



**JOSÉ LUIS GÓMEZ VERGEL**

**“Estudo da Influência da Malha Computacional, Modelos de Turbulência e Aspectos Numéricos da Modelagem CFD em Impelidores PBT usando Malhas Não-estruturadas”.**

**CAMPINAS**

**2013**





**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA**

**JOSÉ LUIS GÓMEZ VERGEL**

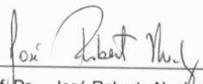
**“Estudo da Influência da Malha Computacional, Modelos de  
Turbulência e Aspectos Numéricos da Modelagem CFD em  
Impelidores PBT Usando Malhas Não-estruturadas”.**

Orientador: Prof. Dr. José Roberto Nunhez

Co-Orientador: Dr. Nicolas Spogis

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química, na área de concentração de Desenvolvimento em Processos Químicos.

**ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO  
DEFENDIDA PELO ALUNO JOSÉ LUIS GÓMEZ VERGEL, E ORIENTADA  
PELO PROF. DR. JOSE ROBERTO NUNHEZ.**



Prof. Dr. – José Roberto Nunhez – Orientador

**CAMPINAS**

**2013**

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE - UNICAMP

V586e      Vogel, José Luis Gomez  
Estudo da influência da malha computacional,  
modelos de turbulência e aspectos numéricos da  
modelagem CFD em impelidores PBT usando malhas  
não-estruturadas / José Luis Gomez Vergel. --Campinas,  
SP: [s.n.], 2013.

Orientador: José Roberto Nunhez  
Coorientador: Nicolas Spogis.  
Dissertação de Mestrado - Universidade Estadual de  
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Mistura (Química). 2. Fluidodinâmica  
computacional (CFD). 3. Dinâmica dos fluídos. 4.  
Tanques de armazenamento. 5. escoamento turbulento.  
I. Nunhez, José Roberto, 1961-. II. Spogis, Nicolas. III.  
Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de  
Engenharia Química. IV. Título.

Título em Inglês: Investigation on the influence of computational mesh,  
turbulence models and numerical aspects of CFD modeling in  
PBT impellers using non-structured meshes

Palavras-chave em Inglês: Mixture (Chemistry), Computational fluid dynamics  
(CFD), Dinâmica dos Fluídos, Storage tanks, Turbulent  
flow

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

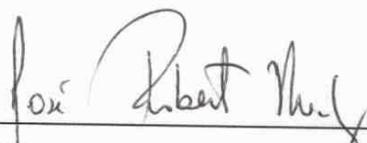
Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora: Celso Fernandes Joaquim Junior, Sávio de Souza Venâncio  
Vianna

Data da defesa: 18-01-2013

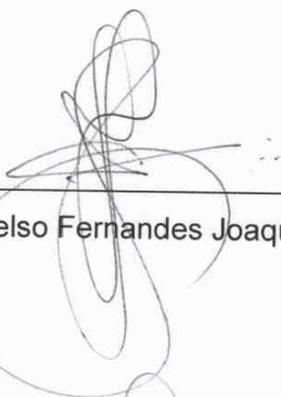
Programa de Pós Graduação: Engenharia Química

Dissertação de Mestrado defendida por José Luis Gómez Vergel e aprovada em 18 de Janeiro de 2013 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



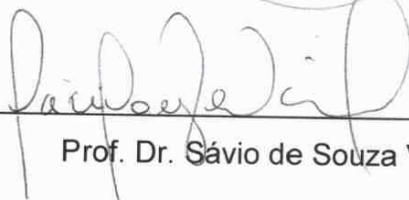
---

Prof. Dr. – José Roberto Nunes–Orientador



---

Prof. Dr. Celso Fernandes Joaquim Junior



---

Prof. Dr. Sávio de Souza Venâncio Vianna



*Dedico esse trabalho a meus pais, irmãos e especialmente  
minha filha os quais são parte importante na minha vida.*



## AGRADECIMENTOS

Eu quero agradecer a Deus por tudo, a meus pais Alvaro Gomez e Martha Vergel pelo afeto carinho e confiança que eles deram para continuar meus estudos. A minha filha Angie Valentina Gomez não só por fazer parte dos meus sonhos e logros, mas também de ser minha fonte de força e motivação. A meus irmãos e familiares por me permitir compartilhar minhas alegrias e desejos. À minha esposa por ter me dado seu apoio e compreensão durante todo esse tempo que me afastei do meu país.

Agradeço muito ao Prof. Dr. Jose Roberto Nunhez não apenas pela orientação técnica no papel de meu orientador, mas também, pela amizade desenvolvida, sua ajuda e conselhos que puderam de uma forma ou outra influenciar em minha vida profissional e pessoal.

Ao meu co-orientador Dr. Nicolas Spogis por sua motivação e ensinamentos, visando atingir meus objetivos, alias, de suas valiosas sugestões que tiveram influência importante no decorrer dessa pesquisa.

À Profa. Dr. Suzanne M. Kresta e Dr. Márcio B. Machado *et al.* da Universidade de Alberta por ter fornecido os dados experimentais que tornaram possível fornecer uma maior relevância em este trabalho.

Ao Dr. Everton Matos e Mcs. Diener Volpin pelas discussões acadêmicas que ajudaram a fixar e enriquecer mais meus fundamentos teóricos. A todos meus colegas e amigos do laboratório de LCFD, Helver Alvarez, Sebastian Moreno, Ana Milena Torres, Urbano Montañez, Daniel Simões, pela amizade e companheirismo.

Finalmente agradeço não só à Unicamp por ter aberto às portas para meu desenvolvimento acadêmico baseado num ensino de excelente qualidade, mas também ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro.



*Não sei como o mundo me vê, mas eu me sinto como um garoto brincando na praia, contente em achar aqui e ali, uma pedra mais lisa ou uma concha mais bonita, mas tendo sempre diante de mim, ainda por descobrir, "O grande oceano de verdades".*

*Isaac Newton*



## ABSTRACT

The use of non-structured meshes has received recently considerable attention for discretization of the computational domain in CFD simulations (Vakili & Esfahany, 2009; Cabrales *et al.*, 2011). The non-structured meshes (the most common are tetrahedral) allow adequate adaptation of irregular geometries and easy use of automated algorithms for mesh generation in most commercial CFD software. It has been consistently suggested in the literature that hexahedral meshes are preferred over tetrahedral. However, they can be used, provided that some care is taken to provide a good representation of the physical phenomena of the problem. Recently published works have been proving that if they are used with care, satisfactory results are obtained (Spogis & Nunhez, 2009). Most of works developed with the use of CFD simulation for mixing processes use hexahedral and to date tetrahedral do not have the same acceptance of hexahedral (Joaquim Junior *et al.*, 2007) and part of this work is aimed at showing that they can provide good results when simulating mixing processes.

Another objective of this work is to show the effect of mesh refinement in tetrahedral meshes. It is investigated the influence of the prismatic elements near wall on global parameters such as the Power and Flow numbers. An initial analysis of the sensitivity of some turbulence models (Standard k- $\epsilon$  model, the shear stress transport (SST) and BSL-Reynolds stress model) and the discretization scheme on the flow field produced were also carried out in this work. In addition, simulations with different mesh resolutions were made using the multiple reference frame (MFR) approach; whereas other cases a sliding mesh modeling was provided for the impeller. The discretization schemes were limited to upwind, high resolution and blend factor, since other schemes do not work well with tetrahedral. The commercial CFD software CFX 14.0 was used to simulate the results. A pitched blade turbine (PBT 45°, down-pumping), was simulated in turbulent flow.

The results obtained for the Power and Flow numbers, the axial velocity profile component of the model in CFD are discussed and compared with experimental data (Machado *et al. et al.*, 2011). The velocity was measured using the PIV technique (Particle Image Velocimetry). A significant influence of some parameters is observed on the determination of some important variable mixing. In general, the predictions of the velocity profile are influenced in some way by the resolution of the mesh, turbulence model and the discretization scheme.

*Keywords: Mixing vessel, pitched blade turbine, non-structured mesh, hydrodynamic characteristics and power number.*

## RESUMO

O uso de malhas não estruturadas recentemente tem recebido uma considerável atenção para discretização do domínio computacional em simulações CFD (Vakili & Esfahany, 2009; Cabrales, *et al.*, 2011). A malha não estruturada (comumente tetraédricas) permite uma adequada adaptação em geometrias irregulares e uma geração automática na maioria dos *softwares* comerciais em CFD. Na literatura constantemente tem sido sugerido que as malhas hexaédricas são preferidas as tetraédricas, porém esta última pode ser usada, desde que alguns cuidados sejam tomados para proporcionar uma boa representação do fenômeno físico do problema. Alguns trabalhos recentemente publicados mostram que as malhas tetraédricas quando utilizadas com cuidado, podem obter resultados satisfatórios (Spogis & Nunhez, 2009). A maioria dos trabalhos desenvolvidos com uso da simulação CFD para processos de mistura utilizam malha hexaédrica, enquanto os resultados obtidos com malhas tetraédricas não possuem a mesma aprovação (Joaquim Junior *et al.*, 2007), parte deste trabalho está focado em mostrar que elas podem fornecer bons resultados em simulações de processos de mistura.

Outro objetivo desse trabalho é mostrar o efeito do refinamento em malhas tetraédricas. Investigou-se a influência dos elementos prismáticos perto da parede sobre parâmetros globais, tais como o número de potência e número de bombeamento. Foi também realizada uma análise inicial da sensibilidade de alguns modelos de turbulência e esquemas de discretização sobre o campo de fluxo produzido. Além disso, simulações com diferentes refinamentos de malha foram feitas usando a abordagem de múltiplos sistemas de referência (MFR); enquanto em outros casos foi proporcionada uma abordagem de malhas deslizantes (SG) no impelidor. Os esquemas de discretização foram limitados aos esquemas *Upwind*, *High resolution* e *blend fator*, uma vez que esquemas diferentes não funcionam adequadamente com elementos tetraédricos. O *software* comercial de CFD CFX 14.0 foi utilizado para simular os resultados. Um impelidor de pás inclinadas (PBT 45°, com bombeamento para baixo) foi simulado em regime turbulento.

Os resultados obtidos pelas simulações CFD para o número de potência e bombeamento, e perfil da componente axial da velocidade são discutidos e comparados com dados experimentais (Machado *et al. et al.*, 2011). A velocidade foi medida usando a técnica *PIV (Particle Image Velocimetry)*. Uma significativa influencia foi observada em alguns parâmetros na determinação de importantes variáveis nos processos de mistura. De forma geral, a predição do perfil da velocidade é influenciada, de alguma forma, pela resolução da malha, pelo modelo de turbulência e pelo esquema de discretização.

*Palavras chaves: Tanques agitados, impelidor pás inclinadas, malhas não estruturadas, características hidrodinâmicas, número de potência.*

# CONTEÚDO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>OBJETIVO</b> .....	<b>5</b>
2.1	OBJETIVO GLOBAL .....	5
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS .....	5
<b>3</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b> .....	<b>7</b>
3.1	INTRODUÇÃO .....	7
3.2	TRABALHOS EM CFD APLICADOS EM SISTEMAS AGITADOS .....	7
<b>4</b>	<b>SISTEMAS DE AGITAÇÃO E MISTURA</b> .....	<b>15</b>
4.1	TANQUE DE MISTURA .....	16
4.2	TIPOS DE IMPELIDORES .....	17
4.3	VARIÁVEIS DE PROJETO .....	21
4.3.1	<i>Número de Reynolds e Número de Froude</i> .....	21
4.3.2	<i>Potência e Número de Potência</i> .....	22
4.3.3	<i>Número de Bombeamento</i> .....	24
4.4	FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL .....	25
<b>5</b>	<b>MODELAGEM MATEMÁTICA</b> .....	<b>27</b>
5.1	EQUAÇÕES DE TRANSPORTE .....	27
5.2	TURBULÊNCIA .....	29
5.2.1	<i>Turbulência Estatística</i> .....	30
5.2.1.1	<i>Modelagem da viscosidade turbulenta (EVM)</i> .....	32

5.2.1.2	Modelagem tensor de Reynolds (RSM).....	33
5.2.2	<i>Turbulência Estruturada</i> .....	34
5.2.3	<i>Modelos de Turbulência</i> .....	35
5.2.3.1	Modelo de Turbulência k-ε (k-épsilon).....	36
5.2.3.2	Modelo de turbulência SST (The Shear Stress Transport) .....	37
5.2.3.3	Modelo de turbulência BSL-RSM (Baseline Reynolds Stress Model).....	38
5.3	CAMADA LIMITE .....	39
5.3.1	<i>Abordagem de Parede Próxima (Near-Wall Modelling)</i> .....	42
5.3.2	<i>Função de Parede (Wall Function)</i> .....	43
<b>6</b>	<b>MÉTODOS NUMÉRICOS.....</b>	<b>45</b>
6.1	MÉTODOS DOS VOLUMES FINITOS (MVF).....	45
6.2	MALHA COMPUTACIONAL .....	47
6.3	ESQUEMAS DE DISCRETIZAÇÃO .....	50
6.4	CONVERGÊNCIA.....	54
6.5	MÉTODOS DE ABORDAGEM NA SIMULAÇÃO ATRAVÉS DE CFD.....	56
6.5.1	<i>Abordagem IBC-Condição de contorno no impelidor</i> .....	57
6.5.2	<i>Modelagem com múltiplos sistemas de referência rotacional- MFR</i> .....	57
6.5.3	<i>Modelagem com malhas deslizantes - SG</i> .....	58
6.6	MODELO ALTERNATIVO DE ROTAÇÃO "ALTERNATIVE ROTATION MODEL".....	59
<b>7</b>	<b>TÉCNICAS EXPERIMENTAIS PARA VISUALIZAÇÃO DE FLUXOS EM TANQUES AGITADOS .....</b>	<b>61</b>
7.1	VELOCIMETRIA DE IMAGEM DE PARTÍCULA (PIV).....	61

<b>8</b>	<b>METODOLOGIA.....</b>	<b>65</b>
8.1	DEFINIÇÃO DO PROBLEMA.....	66
8.2	ASPECTOS GEOMÉTRICOS.....	66
8.3	GERAÇÃO DA MALHA.....	67
8.4	CONFIGURAÇÃO DO MODELO DE SIMULAÇÃO CFD .....	73
	8.4.1 <i>Propriedades Físicas do Fluido</i> .....	73
	8.4.2 <i>Condições de Contorno</i> .....	73
	8.4.3 <i>Modelos Físicos e Esquemas Numéricos</i> .....	75
<b>9</b>	<b>RESULTADOS.....</b>	<b>79</b>
9.1	CONVERGÊNCIA, MONITORAMENTO DA SOLUÇÃO .....	79
	9.1.1 <i>Número de Potência e Número de bombeamento</i> .....	80
	9.1.2 <i>Perfil de Velocidade Axial Adimensional</i> .....	84
	9.1.3 <i>Padrão de Fluxos</i> .....	85
9.2	EFEITO DO REFINAMENTO DA MALHA.....	87
9.3	INFLUÊNCIA DOS ELEMENTOS PRISMAS.....	91
9.4	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE: MODELOS E ESQUEMAS NUMÉRICOS.....	94
	9.4.1 <i>Esquema de Discretização</i> .....	94
	9.4.2 <i>Modelo Alternativo de Rotação</i> .....	96
	9.4.3 <i>Modelo de Turbulência</i> .....	98
9.5	CÁLCULO DO ERRO E DESVIO PADRÃO .....	101
<b>10</b>	<b>CONSLUSÕES E SUGESTÕES.....</b>	<b>105</b>
<b>11</b>	<b>APÊNDICE .....</b>	<b>107</b>
11.1	MODELO DE TURBULÊNCIA K-ÉPSILON (K-E) .....	107

11.2	MODELO DE TURBULÊNCIA SHEAR STRESS TRANSPORT (SST) .....	108
11.3	MODELO DE TURBULÊNCIA BASELINE-REYNOLDS STRESS (BSL-RSM) .....	111
<b>12</b>	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>113</b>

## LISTA DE FIGURAS

---

<i>Figura 4-1 Dimensões características de um tanque agitado convencional</i> .....	16
<i>Figura 4-2 Dimensões características do impelidor</i> .....	18
<i>Figura 4-3 Padrão de fluxos gerados conforme o tipo de impelidor em tanques de mistura. A) Impelidor de fluxo radial B) Impelidor de fluxo axial (Adaptado de Smith, 2011).</i> .....	19
<i>Figura 4-4 Impelidores mais utilizados em escoamentos turbulentos. a) Tipo pás retas. b) Tipo naval. c) Tipo turbina. d) Tipo pás inclinadas (Adaptado de Post Mixing Optimizations and Solutions, 2012).</i> .....	19
<i>Figura 4-5 Impelidores desenvolvidos para processos específicos. a) Impelidor de alto cisalhamento (bar Turbine). b) Impelidor tipo Hydrofoil (Lightnin A310). (Adaptado de Post Mixing Optimizations and Solutions, 2012).</i> .....	20
<i>Figura 5-1 Flutuação da componente da velocidade. (Adaptado de Bird et al., 1960)</i> .....	30
<i>Figura 5-2 Modelos de turbulência disponíveis em ANSYS CFX-14.0</i> .....	35
<i>Figura 5-3 Função de combinação "Blend Function" utilizada no modelo SST. (Adaptado de Spogis, 2007).</i> .....	37
<i>Figura 5-4 Esquema de subcamadas na região próxima da superfície. (Adaptado de ANSYS, Inc. 2011).</i> .....	40
<i>Figura 5-5 Subdivisões da região próxima à parede. (Adaptado de ANSYS, Inc. 2011)</i> .....	41
<i>Figura 5-6 Abordagem para o tratamento de parede. (Adaptado de ANSYS, Inc. 2011)</i> .....	43

<i>Figura 6-1 Esquema do volume de controle ou elementar. (Adaptado de ANSYS, Inc. 2010).</i> .....	46
<i>Figura 6-2 Esquema de discretização. a) Cartesiana. b) Coincidente com a fronteira. (Adaptado de Maliska, 2004).</i> .....	47
<i>Figura 6-3 Tipos de elementos aplicados em geometria 3D.</i> .....	48
<i>Figura 6-4 Esquema do comportamento numérico da interpolação da solução. a) Solução exata (função pulso). b) solução dissipada (difusão numérica). c) solução com oscilações (oscilação numérica). (Adaptado de Maliska, 2004).</i> .....	51
<i>Figura 6-5 Relações entre consistência, estabilidade e convergência. (Adaptado de Charles Hirsch, 2007).</i> .....	55
<i>Figura 6-6 Abordagens para a modelagem da interação entre as chicanas e o impelidor. a) IBC, b) MFR, c) SM. (Adaptado de Joshi, 2011).</i> .....	56
<i>Figura 7-1 Resultados obtidos através do PIV do padrão do fluxo. a) Imagem original; b) Mapa de vetores das flutuações da velocidade instantânea; c) Mapa da vorticidade instantânea. (Adaptado de Mavros, 2001).</i> .....	63
<i>Figura 8-1 Fluxograma do processo típico da análise de CFD. (Adaptado de ANSYS, Inc. 2007).</i> .....	65
<i>Figura 8-2 Definição do domínio estacionário e rotativo na geometria</i> .....	67
<i>Figura 8-3 Relações geométricas usadas no dimensionamento do sistema de agitação.</i> .....	68
<i>Figura 8-4 Detalhes do refinamento da malha na região do impelidor. a) Plano vertical da malha gerada no tanque de mistura. b) Plano horizontal da malha gerada no tanque de mistura.</i> .....	68

<i>Figura 8-5 Malha não estruturada 3D com elementos tetraédricos e prismáticos gerada no software ANSYS CFX meshing. a) Malha superficial do impelidor. b) Malha superficial do domínio rotativo. c) Malha superficial do tanque. d) Malha superficial do domínio estacionário.....</i>	<i>69</i>
<i>Figura 8-6 Detalhe da camada de prisma gerada tanto no impelidor quanto no tanque. Plano horizontal. ....</i>	<i>70</i>
<i>Figura 8-7 Diferença entre uma malha tetraédrica gerada: a) sem elementos prismáticos b) com camada de prisma. Plano transversal do domínio estacionário e rotativo. ....</i>	<i>70</i>
<i>Figura 8-8 Plano transversal para diferentes densidades de malha. A) malha super-grossa B) grossa C) média D) fina. ....</i>	<i>72</i>
<i>Figura 9-1 Monitoramento do critério de convergência no caso de estudo #10 apresentada na Tabela 8-5. ....</i>	<i>79</i>
<i>Figura 9-2 Linhas de corrente na pá do impelidor PBT. ....</i>	<i>81</i>
<i>Figura 9-3 Plano abaixo do impelidor utilizado para o cálculo do bombeamento. ....</i>	<i>82</i>
<i>Figura 9-4 Monitoramento do número de potência no decorrer da solução. Simulações correspondentes aos casos de estudo # 6, 7, 8, 10 e 11 apresentados na Tabela 8-5. ....</i>	<i>83</i>
<i>Figura 9-5 Monitoramento do número de bombeamento no decorrer da solução. Simulações correspondentes aos casos de estudo # 6, 7, 8, 10 e 11 apresentados na Tabela 8-5. ....</i>	<i>83</i>
<i>Figura 9-6 Plano transversal utilizado no cálculo dos perfis de velocidade axial.....</i>	<i>84</i>
<i>Figura 9-7 Padrão de fluxo simulado produzido pelo impelidor PBT-45°.....</i>	<i>86</i>
<i>Figura 9-8 Estabilização dos fluxos através das interfaces do domínio rotativo no decorrer da solução numérica. Simulação correspondente ao caso #4 apresentados na Tabela 8-5. ...</i>	<i>86</i>

<i>Figura 9-9 Variação da estimativa do número de potência e de bombeamento conforme aumenta o refino da malha.</i> .....	88
<i>Figura 9-10 Comparações entre diferentes densidades de malha do perfil de velocidade axial adimensional.</i> .....	89
<i>Figura 9-11 Padrões de fluxo gerados pelo impelidor PBT estimados utilizando diferentes resoluções de malha.</i> .....	90
<i>Figura 9-12 Influência da camada de prisma no cálculo do número de potência (<math>N_p</math>) e número de bombeamento (<math>N_q</math>).</i> .....	91
<i>Figura 9-13 Comparação do perfil de velocidade adimensional entre uma malha utilizando elementos prismáticos e outra sem presença dos mesmos.</i> .....	92
<i>Figura 9-14 Influência da utilização da camada de prisma nas paredes do tanque e impelidor na estimação do <math>y^+</math>. A) Malha refinada com camada de prisma. B) Malha refinada sem elementos prismáticos.</i> .....	93
<i>Figura 9-15 Comparações do perfil de velocidade axial adimensional entre diferentes esquemas de discretização utilizados na modelagem CFD. * Machado et al. (2011).</i> .....	95
<i>Figura 9-16 Influência do esquema de discretização na estimação do número de Potência e número de bombeamento. * Machado et al. (2011).</i> .....	96
<i>Figura 9-17 Influência do modelo alternativo de rotação no perfil de velocidade axial calculado em CFD. * Machado et al. (2011).</i> .....	97
<i>Figura 9-18 Comparações do perfil de velocidade axial adimensional entre diferentes modelos de turbulência utilizados na modelagem CFD. * Machado et al. (2011).</i> .....	99
<i>Figura 9-19 Comparações do perfil de velocidade axial adimensional entre diferentes modelos de turbulência utilizados na modelagem CFD. * Machado et al. (2011).</i> .....	100

*Figura 9-20 Dispersão dos resultados no cálculo do perfil de velocidade entre diferentes esquemas de discretização utilizados na modelagem CFD. \* Machado et al. (2011). ..... 103*

*Figura 9-21 Dispersão dos resultados no cálculo do perfil de velocidade entre diferentes modelos de turbulência utilizados na modelagem CFD. \* Machado et al. (2011). ..... 104*



## LISTA DE TABELAS

---

<i>Tabela 8-1 Parâmetros mais relevantes na geração da malha computacional.</i> .....	71
<i>Tabela 8-2 Denominação do tipo de malha conforme ao número de elementos.</i> .....	71
<i>Tabela 8-3 Propriedades físico-químicas da água.</i> .....	73
<i>Tabela 8-4 Condições de contorno aplicadas na simulação CFD.</i> .....	75
<i>Tabela 8-5 Resumo da densidade de malha, abordagem, modelos de turbulência e esquemas numéricos empregados para cada uma das simulações.</i> .....	76
<i>Tabela 9-1 Porcentagem de variação do número de potência e bombeamento conforme o aumento do refino da malha.</i> .....	87
<i>Tabela 9-2 Cálculo da porcentagem de erro do número de potência estimado em CFD.</i> .....	101
<i>Tabela 9-3 Cálculo da porcentagem de erro do número de bombeamento estimado em CFD.</i> ..	102
<i>Tabela 9-4 Desvio padrão do perfil de velocidade para diversas configurações realizadas na modelagem CFD.</i> .....	104



## NOMENCLATURA

---

$A_p$ : Área projetada da pá do impelidor.

$U_\tau$ : Atrito da velocidade

Z: Altura do tanque

$x_i$ : Coordenada espacial na direção i

K: Constante de Karman

C: Constante da camada logarítmica que depende da rugosidade da parede.

$C_d$ : Coeficiente de arrasto,

L: Comprimento característico

$\bar{v}_i$ : Componente da velocidade média

$v_i'$ : Componente da velocidade flutuante

$\rho$ : Densidade

$y^+$ : Distância adimensional da parede.

D: Diâmetro do impelidor

T: Diâmetro do tanque

$c$ : Distância entre o impelidor e o fundo do tanque

$\Gamma$ : Difusividade específica da propriedade transportada

$\Delta y$ : Distância entre o primeiro nó da malha e a parede.

$\varepsilon$ : Dissipação viscosa

$k$ : Energia cinética turbulenta

$r''$ : Erro residual

$\delta$ : Espessura da camada limite turbulenta

$f$ : Força de arrasto ou torque

$F_1, F_2$ : Função de combinação

$\omega$ : Frequência turbulenta

$F_e$ : Fluxo convectivo na face

$g_c$ : Gravidade

$B$ : Largura da chicana

$w$ : Largura da pá

$[A]$ : Matriz de coeficientes,

$N_p$ : Número de potência

$N_q$ : Número de bombeamento

$\eta$ : Número de nós na camada limite

$Re_L$ : Número de Reynolds baseado no comprimento característico  $L$ .

Re: Número de Reynolds

Fr: Número de Froud

$P_k$ : Produção turbulenta devido às forças viscosas

$P_{kb}, P_{ob}$ : Produção de turbulência flutuante

p: Pressão

$P$ : Potência

$\vec{v}$ : Vetor velocidade

$\vec{\omega}$ : Velocidade angular

$u$ : Velocidade de borda do impelidor.

$U$ : Velocidade tangencial à parede na distância de  $\Delta y$ .

$[\phi]$ : Vetor solução,

$u^+$ : Velocidade adimensional perto da parede.

$\mu$ : Viscosidade molecular

$\mu_t$ : Viscosidade turbulenta

$\nu_t$ : Viscosidade cinemática turbulenta

Q: Vazão volumétrica

$v_{abs}$ : Velocidade em referência absoluta

$\mu_{eff}$ : Viscosidade efetiva

$n_j$ : Vetor normal da superfície

$\phi$ : Variável escalar

$\phi_{up}$ : Valor da variável do nó *upwind*

N: Velocidade rotacional do impelidor

$r$ : Vetor localização

$U_\tau$ : Taxa de atrito da velocidade

t: Tempo

$S^\phi$ : Termo fonte

$\tau$ : Tensor tensão

$\overline{v'_i v'_j}$ : Tensores de Reynolds

$T_q$ : Torque do impelidor

$\bar{v}^T$ : Transposta da velocidade

$\tau_\omega$ : Tensão de cisalhamento na parede.

$q$ : Taxa de crescimento espacial da malha.

$\eta$ : Número de pontos tomados na amostragem

$R$ : Raio do tanque

$v_z$ : Velocidade média na direção axial

$v_{ip}$ : Velocidade de borda do impelidor



## ABREVIATURAS

---

CAD	Computer Aided Design
CFD	Computational Fluid-Dinamics
DNS	Direct Numerical Simulation
EVM	Eddy Viscosity Models
FBT	Flat Blade Turbine
IBC	Impeller Boundary Condition
IO	Inner and Outer iterative procedure
LDA	Laser-Doppler Anenometry
LDV	Laser-Doppler Velocimetry
LES	Large Eddy Simulations
MDF	Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
MFR	Multiple Frames of Reference
MVF	Métodos de Volumes Finitos
PBT	Pitch Blade Turbine

QUICK	Quadratic Upstream Interpolation
RPS	Revoluções por segundo
SG	Sliding Grid
SST	The Shear Stress Transport
RANS	Reynolds Average Navier-Stokes
RMS	Root Mean Square
RNG	Renormalization Group
RSM	Reynolds Stress Model
PIV	Particle Image Velocimetry

# 1 INTRODUÇÃO

---

Conforme com McCabe *et al.* (1985), o sucesso de grande parte das operações indústrias depende da eficiência da agitação, ou mistura de fluidos. Na maioria das vezes, envolvem-se tanques agitados em escoamento turbulento. A agitação refere-se ao movimento induzido de um material de certa maneira normalmente em um padrão circulatório dentro de um container, entretanto, a mistura define-se como uma distribuição randômica entre duas ou mais fases inicialmente separadas.

No entanto, as duas pretendem uma redução da não homogeneidade no processo para conseguir resultados desejados fornecendo movimento ao fluido. Essa não homogeneidade pode ser relativa a uma concentração, temperatura ou fase que se reflete na transferência de massa, reação ou propriedades do produto. Portanto, as operações de agitação ou mistura devem ser analisadas sob-diversos ângulos para verificar-se qual é sua etapa crítica no processo.

No caso do engenheiro projetista, ele possui a sua disposição ferramentas fundamentais para desenvolver seu projeto ou analisar o problema:

- Métodos Teóricos
  - ✓ Métodos analíticos
  - ✓ Métodos numéricos
  
- Métodos experimentais

Os métodos analíticos e os métodos numéricos formam a classe dos métodos teóricos, cujo objetivo consiste em resolver as equações diferenciais que formam o modelo matemático. Nos problemas complexos da engenharia os métodos analíticos são aplicáveis somente a problemas cujas hipóteses sejam simplificadas; portanto os desviam demasiadamente do fenômeno físico real.

Por outro lado, os métodos experimentais têm a grande vantagem de tratar com a configuração real dos problemas, porém eles são de alto custo, e na maioria das vezes podem não ser considerados por questões de segurança ou pela dificuldade da reprodução das condições reais. Por esse motivo, desde a década dos noventa tem-se aumentado o interesse no desenvolvimento de métodos numéricos, tais como a fluidodinâmica computacional (CFD) para a análise dos processos de agitação e mistura.

De acordo com Lane *et al.* (2000), as operações em tanques agitados mostram um escoamento tridimensional complexo, levando uma considerável incerteza no projeto e dimensionamento destes equipamentos; portanto, é necessária a utilização de métodos ainda mais precisos para obter resultados que proporcionem um entendimento detalhado dos mecanismos de transferência de massa, energia e momento no interior do tanque e, assim, revelar ineficiências no processo de mistura.

O tempo e o custo do projeto de um novo equipamento podem ser sensivelmente reduzidos com o uso da simulação numérica; entretanto uma associação adequada entre a simulação e a avaliação física do problema com dados experimentais resultará num projeto mais sofisticado, visto que a visualização do perfil das variáveis tais como: concentração, velocidade, temperatura e pressão ao longo do domínio da solução são possíveis. Tudo isso permitirá fornecer informação sobre a hidrodinâmica do processo, necessária na otimização dos processos em tanques de mistura.

Existe uma série de números adimensionais usados para descrever as operações de agitação e mistura, por meio de correlações experimentais que podem ser encontradas na literatura ou em muitos outros casos de resultados de CFD. O número de potência e o número de bombeamento são alguns deles. Estes parâmetros são utilizados para obter informações sobre consumo de potência do impelidor e a capacidade de circulação do fluido, variáveis que são importantes para caracterizar o desempenho do processo em tanques de mistura.

Contudo, para garantir o sucesso de todo o projeto utilizando CFD, algumas orientações em sua modelagem deverão ser analisadas. Este trabalho foi iniciado como parte de um projeto global com vista à análise de “boas práticas na modelagem CFD”.

Existem muitos parâmetros na modelagem CFD que ainda admitimos como corretos. Alguns deles, porém, são muitos questionáveis. Portanto, quando se compara o que esta sendo feito, com tudo aquilo que deveria ser feito conforme os procedimentos especificados no manual do software CFD, podem aparecer questões que deverão ser resolvidas, tais como:

1. Como poderia se definir uma malha fina? A quão fina deveria ser esta malha?
2. Podem as malhas tetraédricas serem tão precisas quanto às malhas hexaédricas quando se utiliza o método de volumes finitos?
3. Deveria o tamanho da malha ser ligado ao valor da distancia adimensional ( $y^+$ ), quando o escoamento seja turbulento? Se assim for, como este valor varia com o modelo de turbulência, ou com a variável de interesse (por exemplo, temperatura ou concentração)?
4. Como deveria ser realizado um teste de independência de malha?. A malha pode influenciar parâmetros tais como o número de potência e o número de bombeamento de igual forma, por exemplo?
5. Os métodos de abordagem da rotação do impelidor foram primeiramente desenvolvidos para turbo-máquinas, onde a separação entre o rotor-stator é muito pequena. Neste caso, a distância da interface entre o sistema rotativo e o sistema estático localiza-se na metade da separação entre o rotor-stator. Deveríamos seguir esse mesmo procedimento? Ou será que na verdade pode-se estar criando uma “falsa rotação”?
6. Poderia elaborar-se uma tabela, em que se definam os passos básicos que se deverão tomar na modelagem CFD para estimar o consumo de potência e bombeamento, ou qualquer outra variável de interesse, para um escoamento monofásico ou ate mesmo multifásico?

O objetivo deste trabalho é responder algumas dessas questões. Certamente um só trabalho não será capaz de responder todas essas questões. De fato, as primeiras questões listadas acima ainda não foram respondidas satisfatoriamente. Contudo, apresentaremos alguns resultados de uma pesquisa inicial realizada em conjunto com a Universidade de Alberta (Edmonton, Canadá).



## 2 OBJETIVO

---

### 2.1 Objetivo Global

O objetivo principal do presente trabalho consiste em demonstrar que a utilização de uma malha não estruturada tetraédrica na modelagem CFD pode fornecer bons resultados na simulação de tanques de mistura; desde que sejam considerados alguns cuidados para proporcionar uma boa representação do fenômeno físico envolvido nos problemas de agitação e mistura. Para tanto, foram realizados diferentes testes para simulações CFD em impelidores tipo pás retos inclinados (PBT).

### 2.2 Objetivos Específicos

No desenvolvimento do projeto se encontrarão os seguintes objetivos:

1. Analisar o efeito do refinamento da densidade de malha com elementos tetraédricos e a influência da camada de prisma nas superfícies do tanque e impelidor, sobre parâmetros globais tais como: o número de potência ( $N_p$ ), número de bombeamento ( $N_q$ ), assim como, do perfil de velocidade.

2. Realizar um estudo inicial de sensibilidade de alguns modelos turbulentos (*Standard  $k-\epsilon$  model*, *SST model*, *BSL-Reynolds Stress model*) e esquemas de discretização (*Upwind*, *High resolution*, *Specific blend fator*) sobre os campos de fluxo gerados pelo impelidor, disponíveis no software ANSYS CFX 14.0.

3. Finalmente, comparar os resultados numéricos gerados pelo modelo CFD proposto com dados experimentais obtidos a partir da técnica de imagem da velocidade de partícula (PIV), a fim de fazer a validação física do problema e verificar a fidelidade do modelo de simulação CFD de acordo os resultados experimentais. Portanto, valores de  $N_p$ ,  $N_q$  e também o perfil de velocidade axial adimensional serão comparados com dados experimentais de Machado *et al.* (2011).



