 5-2(a), foi fixado no suporte do reator. A hélice do agitador é do tipo hélice marinha com três pás (Figura 5-2(b)). As pás foram inclinadas em dezanove graus conforme utilizado por Pinto (2006). Em todos os experimentos, o agitador foi colocado ao centro do reator, na tentativa de obter a melhor simetria e reprodutibilidade possível. Outro cuidado tomado foi a retificação de desníveis, tanto do tanque quanto do conjunto agitador/hélice, utilizando um nível simples.

Sobre o tanque, na parte superior aberta e exposta ao ambiente, é colocado um medidor (Figura 5-2(c)) de fabricação própria. Consiste em uma base inferior retangular de madeira e uma base superior metálica. Nas bases, há orifícios em posições estratégicas, onde finas hastes metálicas podem mover-se verticalmente. Ao colocar-se o medidor sobre o reator, já operando em regime estacionário, as hastes são movidas até a iminência de contato com interface água-ar e, em seguida, travada. Essa distância da interface ao medidor, indicada pela haste móvel, pode ser descontada da altura do reator, fornecendo, então, a posição do ponto da interface.

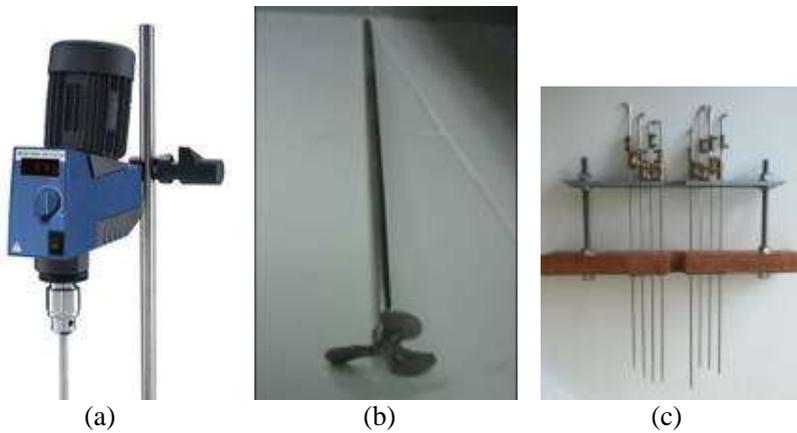


Figura 5-2 – Aparato experimental: (a) Agitador mecânico; (b) Impelidor de hélice marinha e (c) Medidor.

O sistema completo pode ser visto na Figura 5-3, e é comum a todos os experimentos aqui descritos.



Figura 5-3 – Aparato experimental completo.

Ao tanque descrito na instalação experimental (fixado em uma estrutura do laboratório), foram adicionados 800 mL de água destilada à temperatura ambiente (aproximadamente 20°C).

Nesta mesma estrutura, foi fixado o agitador mecânico digital com velocidade ajustável portando o impelidor metálico, ajustado no centro do reator, que pode mover-se na vertical, de acordo com as necessidades do operador. Com um nível, eventuais desníveis entre pontos do reator foram minimizados, bem como garantida a verticalidade do impelidor.

Foi adotado como origem de um sistema de coordenadas cartesianas o centro da parte inferior do reator, de onde a parte final do impelidor dista 33, 50 ou 66 mm (distância vertical), dependendo do experimento.

Foi, então, observado o perfil do vórtice formado pela água destilada para os seguintes casos (velocidade de agitação/distância do impelidor ao fundo do reator):

Tabela 5-1 – Condições de operação do tanque agitado montado com hélice marinha.

<b>Velocidade de agitação [RPM]</b>	<b>Clearance [mm]</b>
580	50
750	50
920	50
750	33
750	66

A escolha dos valores dos parâmetros foi baseada em um planejamento experimental para um estudo de reação de polimerização em suspensão (PINTO, 2006).

A mensuração da interface água-ar foi feita com o medidor, posicionado na parte superior e aberta do reator, e fornece a distância da interface ao topo do reator. Da altura total do reator, foi descontada a distância observada para se obter, então, a coordenada do ponto em estudo do vórtice.

Admitindo simetria axial, foram coletadas coordenadas da interface em quatro linhas entre a parede do tanque e o agitador (no plano  $X=0$ , do sistema de coordenadas adotado). A primeira linha, que chamaremos de linha 1, foi localizada a 1,5 centímetros do impelidor; a linha 2, a 2,5 centímetros; a linha 3, a 3,5 centímetros e a linha 4, a 4,5 centímetros.



## 6 RESULTADOS

Este capítulo mostra os resultados obtidos para os modelos descritos no capítulo MODELAGEM MATEMÁTICA.

Primeiramente foram testados os diversos modelos de turbulência candidatos a melhor predizer o escoamento no interior do tanque sem chicanas. O primeiro sistema, baseado no trabalho de Alcamo *et al.* (2005) é agitado por um turbina Rushton. Idealmente, este teste deveria ser feito também com o sistema com hélice marinha, mas não foram encontrados dados de perfil de velocidade para a verificação deste sistema. Portanto, considera-se que o modelo avaliado para o sistema com turbina Rushton também terá sua aplicação verificada no sistema com hélice marinha.

Após a verificação dos modelos de turbulência, foi verificado o modelo escolhido no sistema com hélice marinha através do dado experimental de forma da superfície livre obtido neste trabalho.

Então, foram avaliados os campos turbulentos em função da rotação do agitador e da altura do agitador hélice marinha, tanto quanto uma análise do volume de abrangência da alta turbulência.

A seguir, foi agregado ao modelo de escoamento de superfície livre o modelo ASM para levar em conta a fase polidispersa e analisar sua distribuição no seio do líquido e tentar encontrar argumentos para explicar o comportamento da DTP final em função da altura do agitador.

Finalmente, os primeiros resultados da aplicação do modelo MUSIG levando em conta a quebra e a coalescência de gotas foi aplicado em um sistema com chicanas agitado por uma turbina Rushton (Yang *et al.*, 2000). A verificação deste modelo MUSIG em conjunto com o modelo obtido para o sistema com hélice marinha formaram a base para o modelo completo.

### 6.1 ANÁLISE DE MODELOS DE TURBULÊNCIA

Alguns modelos de turbulência potencialmente podem predizer o escoamento em tanques sem chicanas. Alguns desses modelos são analisados nesta seção. Os modelos testados aqui serão comparados com dados experimentais (VELLA *et al.*, 2003) e resultados de Simulação de

Grandes Escalas, LES (ALCAMO *et al.*, 2005) e de modelo de transporte de Tensores de Reynolds (HAQUE *et al.*, 2006).

Os dois modelos testados aqui foram SST e o EARSM baseado no BSL. Ambos foram modificados pelo modelo de Spalart e Shur (1997) de correção de curvatura.

O sistema é constituído por um tanque sem chicanas de fundo plano de diâmetro  $T = 190$  mm. O agitador é uma turbina de Rushton de diâmetro  $D/T = 0,5$  localizada a  $C = T/3$  do fundo. Os tamanhos das diversas partes do tanque são proporcionais. (ALCAMO *et al.*, 2005). A altura inicial da água é igual ao diâmetro do tanque ( $H = T$ ). Vide Figura 6-1. Não foi possível utilizar o sistema com agitador tipo hélice marinha por falta de dados de perfis de velocidade disponíveis na literatura para deste sistema.

As análises do escoamento próximo ao agitador realizadas aqui servirão como base para o caso com chicanas, já que o agitador é o mesmo.

No caso analisado nesta seção opera o agitador a 194 RPM.

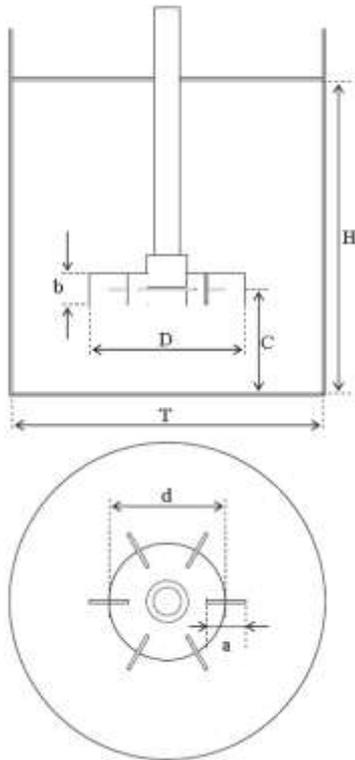


Figura 6-1 – Identificação da geometria e cotas características.

Os perfis a seguir são apurados nas localidades indicadas na Figura 6-2. Vale destacar que os perfis não são tomados em uma linha, mas sim em uma superfície de revolução criada a partir destas linhas de forma a se obter o comportamento médio do escoamento nos 360° em torno do eixo.

O perfil axial encontra-se a  $2r/T = 0,53$  (ou 5,7 mm da ponta do agitador), enquanto que o perfil radial está a 10,0 mm do fundo do tanque (ou  $z/T = 0,053$ ).

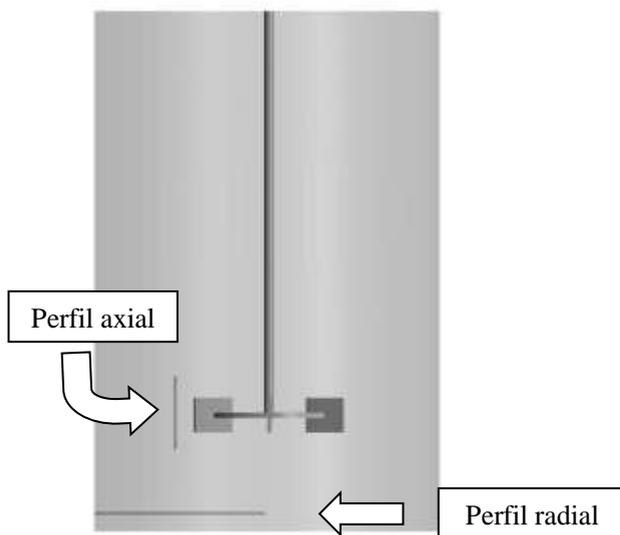


Figura 6-2 – Posição de tomada dos perfis axial e radial.

### 6.1.1 Padrão de escoamento

Esta primeira seção visa apresentar o padrão global do escoamento e suas estruturas características (Figura 6-3).

A primeira característica é a formação de dois grandes vórtices, um acima e outro abaixo do agitador. Esse padrão se deve ao jato radial na descarga do agitador que se divide na parede. Essa característica é menos pronunciada neste caso sem chicanas do que o tanque com chicanas, pois no caso sem chicanas, grande parte da quantidade de movimento está sendo transportada na direção tangencial. A segunda é a formação de uma região de baixas velocidades no centro do reator logo abaixo do disco do agitador. Essa região de baixa mistura pode aprisionar partículas dispersas no líquido diminuindo a capacidade de mistura do tanque. Uma terceira característica é a inclinação para baixo do jato de descarga do agitador devido a maior coluna de líquido próximo a parede externa. Esta característica não está clara na Figura 6-3, mas ficará quando forem tomados os perfis de velocidade radial na descarga.

Também é possível notar que os três resultados apresentam um padrão de semelhança. Todas as tendências são mostradas nos resulta-

dos. Conforme veremos nos próximos itens, somente com uma análise local dos campos é possível identificar diferenças entre os modelos de turbulência.

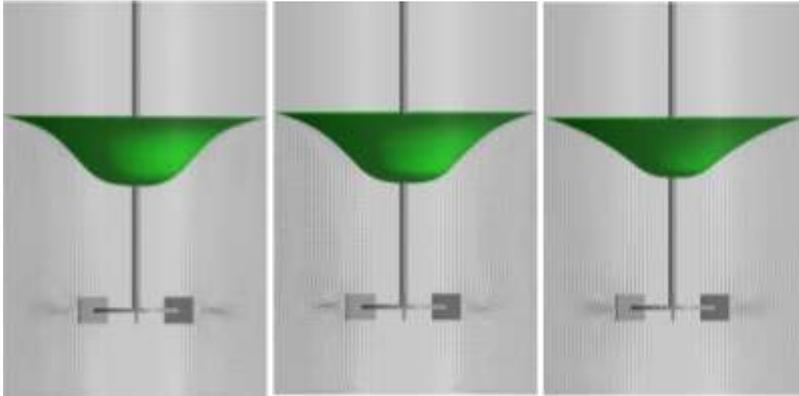


Figura 6-3 – Padrão de escoamento no tanque sem chicanas agitado por uma turbina Rushton (da esquerda para a direita): SST CC; BSL-EARSM CC; BSL-EARSM.

### 6.1.2 Superfície Livre

Os perfis de superfície livre obtidos nas simulações e os medidos por Ciofalo *et al.* (1996) são graficados na Figura 6-4.

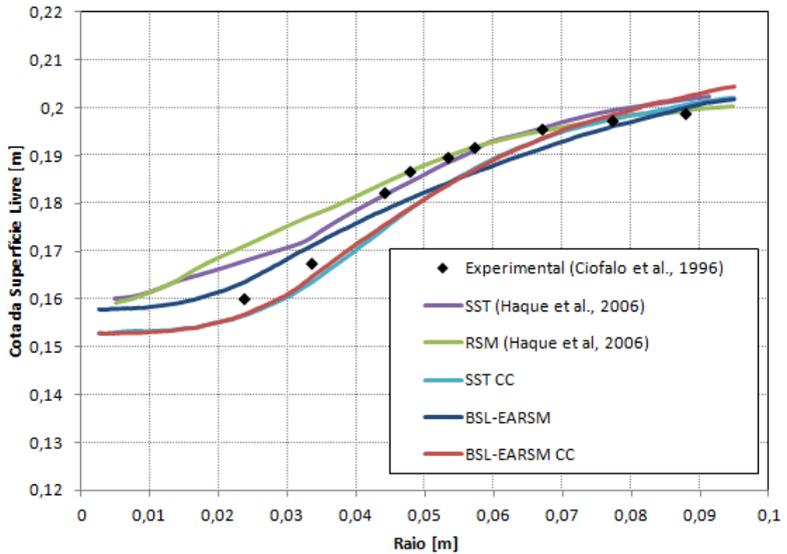


Figura 6-4 – Comparação dos perfis da superfície livre obtida nas simulações numéricas (presente trabalho e HAQUE *et al.* (2006)) e experimentos (CIOFALO *et al.*, 1996).

Os resultados mostram que para todos os modelos o perfil na região de vórtice forçado é sobre predito para os casos sem Correção de Curvatura e subpredito para os casos com Correção de Curvatura.

De uma forma geral, os modelos que usam a Correção de Curvatura apresentam uma tendência a apresentar um perfil mostrando um ponto de inflexão na região de raio 0,04 m. Os outros modelos não mostram esta capacidade de predição mesmo que capturando bem a região de vórtice livre.

Os modelos baseados em Tensores de Reynolds (RSM e BSL-EARSM) mostram uma evolução em relação ao modelo SST mas não tão eficiente quanto os modelo modificados pelo modelo de Spalart e Shur.

Quando se compara os modelos SST e o BSL-EARSM com correção de curvatura não há uma clara distinção de resultados, podendo-se afirmar que ambos são equivalentes neste quesito.

Não há comparação com resultados de simulação de LES, pois não foi encontrado em literatura tal dado.

### 6.1.3 Perfil de velocidade tangencial

Os perfis de velocidade tangencial obtidos estão expostos na Figura 6-5.

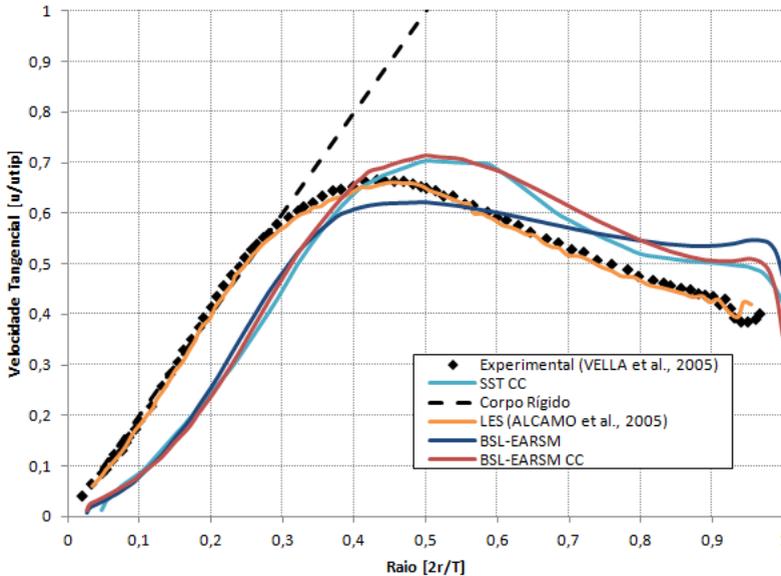


Figura 6-5 – Comparação dos perfis de velocidade tangencial numérico (presente trabalho e ALCAMO *et al.* (2005)) e experimento (VELLA *et al.*, 2003).

Os eixos do gráfico mostram variáveis adimensionalizadas. Nas ordenadas a velocidade tangencial é normalizada pela velocidade de ponta de pá,  $u_{tip}$ , enquanto que a abscissa é um raio normalizado pelo diâmetro do tanque,  $T$ . No gráfico, a linha tracejada representa a solução analítica para o movimento de corpo rígido que é esperado para a região de vórtice forçado. Nota-se que os dados experimentais corroboram esta expectativa.

Fica clara a diferença entre os modelos tipo LES e os modelos RANS na Figura 6-5. O modelo LES obtém uma concordância com os dados experimentais em ambas as regiões do vórtice, além da posição e

valor da máxima velocidade tangencial. Os modelos tipo RANS apresentam discordâncias significativas, ainda que com o modelo de correção de curvatura, na região de vórtice forçado. O modelo BSL-EARSM apresentou um desempenho inferior aos modelos com correção de curvatura na região de vórtice livre, ainda que tanto SST quanto BSL-EARSM com correção de curvatura também tenham sobrepredito a velocidade tangencial nesta região. Também pode-se afirmar que os modelos com correção de curvatura apresentam desempenho semelhantes neste item. Ambos os modelos com correção de curvatura sobrepredizem o ponto e o valor de máxima da velocidade tangencial.

### 6.1.4 Perfil de velocidade radial

O perfil de velocidade radial é analisado através da Figura 6-6.

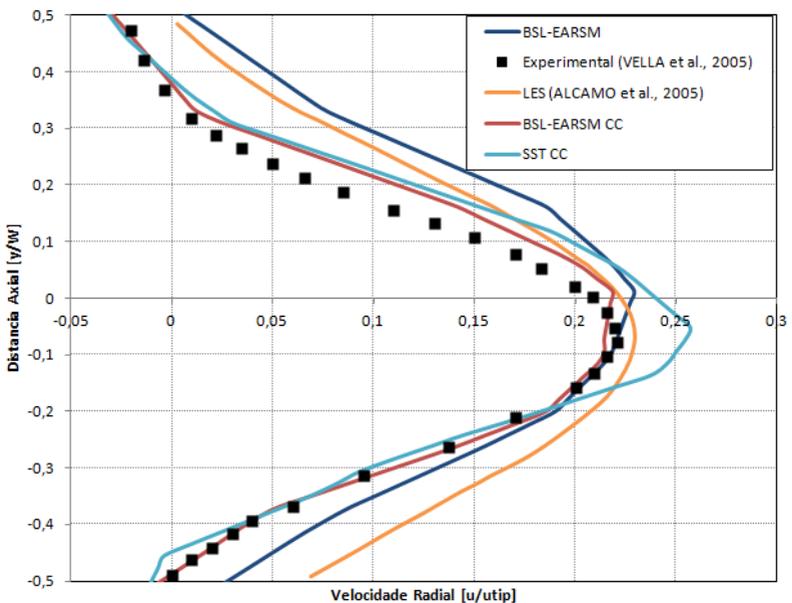


Figura 6-6 – Comparação de perfis de velocidade radial e experimento (VELLA *et al.*, 2003).

No gráfico, os eixos estão normalizados. A abscissa tem a velocidade radial normalizada pela velocidade de ponta de pá,  $u_{tip}$ . A ordenada é normalizada definindo como cota 0,0 o plano que corta o meio do

agitador. Valores negativos indicam posições abaixo deste plano médio, valores positivos, acima.

