



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO EM ENGENHARIA  
QUÍMICA



# **Comparação da dispersão de partículas em tanques agitados com diferentes impelidores e velocidades de rotação utilizando CFD**

*Autor: Bernardo Manica Lima*

*Orientador: Prof. Dr. Marcelo Farenzena*

Porto Alegre, dezembro de 2022



Autor: Bernardo Manica Lima

# Comparação da dispersão de partículas em tanques agitados com diferentes impelidores e velocidades de rotação utilizando CFD

*Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à COMGRAD/ENQ da Universidade Federal do Rio Grande do Sul como parte dos requisitos para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química*

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Farenzena

Banca Examinadora:

M.Sc., Douglas Takeshi Kuamoto, UFRGS

Doutor, Pedro Juarez Melo, UFRGS

Porto Alegre

2022

## RESUMO

Para buscar o melhor desempenho de misturadores é de grande importância o entendimento da influência de parâmetros físicos, como velocidade de rotação e geometria do impelidor, no comportamento do escoamento dos fluídos. Neste trabalho foi comparado o perfil de escoamento entre tanques agitados utilizando impelidores quatro pás inclinadas e impelidor âncora, em duas velocidades de rotação: 150 rpm e 180 rpm. Os sistemas comparados são usados para síntese de catalisadores, com a principal variável estudada sendo a homogeneidade da mistura. O trabalho foi realizado em escala laboratorial, utilizando modelos de reatores de 100 ml e sem chicanas. As simulações apresentaram desempenho aceitável para o uso em escala laboratorial. Os sistemas que apresentaram misturas mais homogêneas neste estudo foram os com velocidade de rotação de 150 rpm.

**Palavras-chave:** *dinâmica de fluídos computacional (CFD), tanque agitado, impelidores, velocidade de rotação*

## ABSTRACT

To seek the best performance of mixers, it is of great importance to understand the influence of physical parameters, such as rotation speed and impeller geometry, on fluid flow behavior. In this work, the flow profile between stirred-tanks using four inclined blades impeller and anchor impeller was compared, at two rotation speed: 150 rpm and 180 rpm. The compared systems are used for catalyst synthesis, with the main variable studied being the homogeneity of the mixture. The work was carried out on a laboratory scale, using models of 100 ml reactors and without chicanes. The simulations showed acceptable performance for use on a laboratory scale. The systems that presented the most homogeneous mixtures in this study were those with a rotation speed of 150 rpm.

**Keywords:** *computational fluid dynamics (CFD), stirred-tank, impellers, rotation speed*

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Espectro de energia de turbulência.....	5
Figura 2: Impelidor 4 pás inclinadas a 45°.....	10
Figura 3: Impelidor âncora.....	11
Figura 4: Sistema completo do reator.....	11
Figura 5: Malha 4 pás – Visão Superior.....	14
Figura 6: Malha 4 pás - Visão Frontal.....	14
Figura 7: Malha Âncora - Visão Frontal.....	15
Figura 8: Malha Âncora - Visão Superior.....	15
Figura 9: Campo de velocidades em vista frontal para sistema 4 pás com rotação de 180 rpm.....	17
Figura 10: Campo de velocidades em vista frontal para sistema 4 pás com rotação de 150 rpm.....	18
Figura 11: Campo de velocidades em vista superior para sistema 4 pás com rotação de 180 rpm.....	18
Figura 12: Campo de velocidades em vista superior para sistema 4 pás com rotação de 150 rpm.....	19
Figura 13: Campo de velocidades em vista frontal para sistema âncora com rotação de 180 rpm.....	19
Figura 14: Campo de velocidades em vista frontal para sistema âncora com rotação de 150 rpm.....	20
Figura 15: Campo de velocidades em vista superior para sistema âncora com rotação de 180 rpm.....	20
Figura 16: Campo de velocidades em vista superior para sistema âncora com rotação de 150 rpm.....	20
Figura 17: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista frontal para sistema 4 pás com rotação de 180 rpm.....	21
Figura 18: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista frontal para sistema 4 pás com rotação de 150 rpm.....	22
Figura 19: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista superior para sistema 4 pás com rotação de 180 rpm.....	23
Figura 20: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista superior para sistema 4 pás com rotação de 150 rpm.....	23
Figura 21: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista frontal para sistema âncora com rotação de 180 rpm.....	24

---

Figura 22: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista frontal para sistema âncora com rotação de 150 rpm. ....	24
Figura 23: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista superior para sistema âncora com rotação de 180 rpm. ....	25
Figura 24: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista superior para sistema âncora com rotação de 150 rpm. ....	25
Figura 25: Campo de velocidades válido para ambos os sistemas. ....	26
Figura 26: Vórtice formado abaixo do centro do impelidor.....	27

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CFD – Dinâmica de Fluidos Computacional

MDF – Método de Diferenças Finitas

MVF – Método de Volumes Finitos

MEF – Método de Elementos Finitos

EVM – *Eddy Viscosity Model*

DSM – *Differential Second-Moment Model*

RANS – *Reynolds-Averaged Navier-Stokes*

VLES – *Very Large Eddy Simulation*

URANS – *Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes*

DES - *Detached Eddy Simulation*

LES - *Large Eddy Simulation*

DNS – *Direct Numerical Simulation*

LDV – *Laser Doppler Velocimetry*

RSTM – *Reynold-stress Transport Model*

SST – *Shear Stress Transport*

MOGA – *Multi-objective Generic Algorithm*

DO – *Direct Optimization*

RSO – *Response Surface Optimization*

FSI – *Fluid Structural/Solid Interaction*

MRF – *Moving Reference Frame*



---

## SUMÁRIO

1	Introdução	1
2	Revisão Bibliográfica	3
2.1	Métodos matemáticos e o CFD	3
2.2	Aplicações do CFD em equipamentos de mistura	5
3	Materiais e Métodos	10
4	Resultados e Discussão	17
5	Conclusões e Trabalhos Futuros	30
	REFERÊNCIAS	31



## 1 Introdução

Catalisadores são utilizados em diversas reações e processos químicos para aumento de velocidade da reação. Estão presentes em diferentes áreas da indústria como: petroquímica, alimentícia, polímeros, farmacêutica, entre outras tantas. Na maioria das vezes, a produção de catalisadores é realizada em tanques agitados. Estes tanques, que muitas vezes também são reatores, possuem impelidores que agitam a mistura presente para uma melhor homogeneização, cada processo tendo seu objetivo. Independente da qual a geometria e o tamanho de um tanque agitado, a modelagem matemática e predição do comportamento do fluido que será misturado é sempre um desafio para engenheiros.

Para auxiliar projetistas e engenheiros no trabalho com escoamento de fluidos, a tecnologia de fluido dinâmica computacional (CFD) vem sendo desenvolvida há algumas décadas. Ela está diretamente ligada à capacidade de processamento disponível nos computadores para uso, sendo ainda limitada por eles. O CFD usa modelos matemáticos para a construção de simulações do escoamento de fluidos, assim trazendo um maior entendimento das forças atuantes nos sistemas e do comportamento de diversos parâmetros do fluido, como velocidade, pressão e tensões turbulentas. Com estas informações os profissionais conseguem ser muito mais assertivos nos projetos e nas otimizações dos sistemas produtivos.

Este trabalho estudou o comportamento do escoamento de uma mistura em um tanque agitado no processo de síntese de catalisador em escala laboratorial. Este estudo visou explorar as características do escoamento nestes sistemas, verificando a velocidade de rotação e a geometria que apresentam a melhor homogeneização da mistura. As velocidades comparadas foram de 150 rpm e 180 rpm, em sistemas possuindo impelidores com quatro pás inclinadas a 45° ou impelidor âncora. Além de buscar a melhor configuração para o sistema, o trabalho objetivou a validação do uso de CFD pelo laboratório responsável pela síntese, buscando mostrar que é possível a utilização desta tecnologia para este tipo de experimento. Caso o resultado seja satisfatório, o laboratório poderá ter uma economia com a diminuição do número de testes práticos para definição das melhores condições de produção.

Para atingir estes objetivos, foi utilizado o programa ANSYS® Fluent em sua versão estudantil para realização das simulações de escoamento nos sistemas de tanques agitados. Foram utilizados alguns dados qualitativos disponibilizados pelo laboratório, obtidos em testes experimentais, para modelagem dos sistemas e validação dos resultados de forma qualitativa. Espera-se que com estes procedimentos seja possível obter respostas que demonstrem quais geometrias e velocidades de rotação apresentem os melhores resultados na homogeneidade das partículas sólidas para a escala laboratorial e que os fenômenos de turbulência causadores destes resultados possam ser estudados para futura otimização.

O presente trabalho será dividido em quatro capítulos, além desta introdução: revisão bibliográfica, que trará uma visão geral dos trabalhos desenvolvidos com CFD para escoamentos turbulentos, buscando apresentar o estado da arte; materiais e métodos, que apresentará os equipamentos e programas utilizados no trabalho além dos modelos e

métodos matemáticos; discussão e resultados, que mostrará os resultados da simulações e apresentará os conhecimentos desenvolvidos com eles; e por fim a conclusão, que fará a finalização do trabalho unindo as informações adquiridas e apresentando as conclusões e ideias para os próximos trabalhos.

## 2 Revisão Bibliográfica

### 2.1 Métodos matemáticos e o CFD

As simulações utilizando fluidodinâmica computacional vem sendo cada vez mais importantes no estudo de comportamentos de fluídos, sendo utilizada em um amplo campo de aplicações. A fluidodinâmica computacional é hoje o estado da arte nas avaliações de escoamento de fluídos. Há um grande potencial nesta tecnologia podendo ser utilizada em avaliações de equipamentos industriais, como turbinas e reatores, no estudo de escoamentos de tubulações, aerodinâmica de aeronaves e carros, hidrodinâmica de navios, planejamento de projetos industriais e em diversos campos de variadas engenharias. (Choi et al, 2013).

Como Maliska (1995) explica, o uso de técnicas computacionais para solução de problemas complexos de engenharia, como o escoamento de fluídos, ganhou força entre as décadas de 80 e 90 devido a evolução computacional. A indústria começou a produzir computadores pessoais com maior capacidade de memória, processamento e placas gráficas, o que possibilitou o crescimento de pesquisas e desenvolvimento de algoritmos capazes de resolver alguns destes problemas mais complexos.

Maliska (1995) traz uma introdução aos principais métodos numéricos computacionais utilizados para a resolução dos problemas de escoamento em seu livro “Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional”. Os métodos numéricos tradicionais são: Método de Diferenças Finitas (MDF), Método de Volumes Finitos (MVF) e Método de Elementos Finitos (MEF). O autor explica que o método de volumes finitos trabalha com a discretização em pequenos volumes de controle, onde são realizados os balanços de conservação das propriedades em cada um destes volumes, sendo assim conservativos. Já os métodos MEF e MDF trabalham apenas com os pontos da malha, não trabalhando com volumes de controle, sendo não conservativos em nível discreto. O método mais utilizado em pacotes comerciais é o MVF devido a suas características conservativas e robustez, principalmente trabalhando com escoamentos de fluidos, visto que é de grande importância a característica conservativa a nível discreto, para não haver a possibilidade de geração ou eliminação de quantidades de massa, energia ou movimento no interior do domínio do cálculo, esclarece o autor. Estes métodos são a base para a construção de simulações computacionais resolvendo os balanços de energia, massa e movimento, mas precisam de equações adicionais para a resolução de modelos complexos, como multifásicos e turbulentos.

Turbulência é o movimento mais complexo de ser matematicamente modelado e até mesmo seu conceito definido. Para Markatos (1986): “um movimento de fluído é descrito como turbulento se for tridimensional, rotacional, intermitente, altamente desordenado, difuso e dissipativo”. Devido a essa complexidade, a simulação deste escoamento em ferramentas computacionais é de extrema importância para a indústria, evitando gasto de tempo e dinheiro em tentativas de construção de protótipos para testes que evidenciem este escoamento e tragam melhorias no conhecimento do comportamento deste escoamento. (Argyropoulos e Markatos, 2015).

