



SIMULAÇÃO EM CFD DA SUSPENSÃO DE SÓLIDOS EM UM TANQUE MECANICAMENTE AGITADO

FELIPE A. M. VILELA*, JOÃO R. C. SOLETTI, LEON C. V. CAVALCANTE, RODOLFO J. BRANDÃO, SANDRA H. V. DE CARVALHO, JOÃO I. SOLETTI

Universidade Federal de Alagoas, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química
*e-mail: felipe.vilela@ctec.ufal.br

RESUMO – O processo de suspensão sólido-líquido em tanques mecanicamente agitados é largamente empregado em diversos setores industriais. Apesar da sua grande aplicação, ainda existe uma carência de informações a respeito dos fenômenos físicos envolvidos durante a suspensão de partículas. Neste contexto, o presente trabalho teve como objetivo avaliar o escoamento e a distribuição de partículas sólidas em um tanque agitado de tampo torisférico com impelidor de pás inclinadas em 45°. Para isto, simulações numéricas em CFD foram realizadas, empregando-se a abordagem Euleriana Granular. Para avaliação do fenômeno de turbulência no escoamento, foi aplicado o modelo $k-\omega$ SST-CC e, para a descrição da rotação do impelidor, o modelo MRF (*Multiple Reference Frame*) foi adotado. As simulações foram realizadas em diferentes velocidades de rotação do impelidor, 500, 850 e 1200 rpm, com o intuito de avaliar o seu efeito sobre a fração volumétrica, velocidade e altura da nuvem de sólidos do sistema. Os resultados obtidos mostraram que as velocidades de 500 rpm e 850 rpm proporcionaram regiões de acúmulo de sólidos para a geometria proposta para o tanque agitado, enquanto que a rotação de 1200 rpm promoveu uma distribuição de sólidos mais homogênea, com altura da nuvem de sólidos mantida acima de 90% do nível do líquido.

INTRODUÇÃO

A agitação está presente em um grande número de processos em diversos setores industriais, tais como mineração, alimentos, petróleo, produtos químicos e farmacêuticos, tratamento de efluentes, sendo aplicada em diversas operações como homogeneização, cristalização, dispersão de gases, flotação mecânica, polimerização e transferência de calor (Ammar et al., 2011).

Embora, sob um ponto de vista geométrico, um tanque agitado seja relativamente simples quando comparado a outras operações unitárias, existem alguns fatores que podem aumentar o nível de complexidade de um bom projeto, tais como a existência de múltiplas fases e frações volumétricas no processo e a existência de

condições inerciais complexas (Celso Fernandes Joaquim Junior et al., 2012).

Dentro dos processos de agitação multifásicos, destaca-se a suspensão de sólidos, com importância em processos industriais, como reações heterogêneas, cristalização, lixiviação, polimerização, processos de tratamento d'água, dentre outros (Gu et al., 2020), sendo, portanto, fundamental o seu estudo.

Estes processos frequentemente ocorrem em tanques mecanicamente agitados, onde a mistura entre as fases é provocada pela rotação do impelidor no interior do tanque. Sendo o desenho do impelidor o principal responsável por determinar os padrões de escoamento nestes equipamentos (Suzanne M. Kresta et al., 2016).

Para suspensão de sólidos, estes padrões de escoamentos no interior do tanque devem ser predominantemente axiais e capazes de promover gradientes de velocidade e

turbulência que favoreçam mecanismos de resuspensão que mantenham os sólidos em constante movimentação (Ochieng and Lewis, 2006).

Em processos reativos, a homogeneidade na distribuição de sólidos reduz os tempos de reação, proporciona maiores rendimentos, evita fugas térmicas e o acúmulo de reagentes.

Esses processos geralmente requerem uma grande área de contato entre as partículas sólidas e o meio fluido para que não sejam limitados pela taxa de transferência de massa.

Esta taxa deixa de ser o fator limitante quando a velocidade de rotação do impelidor é igual à velocidade mínima de suspensão (Changi e Wong, 2016; Kazemzadeh et al., 2020).

Outros fatores que devem ser observados são: a distribuição de sólidos no interior do tanque, a velocidade destas partículas e a altura da nuvem de sólidos formadas devido à agitação. Porém, estas grandezas necessitam de sistemas de medição e monitoramento complexos e de alto custo (Ochieng and Onyango, 2010; Stuparu et al., 2021).

As simulações fluidodinâmicas de sistemas multifásicos são ferramentas essenciais para melhorar a compreensão a respeito dos fenômenos físicos e das variáveis envolvidas em um processo, uma vez que algumas grandezas são difíceis de serem mensuradas experimentalmente (Brodny e Tutak, 2021).