Neste aspecto do escoamento, o modelo LES não apresenta um desempenho tão preciso quanto na velocidade tangencial. Existe uma sobrepredição da velocidade radial em todo o perfil. O modelo BSL-EARSM sem correção de curvatura também mostra este comportamento, mas com o agravante de apontar o máximo da velocidade radial para cima. Experimentalmente, é possível ver que o máximo é ligeiramente apontado para baixo. Esta é uma das características marcantes do escoamento produzido por agitadores radiais em tanques sem chicanas.

Os modelos com correção de curvatura obtêm uma concordância excelente no perfil nas regiões mais afastadas do plano médio do agitador. Já no ponto de máxima, o modelo SST CC mostra a tendência correta, mas com uma sobrepredição apreciável. O modelo BSL-EARSM CC gerou um perfil com a máxima levemente apontada para cima.

Assim, não há claramente um modelo superior a outro. Olhando somente para os resultados, é de se esperar que se escolhesse o modelo BSL-EARSM CC por concordar melhor com os dados experimentais. Entretanto, a convergência do modelo BSL-EARSM CC é muito inferior ao SST CC. Enquanto o modelo SST CC levava aproximadamente 12 h para convergir, o modelo BSL-EARSM CC levava 18 h para o mesmo caso. Assim, o SST CC apresentou o melhor compromisso de capturar corretamente as principais tendências deste perfil com um tempo de cômputo razoável.

### **6.1.5 Conclusões da comparação dos modelos de turbulência**

Nota-se que não há claramente um modelo que cubra todos os aspectos do escoamento gerado por um agitador radial, nem mesmo o dispendioso LES.

Os modelos de turbulência com a correção de Spalart e Shur apresentaram performance superior aos modelos sem a Correção de Curvatura.

Os dois modelos testado com correção de curvatura (SST e BSL-EARSM) apresentaram resultados equivalentes a não ser no perfil de velocidade radial onde o SST sobrepredisse e o BSL-EARSM apontou o máximo para cima.

Considerando todos os aspectos analisados do escoamento e suas principais características e tempo de processamento, conclui-se que o melhor compromisso foi apresentado pelo SST CC.

## 6.2 VERIFICAÇÃO DO MODELO DE TURBULÊNCIA NO SISTEMA AGITADO POR HÉLICE MARINHA

Nesta seção foram comparados e analisados os resultados da forma da superfície livre obtida com o modelo verificado na seção anterior através da variação da rotação do agitador e de sua posição vertical.

Admitindo simetria radial, são coletadas coordenadas da interface em quatro linhas entre a parede do reator e o impelidor (no plano  $X=0$ , do sistema de coordenadas adotado). A primeira linha, que chamaremos de linha 1, está localizada a 15 mm do eixo do agitador; a linha 2, a 25 mm; a linha 3, a 35 mm e a linha 4, a 45 mm, conforme mostrado na Figura 6-7.

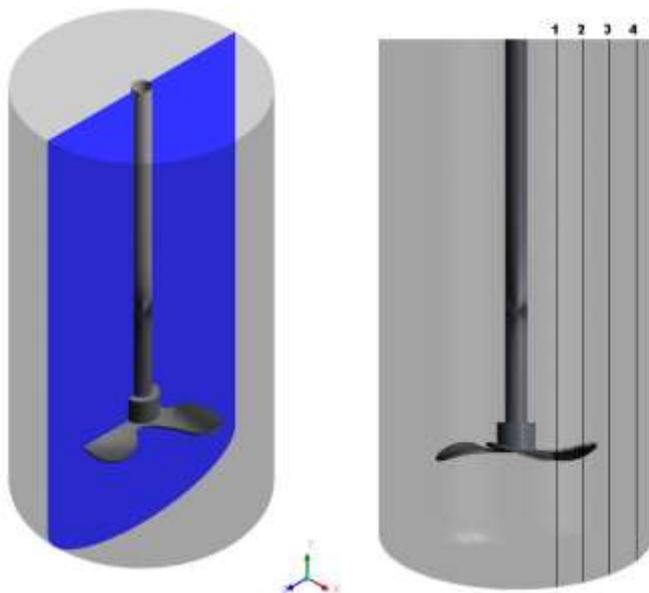


Figura 6-7 – Local de captação de coordenadas experimentais do vórtice. (a) Plano YZ (b) Linhas do plano YZ.

Dessa maneira, obtemos quatro pontos da interface água-ar (para cada caso citado) que nos fornecem uma boa tendência de perfil da mesma, a ponto de ser possível elaborar uma comparação do caso em questão com um simulado em computador (adotando as mesmas distâncias do impelidor ao fundo do reator e velocidade de agitação), utilizando a tecnologia de dinâmica de fluidos computacional.

As medidas aferidas em laboratório são reproduzidas na Tabela 6-1.

Tabela 6-1 – Resultados obtidos em laboratório da altura do vórtice no ponto (de 1 a 4), dada uma velocidade de rotação e distância do impelidor ao fundo do reator.

	Posição do vórtice [mm]											
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
	<b>580 RPM</b>				<b>750 RPM</b>				<b>920 RPM</b>			
	nd	101	112	118	nd	104	117	126	nd	100	122	132
<b>33 mm</b>	nd	101	112	117	nd	103	117	126	nd	98	122	133
	nd	102	112	117	nd	103	116	126	nd	97	121	133
<b>Média</b>	nd	101	112	117	nd	103	116	126	nd	98	121	132
	nd	103	113	120	nd	105	117	127	nd	100	121	131
<b>50 mm</b>	nd	103	114	119	nd	105	119	127	nd	101	120	130
	nd	103	114	119	nd	106	119	127	nd	99	121	131
<b>Média</b>	nd	103	114	119	nd	105	118	127	nd	100	121	131
	nd	101	113	120	nd	101	114	123	nd	103	117	125
<b>66 mm</b>	nd	102	114	120	nd	100	114	123	nd	103	116	125
	nd	102	112	118	nd	100	113	121	nd	102	116	125
<b>Média</b>	nd	102	113	119	nd	100	114	122	nd	103	116	125

Foram realizados três experimentos em momentos diferentes para cada par velocidade de rotação/distância do impelidor ao fundo do tanque, com o objetivo de comparar os dados obtidos na simulação com uma média obtida em laboratório. A coordenada da interface água-ar mais próxima do impelidor (ponto 1) é de difícil mensuração, uma vez

que a hélice pode colidir com o medidor, então, foi apresentada uma estimativa do valor.

Alguns erros experimentais foram observados na obtenção dos dados, tais como: oscilação do agitador (o mesmo apresentou um pequeno movimento translacional periódico); pequenos desvios na altura do agitador e na velocidade de rotação; não simetria do vórtice (em alguns casos o vórtice não era radialmente simétrico) e dificuldade em medir os pontos 1 (pela possibilidade de colisão com a hélice) e 2 (pelo aumento acentuado do perfil do vórtice).

### **6.2.1 Análise da influência da velocidade de rotação do impelidor sobre a superfície livre**

O agitador foi posicionado a 50 mm do fundo do tanque, enquanto que a velocidade de rotação foi variada (580, 750 e 920 RPM).

A Figura 6-8 mostra o efeito do aumento da rotação do agitador (da esquerda para a direita) no campo de fração volumétrica de água. Claramente se nota que o vórtice central aumenta sua profundidade aproximando seu fundo do agitador e elevando a porção de água próxima a parede. Há também um substancial aumento no arraste de ar (caracterizado pela cor amarela) conforme a rotação aumenta. Esse arraste de ar é observado nos experimentos. A rigor, este arraste de ar para o interior do líquido sugere que o uso do modelo não-homogêneo, onde o movimento de cada fase seja caracterizado pelo seu próprio campo de velocidades. Isto permitiria que as bolhas arrastadas saíssem do líquido pela diferença de densidades (empuxo). Utilizando um modelo homogêneo, é de se esperar que o perfil da superfície livre seja sobrepredito.

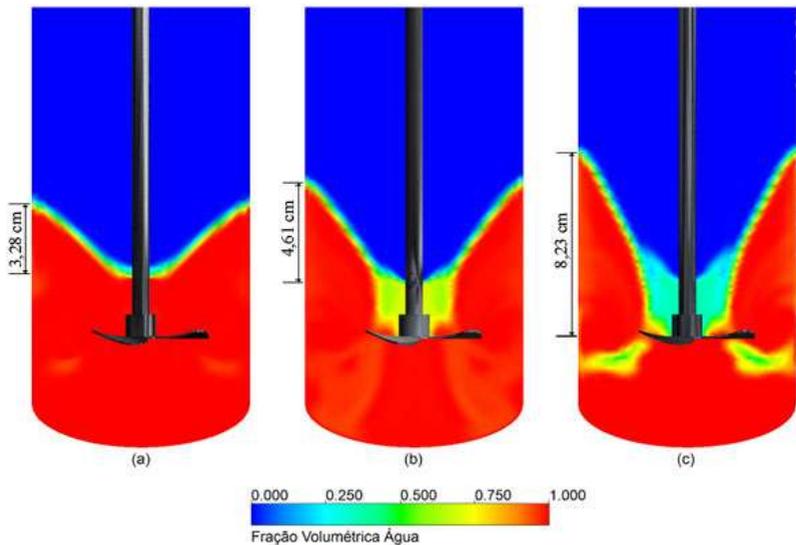


Figura 6-8 – Contornos de fração volumétrica (vermelho: água; azul: ar): comparação entre os resultados para a forma da superfície livre em função da rotação: 580, 750 e 920 RPM.

A Tabela 6-2 e a Figura 6-9 apresentam uma comparação quantitativa entre os resultados do modelo de CFD e do medido experimentalmente. Nota-se que os resultados do modelo CFD concordam de forma satisfatória em todos os pontos amostrados confirmando a verificação (qualitativa e quantitativa) do modelo para o efeito da rotação sobre a forma da superfície livre. Conforme a velocidade aumenta, maiores são os desvios entre o resultado numérico e experimental. É de se esperar que isso aconteça já que nesta rotação a agitação da superfície livre é grande e por isso, a determinação de uma posição média da interface fica prejudicada. Além disso, a hipótese do modelo homogêneo contribui para essa discrepância nos resultados já que há arraste de ar para o interior do líquido o que aumenta o volume do líquido e consequentemente a posição da superfície livre.

Tabela 6-2 – Comparação entre o modelo CFD e os dados medidos experimentalmente para o caso do *clearance* de 50 mm

	Posição do vórtice [mm]											
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
	580 RPM				750 RPM				920 RPM			
<b>CFD</b>	102	108	113	118	93	104	116	125	96	111	126	139
<b>Exp</b>	nd	103	113	119	nd	105	118	127	nd	100	120	130
<b>Erro</b>	nd	5	0	0	nd	0	1	1	nd	1,1	0,4	0,6
<b>Erro %</b>	nd	5,1	0,2	0,8	nd	0,4	1,9	1,1	nd	11	4,4	6,6

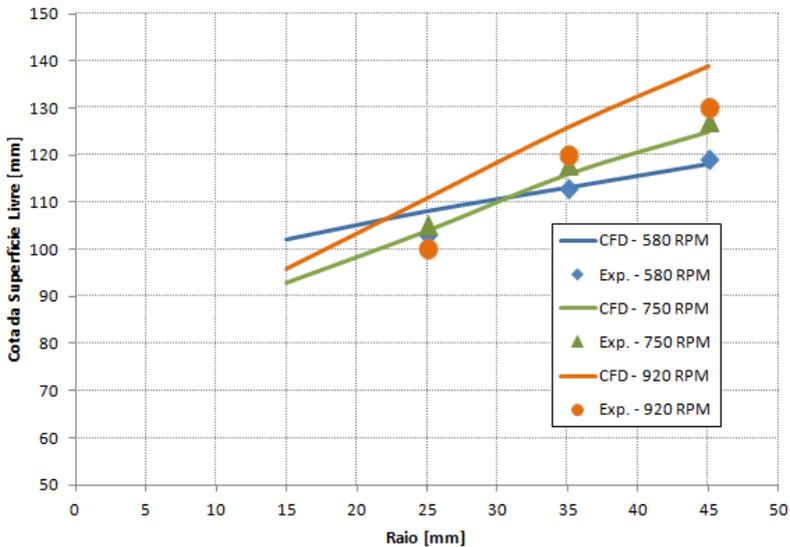


Figura 6-9 – Comparação entre o modelo CFD e os dados experimentais para o caso de *clearance* a 50 mm.

### 6.2.2 Análise da influência da altura do impelidor sobre superfície livre

Nesta seção se analisa o efeito da posição do agitador em relação ao fundo sobre a forma da superfície livre. A rotação do agitador é fixada em 750 RPM.

O efeito da posição do agitador sobre a posição da superfície livre é apresentados na Figura 6-10. É possível observar que conforme o agitador se posiciona mais acima a interface se deforma mais como no caso do aumento da rotação. Outra característica notável é o arraste quase idêntico para as três posições, o que não se observa na prática. No tanque real, conforme o agitador sobe, maior o arraste de ar. Provavelmente, isso se deve a notória natureza dissipativa dos modelos de turbulência a duas equações e de se empregar uma abordagem permanente. Esse fenômeno carece de maior investigação, principalmente no que tange a quantificação do arraste de ar.

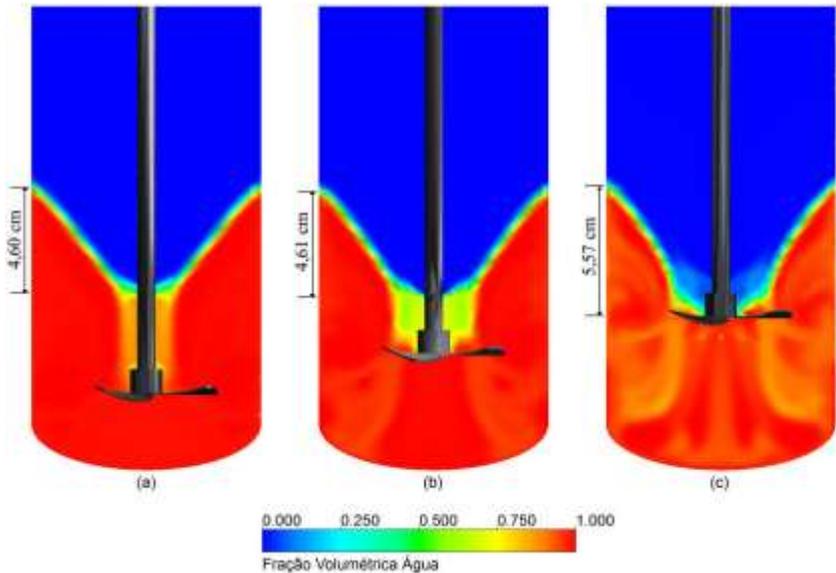


Figura 6-10 – Contornos de fração volumétrica de água: comparação entre três alturas de agitador:  $c = 33$  mm;  $c = 50$  mm;  $c = 66$  mm.

Na Tabela 6-3 e na Figura 6-11, vê-se um comparativo quantitativo entre os resultados de CFD e os dados medidos para a posição da superfície livre em função da posição do agitador. Como no caso da variação da rotação, os resultados mostram boa concordância permitindo concluir que o modelo homogêneo é adequado para capturar o fenômeno, apesar da não captura do arraste de ar. Em comparação com o caso a 920 RPM e 50 mm, se nota um menor arraste de ar. Um reflexo deste fato são os maiores erros para o caso de 66 mm onde se espera maior arraste.

Tabela 6-3 – Comparação entre os dados experimentais e os resultados de CFD para a posição da superfície livre para o caso de rotação a 750 RPM.

	<b>Posição do vórtice [mm]</b>				
	1	2	3	4	
	<b>750 RPM</b>				
<b>33 mm</b>	CFD	96	104	113	121
	Exp.	nd	103	116	126
	Erro	nd	1	3	5
	Erro %	nd	0,8	3,0	4,0
<b>50 mm</b>	CFD	93	104	116	125
	Exp.	nd	105	118	127
	Erro	nd	1	2	2
	Erro %	nd	0,4	1,9	1,1
<b>66 mm</b>	CFD	10	119	129	138
	Exp.	nd	100	113	122
	Erro	nd	19	16	16
	Erro %	nd	19,3	13,6	12,9

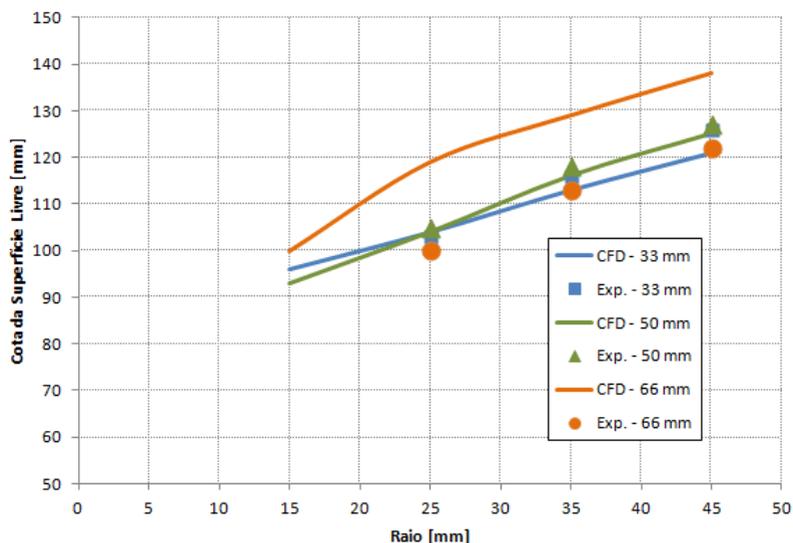


Figura 6-11 – Comparação entre os dados experimentais e os resultados de CFD para a posição da superfície livre para o caso de rotação a 750 RPM.

### 6.2.3 Conclusões

Utilizando a dinâmica de fluidos computacional foram obtidos resultados razoavelmente concordantes aos experimentais em relação à posição da superfície livre, ou seja, o modelo ajustou-se bem em relação ao escoamento em tanques agitados de escala laboratorial, mesmo com todas as simplificações adotadas.

Uma análise qualitativa mostrou que o aumento de velocidade de rotação, fixado uma altura do agitador, implica em aumento do vórtice, conforme verificado na prática. Também é verificado o aumento do vórtice, fixada a velocidade do impelidor, aumentando-se a distância entre o agitador e o fundo do tanque.

Com uma altura do impelidor de 66 mm, os resultados da análise CFD divergiram dos obtidos experimentalmente, sugerindo que nessa posição o modelo não captura todos os aspectos importantes do escoamento e, portanto, o Modelo Homogêneo não é adequado para esta situação específica.

## 6.3 ANÁLISE DOS CAMPOS TURBULENTOS E DE VELOCIDADE MÉDIA NA FASE LÍQUIDA

### 6.3.1 Análise da influência da velocidade de rotação do impelidor sobre os campos turbulentos e velocidade

Nesta seção serão analisados os campos turbulentos,  $k$  e  $\varepsilon$ , e o campo médio de velocidade,  $\mathbf{u}$ . O agitador é posicionado no centro do tanque, sendo que a hélice ficou a uma distância de 50 mm do fundo. As velocidades de agitação estudadas foram de 580, 750 e 920 RPM.

Vale lembrar que os processos de quebra e coalescência são influenciados diretamente por  $\varepsilon$ . Daí a importância no conhecimento de sua distribuição ao longo do tanque.

A magnitude da velocidade é mostrada na Figura 6-12. É intuitivo o aumento da velocidade com o aumento da rotação. É identificável também uma região no centro do reator de baixas velocidades, potencialmente uma região de zona morta.