Sobre escoamentos turbulentos, Hanjalic (1994) apresentou uma revisão acerca dos modelos matemáticos disponíveis, na época, que descrevem esta natureza de escoamento. A

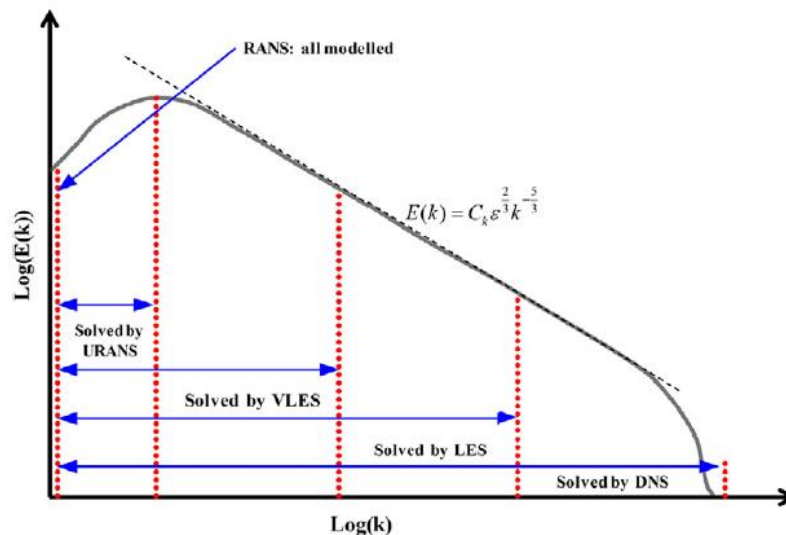
revisão foi focada em modelos de duas equações EVMs (*Eddy Viscosity Models*) e DSMs (*Differential Second-Moment Models*). Os modelos  $k-\varepsilon$  (sendo energia cinética turbulenta,  $k$ , e taxa de dissipação dessa energia,  $\varepsilon$ ) se enquadram como EVM's. O autor explica que os modelos DSMs apresentavam uma superioridade em representar as tensões turbulentas, principalmente próximo a paredes, já que a anisotropia tem forte influência neste tipo de modelo e os EVMs não representavam adequadamente esta condição. Mesmo com os avanços em modelos mais completos como o DSM, os modelos para descrição de turbulência mais utilizados em pesquisas e indústrias continuavam a ser os de duas equações devido ao menor custo computacional e a maior bibliografia disponível, o que trazia mais segurança no uso de modelos como o  $k-\varepsilon$ . O autor ressaltou as oportunidades de evolução para os modelos  $k-\varepsilon$  para melhorar sua performance, visto que nenhum modelo, mesmo o DSM, satisfazia completamente as restrições matemáticas das tensões de Reynolds até aquele momento. Apesar de os modelos de segunda ordem, como o DSM, trazerem avanços na descrição de turbulências, ainda estamos distantes de um modelo matemático universal para esses escoamentos. Como Rotta (1984) afirmou: "Um modelo de turbulência realmente universal é um sonho e será um sonho possivelmente para sempre."

Shih et al. (1994) propuseram um novo modelo de equações algébricas das tensões de Reynolds para modelar escoamentos mais complexos. Eles adaptaram o modelo matemático conhecido como  $k-\varepsilon$  padrão, propondo o modelo  $k-\varepsilon$  *realizable*. No estudo eles mostraram que as adaptações matemáticas adotadas tornaram o modelo  $k-\varepsilon$  *realizable* o único que é capaz de satisfazer as restrições matemáticas das tensões de Reynolds, sendo consistentes com os resultados físicos dos escoamentos. No estudo, foram comparados os dois modelos  $k-\varepsilon$  em situações aplicáveis a engenharia, tendo o modelo  $k-\varepsilon$  *realizable* uma significativa vantagem na predição de comportamentos de fluidos, especialmente em situações com grandes separações de escoamento e fortes camadas de cisalhamento. O modelo padrão falha em prever de forma precisa as tensões de cisalhamento, gradientes de pressão adversos, separação de camada limite e recirculações.

Argyropoulos e Markatos (2015) trouxeram um panorama geral da computação com modelos mais modernos para descrição de escoamentos turbulentos. Os autores apresentaram um resumo conceitual, situação atual e aplicações dos seguintes métodos: *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS), modelo de dois fluidos, *Very Large Eddy Simulation* (VLES), *Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (URANS), *Detached Eddy Simulation* (DES), *Large Eddy Simulation* (LES). Os autores explicam que cada modelo tem seus pontos positivos e suas falhas, podendo ser dividido segundo sua capacidade de modelar turbulências mais energéticas. Na Figura 1 pode-se ver a divisão de acordo com espectro energético da turbulência, por exemplo o método DNS consegue modelar todo o espectro energético, sendo assim mais preciso e tendo maior aplicabilidade que o modelo RANS, porém exigindo uma capacidade computacional muito grande. Hoje conhecemos modelos que conseguiriam resolver turbulências de alta complexidade com precisão, porém ainda não temos disponíveis facilmente máquinas com capacidade computacional para isso. Assim o desafio é conseguir escolher um modelo capaz de resolver as equações para o modelo em estudo entregando um resultado aproximado do real, mas que ao mesmo tempo seja capaz de ser resolvido nas máquinas que estão à disposição. Para os autores o método LES, atingiu sua maturidade com diversos artigos mostrando suas aplicações e tende a crescer rapidamente sua utilização, porém ainda é necessário desenvolvimento do método no que diz respeito a diferentes tipos de escoamentos turbulentos, especialmente escoamentos industriais. Outra opção que vem

se apresentando como uma boa opção são os métodos híbridos LES/RANS, os quais unem a precisão do LES com a velocidade do RANS. O desenvolvimento computacional contínuo promete possibilitar um maior uso do DNS em um futuro próximo. E por fim os autores ressaltam que os métodos mais antigos e simples ainda são recomendados para simulações de engenharia.

Figura 1: Espectro de energia de turbulência.



Fonte: Argyropoulos e Markatos, 2015.

## 2.2 Aplicações do CFD em equipamentos de mistura

Sahu et al. (1999) estudaram cinco geometrias de impelidores axiais para investigar as características e tempos de misturas através de CFD. Foi utilizada uma abordagem de modelagem por zona. O domínio foi dividido em pequenas zonas, onde cada uma delas usou um valor específico de constantes nas equações do modelo  $k$ - $\epsilon$  que melhor representava aquela região do vaso agitado. Os valores encontrados nos cálculos computacionais foram comparados com valor experimentais já que os pesquisadores utilizaram a técnica *laser Doppler velocimetry* (LDV) para medir características da turbulência em um vaso de acrílico. Os autores obtiveram resultados compatíveis entre os valores experimentais e os valores utilizando o método de divisão por zonas no CFD. A predição dos valores de  $k$ , energia cinética turbulenta, foram melhorados utilizando o método de divisão por zonas comparando com o modelo  $k$ - $\epsilon$  padrão em todo o domínio. A predição dos tempos de mistura pelo CFD foi considerada excelente quando comparados com outros resultados da literatura. Os autores buscaram estabelecer os balanços de energia para estes cinco impelidores seguindo modelos da literatura, mas foi observado que os valores da taxa de dissipação de energia turbulenta ( $\epsilon$ ) não apresentavam valores semelhantes ao encontrado no CFD, assim sugeriram um novo método utilizando identificação de redemoinhos que apresentou melhores resultados.

Yeoh et al. (2005) caracterizaram a mistura de um inerte em um vaso agitado que utilizava impelidor *Rushton* utilizando a técnica *Large Eddy Simulation* (LES). Foi utilizado a técnica de

*Moving Reference Frame* para simular a rotação do impelidor. Os autores verificaram que os resultados da utilização da técnica LES nesta simulação foram satisfatórios, apresentando resultados importantes para a otimização do vaso na indústria. Alguns dos resultados foram: verificação de grandes quantidades de sólidos presos entre as chicanas, tempo final de mistura, zonas de estagnação, vias de escoamento preferenciais e otimização do local de alimentação.

Outro pesquisador que analisou a capacidade da técnica *Large Eddy Simulation* para a otimização industrial de vasos agitados foi Derksen (2001). Ele avaliou os campos de escoamentos de um vaso agitado com quatro chicanas espaçadas igualmente e um impelidor de 4 pás inclinadas em 45°. Os campos de velocidade próximos as extremidades do domínio foram bem representadas pelo LES. Uma consideração foi que os níveis de energia cinética foram superestimados em 20% e houve um atraso no desenvolvimento da região de alta energia cinética que coincide com o vórtice central.

Zadghaffari et al. (2010) apresentaram um estudo de um processo de mistura em um tanque agitado utilizando CFD e o método *Large Eddy Simulation (LES)*. O impelidor do tanque era uma turbina Rushton de 6 pás e o tanque apresentava quatro chicanas. Para modelar a rotação do impelidor foi utilizada a técnica *Sliding Mesh*. A simulação foi feita em estado transiente com injeção de sólidos durante o processo para entender a homogeneização do tanque. A simulação foi feita utilizando ANSYS® Fluent 6.3, o qual obteve os campos de escoamento e velocidade, consumo de energia, tempo de mistura, energia cinética turbulenta e taxa de dissipação turbulenta. Os resultados foram comparados com a literatura e apresentaram excelente semelhança. O local de alimentação foi estudado durante as simulações e pode ser otimizado. Os autores concluíram que o método LES trouxe uma melhora nas predições feitas pelo simulador em relação ao clássico método RANS.

Bakker et al. (2000) investigaram o comportamento do escoamento em um vaso agitado utilizando dois tipos de impelidores: turbina de Rushton e pás inclinadas. O modelo matemático usado foi LES. O vaso possuía quatro chicanas. A turbina de Rushton foi testada em uma rotação de 290 rpm e o impelidor de pás inclinadas em uma rotação de 60 rpm. Os resultados para o impelidor de pás inclinadas foram satisfatórios quando comparados aos dados presentes na literatura, e mostraram a presença de padrões de escoamento não estacionários e assimétricos. Mostrou também a presença de flutuações na direção da velocidade axial em períodos que não são constantes. Para a turbina de Rushton os resultados atestaram a localização dos vórtices vindos da passagem das pás e apresentaram o comportamento esperado para o escoamento. Qualitativamente os resultados da turbina de Rushton foram satisfatórios quando comparados com dados da literatura.

Murthy et al. (2007) realizaram simulações das dispersões de três fases em um tanque agitado com impelidor de 4 e de 6 pás inclinadas em 45°. Eles buscaram avaliar amplamente os efeitos do diâmetro do tanque, diâmetro do impelidor, geometria do impelidor, localização do impelidor, velocidade de rotação, tamanhos das partículas, velocidade superficial do gás e quantidade de sólidos nas dispersões nos fluidos. Para ser possível esta simulação eles utilizaram o modelo multifásico Euleriano com o complemento do modelo *k-ε* padrão para a turbulência. A modelagem da rotação do impelidor foi feita por meio da técnica *multiple reference frame* e o software utilizado foi o ANSYS® Fluent 6.2. Foi encontrado um ajuste próximo entre os valores encontrados de velocidade e fração volumétrica do gás na dispersão



gás-líquido, em relação aos valores experimentais. Além disso, os valores de fração volumétrica de sólidos também foram concordantes entre os experimentais e os encontrados nas simulações para uma larga gama de velocidades de rotação e geometrias de impelidores. Os autores também verificaram que a velocidade de rotação crítica para manutenção da suspensão sólida encontrada em diversas variações de parâmetros, como geometria, tamanho de partícula e quantidade de sólidos, foram satisfatórios quando comparados com a literatura, sendo este método aplicável para otimizações em engenharia.

Murthy e Joshi (2008) avaliaram a capacidade de diferentes modelos matemáticos em prever o comportamento do escoamento em cinco diferentes geometrias de impelidores. Os modelos testados foram  $k$ - $\epsilon$  padrão, *Reynolds-stress transport (RSTM)* e *large eddy simulations (LES)*. Os impelidores estudados foram: turbina Rushton de 6 pás, impelidores de 6 pás inclinadas em 30°, 45° e 60°, e impelidor hidrofólio de 3 pás. O tanque tinha chicanas e foi considerado com escoamento totalmente turbulento. Quanto ao fluxo médio, identificou-se que o método RSTM performa melhor que o  $k$ - $\epsilon$  padrão, principalmente por o  $k$ - $\epsilon$  padrão superestimar a viscosidade quando há recirculações no escoamento. Ambos os modelos falham em prever a energia cinética turbulenta na região do impelidor, mas o  $k$ - $\epsilon$  consegue representar muito bem os parâmetros do impelidor hidrofólio por ter menos redemoinhos neste escoamento. Para o uso do método LES, o impelidor que gerou menos instabilidades devido a vórtice foi o hidrofólio e o que mais gerou instabilidades foi a turbina Rushton. Os autores afirmam que o modelo LES demonstrou a capacidade de prever parâmetros diversos do escoamento que vão ao encontro do verificado experimentalmente, sendo um método razoavelmente confiável para estudos nestes cinco impelidores. Eles também concluíram que a melhor maneira de estimar o gasto energético é por meio da utilização do torque aproximado, podendo utilizar modelos RANS para ter um menor custo computacional.

Choi et al. (2013) utilizaram CFD para simulação de turbinas Francis em um projeto de substituição do corredor da turbina. Para este estudo foi utilizado o software ANSYS® CFX. Os pesquisadores construíram com base em trabalhos experimentais e rotina da indústria um novo modelo de corredor da turbina, usando este modelo para ser simulado no CFD para otimização. Após as simulações e estudos de melhorias serem feitos, o projeto otimizado foi testado na prática. O CFD permitiu uma maior agilidade na avaliação da peça e economia de tempo e verba. Os resultados práticos mostram um aumento do pico de eficiência em 9,93% e um desempenho de operação mais suave, com menos casos de cavitação. Os valores de eficiência encontrados nos cálculos pelo CFD foram comparados com os valores práticos obtidos pelo fabricante da peça, tendo uma semelhança muito satisfatória.

Costa e Correa (2019) avaliaram sistemas de agitação e mistura para gerar dados experimentais que auxiliem projetistas de impelidores industriais. Eles avaliaram quatro configurações de impelidores: Rushton-Rushton, Rushton-Smith, Smith-Rushton e Smith-Smith. Os principais parâmetros avaliados foram o tempo de mistura e o consumo de energia dos sistemas. Estas avaliações foram realizadas em três faixas de rotação: 300 rpm, 500 rpm e 700 rpm. As simulações foram realizadas utilizando como fluido água a temperatura ambiente. Os autores apresentaram que os melhores resultados para este estudo foram obtidos na faixa de agitação de 500 rpm. O conjunto que se mostrou mais eficiente no estudo foi Smith-Smith, que obteve os menores tempos de mistura e os menores valores de consumo de potência. Foi ressaltado a grande quantidade de impelidores disponíveis na literatura e que

simples mudanças de posicionamento modificam a eficiência das misturas, assim devendo ser realizado um estudo cuidadoso para cada aplicação de misturados.

