

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Faculdade de Engenharia Química

PAULA TRINDADE DA SILVA

ESTUDO DO ESCOAMENTO EM UM TANQUE AGITADO POR PIV E CFD

CAMPINAS – São Paulo

2020

PAULA TRINDADE DA SILVA

ESTUDO DO ESCOAMENTO EM UM TANQUE AGITADO POR PIV E CFD

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia Química, da Universidade Estadual de Campinas, como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título em Mestra em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. José Roberto Nunhez

Coorientador: Prof. Dr. Guilherme José de Castilho

ESTE TRABALHO CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELA ALUNA PAULA TRINDADE DA SILVA E ORIENTADA PELO PROF. DR. JOSÉ ROBERTO NUNHEZ.

CAMPINAS – São Paulo

2020

Ficha catalográfica Universidade Estadual de Campinas Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura Rose Meire da Silva - CRB 8/5974

Si38e	Silva, Paula Trindade da, 1992- Estudo do escoamento em um tanque agitado por PIV e CFD / Paula Trindade da Silva. – Campinas, SP : [s.n.], 2020.
	Orientador: José Roberto Nunhez. Coorientador: Guilherme José de Castilho. Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.
	1. Fluidodinâmica computacional. 2. Escoamento com giro. 3. Turbomáquinas. 4. Lâminas de turbomáquinas. 5. Estimação de movimento. I. Nunhez, José Roberto, 1961 II. Castilho, Guilherme José de, 1983 III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Flow study in a tank agitated by PIV and CFD Palavras-chave em inglês: Computational fluid dynamics Flow with rotation Turbomachinery Turbomachine blades Movement estimation Área de concentração: Engenharia Química Titulação: Mestra em Engenharia Química Banca examinadora: José Roberto Nunhez [Orientador] Dirceu Noriler Gabriela Cantarelli Lopes Data de defesa: 17-12-2020 Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)

⁻ ORCID do autor: https://orcid.org/0000-0001-7815-7356 - Currículo Lattes do autor: http://lattes.cnpq.br/1675800260349414

Folha de Aprovação da Dissertação de Mestrado defendida por Paula Trindade da Silva - RA 211778, em 17 de dezembro de 2020 pela banca examinadora constituída pelos doutores.

Prof. Dr. José Roberto Nunhez

Presidente e Orientador

FEQ / UNICAMP

Videocoferência

Prof. Dr. Dirceu Noriler

FEQ/ UNICAMP

Videocoferência

Prof. Dr. Gabriela Cantarelli Lopes

DEQ / UFSCAR

Videocoferência

A Ata da Defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria do Programa da Unidade

Ao Gabriel e toda minha família

pelo apoio e incentivo.

AGRADECIMENTO

Aos meus pais, Dalila Cristina Trindade Silva e Adarlan Moreira e Silva, pelos recursos investidos em minha educação e pelo apoio incondicional. Obrigada por me incentivarem a ir além e não desistir nunca.

À minha avó Guiomar Ferreira Trindade por sempre ter incentivado seus netos a estudarem e darem o seu melhor. Obrigada por ser meu maior exemplo de força e perseverança. À toda família Trindade e Moreira-Silva pelos conselhos e suporte.

Ao Gabriel Koyro pelo companheirismo e pela motivação, principalmente nos momentos mais difíceis. Também agradeço à Bettina Koyro e ao Clério Koyro pelo incentivo nessa jornada.

Aos meus amigos Felipe Baião, Angélica Grespan, Rafael França, Otávio Lauriano, Aliandra Barbutti, Lucas Freitas e Thalita Neves, pelo companheirismo, apoio nos estudos e divertimentos ao longo dessa jornada na **Unicamp.**

Ao meu orientador Prof. Dr. José Roberto Nunhez, pela confiança e orientação. Agradeço por todo ensinamento na área de tanques e CFD, e pelas oportunidades de aprendizado ao seu lado.

Ao meu coorientador Prof. Dr. Guilherme José de Castilho pelo empenho e dedicação à sua equipe e ao projeto. Agradeço por todas as oportunidades oferecidas, pelos ensinamentos com PIV, por todo o incentivo e, acima de tudo pela amizade. Agradeço por sua orientação e por ter me incentivado a ser uma pesquisadora melhor.

Ao Prof. Dr. Dirceu Noriler e ao Felipe Mendes por todo apoio durante o mestrado.

Ao IC Ryo Sato, pela parceria no aprendizado com CFD. Agradeço pela experiência em ter participado e contribuído com o seu trabalho.

Aos meus colegas de trabalho do Laboratório de Caracterização de Escoamentos Multifásicos – LACEM pelo suporte oferecido durante os experimentos e projeto. Em especial aos Drs. Helder Moura e Rodrigo Amaral por toda a ajuda durante esses 2 anos de trabalho e dedicação ao projeto. Obrigada por todo aprendizado. Agradeço também ao Dr. Raphael Ribeiro pelo apoio com o CFD.

O presente trabalho foi realizado com apoio da CAPES - código de financiamento 001 e Petróleo Brasileiro S/A-PETROBRAS (Cenpes) - Processo 2017/00376-1.

"May you always remember to enjoy the road, especially when it's a hard one."

Kobe Bryant

RESUMO

O estudo do escoamento em tanques agitados por meio de técnicas experimentais e computacionais tem sido fundamental para avaliar os fenômenos relacionados ao escoamento complexo em tanques agitados mecanicamente. Um desses fenômenos é o efeito da variação do plano azimutal de medida relativo à posição da chicana. Trabalhos anteriores usando a técnica velocimetria por imagem de partículas (PIV) aplicados em tanques com impelidores pitched blade turbines (PBT) mostraram que são significativas as mudanças no escoamento devido ao efeito da posição da chicana relativo ao plano de medida PIV. Isso indicou a necessidade de obter medidas em múltiplos planos, considerando a interação impelidor-chicana pela variação dos planos azimutais (AZ). Esse efeito do plano azimutal ainda não foi avaliado profundamente comparando as medidas PIV com CFD. Dessa forma, esse trabalho avalia o efeito da variação do plano azimutal de medida determinado por PIV na validação dos dados em CFD. Medidas do campo de velocidade média e energia cinética turbulenta (TKE) foram obtidas em seis planos AZ de 0°-75° para o PIV e extraídos na mesma posição para as simulações em CFD. As simulações foram realizadas em OpenFOAM® com abordagem em multiple reference frames (MRF) e quatro modelos de turbulência. Os resultados mostraram que o efeito da variação do plano azimutal foi significativo, especialmente na região de descarga do impelidor. Para os planos AZ 0° e AZ 30°, os desvios RMS do CFD em relação ao PIV foram de 30%, entretanto para a maioria dos planos os desvios foram menores, abaixo de 10%. A média dos planos AZ foi analisada e essa estratégia minimizou os erros locais dos planos. Dois aspectos principais afetaram a variação do plano: posição axial e modelos de turbulência. Em relação à posição axial, próximo ao fundo do tanque, o erro RMS foi maior para todos os planos AZ. Além disso, com o modelo Standard k-e obteve-se melhor performance para a maior parte dos planos e da extensão axial do tanque. Finalmente, em relação à TKE, os dados em CFD foram subestimados em relação ao PIV, principalmente no plano AZ 45°. Entretanto, esse desvio pode estar superestimado devido ao efeito da periodicidade da pá do impelidor. Concluise, a partir deste estudo, que há a necessidade de obter múltiplos planos em diferentes posições AZ e que o uso da estratégia do plano médio AZ, como método alternativo, pode minimizar os erros locais oriundos da interação impelidor-chicana.

Palavras-chave: Tanques agitados, mistura, PIV, CFD, RANS, impelidor.

ABSTRACT

The study of flow in agitated tanks employing experimental and computational techniques has been fundamental to evaluating complex flow phenomena in mechanically agitated tanks. One of these phenomena is the effect of the variation in the azimuthal measurement plane relative to the position of the chicane. Previous work using the PIV technique applied to tanks with PBT impellers has shown that changes in the flow are significant due to the effect of the baffle position relative to the PIV measurement plane. This effect of the azimuthal plane indicated the need to obtain measurements in multiple planes, considering the impeller-chicane interaction due to the variation of the azimuthal planes (AZ). This effect of the azimuthal plane has not yet been thoroughly discussed in literature when comparing PIV measurements with CFD. Thus, this work evaluates the effect of the variation of the azimuthal measurement plane determined by PIV in the validation of the CFD data. Measurements of the mean velocity and turbulent kinetic energy (TKE) field were obtained in six 0°-75° using AZ planes for the PIV and extracted in the same position with the CFD simulations. The simulations were performed in OpenFOAM[®] with an MRF approach and four different turbulence models. The results showed that the effect of the variation of the azimuthal plane was significant, especially in the discharge area of the impeller. For the AZ 0° and AZ 30° planes, the RMS deviations from the CFD with the PIV were 30%. However, for most planes, the deviations were smaller, below 10%. The average of the AZ planes was analyzed, and this strategy minimized the local errors of the planes. Two main aspects affected plane variation: axial position and turbulence models. Regarding the axial position near the bottom of the tank, the RMS error was more significant for all AZ planes. In addition, the Standard kε model achieved better performance for most planes and an axial extension of the tank. Finally, the TKE CFD data were underestimated in relation to PIV, mainly in the AZ 45° plane. However, this deviation may be overestimated due to the periodicity effect of the impeller blade. This work concludes the need of using multiple planes in different AZ positions and further estimation of the AZ average plane strategy can minimize local errors arising from the impeller-baffle interaction.

Keywords: Stirred tanks, mixing, PIV, CFD, RANS, impeller.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Corte transversal do desenho dos principais cilindros verticais com perfis de fundos
distintos. Figura adaptada (Junior et al., 2007; Sousa and Leal Filho, 2010)28
Figura 2 – Configuração geométrica convencional de um tanque agitado. (a) Tanque fundo reto,
(b) Tanque fundo abaulado ASME 10 %. (Autora)28
Figura 3 – Tipos de fluxo produzido por diferentes impelidores. (a) Fluxo axial por um PBT
45, (b) Fluxo radial por um Rushton. (Autora)
Figura 4 – Espectro da energia turbulenta (Kundu and Cohen, 2015)
Figura 5 – Visão geral do OpenFOAM [®] . Imagem adaptada (OpenFOAM, 2020)37
Figura 6 – Estrutura básica dos casos no OpenFOAM. Imagem adaptada (OpenFOAM, 2020)
Figura 7 – Etapas do <i>setup</i> para o sistema 2D PIV (Amaral, 2013)
Figura 8 – Representação de medidas PIV em ângulo-resolvido. (Autora)
Figura 9 – Representação de medidas PIV em <i>ensemble-average</i> . (Autora)44
Figura 10 - Medidas em múltiplos planos considerando a variação do plano azimutal (AZ).
(Autora)46
Figura 11 - Comparação dos perfis de velocidade do impelidor Rushton com 2D PIV e CFD
LES e RANS. (a) Perfil de velocidade média radial (Ur), (b) Perfil de velocidade tangencial
(Ut), (c) Perfil de velocidade axial (Uz) (Delafosse et al., 2008)47
Figura 12 – Comparação CFD e 2D PIV para o campo de velocidade axial normalizada (V_a/V_{tip}).
(Mendoza-escamilla et al., 2018)
Figura 13 – Campos de velocidade axial e radial, TKE e EDR normalizadas. (a) 2D PIV (b)
Modelo <i>Realizable</i> k-ε (c) Modelo k-ω. (Alonzo-Garcia et al., 2019)49
Figura 14 – Medidas do campo de velocidade média em diferentes posições azimutais relativo
à posição da chicana. (Guida et al., 2010)53
Figura 15 - Efeito da variação da chicana e da pá em diferentes tipos de medidas PIV: (a)
ensemble average plano 0° (b) ângulo resolvido no plano 0° , (c) ensemble average plano 45° ,
(d) ângulo resolvido no plano 45°. (Alberini et al., 2017)
Figura 16 – Representação do campo de velocidade média do escoamento por um PBT 45. (a)
Medidas 2D PIV. (b) CFD (Sheng et al., 1998)55
Figura 17 – (a) Representação do sistema de agitação piloto – 1) motor; 2) regulagem da altura
da haste do impelidor; 3) transdutor de torque; 4) tanque de acrílico; 5) câmera PIV área

superior; 6) câmera PIV área inferior; 7) feixe de luz laser; 8) laser. (b) Diagrama da
configuração do sistema de agitação escolhida para os experimentos
Figura 18 – Setup experimental. (a) Configuração do sistema 2D PIV. (b) Medidas de múltiplos
planos pela variação da posição azimutal. (c) Representação dos planos azimutais (AZ) aferidos
relativo à posição da chicana61
Figura 19 – Setup experimental para o experimento plano AZ 0 °: 1) Câmeras; 2) Laser; 3)
Sincronizador; 4) Tanque de acrílico; 5) Acionador do laser
Figura 20 – Setup experimental para o experimento plano AZ 30 °: 1) Câmeras; 2) Laser; 3)
Sincronizador; 4) Tanque de acrílico; 5) Acionador do laser
Figura 21 – Setup experimental para o experimento plano AZ 45 °: 1) Câmeras; 2) Laser; 3)
Sincronizador; 4) Tanque de acrílico; 5) Acionador do laser63
Figura 22 – Geometria do sistema de agitação70
Figura 23 – Discretização do domínio adotado para a região do Estator. (a) visão lateral; (b)
visão superior, com foco na discretização da parede; (c) visão do tampo do tanque, com foco
no centro
Figura 24 – Discretização do domínio adotado para a região do Rotor. (a) visão superior; (b)
visão inferior; (c) visão 3 D; d) visão da discretização do domínio adotado para a parede do
impelidor72
Figura 25 - Representação das condições de contorno em dois domínios: (a) Domínio
Estacionário (estator). (b) Domínio rotativo (rotor)74
Figura 26 – Curva assintótica do Número de Potência (Np) para as três malhas analisadas e para
a extrapolação pelo método GCI
Figura 27 – Perfil de velocidade média UUtip na posição axial 25 mm ($z/H = 0.27$) do plano
AZ médio para as malhas grosseira, intermediária e extrapolada80
Figura 28 – Solução da malha intermediária, com o erro de discretização (GCI) computado na
forma de barra de erro
Figura 29 - Validação do Número de Potência simulado em diferentes malhas com o valor
experimental
Figura 30 – Variação do número de potência com o número de Reynolds para o impelidor PBT
45 nas condições geométricas T = $0,19$ m e D = T/384
Figura 31 – Velocidade radial PIV normalizada uUtip em diferentes planos AZ 0°-75°87
Figura 32 – Velocidade axial PIV normalizada vUtip em diferentes planos AZ 0°-75°88
Figura 33 – Velocidade média PIV normalizada UUtip em diferentes planos AZ 0°-75°90
Figura 34 – Planos AZ Médio PIV para os parâmetros do escoamento91

Figura 35 – Energia cinética turbulenta PIV média TKEUtip em diferentes ângulos azimutais 0°-75°
Figura 36 – Energia cinética turbulenta PIV média TKEUtip no plano AZ médio com duas
resoluções espaciais: (a) 36×36, (b) 10×1095
Figura 37 – Perfil radial da TKE média normalizada em 5 resoluções espaciais distintas para o
plano AZ médio: 36 px, 27 px, 20 px, 15 px e 10 px95
Figura 38 – Velocidade média normalizada UUtip em diferentes planos AZ CFD entre 0° -75°
para ο modelo k-ε STD98
Figura 39 – Velocidade média CFD normalizada UUtip no plano AZ Médio para o modelo k- ϵ
STD99
Figura 40 – Comparação CFD e PIV para o campo de velocidade média normalizada UUtip no
plano AZ médio para o modelo k-ε STD100
Figura 41 – Comparação CFD e PIV para o campo de velocidade média normalizada UUtip no
plano AZ médio. (a) k-ε STD; (b) k-ε RNG; (c) k-ε REA; (d) k-ω SST; (e) PIV102
Figura 42 – Comparação CFD e PIV para o campo de velocidade axial normalizada vUtip no
plano AZ Médio para o modelo k-ε STD103
Figura 43 – Comparação CFD e PIV para o campo de velocidade radial normalizada (u/Utip)
no plano AZ Médio para o modelo k-ε STD104
Figura 44 – Comparação CFD e PIV para o campo de velocidade radial normalizada uUtip no
plano AZ Médio. (a) k-ε STD; (b) k-ε RNG; (c) k-ε REA; (d) k-ω SST; (e) PIV105
Figura 45 – Comparação dos perfis radiais CFD e PIV para posição axial 25 mm no plano AZ
Médio: (a) Velocidade axial vUtip; (b) Velocidade radial uUtip; (c) Velocidade média UUtip .
Figura 46 – Comparação dos perfis radiais CFD e PIV para posição axial 0 mm no plano AZ
Médio: (a) Velocidade axial vUtip; (b) Velocidade radial uUtip; (c) Velocidade média UUtip . 108
Figura 47 – Comparação dos perfis radiais CFD e PIV para posição axial 50 mm no plano AZ
Médio: (a) Velocidade axial vUtip; (b) Velocidade radial uUtip; (c) Velocidade média UUtip .
Figura 48 – Comparação CFD e PIV para a velocidade média CFD normalizada UUtip em
diferentes planos AZ 0°-30° para o modelo k-ε STD111
Figura 49 – Comparação CFD e PIV para a velocidade média normalizada UUtip em diferentes
planos AZ 45°-75° para o modelo k-ε STD112

Figura 50 – Perfis radiais da velocidade média UUtip para o CFD e PIV na posição axial 25
mm para planos AZ 0°-75°113
Figura 51 – Perfis radiais da velocidade média UUtip para o CFD e PIV na posição axial 0 mm
para planos AZ 0°-75°116
Figura 52 – Raiz do erro quadrático médio (RMS) da velocidade média (U/Utip) perfil radial
0 mm (z/H = 0.34).
Figura 53 – Raiz do erro quadrático médio (RMS) da velocidade média (U/Utip) perfil radial
0 mm (z/H = 0,20).
Figura 54 – Perfis radiais da velocidade média (U/Utip) para o CFD e PIV na posição axial 50
mm (z/H = 0,20) para diferentes planos azimutais 0° -75
Figura 55 – Perfis radiais da velocidade média (U/Utip) para o CFD e PIV na posição axial 65
mm (z/H = 0,16) para diferentes planos azimutais 0° -75°
Figura 56 – Raiz do erro quadrático médio (RMS) da velocidade média (U/Utip) para o plano
AZ Médio em diferentes posições axiais122
Figura 57 – Perfis radiais da energia cinética turbulenta (TKE/Utip2) para o CFD e PIV na
posição axial 0 mm ($z/H = 0,34$) para diferentes planos azimutais 0°-75°
Figura 58 – Perfis radiais da energia cinética turbulenta (TKE/Utip2) para o CFD e PIV na
posição axial 25 mm ($z/H = 0,27$) para diferentes planos azimutais 0°-75°
Figura 59 – Perfis radiais da energia cinética turbulenta (TKE/Utip2) para o CFD e PIV na
posição axial 65 mm ($z/H = 0,16$) para diferentes planos azimutais 0°-75°
Figura 60 - Campo de energia cinética turbulenta (TKE/Utip2) para o CFD e PIV para
diferentes planos azimutais 0°-30°129
Figura 61 - Campo de energia cinética turbulenta (TKE/Utip2) para o CFD e PIV para
diferentes planos azimutais 45°-75° para o modelo k-ε STD130
Figura 62 - Comparação CFD e PIV para energia cinética turbulenta (TKE/Utip2). (a) k-e
STD; (b) k-ε RNG; (c) k-ε REA; (d) k-ω SST; (e) PIV131
Figura 63 – Comparação dos esquemas de discretização para o k-ε STD. (a) Radial 0 mm (z/H
= 0,34); (b) Radial 25 mm (z/H =0,27); (c) Radial 65 mm (z/H=0,16)133

LISTA DE TABELAS

abela 1 - Número de potência (Np) para o impelidor PBT em diferentes configurações na
iteratura
Tabela 2 – Cálculos do erro de discretização usando o método GCI para o Número de Potência.
Cabela 3 – Raiz do erro quadrático médio (RMS) da velocidade média (U/Utip) perfil radial
5 mm (z/H = 0,27). 115

ABREVIAÇÕES

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
AR	Ângulo resolvido – Angle resolved
AZ	Planos Azimutais – Azimuthal plane
CAPES	Coordenação de Aperfeiçoamento Pessoal De Nível Superior
CFD	Fluidodinâmica Computacional – Computacional Fluid Dynamics
DNS	Direct Numerical Simulation
GCI	Índice de Convergência de grade – Grid Convergence Index
k-ε REA	Modelo de turbulência <i>Realizable</i> k-e
k-ε RNG	Modelo de turbulência Renormalization Group k-e
k-ε STD	Modelo de turbulência Standard k-ε
LDA	Anemômetro por Laser Doppler – Laser Doppler Anemometry
LDV	Velocimetria por Laser Doppler – Laser Doppler Velocimetry
LES	Simulações das Grandes Escalas – Large Eddy Simulation
MRF	Quadro de Referência Múltiplo – Multiple Reference Frame
NBR	Normas brasileiras
Nd: YAG	Neodymium-doped yttrium aluminium garnet
PBT	Turbinas de pás inclinadas – Pitched Blade Turbine
PIV	Velocimetria por imagem de partículas – Particle Image Velocimetry
RANS Stokes – <i>Reyn</i>	Simulações do Escoamento turbulento pela média das equações de Navier olds averaged Navier-Stokes
RMS	Raiz do valor quadrado médio – Root Mean Square
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations
SNR	Relação sinal-ruído – Signal-to-noise ratio
SSC	Função de correlação cruzada – Standard cross-correlation
TKE	Energia cinética turbulenta – Turbulent Kinetic Energy
QUICK	Quadratic upwind differencing

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Latinas

В	Largura	da	chicana	[m]
-			• • • • • • • • • • • • • • • • • • • •	

- C Distância do impelidor ao fundo reto do tanque [m]
- C_1 Constante para os modelos da família $k \varepsilon$
- C_2 Constante para os modelos da família $k \varepsilon$
- C_3 Constante para os modelos da família $k-\varepsilon$
- C_{μ} Constante para os modelos da família $k \varepsilon$
- d_p Diâmetro da partícula traçadora [μm]
- D Diâmetro do impelidor [m]
- e_a^{21} Erro relativo para o método GCI

 e_{ext}^{21} Erro relativo extrapolado para o método GCI

- F_1 Termo de difusão cruzada do modelo $k \omega SST$
- F Força devido ao frame rotativo de referência por unidade de massa $[N kg^{-1}]$
- g Vetor aceleração gravitacional $[m \ s^{-2}]$

GCI_{fine}^{ij}Índice de convergência da malha [%]

- *h* Comprimento da malha representativa [*m*]
- *H* Altura do líquido no tanque [*m*]
- k Energia cinética turbulenta $[m^2 s^{-2}]$
- *N* Velocidade do impelidor $[s^{-1}]$

N_p Número de Potência

```
p Pressão [Pa]
```

- p_a Ordem aparente para o método GCI
- P Potência [W]

px Pixel

 P_k Termo de produção de turbulência para os modelos da família $k-\epsilon$

r Vetor posição [m]

- r_{21} Fator de refinamento para o método GCI
- r/R Distância radial adimensionalizada [-]
- *Re* Número de Reynolds

- S_{ε} Termo fonte para os modelos da família $k \varepsilon$
- *S*_t Tensor médio
- t Tempo [s]
- T Diâmetro do tanque [m]
- T_f Torque [Nm]
- \boldsymbol{u} Vetor velocidade do fluido [$m s^{-1}$]
- *u* Componente da velocidade axial $[m \ s^{-1}]$
- \tilde{u}^2 Velocidade RMS para a componente axial
- U Velocidade média bidimensional baseada nas componentes u, v $[m \ s^{-1}]$
- $|\overline{U}|$ Módulo de velocidade média 2D x-y [m s⁻¹]
- U_{tip} Velocidade na ponta do impelidor $[m s^{-1}]$

$$v$$
 Componente da velocidade radial $[m s^{-1}]$

- \tilde{v}^2 Velocidade RMS para a componente radial
- Y_k, Y_ω Termos de dissipação para k e ω [kg m⁻¹ s⁻²]
- *w* Componente da velocidade tangencial $[m s^{-1}]$
- *z/H* Altura adimensionalizada no tanque [-]

Letras Gregas

 α Termo de produção da dissipação para o *Re-Normalization Group k*- ϵ

β Constante do modelo *Re-Normalization Group* k-ε relacionada à constante de von Kármán

 $\Gamma_{\omega}, \Gamma_k$ Termos de difusividade efetiva para k e $\omega[kg m^{-1} s^{-2}]$

- Δ Comprimento da janela de interrogação [mm]
- Δt Tempo entre os quadros (*frames*)
- ΔV_i Volume da ith célula da malha
- ε Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta $[m^2 s^{-3}]$
- η Parâmetro de expansão adicional do modelo *Re-Normalization Group k*- ϵ
- η_0 Valor de ponto fixo relacionado ao modelo *Re-Normalization Group k*- ϵ
- I Tensor unitário
- λ Comprimento de onda do laser [nm]

- μ Viscosidade do fluido [*Pa* s⁻¹]
- μ_{eff} Viscosidade efetiva do fluido [*Pa* s⁻¹]
- μ_T Viscosidade turbulenta do fluido [*Pa* s⁻¹]
- ρ Massa específica do fluido [$kg m^{-3}$]
- ho_p Massa específica para a partícula traçadora [kg m⁻³]
- σ número de Prandt para k e ε
- τ^R Tensor tensão de Reynolds [$kg m^{-1} s^{-2}$]
- ν Viscosidade cinemática $[m^2 s^{-1}]$
- ϕ_{ext}^{21} Solução discreta da variável extrapolada
- ϕ_i Solução discreta de uma malha representativa para o método GCI
- Ω Velocidade angular do fluido [*rad* s^{-1}]
- ω Taxa específica de dissipação de energia cinética turbulenta [s⁻¹]

Sobrescrito

R Reynolds

Subscrito

T Turbulento

- *REA* Modelo *Realizable* $k-\varepsilon$
- RNG Modelo Re-Normalization Group k-ε
- STD Modelo Standard $k \varepsilon$

1. CONSIDERAÇÕES INICIAIS2	2
1.1. INTRODUÇÃO2	2
1.2. OBJETIVO GERAL	5
1.2.1. Objetivos Específicos2	5
1.3. ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO2	6
2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA2	7
2.1. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA2	7
2.1.1. Tanques agitados mecanicamente2	7
2.1.2. Turbina com quatro pás inclinadas a 45° (PBT 45)2	9
2.1.3. Turbulência	2
2.1.4. Resolução do problema utilizando CFD	5
2.1.5. OpenFOAM [®]	6
2.1.6. Velocimetria por imagem de partículas – PIV	8
2.1.7. 2D PIV aplicada a tanques agitados4	1
2.1.7.1. Tipos de medidas PIV em tanques agitados4	2
2.1.7.2. Variação do plano azimutal de medida PIV4	5
2.2. Revisão Bibliográfica4	6
2.2.1. Modelos de turbulência aplicados em tanques agitados4	6
2.2.2. Medidas PIV com variação do plano azimutal relativo à chicana5	2
2.2.3. Validação dos modelos de turbulência com medidas experimentais PIV5	4
3. MÉTODOS E PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAL5	7
3.1. APARATO EXPERIMENTAL5	7
3.2. SISTEMA DE AQUISIÇÃO DE DADOS PIV5	8
3.3. VARIAÇÃO DO PLANO AZIMUTAL PIV5	9

SUMÁRIO

3.4. PROPRIEDADES DO ESCOAMENTO	63
3.4.1. Estimativa da energia cinética turbulenta (TKE)	63
4. MÉTODOS E PROCEDIMENTOS NUMÉRICOS	65
4.1. MODELAGEM MATEMÁTICA	65
4.1.1. Equação da continuidade	65
4.1.2. Equação de conservação da quantidade de movimento	65
4.1.3. Equações de fechamento – Modelos de duas equações	66
4.1.3.1. Modelo Standard k-ε	66
4.1.3.2. Modelo Re-Normalization Group k-ε (RNG)	67
4.1.3.3. Modelo <i>Realizable</i> k-ε	67
4.1.3.4. Modelo Shear Stress Transport k–ω SST	68
4.2. APRESENTAÇÃO DO DOMÍNIO COMPUTACIONAL	69
4.3. GEOMETRIA E MALHAS COMPUTACIONAIS	70
4.4. SETUP NUMÉRICO	72
4.5. CONDIÇÕES DE CONTORNO	74
4.6. ANÁLISE DA INDEPENDÊNCIA DA MALHA	75
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES	83
5.1. RESULTADOS EXPERIMENTAL	83
5.1.1. Características hidrodinâmicas do PBT 45	83
5.1.2. Campo de velocidade com variação do plano azimutal 2D PIV	86
5.1.3. Plano AZ Médio para os parâmetros do escoamento	91
5.1.4. Energia cinética turbulenta (TKE)	92
5.1.5. Efeito da resolução espacial	94
5.2. RESULTADOS CFD	96
5.2.1. Análise qualitativa dos campos de velocidade	96

5.3. COMPARAÇÃO CFD E PIV99
5.3.1. Análise quantitativa dos perfis radiais de velocidade106
5.3.2. Efeito do plano azimutal AZ PIV na validação dos dados em CFD110
5.3.3. Efeito da posição axial na validação dos modelos CFD/RANS para o campo de
escoamento médio122
5.3.4. Energia cinética turbulenta (TKE)
5.3.5. Influência das funções de interpolação na predição do escoamento em tanques
agitados132
6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES134
6.1. Conclusões
6.2. Sugestões para trabalhos futuros136
REFERÊNCIAS137

CAPÍTULO 1:

1. CONSIDERAÇÕES INICIAIS

1.1. INTRODUÇÃO

Tanques agitados mecanicamente são essenciais em muitos processos industriais devido à sua versatilidade em diferentes aplicações e sua eficiência em atingir um alto nível de mistura por impelidores axiais. Impelidores axiais, como a turbina de pás inclinadas de 45° (PBT 45), podem oferecer um nível de mistura ideal por meio de altas correntes convectivas e baixa viscosidade turbulenta com o menor consumo de energia que os impelidores radiais (Joshi et al., 2011). Estudos na literatura têm descrito a hidrodinâmica do PBT 45 em tanques agitados com chicanas por meio de simulações numéricas e medidas experimentais (Sheng et al., 1998; Ge et al., 2014). No entanto, ainda é necessário um melhor entendimento da caracterização dos padrões de escoamento do impelidor, principalmente na região de descarga.