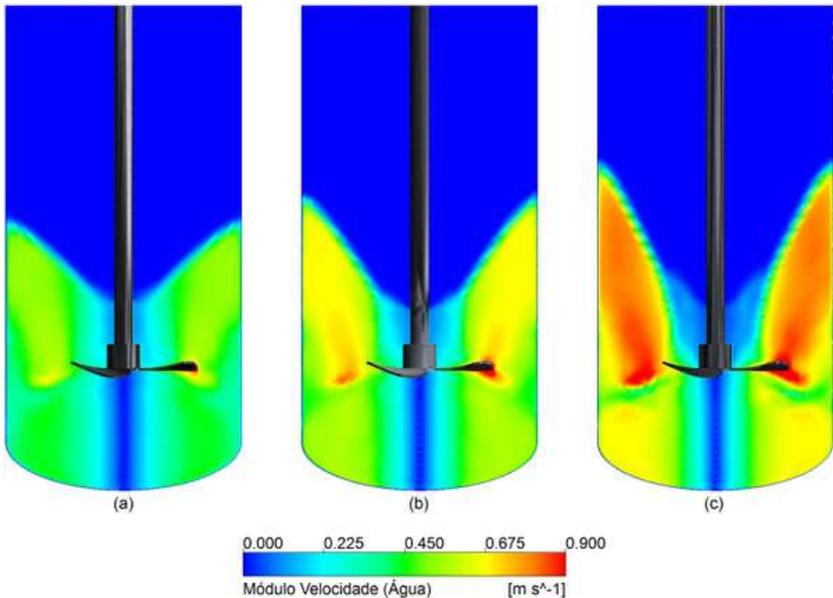


Figura 6-12 – Módulo da velocidade da água para sistema ar-água com diferentes velocidades de rotação do agitador a 50 mm do fundo do tanque: (a) 580 RPM; (b) 750 RPM; (c) 920 RPM.

Uma análise quantitativa pode ser feita com os dados da Tabela 6-4. Como observado qualitativamente, a velocidade aumenta em todo tanque com o aumento da rotação. É possível observar que os valores médios e máximos aumentam linearmente conforme a agitação aumenta, de acordo com o esperado.

Tabela 6-4 – Resultados numéricos do módulo da velocidade da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes velocidades de rotação do agitador a 50 mm do fundo do tanque.

Velocidade Agitador	Região	Módulo Velocidade [m/s]		
		Máximo	Mínimo	Médio
<b>580 RPM</b>	Agitador	1,694	0,005	0,451
	Tanque	0,745	0,000	0,436
	Geral	1,694	0,000	0,437
<b>750 RPM</b>	Agitador	2,139	0,007	0,596
	Tanque	0,940	0,000	0,576
	Geral	2,139	0,000	0,578
<b>920 RPM</b>	Agitador	2,571	0,009	0,743
	Tanque	1,146	0,000	0,701
	Geral	2,573	0,000	0,706

A Figura 6-13 mostra o campo de dissipação de energia cinética turbulenta. Vê-se claramente que esta propriedade tem sua maior intensidade nas proximidades do agitador. Conforme a velocidade de rotação aumenta, o volume de abrangência dos altos valores de  $\varepsilon$  (região vermelha) aumenta. Assim, observando estes campos, pode-se inferir que quanto maior a rotação, maior a intensidade do processo de quebra. Isso é corroborado por Pinto (2006) para este sistema.

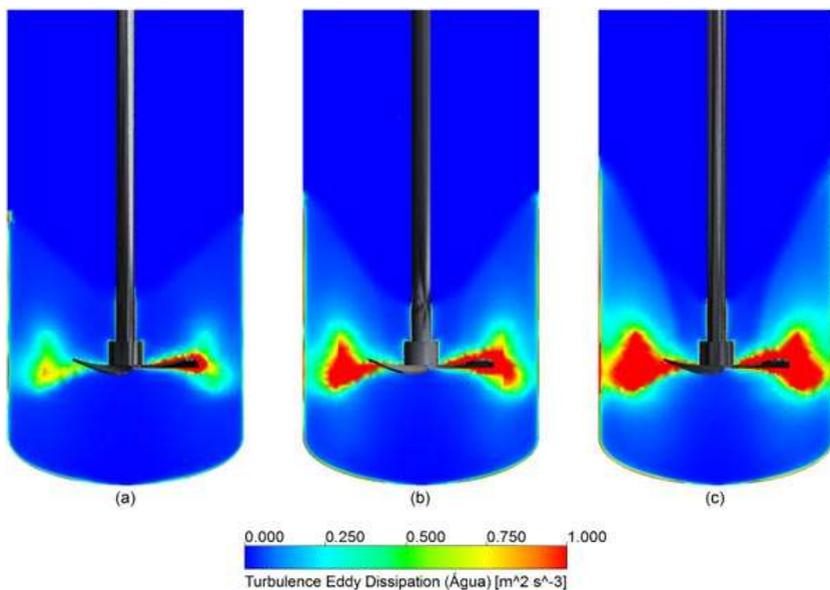


Figura 6-13 – Dissipação da energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes velocidades de rotação do agitador do fundo do tanque: (a) 580 RPM; (b) 750 RPM; (c) 920 RPM.

A análise quantitativa a partir da Tabela 6-5 confirma a tendência observada da Figura 6-13 em todas as estatísticas de valor máximo, mínimo, médio e na integral no volume. Com estes dados e a equação (3-18) pode-se estimar o quanto de quebra a mais ocorrerá em um caso em relação a outro.

Tabela 6-5 – Resultados numéricos de dissipação da energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes velocidades de rotação do agitador a 50 mm do fundo do tanque.

Velocidade Agitador	Região	Diss. Energ. Cin. Turb. ( $\epsilon$ ) [ $\text{m}^2/\text{s}^3$ ]			
		Máximo	Mínimo	Médio	Int ( $10^{-5}$ )
<b>580 RPM</b>	Agitador	643,3	0,009	0,607	5,62
	Tanque	2,0	0,000	0,083	5,27
	Geral	643,3	0,000	0,151	1,09
<b>750 RPM</b>	Agitador	1372,2	0,020	1,236	11,0
	Tanque	4,3	0,000	0,166	10,6
	Geral	1372,2	0,000	0,296	21,6
<b>920 RPM</b>	Agitador	2586,8	0,034	2,354	19,1
	Tanque	8,2	0,000	0,290	19,7
	Geral	2586,8	0,000	0,510	38,8

A última variável a ser analisada é a energia cinética turbulenta. Esta variável fornece a dimensão da flutuação do campo de velocidades em cada ponto do domínio.

Conforme as outras variáveis, ela aumenta com o aumento da rotação do agitador. Diferente da sua dissipação, a energia cinética turbulenta se espalha bastante pelo volume do tanque, mostrando nitidamente a natureza dissipativa, ou difusiva, de sua equação de transporte.

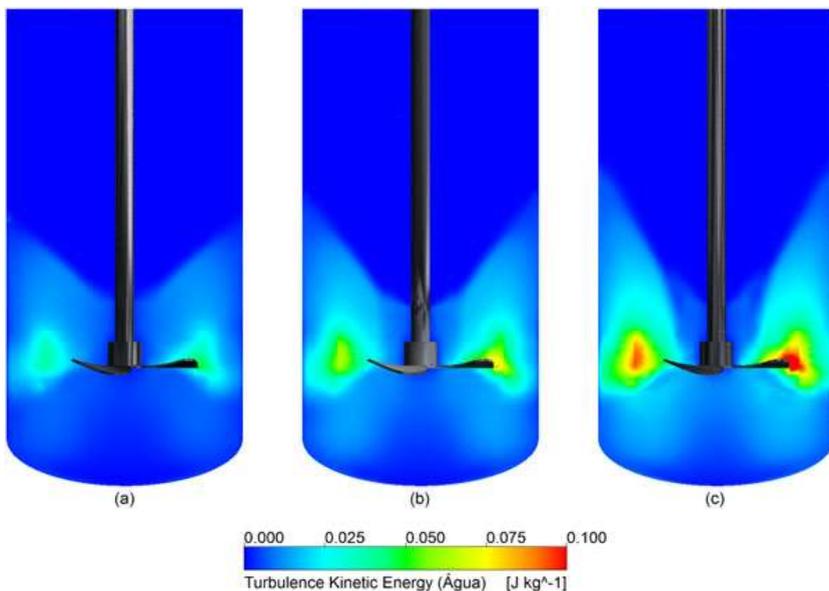


Figura 6-14 – Energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes velocidades de rotação do agitador a 50 mm do fundo do tanque: (a) 580 RPM; (b) 750 RPM; (c) 920 RPM.

A tendência evidenciada na Figura 6-14 é quantitativamente mostrada através da Tabela 6-6. Os valores aumentam conforme aumenta a velocidade do agitador. Também a energia cinética turbulenta é maior na região perto do agitador, que é o ponto de injeção de energia mecânica, em relação à região longe do agitador.

Tabela 6-6 – Resultados numéricos de energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes velocidades de rotação do agitador a 50 mm do fundo do tanque.

Velocidade Impelidor	Região	Energia cinética turbulenta ( $k$ ) [ $\text{m}^2/\text{s}^2$ ]			
		Máximo	Mínimo	Médio	Int( $10^{-5}$ )
<b>580 RPM</b>	Agitador	0,327	0,000	0,018	0,170
	Tanque	0,058	0,000	0,009	0,560
	Geral	0,392	0,000	0,010	0,730
<b>750 RPM</b>	Agitador	0,553	0,001	0,031	0,280
	Tanque	0,098	0,000	0,014	0,910
	Geral	0,553	0,000	0,016	1,190
<b>920 RPM</b>	Agitador	0,831	0,000	0,049	0,400
	Tanque	0,140	0,000	0,019	1,330
	Geral	0,831	0,000	0,022	1,730

### 6.3.2 Análise da influência da altura do agitador sobre os campos turbulentos e velocidade

Nesta seção serão avaliados os campos turbulentos e de velocidade ao se modificar a posição do agitador em relação ao fundo. O agitador foi posicionado no centro do reator. A velocidade de rotação foi mantida constante e igual a 750 RPM. As diferentes alturas do agitador em relação ao fundo do tanque estudadas foram de 33, 50 e 66 mm.

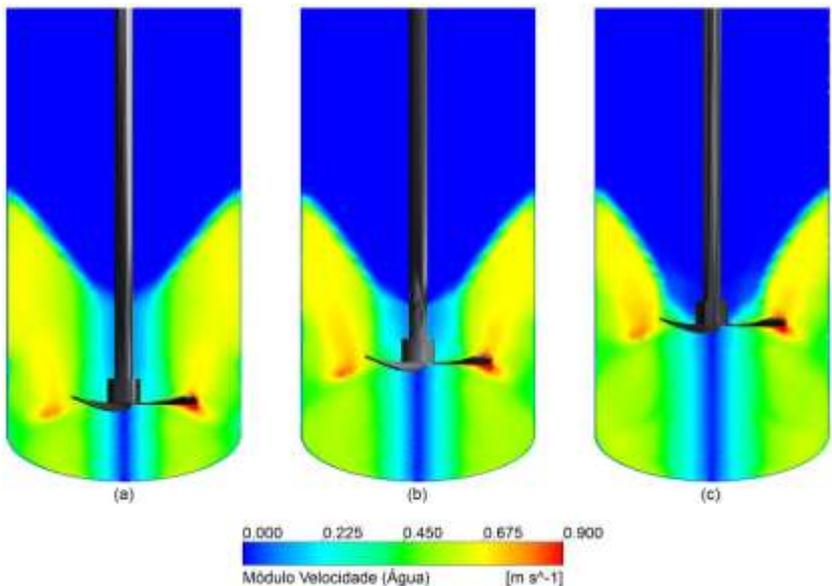


Figura 6-15 – Módulo da velocidade da água para sistema ar-água com diferentes alturas do agitador a 750 RPM: (a) 33 mm; (b) 50 mm; (c) 66 mm.

A Figura 6-15 mostra o campo de velocidade média para as três posições do agitador. A mesma zona de baixa velocidade comum em tanques agitados mecanicamente está claramente evidenciada. Uma característica interessante é a região de abrangência de altas velocidades. Conforme se observa, a zona de velocidades ao redor de 0,6 m/s está localizada entre o plano do agitador e a superfície livre.

Com a ajuda da Tabela 6-7, é possível analisar as estatísticas do campo médio de velocidades. Interessante notar que conforme o agitador tem sua posição vertical aumentada a velocidade máxima geral (que é a ponta do agitador) diminui. Isso se explica pela menor pressão hidrostática sobre o agitador.

Tabela 6-7 – Resultados numéricos do módulo da velocidade da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes alturas do agitador a 750 RPM.

Altura Agitador	Região	Módulo Velocidade [m/s]		
		Máximo	Mínimo	Médio
33 mm	Agitador	2,416	0,006	0,573
	Tanque	0,957	0,000	0,569
	Geral	2,416	0,000	0,570
50 mm	Agitador	2,139	0,007	0,596
	Tanque	0,940	0,000	0,576
	Geral	2,139	0,000	0,578
66 mm	Agitador	2,066	0,005	0,628
	Tanque	0,870	0,000	0,572
	Geral	2,066	0,000	0,578

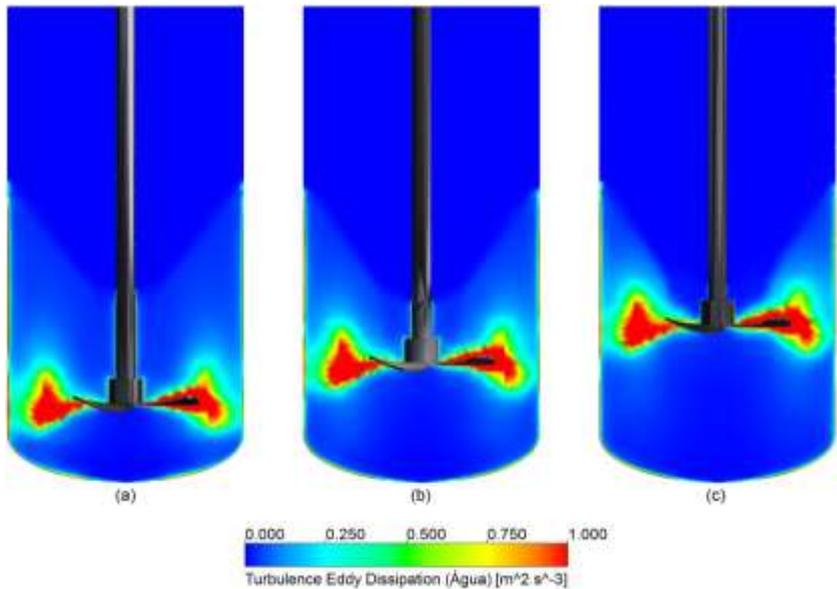


Figura 6-16 – Dissipação da energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes alturas do agitador a 750 RPM: (a) 33 mm; (b) 50 mm; (c) 66 mm.

Os campos de dissipação de energia cinética turbulenta para as três posições do agitador são mostradas na Figura 6-16. A princípio, a zona de alta dissipação turbulenta está confinada na região ao redor do agitador. Conforme o agitador sobe, a zona de alta dissipação turbulenta se aproxima da superfície livre. Por outro lado, maior o volume abaixo do agitador sem dissipação turbulenta.

Conforme se observa na Tabela 6-8, o valor médio da dissipação turbulenta na região do agitador é praticamente o mesmo nos três casos assim como na região longe do agitador. Esse resultado é o esperado já que o valor desta variável é diretamente proporcional à agitação.

Tabela 6-8 – Resultados numéricos de dissipação de energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes alturas do agitador a 750 RPM.

Altura Agitador	Região	Diss. Energ. Cin. Turb ( $\epsilon$ ) [ $\text{m}^2/\text{s}^3$ ]			
		Máximo	Mínimo	Médio	Integral( $10^{-5}$ )
<b>33 mm</b>	Agitador	1296,4	0,009	1,180	10,8
	Tanque	5,6	0,000	0,161	10,8
	Geral	1296,4	0,000	0,284	21,6
<b>50 mm</b>	Agitador	1372,2	0,020	1,236	11,0
	Tanque	4,3	0,000	0,166	10,7
	Geral	1372,2	0,000	0,296	21,7
<b>66 mm</b>	Agitador	1267,4	0,005	1,398	11,0
	Tanque	5,8	0,000	0,164	10,4
	Geral	1267,4	0,000	0,300	21,4

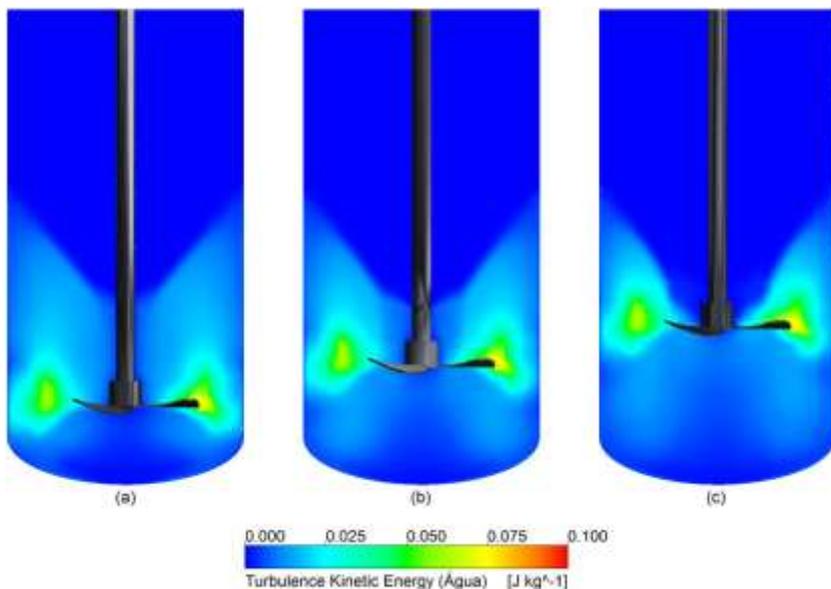


Figura 6-17 – Energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes alturas do agitador a 750 RPM: (a) 33 mm; (b) 50 mm; (c) 66 mm.

O comportamento do campo de energia cinética turbulenta em função da posição do agitador (Figura 6-17) é semelhante ao da sua dissipação. Conforme o agitador sobe, a zona de alta turbulência também sobe, deixando uma zona de baixa turbulência abaixo do agitador cada vez maior.

As estatísticas mostradas na Tabela 6-9 são semelhantes para cada posição do agitador, não dando margem a especular qualquer diferença neste quesito.

Tabela 6-9 – Resultados numéricos de energia cinética turbulenta da fase aquosa para sistema ar-água com diferentes alturas do agitador a 750 RPM.

Altura Agitador	Região	Energia Cinética Turbulenta (k) [m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]			
		Máximo	Mínimo	Médio	Int(10 <sup>-5</sup> )
33 mm	Agitador	0,559	0,000	0,028	0,266
	Tanque	0,102	0,000	0,014	0,943
	Geral	0,559	0,000	0,015	1,209
50 mm	Agitador	0,553	0,001	0,031	0,279
	Tanque	0,098	0,000	0,014	0,911
	Geral	0,553	0,000	0,016	1,190
66 mm	Agitador	0,605	0,000	0,034	0,275
	Tanque	0,103	0,000	0,013	0,869
	Geral	0,605	0,000	0,016	1,145

### 6.3.3 Análise da abrangência do campo turbulento

Como já foi comentado, a variável de fundamental importância para a DTP é a dissipação da energia cinética turbulenta,  $\varepsilon$ . A sua distribuição é mostrada na Figura 6-13 e Figura 6-16. Essa variável representa a taxa específica de energia do escoamento turbulento que é dissipada nas menores escalas ou turbilhões. Essa variável aparece na maior parte dos modelos de quebra como sendo a quantificação do efeito da turbulência neste processo.

Vê-se claramente que a região de turbulência atenuada abaixo do agitador aumenta conforme a posição do agitador em relação ao fundo (ver Figura 6-16). Por outro lado, como a agitação é constante em todos os casos, a região onde essa turbulência se dissipa diminui fazendo com que a mesma quantidade de energia seja distribuída em um volume menor. Essa região invariavelmente está entre o agitador e a superfície livre. Em um caso onde a fase dispersa tenha uma densidade menor que a fase contínua, a fase dispersa tende a se concentrar preferencialmente nesta mesma região onde a dissipação da energia cinética turbulenta é mais alta. Portanto, é possível supor que a elevação do agitador leva a maiores taxas de quebra, e, conseqüentemente, a menores tamanhos da fase dispersa, sem modificar a característica da DTP bimodal.

Pode-se quantificar esta assertiva calculando o volume dentro do reator onde  $\varepsilon$  apresenta valores maiores que um determinado valor. A Tabela 6-10 mostra para cada caso o volume do isovolume com  $\varepsilon$  maior que  $0,02 \text{ [m}^2/\text{s}^3]$ . Este valor foi arbitrariamente escolhido em função do valor máximo encontrado no domínio.

