



UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

HUMBERTO GERALDO LOPES FERNANDES JUNIOR

**ANÁLISE DE DESEMPENHO DE CHICANAS PARA TANQUES AGITADOS: UMA
ABORDAGEM VIA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)**

JOÃO PESSOA

2024

HUMBERTO GERALDO LOPES FERNANDES JUNIOR

**ANÁLISE DE DESEMPENHO DE CHICANAS PARA TANQUES AGITADOS: UMA
ABORDAGEM VIA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado como requisito parcial à
obtenção do título de Bacharelado em
Engenharia Química pela Universidade
Federal da Paraíba.

Orientador: Prof. Dr. Arioston Araujo de
Morais Júnior

JOÃO PESSOA

2024

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

F363a Fernandes Junior, Humberto Geraldo Lopes.
Análise de desempenho de chicanas para tanques
agitados: uma abordagem via fluidodinâmica
computacional (CFD) / Humberto Geraldo Lopes Fernandes
Junior. - João Pessoa, 2024.
52 f. : il.

Orientação: Arioston Araujo de Moraes Júnior.
TCC (Graduação) - UFPB/CT.

1. CFD. 2. tanques agitados. 3. chicanas. 4.
eficiência energética. 5. indústria farmacêutica. I.
Moraes Júnior, Arioston Araujo de. II. Título.

UFPB/CT

CDU 66(043.2)

HUMBERTO GERALDO LOPES FERNANDES JUNIOR

ANÁLISE DE DESEMPENHO DE CHICANAS PARA TANQUES AGITADOS: UMA
ABORDAGEM VIA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)

Trabalho de Conclusão de Curso como
requisito parcial à obtenção do título de
Bacharelado em Engenharia Química
pela Universidade Federal da Paraíba.

Aprovado em: 16 / outubro / 2024.

BANCA EXAMINADORA

Documento assinado digitalmente



ARIOSTON ARAUJO DE MORAIS JUNIOR

Data: 16/10/2024 16:10:14-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Arioston de Moraes Júnior (Orientador)

Universidade Federal da Paraíba (UFPB)

Documento assinado digitalmente



LEOPOLDO OSWALDO ALCAZAR ROJAS

Data: 24/10/2024 15:56:27-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Leopoldo Oswaldo Alcazar Rojas

Universidade Federal da Paraíba (UFPB)

Documento assinado digitalmente



MARCUS GODOLPHIM DE CASTRO NEVES

Data: 16/10/2024 16:45:57-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

M.Sc. Marcus Godolphim Castro Neves

CAEXPERTS

Documento assinado digitalmente



JOSE CARLOS DINIZ FILHO

Data: 25/10/2024 17:28:25-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Eng. Jose Carlos DINIZ FILHO

Universidade Federal da Paraíba (UFPB)

AGRADECIMENTOS

Gostaria de expressar minha mais profunda gratidão a todas as pessoas que desempenharam um papel essencial na conclusão deste trabalho de conclusão de curso. Este momento representa não apenas o final de uma etapa acadêmica, mas também a concretização de um sonho que não seria possível sem o apoio de muitos ao longo dessa jornada.

Primeiramente, quero agradecer à minha família, que sempre foi minha base e fonte de força. Minha mãe, Márcia Virginia Guedes Lopes, meu pai, Humberto Geraldo Lopes Fernandes, e meus irmãos, José Inácio Guedes Lopes e Maria Rita Guedes Lopes, foram pilares fundamentais para que eu chegasse até aqui. O amor incondicional, o incentivo contínuo e a confiança que depositaram em mim foram essenciais para que eu superasse cada desafio e alcançasse esta conquista.

Aos meus amigos, minha gratidão é igualmente profunda. Agradeço por compreenderem minhas ausências, ouvirem minhas preocupações e estarem sempre presentes nos momentos em que mais precisei de apoio. Sua amizade e apoio foram valiosos ao longo desta caminhada. Em especial, agradeço a Carlos, Jhonatas, Moisés, Priscila, Paloma, Paulo, Adriano, Giorgio e Ernesto, que estiveram mais próximos durante esse período desafiador. Cada um de vocês, com sua compreensão, incentivo e companhia, foi essencial para que eu chegasse ao fim desta jornada.

Agradeço a toda a equipe da CAEXPERTS pelas oportunidades e pelo ambiente enriquecedor que proporcionaram ao longo deste trabalho. Em especial, expresso minha gratidão aos meus gestores e líderes Marcus Castro Neves, Otavio Teles e Ricardo Barros, por acreditarem em meu potencial e confiarem no meu desenvolvimento. Sou grato pelo suporte constante, pelas orientações valiosas e pelo incentivo ao uso dos softwares STAR-CCM+ e Solid Edge, essenciais para este trabalho, o qual foi realizado, em parte, em colaboração com a CAEXPERTS.

Gostaria também de expressar minha gratidão à comunidade de CFD, e em especial à comunidade do OpenFOAM, tanto no Discord quanto no Fórum. Vocês foram mais do que simples colegas de troca de conhecimento técnico; foram

verdadeiros mentores ao longo desta jornada. Agradeço pela paciência em tirar dúvidas, pela generosidade em compartilhar conhecimento, e por me ensinar não apenas sobre CFD, mas também sobre o que é ser um engenheiro. O apoio constante e as palavras de encorajamento, especialmente nos momentos mais difíceis, me deram forças para seguir em frente e não desistir. Aprendi muito com vocês e espero continuar aprendendo cada vez mais. Minha trajetória até aqui não teria sido possível sem a colaboração e o espírito dessa comunidade tão inspiradora, e sou profundamente grato por ter feito parte dela.

Minha gratidão também se estende aos meus professores e orientadores, que tiveram um papel fundamental no meu desenvolvimento acadêmico. Agradeço especialmente ao Prof. Dr. Arioston Araújo de Moraes Júnior, cuja orientação e conhecimento foram cruciais para a construção deste trabalho. Seu feedback crítico e direcionamento ajudaram a moldar não apenas o projeto, mas também meu crescimento como estudante e profissional.

Por fim, gostaria de agradecer a todos aqueles que, de alguma forma, contribuíram para a realização deste trabalho, mesmo que de maneira indireta. Cada conversa, cada conselho e cada gesto de apoio tiveram um impacto significativo. Este TCC representa o resultado de um esforço coletivo, e sou profundamente grato por cada pessoa que fez parte dessa trajetória. Muito obrigado por me acompanharem e apoiarem nesta jornada, que não teria sido possível sem vocês.

“Eu tenho dito “CFD não é para todos”. E eu vou dizer “CFD não é para todos os campos ou produtos”. Então você pode se concentrar no desenvolvimento da tecnologia e ser capaz de ver o impacto e o produto.”

John C. Chien

RESUMO

Este trabalho apresenta uma abordagem via CFD para a análise de desempenho de chicanas com distintas geometrias em tanques agitados, utilizados na indústria farmacêutica. O objetivo principal é desenvolver e otimizar modelos geométricos de chicanas, visando melhorar a eficiência da mistura e minimizar o consumo de energia em processos de agitação. Utilizando a técnica de Fluidodinâmica Computacional (CFD) no software STAR-CCM+, diferentes configurações de chicanas foram simuladas e comparadas com chicanas tradicionais, como as geometrias Beavertail e Fin. A metodologia adotada inclui a modelagem de geometrias em Design Assistido por Computador (CAD), a geração de malhas computacionais refinadas e a aplicação de condições de contorno para analisar o comportamento do escoamento. Variáveis como o número de potência, perfis de velocidade, energia cinética turbulenta e dissipação de energia foram avaliados. Os resultados encontrados demonstram que as novas geometrias, W-Baffle, WT-Baffle e especialmente a WTC-Baffle, proporcionam ganhos significativos em termos de eficiência energética e homogeneidade da mistura, representando uma melhoria em relação aos modelos convencionais. Essas inovações podem contribuir para processos industriais mais eficientes e sustentáveis na produção farmacêutica.

Palavras-Chave: CFD, tanques agitados, chicanas, eficiência energética, indústria farmacêutica.

ABSTRACT

This work presents a CFD approach for the performance analysis of baffles with different geometries in stirred tanks, used in the pharmaceutical industry. The main objective is to develop and optimize baffle geometric models, improving mixing efficiency and minimizing energy consumption in upgrading processes. Using the Computational Fluid Dynamics (CFD) technique in the STAR-CCM+ software, different baffle configurations were simulated and compared with traditional baffles, such as the Beavertail and Fin geometries. The adopted methodology includes the modeling of geometries in Computer Aided Design (CAD), the generation of refined computational meshes and the application of boundary conditions to analyze the flow behavior. Variables such as power number, velocity profiles, turbulent kinetic energy and energy dissipation were evaluated. The results found demonstrate that the new geometries, W-Baffle, WT-Baffle and especially the WTC-Baffle, provide significant gains in terms of energy efficiency and mixing homogeneity, representing an improvement over conventional models. These innovations can contribute to more efficient and sustainable industrial processes in pharmaceutical production.

Keywords: CFD, stirred tanks, baffles, energy efficiency, pharmaceutical industry.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Diferentes tipos de chicanas.	30
Figura 2 –	Metodologia do trabalho desenvolvida.....	32
Figura 3 –	Esquemática das partes geometria.	34
Figura 4 –	Geometria e dimensões do tanque, cilindro e impelidor.	35
Figura 5 –	Geometria e dimensões das chicanas: (a) Beavertail; (b) Fin; (c) W; (d) WT; (e) WTC.	35
Figura 6 –	Design da malha para as geometrias: (a) Impelidor, (b) zona rotativa, (c) chicana, (d) camada de inflexão	36
Figura 7 –	Esquema de condição de contorno.	37
Figura 8 –	Convergência variável: (a) resíduos; (b) torque.	38
Figura 9 –	Perfil de velocidade e streamline verticais para as chicanas: (a) Fin; (b) Beavertail; (c) W-Baffle; (d) WT-Baffle; (e) WTC-Baffle.	40
Figura 10 –	Perfil de velocidade horizontal para as chicanas: (a) Fin; (b) Beavertail; (c) W-Baffle; (d) WT-Baffle; (e) WTC-Baffle.	45
Figura 11 –	Perfil de energia cinética turbulenta vertical para as chicanas: (a) Fin; (b) Beavertail; (c) W-Baffle; (d) WT-Baffle; (e) WTC-Baffle.	46
Figura 12 –	Perfil de energia cinética turbulenta horizontal para as chicanas: (a) Fin; (b) Beavertail; (c) W-Baffle; (d) WT-Baffle; (e) WTC-Baffle.	48
Figura 13 –	Perfil de dissipação turbulenta vertical para as chicanas: (a) Fin; (b) Beavertail; (c) W-Baffle; (d) WT-Baffle; (e) WTC-Baffle.	49
Figura 14 –	Perfil de dissipação turbulenta horizontal para as chicanas: (a) Fin; (b) Beavertail; (c) W-Baffle; (d) WT-Baffle; (e) WTC-Baffle.	
	Fonte: o autor	

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 -	Discretizações termos espaciais usando FVM.....	19
Tabela 2 -	Parâmetros camada de inflexão.....	25
Tabela 3 -	Parâmetros das condições de contorno.....	37
Tabela 4 -	Independência de malhas chicanas Beavertail e Fin.....	38
Tabela 5 -	Experimental e simulado para chicanas Beavertail e Fin.....	41
Tabela 6 -	Independência de malha para chicanas W-Baffle, WT-Baffle e WTC-Baffle.	42

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	13
1.1	OBJETIVO	15
1.1.1	OBJETIVOS GERAL.....	15
1.1.2	OBJETIVO ESPECÍFICOS.....	15
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	16
2.1	EQUAÇÕES GOVERNANTES.....	16
2.2	TURBULÊNCIA.....	17
2.3	MÉTODOS NUMÉRICO.....	23
2.4	TANQUES AGITADOS.....	29
2.4.1	IMPELIDORES.....	30
2.4.2	CHICANAS.....	31
3	METODOLOGIA	31
3.1	GEOMETRIA	33
3.2	MALHA	34
3.3	SOLUÇÃO NUMÉRICA	37
3.4.	MRF.....	39
3.5.	CONVERGENCIA.....	39
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	41
4.1	NÚMERO DE POTÊNCIA.....	41
4.1.1	Validação.....	41

4.1.2	Análise novas chicanas.....	42
4.2	CAMPOS DE VARIÁVEIS.....	43
5	CONCLUSÕES	49
	REFERÊNCIAS.....	51

1.INTRODUÇÃO

Nos últimos 10 a 15 anos, a dinâmica de fluidos computacional (CFD) consolidou-se como uma ferramenta essencial na indústria de processos, tanto para o desenvolvimento de novos métodos quanto para a otimização dos já existentes. Nas indústrias química, mineral e de tratamento de águas, os tanques de agitação mecânica são amplamente empregados, desde simples misturas de líquidos até processos multifásicos complexos, como as misturas gás-líquido ou sólidos-líquido. A fim de compreender os fenômenos intrínsecos nesses tanques, é necessário explorar tanto os campos de escoamento monofásicos e bifásicos quanto às características de turbulência envolvidas (AUBIN; FLETCHER; XUERE, 2004).

A indústria farmacêutica, em particular, enfrenta desafios crescentes devido à globalização, à demanda por ambientes mais limpos, à pressão por maior eficiência e à necessidade de reduzir o tempo de lançamento de novos produtos no mercado. Métodos tradicionais, como a transição gradual de escala laboratorial para produção industrial, já não são suficientes. A necessidade de prototipagem e análises rápidas tornou-se crucial, e para enfrentar essas demandas, a inovação deve estar presente em todas as etapas do desenvolvimento de novos produtos (PORDAL; MATICE; FRY, 2002).

Nesse contexto, a integração da CFD permite encurtar os ciclos de desenvolvimento, otimizar processos existentes, reduzir o consumo de energia e acelerar o tempo de lançamento no mercado. Considerando que as operações na indústria farmacêutica envolvem grandes volumes de fluidos, mesmo pequenas melhorias na eficiência podem resultar em economias significativas. Assim, é vital que equipes de pesquisa, desenvolvimento e produção estejam familiarizadas com as vantagens do CFD para incorporá-las ao processo industrial (PORDAL; MATICE; FRY, 2002).

Este estudo concentra-se na aplicação da CFD em tanques agitados na indústria farmacêutica, focando na modelagem e simulação de componentes como agitadores e chicanas. O objetivo é encontrar o design geométrico e físico mais eficiente para as chicanas, compreendendo sua dinâmica e alcançando a melhor

configuração de otimização. Para isso, utilizaremos o software STAR-CCM+ para simular diferentes geometrias e convergir em uma "chicana ideal".