Guidolini (2009) avaliou o comportamento de um reator tubular de polimerização usando ferramentas CFD. Utilizando dados experimentais de trabalhos anteriores foi verificada a presença de uma espessa camada de polímero nas paredes do reator, então ele adicionou estudos de misturadores estáticos ao trabalho para buscar lidar com este problema. Foi utilizado para modelagem o software Phoenics® (CHAM, 2022) com equações  $k-\epsilon$  padrão e modificada. O estudo mostrou que a influência de misturadores estáticos na operação não é dependente de sua geometria, mas sim da frequência com que eles estão dispostos. O uso de misturadores influenciou significativamente no grau de mistura da solução e na redução da perda de carga do sistema devido à eliminação da camada de polímero da parede do reator.

Rosa e Emerick (2020) analisaram com CFD três diferentes geometrias de rotores de bomba centrífuga. Os rotores analisados foram: rotor original da bomba, rotor original com pás intermediárias na saída e rotor original com pás intermediárias na entrada. O software utilizado foi o ANSYS® CFX com o modelo de turbulência *Shear Stress Transport (SST)*. Todas as simulações foram feitas com rotação constante de 1500 rpm. Os resultados obtidos foram concordantes com a teoria de bombas. As pás intermediárias reduziram a altura produzida pelas pás do rotor, com a maior redução sendo do rotor com as pás intermediárias na saída. Essas pás intermediárias na saída também geraram perda de carga e divergências no escoamento. Por outro lado, as pás intermediárias na entrada melhoraram a distribuição do escoamento. Por fim os autores acreditam que as ferramentas CFD irão auxiliar a aprimorar as técnicas de avaliação da eficiência das bombas e a desenvolver novas geometrias de rotores.

Hoseini et al. (2021) avaliaram geometrias de impelidores buscando o menor gasto energético e tensão ao impelidor por meio de CFD. As características de turbulência, padrão de escoamento e gasto energético dos seguintes impelidores foram calculados: ambos são turbinas de Rushton com 6 pás, um com as pás em formato U e outro com as pás em formato V. A avaliação também foi feita em uma turbina Rushton tradicional. O algoritmo *Multi-objective Genetic Algorithm (MOGA)* foi complementado pelo *Direct Optimization (DO)* e pelo *Response Surface Optimization (RSO)* para avaliar os parâmetros geométricos das pás. A interação entre fluido e sólido foi modelado pelo FSI (*Fluid Structural/Solid Interaction*) de duas vias. Utilizando as pás no formato U e V os autores obtiveram uma redução de 48% e 21% no valor consumo de energia, respectivamente. O formato em V também obteve menores valores de tensões de *von Mises*, de energia cinética turbulenta e na taxa de dissipação dessa energia. Os valores experimentais e os resultados numéricos de consumo de energia tiveram uma diferença de 5%. Os autores concluíram que a geometria otimizada das pás de uma turbina Rushton para ser utilizado em tanques agitados é o formato V.

Como verificado até o momento, existe uma grande quantidade de trabalhos utilizando ferramentas capazes de realizarem simulações computacionais de fluidos. Esta área atualmente vem sendo muito estudada e desenvolvida, sendo, como mostrado, o estado da arte no estudo de escoamentos. Entretanto ainda há uma grande espaço para crescimento e desenvolvimento nesta área, em específico estudos de misturadores podem ser mais desenvolvidos utilizando esta tecnologia. Apesar de grande parte dos modelos matemáticos possíveis de serem usados em computadores pessoais serem aproximações e não

conseguirem apresentar resultados extremamente precisos na modelagem de escoamentos turbulentos, modelos como o  $k-\varepsilon$  apresentam um grande histórico de uso em publicações científicas, o que os consolidam como robustos e confiáveis para cálculo de situações básicas de engenharia.

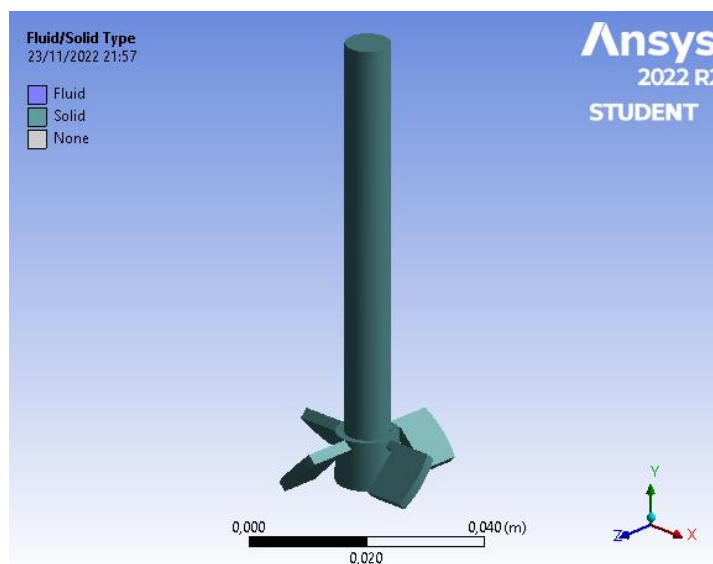
### 3 Materiais e Métodos

A fluído-dinâmica computacional tornou possível simulações que pudessem validar os resultados de laboratório e expor de maneira mais clara o comportamento do fluído. Neste trabalho, estas simulações foram executadas no software ANSYS® 2022 R2 Fluent®, versão 22.2.0 STUDENT. A versão STUDENT é gratuita e direcionada para estudantes que desejam aprender mais sobre simulação computacional, não podendo ser utilizada para fins comerciais. A versão de estudante tem limitações que influenciaram nos métodos de cálculo e nas malhas utilizados neste trabalho, tendo assim de ser simplificados, mas mantendo uma qualidade de resultados aceitáveis para o nível de assertividade objetivado nesta análise. As limitações são: malha máxima de 512.000 células e processador com no máximo 16 cores. A máquina utilizada para rodar as simulações foi um computador pessoal da marca Dell, com 8 GB de memória RAM, processador Intel® Core® i5-8265U CPU 1.80GHz.

Todo os sistemas a serem resolvidos eram reatores utilizando impelidores com capacidade total volumétrica de 100 ml, estando 70% ocupados por líquido. Os sistemas foram simplificados para um modelo isotérmico, já que a variação de temperatura não influenciava significativamente os parâmetros estudados nesta análise. O casco do reator, cobertura do reator, hastes e pás foram considerados sem rugosidade. A espessura das paredes do casco, cobertura e haste foi desprezada, considerando o perfil isotérmico do sistema. Todos os cálculos foram realizados em simulações 3D, com configuração de dupla precisão e com a força da gravidade aproximada em  $9,81 \text{ m/s}^2$ . O campo de velocidade inicial em todas as regiões foi zero. Foi utilizada também uma abordagem em modelo estacionário, visto que os perfis de velocidade e escoamento buscados eram em um longo período após o início da rotação, não interferindo assim o posicionamento inicial do fluído no início do tempo.

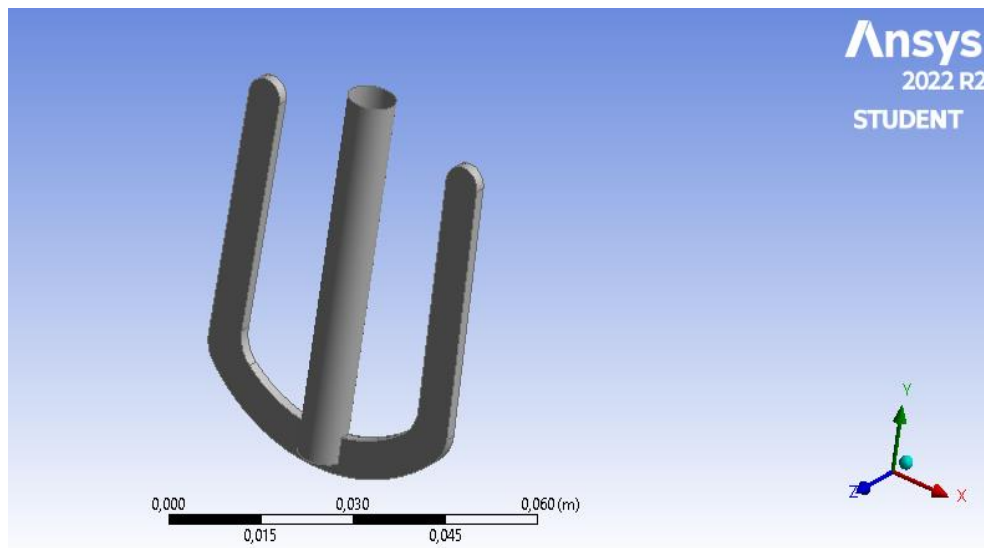
As geometrias utilizadas foram construídas dentro do software ANSYS® *SpaceClaim* e ANSYS® *DesignModeler* e estão apresentadas a seguir. A Figura 2 contém o impelidor quatro pás, a Figura 3 apresenta o impelidor âncora e na Figura 4 está o sistema com o casco do reator para configuração com o impelidor quatro pás, que é o mesmo reator utilizado com o impelidor âncora.

Figura 2: Impelidor 4 pás inclinadas a 45°.



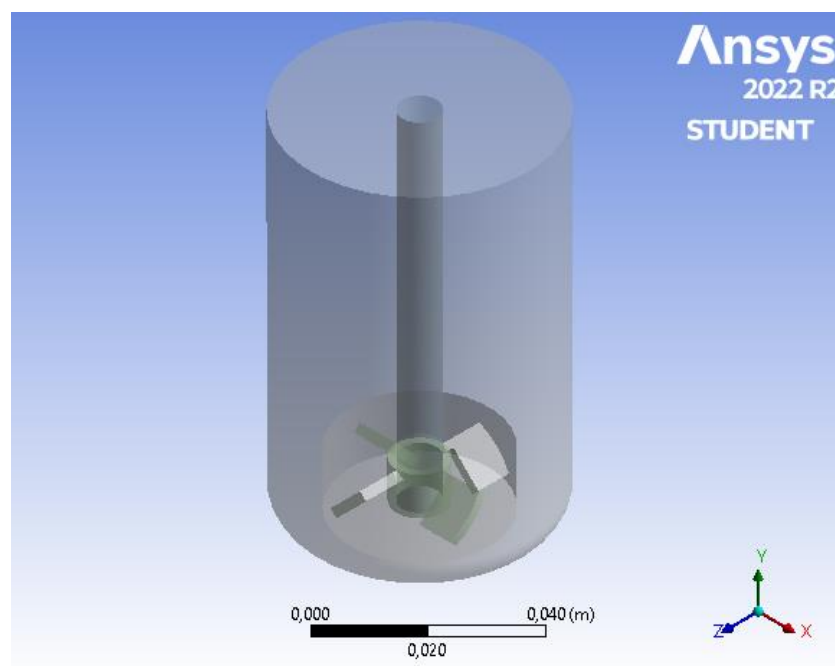
Fonte: O autor, 2022

Figura 3: Impelidor âncora.



Fonte: O autor, 2022.

Figura 4: Sistema completo do reator



Fonte: O autor, 2022.

Para obter a solução numérica desejada em um problema físico é necessário modelar um sistema de equações. Para a modelagem matemática deste problema foram utilizadas as equações de conservação de massa e quantidade de movimento. Os fluídos foram considerados newtonianos. Não foi utilizado equações de balanço de energia pois o sistema foi considerado isotérmico. A abordagem utilizada neste caso para a simulação do movimento dos rotores foi a *Moving Reference Frame* (MRF) com velocidade absoluta, que será explicada subsequentemente, e as equações de balanço de massa e movimento modificadas para esta abordagem estão apresentadas na equação 1 e 2, respectivamente. (Ansys Theory Guide, 2022).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho v_r = 0 \quad (\text{Eq. 1})$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v_r v) + \rho [\omega \times (v - v_t)] = -\nabla \rho + \nabla \cdot \tau + F \quad (\text{Eq. 2})$$

Sendo:

$v_r$  - Velocidade relativa (velocidade vista do domínio móvel);

$v$  - Velocidade absoluta (velocidade vista do domínio estacionário);

$v_t$  - Velocidade de translação do domínio móvel;

$\omega$  - Velocidade angular;

$\rho$  - Massa específica do fluído;

$F$  - Força gravitacional e força de corpos externos;

$\tau$  - Tensor de estresse viscoso / Tensor de Reynolds;

A ferramenta computacional ANSYS® Fluent realiza a resolução dos problemas de escoamentos tridimensionais de fluídos por meio do método de volumes finitos. Este método utiliza a divisão do volume total em pequenos volumes de controle, chamados de células, onde as equações são integradas numericamente. Após a resolução das equações é necessário obter os fluxos advectivos e difusivos nas faces de cada volume de controle. Estes fluxos são obtidos nos centros das células, chamados pontos nodais, e para determinação do fluxo na face o método utiliza funções de interpolação entre estes pontos. (Malalasekera e Versteeg, 1995). Este método é robusto e assertivo, além de ter fácil implementação, pois ele resolve as equações de movimento e massa simultaneamente, o que diminui o número de iterações

necessárias e não faz necessário o uso de um termo para correção de pressões. (Rosa e Emerick, 2020).