Tabela 6-10 – Volumes dos Isovolumes de  $\varepsilon=0,02 \text{ [m}^2/\text{s}^3]$ .

Caso	Volume do Isovoluma [mL]
C=20 [mm]	697
C=33 [mm]	453
C=50 [mm]	219
C=66 [mm]	49

Nota-se que conforme o agitador sobe, o volume onde a turbulência é dissipada diminui fazendo com que mais energia seja possivelmente transferida ao processo de quebra das gotas da fase dispersa.

### 6.3.4 Conclusões

O padrão de escoamento obtido utilizando-se dinâmica de fluidos computacional apresentou resultados qualitativamente de acordo com o observado experimentalmente. Foi possível localizar a interface ar-líquido no interior do tanque e, dessa forma, simplificar os casos estudados gerando novos sistemas que levavam em conta apenas a fase líquida.

Para os casos onde a agitação é maior (920 RPM), é verificado o arraste de ar para o interior do líquido. O Modelo Homogêneo não é adequado para esta situação particular já que este modelo não permite a segregação das fases (neste caso, pelo empuxo), pois as duas fases compartilham o mesmo campo de velocidades. Nestes casos, é recomendável utilizar o Modelo Não-Homogêneo.

Foi possível observar que a variação da posição do agitador pode gerar uma zona de menor mistura abaixo do agitador e outra de maior mistura entre o agitador e a superfície livre.

## 6.4 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA ALTURA DO AGITADOR SOBRE A DTP

Neste item, será incluído no modelo de escoamento o algoritmo ASM de forma a visualizar o comportamento de distintos tamanhos de gota no interior da suspensão. Como foi observada por Pinto (2006), a influência da altura do agitador sobre a DTP foi inesperada. Ao aumentar a altura do agitador, o diâmetro médio de gotas diminui. O objetivo desta seção é investigar, do ponto de vista do escoamento, os motivos para esse fenômeno ocorrer.

Primeiramente, são apresentados os resultados experimentais de Pinto (2006). Conforme descrito no Capítulo de Delineamento Experimental, Pinto (2006) conduziu uma série de reações de polimerização em suspensão e avaliou a influência de uma série de parâmetros operacionais e geométricos sobre a DTP final. A polimerização em suspensão possui uma primeira etapa que é formar a suspensão de gotas de monômero (no caso, estireno) em água. As altas conversões de monômero

impedem que a DTP se altere (os processos de quebra e coalescência entram em equilíbrio). Portanto, a DTP medida das partículas sólidas de poliestireno é a DTP final das gotas.

Para esta análise, Pinto (2006) utilizou as seguintes condições:

- Rotação: 750 RPM
- *Holdup*: 30%

As três DTP obtidas por Pinto (2006) são reproduzidas a seguir:

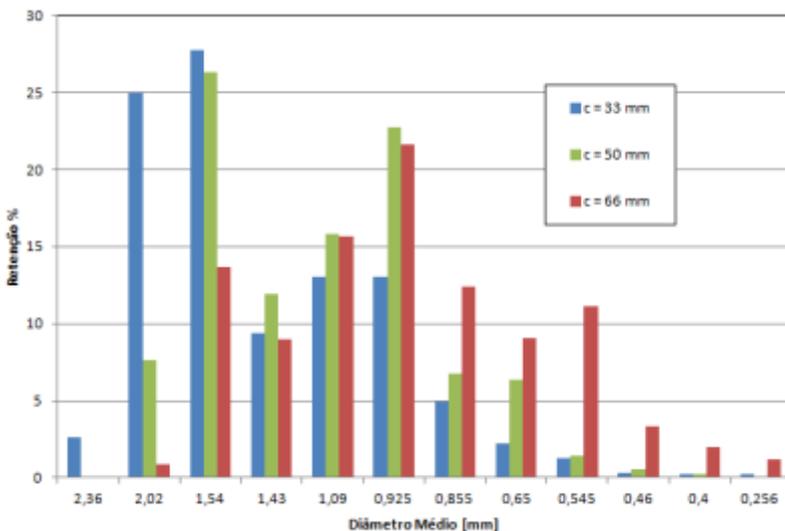


Figura 6-18 – Distribuição de tamanho de partícula: casos operando a 750 RPM, variando o clearance: 33 mm (azul), 50 mm (verde), 66 mm (vermelho).

Na Figura 6-18, as ordenadas representam a retenção mássica em peneira, ou a fração mássica percentual. A abscissa representa o tamanho médio das partículas de determinada classe de tamanho. De uma maneira geral, as DTP não são monomodais. Nota-se que a DTP para o caso de  $c = 33$  mm apresenta uma moda entre os diâmetros de 2,02 e 1,54 mm. Outra moda pode ser identificada entre os diâmetros 1,09 e 0,925 mm. É possível notar também neste histograma duas modas no diâmetro 1,54 mm e em 0,925 mm, para o caso com  $c = 50$  mm. Neste caso, a maior classe de tamanho apresenta uma retenção de aproximadamente 0,1%, que é muito pequena quando comparada à retenção (7,65%) classe seguinte de 2,02 mm. Isso mostra que o tamanho mínimo

do caso com  $c = 50$  mm é menor que o do caso com  $c = 33$  mm. O deslocamento da DTP para os menores diâmetros é mais nítido para o caso de  $c = 66$  mm. Já não há quaisquer partículas na maior classe. Entretanto, as modas são semelhantes ao caso anterior com a de 1,54 e 0,925 mm. A concentração das classes menores que a segunda moda é apreciável chegando a se destacar uma moda em 0,545 mm com aproximadamente 11% de retenção.

A Tabela 6-11 apresenta o diâmetro médio de Sauter de cada distribuição.

Tabela 6-11 – Estatísticas das DTP em função da altura do agitador.

<b>Altura do agitador [mm]</b>	<b>Diâmetro médio de Sauter [mm]</b>
33	1,29
50	1,10
66	0,84

Como se pode observar a tendência do Diâmetro de Sauter é inversamente proporcional à altura do agitador. Pinto (2006) não encontrou explicação plausível para este comportamento já que o comportamento esperado seria ao contrário: quanto mais próximo do fundo, maior seria a região de alto cisalhamento.

Sendo as DTP multimodais, o diâmetro médio de Sauter pode não ser representativo da população de partículas. Isso porque este valor pode recair em uma classe de tamanho de baixa concentração. Assim, para efeito da dinâmica do escoamento, seria mais representativo utilizar, pelo menos, as modas como diâmetros médios. Modelos como o ASM (ver Capítulo de Modelos) e Balanço Populacional são mais adequados para tratar essa situação.

Tendo em vista a proposta deste estudo ser aplicar o modelo mais simples para explicar esta observação experimental, optou-se por utilizar o modelo ASM.

### 6.4.1.1 Análise do comportamento da DTP sob o ponto de vista do escoamento

Como foi concluído na seção onde foi analisada a turbulência, conforme o agitador se encontra mais longe do fundo ou mais perto da superfície livre, o campo de turbulência (a energia cinética e sua dissipação) fica mais confinado cada vez mais em uma região menor que consiste entre o plano do agitador e a superfície livre.

É notório que um dos fenômenos motrizes do processo de quebra é a interação entre a partícula e as estruturas turbulentas em um escoamento (ARAUJO, 2006). A intensidade com que essas estruturas turbulentas se movimentam e trocam energia com o meio a sua volta é medido pela Energia Cinética Turbulenta,  $k$ , e por sua Dissipação,  $\varepsilon$ . Em geral, as taxas de quebra estão relacionadas de alguma forma com a Dissipação,  $\varepsilon$ . Assim, ao observar os resultados de campo turbulento, suspeitou-se que ao diminuir o volume de atuação de alta turbulência, o processo de quebra se intensificaria pois a energia turbulenta específica seria maior. A análise de Hinze (1955) fornece:

$$d_{max} = \left( \frac{We_{crit}}{2} \right)^{3/5} \frac{\sigma^{3/5}}{\rho^{3/5} \varepsilon^{2/5}} \quad (6-1)$$

onde,

$d_{max}$  é o diâmetro máximo permissível em uma dispersão;

$\sigma$  é o coeficiente de tensão superficial entre as fases;

$We_{crit}$  é o número de Weber crítico a partir do qual o processo de quebra ocorre.

Para que essa explicação fizesse sentido, a fase dispersa deveria estar majoritariamente concentrada nesta mesma região de alta turbulência.

Essa é a suposição que se quer confirmar ao usar o modelo ASM: verificar se a dispersão das diferentes modas das DTP obtidas experimentalmente estão concentradas nas regiões de alta turbulência.

### 6.4.1.2 Análise da dispersão de gotas de estireno em água

Neste ponto há uma escolha a ser feita: modelar a fase polidispersa utilizando todas as classes de tamanho apuradas no experimento ou utilizar somente as modas? Para alcançar o objetivo de forma mais ágil, optou-se por usar somente as modas como diâmetros médios.

No processo para obter a nova DTP centrada nas modas foi necessário aglutinar várias classes ao redor de cada moda. Nota-se que para o caso de 66 mm, optou-se por usar uma terceira moda para representar os menores diâmetros. A Tabela 6-12 resume o resultado final desse processo de redução das DTP fornecendo o tamanho da moda e sua respectiva fração mássica.

Tabela 6-12 – Redistribuição das DTP ao redor das modas.

Caso	Moda 1 [mm]	FM	Moda 2 [mm]	FM	Moda 3 [mm]	FM
<b>33 mm</b>	1,75	0,65	0,90	0,35	nd	nd
<b>50 mm</b>	1,60	0,46	0,90	0,54	nd	nd
<b>66 mm</b>	1,50	0,24	0,96	0,50	0,55	0,26

As propriedades da água e do estireno foram extraídas do estudo de Yang *et al.* (2000), assim como a regra de mistura para a viscosidade da suspensão. Os detalhes podem ser observados na Tabela 6-13.

Tabela 6-13 – Propriedades físicas dos fluidos.

Substância	Densidade [kg m <sup>-3</sup> ]	Viscosidade [Pa s]
Água	996,95	9,03 x 10 <sup>-4</sup>
Estireno	901,13	6,71 x 10 <sup>-4</sup>
Mistura	953,48	1,52 x 10 <sup>-3</sup>

A aplicação do modelo ASM passa por uma análise do número de Stokes. O número de Stokes é a razão entre o tempo de relaxação da partícula e um tempo característico do sistema.

$$St = \frac{t_p}{t_f} \quad (6-2)$$

O tempo de relaxação da partícula é o tempo que a partícula leva para alcançar 95% de sua velocidade terminal. Este valor pode se obtido através de:

$$t_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_c} \quad (6-3)$$

O tempo característico do sistema pode ser definido neste caso como período de rotação do agitador.

$$t_f = \frac{1}{\Omega^{rot}} \quad (6-4)$$

Assim, os Números de Stokes para cada moda de cada caso fica:

Tabela 6-14 – Número de Stokes para cada moda de cada posição do agitador.

<b>Caso</b>	<b>Moda 1</b>	<b>Moda 2</b>	<b>Moda 3</b>
<b>33 mm</b>	2,1	0,6	nd
<b>50 mm</b>	1,8	0,6	nd
<b>66 mm</b>	1,6	0,6	0,2

O modelo ASM é adequado para partículas com Stokes da ordem de 1 para baixo. Ou seja, o Stokes da Moda 1 de todos os casos está no limiar da validade do modelo. Para uma análise qualitativa, é suficiente a precisão obtida já que a escala de tempo do sistema é a menor encontrada no domínio (na ponta da pá do agitador). Ainda assim, uma análise

mais aprofundada com o Modelo Não-Homogêneo, onde o movimento de cada tamanho da fase é representado por uma equação de transporte completa e não somente por um balanço de equilíbrio, é necessária para comprovar esta afirmação.

Outros dois números adimensionais a serem analisados são o Reynolds da partícula e o Eotvos. O Reynolds avalia o escoamento da fase contínua ao redor da partícula e indica se o regime viscoso ou o regime inercial dominam o processo. O Eotvos é a razão entre forças gravitacionais e as de tensão superficial. Com estes dois números é possível inferir qual a forma da partícula no escoamento (CLIFT *et al.*, 1978).

A definição do Reynolds é:

$$Re_p = \frac{d_p \rho_c |\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_p|}{\mu_c} \quad (6-5)$$

Enquanto que o número de Eotvos é dado por:

$$Eo = \frac{g \Delta \rho d_p^2}{\sigma} \quad (6-6)$$

onde  $\sigma$  é o coeficiente de tensão superficial entre meio contínuo e partícula. De acordo com Carvalho (2011), o valor para temperatura ambiente é de 32 mN/m.

Com isso, a análise da forma das partículas que constituem as modas das DTP fica conforme a Tabela 6-15. Conforme se observa, todas as classes de tamanho indicam forma esférica das partículas. Esse fato tem duas consequências:

- apesar do  $Re_p$  não estar no regime plenamente viscoso (regime de Stokes,  $Re_p < 0,2$ ), é possível utilizar a premissa de escoamento viscoso, pois as partículas não se deformam;
- a forma esférica em todas as classes implica que a circulação interna da partícula é desprezível, podendo ser comparada, neste sentido, a uma partícula rígida.

Dessas duas afirmações vem a base para a escolha da lei de arraste de Schiller-Naumann (1933) que é desenvolvida para partículas sólidas.

Tabela 6-15 – Análise da forma das partículas.

<b>Caso</b>	<b><math>Re_p</math></b>	<b><math>Eo</math></b>	<b>Forma</b>
<b>33 mm/Moda 1</b>	29,7	0,082	Esférica
<b>33 mm/Moda 2</b>	15,9	0,023	Esférica
<b>50 mm/Moda 1</b>	27,1	0,068	Esférica
<b>50 mm/Moda 2</b>	15,6	0,022	Esférica
<b>66 mm/Moda 1</b>	25,8	0,062	Esférica
<b>66 mm/Moda 2</b>	16,3	0,025	Esférica
<b>66 mm/Moda 3</b>	09,3	0,008	Esférica

1. A Figura 6-19 mostra o campo de fração mássica da classe moda

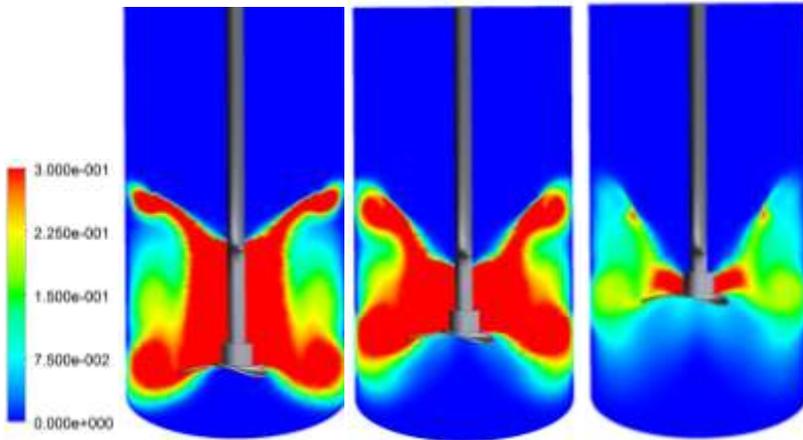


Figura 6-19 – Campo de fração mássica da Moda 1:  $c = 33$  mm;  $c = 50$  mm;  $c = 66$  mm.

A Figura 6-20 mostra o campo de fração mássica da classe moda 2.

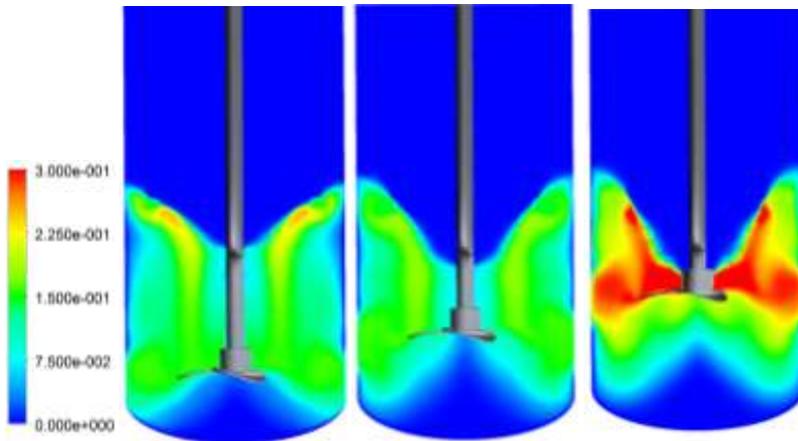


Figura 6-20 – Campo de fração mássica da moda 2:  $c = 50$  mm;  $c = 66$  mm.

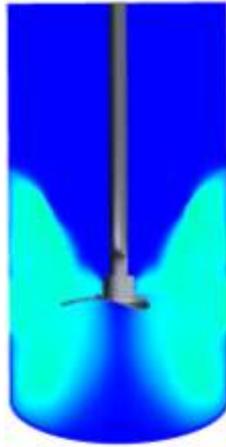


Figura 6-21 – Campo de fração mássica de moda 3:  $c = 66$  mm.

O que se observa é que as partículas maiores tendem a concentrar-se na região entre o agitador e a superfície livre. Esse fenômeno vai de encontro com o que se espera, pois partículas maiores possuem maiores velocidades terminais já que a velocidade terminal é proporcional ao quadrado do diâmetro da partícula.

Conforme foi visto na análise do campo de turbulência, é nesta região também que se concentra grande parte da dissipação da energia cinética turbulenta. O processo de quebra das partículas grandes nesta região é alimentado por esta alta concentração de dissipação.

Analisando as partículas da moda menor, é possível perceber que parte delas são arrastadas para a região abaixo do agitador, onde a dissipação turbulenta não é considerável, permitindo que estas partículas fiquem com tamanho estável.

Ao ocorrer coalescência na região de baixo do agitador, partículas maiores são formadas e, por suas altas velocidades terminais, podem alcançar a região perto da superfície livre, sendo rompidas novamente.

Os resultados dos campos de escoamento que inferem este processo de maior quebra com menor volume de ação da turbulência sugerem que a mistura neste tanque não é totalmente alcançada. Uma indicação disto é o tempo de preparação da suspensão, ao redor de 2 horas mesmo com a vigorosa agitação.

Portanto, a suspeita de que um menor volume de atuação da turbulência para uma mesma quantidade de energia fornecida (mesma rotação do agitador) pode levar a menores tamanhos de gotas, tende a proceder, desde que este volume menor atue na região de maior concentração da fase dispersa.

Outro aspecto que pode favorecer a quebra de gotas neste sistema é o contato entre as gotas e a superfície livre. A estas rotações, a superfície livre está sempre em agitação, sendo rompida a todo instante. Esta energia de rompimento pode influenciar na quebra das gotas que estão próximas da superfície. Com o rompimento da superfície livre, também pode ocorrer o arraste de ar para dentro da suspensão. A interação das bolhas de ar com as gotas também pode influenciar na alteração dos tamanhos. Entretanto, estes aspectos não foram estudados neste texto, mas são possíveis temas para futuras investigações.

## 6.5 ANÁLISE FLUIDODINÂMICA DE UMA SUSPENSÃO DE ESTIRENO EM ÁGUA – TURBINA RUSHTON

A presente seção tem como objetivo analisar as principais características do escoamento (tais como a dispersão de duas fases líquidas imiscíveis e o comportamento da superfície livre) em um tanque agitado utilizado em um trabalho publicado (YANG *et al.*, 2000). Neste trabalho, os autores objetivaram avaliar experimentalmente o comportamento de suspensões de estireno em água usando como agente de suspensão o álcool polivinílico (PVA). Todas as análises têm como objetivo avaliar a distribuição de tamanhos de partículas (DTP) final da suspensão. Assim, a DTP foi analisada em função de diversos parâmetros:

1. PVA com diferentes pesos moleculares;
2. concentração do agente de suspensão.

Indiretamente, os autores mostram alguns outros dados de interesse para a avaliação da influência da fluidodinâmica sobre a DTP:

1. diferentes rotações do agitador;
2. tempo para estabilização da suspensão;
3. diferentes concentrações de estireno.

Destes itens, o mais relevante é a análise do efeito da agitação sobre a DTP.