Diversos autores já realizaram estudos com tanques agitados: Oshinowo et al. (2000) analisaram a distribuição de velocidade tangencial usando modelos de turbulência como $k-\epsilon$, RNG $k-\epsilon$ e RSM em um vaso defletor; Siriasitthichoke et al. (2022) investigaram o número de potência (Po) em tanques com impulsor RBI e defletores usados na indústria farmacêutica, correlacionando Po com a área dos defletores; e Rielly, Habib e Sherlock (2007) avaliaram o desempenho de um impulsor de lâmina curva em um vaso de base cônica, analisando a mistura e a suspensão de sólidos com simulações de CFD. Além desses parâmetros/variáveis de processo, a literatura é quase inexistente quando se trata em analisar diferentes tipos de geometria de chicanas. Diferentes tipos de fluidos, porém utilizou-se um fluido com propriedades físicas iguais às da água.

Em resumo, o presente estudo visa proporcionar uma compreensão aprofundada do comportamento de tanques agitados, abordando a física dos fluidos, métodos numéricos e turbulência, contribuindo para a otimização dessa tecnologia crucial na indústria farmacêutica.

1.1. OBJETIVOS

1.1.1. OBJETIVOS GERAIS

Desenvolver um protótipo de chicana otimizado para agitadores da indústria farmacêutica, utilizando uma combinação de softwares CFD e CAD. O objetivo é analisar o desempenho do novo protótipo em comparação com chicanas já existentes no mercado, visando melhorar a eficiência da mistura e reduzir o consumo de energia em processos de agitação.

1.1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Desenvolvimento do modelo do tanque agitado e seus componentes em CFD e CAD (criação do CAD para cada chicana em estudo e simulação com

software de CFD, aplicando a abordagem k-omegaSST, estado-estacionario e MRF)

- Projetar e avaliar a implementação de novas chicanas mediante ao numero de potencia e a física de fluxo;
- Avaliação de testes de independência de malha;
- Avaliação do número de potência para chicanas Fin e Beavertail, comparando com os dados experimentais mediante literatura;
- Avaliação do número de potência para novas chicanas e comparação com as chicanas convencionais.
- Avaliação e comparação dos planos horizontal e vertical para o perfil de velocidade, energia cinética turbulenta e dissipação de energia, para cada uma das chicanas utilizadas.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Nessa parte do trabalho aborda-se sobre a base teórica para entendimento do estudo. Primeiramente, é abordado as equações governantes e em conjunto com a abordagem de tanques agitados. Em seguida, é citada a metodologia CFD em volumes finitos.

2.1. EQUAÇÕES GOVERNANTES

Na abordagem euleriana, a descrição do campo de fluido é focada em uma certa localização fixa no espaço e suas propriedades mudam conforme o tempo passa e o fluido flui através desta localização. O valor de uma quantidade arbitrária ϕ é governado pela seguinte equação: (KE, 2022)

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = - \underbrace{\nabla \cdot (\rho u \phi)}_{\text{acúmulo}} + \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi)}_{\text{convecção}} + \underbrace{S_{\phi}}_{\text{difusão}} \quad (1)$$

termo fonte

A equação de conservação de massa pode ser derivada substituindo ϕ por unidade e reconhecendo que não há geração/consumo ou difusão de massa total:

$$\frac{\partial(\rho)}{\partial t} = - \nabla \cdot (\rho v) \quad (2)$$

A equação de conservação do momento, na qual o trabalho realizado pela pressão e gravidade foi levado em consideração, pode ser derivada substituindo ϕ por u e contabilizando as forças adicionais:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} = - \nabla \cdot (\rho u u) + \nabla \cdot \tau - \nabla p + \rho g \quad (3)$$

Para fluido Newtoniano, o tensor de tensão viscosa τ é definido pela seguinte expressão:

$$\tau = \mu \left[(\nabla u) + (\nabla u)^T \right] - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot v) I \quad (4)$$

Todos os materiais reais apresentam uma estrutura molecular discreta que influencia suas propriedades macroscópicas. Na escala molecular, por exemplo, à medida que um sistema fluido se movimenta, seus componentes moleculares não acompanham o escoamento de forma organizada segundo as forças externas. Na realidade, estas forças externas se propagam pelo fluido molécula a molécula, em um transporte difusivo; o que significa colisão e cisalhamento entre os elementos. Essa interação entre os componentes microscópicos de um sistema gera uma

resistência ao escoamento. A presença de τ , a tensão cisalhante a responsável pelo número de variáveis independentes serem maiores que o número de equações. (MACIEL, 2013)

O papel da pressão nas equações de Navier-Stokes com densidade constante, requer mais comentários. Primeiro, observamos que as tensões isotrópicas e as forças conservadoras (gravitacionais) têm o mesmo efeito, que é expressão pelo gradiente de pressão. Portanto as forças gravitacionais não têm efeito sobre o campo de velocidade e sobre o campo de pressão. Podemos estar acostumados a pensar na pressão como uma variável termodinâmica, relacionada a densidade e a temperatura por uma equação de estado. No entanto, para fluxos de densidades constantes, não há conexão entre pressão e densidade. (POPE, 2001)

2.2. TURBULÊNCIA

Uma grande maioria dos fluxos naturais e fluxos encontrados em aplicações de engenharias aplicações são de fato turbulentas. A maioria desses fluxos turbulentos é limitada por um ou mais superfícies sólidas ao longo das quais uma camada limite se desenvolve (Srinath; 2017).

O fluxo de fluido pode ser classificado como laminar ou turbulento. Nos fluxos laminares, o movimento das partículas do fluido é muito ordenado, com o fluido se movendo em camadas paralelas. Os fluxos turbulentos, por outro lado, perdem o padrão de fluxo ordenado com movimentos flutuantes nítidos e irregulares no espaço e no tempo. A transição para a turbulência é gerada devido ao desenvolvimento de instabilidades a partir de um fluxo laminar. Essas instabilidades continuam a se desenvolver quando as forças inerciais no fluxo crescem maiores que as forças viscosas, resultando em última análise na instabilidade do campo de fluxo.(Srinath; 2017)

Há diversas maneiras de observar fluxos turbulentos como uma fumaça em uma chaminé, água em um rio ou queda de água ou o alto movimento do ar. Observamos imediatamente que em uma queda de água o fluxo é instável, irregular, randômico e caótico. Na engenharia, aplicações de fluxos turbulentos são prevalentes, porém menos visíveis. Em processos de líquidos ou gases como bombas, compressores, tubulações, etc., os fluxos são geralmente turbulentos. A

mistura de combustíveis e ar em motores, caldeiras e fornos e misturas de reagentes em reatores químicos ocorrem em fluxos turbulentos (POPE,2001).

Fluxos turbulentos podem frequentemente ser observados a partir de fluxos laminares com o aumento do número de Reynolds. Isso acontece porque pequenas perturbações ao fluxo não são mais amortecidas pelo fluxo, mas começam a crescer retirando energia do fluxo laminar original.(William K. George,2013)

Escoamentos turbulentos são caracterizados pelas seguintes propriedades: (FERZIGER; PERIĆ; STREET, 2019)

- Altamente instáveis
- Tridimensionais
- Contém uma grande quantidade de vorticidade
- A turbulência aumenta à medida que as taxas na qual as quantidades conservadas são agitadas. A agitação é um processo no qual parcelas de fluido com diferentes concentrações de pelo menos uma das propriedades conservadas são postas em contato. A mistura real é realizada por difusão. Esse processo é chamado difusão turbulenta
- A turbulência põe em contato fluidos de diferentes quantidades de momento. A redução dos gradientes de velocidade devido a ação da viscosidade reduz a energia cinética do escoamento dentre outras palavras, a mistura é um processo dissipativo. A energia perdida é irreversivelmente convertida em energia interna do fluido.
- Os fluxos turbulentos flutuam em uma ampla faixa de escalas de comprimento e tempo.

A teoria de turbulência mais aceita é baseada no conceito de “cascata de energia” desenvolvido por Kolmogorov. De acordo com essa teoria, a turbulência é composta de vórtices de tamanhos diferentes, cada um possuindo uma certa quantidade de energia que depende de sua dimensão. Os vórtices maiores se desfazem transferindo suas energias para redemoinhos de menor tamanho em um processo em cadeia pelo qual o menor recém-formado vórtice sofre processos de separação semelhantes e transferem sua energia para vórtices ainda menores. Este processo de separação continua até que o menor tamanho de redemoinho possível seja alcançado. Os menores vórtices são de escalas nas quais a viscosidade molecular é muito eficaz na dissipação da energia cinética turbulenta. (MOUKALLED et al., 2016)

A computação e visualização da turbulência abrange um tópico chamado de modelagem turbulenta, que consiste em discretizar as equações de Navier-Stokes para os propósitos de turbulência. Diversos modelos são usados para modelar as escalas turbulentas, com certas características e vantagens. A descrição desses modelos foram listados na Tabela 1.

Tabela 1. Modelos de turbulências.

MODELOS DE TURBULÊNCIAS	
Modelos	Descrição
Simulação Numérica Direta - <u>DNS</u>	- Grande custo computacional - Precisão elevada - Cálculo de todos os vortex
Simulação das Grandes Escalas - <u>LES</u>	- Custo computacional médio - Precisão média - Cálculo somente os grandes vórtices
Simulação Numérica das Médias de Reynolds - <u>RANS</u>	- Análise estatística da turbulência - Baixo custo computacional - Aplicado a escala industrial

Fonte: o autor.

Pelo fato da turbulência consistir de flutuações randômicas, usa-se uma abordagem estatística da turbulência, propondo que todas as quantidades físicas são expressas como a soma da média e as flutuações das partes (WILCOX, 2001). Abrangendo a análise de decompor variáveis físicas através das equações de Navier-Stokes formula-se a simulação das médias de Reynolds (RANS).

2.2.1 Simulação Numérica das Médias de Reynolds (RANS)

Inicia-se com a decomposição de uma variável ϕ no tempo t e na posição x , sendo uma variável de interesse (v, p, e, h, T, ρ, etc), em médias dos valores ($\bar{\phi}(x, t)$) e nas flutuações ($\phi'(x, t)$): (MOUKALLED et al., 2016)

$$\phi(x, t) = \bar{\phi}(x, t) + \phi'(x, t) \quad (5)$$

O método RANS baseia nas médias temporais, em um intervalo de tempo T , que são definidas por:

$$\bar{\phi}(x, t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \phi(x, t) dt \quad (6)$$

Por consequência pode-se tomar a média temporal da equação 1, de forma que a flutuação se torna zero $\overline{\phi'(x, t)} = 0$, uma vez que a média da média é a própria média $\overline{\overline{\phi(x)}} = \overline{\phi(x)}$ (ILHA; COLAÇO; FREIRE, 2006).

Assumindo um fluido Newtoniano incompressível, usamos as equações da continuidade e de Navier-Stokes, Eq. (2) e (3), para tomar a média temporal, além de aplicar as propriedades mencionadas, junto com a decomposição dos termos, as equações são transformadas em:

$$\frac{\partial[\rho(\overline{u+u'})]}{\partial x_i} = \frac{\partial[\rho\overline{u}]}{\partial x_i} = 0 \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial[\rho(\overline{u+u'})]}{\partial t} + \frac{\partial[\rho(\overline{u+u'})(\overline{u+u'})]}{\partial x_i} &= - \frac{\partial(\overline{p+p'})}{\partial x_i} + \frac{\partial(\overline{\tau+\tau'})}{\partial x_i} = \\ \dots &= \frac{\partial[\rho(\overline{uu+u'u'})]}{\partial x_i} = - \frac{\partial(\overline{p})}{\partial x_i} + \frac{\partial(\overline{\tau})}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (8)$$

A equação 7 e 8, portanto, é denominada de equações medias de Reynolds (RANS - Reynolds Averaged Navier-Stokes). Observe que esta equação é igualmente a equação de navier-stokes para escoamentos laminares e estacionários, porém com um termo que representa a contribuição turbulenta ao escoamento médio $\overline{u'u'}$.

Nota-se que os efeitos turbulentos se dão na forma de tensões adimensionais, $(\overline{u'u'})$, a tensão viscosa do escoamento médio, $(\overline{\tau})$, de modo que a tensão efetiva passa a ser:

$$\tau_{eff} = \overline{\tau} - \overline{u'u'} \quad (9)$$

De modo que essa nova tensão, τ_{eff} , passa a ser chamadas de tensões de Reynolds, ou seja, os termos de transporte médio de quantidade de movimento devido às flutuações turbulentas de velocidade. Essas tensões são cruciais para a modelagem dos escoamentos turbulentos, afinal, elas representam as flutuações estocásticas nas equações de Reynolds. Entretanto, a incorporação dos termos de flutuações resulta em um conjunto de dez variáveis independentes, para apenas três equações governantes. Esse fato caracteriza o chamado de problema de fechamento turbulento (ILHA; COLAÇO; FREIRE, 2006).

A modelagem direta do tensor tensão de Reynolds é baseada na hipótese de Boussinesq, que em analogia com os fluxos newtonianos assume que a tensão de

Reynolds é uma função linear dos gradientes da velocidade média, tais como: (MOUKALLED et al., 2016)

$$\begin{aligned}\tau_{eff} &= \overline{\rho u' u'} = \mu_t \{ \nabla u + (\nabla u)^T \} - \frac{2}{3} [\rho k + \mu_t (\nabla \cdot u) I] = \dots \\ \dots &= \mu_t \{ \nabla u + (\nabla u)^T \} - \frac{2}{3} [\rho k I]\end{aligned}\quad (10)$$

Onde k é a energia cinética turbulenta definida como:

$$k = 0.5 \overline{u' \cdot u'} \quad (11)$$

E μ_t é a viscosidade turbulenta (em analogia à viscosidade molecular), que agora é dependente do fluxo, não do fluido. Portanto modelos severos de turbulência tem sido desenvolvidos para expressar a viscosidade turbulenta em termos da velocidade $\sqrt{k}$ e a escala de comprimento, tais como:

$$\mu_t = \rho l \sqrt{k} \quad (11)$$

Nesse trabalho aborda-se o modelo de duas-equações, conhecido como K-Omega SST

2.2.1.1. K-Omega SST

O modelo de transporte de tensão de cisalhamento (SST) foi desenvolvido por F. R. Menter (1994) para melhorar a previsão de escoamentos com gradientes adversos de pressão. O SST combina elementos do modelo $k - \omega$, que é utilizado nas regiões próximas à parede, com o modelo $k - \epsilon$, que é ativado nas regiões externas da camada limite e em escoamentos livres (MENTER, 1994).

A principal inovação do modelo SST está na modificação da definição de viscosidade de redemoinho, levando em conta o transporte da tensão de cisalhamento turbulenta principal, o que resulta em uma performance superior na previsão de separação de fluxo e gradientes de pressão adversos, características onde os modelos convencionais falham. Essa abordagem híbrida permite que o modelo SST ofereça previsões mais robustas e precisas, evitando a sensibilidade ao escoamento livre que afeta outros modelos de duas equações (MENTER, 1994).