A fim de entender a distribuição dos parâmetros do escoamento turbulento em tanques agitados mecanicamente, diferentes técnicas de medição experimental foram empregadas na literatura (Roussinova et al., 2000; Yang et al., 2012; Liu and Barigou, 2015). Técnicas sofisticadas não intrusivas para medir o mapeamento de fluxo em tanques foram aplicadas para caracterizar o campo de escoamento médio, como a velocimetria doppler a laser (LDV) e a velocimetria por imagem de partícula (PIV).

A velocimetria por imagem de partícula é uma técnica que mais tem contribuído para a compreensão dos fenômenos turbulentos em tanques agitados mecanicamente (Bugay et al., 2002; Kleinwächter et al., 2017; Luan et al., 2017; Gong et al., 2018). Aplicando a técnica PIV, é possível extrair o campo de velocidade instantânea em um domínio planar, obtendo dados sobre as componentes axial e radial do escoamento. Desta forma, por meio da técnica PIV, é possível captar as variações médias do campo de escoamento nesses tanques e estimar as características do seu escoamento, como a energia cinética turbulenta (TKE), em uma extensão considerável do tanque.

Nessa perspectiva de visualização do fluxo local em tanques agitados, as medidas PIV próximas ao impelidor podem ser aplicadas por várias opções de medições para explorar o fluxo turbulento. As medidas PIV podem ser realizadas considerando a posição da pá do impelidor fixa, as chamadas medidas em ângulo resolvido (Khan et al., 2006; Chung et al., 2009; Gabriele et al., 2009). Caso contrário, as medições podem ser realizadas sem sincronizar a posição da pá, em medições PIV em *ensemble-average*. Foi observado que as diferenças entre essas duas abordagens de medição PIV são limitadas à avaliações do campo de velocidade média (Alberini et al., 2017).

Medidas *ensemble-averaged* são utilizadas para avaliar as características do escoamento do tanque, considerando a pá do impelidor aleatória ou com rotação em 360° (Pan et al., 2008; Alberini et al., 2017). Essas medidas mostraram-se úteis para a análise de impelidores mais complexos (Unadkat et al., 2011), onde não foi possível sincronizar a pá do impelidor. O uso de medições em *ensemble-average* em tanques sem simetria axial, como tanques *semi-baffled*, também foi relatado (Torré et al., 2007).

Um aspecto que está assumindo a importância do estudo do PIV em tanques agitados é a variação da posição azimutal do plano de medição do PIV com a posição da chicana. Aubin et al. (2004) sugeriram que o padrão do escoamento depende da posição das chicanas e, portanto, as medições devem considerar o efeito da posição desses defletores. Guida, Nienow e Barigou (2010) discutiram a variação da posição dos planos azimutais por medidas 2D PIV. Os autores observaram diferenças significativas nas características do escoamento turbulento devido à variação da posição do plano azimutal em relação à chicana. Recentemente, Alberini et al. (2017) também discutiu o uso de medições em *ensemble-average* com medições em ângulo-resolvido para analisar o efeito da posição da chicana. Para este trabalho, os autores constataram que as diferenças devido à posição da chicana para o plano de medição do PIV foram significativas para ambas as abordagens, principalmente para a visualização do *loop* de fluxo circular produzido pelo impelidor PBT.

Em relação à pesquisa com fluidodinâmica computacional (CFD) em tanques agitados, as capturas das características do escoamento turbulento nesses tanques tiveram uma concordância mais significativa com os modelos de turbulência *Large Eddy Simulation* (LES) e *Direct Numerical Simulation* (DNS) (Delafosse et al., 2008; Roy and Acharya, 2011; Gillissen and Van den Akker, 2012). Esses modelos de turbulência retratam melhor a natureza complexa do fluxo em tanques agitados, que possuem características anisotrópicas e flutuações turbulentas em diferentes escalas (Roy et al., 2010; Pan et al., 2018a). Entretanto, os modelos *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS) são os métodos mais usados para otimização e projeto de tanques, uma vez que, em geral, requerem menor poder computacional (Jaworski

and Zakrzewska, 2002; J. Aubin et al., 2004; Coroneo et al., 2011a; Alonzo-Garcia et al., 2019; Rave et al., 2020).Para esses modelos, a modelagem da interface entre as zonas rotativa e estacionária pode ocorrer pela abordagem de *Multiple Reference Frames* (MRF) (Roy et al., 2010; Pan et al., 2018a).

É importante mencionar que a prática do desenvolvimento do design dos tanques agitados se apoiou, durante muitos anos, em correlações empíricas que foram estabelecidas por meio de experimentos em laboratório e plantas pilotos para diferentes geometrias de agitadores mecânicos e tanques (Wollny and Sperling, 2007). Abordagens como essas, embora ainda muito utilizadas, costumam falhar quanto à determinação do desenho ótimo do sistema impelidor-tanque, principalmente nas etapas de escalonamento do projeto a dimensões industriais. Dessa forma, o uso da fluidodinâmica computacional (CFD) tem muito a contribuir no processo de otimização do desenho e projeto dos tanques no que tange ao grau de realismo/acurácia na elaboração da geometria do sistema de agitação dos mais diversos tipos de escoamentos.

Em geral, os dados de CFD tem apresentado boa concordância com o PIV, tanto qualitativamente quanto quantitativamente (Ranade et al., 2001; de Lamotte et al., 2018; Mendoza-escamilla et al., 2018). As limitações ocorrem naturalmente para a produção e dissipação de energia na região de descarga do impulsor, onde os dados CFD RANS são altamente subestimados (Delafosse et al., 2008; Martínez-Delgadillo et al., 2019).

O efeito do plano azimutal ainda não foi totalmente avaliado comparando as medições PIV com os dados CFD. Assim, impactos significativos dessas diferenças na validação de dados numéricos ainda não foram apontados pela literatura. Dessa forma, neste trabalho, utiliza-se a técnica 2D PIV para avaliar o impacto da variação do plano azimutal na validação de dados de CFD. Os resultados foram avaliados em termos de velocidade média e energia cinética turbulenta.

1.2. OBJETIVO GERAL

O principal objetivo desse trabalho é avaliar a modelagem da turbulência, por CFD, do escoamento em um tanque agitado por água. A confiabilidade dos modelos foi verificada comparando-se os resultados das simulações com os dados experimentais usando a técnica PIV. A validação ocorreu localmente, variando-se o plano azimutal de medida, no intervalo 0°-75°.

1.2.1. Objetivos Específicos

Para alcançar o objetivo principal, os seguintes objetivos específicos são propostos.

- Avaliar as mudanças locais no campo de escoamento médio dentro do taque agitado, pela variação do plano azimutal de medida PIV relativo à posição da chicana. Avaliar se essas mudanças locais afetam a validação do CFD a partir da técnica PIV.
- Comparar plano a plano o campo de escoamento obtido pelos dados em CFD com as medidas PIV. Avaliar o resultado da comparação dos planos individuais com o obtido para a média dos planos azimutais (plano AZ Médio), que é um parâmetro global para avaliar o escoamento.
- Obter a validação dos diferentes modelos de turbulência com abordagem em *Reynolds-Averaged Navier–Stokes (RANS), Standard k-ε*, RNG *k-ε*, *Realizable k-ε*, *k-ω SST*, pela comparação com os dados PIV em termos do campo de velocidade e energia cinética, tanto plano a plano quanto para o plano AZ Médio.
- Avaliar o efeito da variação do plano azimutal na validação das simulações em CFD, analisando a variação da posição axial ao longo do jato produzido pelo PBT e a variação dos modelos de turbulência RANS. Além disso, propõe-se nessa análise identificar o melhor modelo.
- Comparar a TKE obtida nas medidas PIV com os valores obtidos das simulações em CFD.

1.3. ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

O presente estudo está dividido em seis capítulos. O **Capítulo 1** consiste na introdução ao tema e apresentação dos objetivos da pesquisa. Os seguintes capítulos estão organizados da seguinte maneira:

- Capítulo 2: são reportados a fundamentação teórica e a revisão bibliográfica sobre o escoamento em tanques agitados no que diz respeito a agitação produzida pelo impelidor PBT 45 e sua aplicação tanto por meio da técnica experimental PIV como pela técnica computacional em CFD. Nesse capítulo também será apresentada uma visão geral do *software* gratuito *Open Source Field Operation and Manipulation* (OpenFOAM) para resolução do problema em CFD. Além disso, são descritos os principais conceitos relacionados à técnica PIV, principalmente no que tange ao uso de múltiplos planos para analisar o efeito da variação do plano azimutal.
- Capítulo 3: são fornecidos os métodos e procedimentos experimentais para a técnica 2D PIV com aplicação de medidas em *ensemble average* e gravação das imagens em múltiplos planos azimutais. Todas as etapas desde a aquisição dos dados ao pós processamento serão fornecidas.
- Capítulo 4: são apresentados os métodos e procedimentos computacionais, iniciando pela modelagem matemática, apresentação do problema em CFD, descrição da geometria e malhas computacionais. Segue-se para a apresentação do *setup* numérico, condições de contorno e análise da incerteza numérica para avaliar a adequação da malha pela quantificação do erro de discretização numérica.
- Capítulo 5: são apresentados os resultados obtidos em três seções principais. Inicialmente, os resultados experimentais em termos dos parâmetros do escoamento, campo de velocidade e energia cinética turbulenta são apresentados. Nessa sessão avalia-se o efeito da variação do plano azimutal e aspectos experimentas como o efeito da resolução espacial nas medidas PIV. Seguindo, a segunda seção apresenta os resultados em CFD, focando na obtenção dos planos azimutais simulados e da média dos planos em CFD (plano AZ Médio). A última seção avalia a comparação entre os dados CFD e PIV com destaque às discussões que respondem aos objetivos dessa pesquisa.
- Capítulo 6: são fornecidas as principais conclusões provenientes dessa pesquisa e as sugestões para trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2:

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1.1. Tanques agitados mecanicamente

Tanques agitados mecanicamente consistem na unidade básica dos processos químicos industriais. Eles são em sua maioria cilíndricos, não pressurizados e com composição variada, sendo os mais comuns o de aço inoxidável e de aço carbono. Quanto à geometria do tampo, podem apresentar fundo plano ou baseado em um perfil cuja curvatura inferior depende da operação pretendida e do custo envolvido na sua conformação. Perfis com fundo plano são geralmente utilizados em sistemas líquidos, enquanto tanques com fundo abaulado ou cônicos são mais comuns em sistemas sólido-líquido ou sólido-líquido-gás para auxiliar a suspensão de partículas (Brucato et al., 1998; Junior et al., 2007). De forma geral, o padrão do tampo deve beneficiar o fluxo gerado pelo impelidor (Figura 1).

A geometria do sistema de agitação é extremamente relevante, pois é fundamental para a determinação dos perfis de velocidades no interior do tanque e na caracterização dos escoamentos em sistemas de mistura. O design apropriado de um tanque agitado assim como a otimização do processo de mistura nesses tanques requer um estudo de todas as variáveis que afetam potencialmente a desempenho desse processo. Alguns desses parâmetros podem ser apresentados como: a geometria do tanque; orientação e número de impelidores; presença de chicanas e a folga do agitador em relação ao fundo do tanque. A Figura 2 abaixo identifica a principal configuração de um sistema de agitação convencional com entrada do impelidor superior e centrada adaptada para dois tipos de fundo.



Figura 1 – Corte transversal do desenho dos principais cilindros verticais com perfís de fundos distintos. Figura adaptada (Junior et al., 2007; Sousa and Leal Filho, 2010).



Figura 2 – Configuração geométrica convencional de um tanque agitado. **(a)** Tanque fundo reto, **(b)** Tanque fundo abaulado ASME 10 %. (Autora).

Tanques convencionais com um único impelidor apresentam uma altura padrão do líquido (H) igual ao diâmetro interno do tanque (T), porém, a relação H/T pode variar entre 1/2 a 3/2, atendendo ao critério de estabilidade estrutural. Referente à altura do impelidor ao fundo (C), esta varia entre 1/6 e 1/2 em relação a T, sendo C=T/3 a configuração mais comum. O diâmetro do impelidor (D) varia entre 1/6 a 1/4 em relação à largura da pá do impelidor (w), sendo D=w/5 é o mais comum, e varia entre 1/4 a 1/2 em relação ao diâmetro do tanque, D=T/3 com a configuração mais usual (Silva et al., 2002; Junior et al., 2007). Além disso, tipicamente, uma configuração básica de tanques geralmente inclui chicanas igualmente espaçadas em assimetria axial (4 chicanas), cuja largura (B) varia entre T/12 e T/10 (Europa) (Paul et al., 2004).

2.1.2. Turbina com quatro pás inclinadas a 45° (PBT 45)

Agitadores mecânicos, também conhecidos como impelidores, rotores ou impulsores são bons conversores de energia em movimento do fluido. De acordo com Mccabe et al. (2001), os impelidores são classificados quanto ao fluxo em: axial e radial (Figura 3). Impelidores axiais promovem fluxo paralelo ao eixo de saída da pá, enquanto os impelidores radiais promovem um fluxo na direção do raio ou perpendicular ao eixo da pá.

Além disso, os impelidores axiais geram maiores taxas de bombeamento (altos fluxos) enquanto os radiais apresentam alta taxa de cisalhamento. De acordo com Joshi et al. (2011) a vantagem dos impelidores axiais, como a turbinas de pás inclinadas (PBT, do inglês *pitched blade turbine*), é a geração de um nível de mistura com menor consumo de energia que os impelidores radiais.

Impelidores do tipo turbinas com pás inclinadas a 45° são comumente aplicados em operações de mistura e dispersão, onde é necessário um alto requerimento energético e um fluxo predominantemente axial. São geralmente utilizados em bombeamento descendente (Bittorf and Kresta, 2000; Achouri et al., 2012; Ge et al., 2014). Mas também operar em configuração ascendente de bombeamento (Bhattacharya and Kresta, 2004; J. Aubin et al., 2004; Chung et al., 2009).



Figura 3 – Tipos de fluxo produzido por diferentes impelidores. (a) Fluxo axial por um PBT 45, (b) Fluxo radial por um Rushton. (Autora).

O campo de escoamento produzido por esse tipo de impelidor foi avaliado em diversos trabalhos ao longo dos anos (Ranade and Joshi, 1989; Kresta and Wood, 1993; Bakker et al., 1996; Driss et al., 2010; Zamiri and Chung, 2017; Wang et al., 2018). As principais investigações desses trabalhos ocorreram para identificar o campo de escoamento médio produzido pelo impelidor PBT 45. Além disso, investigaram as características do campo médio em várias partes do tanque, o que contribui para modelagem de diversos fenômenos, tais como, mistura, reação química, fermentação e distribuição do tamanho de partículas (Kresta and Wood, 1993). De acordo com os autores, as características do escoamento produzidas por um PBT 45 e outros impelidores podem ser classificadas em três abordagens principais: turbulência, estruturas de vórtices associados ao movimento individual das pás e padrões de circulação associados aos aspectos não estacionários conhecidos como macroinstabilidades.

Outros trabalhos, ainda, focaram na quantificação de macro parâmetros, como a eficiência hidráulica (Fořt, 2011) e os números adimensionais, como o número de potência (Np) (Chapple et al., 2002; Machado et al., 2011) e número de bombeamento (Nq) (Mavros and Baudou, 1997; Aubin et al., 2001). Em relação ao número de potência, o seu valor é constante na região de turbulência, e para os impelidores PBT essa condição ocorre acima do número de Reynolds (Re) superior a 2×10^4 (Chapple et al., 2002). Na literatura, os principais valores de

Np experimental para o PBT na região de turbulência são apresentados conforme Tabela 1 abaixo:

Número Número de de Configuração geométrica Literatura Potência **Reynolds** (Np) (**Re**) Chapple et al. (2002) 1,27 20.000 T=240 mm, D=T/3, C=T/3, 4-PBT 45 Sardeing et al. (2004) 1,96 T=190 mm, D=T/2, C=T/3, 6-PBT 45 45.125 Gabriele et al. (2009) 22.800 T=150 mm, D=9T/2, C=T/4, 6-PBT45 1,55 Souza (2011) 1,34 200.000 T=380 mm, D=T/3, C=T/3, 4-PBT 45 1,29 Machado et al. (2011) 48.000 T=78.5 mm, D=T/3, C=T/3, 4-PBT 45 Alonzo-Garcia et al. 1,26 52.000 T=250 mm, D=T/3, C=T/3, 4-PBT 45 (2019)

Tabela 1 – Número de potência (Np) para o impelidor PBT em diferentes configurações na literatura.

O estudo do escoamento produzido pelo impelidor PBT 45 por meio de predições com CFD e medidas PIV é particularmente interessante devido à grande quantidade de informações sobre sua hidrodinâmica na literatura.

Em relação às simulações em CFD, essas informações são importantes para validar os diferentes modelos de turbulência e predizer suas capabilidades no contexto de agitação e mistura. Neste contexto, importantes avanços ocorreram com modelos de simulações em LES (Nurtono et al., 2009; Roy and Acharya, 2012; Eng and Rasmuson, 2015). Porém a performance dos modelos de turbulência baseados em RANS ainda tem muito espaço para discussão, principalmente para analisar e validar o fluxo predito na região de descarga do impelidor (Montante et al., 2005; Ge et al., 2014; Bashiri et al., 2016; Mendoza-escamilla et al., 2018).

Em relação às técnicas experimentais, por exemplo, a técnica 2D PIV, motiva discussões importantes sobre o tipo de medidas utilizadas, a posição do plano de medida, e o uso de múltiplas medidas para captar o escoamento em um domínio planar. Quanto ao tipo de medidas, foram utilizadas tanto medidas em ângulo-resolvido (Chung et al., 2009; Gabriele et

al., 2009) – também denominado fase resolvida, quanto medidas em *ensemble-averaged*, ou 360° *ensemble averaged* (Schäfer et al., 1998; Yianneskis, 2000). A diferença entre as duas abordagens é sincronização da pá do impelidor, que ocorre apenas nas medidas em ângulo-resolvido.

Quanto à posição do plano de medida, as principais posições escolhidas são $0^{\circ}-5^{\circ}$ da chicana (Chung et al., 2009; Gabriele et al., 2009; Roy et al., 2010) ou localizado em 45° relativo à chicana, ou seja, entre duas chicanas consecutivas (Khan et al., 2004; Alberini et al., 2017). Mais recentemente, autores discutiram o efeito da variação do plano de medida PIV em relação à chicana com impelidores PBT. Essa discussão é mencionada como variação da posição azimutal do plano de medida PIV e seu efeito sobre os parâmetros do escoamento obtido por um agitador mecânico (Guida et al., 2010) ou efeito da posição da chicana (Aubin et al., 2004; Alberini et al., 2017). Neste presente trabalho, aborda-se a estratégia de medida PIV *ensemble-average* com variação do plano azimutal (AZ) e seu efeito na validação das simulações em CFD.

2.1.3. Turbulência

A turbulência é o fenômeno central em grande parte da tecnologia de mistura de fluidos e todos os processos típicos que são dramaticamente afetados pela sua presença: reação, transferência de massa e calor, dispersão líquido-líquido, dispersão de gás, flotação, mistura e a suspensão de sólidos. Uma compreensão da natureza da turbulência é, portanto, fundamental para lidar com as interações entre as flutuações turbulentas nos escoamentos em tanques de agitação e mistura.

De acordo com Von Karman (1937), a turbulência é um movimento irregular que, em geral, está presente em fluidos, gases ou líquidos quando a água passa por superfícies sólidas ou mesmo quando correntes vizinhas do mesmo fluido passam ou se sobrepõem umas às outras. A turbulência é caracterizada pela presença de um espectro contínuo de escalas de tempo e comprimento, variando da maior para menor. Tais escalas podem ser visualizadas na forma de redemoinhos ou turbilhões (vórtices) que se sobrepõem no espaço e apresentam-se em um processo em cascata, pelo qual à medida que a turbulência decai, sua energia cinética é transferida dos redemoinhos maiores para os menores.

As menores escalas de turbilhões se dissipam em calor pela ação da viscosidade molecular. Essa menor escala é denominada escala de Kolmogorov e definida pela relação da viscosidade turbulenta com a taxa de dissipação (Tanaka and Eaton, 2007; Liu and Barigou, 2013)

Por análise da equação de Navier-Stokes, ou por análise da formação da camada limite, mostra-se que a turbulência desenvolve como uma instabilidade do escoamento laminar. As instabilidades formam-se pela interação dos termos inerciais e viscosos, e é bastante complexa devido a sua natureza rotacional, tridimensional e transiente (Kresta, 1998).

A modelagem da turbulência representa por natureza a criação de um modelo matemático que aproxima o comportamento físico do escoamento turbulento. A turbulência é tridimensional e dependente do tempo, e dessa forma requer uma quantidade considerável de informações para descrever o seu fluxo. A escolha das propriedades importantes para um determinado escoamento é ditada pela aplicação. Para aplicações mais simples, o coeficiente de atrito é suficiente. Para aplicações que requerem um maior detalhamento do campo de escoamento, podem-se requerer propriedades do espectro de energia, magnitude da flutuação da turbulência e escalas da turbulência (WILCOX, 1988).

De acordo com Kundu e Cohen (2015), o escoamento turbulento não apresenta um conceito definido. Ele pode ser definido por conceitos específicos mecanicistas, tal como o comprimento de mistura de Prandtl, definido por observações fenomenológicas. A partir da definição de estruturas coerentes turbulentas no contexto de agitação e mistura, algumas características que descrevem o escoamento turbulento:

- Aleatoriedade: Escoamento caótico, irregular e imprevisível, variáveis difíceis de mensurar.
- Não Linearidade: Presença de pequenas perturbações, alongamento no vórtice.
- Tridimensional: A velocidade flutua em três coordenadas espaciais.
- Difusividade: Alta taxa de difusão de momento e calor.

• Vorticidade: Contabiliza pela rotação local do fluido e é representado por estruturas identificáveis como redemoinhos que se caracterizam por diversas escalas de comprimento que são responsáveis pela propagação do fenômeno da turbulência.

• **Dissipação:** Mecanismo de alongamento do vórtice, responsável pela transferência de energia e vorticidade para as escalas menores até ocorrer a dissipação por forças viscosas.

• **Mistura:** Processo global composto por todos os efeitos convectivos, difusivos e dissipativos descritos acima.

A turbulência também pode ser caracterizada pela presença de flutuações aleatórias na velocidade, assim mencionadas como turbilhões, que são sobrepostas na média em todas as três direções no espaço (Moukalled et al., 2016). Dessa forma, a decomposição da velocidade de Reynolds consiste em definir uma componente média da velocidade (\tilde{v}) e uma componente flutuante (v), que pode ser escrita como a Equação 1.

$$v = \tilde{v} + \dot{v} \tag{1}$$

Conforme a Equação 1 acima, pode-se pensar nessas flutuações da velocidade em torno da média como uma manifestação das diversas escalas de tamanho, e por consequência do tempo, estão presentes no fenômeno da turbulência. Assim, haverá uma variedade de escalas de tempo e comprimento de vórtices associados a um campo de escoamento específico. Esse raciocínio pode ser mais bem delineado pelo conceito da cascata de Richardson. Em que o eixo vertical representa o logaritmo da energia cinética turbulenta em função do número de onda k, que se relaciona com o inverso da escala do comprimento dos turbilhões. O conceito da dispersão e mistura de fluidos advém desse conjunto de interações complexas, pois nos escoamentos turbulentos, os campos escalares são rapidamente dispersos comparado às contrapartes laminares (Kundu and Cohen, 2015). A cascata de energia de Richardson ilustra de maneira prática o quadro físico do problema da turbulência (Figura 4).



Figura 4 – Espectro da energia turbulenta (Kundu and Cohen, 2015).

2.1.4. Resolução do problema utilizando CFD

A Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) é uma ferramenta amplamente utilizada para predizer os campos de escoamento em tanques agitados (Gómez et al., 2010; Singh et al., 2011; de Lamotte et al., 2018). Os códigos em CFD são estruturados em torno de algoritmos numéricos que descrevem os problemas do escoamento dos fluidos. Todos os estudos de caso operam mediante três etapas principais: pré-processamento, processamento (solver) e pós-processamento (Andersson et al., 2012).

A etapa de pré-processamento consiste na definição do domínio computacional a partir da criação de uma geometria na região de interesse. Em seguida, por meio da geração da malha, o domínio computacional é dividido em subdomínios definidos por uma malha de células (volumes de controle ou elementos de controle). Ainda no pré-processamento é definido o fenômeno físico e químico a ser modelado assim como os modelos que serão usados para modelar esses fenômenos. Além disso, no pré-processamento são definidas as propriedades do fluido e a especificação apropriada das condições de contorno nas células onde coincidem com o domínio do contorno.

Na etapa de processamento, o solver computacional atua na resolução das equações algébricas obtidas no processo de discretização da malha computacional. Para resolver as equações algébricas, são aplicados métodos iterativos, na maior parte dos exemplos de simulações em CFD, pois requerem menor poder computacional por iteração e menor requerimento de memória comparado aos métodos diretos. Alguns métodos interativos comuns de serem aplicados em malhas estruturadas e não estruturadas incluem: eliminação por Gauss, fatorização LU e algoritmos de matriz Triadigonal e Pentagonal (Moukalled et al., 2016).

Dentre os métodos de discretização desenvolvidos para a simulação de escoamentos de fluidos, o método de volumes finitos (MVF) é bastante popular por sua flexibilidade durante o processo de discretização, que ocorre diretamente no espaço físico, sem a necessidade de nenhuma transformação entre o espaço físico e computacional. O MVF foi desenvolvido como uma formulação especial do método de diferenças finitas e apresenta duas etapas fundamentais. Primeiramente ocorre a integração formal das equações governantes do fluido sobre cada um dos volumes finitos (elementos da malha) definidos na subdivisão do domínio de solução. A etapa subsequente consiste na transformação das integrais de volume e superfície em equações discretas e sua integração numérica pelo uso de pontos de integração (Moukalled et al., 2016).

A discretização consiste na substituição de aproximações do tipo diferenciais finitas por termos na representação integral (termos convectivos, difusão e fontes) em equações algébricas. Esquemas de discretização são utilizados para aproximar a solução numérica da solução exata. E associado aos esquemas de discretização, o erro de truncagem de um esquema numérico indica o quão rapidamente o erro de discretização reduz com o refinamento da malha. Esquemas de alta ordem são usados para garantia de uma redução rápida do erro numérico com o aumento do refinamento da malha numérica (Roache, 1994; Deglon and Meyer, 2006; Moukalled et al., 2016).

Ao final, a solução das equações é obtida por métodos iterativos, como o algoritmo da matriz triadigonal (TDMA), também conhecido como Algoritmo de Thomas. Esse solver resolve a matriz de equações algébricas utilizando a Eliminação de Gauss (OpenFOAM, 2020).

Por meio do método de volumes finitos, é possível obter a conservação das propriedades relevantes em cada tamanho de célula finita. A etapa final de pós processamento inclui pacotes equipados com ferramentas de visualização dos parâmetros do escoamento obtidos pela resolução das equações algébricas.

2.1.5. OpenFOAM[®]

O Open Source Field Operation and Manipulation (OpenFOAM[®]) é um software de CFD gratuito, que opera em código aberto, sendo esse representado pela Linguagem C++. Baseado no método dos volumes finitos, essa ferramenta soluciona sistemas de equações diferenciais parciais (EDP), operando com campos escalares, vetoriais e tensoriais por meio de arquivos textos, sem interface gráfica no processamento. Essa ferramenta consiste, basicamente, em uma biblioteca em linguagem C++, cujo objetivo é a criação de executáveis que são representados pelos *solvers*. Os solvers são designados para resolução de um problema específico utilizando a mecânica contínua, e as utilidades, que são interfaces de préprocessamento e pós processamento, onde o usuário tem a oportunidade de criar informações e adicionar aos métodos preexistentes que, em geral, necessitam de um dicionário próprio (Moukalled et al., 2016; OpenFOAM, 2020). A visão geral da estrutura do OpenFOAM[®] é apresentada pela Figura 5.

Após a instalação do *software*, duas pastas são geradas: OpenFOAM* e ThirdParty*. Nesta última, pode-se encontrar o *Paraview*, um *software* gratuito utilizado na etapa de pós processamento. A pasta OpenFOAM* apresenta os diretórios com informações
dos códigos fontes de base como, por exemplo, informações sobre os métodos numéricos utilizados ou estruturação das malhas (OpenFOAM, 2020).



Figura 5 – Visão geral do OpenFOAM[®]. Imagem adaptada (OpenFOAM, 2020).

A estrutura básica dos casos executados no OpenFOAM[®] é apresentada na Figura 6 abaixo:



Figura 6 – Estrutura básica dos casos no OpenFOAM. Imagem adaptada (OpenFOAM, 2020)

Conforme representado acima, todos os casos no OpenFOAM geram várias pastas, dentre elas, 3 são consideradas relevantes por conter as informações principais para a resolução do problema (0, *constant* e *system*). As pastas de tempo adicionais são geradas durante a simulação conforme especificação de salvamento. A pasta 0 contém os arquivos referentes às condições iniciais e de contorno e é distribuída na forma de arquivos para cada variável dos modelos dependentes de condições de contorno e/ou iniciais a serem definidas pelo programador/executor. A pasta *constant* contém o diretório *polyMesh* que contabiliza por arquivos com informações acerca da malha (pontos, vizinho, dono, contorno, faces) e apresenta arquivos das propriedades físicas do caso, assim como constantes relacionadas ao modelo, tais como as propriedades da turbulência. Por último, a pasta *system* apresenta os arquivos contendo os controles das simulações, representados por diretórios. Como exemplo, na pasta *system* encontra-se o *controlDict*, que consiste em um dicionário de controle da simulação, contendo informações como o passo de tempo, número de Courant, etc. A pasta de tempo adicional é utilizada nos pós processamento, por meio da extração dos dados desse diretório e posterior análise dos resultados.