### 6.5.1 Aparato Experimental

O aparato experimental constitui-se em um tanque cilíndrico de fundo chato agitado através de um impelidor do tipo turbina de Rushton. Com as informações fornecidas, não foi possível avaliar qual seria o volume total da suspensão. As dimensões fornecidas são suficientes para reconstruir o sistema experimental em uma maquete eletrônica:

- diâmetro interno do tanque,  $T = 144$  mm;
- número de defletores verticais, 4;
- largura dos defletores,  $14,4$  mm ( $T/10$ );
- número de pás do agitador, 6;
- diâmetro do agitador,  $D = 72$  mm;
- largura do agitador,  $W = 14,4$  mm.

Para fins de amostragem para determinação da DTP, três pontos foram selecionados no interior do reator de modo a mostrar a boa mistura que ocorre no sistema. A Figura 6-22 mostra onde ficam estes pontos e também as outras relações de dimensões do sistema. Nota-se que o agitador fica a meia altura do nível de líquido.

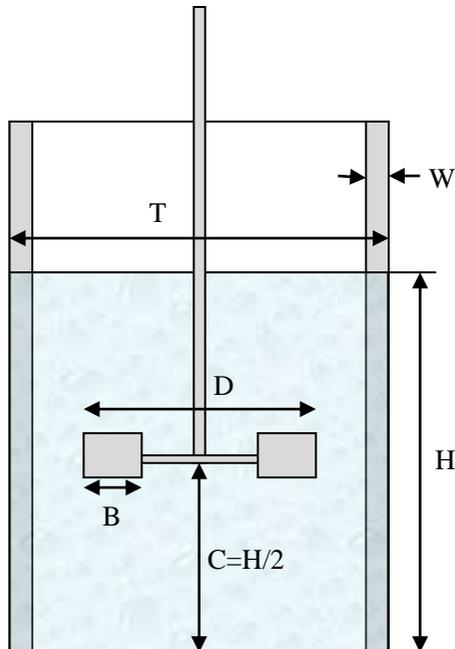


Figura 6-22 – Aparato experimental (adaptado de YANG *et al.*, 2000).

Nota-se que os pontos de amostragem são selecionados em três regiões de padrão de escoamento muito semelhantes, conforme será analisado mais adiante. Pela Figura 6-23, pode-se afirmar que os pontos:

- A. fica localizado na região de sucção do agitador onde ocorre alto cisalhamento;
- B. está situado na saída do agitador onde as maiores velocidades são observadas e um grande cisalhamento;
- C. próximo à superfície da suspensão onde se pode esperar um cisalhamento menor devido ao movimento da superfície semelhante ao seio do líquido adjacente.

A primeira crítica que se poderia fazer acerca das escolhas dos pontos de amostragem é o fato de não haver pontos abaixo da linha do agitador. Como será observado mais tarde, existe uma diferença de concentração da fase dispersa entre a região acima e abaixo do agitador.

### 6.5.2 Pontos de amostragem

Os pontos de amostragem utilizados pelos autores são apresentados na Figura 6-23.

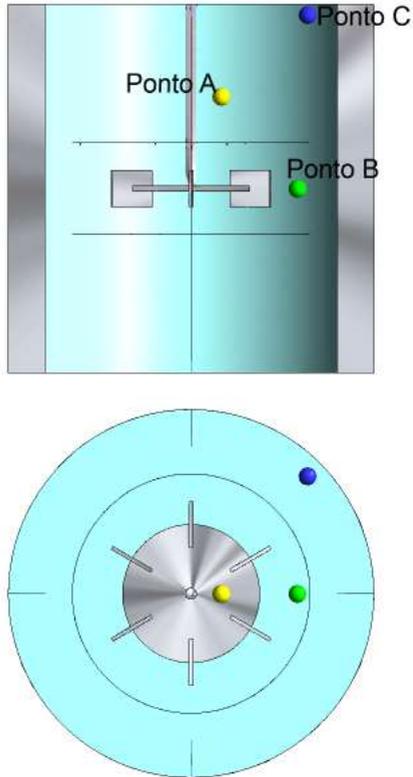


Figura 6-23 – Posicionamento dos pontos de amostragem.

Os autores mostram os resultados de diâmetro médio de Sauter,  $d_{32}$ , em todos os pontos em função do grau de agitação, conforme é mostrado na Figura 6-24.

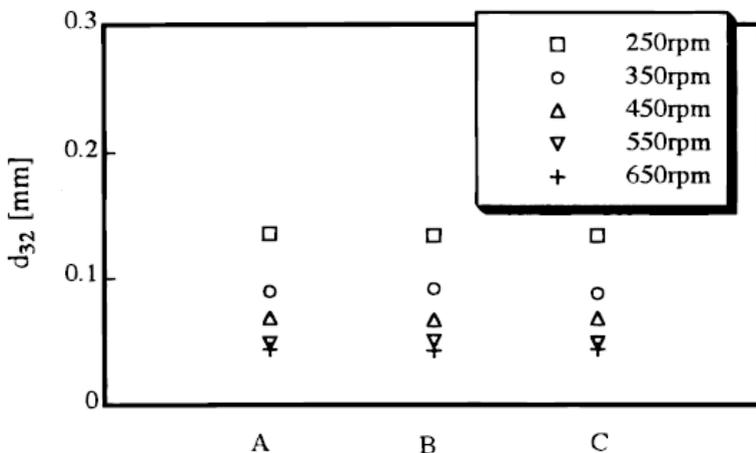


Figura 6-24 – Tamanho de partícula nos vários pontos de amostragem de uma suspensão com *holdup* de 5% (YANG *et al.*, 2000).

Pode-se notar que os valores de diâmetro médio são muito similares e também apresentam a mesma correlação em função da velocidade do agitador.

### 6.5.3 Propriedades físicas

Outro ponto de extrema importância são as propriedades de transporte, neste caso, as correlatas ao movimento dos fluidos: densidade e viscosidade dinâmica. Os autores apresentam essas propriedades inclusive sugerindo as correlações para as propriedades de mistura em função da concentração do estireno. A Tabela 6-16 mostra as propriedades dos fluidos puros e das suspensões.

Tabela 6-16 – Propriedades físicas do estireno e da água a 25 °C.

<i>Substância</i>	<i>Densidade [kg m<sup>-3</sup>]</i>	<i>Viscosidade [Pa s]</i>
<b>Água</b>	996,95	9,03 x 10 <sup>-4</sup>
<b>Estireno</b>	901,13	6,71 x 10 <sup>-4</sup>

Para a densidade os autores utilizam a fórmula (HEUVEN e BEEK, 1971).

$$\rho_M = \phi\rho_d + (1 - \phi)\rho_c \quad (6-7)$$

Enquanto que para a viscosidade dinâmica a expressão é (VERMEULEN *et al.*, 1955)

$$\mu_M = \mu_c \frac{\left[ \frac{1.5\mu_d\phi}{(\mu_d + \mu_c)} + 1 \right]}{1 - \phi} \quad (6-8)$$

onde,

$\phi$  é a fração volumétrica de monômero ou *holdup*;

$\mu$  é a viscosidade dinâmica;

$\rho$  é a densidade.

Os índices *d*, *c* e *M* correspondem a fase dispersa (estireno), contínua (água) e mistura, respectivamente.

Um parâmetro de extrema importância para a avaliação dos fenômenos de quebra e coalescência das gotas de estireno é o coeficiente de tensão superficial que indica o quanto de energia é necessário para que uma interface se rompa. Este parâmetro não foi fornecido pelos autores.

Neste trabalho, este parâmetro teve seu valor arbitrado em 0,01 N/m.

#### 6.5.4 Maquete virtual do reator e malha

A maquete virtual ou geometria é montada a partir dos dados fornecidos no artigo em questão em um programa do tipo CAD (*Computer Aided Design*). Esta geometria vai definir o volume onde as equações de conservação são resolvidas (Figura 6-25). O critério para definir os limites deste volume é de se ter, a priori, informações sobre as variáveis que se deseja resolver. Para um tanque fechado, todos os contornos externos são paredes.

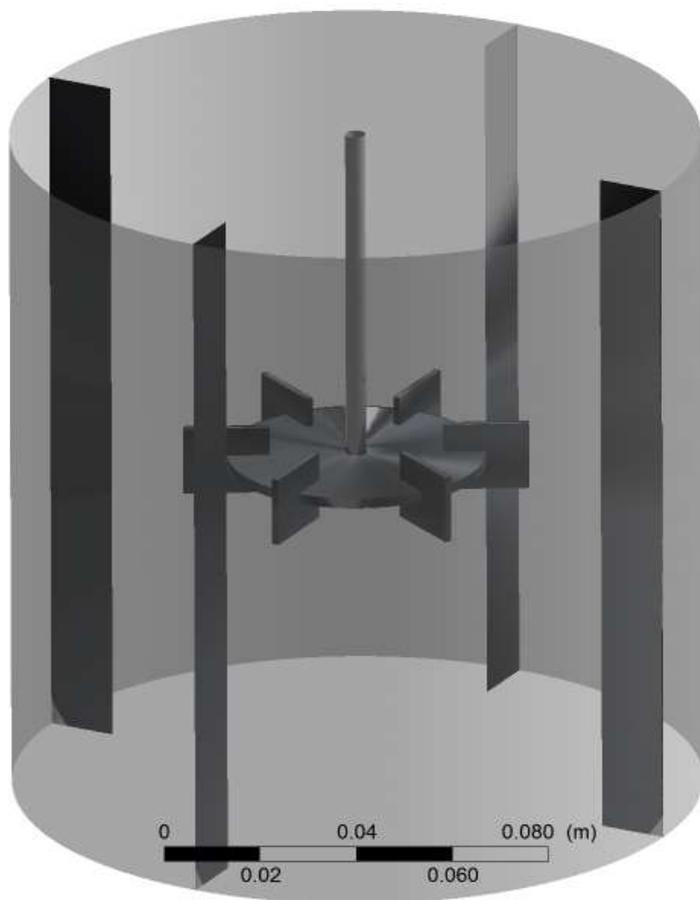


Figura 6-25 – Maquete virtual do sistema utilizado (YANG *et al.*, 2000).

Após a confecção da geometria, o próximo passo é discretizar este volume em volumes menores chamados volumes finitos (MALISKA, 2004). Em cada um destes volumes finitos serão aplicadas as equações de conservação. A Figura 6-26 mostra uma imagem da malha.

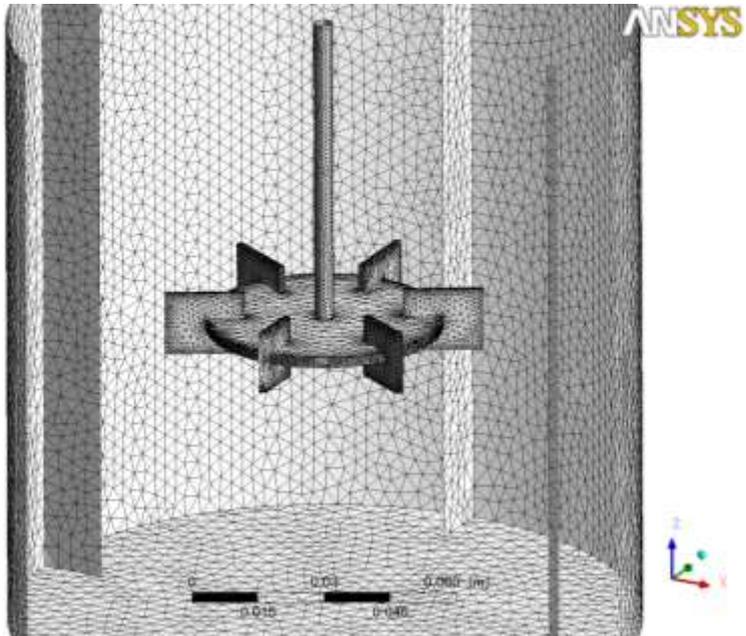


Figura 6-26 – Malha computacional do sistema utilizado (YANG *et al.*, 2000).

A malha contém 864.401 elementos sendo destes 808.743 tetraédricos. Javed *et al.* (2006) realizou o estudo de malha e mostrou que para o mesmo sistema, os resultados dos campos turbulentos não mudaram mais a partir de aproximadamente 115k nós. Já Deglon e Meyer (2006) chegam a um valor de 800k nós para capturar de forma satisfatória perfis de velocidade na descarga do agitador, inclusive observando a formação do par de vórtices típico de uma turbina Rushton. O restante é composto por elementos prismáticos que são relevantes próximos às paredes conforme Figura 6-27 (ANSYS CFX, 2010).

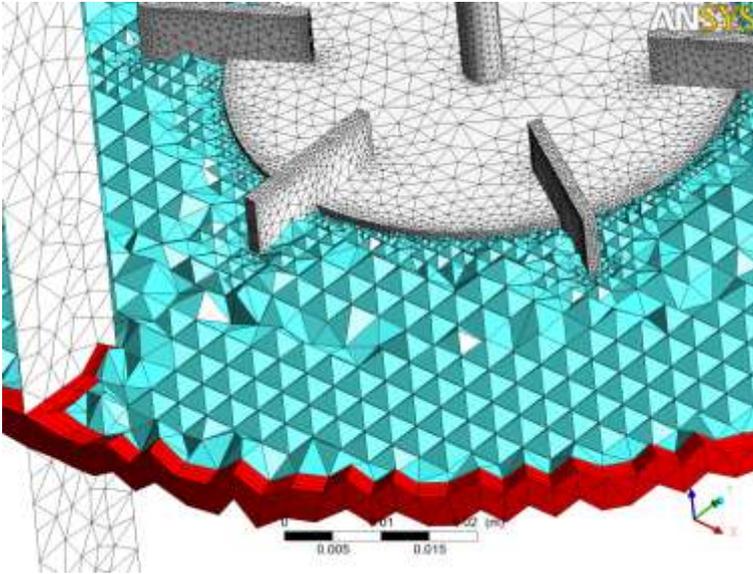


Figura 6-27 – Ampliação na malha computacional volumétrica próxima à parede do tanque: em vermelho, prismas; em azul, tetraedros.

Alguns critérios devem ser considerados para avaliação da qualidade da malha. Em outras palavras, a malha não deve conter elementos cuja geometria seja muito irregular (MALISKA, 2004). A Tabela 6-17 mostra as estatísticas e critérios que devem ser atendidos. Estes critérios estão definidos nos manuais dos códigos comerciais (ANSYS CFX. , 2010).

Tabela 6-17 – Critérios de qualidade da malha.

<i><b>Crítério</b></i>	<i><b>Valor</b></i>	<i><b>Crítério</b></i>	<i><b>Status</b></i>
<b>Razão de Aspecto Máxima</b>	10,3	<100	OK
<b>Ângulo máximo de face</b>	149,7°	<170°	OK
<b>Razão de volumes máxima</b>	22,0	<30	OK

### 6.5.5 Modelo matemático

O modelo matemático empregado teve como base o modelo de dois fluidos de Ishii (1975). Neste modelo, cada fase possui um conjunto

completo de equações de movimento. A interação entre as fases se dá pelos termos de troca interfacial. Como neste caso não há transferência de massa nem calor, as trocas são somente de quantidade de movimento. O principal mecanismo de transferência de quantidade de movimento é o arraste. Neste estudo, o modelo de arraste usado é o de Schiller-Nauman. Uma das informações requeridas pelo modelo de arraste é a densidade de área interfacial. Quando se trata de uma fase polidispersa pode-se abordar o problema de duas formas:

- considerar uma densidade de área média local;
- considerar um conjunto de equações de movimento para cada classe de tamanho.

A grande vantagem de se usar a segunda abordagem é poder observar o comportamento dinâmico de cada classe de tamanho, sendo possível, por exemplo, observar segregação de partículas de diferentes tamanhos. Entretanto, esta abordagem é muito dispendiosa, pois o número de equações aumenta muito com o número de classes. A primeira abordagem é conhecida por modelo MUSIG ou *Multiple Size Groups* (ANSYS CFX, 2010). Este modelo tem por hipótese fundamental que todas as partículas atinjam sua velocidade terminal seja atingida rapidamente. Em outras palavras, o número de Stokes das partículas deve ser menor que a unidade. Nestas condições as partículas se comportam de forma homogênea e podem, portanto, compartilhar o mesmo campo de velocidades.

Tabela 6-18 – Tempo de relaxação e número de Stokes para as classes de tamanho utilizadas.

<i>Classe [m]</i>	<i>t<sub>p</sub> [s]</i>	<i>St</i>
<b>3,00x10<sup>-5</sup></b>	5,01x10 <sup>-5</sup>	2,09x10 <sup>-4</sup>
<b>9,00x10<sup>-5</sup></b>	4,51x10 <sup>-4</sup>	1,88x10 <sup>-3</sup>
<b>1,50x10<sup>-4</sup></b>	1,25x10 <sup>-3</sup>	5,21x10 <sup>-3</sup>
<b>2,10x10<sup>-4</sup></b>	2,45x10 <sup>-3</sup>	1,02x10 <sup>-2</sup>
<b>2,70x10<sup>-4</sup></b>	4,05x10 <sup>-3</sup>	1,69x10 <sup>-2</sup>

Conforme se observa na Tabela 6-18, os números de Stokes das classes são todos muito abaixo da unidade, o que permite o uso do modelo MUSIG homogêneo.

O modelo MUSIG homogêneo é baseado no transporte da fração de tamanho,  $f_i$ , de cada classe,  $i$ , da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_d \alpha_d f_i) + \nabla \cdot (\rho_d \alpha_d \mathbf{u}_d f_i) = S_i \quad (6-9)$$

onde o índice  $d$  representa a fase dispersa e  $S_i$  é a somatória dos termos-fonte dos processos de quebra e coalescência. Esse termo-fonte tem a contribuição de quatro termos:

- surgimento de uma partícula de tamanho  $i$  devido a quebra de partículas maiores;
- surgimento de uma partícula de tamanho  $i$  devido a coalescência de duas (ou mais) partículas menores;
- desaparecimento de uma partícula de tamanho  $i$  devido a sua quebra;
- desaparecimento de uma partícula de tamanho  $i$  devido a sua coalescência com outra partícula.

A soma desses termos sobre todas as classes é nula de modo a conservar a massa da fase dispersa. Vai além do escopo do trabalho discutir mais a fundo este termo-fonte. Sugere-se a leitura de ANSYS CFX (2010) para maiores detalhes.

Os processos de quebra e coalescência são regidos por núcleos funcionais que relacionam a taxa específica do processo em questão com variáveis locais do escoamento. Neste trabalho, os núcleos de quebra e coalescência são os padrões do ANSYS CFX (2010) devidos a Luo e Svendsen (1996) e Prince e Blanch (1990), respectivamente. Em ambos os modelos, os núcleos são função das propriedades físicas de ambas as fases e da dissipação da energia cinética turbulenta,  $\epsilon$ . Portanto, a qualidade da predição da DTP está atrelada diretamente ao modelo de turbulência.

Após calcular localmente a DTP pelo modelo MUSIG, o diâmetro médio de Sauter é calculado para ser usado para obter a densidade de área interfacial a ser aplicada posteriormente no termo de transferência de quantidade de movimento.

O modelo de turbulência utilizado foi o  $k-\epsilon$  padrão com funções de parede escalonáveis (ANSYS CFX, 2010). A grande vantagem das funções escalonáveis é que ela pode ser aplicada em malhas refinadas e

permitir um refinamento consistente independente do número de Reynolds (GROTJANS e MENTER, 1998). Diferentemente do escoamento em reatores sem chicanas, nos reatores com chicanas o movimento circular não é tão intenso. Isso permite o uso de modelos de turbulência a duas equações para predição de variáveis globais do sistema. Vários trabalhos na literatura corroboram o uso do modelo  $k-\varepsilon$  em tanques com chicanas. Montante *et al.* (2001) preveem tanto o padrão de escoamento quanto perfis locais de velocidade em diversas configurações geométricas do reator. Spogis (2002) levanta com sucesso a curva de número de potência contra número de Reynolds de diversos agitadores em reatores com chicanas. Choi *et al.* (2004) modelam com sucesso a distribuição do tempo de residência. Khopkar *et al.* (2004) investigam os vórtices formados na esteira das pás do agitador. Os autores obtêm resultados razoáveis com o modelo  $k-\varepsilon$ . Deglon e Meyer (2006) mostram que com a malha adequada e esquemas de advecção de alta ordem permitem alcançar resultados com boa precisão. Javed *et al.* (2006) obtiveram boa concordância com dados experimentais de tempo de mistura avaliados em diversos pontos do reator. No caso de escoamentos de morfologia contínua-dispersa, o modelo de turbulência é aplicado à fase contínua somente. A interação com a fase dispersa pode ser obtida através de modelos algébricos. No ANSYS CFX (2010), o modelo algébrico relaciona linearmente a viscosidade turbulenta da fase dispersa com a viscosidade turbulenta da fase contínua.