Na aplicação do modelo, as equações de transporte para $k - \omega$ são utilizados na região próximo a parede, enquanto as equações para $k - \epsilon$ são adotadas na região externa. A ponderação da contribuição de cada modelo é

realizada por uma função de mistura F_1 (que equivale a unidade na parede até zero na região externa da camada limite), do tipo: (ILHA; COLAÇO; FREIRE, 2006)

$$\phi = F_1 \phi_1 + (1 - F_1) \phi_2 \quad (12)$$

A formulação básica do modelo SST é descrita pelas equações de transporte da energia cinética turbulenta (k) e da dissipação específica (ω) (MENTER, 1994):

$$\frac{D\rho k}{Dt} = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - 0.09\rho\omega k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \sigma_k \mu_t \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{D\rho\omega}{Dt} = & \frac{\gamma}{v_t} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - 0.09\rho\omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \sigma_\omega \mu_t \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \dots \\ & \dots + 1.7\rho(1 - F_1) \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (14)$$

$$F_1 = \tan(arg^4) \quad (15)$$

$$arg = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{0.09\omega y}, \frac{500\nu}{y^2\omega} \right), \frac{3.424\rho k}{CD_{k\omega} y^2} \right] \quad (16)$$

$$CD_{k\omega} = \max \left(2\rho\sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 10^{-20} \right) \quad (17)$$

A viscosidade turbulenta definida como:

$$\mu_t = \frac{0.31\rho k}{\max(0.31\omega, \Omega F_2)} \quad ; \text{com: } F_2 = \tan \left(\left(\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{0.09\omega y}, \frac{500\nu}{y^2\omega} \right) \right)^2 \right) \quad (18)$$

2.2.2. Funções de Parede

Em regime de alta turbulência, o comportamento universal de escoamento próximo a parede chamado “função de parede”, é aplicado. Pela função de parede, o modelo de turbulência na pode integrar as equações k-omega para as regiões perto da parede. A velocidade média em um ponto cuja distância adimensional da parede está entre 30 e 500, satisfaz a lei logarítmica. Nesta região, a taxa de produção de turbulência é igual a taxa de dissipação. Usando essa suposição e as equações da viscosidade turbulenta, as funções de parede podem ser desenvolvidas como (ASKARI MAHVELATI, 2018):

$$u^+ = \frac{U}{u_\tau} = \frac{1}{0.41} \ln y^+ \quad k = \frac{u_\tau^2}{\sqrt{0.09}} \quad \epsilon = \frac{u_\tau^3}{ky} \quad (19)$$

Onde: u^+ é a velocidade adimensional; $u_\tau = \sqrt{\tau_{y=0}/\rho}$ é a velocidade de atrito na parede; $y_+ = U_\tau y/\nu$ é a primeira camada da uma malha uniforme., y é a distância até a parede mais próxima e ν é a viscosidade cinemática.

Para resolver todos os detalhes da camada limite em simulações numéricas, é necessário utilizar um grande número de pontos de malha. No entanto, quando o primeiro ponto da grade está posicionado na região totalmente turbulenta, torna-se inevitável o uso de "funções de parede" para capturar o efeito dos limites próximos à parede (ASKARI MAHVELATI, 2018). Essas funções de parede fornecem a tensão de cisalhamento e outras variáveis no primeiro nó da grade próximo à parede. Elas estabelecem uma relação entre os valores das variáveis nos centros das células e aqueles na parede, por meio de expressões pré-integradas simplificadas, o que permite definir indiretamente as condições de contorno na parede (POPOVAC; HANJALIC, 2007).

2.3. MÉTODO NUMÉRICO

Os métodos numéricos, e assim a dinâmica dos fluidos computacional (CFD), é uma ciência que, produz previsões quantitativas de fenômenos de fluxo de fluidos com base nas leis de conservação (conservação de massa, momento e energia) que governam os fluidos. Essas previsões normalmente ocorrem sob as condições definidas em termos de geometria do fluxo, propriedades físicas, condições iniciais e de contorno. As previsões geralmente dizem respeito a conjuntos de valores de variáveis de fluxo, por exemplo, velocidade, pressão ou temperatura em locais selecionados no domínio e para tempos selecionados (KUNDU; COHEN, 2004). Nesse estudo, iremos analisar um dos métodos numéricos mais propagado em soluções de CFD, que é chamado de método dos volumes finitos (FVM).

2.3.1. Métodos dos Volumes Finitos (FVM)

O método dos volumes finitos (FVM) é uma técnica que discretiza diretamente a formulação integral das leis de conservação no espaço físico. Sua popularidade se deve à sua generalidade, simplicidade conceitual e facilidade de implementação para malhas arbitrárias, sejam estruturadas ou não estruturadas. O

FVM baseia-se nos valores médios das células, que constituem a principal quantidade de interesse em CFD. Após a geração de uma malha, o método associa um volume de controle a cada ponto da malha e aplica a lei de conservação integral a esse volume local. No contexto geral, trata-se de uma técnica capaz de transformar uma equação diferencial parcial, representando uma lei de conservação, em equações algébricas discretas aplicadas sobre volumes ou elementos (HIRSCH, 2007; MOUKALLED et al., 2016).

2.3.1.1. Discretização da equação de transporte

A discretização inicia-se com a equação de transporte de uma propriedade escalar de segunda ordem (JASAK, 1996):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \Delta(u\phi\rho) - \Delta(\Gamma\rho\Delta\phi) - S(\phi) = 0 \quad (20)$$

O método dos volumes finitos requer que a equação (20) seja discretizada no espaço e no tempo ao redor de um ponto P na forma integral (JASAK, 1996):

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{vc} \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \int_{vc} \Delta(\bar{u}\phi\rho) dV - \int_{vc} \Delta(\Gamma\rho\Delta\phi) dV - \int_{vc} S(\phi) dV \right] = 0 \quad (21)$$

A tabela abaixo mostra a discretização de cada um dos termos da equação (2).

Tabela 2. Discretizações termos espaciais usando FVM.

Termos	Discretização Espacial
Convectivo	$\int_{vc} \nabla \cdot (\bar{u}\phi\rho) dV = \sum_f S(\bar{u}\phi\rho)_f = \sum_f F\phi_f$ $F = S(\bar{u}\rho)_f$
Difusivo	$\int_{vc} \nabla \cdot (\rho\Gamma_\phi \nabla \phi) dV = \sum_f S(\rho\Gamma_\phi \nabla \phi)_f = \sum_f (\rho\Gamma_\phi)_f S(\nabla \phi)_f$
Fonte	$\int_{vc} S_\phi(\phi) dV = S_u V_P + S_P V_P \phi_P$

Esquema de	$\phi_f = f_x \phi_p + (1 - f_x) \phi_N$	(Dif.Central)
Diferenciação	$\phi_f = \begin{cases} \phi_f = \phi_P & \text{para } F \geq 0 \\ \phi_f = N & \text{para } F < 0 \end{cases}$	(Upwind)
Convectiva		

Fonte: o autor

Usando a discretização espacial nos termos da equação e assumindo que o volume de controle não muda com o tempo, temos (DAMIÁN, 2013):

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_P V_P + \sum_f F \phi_f - \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f S(\nabla \phi)_f - (S_u V_P + S_P V_P \phi_P) \right] = 0 \quad (22)$$

Como ponto de partida para definir o operador temporal é necessário descrever a variação da solução ao longo do domínio. Desse modo a variação linear de ϕ ao longo do intervalo de tempo o valor de um ponto arbitrário pode ser encontrado como:

$$\phi(t + \Delta t) = \phi^t + \Delta t \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^t \quad (23)$$

Assim as integrais temporais e a derivada do tempo pode ser calculadas diretamente como:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_P = \frac{\phi_P^n - \phi_P^0}{\Delta t} \quad (24)$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi(t) dt = 0.5(\phi^0 + \phi^n) \Delta t \quad (25)$$

Onde ϕ^n representa o valor de ϕ no presente tempo e ϕ^0 representa o valor no tempo previo. No caso de não haver variação de tempo nas propriedades físicas a discretização para a célula P é:

$$\frac{\phi_P^n - \phi_P^0}{\Delta t} V_P + \frac{1}{2} \sum_f F_f \phi_f^n - \frac{1}{2} \sum_f (\Gamma_\phi)_f S_f (\nabla \phi)_f^n + \dots \quad (26)$$

$$\dots + \frac{1}{2} \sum_f F_f \phi_f^0 - \frac{1}{2} \sum_f (\Gamma_\phi)_f S_f (\nabla \phi)_f^0 = Q V_P - \frac{c}{2} V_P \phi_P^n - \frac{c}{2} V_P \phi_P^0$$

Que é um exemplo de discretização de Crank-Nicholson e é de segunda ordem precisa, mas pode produzir limitação.

$$\frac{\phi_P^n - \phi_P^0}{\Delta t} V_P + \theta \sum_f F_f \phi_f^n - \theta \sum_f (\Gamma_\phi)_f S_f (\nabla \phi)_f^n + \dots \quad (27)$$

$$\dots + (1 - \theta) \sum_f F_f \phi_f^0 - (1 - \theta) \sum_f (\Gamma_\phi)_f S_f (\nabla \phi)_f^0 = \dots$$

$$\dots = QV_p - \theta cV_p \phi_p^n - (1 - \theta)cV_p \phi_p^0$$

Essa expressão leva ao Método Trapezoidal Generalizado. Escolhendo $\theta = 0$ obtém-se o Método Forward-Euler que é explícito e restrito a um número de Courant < 1 . Tomando $0 < \theta \leq 1$ leva a Métodos Implícitos. O caso de $\theta = 1$ é conhecido como Método Backward-Euler, que apresenta precisa de primeira ordem é sempre limitado (DAMIÁN, 2013).

2.3.1.2. Discretização para a equação de Navier-Stokes

Nesta seção, um procedimento de discretização para as equações de Navier-Stokes será apresentado. Começaremos com a forma incompressível do sistema: (JASAK, 1996)

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho u u) + \nabla \cdot (\mu \nabla u) - \nabla p \quad (28)$$

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (29)$$

Este sistema lida com três questões principais, primeiro, a incompressibilidade que leva à falta de equação de evolução de pressão e requer um tratamento especial para acoplamento pressão-velocidade, as duas outras questões da esquerda estão relacionadas ao termo advectivo que tem que ser estabilizado e particularmente por sua não linearidade. A estabilização é tratada pelos métodos apresentados anteriormente neste capítulo. Em relação à não linearidade, ela pode ser resolvida usando um sistema não linear ou pela linearização, que é a opção escolhida. Portanto, o termo advectivo é linearizado: (DAMIÁN, 2013)

$$\nabla \cdot (\rho u u) = \sum_f v_f u_f^0 \cdot S_f = \sum_f F_f^0 u_f = a_p u_p + \sum_N a_N u_N \quad (30)$$

A pressão é discretizada nos centros das células e as velocidades são calculadas nas faces na forma de fluxos, portanto o fluxo F^0 é calculado apenas de u^0 eventualmente no primeiro passo de tempo; no restante do cálculo, esse fluxo é retirado do loop de pressão-velocidade do passo de tempo anterior, o que garante a aplicação da equação de continuidade (fluxo conservativo). Em relação à restrição de incompressibilidade, ela será tratada neste trabalho pelo procedimento SIMPLE (Semi IMPLICIT Linked Equations) (DAMIÁN, 2013).

2.2.1.2.1. Discretização da Pressão

Na ordem de derivar a equação da pressão, uma semi-discretização da equação de momento vai ser usada: (JASAK, 1996)

$$a_p u_p = H(v) - \nabla p \quad (31)$$

No espírito do procedimento Rhie e Chow, o termo gradiente de pressão não é discretizado nesta fase. Sendo obtida a partir da forma integral da equação de momento, usando o procedimento de discretização descrito anteriormente.

O termo $H(v)$ consiste em duas partes: a “parte de transporte”, incluindo coeficientes da matriz para todos os vizinhos multiplicados pelas velocidades correspondentes e a “parte da fonte” incluindo a parte da fonte do termo transitório e todos os outros termos da fonte além do gradiente de pressão:

$$H(v) = - \sum_N a_N u_N + \frac{v^0}{\Delta t} \quad (32)$$

A forma da discretização para a equação da continuidade:

$$\nabla \cdot u = \nabla \cdot \left(\frac{1}{a_p} \nabla p \right) = \nabla \cdot \left(\frac{H(u)}{a_p} \right) = \sum_f S \cdot \left(\frac{H(u)}{a_p} \right)_f \quad (33)$$

A forma final da equação de Navier-Stokes incompressível é:

$$a_p u_p = H(u) - \sum_f S(p)_f \Rightarrow \sum_f S \left[\left(\frac{1}{a_p} \nabla p \right)_f \right] = \sum_f S \left[\left(\frac{H(u)}{a_p} \right)_f \right] \quad (34)$$

O fluxo da face F é calculada de modo:

$$F = S \cdot v_f = S \cdot \left[\left(\frac{H(v)}{a_p} \right)_f - \left(\frac{1}{a_p} \nabla p \right)_f \right] \quad (35)$$

Quando a equação (35) é satisfeita, os fluxos da face são garantidos para serem conservativos.

2.2.1.2.2. O Método SIMPLE para Acoplamento Pressão-Velocidade

Existem, atualmente, diversos métodos para tratar o acoplamento pressão-velocidade. O objetivo de todos eles é criar uma equação para a pressão que permita que o processo iterativo avance, observando a conservação da massa. A solução correta de um problema de transporte de quantidade de movimento será

obtida quando o campo de pressões introduzido nas equações de Navier-Stokes gerarem velocidades que satisfaçam a equação da continuidade (MALISKA, 2017).

Nos métodos de acoplamento como o Semi IMPLICIT Linked Equations (SIMPLE), a pressão é escrita como a soma da melhor estimativa da pressão disponível, mais uma correção que é calculada de maneira a satisfazer a equação da continuidade. No que gera dois passos distintos: velocidades corrigidas e as pressões avançadas (MALISKA, 2017).

Um algoritmo é formado pela metodologia SIMPLE abaixo: (MALISKA, 2017; JASAK, 1996).

Passo 1. Estimar os campos de velocidade e pressão (p^*), Calcular os coeficientes das equações de movimento e resolver as equações de acordo com:

$$a_p u_p^* = H(u) - \nabla p^* \quad (36)$$

Passo 2. Obter p' a partir de :

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{a_p} \nabla p' \right) = \sum_f S \cdot \left(\frac{H(u)}{a_p} \right)_f \quad (37)$$

Passo 3. Corrigir a velocidade estimada, obtendo o campo de velocidade que satisfaz:

$$F = S \cdot \left[\left(\frac{H(u)}{a_p} \right)_f - \left(\frac{1}{a_p} \nabla p \right)_f \right] \quad (38)$$

Passo 4. Calcular a pressão através de:

$$p = p^* + \alpha p' \quad (39)$$

Passo 5. Fazer $p^* = p$ e recomeçar no item (2) até convergência.