A Fluidodinâmica Computacional (CFD) tem se destacado pela praticidade que oferece no projeto de operações sensíveis às alterações na sua geometria, como no caso de processos de agitação, os quais são altamente dependentes do formato do impelidor, do tanque de mistura, da presença de chicanas e das posições desses elementos no equipamento (Peiter, 2017).

Constantemente novos trabalhos são desenvolvidos para melhoria das previsões em sistemas de agitação, contribuindo para projeto e otimização do processo, além de reduzir custos e esforços experimentais. Neste contexto, o presente trabalho teve como objetivo avaliar o escoamento e a distribuição de sólidos em um tanque mecanicamente agitado, através da aplicação de diferentes velocidades de rotação do impelidor.

Para isto, simulações numéricas em CFD foram realizadas utilizando a abordagem Euleriana Granular, aplicando o modelo de turbulência $k-\omega$ SST-CC. Para a descrição da rotação do impelidor, o modelo MRF (*Multiple Reference Frame*) foi adotado. A partir das diferentes velocidades de rotação empregadas, foi possível avaliar o seu efeito sobre a fração volumétrica, velocidade e altura da nuvem de sólidos do sistema.

METODOLOGIA

A geometria e a malha computacional foram modeladas de acordo com o reator químico Syrris *Orb Jacketed Reactor* de tempo torisférico com capacidade de 1000 mL.

Com o objetivo de facilitar a geração e controle da malha computacional, a geometria foi estrategicamente particionada como mostra a Figura 1. Um impelidor de quatro pás inclinadas em 45° foi modelado, o qual é considerado o mais comum para suspensões de sólidos (Joshi et al., 2011).

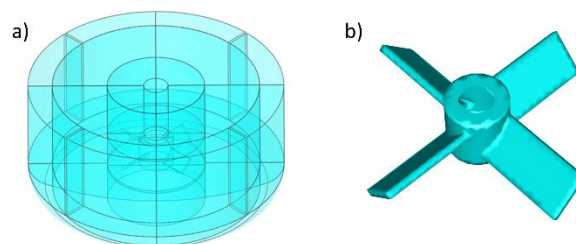


Figura 1: a) Geometria particionada e b) geometria do impelidor.

A malha computacional foi confeccionada utilizando o *software Ansys Mesh*, versão estudante. O método de dimensionamento de arestas (*Edge Sizing*) foi aplicado para melhor controle e refinamento da malha.

O volume simulado foi dividido em dois domínios para utilização do modelo MRF, o rotacional e o estático. No domínio rotacional, próximo ao impelidor foram utilizadas células tetraédricas, para uma melhor adaptação ao formato do impelidor. No domínio estático, foram utilizadas células predominantemente hexaédricas, para a obtenção de uma malha mais estruturada.

O número total de células da malha foi de 498 mil, sendo 305 mil tetraédricas e 193 mil

hexaédricas. A malha criada pode ser vista na Figura 2.

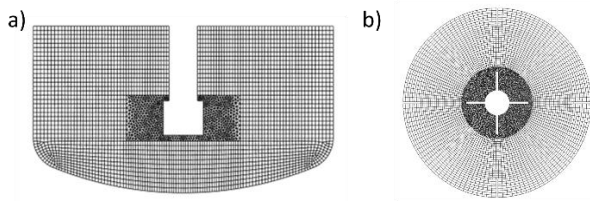


Figura 2: Malha computacional em a) corte vertical central e b) corte horizontal na altura central do impelidor.

A modelagem matemática e as simulações foram realizadas através do software Ansys Fluent. Um resumo dos modelos utilizados está na Tabela 1.

Tabela 1 - Resumo dos modelos matemáticos.

Modelo multifásico	Euleriano granular
Pressão de sólidos	Lun et al (1984)
Distribuição radial	Lun et al (1984)
Viscosidade granular	Gidaspow (1990)
Modelo de turbulência	k- ω SST-CC (1994)
Modelo de arraste	Gidaspow (1990)
Modelo de dispersão turbulenta	Simonin e Viollet (1990)
Modelo rotacional	MRF (1994)

Visando avaliar a dispersão das partículas em diferentes condições operacionais, foram utilizadas as velocidades de rotação do impelidor de 500, 850 e 1200 rpm.

A velocidade de rotação de 850 rpm corresponde à velocidade de suspensão estimada pela correlação de Zwietering (Devarajulu e Loganathan, 2016; Zwietering, 1958) e 500 rpm e 1200 rpm representam variações de $\pm 30\%$.

A mistura sólido-líquido utilizada no estudo foi composta pelo tetraidrofurano (THF) líquido (densidade de 889 Kg/m^3 e viscosidade cinemática de $0,00048 \text{ Kg/ms}$) e partículas de magnésio (densidade de 1738 Kg/m^3).