2.1.6. Velocimetria por imagem de partículas – PIV

Em tanques agitados, as características do escoamento turbulento são complexas porque o sistema é não uniforme e o escoamento é anisotrópico. Alguns parâmetros turbulentos, como a taxa de dissipação média, podem ser obtidos experimentalmente por meio dos parâmetros operacionais, como o número de potência e medidas de torque. Porém esses parâmetros dificilmente descrevem o transporte de energia local (Kresta and Wood, 1991; Sommerfeld and Decker, 2004; Deglon and Meyer, 2006; Liu et al., 2016). Dessa maneira, metodologias experimentais são empregadas para quantificar o campo vetorial de velocidade e estimar as características do escoamento turbulento.

A velocimetria por imagem de partículas (PIV) é uma das técnicas que mais tem contribuído para o entendimento dos fenômenos turbulentos de escoamentos complexos. Aplicando a metodologia PIV, é possível extrair o campo de velocidade instantâneo, assim como informações sobre os níveis de turbulência, por meio da raiz das velocidades instantâneas ao quadrado (velocidade RMS). Ademais, é possível obter informações sobre as estruturas de vórtices em escalas menores (Liu et al., 2016). As principais vantagens da técnica PIV é que sua aferição se estende por uma grande área e isso ocorre de forma não intrusiva. Em outras palavras, os sensores da câmera, *charged-couple device* (CCD) e *active-pixel sensor* (CMOS), são alocados fora do campo de escoamento e capturam as imagens de todo campo de escoamento de interesse. Assim, a técnica PIV é uma ferramenta poderosa para avaliar e validar as simulações numéricas, principalmente no contexto dos tanques de agitação mecânica.

Essa técnica experimental pode ser classificada em função das componentes de velocidade (C) e do domínio de medida (D): PIV 2D-2C (PIV Clássica), PIV (2D-3C) (Stereo-PIV) e (PIV 3D-3C) (*Tomographic*-PIV) (Raffel et al., 2018). A técnica PIV clássica bidimensional (2D) é a abordagem escolhida para a maioria dos trabalhos com tanques. O *setup* do sistema 2D PIV consiste em várias etapas, que podem ser identificadas na Figura 7. De acordo com Raffel et al. (2018), as etapas da abordagem clássica podem ser simplificadas e descritas conforme a sequência abaixo:

- a. Gravação das imagens para calibração;
- b. Alimentação do sistema com partículas traçadoras;
- c. Iluminação do sistema com as partículas traçadoras pela luz laser pulsada;

d. Gravação da luz espalhada pelas partículas traçadoras gravada por dois quadros separados ou uma sequência de quadros de uma câmera;

e. Aplicação das técnicas de calibração para determinar a relação entre o deslocamento da imagem da partícula nos dois domínios, da imagem e do objeto;

f. Pré-processamento das imagens

g. Avaliação das gravações utilizando técnicas estatísticas como correlação cruzada.



h. Pós-processamento.

Figura 7 – Etapas do setup para o sistema 2D PIV (Amaral, 2013).

Conforme observado na Figura 7 e seguindo as etapas da técnica 2D PIV descritas na sequência anterior, partículas traçadoras são inseridas no sistema e acompanham a direção e velocidade do escoamento indicada. Elas são iluminadas por uma luz *laser*, na forma de luz pulsada que espalha a luz em um plano cujas imagens serão captadas por uma câmera, geralmente localizada a 90° da folha de luz, de modo que o plano da imagem a ser observado coincida com a fatia iluminada pelo *laser* (Amaral et al., 2014)

Na etapa de gravação, as partículas são iluminadas pelo menos duas vezes dentro de um intervalo de tempo curto e conhecido (*double-frame*). O intervalo de tempo entre os pulsos (*interframe time*) deve ser escolhido conforme a velocidade do escoamento e ao grau de ampliação da imagem. As informações obtidas na saída do sensor digital são então transferidas para a memória de um computador (Raffel et al., 2018).

Na etapa de avaliação das imagens (processamento), a gravação digital é dividida em subáreas denominadas de áreas de interrogação (*interrogation window*). A partir dessas subáreas, o vetor deslocamento local para as duas imagens consecutivas é determinado para cada área de interrogação, por meio de métodos estatísticos, como o método de correlação cruzada (SSC). Dessa forma, a projeção do vetor velocidade local do escoamento no plano da folha de luz, que corresponde a um vetor de duas componentes, é computado tendo em vista o intervalo de tempo das iluminações e da calibração do sistema. A avaliação é repetida para todas as áreas de interrogação da gravação das imagens, podendo capturar mais de 100 gravações por minuto dependendo da frequência dos sensores das câmeras de gravação (Raffel et al., 2018). Dentre os métodos relatados em literatura para a etapa de processamento, uma abordagem bastante interessante analisa a resolução espacial adaptativa, denominada análise multigrid com resolução adaptativa iterativa da deformação de janela (*multigrid analysis with window deformation offset*) (Scarano, 2001). Este método é aplicado junto com a correlação cruzada padrão (SSC).

A etapa de calibração é necessária para determinar a relação entre o deslocamento da imagem da partícula no domínio da imagem e do objeto. Nessa etapa, técnicas de função de mapeamento podem ser utilizadas para compensar a distorção das imagens devido ao efeito da curvatura do tanque e efeito de parede, por exemplo (Soloff et al., 1997; Amaral et al., 2014).

A etapa de pré-processamento é realizada para melhorar as imagens obtidas, sem alterar as informações aferidas na gravação. Os principais objetivos dessa etapa incluem, por exemplo, distribuição da intensidade de luz no quadro (Shavit et al., 2007) e remoção do fundo luminoso (Honkanen and Nobach, 2005). Essa etapa pode ser associada à posteriori com a correlação, onde ocorre a combinação dos efeitos de vários erros que atrapalham a precisão das medidas, como por exemplo, qualidade da imagem, partículas fora da folha de luz e altos gradientes de deslocamento do escoamento, que contribuem no sinal ruidoso no plano de correlação. O uso de filtro Gaussiano (Dabiri, 2006) é também reportado na etapa de préprocessamento, para otimizar o formato da imagem das partículas. Essa mesma abordagem pode ser aplicada no pós processamento na imagem da janela de interrogação (Xu and Chen, 2013).

Finalmente, segue-se ao pós-processamento, etapa necessária para detectar e remover medições inválidas (*outliers*) e extrair as informações do campo de escoamento, como, por exemplo, os parâmetros turbulentos, como a energia cinética turbulenta (TKE). Essa etapa é realizada por meio de critérios de validação e utilizando parâmetros de qualidade para avaliar os resultados pós processados (Johnson, 2001; Deen and Hjertager, 2002) A performance da técnica PIV pode ser acessada por meio de parâmetros de qualidade, como por exemplo a resolução espacial. A validação dos dados pode ser feita com base na correlação razão sinal-ruído (SNR) para detecção de vetores espúrios (Scarano, 2001; Unadkat et al., 2008).

2.1.7. 2D PIV aplicada a tanques agitados

Boa parte dos trabalhos com tanques em literatura aplicaram a abordagem clássica para obtenção de campos bidimensionais, baseados em medidas gravadas em um único plano vertical, assumindo, dessa maneira, simetria axial (Bugay et al., 2002; Aubin et al., 2004; Micheletti et al., 2004; Huchet et al., 2009; de Lamotte et al., 2018; Mendoza et al., 2018).

Diante da complexidade dos escoamentos em tanques agitados e a necessidade de entender as estratégias de validação das simulações em CFD com PIV, algumas discussões foram levantadas acerca das abordagens de medidas PIV neste contexto. Os principais pontos levantados neste trabalho foram:

- Tipo de gravação de imagens;
- Posição do plano de medida PIV;

• Variação do plano de medida relativo à posição da chicana (variação do plano azimutal ou efeito da posição da chicana).

Esses pontos, extremamente relevantes para a abordagem escolhida neste trabalho, serão discutidos a seguir.

2.1.7.1. Tipos de medidas PIV em tanques agitados

Diante da necessidade de captar os níveis de turbulência em tanques agitados, alguns artigos discutiram a forma como as medidas devem ser obtidas. Esses estudos foram realizados desde 1976, com foco principalmente na região de descarga do impelidor. Van't Riet et al. (1976) descreveram essa região como "pseudoturbulência" devido ao efeito de periodicidade induzido pelas pás do impelidor. Nessa região, as flutuações randômicas, intrínsecas ao fenômeno de agitação, e periódicas estão presentes e se dissipam rapidamente com o distanciamento do impelidor.

Nessa perspectiva de visualização do fluxo local, Rutherford et al. (1996) observaram que as medidas dos parâmetros do escoamento próxima à região do impelidor são afetadas pelo efeito da periodicidade. Schäfer et al. (1998) mostraram que, devido à contribuição da periodicidade, medidas da TKE podem ser superestimadas dependendo da técnica experimental utilizada. Dessa forma, os autores mostraram que, para o impelidor PBT 45, a sincronização dos dados PIV com a posição da pá do impelidor pode ser usada para separar as flutuações periódicas das turbulentas. Em outras palavras, as imagens são obtidas com a pá sempre na mesma posição definida a partir de microcontroladores que fazem a comunicação entre a frequência de aquisição das imagens com a frequência de rotação do eixo do impelidor. Essa forma de medição é denominada ângulo-resolvido (Figura 8). Na literatura a sincronização foi reportada por meio do uso de encoders que emitem sinais em lógica transistor-transistor (TTL), geralmente aplicadas com precisão de 1 pulso por revolução (Gómez et al., 2010; Ge et al., 2014). A Figura 8 ilustra as medições em ângulo-resolvido, por meio da qual é possível observar que a gravação da imagem (identificada pelo plano de medida em verde) ocorre sempre com a pá na mesma posição. A nomenclatura 1º ângulo-resolvido encontrada na literatura (Rutherford et al., 1996) descreve justamente esse conceito de sincronização em uma posição angular especificada para a pá do impelidor, seja, por exemplo, em 0° ou 45° em relação à chicana mais próxima.

Muitos trabalhos utilizam as medidas em ângulo-resolvido para avaliar o fenômeno das estruturas turbulentas ao redor dos impelidores, os vórtices, que são afetados pela posição angular da pá e descrevem um movimento helicoidal para o PBT 45 (Ranade et al., 2001; Khan et al., 2006; Chung et al., 2009; Roy et al., 2010; Jin and Fan, 2020). Por meio das medidas em ângulo-resolvido é possível obter maior precisão da variação dos níveis de turbulência em diferentes posições angulares, com a facilidade em variar as posições do ângulo alterando o atraso do disparo do laser por meio de controladores eletrônicos.

Outra abordagem bastante utilizada são as medidas em *ensemble-average* (360° *ensemble-averaging*) (Figura 9). Utilizada em trabalhos com LDV, como por Yianneskis et al. (1987) e em PIV, como por Unadkat et al., (2011), um conjunto de dados aleatórios da velocidade instantânea é obtido em todo ciclo do impelidor, sem sincronização das pás com *encoders* digitais. Para ilustrar a pá aleatorizada durante a aquisição das imagens, a Figura 9 descreve a imagem do impelidor PBT 45 de quatro pás em movimento durante a gravação da imagem pelo feixe de luz laser. Em contrapartida, em medições em ângulo resolvido, a imagem do impelidor parece fixa em uma posição angular específica, devido à sincronização da velocidade de rotação da pá com a frequência de aquisição do laser (Figura 8). Para as medidas com PIV, o plano de medida escolhido para ambas as abordagens ocorre, geralmente, entre dois defletores consecutivos (45°) (Sheng et al., 1998; Pan et al., 2008; Alberini et al., 2017).

Alberini et al. (2017) investigou as medidas PIV em *ensemble-average* e em ângulo resolvido e mostrou que para a avaliação do campo de escoamento médio, não existem diferenças significativas entre os dois tipos de medida. Entretanto, as medidas em ensemble-average trazem incertezas quanto à quantificação da TKE, devido ao efeito da periodicidade das pás que não é discriminado nessa abordagem. Em medidas em *ensemble-average* os níveis de turbulência são superestimados, e isso depende de uma série de fatores como o tipo de impelidor, velocidade de rotação, frequência de aquisição de imagens e plano de medida (Nikiforaki et al., 2003; Hasal et al., 2008; Jin and Fan, 2020). Entretanto, o uso dessa abordagem é particularmente interessante mediante geometrias complexas de impelidores, onde a posição da pá não é relevante e assim medidas em ângulo resolvido não são a melhor escolha (Unadkat et al., 2011). Outra aplicação desse tipo de medida ocorre em tanques *semi-baffled*, onde não ocorre simetria axial do escoamento e os efeitos da posição da chicana são importantes (Torré et al., 2007). Nesses casos a variação da posição do impelidor não é o foco da análise.



Figura 8 – Representação de medidas PIV em ângulo-resolvido. (Autora).



Figura 9 – Representação de medidas PIV em *ensemble-average*. (Autora).

2.1.7.2. Variação do plano azimutal de medida PIV

Conforme mencionado no item 2.1.2, as medidas PIV em tanques com impelidores PBT 45 ocorreram em duas posições específicas relativas à posição da chicana: 0° e 45°(Sheng et al., 2000; Khan et al., 2006; Chung et al., 2009). Porém, ao fixar o plano de medida, o efeito da condição de contorno é negligenciado. Alguns autores como Aubin et al. (2004) reportaram que o efeito da posição da chicana é relevante nas variações do campo de escoamento médio. Assim, medidas em múltiplos planos com variação do plano de medida azimutal podem ser aplicadas para avaliar a interação impelidor-chicana pelo efeito da posição da chicana em relação ao plano de medida (Figura 10).

Guida et al. (2010) verificaram que o efeito da posição do plano de medida em relação à chicana é relevante e que a variação do plano azimutal impactou significativamente o campo de velocidade em medidas com intervalo de 5° entre os planos azimutais aferidos. Alberini et al., (2017) reforçaram o argumento ao comparar as posições 0° e 45° em relação à chicana, mostrando diferenças significativas na continuidade dos fluxos de recirculação nos diferentes planos.

Um ponto relevante e não muito esclarecido em literatura, é que as medidas com variação do plano azimutal podem ocorrer tanto sincronizadas (em ângulo resolvido, com a pá alinhada ao plano) ou sem sincronização (em *ensemble-average*). Outro ponto é que dependendo da abordagem de modelagem da interação impelidor-chicana em CFD, é necessário avaliar um pós-processamento adicional dessas medidas PIV em múltiplos planos. Diferentemente das simulações em *sliding-mesh*, a modelagem em *multiple reference frame* (MRF) negligencia o movimento relativo da chicana em relação ao impelidor e, assim, a interação entre essas partes não é contabilizada (Chapple et al., 2002; Yeoh et al., 2004). Aplicando a média estatística dos planos azimutais, o efeito dessa interação pode ser removido, contribuindo para a validação dos dados CFD em relação ao PIV.



Figura 10 – Medidas em múltiplos planos considerando a variação do plano azimutal (AZ). (Autora).

2.2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.2.1. Modelos de turbulência aplicados em tanques agitados

Nesta seção, apresenta-se os principais trabalhos com CFD aplicados em tanques agitados. Nesses trabalhos, serão discutidas as abordagens com diferentes modelos de turbulência e os seus desdobramentos na obtenção do campo de escoamento médio e os parâmetros turbulentos, como a TKE e a EDR.

Vários trabalhos com simulações do escoamento em tanques agitados utilizaram o modelo de turbulência *Large Eddy Simulation* (LES). As simulações em LES, em particular, demonstraram bom desempenho na captura das complexidades do escoamento turbulento em tanques agitados, principalmente no que tange à caracterização dos vórtices e das características turbulentas anisotrópicas (Delafosse et al., 2008; Murthy and Joshi, 2008; Pan et al., 2018b; González-Neria et al., 2019). Além disso, os dados simulados em LES, no geral, estiveram em boa concordância com os dados experimentais, como a 2D PIV (Figura 11). Essa concordância ocorreu porque os modelos de escala da submalha (*subgrid model*) aplicado em LES, como o

modelo de Smagorinsky, contabiliza parâmetros que proporciona uma boa avaliação das características turbulentas anisotrópicas e periódicas em tanques agitados. Essa abordagem, porém, está fora de alcance da maioria dos cenários práticos, pois as simulações requerem um alto poder computacional para aproximar as menores escalas dissipativas, principalmente na região de camada limite na superfície do impelidor e na parede do tanque (Gimbun et al., 2012; Yang et al., 2013). Além disso, os parâmetros turbulentos, como a taxa de dissipação turbulenta (EDR) são obtidos posteriormente às simulações, em um pós-processamento dependente dos modelos de escala de submalha (Yeoh et al., 2004; Delafosse et al., 2008; González-Neria et al., 2019). Assim, a busca por modelos de turbulência que apresentam menor demanda computacional e, dessa forma, mais práticos que os modelos LES, são um dos focos deste presente trabalho.



Figura 11 – Comparação dos perfis de velocidade do impelidor Rushton com 2D PIV e CFD LES e RANS. (a) Perfil de velocidade média radial (U_r), (b) Perfil de velocidade tangencial (U_t), (c) Perfil de velocidade axial (U_z) (Delafosse et al., 2008).

O modelo *Standard* k-ε, baseado na abordagem RANS, é o modelo o mais utilizado nas simulações em tanques agitados documentadas em literatura ao longo dos anos (Luo et al., 1994; Micale et al., 1999; Deglon and Meyer, 2006; Joshi et al., 2011; Ge et al., 2014; de Lamotte et al., 2018). Esse modelo faz uso da abordagem de Boussinesq para modelagem dos tensores de Reynolds pelos gradientes da velocidade média.

Jaworski and Zakrzewska (2002) avaliaram a modelagem do jato produzido por um PBT 45 a partir de diferentes modelos em RANS com validação com anemômetro de laser a doppler (LDA). Nesse trabalho, o modelo *Standard* k-ε apresentou melhor desempenho para a velocidade axial e energia cinética turbulenta comparado aos outros modelos, como *Reynolds Stress Model* (RSM) e os alternativos k-ε. Entretanto, devido a pressuposição da viscosidade turbulenta isotrópica, os níveis de turbulência para esse modelo são subestimados em relação aos dados experimentais (Sommerfeld and Decker, 2004). Outros autores, também ressaltaram as dificuldades do modelo k-ε na modelagem dos escoamentos circulatórios, propondo estudos com modelos de turbulência alternativos (Deglon and Meyer, 2006; Singh et al., 2011).

No trabalho de Mendoza-escamilla et al. (2018), por exemplo, os autores compararam o desempenho dos três modelos k- ε (Standard, *Re-Normalization Group* (RNG) e *Realizable*), com dados experimentais 2D PIV, analisando os seguintes parâmetros: componentes da velocidade, parâmetros turbulentos, número de bombeamento e número de potência para o impelidor PBT 45 Os autores sugeriram que os modelos k- ε alternativos contabilizaram uma melhor qualidade das características turbulentas. Dos três modelos, o *Realizable* apresentou o melhor desempenho, enquanto o RNG apresentou o pior. Os autores destacaram que as diferenças entre os resultados em CFD e PIV para o PBT 45 foram atribuídos às limitações dos modelos RANS em reproduzir o campo médio em regiões de alta deformação, principalmente ao redor do impelidor e perto da ponta da pá (Figura 12). Outro ponto relevante foi que o modelo Standard k- ε apresentou maiores níveis de TKE em comparação aos outros modelos RANS. Em relação às simulações transientes utilizando abordagem em malhas deslizantes, não houve diferenças significativas em relação à abordagem em estado estacionário utilizando a abordagem em *multiple reference frames* (MRF) para modelar a interface entre as regiões rotativa e estacionária.

Análise similar foi feita por Alonzo-Garcia et al. (2019), com modelos RANS, incluindo o *Reynolds Stress Model* (RSM) e k- ω . Além disso, os autores analisaram os perfis radiais de velocidade considerando duas linhas abaixo do impelidor – 3 mm e 10 mm. Os perfis radiais em diferentes posições axiais indicaram que os modelos se comportam de forma distinta

nas duas posições, sendo assim, necessário uma validação considerando mais de uma região do impelidor. Outro ponto relevante, foi que, pela Figura 13, todos os modelos falharam na predição da componente radial na região de descarga do impelidor, assim como os parâmetros turbulentos.



Figura 12 – Comparação CFD e 2D PIV para o campo de velocidade axial normalizada (V_a/V_{tip}). (Mendoza-escamilla et al., 2018).



Figura 13 – Campos de velocidade axial e radial, TKE e EDR normalizadas. (a)
2D PIV (b) Modelo *Realizable* k-ε (c) Modelo k-ω. (Alonzo-Garcia et al., 2019).

Alguns autores avaliaram o modelo Reynolds Stress Model (RSM), em que cada um dos tensores de Reynolds é modelado por meio de uma equação de transporte separada das demais, eliminando o pressuposto de isotropia da viscosidade turbulenta (Montante et al., 2006; Qi et al., 2010). Os trabalhos mostraram que as simulações em estado estacionário utilizando o modelo RSM subestimaram os valores para a energia cinética turbulenta (TKE), apresentando desvios acima de 40% para regiões próximas ao impelidor (Murthy and Joshi, 2008; Joshi et al., 2011; Singh et al., 2011). Comparado aos modelos RANS tradicionais de duas equações, o modelo RSM requer maior poder computacional e sofre com a baixa convergência comparada aos RANS clássicos (J. Aubin et al., 2004). Basavarajappa et al. (2015), avaliaram o modelo RSM em comparação com o Standard k-E. Os autores encontraram que os valores máximos de TKE preditos pelo RSM foram quatro vezes menores que os valores encontrados no modelo kε em planos radiais. Os autores também mostraram que o modelo RSM subestimou drasticamente a EDR. Assim sendo, concluíram que nenhum aspecto nas predições do campo de escoamento em tanques agitados era acrescentado para esse modelo. É importante mencionar que os trabalhos apresentados estiveram em estado estacionário, e que as condições para o modelo RSM em estado transiente pode ser diferente do que foi encontrado.

O modelo *Shear Stress Transport* (SST) tem sido aplicado com uma maior frequência por pesquisadores da área (Moilanen et al., 2006; Spogis and Nunhez, 2009; Cabrales-Navarro et al., 2011; Lane, 2017; Rave et al., 2020). É um modelo híbrido que combina as melhores características dos modelos k- ε e k- ω . Próximo à parede predomina-se o modelo k- ω e longe das paredes, predomina-se o modelo k- ε . Esse modelo apresentou boa representação numérica para escoamentos sob ação de gradientes de pressão adversos e separação de fases. Entretanto, de acordo com Menter (2012), esse modelo não é adequado para obter qualquer detalhe de estruturas turbulentas não estacionárias. Uma desvantagem associada ao modelo SST, discutido por Menter, Kuntz e Langtry (2003) e Lane (2017) é o excesso de amortecimento na turbulência, o que dificulta a resolução direta dos detalhes das características turbulentas. Dessa maneira, para contornar essas falhas, os autores propuseram o uso de modelos híbridos RANS-LES ou correções na curvatura para compensar a depreciação de dissipação observada.

O modelo de turbulência híbrido RANS-LES *Scale Adaptive Simulation* (SAS-SST) foi aplicado por Menter e Egorov (2005) com objetivo de capturar as características turbulentas do modelo LES utilizando as ferramentas da modelagem RANS. Assim, próximas às paredes e em regiões em escoamento estacionário, ajusta-se a escala de comprimento da turbulência para o comprimento que seja capaz de resolver diretamente as estruturas turbulentas, evitando assim, a dissipação produzida pelos modelos RANS clássicos. De acordo com Egorov et al. (2010), o modelo SAS apresentou boa sensibilidade para obtenção do comprimento e intensidade dos vórtices. Singh, Fletcher e Nijdam (2011) analisaram os parâmetros turbulentos associados ao modelo SAS-SST comparado aos modelos k-ε, SST e RSM. Foi constatado dificuldades em obter a independência de malha utilizando o modelo SAS-SST. Além disso, os autores identificaram que o aumento de refinamento da malha resultou em flutuações turbulentas menores a serem resolvidas, como resultado, a complexidade deste modelo aumentou significativamente. Para este trabalho limitaram-se a 2,138 milhões de nós a malha para todos os modelos analisados, com pontos de atenção ao número de nós adotados ao longo do comprimento do impelidor para obtenção estimada dos vórtices.

Outro modelo híbrido proposto é o Detached Eddy Simulation (DES), no qual o modelo LES é aplicado longe da parede, e o modelo Spalart-Allmaras RANS perto da parede objetivando uma melhor resolução do escoamento próximo à camada limite. Em um escoamento com turbulência proeminente, as estruturas do escoamento próximas à parede são pequenas e anisotrópicas. Dessa forma, o modelo DES reduz consideravelmente o custo computacional transferindo as características do modelo RANS nas camadas próximas à parede (Gimbun, 2012). Lane (2017) utilizou esse modelo híbrido para comparar com a eficiência do modelo SST. Nesse trabalho, o modelo DES, a integração da EDR contabilizou apenas 70% da energia de entrada e os resultados para predição dessa taxa em relação a dados experimentais da literatura variou de 18% e 40%. O autor, dessa forma, não indicou o modelo DES para uma abordagem prática, porém fez ressalvas à malha desenvolvida estar pouco refinada. Gimbun (2012), em contrapartida, afirma que a malha desenvolvida no modelo DES é muito mais simplificado do que o modelo LES, pois apresenta uma malha grosseira com distância da parede adimensional igual a 20 ($y^+ \sim 20$), suficiente para boas predições da TKE com um tempo computacional menor que o LES. No entanto, o autor faz ressalvas para potenciais melhorias do modelo DES, principalmente na aplicação adequada de funções de parede.

De forma geral, nesse item, observou-se que para o campo de velocidade média, ocorreram variações entre os modelos baseados em *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS), porém não há um consenso em relação ao melhor modelo RANS em tanques agitados. Além disso, não é abordado uma metodologia clara de validação desses modelos com ténicas experimentais. Por esse motivo, aplicaremos 4 diferentes modelos baseados em RANS para avaliar a concordância dos dados preditos com os dados experimentais PIV.

2.2.2. Medidas PIV com variação do plano azimutal relativo à chicana

Em relação à abordagem experimental PIV, alguns trabalhos foram selecionados para descrever os principais resultados obtidos em relação à variação do plano azimutal em literatura.

Aubin et al. (2004) analisaram a hidrodinâmica em um tanque aerado agitado por um impelidor de 6-pás PBT 45 pela técnica 2D PIV. As medidas do escoamento foram obtidas a partir do plano entre duas chicanas consecutivas. Os padrões de escoamento foram analisados e identificou-se que a conservação da massa não foi satisfeita, sugerindo que tanto o padrão obtido quanto a vazão do fluxo são dependentes da posição das chicanas. Em outras palavras, o efeito da posição da chicana foi considerado relevante para análise da hidrodinâmica em tanques agitados mecanicamente. Sugeriu-se, dessa maneira medidas em outro plano relativo a chicana.

Guida et al. (2010) avaliaram o efeito do plano azimutal no campo de escoamento médio, na faixa de 0°-85° em intervalo de 5° para medições de 2D PIV (Figura 14). Segundo os autores, os principais efeitos da posição azimutal do plano de medida relativo à chicana foram: mudanças na distribuição da velocidade no plano AZ; a forma do jato; a posição e magnitude da velocidade de pico. Além disso, os autores mostraram que o ângulo de 5°, associado ao plano AZ mais próximo ao impelidor, apresentou as diferenças significativas na distribuição de velocidade em relação aos demais planos AZ.

Alberini et al. (2017) avaliaram que as diferenças entre as medidas em ângulo resolvido e ensemble average foram pequenas para um mesmo plano de medida relativo à chicana. Isso indicou que o efeito da posição angular da pá para o PBT 60° de 6 pás não foi relevante. Em literatura o efeito da pá depende da configuração e geometria do impelidor (Gabriele et al., 2009; Lane, 2017). Entretanto, para ambas as abordagens de medida PIV, o efeito da chicana pela variação do plano de medida impactou o campo de escoamento médio, principalmente na região de recirculação próximo à parede (Figura 15). Isso indica que o efeito da posição da chicana é relevante para as variações do campo do escoamento médio.



Figura 14 – Medidas do campo de velocidade média em diferentes posições azimutais relativo à posição da chicana. (Guida et al., 2010).



Figura 15 – Efeito da variação da chicana e da pá em diferentes tipos de medidas PIV: (a) ensemble average plano 0° (b) ângulo resolvido no plano 0°, (c) ensemble average plano 45°, (d) ângulo resolvido no plano 45°. (Alberini et al., 2017).

2.2.3. Validação dos modelos de turbulência com medidas experimentais PIV

Neste último item, selecionou-se alguns trabalhos que comparam CFD e PIV para abordar suas estratégias validação das simulações pela comparação entre os dados de ambas as estratégias computacionais e experimentais.

Nesse contexto de avaliação das predições das características do escoamento em tanques agitados e dos parâmetros turbulentos, como a TKE, a avaliação da credibilidade dessas predições resulta na análise de seis aspectos fundamentais (Beghini and Hough, 2016):

1. Fidelidade geométrica: avalia o nível de detalhe espacial e temporal do sistema.

2. *Fidelidade física*: avalia a fidelidade da modelagem física dos modelos empíricos apresentados no tópico anterior.

3. Verificação do código: avalia os algoritmos numéricos.

4. *Verificação da solução*: avalia os erros numéricos da solução e a confiança nos resultados computacionais.

5. *Validação do modelo*: avaliação da acurácia do modelo físico comparando os dados experimentais com os resultados simulados.

6. *Quantificação de incertezas*: identificação e caracterização das incertezas e análise da sensitividade do modelo para analisar as causas dessas incertezas.

Nos trabalhos em CFD, a validação relaciona-se ao modelo físico (parâmetro), item 5 acima, e determina o quanto os resultados numéricos se aproximam de dados experimentais conhecidos. Essa denominação faz parte das perspectivas e responsabilidades pela comunidade científica em desenvolver, conduzir e entregar verificação, validação e quantificação de incertezas (VV&UQ) discutidas por diversos grupos, como a Sociedade Americana de Engenheiros Mecânicos (ASME) (Celik et al., 2008; Freitas, 2020).