2.4. TANQUES AGITADOS

Uma das principais operações unitárias utilizadas na indústria é o processo de mistura, definido como o movimento aleatório de duas ou mais fases inicialmente separadas. Quando há um movimento induzido em uma forma determinada, geralmente circulatória, chamamos de processos de agitação. Essa operação auxilia em processos químicos e físicos em diversas aplicações, como a mistura de

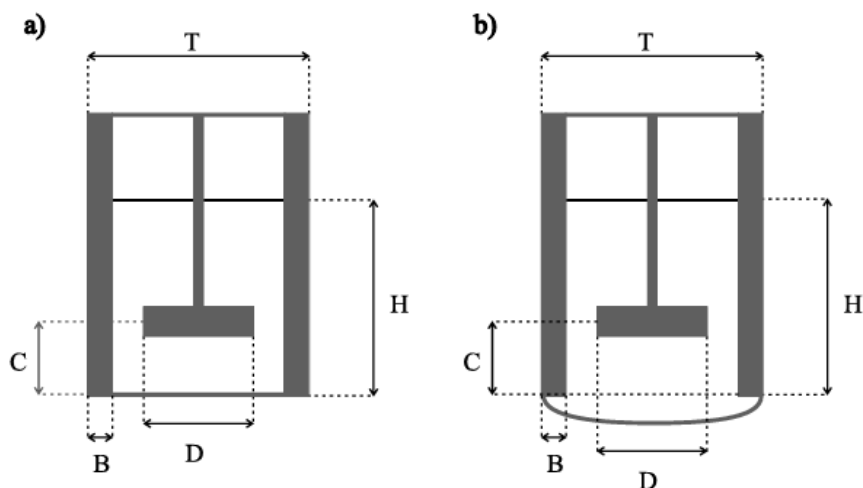
líquidos, formação de dispersões, transferência de calor e uniformização de temperatura (PRADA, 2015).

A eficiência do processo de agitação está diretamente relacionada ao tempo e ao consumo de energia necessários para atingir a mistura desejada, o que impacta na minimização de custos de investimento e operacionais, proporcionando, assim, maior rendimento. Como os processos de agitação não são completamente compreendidos, diversos parâmetros precisam ser considerados. A fluidodinâmica e a geometria do sistema são fatores-chave para entender esse tipo de processo, embora as propriedades dos fluidos também influenciem significativamente o desempenho da operação (PRADA, 2015).

Em vasos agitados com chicanas, o fluxo gerado pelo impelidor rotativo interage com as chicanas estacionárias, gerando um fluxo turbulento complexo, tridimensional e recirculante. O fluxo médio gerado pelo impulsor causa o movimento em massa dos constituintes, responsável pelo transporte convectivo de momento, calor e massa. A turbulência gerada determina a difusão de momento, calor e massa. Assim, o desempenho geral de um vaso agitado depende fortemente do campo de fluxo e das características de turbulência associadas, produzidas pelo impelidor (JOSHI et al., 2011).

A geometria do sistema de agitação é extremamente relevante, pois é fundamental para a determinação dos perfis de velocidades no interior do tanque e na caracterização dos escoamentos em sistemas de mistura. O design apropriado de um tanque agitado assim como a otimização do processo de mistura nesses tanques requer um estudo de todas as variáveis que afetam potencialmente a desempenho desse processo. Alguns desses parâmetros podem ser apresentados como: a geometria do tanque; orientação e número de impelidores; presença de chicanas e a folga do agitador em relação ao fundo do tanque (DA SILVA, 2020). A Figura 1 abaixo mostra configurações de tanques agitados para a geometria do tanque para dois tipos de fundos.

Figura 1. Tipos de tanques agitados: (a) tanque fundo reto; (b) tanque fundo abaulado ASME 10%.



Fonte: DA SILVA, 2020.

2.4.1. IMPELIDOR

Uma das características mais comuns na literatura, na influência da eficiência de um processo de mistura, é o tipo de impelidor. Os impelidores mais comuns podem ser classificados em cinco categorias: escoamento axial, escoamento radial, alto cisalhamento, baixo cisalhamento e impelidores especiais. Cada classificação está relacionada à forma como o impelidor interage com o fluido, e cada tipo tem aplicações específicas (MACIEL, 2013).

Se o objetivo é a mistura eficiente, é necessário utilizar uma configuração que proporcione um baixo tempo de mistura por unidade de volume e menor consumo de potência por unidade de volume. A qualidade da mistura em tanques agitados depende da distribuição da energia cinética média e turbulenta. Isso pode ser alcançado controlando a turbulência em relação aos padrões de fluxo convectivo. Um pequeno aumento na difusividade turbulenta pode reduzir o tempo de mistura, mas um aumento maior (por exemplo, mais de cinco vezes) não resulta em uma redução substancial no tempo de mistura. Assim, o projeto do impelidor deve permitir a otimização dos padrões de fluxo convectivo, mantendo níveis moderados de turbulência (baixa difusividade turbulenta) (JOSHI et al., 2011).

2.4.2. CHICANAS

As chicanas tratam-se de placas metálicas verticais, instaladas ao longo da

parede interna do tanque, que impedem a rotação do fluido como um corpo sólido. Sua função é converter o movimento de turbilhão gerado pela rotação do(s) impelidor(es) em um padrão de fluxo mais eficiente, adequado aos objetivos do processo. Entre os benefícios proporcionados pelas chicanas estão a redução do tempo de mistura, supressão dos vórtices, aumento da entrada de energia e melhoria da estabilidade mecânica (KRESTA et al., 2015).

Em processos que envolvem grandes variações de viscosidade, as chicanas podem ser necessárias. A escolha do número, tamanho e posicionamento desses dispositivos depende fortemente das características específicas do processo, não havendo regras universais aplicáveis (KRESTA et al., 2015).

Os vórtices gerados durante a agitação podem provocar diversos problemas indesejados. Entre eles, destacam-se: (a) incorporação de ar, que pode causar formação de espuma em determinados processos; (b) vibrações no eixo, principalmente quando o vórtice atinge o impelidor inferior; (c) menor cisalhamento entre o fluido e o impelidor, uma vez que o movimento se torna predominantemente circular; e (d) transbordamento de material para fora do tanque (Barbosa, 2004).

Na indústria em geral e especialmente na indústria farmacêutica e bio-farmacêutica diversas chicanas são usadas, para diferentes funções e aplicações, dentre elas estão a Beavertail, Fin, D-type, H-Type, Finger. Ilustradas na Figura 2.

Figura 2. Diferentes tipos de chicanas.



Fonte: SIRASITTHICHOKE et al, (2022)

2.3.3. NÚMERO POTÊNCIA

Em aplicações de mistura industrial, o consumo de potência por unidade de volume é amplamente utilizado para processos de scale-up, scale-down e design. Apesar de seu uso disseminado, a dependência do consumo de potência/energia em relação à geometria do impulsor e do tanque é definida apenas de forma geral. Isso se deve, em parte, à dificuldade de se obter medições precisas de torque em pequena escala e, também, às limitações preditivas da teoria do arrasto, especialmente em fluxos tridimensionais com reciclagem (CHAPPLE et al., 2002).

Os primeiros estudos sobre consumo de energia datam de 1934, mas o trabalho inicial de Rushton et al. 1950, é amplamente citado como pioneiro no desenvolvimento dessa área. Usando análise dimensional, Rushton et al. desenvolveram vários grupos adimensionais, incluindo o número de potência, N_p : (CHAPPLE et al., 2002)

$$N_p = \frac{P}{\rho N^3 D^5} \quad (40)$$

A potência normalmente é calculada medindo-se o torque (Θ) e a rotação do eixo:

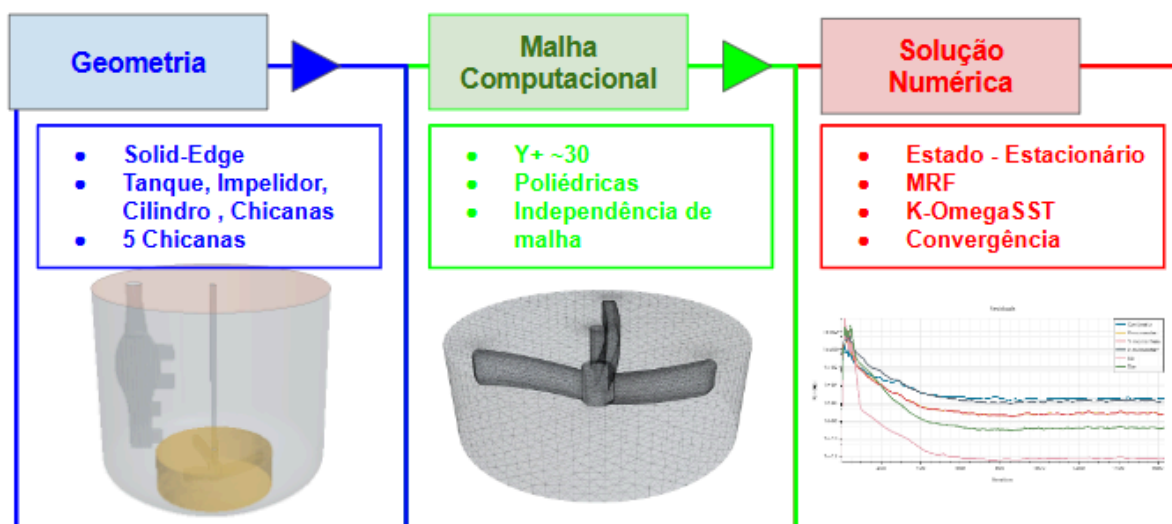
$$P = 2\pi N \Theta \quad (41)$$

Variações no número de potência (N_p), devido a mudanças no diâmetro e nos detalhes da construção do impelidor, podem introduzir um grau de incerteza em uma das especificações centrais para o projeto de equipamentos de mistura. Medições extremamente precisas do torque e do consumo de energia são necessárias para resolver essa ambiguidade, pois, em escalas reduzidas, o torque diminui drasticamente ($\Theta \sim D^5$). Embora o torque também aumente com N^2 , existem limites práticos de N devido à entrada de ar e à vibração mecânica (CHAPPLE et al., 2002).

3. METODOLOGIA

A metodologia do trabalho proposto é detalhada na Figura 3. Primeiramente definimos a geometria base e otimizada, posteriormente criamos uma malha base para essa geometria, e por finalidade é gerada uma solução numérica com base no FVM.

Figura 3. Metodologia do trabalho desenvolvida.

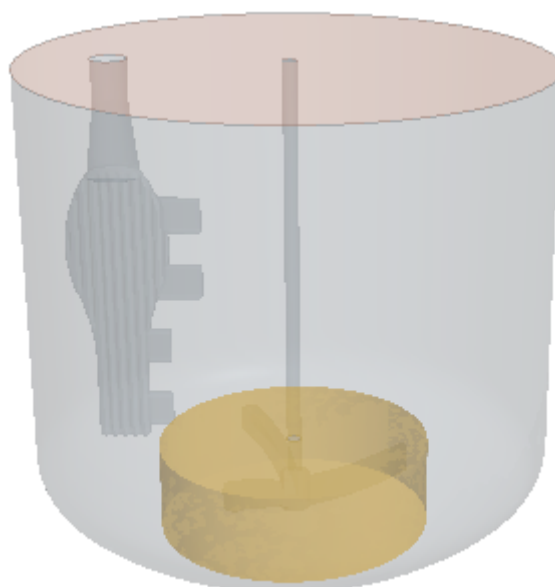


Fonte: o autor

3.1. GEOMETRIA

Foram criadas três geometrias distintas para o estudo: uma para o tanque, outra para o rotor e uma terceira para a chicana. Cinco variações de chicanas foram consideradas, sendo duas comumente utilizadas na indústria e outras três desenvolvidas para estudo e otimização. Além disso, em torno do rotor, foi gerado um cilindro para representar o domínio rotativo, ou seja, a região onde será aplicado o MRF, que será explicado mais detalhadamente no subitem 3.3.1. Um esquema das partes da geometria proposta é apresentado na Figura 4.

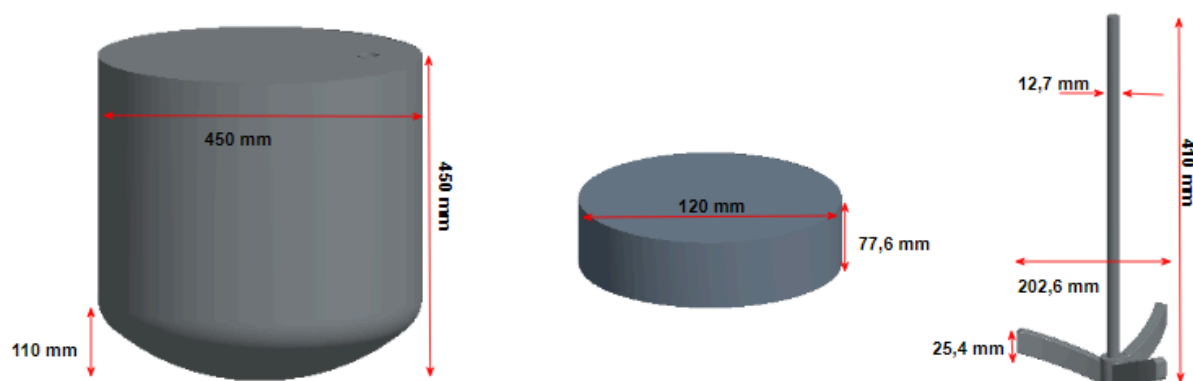
Figura 4. Esquemática das partes geometria.