## **3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

---

### **3.1 Introdução**

Neste capítulo serão mostrados alguns trabalhos visando auxiliar o entendimento de parâmetros relevantes na fluidodinâmica computacional que podem ser avaliados numericamente e alterados até conseguir-se que o resultado da simulação atinja às exigências do projeto; destacando cada vez mais o uso de CFD como uma ferramenta útil na resolução de projetos de sistemas de mistura.

Em geral, se focará no uso de técnicas CFD referente às estratégias da iteração impelidor-chicana, assim como a influência do modelo de turbulência e densidade da malha, sobre diversos parâmetros globais importantes no desempenho dos processos de mistura; tais como: padrões de fluxos, potência consumida, bombeamento, perfis de velocidade, entre outros. Embora todos esses estudos de certa maneira sejam complexos, porém, na última década estes estudos vêm já sendo analisado por diversos pesquisadores.

### **3.2 Trabalhos em CFD Aplicados em Sistemas Agitados**

De acordo com o pesquisador Deglon (2006), os modelos CFD em tanques de mistura requerem, entre outras coisas, uma adequada seleção da densidade da malha, do esquema de discretização, do modelo de turbulência e da abordagem utilizada para descrever a rotação do impelidor. Nesta seleção de considerações numéricas, pode haver uma enorme influência sobre a exatidão da simulação e o esforço computacional associado.

Assim, a densidade da malha é um fator importante na simulação CFD, já que está diretamente envolvida no custo computacional da solução. Para determinar a densidade da malha necessária a fim de obter uma solução numericamente independente, é necessário fazer um teste de independência da malha. O teste consiste em realizar simulações refinando a malha até não encontrar diferenças significativas nos valores preditos das variáveis observadas. De acordo com

Wechsler *et al.* (1999), são necessárias malhas refinadas para isolar erros numéricos na predição de quantidades de transporte nos modelos de turbulência.

Geralmente, na simulação CFD são frequentemente utilizados métodos para descrever o movimento do impelidor em estado pseudo-transiente, tais como o MFR (*Multiple Frames of Reference*) e assim diminuir custo computacional. Conforme alguns pesquisadores, a abordagem MFR fornece resultados similares com relação a outras abordagens transientes mais sofisticadas para simulações de tanques de mistura no estado estacionário (Koh *et al.*, 2003; Koh and Schwarz, 2005).

Por outro lado, alguns autores têm pesquisado o efeito do esquema de discretização sobre a predição do fluxo. Estudos tais como Brucato *et al.* (1998), fizeram comparações utilizando um esquema híbrido (*upwind*-diferença central) e um esquema de alto ordem (*Quadratic Upstream Interpolation* “QUICK”), observando que a escolha do esquema de discretização tem pouco efeito sobre a solução. Não obstante, Aubin *et al.* (2004), pesquisaram três diferentes esquemas de discretização (*upwind*, *upwind*-diferença central e QUICK), encontrando pouco efeito no padrão de fluxo, mas algumas diferenças significativas principalmente no perfil de velocidade e no cálculo das quantidades turbulentas. Cabe salientar que todos esses estudos foram feitos utilizando malhas hexaédricas.

A abordagem RANS (*Reynolds Average Navier–Stokes*) é o método de simulação mais amplamente utilizado no campo da turbulência em tanques de mistura desde a década de 90. (Brucato *et al.*, 1994; Luo *et al.*, 1994; Murthy *et al.*, 1994). A dependência numérica dos resultados dessa abordagem aplicados em tanques de mistura tem sido considerada em poucos trabalhos (Aubin *et al.*, 2004; Deglon e Meyer, 2006). Entretanto, é importante salientar que as limitações da capacidade computacional não têm permitido uma total investigação das incertezas numéricas devido à discretização espacial do domínio computacional. Por conseguinte, os estudos de independência de malha são limitados ao tamanho de malhas grossas (Aubin *et al.*, 2004; Brucato *et al.*, 1998; Montante *et al.*, 2001; Yianneskis *et al.*, 1998; Ranade *et al.*, 2002).

Dentro da abordagem RANS, o modelo de turbulência k-ε é o modelo mais amplamente usado na modelagem de escoamentos turbulentos em tanques de mistura. Na maioria dos casos estudados, foi encontrada uma pobre predição das quantidades turbulentas atribuídas às deficiências desse modelo, principalmente pela suposição da turbulência isotrópica, limitando a predição de vórtices e recirculações de fluxos (Abuejelala and Lilley, 1984; Armentante *et al.* 1997; Jenne and Reuss, 1999). Diversos autores realizaram comparações das predições do escoamento em tanques agitados, usando diversos arranjos do modelo k-ε, tais como Chen Kim e *Renormalization Group* “RNG” (Ranade *et al.*, 1989; Jenne and Reuss, 1999; Jaworski and Zakrzewska, 2002; Aubin *et al.*, 2004). No entanto, têm-se feito sugestões indicando que os modelos de turbulência que não estejam baseados na suposição da turbulência isotrópica, poderiam fornecer melhores resultados. Porém, alguns estudos publicados baseados em modelos turbulentos não isotrópicos RSM (*Reynolds Stress Model*) mostram que os campos dos perfis da velocidade cinética turbulenta apresentam maiores desvios dos valores que aqueles obtidos usando o modelo k-ε com relação aos dados experimentais (Montante *et al.*, 2001; Jaworski and Zakrzewska, 2002).

Visto que a modelagem em CFD é baseada sobre as equações de Navier-stokes e modelos matemáticos, em que podem ser assumidas simplificações, existem muitas discrepâncias em torno do tipo da modelagem utilizada, tais como os modelos de turbulência, métodos de discretização e abordagens de rotação do impelidor (Aubin *et al.*, 2004). Assim mesmo, poucos autores têm reportado na literatura o efeito das diferentes abordagens na modelagem CFD em tanques de mistura. Dentre esses autores, podem-se encontrar alguns trabalhos descritos como segue:

Sahu e Joshi, (1995) utilizaram a técnica IBC (*Impeller Boundary Condition*) para simular um impelidor de pás inclinadas e fizeram comparações entre três diferentes esquemas de discretização de primeira ordem (*upwind*, *upwind*-diferenças centrais e esquema de lei de potência). Eles concluíram que tanto o esquema híbrido *upwind* quanto a lei de potência fornece resultados similares, enquanto o esquema *upwind* apresenta diferenças significativas, porém possui uma convergência mais rápida. Avaliações foram feitas com dados experimentais encontrando-se o esquema da lei de potência mais robusto e com maior exatidão.

Brucato *et al.* (1998) e (1999) realizaram comparações dos resultados das simulações para impelidor Rushton e pás inclinadas com modelo de turbulência  $k-\varepsilon$ , utilizando diferentes abordagens para simular o movimento do impelidor (IBC, MFR, SG) e métodos de discretização (*upwind*-diferenças centrais e QUICK). Eles mostraram que os resultados do método IBC são mais sensíveis às condições de contorno, visto que dependem da disponibilidade e precisão desses dados. O método MFR dá uma maior precisão nas previsões que o método IBC, mas requer um esforço computacional a mais. Entretanto, os autores encontraram que o método SG (*Sliding Grid*) produz os melhores resultados com relação aos dados experimentais para os campos de fluxos, embora tenha tendência de sub-predizer os valores das quantidades turbulentas. De acordo com os resultados obtidos, concluíram que o esquema numérico QUICK não apresenta diferenças apreciáveis com relação ao esquema híbrido *upwind*, mas, o primeiro tende a reproduzir taxas altas de recirculação no topo e fundo do tanque.

Alguns trabalhos têm sido focados ao estudo da influência do modelo de turbulência na solução numérica. Assim, alguns pesquisadores como Jaworski *et al.* (1997), estudaram o fluxo produzido pela turbina Rushton comparando os métodos de turbulência  $k-\varepsilon$  e RNG  $k-\varepsilon$  mediante uma abordagem de malhas deslizantes (SG). Eles reportaram que o método de turbulência não tem muita influência nas velocidades médias. Embora as quantidades turbulentas fossem totalmente sub-preditadas pelos dois métodos. O modelo  $k-\varepsilon$  mostrou uma melhor concordância com os dados experimentais. Entretanto, Bakker *et al.*, (1996) pesquisaram o fluxo turbulento para impelidor pás inclinadas utilizando três modelos turbulentos ( $k-\varepsilon$ , RNG e RSM) os quais foram comparados com dados experimentais obtidos por LDV (*Laser-Doppler Velocimetry*). Os autores mostraram que os campos de velocidade axial e radial preditos pelos três modelos apresentam resultados similares e razoáveis com relação a dados experimentais. Oshinowo *et al.*, (2000) estudaram o efeito do modelo de turbulência  $k-\varepsilon$ , RNG  $k-\varepsilon$  e RSM no perfil da velocidade tangencial no tanque agitado usando a técnica MFR. Eles encontraram regiões de vórtices preditas pelo simulador que não estão de acordo com a física do fenômeno, as quais poderiam ser reduzidas pelo uso do modelo RNG e ainda mais com o modelo RSM.

Frequentemente, em estudos de CFD, a exatidão dos resultados é avaliada somente com relação aos perfis de velocidades. Não obstante, parâmetros turbulentos são de grande importância na modelagem de uma série de aplicações em tanques de mistura. Por isso, têm-se realizado estudos para proporcionar uma maior capacidade de predição nas quantidades turbulentas, quer seja pelo refinamento da malha (Yianneskis, 1998) ou pela utilização de modelos de turbulência mais adequados que possam descrever melhor essas quantidades (Bakker *et al.*, 1996).

Lane *et al.* (2000) apresentaram resultados de simulações feitas para configurações padrões de tanques agitados com impelidor tipo Rushton. Foram discutidos e comparados os métodos de malhas deslizantes (SG) e sistema múltiplo de referência (MFR) com relação ao tempo computacional e precisão na predição de parâmetros de turbulência assim como velocidades médias. Observou-se que o uso do método MFR gera um menor tempo computacional, cerca de uma ordem de magnitude. Na predição de velocidades médias, concluíram que os dois métodos testados tiveram resultados bons com relação a dados experimentais, porém, eles não deram boas predições nos parâmetros turbulentos, tais como energia cinética turbulenta e dissipação da energia turbulenta apesar do método MFR fornecer melhores resultados.

Montante *et al.* (2001) adotaram as técnicas de simulação SG e IO (*Inner-Outer iterative procedure*) para observar o efeito da distância entre o impelidor e o fundo do tanque (*clearance*) sobre o fluxo padrão em tanques agitados. Os resultados foram comparados com dados experimentais obtidos pela técnica LDA (*Laser-Doppler Anemometry*) mostrando que é possível simular por técnicas de CFD a transição experimental observada no fluxo padrão quando é feita uma redução da distância entre o fundo do tanque e o impelidor. Os autores fizeram testes para diferentes densidades de malha hexaédrica e diversos modelos de turbulência a fim de aperfeiçoar os resultados com relação aos obtidos experimentalmente.

Aubin *et al.* (2004) fizeram estudos sobre o efeito do método numérico e do modelo turbulento sobre as velocidades médias, energia cinética turbulenta e quantidades globais, tais como número de potência e bombeamento. Os resultados foram validados com dados experimentais obtidos por LDV. Percebeu-se pouca influência entre o uso da modelagem dependente do tempo e no estado estacionário com relação ao fluxo turbulento. Porém, o

esquema numérico teve uma influência considerável, principalmente na predição da energia cinética turbulenta. Também se observou que os métodos numéricos de primeira ordem apresentaram maior desvio nos resultados do que os métodos de alta ordem. Em relação aos modelos turbulentos testados ( $k-\varepsilon$  e RNG  $k-\varepsilon$ ), não se encontraram diferenças consideráveis nos resultados obtidos. Conforme os resultados, o número de potência calculado para impelidores de pás inclinadas PBT (*Pitch Blade Turbine*) teve uma boa concordância nos dados, tanto para agitadores de alto quanto de baixo bombeamento, porém o número de bombeamento foi superestimado.

Deglon e Meyer (2006) demonstraram para o caso da modelagem através da técnica MFR utilizando o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  (comumente usado nas simulações em CFD), pode-se modelar o fluxo turbulento do fluido fazendo o uso de malhas muito finas acopladas com esquemas numéricos de alta ordem para fornecer resultados adequados. Fizeram simulações para diversos esquemas numéricos (*Upwind*, diferenças centrais, *QUICK*) e densidades de malha. Foram avaliados parâmetros tais como campos de velocidades, número de potência e energia cinética turbulenta usando dados da literatura. Concluíram que as predições dos campos de fluxo e velocidades médias não são fortemente influenciadas pelos esquemas numéricos nem pela densidade da malha, porém, a energia cinética turbulenta apresenta uma forte influência para as duas situações. Pode-se inferir que predições ruins obtidas usando o modelo turbulento  $k-\varepsilon$ , frequentemente citadas na literatura poderiam ser devido ao erro numérico pelas questões anteriormente ditas.

Jean-Philippe Torre *et al.* (2007) realizaram estudos hidrodinâmicos baseados em simulações CFD para um sistema de tanque agitado com presença de chicanas usando uma abordagem MFR. Para baixa rotação do impelidor, foi utilizada uma modelagem monofásica onde foi observada uma superfície livre plana, enquanto para altas rotações foi utilizada uma modelagem multifásica para capturar a localização da superfície livre. Foram mostrados efeitos transientes significativos o que levou a supor que algumas regras consideradas na superfície livre necessitam ser revisadas. As simulações foram feitas com os modelos de turbulência de  $k-\varepsilon$  e RSM. Os resultados foram avaliados com medidas experimentais usando a técnica PIV (*Particle*

*Image Velocimetry*), tanto para superfície livre plana quanto para superfície livre deformada, coincidindo com resultados concordantes no consumo de potência calculado na simulação.

Murthy e Joshi (2008) pesquisaram detalhadamente as capacidades preditivas de diversos modelos de turbulência, tais como k- $\epsilon$ , RMS e LES (*Large Eddy Simulations*). No caso do modelo LES foi necessário usar uma equação dinâmica para a modelagem da escala da malha. Compararam-se os valores de velocidades médias axial, radial e tangencial, além da energia cinética turbulenta com dados obtidos por LDA. Os autores identificaram que o modelo LES teve o melhor desenvolvimento nas predições de todas as variáveis calculadas, já, o modelo RSM e k- $\epsilon$  mostraram desvios no cálculo da energia cinética turbulenta principalmente na região do impelidor. O modelo RMS conseguiu capturar bem os fluxos característicos, mas o modelo k- $\epsilon$  falhou no cálculo da simulação dos fluxos associados com turbilhões fortes. Foram testadas simulações para diversos tipos de impelidores, tais como Rushton, pás inclinadas (PBT60/ PBT45/ PBT30) e hydrofoil (HF).

M. Coroneo *et al.* (2010) avaliaram o efeito da densidade da malha hexaédrica e o esquema numérico na predição de parâmetros globais, velocidades médias, taxa de dissipação turbulenta e homogeneização. A modelagem foi feita para um tanque de agitação com escoamento monofásico utilizando o modelo de turbulência RANS. Segundo os autores, de modo geral, pode-se obter bons resultados tanto no cálculo de parâmetros globais quanto de fluxo, porém, deve-se tomar cuidado com o cálculo das quantidades turbulentas. No último caso, demonstraram que as limitações do modelo RANS diminuíam se levassem em conta as considerações numéricas mais apropriadas. Os resultados das simulações foram comparados e analisados com dados da literatura.

Finalmente, hoje em dia, métodos experimentais avançados, tais como LDV e PIV têm sido desenvolvidos para obter informações detalhadas sobre os campos de fluxo em escoamentos turbulentos, sendo utilizados com preferência para avaliar as simulações de CFD em tanque de mistura. (Aubin *et al.*, 2001; Ranade *et al.*, 2001).



## 4 SISTEMAS DE AGITAÇÃO E MISTURA

---

As operações de agitação e mistura são que buscam reduzir qualquer não uniformidade ou diminuir gradientes existentes de composição, temperatura ou propriedades de um ou vários fluidos respectivamente. Um sistema de agitação eficiente consiste em atingir a mistura, não só no menor tempo possível, mas também com o menor gasto de energia; seja para fornecer um maior rendimento do sistema reacional, uma melhor troca de calor ou maior qualidade do produto.

O estudo de sistemas de agitação deve levar em conta considerações básicas, tais como a geometria do tanque, tipo de impelidor e as dimensões do equipamento que podem ser determinantes no desempenho do processo de agitação. O desenho do tanque e o tipo de impelidor deveriam ser escolhidos de acordo com a classe de aplicação no processo.

A operação de agitação pode ser classificada, segundo Nagata (1975), em cinco classes de aplicações primárias: líquido-sólido, líquido-gás, líquidos imiscíveis, líquidos miscíveis e movimentação do fluido. Assim, dependendo do propósito da operação de mistura, a geometria do tanque e tipo de impelidor pode mudar significativamente. Além disso, existem alguns fatores que pode aumentar o nível de complexidade do projeto de tanques, tais como:

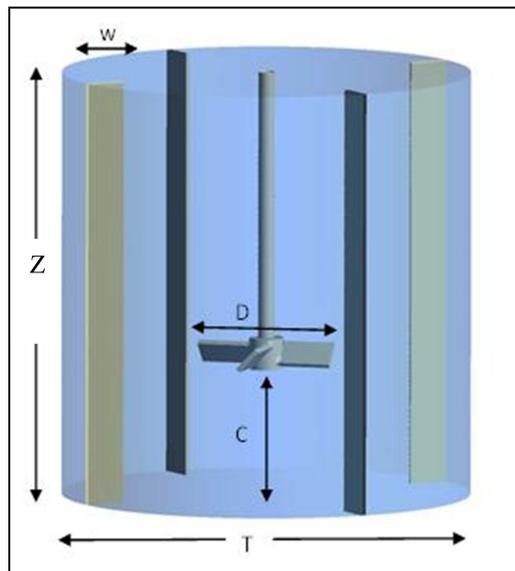
- Sistemas multifásicos
- Fluidos não-newtonianos
- Regime de escoamento numa faixa de transição entre laminar e turbulento
- Condições iniciais e de contorno complexas

Embora os processos de agitação e misturas sejam utilizados há muito tempo, seu entendimento, entretanto, ainda é muito limitado devido ao fato de que os fenômenos de escoamento são muito complexos, portanto a solução do equacionamento das quantidades de transporte (massa, quantidade de movimento, energia) é também complexa. Por esse motivo é preciso utilizar aproximações numéricas ou empíricas.

## 4.1 Tanque de Mistura

Um tanque agitado convencional consiste geralmente de uma estrutura vertical cilíndrica (sendo esta a parede do tanque), um ou mais impelidores e, comumente, chicanas. Alguns tanques apresentam serpentinas ou jaquetas para processos que necessitem de troca térmica.

Conforme como se mostra na Figura 4-1, frequentemente, são utilizadas como referência, dimensões características do sistema de agitação como a relação entre a altura do tanque ( $Z$ ) e seu diâmetro ( $T$ ) para descrever os efeitos da geometria (Oldshue, 1983).



*Figura 4-1 Dimensões características de um tanque agitado convencional*

Normalmente a relação  $Z/T$  é igual a um, mas em alguns processos esse valor pode ser modificado, como por exemplo, para suspensão de sólidos, onde a relação ótima para o menor consumo de potência encontra-se entre 0,6 e 0,7 (Oldshue, 1983). Mais de um impelidor será necessário no tanque se houver uma razão de aspecto  $Z/T > 1,5$ . Existem diversas relações geométricas do tanque que variam em de acordo com a aplicação desejada e as características do fluido envolvido (Hemrajani *et al.*, 2004).

Para cada processo existe um tipo de fundo do tanque mais adequado para evitar zonas estagnadas. As configurações abauladas, cônicas, planas, entre outras, envolvem aspectos tais como: resistência mecânica, influência no padrão de fluxo, limpeza e sanitariedade, sendo o fundo abaulado o mais empregado (Joaquim Junior *et al.*, 2007).

As chicanas (ou defletores) são chapas metálicas montadas verticalmente nas paredes e são geralmente usadas nos processos que ocorrem em regime transitório ou turbulento. Seu objetivo é evitar a rotação sólida do fluido provocando um distúrbio no fluxo e impedir a formação de vórtices provocando a formação de uma superfície livre plana acima do fluido. As chicanas promovem a transferência de potência para o fluido, favorecem a mistura axial desde o fundo até o topo do tanque e evitam a entrada de ar no sistema. O tamanho e o tipo adequado das chicanas devem ser escolhidos em função de criar um padrão de fluxo eficiente para uma maior ação de mistura. O número de chicanas, normalmente utilizadas são quatro e possuem uma largura ( $w$ ) entre 1/10 a 1/12 do diâmetro do tanque (Oldshue, 1983).

## 4.2 Tipos de Impelidores

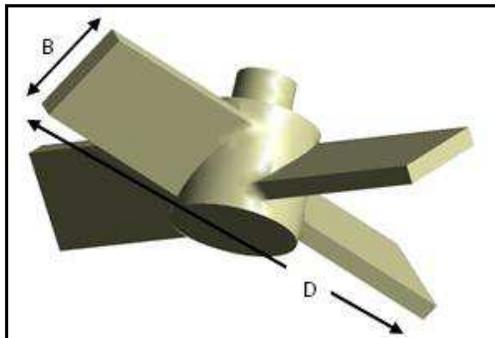
Existe na literatura uma enorme variedade de tipos de impelidores disponíveis para uso comercial, mas a escolha certa do impelidor deverá ser baseada na análise dos requerimentos do processo e conhecimento das propriedades físicas do escoamento. No caso do fluxo turbulento, os impelidores podem ser divididos em diversas classes, baseados em seu fluxo padrão, aplicações e geometrias especiais.

Com o fluxo, os impelidores podem ser classificados em fluxo axial e fluxo radial. A classificação também define o tipo de aplicação para o qual esse impelidor é usado. Assim, os impelidores de fluxo axial são muito eficientes para mistura de líquidos e suspensão de sólidos e transferência de calor, entretanto, os impelidores de fluxo radial são mais utilizados para dispersão de gás e transferência de massa (Hemrajani *et al.*, 2004). Os impelidores tipo axial apresentam a característica de gerar componentes de velocidades paralelas ao eixo do impelidor, enquanto ao impelidor de fluxo radial descarga o fluxo ao longo do raio do impelidor gerando componentes de velocidade na direção radial, como pode ser visto na Figura 4-2.

Embora existam grande variedades de impelidores, os mais empregados comercialmente para regime turbulento são: o impelidor naval (*Marine propeller*), de pás retas (FBT), de pás inclinadas (PBT) e tipo Rushton. Na Figura 4-3 podem ser vistos os desenhos típicos dos impelidores mais utilizados para o fluxo turbulento.

Os impelidores tipo naval são de fluxo axial e apresentam menor consumo de potência que outros impelidores do mesmo diâmetro com a mesma velocidade de rotação, portanto operam normalmente com altas rotações. Além disso, apresentam uma boa capacidade de bombeamento tendo uma boa eficiência no fluxo de massa por unidade de potência porquanto possuem um impulso uniforme ao longo da pá.

Os impelidores de pás inclinadas são considerados de fluxo misto, visto que sua descarga de fluxo gera componentes de velocidade tanto axiais quanto radiais. As pás podem ter um ângulo entre  $10^\circ$  e  $90^\circ$  de inclinação com relação ao seu plano horizontal, sendo comumente utilizado um ângulo de  $45^\circ$ . O impelidor também pode ser descrito por meio de dimensões características que são expressas em função do diâmetro do impelidor ( $D$ ), tal com a largura da pá ( $B$ ), sendo utilizadas em equipamentos de bancada no máximo relações de  $B/D=1/5$  (Figura 4-2). Esse tipo de impelidor apresenta uma excelente combinação entre um baixo cisalhamento com uma boa capacidade de bombeamento (Oldshue, 1983).



*Figura 4-2 Dimensões características do impelidor*

Os impelidores de fluxos radiais podem ser de disco (Rushton) ou abertos (FBT) e, são usados em aplicações que precisem de altas tensões de cisalhamento e turbulência com um baixo bombeamento particularmente em processos de transferência de massa gás-líquido. O

impelidores tipo Rushton apresentam um padrão de fluxo radial mais uniforme, porém mostram uma maior potência que os impelidores abertos. O desenho do impelidor Rushton geralmente se constrói utilizando dimensões relativas ao diâmetro do impelidor ( $D$ ) baseadas nas seguintes relações geométricas: comprimento da pá de  $D/4$ , largura da pá de  $D/5$  e diâmetro de disco de  $0,66-0,75D$  (Hemrajani *et al.*, 2004).

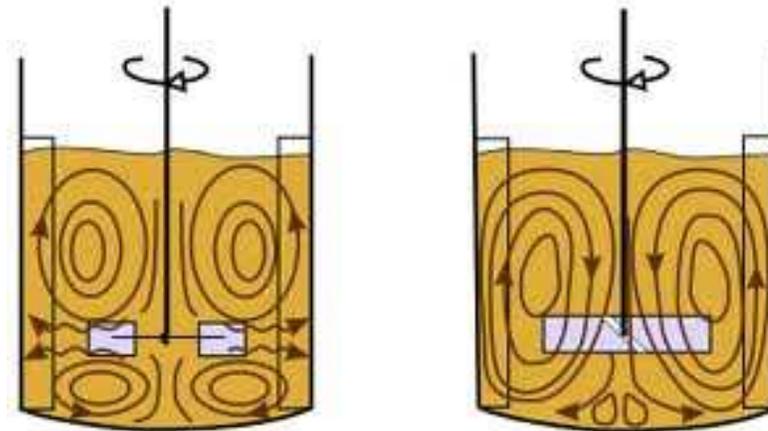


Figura 4-3 Padrão de fluxos gerados conforme o tipo de impelidor em tanques de mistura. A) Impelidor de fluxo radial B) Impelidor de fluxo axial (Adaptado de Smith, 2011).

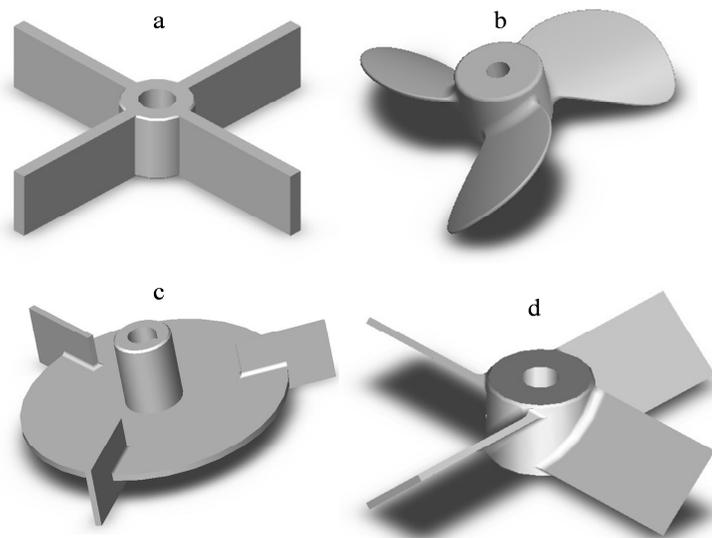
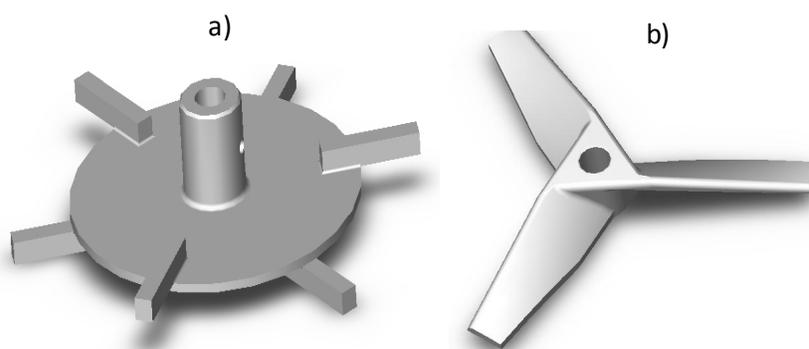


Figura 4-4 Impelidores mais utilizados em escoamentos turbulentos. a) Tipo pás retas. b) Tipo naval. c) Tipo turbina. d) Tipo pás inclinadas (Adaptado de Post Mixing Optimizations and Solutions, 2012).

Recentemente a tecnologia para impelidores tem se focado em geometrias especiais não só no aumento do fluxo axial dos mesmos, senão também em reduzir seu cisalhamento, portanto, tem se realizado mudanças no perfil das pás para melhorar sua eficiência e aumentar seu bombeamento. Essa nova classe de impelidores é chamada "*Hydrofoil*". Por outro lado, existem também impelidores para um alto cisalhamento, que operam em condições de alta velocidade, utilizados para dispersão de material, emulsões ou no acréscimo de uma segunda fase. Geralmente, esse tipo de impelidor possui um baixo bombeamento pelo qual frequentemente são utilizados junto com impelidores axiais para proporcionar uma melhor homogeneização. Na Figura 4-3 podem ser vistos alguns desenhos de impelidores com geometrias especiais utilizados em processos específicos na indústria.



*Figura 4-5 Impelidores desenvolvidos para processos específicos. a) Impelidor de alto cisalhamento (bar Turbine). b) Impelidor tipo Hydrofoil (Lightnin A310). (Adaptado de Post Mixing Optimizations and Solutions, 2012).*

Embora os impelidores possam ter entre 2 e 12 pás, normalmente é utilizado um número entre 3 a 6 pás para manter uma maior estabilidade mecânica. Além disso, tem-se dificuldade no desenho para construir impelidores com mais de 6 pás (Hemrajani *et al.*, 2004).

A localização relativa do impelidor com relação às paredes do tanque, outros impelidores ou à superfície livre do fluido tem um efeito no consumo da potência. A distância entre o fundo do tanque e o impelidor (*Clearence*), afeta o padrão de fluxo na direção radial e axial; por conseguinte não é aconselhável que o impelidor seja localizado muito perto do fundo do tanque, a fim de evitar o desenvolvimento de turbilhões que possam afetar consideravelmente as zonas de

bombeamento do impelidor. No caso dos impelidores de fluxo axial, quando o impelidor é deslocado perto do fundo do tanque observa-se um acréscimo na potência devido ao aumento da resistência de fluxo; entretanto em impelidores de fluxo radial, diferentemente do anterior, há uma diminuição da potência devido à redução da zona de bombeamento na região abaixo do impelidor. Portanto, é comumente usado para *blending* um espaço T/3 enquanto a impelidor de fluxo radial é localizado em um espaço de T/6 (Hemrajani *et al.*, 2004).

Finalmente, a escolha de um tipo de impelidor ótimo deverá basear-se no entendimento da importância do processo de agitação e o conhecimento dos fenômenos físicos que ocorrem no sistema. Na atualidade o desenvolvimento da tecnologia está sendo focada no desenho de impelidores especiais que possam atingir melhor as necessidades específicas do processo.

### 4.3 Variáveis de Projeto

Um sistema de agitação é muito semelhante a uma bomba e embora não seja tão eficiente quanto ela, possui algumas das características de uma bomba. Uma dessas características fundamentais é o efeito de bombeamento produzido pela potência aplicada pelo impelidor. Portanto, toda potência transferida do impelidor para o fluido gera uma força de cisalhamento e um fluxo no fluido.

Diversos pesquisadores têm reportado parâmetros característicos associados com sistemas de agitação utilizando quantidades adimensionais para obter correlações sobre dados importantes, como o consumo de energia, capacidade de circulação, regime de turbulência, entre outros. Um número adimensional é um número desprovido de unidades físicas que o defina, por conseguinte, esta análise se baseia no fato que as leis naturais são independentes das unidades.

#### 4.3.1 Número de Reynolds e Número de Froude

O número de Reynolds relaciona as forças inerciais com as forças viscosas e, no caso da agitação, foi desenvolvido baseado na definição clássica do número de Reynolds  $Re = \rho LU / \mu$ , onde " $L$ " é um comprimento característico e " $u$ " uma velocidade característica.

Substituindo " $L$ " pelo diâmetro do impelidor  $D$  e " $u$ " pela velocidade na borda do impelidor ( $\pi ND$ ), obtemos a seguinte expressão:

$$Re = \frac{\rho \pi D^2 N}{\mu} \quad (4.1)$$

Em que, "N" refere-se á velocidade de rotação do impelidor.

Assim, Valores de  $Re$  abaixo de 10 caracterizam o regime laminar e valores acima de  $10^4$  o regime turbulento. Entre esses valores o regime é de transição (Joaquim Junior *et al.*, 2007).

Entretanto, o número de Froude representa o balanço das forças inerciais atuantes com relação às forças gravitacionais no sistema de agitado, e é normalmente usado para considerar os efeitos da superfície livre causados pela formação do vórtice central encontrados em sistemas sem chicanas. O número de Froude pode ser descrito como segue:

$$Fr = \frac{N^2 D}{g_c} \quad (4.2)$$

#### 4.3.2 Potência e Número de Potência

Em sistemas de agitação ou mistura uma das considerações importantes a levar em conta é o consumo de potência, pelo seu relacionamento ao custo da energia aplicada. A maior parte da energia fornecida pelo impelidor é transformada em energia cinética turbulenta e o resto é dissipado pelas forças viscosas do fluido; fatores ligados ao efeito de mistura ou agitação requerido.

Assim, no cálculo da potência, considera-se a transferência da energia do impelidor para o fluido, necessária para superar as forças de arrasto atuantes sobre o mesmo; e pode ser determinada segundo Hemrajani *et al.* (2004), como segue:

$$P = (f)(u) \quad (4.3)$$

Onde  $f$  é a força de arrasto ou torque e " $u$ " a velocidade característica do impelidor. O torque é definido como a força aplicada sobre o fluido e distribuída ao longo da distância da pá do impelidor, a qual produz a rotação do fluido. A força de arrasto em regime turbulento pode ser representada pela expressão mostrada embaixo:

$$f = C_d \rho u^2 A_p \quad (4.4)$$

Sendo  $C_d$  o coeficiente de arrasto,  $\rho$  a massa específica do fluido e  $A_p$  a área projetada da pá do impelidor. Portanto, substituindo tem-se:

$$P = C_d \rho u^3 A_p \quad (4.5)$$

Sabemos que a velocidade característica " $u$ " no sistema de agitação é proporcional a  $ND$ , entretanto sua área projetada é proporcional a  $D^2$ , em que "N" corresponde à velocidade rotacional e "D" ao diâmetro do impelidor; por conseguinte a potência pode ser representada pela seguinte expressão:

$$P \propto C_d \rho N^3 D^5 \quad (4.6)$$

Assim, a potência consumida pelo impelidor é uma função da velocidade do impelidor, de seu diâmetro e sua geometria. Além disso, envolve outros aspectos, incluindo a propriedade física do fluido, localização do impelidor e geometria do tanque.

A estimativa de potência para o caso do escoamento turbulento em um sistema homogêneo pode ser realizada através de análise dimensional e medidas experimentais. Portanto, o grupo adimensional denominado número de potência pode ser determinado baseado na equação Eq. (4.6).

$$N_p = \frac{P}{\rho N^3 D^5} \quad (4.7)$$

De acordo com o teorema de PI de Buckingham que define a relação das variáveis através de números adimensionais, a análise dimensional aplicada para o tanque agitado em regime turbulento fornece uma relação do tipo (Uhl e Gray, 1966):

$$N_p = f\left(\frac{\rho ND^2}{\mu}, \frac{N^2 D}{g_c}, \frac{P}{\rho N^3 D^5}, \frac{T}{D}, \frac{c}{D}, \frac{Z}{D}, \frac{w}{D} \dots\right) \quad (4.8)$$

Percebe-se que para manter a coerência dimensional, os grupos nesta equação são adimensionais. Sendo assim, o número de potência é proporcional ao número de Reynolds, o número de Froude e outros números que representam os efeitos da geometria. Se a similaridade geométrica é mantida para um escoamento turbulento em tanques com chicanas, para altos números de Reynolds o número de potência é constante e independente da viscosidade. Atualmente, existem diversas correlações para o cálculo do número de potência em função do número de Reynolds do impelidor para diferentes configurações de tanques de mistura.