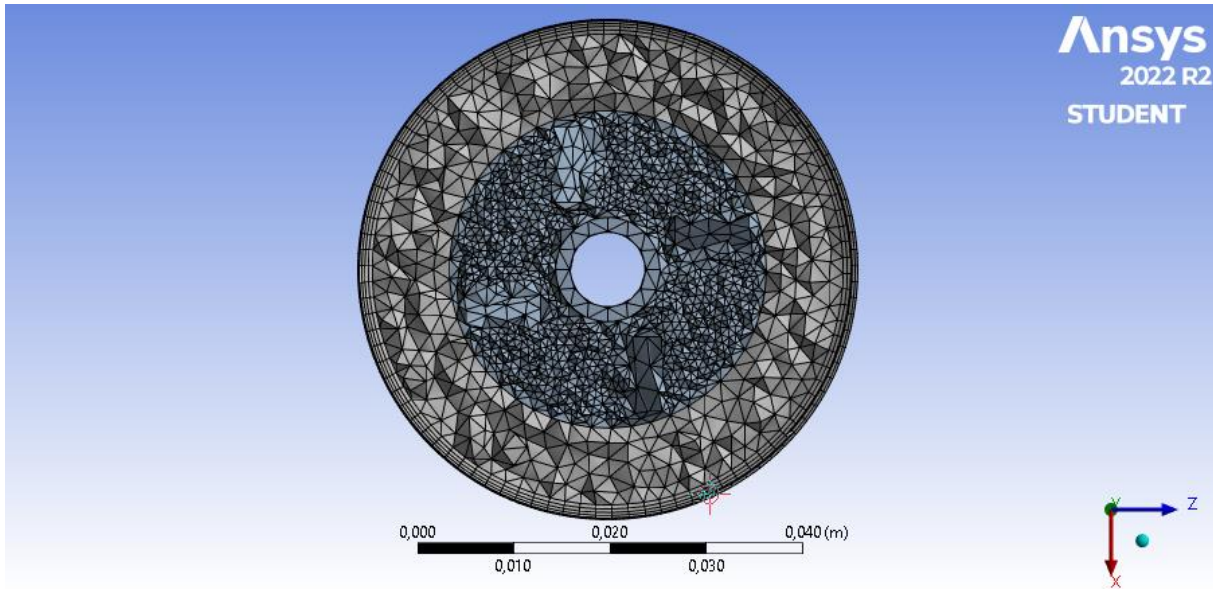
Como estes sistemas envolviam fase gasosa (30% do volume do reator estava preenchido com ar), líquida e sólida, sendo a sólida dispersa no líquido, era necessário um modelo multifásico para resolução do problema. O modelo escolhido foi o Euleriano. Este modelo resolve as equações de momento e massa em cada fase, assim permitindo a obtenção de campos de velocidade e escoamento separados para cada uma. Além disso, todas elas são tratadas como contínuas e possuem a mesma pressão neste modelo. A fase sólida foi configurada como sendo granular e o diâmetro das partículas foi fixado em 10  $\mu\text{m}$ , já que este era o tamanho considerado ideal pelos testes laboratoriais. Foram usados os modelos padrão de interação interfásica do software, sendo o coeficiente de arraste definido pela equação de Schiller-Naumann. O coeficiente de tensão superficial entre líquido e gás foi aproximado ao do hexano, sendo 0,0184 N/m. Para resolução do acoplamento pressão-velocidade foi usado o algoritmo Phase Coupled SIMPLE. (Ansys Theory Guide, 2022). O método euleriano apresentou-se como uma boa opção de abordagem para resolução de problemas multifásicos, sendo demonstrado na literatura sua eficiência quando é incluído os valores relativos as interações entre fases. Outro modelo que poderia ser usado é o Euler-Lagrangiano, o qual tem resultados mais realistas, especialmente em baixas concentrações de sólidos, tratando a fase sólida como discreta e construindo a trajetória das partículas individualmente, mas tendo um maior custo computacional e complexidade neste sistema. (Lahiri e Ghanta, 2010).

Para a modelagem da turbulência foi usado o modelo  $k$ - $\epsilon$ , que utiliza duas equações: uma para energia cinética turbulenta,  $k$ , e outra para a taxa de dissipação dessa energia,  $\epsilon$ . Este modelo apresenta uma grande robustez, sendo o mais empregado neste tipo de simulação. Ele apresenta uma notável capacidade de representar escoamentos laminares próximo a paredes e ao mesmo tempo a turbulência ocasionada por agitadores, assim representando bem a situação deste estudo. (Guidolini, 2009). Foram usados os valores padrão dos coeficientes do modelo  $k$ - $\epsilon$  *realizable*, com funções de parede padrão e turbulência *dispersed*, sendo:  $C_{\epsilon 2}=1,9$ ,  $C_{\epsilon 3}= 1,3$ ,  $\sigma_{\epsilon}= 1,2$ ,  $\sigma_k= 1$  e número de dispersão de Prandtl = 0,75. (Ansys Theory Guide, 2022).

As malhas de células foram construídas no ANSYS® *Meshing*, utilizando a técnica de *Moving Reference Frame*. Esta técnica é indicada para modelos estacionários e de rotação constante, além de ter fácil aplicação. (Ansys Users Guide, 2022). Basicamente é necessária a separação de dois domínios, um estacionário e o outro rotativo. Haverá uma face de interface entre os dois domínios, onde os resultados de uma zona serão usados como condições de contorno para outra, integrando assim os escoamentos. As malhas construídas foram divididas em zonas internas, sendo estas rotativa com velocidade angular absoluta em rpm, e zonas externas, as quais eram estacionárias. A malha criada para os sistemas com impelidor quatro pás ficou com 462.734 células, sendo elas elementos tetraédricos. Já a malha criada para os sistemas com impelidor âncora ficou com 168.997 células, com elementos poliédricos. Para aumentar a qualidade dos resultados foram utilizadas as ferramentas de *inflation*, a qual aumenta o número de células próximas à parede para representação de camada limite, e *body sizing*, para diminuir o volume das células na zona interna aumentando o detalhamento dos cálculos próximo ao impelidor. As células utilizadas possuíam entre 1,1 mm e 2 mm. Este número de células e seus tamanhos são aceitáveis para os resultados desejados, já que a máquina utilizada não possuía grande força de processamento e havia a limitação de versão

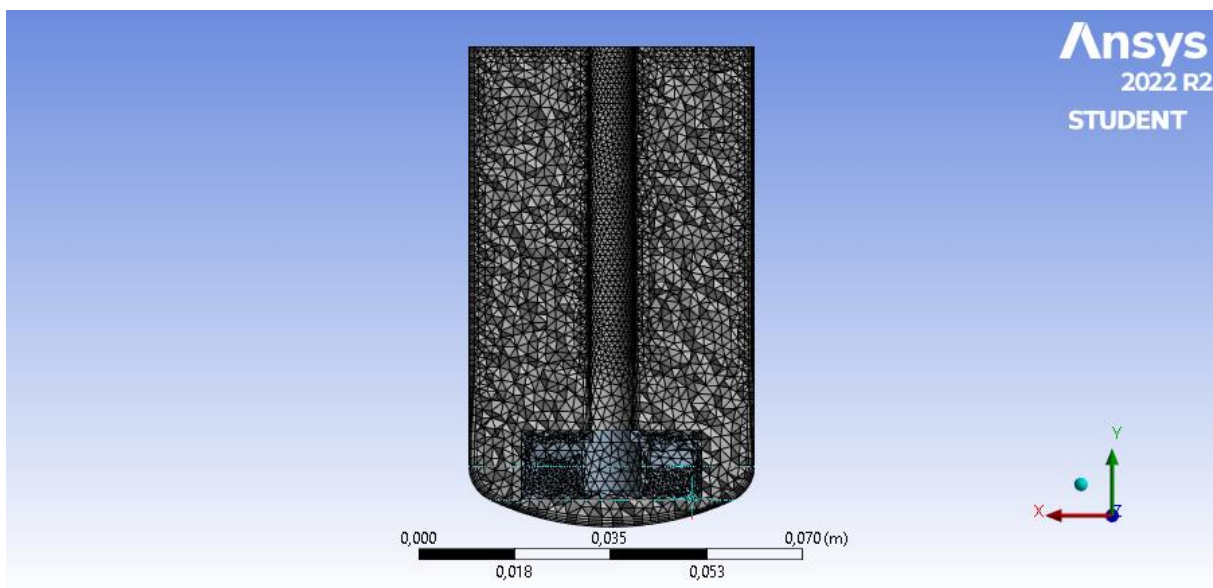
de estudante. Na Figura 5 e na Figura 6, são apresentadas as malhas dos sistemas de quatro pás com as duas zonas de domínio, em vista superior e frontal, respectivamente. Na Figura 7 e na Figura 8 são apresentadas as malhas dos sistemas com impelidor âncora para as vistas frontal e superior, respectivamente.

Figura 5: Malha 4 pás – Visão Superior.



Fonte: O autor, 2022.

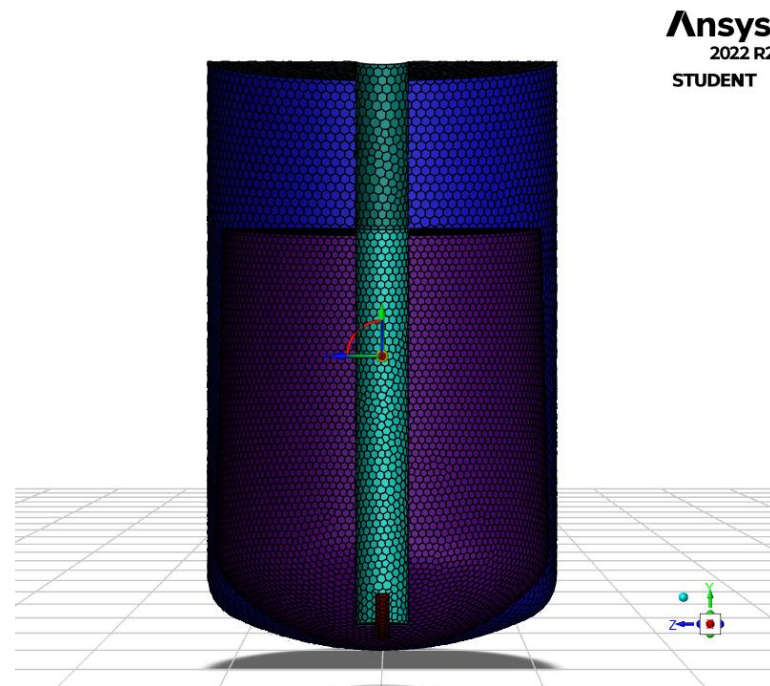
Figura 6: Malha 4 pás - Visão Frontal.



Fonte: O autor, 2022.

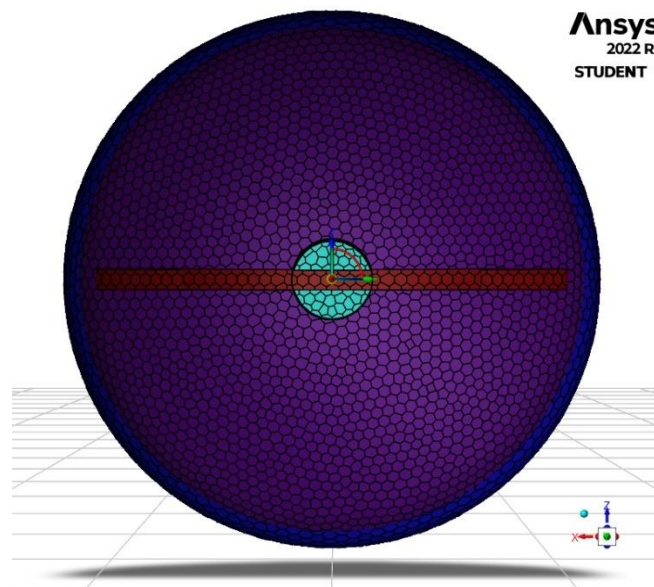


Figura 7: Malha Âncora - Visão Frontal.



Fonte: O autor, 2022.

Figura 8: Malha Âncora - Visão Superior.



Fonte: O autor, 2022.

Os fluídos usados no Fluent neste trabalho foram 3: ar, líquido final e particulado. O ar foi usado na configuração padrão do software com densidade de  $1,225 \text{ kg/m}^3$  e viscosidade de  $1,7894 \cdot 10^{-5} \text{ kg/ms}$ . O líquido final foi uma modificação do hexano padrão, tendo massa específica de  $700 \text{ kg/m}^3$  e viscosidade de  $0,0005 \text{ kg/ms}$ . Já o particulado correspondia aos sólidos e foi modificado da água padrão, tendo massa específica de  $2300 \text{ kg/m}^3$ . A viscosidade do sólido foi desprezada pelo software.

Após toda a configuração aqui descrita ser inserida no software, o volume total de controle foi dividido em uma região com 70% do volume, a qual foi adicionado apenas a fase líquida e a sólida com as partículas uniformemente distribuídas, e uma região com 30% do volume exclusiva para o ar. A fração volumétrica inserida de sólidos foi de 2,6% do volume total. Esta configuração foi feita em todos os cenários. Com esta divisão inicial feita, as simulações foram iniciadas, atingindo uma convergência aceitável após 1000 iterações. Devido ao limite da capacidade computacional não foi possível correr as simulações até convergência completa de todas as variáveis, porém os resultados após 1000 iterações foram robustos e com pouca variação nos residuais. O tempo total de cada simulação foi próximo a 4 horas e 30 minutos. Os resultados destas simulações serão apresentados no próximo capítulo.