As seções 6.5.6, 6.5.7, 6.5.8 avaliam a estrutura do escoamento de superfície livre através de resultados do Modelo Homogêneo para os campos de velocidade (vetores e contornos) e dissipação da energia cinética turbulenta. A seção 6.5.9 avalia o comportamento da posição da superfície livre em função da agitação. A seção 6.5.10 utiliza o resultado para o Modelo MUSIG para avaliar a homogeneidade da distribuição da fase dispersa no interior do tanque.

### **6.5.6 Resultados para o campo de velocidades – estrutura de escoamento**

A estrutura de escoamento diz respeito à forma que tomam as linhas de corrente dentro do sistema. Vórtices e recirculações são elementos que fazem parte desta estrutura. A visualização da estrutura de escoamento permite inferir características do escoamento como zonas mortas. Os resultados para a estrutura de escoamento para o sistema são apresentados na Figura 6-28, através de um gráfico de vetores de velo-

cidade em um plano longitudinal que passa pelo eixo do tanque. Fica clara a estrutura do escoamento que este tipo de agitador proporciona. Jatos radiais são formados pela descarga do agitador (vetores em vermelho) em direção às paredes do tanque. Ao atingir a parede, esse jato se divide em dois jatos secundários, um ascendente e outro descendente. Estes jatos secundários, por sua vez, seguem pela parede até atingir a superfície livre e o fundo do tanque, respectivamente. Novamente mudam de direção e iniciam, ao atingir a região central do tanque, o retorno ao agitador. Esse sistema gera dois grandes vórtices independentes.

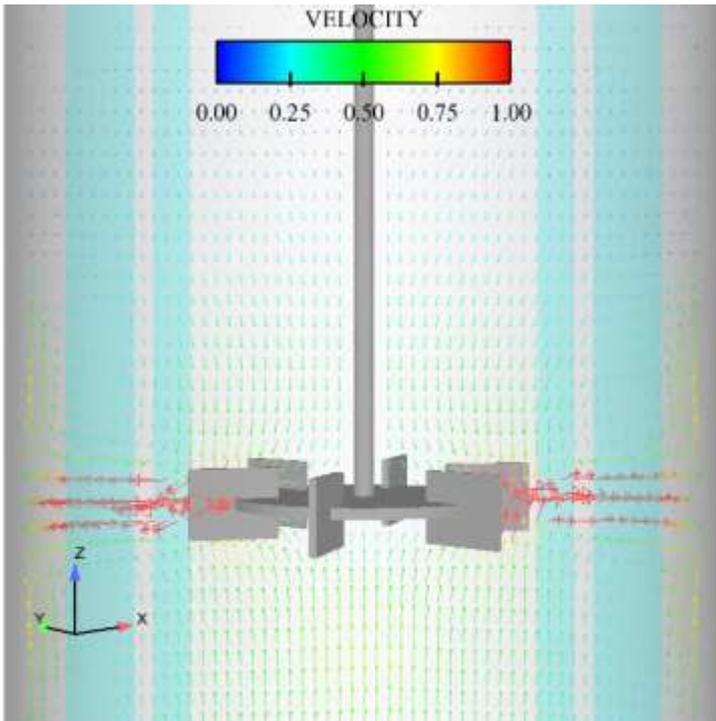


Figura 6-28 – Estrutura de escoamento da suspensão dentro do tanque – Campo de vetores velocidade: plano longitudinal.

A Figura 6-29 mostra o mesmo campo em outra posição utilizando um plano que passa no centro do agitador. Pode-se notar o efeito da rotação (sentido anti-horário) do agitador. As chicanas formam uma barreira a esse movimento, criando zonas de menor velocidade.

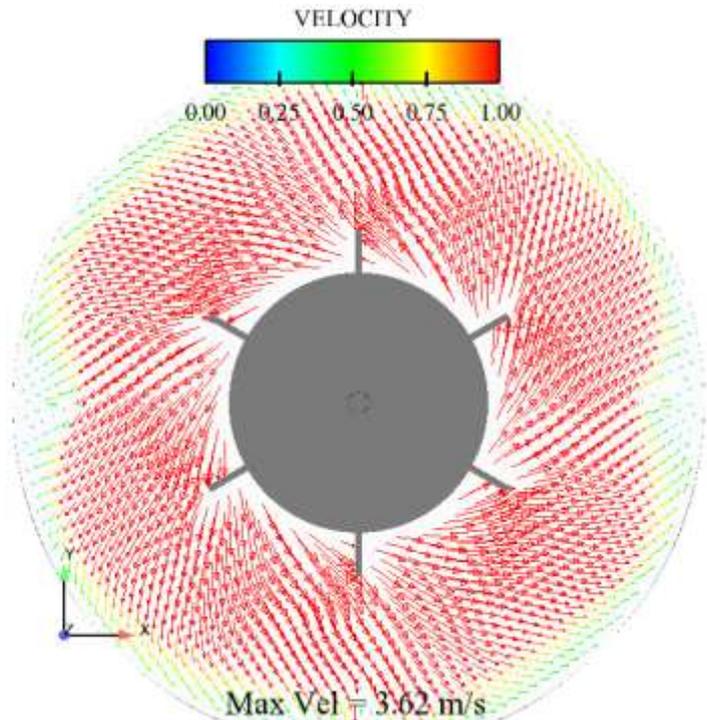


Figura 6-29 – Estrutura de escoamento da suspensão dentro do tanque – Campo de vetores velocidade: plano paralelo ao agitador.

A Figura 6-30 mostra um comparativo entre o campo de vetores e perfis de velocidade axial extraídos de linhas em duas posições no tanque: uma acima do agitador e outra abaixo. Nos centros dos vórtices, a velocidade apresenta valor nulo e está localizada a 0,055 m do centro do tanque. Os perfis de velocidade permitem observar que a área de escoamento dos jatos secundários é muito menor que a entrada do agitador.

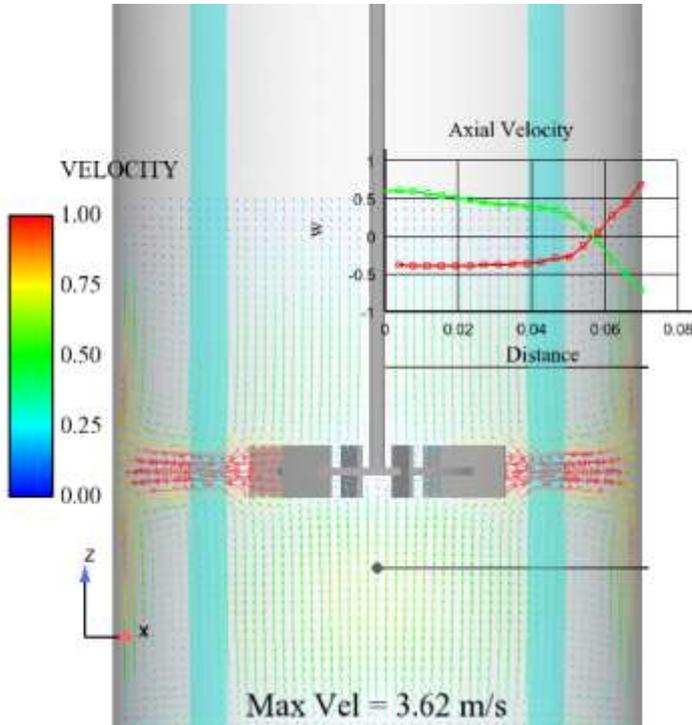


Figura 6-30 – Estrutura de escoamento da dispersão dentro do tanque a 650 RPM – Vetores velocidade e perfis de velocidade axial com o raio.

### 6.5.7 Resultados para o campo de velocidades – efeito do grau de agitação

Os resultados para velocidade são apresentados na Figura 6-31. O padrão típico de um agitador radial é obtido com o fluxo na descarga do agitador formando um jato perpendicular a parede. Ao alcançar a parede o jato se divide em dois jatos secundários, um no sentido ascendente e outro, descendente. Ambos os jatos secundários formam grandes vórtices, um acima e outro abaixo do plano do agitador. Percebe-se que existem regiões (em azul) de baixas velocidades, principalmente em função do jato secundário inferior onde, provavelmente, possam existir zonas mortas no tanque.

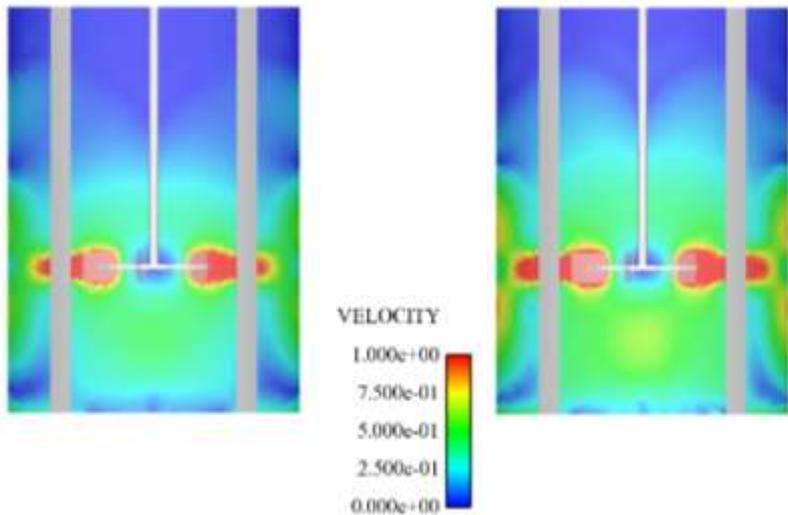
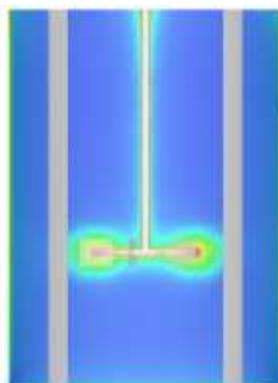
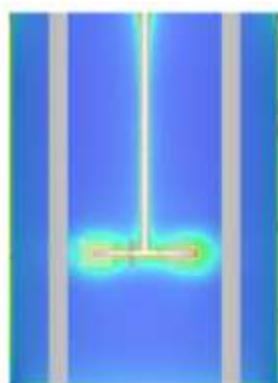


Figura 6-31 – Campos de velocidade para os dois casos de maior velocidade: 550 e 650 RPM.

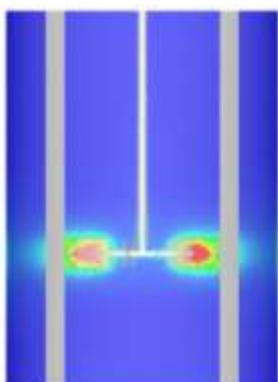
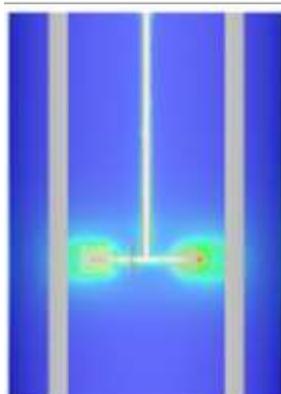
### 6.5.8 Resultados para a dissipação da energia cinética turbulenta

A dissipação da energia cinética turbulenta é o parâmetro fundamental de relação entre o escoamento turbulento e as taxas de quebra e coalescência.

Os resultados são mostrados na Figura 6-32. Nota-se que a forma ou padrão desta variável é relativamente o mesmo entre as diferentes agitações. O que as diferencia é o tamanho da região de alta dissipação. Conforme aumenta a rotação, aumenta o volume da região de alta dissipação da turbulência. A região de alta dissipação da energia cinética turbulenta está concentrada próximo ao agitador.



TED  
5.000e+01  
3.750e+01  
2.500e+01  
1.250e+01  
0.000e+00



TED  
5.000e+01  
3.750e+01  
2.500e+01  
1.250e+01  
0.000e+00

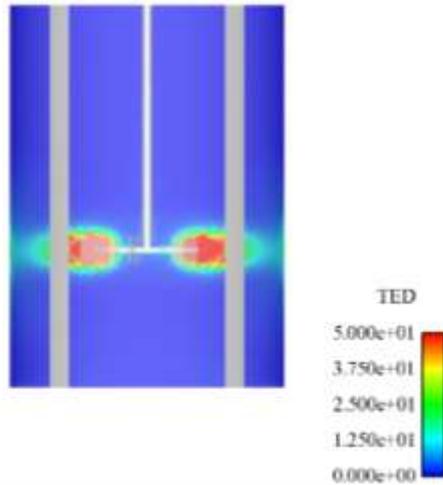


Figura 6-32 – Resultados para a dissipação da energia cinética turbulenta. De cima para baixo: 250, 350, 450, 550 e 650 RPM.

### 6.5.9 Resultados para o nível de líquido no tanque

Em nenhum momento do artigo, os autores citam o que ocorre com a interface suspensão-ar dentro do tanque. Assim, a primeira investigação foi observar como se comporta a interface em função do grau de agitação do meio.

As figuras Figura 6-33, Figura 6-34, Figura 6-35, Figura 6-36, Figura 6-37 mostram um comparativo entre todas as velocidades utilizadas no trabalho conforme apresentado na Figura 6-24. De uma forma geral, a interface se mantém relativamente plana devido à presença dos defletores verticais montados próximos as paredes. Essa observação permite uma simplificação na descrição da interface: pode-se então considerar a superfície da dispersão como uma parede sem atrito. Essa simplificação permite uma economia no número de elementos para descrever o sistema, pois não se faz necessária a discretização da região em que ar ocupa. Entretanto, se observa uma elevação da superfície livre que se deve ao arraste de ar para a fase líquida. Para os casos com altas rotações, este arraste foi provavelmente sobrepredito conforme discutido nas seções 6.2.1 e 6.2.2.

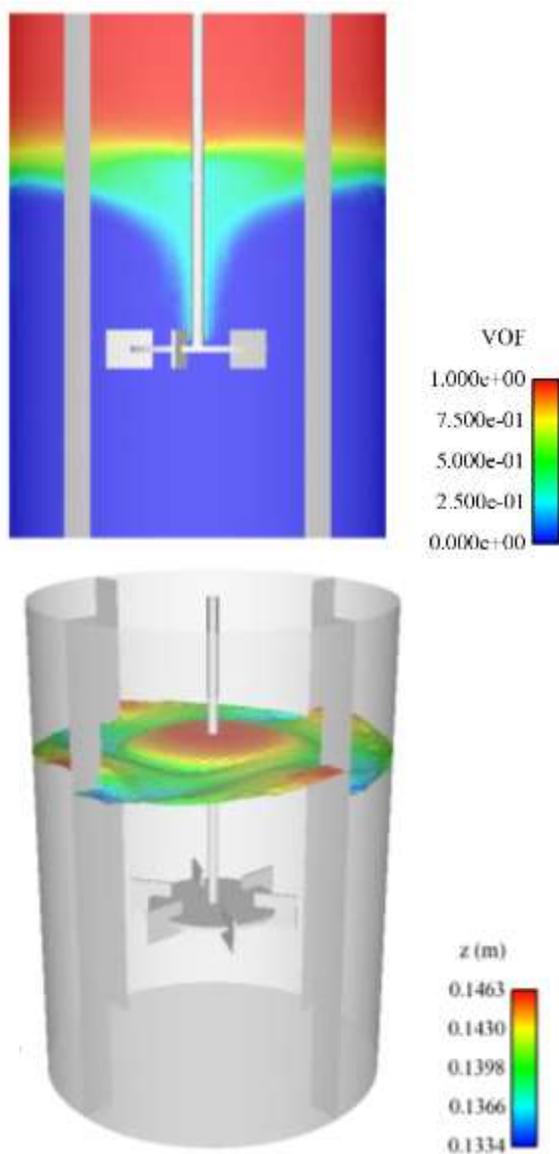


Figura 6-33 – Agitador a 250 RPM: à esquerda, plano longitudinal com a fração volumétrica de ar; a direita, iso-superfície de fração volumétrica igual 0,5

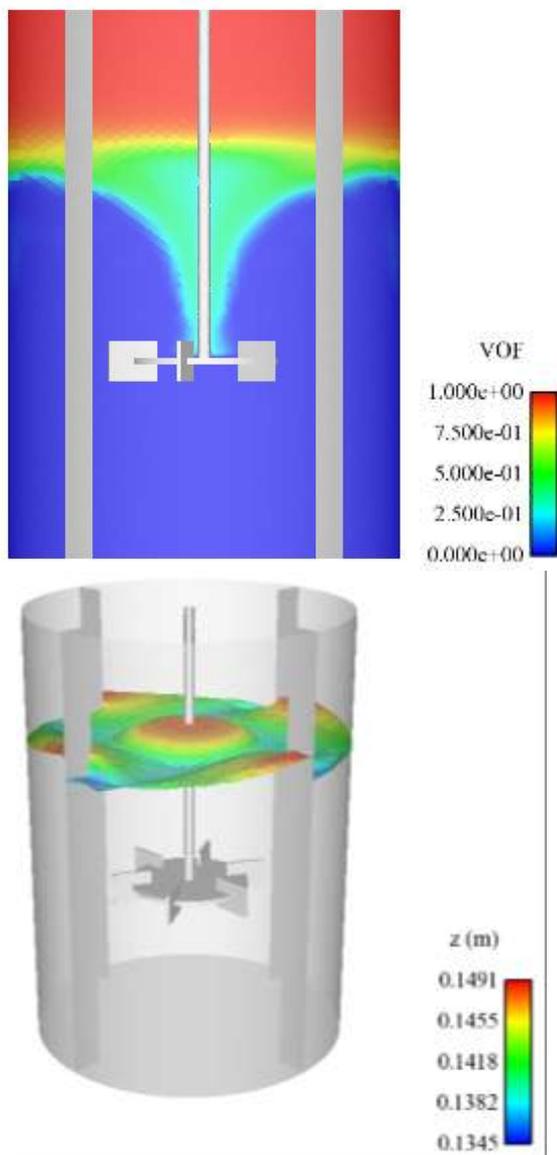


Figura 6-34 – Agitador a 350 RPM: à esquerda, plano longitudinal com a fração volumétrica de ar; a direita, iso-superfície de fração volumétrica igual 0,5.

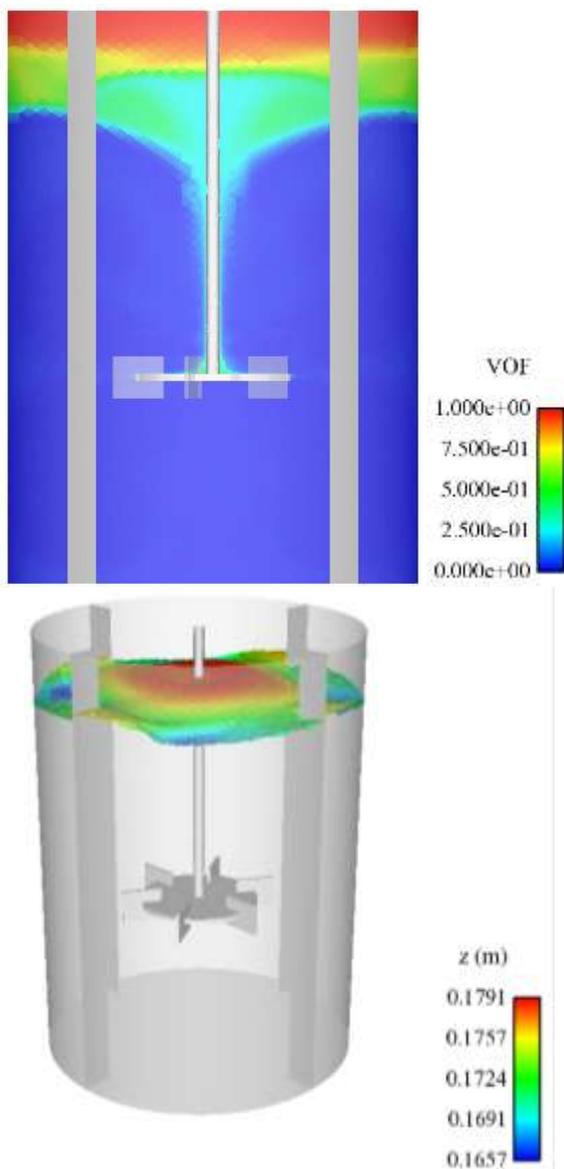


Figura 6-35 – Agitador a 450 RPM: à esquerda, plano longitudinal com a fração volumétrica de ar; a direita, iso-superfície de fração volumétrica igual 0,5.