Fonte: o autor

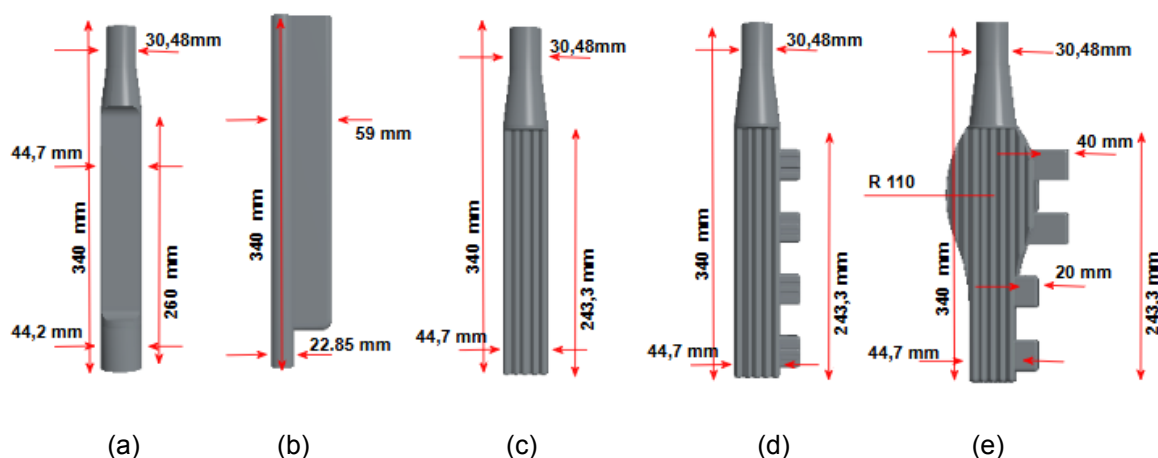
Conduziram-se a geração de geometrias básicas, como o tanque e o impelidor (do tipo *Retreat-Blade*), além de diferentes tipos de chicanas. Para isso, foi utilizado o software Solid-Edge. As dimensões detalhadas da geometria estão apresentadas nas Figuras 5 e 6.

Figura 5. Geometria e dimensões do tanque, cilindro e impelidor.



Fonte: o autor

Figura 6. Geometria e dimensões das chicanas: (a) Beavertail; (b) Fin; (c) W; (d) WT; (e) WTC.



Fonte: o autor

3.2. MALHA COMPUTACIONAL

Para garantir a precisão dos métodos numéricos, é necessário que o domínio contenha elementos para a computação das equações governantes. Isso significa que as equações interpretam a geometria por meio de uma discretização em pequenas partes, permitindo o cálculo da solução para cada uma dessas

subdivisões. Dito isso, é evidente que, quanto maior a geometria, mais complexa será a configuração da solução e maior será o custo computacional. Assim, lidar com a relação entre a discretização e custo computacional é uma tarefa crucial.

O tamanho da malha é uma das propriedades numéricas mais críticas para qualquer modelagem de escoamento e mistura. Embora uma malha mais refinada seja sempre preferível para obter maior precisão, ela costuma ser limitada pelos recursos computacionais disponíveis. Na análise numérica, é uma prática padrão realizar um estudo de independência de malha antes de considerar a solução final (KRESTA et al., 2015). De modo, que realizasse um estudo de 3 tamanhos de malhas diferentes, para cada uma das geometrias, e compara-se o erro gerado de uma variável para cada malha, de modo a minimizar o erro em relação ao tamanho de malha.

Como o impulsor é a fonte do fluxo turbulento, a previsão precisa do fluxo e das soluções turbulentas ao seu redor é fundamental. O gradiente das variáveis de fluxo é geralmente mais acentuado próximo ao impulsor, e por isso uma malha mais refinada nessa região é comumente utilizada (KRESTA et al., 2015).

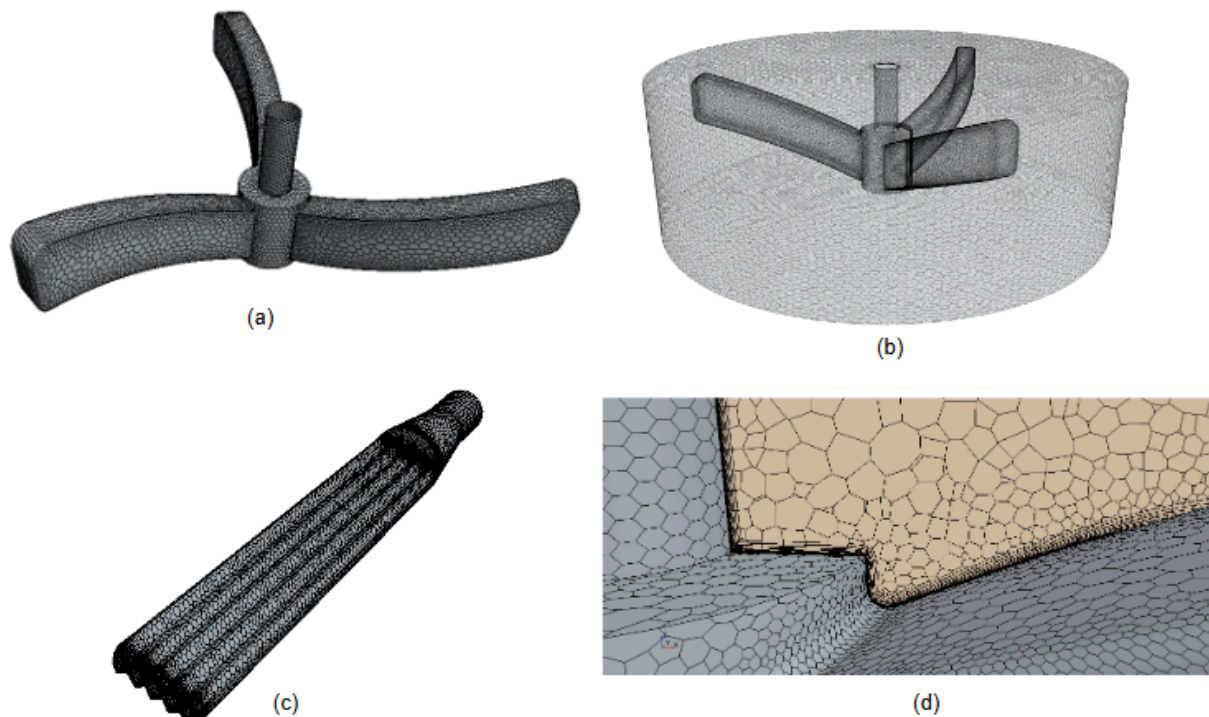
Neste trabalho, utiliza-se malhas poliédricas em todo o domínio, adicionando uma camada de inflação para captar as dinâmicas dos altos gradientes. A Figura 7 mostra a malha gerada para o domínio. Dois domínios foram definidos para a geração da malha: um contendo o cilindro (domínio rotativo) -impelidor (CI) e outro envolvendo o tanque-cilindro-impelidor (TCI), permitindo que a parte rotativa da geometria seja adequadamente computada pela solução numérica. A Tabela 3 apresenta os parâmetros propostos para a criação da camada de inflação para os dois domínios, de acordo com o valor de Y^+ .

Tabela 3. Parâmetros camada de inflexão.

Parâmetros	Domínios	
	TCI	CI
Y^+	30	30
Camadas de Inflexão	13	13
Max. Growth Ratio	1.21	1.21
Primeira Camada	6,70E-05	6,70E-05

Fonte: o autor

Figura 7. Design da malha para as geometrias: (a) Impelidor, (b) domínio rotativa, (c) chicana, (d) camada de inflexão.

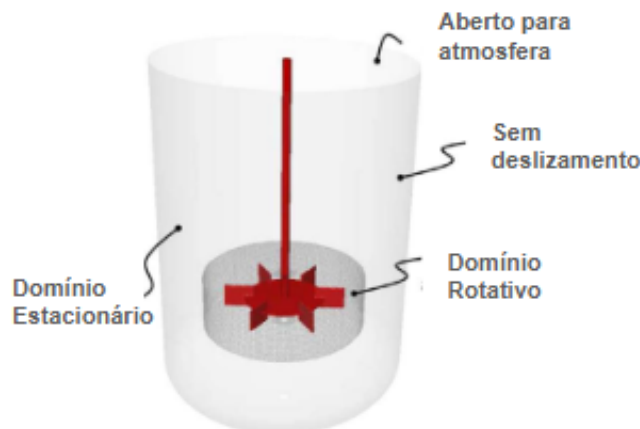


Fonte: o autor

3.3. MÉTODOS NUMÉRICOS

O procedimento de solução começa com o movimento da malha, necessário para capturar a rotação do impelidor. Isso é realizado facilmente definindo um domínio rotativo ao redor do impelidor (Figura 1), onde é imposta uma rotação de corpo sólido com uma velocidade angular prescrita em todas as células e limites dentro dessa zona (DESHPANDE et al., 2017). Superfícies nas quais as condições de contorno são definidos para cada um dos componentes do tanque e do impelidor, como mostrado tanto na Figura 8 como na Tabela 4.

Figura 8. Esquema de condição de contorno.



Fonte: DESHPANDE et al., 2017

Tabela 4. Parâmetros das condições de contorno.

Superfícies	Condição de Contorno	Valor
<u>Paredes (Tanque)</u>	Não deslizamento	Velocidade = 0
<u>Outlet (Tanque)</u>	Pressão Prescrita	Pressão Hidrostática
<u>Chicana (Tanque)</u>	Não deslizamento	Velocidade = 0
<u>Rotor (Impelidor)</u>	Não deslizamento	Velocidade = 0

Fonte: o autor

A simulação rodada utilizando o abordagem de volumes finitos (FVM), em um software comercial, *STAR-CCM+*, bem como o pos-processamento. O modelo de turbulência utilizado no presente trabalho é o K-Omega SST. Os parâmetros de turbulência, previamente calculados, foram: energia cinética turbulenta (k) igual a 0,0360375 e dissipação de energia (ω) igual a 0,9369963231.

3.3.1. MRF

Os problemas de modelagem que envolvem zonas estacionárias (como defletores) e móveis (como o impulsor) podem ser tratados de duas maneiras: o método de múltiplas referências de quadro (MRF) e o método de malha deslizante. O MRF é o mais simples e é adequado quando os fluxos entre as zonas interior e exterior se tornam uniformes rapidamente. Como as interações entre o impulsor e o

defletor são relativamente fracas, e grandes efeitos transitórios não estão presentes em tanques de mistura, o método MRF pode ser utilizado (VAKILI, M.H.).

3.3.2. CONVERGÊNCIA

A escolha dos critérios para interromper a execução do programa é uma decisão crítica. Alguns problemas possuem convergência lenta, e se a execução for interrompida com um critério inadequado, o resultado ainda pode estar longe da solução ideal. Por outro lado, um critério muito rigoroso pode manter o programa iterando sem necessidade (MALISKA, 2017).

A escolha do critério se torna simples quando os limites de variação da função são conhecidos, permitindo até o uso de um critério absoluto eficiente. Um critério comum na literatura é baseado em resíduos e pode ser dado por (MALISKA, 2017):

$$\left| \frac{\phi^{k+1} - \phi^k}{\phi^k} \right| \leq \epsilon \quad (42)$$

Deve-se prestar atenção ao fato de que os critérios de convergência são necessários em vários níveis dentro de um programa de simulação, principalmente para interromper os cálculos quando as variáveis convergem ou dentro de *solvers* de sistemas lineares (MALISKA, 2017).

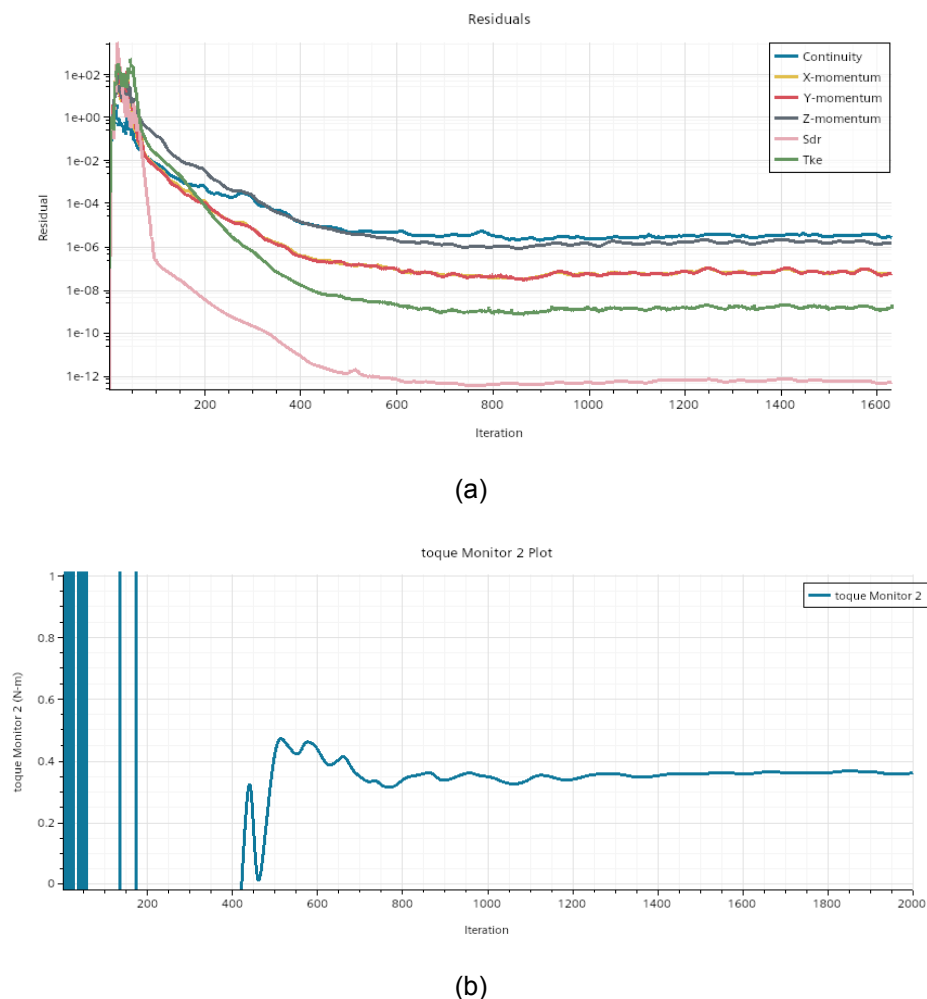
4.RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesta seção, são apresentados e discutidos os principais resultados obtidos a partir das simulações realizadas no software *STAR-CCM+*. Primeiramente, aborda-se a validação do modelo numérico utilizando dados experimentais disponíveis na literatura, e em seguida, analisa-se os resultados das geometrias propostas para as novas chicanas.

Dois estudos foram conduzidos: o primeiro foi focado na validação das simulações CFD comparadas a dados experimentais, enquanto o segundo se dedicou à análise de desempenho das novas geometrias de chicanas desenvolvidas no estudo. Para garantir a estabilidade e precisão das variáveis, foram executadas simulações com 2000 iterações, sendo analisados resíduos e o torque gerado pelo

agitador. A Figura 9 ilustra a convergência dos resíduos e torque ao longo das iterações, garantindo que o modelo estava devidamente estabilizado.

Figura 9. Convergência variável: (a) resíduos; (b) torque.



Fonte: o autor

4.1. NÚMERO DE POTÊNCIA

4.1.1. Validação

Para validar o modelo, foram simuladas duas chicanas tradicionais amplamente descritas na literatura: Beavertail e Fin chicana. A validação foi baseada na comparação entre os valores simulados de torque e potência com os resultados experimentais, com ênfase na análise do número de potência (N_p), que representa a eficiência da mistura gerada pela chicana.