#### 4.3.3 Número de Bombeamento

O número de bombeamento é uma medida da quantidade de material descarregado pelo impelidor. Este número relaciona a vazão volumétrica (Q) gerada pelo impelidor com a velocidade de rotação (N) e o diâmetro do impelidor (D) (Hemrajani *et al.*, 2004), como segue na seguinte expressão:

$$N_q = \frac{Q}{ND^3} \quad (4.9)$$

O número de bombeamento aumenta com o acréscimo do regime turbulento até se tornar constante para altos números de Reynolds. Além disso, devemos salientar que o bombeamento é influenciado pelo tamanho e geometria do impelidor. Existem diversas técnicas para o cálculo da capacidade de bombeamento do impelidor e a maioria delas é baseada na medição dos fluxos primários induzidos junto ao impelidor.

## 4.4 Fluidodinâmica Computacional

A fluidodinâmica computacional tem emergido como uma poderosa ferramenta utilizada na investigação para prever a dinâmica local do fluido e fenômenos associados, tais como transferência de massa e reações químicas em tanques de mistura (Van den Akker, 2006).

O uso de técnicas numéricas para a solução de problemas complexos que envolvem escoamento de fluidos tem-se desenvolvido, graças ao avanço computacional e a criação de algoritmos para a solução de diversos problemas da engenharia.

A fluidodinâmica computacional (CFD) envolve a solução numérica das equações fundamentais que governam a mecânica de fluidos. Estas equações são modelos matemáticos formulados através de modelos que descrevem fenômenos físicos que ocorrem na natureza. Assim, as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, dada as condições de contorno e propriedades reológicas, correspondentes ao fluido e definem a dinâmica de escoamento do fluido. A maioria destas equações (também conhecidas como equações de Navier-Stokes em homenagem a seus criadores) resulta em equações diferenciais parciais não lineares e sem solução analítica conhecida.

Para a solução numérica desse sistema de equações diferenciais, necessita-se de métodos robustos de discretização, tais como, Diferenças Finitas (MDF), Volumes Finitos (MVF) ou Elementos Finitos (MEF). Esses métodos permitem linearizar as equações que modelam o fenômeno num conjunto de equações algébricas que são resolvidas pelos diferentes métodos numéricos existentes (Maliska, 2004). De acordo com o autor, na área de mecânica de fluidos o método mais empregado em pacotes comerciais é o método de volumes finitos (MVF). A preferência é em função da robustez, devido às suas características conservativas. Neste método, equações aproximadas são obtidas através dos balanços de conservação no volume elementar, por conseguinte, a conservação das propriedades é satisfeita no nível de todos os volumes elementares.

Na simulação de tanques de mistura em CFD, além da estimativa de dados globais de eficiência, também pode ser estimado o comportamento local do sistema de mistura, o que

facilita localizar pontos específicos de ineficiência, permitindo compreender melhor os fenômenos de transporte que ocorrem no sistema. Portanto, essa abordagem traz vantagens quanto ao tempo e custo através de um protótipo numérico, devido a sua flexibilidade para mudar parâmetros do sistema e fornecer detalhes que não podem ser obtidos experimentalmente. No caso dos sistemas de agitação e mistura, a análise computacional visa simular tanto o fluxo primário gerado pelo movimento do impelidor quanto o fluxo secundário, gerado pelas forças inerciais devido ao movimento. Neste tipo de simulação os modelos são rigorosamente tridimensionais e dependentes do tempo, visto que o agitador muda de posição à medida que o rotor se movimenta.

Cabe salientar que a fluidodinâmica computacional não tem como objetivo substituir os testes experimentais, mas sim possibilitar uma pesquisa mais eficiente e um conhecimento mais detalhado do processo. Assim, a simulação numérica em CFD é aplicada atualmente em diversas áreas industriais, tais como o dimensionamento de reatores, poluição ambiental, projeto de máquinas rotativas, aerodinâmica de aviões e veículos, projeto de equipamentos térmicos, bioengenharia entre muitas outras aplicações. Podem-se encontrar, atualmente, diversos pacotes comerciais para simulação CFD sendo o programa ANSYS CFX um dos mais utilizados para esse propósito.

## 5 MODELAGEM MATEMÁTICA

---

A modelagem matemática busca por meio de equações, representar a realidade física de um fenômeno, portanto, a fidelidade do modelo matemático com relação ao problema físico é muito importante. Nos processos de agitação e mistura, o escoamento é descrito por um sistema de equações de transporte que fornece variáveis necessárias para seu estudo. A seguir, serão apresentados os fundamentos das equações que governam a movimentação de um fluido em qualquer escoamento.

### 5.1 Equações de Transporte

São equações diferenciais obtidas das leis de conservação de massa, momentum e energia. Normalmente conhecida como equação de Navier-Stokes, descreve o movimento do fluido calculando as componentes da velocidade do sistema.

A equação de continuidade para um sistema genérico de coordenadas é dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v}) = 0 \quad (5.1)$$

Onde,

$\rho$  : massa específica

$\bar{v}$  : vetor velocidade

As equações de quantidade de movimento podem ser representadas para cada uma das direções de seu sistema coordenado como segue:

$$\rho \left[ \frac{\partial v}{\partial t} + \nabla \cdot (v \bar{v}) \right] = -\nabla p - \nabla \cdot \tau + \rho \bar{g} + \sum S \quad (5.2)$$

Do lado esquerdo temos os termos temporais e convectivos e do lado direito aparecem os termos do gradiente de pressão, os termos de difusão de momento devido às forças viscosas, a força gravitacional e o termo fonte que representa as demais forças externas que interagem sobre o fluido.

O tensor tensão para fluidos newtonianos é dado por:

$$\tau = \mu \left[ \nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T - \frac{2}{3} \delta \nabla \cdot \vec{v} \right] \quad (5.3)$$

Onde  $\mu$  é a viscosidade do fluido.

De outro modo, quando é considerado um escoamento sob um sistema de referência rotativa, deve-se acrescentar o termo responsável pelas forças centrífuga e de Coriolis aparecendo como termo fonte na equação de transporte de momentum como segue:

$$S = S_{coriolis} + S_{centrifuga} \quad (5.4)$$

$$S_{coriolis} = -2\rho\vec{\omega} \times \vec{v} \quad (5.5)$$

$$S_{centrifuga} = \rho\vec{\omega}^2 \times \vec{r} \quad (5.6)$$

Onde,

$\vec{\omega}$ : velocidade angular

$r$ : vetor localização

Escrevendo as equações de quantidade de continuidade e movimento para coordenadas generalizadas, tem-se:

Equação de Continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \left[ \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + \frac{\partial v_j}{\partial x_j} + \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right] = 0 \quad (5.7)$$

Equação de Movimento (direção coordenada  $x_i$ )

$$\rho \left[ \frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial (v_i v_j)}{\partial x_j} \right] = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \vec{v} \right) \right] + \rho g_i + \sum F_i \quad (5.8)$$

Sendo  $\delta_{ij} = 1$  para  $i = j$  e  $\delta_{ij} = 0$  para  $i \neq j$

## 5.2 Turbulência

Nos processos industriais o movimento caótico que ocorre nas condições turbulentas é, geralmente, devido às flutuações das quantidades de transporte no espaço e tempo, aumentando significativamente a transferência de massa, momento e energia. Nas operações de agitação, a formação de vórtices ou turbilhões ajuda no movimento do fluido e na transferência da energia mecânica associada ao campo de velocidades sendo que essa energia é transferida entre as diferentes escalas de turbilhões até serem dissipadas pelas forças viscosas em energia interna.

De acordo com Bird *et al.* (1960), as equações de continuidade e movimento podem ser aplicadas diretamente no cálculo dos perfis de velocidade em regime turbulento, caso puderem resolver-se essas equações em escala do turbilhão e do tempo envolvido no escoamento. Nesse tipo de abordagem conhecida como DNS ("*Direct Numerical Simulation*") não é necessário arranjar as equações de continuidade e movimento para adicionar algum outro termo, porém seu enorme consumo de tempo e exigência de memória computacional limita o uso do DNS a números de Reynolds baixos e equipamentos de escalas reduzidas.

Uma forma de resolver o problema para o cálculo de escoamentos turbulentos em escala industrial é através da solução das equações de movimento em conjunto com equações adicionais chamadas modelos de turbulência.

Conforme Tatterson (1991), o estudo sobre os campos de fluxos em tanques agitados em regime turbulento podem ser divididos em três categorias na literatura: estudos com parâmetros globais, estudos com turbulência estatística e estudos com turbulência estruturada.

### 5.2.1 Turbulência Estatística

Essa abordagem utiliza um tratamento estatístico para aqueles fluxos altamente complexos e de natureza randômica. Esse tipo de abordagem é, principalmente, usado para o cálculo de escoamentos em escala industrial.

Na turbulência estatística, a estratégia é baseada no uso de quantidades médias no tempo em vez de usar valores instantâneos como se observa na Figura 5-1. Quando a turbulência é incluída na equação de transporte, as variáveis dependentes do tempo podem ser representadas pela soma de uma componente no equilíbrio e uma flutuação devido à turbulência (Eq. 5.9).

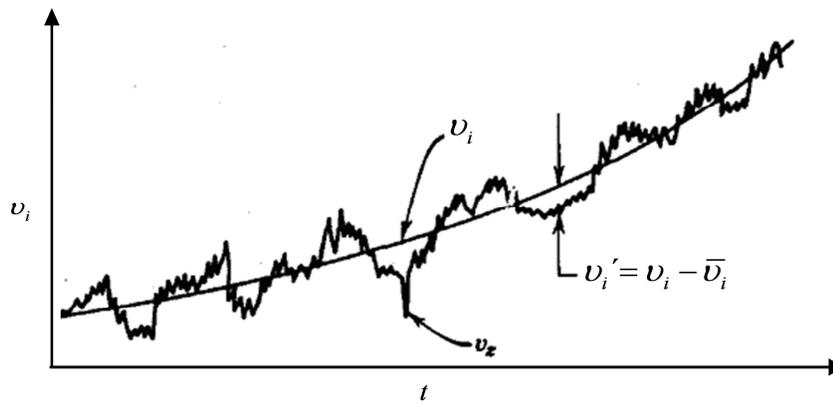


Figura 5-1 Flutuação da componente da velocidade. (Adaptado de Bird et al., 1960).

Se tomarmos um tempo médio sobre muitos ciclos de flutuação como aparece na eq. (5.10) o termo da componente flutuante poderá ser desprezado ( $\overline{v'_z} = 0$ ), o que não acontece com aqueles que correspondem ao produto de termos flutuantes que serão diferentes de zero ( $\overline{v'_z v'_z} \neq 0$ ). Essa abordagem também é válida para qualquer propriedade de transporte como a pressão e a temperatura.

$$v_i = \bar{v}_i + v'_i \quad (5.9)$$

$$\bar{v}_z = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} v_z dt \quad (5.10)$$

Substituindo os termos de  $v_i$  por  $\bar{v}_i + v'_i$  e  $p$  por  $\bar{p} + p'$  na eq. (5.7) e eq. (5.8) e baseado no conceito de tempo médio, têm-se:

Equação de continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \left[ \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_k}{\partial x_k} \right] = 0 \quad (5.11)$$

Equação de quantidade de movimento:

$$\rho \left[ \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{v_i v_j})}{\partial x_j} \right] = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \bar{v} \right) \right] - \frac{\partial (\overline{\rho v'_i v'_j})}{\partial x_j} + \rho g_i + \Sigma F_i \quad (5.12)$$

Os novos termos envolvendo  $\overline{v'_i v'_j}$  são os tensores de Reynolds. Para o cálculo desses tensores se utilizam expressões aproximadas obtidas a partir de equações semi-empíricas conhecidas como modelos de turbulência RANS (*Reynolds-averaged Navier-Stokes*). Embora

estes tipos de modelos precisem de medidas experimentais para calcular os efeitos turbulentos no perfil de velocidade, os mesmos tem grande aplicação em problemas da engenharia.

Por outro lado, os modelos de turbulência RANS podem ser abordados sob dois tipos de fundamentos: baseado na viscosidade turbulenta (EVM - *Eddy Viscosity Models*) ou via equação de transporte dos tensores de Reynolds (RSM - *Reynolds-Stress Model*).

### 5.2.1.1 Modelagem da viscosidade turbulenta (EVM)

Esses modelos são propostos utilizando a hipótese de Boussinesq (1877) e assumem que os tensores de Reynolds podem ser expressos por gradientes de velocidades; portanto, se utiliza uma analogia da lei da viscosidade de Newton, como segue.

$$\rho \overline{v'_i v'_j} = \mu_{(t)} \left[ \nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^T - \frac{2}{3} (\rho k + \delta_{ij} \nabla \cdot \bar{v}) \right] \quad (5.13)$$

Onde o coeficiente  $\mu_{(t)}$  é a viscosidade turbulenta; diferente da viscosidade laminar é dependente do escoamento e não do fluido. Portanto, a viscosidade turbulenta é função da posição, da velocidade e propriedades materiais. Assim, pode-se introduzir a viscosidade efetiva como um novo conceito da seguinte forma:

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (5.14)$$

$$\rho \left[ \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{v}_i \bar{v}_j)}{\partial x_j} \right] = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_{eff} \left( \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) \right] + S_M \quad (5.15)$$

Em que,  $S_M$  é um termo fonte que reúne a somatória de outras forças que podem estar presentes.

O trabalho desse tipo de modelos de turbulência consiste em determinar os tensores de Reynolds estimando os valores da viscosidade turbulenta  $\mu_t$ , sendo ela formulada de diversas maneiras na literatura, seja, em termos de modelos algébricos, ou modelos de uma e duas equações.

### 5.2.1.2 Modelagem tensor de Reynolds (RSM)

Neste modelo a hipótese de Boussinesq (1877) não é utilizada devido às falhas na predição adequada para situações de escoamentos anisotrópicos (Reynolds, 1987; Launder, 1990; Hanjalic, 1994). O modelo assume uma viscosidade anisotrópica e calcula os tensores de Reynolds individualmente, utilizando equações de transporte para cada uma das três direções coordenadas. Isto significa que em modelos 3D devem-se acrescentar seis equações a mais nas equações de transporte o que torna mais complexo seu equacionamento.

Essas equações aparecem de forma geral da seguinte forma:

$$\frac{\partial \rho \overline{v_i'v_j'}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \overline{v_k v_i'v_j'})}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \mu + \rho C_s \frac{k^2}{\varepsilon} \right) \frac{\partial v_i'v_j'}{\partial x_k} \right] P_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho \varepsilon + \Phi_{ij} + P_{ij,b} \quad (5.16)$$

Do lado esquerdo da equação (5.16) aparecem os termos temporal e convectivo devido ao fluxo das velocidades médias do tensor de Reynolds; já do outro lado, além do termo difusivo, também aparecem os termos da produção de cisalhamento, a dissipação viscosa, o tensor tensão-pressão e finalmente a turbulência flutuante.

A viscosidade turbulenta anisotrópica acontece naqueles escoamentos que apresentam linhas de corrente substancialmente curvas e grandes turbilhões. Portanto, esses modelos podem representar com maior precisão, os efeitos turbulentos nas equações da quantidade de movimento do que os modelos baseados na viscosidade turbulenta. Porém na prática, mostra-se que esse tipo de modelagem em alguns casos não é superior aos modelos de duas equações. De modo geral, os maiores problemas apresentados nesse tipo de modelos é a convergência e o alto custo computacional necessário para a resolução do sistema de equações do modelo.

## 5.2.2 Turbulência Estruturada

Este tipo de abordagem envolve a identificação dos campos de fluxo médios nas diversas escalas que incluem as categorias anteriores, porém, a condição do valor médio das flutuações não é levada em conta. Nessa abordagem os fluxos de maior escala são tratados com modelos determinísticos e fornece um alto nível de conhecimento dos campos de velocidade em relação a outros estudos.

A existência de diversas escalas no escoamento é usada para caracterizar a natureza do escoamento turbulento e sua influência no campo de fluxo. Os grandes turbilhões geralmente dominam a física do escoamento turbulento e interagem fortemente com os fluxos médios. Entretanto, os pequenos turbilhões ocorrem numa escala de tempo e tamanho muito menor. Portanto, podem ser considerados independentes do comportamento global do fluxo e responsáveis pela dissipação da energia. A escala do turbilhão é determinada fazendo uso de uma malha espacial, de modo que o comportamento turbulento na grande e meia escala é calculado utilizando os valores instantâneos das equações de transporte. Não obstante, a turbulência em pequena escala deve ser modelada.

Essa categoria de modelos é denominada LES (*Large eddy simulation*) e é acompanhada de modelos que avaliam a turbulência na escala da malha (*subgrid-scale model*) que são, fundamentalmente, filtros que isolam os turbilhões pequenos dos turbilhões de média e grande escala. Assim, a simulação é isenta de capturar as flutuações randômicas tridimensionais que se desenvolvem no escoamento em grande e média escala.

Essa modelagem está gradualmente tornando-se numa ferramenta popular para a investigação de escoamentos turbulentos, visto que fornece resultados de predição de turbulência com muita exatidão. Contudo, necessita uma malha numérica refinada e o uso de passos de tempos pequenos, sendo o custo computacional ainda elevado com relação a outros modelos.

### 5.2.3 Modelos de Turbulência

Conforme com Joshi *et al.* (2011), as abordagens para a modelagem da turbulência em CFD podem ser classificadas como: Simulação Numérica Direta (DNS), Simulação de Grande Vórtice (LES) e Navier-Stokes com Média de Reynolds (RANS). Dentro dos modelos de turbulência RANS, podem-se encontrar diferentes modelos disponíveis em ANSYS CFX-14.0 mostrados na Figura 5-2.

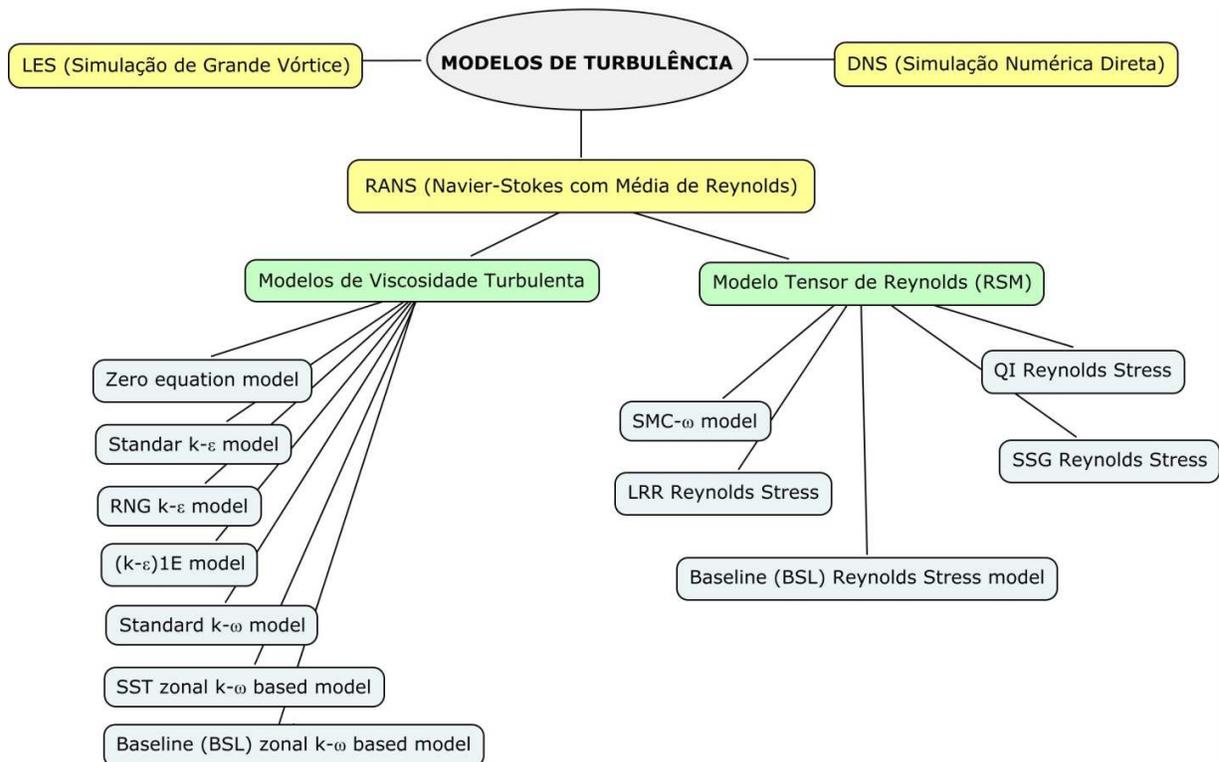


Figura 5-2 Modelos de turbulência disponíveis em ANSYS CFX-14.0

Dentro da técnica RANS também se podem encontrar outras expressões para determinar os tensores de Reynolds que descrevam o transporte de movimento em escoamentos turbulentos; tais como, o comprimento de mistura de Prandtl, a teoria do transporte de vórtice de Taylor, a hipótese de Von Karmàn e expressões obtidas pela análise dimensional (Brodkey, 1967).

Contudo, ainda não existe um modelo de turbulência que pode predizer, com certeza, todos os escoamentos turbulentos com a suficiente precisão, já que, todos os modelos de turbulência utilizam algum nível de aproximação para atingir seu objetivo. Por conseguinte o modelo turbulento é válido enquanto representa a natureza das condições do escoamento.

Visto que, dentro das técnicas RANS, encontram-se alguns dos modelos de turbulência mais populares em uso para aplicações na engenharia, a seguir descreveremos alguns destes que foram utilizados neste trabalho:

### 5.2.3.1 Modelo de Turbulência $k-\varepsilon$ ( $k$ -épsilon)

Este é um dos modelos da família de modelos de dois parâmetros. Ele é um modelo semi-empírico e baseado em grande parte em observações de escoamentos com alto número de Reynolds e assumindo a existência de uma turbulência isotrópica. Consiste na inclusão de duas equações para determinar os tensores de Reynolds e é muito aplicado para tanques de mistura. Este é um dos modelos mais robustos, principalmente pela sua estabilidade numérica. Este modelo é aplicável para uma ampla faixa de escoamentos turbulentos sendo usado há muito tempo na modelagem da turbulência.

O modelo  $k-\varepsilon$  introduz duas novas variáveis no sistema de equações, a energia cinética turbulenta  $k$  e a taxa de dissipação de turbulência  $\varepsilon$ ; utilizadas para o cálculo da viscosidade turbulenta  $\mu_t$  (Eq. 5.17). A resolução numérica consiste em determinar os valores  $k$  e  $\varepsilon$  a partir das equações de transporte (se podem ver mais detalhes deste modelo no apêndice).

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (5.17)$$

Onde,  $C_\mu$  é uma constante obtida de dados experimentais.

### 5.2.3.2 Modelo de turbulência SST (*The Shear Stress Transport*)

Um dos principais problemas nos modelos de duas equações é a predição do descolamento do fluxo em superfícies lisas, já que, frequentemente apresentam falhas para estimar o local e quantidade de fluxo separado. Devido ao fato, que em diversas aplicações técnicas desse fenômeno é importante, alguns modelos têm desenvolvido estratégias para resolver esse problema.

Atualmente, entre os modelos de duas equações mais destacados nessa área encontra-se o modelo SST desenvolvido por Menter (1994), porquanto considera no transporte de momentum o efeito da tensão de cisalhamento próximo da parede, fornecendo uma melhor predição em termos do descolamento do fluxo. Além disso, este modelo combina as vantagens do modelo  $k - \omega$  de Wilcox (1986) e o modelo  $k - \varepsilon$ . Uma vez que, o primeiro apresenta uma boa capacidade para descrever a camada limite turbulenta perto da superfície, onde as velocidades são baixas, pelo qual, os modelos baseados na dissipação turbulenta ( $\varepsilon$ ) apresentam falhas. Entretanto, o segundo é aplicado nas regiões restante de livre escoamento, em que se localizam as maiores velocidades, visto que esse modelo é ideal para condições de alto Reynolds.

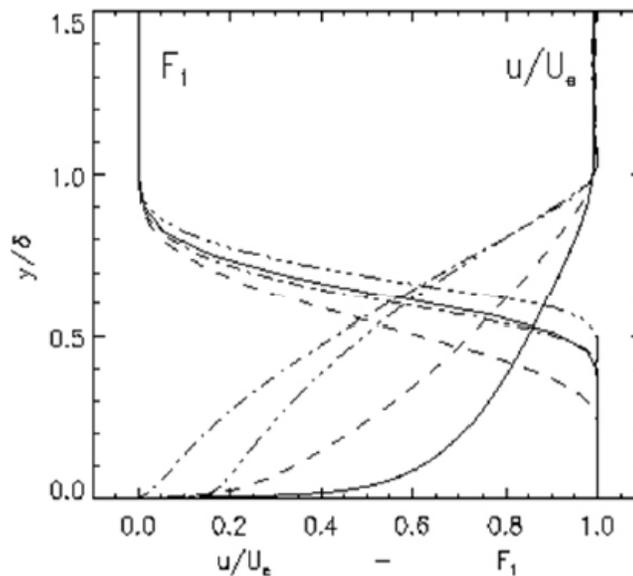


Figura 5-3 Função de combinação "Blend Function" utilizada no modelo SST. (Adaptado de Spogis, 2007).

Por esse motivo, o modelo SST utiliza funções de combinação (*Blend Function*) para que conforme seja as condições do escoamento possa usar qualquer um desses modelos ou simplesmente uma combinação deles. Pode ser visto na Figura 5-3 o esboço da função de combinação  $F_1$  utilizada para o acoplamento dos dois modelos, em que, “ $y$ ” refere-se a distancia da parede e “ $\delta$ ” se define como a espessura da camada limite explicados na seção 5.3.

Para que essa combinação de modelos funcione, é necessário logo de transformar o modelo  $k - \varepsilon$  para uma formulação de  $k - \omega$ , multiplicar o mesmo por uma função de combinação  $1 - F_1$ , enquanto o modelo  $k - \omega$  é multiplicado por uma função  $F_1$ . Note-se que  $F_1$  toma o valor de um próximo da superfície da parede e diminui até zero fora da camada limite, portanto, na borda e fora da camada limite o modelo  $k - \varepsilon$  é retomado ( se podem ver mais detalhes deste modelo no apêndice).

#### 5.2.3.3 Modelo de turbulência BSL-RSM (*Baseline Reynolds Stress Model*)

Os modelos de turbulência de duas equações (baseados em  $k - \varepsilon$  e  $k - \omega$ ) frequentemente fornecem boas predições nas características físicas do escoamento, principalmente, em padrões de fluxo unidirecional. Porém, em escoamentos em que o transporte turbulento é importante a hipótese da viscosidade turbulenta não é mais valida, portanto, esses modelos poderiam ser inapropriados para o cálculo das quantidades de transporte. É assim que, os modelos comumente baseado sobre equações de transporte para o cálculo de cada componente individual do tensor de Reynolds conhecidos como “*Reynolds Stress Model*” (RSM) têm mostrado uma melhor predição comparada com os modelos de duas equações das características turbulentas, principalmente, em escoamentos que incluem efeitos tais como: vórtices, mudanças bruscas da taxa de deformação, fluxos secundários ou flutuações do mesmo. Embora, esses modelos possuam um alto grau de universalidade seu alto grau de complexidade diminui sua robustez numérica, requerendo um maior esforço computacional impedindo às vezes seu uso em fluxos complexos.

Por outro lado, devido as deficiência que também apresenta os modelos de turbulência RSM referentes à predição do descolamento do fluxo na camada limite, particularmente, devido ao uso da formulação da taxa de dissipação turbulenta ( $\varepsilon$ ); foram implementados alguns modelos

RMS baseados na formulação de Wilcox (1986) da frequência turbulenta ( $\omega$ ). Dentro destes, está o modelo de turbulência *Baseline-Reynolds Stress* (BSL-RSM). Em que, de forma similar ao modelo SST são utilizadas funções de combinação para alternar as formulações  $k-\epsilon$  e  $k-\omega$  no cálculo das quantidades de transporte, conforme as características do número de Reynolds (se podem ver mais detalhes deste modelo no apêndice).

### 5.3 Camada Limite

A presença de superfícies rugosas afeta seriamente a fluidodinâmica no escoamento turbulento, visto que, o efeito viscoso sobre as quantidades de transporte são maiores nas regiões muito próximas da superfície, o que reduz as flutuações da velocidade nessas aéreas. Fora da região viscosa, a turbulência aumenta rapidamente por conta da produção da energia cinética turbulenta gerando grandes gradientes na velocidade média devido ao transporte de quantidade de movimento, que ocorre vigorosamente.

A modelagem desses fenômenos dentro da simulação pode influenciar significativamente na exatidão da solução numérica, de forma que, esses problemas devem ser tratados com muita atenção, já que, uma boa representação do escoamento nas regiões perto da parede determinará o sucesso das predições nos resultados.

De acordo com Olini (2010), quando as partículas do fluido entram em contato com uma superfície, ocorre uma estagnação da camada do fluido em contato com a mesma. Estas partículas atuam no retardamento do movimento das partículas da camada do fluido adjacente, que por sua vez atuam na seguinte e assim até uma distância da superfície  $\Delta y$ , onde o efeito do retardamento é desprezível. A região em que o fluido é perturbado pela superfície, é chamada de camada limite.

Análises experimentais feitos por Launder e Spalding (1974), mostram que a região próxima da superfície (camada interna) pode ser dividida em três camadas, conforme mostra a Figura 5-4. A camada mais próxima da parede é chamada de “subcamada viscosa”, em qual o escoamento é preferencialmente laminar e a viscosidade molecular age de uma forma importante na transferência de calor e movimento; de outro modo, longe da parede tem-se uma região

chamada de “camada turbulenta” onde os processos de transporte são dominados pela turbulência. Finalmente, existe uma região entre a subcamada viscosa e a camada logarítmica, em que os efeitos turbulentos e viscosos são de igual importância é chamada de camada amortecedora.

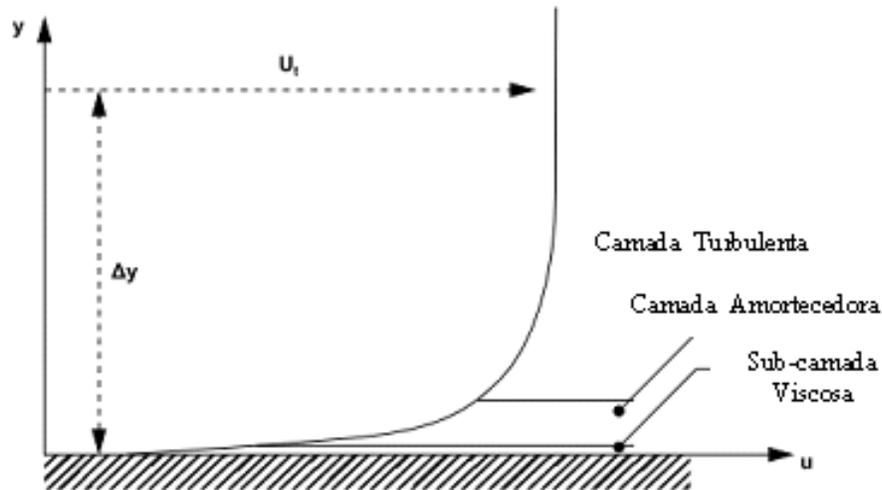


Figura 5-4 Esquema de subcamadas na região próxima da superfície. (Adaptado de ANSYS, Inc. 2011).

Na camada interna próxima da parede, podemos relacionar a velocidade tangencial ( $U$ ) ali alocada com a tensão de cisalhamento ( $\tau_w$ ) por meio de expressões em função da distancia adimensional da parede ( $y^+$ ), tanto para a região turbulenta (Eq. 5.18) quanto para a região da subcamada viscosa (Eq. 5.19); como são mostradas na Figura 5-5 conforme as subdivisões da região próxima à parede.

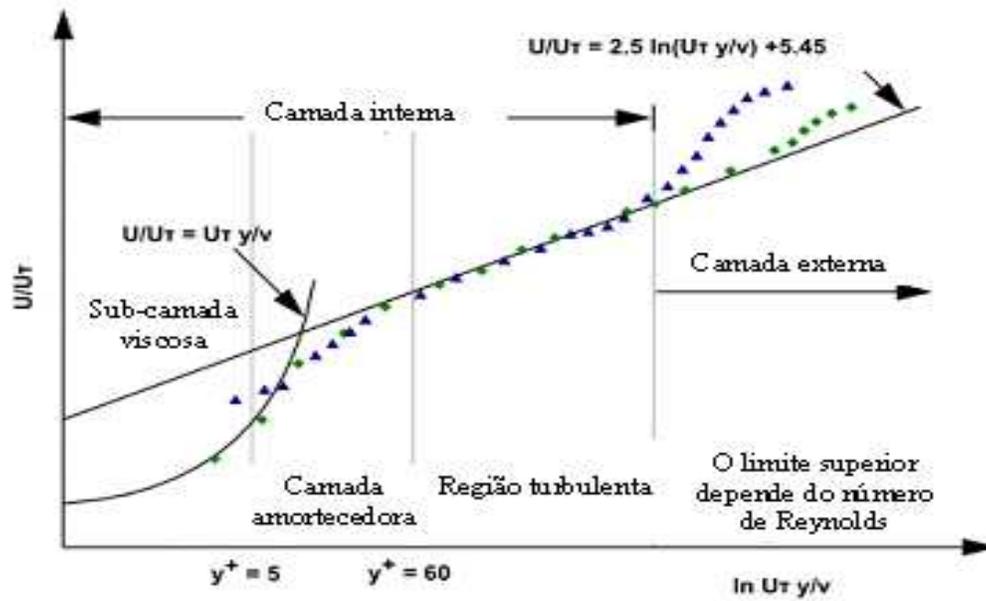


Figura 5-5 Subdivisões da região próxima à parede. (Adaptado de ANSYS, Inc. 2011).

As relações encontradas por Launder e Spalding (1974), podem ser expressas da seguinte forma:

$$u^+ = \frac{U}{U_\tau} = \frac{1}{K} \ln(y^+) + C \quad (5.18)$$

$$u^+ = \frac{U}{U_\tau} = y^+ \quad (5.19)$$

Em que,

$$y^+ = \frac{\rho \Delta y U_\tau}{\mu} \quad (5.20)$$

$$U_\tau = \left( \frac{\tau_w}{\rho} \right)^{1/2} \quad (5.21)$$

Sendo,

$u^+$  : velocidade perto da parede.

$u_\tau$  : atrito da velocidade

$U$  : velocidade tangencial à parede na distância de  $\Delta y$ .

$\Delta y$  : distancia entre o primeiro nó da malha e a parede.

$y^+$  : distância adimensional da parede.

$\tau_\omega$  : Tensão de cisalhamento na parede.

$K$  : Constante de Karman

$C$ : Constante da camada logarítmica que depende da rugosidade da parede.

Atualmente, existem duas abordagens para modelar a influência da parede através do escoamento do fluido no ANSYS CFX 14.0, que serão explicadas posteriormente.

### 5.3.1 Abordagem de Parede Próxima (*Near-Wall Modelling*)

Esta abordagem é conhecida também como formulação de baixo número de Reynolds, já que, o número de Reynolds baseado na viscosidade turbulenta na subcamada viscosa apresenta valores muito baixos. Portanto, os modelos de turbulência requerem ser modificados para permitir o efeito viscoso perto da parede. Assim, esse método consegue delinear diretamente o perfil da camada limite usando uma escala de malha muito pequena na direção normal da parede. Os modelos turbulentos baseados nas equações de frequência turbulenta " $\omega$ " (*SST,  $k-\omega$* ) são adequados para este tipo de abordagem. A desvantagem desse método deve-se a seu alto esforço computacional

### 5.3.2 Função de Parede (*Wall Function*)

Nesta abordagem a região ou subcamada afetada por causa das forças viscosas não é resolvida. Em lugar disso, é utilizada uma função semi-empírica para proporcionar as condições de contorno na parede para as equações de transporte. Essa formulação empírica liga as condições da parede com variáveis dependentes dos “nós” da malha que estejam perto da parede, assumindo que eles encontram-se numa região totalmente turbulenta da camada limite. Assim, pode se assumir um perfil logarítmico na distribuição das velocidades nessa região como uma aproximação numérica, este arranjo numérico é conhecido como função de parede.