Sheng et al. (1998) aplicou métodos de validação de simulações em CFD por equações baseadas em modelos em Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) utilizando a técnica 2D PIV e LDV. As medidas PIV foram obtidas a partir da média temporal de 1024 imagens instantâneas sequenciais, sem a menção pelos autores da sincronização da pá do impelidor, supondo, dessa maneira, que elas ocorreram em *ensemble-average*. Foram extraídos o campo de velocidade média e as características turbulentas, dentre elas, a energia cinética turbulenta. Quanto ao campo de velocidade média (Figura 16) diferenças entre o PIV e o CFD ocorreram para o ângulo de descarga e localização do segundo vórtice no plano de medida, que se forma próximo à parede do tanque, para recirculação do jato principal. Quanto à TKE, os dados em CFD foram subestimados em um fator de 4 na região de descarga do impelidor.



Figura 16 – Representação do campo de velocidade média do escoamento por um PBT 45. (a) Medidas 2D PIV. (b) CFD (Sheng et al., 1998).

Gómez et al. (2010) avaliou as simulações em CFD com medidas PIV para um sistema de agitação contendo impelidores laterais do tipo naval (*hydrofoil*). As comparações foram feitas qualitativamente com campos de velocidade em diferentes condições de agitação. E quantitativamente por meio dos perfis radiais normalizados. A curva de número de Np com número de Reynolds também foi usada como estratégia de validação. Em termos de verificação, os autores optaram pela análise da incerteza pelo método GCI tanto para o Np quanto velocidade. Os desvios RMS do CFD em relação ao PIV foram computados para a velocidade média e os desvios reportados variaram entre 12% a 20,1%

Gillissen e Van Den Akker (2012) conduziram uma análise de simulações em DNS comparando com simulações em LES, RANS, LDV e PIV 2D-2C. Tanto a velocidade quanto a TKE foram avaliadas em termos de campo de velocidade medida e perfis radiais. Os dados referentes à velocidade média para o modelo DNS, assim como nos modelos RANS e LES concordaram estatisticamente com as medidas experimentais. Todavia, várias observações foram feitas referentes aos parâmetros turbulentos obtidos próximos as pás dos impelidores, onde a energia cinética turbulenta tende a ser máxima. Nessa região, os parâmetros k e ε para o os modelos de turbulência apresentaram um desvio de 40-50% dos dados experimentais RANS e menores para os modelos LES e DNS, que foram mais bem representados na maior parte do tanque.

Alonzo-Garcia et al. (2019) avaliaram os modelos RANS em diferentes posições axiais com PIV, utilizando duas malhas distintas, tetraédricas e células não estruturadas do tipo cartesianas com célula cortada. Os autores validaram o CFD primeiramente com os parâmetros número de potência e bombeamento, depois com perfis radiais em diferentes posições axiais e depois, qualitativamente, compararam o campo de velocidade para as componentes radiais e axiais, TKE e EDR. Para as malhas tetraédricas os modelos de turbulência RANS se comportaram similarmente, porém a variação da posição axial impactou na validação dos modelos. A estratégia de validação proposta foi uma comparação múltipla dos parâmetros do escoamento, componentes de velocidade, TKE e EDR e o grau de concordância geral para todos considerando todas as componentes, com concordância 81% e 63% qualitativa com o PIV. O modelo *Standard* k-ε apresentou a pior performance considerando as duas topologias malhas propostas.

González-Neria et al. (2019) avaliaram o comportamento hidrodinâmico de um impelidor *V-grooved* comparado a um PBT 45 de quatro pás por PIV e CFD LES. Foi proposto medidas em ângulo resolvido, com variação do ângulo em 5°. Além disso, utilizou-se planos aerodinâmicos, variando a direção do laser, para captar os dados perdidos devido a interface da pá inclinada com a folha de luz laser. Foi observado que a posição angular da pá impacta os parâmetros do escoamento, especialmente para a taxa de dissipação máxima, e isso ocorreu de forma distinta para os dois impelidores analisados.

CAPÍTULO 3:

3. MÉTODOS E PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAL

3.1. APARATO EXPERIMENTAL

Na Figura 17 é mostrado o esquema do tanque piloto usado nos experimentos com 2D PIV. O sistema de agitação consiste em um tanque cilíndrico de acrílico associado a estruturas metálicas de aço inoxidável: o fundo torisférico ASME 10%, as quatro chicanas, dispostas ao redor do tanque em 90 graus, o impelidor de quatro pás inclinadas à 45 graus em bombeamento descendente e o suporte do sistema de agitação. O suporte metálico é composto pelo motor, painel elétrico de controle e elementos de saída que conectam o computador ao transdutor, para acionamento elétrico dos comandos de operação do tanque. Os equipamentos e acessórios elétricos foram fornecidos pela SEW-EURODRIVE do Brasil. O sistema de medição de torque fornecido pela MAGTROL é composto, por sua vez, pelo transdutor de torque (modelo TM 306, 15 Nm de torque nominal), um monitor de exibição dos dados de torque, velocidade de rotação e potência, e o *software* de aquisição, instalado em um computador. A acurácia das leituras das medidas de torque foi de 0,02 %, segundo especificações do fabricante e considerando que o equipamento estava novo e calibrado.



Figura 17 – (a) Representação do sistema de agitação piloto – 1) motor; 2) regulagem da altura da haste do impelidor; 3) transdutor de torque; 4) tanque de acrílico; 5) câmera PIV área superior; 6) câmera PIV área inferior; 7) feixe de luz laser; 8) laser. (b) Diagrama da configuração do sistema de agitação escolhida para os experimentos.

3.2. SISTEMA DE AQUISIÇÃO DE DADOS PIV

O escoamento dentro do tanque agitado foi investigado utilizando a técnica 2D PIV. O princípio dessa técnica consiste em aquisitar campos de velocidade instantâneos em um domínio planar, obtendo, neste contexto, dados das componentes axiais e radiais do escoamento a partir de planos azimutais.

O 2D PIV utilizado foi o sistema comercial adquirido pela Dantec Dynamics[®] (Denmark). Esse sistema inclui um laser de pulso duplo Nd:YAG ($\lambda = 532 nm, 200 mJ/pulse$, 15 Hz), duas câmeras gravadoras de imagem em *double frame* (modelo FlowSense EO 8M-21, sensor CCD), com frequência máxima de 15 Hz e com uma resolução igual a 3312 x 2488 px cada, um sincronizador e um computador, com software para aquisição dos dados, *DynamicStudio* (versão 6.9). O material utilizado como partícula traçadora foi a poliamida, adquirida pela Dantec Dynamics[®] (PSP-20), com diâmetro médio (d_p) igual a 20 μm e com massa específica (ρ_p) igual a 1,03. O tempo entre duas imagens para cada par de imagens (Δt) foi 100 μs , na rotação 660 rpm. Este tempo foi definido a partir da análise prévia da relação sinal ruído (*SNR*) para caracterizar a qualidade da imagem, associado a representatividade do escoamento axial-radial do PBT 45 obtido pelo processamento das imagens. A taxa de aquisição de imagens foi estabelecida 5 Hz e, e dessa maneira, os dados instantâneos obtidos não foram sincronizados com a passagem das pás do impelidor. Essa estratégia foi similar ao obtido por Torré et al., (2007) e Guida et al. (2010).

Para todos os experimentos, 1000 pares de imagens foram gravadas em *double-frame* para assegurar a convergência estatística dos valores do campo de velocidade média e energia cinética turbulenta. A convergência estatística foi alcançada pela comparação dos valores de velocidade média e *root mean square* (*RMS*) entre os pares de imagens instantâneos.

A calibração foi realizada usando uma placa de PVC com medidas $0,21 \ m \times 0,75 \ m$, representando o domínio planar a ser aquisitado. Nesta área, foram impressos marcadores de calibração (pontos pretos), com diâmetro 0,5 mm e espaçados a 1 mm do seu centro, formando uma malha cartesiana. A placa foi posicionada em cada plano de medida (6 planos no total), de forma a coincidir com a posição da folha de luz laser. A calibração foi alcançada através da aquisição de imagens dessa malha por cada câmera utilizada para compor a área final de aquisição. Usando o conhecimento das verdadeiras posições dos pontos de calibração, foi possível mapear o plano do objeto para o plano da imagem.

As imagens foram processadas usando análise em *multigrid* com deslocamento discreto da janela (Scarano, 2001). O processamento PIV iniciou com células de interrogação de 48 × 48 px com um valor do tamanho da janela de interrogação (Δ) igual a 1,08 mm e, com uma resolução espacial final igual a 10 × 10 px com Δ igual a 0,3 mm. Para eliminar os vetores espúrios, um filtro de pós processamento foi aplicado em cada etapa, considerando uma janela de interrogação 3 × 3 px. O deslocamento da partícula mais provável foi calculado usando a função de correlação cruzada padrão (*SSC*) para cada janela de interrogação considerada. Repetindo a correlação cruzada padrão (*SSC*) para cada janela de interrogação considerada. Repetindo a correlação cruzada para cada área de interrogação, obteve-se o campo vetorial das velocidades instantâneas radial-axial sobre todo o domínio planar analisado. A análise do campo pós processado foi realizada a partir de cinco resoluções espaciais: 36 × 36 px (1.08 mm), 27 × 27 px (0.81 mm), 20 × 20 px (0.60 mm), 15 × 15 px (0.45 mm) e 10 × 10 px (0.30 mm). O pós processamento das imagens ocorreu com avaliação das métricas com SNR para identificação e eliminação dos vetores *outliers*.

As imagens brutas foram pré-processadas para remover as reflexões e o fundo luminoso projetado no escoamento que podem deteriorar a qualidade da imagem. Um filtro Gaussiano $(3 \times 3 px)$, subtração da intensidade em local mínimo $(7 \times 7 px)$ e a estratégia de limite de intensidade foram aplicados para esse propósito (Shavit et al., 2007). Detalhes da sequência não fazem parte do escopo desse trabalho.

3.3. VARIAÇÃO DO PLANO AZIMUTAL PIV

O *setup* experimental é apresentado na Figura 18-a. O tanque agitado de acrílico foi especialmente projetado para permitir medições de velocimetria de imagem de partículas (PIV) em geometrias encontradas em aplicações industriais, dispostas numa escala em dimensões piloto.

Os dados 2D PIV foram obtidos usando a abordagem em multi-blocos apresentada por Khan et al. (2004), que consistiu na aquisição dados em duas áreas distintas para obtenção de um mapa composto do escoamento. Para isso, utilizamos duas câmeras posicionadas lado a lado, conforme a Figura 18-a. para captar duas áreas distintas, cobrindo grande parte da extensão axial-radial do tanque com uma área comum de sobreposição. Dessa maneira, boa parte do escoamento foi captado, com exceção do fundo do tanque e da região da parede. Além disso, a partir desse método, foi possível visualizar as características do escoamento mantendo uma boa qualidade da resolução espacial das medidas PIV (Gabriele et al., 2009; Guida et al., 2010).

Como o PBT 45 apresenta quatro pás simétricas, assumimos uma região de simetria equivalente a 90°, correspondendo à região entre duas chicanas adjacentes. Dessa maneira, medidas em domínio planar foram realizadas em 6 planos distintos nessa região, para ângulos entre 0° e 90°, variando 15° entre as medidas, conforme indicado nas Figura 18-b. e Figura 18-c. A primeira medida foi estabelecida na posição 0° relativo a chicana. Para evitar reflexões, as chicanas e o impelidor foram pintados de preto. A aquisição dos pares de imagens foram realizadas em *ensemble-average*, isto é, cada plano azimutal foi aquisitado considerando uma variação em 360° do impelidor, aleatoriamente (Pan et al., 2008; Unadkat et al., 2011).

Para obter as medidas de cada um dos planos indicados na Figura 18-c., o sistema PIV composto por laser, câmeras e tanque foi deslocado espacialmente. Para isso, utilizou-se perfis de alumínio estrutural modulares para posicionar adequadamente cada componente. Por exemplo, para o Plano AZ 0° (Figura 19) as câmeras foram posicionadas a 90° da folha de luz laser, aproximadamente. Ao passo que para ângulos azimutais maiores, o ângulo entre as câmeras e a folha de luz laser foi menor, como indicado para os planos AZ 30° (Figura 20) e AZ 45° (Figura 21).

Os campos médios foram processados para cada plano, sendo suas áreas distintas, devido à perspectiva de aquisição das imagens e objetos interferentes no plano de imagem, como parte da chicana captada pelas câmeras. Dessa maneira, limitou-se a área final de cada plano, para que apresentassem a mesma área, de acordo com as seguintes medidas: extensão radial normalizada foi igual a 0.02 < r/R < 0.65, e axial foi igual a 0.145 < z/T < 0.725. Consequentemente, foi possível obter, em um pós-processamento adicional, a média dos 6 planos para compor, em um único plano, o campo de escoamento médio da região de simetria do tanque, denominado plano AZ Médio.



Figura 18 – *Setup* experimental. **(a)** Configuração do sistema 2D PIV. **(b)** Medidas de múltiplos planos pela variação da posição azimutal. **(c)** Representação dos planos azimutais (AZ) aferidos relativo à posição da chicana.



Figura 19 – *Setup* experimental para o experimento plano AZ 0 °: 1) Câmeras; 2) Laser; 3) Sincronizador; 4) Tanque de acrílico; 5) Acionador do laser.



Figura 20 – *Setup* experimental para o experimento plano AZ 30 °: 1) Câmeras; 2) Laser; 3) Sincronizador; 4) Tanque de acrílico; 5) Acionador do laser.



Figura 21 – *Setup* experimental para o experimento plano AZ 45 °: 1) Câmeras; 2) Laser; 3) Sincronizador; 4) Tanque de acrílico; 5) Acionador do laser.

3.4. PROPRIEDADES DO ESCOAMENTO

As propriedades médias do escoamento no tanque analisadas neste trabalho foram as componentes da velocidade axial (u) e radial (v), a média das duas componentes no plano radial-axial (U) e a energia cinética turbulenta (TKE).

Para determinar a propriedade turbulenta energia cinética turbulenta (*TKE*), os dados foram pós processados por rotinas em Matlab. Nesta seção, a determinação da *TKE* será descrita usando a suposição isotrópica.

3.4.1. Estimativa da energia cinética turbulenta (TKE)

As medições em 2D PIV não fornecem informações acerca da terceira componente de velocidade, a velocidade tangencial (*w*). Dessa maneira, a energia cinética turbulenta é aproximada, considerando as premissas pseudoisotrópicas, a partir da raiz do valor quadrado médio (RMS) dos valores instantâneos das componentes axial (\tilde{u}^2) e radial (\tilde{v}^2), obtida pelos dados PIV e descrita pela Equação 2 (Khan et al., 2006; Chung et al., 2009).

$$k = 3/4 \, \left(\tilde{u}^2 + \tilde{v}^2 \right) \tag{2}$$

Onde, k corresponde à energia cinética turbulenta (TKE). E a velocidade RMS pode ser descrita pela Equação 3, por exemplo, na direção x (Chung et al., 2009).

$$\tilde{u}^2 = \overline{(u+\bar{u})^2} \tag{3}$$

Onde, u representa a velocidade instantânea e \bar{u} a velocidade média no tempo.

Essa aproximação 2D da TKE foi endereçada por Khan et al. (2006), onde não foram observados desvios significativos entre as medidas do campo de TKE com medidas em ângulo resolvido com 2D PIV e com o Stereo PIV na região de descarga do impelidor PBT 45, operando a 300 rpm, com T = 0.29m e D = T/3. Algumas diferenças foram observadas no centro da estrutura de vórtice, onde o seu valor é um pouco maior para o campo de TKE estimado pelas medidas Stereo PIV. Os autores deixam claro que embora a simplificação de pseudoisotropia seja feita, não implica que o escoamento seja considerado isotrópico. A estrutura de vórtice produzida pelo impelidor PBT 45 foi identificada em LDV por Schäfer et al. (1998), onde o escoamento é associado a atividade anisotrópica turbulenta. Outros autores como Chung et al. (2009); Gabriele et al. (2009); Li et al. (2011) e Wang et al. (2018) também utilizaram essa simplificação para analisar o campo de energia cinética turbulenta e níveis de anisotropia na região de descarga do impelidor PBT 45 em ambos os bombeamentos ascendente e descendente com PIV, considerando o pressuposto de pseudoisotropia para cálculo da energia cinética turbulenta (TKE).

CAPÍTULO 4:

4. MÉTODOS E PROCEDIMENTOS NUMÉRICOS

4.1. MODELAGEM MATEMÁTICA

Nessa seção, é apresentada a modelagem matemática do escoamento no tanque de agitação, em estado estacionário, monofásico, com fluido incompressível e abordagem em *multiple reference frames (MRF)* para modelagem da interface rotor-estator. Os modelos utilizados nesse trabalho são baseados na média de Reynolds obtida nas equações de Navier-Stokes (RANS).

4.1.1. Equação da continuidade

As equações governantes incluem a equação da continuidade (Equação 4) e a equação da quantidade de momento (Equação 5 e 6), que, neste contexto, são descritas para o fluido dentro do tanque de agitação.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla (\rho \boldsymbol{u}) = 0 \tag{4}$$

Onde ρ é a densidade do fluido, u é o vetor velocidade do fluido e t é o tempo.

4.1.2. Equação de conservação da quantidade de movimento

A equação balanceada do momento para o domínio estacionário (Equação 5) e para o domínio rotativo (Equação 6), pode ser definida abaixo:

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla (\rho \boldsymbol{u} \boldsymbol{u}) = -\nabla \mathbf{p} + \nabla \tau^{R} + \rho g$$
(5)

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla . \left(\rho \boldsymbol{u} \boldsymbol{u}\right) = -\nabla \mathbf{p} + \nabla . \tau^{R} + \rho g + F$$
(6)

Onde p é a pressão estática, τ^R é o tensor tensão de Reynolds, ρg é a força gravitacional, *F* corresponde à força devido ao frame rotativo de referência (Equação 7):

$$F = -2\rho\Omega \times \boldsymbol{u} - \rho(\Omega \times (\Omega \times r))$$
⁽⁷⁾

Onde $(2\Omega \times u)$ corresponde à aceleração de Coriolis aplicada à rotação, e $\Omega \times (\Omega \times r)$ corresponde à aceleração centrífuga. Nota-se que a força centrífuga depende do

vetor posição r, enquanto a força de Coriolis depende da velocidade u medida no quadro (*frame*) rotacional de referência. Além disso, quando a velocidade angular for igual a zero ($\Omega = 0$) as forças de Coriolis e centrífuga desaparecem e a Equação 6 reduz à Equação 5.

O tensor tensão de Reynolds, para um fluido Newtoniano, é baseado nos gradientes de velocidade média, utilizando a hipótese de Boussinesq (Equação 8):

$$\tau^{R} = \mu_{T} \left[\nabla (\boldsymbol{u} + \nabla \boldsymbol{u}^{T}) - \frac{2}{3} \nabla . (\boldsymbol{u}) I \right]$$
(8)

Onde μ_T é a viscosidade turbulenta efetiva, dada pela soma das viscosidades molecular do fluido e turbulenta, e *I* é o tensor unitário.

4.1.3. Equações de fechamento – Modelos de duas equações

Para resolução das equações de Navier Stokes em Média de Reynolds (RANS), equações de fechamento são necessárias. Os modelos de duas equações assumem que o tensor de Reynolds pode ser modelado como uma função linear dos gradientes de velocidade. Os modelos de duas equações, baseiam-se na hipótese de Boussinesq e aproximam a modelagem da viscosidade turbulenta em termos da velocidade e escala de comprimento.

4.1.3.1. Modelo Standard k-e

O modelo *Standard* k– ε baseia-se nas equações governantes para a energia cinética turbulenta k e para a taxa de energia de dissipação turbulenta ε . Esse modelo é valido para escoamentos totalmente turbulentos, com números de Reynolds alto, e considera fluxos com cisalhamento livres que não podem ser integrados totalmente à parede (Moukalled et al., 2016). A seguir, descreve-se as equações governantes para o modelo *Standard* k– ε (Rahimi and Parvareh, 2005; Moukalled et al., 2016):

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho k \boldsymbol{u}) = \nabla (\mu_{eff,k} \nabla k) + P_k - \rho \varepsilon$$
(9)

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\varepsilon \boldsymbol{u}) = \nabla \left(\mu_{eff,\varepsilon} \nabla \varepsilon\right) + \rho \left(\frac{\varepsilon}{k} C_{1,STD} P_k - C_{2,STD} \frac{\varepsilon}{k} \varepsilon\right)$$
(10)

Onde a viscosidade turbulenta efetiva para as duas equações balanceadas, $\mu_{eff,k}$ e $\mu_{eff,\epsilon}$, são definidas como:

$$\mu_{eff,k} = \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{k,STD}} \tag{11}$$

$$\mu_{eff,\varepsilon} = \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\varepsilon,STD}} \tag{12}$$

Onde P_k é o termo de produção de turbulência devido aos gradientes de velocidade, com forma compacta igual a $P_k = \tau^R : \nabla \boldsymbol{u}, \mu_T$ é a viscosidade turbulenta, $\sigma_{k,STD}$ corresponde ao número de Prandtl turbulento para k, $\sigma_{\varepsilon,STD}$ corresponde ao número de Prandtl turbulento para ε , e $C_{1,STD}$ e $C_{2,STD}$ são constantes.

A viscosidade turbulenta é descrita a partir de k e ɛ:

$$\mu_t = \rho C_{\mu,STD} \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{13}$$

Os valores dos termos constantes ajustáveis são considerados baseados em termos empíricos aplicados no modelo. Os valores utilizados foram (Launder and Spalding, 1974): $C_{1,STD} = 1,44; C_{2,STD} = 1,92; C_{\mu,STD} = 0,09; \sigma_{k,STD} = 1,0; e \sigma_{\varepsilon,STD} = 1,3.$

Para os modelos *Re-Normalization Group (RNG)* (Yakhot et al., 1992) e *Realizable* (Shih et al., 1995) o termo fonte da Equação 10, definido para o *Standard k* – ε como $S_{\varepsilon} = \rho\left(\frac{\varepsilon}{k}C_{1,STD}P_k - C_{2,STD}\frac{\varepsilon}{k}\varepsilon\right)$, é descrito diferente para cada modelo.

4.1.3.2. Modelo Re-Normalization Group k-ε (RNG)

Para o RNG, o termo S_{ε} é descrito a seguir:

$$S_{\varepsilon} = \rho \left(\frac{\varepsilon}{k} C_{1,RNG} P_k - \alpha \frac{\varepsilon}{k} \varepsilon - C_{2,RNG} \frac{\varepsilon}{k} \varepsilon \right)$$
(14)

Onde $C_{1,RNG} = 1,42$; $C_{2,RNG} = 1,68$; $\sigma_{k,RNG} = \sigma_{\epsilon,RNG} = 0,719$; $C_{\mu,RNG} = 0,0845$;

$$\alpha = C_{\mu,RNG} \eta^3 \frac{1 - \eta/\eta_0}{1 + \beta \eta^3}; \eta_0 = 4,8; \ \beta = 0,012; \ \eta = S_t \frac{k}{\varepsilon}; S_t^2 = 2S_t S_t; \ S_t = \nabla(\boldsymbol{u} + \nabla \boldsymbol{u}^T).$$

Esse modelo baseia-se na expansão das escalas para os termos tensores de Reynolds e produção da dissipação (Yakhot et al., 1992). O termo adicional de expansão (η) relaciona a tensão média turbulenta com a escala de tempo, $\eta = S_t \frac{k}{\epsilon}$;

4.1.3.3. Modelo Realizable k-e

Para o modelo *Realizable*, o termo S_{ε} é descrito a seguir:

$$S_{\varepsilon} = \rho \left(C_{1,REA} S_t \varepsilon - C_{2,REA} \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} \right)$$
(15)

Onde $C_{1,REA} = max \left[0,43; \frac{\eta}{\eta+5} \right];$ $C_{2,REA} = 1,9;$ $\sigma_{k,REA} = 1; \sigma_{\varepsilon,REA} = 1,2;$ $C_{\mu,REA} = 1,9;$ $\eta = S_t \frac{k}{\varepsilon};$ $S_t^2 = 2S_t S_t;$ $S_t = \nabla(\boldsymbol{u} + \nabla \boldsymbol{u}^T).$

O modelo *Realizable k* – ε foi testado em diversos fluxos de referência como, fluxos de cisalhamento rotativos, e possivelmente apresenta desempenho melhor que o modelo *Standard k*– ε para essa condição (Shih et al., 1995). Além disso, de acordo com os autores, espera-se uma maior estabilidade numérica com uso de esquemas de fechamento de segunda ordem.

4.1.3.4. Modelo Shear Stress Transport k–ω SST

O modelo k– ω SST considera a robustez do modelo k– ω próximo à superfície de parede, e o bom desempenho do modelo k- ε perto da camada limite e longe das paredes (Menter, 1992; Menter et al., 2003). Essa variação foi obtida por meio de uma conversão exata, baseado em um termo de difusão cruzada, F_1 , na seguinte forma:

$$\tilde{\phi}(F_1) = \phi_1 F_1 + \phi_2 (1 - F_1) \tag{16}$$

Onde $\phi_1 e \phi_2$ são coeficientes do modelo k- ω e k- ε , respectivamente. O termo F_1 é definido considerando a distância *d* até a parede mais próxima:

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

$$Com CD_{k\omega} = max(2\rho\sigma_{\omega^{2}}\nabla k.\nabla\omega, 10^{-10})$$
(17)

Dessa maneira, as equações governantes para o modelo k- ω SST seguem da seguinte forma (Menter et al., 2003; Moukalled et al., 2016):

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho k \boldsymbol{u}) = \nabla (\mu_{eff,k} \nabla k) + P_k - \beta^* \rho k \omega$$
(18)

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\omega \boldsymbol{u}) = \nabla \left(\mu_{eff,\omega} \nabla \omega \right) + \alpha \rho S^2 - \beta \omega^2 \rho + 2(1 - F_1) \sigma_{\omega 2} \frac{\rho}{\omega} \nabla k. \nabla \omega$$
(19)

Com a viscosidade turbulenta e efetiva para as duas equações governantes, sendo definidas como:

$$\mu_{eff,k} = \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{k,SST}} \tag{20}$$

$$\mu_{eff,\omega} = \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\omega,SST}}$$
(21)

$$\mu_t = \rho \frac{a_1 k}{Max(a_1 \omega, S_t F_2)} \tag{22}$$

 F_2 é um segundo termo de mistura definido como:

$$F_{2} = tanh\left[max\left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta^{*}\omega d}; \frac{500\nu}{d^{2}\omega}\right)^{2}\right]$$
(23)

O termo de produção P_k é limitado para prevenir a produção de turbulência em zonas estagnadas da seguinte maneira:

$$\widetilde{P_k} = \min(P_k, c_1 \beta^* \omega k) \tag{24}$$

Os valores dos coeficientes do modelo k-ω SST são definidos a seguir (Menter et al., 2003; OpenFOAM, 2020):

 $\beta^* = 0,09; \ \alpha_1 = 5/9; \ \beta_1 = 3/40; \alpha_2 = 0,44; \ \beta_1 = 0,0828; \ \sigma_{k2} = 1; \ \sigma_{\omega 2} = 0,856; \ \alpha_1 = 0,31; \ c_1 = 10.$

4.2. APRESENTAÇÃO DO DOMÍNIO COMPUTACIONAL

Os parâmetros relacionados à dimensão do sistema tanque-impelidor utilizados nas simulações numéricas foram os mesmos utilizados nos experimentos com PIV. Considerou-se um sistema de agitação composto por um tanque cilíndrico com fundo torisférico, com tampo do tipo ASME 10%, em que o raio de rebordeamento interno (r) é 10% do diâmetro (T) do tanque, e a altura da parte cilíndrica (H) preenchida com líquido é igual ao seu diâmetro (T), T = H = 0,38 m. Foram dispostas ao redor do tanque 4 chicanas verticais igualmente espaçadas, com largura (B) igual a 0,12 do diâmetro do tanque, B = 0,12 T. O impelidor de pás inclinadas à 45° (PBT 45), com diâmetro (D), onde $D \cong 1/3 T$, foi posicionado a uma distância do fundo cilíndrico (C) igual a um terço do diâmetro do tanque, C = 1/3 T. A espessuras (e) das pás do impelidor PBT 45 foi considerada, igual a 0,002 m. A agitação ocorreu em regime turbulento com bombeamento descendente, cujo número de Reynolds obtido, $Re = \rho N D^2 / \mu \cong 1,72 \times 10^5$, representando um escoamento completamente turbulento. O Re foi descrito em termos da velocidade rotacional do impelidor, N = 660 rpm, seu diâmetro, D = 0,1254 m, e propriedades da água como fluido circundante, sendo a massa específica, $\rho = 998,2 kg/m^3$, e viscosidade, $\mu = 1,03 \times 10^{-3} Pa.s$.

4.3. GEOMETRIA E MALHAS COMPUTACIONAIS

A geometria 3D do sistema de agitação foi criada utilizando o módulo de geometria do utilitário Salome versão 9.2. A geometria computacional é apresentada na Figura 22. As malhas computacionais foram criadas com uma abordagem em arranjo híbrido (Bern and Plassmann, 2000; Morgut and Nobile, 2009). A geometria foi decomposta em multi-blocos para obter uma malha híbrida mais eficiente (Liseikin, 2007). O primeiro arranjo criado, denominado Estator (Figura 23), representa o domínio computacional da região estacionária do tanque. Ele foi criado no gerador de malhas Salome versão 9.2 e é descrito por malhas hexaédricas do tipo curvilíneas com topologia do tipo O (O-type grid) (Bern and Plassmann, 2000; Liseikin, 2007). Nessa região, as malhas perto da parede e nas superfícies livres foram controladas, para permitir uma redução significativa do número de células computacionais. O maior refinamento ocorreu na região rotativa (Figura 24), uma vez que os fluxos com maiores gradientes de velocidade ocorrem ao seu redor (Coroneo et al., 2011). A região rotativa do tanque, denominada Rotor (Figura 24), apresenta, por sua vez, um arranjo de malhas não estruturadas obtidas por meio do gerador de malhas em código aberto snappyHexMesh, controlado por dicionários do OpenFOAM, versão OpenFOAM[®] v1812 (nomenclatura da versão conforme indicado pelo site https://www.openfoam.com/releases/openfoam-v1812/). A decisão por essa estratégia ocorreu devido à complexidade em adaptar malhas predominantemente hexahédricas à geometria complexa do impelidor PBT 45.