Modelo Euler-Granular

A teoria Euler-Granular foi utilizada para modelar o escoamento multifásico. Este modelo assume que cada uma das fases envolvidas coexiste e interage entre si como

meios contínuos e interpenetrantes, onde a fase sólida é interpretada como um material granular e, portanto, escoar e se comporta como um fluido (Gohel et al., 2012; Gu et al., 2020).

As equações de conservação são calculadas para cada fase. Para um sistema com q fases sem termos fonte e sem considerar mecanismos de transferência de massa, a equação da continuidade é dada pela Equação 1 (Anderson and Jackson, 1967; Tamburini et al., 2014).

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi_q \rho_q) + \nabla \cdot (\phi_q \rho_q \vec{u}_q) = 0 \quad (1)$$

sendo, ϕ a fração volumétrica, ρ a densidade e \vec{u} a velocidade para cada fase, respectivamente.

As equações de conservação de momento para fase líquida e sólida são mostradas nas Equações 2 e 3, respectivamente (Ding and Gidaspow, 1990; Lun et al., 1984; Syamlal et al., 1993).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\phi_l \rho_l \vec{u}_l) + \nabla \cdot (\phi_l \rho_l \vec{u}_l \vec{u}_l) \\ = -\phi_l \nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_l \\ + \phi_l \rho_l \vec{g} \\ + \sum_{s=1}^2 (K_{sl} (\vec{u}_s - \vec{u}_l)) + \vec{F}_l \\ + \vec{F}_{td,l} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s \vec{u}_s) + \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \vec{u}_s \vec{u}_s) \\ = -\phi_s \nabla p - \nabla p_s + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_s \\ + \phi_s \rho_s \vec{g} \\ + \sum_{l=1}^2 (K_{ls} (\vec{u}_l - \vec{u}_s)) + \vec{F}_s \\ + \vec{F}_{td,s} \end{aligned} \quad (3)$$

Em que p é a pressão compartilhada entre as fases, p_s é a pressão de sólido do modelo granular, $\bar{\bar{\tau}}$ é o tensor tensão, g é a aceleração da gravidade, K é o coeficiente de troca de

momento na interface, \vec{F} são as forças externas e \vec{F}_{td} é a força de dispersão turbulenta.

Modelo de interação de fases

Foram consideradas a força de arrasto e a força de dispersão turbulenta na modelagem das forças de interação entre as fases. A força de arrasto é considerada no escoamento sólido-líquido e pode ser determinada utilizando o modelo de Gidaspow (1994) para $\phi_l > 0,8$ e considerando $K_{sl} = K_{ls}$ (Equação 4 e 5).

$$K_{sl} = \frac{3}{4} C_D \frac{\phi_s \phi_l |\vec{u}_s - \vec{u}_l|}{d_s} \phi_l^{-2,65} \quad (4)$$

$$C_D = \frac{24}{\phi_l Re_s} [1 + 0,15(\phi_l Re_s)^{0,687}] \quad (5)$$

Onde, d_s é o diâmetro da partícula e Re_s é o número de Reynolds relativo.

A força de dispersão turbulenta mede a transferência de momento entre a fase sólida e líquida causada pela turbulência. Para este fim, foi utilizado o modelo proposto e descrito em detalhes por Simonin e Viollet (1990).

Modelagem da rotação do impelidor

Para simular a rotação do impelidor foi utilizado o modelo *Multiple Reference Frame* (MRF). Trata-se de um método onde o equacionamento de um sistema de referência móvel é usado no interior do domínio rotacional e equações estacionárias são usadas no domínio estático (Luo et al., 1994; Patil et al., 2021).

Neste método, as interações transitórias impelidor/chicana não são levadas em consideração, reduzindo o custo computacional consideravelmente, sem prejuízos significativos nos resultados finais (Lane, 2017).

Modelo de turbulência

Foi utilizado o modelo de turbulência SST k- ω , que foca na interação do escoamento dos fluidos com as paredes do equipamento e é adequado para escoamento multifásico de sistemas com sólidos granulares (ANSYS inc, 2020; Menter, 1994; Wang et al., 2022).

SIMULAÇÃO NUMÉRICA

Inicialmente foi avaliado o fluxo monofásico em estado estacionário, o qual foi usado como referência para entrada dos valores iniciais na simulação transiente multifásica.

Como condição de contorno, em todas as paredes foi considerada a condição de não-deslizamento. Para simplificação da resolução das simulações, foi assumido que a presença das chicanas era suficiente para manter o nível na superfície da fase líquida constante, e, portanto, a condição de não-deslizamento também foi aplicada na face superior da geometria.

Como condição inicial, a fração volumétrica da fase sólida foi considerada homogênea em todo o fluido para uma melhor consistência e convergência (Ochieng and Onyango, 2010) da simulação. A fração inicial de sólidos consistiu em aproximadamente $\phi_s^0 = 0,052$.