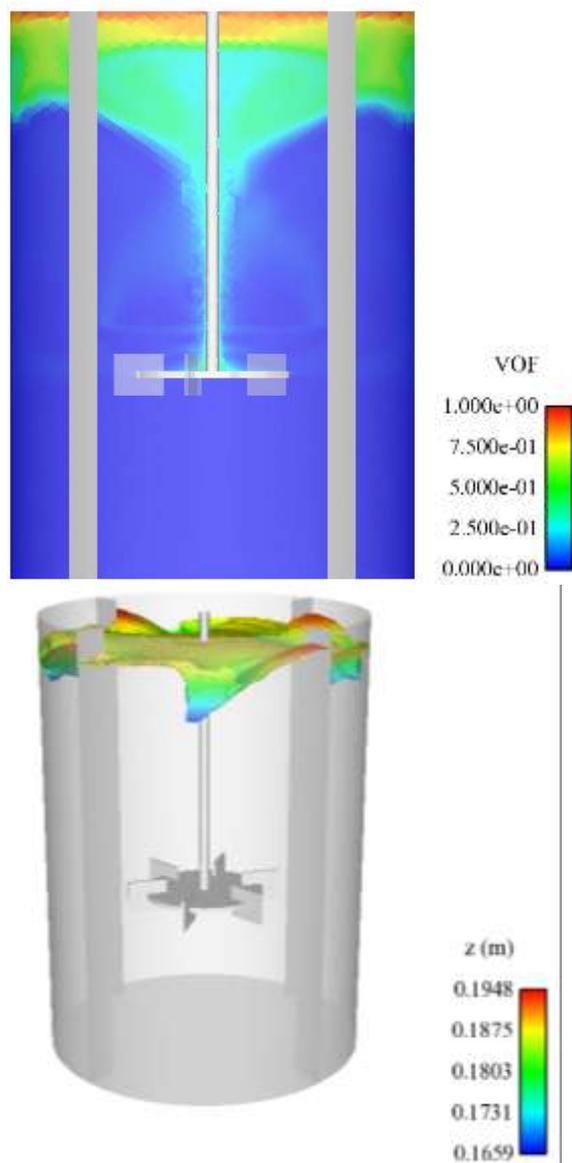


Figura 6-36 – Agitador a 550 RPM: à esquerda, plano longitudinal com a fração volumétrica de ar; à direita, iso-superfície de fração volumétrica igual 0,5.

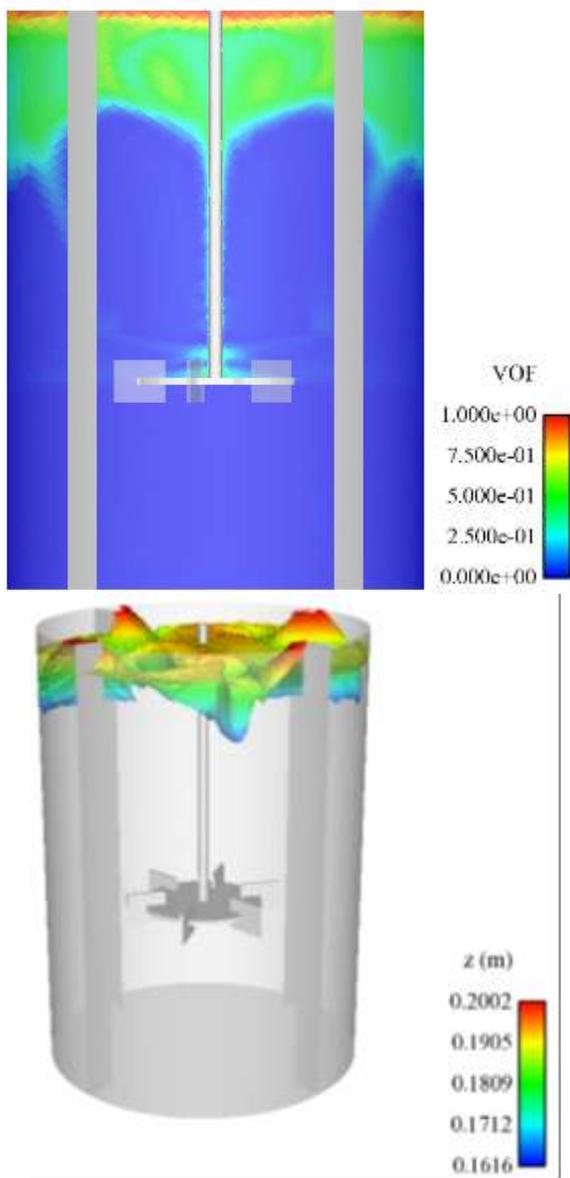


Figura 6-37 – Agitador a 650 RPM: à esquerda, plano longitudinal com a fração volumétrica de ar; a direita, iso-superfície de fração volumétrica igual 0,5.

Nota-se que conforme o grau de agitação aumenta, a interface sobe. Isso se deve ao fato do ar próximo a interface ser capturado pela dispersão. Nas Figura 6-33 a Figura 6-37, essa captura é notada através dos níveis de contorno de cor verde. No caso de 650 RPM (Figura 6-37) percebe-se que existem pontos próximos aos defletores onde a suspensão pode sair do domínio definido para tanque.

Para os casos de 550 RPM e 650 RPM, a interface tende a ficar menos plana com certa deformação descendente da interface próxima a parede do tanque.

De forma a melhor mostrar o efeito da agitação na posição da interface gás-líquido, a Figura 6-38 foi plotada. É possível ver um comportamento não linear da altura da interface com a rotação. Parece existir uma rotação crítica em torno de 400 RPM onde o patamar da interface apresenta um grande aumento. Esta rotação crítica pode ser associada com a limitação do Modelo Homogêneo quando existe uma extensão razoável de arraste de ar. Esse fenômeno deve ser confrontado com observação experimental.

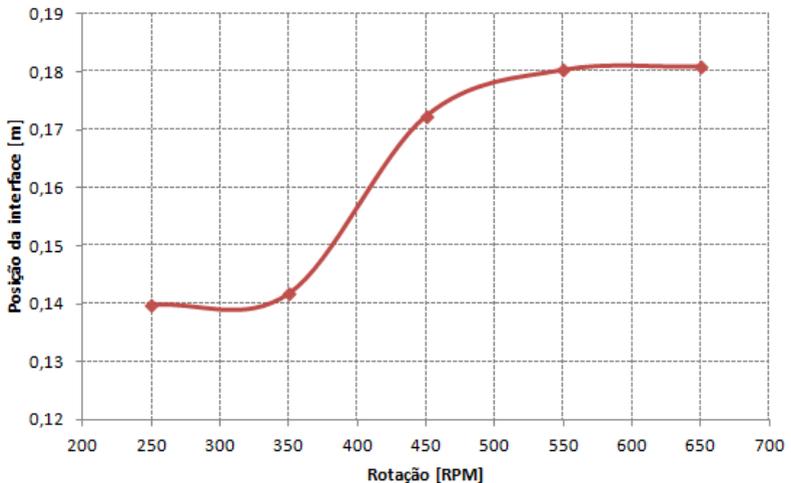


Figura 6-38 – Altura média da interface em relação ao fundo do tanque em função da agitação.

### 6.5.10 Análise da homogeneidade do tanque

Em Yang *et al.* (2000) foi concluído que o sistema de agitação apresenta homogeneização da mistura em seu interior através de medição do tamanho médio de três pontos de amostra conforme mostra Figura 6-24. De forma a verificar se o modelo CFD responde da mesma forma, foi conduzida uma simulação utilizando a PBE acoplada.

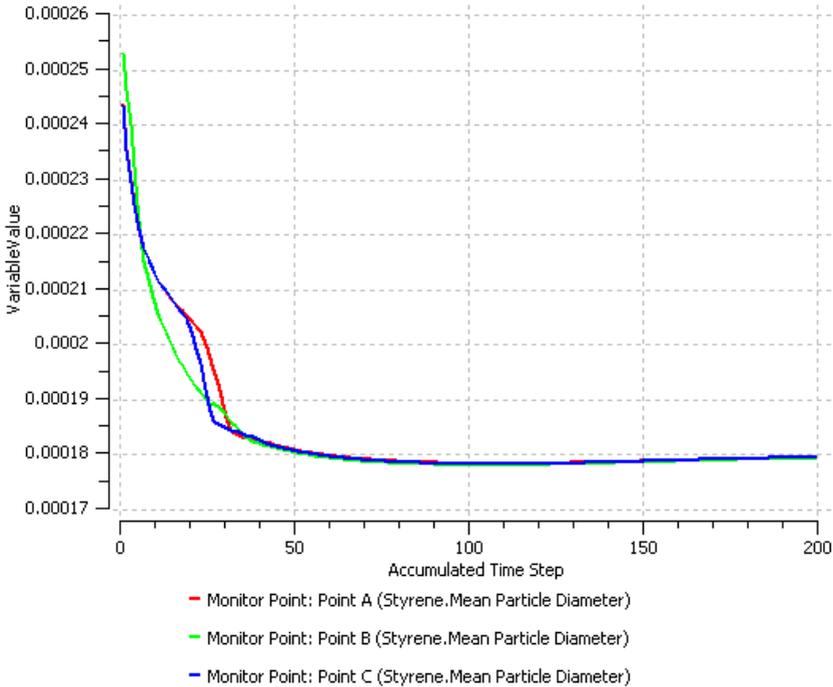


Figura 6-39 – Comportamento do diâmetro médio de Sauter nos três pontos de amostragem ao longo das iterações considerando somente o modelo de quebra.

Nota-se na Figura 6-39 que ao longo de todo o processo iterativo, os três pontos de amostragem mostram o mesmo comportamento homogêneo sugerido no trabalho de Yang *et al.*; (2000). O valor final da simulação gira em torno de 180 µm enquanto que o valor aferido pelo trabalho experimental foi de 140 µm.

Aqui cabem dois comentários: primeiramente, os autores do trabalho experimental não avaliam o erro experimental observado no processo de medição, e; os parâmetros do modelo de quebra utilizado (LUO

e SVENDSEN, 1996) foram o padrão do software que é, por sua vez, ajustado para o sistema ar-água. Portanto, não é possível avaliar este resultado quantitativamente com confiança. Entretanto, é possível ver que o modelo do escoamento promove a homogeneidade verificada experimentalmente.

Se voltando para as posições de amostragem, é notável que todos os pontos estão acima do plano do agitador. Aproveitando que a ferramenta CFD permite a visualização tridimensional do escoamento, foi levantado um gráfico de *holdup* (fração volumétrica) da fase orgânica em um plano longitudinal que passa pelo centro do tanque, conforme mostra a Figura 6-40.

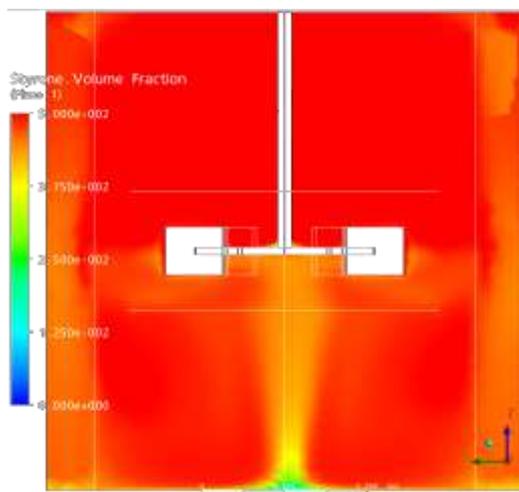


Figura 6-40 – Campo de fração volumétrica (*holdup*) de monômero a uma rotação do agitador de 250 RPM.

Nota-se que existe, na região abaixo do agitador, uma heterogeneidade da mistura. Essa heterogeneidade é produto de uma região de recirculação. Portanto, é possível afirmar que o tanque como um todo não é perfeitamente homogêneo, mas sim o volume acima do agitador.

Quando se inclui o modelo de coalescência de Prince e Blanch (1990), um resultado espúrio é obtido conforme mostra a Figura 6-41. É possível notar que as gotas tendem a coalescer ao invés de somente quebrar. Neste sentido, é importante notar que foi adicionado a fórmula da suspensão um agente estabilizante (PVA). Assim, a coalescência, na

prática, é muito reduzida podendo o sistema ser considerado como dominado pela quebra. Também é possível notar que o ponto B apresenta alguma quebra. Isso é razoável já que é o ponto mais próximo do agitador.

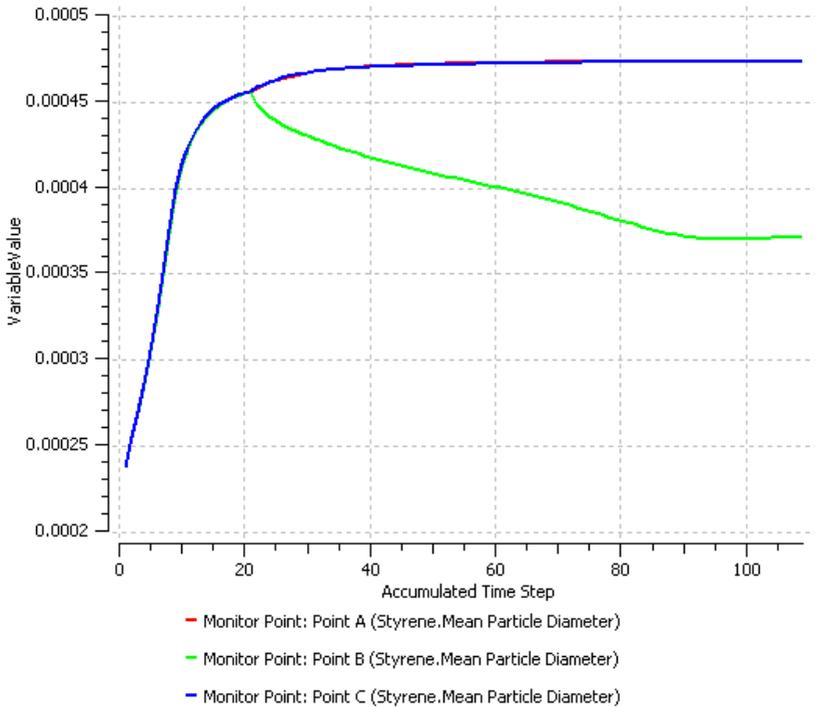


Figura 6-41 – Comportamento do diâmetro médio de Sauter nos três pontos de amostragem ao longo das iterações com os modelos de quebra e coalescência levados em conta.

### 6.5.11 Conclusões

Esta seção mostrou que mesmo um modelo com várias simplificações na modelagem da turbulência e do balanço populacional, foi possível obter resultados em boa concordância com medidas experimentais de diâmetro médio em um tanque com chicanas agitado por uma turbina Rushton.

Foi ressaltada a importância na escolha dos pontos de amostragem já que em um tanque agitado, a dispersão pode não ser homogênea.

## 7 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

### 7.1 CONCLUSÕES DO TRABALHO

Pode-se concluir dos resultados obtidos neste trabalho que a ferramenta de CFD pode ser usada com sucesso na análise de tanques agitados mecanicamente com as seguintes variações:

- tanque com e sem chicanas;
- agitador radial (Rushton) e axial (hélice marinha);
- fundo plano (Yang *et al.*, 2000; Haque *et al.*, 2006) e fundo perfilado (Pinto, 2006; Abu-Farah *et al.*, 2010);
- fase líquida sendo homogênea (superfície livre) ou heterogênea (polidispersa).

Modelos de turbulência a duas equações são capazes de fornecer resultados razoáveis para tanques com chicanas (Yang *et al.*, 2000). Os mesmos modelos a duas equações também são capazes de prever com razoável precisão o escoamento em tanques sem chicanas se levar em conta a correção da curvatura das linhas de corrente. Embora modelos baseados em Tensores de Reynolds e de Grandes Escalas (LES) sejam ainda mais precisos, sua convergência (no caso dos Tensores de Reynolds) e seu custo computacional (no caso de LES) são fatores a se levar em conta no momento da decisão qual modelo usar.

Para o caso onde a DTP final é conhecida e o objetivo da análise é somente conhecer a distribuição espacial das diferentes classes de tamanho, o modelo ASM se mostrou uma ótima alternativa em termos de custo computacional. Sua simplicidade de implementação (facilmente acoplável com o modelo de superfície livre) e convergência o fazem um modelo muito atrativo para análise de escoamento de misturas heterogêneas em tanques agitados.

O balanço populacional (modelo MUSIG) com hipóteses simplificadoras (homogeneidade do campo de velocidades da fase dispersa) pode ser utilizado em casos em que a DTP final não é conhecida a priori. A boa homogeneidade de um tanque com chicanas agitado mecanicamente permite o emprego desta hipótese. O modelo de quebra utilizado nesta tese se mostrou ser capaz de prever qualitativamente o processo de quebra e a homogeneidade do reator. Entretanto, para se alcan-

çar resultados quantitativamente concordantes aos dados experimentais requer ajustes em seus parâmetros. Ao se agregar o modelo de coalescência os resultados mostraram que este fenômeno domina o escoamento. O conhecimento prévio da presença de aditivos na suspensão é fundamental para o sucesso da modelagem.

## 7.2 SUGESTÕES

O trabalho realizado neste estudo abriu algumas vertentes que podem ser exploradas em futuro próximo tais como:

- uma verificação mais ampla dos modelos de turbulência é bem vinda para possibilitar a utilização deste modelo em outras situações;
- o modelo de turbulência testado pode ser mais explorado em outras condições de operação encontradas na literatura tanto para o caso de um agitador radial (Rushton) quanto para o uso de um agitador axial (hélice marinha);
- testes sistemáticos para obter um valor ótimo do parâmetro de ajuste da função correção de curvatura,  $C_{scale}$ , tem o potencial de melhorar a qualidade da predição dos modelos a duas equações em sistema de tanque agitado;
- investir em medidas experimentais de campos de escoamento (velocidades e grandezas turbulentas) gerados por uma hélice marinha vão permitir uma verificação do modelo mais ampla. Métodos óticos vêm ganhando espaço na literatura em sistemas com turbina Rushton;
- desenvolver um modelo ASM-PBE pode ser uma alternativa econômica de modelar reatores heterogêneos polidispersos onde o objetivo seja observar a evolução da DTP e sua segregação;
- tendo em mãos recursos computacionais suficientes, investir no modelo MUSIG heterogêneo que seria o modelo euleriano mais completo possível;
- estudar outras discretizações da PBE como o método dos momentos e suas variações (DAMIAN, 2007) ou ainda a colocação ortogonal (ARAUJO, 1999);

- um estudo mais aprofundado dos modelos de quebra e coalescência e sua aplicação em sistemas líquido-líquido deve ser conduzido para melhorar a predição da DTP no caso de Yang *et al.* (2000) e posteriormente ser aplicado no sistema de Pinto (2006);
- este trabalho está em andamento para investigação mais profunda na modelagem da DTP, núcleos de quebra e coalescência e turbulência. Após sua conclusão, este modelo será aplicado no caso do tanque sem chicanas agitado por uma hélice marinha e confrontado com os dados experimentais de Pinto (2006).



## REFERÊNCIAS

ABU-FARAH, L.; AL-QAESSI, F.; SCHÖNBUCHER, A. Cyclohexane/water dispersion behaviour a stirred batch vessel experimentally and with CFD simulation. **Procedia Computer Science**, v. 1, p. 655-664, 2010.