Figura 22 – Geometria do sistema de agitação.



Figura 23 – Discretização do domínio adotado para a região do Estator. (a) visão lateral; (b) visão superior, com foco na discretização da parede; (c) visão do tampo do tanque, com foco no centro.



Figura 24 – Discretização do domínio adotado para a região do Rotor. (a) visão superior; (b) visão inferior; (c) visão 3 D; d) visão da discretização do domínio adotado para a parede do impelidor.

4.4. SETUP NUMÉRICO

As equações de Navier-Stokes com média de Reynolds (RANS) para o momento e a continuidade foram resolvidas em um sistema de coordenadas cartesianas para um fluido incompressível e escoamento turbulento.

A solução numérica dessas equações foi obtida pelo método de volumes finitos em código CFD, com software OpenFOAM[®] (*Open-source Field Operation And Manipulation*), versão 1812.
O algoritmo SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*), que é um solver em estado estacionário para fluidos incompressíveis, foi adotado para acoplar as equações de continuidade e momento.

O método de discretização espacial utilizada no software OpenFOAM é o método de volumes finitos.Para a discretização espacial dos operadores diferenciais, a integração de Gauss foi utilizada com diferentes esquemas de interpolação. Nesse sentido, para os termos gradientes, o esquema de interpolação linear de segunda ordem foi aplicado neste trabalho.

Para os termos divergentes, que inclui os termos advectivos das equações de momento e fechamento do modelo de turbulência, três tipos de funções de interpolação numérica foram adotadas. O primeiro esquema numérico foi o blended differencing methods baseados em esquemas de alta resolução por conservação hiperbólica, denominado total variation diminishing (TVD) (Harten, 1982; OpenFOAM, 2020; Rave et al., 2020). Este esquema de discretização envolve a combinação do esquema de segunda ordem de diferença centrada (CD) com o esquema de primeira ordem Upwind (UD). Na literatura, no contexto de tanques de agitação, esse esquema numérico é também denominado *hybrid upwind-central* (Brucato et al., 1998; Aubin et al., 2004). Neste trabalho, consideramos $\gamma_{CD} = 0.95$, que corresponde o percentual do esquema de diferença centrada. Também aplicamos o esquema de discretização de segunda ordem *Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics* (QUICK), conforme Coroneo et al. (2011), para investigar o efeito dos esquemas numéricos na predição da energia cinética turbulenta. Para avaliação dos modelos de turbulência com o PIV, todos os termos convectivos momento, k e ε , foram resolvidos usando o esquema de discretização de segunda ordem linear Upwind.

Para os termos Laplacianos, que inclui os termos de difusão da equação de momento, a interpolação linear de segunda ordem foi utilizada com correção explícita não ortogonal. Os parâmetros de relaxação foram definidos com valores iguais a 0,3 para pressão e 0,5 para as variáveis U,k,ɛ. Foi aplicado precondicionadores de gradiente conjugado ao solver, com precondicionador Cholesky incompleto simplificado com base na diagonal para a pressão (DILUPBiCGStab). Para a turbulência e para a velocidade, foi aplicado a sua versão bi-conjugada com precondionador LU incompleto (DICPCG). Essas precondições são usadas para manipular a equação da matriz para um formato que é resolvida mais rapidamente.

4.5. CONDIÇÕES DE CONTORNO

Foram utilizadas 11 condições contornos distintas: parede do estator, haste móvel (dentro da região rotor) e estática (dentro da região estator), paredes das 4 chicanas, impelidor, e duas regiões representando as interfaces rotor-estator, conforme indicado na Figura 25, com cada uma representando 3 partes nomeadas por topo, cilindro e base.





Para velocidade, a condição de não deslizamento (*no slip condition*) foi aplicada para as regiões de parede, exceto para haste estática e regiões de interface rotor-estator. Para a haste estática, como ela se localiza na região estacionária e é conectada à haste móvel, foi estabelecido a condição de rotação de parede (*rotatingWallVelocity*). Para a pressão, a condição de gradiente zero foi aplicada para todas os contornos, exceto para as interfaces rotor-estator.

Para os parâmetros viscosidade turbulenta, energia cinética turbulenta e energia de dissipação, foram selecionadas funções de paredes particulares para as condições de contorno listadas no OpenFOAM, sendo aplicadas nas condições de contorno de parede com imposição da função padrão *log-law* verificadas para valores da distância da parede adimensional (y^+) entre $30 < y^+ < 300$. É importante mencionar que para comparar os modelos de turbulência,

foi utilizado a mesma malha para todos os modelos de turbulência analisados. Assim, foram estabelecidas as mesmas condições de parede para os 4 modelos propostos, seguindo estudos anteriores (Alonzo-Garcia et al., 2019). Sabe-se, contudo, que o modelo k-ω SST sofre limitações mediante a essa normalização dos dados.

A superficie livre foi tratada com tensão de cisalhamento igual a zero (*zero shear stress*). Para as interfaces que separam as regiões rotor-estator foi utilizada a condição de contorno *cyclicAMI*, que são condições de contorno para interface de malha cíclica. Essa condição de contorno define a condição cíclica, e, simultaneamente, faz a comunicação entre as interfaces que compõe as regiões estacionária e rotativa, por meio de uma interpolação de interface de malha arbitrária (AMI). Essa condição de contorno faz parte da abordagem *multiple reference frames* (MRF).

A abordagem em *multiple reference frames* (MRF) *foi utili*zada neste trabalho para obter as simulações considerando a interação rotor-estator. Essa abordagem consiste em modelar o escoamento utilizando diferentes referenciais. A região rotacional, foi resolvida em um *frame* rotativo, enquanto a região estacionária, foi resolvida em um *frame* estacionário, conforme modelagem das Equações 8 e 9. Essa abordagem contabilizou a rotação do rotor sem fisicamente movimentar uma malha em relação a outra. Porém, as células computacionais na região de rotação foram especificadas em *cellZone* distintas.

4.6. ANÁLISE DA INDEPENDÊNCIA DA MALHA

Para validar as simulações diante da técnica experimental PIV, é necessário quantificar as incertezas numéricas, relativas às aproximações do modelo numérico para obter a solução aproximada por comprimentos finitos. Assim, diante do erro numérico relativo ao experimental, podemos determinar o percentual relativo às incertezas numéricas, que incluem os erros de discretização, que não podem ser completamente eliminados.

A estimativa do erro pelo método GCI (Roache, 1994) é baseada no método de extrapolação de Richardson pode ser utilizada para demonstrar a acurácia da solução numérica. Esse procedimento, define, primeiramente, o tamanho da malha representativa (*h*), para uma malha tridimensional, descrita abaixo:

$$h = \left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^{N} \Delta V_i\right]^{\frac{1}{3}}$$
(25)

Onde ΔV_i é o volume da ith célula da malha, e *N* é o número total de células.

O fator de refinamento da malha, definido pela Equação 26, é desejável que seja acima de 1.3 e constante (Roache, 1994; Celik et al., 2008).

$$r = \frac{h_{grosseira}}{h_{refinada}}$$
(26)

O fator de refinamento (r_{12}) pode ser simplificado da seguinte maneira, para malhas tridimensionais:

$$r_{21} = \left(\frac{N_1}{N_2}\right)^{\frac{1}{3}}$$
(27)

Três malhas foram selecionadas, considerando $N_1 > N_2 > N_3$ e a variável extraída das simulações considerada representada por (ϕ_i), que é a solução discreta. A ordem aparente (p_a) é calculada por iteração de ponto fixo:

$$p_a = \frac{1}{\ln(r_{21})} \cdot \left| \ln \left| \frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \right| + q_a(p_a) \right|$$
(28)

$$q_a(p_a) = ln\left(\frac{r_{21}^{p_a} - s}{r_{32}^{p_a} - s}\right)$$
(29)

$$s = 1.sgn\left(\frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}}\right) \tag{30}$$

Onde, $r_{21} = h_2/h_1$; $r_{32} = h_3/h_2$; $\varepsilon_{21} = \phi_2 - \phi_1$; $\varepsilon_{21} = \phi_2 - \phi_1$.

A partir da ordem aparente, calcula-se os valores da variável de interesse discreta extrapolada (ϕ_{ext}^{21}):

$$e_a{}^{21} = \left| \frac{\phi_1 - \phi_2}{\phi_1} \right| \tag{31}$$

$$\phi_{ext}^{21} = \frac{r_{21}^{p_a} \phi_1 - \phi_2}{r_{21}^{p_a} - 1}$$
(32)

Similarmente, calcula-se o valor de interesse discreta da variável extrapolada ϕ_{ext}^{32} . O erro relativo aproximado e o erro relativo extrapolado são definidos abaixo:

$$e_{ext}^{21} = \left| \frac{\phi_{ext}^{21} - \phi_1}{\phi_{ext}^{21}} \right|$$
(33)

Dessa forma, o índice de convergência da malha refinada, com um fator de segurança de 25 %, é definido como:

$$GCI_{fine}^{21} = \frac{1,25 \, e_a^{21}}{r_{21}^{p_a} - 1} \tag{34}$$

Para calcular o erro de discretização pelo método GCI, descrito por Celik et al. (2008), consideramos as simulações resolvidas com esquema de discretização de segunda ordem *Upwind* (UW) para os termos convectivos. O mesmo *setup* será usado nas comparações com as medidas PIV nas sessões seguintes. O modelo de turbulência analisado foi o *Standard* k-ε. Foram consideradas 3 malhas para o método GCI, conforme indicado na Tabela 2.

Todas as malhas levaram em torno de 10.000 iterações para convergir para a solução estacionária do problema, extrapolando para 30.000 iterações para garantia da estacionalidade. As simulações foram realizadas em paralelo, a partir de um *cluster* computacional, utilizando um nó com 96 GB de memória RAM e 24 unidades de processamento em *sockets* Intel Xeon *Scalable Gold 5118* de 2,3 GHz CPU, com 16,5 MB cachê, 10,4 GT/s UPI. O critério de convergência utilizado junto ao solver SIMPLE considerou para as equações de transporte (momento e massa) resíduos iniciais especificados (RMS) abaixo de 1 e^{-6} . O campo de pressão, por sua vez, apresentou um resíduo inicial máximo de 1 e^{-5} , similar ao reportado por Aubin et al. (2001) para simulações em CFD com PBT 45 e modelos de turbulência *Standard* k– ε . A velocidade média e o Número de Potência, foram monitorados para garantia da condição de estado estacionário.

O método GCI foi aplicado para o Número de Potência (Np), que foi obtido pelo monitoramento do torque predito na parede do impelidor (Gómez et al., 2010; Ge et al., 2014; Alonzo-Garcia et al., 2019). Os valores da ordem de acurácia aparente (p_a) junto ao erro relativo (e_a^{ij}) foram resumidos na Tabela 2, tanto para a malha intermediária em relação à refinada (índice 21), quanto para a malha grosseira em relação à intermediária (índice 32).

A Tabela 2 mostra os valores que foram utilizados para se chegar ao erro de discretização numérica pelo método GCI. De acordo com a Tabela 2, para a malha intermediária em relação à malha grosseira, o índice de convergência de malha foi significativamente baixo comparado com a literatura, obtendo um valor de apenas 0,355 % (Coroneo et al., 2011b; Alonzo-Garcia et al., 2019). Ainda assim, comparado a malha refinada com a malha intermediária, o GCI resultou em 0,027%, provando que a malha intermediária é muito mais

eficiente para o uso pois requer menor poder computacional devido ao número significativamente menor de elementos de malha.

Parâmetro	Malha		
	Grosseira	Intermediária	Refinada
Número de elementos	1.474.030	2.896.124	8.528.019
Número de Potência [-]	1,130	1,143	1,146
		Valor	
Índice [ij]	32	21	-
Ordem aparente (p _a)	-	7,154	-
Erro relativo (e _a ^{ij}) [%]	1,137	0,262	-
GCI _{fine} ^{ij} [%]	0,355	0,027	-

Tabela 2 – Cálculos do erro de discretização usando o método GCI para o Númerode Potência.

Dessa maneira, a malha intermediária, pode ser empregada para a validação com os dados experimentais, sem comprometimento por erros de discretização. Análise similar foi empregada em outros trabalhos, onde o GCI foi abaixo de 5% para o Np (Coroneo et al., 2011b; Alonzo-Garcia et al., 2019).

Para averiguar a adequação do método GCI para avaliar o erro de discretização pela variável Np, mensurou-se o valor de Np para as três malhas descritas na Tabela 2 junto à malha extrapolada calculada (Figura 26). A Figura 26 indica que os três resultados, muito próximos, encontram-se em uma região assintótica, convergindo para o valor de Np da malha extrapolada. Isso satisfaz a condição do método GCI, que considera o comportamento assintótico para as soluções discretas obtidas, e, portanto, a aplicação do método é adequada.



Figura 26 – Curva assintótica do Número de Potência (Np) para as três malhas analisadas e para a extrapolação pelo método GCI.

Os perfis de velocidade média $(\overline{|U|}/U_{tip})$, no plano AZ médio, extraídos à 25 mm abaixo da mediana do impelidor (z/H = 0,27), foram obtidos para as malhas grosseira e intermediária (Figura 27). Calculou-se os valores de $\overline{|U|}/U_{tip}$, para a malha extrapolada, conforme Equação 32. É possível notar uma proximidade dos valores para as três malhas, na maior extensão do perfil radial. Entretanto, observou-se algumas diferenças entre os perfis, a partir da posição radial próxima à ponta do impelidor, em r/R = 0,33.

Essas diferenças foram destacáveis pelo GCI [%] obtido para cada velocidade no perfil radial (Figura 28). Na região 0,33 < r/R < 0,66, o erro de discretização foi maior, com valor máximo igual a 3 %. Para toda região do perfil, 0 < r/R < 0,66, porém, o GCI médio foi muito menor, igual a 1,07 %. Pode-se concluir que a análise do método GCI para a velocidade indica que a malha intermediária, com 2.896.124 células computacionais, pode ser usada para validação dos dados em CFD com PIV.



Figura 27 – Perfil de velocidade média $(\overline{|U|}/U_{t\iota p})$ na posição axial 25 mm (z/H = 0.27) do plano AZ médio para as malhas grosseira, intermediária e extrapolada.



Figura 28 – Solução da malha intermediária, com o erro de discretização (GCI) computado na forma de barra de erro.

Diante da verificação da malha para o Np e velocidade, segue-se para a validação do Np predito com o Número de Potência experimental (item 5.1.1), para avaliar a acurácia das simulações a partir deste macro parâmetro. A Figura 29 apresenta os valores de Np para as 3 malhas descritas na Tabela 2, acrescidas de duas malhas inferiores, com 1.025.430 (malha 2) e 865.050 (malha 1) células computacionais, para avaliar a influência do Np com a resolução da malha.

Deglon e Meyer (2006) relataram que a acurácia na predição do número de potência depende da resolução da malha, podendo variar em 20 % de uma malha mais inferior para uma malha mais refinada. Em relação a malha mais refinada, as duas malhas inferiores tiveram um desvio de 22% (865.050) e 10% (1.025.430) para número de potência predito (Figura 14). A malha grosseira, com 1.474. 030 células (Tabela 2), concordou em 68% com o Np experimental, cujo valor foi 1,66, muito similar ao valor obtido para a malha mais refinada e intermediária (69%). Essa proximidade dos valores de Np para as 3 malhas mais refinadas retratadas na Tabela 2, foi possível devido ao alto refinamento na região do rotor.



Figura 29 – Validação do Número de Potência simulado em diferentes malhas com o valor experimental.

A malha menos refinada indicada na Figura 29, com 865.050 apresentou um refinamento na região do rotor 2 vezes menor que a malha grosseira, com 1.474.030 células totais. Acima desse refinamento, a variação do Np foi muito pequena, corroborando para o comportamento assintótico dos valores de Np, para as malhas mais refinadas (Figuras 28 e 29). Entretanto, foi necessário adequar o número de células na região do estator (Figura 23) para balancear o número de células totais distribuídas na confecção da malha computacional do tanque. É importante mencionar que outros autores obtiveram o Np predito pelo método da integração da energia cinética turbulenta dissipada no volume do tanque (Coroneo et al., 2011; Mendoza-escamilla et al., 2018). Porém, para esse trabalho, essa estratégia foge do escopo, uma vez que não foi estimado a taxa de dissipação experimental para comparar com os dados em CFD. Além disso, considerando a subestimação dos parâmetros turbulentos para os modelos RANS em relação aos dados PIV, essa estratégia de obtenção do Np não corrobora para a validação desse macro parâmetro.

CAPÍTULO 5:

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1. RESULTADOS EXPERIMENTAL

5.1.1. Características hidrodinâmicas do PBT 45

Construiu-se um gráfico, apresentado na Figura 30, que fornece a relação entre o número de potência (Np) com o número de Reynolds (Re). Por meio desse gráfico é possível realizar uma análise prévia do escoamento do PBT 45 e escolher adequadamente o nível de agitação na região de turbulência. Além disso, é uma análise recomendada para caracterização do escoamento turbulento do impelidor (Machado et al., 2011). A Figura 30 também apresenta as curvas de número de potência (Np) e torque (Tf) com a variação da velocidade de rotação (N). Embora não seja usual essa representação, esse gráfico fornece uma base de dados para operar em outras condições de agitação deste mesmo tanque.

Os parâmetros de torque (Tf), velocidade de rotação (N) e potência (P) foram obtidos pelo transdutor acoplado ao eixo do impelidor a partir de sinais elétricos. O monitor de exibição converteu o sinal elétrico em analógico e foi responsável pela alimentação dos dados ao software, que armazena e analisa os parâmetros do escoamento aferidos. O número de Reynolds foi calculado para cada velocidade de rotação (N) definida por teste. Foram realizados um total de 26 testes considerando velocidades dentro do intervalo de operação do impelidor PBT 45, variando N entre 150 rpm e 1500 rpm. Os experimentos para cada rotação duraram cerca de 5 minutos para garantia da estabilidade do escoamento e para eliminar as flutuações dos dados instantâneos. Os valores apresentados representam a média dos valores instantâneos do conjunto de dados obtidos. As Equações 35 e 36 fornecem as definições para os parâmetros adimensionais Np e Re descritos por Chapple et al. (2002).

$$N_p = P/\rho N^3 D^5 \tag{35}$$

$$Re = \rho N D^2 / \mu \tag{36}$$

A potência requerida, por sua vez, pode ser calculada por derivação das medidas de torque (Tf) (Chapple et al., 2002)

$$P = 2\Pi NT_f \tag{37}$$



Figura 30 – Variação do número de potência com o número de Reynolds para o impelidor PBT 45 nas condições geométricas T = 0,19 m e D = T/3.

Para muitos impelidores, o número de potência já foi determinado como uma função do número de Reynolds. De acordo com Chapple et al. (2002), na região de escoamento completamente turbulento, o número de potência (Np) é constante e independente do número de Reynolds (Re). Para o impelidor PBT 45, com diâmetro D = T/3, imerso em água em um tanque cilíndrico com H = T e localizado a C = T/3 do fundo, os autores constataram que o Np foi constante para valores de $Re > 2 \times 10^4$.

Dessa maneira, praticamente toda faixa de operação aferida neste trabalho estaria dentro do regime turbulento para o PBT 45. Contudo, os dados apresentados na Figura 30 foram superestimados para a água, principalmente na região entre 150 à 450 rpm. Conforme a Tabela 1, os valores de Np para o PBT 45 de 4 pás inclinadas foram menores que o valores encontrados neste trabalho na região de turbulência. Souza (2011), por exemplo, utilizando a mesma planta piloto apresentada na Figura 17, encontrou um Np = 1,34 para $Re = 2 \times 10^5$, sendo, em torno 11% menor que o valor encontrado neste trabalho, para o mesmo valor de Re. É muito

importante mencionar, todavia, que neste trabalho o torquímetro foi calibrado com certificação nacional, segundo a norma ABNT NBR 12240 – Calibração de dispositivos para medição de torque estático. Além disso, o monitor de leitura dos parâmetros estava novo e devidamente calibrado.

Dado a alta variação dos valores de Np para a faixa de velocidade entre 150 rpm e 600 rpm, escolheu-se a rotação de 660 rpm para os experimentos com PIV, onde o Re calculado foi aproximadamente $1,72 \times 10^5$, o Np aproximadamente 1,66 e o Tf foi 0,99 Nm. A partir dessa velocidade rotacional, na faixa entre 660-1400 rpm, observou-se que a variação na curva de Np com o número de Re foi menor, com variação máxima de 20 % do valor médio (Np=1.35) nessa região, e, portanto, considerou-se o regime completamente turbulento. Além disso, aplicando uma regressão linear dos dados acima de 660 rpm, observamos que a inclinação da curva foi aproximadamente zero $(-2,6995 \times 10^{-6} \pm 1,7251 \times 10^{-7})$ com um coeficiente de determinação (R^2) ajustado igual a 0.946 para o modelo linear em questão.

A partir da velocidade 1200 rpm, o valor de Np permaneceu constante e igual a 1,18 até a rotação 1400 rpm. Contudo, o uso de velocidades de rotação acima de 750 rpm não foi recomendado, dado a presença de instabilidades físicas no sistema de agitação, tais como vibrações mecânicas e zonas de baixa pressão.

5.1.2. Campo de velocidade com variação do plano azimutal 2D PIV

O campo das componentes de velocidade radiais (\bar{u}) axiais (\bar{v}) são apresentados na Figura 31 e Figura 32, respectivamente, em diferentes ângulos azimutais (AZ). Em todos os campos apresentados, as velocidades foram normalizadas pela velocidade na ponta da pá do impelidor $U_{tip} = \pi ND \approx 4,32 \ m/s$.

Nota-se que as áreas de representação do campo são distintas, e as chicanas foram identificadas em apenas alguns planos AZ: 0°, 60° e 75°. Essas diferenças na representação das áreas e chicanas estão de acordo com a perspectiva de visualização do plano AZ durante a aquisição das imagens, conforme explicado na metodologia (Item 3.3). Dessa maneira, o plano AZ 0° exibiu o maior campo de visão e o plano AZ 60° foi o plano com a menor área entre os planos AZ, pela presença de parte da chicana, captada pelas câmeras na posição radial r/R = 0,65.

É possível observar que à medida que o ângulo azimutal (AZ) rotacionou em relação à posição da chicana, os campos de escoamento radial e axial exibiram variações significativas. Essas mudanças foram maiores para a componente radial, principalmente na região de descarga do impelidor, concentrada entre $0,1 \le r/R \le 0,4$. Nessa região e abaixo do impelidor, indicada pela Figura 31, a velocidade radial (\bar{u}/U_{tip}) variou entre $0,1 \le \bar{u}/U_{tip} \le$ 0,2, para os planos AZ 0°, 60°, 75°. Enquanto, para os planos AZ 15°, 30° e 45°, o fluxo apresentou maior variação, com valores entre $0,2 \le \bar{u}/U_{tip} \le 0,4$, alcançando valores máximos iguais a $\bar{u}/U_{tip} \cong 0,5$ para o plano AZ 45° na posição r/R = 0,33, logo abaixo do impelidor.

Além disso, na região abaixo do impelidor, o fluxo radial nos planos aumentou até o AZ 45° e reduziu até o AZ 75°. Essa dinâmica está relacionada à variação do plano azimutal e o efeito da interação impelidor-chicana. Dessa forma, a variação da condição de contorno é relevante nas análises do escoamento turbulento em tempo médio. Contudo, para o campo axial normalizado (\bar{v}/U_{tip}) (Figura 32), essas variações foram mais sutis qualitativamente.



Figura 31 – Velocidade radial PIV normalizada $(|u|/U_{tip})$ em diferentes planos AZ 0°-75°.



Figura 32 – Velocidade axial PIV normalizada $(|v|/U_{tip})$ em diferentes planos AZ 0°-75°.

A média entre esses dois campos obtidos pelas Figuras 31 e 32 forneceram os dados da Figura 33, que compõe o campo de velocidade média normalizada ($\overline{|U|}/U_{tip}$). Assim como as componentes radiais e axiais, o campo de velocidade média foi investigado em diferentes ângulos azimutais entre 0°-75°. Em cada plano, foi possível observar o padrão de escoamento típico de um PBT 45 em bombeamento descendente e em medidas *ensemble-averaged*, descrito por outros trabalhos (Schäfer et al., 1998; Guida et al., 2010; Alberini et al., 2017). Os campos $\overline{|U|}/U_{tip}$ apresentados mostraram as estruturas dominantes do escoamento, orientadas na forma de J, com velocidade máxima igual a $\overline{|U|}/U_{tip} \cong 0,5$, chegando a valores iguais a 0,6 para o AZ 45°, em aproximadamente r/R = 0,33. Nota-se pontos ruidosos no canto inferior direito de alguns planos AZ, principalmente no plano AZ 45°, relacionados a defeitos no tanque de acrílico. Ao longo dos experimentos foram aparecendo ranhuras internas e seu efeito foi propagado nas imagens PIV processadas. Esse efeito corresponde a erros sistemáticos, com valor zero de velocidade e não afeta o escoamento.

Guida et al. (2010) avaliaram o efeito do plano azimutal no campo de fluxo médio, na faixa de 0°-85° em intervalo de 5° para medidas 2D PIV Segundo os autores, os principais efeitos da posição azimutal foram: mudanças na distribuição da velocidade no plano AZ; a forma do jato; a posição e magnitude da velocidade máxima. Além disso, os autores mostraram que o ângulo de 5°, associado ao plano AZ mais próximo da chicana, resultou em diferenças mais significativas na distribuição de velocidade em relação aos demais planos AZ. Qualitativamente, neste estudo, tanto o AZ 0° quanto o AZ 45° apresentaram diferenças com os demais planos para a velocidade média. Para AZ 30°, maior intensidade foi observada próximo à parede do tanque (z / H = 0,75), indicando uma recirculação mais intensa para essa posição azimutal.

Alberini et al. (2017) concluíram que a análise do campo de velocidade pode ser feita em ambos os métodos *ensemble-averaged* ou ângulo resolvido, pois ambos produzem estruturas de escoamento similares. Isso indica que a variação da posição do impelidor não afeta a representação do escoamento médio. Porém, os autores mostraram que medidas PIV em diferentes posições relativas à chicana, 0° e 45°, produziram padrões de escoamentos distintos. Neste trabalho, as maiores diferenças, qualitativamente, ocorreram entre os AZ 0° e 45°, com o maior fluxo de velocidade no plano 45°. Essa diferença mostra que o efeito da posição da chicana é muito relevante para esse impelidor nas configurações geométricas propostas. Nas próximas seções será estendida essa análise para o CFD, a fim de analisar qual é o impacto dessas diferenças na validação com os dados simulados.



Figura 33 – Velocidade média PIV normalizada $(|U|/U_{tip})$ em diferentes planos AZ 0°-75°.

5.1.3. Plano AZ Médio para os parâmetros do escoamento

Seguindo os desdobramentos do efeito do plano azimutal na distribuição do campo de velocidade média, realizamos um pós-processamento adicional, onde obtivemos a média de todos os planos AZ para cada componente do campo do escoamento (Figura 34): campo de velocidade média $(\overline{|U|}/U_{tlp})$, TKE média $(\overline{TKE}/U_{tlp}^2)$, velocidade radial média (\overline{u}/U_{tlp}) e velocidade axial média (\overline{v}/U_{tlp}) .



Figura 34 - Planos AZ Médio PIV para os parâmetros do escoamento.

Esse campo representa o escoamento reproduzido a cada 90° do volume do tanque por uma pá do impelidor PBT 45. Em outras palavras, é como se todo o campo produzisse esse mesmo padrão de escoamento, independentemente da posição da chicana ou impelidor. Assim, para esse plano AZ Médio, o efeito da interação chicana-impelidor é removido. Nas seções

seguintes, avalia-se se essa estratégia impacta positivamente na validação dos dados em CFD RANS com abordagem em MRF. É importante mencionar que essa estratégia do uso da média dos planos azimutais é uma forma de validação e não invalida o foco principal deste trabalho que é mostrar as diferenças entre os planos azimutais e a necessidade de medidas em múltiplos planos.

5.1.4. Energia cinética turbulenta (TKE)

A Figura 35 apresenta a distribuição de energia cinética turbulenta (TKE) experimental ao longo dos planos azimutais. Para essa quantidade turbulenta, os valores no campo foram apresentados na relação: \overline{TKE}/U_{tip}^2 . As principais diferenças observadas entre os AZ ocorreram na região de descarga do impelidor, com aumento da \overline{TKE}/U_{tip}^2 entre valores $0,04 \le \overline{TKE}/U_{tip}^2 \le 0,14$, principalmente para os AZ 15°, 30° e 45°.

Padrão similar foi obtido por Guida et al. (2010), em que os valores máximos de \overline{TKE}/U_{tip}^2 foram encontrados na região imediata abaixo do impelidor. No entanto, a distribuição desses máximos pelo efeito do plano azimutal foi diferente. No trabalho de Guida et al. (2010) a \overline{TKE}/U_{tip}^2 reduziu à medida que o AZ aumentou, enquanto, neste trabalho, os valores de máximo \overline{TKE}/U_{tip}^2 aumentaram até 45° e reduziram até AZ 75°. Para o plano AZ 45°, na região de descarga do impelidor, a distribuição de TKE foi maior, acima de valores de $\overline{TKE}/U_{tip}^2 \ge 0,06$.

No entanto, à princípio, não se pode afirmar que a variação no campo de TKE está relacionada à variação dos planos azimutais e o efeito da posição da chicana. Isso ocorre porque as medidas da TKE em *ensemble averaged* podem estar superestimadas pela componente periódica ou pseudoturbulência aos níveis de turbulência no tanque (Alberini et al., 2017; Lane, 2017), pois não foi removido o efeito da periodicidade das pás do impelidor, conforme realizado por medidas em ângulo resolvido (Ducci and Yianneskis, 2006; Li et al., 2011b; Zhipeng et al., 2013). A decomposição dessa componente periódica da componente turbulenta intrínseca do escoamento, conhecida como randômica (Delafosse et al., 2008), envolve análises mais complexas, como a avaliação da série espectral do escoamento periódico e técnicas de decomposição ortogonal apropriada (POD) (de Lamotte et al., 2018; Haringa et al., 2018). Essa análise não será feita neste trabalho, pois foge do seu escopo. É importante mencionar que a superestimação dos níveis de turbulência pode ser diferente para os planos AZ assim como pode depender do nível de agitação (Nikiforaki et al., 2003). Isso significa, que sem um pós

processamento e análise de sinais das componentes da $\overline{|TKE|}/U_{tip}$, não se pode associar a variação da TKE com o efeito do plano azimutal.