O critério de convergência absoluta foi de 10^{-3} , aplicado a: velocidades das fases líquida e sólida; energia cinética turbulenta e taxa de dissipação específica da fase líquida; e, fração de volume da fase sólida. E o critério de parada de simulação foi para o tempo de escoamento igual a 4 s.

Para garantir uma melhor convergência, foi utilizado um passo de tempo inicial de 10^{-8} s que foi aumentado até alcançar um valor equivalente a 10% do número de Courant para tanques agitados, como mostra a Equação 7.

$$CFL = \frac{u_{tip} \Delta t}{\Delta x} \quad (6)$$

Onde, u_{tip} é a velocidade linear da ponta da lâmina do impelidor, Δt é o passo de tempo e Δx é a raiz cúbica do volume da menor célula da malha.

Para o pós-processamento, foram avaliados os resultados instantâneos, para um tempo de escoamento de 4 s, gráficos de contorno foram utilizados para avaliação da fração volumétrica de sólidos.

O resumo dos métodos de solução está na Tabela 2.

Tabela 2 - Resumo dos métodos de solução.

Acoplamento pressão-velocidade	Coupled
Discretização espacial	Gradiente: <i>Green-Gauss Node Based</i> Pressão: <i>PRESTO!</i> Momento, energia cinética turbulenta e taxa de dissipação específica: <i>QUICK</i> Fração volumétrica: <i>Modified HRIC</i>
Passo de tempo	Entre 10^{-8} e 10^{-5} s
Tempo de escoamento	4 s
Critério de convergência	10^{-3}

Os contornos foram analisados em dois planos. O primeiro plano (Plano 1) foi um corte vertical que atravessa a geometria do tanque em um ponto equidistante entre as chicanas. O segundo plano (Plano 2) foi um corte horizontal que atravessa o tanque na altura do centro do impelidor (Figura 3).

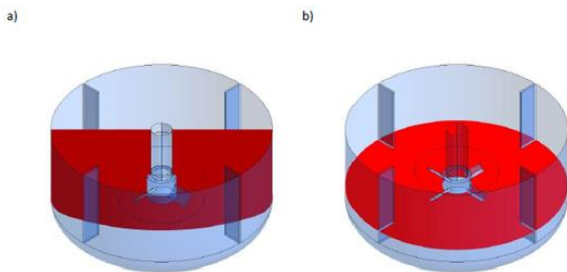


Figura 3: Planos utilizados para avaliar os contornos da distribuição de sólidos: (a) Plano 1; (b) Plano 2.

Gráficos cartesianos foram utilizados para avaliar a fração volumétrica de sólidos e a velocidade da fase sólida ao longo de linhas horizontais próximas do fundo (altura equivalente à $0.1H$), ao centro ($0.5H$) e ao nível da fase líquida ($0.9H$), e linhas verticais próximas ao eixo (raio equivalente à $0.1R$), na metade da distância entre o eixo e a parede do tanque ($0.5R$) e próximas à parede ($0.9R$).

Para avaliação do comportamento e altura da nuvem de sólidos, criou-se uma isosuperfície para fração volumétrica de sólidos igual a ϕ_s^0 , ou seja, esta é uma superfície que traça todos os

pontos no domínio onde ϕ_s tem homogeneidade ideal. Apesar de ser um resultado bidimensional (uma superfície), a forma como esta isosuperfície se distribui no interior do tanque permite uma avaliação quase que tridimensional da variável desejada.

Para uma avaliação adimensional dos resultados, algumas grandezas normalizadas foram definidas. A fração volumétrica normalizada da fase sólida foi dada por $\phi_s' = \phi_s / \phi_s^0$. A altura normalizada foi definida como $z' = z/H$, em que z representa uma altura qualquer do tanque e H a sua altura máxima. O raio normalizado do tanque foi dado por $r' = r/R$, sendo r um raio qualquer no tanque e R o seu raio total. A velocidade normalizada foi definida pela razão $u' = u/u_{tip}$.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Perfis da fração volumétrica da fase sólida

A Figura 4 mostra o perfil para fração volumétrica da fase sólida, nos Plano 1 e Plano 2, para três velocidades de agitação ($N_1 = 500$ rpm, $N_2 = 850$ rpm e $N_3 = 1200$ rpm).