A independência de malha é um aspecto crucial na modelagem CFD para garantir que o refinamento da malha não interfira significativamente nos resultados numéricos. Para isso, foi realizada uma análise de independência de malha para as duas chicanas tradicionais, conforme apresentado na Tabela 5. O erro médio entre o refinamento da malha foi inferior a 1%, mostrando que os resultados são suficientemente confiáveis para comparação com os dados experimentais.

Tabela 5. Independência de malhas chicanas Beavertail e Fin.

	FIN		BEAVERTAIL	
	Cell	Np	Cell	Np
1	706976	0,612	530134	0,630
2	1349886	0,605	1364647	0,617
3	1864526	0,602	2168744	0,617

Fonte: o autor

Após a validação com diferentes refinamentos de malha, os resultados foram comparados com os valores experimentais presentes na literatura, conforme a Tabela 6. A chicana Fin apresentou uma boa concordância entre os valores simulados e os experimentais, enquanto a chicana Beavertail apresentou uma maior discrepância, o que também foi observado por outros autores, como IRASITTHICHOKE et al. (2022).

Tabela 6. Experimental e simulado para chicanas Beavertail e Fin.

	FIN	BEAVERTAIL
Experimental	0,615	0,489
Simulação	0,605	0,617
Erro	0,26%	12,84%

Fonte: o autor

A alta discrepância observada para a chicana Beavertail pode ser atribuída à formação de vórtices complexos, que não são completamente capturados por modelos de turbulência tradicionais, como o modelo k-omega SST-MFR é o principal responsável por não capturar esse fenômeno. Estudos anteriores, como o de

IRASITTHICHOKE et al. (2022), sugerem que o uso de modelos de maior fidelidade, como o LES (Large Eddy Simulation), pode fornecer resultados mais precisos para geometrias que geram esse tipo de comportamento fluidodinâmico.

No entanto, para a chicana Fin, os resultados numéricos mostraram boa concordância com os valores experimentais, validando a confiabilidade do modelo numérico para as simulações de novas geometrias.

4.1.2. Análise novas chicanas

Com o modelo validado, foi possível avançar para o estudo de novas geometrias de chicanas, com o objetivo de melhorar a eficiência de mistura e reduzir o consumo de energia. Três novas geometrias foram propostas e simuladas: W-Baffle, WT-Baffle e WTC-Baffle. A W-Baffle é uma versão modificada da Beavertail, projetada para otimizar o perfil de fluxo dentro do tanque, removendo a parte lisa da geometria original. A WT-Baffle foi desenhada para aumentar a área de contato com o fluido, enquanto a WTC-Baffle foi otimizada para promover maior homogeneidade de mistura, especialmente nas regiões superiores do tanque, onde é comum ocorrer acúmulo de fluido.

A Tabela 7 apresenta a análise de independência de malha para as novas chicanas, detalhando o número de células utilizadas em cada simulação e os respectivos números de potência (N_p) obtidos.

Tabela 7. Independência de malha para chicanas W-Baffle, WT-Baffle e WTC-Baffle.

	W-Baffle		WT-Baffle		WTC-Baffle	
	Cell	Np	Cell	Np	Cell	Np
1	548852	0,614	789267	0,570	1003976	0,521
2	1355811	0,595	1297726	0,582	1312780	0,520
3	1692964	0,595	1812907	0,580	1709127	0,524

Fonte: o autor

Observa-se que, para todas as geometrias, as simulações com malhas contendo cerca de 1,3 milhões de células apresentaram variações de número de

potência inferiores a 1% em relação às malhas mais refinadas, confirmando que a convergência de malha é alcançada independentemente do refinamento adicional.

As chicanas W-Baffle e WT-Baffle apresentaram resultados superiores às chicanas convencionais, como a Fin, com melhorias de 1,9% e 3,3%, respectivamente, no número de potência. No entanto, quando comparadas à chicana Beavertail, essas geometrias registraram números de potência superiores, com aumento de 9% e 10%, respectivamente. Esses resultados indicam que ambas as geometrias modernas mantêm uma conformidade adequada, ao mesmo tempo em que oferecem vantagens em relação à eficiência energética frente à chicana Fin.

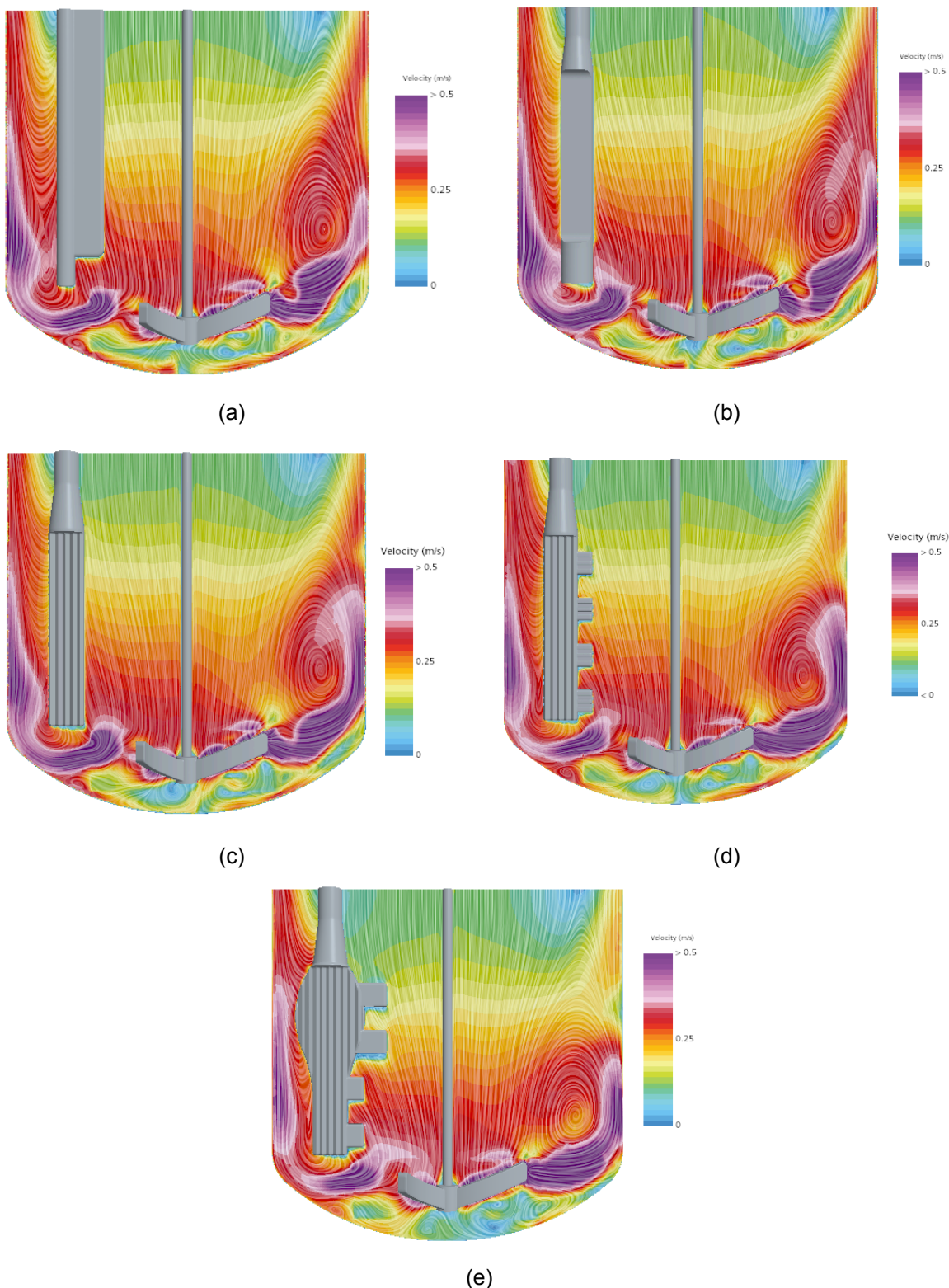
A WTC-Baffle, por sua vez, demonstrou desempenho claramente superior tanto em comparação com as chicanas convencionais quanto com as outras geometrias analisadas. Em termos de número de potência, a WTC-Baffle apresentou uma melhoria de 9,5% em relação à chicana Fin e um ganho de 3% em relação à Beavertail. Esses resultados evidenciam que a WTC-Baffle oferece um desempenho otimizado, com potência próxima ao valor mais eficiente já reportado na indústria, destacando-se significativamente em relação às demais geometrias.

Portanto, as novas chicanas analisadas, especialmente a WTC-Baffle, não apenas proporcionam melhorias significativas no consumo de energia em tanques agitados, como também exibem características de fluxo que as tornam superiores às chicanas convencionais já amplamente utilizadas na indústria.

4.2. CAMPOS DE VARIÁVEIS

A eficiência de mistura e o comportamento do fluido dentro do tanque foram avaliados com base nos campos de velocidade, energia cinética turbulenta (k) e dissipação de energia turbulenta (ω). A análise dessas variáveis é crucial para entender como as diferentes geometrias de chicanas afetam a movimentação do fluido e a eficiência do processo de mistura.

Figura 10. Perfil de velocidade e streamline verticais para as chicanas: (a) Fin; (b) Beavertail; (c) W-Baffle; (d) WT-Baffle; (e) WTC-Baffle.



(e)

Fonte: o autor

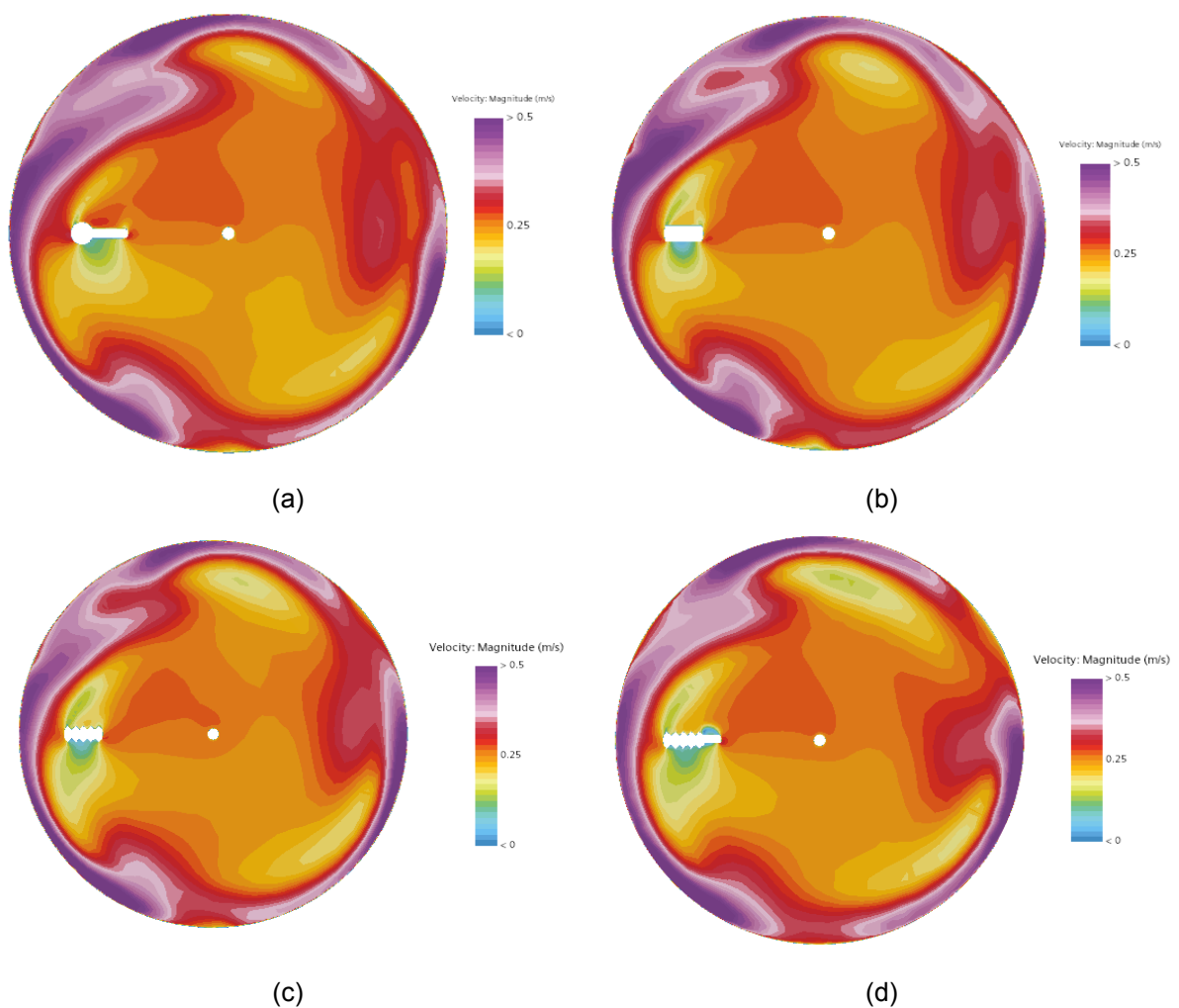
No campo de velocidade, figura 10, observou-se a formação de vórtices no lado direito, onde não há chicana, e vórtices menores abaixo do impelidor, o que é comum. No entanto, verificou-se a presença de vórtices próximos às chicanas nos casos das geometrias Fin, Beavertail e W-Baffle, indicando que essas chicanas não

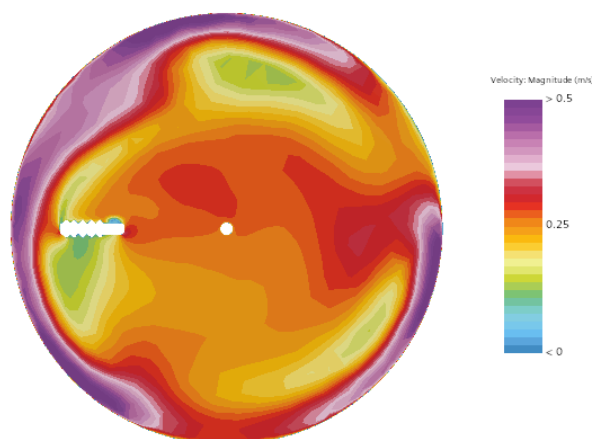
eliminaram completamente os vórtices. Em contrapartida, as novas geometrias WT-Baffle e WTC-Baffle foram mais eficazes na quebra desses vórtices ao lado das chicanas.

Além disso, a uniformidade da velocidade em todo o tanque é crucial para promover uma mistura eficiente e evitar a formação de vórtices indesejados. A chicana WTC-Baffle se destacou, apresentando maiores velocidades em todo o domínio da chicana, o que indica uma maior capacidade de promover a movimentação do fluido de forma mais eficiente.