Figura 35 – Energia cinética turbulenta PIV média $(|TKE|/U_{tip})$ em diferentes ângulos azimutais 0°-75°.

A questão da problemática da pseudoturbulência neste trabalho é que, de acordo com (Nikiforaki et al., 2003), as simulações RANS em estado estacionário não contabilizam os efeitos de periodicidade nas quantidades turbulentas, como a TKE. Em outras palavras, os dados simulados em RANS em estado estacionário retratam apenas a turbulência intrínseca ao escoamento turbulento no tanque de agitação. Delafosse et al. (2008) relatou que a dificuldade das simulações RANS em resolverem a energia cinética periódica indica uma má representação do escoamento periódico por esses modelos, e, consequentemente, não conseguem modelar a interação chicana-impelidor e a indução das estruturas dos vórtices produzidos pelas pás do impelidor. Dessa maneira, de forma a atenuar o efeito da periodicidade no campo de TKE das medidas PIV, a representação da média dos planos, indicada pela Figura 34, pode ser uma boa estratégia para reduzir as discrepâncias entre os dados numéricos e experimentais.

5.1.5. Efeito da resolução espacial

A escolha adequada do campo de \overline{TKE}/U_{tip}^2 obtido pelas medidas PIV para comparação com dados em CFD envolve a análise do efeito da resolução espacial nesse parâmetro turbulento. A Figura 36 ilustra a comparação entre as resoluções espaciais extremas, uma inferior com tamanho igual a 36×36 *px* e uma mais refinada com 10×10 *px*, com valores do tamanho da janela de interrogação (Δ) iguais a 1,08 mm e 0,3 mm, respectivamente. A escolha de uma resolução menos refinada pode lidar com uma má representação local do campo de energia cinética turbulenta. Dessa maneira, as diferentes resoluções devem ser analisadas.

A partir da Figura 36 é possível observar diferenças nas duas distribuições de \overline{TKE}/U_{ttp}^2 , principalmente na região de descarga do impelidor, pela presença de níveis de turbulência locais possivelmente incoerentes na resolução 36×36 *px*. Esses valores incoerentes, indicados por pontos com alto valor de TKE, desapareceram na resolução 10×10 *px*. De modo geral, a resolução espacial mais refinada pode capturar as mudanças nos gradientes de velocidade com maior acurácia, pois apresenta maior número de vetores representativos numa mesma área de interrogação (Scarano, 2001; Tanaka and Eaton, 2007). Consequentemente, a partir de uma resolução mais refinada, é possível obter uma melhor resolução local dos níveis de TKE. Neste caso, a resolução de 10 pixels foi mais adequada

A Figura 37 abaixo, analisa quantitativamente o efeito das 5 resoluções espaciais obtidas neste trabalho por meio do método *multigrid* (item 3.2) em um perfil de $(\overline{|TKE|}/U_{tup})$ radial com 15 mm *offset* da altura da mediana do PBT 45, obtido para o plano AZ Médio.



Figura 36 – Energia cinética turbulenta PIV média $(\overline{|TKE|}/U_{tip})$ no plano AZ médio com duas resoluções espaciais: (a) 36×36, (b) 10×10.



Figura 37 – Perfil radial da TKE média normalizada em 5 resoluções espaciais distintas para o plano AZ médio: 36 px, 27 px, 20 px, 15 px e 10 px.

Por meio da Figura 37, observa-se que o efeito da resolução espacial para o campo de campo de $\overline{\overline{TKE}/U_{tip}}^2$ foi local, sendo que, na maior parte da extensão radial do perfil

analisado, os valores de TKE em diferentes resoluções espaciais foram próximos. No entanto, foi possível observar alta variação da \overline{TKE}/U_{tip}^2 abaixo do eixo do impelidor, numa extensão $0 \le r/R \le 0,12$. As resolução inferiores, 36 px, e 27 px superestimaram em 76% e 57%, respectivamente, os valores de \overline{TKE}/U_{tip}^2 nessa região, em relação as resoluções espaciais mais refinadas, 20 px,15 px e 10 px. Além disso, a partir de 20 px, não ocorreram mudanças significativas nos perfis PIV para a TKE.

O principal fator relacionado a essa variação de TKE pela resolução espacial é a falta de coerência espacial nas resoluções espaciais menos refinadas, por terem uma janela de interrogação grande para o escoamento nessa região. A resolução de $10 \times 10 px$ apresentou maior número de vetores representados numa mesma área e, assim, forneceu, uma representação do escoamento mais coerente. Além disso, fatores nas medições PIV podem interferir no efeito da resolução espacial, como a concentração das partículas na janela de interrogação analisada e reflexão da luz laser (Liu et al., 2016). Lembrando que a área analisada foi extensa e a técnica é sensível a esses fatores de medição. Dessa maneira, a resolução espacial mais apropriada escolhida para as comparações com os dados em CFD foi a resolução $10 \times 10 px$ com $\Delta = 0,3 mm$.

5.2. RESULTADOS CFD

5.2.1. Análise qualitativa dos campos de velocidade

O campo de velocidade média normalizada $(\overline{|U|}/U_{tip})$ foi obtido para as simulações em CFD com diferentes modelos de turbulência associados às equações RANS: *Standard* k- ε (k- ε STD), *Renormalization Group* k- ε (k- ε RNG), *Realizable* k- ε (k- ε REA) e *Shear Stress Transport* (k- ω SST). Para comparar com os dados experimentais PIV, os dados em CFD foram extraídos nos mesmos 6 planos azimutais, de 0° à 75° (Figura 38), variando em 15° a posição do plano relativo à chicana. Em seguida, foi obtida a média estatística espacial desses planos, fornecendo uma representação do plano AZ Médio, conforme a Figura 39.

É possível observar, por meio da Figura 38, que exemplifica o campo de velocidade média para o modelo k-ε STD, que a condição de contorno rotativa em abordagem MRF fixa a posição do rotor em relação à chicana. Essa abordagem, conforme mencionado por Chapple et al. (2002), negligencia, de certa forma, o movimento do impelidor relativo à chicana no escoamento médio. Estratégias com malha dinâmica, como a abordagem em *sliding mesh*, são

capazes de captar essa interação chicana-impelidor. Muito embora, na literatura, não foram observadas diferenças significativas entre as abordagens em MRF e *sliding mesh* (Jahoda et al., 2009; de Lamotte et al., 2018; Mendoza-escamilla et al., 2018).

A principal observação, no entanto, é que os campos de velocidade apresentados nos planos AZ CFD variaram consideravelmente em função da posição do plano azimutal relativo à chicana. E isso ocorreu de forma similar ao observado nos campos de velocidade AZ PIV (Figura 33). No entanto, para os experimentos PIV em *ensemble average*, a posição da pá foi aleatorizada em cada plano. Essa variação do plano azimutal não é muito discutida na literatura para os dados numéricos ou PIV, deixando em questionamento qual o efeito da variação da posição do plano azimutal para analisar a validação dos modelos em CFD/MRF com dados experimentais. Outro questionamento seriam as ressalvas para o uso das medidas 2D PIV em *ensemble average* aplicadas em diferentes planos AZ para analisar os dados em CFD RANS, principalmente quanto ao efeito nas propriedades turbulentas, como a energia cinética turbulenta. Tal questionamento ocorre porque, nos últimos anos, grande parte das validações dos dados simulados com PIV ocorreram com medidas em ângulo resolvido, onde a posição da pá é fixada em relação ao plano de medida e o efeito da periodicidade é removido dos níveis de turbulência (Ranade et al., 2001; Deen et al., 2008; Chung et al., 2009; Kleinwächter et al., 2017). Esses questionamentos serão discutidos nas seções subsequentes.

A abordagem da média espacial dos planos azimutais (Figura 39) foi aplicada com o intuito de minimizar o efeito da condição de contorno rotativa fixa e eliminar o impacto da interação chicana-impelidor no plano azimutal PIV. Isso fica bastante claro ao analisar o formato da estrutura do escoamento em J pela Figura 39. É possível observar uma suavização do jato, em comparação com os fluxos obtidos pelos planos azimutais na Figura 38. Essa perspectiva fornece uma representação muito interessante e didática do escoamento turbulento médio neste tanque agitado. Além disso, é possível que essa estratégia contribua para reduzir as discrepâncias entre as abordagens experimental e computacional quanto à interação impelidor-chicana.



Figura 38 – Velocidade média normalizada $(\overline{|U|}/U_{tip})$ em diferentes planos AZ CFD entre 0°-75° para o modelo k-ε STD.



Figura 39 – Velocidade média CFD normalizada $(\overline{|U|}/U_{tip})$ no plano AZ Médio para o modelo k- ε STD.

5.3. COMPARAÇÃO CFD E PIV

Em seguida, limitou-se a área do campo CFD, similar ao PIV, conforme Figura 40, para destacar as similaridades e diferenças entre as duas abordagens experimental e computacional. Utilizou-se incialmente o modelo Standard k- ε , pois este modelo é o mais retratado em literatura. Na Figura 40, os campos de velocidade $\overline{|U|}/U_{tip}$ no plano AZ Médio foram dispostos lado a lado para o CFD, pelo modelo k- ε STD, e PIV. Primeiramente, é importante mencionar que em escoamentos rotativos o módulo da velocidade ($\overline{|U|}/U_{tip}$) inclui a terceira componente da velocidade, tangencial (*w*), no plano azimutal a ser analisado. Dessa maneira, como utilizou-se a configuração 2D PIV, cujo campo médio é representado apenas pelas componentes axial (v) e radial (u), extraiu-se essa informação do numérico de forma análoga ao experimental PIV. Essa questão é muito bem retratada em literatura (Khan et al., 2004; Chung et al., 2009; de Lamotte et al., 2018), onde a inclusão da componente tangencial no campo de escoamento completamente turbulento aumenta a magnitude da velocidade normalizada para, aproximadamente, $\overline{|U|}/U_{tip} \cong 0,6$ (Khan et al., 2006; Chung et al., 2007). Entretanto, a análise desse mesmo escoamento com apenas duas componentes, compondo o escoamento axial-radial, limita o módulo de velocidade para valores entre $0,45 \le \overline{|U|}/U_{tip} \le$ 0,55 (Jaworski et al., 2001; Chung et al., 2009), para o impelidor PBT.



Figura 40 – Comparação CFD e PIV para o campo de velocidade média normalizada $(\overline{|U|}/U_{tip})$ no plano AZ médio para o modelo k- ε STD.

Qualitativamente, os escoamentos produzidos por meio das duas abordagens foram muito similares entre si (Figura 40). Ambos produziram um jato descendente com magnitude de velocidade entre $0,23 \leq \overline{|U|}/U_{tup} \leq 0,45$. A velocidade máxima se estendeu da ponta do impelidor até uma altura de z/H = 0,25, deslocando radialmente entre $0,25 \leq r/R \leq 0,33$. A largura do jato foi bastante análoga, e ambos apresentaram um fluxo axial vertical, sendo o fluxo do CFD um pouco inclinado para a direita. O padrão de escoamento captado pelo CFD e, em concordância com o PIV, indicou uma coerência do fenômeno de agitação turbulenta em tanques agitados por impelidores PBT 45°, em configuração *down-pumping*, com D = 1/3T e C = 1/3T (Ranade and Joshi, 1989; Aubin et al., 2001). Mudanças na posição da distância do fundo do tanque (*C*) ou do diâmetro do impelidor (*D*), implicam em alterações no padrão de circulação e consequentemente da distribuição do jato no volume do tanque (Kresta and Wood, 1993; Kresta, 1998).

Outro ponto observado na Figura 40 foi o decaimento da velocidade na região convectiva (*bulk*) ao redor do impelidor: acima e ao lado, na região de recirculação do fluxo principal. Essa região é também denominada região de escoamento médio (Murthy and Joshi, 2008). O decaimento foi gradual tanto na região de recirculação do fluxo axial, ao longo de $0,5 \le r/R \le 0,7$, e acima do impelidor, na região entre $0,45 \le z/H \le 0,7$ para o CFD e PIV. Entretanto, nessa região de recirculação, notou-se que os dados de velocidade para o CFD ficaram ligeiramente subestimados em relação ao PIV, indicando um maior amortecimento da velocidade turbulenta próximo à parede e chicanas. Padrão similar foi observado por Ge et al. (2014), ao comparar medidas PIV com CFD/RANS para estudar o escoamento de diversos impelidores, dentre eles, o PBT 45. O padrão de escoamento obtido por esses autores, a partir do modelo k- ε STD, descreveu o fluxo descendente com velocidades entre $0,2 \le \overline{|U|}/U_{tup} \le 0,45$, para uma configuração de tanque igual a T = 0,34 m, D = 0,42T e C = 1/3T. A subestimação desse modelo ocorreu nos mesmos pontos que no presente trabalho: logo abaixo do impelidor e na região de recirculação, próximo à parede.

Apesar dessa pequena diferença observada, o modelo k- ε STD, neste trabalho, foi bastante representativo para agitação turbulenta produzida pelo PBT 45. No entanto, na literatura, este modelo é criticado por subestimar os parâmetros de segunda ordem, como a energia cinética turbulência (TKE) (Jaworski and Zakrzewska, 2002) e a taxa de dissipação turbulenta (EDR) (Yeoh et al., 2004; Mendoza-escamilla et al., 2018). Outras falhas do modelo relatadas foram: baixo desempenho para modelagem do fluxo em espiral ou fluxos de recirculação ou geração de vórtices (Torré et al., 2007; Lane, 2017); baixo desempenho na modelagem dos termos convectivos $k \in \varepsilon$ na região próxima à parede (Singh et al., 2011); suposição da isotropia da turbulência (Singh et al., 2011; Haringa et al., 2018).

Dessa maneira, a Figura 41 estende essa comparação para os outros modelos de turbulência, cuja performance será avaliada. Os modelos analisados junto ao k-ε STD e o PIV foram: *Renormalization Group* k-ε (k-ε RNG), *Realizable* k-ε (k-ε REA) e *Shear Stress Transport* (k-ω SST).



Figura 41 – Comparação CFD e PIV para o campo de velocidade média normalizada $(\overline{|U|}/U_{t\iota p})$ no plano AZ médio. (a) k- ε STD; (b) k- ε RNG; (c) k- ε REA; (d) k- ω SST; (e) PIV.

A partir da Figura 41 acima é possível observar diferenças entre as distribuições normalizadas de $\overline{|U|}/U_{ttp}$ para os modelos apresentados. Os modelos k- ε RNG, k- ε REA e k- ω SST apresentaram ligeira superestimação dos máximos de $\overline{|U|}/U_{ttp}$, comparado ao k- ε STD e PIV. Entretanto, os modelos k- ε REA e k- ω SST produziram jatos com menor inclinação comparado aos modelos k- ε RNG e k- ε STD. A região acima do impelidor foi muito similar para os modelos em CFD, exceto para o modelo k- ω SST. Dessa maneira, pode-se indicar que, qualitativamente, o modelo k- ε STD apresentou maior similaridade com a distribuição $\overline{|U|}/U_{tip}$ obtida pelo PIV. Contudo a comparação dos perfis radiais também é feita para averiguar as diferenças quantitativas entre os modelos propostos e os dados PIV na região de descarga do impelidor, que é a região de interesse neste trabalho.

De acordo com Mendoza-escamilla et al. (2018), em um escoamento produzido por um PBT em um tanque agitado, é esperado que a velocidade axial contenha a maior parte da energia cinética turbulenta do escoamento. Em outras palavras, o escoamento produzido por esse tipo de impelidor é predominantemente axial. A Figura 42 abaixo mostra a comparação entre os campos axiais $(\overline{|v|}/U_{tup})$ para o modelo k- ε STD e os dados PIV no plano AZ Médio.





Considerando a componente de velocidade axial para ambas as abordagens CFD e PIV, o fluxo máximo descendente, em azul, ocorreu na região de descarga do impelidor. Enquanto os valores positivos máximo, em vermelho, foram encontrados próximo à parede do tanque. Para o resultado numérico, a velocidade descendente máxima foi aproximadamente $\overline{\overline{v}/U_{tip}} = -0,45$. Para o PIV, na mesma região, o máximo encontrado foi 12,5% menor, com $\overline{\overline{v}/U_{tip}} = -0,4$. Em relação aos modelos de CFD analisados neste trabalho, não houve diferenças significativas entre os modelos para o campo de velocidade axial normalizado. Diferenças entre o CFD e PIV foram pequenas para a componente axial. Em outras palavras, pela Figura 42, o CFD foi capaz de reproduzir adequadamente as características experimentais do fluxo axial.

A mesma tendência não foi observada para o campo de velocidade radial (Figura 43). Para o experimental PIV foi encontrado alto gradiente de velocidade existente nas regiões acima e abaixo do impelidor, que são formadas devido à transferência de momento induzida pela rotação da pá do PBT 45. No entanto, para o campo produzido pelo modelo k- ε STD, foi observada alta subestimação do fluxo radial abaixo do impelidor, 40% em relação ao máximo experimental, cujo valor encontrado foi $\overline{u}/U_{tup} = 0,25$. Além disso, ao longo da região de descarga do impelidor essa subestimação chegou até 75% em relação ao PIV. Porém, percebeuse que essa subestimação impactou muito pouco o campo de velocidade média $\overline{|U|}/U_{tup}$ final, que foi próximo para ambos PIV e CFD, com características predominantemente axiais.



Figura 43 – Comparação CFD e PIV para o campo de velocidade radial normalizada ($\overline{\overline{|u|}/U_{tip}}$) no plano AZ Médio para o modelo k- ε STD.

Diferentemente do escoamento axial, onde os modelos de turbulência apresentaram uma representação similar do campo, na distribuição de velocidade radial, os modelos baseados em RANS demonstraram comportamentos distintos entre eles (Figura 44).



Figura 44 – Comparação CFD e PIV para o campo de velocidade radial normalizada $(\overline{|u|}/U_{tip})$ no plano AZ Médio. (a) k- ε STD; (b) k- ε RNG; (c) k- ε REA; (d) k- ω SST; (e) PIV.

É possível observar que o gradiente de velocidade radial produzido acima do impelidor foi bastante diferente para os 4 modelos de turbulência obtidos (Figura 44). O modelo k-ω SST foi o único modelo que conseguiu um maior espalhamento desse fluxo acima do impelidor, aproximando do padrão obtido pelo PIV. Porém, na região de interesse, que é o fluxo abaixo do impelidor, todos os modelos de turbulência falharam em reproduzir o fluxo radial. A comparação quantitativa do campo de velocidade radial médio foi feita para o PBT 45 com medidas PIV por Ge et al. (2014). Observou-se que os valores em CFD para a velocidade radial não foram satisfatórios com as medidas PIV na vizinhança do impelidor. Essa divergência indicou ser uma dificuldade dos modelos RANS em reproduzir o padrão da hidrodinâmica do PBT 45 com 4 pás inclinadas. Diferentes inclinações, números de pás e formato de pás foram utilizados, e os desvios com os dados experimentais foram maiores para o PBT 45.

Murthy e Joshi (2008) mostraram que o modelo k- ε STD subestimou a componente radial comparado aos modelos *Large Eddy Simulation* (LES) e *Reynolds Stress Model* (RSM). Esses desvios confirmam a dificuldade dos modelos de turbulência RANS, baseados no pressuposto da isotropia, em capturarem o escoamento complexo tridimensional deste impelidor e suas características turbulentas, como os vórtices. Roy e Acharya (2011, 2012) mostraram que a componente radial predita pelo modelo LES concordou em 10% – 15% com os dados experimentais PIV em ângulo resolvido. Isso mostra que até mesmo o modelo LES apresentou limitações na caracterização do fluxo radial e das estruturas turbulentas não estacionárias associadas à hidrodinâmica do impelidor PBT 45 diante das técnicas experimentais utilizadas para validação.

5.3.1. Análise quantitativa dos perfis radiais de velocidade

Perfis de velocidade na região de descarga do impelidor foram obtidos em diferentes alturas axiais a partir da mediana do impelidor até o fim do jato: 0 mm da mediana do impelidor (z/H = 0,34), 25 mm (z/H = 0,27), 50 mm (z/H = 0,20) e 65 mm (z/H = 0,16). Os resultados para ambos PIV e CFD/RANS são mostrados na Figura 45 para o perfil 25 mm no plano AZ Médio, para as componentes de velocidade axial (\overline{v}/U_{tip}), radial (\overline{u}/U_{tip}); e velocidade média ($\overline{|U|}/U_{tip}$).



Figura 45 – Comparação dos perfis radiais CFD e PIV para posição axial 25 mm no plano AZ Médio: (a) Velocidade axial $(\overline{|v|}/U_{tip})$; (b) Velocidade radial $(\overline{|u|}/U_{tip})$; (c) Velocidade média $(\overline{|U|}/U_{tip})$.

Os resultados dos gráficos obtidos na Figura 45 reforçam a discussão qualitativa dos campos apresentados nas seções anteriores para o PIV e CFD. O perfil de velocidade axial (Figura 45-a) para os modelos em CFD foram similares entre si e concordaram em boa parte com o experimental PIV. Entretanto, foi observado uma superestimação do fluxo máximo descendente (Figura 42-em azul) e do fluxo ascendente máximo em relação ao PIV (Figura 42em vermelho). E isso ficou muito bem representado na Figura 45-a, sendo o fluxo descendente indicado pelos dados entre $0,15 \le z/H \le 0,3$ e o fluxo ascendente entre $0,4 \le z/H \le 0,65$. Analogamente, o campo radial (Figura 45-b) confirma as discussões realizadas, onde os dados em CFD abaixo do impelidor foram bastante subestimados em relação ao PIV. Todavia, é importante ressaltar que em determinadas regiões, como na região da linha do impelidor (Figura 46) e próximo ao fundo do tanque (Figura 47), o padrão do escoamento foi bastante diferente, principalmente para o fluxo radial, onde ocorreu maior concordância entre os dados CFD e PIV para a componente de velocidade radial (\overline{u}/U_{tip}) comparado à Figura 45-c. Por outro lado, em todas as regiões apresentadas, os perfis para a velocidade média ($\overline{|U|}/U_{tip}$) dos dados em CFD concordaram muito bem com os dados experimentais PIV, para o plano médio AZ. Dessa maneira, escolheu-se o campo $\overline{|U|}/U_{tip}$ para validar as simulações aplicadas nos 4 modelos baseados em RANS.



Figura 46 – Comparação dos perfis radiais CFD e PIV para posição axial 0 mm no plano AZ Médio: (a) Velocidade axial $(\overline{|v|}/U_{tip})$; (b) Velocidade radial $(\overline{|u|}/U_{tip})$; (c) Velocidade média $(\overline{|U|}/U_{tip})$.


Figura 47 – Comparação dos perfis radiais CFD e PIV para posição axial 50 mm no plano AZ Médio: (a) Velocidade axial $(\overline{|v|}/U_{tip})$; (b) Velocidade radial $(\overline{|u|}/U_{tip})$; (c) Velocidade média $(\overline{|U|}/U_{tip})$.

5.3.2. Efeito do plano azimutal AZ PIV na validação dos dados em CFD

Para validar os dados simulados com os dados experimentais, comparamos o campo de velocidade média ($\overline{|U|}/U_{tip}$), conforme Figura 48 e Figura 49 para o modelo de turbulência k- ε STD e PIV. Foram analisados os 6 planos azimutais obtidos nas seções 5.1.2, para o PIV, e 5.2.1, para o CFD. Os planos foram delimitados em uma área comum, considerando as restrições de cada plano durante a gravação das imagens PIV.

Comparando os dados CFD e PIV plano a plano, observou-se que os valores máximos de $\overline{|U|}/U_{tip}$ divergiram nos planos AZ 0° (Figura 48) e AZ 45° (Figura 49) para as duas abordagens. No plano AZ 0°, o modelo k- ε STD apresentou um pico superestimado em 25% em relação ao PIV. Enquanto no plano azimutal AZ 45°, o máximo valor de $\overline{|U|}/U_{tip}$ para o k- ε STD ficou subestimado em 18%. Essas diferenças, entretanto, foram locais, próximas ao impelidor.

Qualitativamente, não é possível inferir quais planos apresentaram melhor concordância entre os dados CFD e PIV. Entretanto, um ponto relevante é que cada plano AZ apresentou um comportamento distinto, indicando que o campo de escoamento é influenciado pela posição da chicana. Em outras palavras o efeito da interação chicana-impelidor é significante, e essa discussão ainda não foi abordada profundamente em literatura, considerando a variação do plano azimutal para os dados PIV em comparação com dados em CFD.

Para compreender o efeito do plano azimutal na validação dos dados em CFD, investigou-se os perfis radiais da velocidade média ($\overline{|U|}/U_{tip}$) extraídos dos 6 planos azimutais a uma distância axial normalizada igual a 25 mm (z/H = 0,27), a partir da linha central do impelidor (Figura 50). Nota-se que para essa altura axial, os modelos RANS tiveram boa concordância em toda extensão radial com os dados PIV, nos 6 planos AZ. Os desvios foram maiores nas extremidades, onde a magnitude da velocidade foi baixa e os modelos de turbulência apresentaram maior amortecimento, e próximo da ponta do impelidor r/R = 0,33, onde ocorreu um deslocamento do pico do CFD em relação ao PIV. O deslocamento do pico de $\overline{|U|}/U_{tip}$ para o CFD foi menor em alguns planos, como o AZ 60° e 75°, nessa posição axial. É importante mencionar que a queda de velocidade no plano AZ 45°, no canto inferior, foi uma propagação do erro sistemático ocorrido devido às ranhuras no tanque de acrílico, explicados no item 5.1.2.



Figura 48 – Comparação CFD e PIV para a velocidade média CFD normalizada $(\overline{|U|}/U_{tip})$ em diferentes planos AZ 0°-30° para o modelo k- ε STD.



Figura 49 – Comparação CFD e PIV para a velocidade média normalizada $(\overline{|U|}/U_{tip})$ em diferentes planos AZ 45°-75° para o modelo k- ε STD.



Figura 50 – Perfis radiais da velocidade média $(|U|/U_{tip})$ para o CFD e PIV na posição axial 25 mm para planos AZ 0°-75°.

Comparando os 6 planos azimutais da Figura 50, a distribuição de $\overline{|U|}/U_{tip}$ foi diferente entre os planos AZ, tanto para o CFD quanto para o PIV. As principais diferenças observadas entre os planos AZ foram o formato da distribuição $\overline{|U|}/U_{tip}$ ao longo da extensão radial e o valor máximo de $\overline{|U|}/U_{tip}$ encontrado em cada plano. Além disso, as diferenças entre os planos azimutais ocorreram principalmente na região de descarga do impelidor, que é a região de interesse para a maioria das validações de modelos em CFD com escoamento em tanques. Para o CFD, esses desvios entre os planos azimutais estão relacionados à posição fixa da pá nos diferentes planos, considerando a modelagem em multiple reference frames (MRF). Para o PIV as diferenças estão relacionadas ao efeito da variação do plano azimutal em relação à posição da chicana. Essas mudanças observadas no escoamento devido à variação dos planos PIV AZ foi bastante similar aos resultados obtidos por Guida et al. (2010), onde as maiores velocidades ocorreram no plano AZ 0° (no artigo, 5°). Para os perfis apresentados pela Figura 50, os maiores valores de velocidade ocorreram no plano AZ 45°, com valor máximo igual $\overline{|U|}/U_{tip} \cong 0,55$ para o PIV. Como a posição da pá foi aleatorizada, as diferenças entre os planos azimutais não podem ser associadas diretamente às estruturas turbulentas ao redor do tanque, como os vórtices (Schäfer et al., 1998; Yianneskis, 2000), mas sim ao efeito da interação chicana-impelidor no campo de velocidade. Essas interações devem ser consideradas na validação numérica com experimental.

Para quantificar as diferenças entre os planos AZ e entender o efeito da variação do plano azimutal na validação dos dados numéricos, foi realizado o desvio da raiz do valor quadrático médio (RMS), conforme Equação 38, para o CFD em relação ao PIV, em toda extensão do perfil radial $0 \le r/R \le 0.7$ de cada plano AZ. Para isso, foram considerados 126 pontos pareados entre as duas abordagens, CFD e PIV, para cada linha amostral (Gómez et al., 2010).

$$RMS = \frac{\left[\frac{1}{N}\sum_{I=1}^{i=N} ((\overline{|U|}/U_{tip})_{CFD} - (\overline{|U|}/U_{tip})_{PIV})^2\right]^{\frac{1}{2}}}{\left[\frac{1}{N}\sum_{I=1}^{i=N} ((\overline{|U|}/U_{tip})_{PIV})^2\right]^{\frac{1}{2}}}$$
(38)

Os valores de RMS para cada plano AZ são apresentados na Tabela 3 para os modelos de turbulência RANS analisados. Além disso, para avaliar a estratégia do uso do plano AZ Médio na validação dos modelos RANS, apresentou-se, na mesma tabela, os valores de RMS para o plano AZ Médio.

Tabela 3 – Raiz do erro quadrático médio (RMS) da velocidade média ($\overline{|U|}/U_{tip}$) perfil radial 25 mm (z/H = 0,27).

	Modelo de Turbulência RANS				- RMS Médio
Plano	k-ε STD	k-ε RNG	k-ε REA	k-ω SST	
0°	0,247	0,314	0,297	0,315	0,293
15°	0,092	0,194	0,153	0,194	0,158
30°	0,221	0,334	0,273	0,409	0,309
45°	0,225	0,087	0,067	0,262	0,160
60°	0,165	0,227	0,204	0,299	0,224
75°	0,164	0,187	0,182	0,228	0,190
AZ médio	0,106	0,191	0,146	0,215	0,165

Como resultado do cálculo do RMS (Tabela 3), observou-se que dois planos tiveram desvios altos, o AZ 0°, com um RMS médio de 0,293 para os quatro modelos, e o AZ 30°, com RMS médio igual a 0,309. Isso implica que para o AZ 0°, por exemplo, esse desvio foi em torno de 45% maior que o valor de RMS médio para o AZ 15° e AZ 45°, que apresentaram os menores RMS, e um desvio médio muito similar (44% maior) que o plano AZ médio (Figura 45-c). Essas observações indicam que o efeito da variação do plano azimutal impacta substancialmente na validação das simulações em CFD. Além disso, fica evidente que a média dos planos AZ é muito boa, uma vez que minimizou os desvios relativos aos planos analisados, apresentando uma validação muito próxima dos melhores planos avaliados nessa linha.