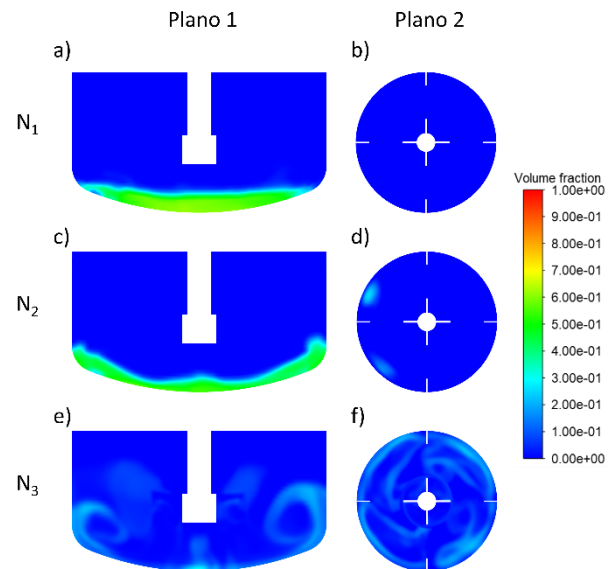


Figura 4: Fração volumétrica de sólidos nas velocidades de rotação de $N_1=500$ rpm, $N_2=850$ rpm e $N_3=1200$ rpm.

Observa-se que para a velocidade de 500 rpm, no Plano 1 (Figura 4a), as partículas sólidas permanecem concentradas no fundo do tanque e que a transferência de momento causada pela movimentação do impelidor não é

significativo para movimentação da fase sólida.

Ou seja, a energia fornecida para o sistema através da rotação do impelidor não é suficiente para provocar a suspensão dos sólidos, mas é suficiente para promover a movimentação destas partículas no fundo do equipamento.

Ao avaliar o Plano 2, ainda na velocidade de rotação de 500 rpm (Figura 4b), o contorno apresentado encontra-se com coloração uniforme, apresentando valores próximos a zero. Isto é devido à ausência de sólidos na altura do impelidor para esta condição de velocidade, corroborando com a observação realizada para a Figura 4a.

Para velocidade N_2 (850 rpm) no Plano 1 (Figura 4c), a região com alta concentração de sólidos passa a apresentar, na interface sólido-líquido, um relevo que possibilita observar depressões logo abaixo das pás do impelidor e aclives próximas às paredes, um comportamento que condiz com o padrão de escoamento causado por impelidores de pás inclinadas em 45° .

Pode-se observar, no Plano 2 (Figura 4d), que o contorno não apresenta coloração uniforme. Isto indica a presença de sólidos nesta superfície. A assimetria deste perfil é um indício de um movimento ondulatório da fase sólida granular, promovido pela utilização dos modelos de força de arraste e de dispersão turbulenta.

Também é perceptível que as regiões de acúmulo, mostradas no Plano 2 (Figura 4d), estão próximas às chicanas, indicando que o modelo considera a interação entre o escoamento e as paredes e que esses acessórios favorecem na dispersão de sólidos.

Para N_3 (1200 rpm), no Plano 1 (Figura 4e), não há áreas de acúmulo de sólidos como observado para as velocidades de agitação anteriores. Isso sugere que, nesta velocidade de agitação, não ocorre apenas suspensão de sólidos, mas que eles estão uniformemente distribuídos pelo volume do reator.

No fundo do reator, logo abaixo do eixo, o movimento do rotor gera uma região de vorticidade intensa onde a força centrípeta é dominante, o que leva à formação de uma microrregião de acúmulo de partículas sólidas (Figura 4e).

A presença de sólidos no Plano 2 (Figura 4f) destaca-se pela tonalidade verde, que indica a fração volumétrica desta fase denotando que há dispersão de sólidos neste plano.

Nota-se também a interação do escoamento e da distribuição da fase sólida com as chicanas que favorecem a turbulência no sistema e a dispersão caótica das partículas.

A Figura 5 apresenta a fração volumétrica espacial da fase sólida normalizada, no interior do tanque, em função do seu raio (gráficos à esquerda) e altura (gráficos à direita). Desta forma, é possível avaliar quantitativamente a distribuição de sólidos no reator.

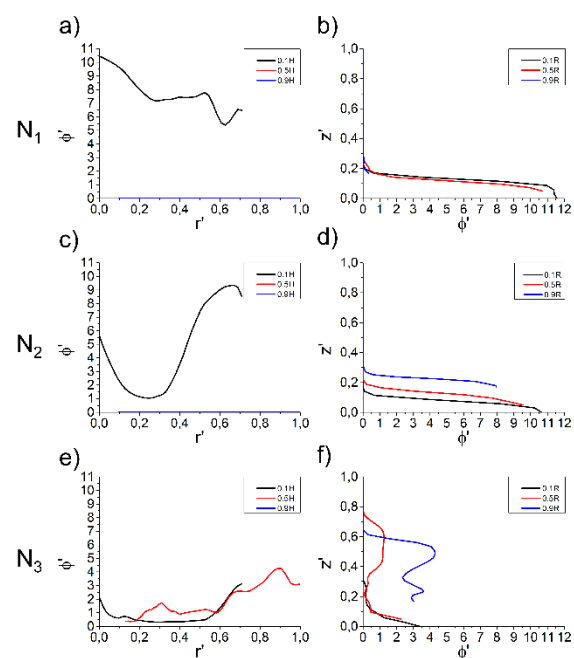


Figura 5: Variação espacial das frações volumétricas normalizadas da fase sólida para três diferentes velocidades de agitação.