A vantagem deste método deve-se a que altos gradientes de cisalhamento na região perto da parede podem ser modelados com malhas grossas, poupando tempo computacional. Além disso, o uso da função da parede evita alterar o modelo de turbulência para levar em conta o efeito da presença da parede. Essa abordagem é utilizada no software ANSYS CFX 14.0 para todos os modelos de turbulência baseados na taxa de dissipação turbulenta " $\epsilon$ ". A seguir, podem ser vistas na Figura 5-6 as abordagens utilizadas no software para o tratamento da parede.

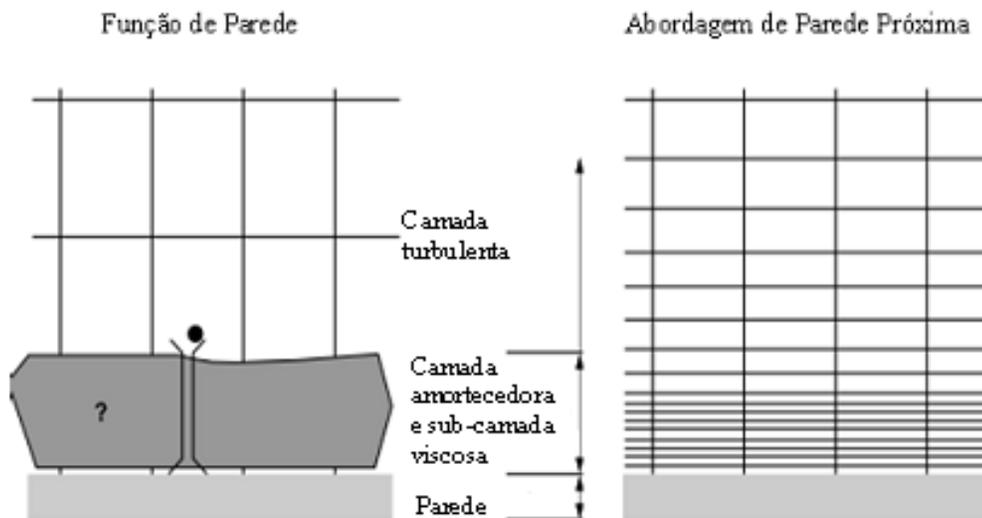


Figura 5-6 Abordagem para o tratamento de parede. (Adaptado de ANSYS, Inc. 2011).

De acordo com Spogis (2007), uns dos fatores essenciais para o ótimo desempenho dos modelos de turbulência é a solução correta do perfil de velocidade na camada limite. Desse modo, na literatura são sugeridos alguns critérios para avaliar a qualidade da malha na região da camada limite. Assim mesmo, o autor apresenta o desenvolvimento matemático realizado para estimar os parâmetros a serem levados em conta na geração da malha, os quais são baseados em modificações simples de correlações para uma placa plana em termos do Reynolds, o comprimento característico  $L$  e a distância adimensional da parede  $y^+$ .

Dentro dos parâmetros a considerar na geração da malha próxima da superfície estão o espaçamento (Eq. 5.22) e o número de nós da malha dentro da região da camada limite (Eq. 5.23).

$$\Delta y = Ly^+ \sqrt{74} \text{Re}_L^{-13/14} \quad (5.22)$$

$$\eta = \text{round} \left( \frac{\ln \left( \frac{0.035L \text{Re}_L^{-1/7} (q-1)}{\Delta y} + 1 \right)}{\ln(q)} \right) \quad (5.23)$$

Em que, " $\text{Re}_L$ " refere-se ao número de Reynolds baseado no comprimento característico e " $q$ " á taxa de crescimento espacial da malha.

Conforme o manual de ANSYS CFX 14.0, sugere-se utilizar valores de  $y^+ < 300$  para que seja válida a aproximação da função da parede baseado no perfil logarítmico. Entretanto, quando são usados modelos baseados na frequência turbulenta  $\omega$ , como no caso dos modelos  $k-\omega$  e SST é de preferência usar valores de  $y^+ < 2$  para obter um total proveito da formulação de baixo número de Reynolds. Por outro lado, o manual faz sugestão de um número mínimo de nós dentro da camada limite entre 10 - 15 com o propósito de garantir que o modelo de turbulência trabalhe adequadamente no cálculo do escoamento cerca da superfície da parede.

## 6 MÉTODOS NUMÉRICOS

---

De acordo com Maliska (2004), a tarefa do método numérico é resolver uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes por expressões algébricas que envolvam a função incógnita.

Quando não é possível uma solução analítica, podemos fazer aproximações numéricas da equação diferencial utilizando um número discreto de pontos com um erro associado a eles. Assim, quando se deseja aumentar a precisão dos cálculos, se deverão aumentar o número de pontos a serem utilizados para aproximar-se da solução exata. Não obstante, pelo aumento dos cálculos a serem efetuados o esforço computacional também crescerá, mas de forma não linear.

Deve-se salientar que a modelagem em CFD proporciona resultados excelentes se as equações do modelo representarem com fidelidade a física do problema e estiverem livres de erros numéricos associados a esse tipo de enfoque.

### 6.1 Métodos dos Volumes Finitos (MVF)

O método foi desenvolvido por McDonald (1971) e MacCormack & Paullay (1972), inicialmente empregado na solução de problemas bidimensionais. Basicamente, todo método de volumes finitos busca obter equações aproximadas, dividindo o domínio em volumes elementares e satisfazendo a conservação das propriedades de transporte para cada volume. As equações aproximadas são obtidas integrando no espaço e tempo as equações massa, momentum e energia em sua forma divergente.

Ao realizar a integração em todos os volumes elementares obtém-se uma equação algébrica para cada elemento e, portanto, os valores de todas as propriedades envolvidas são obtidos em pontos discretos ao longo do domínio. Assim, as propriedades são avaliadas no centroide e nas faces que delimitam o elemento, conforme se observa na Figura 6-1.

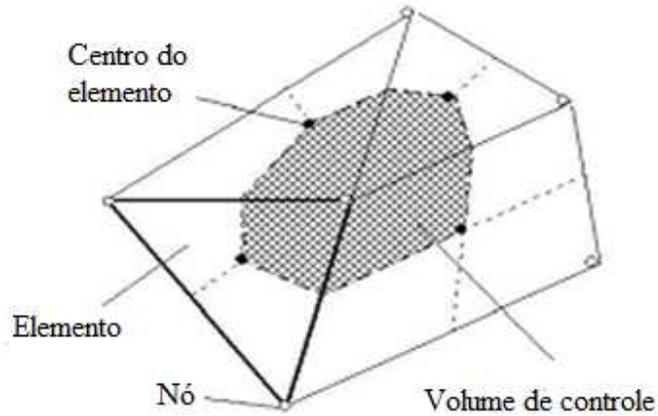


Figura 6-1 Esquema do volume de controle ou elemental. (Adaptado de ANSYS, Inc. 2010).

Para ilustrar a metodologia do método dos volumes finitos, considerem-se as equações de conservação de massa (Eq. 6.1) e quantidade de movimento (Eq. 6.2), a seguir:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (6.1)$$

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i v_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_{eff} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] \quad (6.2)$$

Após as equações de conservação acima serem integradas, aplica-se o teorema de divergência de Gauss para converter as integrais de volume envolvidas no operador gradiente e divergente para integrais de superfície, assim as equações integradas tornam-se:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \int_S \rho v_j dn_j = 0 \quad (6.3)$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho v_i dV + \int_S \rho v_i v_j dn_j = -\int_S P dn_j + \int_S \mu_{eff} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) dn_j + \int_V S_{v_i} dV \quad (6.4)$$

Onde “v” e “s” denotam as regiões de volume e superfície na integral, e  $dn_j$  o vetor normal da superfície. As derivadas temporais podem ser retiradas fora das integrais de volume, pois o volume de controle não se deforma no tempo. As integrais de volume representam os termos fontes e de acumulação, enquanto as integrais de superfície representam a soma dos fluxos que entram e saem do volume elementar. Esse processo, onde a formulação continua da equação diferencial é convertida em uma equação algébrica através de pontos discretos é conhecido como discretização.

## 6.2 Malha Computacional

Para dividir o domínio físico do problema em subdomínios discretos ou volumes elementares é necessária uma malha computacional. Essa malha pode conter elementos de diversas formas e tamanhos. Sabe-se que inicialmente, para simplificar, a discretização em coordenadas cartesianas era comumente usada, mas esse sistema é muito limitado caso o problema envolva geometrias irregulares, como pode ser visto na Figura 6-2.

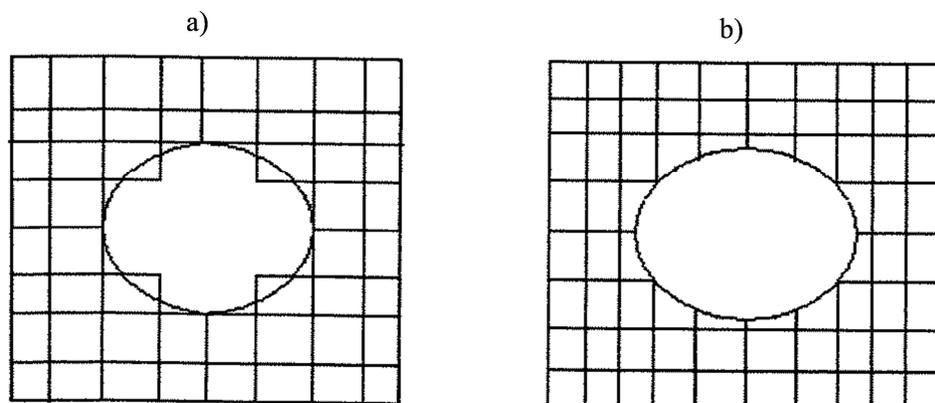
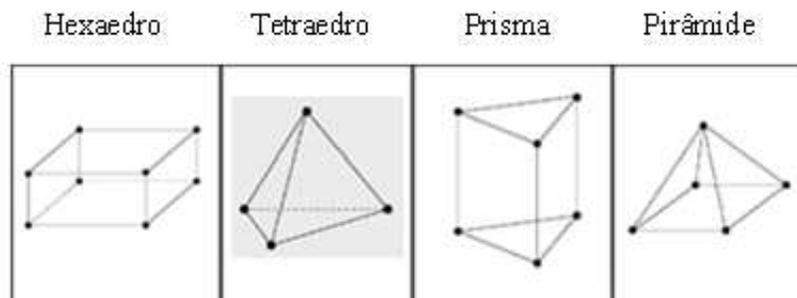


Figura 6-2 Esquema de discretização. a) Cartesiana. b) Coincidente com a fronteira. (Adaptado de Maliska, 2004).

Uma das alternativas para discretização de domínios irregulares é o uso de coordenadas curvilíneas generalizadas. Nesta opção, os volumes de controle conectam-se entre si através de uma lei de formação no caso das malhas estruturadas e de forma arbitrária no caso das malhas não estruturadas.

De acordo com Maliska (2004), as malhas estruturadas, com seus volumes ordenados, possuem a vantagem de gerar matrizes diagonais, portanto, mais fáceis de serem resolvidas pelos *solvers*. No entanto, alguns problemas com geometrias complexas não permitem que malhas estruturadas sejam sempre empregadas. Em muitos problemas, as malhas não estruturadas conseguem uma discretização adequada do domínio do problema, mas a dificuldade na ordenação de seus volumes elementares dá origem a matrizes mais complexas que impossibilitam a aplicação de muitos métodos numéricos para serem resolvidas. Contudo, as malhas não estruturadas são mais versáteis, com maior facilidade para adaptar-se e adequada na discretização de geometrias irregulares.

A criação da malha é composta por elementos característicos, os quais podem possuir uma ordenação estruturada ou não. O elemento é um ente geométrico que cobre todo o domínio computacional sem superposição e sem pedaços nas fronteiras do domínio. Na Figura 6-3 são apresentados diversos tipos de elementos aplicados na geração de malhas 3D em ANSYS CFX.



*Figura 6-3 Tipos de elementos aplicados em geometria 3D.*

A utilização simultânea de dois ou mais tipos de elementos na solução de problemas, também conhecidas como malhas híbridas, se mostra muito útil em situações de elevada complexidade da geometria e limitações na disponibilidade de recurso computacional. No caso dos volumes finitos, as malhas estruturadas sempre utilizam elementos hexaédricos enquanto a malhas não estruturadas podem utilizar elementos tanto de tipo hexaédricos quanto tetraédricos ou até mesmo poliédricos. Além disso, existem elementos especiais tais como prismas e pirâmides que são usados principalmente em camadas adjacentes à parede ou na transição de malhas compostas.

Segundo Joaquim Junior *et al.* (2007), na simulação de sistemas de agitação, as malhas tetraédricas não possuem a mesma aceitação da malha hexaédrica. Isto se deve ao fato de que a malha tetraédrica requer uma quantidade de elementos maior para proporcionar a mesmo número de nós do que a malha hexaédrica. Portanto, o aumento do esforço computacional é esperado. Além disso, a malha tetraédrica não proporciona uma boa representação da solução nas camadas adjacentes às paredes. Portanto, se recomenda o uso de uma malha híbrida com elementos prismáticos, porquanto, eles conseguem reproduzir o nível de refino necessário à captura dos efeitos da camada limite, o que não seria possível caso existissem tetraedros adjacentes às paredes devido a sua isotropia.

A malha tetraédrica pode ser criada facilmente pela maioria de programas geradores das malhas que existem comercialmente. Aliás, o desenvolvimento de algoritmos avançados, assim como o aumento do poder computacional faz com que a utilização de malhas não estruturadas, tais como as tetraédricas possam mostrar resultados semelhantes às hexaédricas, enquanto, seja tomado alguns cuidados para obter resultados satisfatórios.

De modo geral, na simulação de tanques agitados a densidade da malha precisa ser suficientemente refinada para capturar os fluxos principais e secundários gerados pelo impelidor, mas evitando que o número de elementos da malha seja excessivamente alto, visto que requerem um maior tempo para o cálculo da solução. Assim, malhas não uniforme na topologia podem ser usadas para localizar maiores densidades de malha em regiões onde é necessário e permitem malhas mais grosseiras em outras.

Maliska (2004) ressalta que para o método de volumes finitos não interessam a forma e o modo como foi criado o volume elementar, já que, a característica principal desse método é a integração das equações, nas formas conservativas, sobre um volume elementar qualquer.

### 6.3 Esquemas de Discretização

A avaliação das propriedades nas faces do volume elementar no método numérico deve ser feita com muita cautela, já que, o método MVF exige o conhecimento do valor das variáveis na interface dos volumes de controle. Desse modo é necessária a utilização de funções de interpolação nos esquemas de discretização que permite a utilização do método desde situações puramente difusivas até situações controladas pela convecção.

De acordo com Maliska (2004) o objetivo sempre é propor uma função de interpolação com o menor erro possível e que, ao mesmo tempo, não envolva muitos pontos nodais para não criar uma matriz com estrutura muito complexa. Assim, a função de interpolação ideal é aquela que conecta os pontos nodais com a própria solução do problema que queremos resolver.

Para problemas físicos, onde se apresentam apenas efeitos de difusão, é natural escolher uma função linear como diferencial central (CDS). O uso desse esquema na aproximação dos termos convectivos cria dificuldades na solução numérica o que conduz a erros numéricos e resultados errados. Uma maneira de reduzir estes erros é utilizar uma malha bastante refinada, no entanto uma melhor opção preferível pode ser usar outro tipo de esquema de interpolação.

Para problemas dominados pela convecção, pode-se usar o esquema *Upwind* de primeira ordem como uma maneira de evitar o problema da aproximação do termo, sendo este um esquema que, além de fornecer boa estabilidade na solução, é fácil sua implementação.

O *Upwind* de primeira ordem é uma aproximação de um lado só; tomando que o valor na face do volume de controle pode ser considerado igual ao valor do primeiro volume localizado na direção do fluxo. Quando se utiliza um número maior de volumes vizinhos, o esquema *Upwind* converte-se no esquema *Upwind* de segunda ordem, fornecendo melhores resultados, mas também aumentando o esforço computacional.

Conforme, Patankar (1980), o esquema *Upwind* pode ser expresso na equação (6.5):

$$F_e \phi_e = \phi_p [F_e, 0] - \phi_E [-F_e, 0] \quad (6.5)$$

Onde,  $F_e$  é o fluxo convectivo na face "e" e  $[F_e, 0]$  representa o maior valor entre  $F_e$  e zero.

Se o escoamento estiver alinhado com os volumes de controle da malha, os esquemas de interpolação de primeira ordem são aceitáveis. Porém, visto que os fluxos padrão em tanques de agitação não satisfazem essa condição (principalmente se a malha for não estruturada), esquemas numéricos de alta ordem são recomendados para reduzir os erros na solução.

De acordo a Maliska (2004), os esquemas *Upwind* produzem soluções fisicamente coerentes, mas têm a propriedade de suavizar altos gradientes, portanto, não captando a real gradiente no problema. No entanto, as aproximações de alta ordem, quando os termos convectivos são predominantes, geram instabilidade, produzindo soluções que apresentam oscilações numéricas em regiões de grandes gradientes. A impossibilidade de dissipar essas oscilações é uma característica do esquema de alta ordem, podendo gerar soluções não realísticas do problema. Na Figura 6-4 se ilustra alguns dos comportamentos característicos que se apresentam na interpolação do esquema de discretização.

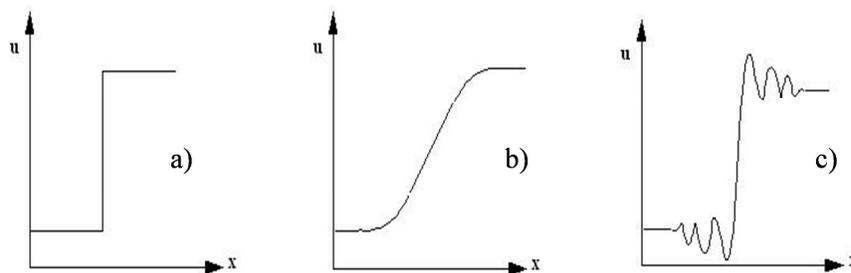


Figura 6-4 Esquema do comportamento numérico da interpolação da solução. a) Solução exata (função pulso). b) solução dissipada (difusão numérica). c) solução com oscilações (oscilação numérica). (Adaptado de Maliska, 2004).

Assim, os autores de trabalhos numéricos em tanque de mistura têm preferido utilizar esquemas de alta ordem que fornecem melhores resultados para fluxos com alta recirculação frente ao esquema *Upwind* de primeira ordem. Entretanto, o software ANSYS CFX-14.0 fornece alguns esquemas de interpolação alta ordem, tais como o esquema *High Resolution* e *Specified Blend Factor*.

Os esquemas de discretização implementados para os termos convectivos por ANSYS CFX-14.0 podem escrever-se de forma geral como aparece na equação (6.6):

$$\phi_{ip} = \phi_{up} + \beta \nabla \phi \cdot \Delta \vec{r} \quad (6.6)$$

Onde,  $\phi_{up}$  é o valor do nó *Upwind* e o termo  $\beta \nabla \phi \cdot \Delta \vec{r}$  é a correção da difusão numérica associada ao esquema *Upwind*.

Nos esquemas de alta ordem o valor do coeficiente  $\beta$  (Eq. 6.6) oscila entre zero e um, e o cálculo do gradiente adjacente ao nó  $\nabla \phi$  varia dependendo do método utilizado. De forma geral, os esquemas de primeira ordem reduzem o erro linearmente com a diminuição do tamanho da malha, enquanto que os esquemas de alta ordem permitem reduzir os erros de forma quadrática. Uma prática comum em CFD é utilizar os esquemas de primeira ordem para obter uma solução parcialmente convergida e depois mudar para um esquema de alta ordem para obter resultados finais.

De acordo com os autores Maliska (2004) e Patankar (1983), o limitante dos esquemas de interpolação é que eles são normalmente unidimensionais, enquanto que o problema numérico é tridimensional, o que ocasiona um maior erro ao estimar os resultados. Outro erro atribuído ao esquema de interpolação é devido ao fato de que os fluxos não são perpendicular às faces dos volumes elementares, o que gera erros na solução global.

Para problemas com dependência do tempo, como ocorre nas simulações transientes, os termos temporais da derivada precisam ser discretizados também. Nesse caso, devemos usar funções de interpolação temporal.

As derivadas temporais podem ser aproximadas por funções de primeira (Eq. 6.7) ou segunda ordem (Eq. 6.8), como segue:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho \phi dV \approx V \frac{\rho \phi^n - \rho \phi^{n+1}}{\Delta t} \quad (6.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho \phi dV \approx V \frac{1}{\Delta t} \left( \frac{3}{2} (\rho \phi^{n+1}) - 2(\rho \phi^n) + \frac{1}{2} \rho \phi^{n-1} \right) \quad (6.8)$$

Na equação (6.7) e (6.8), o termo  $\phi^n$  é uma variável qualquer avaliada no tempo  $t$ , Assim,  $\phi^{n+1}$  e  $\phi^{n-1}$  são avaliadas conseqüentemente no tempo  $t + \Delta t$  e  $t - \Delta t$ . Dependendo da função escolhida para o comportamento do fluxo no intervalo de tempo, teremos formulações explícitas (Eq. 6.9) e implícitas (Eq. 6.10), respetivamente:

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t \cdot f(\phi^n) \quad (6.9)$$

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t \cdot f(\phi^{n+1}) \quad (6.10)$$

A maior diferença entre o método explícito e o implícito, dá-se quando os termos da discretização espacial  $f(\phi)$  são avaliados no tempo atual ou em um tempo posterior. A formulação implícita é a preferida pela possibilidade de avançar no tempo com passo maior ( $\Delta t$ ).

O software ANSYS CFX 14.0 fornece algoritmos com formulação implícita de primeira e segunda ordem tais como *First Order Backward Euler* e *Second Order Backward Euler*. Assim como na discretização dos termos convectivos, as funções de primeira ordem fornecem estabilidade na solução, mas introduzem dissipações numéricas nos gradientes temporais. Não obstante, devemos lembrar que as funções de alta ordem criam algumas oscilações não físicas do problema. De forma geral, o esquema transiente *Second Order Backward Euler* é recomendado para a maioria das simulações com dependência no tempo.

## 6.4 Convergência

Os fenômenos físicos envolvidos nas operações de agitação e mistura geralmente dá origem a sistemas de equações de alto grau não linear, resolvidas em forma sequencial e envolvendo acoplamentos complexos. Portanto, para obter soluções numéricas convergidas das equações diferenciais que regem os fenômenos dentro dos tanques de mistura, devemos fornecer condições favoráveis (tamanho da malha, intervalo do tempo, coeficientes de relaxação, esquemas de interpolação, etc.) para que isso aconteça.

A simulação numérica, além de exigir um alto conhecimento na física do problema, requer uma experiência que permita encontrar os parâmetros que levem um processo iterativo para convergência. Para que uma aproximação numérica seja convergente, deve possuir consistência e estabilidade na solução.

A consistência numérica é dada quando a equação diferencial discretizada consegue reproduzir a equação diferencial. Isto, geralmente ocorre quando o tamanho da malha e o intervalo do tempo tendem a zero e, portanto, os erros de truncamento se reduzirão quando a malha tende ao um número infinito de nós. Não obstante, de acordo com Anderson *et al.* (1984), existem aproximações numéricas nas quais os erros de truncamento crescem com o refinamento da malha. Por este motivo é recomendado fazer o teste de independência da malha.

Outra característica importante é a estabilidade da solução numérica, de maneira que esta deve representar a solução exata das equações discretizadas. Entre os fatores que interferem na estabilidade da solução temos os erros de arredondamento, como o tratamento do acoplamento entre as variáveis. Isto faz com que algumas variáveis evoluam mais rapidamente que outras.

Finalmente, podemos dizer que as condições de consistência definem uma relação entre a equação diferencial e sua formulação discretizada, enquanto que as condições de estabilidade estabelecem uma relação entre a solução numérica e a solução exata da equação discretizada. Por conseguinte, pode ser vista na Figura 6-5, uma condição de convergência liga uma solução numérica à solução exata da equação diferencial que representa o modelo matemático.

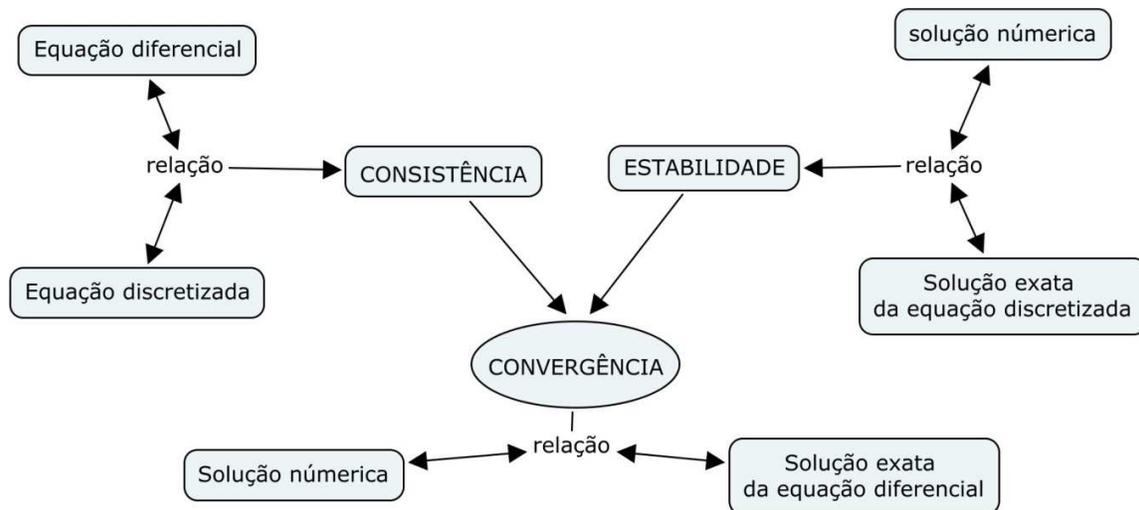


Figura 6-5 Relações entre consistência, estabilidade e convergência. (Adaptado de Charles Hirsch, 2007).

Devido ao método ser não linear, existe vários critérios de convergência para as variáveis. Um deles consiste no valor do resíduo médio normalizado da solução numérica chamado erro residual *RMS* (*root mean square*), sendo esse valor uma medida da conservação do balanço na equação do volume elementar. O erro residual da solução numa matriz pode ser esquematizado na equação (6.12), como segue:

$$[A][\varphi] = [b] \tag{6.11}$$

$$r^n = b - A\varphi^n \tag{6.12}$$

Onde,  $[A]$  é a matriz de coeficientes,  $[\varphi]$  o vetor solução,  $[b]$  os termos do lado direito da equação linear, e  $r^n$  o erro residual.

O nível da convergência requerida depende do propósito da solução e do detalhe do modelo. Conforme com o manual de ANSYS CFX-14.0, de forma geral, valores de *RMS* abaixo de  $10^{-4}$ , embora seja uma convergência fraca, podem ser suficientes para muitas aplicações na engenharia. Entretanto valores abaixo de  $10^{-5}$  fornecem uma boa convergência, portanto,

usualmente suficiente para a maioria das aplicações em engenharia. Ocasionalmente,  $RMS$  menores a  $10^{-6}$  são requeridos para problemas geometricamente sensíveis.

Independente do critério de escolha é necessário que a solução das variáveis não sofra mais alterações, além de assegurar que os balanços das equações de conservação deverão fechar em todo o domínio.

## 6.5 Métodos de Abordagem na Simulação através de CFD

Nas simulações numéricas, a movimentação relativa entre a rotação do impelidor e as partes estáticas do tanque (paredes, chicanas, e outros) faz com que a simulação do campo de fluxo na totalidade do tanque seja computacionalmente difícil; já que, o movimento relativo entre as pás do impelidor e as chicanas gera variações cíclicas sobre o domínio de solução.

Brucato *et al.* (1998) e Joshi *et al.* (2011), apresentaram algumas estratégias utilizadas para modelar essas interações entre o impelidor e as chicanas em tanques agitados. De acordo com os autores, essas abordagens podem ser classificadas em duas categorias: em estacionário ou em estado transiente. Na Figura 6-6, são mostradas as abordagens comumente utilizadas na literatura para simulação de tanques de mistura.

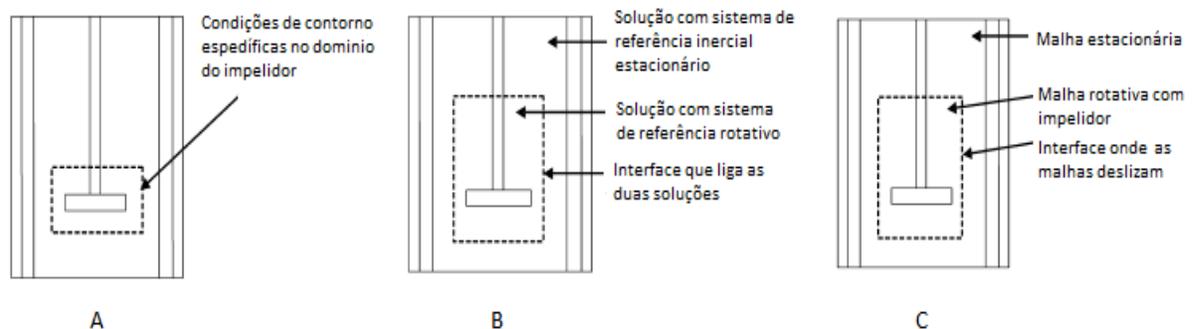


Figura 6-6 Abordagens para a modelagem da interação entre as chicanas e o impelidor. a) IBC, b) MFR, c) SM. (Adaptado de Joshi, 2011).

Dentro do estado estacionário podemos encontrar as seguintes abordagens: IBC (*Impeller Boundary Condition*), SS (*Source Sink*), MFR (*Multiple Reference Frame*), IO (*Inner and Outer*) e a abordagem *Snapshot*. Entretanto, no estado transiente como as iterações do impelidor dependem do tempo, podemos encontrar abordagens tais como SG (*Sliding Grid*), MDG (*Moving Deforming Grid*) e AFT (*Adaptive Force Field Technique*). A seguir, descreveremos algumas das técnicas mais utilizadas na literatura.

### 6.5.1 Abordagem IBC-Condição de contorno no impelidor

Uma das estratégias para encarar a dificuldade de modelar o impelidor é usada nessa abordagem. Aqui o impelidor não é explicitamente simulado e é tratado como uma caixa preta, portanto ele é excluído do domínio computacional e trocado por condições de contorno na superfície ou termos fontes espalhados em todo volume. Seus efeitos são modelados por imposição de condições de contorno tais como perfis de velocidade média e quantidades turbulentas que são medidas experimentalmente para o sistema em análises. Diversos pesquisadores tem usado essa técnica Harvey and Greaves, (1982); Ranade and Joshi, (1990) e Kresta e Wood (1991), sendo válida para qualquer situação no qual o comportamento experimental do impelidor é conhecido. O uso dessa técnica esta limitada à disponibilidade de dados experimentais, portanto tornando esta abordagem seriamente restrita.

### 6.5.2 Modelagem com múltiplos sistemas de referência rotacional- MFR

O método de múltiplos sistemas de referência (MFR) foi empregado inicialmente por Luo (1994) e posteriormente utilizado por Marshall *et al.* (1996), Nesta abordagem, o volume do tanque é dividido em duas regiões. Uma região interna que contém o impelidor e a região externa que inclui as chicanas e parede do tanque. Na região do impelidor o fluxo é resolvido em um sistema de referência rotativo que, em termos práticos, seria como se o impelidor estivesse parado, entretanto, na região externa as simulações são feitas sob referência inercial.

No sistema de referência rotativo novos termos fontes devem ser acrescentados na equação de momento, tais como a forças centrífuga e de Coriolis. Na interface entre domínios, as velocidades são corrigidas por um método de acoplamento implícito, portanto esta superfície

deve ser localizada onde as variáveis não apresentem fortes mudanças tanto na direção angular quanto no tempo.

Uma vantagem desta abordagem é que a solução pode ser calculada no estado estacionário desprezando o termo da derivada temporal na equação de momento. Não obstante, uma limitação desta modelagem é que o impelidor está parado na simulação com relação ao sistema rotacional durante todo o cálculo. Portanto, os resultados poderão variar em função da posição da pá do impelidor em relação às chicanas.

Há muitas aproximações básicas utilizadas na simulação de sistemas de referência múltipla. Entre as mais comuns empregadas para tratar o movimento relativo dos corpos utilizadas no software CFX 14.0 tem-se: O tratamento "*Circunferential Averaging*", onde as conexões na interface estão embasadas na média de todas as conexões existentes durante uma revolução completa do impelidor. De outro lado, no tratamento "*Frozen Rotor*" o movimento relativo na interface é assumido como fixo sendo independente do tempo.

### 6.5.3 Modelagem com malhas deslizantes - SG

O método das malhas deslizantes foi apresentado pela primeira vez por Perng & Murthy (1993). Nesse modelo, o domínio do fluido é dividido em dois blocos. No subdomínio externo é fixado um sistema de referência inercial estacionário enquanto o bloco interno se movimenta junto com o impelidor em relação ao bloco estacionário. Ao contrário dos métodos anteriormente descritos acima, as equações de transporte no domínio rotativo são descritas em relação ao sistema inercial estacionário. Entretanto, a rotação da malha fornece termos de aceleração que acabam sendo equivalentes às forças levadas em conta no sistema de referência rotacional.

As duas regiões são implicitamente acopladas na interface onde as variáveis são interpoladas assegurando a conservação do fluxo usando um algoritmo de conexão de malha não coincidente (*unmatched grid*) e levando em consideração o movimento relativo entre domínios. Claramente, uma malha dependente no tempo obriga à resolução do problema em regime totalmente transiente, portanto, é necessário que o impelidor complete diversas voltas até atingir um regime estacionário. No software ANSYS CFX-14.0 a configuração baseada nessa

abordagem é denominada como *Transient Rotor-Stator*. Embora o modelo das malhas deslizantes seja o modelo mais rigoroso utilizado para modelagem de sistemas agitados, seu custo computacional é muito alto.

## 6.6 Modelo Alternativo de Rotação "Alternative Rotation Model"

Neste modelo o termo de advecção na equação de momento é modificado. Ao invés de resolver as equações utilizando uma formulação de velocidades relativas, o *solver*, resolve o escoamento embasado em um sistema de velocidades absolutas ou inerciais.

A relação entre as velocidades absolutas e relativas pode ser dada por:

$$\mathbf{v}_{abs} = \mathbf{v} + \vec{\omega} \times \vec{r} \quad (6.14)$$

As equações de quantidade de movimento podem ser descritas para cada formulação como segue:

- Formulação da velocidade relativa

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = \nabla \cdot (-P \delta + \mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)) - 2\rho \vec{\omega} \times \mathbf{v} - \rho \vec{\omega} \times (\vec{\omega} + \vec{r}) \quad (6.15)$$

- Formulação da velocidade absoluta

Aqui, devido à troca de variáveis no termo de advecção é requerida uma modificação adicional no termo fonte, referente à expressão da força de Coriolis. A forma final da equação do momento torna-se:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}_{abs}) = \nabla \cdot (-P \delta + \mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)) - \rho \vec{\omega} \times \mathbf{v} - \rho \vec{\omega} \times (\vec{\omega} + \vec{r}) \quad (6.16)$$

A maior vantagem deste novo arranjo é observada quando a velocidade no sistema inercial é praticamente constante, enquanto que, a velocidade no sistema relativo tem um alto componente rotativo. Assim, pequenos erros no modelo de advecção do escoamento no sistema relativo podem tornar-se grandes erros no cálculo do escoamento quando é resolvido na formulação de velocidade absoluta.

O modelo possibilita uma redução do erro numérico principalmente quando no sistema de velocidade absoluta o fluxo é constante e paralelo ao eixo de rotação. De fato, o erro numérico no termo de advecção da equação de movimento torna-se zero no sistema absoluto quando o fluxo torna-se constante em direção axial, independente da deslocação radial e da taxa de rotação.