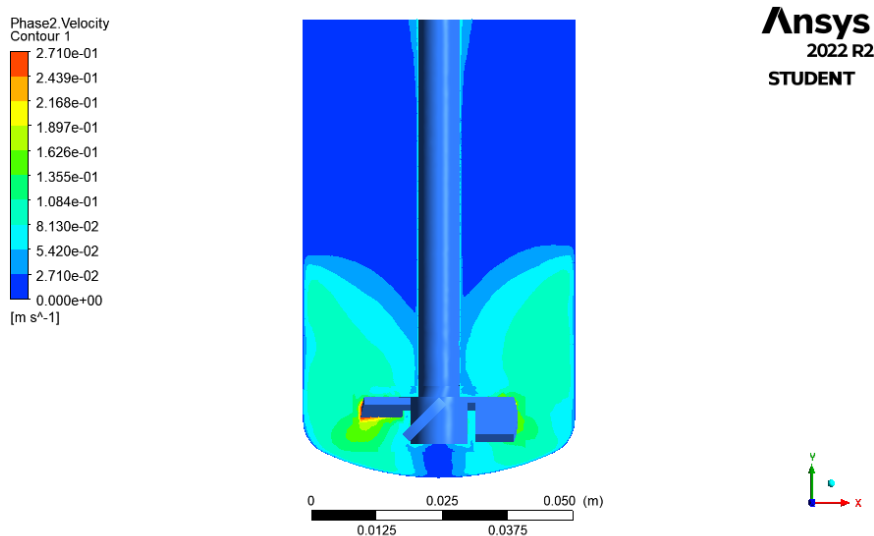
## 4 Resultados e Discussão

Neste capítulo foram apresentados os resultados dos procedimentos descritos no capítulo 3. A apresentação dos resultados das simulações foi intercalada entre as geometrias. Finalizando os resultados seguiu-se com a discussão que buscou analisar o comportamento da mistura nos quatro casos estudados relacionando com trabalhos da literatura e verificando a validade dos resultados obtidos com os comportamentos qualitativo do escoamento que é visto na prática de síntese em laboratório.

Para apresentação dos resultados das simulações, foram usadas imagens dos campos de velocidade e do escoamento, mostrando a fração volumétrica de sólidos presente. Neste trabalho o foco foi dado aos resultados que envolvem a fase sólida e sua interação com o líquido, já que é o comportamento desta espécie que estava em análise. Em primeiro momento foi exposto o campo de velocidades modelado para os dois sistemas de impelidores em vista frontal através da Figura 9 e Figura 10, e em vista superior através das Figura 11 e Figura 12.

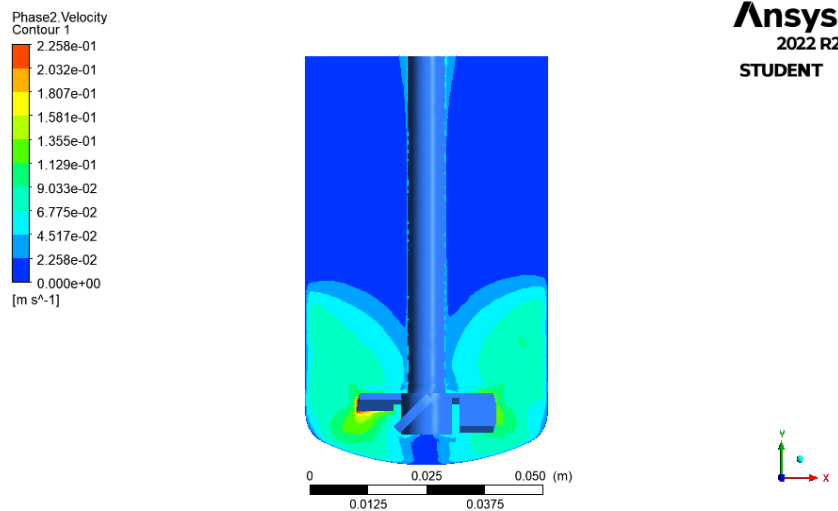
Na Figura 9, é apresentado o campo de velocidades para a rotação de 180 rpm com impelidor quatro pás. Nota-se, como esperado, uma maior velocidade nas regiões das pás do impelidor e uma menor velocidade junto as paredes. Além disso, verificou-se a presença de um vórtice central, com a elevação de velocidade da fase próximo as paredes e a constante redução desta em direção a haste central. Também é observável uma zona de baixa velocidade e alta pressão logo abaixo do centro do impelidor, entre o impelidor e o fundo do reator. Na Figura 10, o campo de velocidades para o sistema com rotação de 150 rpm e com impelidor quatro pás é apresentado e vai ao encontro do perfil de velocidades apresentado no sistema de rotação de 180 rpm. O perfil é praticamente igual no que pode ser observado pela vista frontal, com a diferença sendo a intensidade das velocidades calculadas. A velocidade máxima calculada para a rotação de 180 rpm foi de 0,271 m/s e já para rotação de 150 rpm foi de 0,226 m/s, para esta vista.

Figura 9: Campo de velocidades em vista frontal para sistema 4 pás com rotação de 180 rpm.



Fonte: O autor, 2022.

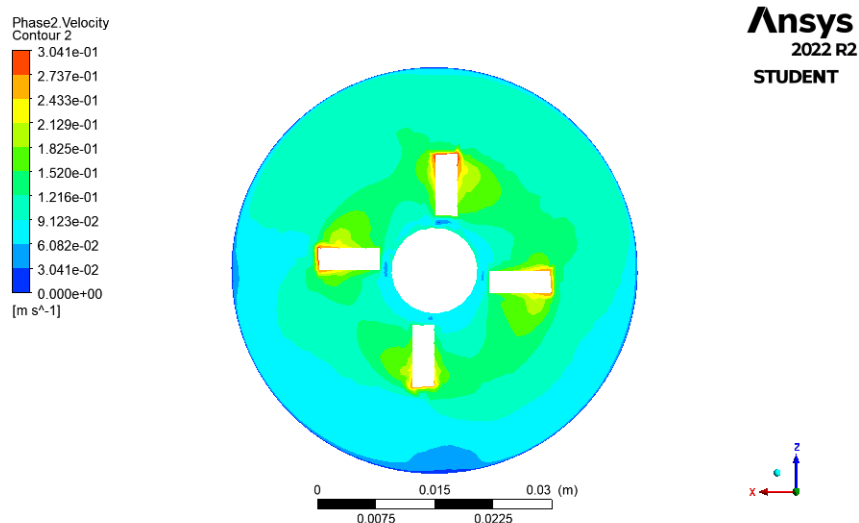
Figura 10: Campo de velocidades em vista frontal para sistema 4 pás com rotação de 150 rpm.



Fonte: O autor, 2022.

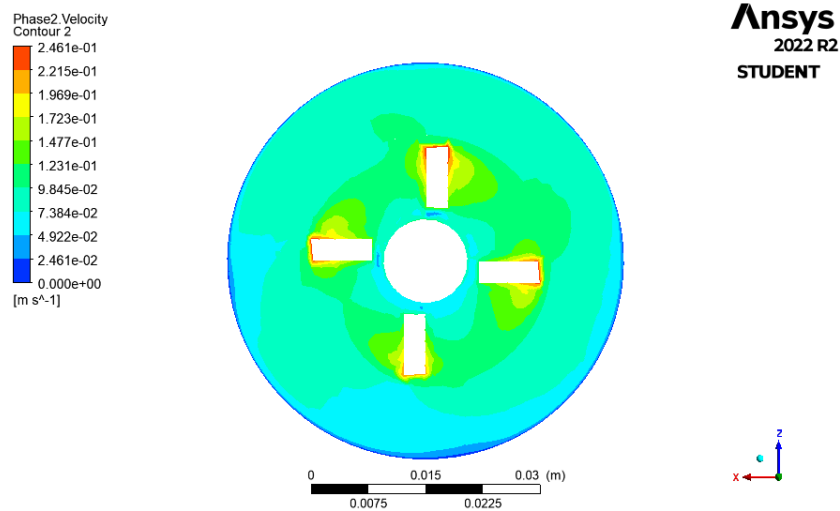
Quando é avaliado o campo de velocidade para os sistemas de quatro pás através de vistas superiores, nota-se que há uma região mais rápida no caminho das pás e regiões mais lentas próximo a parede e ao centro do impelidor, principalmente embaixo dos conectores das pás. Também é notável, principalmente no sistema de 180 rpm, anomalias na camada limite junto a parede, que serão discutidas mais a frente. As velocidades máximas calculadas, relativas a esta vista envolvendo maiores forças axiais e tangenciais, são de 0,304 m/s e 0,246 m/s para os sistemas de 180 rpm e 150 rpm, respectivamente. A vista superior dos perfis de velocidades é apresentada na Figura 11 e Figura 12.

Figura 11: Campo de velocidades em vista superior para sistema 4 pás com rotação de 180 rpm.



Fonte: O autor, 2022.

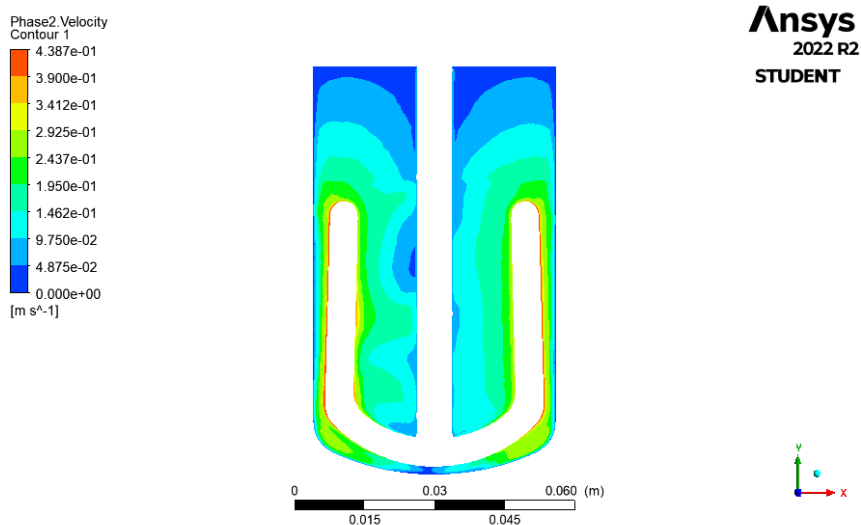
Figura 12: Campo de velocidades em vista superior para sistema 4 pás com rotação de 150 rpm.



Fonte: O autor, 2022.

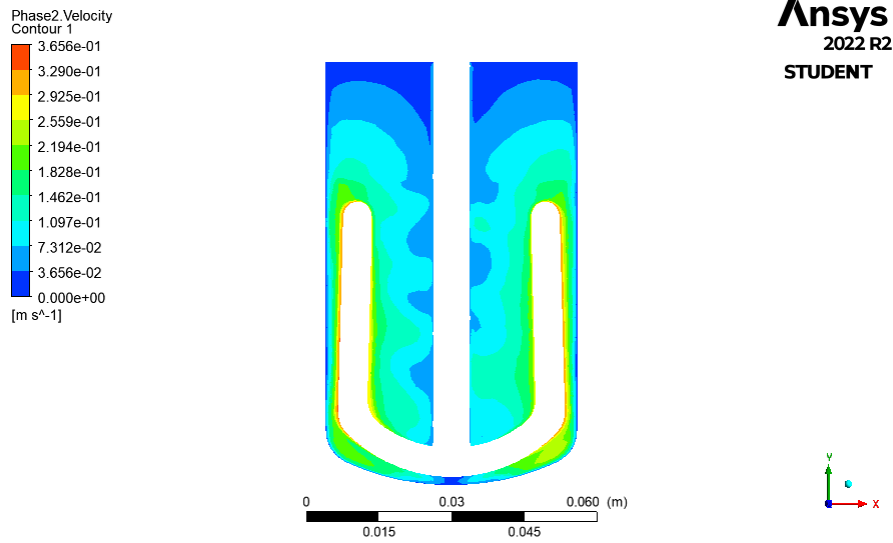
Já o campo de velocidades para os sistemas com impelidor âncora em vista frontal, como apresentados na Figura 13 e na Figura 14, mostra características semelhantes de escoamento nas duas velocidades de rotação. Essas características são a maior velocidade próximo as pás do impelidor e zonas de baixa velocidade próximas ao centro do tanque, principalmente entre o fundo e o impelidor. A diferença entre as duas fica por conta da intensidade da velocidade sendo a velocidade máxima calcula no tanque com 180 rpm de 0,439 m/s e no tanque com 150 rpm de 0,366 m/s. Outra diferença é a maior presença de regiões com baixas velocidades de escoamento próximas a haste do impelidor no sistema com velocidade de rotação de 150 rpm.

Figura 13: Campo de velocidades em vista frontal para sistema âncora com rotação de 180 rpm.



Fonte: O autor, 2022.