ALCAMO, R.; MICALÈ, G.; GRISAFI, F.; BRUCATO, A.; CIOFALO, M. Large-eddy simulation of turbulent flow in an unbaffled stirred tank driven by a Rushton turbine. **Chem. Eng. Sci.**, 5<sup>th</sup> International Symposium on Mixing in Industrial Processes (ISMIP5), v. 60, p. 2303-2316, 2005.

ALEXOPOULOS, A. H.; MAGGIORIS, D.; KIPARISSIDES, C. CFD analysis of turbulence non-homogeneity in mixing vessels a two-compartment model. **Chem. Eng. Sci.**, v. 57, p 1735-1752, 2002.

ANDERSON, J. **Computational fluid dynamics**. Estados Unidos: McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 1995.

ANSYS CFX. **Ansys Help: CFX theory guide** v. 13.0. Cannonsburg: Ansys Inc., 2010.

ARAÚJO, J. F. M. **Estudo dos modelos de quebra e coalescência para escoamentos polidispersos**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Programa de Engenharia Química, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2006.

ARAÚJO, P. H. H. **Distribuição de Tamanhos de Partícula em Sistemas Heterogêneos de Polimerização**. Tese (Doutorado em Engenharia Química) Programa de Engenharia Química, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 1999.

ARMENANTE, P. M.; LUO, C.; CHOU, C.-C.; FORT, I.; MEDEK, J. Velocity profiles in a closed, unbaffled vessel: comparison between experimental LDV data and numerical CFD predictions **Chem. Eng. Sci.**, v. 52, p. 3483-3492, 1997.

ASSIRELLI, M.; BUJALSKI, W.; EAGLESHAM, A.; NIENOW, A.

W. Study Of Micromixing in a Stirred Tank Using a Rushton Turbine: Comparison of Feed Positions and Other Mixing Devices. **Chem. Eng. Res. Design**, v. 80, n. 8, p. 855-863, 2002.

AUBIN, J.; FLETCHER, D. F.; XUEREB, C. Modeling turbulent flow in stirred tanks with CFD: the influence of the modeling approach, turbulence model and numerical scheme. **Experimental Thermal and Fluid Science**, 5<sup>th</sup> international conference on Gas-Liquid and Gas-Liquid-Solid Reactor Engineering, v. 28, p. 431-445, 2004

BAKKER, A.; VAN DEN AKKER, H. E. A. Single-phase flow in stirred reactors. **Chem. Eng. Sci.**, v. 72, p. 583-593, 1994.

BARTH, T.J.; JESPERSON, D.C. The design and application of upwind schemes on unstructured meshes, **AIAA Paper** 89-0366, 1989.

BATCHELOR, G. K. **An introduction to fluid dynamics**. Cambridge : Cambridge University Press, 2000.

BHATTACHARYA, S.; HEBERT, D.; KRESTA, S. Air Entrainment in Baffled Stirred Tanks. **Chem. Eng. Res. And Design**, v. 85, p. 654-664, 2007.

BRAVI, M.; DI CAVE, S.; MAZZAROTTA, B.; VERDONE, N. Relating the attrition modeling of crystals in a stirred vessel to their mechanical properties. **Chem Eng. J.**, v. 94, p. 223-229, 2003.

BRENNEN, C. E. **Fundamentals of multiphase flow**. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.

BUSCIGLIO, A.; GRISAFI, F.; SCARGIALI, F.; DAVÌ, M. L.; BRUCATO, A. Vortex Shape in Unbaffled Stirred Vessels: Experimental Study via Digital Image Analysis. **The 10<sup>th</sup> International Conference on Chemical & Process Engineering**, 2011.

CARVALHO, E. P. **Uso do Persulfato de amônio para estabilização da polimerização em suspensão do estireno**. Dissertação (mestrado em Engenharia Química). Programa de Engenharia Química, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2011

CHOI, B. S.; WAN, B.; PHILYAW, S.; DHANASEKHARAN, K.; RING, T. A. Residence Time Distributions in a Stirred Tank: Comparison of CFD Predictions with Experiment. **Ind. & Eng. Chem. Res.**, v. 43, p. 6548-6556, 2004.

CIOFALO, M.; BRUCATO, A.; GRISAFI, F.; TORRACA, N. Turbulent flow in closed and free-surface unbaffled tanks stirred by radial impellers. **Chem. Eng. Sci.**, v. 51, p. 3557-3573, 1996.

CLIFT, R.; GRACE, J. R.; WEBER, M. E. **Bubbles, drops and particles**. Mineola: Dover Publications, Inc., 1978.

CORONEO, M.; MONTANTE, G.; PAGLIANTI, A.; MAGELLI, F. CFD prediction of fluid flow and mixing in stirred tanks: Numerical issues about the RANS simulations. **Computers & Chem. Eng.**, v. 35, p. 1959-1968, 2011.

CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. L. A discrete numerical model for granular assemblies. **Géotechnique**, v. 29, n. 1, 1979.

DAMIAN, R. B. **Acoplamento de balanço populacional à simulação computacional de escoamentos multifásicos polidispersos**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Programa de Engenharia Química, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2007.

DAVIDSON, P. A. **Turbulence: an introduction for scientists and engineers** Oxford: Oxford University Press, 2004.

DEGLON, D.; MEYER, C. CFD modeling of stirred tanks: numerical considerations minerals engineering. **Selected papers from Computational Modelling '05**, Cape Town, África do Sul, v. 19, p. 1059-1068, 2006.

DOHI, N.; TAKAHASHI, T.; MINEKAWA, K.; KAWASE, Y. Power consumption and solid suspension performance of large-scale impellers in gas-liquid-solid three-phase stirred tank reactors. **Chem. Eng. J.**, v. 97, p. 103-114, 2004.

EARLE, R. L. e EARLE, M. D. **Unit operations in food processing**.

Disponível on-line <http://www.nzifst.org.nz/unitoperations/index.htm>, 1983.

FRANK, T.; ZWART, P. J.; SHI, J.-M.; KREPPER, E.; LUCAS, D.; ROHDE, U. Inhomogeneous MUSIG model – a population balance approach for polydispersed bubbly flows. **Nuclear Energy for New Europe 2005**. Bled, Slovenia, Setembro 5-8, 2005

GIDASPOW, D. **Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions**. San Diego: Academic Press, 1994.

GILLISSEN, J. J. J.; VAN DEN AKKER, H. E. A. Direct numerical simulation of a turbulently stirred tank. **13<sup>th</sup> European Conference on Mixing**, Londres, Abril 14–17, 2009.

GLOVER, G. C.; FITZPATRICK, J. Modelling vortex formation in an unbaffled stirred tank reactors. **Chem. Eng. J.**, v. 127, p. 11-22, 2007.

GROTJANS, H.; MENTER, F.R. Wall functions for general application CFD codes”, In K.D.Papailiou et al., editor, ECCOMAS 98 **Proceedings of the Fourth European Computational Fluid Dynamics Conference**, p. 1112-1117. John Wiley & Sons, 1998.

HAQUE, J. N.; MAHMUD, T.; ROBERTS, K. J.; RHODES, D. Modeling Turbulent Flows with Free-Surface in Unbaffled Agitated Vessels. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 45, p. 2881-2891, 2006.

HARTMANN, H., DERKSEN, J.J., MONTAVON, C. PEARSON, J. HAMILL, I.S., VAN DEN AKKER, H.E.A. Assessment of large eddy and RANS stirred tank simulations by means of LDA. **Chemical Engineering Science**. V. 59, p 2419- 2432, 2004.

HELLSTEN, A. New advanced  $k-\omega$  turbulence model for high-lift aerodynamics. **AIAA Paper 2004-1120**, Reno, Nevada, 2004.

HEUVEN, J. W. V.; BEEK, W. J. Power input, drop size and minimum stirrer speed for liquid–liquid dispersions in stirred tanks. **Proceedings of the International Solvent Extraction Conference**. Hague, Netherlands. P. 70–81, 1971.

HINZE, J. O. Fundamentals of the hydrodynamics mechanism of splitting in dispersion processes. **AICHE J.**, v. 1, p. 289-295, 1955.

HINZE, J. O. **Turbulence**. 2 ed. Estados Unidos: McGraw-Hill College, 1975.

HIRSCH, C. **Numerical computation of internal and external flows: the fundamentals of computational fluid dynamics**. 2 ed. Estados Unidos: Butterworth-Heinemann, 2007

HIRT, C. W.; NICHOLS, B. D. Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries. **J. Comput. Phys.**, v. 39, p. 201-225, 1981

ISHII, M. One-dimensional drift-flux model and constitutive equations for relative motion between phases in various two-phase flow regimes. **Argonne National Laboratory Report**, ANL 77-47, 1977.

ISHII, M. **Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow**. Collection de la direction des etudes et recherches d'Electricite de France. Eyrolles, Paris, France, 22, 1975.

ISHII, M.; HIBIKI, T. **Thermo-fluid dynamics of two-phase flow**. New York: Springer, 2006.

JAKOBSEN, H. A. **Chemical reactor modeling: multiphase reactive flows**. Berlin: Springer-Verlag, 2008.

JAVED, K.; MAHMUD, T.; ZHU, J. Numerical simulation of turbulent batch mixing in a vessel agitated by a Rushton turbine. **Chem. Eng. And Proc.**, v. 45, p. 99-112, 2006.

JOSHI, J. B.; NERE, N. K.; RANE, C. V.; MURTHY, B. N.; MATHPATI, C. S.; PATWARDHAN, A. W.; RANADE, V. V. CFD simulation of stirred tanks: Comparison of turbulence models. Part I: Radial flow impellers. **Can. J. Chem. Eng.**, v. 89, p. 23-82, 2011

JOSHI, J. B.; RANADE, V. V. Computational fluid dynamics for designing process equipment: expectations, current status and path for-

ward. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 42, p. 1115–1128, 2003.

KHOPKAR, A.; AUBIN, J.; RUBIO-ATOCHE, C.; XUEREB, C.; LE SAUZE, N.; BERTRAND, J.; RANADE, V. V. Flow generated by radial flow impellers: PIV measurements and CFD simulations. **Int. J. Chem. Reactor Eng.**, v. 2, p. 1-17, 2004.

KING, R. (Ed) **Fluid mechanics of mixing: 201odeling, operations and experimental techniques (fluid mechanics and its applications)**. Países Baixos: Kluwer Academic Publishers, 2010.

KOLMOGOROV, A. N. On the breakage of drops in a turbulent flow. **Dokl. Akad. Navk.**, SSSR 66, v. 8825-828, 1949.

LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. **Lectures in mathematical models of turbulence**. London: Academic Press, 1972.

LAURENZI, F.; CORONEO, M.; MONTANTE, G.; PAGLIANTI, A.; MAGELLI, F. Hydrodynamics of immiscible liquid-liquid dispersions in stirred vessels **13<sup>th</sup> European Conference on Mixing**, London, 14-17 April, 2009

LEE, S. J., HASHASH, Y. M. A.; NESAMI, E. G. Simulation of triaxial compression tests with polyhedral discrete elements. **Computers and Geotechnics**, v. 43, p. 92-100, 2012.

LO, S.; BAGATIN, R.; MASI, M. The development of a CFD analysis and design tool for air-lift reactors. **Proceedings of the SAIChE 2000 Conference**, Secunda, África do Sul, 2000.

LUMLEY, J. L.; TENNEKES, H. **A First Course in Turbulence**. Estados Unidos: The MIT Press, 1972.

LUO, S.M.; SVENDSEN, H. Theoretical model for drop and bubble breakup in turbulent dispersions. **AIChE J.**, v. 42, p. 1225 -1233, 1996.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. 2 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004

MANNINEN, M.; TAVASSALO, V. **On the Mixture Models for Multiphase Flow**, Tekniikantie, Finlândia: VTT Publications, 1996.

MENTER, F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. **AIAA-Journal**, v. 32, n. 8, p. 1598 – 1605, 1994.

MENTER, F.R., Multiscale model for turbulent flows. In **24<sup>th</sup> fluid dynamics conference**. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1993.

MONTANTE, G.; LEE, K. C.; BRUCATO, A.; YIANNESKIS, M. Numerical simulations of the dependency of flow pattern on impeller clearance in stirred vessels. **Chem. Eng. Sci.**, v. 56, p. 3751-3770, 2001

MURTHY, B. N.; GHADGE, R. S.; JOSHI, J. B. CFD simulations of gas–liquid–solid stirred reactor: prediction of critical impeller speed for solid suspension. **Chem. Eng. Sci.**, v. 62, p. 7184–7195, 2007.

MURTHY, B. N.; JOSHI, J. B. Assessment of Standard  $k-\epsilon$ , RSM and LES Turbulence Models in a Baffled Stirred Vessel Agitated by Various Impeller Designs. **Chem. Eng. Sci.**, v. 63, p. 5468–5495, 2008.

NAGATA, S. **Mixing: Principle and Applications**. New York: Wiley, 1975.

NAUMAN, B. (Ed) **Handbook of chemical reactor design, optimization, and scaleup**. EUA: McGraw-Hill, 2002.

NUNHEZ, J. R.; JOAQUIM JR., C. F.; CEKINSKI, E.; URENHA, L. C. **Agitação e mistura na indústria**. Notas do Curso de Extensão, Unicamp, 13-15 de agosto, 2002.

OCHIENG A. **Hydrodynamics and mixing in stirred tanks: Investigation of hydrodynamics and mixing using computational fluid dynamics simulation techniques**. Alemanha: Lambert Academic Publishing, 2009.

OSHER, S.; SETHIAN, J. A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on modeling-jacobi formulations. **J. Comput. Phys.**, v. 79, p.12–49, 1988.

OSHINOWO, L. M.; BAKKER, A. CFD modeling of solids suspen-

sions in stirred tanks. **Symposium on Computational Modeling of Metals, Minerals and Materials, TMS Annual Meeting**, Fevereiro 17-21, Seattle, WA, 2002.

PAUL, E. L. (Ed), ATIEMO-OBENG, V. (Ed), KRESTA, S. M (Ed). **Handbook of industrial mixing: science and practice**. EUA: John Wiley & Sons, 2004.

PINTO, J. C.; LAGE, P. L. C. **Métodos numéricos em problemas de engenharia química**. Rio de Janeiro: e-Papers, 2001.

PINTO, L. **Efeito das condições de operação e da geometria do reator sobre a distribuição de tamanhos de partícula de uma polimerização em suspensão**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2006.

POPE, S. B **Turbulent flows**. Cambridge: Cambridge University Press, 2000

PRINCE, M. AND BLANCH, H. bubble coalescence and break-up in air-sparged bubble columns. **AIChE J.**, v. 36, p. 1485-1499, 1990.

RAMKRISHNA, D. **Population balances: theory and applications to particulate systems in engineering**. San Diego: Academic Press, 2000.

RANADE, V. V. **Computational flow modeling for chemical reactor engineering**. Volume 5 (process systems engineering). Bookcraft, Reino Unido: Academic Press, 2002.

REYNOLDS O. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. **Philos. Trans. R. Soc.**, v.186, p. 123–164, 1895.

RHIE, C. M. AND CHOW, W. L. Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. **AIAA Journal**, v. 21, p. 1525–1532, 1983

ROACHE, P. J., **Verification and validation in computational science and engineering**, Hermosa Publishers, 1998

ROSA, E. S. **Escoamento 204odeling204o204 204odeling204o: modelos de multifluidos e de mistura**. Porto Alegre: Bookman, 2011.

RUMSEY, C. Turbulence modeling resource. NASA Langley Research Center. Disponível on-line em <<http://turbmodels.larc.nasa.gov/index.html>>. Acesso em: 27 mar. 2012, 17:00:00.

RUSHTON, J.H., COSTICH, E.W. EVERATT, H.J. Power characteristics of mixing impellers. **Chem. Eng. Prog.**, v. 46, p. 395–476, 1950.

SBRIZZAI, F.; LAVEZZO, V.; VERZICCO, R.; CAMPOLO, M.; SOLDATIA, A. Direct numerical simulation of turbulent particle dispersion in an unbaffled stirred-tank reactor. **Chem. Eng. Sci.**, v. 61, p. 2843–2851, 2006.

SCHILLER, L. AND NAUMANN, A., **VDI Zeits**, v. 77, p. 318, 1933.

SILVA, L. F. L. R. **Desenvolvimento de metodologias para simulação de escoamentos polidispersos usando código livre**. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Programa de Engenharia Química, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2008.

SMAGORINSKY, J. General circulation equipments with primitive equations. **Monthly Weather Rev.**, v. 93, p. 99, 1963.

SMIRNOV, P.E.; MENTER, F.R. Sensitization of the SST turbulence model to rotation and curvature by applying the Spalart-Shur correction term. **ASME Paper GT 2008-50480**, Berlin, Germany, 2008.

SPALART, P.R.; SHUR, M. On the sensitization of turbulence models to rotation and curvature. **Aerospace Sci. Tech.**, v. 1, n. 5, p. 297-302, 1997.

SPOGIS, N. **Metodologia para determinação de curvas de potência e fluxos característicos para impelidores axiais, radiais e tangenciais utilizando a fluidodinâmica computacional**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química. Faculdade de Engenharia Química, Unicamp, Campinas, 2002.

TATTERSON, G. B. **Scaleup and design of industrial mixing processes**. 2 ed. Estados Unidos: Gary Tatterson, 2003.

TECHNOLOGY VISION 2020. **The US Chemical Industry**. EUA: American Chemical Society, 1996.

VELLA, C.; GRISAFI, F.; MICALE, G.; RIZZUTI, L.; BRUCATO, A.. Near impeller flow field in an unbaffled stirred tank. **Proceedings of the 11<sup>th</sup> European Conference on Mixing**, preprints—VDI-GVD—Bamberg, 14–17 Outubro, p. 629–636, 2003.

VERMEULEN, T.; WILLIAMS, G.M.; LANGLOIS, G.E. Interfacial area in liquid-liquid and gas-liquid agitation. **Chem. Eng. Prog.**, v. 51F, pp. 85–94, 1955.

VERSTEEG, H. E MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method**. 2 ed. Prentice Hall, 2007.

VIVALDO-LIMA, E.; WOOD, P. E.; HAMIELEC, A. E.; PENLIDIS, A. An updated review on suspension polymerization. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 36, n. 4, p 939–965, 1997.

WALLIN, S., AND JOHANSSON A. Modelling streamline curvature effects in explicit algebraic Reynolds stress turbulence models. **Int. J. Heat and Fluid Flow**, v. 23, n. 5, p. 721-730, 2002.

WALLIN, S.; JOHANSSON, A. A complete explicit algebraic Reynolds stress model for incompressible and compressible flows. **J. Fluid Mech.**, v. 403, p. 89-132, 2000.

WANG, F.; MAO, Z.-S.; WANG, Y.; YANG, C. Measurement of phase holdups in liquid–liquid–solid three-phase stirred tanks and CFD simulation. **Chem. Eng. Sci.**, v. 61, p. 7535 – 7550, 2006.

WILCOX, D. C. **Turbulence modeling for cfd**. 2 ed. Estados Unidos: DCW Industries, 1998.

YANG, B.; TAKAHASHI, K.; TAKEISHI, M. Styrene drop size and size distribution in an aqueous solution of poly(vinyl alcohol). **Ind. Eng.**

**Chem. Res.**, v. 39, p. 2085-2090, 2000.

ZAKRZEWSKA B., JAWORSKI Z.: CFD modeling of turbulent jacket heat transfer in a Rushton turbine stirred vessel. **Chem. Eng. Technol.** V. 27, n. 3, p. 237-242, 2004.

ZLOKARNIK, M. **Stirring: Theory and Practice**. Alemanha: Wiley-VCH, 2001.

ZWART, P. J. **Numerical modeling of free surface and cavitating flows**. White Paper. Waterloo: Ansys Canada ltd, 2005.

ZWART, P. J.; BURNS, A. D.; GALPIN, P. F. coupled algebraic multi-grid for free surface flow simulations. **Proceedings of OMAE2007 26<sup>th</sup> International Conference on Offshore Mechanics and Arctic Engineering**. San Diego, California, EUA, Junho 10-15, 2007.

ZWART, P. J.; SCHEUERER, M.; BOGNER, M. Free surface flow modeling of an impinging jet. In: **ASTAR International Workshop on Advanced Numerical Methods for Multidimensional Simulation of Two-Phase Flows**, 2003.