Para entender o efeito da variação do plano azimutal na validação dos dados em CFD, essa análise é estendida para regiões acima dessa linha analisada, em 0 mm (mediana do impelidor), na região de recirculação (Figura 51). Também foram investigadas linhas abaixo da posição 25 mm até o limite captado pelo PIV, 50 mm (Figura 54) e 65 mm (Figura 55). Esses dados compreendem toda extensão da região de descarga do impelidor. Os resultados para os RMS calculados para as regiões 0 mm e 50 mm são apresentados nas Figura 52 e 53, respectivamente. Essas regiões serão utilizadas para discutir as tendências dos desvios entre o CFD e PIV para os diferentes planos azimutais.



Figura 51 – Perfis radiais da velocidade média $(\overline{|U|}/U_{tip})$ para o CFD e PIV na posição axial 0 mm para planos AZ 0°-75°.

Na região de recirculação, os modelos RANS apresentaram boa concordância para a maioria dos planos AZ, desde à ponta do impelidor até próximo à parede (Figura 51). Para compreender as diferenças entre o CFD e PIV para cada plano, compararam-se os valores de RMS para os 4 modelos nos 6 planos azimutais e plano AZ Médio (Figura 52). Diferente da posição axial 25 mm apresentada acima (Tabela 3), os planos AZ com menores desvios foram 60° e 75°, com valores de RMS abaixo de 0,05 para maioria dos modelos (Figura 52). Contudo, similarmente, os planos AZ 0° e 30° continuaram apresentando os maiores desvios do CFD em relação ao PIV, próximo de 30%.



Figura 52 – Raiz do erro quadrático médio (RMS) da velocidade média $(\overline{|U|}/U_{tip})$ perfil radial 0 mm (z/H = 0.34).

Ainda que os planos AZ 0° e 30° obtiveram desvios altos, os valores de RMS para o plano AZ médio acompanhou a tendência dos melhores planos, AZ 60° e 75°. Na literatura, seja por LDA/LDV ou PIV, as medidas em *ensemble average* são aquisitadas geralmente para apenas um plano, sendo eles 0° ou 45° (entre duas chicanas consecutivas), conforme discutido por Schäfer et al. (1998); Unadkat et al. (2008); Coroneo et al. (2011) e Alberini et al. (2017). De alguma maneira, isso pode limitar as análises do escoamento nos tanques, uma vez que o efeito do plano azimutal na validação em CFD/RANS foi significativo e o plano 0° apresentou desvios altos. Com a abordagem apresentada neste trabalho, obteve-se resultados mais satisfatórios com o plano AZ Médio, minimizando os efeitos dos planos azimutais com o plano, que inclui o efeito de toda a região de simetria do tanque.

A Figura 53 apresenta os valores de RMS para os dados na posição axial 50 mm abaixo da linha central do impelidor. De forma geral, os desvios encontrados nessa região para os modelos em CFD foram maiores, em média 30%. Comparando com os valores de RMS para as linhas axiais 25 mm (Tabela 3) e 0 mm (Figura 53) percebe-se que o desvio aumentou com o deslocamento dos perfis radiais para posições axiais próximas ao fundo do tanque para todos os modelos de turbulência RANS analisados. Isso fica evidente com a visualização dos perfis para as linhas 50 mm (Figura 54) e 65 mm (Figura 55), principalmente, em relação ao aumento do deslocamento do pico entre CFD e PIV nesses perfis radiais.



Figura 53 – Raiz do erro quadrático médio (RMS) da velocidade média $(|\overline{U}|/U_{tip})$ perfil radial 0 mm (z/H = 0,20).



Figura 54 – Perfis radiais da velocidade média ($\overline{|U|}/U_{tip}$) para o CFD e PIV na posição axial 50 mm (z/H = 0,20) para diferentes planos azimutais 0°-75



Figura 55 – Perfis radiais da velocidade média ($\overline{|U|}/U_{tip}$) para o CFD e PIV na posição axial 65 mm (z/H = 0,16) para diferentes planos azimutais 0°-75°.

Nessas regiões, os desvios, de forma geral, foram maiores, principalmente na região do jato entre $0,1 \le r/R \le 0,3$. Outra constatação importante foi que as diferenças entre os modelos em CFD nas linhas 50 mm e 65 mm aumentaram em relação à linha 0 mm, conforme indicado pelos valores de RMS para a linha de 50 mm (Figura 53). Neste perfil, o modelo k- ε STD obteve os menores desvios, com valores de RMS entre $0,1 \le RMS \le 0,25$, dependendo do plano AZ. Os planos AZ 0° e 30° continuaram com o RMS alto praticamente para todas as linhas axiais analisadas, de 0 mm a 65 mm, com valores de RMS próximo de 30%.

Pela análise dos perfis apresentados (Figuras 50-55) e dos seus RMS calculados para cada plano AZ (Tabela 3), verifica-se que a validação CFD com PIV a partir de um único plano pode levar a desvios altos. Dependendo do plano escolhido, a divergência entre o CFD e PIV é maior, e assim, a validação do modelo numérico fica comprometida ou limitada a apenas uma análise local. Outro ponto é que cada experimento é passível de erros, seja pela dificuldade de acesso óptico, propagação das reflexões de chicanas e impelidor no escoamento e outros tipos de fontes ruidosas. Mais um problema relacionado ao uso de um único plano é a incidência de variações no campo médio ligadas a macroinstabilidades (Roussinova et al., 2000; Haringa et al., 2018). Dessa maneira, o uso de múltiplos planos é interessante para reduzir as fontes ruidosas atribuídas em alguns planos e às variações não estacionárias do escoamento em tanques. Assim, recomenda-se o uso de mais de um plano AZ para validação dos dados em CFD com PIV e o uso da estratégia do plano AZ Médio para reduzir as discrepâncias plano a plano. Essa recomendação é relevante principalmente para escoamentos mais complexos, os quais a interação impelidor-chicana pode ser diferente e/ ou mais intensificada que o padrão encontrado para a água, apresentado neste trabalho (Aubin et al., 2004; Liu et al., 2016).

Verificou-se, ainda, que próximo ao plano 0° podem ocorrer reflexões na imagem processada, tanto na região do impelidor, quanto próximo à chicana quando se aplica medidas em *ensemble average* (Unadkat et al., 2008, 2011). Dessa maneira, recomendações são feitas para deslocar o plano de luz da chicana, de forma que esta seja posicionada atrás do feixe de luz laser. Neste trabalho, deslocou-se o feixe de luz em aproximadamente 1°-5° da chicana, garantindo o acesso óptico necessário e minimizando a projeção dos reflexos da imagem do defletor.

5.3.3. Efeito da posição axial na validação dos modelos CFD/RANS para o campo de escoamento médio.

Os resultados dos perfis apresentados acima (Figuras 50-55), associados aos seus RMS calculados (Tabela 3), indicaram uma tendência do aumento do desvio CFD/PIV com o aumento da posição axial em relação ao impelidor. Para averiguar essa tendência, os dados RMS foram mensurados para o plano médio AZ para cada linha axial, variando entre 0 mm a 65 mm (Figura 56). O uso do plano AZ Médio para essa análise foi interessante, uma vez que os valores de RMS dos modelos RANS em relação aos dados PIV foram menores para a média dos planos AZ.



Figura 56 – Raiz do erro quadrático médio (RMS) da velocidade média $(\overline{|U|}/U_{tip})$ para o plano AZ Médio em diferentes posições axiais.

É possível observar, a partir da Figura 56, para a maioria dos modelos RANS analisados, um aumento do desvio com o aumento da distância axial em relação a linha central do impelidor. Além disso, os menores desvios ocorreram em 0 mm, na região de recirculação. Nessa região, prevalece o escoamento médio, e, dessa forma, a isotropia local existe (Murthy and Joshi, 2008). Enquanto, nas outras regiões prevalece o comportamento anisotrópico, e assim os desvios são maiores, principalmente próximo ao fundo do tanque (65 mm), onde são encontradas as macroestruturas do fluxo turbulento, como o *looping* do jato principal.

Em relação aos modelos de turbulência RANS, o modelo k- ε STD obteve os menores desvios RMS, na maior parte da região de descarga do impelidor do PBT 45 de 4 pás inclinadas. Resultado similar foi encontrado por Jaworski et al. (2001); Jaworski e Zakrzewska (2002) ao comparar 6 modelos de turbulência baseado em RANS. O modelo k- ε STD apresentou a melhor performance para a velocidade média, comparando com medidas em *ensemble average* aplicadas em LDA para o PBT 45 de 6 pás inclinadas. Considerando toda a região do jato, as maiores discrepâncias ocorreram para o modelo k- ε RNG. O modelo k- ε REA, apresentou maior estabilidade do desvio RMS em relação ao PIV. Enquanto o modelo k- ω SST, superestimou a velocidade média na região de descarga do impelidor, entre 10 $\leq z \leq 25$ mm.

O modelo k- ω SST obteve melhor desempenho nas regiões extremas, em 0 mm, devido ao tratamento desse modelo próximo à parede do impelidor (Li et al., 2004; Spogis and Nunhez, 2009); e próximo ao *looping* do jato (65 mm), onde reportaram melhor modelagem do fluxo na linha de curvatura próximo à 65 mm (Menter et al., 2003; Singh et al., 2011).

5.3.4. Energia cinética turbulenta (TKE)

A energia cinética turbulenta (TKE) foi obtida em três regiões distintas: 0 mm (z/H = 0.34) (Figura 57), 25 mm (z/H = 0.27) (Figura 58), e 65 mm (z/H = 0.16) (Figura 59). A TKE foi normalizada na seguinte relação: $\overline{|TKE|}/U_{tip}^2$.

Para as três regiões analisadas, a energia a $\overline{|TKE|}/U_{tip}^2$ predita foi subestimada para os quatros modelos RANS analisados em relação ao PIV. Os desvios foram menores na região de recirculação (0 mm), onde prevaleceu os efeitos isotrópicos do escoamento turbulento, e os níveis de turbulência foram baixos $0,005 \le \overline{|TKE|}/U_{tip}^2 \le 0,06$. Na região de descarga do impelidor, por outro lado, os desvios foram até 4 vezes dependendo do plano AZ analisado. Sugere-se que essa região apresente maiores efeitos anisotrópicos e por isso os modelos de duas equações, como o *Standard k-\varepsilon*, não conseguem computar os efeitos da anisotropia nas maiores escalas de turbulência (Li et al., 2011a; Wang et al., 2018). Próximo ao fundo, em 65 mm, os níveis de turbulência foram menores para o experimental, mas os modelos em CFD continuaram com altos níveis de subestimação em relação ao PIV.

Referente à variação do plano azimutal na distribuição de $\overline{|TKE|}/U_{tip}^2$, observouse, para o PIV, uma tendência de aumento gradual da TKE do plano azimutal 0° até o plano azimutal 45°, com posterior redução do nível de turbulência nos planos AZ 60° e 75°. Isso ocorreu principalmente para perfis radiais na posição axial 25 mm, apresentado na Figura 58. Para os dados PIV, a variação da TKE pela mudança do plano AZ foi de até 76 % para o valor máximo de $\overline{|TKE|}/U_{tip}^2$, obtido no plano AZ 45° (Figura 58). Para todas as regiões, o plano AZ 45° apresentou maiores valores do máximo de $\overline{|TKE|}/U_{tip}^2$ para o experimental, enquanto os planos PIV AZ 60° e 75° apresentaram os menores máximos de $\overline{|TKE|}/U_{tip}^2$. Para os dados em CFD, no entanto, essa diferença entre os planos AZ foi mais sutil, cujos valores máximos de $\overline{|TKE|}/U_{tip}^2$ oscilaram dentro de uma faixa igual a 0,15 $\leq \overline{|TKE|}/U_{tip}^2 \leq 0,35$.

È importante discutir que a comparação quantitativa entre os dados PIV e CFD para os resultados para a TKE possui algumas ressalvas para a abordagem de medidas PIV em *ensemble-average*. Nessa abordagem em *ensemble-average*, foi relatado que os níveis de turbulência são superestimados devido ao fato que os resultados PIV em *ensemble-average* contabilizam a periodicidade do escoamento devido à passagem das pás (Schäfer et al., 1998; Chung et al., 2009; Gabriele et al., 2009; Alberini et al., 2017). Por meio desses estudos, entende-se que essa superestimação pode ocorrer em apenas alguns planos AZ. Além disso, o efeito da periodicidade pode ser dependente da geometria do impelidor (Gabriele et al., 2009; Lane, 2017) e do grau de agitação (velocidade de rotação) (Nikiforaki et al., 2003; Huchet et al., 2009). Estudos recentes sugerem que a análise da TKE deve ser feita pela separação dos efeitos da periodicidade da pá (Haringa et al., 2018; Rave et al., 2020) do nível de turbulência total do escoamento. Essa segregação não se aplica para os dados em CFD em estado estacionário, pois esses dados naturalmente não incluem as componentes periódicas ou não estacionárias da energia cinética turbulenta (Nikiforaki et al., 2003; Ducci and Yianneskis, 2007; Delafosse et al., 2008; Zamiri and Chung, 2017).

Algumas técnicas de segregação podem ser enumeradas: decomposição ortogonal apropriada (POD) (Hasal et al., 2008; de Lamotte et al., 2018; Jin and Fan, 2020), análise da densidade espectral com correção do RMS periódico (Haringa et al., 2018) e decomposição em modo dinâmico (DMD) (de Lamotte et al., 2018). Dessa forma, sugere-se que os efeitos da frequência e magnitude das macroinstabilidades do escoamento em um tanque agitado pode superestimar os níveis de turbulência e, portanto, também devem quantificados (Nikiforaki et al., 2003; Roy and Acharya, 2012). Dessa maneira, a tendência de variação da TKE observada não pode ser atribuída à variação do plano azimutal em relação à chicana sem essas análises prévias.



Figura 57 – Perfis radiais da energia cinética turbulenta $(\overline{|TKE|}/U_{tip}^2)$ para o CFD e PIV na posição axial 0 mm (z/H = 0.34) para diferentes planos azimutais 0°-75°.



Figura 58 – Perfis radiais da energia cinética turbulenta $(\overline{|TKE|}/U_{tip}^2)$ para o CFD e PIV na posição axial 25 mm (z/H = 0,27) para diferentes planos azimutais 0°-75°.



Figura 59 – Perfis radiais da energia cinética turbulenta $(\overline{|TKE|}/U_{tip}^2)$ para o CFD e PIV na posição axial 65 mm (z/H = 0,16) para diferentes planos azimutais 0°-75°.

Por outro lado, pode-se analisar qualitativamente os campos de TKE PIV e CFD. Seguindo a comparação qualitativa dos campos de velocidade, comparou-se plano a plano os dados CFD e PIV para a TKE normalizada (Figuras 60 e 61). Considerou-se o modelo o modelo k-ε STD para o CFD, pois ele apresentou maiores níveis de energia cinética turbulenta em boa parte dos perfis radiais apresentados acima (Figuras 57-59).

Pelas Figuras 60 e 61 observa-se que em cada plano azimutal, variando entre 0°-75°, os dados em CFD acompanharam a tendência de produção de energia cinética descrita pelo experimental PIV. Entretanto, todos os planos simulados foram bastante subestimados em relação aos planos AZ PIV. Para o plano AZ 0°, por exemplo, a energia cinética turbulenta produzida concentrou-se ao redor do impelidor, distribuindo de forma descendente ao logo da região de descarga do impelidor. Até o plano AZ 45° a $\overline{|TKE|}/U_{tip}^2$ distribuiu-se ao longo dessa região de bombeamento descendente do impelidor PBT, intensificando à medida que o plano AZ distanciou da chicana (0°-45°), e voltou a concentrar ao redor do impelidor para os planos AZ 60° e 75°, logo atrás da chicana adjacente. Dessa maneira, mesmo que os níveis estejam superestimados para alguns planos e a quantificação dessa superestimação não tenha sido realizada neste trabalho, pode-se observar claramente uma tendência do efeito da variação da $\overline{|TKE|}/U_{tip}^2$ pela oscilação do plano azimutal. E, consequentemente, essa tendência é um indicativo que o efeito da interação chicana-impelidor na produção de energia cinética turbulenta é significativo.

O plano AZ Médio para o campo de TKE normalizada foi representado para cada modelo de turbulência RANS com o experimental PIV (Figura 62). Nota-se que a distribuição de $\overline{|TKE|}/U_{tip}^2$ para o modelo k- ε STD se aproximou mais dos dados PIV que os outros modelos, que tiveram a $\overline{|TKE|}/U_{tip}^2$ concentrada em uma posição radial, logo abaixo da pá do impelidor PBT 45. Além disso, o modelo k- ε STD apresentou os maiores níveis de TKE, comparado aos outros modelos RANS analisados neste trabalho Figura 62. Essa observação com diferentes modelos de turbulência RANS já foi discutida em literatura recente por Yáñez-Varela et al. (2020) considerando um impelidor do tipo anel de eletrodo dinâmico rotativo (RRE). Neste trabalho observou-se que embora os níveis de turbulência para o modelo k- ε STD sejam maiores, outros modelos, como o k- ε REA, representaram melhor a física do escoamento rotativo, principalmente em regiões de recirculação produzida pela interação chicanaimpelidor. Segundo os autores, o fator limitante da performance desses modelos foi a componente tangencial obtida a partir de medidas planos radiais extraídos do CFD em MRF.



Figura 60 – Campo de energia cinética turbulenta $(\overline{|TKE|}/U_{tip}^2)$ para o CFD e PIV para diferentes planos azimutais 0°-30°.



Figura 61 – Campo de energia cinética turbulenta $(\overline{|TKE|}/U_{tip}^2)$ para o CFD e PIV para diferentes planos azimutais 45°-75° para o modelo k- ε STD.



Figura 62 – Comparação CFD e PIV para energia cinética turbulenta $(\overline{|TKE|}/U_{tip}^2)$. (a) k-ε STD; (b) k-ε RNG; (c) k-ε REA; (d) k-ω SST; (e) PIV.

5.3.5. Influência das funções de interpolação na predição do escoamento em tanques agitados

Tendo em vista o melhor desempenho do modelo k- ε STD nos planos azimutais analisados, o efeito da discretização numérica dos termos convectivos, momento, k e ε , para esse modelo foi avaliado. Assim, conforme apresentado na Figura 63, obtiveram-se os perfis radiais para a energia cinética turbulenta a partir de três métodos de discretização numérica. Essa análise foi realizada para entender qual esquema numérico é mais eficiente para reproduzir os parâmetros do escoamento turbulento em tanques agitados, considerando a comparação com dados experimentais PIV Tendo em vista o melhor desempenho do modelo k- ε STD nos planos azimutais analisados, o efeito da discretização numérica dos termos convectivos, momento, k e ε , para esse modelo foi avaliado. Assim, conforme apresentado na Figura 63, obtiveram-se os perfis radiais para a energia cinética turbulenta a partir de três métodos de discretização numérica. Essa análise foi realizada para entender qual esquema numérico é mais eficiente para reproduzir os parâmetros do escoamento turbulenta a partir de três métodos de discretização numérica. Essa análise foi realizada para entender qual esquema numérico é mais eficiente para reproduzir os parâmetros do escoamento turbulento em tanques agitados, considerando a comparação com dados experimentais PIV (J. Aubin et al., 2004; Deglon and Meyer, 2006; Coroneo et al., 2011b; Lane, 2017).

Para essa análise, empregaram-se as seguintes funções de interpolação, conforme explicado no item 4.4: esquema híbrido (*upwind-central*) (Brucato et al., 1998; Sommerfeld and Decker, 2004; Rave et al., 2020) e discretização de segunda ordem *linear Upwind*, e *quadratic upwind differencing* (QUICK). As análises foram baseadas nos perfis de $\overline{|TKE|}/U_{tm}^2$ extraídos nos planos AZ Médio na posição axial 0 mm, 25 mm e 65 mm.

Nas três regiões do tanque analisadas, os perfis de $\overline{|TKE|}/U_{tip}^2$ indicaram diferença significativa entre o esquema híbrido em relação às funções *Upwind* de segunda ordem e QUICK. Para a região de descarga do impelidor (Figura 63-b), o esquema híbrido subestimou a TKE predita em 30% em relação ao esquema numérico *Upwind* de segunda ordem, enquanto o esquema de discretização QUICK apresentou um desvio de 6% em relação ao Upwind para a $\overline{|TKE|}/U_{tip}^2$. Além disso, é importante mencionar que os erros foram maiores nas regiões onde a anisotropia é predominante, uma vez que para a linha radial 0 mm, o desvio entre os esquemas numéricos foi baixo, e os três métodos concordaram em boa parte da extensão radial nessa região.

Dessa maneira, o método *Upwind* de segunda ordem forneceu maiores níveis de turbulência $\overline{|TKE|}/U_{tup}^2$, além de ter sido mais robusto e resultou em menor tempo computacional em relação ao QUICK (aproximadamente 20% menor). O esquema híbrido, apesar de ter apresentado os menores níveis de turbulência, convergiu com o menor tempo computacional, com 8000 iterações, em contraposição a 10000 iterações para o *Upwind* e 11000 iterações para o método QUICK. Em literatura, os esquemas de segunda ordem *Upwind* e QUICK são mais empregados (J. Aubin et al., 2004; Deglon and Meyer, 2006; Coroneo et al., 2011a; Alonzo-Garcia et al., 2019).



Figura 63 – Comparação dos esquemas de discretização para o k- ε STD. (a) Radial 0 mm (z/H = 0,34); (b) Radial 25 mm (z/H =0,27); (c) Radial 65 mm (z/H=0,16).

CAPÍTULO 6:

6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES

6.1. CONCLUSÕES

O estudo do escoamento em tanques agitados por PIV e CFD tem sido muito relevante para compreender o escoamento complexo nesses tanques e otimizar a eficiência dos processos de agitação e mistura. Em especial, o efeito da variação do plano azimutal em tanques com chicanas tem se mostrado relevante nos últimos anos. Entretanto, esse efeito da posição da chicana e a comparação de dados experimentais PIV e simulações CFD ainda não tinham sido discutidos profundamente, o que justifica o tema central dessa dissertação.

Nesse contexto, foi proposto o estudo do escoamento turbulento da água em um tanque agitado por um PBT 45 por meio da técnica PIV e simulações em CFD para avaliar a variação da posição azimutal do plano de medida na validação dos dados simulados por diferentes modelos RANS. As principais conclusões foram as seguintes:

• A variação do plano azimutal de medida impactou em mudanças significativas no campo de escoamento médio. Essas mudanças ocorreram principalmente na região de descarga do impelidor, indicando que o efeito da posição da chicana deve ser considerado nas medidas experimentais PIV.

• A comparação plano a plano entre os dados em CFD com as medidas PIV levou à conclusão de que a validação dos dados simulados é dependente do plano azimutal analisado. Os maiores desvios foram observados para os planos AZ 0° e 30°. Essa observação é importante, uma vez que vários trabalhos analisam apenas um único plano de medida, sendo ele 0° ou 45°, em sua maioria.

• Foi observado que o a média dos planos azimutais (plano AZ Médio) minimizou os erros locais dos planos AZ individuais, apresentando-se como uma boa estratégia para validar as simulações com PIV.

 Com relação à validação dos modelos de turbulência RANS, o modelo *Standard* k-ε apresentou o melhor desempenho, concordando com o PIV qualitativamente e quantitativamente, considerando a variação do plano azimutal. • Com relação ao efeito da variação do plano azimutal na validação dos dados em CFD, conclui-se que este efeito é impactado pela posição axial ao longo do jato do impelidor. Próximo ao impelidor, os desvios entre o CFD e PIV foram menores, aumentando gradativamente até o fundo do tanque. Além disso, alguns modelos de turbulência foram mais sensíveis à essa variação, como o k- ϵ RNG e k- ω SST. Os modelos k- ϵ REA e k- ϵ STD apresentaram os menores desvios diante dessas variáveis.

• A análise da TKE por PIV e CFD mostrou que o CFD segue a tendência dos dados experimentais, embora, como esperado, os níveis de turbulência para os modelos RANS foram bastante subestimados. Para as medidas PIV, foi observado uma variação do campo de TKE pela variação do plano azimutal, porém a quantificação desses desvios deve considerar o efeito da periodicidade das pás do impelidor.

6.2. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Diante às conclusões deste trabalho, as principais sugestões são propostas:

- Obter medidas em ângulo resolvido para alguns planos azimutais e avaliar se as duas abordagens, ângulo resolvido e *ensemble-average* fornecem de fato os mesmos resultados para o campo de velocidade.
- Empregar análise de sinal para quantificar a componente periódica da energia cinética turbulenta e avaliar esse efeito para diferentes impelidores e rotações.
- Avaliar as simulações em regime transiente e fazer as análises sugeridas por trabalhos recentes como (Zamiri and Chung, 2017; Rave et al., 2020).
- Avaliar modelos de turbulência híbridos RANS-LES.

Avaliar o problema da superestimação do número de potência experimental para a água.

- Achouri, R., Mokni, I., Mhiri, H., Bournot, P., 2012. A 3D CFD simulation of a self inducing Pitched Blade Turbine Downflow. Energy Conversion and Management 64, 633–641. https://doi.org/10.1016/j.enconman.2012.06.005
- Alberini, F., Liu, L., Stitt, E.H., Simmons, M.J.H., 2017. Comparison between 3-D-PTV and 2-D-PIV for determination of hydrodynamics of complex fluids in a stirred vessel. Chemical Engineering Science 171, 189–203. https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.05.034
- Alonzo-Garcia, A., Mendoza-Escamilla, V.X., Martinez-Delgadillo, S.A., Gonzalez-Neria, I., Del C Gutiérrez-Torres, C., Jiménez-Bernal, J.A., 2019. On the performance of different rans based models to describe the turbulent flow in an agitated vessel using non-structured grids and PIV validation. Brazilian Journal of Chemical Engineering 36, 361–382. https://doi.org/10.1590/0104-6632.20190361s20180091
- Amaral, R.L., 2013. Uso da Velocimetria por Imagem de Partícula (PIV) na indústria do petróleo. Universidade Federal de Pernambuco.
- Amaral, R.L., Forero, D.I.S., Taranto, O.P., Mori, M., Campinas, U.E. De, 2014. Efeito da função de mapeamento na distribuição da velocidade da fase l~iquida na seção de uma coluna de bolhas por PIV, in: XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química. pp. 1–8.
- Andersson, B., Engineering, C., Andersson, R., Engineering, C., Uni-, C., Hightech, E., Resources, E.D., Mortensen, M., Defence, N., Sudiyo, R., Mada, G., 2012. Computational Fluid Dynamics for Engineers. Cambridge University Press, New York.
- Aubin, J., Fletcher, D.F., Xuereb, C., 2004. Modeling turbulent flow in stirred tanks with CFD : the influence of the modeling approach , turbulence model and numerical scheme. Experimental Thermal and Fluid Science 28, 431–445. https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2003.04.001
- Aubin, J., Mavros, P., Fletcher, D.F., Bertrand, J., Xuereb, C., 2001. Effect of axial agitator configuration (up-pumping, down-pumping, reverse rotation) on flow patterns generated

in stirred vessels. Chemical Engineering Research and Design 79, 845–856. https://doi.org/10.1205/02638760152721046

- Aubin, Sauze, Bertrand, Fletcher, Xuereb, 2004. PIV measurements of flow in an aerated tank stirred by a down- and an up-pumping axial flow impeller. Experimental Thermal and Fluid Science 28, 447–456. https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2001.12.001
- Bakker, A., Myers, K.J., Ward, R.W., Lee, C.K., 1996. The laminar and turbulent flow pattern of a pitched blade turbine. Chemical Engineering Research and Design.
- Basavarajappa, M., Draper, T., Toth, P., Ring, T.A., Miskovic, S., 2015. Numerical and experimental investigation of single phase flow characteristics in stirred tanks using Rushton turbine and flotation impeller. Minerals Engineering 83, 156–167. https://doi.org/10.1016/j.mineng.2015.08.018
- Bashiri, H., Alizadeh, E., Bertrand, F., Chaouki, J., 2016. Investigation of turbulent fluid flows in stirred tanks using a non-intrusive particle tracking technique. Chemical Engineering Science 140, 233–251. https://doi.org/10.1016/j.ces.2015.10.005
- Beghini, L.L., Hough, P.D., 2016. Sandia Verification and Validation Challenge Problem : A PCMM-Based Approach to Assessing Prediction Credibility. Journal of Verification, Validation and Uncertainty Quantification 1, 1–10. https://doi.org/10.1115/1.4032369
- Bern, M., Plassmann, P., 2000. Structured Mesh. Handbook of Computational Geometry.
- Bhattacharya, S., Kresta, S.M., 2004. Surface feed with minimum by-product formation for competitive reactions 82, 1153–1160.
- Bittorf, K.J., Kresta, S.M., 2000. Active volume of mean circulation for stirred tanks agitated with axial impellers. Chemical Engineering Science 55, 1325–1335.
- Brucato, A., Ciofalo, M., Grisafi, F., Micale, G., 1998. Numerical prediction of flow fields in baffled stirred vessels: A comparison of alternative modelling approaches. Chemical Engineering Science 53, 3653–3684. https://doi.org/10.1016/S0009-2509(98)00149-3