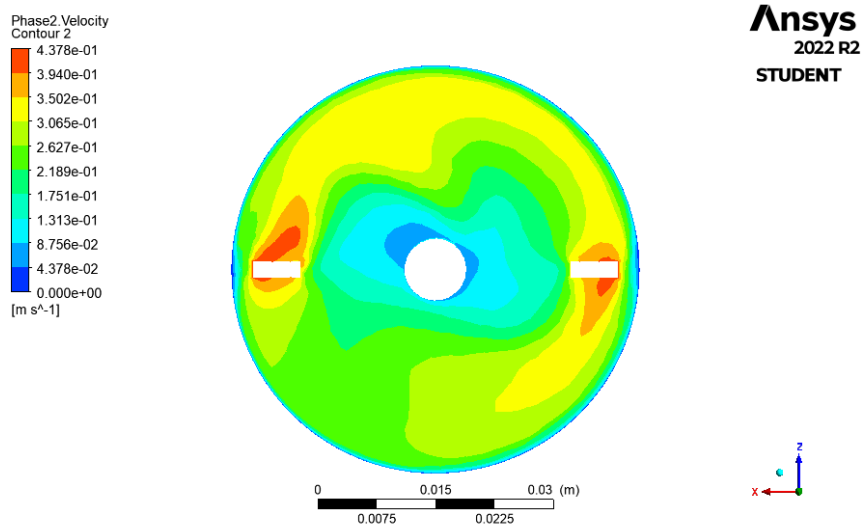
Figura 14: Campo de velocidades em vista frontal para sistema âncora com rotação de 150 rpm.



Fonte: O autor, 2022.

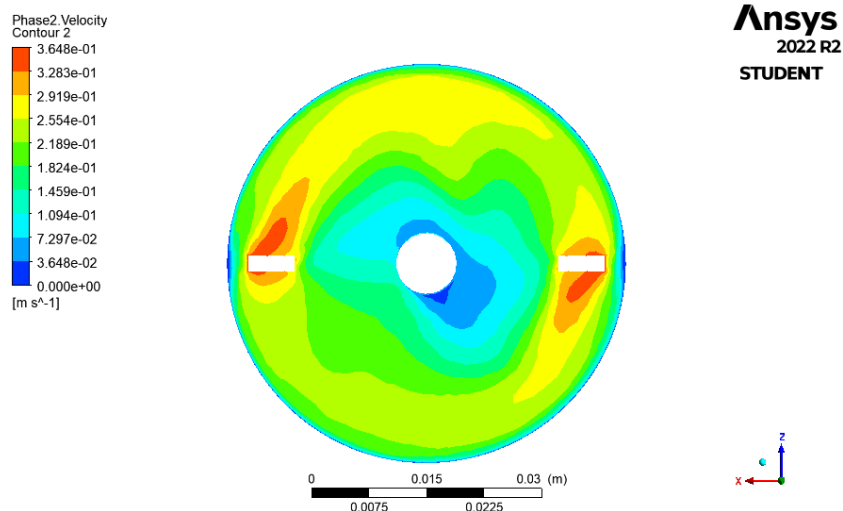
Na vista superior para as simulações com impelidor âncora, é visível em ambos as velocidades de rotação uma menor velocidade junto as paredes e ao centro do tanque, assim como é visto no sistema que utiliza o impelidor quatro pás. Também é notável a região com maior velocidade onde está localizado a trajetória das pás do impelidor. As velocidades máximas foram de 0,439 m/s, para o com 180 rpm, e de 0,365, para o com 150 rpm. Estes campos de velocidade são apresentados na Figura 15 e Figura 16.

Figura 15: Campo de velocidades em vista superior para sistema âncora com rotação de 180 rpm



Fonte: O autor, 2022.

Figura 16: Campo de velocidades em vista superior para sistema âncora com rotação de 150 rpm

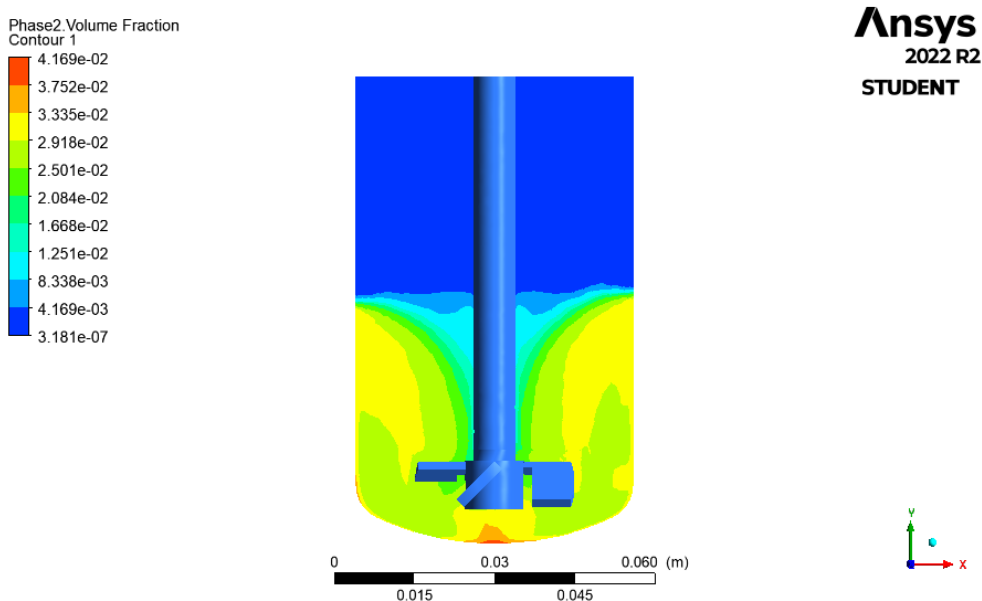


Fonte: O autor, 2022.

Seguindo com a apresentação de resultados, a Figura 17 e a Figura 18 mostram os perfis de concentração de sólidos dispersos nas misturas em vista frontal para os sistemas com impelidor quatro pás. Os valores estão em fração volumétrica.

A Figura 17 apresenta a distribuição da fase sólida em função da sua fração volumétrica do sistema com velocidade de rotação de 180 rpm e impelidor quatro pás. É possível ver o nível bem definido da fase sólida, com a presença do vórtice central igual ao calculado no perfil de velocidade, com uma maior concentração de sólidos próximo a parede e uma redução gradual desta concentração em direção a haste. A simulação apresentou uma região com elevada concentração abaixo do impelidor e próximo ao fundo do reator. Outra zona de com alta fração volumétrica de sólidos foram as paredes. O resultado também demonstrou que nesta rotação existe a formação de vias preferenciais de escoamento de sólidos, em ambos os lados do impelidor, seguindo o fluxo descendente do vórtice central.

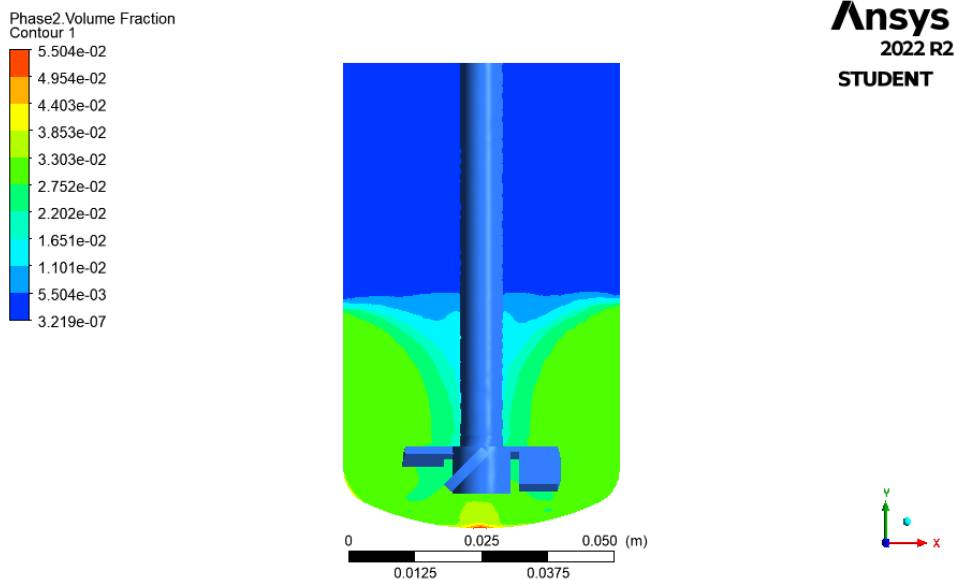
Figura 17: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista frontal para sistema 4 pás com rotação de 180 rpm.



Fonte: O autor, 2022.

A Figura 18 apresenta o perfil de concentração volumétrica de sólidos no sistema com rotação de 150 rpm. É notável a maior homogeneidade na distribuição de sólidos em suspensão neste sistema em relação ao de 180 rpm, mas com uma grande concentração de partículas junto ao fundo abaixo do impelidor. Os resultados mostraram o mesmo perfil de vórtice central do sistema de 180 rpm, mas com a região de menor concentração sólida no centro sendo mais larga. Também a simulação mostra concentração de sólidos em alguns pontos da junto a parede.

Figura 18: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista frontal para sistema 4 pás com rotação de 150 rpm.

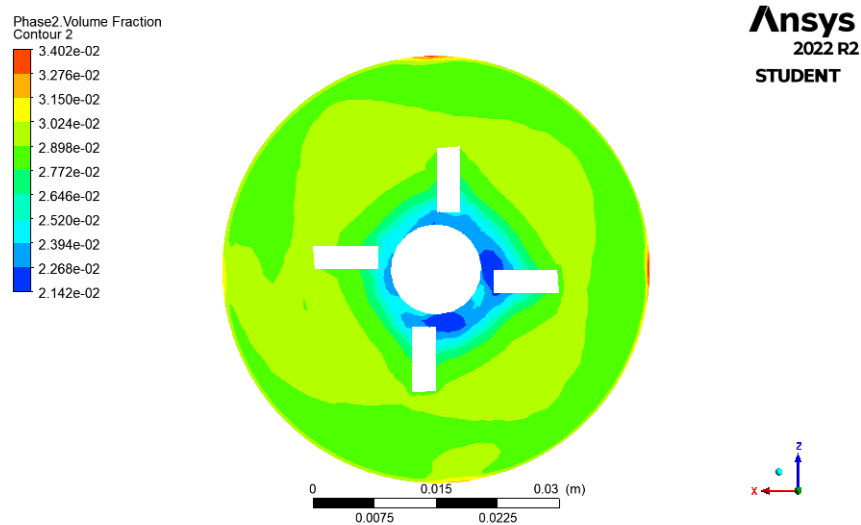


Fonte: O autor, 2022.

As vistas superiores do perfil de concentração volumétrica do tanque com impelidor quatro pás são mostradas a seguir pela Figura 19 e pela Figura 20 para o sistema de 180 rpm e o sistema de 150 rpm, respectivamente. O perfil de distribuição da fração volumétrica de sólidos nas duas situações é muito semelhante, com uma maior concentração em regiões próximas as paredes e menores concentrações em regiões próximas ao impelidor. Os cálculos também mostraram quatro regiões de alta concentração junto as paredes em ambas as simulações.

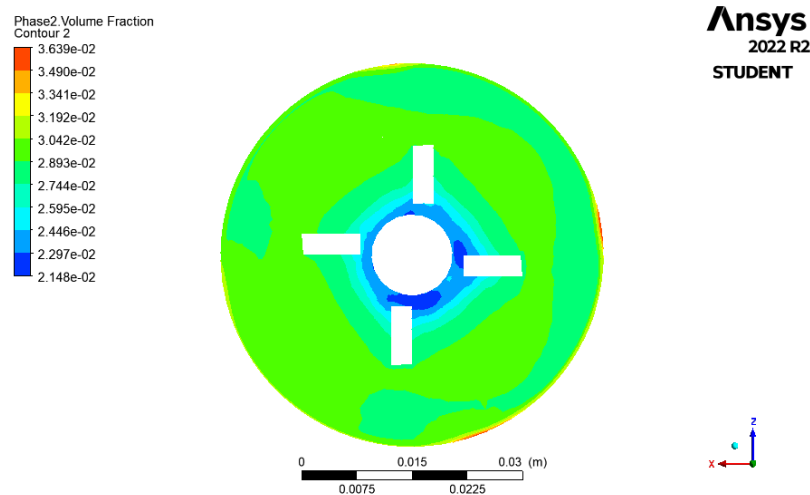


Figura 19: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista superior para sistema 4 pás com rotação de 180 rpm.



Fonte: O autor, 2022.