## 7 Técnicas Experimentais para visualização de Fluxos em Tanques Agitados

---

O padrão de fluxo fornecido por um impelidor foi uma das primeiras formas de determinar a idoneidade do impelidor para uma aplicação em particular. Inicialmente, com a observação do fluido ou utilizando um corante para identificar os padrões de circulação; depois técnicas simples como tubos Pitot foram usadas para quantificar o campo de velocidades. Essas técnicas permitiram a identificação de padrão de circulação básicos encontrados em um tanque agitado. Esses padrões de fluxo foram amplamente aceitos e referenciados na literatura (Nagata, 1975; Oldshue, 1983; Zlokarnik *et al.*, 1988), porém, o uso de técnicas mais sofisticadas permitiu um estudo detalhado do fluxo em diversas partes do tanque.

Conforme com Mavros (2001), as técnicas atuais disponíveis para mapeamento do fluxo podem ser divididas em duas categorias:

- Técnicas de medição para um ponto único. As quais determinam a velocidade em uma posição específica no interior do tanque. Dentro dessas técnicas podem-se identificar: Tubos Pitot, *Hot-wire Anemometry*, *Laser-Doppler Velocimetry*, *Ultrasound Doppler Velocimetry*, entre outras.
- Técnicas de medição em conjunto. As quais determinam o fluxo padrão simultaneamente em uma grande região do fluido agitado. Algumas das técnicas que podem ser classificadas nessa categoria são: *Simple Imaging*, *Flow-Followers*, *Colour Change*, *Thermography*, *Particle Image Velocimetry*, *Laser-Induced Fluorescence*, *Tomography*, etc.

### 7.1 Velocimetria de Imagem de Partícula (PIV)

Uma característica interessante do PIV (*Particle Image Velocimetry*) está na captura dos fenômenos transientes que ocorrem nos fluxos instáveis, os quais são possíveis calculando as flutuações de velocidade, produto da turbulência do sistema (Meyers *et al.*, 1997).

Esta técnica consiste em uma fotografia que registra o movimento das partículas no tanque de mistura em pequenos intervalos de tempo, de modo que podem ser comparadas imagens consecutivas do movimento das partículas. Analisando o deslocamento de cada partícula no tempo podemos obter um plano de velocidade bidimensional do fluxo no interior do tanque (Hassam, 1998; Lai, 1996).

Por outro lado, algumas modificações da técnica PVI, tais como holografia PVI e fotogrametria digital podem capturar a distribuição de velocidade 3-D em função do tempo (Hirsch & Hinrichs, 1996; Zhang, 1997). Os cálculos da velocidade das partículas são realizados em sofisticados softwares, utilizando métodos de tratamento de imagens para determinar os vetores individuais das partículas (Grant & Pan, 1997; Westerwell, 1997). Finalmente, os desenvolvimentos de softwares especializados estão sendo focados no mapeamento detalhado dos fluxos, inclusive em características tais como vorticidade e turbulência. (Escudié *et al.*, 2000; Perrard *et al.*, 2000). Na Figura 7-1 são mostradas algumas ilustrações de mapeamentos típicos obtidos de resultados experimentais através da técnica PIV.

Neste trabalho a validação dos resultados foi feita com base a dados experimentais fornecidos por Machado *et al.* (2011) utilizando a técnica PIV na medição da velocidade. Conforme com o autor foram utilizadas duas câmeras de alta resolução (La Vision, Imager Pro X, 14 bits, 2048 x 2048 pixels) as quais foram configuradas para capturar 1000 pares de imagens com um intervalo de tempo de 200-450 $\mu$ s entre cada imagem. A frequência da coleta do par de imagens foi de 1,6-2,5 Hz. Os vetores de velocidade foram calculados conforme os três componentes de velocidade instantânea usando um *software* comercial (La Vision, Davis 7.4).

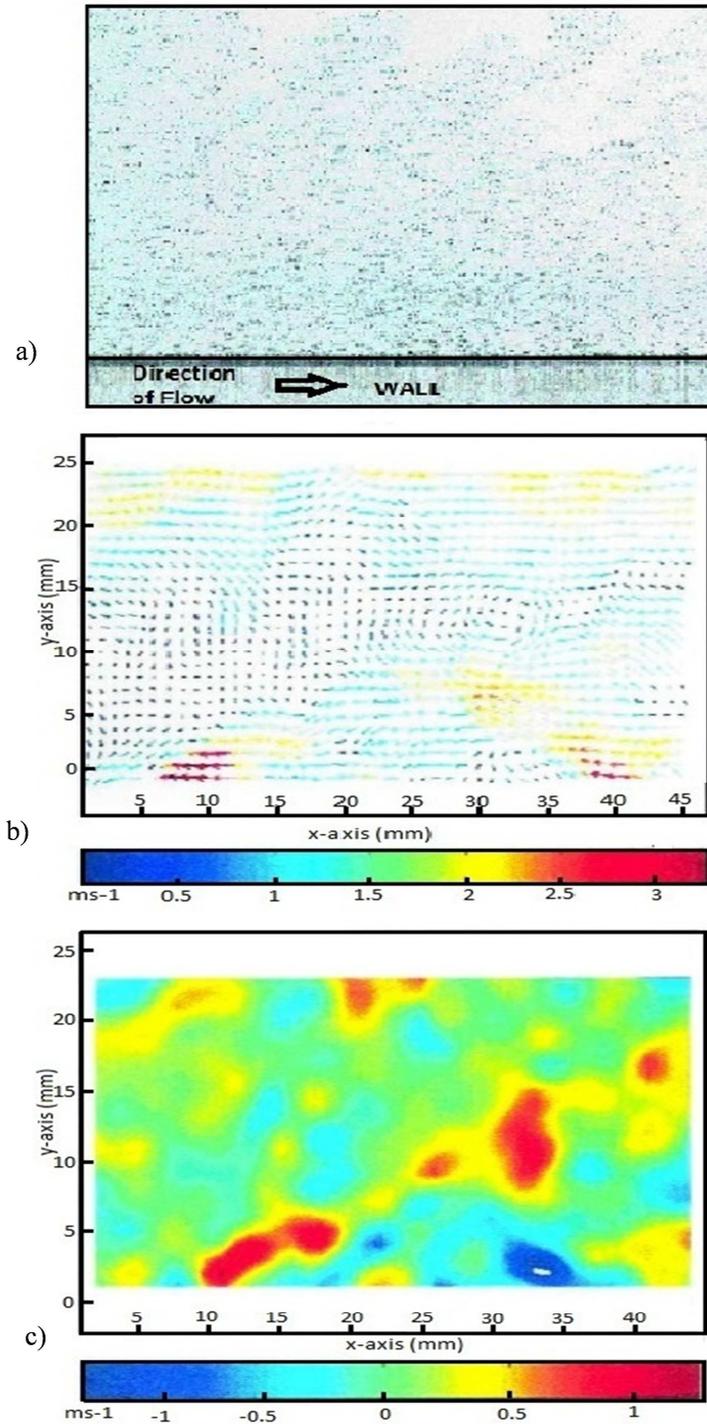


Figura 7-1 Resultados obtidos através do PIV do padrão do fluxo. a) Imagem original; b) Mapa de vetores das flutuações da velocidade instantânea; c) Mapa da vorticidade instantânea. (Adaptado de Mavros, 2001).



## 8 METODOLOGIA

O objetivo neste capítulo é apresentar, de forma sucinta, todos os passos presentes em uma simulação típica de CFD. Geralmente toda simulação CFD é composta por quatro etapas fundamentais: Definição do problema, Pré-processamento, *solver* e Pós-processamento. Essas etapas da metodologia CFD podem ser vistas na Figura 8-1, onde são apresentados os passos típicos da análise de CFD. Deve-se prestar muita atenção em cada uma delas, já que quaisquer erros gerados são levados conseqüentemente para cada etapa, influenciando os resultados obtidos ou até mesmo, causando divergência na solução do problema.

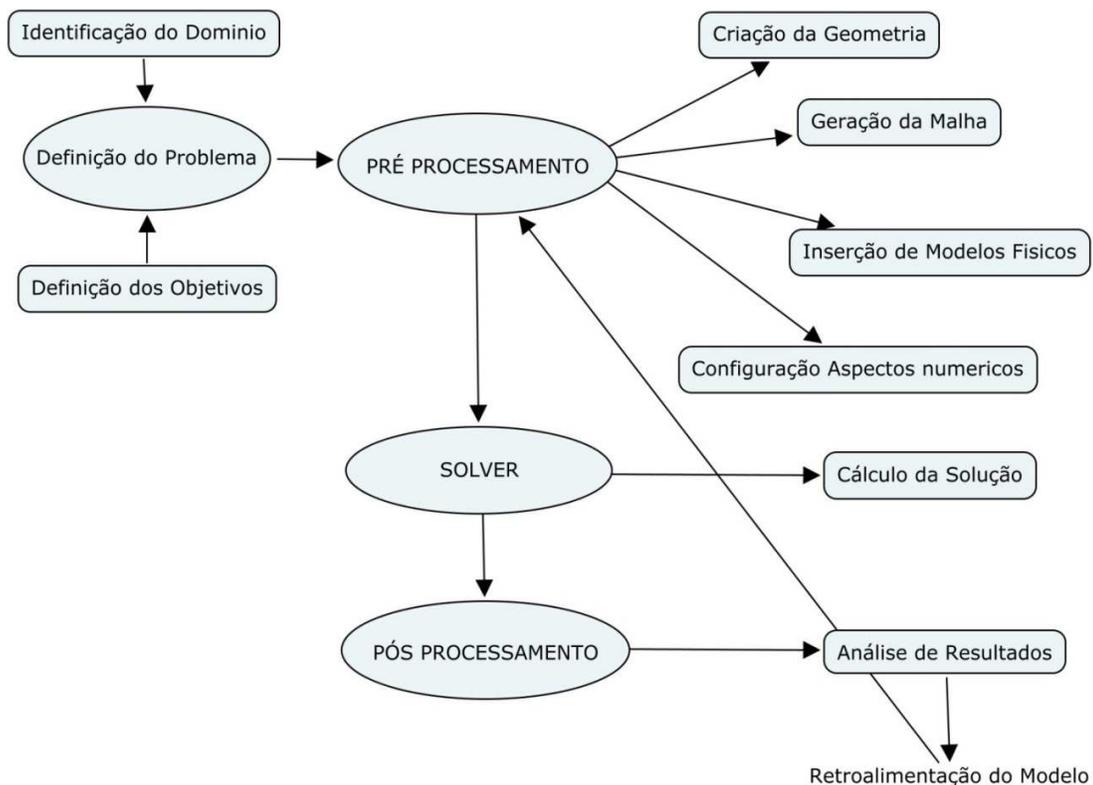


Figura 8-1 Fluxograma do processo típico da análise de CFD. (Adaptado de ANSYS, Inc. 2007).

## 8.1 Definição do Problema

O objetivo da análise CFD será simular uma configuração geométrica de tanque de mistura consistente num tanque cilíndrico de diâmetro  $T = 240$  mm de fundo reto com 4 chicanas verticais igualmente espaceadas e equipado com um impelidor de 4 pás inclinadas a  $45^\circ$  (PBT) de diâmetro  $D = 80$  mm. A velocidade de rotação será de  $450$  rpm com uma direção de bombeamento descendente (*pumping-down*). Todas as simulações foram feitas baseadas em um escoamento monofásico utilizando como fluido a água em regime totalmente turbulento ( $Re = 48.000$ ).

O dimensionamento do tanque de agitação foi baseado conforme com as dimensões do equipamento de bancada do laboratório de investigação em mecanismos de mistura do departamento de Engenharia Química e Materiais da Universidade de Alberta (Machado *et al.*, 2011).

## 8.2 Aspectos Geométricos

Nesta primeira etapa, a criação da geometria foi feita utilizando a ferramenta *CAD Design Modeler* disponível pelo software ANSYS CFX 14.0. Deve-se considerar que o objetivo final da geometria é esboçar a região do fluido que está envolvida no domínio do problema. No caso das máquinas rotativas, a configuração do domínio compõe-se principalmente de duas regiões, uma região interna chamada rotativa e uma região externa chamada estacionária.

O impelidor situa-se no interior da região rotativa sob um sistema de referência rotacional determinado através da velocidade angular do mesmo, tomando em consideração as forças de aceleração que interagem no fenômeno físico. Por outro lado, na região estacionária encontram-se as paredes e chicanas do tanque sob o sistema de referência inercial da terra, conforme pode ser visto na Figura 8-2.

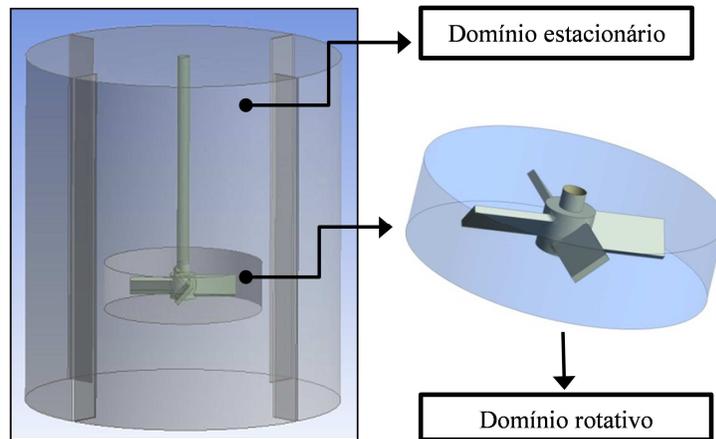


Figura 8-2 Definição do domínio estacionário e rotativo na geometria

A escolha do domínio rotativo e estacionário não pode ser arbitrária, já que, deve garantir uma aproximação do fenômeno físico que ocorre no sistema agitado. Assim, é importante que a interface entre os domínios esteja localizada nas regiões onde o fluxo das variáveis não mude consideravelmente com a localização angular ou com o tempo, de modo que, seja válida essa suposição.

Por conseguinte, a interface foi localizada numa distância axial desde o centro do impelidor de  $\pm 0.25D$  e raio  $r = 0.75D$  conforme as sugestões feitas na literatura (Lane *et al.*, 2000; Coroneo *et al.*, 2010). Na figura 8-3 são mostrados os detalhes das relações geométricas empregadas no tanque de mistura, que de acordo com a literatura, comumente são encontradas na indústria química e de processos (Joaquim Junior *et al.*, 2007).

### 8.3 Geração da Malha

Neste processo é traduzida a informação geométrica do modelo em pontos nodais discretos, num processo conhecido como discretização. Visto que a distribuição de refino da malha ao longo do domínio do problema tem influência direta nos resultados obtidos é importante realizar um teste de independência de malha. Porém, o grande problema relacionado ao refino de malhas está sempre ligado ao aumento do custo computacional o qual é um fator que deve ser considerado com cuidado.

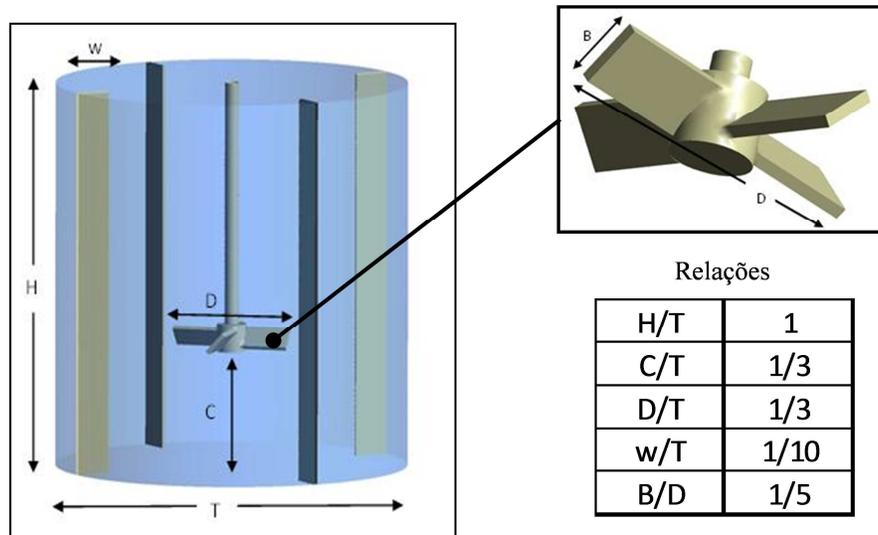


Figura 8-3 Relações geométricas usadas no dimensionamento do sistema de agitação.

No processo de geração de malhas, estas foram feitas utilizando o *software ANSYS CFX meshing*, o qual permite gerar as malhas relativamente simples, levando em consideração importantes parâmetros tais como: o tamanho mínimo do elemento, a taxa de crescimento e o refinamento localizado principalmente em regiões próximas às superfícies das paredes do tanque e impelidor; onde se esperam altos gradientes de propriedades relevantes tais como velocidade ou energia cinética turbulenta, entre outras. Na figura 8-4 são mostrados alguns detalhes da malha computacional nas regiões próximas ao impelidor e paredes do tanque.

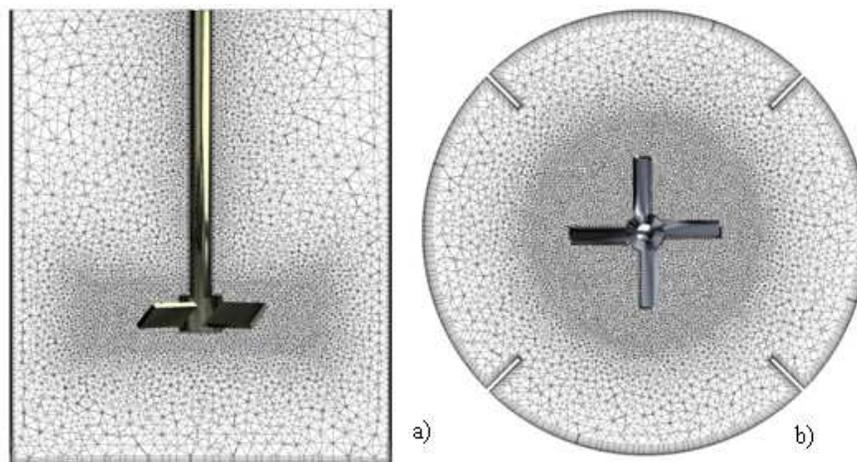
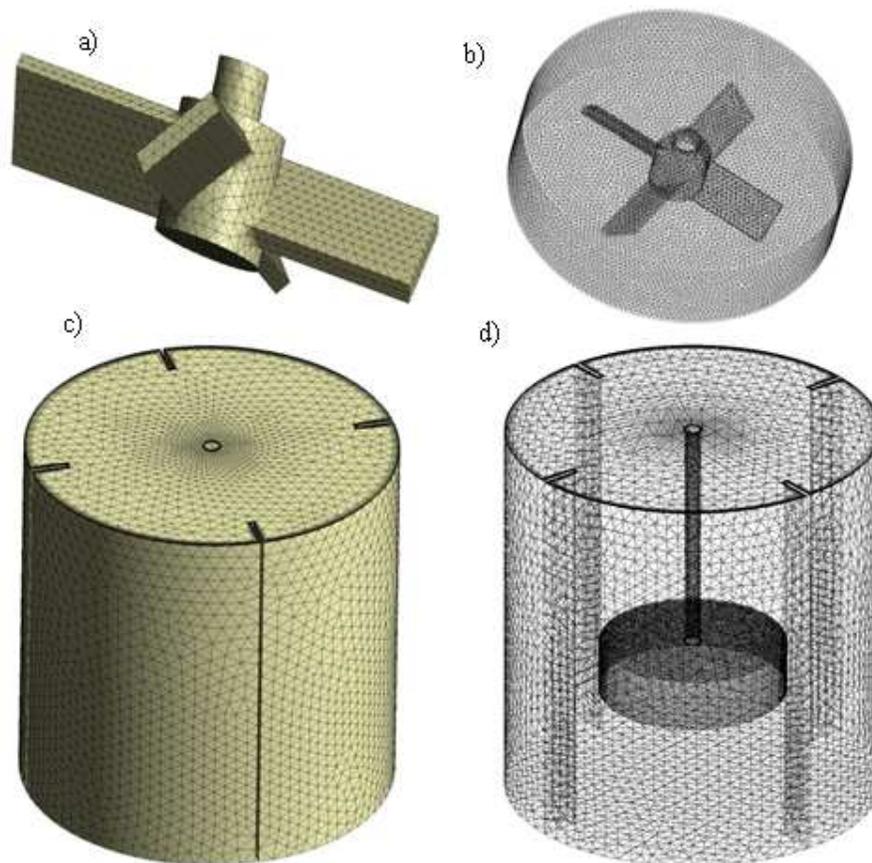
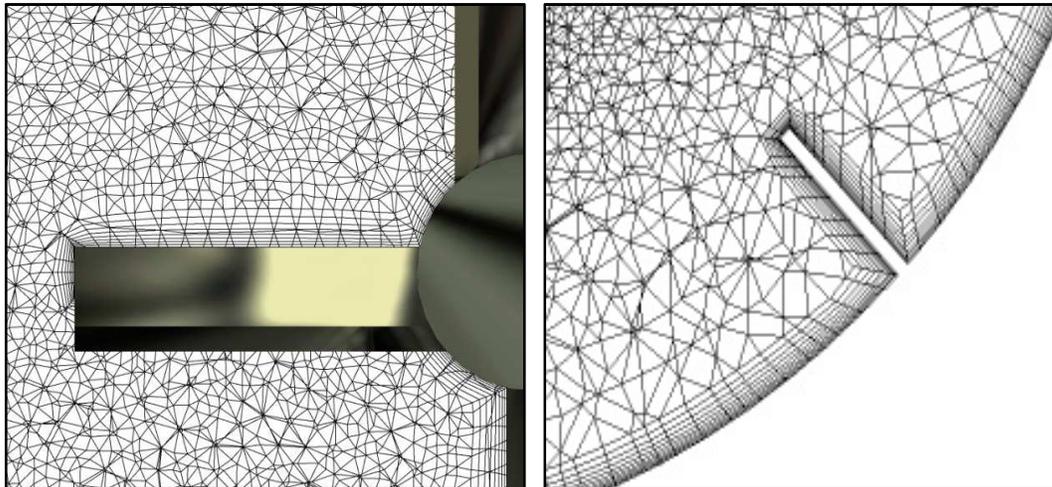


Figura 8-4 Detalhes do refinamento da malha na região do impelidor. a) Plano vertical da malha gerada no tanque de mistura. b) Plano horizontal da malha gerada no tanque de mistura.

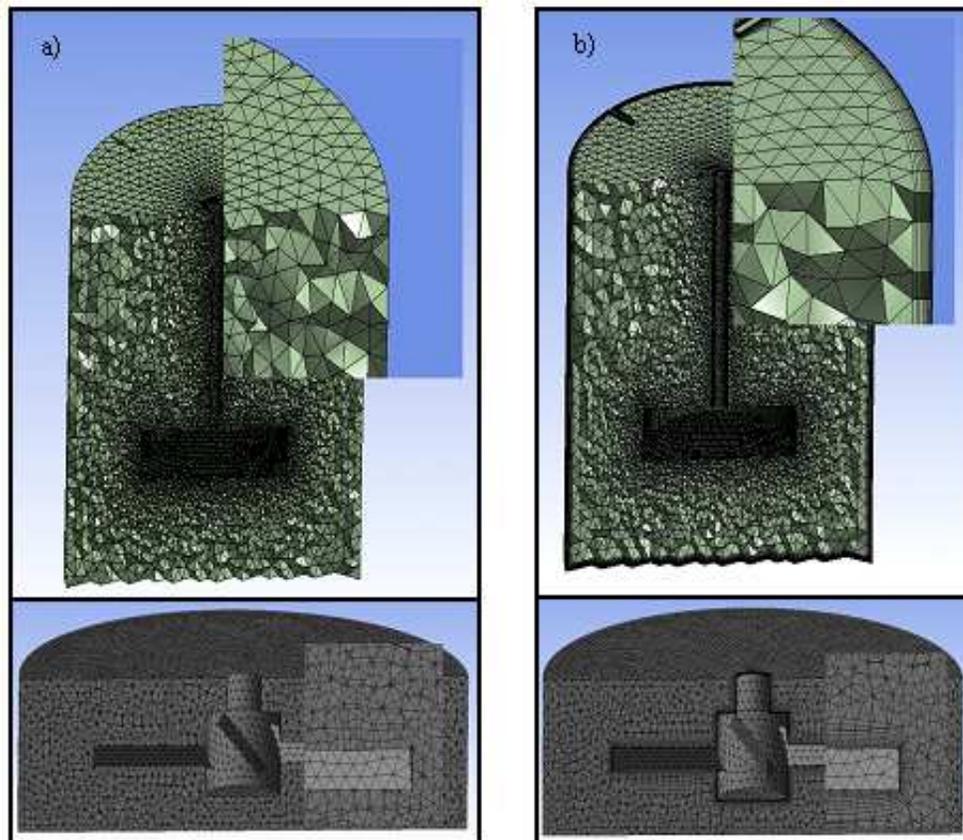
Todas as simulações CFD feitas no presente trabalho foram realizadas utilizando malhas tetraédricas tridimensionais (3D), como são mostradas na Figura 8-5. Foram empregados diversos refinamentos na região estacionária do tanque, as quais se realizaram mudando a taxa de crescimento da malha entre 10% - 200%. Entretanto, nas regiões normais as superfícies tais como paredes, chicanas, impelidor e eixo foram aplicados elementos prismáticos conforme as sugestões feitas na literatura, em torno da distancia adimensional ( $y^+$ ) e número de nós dentro da camada limite expostos na seção 5.3. Alguns detalhes da aplicação dos elementos prismáticos no tanque e impelidor são expostos nas Figuras 8-6 e 8-7.



*Figura 8-5 Malha não estruturada 3D com elementos tetraédricos e prismáticos gerada no software ANSYS CFX meshing. a) Malha superficial do impelidor. b) Malha superficial do domínio rotativo. c) Malha superficial do tanque. d) Malha superficial do domínio estacionário.*



*Figura 8-6 Detalhe da camada de prisma gerada tanto no impelidor quanto no tanque. Plano horizontal.*



*Figura 8-7 Diferença entre uma malha tetraédrica gerada: a) sem elementos prismáticos b) com camada de prisma. Plano transversal do domínio estacionário e rotativo.*

Desse modo, foi feita uma camada de 10 prismas com taxa de crescimento de 20% em todas as superfícies do tanque e impelidor. Assim mesmo, a maioria das simulações foi realizada utilizando um  $y^+$  na faixa entre  $0.2 < y^+ < 9$  para a região estacionária do tanque e entre  $0.7 < y^+ < 18$  para a região rotativa do impelidor. Por outro lado, ao tamanho mínimo do elemento foi considerado 1/3 da espessura da pá do impelidor a fim de definir detalhadamente na malha os aspectos geométricos do mesmo. Na Tabela 8-1 são listados os parâmetros mais importantes utilizados neste trabalho para a geração da malha computacional.

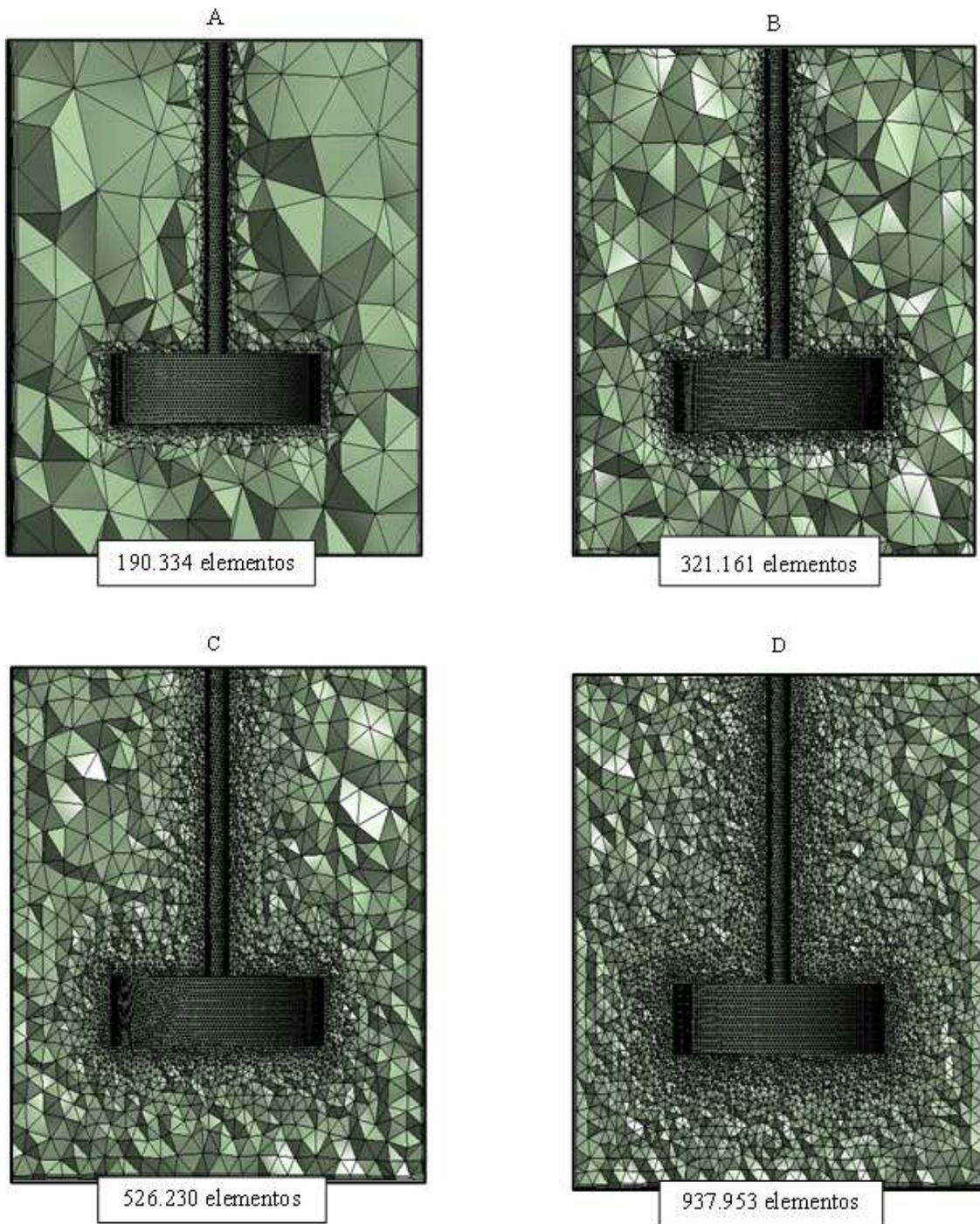
*Tabela 8-1 Parâmetros mais relevantes na geração da malha computacional.*

Parâmetros da Malha	Região	
	Tanque	Impelidor
Taxa de crescimento	10-200%	10%
Camada de Prisma	10	10
Crescimento de Prisma	10%	10%
Faixa utilizada de $y^+$	$0.2 < y^+ < 9$	$0.7 < y^+ < 18$
Valor médio $y^+$	5	8
Tamanho mínimo de elemento	1/3 espessura da pá	

Assim, na região do impelidor foi gerada uma malha com cerca de 410.000 elementos, enquanto na região do domínio estacionário foi aumentado o número de elementos criando diferentes densidades de malha até que os resultados numéricos mostraram independência da malha. Deste modo, podem-se ver na Figura 8-8 que foram geradas 4 tipos de refinamento compostas entre 190.000, 320.000, 530.000 e 940.000 elementos aproximadamente e denominadas conforme se apresenta na Tabela 8-2.

*Tabela 8-2 Denominação do tipo de malha conforme ao número de elementos.*

Tipo de Refino	Elementos
Super-Grossa	190.334
Grossa	321.161
Mediana	526.230
Fina	9379.53



*Figura 8-8 Plano transversal para diferentes densidades de malha. A) malha super-grossa B) grossa C) média D) fina.*

## 8.4 Configuração do Modelo de Simulação CFD

Nesta etapa o objetivo foi configurar todos os modelos que foram empregados, de acordo com o nível de acurácia que se deseja obter do fenômeno físico. Do mesmo modo, serão definidas características do fluido envolvido e as condições de contorno que limitam o problema, como também os parâmetros numéricos a serem considerados.

### 8.4.1 Propriedades Físicas do Fluido

As operações de agitação em fase homogênea são muito aplicadas na indústria química, principalmente aquelas que estão em fase aquosa, sendo na maioria das vezes fluidos Newtonianos. Assim, para efeitos práticos todas as simulações foram consideradas para um escoamento monofásico, empregando como fluido da análise as propriedades da água a 25°C e 1 atmosfera de pressão. Essas propriedades são mantidas constantes em um sistema quando este é considerado isotérmico e sob condições de fluido incompressível.

*Tabela 8-3 Propriedades físico-químicas da água.*

Densidade	997	Kg/m <sup>3</sup>
Viscosidade dinâmica	8.899E-04	Kg/m.s
Massa molar	18,02	Kg/Kmol

### 8.4.2 Condições de Contorno

A fim de calcular a solução das equações de momento, continuidade e modelo de turbulência e poder obter uma solução do sistema, condições de contorno apropriadas e algumas suposições necessitam ser aplicadas ao problema físico. No caso de simulação de tanques agitados, algumas condições de contorno são comuns em todas as estratégias de resolução, A seguir serão descritas algumas delas:

- ❖ Parede do tanque e chicanas: Foi usada uma condição de não escorregamento. Nesse tratamento a velocidade é reduzida nas regiões perto da parede até que o fluido em contato atinja a velocidade nula na parede.
- ❖ Topo do tanque: Essa região é uma superfície livre, porém pode-se tratar como uma parede ocasionando uma superfície plana do fluido com tensores e velocidade axial nula. Assumindo, portanto, uma altura de líquido constante. Essa hipótese é totalmente aceitável ao considerar que não há fluxo de massa através da superfície do topo do tanque, e que a presença de chicanas evita a formação do vórtice central. Portanto, pode ser aplicada na simulação a condição de livre escorregamento na superfície superior do tanque.
- ❖ Impelidor e eixo – árvore: Considera-se como uma parede de não escorregamento com velocidade angular definida no domínio rotativo.
- ❖ Interface entre domínios: As interfaces para modelos com referências rotacionais são tratadas como superfícies comuns não coincidentes tipo fluido-fluido (*General Grid Interface - GGI*). O que significa que embora o tipo de elementos e a localização dos nós entre os blocos não coincidam, o fluxo físico através da interface é permitido.

Antes de iniciar a solução do problema deve-se inicializar o cálculo através de um campo inicial. No caso das simulações transientes, a inicialização deverá ser o estado físico do escoamento no tempo inicial. Neste trabalho será utilizado um campo inicial com velocidade nula e pressão relativa zero como estado inicial da simulação. As simulações serão feitas desde o estado inicial até que o desenvolvimento do padrão do fluxo torne-se periódico ou estável. Em síntese, as condições de contorno comumente usadas nas simulações CFD para tanques de mistura estão mostradas na Tabela 8-4.

### 8.4.3 Modelos Físicos e Esquemas Numéricos

Na Tabela 8-5 traz um resumo dos diversos arranjos propostos nas simulações, para ver a influência tanto da densidade de malha quanto do modelo de turbulência e esquema numérico, em que é possível ver a evolução dos casos estudados e o alvo dos mesmos.

*Tabela 8-4 Condições de contorno aplicadas na simulação CFD.*

<b>Local</b>	<b>Condições</b>	<b>Especificações</b>
Parede do tanque e chicanas	Não escorregamento	Velocidade na parede nula
Topo do tanque	Superfície livre plana	Tensores e velocidade normal à superfície nula
Impelidor e eixo	Parede rotativa	Velocidade de rotação = 450 rpm
Interface entre domínios	Interface fluida - fluida	Mudança do sistema de referência
	Inicialização	Componentes de velocidade nulos. Pressão relativa nula

Em princípio, para estimar a influência da densidade da malha na análise CFD foi utilizada a abordagem de rotação MFR-*Frozen rotor*, devido a sua estabilidade numérica e menor custo computacional. Porém, para uma melhor predição das interações entre as passagens das pás do impelidor com relação às chicanas foram feitas também simulações utilizando o modelo *Transiente Rotor-Stator* disponível no *software ANSYS CFX 14.0*, o qual é baseado na abordagem de malhas deslizantes (SG).