A condição ideal de distribuição é alcançada quando a fração volumétrica normalizada (ϕ') é igual a 1. Valores acima da unidade indicam que, no local, a concentração de sólidos é maior que a condição ideal de mistura, valores abaixo da unidade indicam que no local a concentração de sólidos é menor do que o desejado.

Tanto para uma distribuição radial quanto para distribuição axial, nota-se que com o aumento da velocidade de agitação as curvas tendem a se aproximar da condição de ideal, ou seja, oscilar em torno de $\phi' = 1$.

Para as distribuições radiais, nas

velocidades de 500 e 850 rpm (Figura 5a e Figura 5c) a presença de sólidos na faixa intermediária e próxima ao nível do tanque é praticamente nula. Já na faixa equivalente à $0,1H$ há um acúmulo de sólidos na região central do tanque e nas proximidades da parede.

À medida que a velocidade aumenta (Figura 5c) nota-se a queda nos valores da fração volumétrica normalizada ao longo da curva localizada próxima ao fundo do tanque e um perfil com uma queda seguida de uma ascensão devido à baixa concentração de sólidos próximo ao raio do impelidor e uma alta concentração de sólidos próximo às paredes.

Para a altura centralizada, é observado um maior acúmulo nas regiões próximas às paredes, causada pelo perfil do escoamento ocasionada pelo impelidor utilizado. Observando a altura mais próxima à superfície da fase líquida a presença de sólidos é praticamente nula para as velocidades que foram simuladas.

Para as distribuições axiais, observa-se na Figura 5b que a fração volumétrica chega a valores doze vezes acima do ideal para a menor velocidade.

Interessante notar a mudança abrupta dos perfis entre as velocidades de 850 e 1200 rpm, o que indica que a velocidade mínima de suspensão de sólidos está presente entre estas duas condições.

A velocidade mínima de suspensão de sólidos calculada pela equação de Zwietering indica um valor de 1300 rpm para os parâmetros deste sistema, porém, deve-se ressaltar que a geometria utilizada possui um tampo torisférico, e não chato, e nível de líquido que corresponde à 55 % do diâmetro do tanque, ou seja, abaixo da relação geométrica tradicional de manter o nível igual ao diâmetro do tanque agitado.

Para velocidade mais alta é possível observar um maior acúmulo de sólidos ao longo da componente axial na região das paredes e que a região que indica frações volumétricas normalizadas abaixo da unidade são aquelas na região próxima ao impelidor ou próximas ao nível da fase líquida.

Perfis da velocidade da fase sólida

A Figura 6 apresenta os perfis de

velocidade da fase sólida a 500 (N_1), 850 (N_2) e 1200 rpm (N_3), ao longo do raio normalizado, em função da altura (gráficos à esquerda); e, ao longo da altura normalizada, para diferentes raios (à direita).

Pode-se observar uma região estagnada para N_1 e N_2 (Figuras 6a-6d), enquanto para N_3 , o sistema apresenta leves perturbações na região de topo no raio de $0,5R$ (Figura 6f).

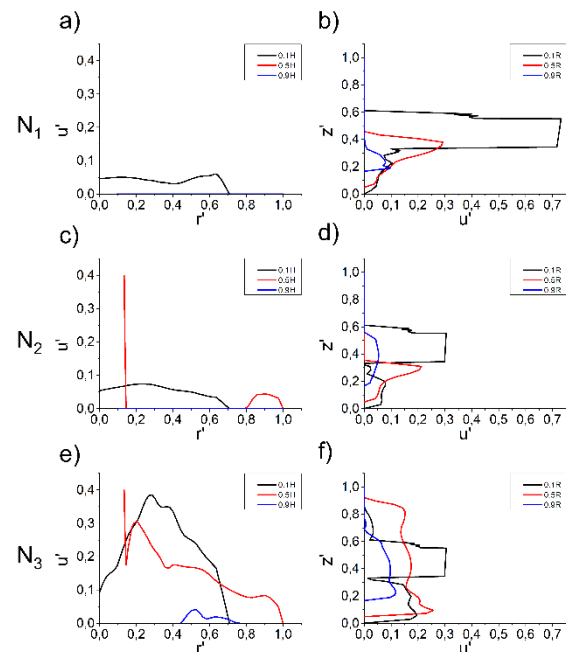


Figura 6: Variação espacial das velocidades normalizadas da fase sólida para velocidades de agitação $N_1 = 500$ rpm, $N_2 = 850$ rpm e $N_3 = 1200$ rpm.