Nesse contexto, também foi analisado o campo de velocidade em um plano horizontal a 200 mm de altura no tanque, Figura 11.

Figura 11. Perfil de velocidade horizontal para as chicanas: (a) Fin; (b) Beavertail; (c) W-Baffle; (d) WT-Baffle; (e) WTC-Baffle.





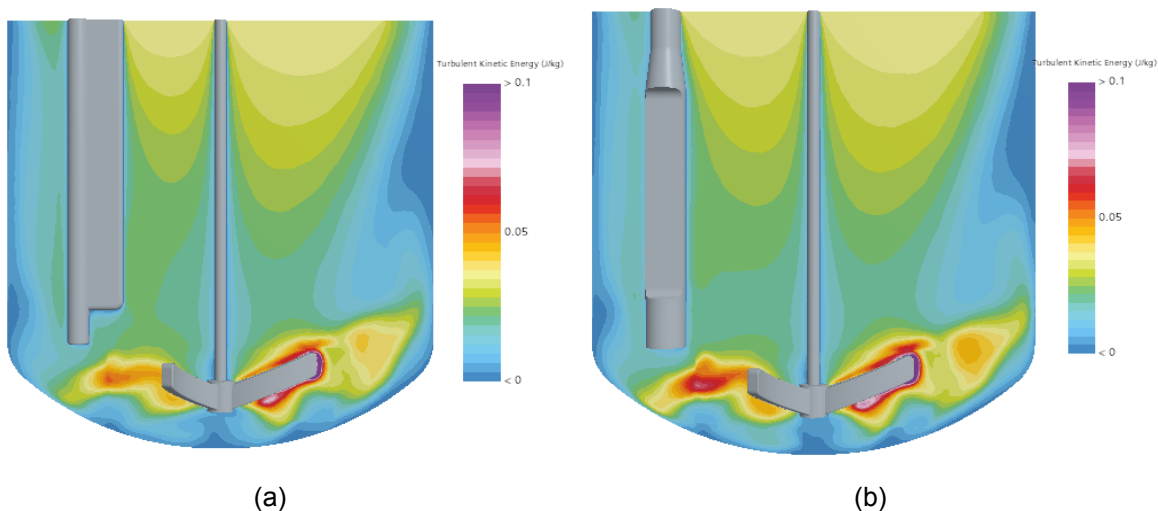
(e)

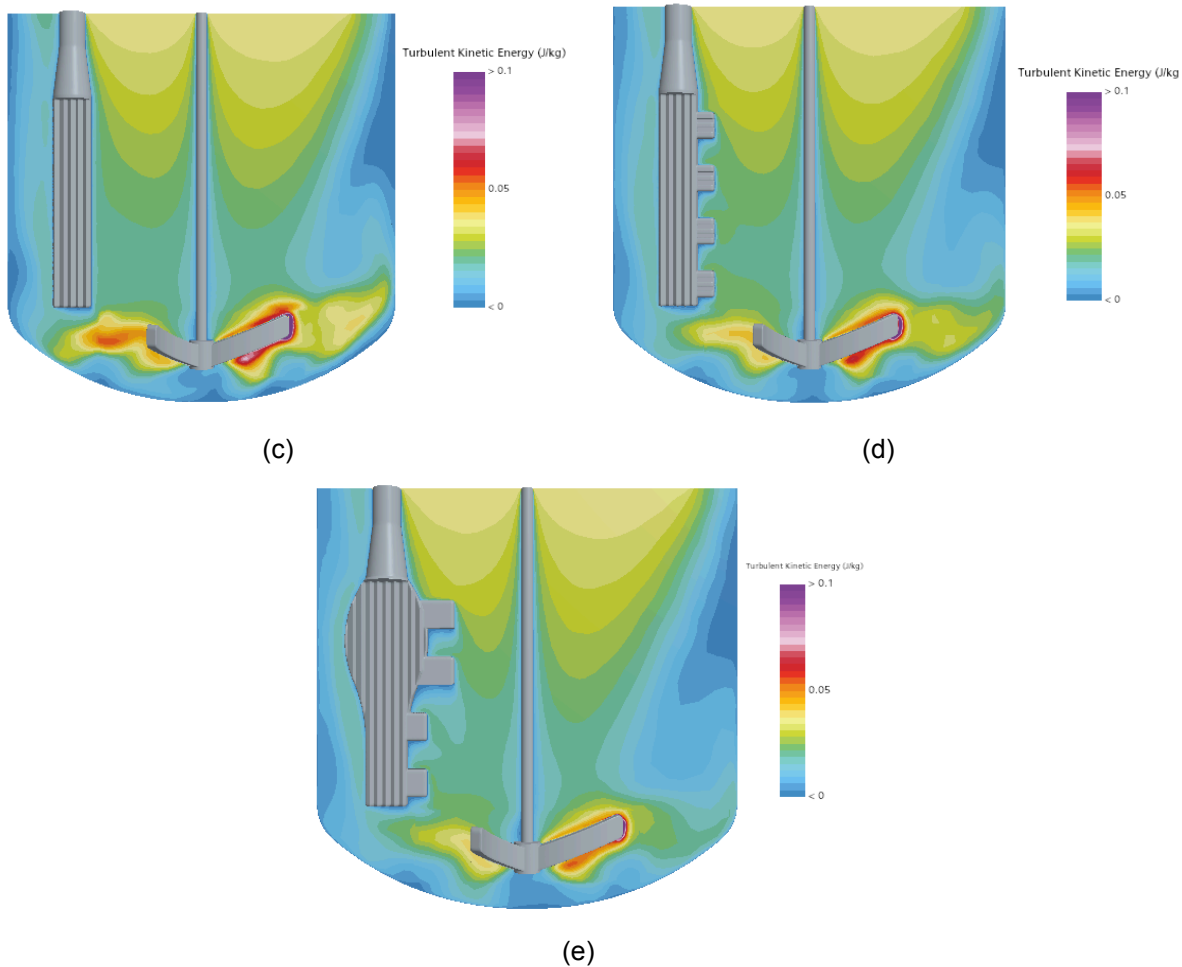
Fonte: o autor

No plano horizontal, foi observada uma menor velocidade nas proximidades das chicanas Fin e Beavertail. Já as novas chicanas suprimiram essa característica e conseguiram distribuir velocidades mais elevadas de maneira uniforme. No entanto, a velocidade junto às paredes foi superior nas chicanas convencionais, especialmente na Beavertail, o que pode justificar a formação mais acentuada de vórtices.

Outra variável importante é a energia cinética turbulenta (Figuras 12 e 13), que reflete a intensidade do fluxo turbulento. A agitação em alta velocidade gera maior turbulência, e essa energia se dissipa no fluido por convecção e difusão (VAKILI, M.H.).

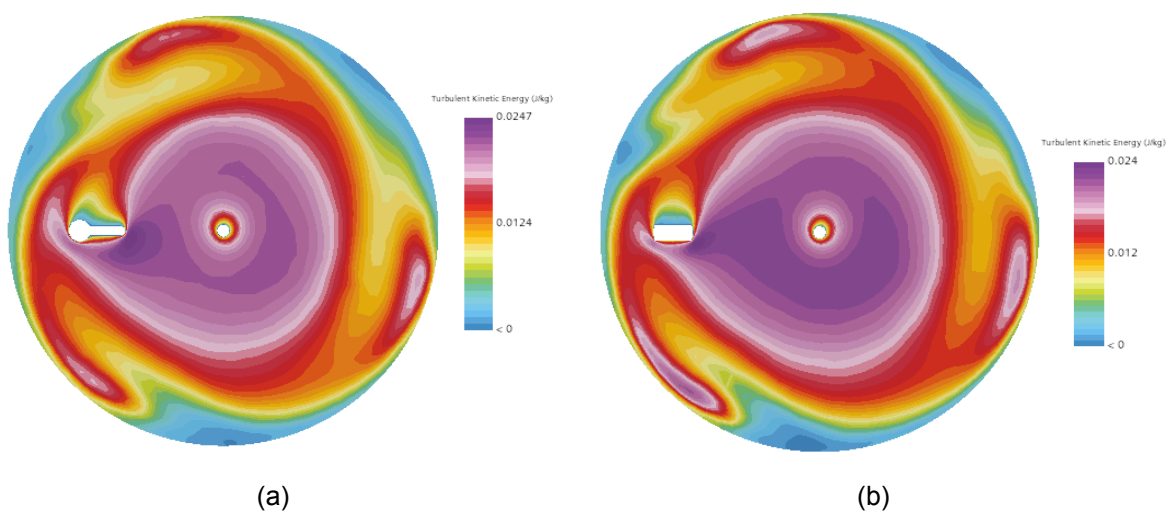
Figura 12. Perfil de energia cinética turbulenta vertical para as chicanas: (a) Fin; (b) Beavertail; (c) W-Baffle; (d) WT-Baffle; (e) WTC-Baffle.

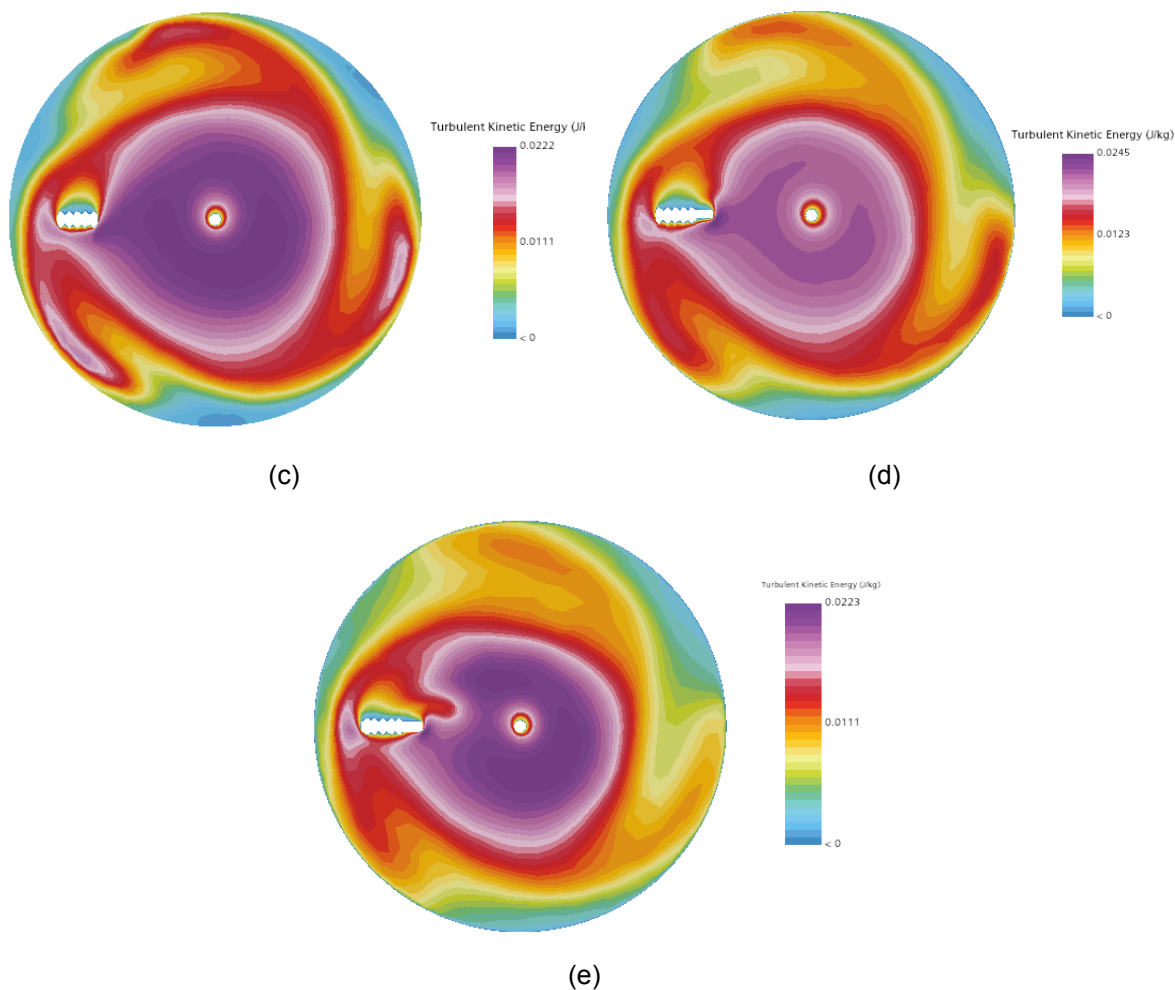




Fonte: o autor

Figura 13. Perfil de energia cinética turbulenta horizontal para as chicanas: (a) Fin; (b) Beavertail; (c) W-Baffle; (d) WT-Baffle; (e) WTC-Baffle.