Na grande parte das simulações feitas neste trabalho foi utilizado o modelo de turbulência SST, já que, esse modelo leva em conta, na equação de transporte, a tensão de cisalhamento que ocorre perto da parede dando, assim, uma boa predição da turbulência e descolamento da camada limite. Não obstante, se realizaram simulações adicionais com outros modelos de turbulência para analisar a sensibilidade dos mesmos com relação aos resultados. Dentro dos modelos de

turbulência testados encontram-se o modelo *Standard k-ε* e *BSL Reynolds Stress*, sendo o primeiro, o mais amplamente usado na modelagem CFD, enquanto que, o segundo pertence a modelos com maior complexidade que assume uma viscosidade anisotrópica.

*Tabela 8-5 Resumo da densidade de malha, abordagem, modelos de turbulência e esquemas numéricos empregados para cada uma das simulações.*

<b>Caso #</b>	<b>Densidade de malha</b>	<b>Abordagem de rotação</b>	<b>Esquema de discretização</b>	<b>Modelo de Turbulência</b>	<b>Alvo</b>
1	Super-grossa	MFR/ARM	UW	SST	Influência da malha
2	Grossa	MFR/ARM	UW	SST	
3	Mediana	MFR/ARM	UW	SST	
4	Fina	MFR/ARM	UW	SST	
5	Fina sem prisma	MFR/ARM	UW	SST	
6	Fina	SG/ARM	UW	SST	Influência dos modelos e esquemas numéricos
7	Fina	SG/ARM	HR	SST	
8	Fina	SG/ARM	BF (0.75)	SST	
9	Fina	SG	BF (0.75)	SST	
10	Fina	SG/ARM	BF (0.75)	k-ε	
11	Fina	SG/ARM	BF (0.75)	BSL-RSM	

Por outro lado, foi usado o modelo alternativo de rotação “*Alternate Rotation Model*” (ARM), uma vez que ele resolve os termos advectivos na equação do momento utilizando o sistema de referência inercial da velocidade. Fornecendo, portanto, uma redução do erro numérico quando o escoamento é constante e paralelo ao eixo de rotação no sistema de referência

estacionária. A influência desse modelo no cálculo dos resultados com relação à abordagem de velocidades relativas também foi analisada.

Finalmente, como todas as simulações foram realizadas em regime transiente, no caso da interpolação dos termos temporais foi utilizado o esquema transiente *Second Order Backward Euler*; o qual é uma formulação implícita de segunda ordem no avanço do tempo que garante uma estabilidade numérica qualquer seja o valor do passo do tempo. Entretanto, para os esquemas de interpolação espacial nos termos advectivos, foram testados esquemas tanto de primeira quanto de alta ordem para observar sua influência nos resultados. Os esquemas de interpolação foram limitados a *Upwind* (UW), *Specific Blend factor* (BF) e *High resolution* (HR) disponíveis no *software ANSYS CFX 14.0*, visto que, outros esquemas não funcionam corretamente com malhas tetraédricas. No caso do esquema *Blend fator* (BF) foi especificado um fator " $\beta$ " de 0,75.

Tanto o passo do tempo quanto o intervalo da simulação, foram definidos segundo as estratégias utilizadas para modelar a interação chicana-impelidor encontradas na literatura. Autores como Lane *et al.* (2000), Spogis (2002) e Murthy & Joshi (2008) utilizaram passos de tempo inferiores a  $t < \frac{1}{10 * (N)}$ , em que "N" refere-se à velocidade de rotação do impelidor.

Depende da abordagem utilizada na simulação se pode atingir um estado estacionário ou pelo contrario um estado pseudo-permanente. Desse modo, aquelas simulações baseadas na abordagem com múltiplos sistemas de referência (MFR) foram realizadas com um passo de tempo em torno de 0,013s até atingir o estado estacionário a fim de guardar tempo computacional. Entretanto, para as simulações que utilizaram a abordagem de malhas deslizantes (SG), foi definido um passo de tempo em torno de 0,0018s correspondente a uma rotação de 5° graus do impelidor até conseguir atingir um estado pseudo-permanente. Cabe-se salientar que, na abordagem de malhas deslizantes (SG) foi necessário definir um passo de tempo pequeno para obter resultados que pudessem descrever corretamente tanto os fluxos gerados pelo impelidor quanto a interação da passagem das pás do impelidor com a chicana.

Entretanto, no intervalo de tempo da simulação ainda existem muitas diferenças entre os autores, pois depende muito de outros fatores tais como a capacidade computacional, os parâmetros a serem avaliados e as condições de operação do problema. Portanto, podem encontrar-se na literatura tempos de simulação que vão desde 10 até 44 voltas do impelidor (Lane *et al.*, 2000; Spogis, 2002; Murthy & Joshi, 2008). Neste trabalho os casos de estudo que foram resolvidos em regime totalmente transiente foram simulados em torno a 30 voltas do impelidor, o que coincide com um intervalo de tempo de 4s.

Finalmente, todas as simulações foram realizadas utilizando computadores equipados com Intel® Core i7 64 bits de quatro processadores e um total de 8GB de memória RAM e velocidade do processador de 2,80 GHz. Conforme a abordagem de rotação escolhida, cada simulação demorou em torno de 5 dias no caso da configuração *Transient Rotor* (SG), enquanto que na configuração *Frozen Rotor* (MFR) foi em torno de 8 horas.

## 9 RESULTADOS

### 9.1 Convergência, Monitoramento da Solução

Para garantir a convergência dos resultados foram considerados valores RSM residuais inferiores a  $1E-05$ . Tais valores são baseados nos erros residuais das soluções numéricas das equações de momento e continuidade sugeridas na literatura para a conservação das quantidades de transporte. Portanto, a convergência da solução foi cuidadosamente verificada através do monitoramento do valor residual das equações de transporte no decorrer da simulação como se observa na Figura 9-1.

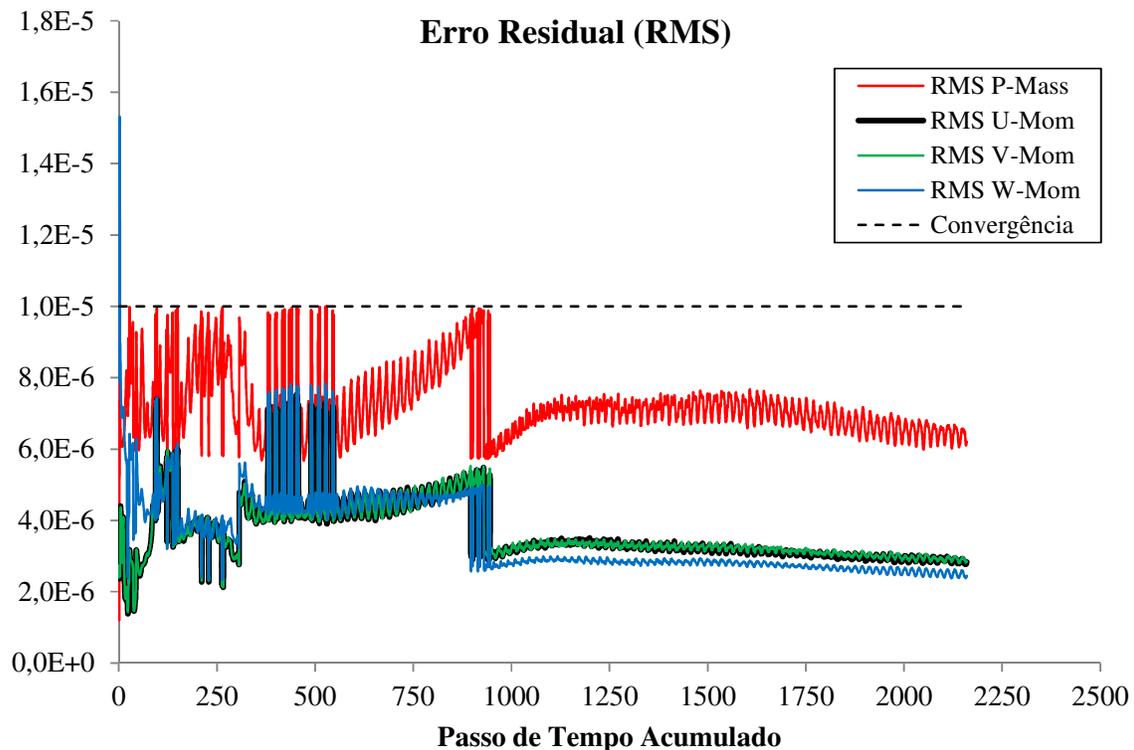


Figura 9-1 Monitoramento do critério de convergência no caso de estudo #10 apresentada na Tabela 8-5.

Como todas as simulações foram feitas dependentes do tempo foi necessário rodar um período de tempo, de modo que o impelidor pudesse completar diversas voltas até atingir o estado estacionário ou pseudo-permanente garantindo que tanto os campos de velocidade quanto as variáveis de interesse estivessem com poucas flutuações. Por esse motivo, foram aplicados pontos de controle para o monitoramento de todas as variáveis de interesse a fim de verificar que hajam atingido a estabilidade necessária. De forma que, as variáveis do número de potência ( $N_p$ ) e número de bombeamento ( $N_q$ ) foram monitoradas para cada simulação como é mostrado a seguir.

### 9.1.1 Número de Potência e Número de bombeamento

As variáveis de interesse neste trabalho são as quantidades adimensionais do número de potência ( $N_p$ ) e número de bombeamento ( $N_q$ ), os quais foram definidos na seção 4.3 e que são amplamente utilizadas como parâmetros característicos associados ao sistema de agitação.

Para todas as simulações, o consumo de potência ( $P$ ) foi estimado a partir do cálculo da transferência de torque ( $T_q$ ) da superfície rotativa para o fluido. Conforme a potência consumida, o valor “ $N_p$ ” para sistemas homogêneos em escoamento turbulento pode se estimar através das seguintes expressões:

$$P = 2\pi N T_q \quad (9.1)$$

$$N_p = \frac{P}{\rho N^3 D^5} \quad (9.2)$$

Em que, o torque ( $T_q$ ) na equação (9.1) é definido como a força de arrasto aplicada sobre o fluido e distribuída ao longo da distância da pá do impelidor. Enquanto a variáveis “ $N$ ” e “ $D$ ” são definidas como a velocidade de rotação e diâmetro do impelidor. Na Figura 9-2 são mostradas as linhas de corrente geradas pelo arrasto da pá do impelidor.

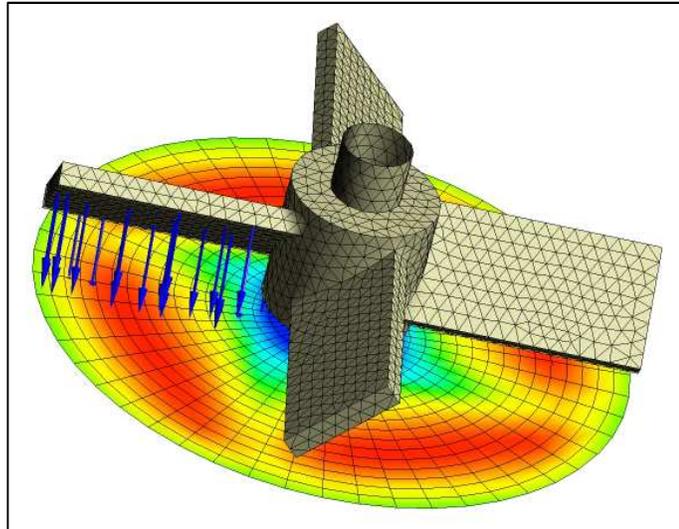


*Figura 9-2 Linhas de corrente na pá do impelidor PBT.*

Para o cálculo do bombeamento é necessário calcular a vazão dos fluxos primários gerados na descarga do impelidor ( $Q$ ). Por este motivo se criou um plano circular localizado na direção transversal ao fluxo logo abaixo do impelidor, de acordo ao esquema apresentado na Figura 9-3. Desse modo, foi estimado o número de bombeamento para cada configuração estudada conforme a seguinte expressão:

$$N_q = \frac{Q}{ND^3} \quad (9.3)$$

Lembre-se que o número de potência ( $N_p$ ) diminui com o aumento do regime turbulento até se tornar constante e independente da viscosidade para altos números de Reynolds, no entanto, o número de bombeamento ( $N_q$ ) aumenta com o acréscimo do regime turbulento.



*Figura 9-3 Plano abaixo do impelidor utilizado para o cálculo do bombeamento.*

Na Figura 9-4, podem ser vistas não só as flutuações produzidas no cálculo da potência do impelidor devido à interação da chicana considerada na abordagem *Transient Rotor-Stator*, senão também as oscilações devido às instabilidades numéricas presentes nos esquemas numéricos de alta ordem. Por outro lado, na Figura 9-5 são mostradas as oscilações presentes na estimativa do número de potência enquanto estabiliza o fluxo gerado pelo impelidor no transcorrer do tempo.

Em todas as simulações se verificou que tanto o número de potência ( $N_p$ ) quanto o número de bombeamento ( $N_q$ ) mostraram um padrão periódico acima de um tempo de 2 [s] no decorrer da simulação, como pode ser visto na Figura 9-4 e Figura 9-5 conforme os casos mostrados. Por conseguinte, foram considerados na estimação do número de potência e bombeamento somente os valores após desse tempo obtidos nas diversas simulações. Finalmente, todos os resultados tanto de  $N_p$  quanto de  $N_q$  foram comparados com valores experimentais fornecidos por Machado *et al.* (2011).

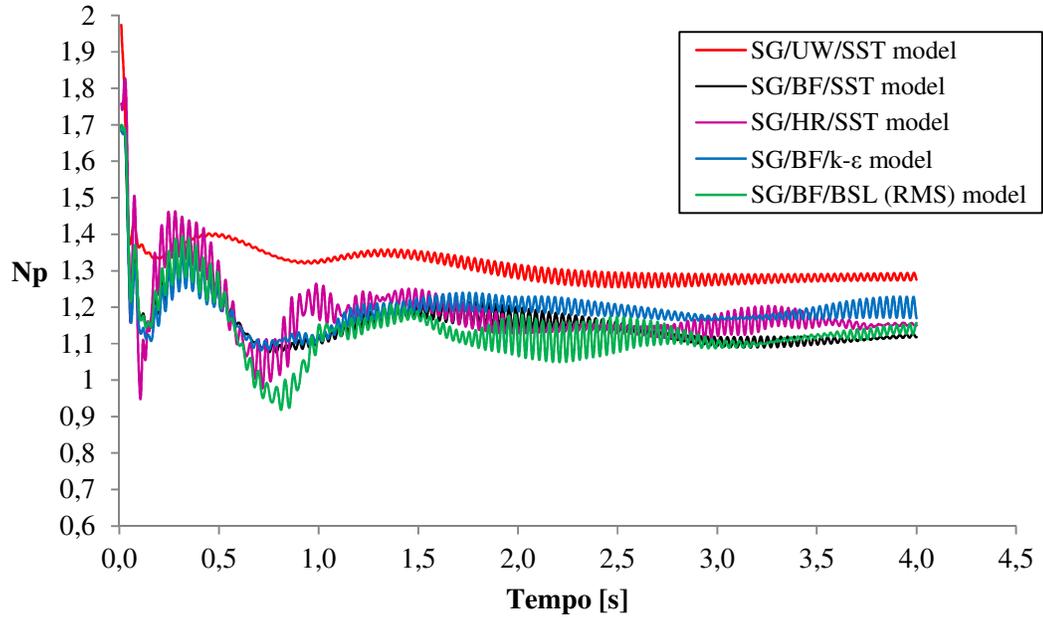


Figura 9-4 Monitoramento do número de potência no decorrer da solução. Simulações correspondentes aos casos de estudo # 6, 7, 8, 10 e 11 apresentados na Tabela 8-5.

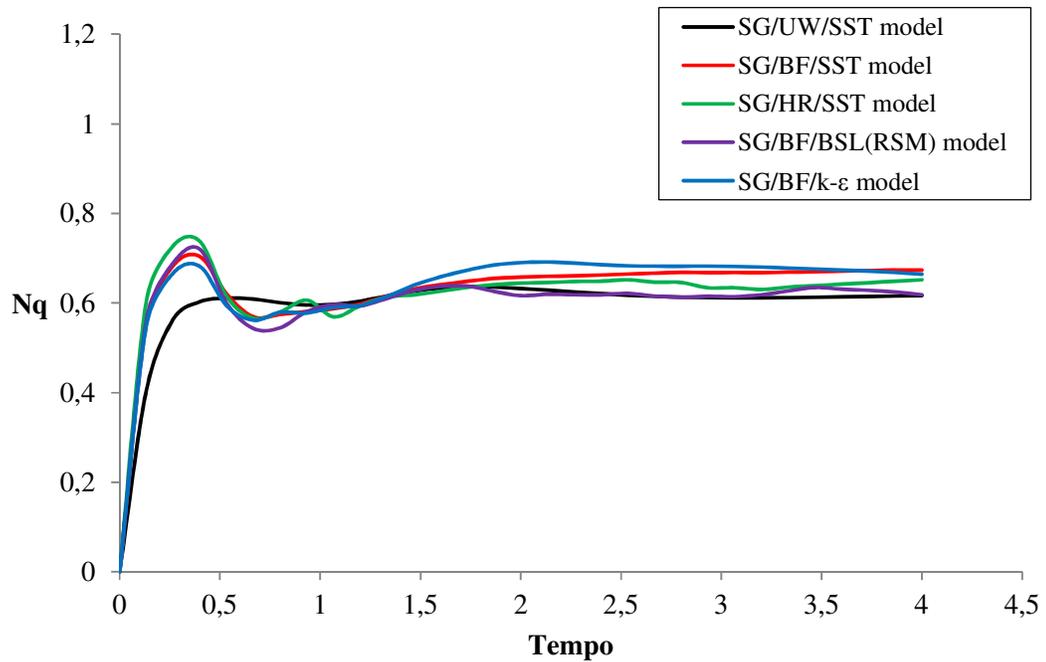


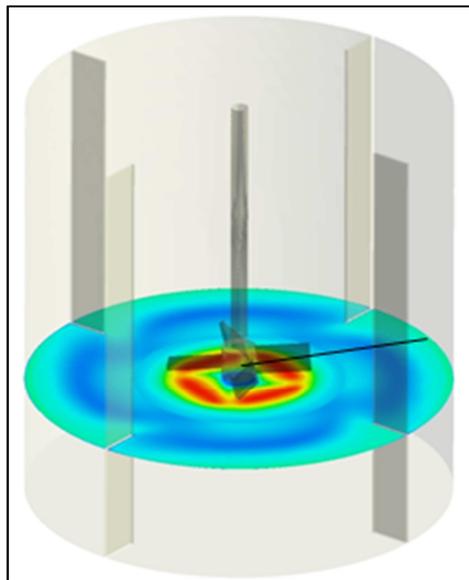
Figura 9-5 Monitoramento do número de bombeamento no decorrer da solução. Simulações correspondentes aos casos de estudo # 6, 7, 8, 10 e 11 apresentados na Tabela 8-5.

### 9.1.2 Perfil de Velocidade Axial Adimensional

Para avaliar a influência dos diversos métodos e esquemas na modelagem CFD, foi necessário investigar a exatidão deles com relação ao fenômeno físico real. Por esse motivo, foram avaliados os perfis de velocidade axial obtido a partir das simulações, já que, o impelidor PBT é considerado um impelidor de tipo axial.

Os resultados dos perfis de velocidade axial foram tomados através de uma linha traçada desde o centro do tanque ate um ponto na metade de duas chicanas e sobre um plano transversal, localizado a 3 mm logo abaixo do impelidor, conforme se mostra na Figura 9-6. Os perfis foram calculados com base em valores médios no tempo e posição relativa, de acordo à metodologia empregada por Machado *et al.* (2011) na determinação dos dados experimentais utilizados neste trabalho como ferramenta de validação das simulações.

O perfil axial dentro da simulação foi estimado a partir de cálculos de velocidade média na direção axial ( $V_z$ ) do fluxo de descarga do impelidor considerando as 4 últimas voltas do intervalo do tempo simulado.



*Figura 9-6 Plano transversal utilizado no cálculo dos perfis de velocidade axial.*

Finalmente, os perfis de velocidade axial foram comparados com dados experimentais fornecidos por Machado *et al.* (2011) utilizando variáveis adimensionais, visto que são mais convenientes para realizar comparações com valores experimentais. Por esse motivo, foram utilizadas variáveis adimensionais  $r/R$  e  $V_z/V_{tip}$  para o cálculo do perfil de velocidade axial adimensional, onde os valores de "R" e " $V_{tip}$ " são constantes e definidos conforme o raio do tanque e a velocidade de borda do impelidor.

### 9.1.3 Padrão de Fluxos

De acordo com a literatura, os impelidores de pás retas inclinadas (PBT) geram um fluxo misto axial-radial na forma de jato, que é espalhado à medida que progride em direção ao fundo do tanque formando uma recirculação do fluxo na direção axial de baixo para cima no tanque; em que a direção e amplitude do jato, assim como, o tamanho do vórtice de recirculação dependem em grande parte da inclinação das pás do impelidor y a velocidade de rotação do mesmo.

Para garantir a consistência da solução numérica com os fenômenos físicos envolvidos em tanques de agitação, se constato que o padrão de fluxo fosse característico do impelidor analisado neste trabalho. Na Figura 9-7, pode ser visto o padrão de fluxo característico do impelidor PBT-45° consistente com o exposto na literatura.

Por esse motivo, foi necessário monitorar a estabilização dos fluxos ao longo da simulação que pudesse estabelecer um padrão definido de fluxo, portanto, os fluxos volumétricos de cada interface (superior, lateral e inferior) entre o sistema rotativo e estacionário foram monitorados para cada simulação como se mostra na Figura 9-8.

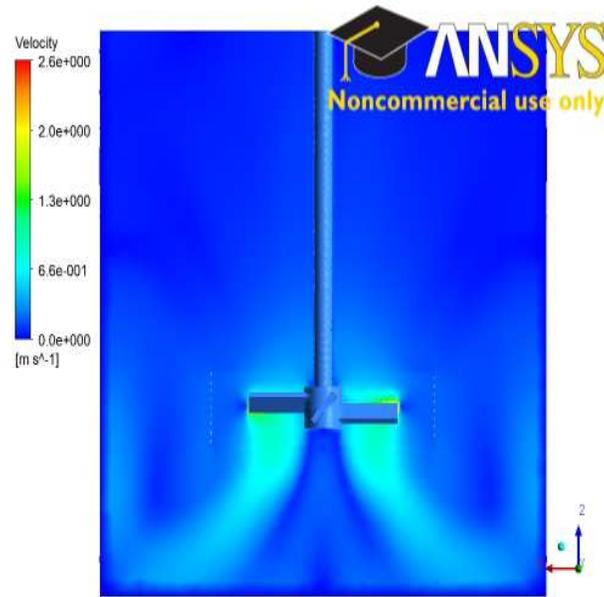


Figura 9-7 Padrão de fluxo simulado produzido pelo impelidor PBT-45°

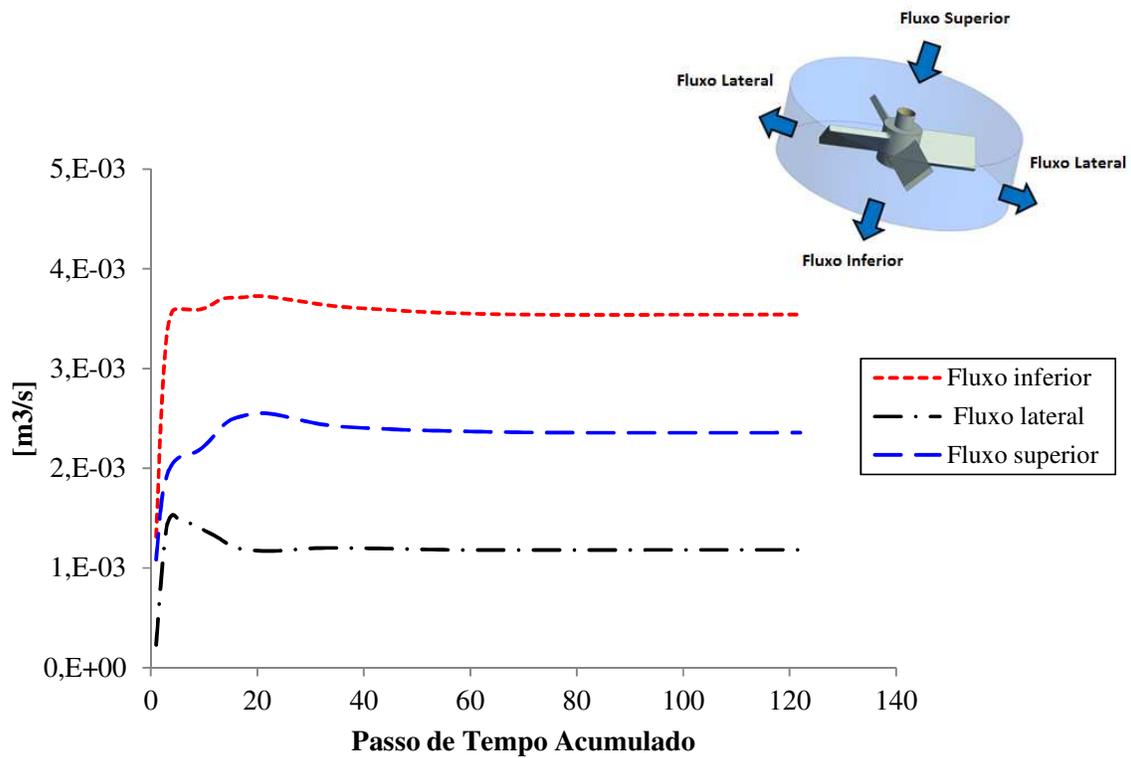


Figura 9-8 Estabilização dos fluxos através das interfaces do domínio rotativo no decorrer da solução numérica. Simulação correspondente ao caso #4 apresentados na Tabela 8-5.

## 9.2 Efeito do Refinamento da Malha

Uma solução convergida e independente da malha sobre um problema com adequados modelos físicos fornecerá precisão nos resultados. Portanto, a avaliação das incertezas numéricas da simulação foi feita baseada na análise da predição do número de potência e bombeamento, já que, eles são os parâmetros adimensionais mais representativos e importantes na caracterização global dos processos de mistura em tanques.

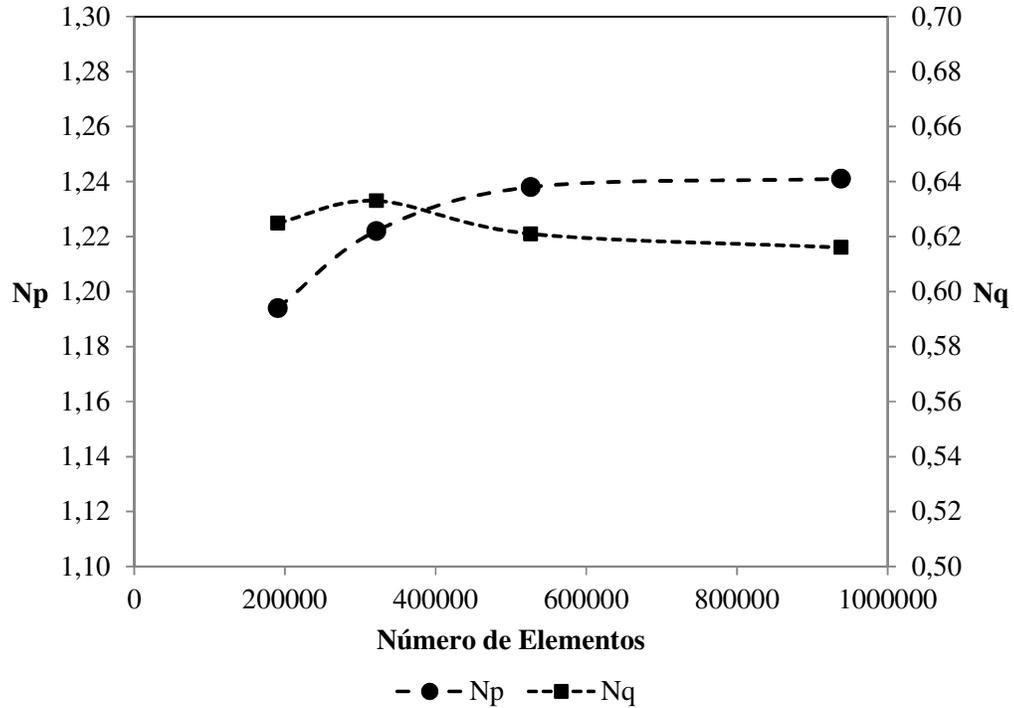
Um estudo da influencia do refinamento da malha mostrará o efeito do número de elementos sobre o número de potencia ( $N_p$ ) e bombeamento ( $N_q$ ). Para isso, foram feitas quatro simulações com diferentes densidades de malha descritas na seção 8.3. Na análise do efeito da discretização espacial ou refinamento da malha foi utilizada uma abordagem MFR- *Frozen Rotor* junto com o modelo de turbulência SST, assim mesmo foi empregado na simulação o esquema de discretização *Upwind* para os quatro tipos de refinamentos testados.

Uma malha com cerca de 940.000 elementos mostrou que pode prever resultados do número de potência e bombeamento com suficiente precisão, segundo com o critério padrão estabelecidos na engenharia (inferior a 1%). Desta forma, com o apresentado na Tabela 9-1 se observa que a malha denominada como fina satisfaz o critério da independência de malha.

*Tabela 9-1 Porcentagem de variação do número de potência e bombeamento conforme o aumento do refino da malha.*

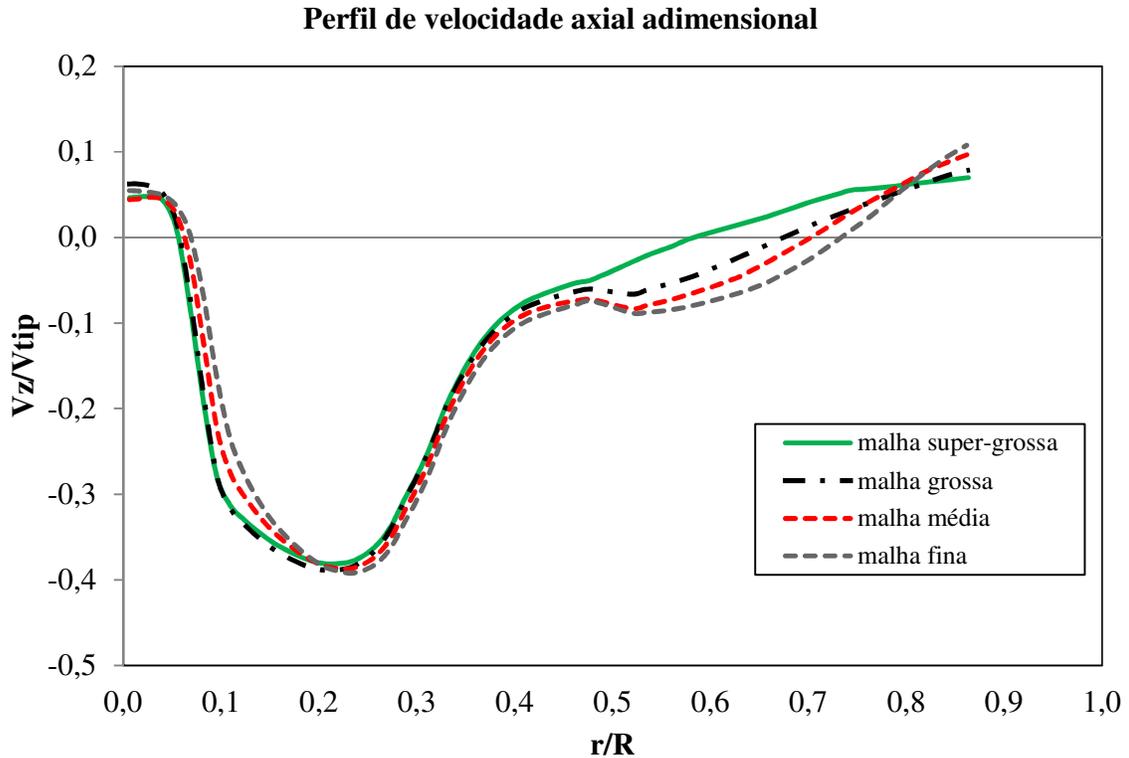
Tipo de Refino	Número de Elementos	$N_p$	$N_q$
Super-coarse	190334	-	-
Coarse	321161	2.35%	1.28%
Média	526230	1.31%	1.90%
Fina	937953	0.24%	0.81%

Por outro lado, podemos ressaltar que o número de bombeamento não apresenta uma forte dependência com o refinamento da malha, o que ocorre de modo contrário no cálculo do número de potência, assim mesmo note-se que as variações significativas nos resultados quase desaparecem com o refinamento da densidade da malha. Na figura 9-9 é mostrado o efeito da discretização espacial sobre a predição do  $N_p$  e  $N_q$ .



*Figura 9-9 Variação da estimativa do número de potência e de bombeamento conforme aumenta o refino da malha.*

De outro modo, na Figura 9-10 é mostrado o efeito do refinamento da densidade da malha no perfil de velocidade axial adimensional, onde claramente, se percebe que a malha super-grossa apresenta uma significativa sub-predição da intensidade da recirculação do fluxo. Entretanto, as outras malhas apresentam perfis qualitativamente similares com algumas diferenças numéricas, principalmente na região compreendida entre  $0.55 < r/R < 0.8$ . Os resultados das malhas com maiores refinamentos sugere que refinamentos adicionais não teriam um efeito significativo na predição do perfil de velocidade.



*Figura 9-10 Comparações entre diferentes densidades de malha do perfil de velocidade axial adimensional.*

Por conseguinte, também foi analisado de forma qualitativa a influencia do refinamento da malha no padrão de fluxo, portanto, foram traçados os vetores de velocidade produzidos pelo impelidor. Note-se que na Figura 9-11 os padrões de fluxo nas malhas mediana e fina são semelhantes apresentando uma forte recirculação do fluxo primário encostado na parede e parte inferior do tanque junto com uma pequena recirculação secundária embaixo do impelidor. Entretanto, percebem-se na predição da direção e espessura do jato de descarga do impelidor, assim como no tamanho do vórtice da recirculação do fluxo primário algumas diferenças apreciáveis influenciadas pela densidade da malha.

Finalmente, conforme com todas as observações expostas acima, foi escolhido o refinamento de malha denominada neste trabalho como fino na análise da sensibilidade dos modelos de turbulências e dos esquemas numéricos para garantir a independência da malha nos resultados das simulações posteriores.