Em 500 rpm, os sólidos no fundo do tanque não se encontram em repouso, mas apresentam baixa velocidade (Figuras 6a e 6b). Esses gráficos também reforçam que para N_3 o impelidor fornece momento suficiente para que as partículas sólidas apresentem velocidade não nula mesmo acima de $0,9H$, próximo ao nível da fase líquida (Figura 6f).

Altura da nuvem de sólidos (ANS)

A altura da nuvem de sólidos é essencial para determinar a qualidade da distribuição do material particulado em um tanque agitado.

A partir da análise da Figura 7, nota-se que a ANS é sensível à posição e não apresenta simetria ao longo do volume do tanque agitado, devido à sua natureza turbulenta. Portanto, uma análise tridimensional é mais adequada. As isosuperfícies, Figura 7, representam a interface

entre as fases sólida e líquida, ou seja, a altura da nuvem de sólidos para cada uma das velocidades analisadas.

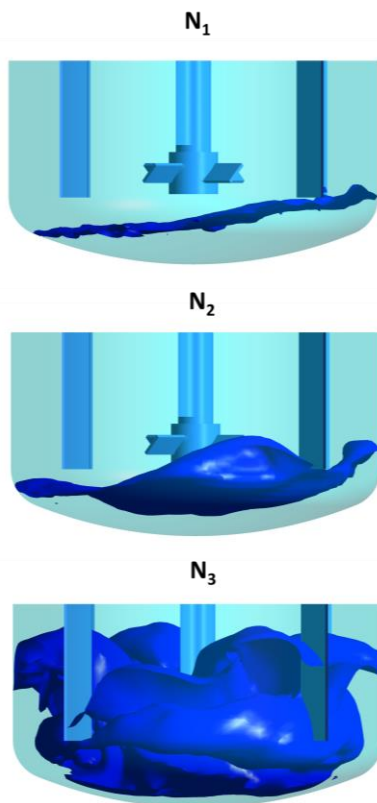


Figura 7: Isosuperfícies da altura da nuvem de sólidos para velocidades de agitação $N_1 = 500$ rpm, $N_2 = 850$ rpm e $N_3 = 1200$ rpm.

Para 500 rpm, nota-se que a altura da nuvem de sólidos é insuficiente para a homogeneização das fases. A análise tridimensional reforça o comportamento ondulado e assimétrico da fase granular, e a influência dos modelos de força de arrasto e de dispersão turbulenta, na reprodução deste comportamento.

Em 850 rpm, fica evidente que o uso isolado de análises unidimensionais ou bidimensionais pode levar a resultados enganosos. Isto ocorre pela falta de simetria apresentada pela nuvem de sólidos nessas condições, e à variabilidade dos parâmetros analisados ao longo do volume da geometria estudada.

A interação entre o movimento de sólidos e as chicanas se torna mais evidente devido à diferença entre o acúmulo de sólidos à montante e à jusante de cada chicana. Portanto, fica clara a importância das chicanas na dispersão da fase granular.

A isosuperfície obtida à 1200 rpm, reafirma a qualidade da mistura nestas condições, com a superfície dispersa por todo o volume. Isto indica uma mistura adequada, e uma altura de nuvem de sólidos próxima do nível superior. É possível observar os padrões e o comportamento oscilatório desta superfície, bem como a interação do escoamento granular com chicanas.

Na Tabela 3, é apresentada a altura máxima normalizada da superfície isométrica em função das velocidades de agitação analisadas.

Tabela 3: Altura máxima da nuvem de sólidos normalizada, em função da velocidade de agitação.

Velocidade de agitação (rpm)	Altura normalizada máxima da nuvem de sólidos
500	0,39
850	0,49
1200	0,91

Dentre as velocidades de agitação utilizadas, observa-se que 850 rpm, valor médio, apresenta um comportamento mais próximo de 500 rpm que de 1200 rpm. Isso ocorre uma vez que a condição de velocidade mínima para suspensão de sólidos está entre 850 e 1200 rpm.

CONCLUSÃO

A fluidodinâmica computacional é uma importante ferramenta para a compreensão do comportamento de escoamentos multifásicos em tanques mecanicamente agitados, auxiliando no projeto de equipamentos e previsão de resultados sob diferentes condições operacionais, de forma econômica e segura.

A partir das simulações numéricas realizadas, foi possível concluir que a velocidade de rotação do impelidor de 500 rpm não apresentou um bom desempenho para suspensão de partículas de magnésio em THF, para a geometria de tanque agitado proposta. Apesar de haver movimentação das partículas sólidas, estas se concentram no fundo do tanque, promovendo a estratificação das fases e, com isso, a área superficial das partículas sólidas não fica suficientemente expostas,

devido ao empacotamento.