- Bugay, S., Escudié, R., Liné, A., 2002. Experimental analysis of hydrodynamics in a axially agitated tank. AIChE Journal 48, 463–475. https://doi.org/10.1002/aic.690490306
- Cabrales-Navarro, F.A., Alvarez-Castro, H.C., Nunhez, J.R., Spogis, N., Ito, A.S., Martignoni, W., 2011. Computational Fluid Dynamic study of mixing in large scale diesel storage vessels. AIChE Annual Meeting, Conference Proceedings.
- Celik, I.B., Ghia, U., Roache, P.J., Freitas, C.J., 2008. Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications, Journal of Fluids Engineering, Transactions of the ASME. https://doi.org/10.1115/1.2910144
- Chapple, D., Kresta, S.M., Wall, A., Afacan, A., 2002. The effect of impeller and tank geometry on power number for a pitched blade turbine. Chemical Engineering Research and Design 80, 364–372. https://doi.org/10.1205/026387602317446407
- Chung, K.H.K., Barigou, M., Simmons, M.J.H., 2007. Reconstruction of 3-D flow field inside miniature stirred vessels using a 2-D PIV technique. Chemical Engineering Research and Design 85, 560–567. https://doi.org/10.1205/cherd06165
- Chung, K.H.K., Simmons, M.J.H., Barigou, M., 2009. Angle-resolved particle image velocimetry measurements of flow and turbulence fields in small-scale stirred vessels of different mixer configurations. Industrial and Engineering Chemistry Research 48, 1008– 1018. https://doi.org/10.1021/ie8008204
- Coroneo, M., Montante, G., Paglianti, A., Magelli, F., 2011a. CFD prediction of fluid flow and mixing in stirred tanks: Numerical issues about the RANS simulations. Computers and Chemical Engineering 35, 1959–1968. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2010.12.007
- Coroneo, M., Montante, G., Paglianti, A., Magelli, F., 2011b. CFD prediction of fluid flow and mixing in stirred tanks: Numerical issues about the RANS simulations. Computers and Chemical Engineering 35, 1959–1968. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2010.12.007

- Dabiri, D., 2006. Cross-Correlation Digital Particle Image Velocimetry-A Review, Department of Aeronautics & Astronautics Box 352400 University of Washington.
- de Lamotte, A., Delafosse, A., Calvo, S., Toye, D., 2018. Identifying dominant spatial and time characteristics of flow dynamics within free-surface baffled stirred-tanks from CFD simulations. Chemical Engineering Science 192, 128–142. https://doi.org/10.1016/j.ces.2018.07.024
- Deen, N.G., Hjertager, B.H., 2002. Particle image velocimetry measurements in an aerated stirred tank. Chemical Engineering Communications 189, 1208–1221. https://doi.org/10.1080/00986440213881
- Deen, N.G., Solberg, T., Hjertager, B.H., 2008. Flow Generated by an Aerated Rushton Impeller: Two-phase PIV Experiments and Numerical Simulations. The Canadian Journal of Chemical Engineering 80, 1–15. https://doi.org/10.1002/cjce.5450800406
- Deglon, D.A., Meyer, C.J., 2006. CFD modelling of stirred tanks: Numerical considerations. Minerals Engineering 19, 1059–1068. https://doi.org/10.1016/j.mineng.2006.04.001
- Delafosse, A., Line, A., Morchain, J., Guiraud, P., 2008. LES and URANS simulations of hydrodynamics in mixing tank : Comparison to PIV experiments. Chemical Engineering Research and Design 6, 1322–1330. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2008.07.008
- Driss, Z., Bouzgarrou, G., Chtourou, W., Kchaou, H., Abid, M.S., 2010. Computational studies of the pitched blade turbines design effect on the stirred tank flow characteristics. European Journal of Mechanics, B/Fluids 29, 236–245. https://doi.org/10.1016/j.euromechflu.2010.01.006
- Ducci, A., Yianneskis, M., 2007. Vortex Tracking and Mixing Enhancement in Stirred Processes. AIChE Journal 53, 305–315. https://doi.org/10.1002/aic
- Ducci, A., Yianneskis, M., 2006. Turbulence kinetic energy transport processes in the impeller stream of stirred vessels. Chemical Engineering Science 61, 2780–2790. https://doi.org/10.1016/j.ces.2005.09.020

- Egorov, Y., Menter, F., Lechner, R., Cokljat, D., 2010. The Scale-Adaptive Simulation Method for Unsteady Turbulent Flow Predictions. Part 2: Application to Complex Flows. Flow, Turbulence and Combustion 85, 139–165.
- Eng, M., Rasmuson, A., 2015. Large Eddy Simulation of the influence of solids on macro instability frequency in a stirred tank. Chemical Engineering Journal 259, 900–910. https://doi.org/10.1016/j.cej.2014.08.056
- Fořt, I., 2011. On hydraulic efficiency of pitched blade impellers. Chemical Engineering Research and Design 89, 611–615. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2010.10.005
- Freitas, C.J., 2020. Standards and Methods for Verification, Validation, and Uncertainty Assessments in Modeling and Simulation. Journal of Verification, Validation and Uncertainty Quantification 5, 1–9. https://doi.org/10.1115/1.4047274
- Gabriele, A., Nienow, A.W., Simmons, M.J.H., 2009. Use of angle resolved PIV to estimate local specific energy dissipation rates for up- and down-pumping pitched blade agitators in a stirred tank. Chemical Engineering Science 64, 126–143. https://doi.org/10.1016/j.ces.2008.09.018
- Ge, C.Y., Wang, J.J., Gu, X.P., Feng, L.F., 2014. CFD simulation and PIV measurement of the flow field generated by modified pitched blade turbine impellers. Chemical Engineering Research and Design 92, 1027–1036. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2013.08.024
- Gillissen, J.J.J., Van den Akker, H.E.A., 2012. Direct Numerical Simulation of the Turbulent Flow in a Baffled Tank Driven by a Rushton Turbine. American Institute of Chemical Engineers AIChE Journal 58, 3878–3890. https://doi.org/10.1002/aic
- Gimbun, J., 2012. Detached Eddy Simulation on the Turbulent Flow in a Stirred Tank. AIChE Journal 58. https://doi.org/10.1002/aic
- Gimbun, J., Rielly, C.D., Nagy, Z.K., Derksen, J.J., 2012. Detached Eddy Simulation on the Turbulent Flow in a Stirred Tank. AIChE Journal 59, 3224-. https://doi.org/10.1002/aic

- Gómez, C., Bennington, C.P.J., Taghipour, F., 2010. Investigation of the flow field in a rectangular vessel equipped with a side-entering agitator. Journal of Fluids Engineering, Transactions of the ASME 132, 0511061–05110613. https://doi.org/10.1115/1.4001575
- Gong, H., Huang, F., Li, Z., Gao, Z., Derksen, J.J., 2018. Mechanisms for drawdown of floating particles in a laminar stirred tank fl ow. Chemical Engineering Journal 346, 340–350. https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.04.011
- González-Neria, I., Alonzo-Garcia, A., Martínez-Delgadillo, S.A., Mendoza-Escamilla, V.X., Yáñez-Varela, J.A., Verdin, P.G., Rivadeneyra-Romero, G., 2019. PIV and dynamic LES of the turbulent stream and mixing induced by a V-grooved blade axial agitator. Chemical Engineering Journal 374, 1138–1152. https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.06.033
- Guida, A., Nienow, A.W., Barigou, M., 2010. The effects of the azimuthal position of the measurement plane on the flow parameters determined by PIV within a stirred vessel. Chemical Engineering Science 65, 2454–2463. https://doi.org/10.1016/j.ces.2009.12.012
- Haringa, C., Vandewijer, R., Mudde, R.F., 2018. Inter-compartment interaction in multiimpeller mixing: Part I. Experiments and multiple reference frame CFD. Chemical Engineering Research and Design 136, 870–885. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.06.005
- Harten, A., 1982. High-resolution schemes for hyperbolic conservation laws. Journal of Computational Physics 49, 357–393. https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0363(19960830)23:4<309::AID-FLD410>3.0.CO;2-Z
- Hasal, P., Jahoda, M., Fořt, I., 2008. Macro-instability: A chaotic flow component in stirred tanks. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 366, 409–418. https://doi.org/10.1098/rsta.2007.2098
- Honkanen, M., Nobach, H., 2005. Background extraction from double-frame PIV images. Experiments in Fluids 38, 348–362. https://doi.org/10.1007/s00348-004-0916-x

Huchet, F., Liné, A., Morchain, J., 2009. Evaluation of local kinetic energy dissipation rate in

the impeller stream of a Rushton turbine by time-resolved PIV. Chemical Engineering Research and Design 87, 369–376. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2008.11.012

- Jahoda, M., Tomášková, L., Moštěk, M., 2009. CFD prediction of liquid homogenisation in a gas-liquid stirred tank. Chemical Engineering Research and Design 87, 460–467. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2008.12.006
- Jaworski, Z., Dyster, K.N., Nienow, A.W., 2001. The effect of size, location and pumping direction of pitched blade turbine impellers on flow patterns: LDA measurements and CFD predictions. Chemical Engineering Research and Design 79, 887–894. https://doi.org/10.1205/02638760152721406
- Jaworski, Z., Zakrzewska, B., 2002. Modelling of the Turbulent Wall Jet Generated by a Pitched Blade Turbine Impeller. Trans IChemE 80.
- Jin, J., Fan, Y., 2020. PIV experimental study on flow structure and dynamics of square stirred tank using modal decomposition. Korean Journal of Chemical Engineering 37, 755–765. https://doi.org/10.1007/s11814-020-0504-7
- Johnson, D.A., 2001. Analysis of the immediate boundary conditions of an axial flow impeller. Journal of Fluids Engineering, Transactions of the ASME 123, 771–779. https://doi.org/10.1115/1.1412846
- Joshi, J.B., Nere, N.K., Rane, C. V., Murthy, B.N., Mathpati, C.S., Patwardhan, A.W., Ranade, V. V., 2011. CFD simulation of stirred tanks: Comparison of turbulence models. Part I: Radial flow impellers. Canadian Journal of Chemical Engineering 89, 23–82. https://doi.org/10.1002/cjce.20446
- Junior, C.F.J., CEKINSKI, E., NUNHEZ, J.R., URENHA, L.C., 2007. Agitação e Mistura na Indústria. LTC, Rio de Janeiro.
- Khan, F.R., Rielly, C.D., Brown, D.A.R., 2006. Angle-resolved stereo-PIV measurements close to a down-pumping pitched-blade turbine. Chemical Engineering Science 61, 2799–2806. https://doi.org/10.1016/j.ces.2005.10.067

- Khan, F.R., Rielly, C.D., Hargrave, G.K., 2004. A multi-block approach to obtain angle-resolved PIV measurements of the mean flow and turbulence fields in a stirred vessel.
 Chemical Engineering and Technology 27, 264–269. https://doi.org/10.1002/ceat.200401998
- Kleinwächter, A., Hellwig-Rieck, K., Heinke, H.J., Damaschke, N.A., 2017. Full-scale total wake field PIV-measurements in comparison with ANSYS CFD calculations: a contribution to a better propeller design process. Journal of Marine Science and Technology (Japan) 22, 388–400. https://doi.org/10.1007/s00773-016-0418-6
- Kresta, S., 1998. Turbulence in Stirred Tanks: Anisotropic, Approximate and Applied. The Canadian Journal of Chemical Engineering 76, 563–576.
- Kresta, S.M., Wood, P.E., 1993. The mean flow field produced by a 45° pitched blade turbine: Changes in the circulation pattern due to off bottom clearance. The Canadian Journal of Chemical Engineering 71, 42–53. https://doi.org/10.1002/cjce.5450710107
- Kresta, S.M., Wood, P.E., 1991. Prediction of the three-dimensional turbulent flow in stirred tanks. AIChE Journal 37, 448–460.
- Kundu, P.K., Cohen, I.M., 2015. Fluids Mechanics, Elsevier. Academic Press, Kidlington, UK. https://doi.org/10.1017/CBO9781107415324.004
- Lane, G.L., 2017. Improving the accuracy of CFD predictions of turbulence in a tank stirred by a hydrofoil impeller. Chemical Engineering Science 169, 188–211. https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.03.061
- Launder, B.E., Spalding, D.B., 1974. The numerical computation of turbulent flows. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 3, 269–289. https://doi.org/10.1016/0045-7825(74)90029-2
- Li, M., White, G., Wilkinson, D., Roberts, K.J., 2004. LDA measurements and CFD modeling of a stirred vessel with a retreat curve impeller. Industrial and Engineering Chemistry Research 43, 6534–6547. https://doi.org/10.1021/ie034222s
- Li, Z., Bao, Y., Gao, Z., 2011a. PIV experiments and large eddy simulations of single-loop flow fields in Rushton turbine stirred tanks. Chemical Engineering Science 66, 1219–1231. https://doi.org/10.1016/j.ces.2010.12.024
- Li, Z., Hu, M., Bao, Y., Gao, Z., 2011b. Particle Image Velocimetry Experiments and Large Eddy Simulations of Merging Flow Characteristics in Dual Rushton Turbine Stirred Tanks. Chemical Engineering Science 66, 1219–1231. https://doi.org/10.1021/ie201579t
- Liseikin, V.D., 2007. A computational Differential Geometry Approach to Grid Generation, 2nd ed, Journal of Chemical Information and Modeling. Springer International Publishing, Novosibirsk, Russia. https://doi.org/10.1017/CBO9781107415324.004
- Liu, L., Barigou, M., 2015. Lagrangian particle tracking in mechanically agitated polydisperse suspensions: Multi-component hydrodynamics and spatial distribution. International Journal of Multiphase Flow 73, 80–89. https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2015.03.008
- Liu, L., Barigou, M., 2013. Numerical modelling of velocity field and phase distribution in dense monodisperse solid-liquid suspensions under different regimes of agitation: CFD and PEPT experiments. Chemical Engineering Science 101, 837–850. https://doi.org/10.1016/j.ces.2013.05.066
- Liu, N., Wang, W., Han, J., Zhang, M., Angeli, P., Wu, C., Gong, J., 2016. A PIV investigation of the effect of disperse phase fraction on the turbulence characteristics of liquid–liquid mixing in a stirred tank. Chemical Engineering Science 152, 528–546. https://doi.org/10.1016/j.ces.2016.06.040
- Luan, D., Zhang, S., Wei, X., Duan, Z., 2017. Effect of the 6PBT stirrer eccentricity and offbottom clearance on mixing of pseudoplastic fluid in a stirred tank. Results in Physics 7, 1079–1085. https://doi.org/10.1016/j.rinp.2017.02.034
- Luo, J.Y., Issa, R.I., Gosman, A.D., 1994. Prediction of Impeller Induced Flows in Mixing Vessels using multiple frames of reference, in: INST CHEMICAL ENGINEERS (Ed.), Institution of Chemical Engineers Symposyum Series. Cambridge, England, pp. 549–556.

- Machado, M.B., Nunhez, J.R., Nobes, D., Kresta, S.M., 2011. Impeller Characterization and Selection: Balancing Efficient Hydrodynamics with Process Mixing Requirements. AIChE Journal 58, 2573–2588. https://doi.org/10.1002/aic
- Martínez-Delgadillo, S.A., Alonzo-Garcia, A., Mendoza-Escamilla, V.X., González-Neria, I., Antonio Yáñez-Varela, J., 2019. Analysis of the turbulent flow and trailing vortices induced by new design grooved blade impellers in a baffled tank. Chemical Engineering Journal 358, 225–235. https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.10.015
- Mavros, P., Baudou, X., 1997. QUANTIFICATION OF THE PERFORMANCE OF AGITATORS IN STIRRED VESSELS: Definition and Use of an Agitation Index. IChemE 75, 737–743.
- McCabe, L, W., Smith, J., Harriot, P., 2001. Unit operations of chemical engineering., 5th ed, Chemical Engineering Science. McGraw-Hill, Singapore. https://doi.org/10.1016/0009-2509(57)85034-9
- Mendoza-escamilla, V.X., Alonzo-garcía, A., Mollinedo, H.R., González-neria, I., Yáñezvarela, J.A., Martinez-delgadillo, S.A., 2018. Assessment of k – ε models using tetrahedral grids to describe the turbulent fl ow fi eld of a PBT impeller and validation through the PIV technique. Chinese Journal of Chemical Engineering 26, 942–956. https://doi.org/10.1016/j.cjche.2018.02.012
- Mendoza, F., Bañales, A.L., Cid, E., Xuereb, C., Poux, M., Fletcher, D.F., Aubin, J., 2018. Hydrodynamics in a stirred tank in the transitional flow regime. Chemical Engineering Research and Design 132, 865–880. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2017.12.011
- Menter, F., Egorov, Y., 2005. A scale adaptive simulation model using two-equation models. 43 rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit 1095.
- Menter, F.R., 2012. Best Practice: Scale-Resolving Simulations in ANSYS CFD. ANSYS Inc. https://doi.org/10.1155/2013/859465

Menter, F.R., 1992. Improved two-equation k-omega turbulence models for aerodynamic

flows. NASA Technical Memorandum. https://doi.org/10.2514/6.1993-2906

- Menter, F.R., Kuntz, M., Langtry, R., 2003. Ten Years of Industrial Experience with the SST Turbulence Model. Turbulence Heat and Mass Transfer 4. https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.576.60
- Micale, G., Brucato, A., Grisafi, F., Chimica, I., Scienze, V., Ciofalo, M., Nucleare, I., Scienze, V., 1999. Prediction of Flow Fields in a Dual-Impeller Stirred Vessel. AIChE Journal 45, 445–464.
- Micheletti, M., Baldi, S., Yeoh, S.L., Ducci, A., Papadakis, G., Lee, K.C., Yianneskis, M., 2004.
 On spatial and temporal variations and estimates of energy dissipation in stirred reactors.
 Chemical Engineering Research and Design 82, 1188–1198.
 https://doi.org/10.1205/cerd.82.9.1188.44172
- Moilanen, P., Laakkonen, M., Aittamaa, J., 2006. Modeling aerated fermenters with computational fluid dynamics. Industrial and Engineering Chemistry Research 45, 8656– 8663. https://doi.org/10.1021/ie060097j
- Montante, G., Bakker, A., Paglianti, A., Magelli, F., 2006. Effect of the shaft eccentricity on the hydrodynamics of unbaffled stirred tanks. Chemical Engineering Science 61, 2807– 2814. https://doi.org/10.1016/j.ces.2005.09.021
- Montante, G., Mošt^{*}, M., Jahoda, M., Magelli, F., 2005. CFD simulations and experimental validation of homogenisation curves and mixing time in stirred Newtonian and pseudoplastic liquids 60, 2427–2437. https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.11.020
- Morgut, M., Nobile, E., 2009. Comparison of Hexa-Structured and Hybrid-Unstructured Meshing Approaches for Numerical Predication of the Flow Around Marine Propellers.
 First International Symposium on Marine Propulsors. https://doi.org/10.1080/14634980701201681
- Moukalled, F., Mangani, L., Darwish, M., 2016. The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics, Fluid Mechanics and its Applications. https://doi.org/10.1007/978-3-

- Murthy, B.N., Joshi, J.B., 2008. Assessment of standard k , RSM and LES turbulence models in a baffled stirred vessel agitated by various impeller designs. Chemical Engineering Science 63, 5468–5495. https://doi.org/10.1016/j.ces.2008.06.019
- Nikiforaki, L., Montante, G., Lee, K.C., Yianneskis, M., 2003. On the origin, frequency and magnitude of macro-instabilities of the flows in stirred vessels. Chemical Engineering Science 58, 2937–2949. https://doi.org/10.1016/S0009-2509(03)00152-0
- Nurtono, T., Setyawan, H., Altway, A., Winardi, S., 2009. Macro-instability characteristic in agitated tank based on flow visualization experiment and large eddy simulation. Chemical Engineering Research and Design 87, 923–942. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2009.01.011
- OpenFOAM, 2020. Open ⊽ FOAM The Open Source CFD Toolbox.
- Pan, C., Min, J., Liu, X., Gao, Z., 2008. Investigation of Fluid Flow in a Dual Rushton Impeller Stirred Tank Using Particle Image Velocimetry. Chinese Journal of Chemical Engineering 16, 693–699. https://doi.org/10.1016/S1004-9541(08)60142-1
- Pan, X., Ding, L., Luo, P., Wu, H., Zhou, Z., Zhang, Z., 2018a. LES and PIV investigation of turbulent characteristics in a vessel stirred by a novel long-short blades agitator. Chemical Engineering Science 176, 343–355. https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.10.054
- Pan, X., Ding, L., Luo, P., Wu, H., Zhou, Z., Zhang, Z., 2018b. LES and PIV investigation of turbulent characteristics in a vessel stirred by a novel long-short blades agitator. Chemical Engineering Science 176, 343–355. https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.10.054
- Paul, E.L., Atiemo-obeng, V. a, Kresta, S.M., 2004. HANDBOOK OF INDUSTRIAL MIXING Edited by. https://doi.org/10.1002/0471451452
- Qi, N., Wang, H., Zhang, K., Zhang, H., 2010. Numerical simulation of fl uid dynamics in the stirred tank by the SSG Reynolds Stress Model. Front. Chem. Eng. China 4, 506–514.

https://doi.org/10.1007/s11705-010-0508-7

- Raffel, M., Willert, C.E., Scarano, F., Kähler, C.J., 2018. Particle Image Velocimetry: A Pratical Guide, Third Edit. ed. © Springer International Publishing AG, part of Springer Nature 2018, Gewerbestrasse.
- Rahimi, M., Parvareh, A., 2005. Experimental and CFD investigation on mixing by a jet in a semi-industrial stirred tank 115, 85–92. https://doi.org/10.1016/j.cej.2005.09.021
- Ranade, V. V., Joshi, J.B., 1989. FLOW GENERATED BY PITCHED BLADE TURBINES
 I: MEASUREMENTS USING LASER DOPPLER ANEMOMETER FLOW
 GENERATED BY PITCHED BLADE TURBINES I: MEASUREMENTS USING
 LASER. Chemical Engineering Communications 81, 197–224.
- Ranade, V. V., Perrard, M., Le Sauze, N., Xuereb, C., Bertrand, J., 2001. Trailing vortices of rushton turbine: PIV measurements and CFD simulations with snapshots approach. Chemical Engineering Research and Design 79, 3–12. https://doi.org/10.1205/026387601528471
- Rave, K., Lehmenküer, M., Wirz, D., Bart, H., 2020. 3D flow simulation of a baffled stirred tank for an assessment of geometry simplifications and a scale-adaptive turbulence model. Chemical Engineering Science 116262. https://doi.org/10.1016/j.ces.2020.116262
- Roache, P.J., 1994. Perspective: A method for uniform reporting of grid refinement studies. Journal of Fluids Engineering; 116, 405–413.
- Roussinova, V.T., Grgic, B., Kresta, S.M., 2000. Study of macro-instabilities in stirred tanks using a velocity decomposition technique. Chemical Engineering Research and Design 78, 1040–1052. https://doi.org/10.1205/026387600528157
- Roy, S., Acharya, S., 2012. Scalar mixing in a turbulent stirred tank with pitched blade turbine:
 Role of impeller speed perturbation. Chemical Engineering Research and Design 90, 884– 898. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2011.10.009

- Roy, S., Acharya, S., 2011. Perturbed turbulent stirred tank flows with amplitude and modeshape variations. Chemical Engineering Science 66, 5703–5722. https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.08.005
- Roy, S., Acharya, S., Cloeter, M.D., 2010. Flow structure and the effect of macro-instabilities in a pitched-blade stirred tank. Chemical Engineering Science 65, 3009–3024. https://doi.org/10.1016/j.ces.2010.01.025
- Rutherford, K., Lee, K.C., Mahmoudi, S.M.S., Yianneskis, M., 1996. Hydrodynamic characteristics of dual rushton impeller stirred vessels. AIChE Journal 42, 332–346. https://doi.org/10.1002/aic.690420204
- Sardeing, R., Aubin, J., Xuereb, C., 2004. GAS LIQUID MASS TRANSFER A Comparison of Down- and Up-pumping Axial Flow Impellers with Radial Impellers 82, 1589–1596.
- Scarano, F., 2001. Iterative image deformation methods in PIV. Measurement Science and Technology 13, 1–19.
- Schäfer, M., Yianneskis, M., Wächter, P., Durst, F., 1998. Trailing vortices around a 45° pitched-blade impeller. AIChE Journal 44, 1233–1246. https://doi.org/10.1002/aic.690440602
- Shavit, U., Lowe, R.J., Steinbuck, J. V., 2007. Intensity Capping: A simple method to improve cross-correlation PIV results. Experiments in Fluids 42, 225–240. https://doi.org/10.1007/s00348-006-0233-7
- Sheng, J., Meng, H., Fox, R.O., 2000. A large eddy PIV method for turbulence dissipation rate estimation 55, 4423–4434.
- Sheng, J., Meng, H., FOX, R.O., 1998. Validation of CFD simulations of a stirred tank using particle image velocimetry. The Canadian Journal of Chemical Engineering 76, 611–625.
- Shih, T.-H., Liou, W.W., Shabbir, A., Yang, Z., Zhu, J., 1995. A new k ε eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. Computer Fluids 24, 227–238.

https://doi.org/10.1007/978-3-319-27386-0 7

- Silva, J.L.G. da, Nunhez, J.R., Cekinsky, E., 2002. Universidade Estadual de Campinas Universidade Estadual de Campinas. Universidade Estadual de Campinas. https://doi.org/http://dx.doi.org/10.5935/0100-4042.20150042
- Singh, H., Fletcher, D.F., Nijdam, J.J., 2011. An assessment of different turbulence models for predicting flow in a baffled tank stirred with a Rushton turbine. Chemical Engineering Science 66, 5976–5988. https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.08.018
- Soloff, S.M., Adrian, R.J., Liu, Z.C., 1997. Distortion compensation for generalized stereoscopic particle image velocimetry. Measurement Science and Technology 8, 1441– 1454. https://doi.org/10.1088/0957-0233/8/12/008
- Sommerfeld, M., Decker, S., 2004. State of the art and future trends in CFD simulation of stirred vessel hydrodynamics. Chemical Engineering and Technology 27, 215–224. https://doi.org/10.1002/ceat.200402007
- Sousa, P.R., Leal Filho, L. de S., 2010. Escalonamento de tanques condicionadores utilizados na flotação de apatita. Universidade de São Paulo.
- Souza, E., 2011. Consumo de Potência para Impelidores Rápidos Aplicados em Processos de Agitação e Mistura. https://doi.org/http://dx.doi.org/10.5935/0100-4042.20150042
- Spogis, N., Nunhez, J.R., 2009. Design of a High-Efficiency Hydrofoil Through the Use of Computational Fluid Dynamics and Multiobjective Optimization. AIChE Journal 55, 1723–1735. https://doi.org/10.1002/aic
- Tanaka, T., Eaton, J.K., 2007. A correction method for measuring turbulence kinetic energy dissipation rate by PIV. Experiments in Fluids 42, 893–902. https://doi.org/10.1007/s00348-007-0298-y
- Torré, J.P., Fletcher, D.F., Lasuye, T., Xuereb, C., 2007. Single and multiphase CFD approaches for modelling partially baffled stirred vessels: Comparison of experimental

data with numerical predictions. Chemical Engineering Science 62, 6246–6262. https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.06.044

- Unadkat, H., Rielly, C.D., Hargrave, G.K., Nagy, Z.K., 2008. Application of fluorescent PIV and digital image analysis to measure turbulence properties of solid – liquid stirred suspensions. Chemical Engineering Research and Design 7, 573–586. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2008.11.011
- Unadkat, H., Rielly, C.D., Nagy, Z.K., 2011. PIV study of the flow field generated by a sawtooth impeller. Chemical Engineering Science 66, 5374–5387. https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.07.046
- Van't Riet, K., Bruijn, W., Smith, M.J., 1976. Real and pseudo-turbulence in the discharge stream from a Rushton turbine. Chemical engineering Science 31, 407–412.
- Von Karman, T., 1937. On the statistical theory of turbulence. Proceedings of the National Academy of Sciences 23, 98–105.
- Wang, C., Xu, Y., Wu, Y., An, Z., 2018. PIV investigation of the flow features of double and single 45° up-pumping pitched blade turbines in a square tank. Canadian Journal of Chemical Engineering 96, 788–799. https://doi.org/10.1002/cjce.22952
- WILCOX, D.C., 1988. Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. AIAA journal 26, 1299–1310.
- Wollny, S., Sperling, R., 2007. Partikelbeanspruchung in Gerührten Behältern. Chemie-Ingenieur-Technik 79, 199–208. https://doi.org/10.1002/cite.200600129
- Xu, D., Chen, J., 2013. Accurate estimate of turbulent dissipation rate using PIV data. Experimental Thermal and Fluid Science 44, 662–672. https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2012.09.006
- Yakhot, V., Orszag, S.A., Thangam, S., Gatski, T.B., Speziale, C.G., 1992. Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique. Physics of Fluids A

4, 1510-1520. https://doi.org/10.1063/1.858424

- Yáñez-Varela, J.A., González-Neria, I., Alonzo-García, A., Rivadeneyra-Romero, G., Martínez-Delgadillo, S.A., 2020. Numerical analysis of the hydrodynamics induced by rotating ring electrode using κ-ε models. Chemical Engineering and Processing - Process Intensification 158. https://doi.org/10.1016/j.cep.2020.108203
- Yang, F., Zhou, S., Wang, G., 2012. Detached eddy simulation of the liquid mixing in stirred tanks. Computers and Fluids 64, 74–82. https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2012.05.005
- Yang, F.L., Zhou, S.J., Zhang, C.X., Evans, G.M., Wang, G.C., 2013. Study of the turbulent flow in an unbaffled stirred tank by Detached eddy simulation. Chemical Engineering Communications 200, 1347–1365. https://doi.org/10.1080/00986445.2012.746674
- Yeoh, S.L., Papadakis, G., Yianneskis, M., 2004. Numerical simulation of turbulent flow characteristics in a stirred vessel using the LES and RANS approaches with the sliding/deforming mesh methodology. Chemical Engineering Research and Design 82, 834–848.
- Yianneskis, M., 2000. Trailing vortex, mean flow and turbulence modification through impeller blade design in stirred reactors. 10th European Conference on Mixing 1–8. https://doi.org/10.1016/b978-044450476-0/50002-9
- Yianneskis, M., Popiolek, Z., Whitelaw, J.H., 1987. An experimental study of the steady and unsteady flow characteristics of stirred reactors. Journal of Fluid Mechanics 175, 537–555. https://doi.org/10.1017/S002211208700051X
- Zamiri, A., Chung, J.T., 2017. International Journal of Mechanical Sciences Ability of URANS approach in prediction of unsteady turbulent flows in an unbaffled stirred tank 133, 178– 187. https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2017.08.008
- Zhipeng, L., Ge, S., Yuyun, B., Gao, Z., 2013. Stereo-PIV Experiments and Large Eddy Simulations of Flow Fields in Stirred Tanks with Rushton and Curved-Blade Turbines. AIChE Journal 59, 3986–4003. https://doi.org/10.1002/aic