Fonte: o autor

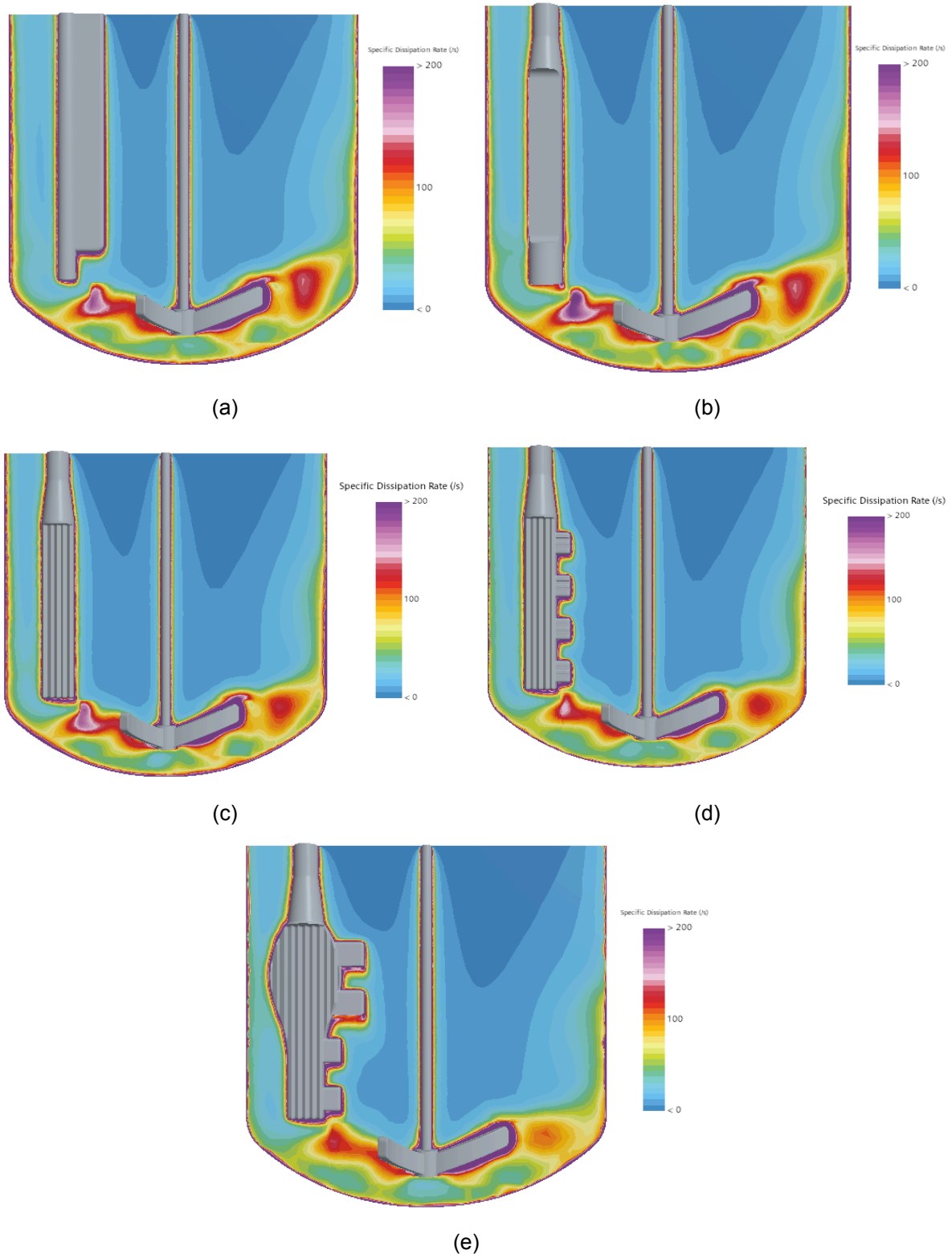
No eixo vertical, Figura 12, a geração de energia cinética turbulenta é alta nas proximidades do impelidor, como esperado, dado que essa região concentra maior vorticidade e turbulência. As novas chicanas mostraram uma menor geração de energia cinética turbulenta para a mesma rotação, indicando uma maior eficiência na quebra dos vórtices.

No eixo horizontal, Figura 13, observamos uma redução da energia cinética turbulenta nos cantos do tanque e uma diminuição perto do impelidor. Nas proximidades das novas chicanas, houve uma maior uniformidade na distribuição da turbulência, evidenciando a eficácia dessas geometrias em quebrar os vórtices.

A dissipação de energia turbulenta (ϵ), representada nas Figuras 14 e 15, é outra variável fundamental no fluxo turbulento. A taxa de dissipação afeta a micromistura e as taxas de transferência de calor e massa, sendo crucial em

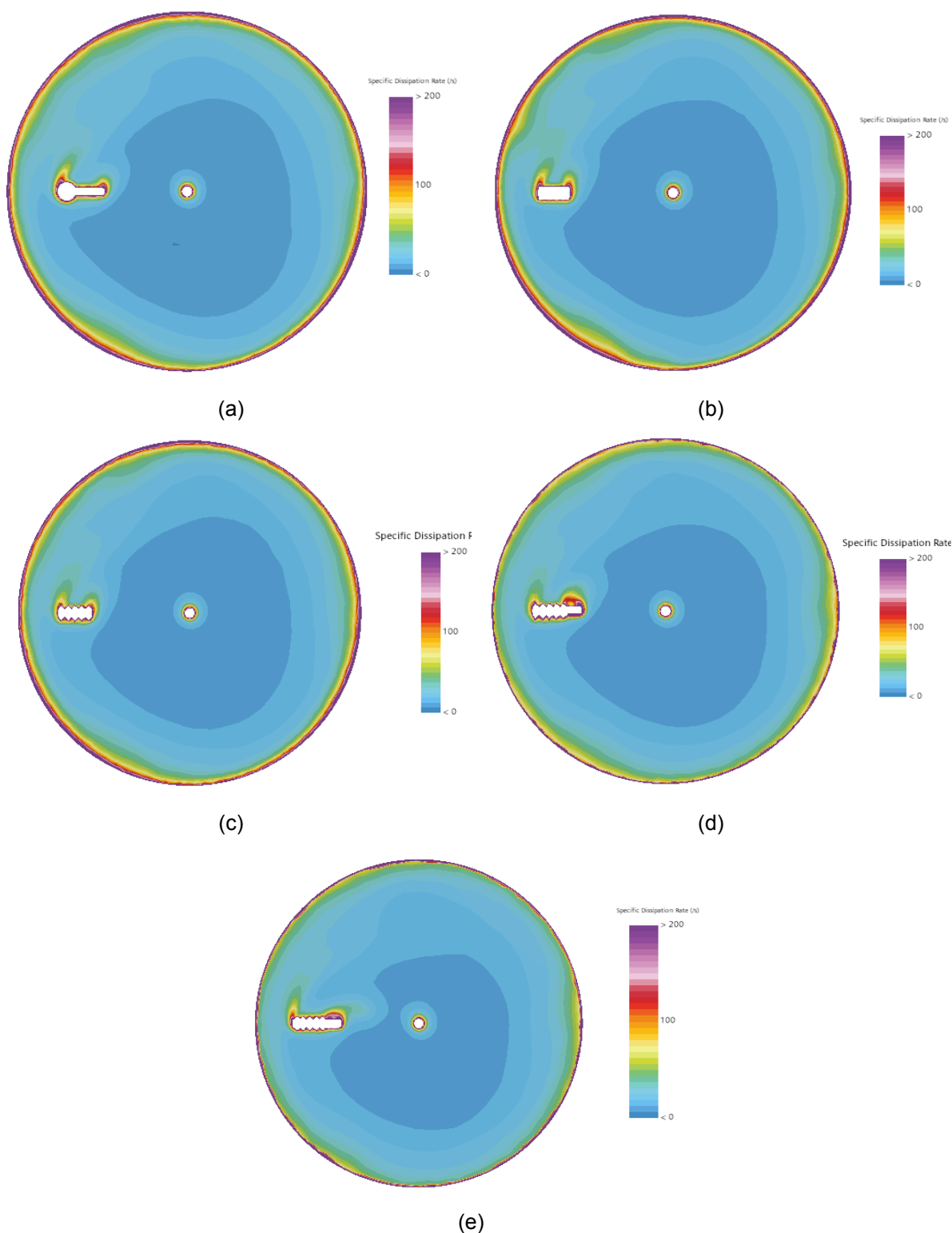
sistemas como biorreatores, onde altas taxas de dissipação podem causar danos celulares e reduzir o rendimento (VAKILI, M.H.).

Figura 14. Perfil de dissipação turbulenta vertical para as chicanas: (a) Fin; (b) Beavertail; (c) W-Baffle; (d) WT-Baffle; (e) WTC-Baffle.



Fonte: o autor

Figura 15. Perfil de dissipação turbulenta horizontal para as chicanas: (a) Fin; (b) Beavertail; (c) W-Baffle; (d) WT-Baffle; (e) WTC-Baffle.



Fonte: o autor

Em aplicações farmacêuticas, onde microrganismos estão envolvidos e não podem ser degradados, é desejável uma menor dissipação de energia, para evitar o aquecimento indesejado do tanque. No eixo vertical (Figura 14), notou-se que as

novas chicanas, especialmente as WT-Baffle e WTC-Baffle, reduziram significativamente a dissipação nas proximidades do eixo. No entanto, foi observada uma dissipação mais elevada nas regiões próximas às paredes. Já no eixo horizontal (Figura 15), as chicanas WT-Baffle e WTC-Baffle apresentaram uma redução perceptível na dissipação ao longo das paredes do tanque, enquanto as chicanas Fin e Beavertail acumularam dissipação no meio horizontal.

Essas análises demonstram que as novas chicanas, como as geometrias W-Baffle, WT-Baffle e, especialmente, a WTC-Baffle, são capazes de otimizar o desempenho do tanque de mistura, promovendo maior eficiência na quebra de vórtices e melhor distribuição de velocidade e turbulência.

5.CONCLUSÃO

Este trabalho apresentou uma análise detalhada da aplicação de Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) para o estudo de novas geometrias de chicanas em tanques agitados, com foco na indústria farmacêutica. Através de simulações numéricas realizadas no software *STAR-CCM+*, foi possível modelar, validar e comparar diferentes tipos de chicanas, incluindo as convencionais Beavertail e Fin, e novas geometrias propostas, como a W-Baffle, WT-Baffle e WTC-Baffle.

Os resultados obtidos indicam que as novas geometrias, em especial a WTC-Baffle, apresentaram ganhos significativos em termos de eficiência de mistura e redução do consumo de energia, quando comparadas às chicanas tradicionais. A WTC-Baffle se destacou ao oferecer melhor distribuição de velocidade e menor dissipação de energia, sendo capaz de otimizar o desempenho do processo de agitação em tanques de grande porte.

Essas inovações podem trazer importantes benefícios para a indústria farmacêutica, contribuindo para o desenvolvimento de processos mais eficientes, com menor consumo de recursos e maior controle sobre a qualidade dos produtos finais. Além disso, este estudo demonstra a relevância do uso de CFD como uma ferramenta poderosa na otimização de processos industriais, abrindo novas possibilidades para futuras pesquisas na área de modelagem e simulação de fluidos em tanques agitados.

REFERÊNCIA

HIRSCH, Charles. Numerical Computation of Internal and External Flows: Fundamentals of Computational Fluid Dynamics. 2. ed. [S. l.: s. n.], 2007. v. 1.

DAMIÁN, Santiago Márquez. AN EXTENDED MIXTURE MODEL FOR THE SIMULTANEOUS TREATMENT OF SHORT AND LONG SCALE INTERFACES. 2013. Tese Doutorado (Doutor) - UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL, [S. l.], 2013.

KUNDU, Pijush K.; COHEN, Ira M. Fluid Mechanics. 3. ed. [S. l.: s. n.], 2004.

DENG, Xin et al. Methodology of turbulence parameter correction in water-lubricated thrust bearings. Journal of Fluids Engineering, v. 141, n. 7, p. 071104, 2019.

Szeri, A. Z., 2010, Fluid Film Lubrication, Cambridge University Press, New York.
Sricharan Srinath. Modeling and prediction of near wall turbulent flows. Fluids mechanics [physics.class-ph]. Ecole Centrale de Lille, 2017. English. □NNT: 2017ECLI0029□. □tel-01803407□

BERBEROVIĆ, Edin et al. Drop impact onto a liquid layer of finite thickness: Dynamics of the cavity evolution. Physical Review E, v. 79, n. 3, p. 036306, 2009.

BREDBERG, Jonas. On the wall boundary condition for turbulence models. Chalmers University of Technology, Department of Thermo and Fluid Dynamics. Internal Report 00/4. Goteborg, p. 8-16, 2000.

JOSHI, Jyeshtharaj B. et al. CFD simulation of stirred tanks: Comparison of turbulence models (Part II: Axial flow impellers, multiple impellers and multiphase dispersions). The Canadian Journal of Chemical Engineering, v. 89, n. 4, p. 754-816, 2011.

JASAK, Hrvoje. Error analysis and estimation in the Finite Volume method with applications to fluid flows. 1996.

MOUKALLED, Fadl et al. The finite volume method. Springer International Publishing, 2016.

KRESTA, Suzanne M. et al. (Ed.). Advances in industrial mixing: a companion to the handbook of industrial mixing. John Wiley & Sons, 2015.

TAGHAVI, Mahsa et al. Experimental and CFD investigation of power consumption in a dual Rushton turbine stirred tank. Chemical Engineering Research and Design, v. 89, n. 3, p. 280-290, 2011.

AUBIN, Joelle; FLETCHER, David F.; XUEREB, Catherine. Modeling turbulent flow in stirred tanks with CFD: the influence of the modeling approach, turbulence model and numerical scheme. *Experimental thermal and fluid science*, v. 28, n. 5, p. 431-445, 2004.

SIRASITTHICHOKE, Chadakarn; SALLOUM, Sandrine; ARMENANTE, Piero M. Power number and hydrodynamic characterization of a stirred vessel equipped with a retreat-blade impeller and different types of pharmaceutical single baffles. *Chemical Engineering Science*, v. 257, p. 117725, 2022.

CHAPPLE, D. et al. The effect of impeller and tank geometry on power number for a pitched blade turbine. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 80, n. 4, p. 364-372, 2002.

PORDAL, H. S.; MATICE, C. J.; FRY, T. J. Computational fluid dynamics in the pharmaceutical industry. *Pharm. Technol*, v. 26, n. 2, p. 72-79, 2002.

RIELLY, C. D.; HABIB, M.; SHERLOCK, J.-P. Flow and mixing characteristics of a retreat curve impeller in a conical-based vessel. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 85, n. 7, p. 953-962, 2007.

PRADA, Ronald Jaimes. Obtenção de correlações de Nusselt em reatores de tanque agitado através da fluidodinâmica computacional (CFD). 2015. Tese de Doutorado. [sn].

MACIEL, Thábata Cristina Giglio Lourenço. Simulação fluidodinâmica de um vaso agitado em OpenFOAM. TCC (Graduação)-Curso de Química Industrial, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2013.

MALISKA, Clovis Raimundo. Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional . Grupo Gen-LTC, 2017.

FERZIGER, Joel H.; PERIĆ, Milovan; STREET, Robert L. Computational methods for fluid dynamics. springer, 2019.

DA SILVA, Paula Trindade. Estudo do escoamento em um tanque agitado por PIV e CFD. 2020. Tese de Doutorado. [sn].

KE, Tan. CFD SIMULATION OF SIEVE TRAY HYDRODYNAMICS USING OPENFOAM. 2022.

DESHPANDE, S. S. et al. An experimental and computational investigation of vortex formation in an unbaffled stirred tank. *Chemical Engineering Science*, v. 168, p. 495-506, 2017.

MENTER, Florian R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. AIAA journal, v. 32, n. 8, p. 1598-1605, 1994.

ILHA, Anderson; COLAÇO, Marcelo J. Atila P. Silva Freire. Turbulência. 2006.

WILCOX, David. Turbulence modeling-an overview. In: 39th aerospace sciences meeting and exhibit. 2001. p. 724.

ASKARI MAHVELATI, Ehsan. Development, validation and application of population balance models in Eulerian approach for bubbly flow reactors. 2018.

POPOVAC, M.; HANJALIC, K. Compound wall treatment for RANS computation of complex turbulent flows and heat transfer. Flow, turbulence and combustion, v. 78, p. 177-202, 2007.

POPE, Stephen B. Turbulent flows. Measurement Science and Technology, v. 12, n. 11, p. 2020-2021, 2001.

RUSHTON, J. H. Power characteristics of mixing impellers part 1. Chem. Eng. Prog., v. 46, p. 395-404, 1950.