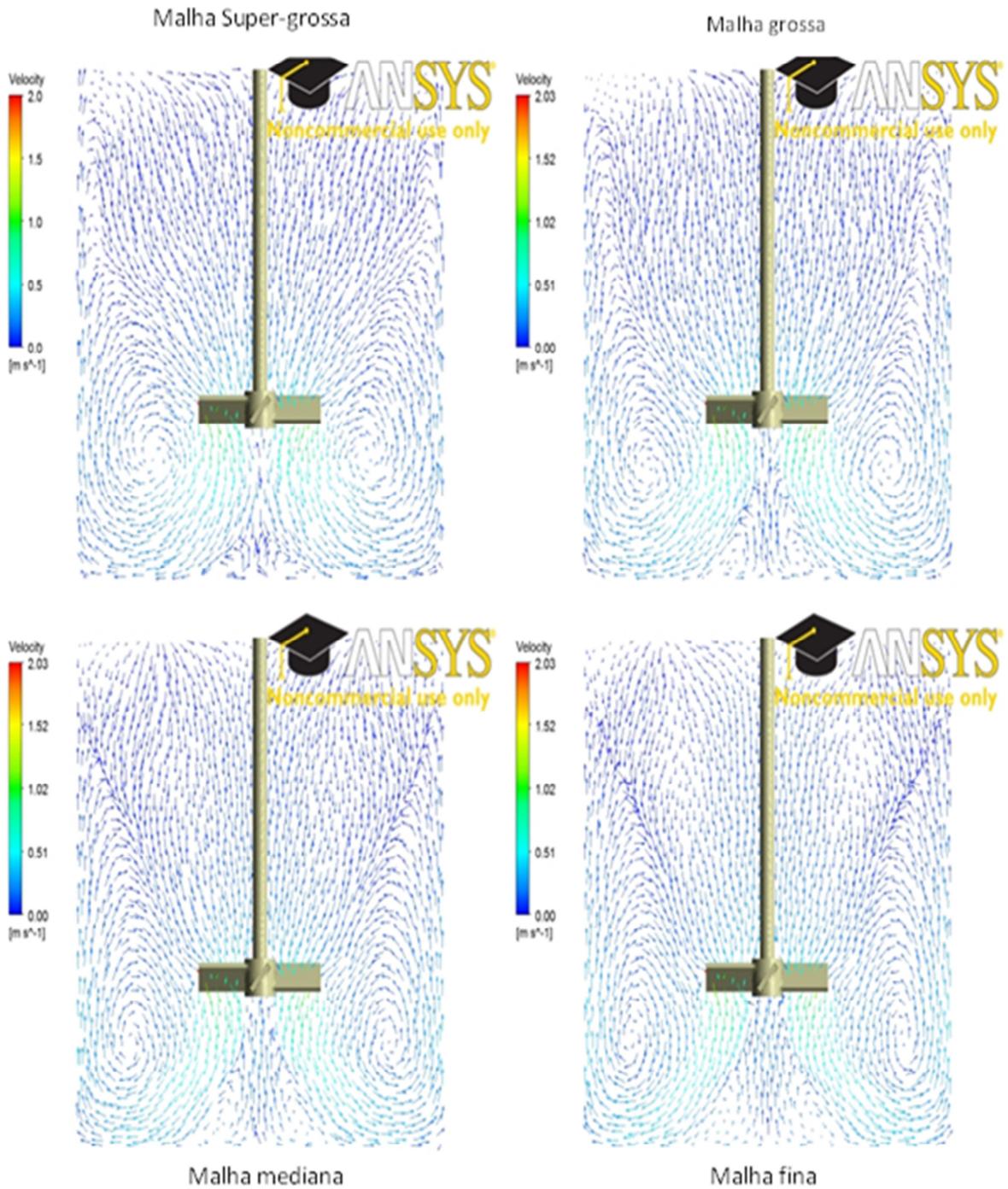


Figura 9-11 Padrões de fluxo gerados pelo impelidor PBT estimados utilizando diferentes resoluções de malha.

### 9.3 Influência dos Elementos Prismas

Como foi explicado na secção 6.2, quando forem utilizadas malhas tetraédricas será necessária uma aplicação de elementos prismáticos adjacente às paredes para que os cálculos dos efeitos viscosos que ocorrem na região próxima da parede sejam corretos. Portanto, foi realizado um teste para determinar a influência da camada de prismas no cálculo das variáveis de interesse neste trabalho.

Conforme com a Figura 9-12, note-se que a influência considerável dos elementos prismáticos com relação à predição do número de potência, enquanto que a influência no cálculo do número de bombeamento é desprezível. Lembre-se que a potência é determinada segundo o cálculo do torque, portanto, os efeitos de cisalhamento próximos das superfícies do impelidor e paredes do tanque podem ser significativos. Assim, o cálculo adequado das quantidades de transporte nas regiões próximas da parede vai fornecer maior precisão dos resultados com relação ao consumo de potência.

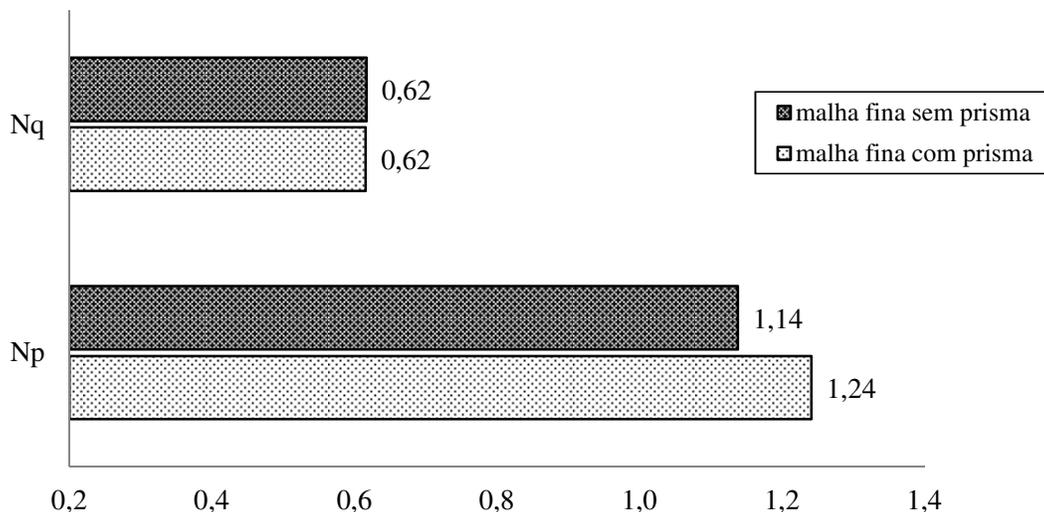


Figura 9-12 Influência da camada de prisma no cálculo do número de potência ( $N_p$ ) e número de bombeamento ( $N_q$ ).

De outro modo, devido ao fato que o cálculo dos fluxos na grande parte do tanque encontra-se afastado da interação do fluido-parede, a camada de prisma não apresenta nenhum efeito significativo na predição dos fluxos primários gerados pelo impelidor como se observa na

Figura 9-13. Portanto não haverá nenhuma influência no cálculo do bombeamento e na predição do perfil de velocidade, enquanto estiver restrito a um perfil fora da camada limite.

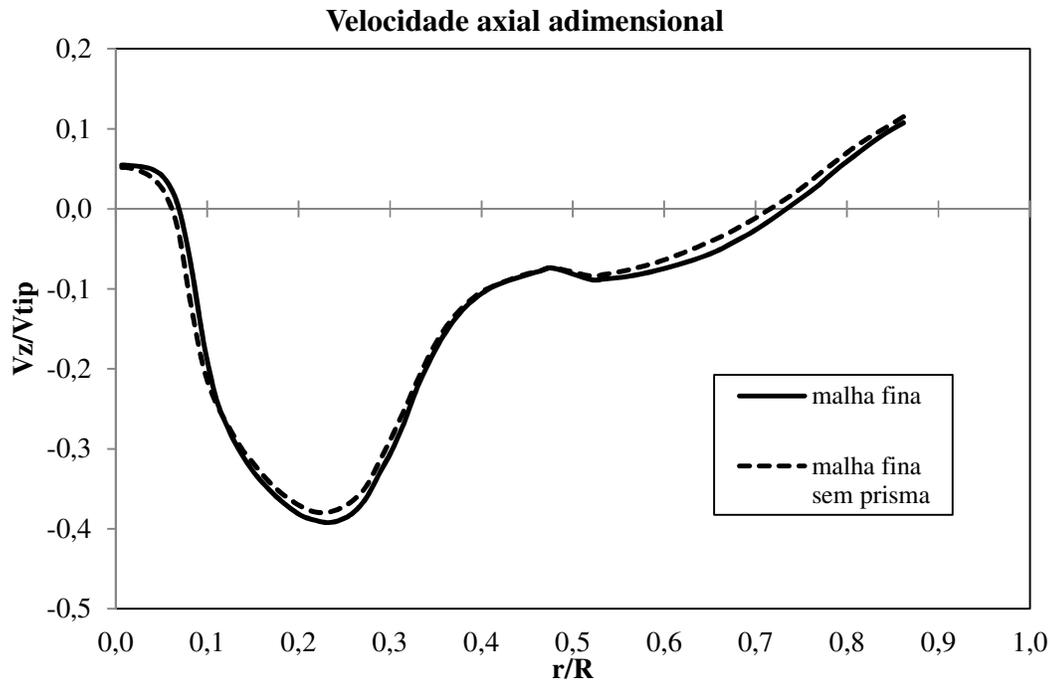


Figura 9-13 Comparação do perfil de velocidade adimensional entre uma malha utilizando elementos prismáticos e outra sem presença dos mesmos.

Na Figura 9-14 é mostrado o efeito da estimativa do  $y^+$  na parede do tanque e impelidor. Note-se na figura que mesmo a malha seja bem refinada é difícil manter o  $y^+$  em um valor baixo sem o uso da camada de prismas. Além disso, lembre-se de que uma das vantagens da utilização dos modelos baseados na formulação da frequência turbulenta ( $\omega$ ) deve-se ao fato de poder caracterizar o escoamento da região viscosa próximo da parede; onde outros modelos podem apresentar falhas na predição da turbulência por causa do baixo número de Reynolds nessa região.

Portanto, é importante garantir valores de  $y^+ < 11$  que permitam que os nós da malha estejam localizados dentro da região fluidodinâmica da camada viscosa detalhado na secção 5.3, e assim tirar um maior proveito do tratamento de parede utilizado nessa abordagem (*Near-wall treatment*).

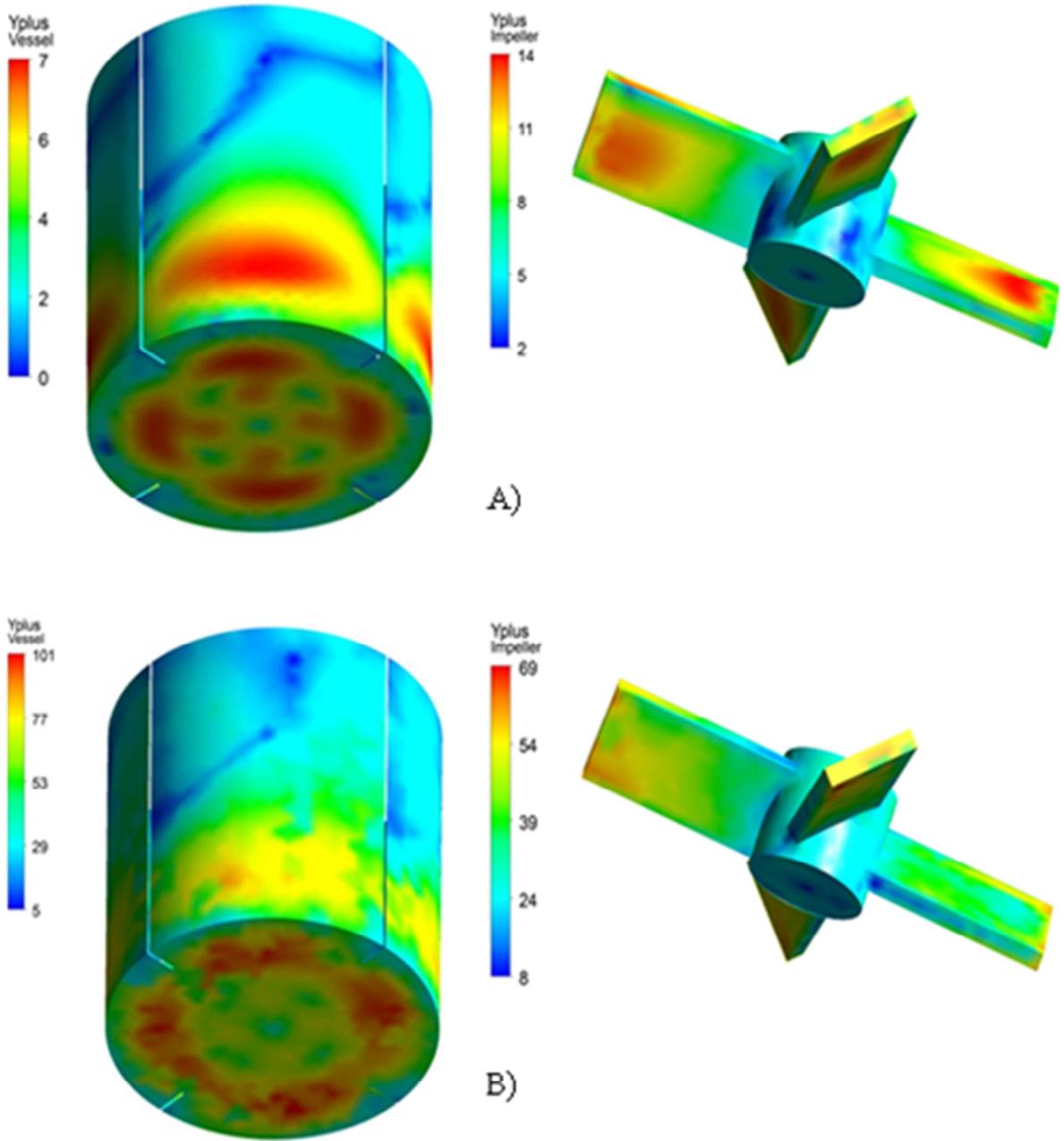


Figura 9-14 Influência da utilização da camada de prisma nas paredes do tanque e impelidor na estimação do  $y^+$ . A) Malha refinada com camada de prisma. B) Malha refinada sem elementos prismáticos.

## 9.4 Análise de Sensibilidade: Modelos e Esquemas Numéricos

Nesta seção serão feitas algumas comparações entre previsões CFD e dados experimentais que permitirão uma visão global do efeito nos resultados quando são mudados os modelos físicos e numéricos na configuração do *software* CFD. O cálculo do desvio dos resultados será feito mediante o uso de expressões para quantificar o erro, conforme cada simulação. Por outro lado, devido ao esforço computacional, a turbulência foi limitada a modelos de turbulência estatística conhecida como modelos RANS. Entretanto, os modelos numéricos testados foram escolhidos de acordo aos esquemas disponíveis em ANSYS CFX 14.0.

### 9.4.1 Esquema de Discretização

Embora os esquemas de alta ordem sejam conhecidos por serem mais precisos, eles frequentemente possuem menor estabilidade numérica e uma convergência mais difícil em relação a esquemas numéricos de primeira ordem. Com essas considerações acima e a preferência dos esquemas de alta ordem por diversos autores na simulação de processos de mistura em tanques, o efeito do esquema de discretização na solução numérica foi pesquisado.

O perfil da velocidade axial obtido pela técnica do PIV foi comparado com aqueles preditos nas simulações CFD utilizando o esquema de primeira ordem *Upwind* e os esquemas de alta ordem *Blend Factor (0,75)* e *High Resolution*. Além disso, foi investigado o efeito do cálculo do número de potência e bombeamento no resultados CFD mostrados na figura 9.14. Nesta parte da análise, todas as simulações foram desenvolvidas usando o modelo de turbulência SST.

Na comparação do perfil de velocidade, podem-se notar as diferenças na distribuição radial da velocidade axial para os diferentes esquemas numéricos utilizados, mostrando algumas oscilações numéricas na região compreendida entre  $0.1 < r/R < 0.5$  no esquema *High resolution*. Nessa região se localizam os maiores gradientes de velocidade por causa do fluxo primário gerado pelo impelidor.

Entretanto, percebe-se no esquema *Upwind* uma menor predição das regiões com altos gradientes correspondentes ao jato do impelidor, devido ao efeito da difusão numérica associado com o esquema *Upwind*. Qualitativamente, note-se que o esquema *Blend factor (0,75)* foi o esquema numérico que mostrou maior concordância com os dados experimentais sem mostrar indícios claros de oscilação ou difusão numérica no resultado.

Embora os valores máximos da velocidade determinados por todos os esquemas se localizem na área de descarga do impelidor, sua magnitude foi diferente em todos os esquemas numéricos avaliados. Os resultados apresentados na Figura 9-15 mostraram uma pobre predição do valor máximo de velocidade no esquema *Upwind* e uma predição acima do esperado no esquema *High resolution*. Cabe salientar que o esquema *High resolution* mostrou exatidão nos resultados na região determinada pela recirculação do fluxo compreendida entre  $0.5 < r/R < 0.8$ . Finalmente, o esquema *Blend fator (0,75)* foi o que melhor conseguiu estimar a máxima velocidade no perfil.

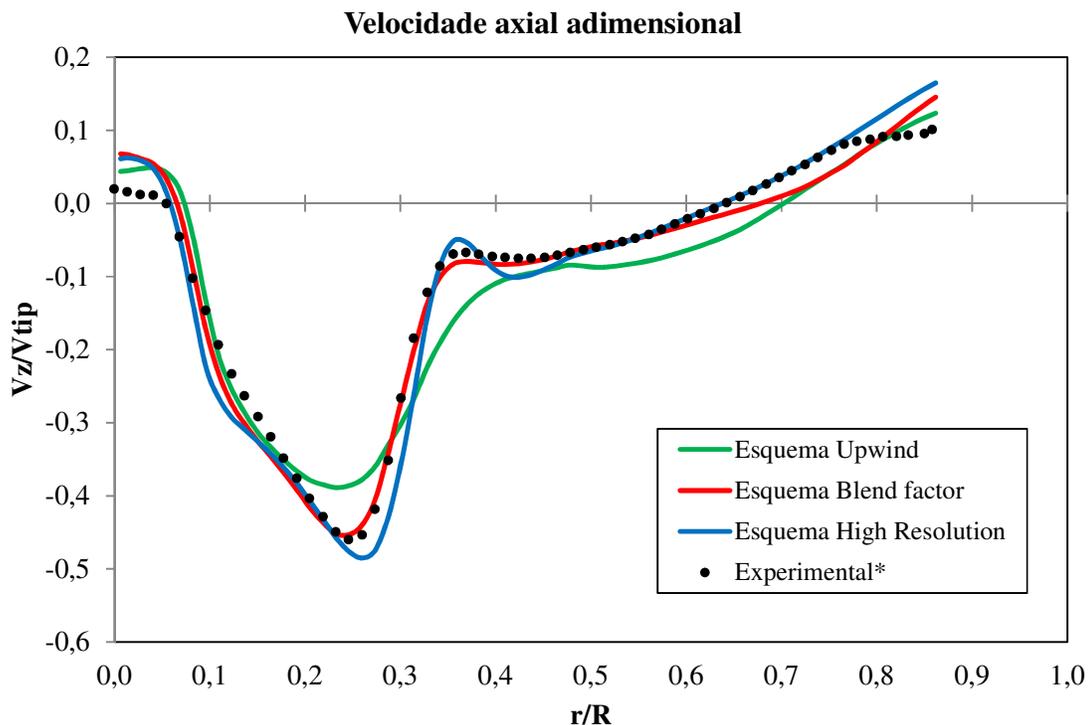


Figura 9-15 Comparações do perfil de velocidade axial adimensional entre diferentes esquemas de discretização utilizados na modelagem CFD. \* Machado et al. (2011).

### Número de Potência e Bombeamento

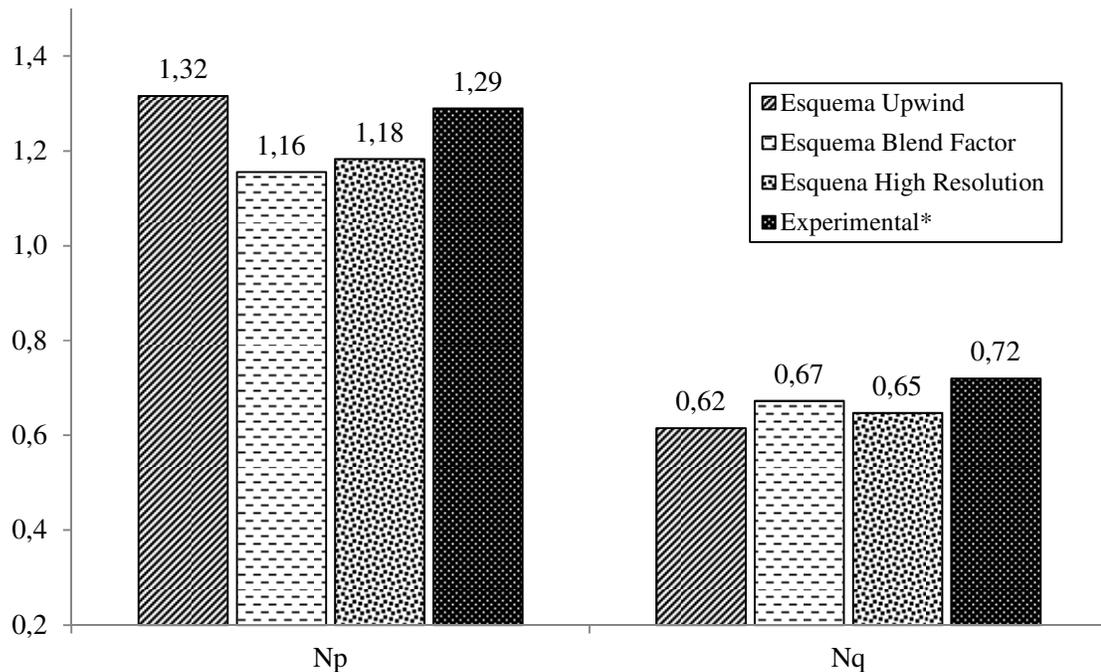


Figura 9-16 Influência do esquema de discretização na estimação do número de Potência e número de bombeamento. \* Machado et al. (2011).

De acordo com a figura 9-16 pode-se concluir que o esquema de discretização tem influência direta na precisão do cálculo do número de potência e bombeamento. Observa-se uma sobre estimativa do valor de  $N_p$  quando é utilizado o esquema *Upwind* e uma menor estimativa quando se utiliza esquemas de alta ordem. Por outro lado, a estimativa do número de bombeamento foi inferior ao valor experimental em todos os casos. Finalmente, o esquema *Upwind* forneceu a maior precisão nos resultados do número de potência, enquanto que o esquema Blend factor (0,75) apresentou a melhor concordância do número de bombeamento.

#### 9.4.2 Modelo Alternativo de Rotação

Conforme o manual ANSYS CFX 14.0, o modelo alternativo de rotação faz uma redução significativa no erro numérico quando o escoamento no sistema de referência inercial é paralelo ao eixo de rotação e constante. Este padrão de fluxo é similar ao padrão produzido pelo impelidor de tipo axial analisado neste trabalho. Portanto, o modelo evita que pequenos erros nos termos

advectivo do fluxo no sistema rotativo tornem-se enormes erros no cálculo do fluxo no sistema estacionário ou inercial. Além disso, é sugerido no manual de CFX 14.0 que o uso deste modelo na maioria das situações diminui o erro numérico nos resultados ou pelo menos não é aumentado.

Por isso, foi feito um teste para avaliar a influência do modelo no cálculo do perfil de velocidade, sendo utilizada na análise da sensibilidade do modelo alternativo de rotação uma configuração *Shear Stress Transport (SST) - Blend factor (0,75)* na simulação.

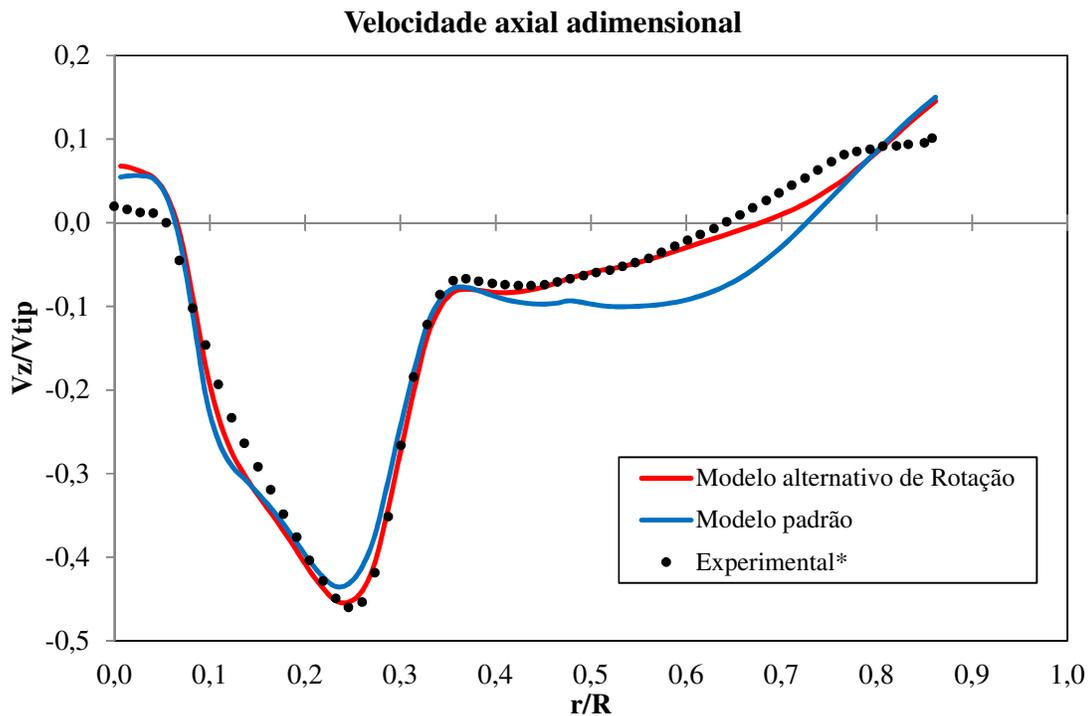


Figura 9-17 Influência do modelo alternativo de rotação no perfil de velocidade axial calculado em CFD. \* Machado et al. (2011).

Conforme os resultados dos perfis de velocidade na Figura 9-17 note-se que embora as diferenças na região de descarga do jato do impelidor não sejam significativas a exatidão dos resultados da velocidade axial na área da recirculação diminui segundo o modelo de rotação utilizado.

Assim, pode ser visto na Figura 9-17 que o modelo padrão utilizado em ANSYS CFX-14.0 mostrou um forte deslocamento do perfil de velocidade acima da região  $r/R > 0.5$ , afastando-lhe dos resultados experimentais. Isso devido, bem seja à propagação do erro na mudança do sistema de referência ou à desvantagem do modelo de calcular corretamente os fluxos paralelos ao eixo da rotação como foi discutido anteriormente.

Entretanto, o modelo alternativo de rotação apresentou uma melhor concordância nos resultados tanto na região de descarga quanto na região de recirculação dos fluxos gerado pela rotação do impelidor, porquanto foi mantido na configuração das demais simulações.

### 9.4.3 Modelo de Turbulência

A maioria dos trabalhos têm se focado na modelagem do campo médio de fluxo e nas quantidades turbulentas embasando-se em medições experimentais do fluxo. No entanto, a comparação da capacidade preditiva de diversos modelos de turbulência ainda tem sido incipiente para fluxos gerados por impelidores convencionais como o impelidor PBT.

Embora seja sugerido o uso de modelos de turbulência baseados no cálculo dos tensores de Reynolds, uma vez que a turbulência em tanques de mistura é considerada anisotrópica e não homogênea, eles apresentam algumas deficiências, tais como dificuldades numéricas e maior esforço computacional com relação a modelos de duas equações. Não obstante, em muitos casos, uma maior complexidade do modelo não garante uma melhor predição nos resultados CFD.

A maioria dos desvios no cálculo dos fluxos, geralmente, é atribuída às deficiências do modelo de turbulência ao invés de erros associados com o esquema de discretização ou da resolução da malha. Portanto, deve assegurar-se uma densidade de malha correta junto com uma predição precisa da taxa de cisalhamento nas superfícies do impelidor e do tanque, para que seja possível obter-se uma boa concordância com os resultados experimentais.

Na Figura 9-18 mostram-se comparações do perfil de velocidade axial usando três diferentes modelos de turbulência (*k-ε model*, *SST model* e *BSL-Reynolds Stress model*). Todas as simulações foram configuradas junto ao esquema de discretização *Blend factor (0,75)*. Pode-se observar que o modelo *k-ε* apresentou o maior desvio no perfil de velocidades, principalmente, na região compreendida entre  $0.35 < r/R < 0.8$  por causa de fortes recirculações nessa área, enquanto na região do jato de descarga do impelidor se observou predições similares ao modelo SST.

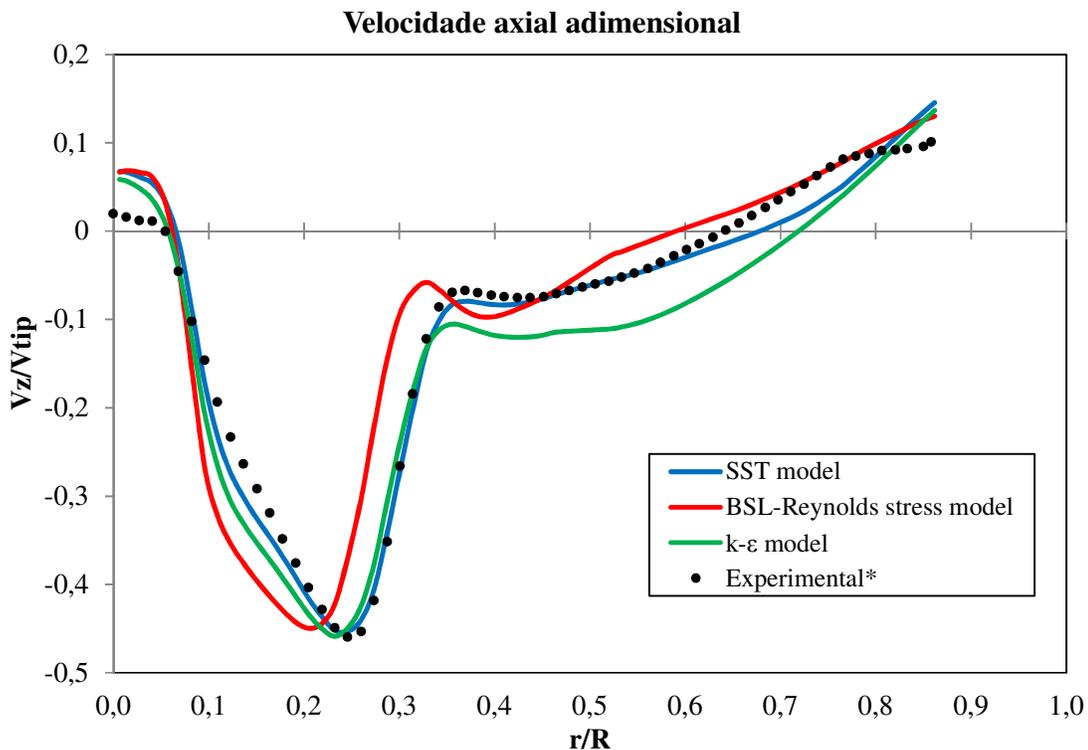


Figura 9-18 Comparações do perfil de velocidade axial adimensional entre diferentes modelos de turbulência utilizados na modelagem CFD. \* Machado et al. (2011).

De outro modo, o modelo *BSL-Reynolds Stress model* mostrou uma predição razoável do perfil de velocidade na região  $r/R > 0.4$ . No entanto, algumas flutuações foram observadas no perfil, que aumentaram significativamente em áreas com altos gradientes pertencentes ao contorno do jato gerado pelo impelidor. Por conseguinte, é possível que essas flutuações tenham deslocado a predição do perfil, em particular da inclinação do jato de descarga.

Pode-se notar que, de acordo com a localização do pico de velocidade na região compreendida entre  $0.1 < r/R < 0.35$ , se pode conferir uma mudança da inclinação do jato na zona de descarga do impelidor, de fato esse fenômeno terá um efeito significativo na estimativa do bombeamento do impelidor. Finalmente, a comparação com dados experimentais do PIV mostrou que o modelo SST forneceu a melhor predição CFD do perfil de velocidade, porém, são observados alguns desvios nas regiões entre  $0.6 < r/R < 0.85$  e  $0.1 < r/R < 0.2$  respectivamente.

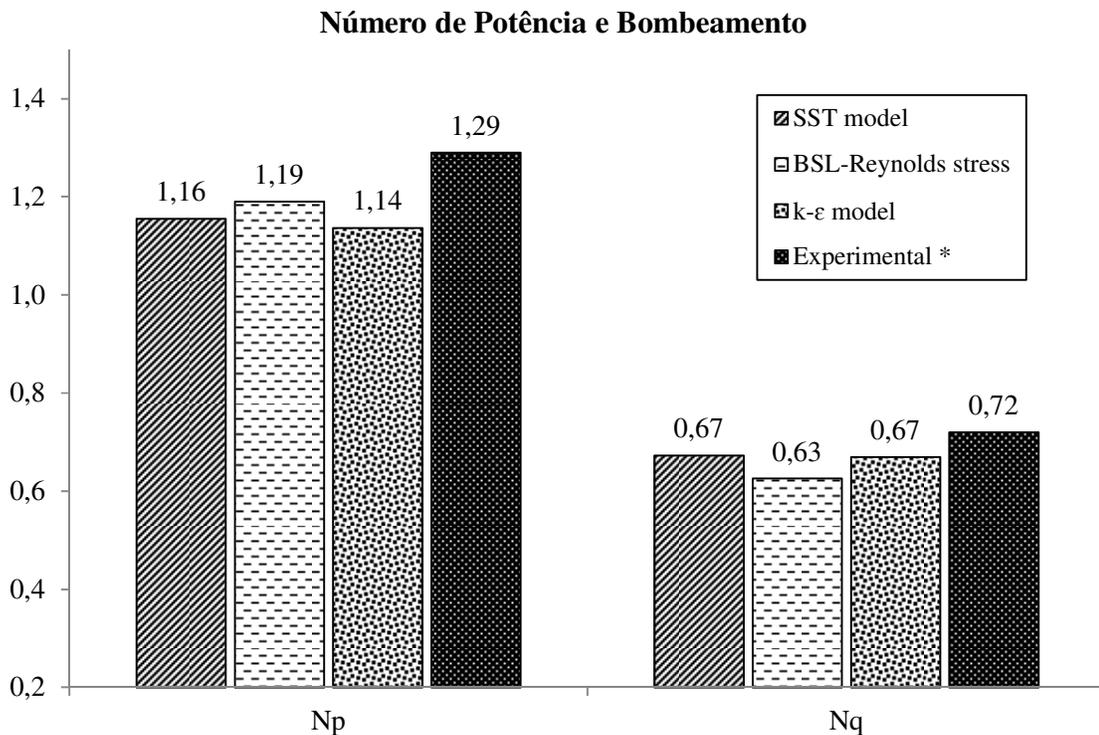


Figura 9-19 Comparações do perfil de velocidade axial adimensional entre diferentes modelos de turbulência utilizados na modelagem CFD. \* Machado et al. (2011).

Por outro lado, para o cálculo das quantidades globais do processo de mistura pode-se concluir, conforme na Figura 9-19 que o modelo *BSL-Reynolds stress model* foi o mais adequado para o cálculo do Np. Não obstante forneceu uma estimativa bastante baixa para o cálculo do Nq, uma vez que a inclinação do fluxo de descarga do impelidor foi influenciada consideravelmente pelo modelo turbulento como foi citado anteriormente. De outro modo, os modelos *k-ε* e *SST* obtiveram resultados similares para o cálculo do Nq, porém ainda mantiveram uma baixa estimativa do número de potência nos resultados, principalmente o modelo *k-ε*.

## 9.5 Cálculo do Erro e Desvio padrão

Para avaliar a concordância dos resultados de CFD em relação aos valores experimentais, foi quantificada a porcentagem de erro (Eq. 9.4) e o desvio padrão (Eq. 9.4), conforme as seguintes expressões:

$$\% \text{ Erro} = \frac{\text{valor experimental} - \text{valor CFD}}{\text{valor experimental}} * 100 \quad (9.4)$$

$$\text{Desvio padrão} = \sqrt{\frac{\sum (\text{valor experimental} - \text{valor CFD})^2}{\eta}} \quad (9.5)$$

Em que,  $\eta$  se define como o número de pontos da amostra.

A porcentagem de erro foi utilizada para quantificar a exatidão das predições feitas em CFD do número de potência ( $N_p$ ) e número de bombeamento ( $N_q$ ) conforme as diferentes simulações realizadas. Assim, os resultados foram comparados com valores experimentais obtidos por diversos autores (Chapple *et al.*, 2001; Hemrajani *et al.*, 2004; Machado *et al.*, 2011; Wu *et al.*, 2001), como é mostrado a seguir.