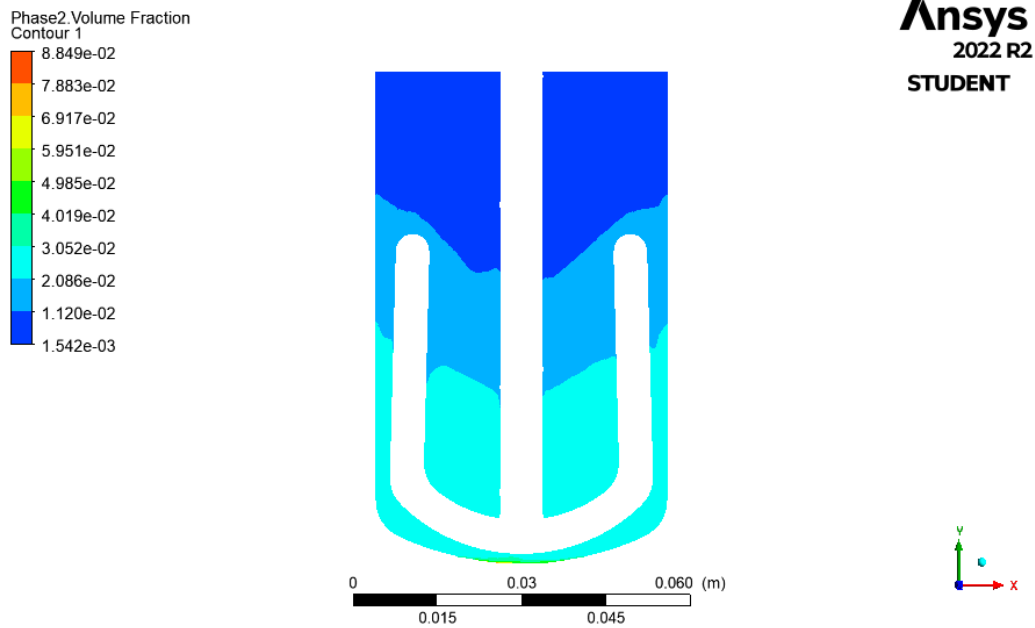
Figura 20: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista superior para sistema 4 pás com rotação de 150 rpm.



Fonte: O autor, 2022.

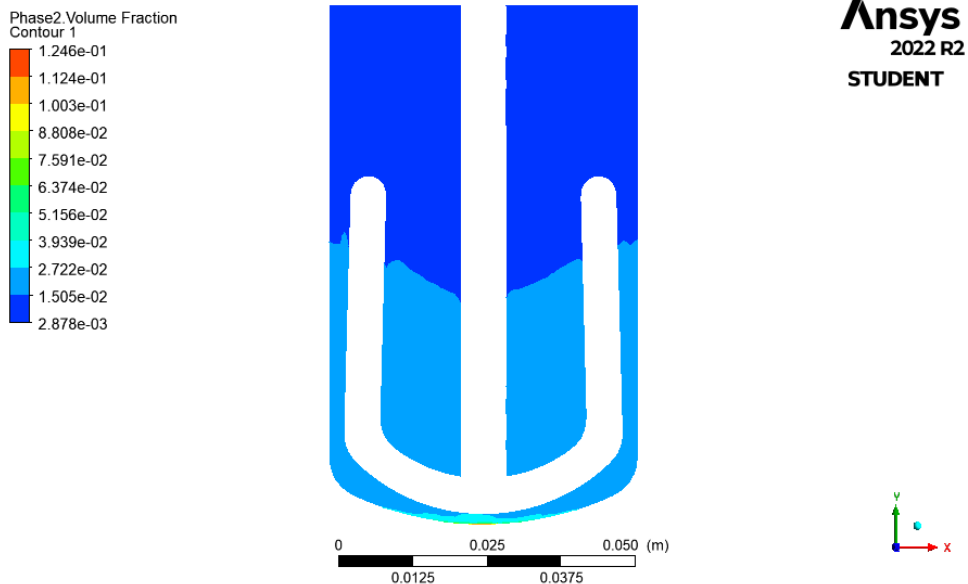
Para o sistema com impelidor âncora a Figura 21 e Figura 22 apresentam os perfis de concentração volumétricas em vista frontal. É notável em ambos os sistemas uma baixa concentração de sólidos ao logo do fluido, com formação de um vórtice central. Além disso, os dois sistemas apresentam um acúmulo de sólidos considerável ao fundo do reator, logo abaixo do impelidor. O sistema com 180 rpm de velocidade de rotação apresenta uma maior dispersão de sólidos em altura, comparado com o de 150 rpm.

Figura 21: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista frontal para sistema âncora com rotação de 180 rpm.



Fonte: O autor, 2022.

Figura 22: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista frontal para sistema âncora com rotação de 150 rpm.

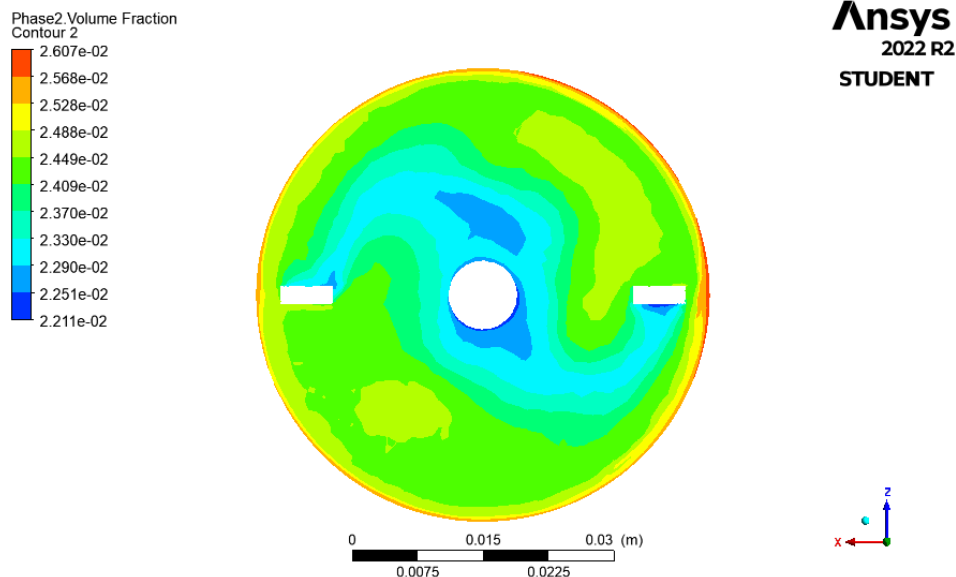


Fonte: O autor, 2022.

Já a vista superior da concentração volumétrica para o sistema com impelidor âncora, na Figura 23 e na Figura 24, mostram para ambos os sistemas uma maior concentração junto as paredes e um gradual diminuição de sólidos na direção ao centro do reator. É notável uma

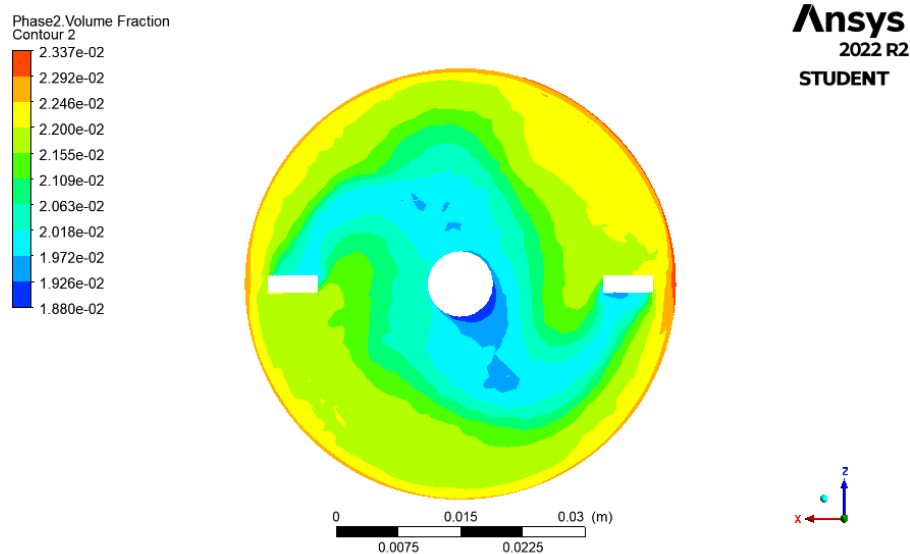
menor concentração de sólidos na região logo atrás das pás do impelidor. O sistema com velocidade de 180 rpm apresenta uma maior intensidade de concentração de sólidos dispersos em função da fração volumétrica quando comparado ao de 150 rpm.

Figura 23: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista superior para sistema âncora com rotação de 180 rpm.



Fonte: O autor, 2022.

Figura 24: Perfil de concentração volumétrica da fase sólida em vista superior para sistema âncora com rotação de 150 rpm.



Fonte: O autor, 2022.

Estes foram os resultados em âmbito geral das simulações dos dois sistemas de mistura estudados. A partir de agora, serão detalhados e discutidos estes resultados com atenção a

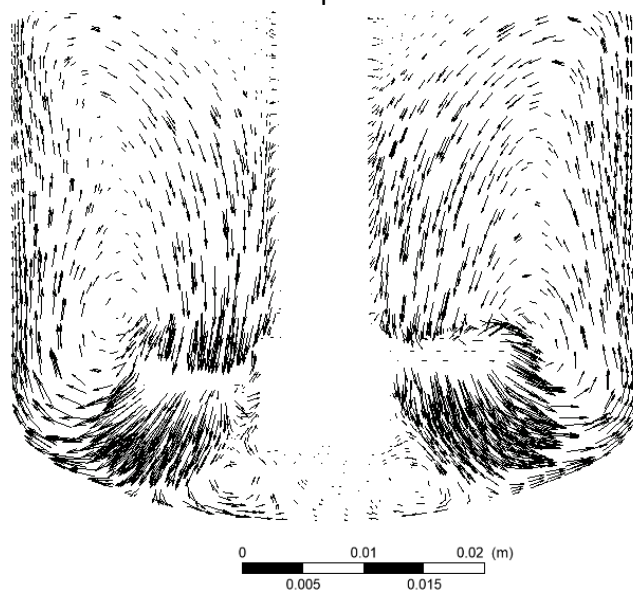
comportamentos específicos observados no escoamento, buscando entender qual a melhor configuração do reator para a esta síntese catalítica em escala laboratorial.

Os resultados mostraram que ambos os sistemas fornecem as mesmas características de escoamento: vórtice central de sólidos, zona de baixa velocidade na região inferior do impelidor, acúmulo de sólidos nas paredes e anomalias de escoamento em pontos das paredes. Podemos concluir que esses aspectos, estando presente em ambos os sistemas, são causados por parâmetros que se mantém constantes como a geometria do impelidor e do casco do reator. A diferença notável entre os dois sistemas é a intensidades destes eventos e da homogeneidade das regiões do reator.

A presença do vórtice central é uma característica conhecida de tanques agitados que utilizam impelidores de pás retas ou inclinadas centralizado e sem a presença de chicanas. Apesar de nas simulações o nível da interface líquido-gás não apresentar grande formação de vórtice, as partículas sólidas acabam sendo mais influenciadas pela força centrípeta e o fluxo tangencial causado pelas pás, já que sua grande concentração está localizada em uma região com maior atuação do impelidor, tendo esta formação maior intensidade na fase sólida. O fluxo tangencial, que é o fluxo responsável por fazer o fluido escoar em círculos ao redor da haste, acaba tendo grande influência na formação do vórtice central justamente por aumentar a força centrípeta.

O fluxo do escoamento causado pelas pás pode ser melhor observado através da Figura 25, que traz as linhas de direção separadas pelo comprimento da seta de acordo com a velocidade. Nota-se o fluxo longitudinal causado por esta geometria de impelidor. A pás aceleram o fluido em direção ao fundo e a parede, então este fluido adquire um escoamento ascendente seguindo as paredes e ao chegar à altura próxima ao limite do vórtice central ele descende em direção ao centro do reator, onde reinicia este fluxo de escoamento nas pás do impelidor. Esta geometria de impelidor com pás inclinadas, é usada em misturadores devido a este fluxo longitudinal que evita a formação de camadas mais densas próximo ao fundo, justamente por fornecer energia que leva as partículas de forma ascendente, favorecendo a homogeneização da mistura.

Figura 25: Campo de velocidades válido para ambos os sistemas.

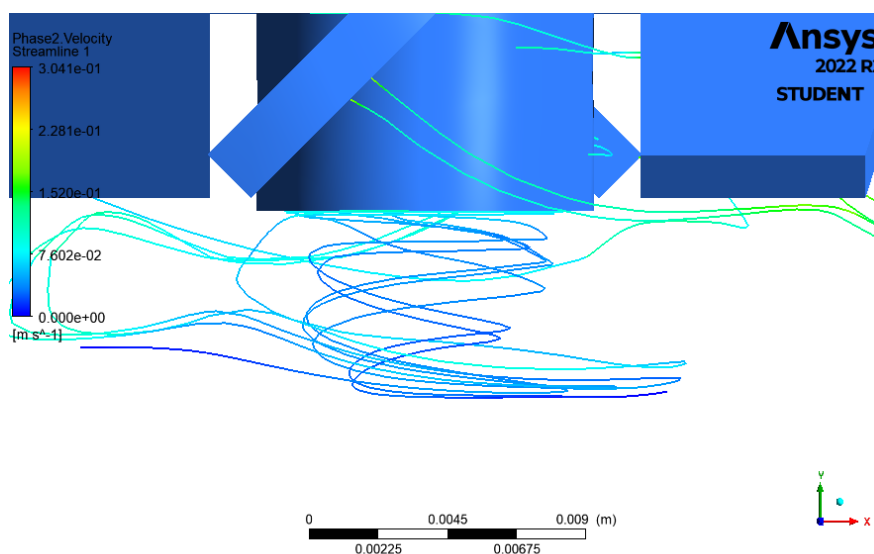


**Ansys**  
2022 R2  
STUDENT

Fonte: O autor, 2022.