Tabela 9-2 Cálculo da porcentagem de erro do número de potência estimado em CFD

% Erro	Número de Potência ( $N_p$ )		
	Chapple <i>et al.</i> (2001)	Hemrajani <i>et al.</i> (2004)	Machado <i>et al.</i> (2011)
<b>Esquema de discretização</b>			
Upwind	4.5%	3.6%	2.0%
Blend Factor (0,75)	8.3%	9.0%	10.4%
High Resolution	6.2%	6.9%	8.3%
<b>Modelo de turbulência</b>			
SST	8.3%	9.0%	10.4%
BSL-Reynolds stress	5.5%	6.3%	7.7%
k- $\epsilon$	9.8%	10.5%	11.9%

Tabela 9-3 Cálculo da porcentagem de erro do número de bombeamento estimado em CFD

% Erro	Número de Bombeamento (Nq)		
	Wu <i>et al.</i> (2001)	Hemrajani <i>et al.</i> (2004)	Machado <i>et al.</i> (2011)
<b>Esquema de discretização</b>			
Upwind	19.1%	22.1%	14.6%
Blend Factor (0,75)	11.5%	14.9%	6.6%
High Resolution	14.8%	18.1%	10.1%
<b>Modelo de turbulência</b>			
SST	11.5%	14.9%	6.6%
BSL-Reynolds stress	17.7%	20.8%	13.1%
k-ε	11.9%	15.3%	7.0%

Conforme com os resultados do cálculo do erro apresentados na Tabela 9-2 e 9-3, conclui-se que o esquema de discretização *Blend factor* (0,75), de maneira geral, fornece uma boa predição tanto de  $N_p$  quanto de  $N_q$ . Embora este esquema apresente os maiores erros na estimativa de  $N_p$ , ele ainda encontra-se dentro da faixa da maioria dos trabalhos publicados na literatura (Joshi *et al.*, 2011). Cabe salientar que de todos os esquemas de discretização utilizados, o esquema *Upwind* apresentou o menor valor de erro na estimativa do número de potência ( $N_p$ ); entretanto, o esquema *High Resolution* por causa de suas instabilidades numéricas, mostrou os maiores erros na estimativa do número de bombeamento ( $N_q$ ) em relação com os demais esquemas.

De outra forma, conforme com os modelos de turbulência analisados o modelo k-ε reportou erros relativamente similares com o modelo SST tanto na estimativa de  $N_p$  quanto no cálculo de  $N_q$ . Entretanto o modelo *BSL-Reynolds stress* forneceu uma melhor predição do número de potência ( $N_p$ ), porém, foi o modelo que obteve o maior erro na estimativa do número de bombeamento ( $N_q$ ).

Entretanto, o desvio padrão foi utilizado para quantificar a dispersão dos resultados estimados em CFD. Por isso, foi necessária uma amostragem do perfil de velocidade no mesmo local em que foram mensurados os dados experimentais. A partir dos valores de velocidade foi calculado o desvio dos resultados para cada ponto da amostragem realizada em cada simulação.

Uma vez obtidos esses valores, o desvio dos resultados foi calculado a partir da raiz quadrática média conforme a Eq. (9.5) para determinar seu desvio padrão. Cabe lembrar que essa coleta de dados foi realizada a partir da medição da velocidade axial em um plano logo abaixo do impelidor conforme foi explicado na seção 9.1.2. Nas Figuras 9-20 e 9-21 são mostrados os desvios do perfil de velocidade axial adimensional estimado a partir de CFD conforme com os valores encontrados de forma experimental através do PIV por Machado *et al.*, (2011).

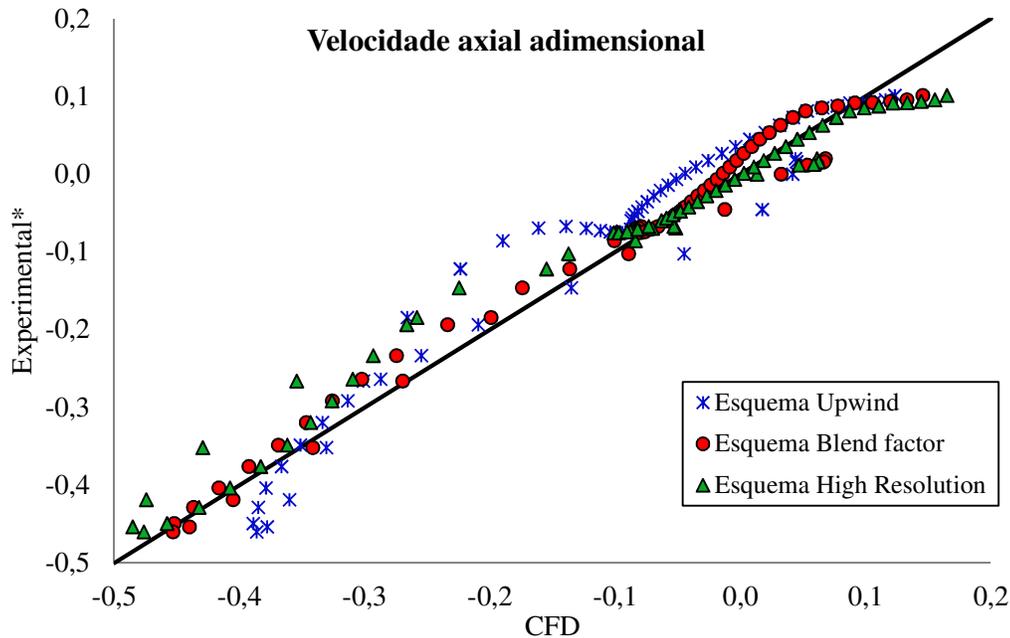


Figura 9-20 Dispersão dos resultados no cálculo do perfil de velocidade entre diferentes esquemas de discretização utilizados na modelagem CFD. \* Machado *et al.* (2011).

De forma geral, observa-se na Figura 9-20 que o esquema *Blend factor* (0,75) apresentou a menor dispersão dos resultados, porém, na região de velocidades compreendidas entre -0,05 e 0,1 o esquema *High Resolution* mostrou uma maior exatidão na predição do perfil de velocidade. Entretanto, o esquema *Upwind* apresentou a maior dispersão dos resultados na grade maioria do perfil de velocidade. Por outro lado, conforme com a Tabela 9-4 o esquema *Blend factor* (0,75) reportou o menor desvio padrão indicado uma melhor predição do perfil de velocidade em relação com os demais esquemas testados.

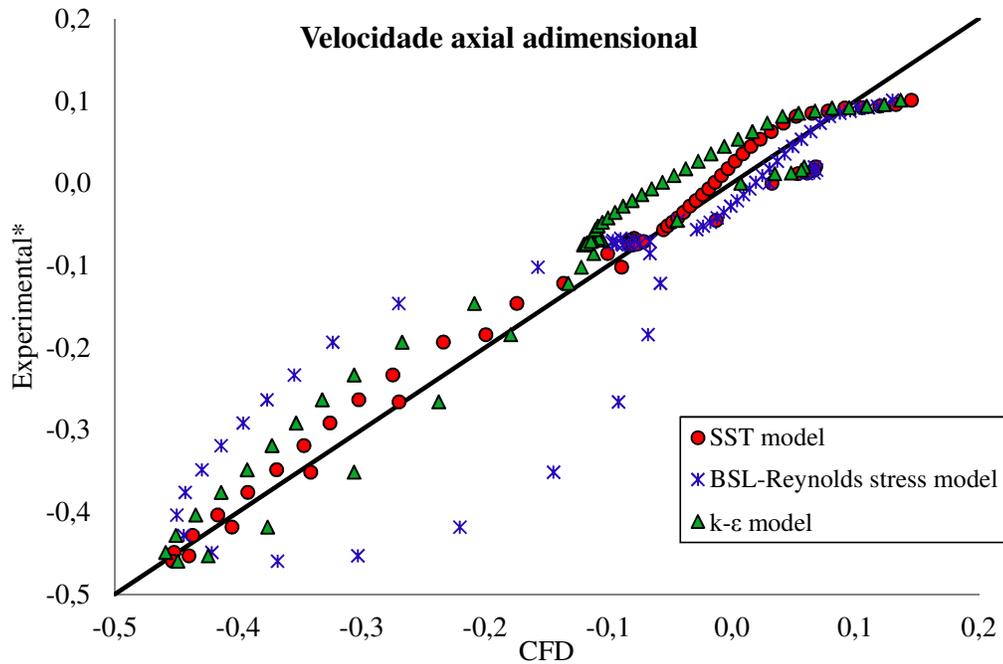


Figura 9-21 Dispersão dos resultados no cálculo do perfil de velocidade entre diferentes modelos de turbulência utilizados na modelagem CFD. \* Machado et al. (2011).

Embora, o modelo *BSL-Reynolds stress* considera, dentro da sua abordagem, uma turbulência anisotrópica, note-se na Figura 9-21 um maior desvios dos resultados para velocidades inferiores a -0.1 com relação aos demais modelos. Entretanto, o modelo *k-ε* apresenta uma dispersão dos resultados similar ao modelo SST para velocidades inferiores de -0.1 e acima de 0.05, no entanto, para valores de velocidade entre -0.1 e 0.05 mostraram diferenças significativas. Assim mesmo, conforme com a Tabela 9-4 o modelo SST reportou o menor desvio padrão indicado a melhor predição do perfil de velocidade entre todos os modelos testados.

Tabela 9-4 Desvio padrão do perfil de velocidade para diversas configurações realizadas na modelagem CFD.

<b>Esquema de Discretização</b>	Upwind	4.30E-02
	Blend Factor (0,75)	2.30E-02
	High Resolution	3.30E-02
<b>Modelo de Turbulência</b>	SST	2.30E-02
	BSL-Reynolds stress	6.80E-02
	k-ε	4.40E-02

## 10 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

---

Um estudo de sensibilidade para observar a influência dos modelos e esquema numéricos na modelagem CFD em tanques agitados utilizando malhas tridimensionais (3-D) não estruturadas (tetraédricas) foi realizado. Uma representação da fluidodinâmica dependente do tempo (simulação transiente) foi necessária, em vista que os fenômenos que ocorrem no interior do tanque agitado são de natureza randômica e tridimensional.

Quanto aos resultados, foi observado que sua precisão depende da resolução da malha, portanto não se devem usar malhas grossas se são desejados resultados precisos. Além disso, note-se que a camada de prismas nas paredes mostra um importante efeito na acurácia dos resultados, principalmente na estimação do número de potencia, já que eles possuem uma resolução da camada de cisalhamento superior aos elementos tetraédricos.

De acordo com os resultados se encontrou que a configuração do modelo de turbulência SST junto ao esquema *blend factor* (0,75), de forma geral, forneceu os melhores resultados. Este arranjo apresentou o menor desvio padrão, indicando melhor predição do perfil de velocidade. Entretanto, essa configuração teve o menor erro na estimativa do número de bombeamento ( $N_q$ ) entre os demais arranjos propostos., enquanto que o número de potência foi estimado com uma aproximação razoável de acordo com outros trabalhos reportados na literatura.

Embora a modelagem da anisotropia da turbulência implementada no modelo de BSL-*Reynolds Stress*, teoricamente, seja mais adequada na predição de fluxos complexos, tal como acontece nos processos mistura em tanques. Foi observado que esse modelo não foi superior na estimativa do número de bombeamento ( $N_q$ ) nem também na predição do perfil de velocidade de acordo com os demais modelos ( $k-\epsilon$ , SST) utilizados neste trabalho.

Em geral, as predições do perfil de velocidade são influenciadas, de alguma forma, pelo modelo de turbulência, esquema de discretização e resolução da malha utilizada; contudo, foi possível obter uma boa predição do perfil de velocidade. Entretanto, de acordo com resultados a estimativa do número de potência ( $N_p$ ) apresentou uma faixa de erro entre 2% a 12%, enquanto

que o número de bombeamento ( $N_q$ ) mostrou um erro de 6% a 21% para todos os casos simulados. Uma influência significativa, principalmente, ligados ao esquema de discretização utilizado na modelagem CFD no cálculo de parâmetros tais como  $N_p$  e  $N_q$  foram observados. Finalmente, foi demonstrado que se podem utilizar malhas não estruturadas na simulação em CFD para tanque de mistura. No entanto, é necessário tomar alguns cuidados de forma que se possam obter resultados confiáveis.

Por outro lado, embora exista uma extensa literatura focada na modelagem CFD dos fluxos gerados por diversos impelidores, a grande maioria desses trabalhos foram limitados a utilizar a água como fluido de trabalho. Seria importante abrir novas linhas de pesquisa orientadas a fornecer um melhor conhecimento dos processos de mistura para fluidos não newtonianos e escoamentos multifásicos.

Entretanto, note-se o esforço de diversos autores no sentido de desenvolver correlações entre o conhecimento do padrão do escoamento e o processo de mistura. Porém, ainda não se realizaram esforços suficientes para ligar os conhecimentos da fluidodinâmica em processos que envolvam transferência de calor e de massa, o que seria de muito interesse no projeto de equipamentos para diversos processos.

Têm-se investigado a influência de diferentes modelos de turbulência disponíveis em software CFD comerciais, no entanto, a maioria desses modelos foi utilizada empregando parâmetros determinados para um caso padrão. Por conseguinte, há a possibilidade de que aqueles modelos melhorem sua concordância com os resultados conforme sejam feitos ajustes embasado em características particulares do problema a ser simulado.

Com o avanço do poder computacional, é possível realizar simulações com malhas cada vez mais refinadas e modelos mais sofisticados (por exemplo, modelo de turbulência LES), além da redução das restrições na descrição física do problema (por exemplo, simulações monofásicas, uso da simetria, análise bidimensional, regime estacionário etc.); estas restrições podem conduzir a erros nos resultados, já que limitam a natureza randômica do escoamento em tanques de mistura.

## 11 APÊNDICE

---

### 11.1 Modelo de turbulência k-épsilon (k- $\epsilon$ )

As equações de transporte a serem determinadas para  $k$  e  $\epsilon$  são:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \epsilon \quad (9.6)$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \epsilon) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + \frac{\epsilon}{k} C_{\epsilon 1} P_k - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} \quad (9.7)$$

Onde,

$k$  : energia cinética turbulenta

$\epsilon$ : taxa de dissipação turbulenta

$P_k$  : Produção turbulenta devido às forças viscosas

$\mu_t$  : viscosidade turbulenta

As quantidades  $C_{\epsilon 1}, C_{\epsilon 2}, \sigma_\epsilon, \sigma_k$  são constantes empíricas

## 11.2 Modelo de turbulência Shear Stress Transport (SST)

Modelo de Wilcox

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \nu k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k1}} \right) \nabla k \right] + P_k - \beta' \rho k \omega \quad (9.8)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \nu \omega) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 1}} \right) \nabla \omega \right] + \alpha_1 \frac{\omega}{k} P_k - \beta_1 \rho \omega^2 \quad (9.9)$$

Modelo de  $k - \varepsilon$  transformado

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \nu k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k2}} \right) \nabla k \right] + P_k - \beta' \rho k \omega \quad (9.10)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \nu \omega) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 2}} \right) \nabla \omega \right] + 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla k \nabla \omega + \alpha_2 \frac{\omega}{k} P_k - \beta_2 \rho \omega^2 \quad (9.11)$$

Logo após que as equações do modelo de Wilcox e do modelo  $k - \varepsilon$  transformado na formulação- $\omega$  são multiplicadas por as funções de combinação  $F_1$  e  $(1 - F_1)$ , o equacionamento torna-se:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \nu k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k3}} \right) \nabla k \right] + P_k - \beta' \rho k \omega + P_{kb} \quad (9.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \nu \omega) = & \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 3}} \right) \nabla \omega \right] + (1 - F_1) 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla k \nabla \omega \\ & + \alpha_3 \frac{\omega}{k} P_k - \beta_3 \rho \omega^2 + P_{\omega b} \end{aligned} \quad (9.13)$$

Onde,

$k$  : energia cinética turbulenta

$\omega$ : frequência turbulenta

$P_k$  : Produção turbulenta devido às forças viscosas

$P_{kb}, P_{\omega b}$  : Produção de turbulência flutuante

$\mu_t$  : viscosidade turbulenta

Em que, as constantes são definidas a seguir:

$$\beta' = 0.09;$$

$$\alpha_1 = \frac{5}{9};$$

$$\beta_1 = 0.075;$$

$$\sigma_{k1} = 2;$$

$$\sigma_{\omega1} = 2;$$

$$\alpha_2 = 0.44;$$

$$\beta_2 = 0.0828;$$

$$\sigma_{k2} = 1;$$

$$\sigma_{\omega2} = \frac{1}{0.856}$$

Em que os novos coeficientes do modelo são uma combinação linear das constantes correspondentes tanto do modelo baseado na equação -  $\omega$  quanto do modelo baseado na equação -  $\epsilon$ , mas transformado em uma formulação-  $\omega$ , segundo a seguinte expressão:

$$\Psi_3 = F_1\Psi_1 + (1-F_1)\Psi_2 \quad (9.14)$$

Visto que a função  $F_1$  restringe o limite da camada limite na parede, esta função de combinação tem como característica a delimitação das regiões onde cada modelo interage. Estas são baseadas de acordo com a distância do primeiro nó e nas variáveis do escoamento definida como segue:

$$F_1 = \tanh(\arg_1^4) \quad (9.15)$$

$$\arg_1 = \min \left( \max \left( \frac{\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho k}{CD_{k\omega} \sigma_{\omega 2} y^2} \right) \quad (9.16)$$

$$CD_{k\omega} = \max \left( 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla k \nabla \omega, 1 \times 10^{-10} \right) \quad (9.17)$$

A fim de evitar falhas no modelo, devido às sobre predições da viscosidade turbulenta, principalmente para escoamento em superfícies lisas ou cisalhamento livre, o comportamento adequado para o escoamento pode ser obtido limitando a formulação da viscosidade turbulenta como se mostra embaixo:

$$\nu_t = \frac{\alpha_1 k}{\max(\alpha_1 \omega, SF_2)} \quad (9.18)$$

Onde,  $\nu_t = \frac{\mu_t}{\rho}$ . Entretanto o termo S é uma medida invariante da taxa de deformação e o termo  $F_2$  é uma função de combinação similar a  $F_1$  e definida a seguir:

$$F_2 = \tanh(\arg_2^2) \quad (9.19)$$

$$\arg_2 = \max \left( \frac{2\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right) \quad (9.20)$$

Onde,  $y$  é a distância mais próxima à parede e  $\nu$  é a viscosidade cinemática.

### 11.3 Modelo de turbulência Baseline-Reynolds Stress (BSL-RSM)

Dada uma direção  $k$  o modelo pode ser descrito pela seguinte equação -  $\omega$

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (U_k \rho \omega) = \alpha_3 \rho \frac{\omega}{k} P_k + P_{\omega\omega} - \beta_3 \rho \omega^2 + \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 3}} \right) \nabla \omega \right] + (1 - F_1) * 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla \varepsilon \nabla \omega \quad (9.21)$$

Assim, os coeficientes  $\alpha; \beta$ , e o numero de Prandtl turbulento do modelo são uma combinação linear das constantes correspondentes tanto do modelo baseado na equação -  $\omega$  quanto do modelo baseado na equação -  $\varepsilon$ , mas transformado em uma formulação- $\omega$ , segundo a seguinte expressão:

$$\varphi_3 = F \varphi_1 + (1 - F) \varphi_2 \quad (9.22)$$

Por outro lado, a função de combinação  $F$  pode ser definida pelas seguintes expressões:

$$F = \tanh(\arg^4) \quad (9.23)$$

$$\arg_1 = \min \left( \max \left( \frac{\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho k}{CD_{k\omega} \sigma_{\omega 2} y^2} \right) \quad (9.24)$$

$$CD_{k\omega} = \max \left( 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla k \nabla \omega, 1 \times 10^{-10} \right) \quad (9.25)$$

Em que, as constantes são definidas a seguir:

$$\beta' = 0.09; \beta_1 = 0.075; \sigma_{k1} = 2; \sigma_{\omega 1} = 2; \beta_2 = 0.0828; \sigma_{k2} = 1; \sigma_{\omega 2} = \frac{1}{0.856}.$$

$$\alpha_1 = \frac{\beta}{\beta'} - \frac{\kappa^2}{\sigma(\beta')^{0.5}} = 0.553$$

$$\alpha_2 = \frac{\beta}{\beta'} - \frac{\kappa^2}{\sigma(\beta')^{0.5}} = 0.44$$



## 12 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

---

1. ANDERSON, D. A., TANNEHILL, J. C. E., PLETCHER, R. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, Hemisphere Publishing Corporation, 1984.
2. ANKAMMA R. D. & SIVASHANMUGAM, P. Experimental and CFD simulation studies on power consumption in mixing using energy saving turbine agitator. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 16, 157-161, 2010.
3. ANSYS, Inc. *Solver Theory Guide*. ANSYS CFX 14.0, 2011.
4. ANSYS, Inc. *Solver Modeling Guide*. ANSYS CFX 14.0, 2011.
5. ANSYS, Inc. *User Manual*. ANSYS CFX 11.0, 2007.
6. ARMENANTE, P. M., LUO, C., CHOU, C. C., FORT, I., MEDEK, J. Velocity profiles in a closed, unbaffled vessel: comparison between experimental LDV data and numerical CFD predictions. *Chemical Engineering Science*, 52, 3483-3492, 1997.
7. AUBIN, J., FLETCHER, D. F., XUEREBO, C. Modeling turbulent flow in stirred tanks with CFD: the influence of the modeling approach, turbulence model and numerical scheme. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 28, 431-445, 2004.
8. AUBIN, J., MAVROS, P., FLETCHER, D. F., BERTRAND, J., XUEREBO, C. 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, 2001.
9. BARTH, T. J. & JESPERSON, D. C. The Design and Application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes. *AIAA Journal*, 89, 366, 1989.

10. BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N. *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, Inc., 1960.
11. BOUSSINESQ, J. Théorie de l'Écoulement Tourbillant. *Mem. Présentés par Divers Savants Acad. Sci. Inst. Fr.*, v. 23, pp. 46-50, 1877.
12. BRODKEY, R. S. *The Phenomena of Fluid Motions*, Addison - Wesley Pub. Co., 1967.
13. BRUCATO, A., CIOFALO, M., GRISAFI, F., MICALÉ, G. Numerical prediction of flow fields in baffled stirred vessels: A comparison of alternative modelling approaches. *Chemical Engineering Science*, 53, 3653-3684, 1998.
14. BUJALSKI, J. M., JAWORSKI, Z., BUJALSKI, W., NIENOW, A. W. The Influence of the Addition Position of a Tracer on CFD Simulate Mixing Times in a Vessel Agitated by a Rushton Turbine. *Chemical Engineering Research and Design*, 80, 824-831, 2002.
15. CABRALES, F. A. N., SPOGIS, N., NUNHEZ, J. R., MARTIGNONI, W. P., CASTRO, H. C. A., ITO, A. S. Computational fluid dynamic study of mixing in large scale diesel storage vessels. AIChE Spring Meeting & 7th Global Congress on Process Safety, Chicago, v. a. p. 211173-1-211173-9, 2011.
16. CORONEO, M., MONTANTE, G., PAGLIANTI, A., MAGELLI, F. CFD prediction of fluid flow and mixing in stirred tanks: Numerical issues about the RANS simulations. *Computers & Chemical Engineering*, 35, 1959-1968, 2011.
17. CHAPPLE, D., KRESTA, S. M., WALL, A., AFACAN, A. The Effect of Impeller and Tank Geometry on Power Number for a Pitched Blade Turbine. *Chemical Engineering Research and Design*, 80, 364-372, 2002.
18. CHARLES HIRSCH. *Numerical Computation of Internal and External Flows*, John Wiley & Sons, Inc., 2007.

19. DEGLON, D. A. & MEYER, C. J. CFD modelling of stirred tanks: Numerical considerations. *Minerals Engineering*, 19, 1059-1068, 2006.
20. ESCUDIÉ, R., LINÉ, A., ROUSTAN, M. Turbulent Macroscale in the Impeller Stream of a Rushton Turbine. *Proceedings 10<sup>th</sup> Europ. Conf. Mixing*, (eds.) Van den Akker, H.E.A. & Derksen, J.J., Elsevier, Amsterdam, pp. 353-360, 2000.
21. GRANT, I. & PAN, X. The Use of Neural Techniques in PIV and PTV, *Measurement Science & Technology*, 8, 1399-1405, 1997.
22. GROTHJANS, H. A. M., & F.R. Wall functions for general application CFD codes. *Fourth European Computational Fluid Dynamics Conference (ECCOMAS)*, (ed.) K. D. P. E., John Wiley & Sons, 1112-1117, 1998.
23. HANJALIC, K. Advance Turbulence Closure Models: A View of Current Status and Future Prospects. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 15 (3), 178-203, 1994.
24. HARVEY, P. S., GREAVES, M. Turbulent flow in an agitated vessel. Part I-predictive model. *Trans IchemE*, 60, 195-200, 1982.
25. HASSAN, Y. A. Multiphase Flow Measurements Using Particulate Image Velocimetry. *The Handbook of Fluid Dynamics*, (ed.) Johnson, R. W., Press- Springer, Boca Raton FL, pp 36.1-36.15, 1998.
26. HEMRAJANI, R. R. & TATTERSON, G. B. Mechanically Stirred Vessel. *Handbook of Industrial Mixing: Science and Practices*, (eds.) Paul, E. L., Atiemo-Obeng V. A., Kresta S. M., Jhon Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, pp 345-390, 2004.
27. HINSCH, K. D. & HINRICHS, H. The Three-Dimensional Particle Velocimetry, *Three-Dimensional Velocity and Vorticity Measuring and Image Analysis Techniques*, (ed.) Dracos, T., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, pp 129-152, 1996.

28. JEAN-PHILIPPE TORRÉA, D. F. F., LASUYEC, T., XUEREBA, C. Single and multiphase CFD approaches for modelling partially baffled stirred vessels: Comparison of experimental data with numerical predictions. *Chemical Engineering Science*, 62, 6246 – 6262, 2007.
29. JOAQUIM JUNIOR C. F., CEKINSKI. E., NUNHEZ J. R., URENHA L. C. *Agitação e Mistura na Indústria.*, Rio de Janeiro, LTC, 2007.
30. JOSHI, J. B., NERE, N. K., RANE, C. V., MURTHY, B. N., MATHPATI, C. S., PATWARDHAN, A. W., RANADE, V. V. CFD simulation of stirred tanks: Comparison of turbulence models. Part I: Radial flow impellers. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 89, 23–82, 2011.
31. KRESTA, S. M. & WOOD, P. E. Prediction of the Three-Dimensional Turbulent Flow in Stirred Tanks. *AICHE J.*, 37, 448-460, 1991.
32. LAI, W. T. Particle Image Velocimetry: A new Approach in Experimental Fluid Research. *Three-Dimensional Velocity and Vorticity Measuring and Image Analysis Techniques*, (ed.) Dracos, T., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, pp 61-92, 1996.
33. LANE, G. L., SCHWARZ, M. P., EVANS, G. M. Chapter 34 - Comparison of CFD Methods for Modelling of Stirred Tanks. *10th European Conference on Mixing*, (eds.) Akker, H. E. A. V. D. & Derksen, J. J., Elsevier Science, Amsterdam, 2000.
34. LAUNDER, B. E. Current Capabilities for Modelling Turbulence in Industrial Flows. *Appl. Sci. Res.*, 48 (3-4), 247-269, 1990.
35. LAUNDER, B. & SPALDING, D. The Numerical Computation of Turbulent Flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 3, 269–289, 1974.
36. LECHNER, R. & MENTER, F. Development of a rough wall boundary condition for w-based turbulence models. *Technical Report ANSYS*, 2004.

37. LUO, J. Y., ISSA, R. I., GOSMAN, A. D. Prediction of Impeller Induced Flows in Mixing Vessels Using Multiple Frames of Reference. *IChemE Symposium*, 136, 1994.
38. MACCORMACK, R. W. & PAULLAY, A. J. Computational Efficiency Achieved by Time Splitting of Finite-Difference Operators. *10<sup>th</sup> Aerospace Sciences Meeting, AIAA*, 19, 72-154, 1972.
39. MACHADO *ET AL.*, M. B., NUNHEZ, J. R., NOBES, D. & KRESTA, S. M. Impeller Characterization and Selection: Balancing Efficient Hydrodynamics with Process Mixing Requiriments. *AICHE-Journal*, DOI 10.1002/aic.12758, 2011.
40. McDONALD, P. W. The Computation of Transonic Flow through Two-Dimensional Gas Turbine Cascades. *ASME*, 71, 89, 1971.
41. MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, LTC, 2004.
42. MARSHALL, E., HAIDADARI A., SUBBIAH S. *Annual Meeting of Americam Institute of Chemical Engineering*, Chicago, November, 1996.
43. MAVROS, P. Flow Visualization in Stirred Vessels: A Review of Experimental Techniques. *Chemical Engineering Research and Design*, 79, 113-127, 2001.
44. McCABE, W. L., SMITH, J. C., HARRIOTT, P. *Unit Operations of Chemical*, ed. 4<sup>th</sup>, McGraw-Hill, 1985.
45. MENTER, F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA-Journal*, 32, 1598 - 1605, 1994.
46. MYERS, K. J., WARD, R. W., BAKKER, A. A digital Particle Image Velocimetry Investigation of Flow Field Instabilities of Axial-Flow Impellers. *Journal Fluids Eng.*, 119 (3), 623-632, 1997.

47. MONTANTE, G., LEE, K. C., BRUCATO, A., YIANNESKIS, M. Numerical simulations of the dependency of flow pattern on impeller clearance in stirred vessels. *Chemical Engineering Science*, 56, 3751-3770, 2001.
48. MURTHY, B. N. & JOSHI, J. B. Assessment of standard , RSM and LES turbulence models in a baffled stirred vessel agitated by various impeller designs. *Chemical Engineering Science*, 63, 5468-5495, 2008.
49. NAGATA, S. *Mixing: Principles and Applications*, Wiley, New York, 1975.
50. NG, K., FENTIMAN, N. J., LEE, K. C., YIANNESKIS, M. Assessment of Sliding Mesh CFD Predictions and LDA Measurements of the Flow in a Tank Stirred by a Rushton Impeller. *Chemical Engineering Research and Design*, 76, 737-747. 1998.
51. NG, K. & YIANNESKIS, M. Observations on the Distribution of Energy Dissipation in Stirred Vessels. *Chemical Engineering Research and Design*, 78, 334-341, 2000.
52. OLDSHUE, J. Y. *Fluid Mixing Technology*, McGraw-Hill, New York, 1983.
53. OLINO, A. L. M. *Otimização do impelidor KPC utilizando fluidodinâmica computacional (CFD)*. Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2010. Tese (mestrado).
54. PAKZAD, L., EIN-MOZAFFARI, F., CHAN, P. Using computational fluid dynamics modeling to study the mixing of pseudoplastic fluids with a Scaba 6SRGT impeller. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 47, 2218-2227, 2008.
55. PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corp., 1980.
56. PATÉL, R. A. S. Turbulence Models for Near-Wall and Low Reynolds Number Flows. *AIAA-Journal*, 23, 1308, 1985.

57. PERNG, C. Y. & MURTHY, J. Y. A moving-deforming mesh technique for simulation of flow in mixing tanks. *Process Mixing: Chemical and Biochemical Applications*, pp. 37-41, 1993.
58. PERRAD, M., LeSAUZE, N., XUEREBO, C., BERTRAND, J. Characterization of the Turbulence in a Stirred Tank using Particle Image Velocimetry. *Proceedings 10<sup>th</sup> Europ. Conf. Mixing*, (eds.) Van den Akker, H.E.A. & Derksen, J.J., Elsevier, Amsterdam, pp. 345-352, 2000.
59. POST-MIXING OPTIMIZATION AND SOLUTIONS. *The consulting services in mixing*. Disponivel em: <http://www.postmixing.com>. Último acesso em 03/07/2012.
60. RANADE, V. V. & JOSHI, J. B. Flow Generated by a Disc Turbine; Part II Mathematical Modelling and Comparison with Experimental Data. *Chemical Engineering Research*, 68A, 34-43, 1990.
61. RANADE, V. V. An efficient computational model for simulating flow in stirred vessels: a case of Rushton turbine. *Chemical Engineering Science*, 52, 4473-4484, 1997.
62. REYNOLDS, W. C. Fundamentals of Turbulence for Turbulence Modelling and Simulation. *Lecture Notes for Von Karman Institute, AGARD CP-93*, 1987.
63. RUSHTON, J. H., C. E. W., EVERETT, H. J. Power Characteristics of Mixing Impeller, Parte II. *Chem. Eng. Prog.*, 46, 467-476, 1950.
64. RUTHERFORD, M. & YIANNESKIS, L. The Influence of Rushton Impeller blade and Disk Thickness on the Mixing Characteristics of Stirred Vessels. *Trans. I.Chem.E.*, 74, 370, 1996.
65. SAHU, A. K., KUMAR, P., PATWARDHAN, A. W., JOSHI, J. B. CFD modelling and mixing in stirred tanks. *Chemical Engineering Science*, 54, 2285-2293, 1999.
66. SHERWIN, J. P. A. S. Finite Difference, Finite Element and Finite Volume Methods: Partial Differential Equations. *Department of Aeronautics*, (ed.) I. C., London, UK, 2005.

67. SILVA, J. L. *Análise crítica das correlações e parâmetros fundamentais em sistemas de agitação*. Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2002. Tese (Mestrado).
68. SMITH, J. M. *Agitation Devices*. *THERMOPEDIA™*, 2011. Disponível em: <http://www.thermopedia.com>. Último acesso em 03/08/2012.
69. SPOGIS, N. *Metodologia para determinação de curvas de potência e fluxos característicos para impelidores axiais, radiais e tangenciais utilizando a fluidodinâmica computacional*. Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2002. Tese (Mestrado).
70. SPOGIS, N. *Desenvolvimento de um impelidor de alta eficiência através da dinâmica dos fluídos computacional e otimização multi-objetivo*. Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2007. Tese (Doutorado).
71. SPOGIS, N. & NUNHEZ, J.R. *Design of a high-efficiency hydrofoil through the use of computational fluid dynamics and multiobjective optimization*. *AIChE Journal*, 55: 1723-1735, 2009.
72. TATTERSON, G. B. *Fluid Mixing and Gas Dispersion in Agitated Tanks*, McGraw-Hill, 1991.
73. TORRÉ, J. P., FLETCHER, D. F., LASUYE, T., XUEREBO, C. An experimental and computational study of the vortex shape in a partially baffled agitated vessel. *Chemical Engineering Science*, 62, 1915-1926, 2007a.
74. TORRÉ, J.-P., FLETCHER, D. F., LASUYE, T., XUEREBO, C. Single and multiphase CFD approaches for modelling partially baffled stirred vessels: Comparison of experimental data with numerical predictions. *Chemical Engineering Science*, 62, 6246-6262, 2007b.

75. TORRÉ, J.-P., FLETCHER, D. F., LASUYE, T., XUERE, C. An experimental and CFD study of liquid jet injection into a partially baffled mixing vessel: A contribution to process safety by improving the quenching of runaway reactions. *Chemical Engineering Science*, 63, 924-942, 2008.
76. UHL, V. W. & GRAY, J. B. *Mixing: Theory and Practice*, vol I, Academic, New York, 1966.
77. VAN DEN AKKER, H. E. A. The details of turbulent mixing process and their simulations. *Advances in Chemical Engineering*, 31, 151-229, 2006.
78. VAKILI, M. H. & ESFAHANY, M. N. CFD analysis of turbulence in a baffled stirred tank, a three-compartment model. *Chemical Engineering Science*, 64, 351-362, 2009.
79. VERSTEEG, H. K., & MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*, Longman Scientific & Technical, UK, 1995.
80. WESTERWEEL, J. Fundamentals of Digital Particle Image Velocimetry. *Measurement Science & Technology*, 8, 1379-1392, 1997.
81. WU, J., ZHU Y., PULLUM L. Impeller geometry effect on velocity and solids suspension. *Chem. Eng. Res.*79(8): 989-997, 2001.
82. WILCOX, D. C. Multiscale model for turbulent flows. *24th Aerospace Sciences Meeting*, AIAA, 1986.
83. YEOH, S. L., PAPADAKIS, G., YIANNESKIS, M. 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, 2004.
84. ZHANG, J., THAO, B., KATZ, J. Turbulent Flow Measurement in a Square Duct with Hybrid Holographic PIV. *Exp. in Fluids*, 23, 337-381, 1997.