Seguindo a análise do campo de velocidades da Figura 25, é notável a formação de dois vórtices na passagem de cada pá, um no canto superior externo e outra no canto inferior interno. Além da presença de uma forte zona de baixa velocidade logo abaixo do centro do impelidor. Esta zona de baixa velocidade representa um vórtice formado pelo fluxo tangencial que é mais bem observado na Figura 26. Como este vórtice está localizado na região de maior concentração de sólidos, é compreensível que as partículas do catalisador após ingressarem neste fluxo do vórtice acabam ficando presas em uma zona de baixa velocidade e consequentemente alta pressão, não conseguindo escapar e se acumulando nesta região e ao fundo do reator. Os resultados qualitativos apresentados pelo laboratório foram justamente que o impelidor quatro pás com maior velocidade de rotação produziram partículas de catalisador mais irregulares. Expandindo a análise e comparando com esta informação, podemos concluir que esta zona inferior de alta pressão é uma das principais causadoras das partículas irregulares encontradas em ambos os testes experimentais, visto que maior concentração das partículas em contato por mais tempo permite a construção de agregados maiores do que o desejado.

Figura 26: Vórtice formado abaixo do centro do impelidor.



Fonte: O autor, 2022.

A Figura 25 também mostra que as pás do impelidor direcionam o fluxo mássico diretamente para as paredes, que como é sabido terá a formação de uma camada limite de escoamento e naturalmente haverá a diminuição da velocidade na parede. Esta menor velocidade facilitará o crescimento de partículas irregulares por aumentar a concentração e o tempo de contato das partículas, assim como foi observado com o vórtice inferior. Esta maior concentração nas paredes poderá levar a formação de um filme de sólidos.

Os dois sistemas de quatro pás apresentaram quatro pontos de menor velocidade nas paredes, diretamente relacionados ao posicionamento das pás do impelidor. Estes pontos de

maior concentração e menor velocidade podem ser vórtices causados pela separação da camada limite, apesar das simulações não deixarem claro isso, devido ao uso de modelos matemáticos simplificados. Estes pontos de baixa velocidade nas paredes e o vórtice central poderiam ser evitados ou diminuídos com o uso de chicanas nas paredes do reator. As chicanas também aumentariam a influência do fluxo radial ao escoamento.

Analisando o escoamento do sistema com impelidor âncora e comparando com os resultados do impelidor quatro pás, é evidente a menor concentração de sólidos nas paredes em ambos os sistemas âncora. Isto se deve ao próprio formato das pás do impelidor âncora, se estendem próximas as paredes do reator evitando uma maior concentração de sólidos no local. Os sistemas com impelidor âncora apresentaram uma zona de baixa velocidade entre o impelido e o fundo do reator da mesma forma que os sistemas com impelidor quatro pás. Esta zona de baixa velocidade cria um vórtice que prende as partículas e favorece o crescimento irregular das mesmas, além de depositá-las no fundo. Outro ponto importante de se mencionar é a turbulência criada na área central dos impelidores âncora devido aos vórtices criados pelas zonas de baixa velocidade, que podem levar a formação de partículas maiores que viriam a precipitar.

De maneira geral os sistemas que utilizaram o impelidor âncora apresentaram uma maior homogeneidade na concentração de sólidos no fluído do que o impelidor quatro pás, em teoria produzindo partículas menos irregulares. Porém, as simulações apresentaram uma grande quantidade de precipitado ao fundo no reator com impelidor âncora, o que não deveria acontecer nesta intensidade, visto que o formato e distância da pá do impelidor acabaria retirando está camada do fundo. Esta informação foi conferida com os resultados qualitativos disponibilizados pelo laboratório dos testes práticos de síntese com este catalisador e as simulações do impelidor âncora apresentaram resultados diferentes da realidade neste ponto, com uma maior precipitação de sólidos. Uma possibilidade para correção deste problema é o uso do modelo Eurler-lagrangiano para a fase sólida no lugar do modelo Euleriano utilizado nestas simulações.

Podemos sugerir que a formação de partículas irregular e não homogêneas poderiam ser causadas pelos vórtices na região inferior dos reatores e pelo acúmulo de sólidos na região das paredes. O sistema com impelidor quatro pás, principalmente o com 180 rpm, sugerem a formação de filmes nas paredes, já que as simulações mostraram uma camada com elevada concentração de sólidos junto as paredes e vias de escoamento com maior fração volumétrica de sólidos. Em ambos as geometrias os sistemas com 150 rpm apresentaram uma maior homogeneidade da mistura, sendo neste caso superiores aos com 180 rpm. Fica uma observação: os sistemas de 150 rpm apresentaram uma maior homogeneidade nos fluxos, porém uma maior quantidade de sólidos já decantados, ou seja, essa menor rotação pode acelerar o processo de precipitação dos sólidos o que poderia aumentar o tamanho das partículas catalíticas. Este processo deve ser investigado em trabalhos futuros.

Comparando os resultados com a literatura, é encontrada uma divergência do que foi apresentado por Costa e Correa (2019) onde é apresentado que maiores velocidades de rotação apresentam melhores misturas. Em segunda análise esta conclusão pode ser válida para misturas térmicas, mas não apresenta o mesmo comportamento em mistura de fases.

Após análises dos resultados, apresenta-se o entendimento que os sistemas com velocidade de rotação de 150 rpm apresentaram uma mistura mais homogênea, o que facilitaria a formação de partículas menores e com diâmetros semelhantes em um reator deste volume. Os sistemas com a mesma geometria apresentaram os mesmos perfis de escoamento para as duas velocidades de rotação, apenas sendo diferenciados pela intensidade da velocidade e concentração. Como a diferença dos resultados não foi tão grande, entende-se que para este processo reativo, com um pequeno volume, a geometria do reator e do impelidor apresentam maior influência na homogeneidade das partículas do que uma diferença de 30 rpm na velocidade de rotação. Para sistemas maiores e mais complexos estas conclusões podem ser diferentes. Em relação a geometrias, pelos resultados das simulações a geometria âncora produz uma melhor homogeneização da mistura para este volume de rotação, porém como já foi explicado este resultado não é validado quando comparado com a realidade.

Os resultados validam a possibilidade do uso do CFD pelo laboratório para a diminuição de gastos com testes experimentais. Este foi um experimento simples, em pequenas proporções, mas serviu como um começo que pode ser expandido com o desenvolvimento do conhecimento em CFD para testes em grande escala. A sugestão para melhores resultados com o impelidor quatro pás é o uso de chicanas para diminuição do vórtice central e de pontos de baixa velocidade nas paredes e o uso de um raspador ou uma lâmina do fundo do reator, embaixo do impelidor, para evitar a formação do vórtice e o acúmulo de sólidos. Não sendo possível estas adaptações, é indicado o uso do impelidor com geometria âncora para melhores resultados em um reator laboratorial com volume de 100 ml.

## 5 Conclusões e Trabalhos Futuros

Este trabalho buscou entender a diferença do perfil de escoamento, principalmente a homogeneidade da fase sólida, entre sistemas com impelidor quatro pás com velocidade de rotação de 150 rpm e 180 rpm, e sistemas com impelidor âncora com as respectivas mesmas velocidades, usados na síntese de catalisador. Para isso, foi utilizado fluidodinâmica computacional.

Além de entender o perfil de escoamento, buscou-se validar o uso das simulações para este perfil de síntese do laboratório, para futuramente reduzir o número de testes experimentais que acabam sendo dispendiosos em tempo e dinheiro.

Os objetivos do trabalho foram cumpridos, mostrando que o uso de simulações é possível e útil para o laboratório em questão, além de ter sido uma ótima introdução ao conhecimento de CFD. As simulações apresentaram boas aproximações da realidade, com exceção do processo de precipitação nos sistemas com impelidor âncora. Pode-se concluir que para este volume de reator e geometria de casco, a velocidade de rotação de 150 rpm apresenta melhores resultados com ambos os impelidores. Seguindo os resultados das simulações o impelidor âncora apresentou uma melhor mistura, porém para reatores de maior volume esta geometria apresentaria dificuldades devido as tensões nas pás causadas pelo seu próprio formato.

Alguns questionamentos e possibilidades ficaram em aberto durante o trabalho que poderão ser melhor explorados em trabalhos futuros, como uma melhor visualização do comportamento do fluido nos quatro pontos de baixa velocidade das paredes no impelidor quatro pás e a maior precipitação do sólido ao fundo na rotação de 150 rpm em ambos os impelidores. Para otimização deste processo de síntese recomenda-se o uso de chicanas evitando formação de vórtice central e uma lâmina ao fundo do reator para quebrar o vórtice inferior formado e evitar acúmulo de sólidos em sistemas com impelidor quatro pás. Caso não seja possível, recomenda-se o uso de impelidor âncora neste reator de 100 ml para evitar estas formações.

Para futuros trabalhos, a sugestão é utilizar modelos matemáticos mais completos, como o LES, para a modelagem da turbulência nestes mesmos sistemas. Outra possibilidade é o uso da abordagem Euler-lagrangiana para a modelagem da fase sólida, tratando a mesma como uma fase discreta. Outro estudo possível é a utilização de impelidores de diferentes geometrias e reatores com maior volume, comparando com o atual trabalho para entender a real influência da geometria na homogeneidade do sistema.



## REFERÊNCIAS

- Choi, H. J., Zullah, M. A., Roh, H. W., Ha, P. S., Oh, S. Y., & Lee, Y. H. (2013). CFD validation of performance improvement of a 500 kW Francis turbine. *Renewable Energy*, *54*, 111–123.
- Maliska, C. R. Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional. 2 ed. Rio de Janeiro: LTC, 1995.
- Markatos, N. C. (1986). *The mathematical modelling of turbulent flows*.
- Hanjalić, K. (1994). Advanced turbulence closure models: a view of current status and future prospects. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, *15*(3). [https://doi.org/10.1016/0142-727X\(94\)90038-8](https://doi.org/10.1016/0142-727X(94)90038-8)
- Shih, T.-H., Jiang, Z. ", & Lumleyb, J. L. (1995). Computer methods in applied mechanics and engnsering A new Reynolds stress algebraic equation model. In *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg* (Vol. 125).
- Argyropoulos, C. D., & Markatos, N. C. (2015). Recent advances on the numerical modelling of turbulent flows. In *Applied Mathematical Modelling* (Vol. 39, Issue 2). <https://doi.org/10.1016/j.apm.2014.07.001>
- Sahu, A. K., Kumar, P., Patwardhan, A. W., & Joshi, J. B. (1999). CFD modelling and mixing in stirred tanks. *Chemical Engineering Science*, *54*(13–14). [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(98\)00334-0](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(98)00334-0)
- Yeoh, S. L., Papadakis, G., & Yianneskis, M. (2005). Determination of mixing time and degree of homogeneity in stirred vessels with large eddy simulation. *Chemical Engineering Science*, *60*(8-9 SPEC. ISS.). <https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.10.048>
- Derksen, J. (2001). Assessment of large eddy simulations for agitated flows. *Chemical Engineering Research and Design*, *79*(8), 824–830. <https://doi.org/10.1205/02638760152721334>
- Zadghaffari, R., Moghaddas, J. S., & Revstedt, J. (2010). Large-eddy simulation of turbulent flow in a stirred tank driven by a Rushton turbine. *Computers and Fluids*, *39*(7). <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2010.03.001>
- Bakker, A., Oshinowo, L. M., & Marshall, E. M. (2000). The Use of Large Eddy Simulation to Study Stirred Vessel Hydrodynamics. In *10th European Conference on Mixing*. <https://doi.org/10.1016/b978-044450476-0/50032-7>
- Murthy, B. N., Ghadge, R. S., & Joshi, J. B. (2007). CFD simulations of gas-liquid-solid stirred reactor: Prediction of critical impeller speed for solid suspension. *Chemical Engineering Science*, *62*(24). <https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.07.005>

Murthy, B. N., & Joshi, J. B. (2008). Assessment of standard  $k - \epsilon$ , RSM and LES turbulence models in a baffled stirred vessel agitated by various impeller designs. *Chemical Engineering Science*, 63(22). <https://doi.org/10.1016/j.ces.2008.06.019>

Costa Júnior, C. C., & Correa, L. J. (2019). Avaliação de parâmetros de desempenho em reator convencional: aplicação em processos industriais. *Research, Society and Development*, 8(3), e3783745. <https://doi.org/10.33448/rsd-v8i3.745>

Guidolini, I. P. Análise da fluidodinâmica e do efeito de misturadores estáticos em um reator tubular de polimerização usando ferramentas de CFD. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, p.88. 2009.

Rosa, H. M. P., & Emerick, B. S. (2020). CFD simulation on centrifugal pump impeller with splitter blades. *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental*, 24(1), 3–7. <https://doi.org/10.1590/1807-1929/agriambi.v24n1p3-7>

Hoseini, S. S., Najafi, G., Ghobadian, B., & Akbarzadeh, A. H. (2021). Impeller shape-optimization of stirred-tank reactor: CFD and fluid structure interaction analyses. *Chemical Engineering Journal*, 413. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.127497>

Catálogo Mettler Toledo, 2022.

ANSYS® Fluent® Theory Guide, 2022.

ANSYS® Fluent® Users Guide, 2022.

Lahiri, S. K., & Ghanta, K. C. (2010). Slurry flow modelling by CFD. *Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly*, 16(4), 329–343. <https://doi.org/10.2298/CICEQ091030034L>

Versteeg, H. K. & Malalasekera, W. An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method. 2 ed. Harlow: Pearson Education Limited, 1995.

Concentration, Heat and Momentum (CHAM), Cham. Disponível em: <https://www.cham.co.uk/phoenics.php>  
Acesso em: 05 dez. 2022.