O comportamento do escoamento da fase sólida à 850 rpm é semelhante ao perfil observado à 500 rpm. O movimento das partículas é mais intenso e a nuvem de sólidos alcança um nível mais alto. Entretanto, ainda foi verificada a estratificação das fases, não havendo, portanto, uma distribuição adequada dos sólidos. Este comportamento está de acordo com a estimativa teórica para velocidade mínima de suspensão de sólidos.

A velocidade de agitação de 1200 rpm resultou em uma distribuição de sólidos adequada por todo o volume do tanque, com homogeneidade da fração volumétrica. Ademais, não foram observadas partículas estagnadas, com a altura da nuvem de sólidos apresentando valores próximos à 90% do nível do líquido.

NOMENCLATURA

ϕ	Fração volumétrica	
ρ	Densidade	Kg/m ³
u	Velocidade	m/s
p	Pressão	N/m ²
p_s	Pressão de sólidos	N/m ²
$\bar{\tau}$	Tensor tensão	N/m ²
K	Coefficiente de troca de momento na interface	Kg/m ³ s
F_{td}	Força de dispersão turbulenta	N/m ³
F	Forças externas	N/m ³
C_D	Coefficiente de arraste	
d_s	Diâmetro da partícula	m
Re_s	Número de Reynolds relativo	
CFL	Número de Courant	
Δt	Passo de tempo	s
	Distância linear	
Δx	característica da menor célula da malha	m
	Velocidade linear da extremidade da pá do impelidor	
u_{tip}		m/s
u'	Velocidade linear local normalizada	
ϕ_s'	Fração volumétrica de sólidos normalizada	
u'	Velocidade normalizada	
r'	Raio do tanque normalizado	

z'	Altura do tanque normalizada	
H	Altura do tanque	m
R	Raio do tanque	m

AGRADECIMENTOS

Este trabalho foi realizado com apoio financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e da Fundação de Amparo e Pesquisa do Estado de Alagoas (FAPEAL), por meio do programa PPG-Empresa, processo número 133803/2019-8. Os autores também agradecem à empresa Interacta Química, ao Laboratório de Sistemas de Separação e Otimização de Processos (LASSOP), ao Laboratório de Pesquisa Em Recursos Naturais (LPqRN) e à Universidade Federal de Alagoas (UFAL).

REFERÊNCIAS

- Ammar, A.S., Salem, S.A., Badr, F.H., 2011. Rheological Properties of Wheat Flour Dough as Affected by Addition of Whey and Soy Proteins. *Pakistan Journal of Nutrition* 10, 302–306. <https://doi.org/10.3923/pjn.2011.302.306>
- Anderson, T.B., Jackson, R., 1967. Fluid mechanical description of fluidized beds: Equations of Motion. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals* 6, 527–539. <https://doi.org/10.1021/i160024a007>
- ANSYS inc, 2020. ANSYS© Fluent user's guide, R2020.2. ed. ANSYS inc, Canonsburg, PA.
- Celso Fernandes Joaquim Junior, Efraim Cekinski, Jose Roberto Nunhez, Luiz Carlos Urenha, 2012. *Agitação e Mistura na Indústria*, 1ª ED. ed. LTC.
- Changi, S.M., Wong, S.W., 2016. Kinetics Model for Designing Grignard Reactions in Batch or Flow Operations. *Org Process Res Dev* 20, 525–539. <https://doi.org/10.1021/acs.oprd.5b00281>
- Devarajulu, C., Loganathan, M., 2016. Effect of impeller clearance and liquid level on critical impeller speed in an agitated vessel using different axial and radial impellers. *Journal of Applied Fluid Mechanics* 9, 2753–2761.

- <https://doi.org/10.29252/jafm.09.06.2482>
4
- Ding, J., Gidaspow, D., 1990. A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow. *AIChE Journal* 36, 523–538.
<https://doi.org/10.1002/aic.690360404>
- Gohel, S., Joshi, S., Azhar, M., Horner, M., Padron, G., 2012. CFD modeling of solid suspension in a stirred tank: Effect of drag models and turbulent dispersion on cloud height. *International Journal of Chemical Engineering* 2012.
<https://doi.org/10.1155/2012/956975>
- Gu, D., Ye, M., Liu, Z., 2020. Computational fluid dynamics simulation of solid-liquid suspension characteristics in a stirred tank with punched circle package impellers. *International Journal of Chemical Reactor Engineering* 18.
<https://doi.org/10.1515/ijcre-2020-0026>
- Joshi, J.B., Nere, N.K., Rane, C. v., Murthy, B.N., Mathpati, C.S., Patwardhan, A.W., Ranade, V. v., 2011. CFD simulation of stirred tanks: Comparison of turbulence models (Part II: Axial flow impellers, multiple impellers and multiphase dispersions). *Canadian Journal of Chemical Engineering* 89, 754–816.
<https://doi.org/10.1002/cjce.20465>
- Kazemzadeh, A., Ein-Mozaffari, F., Lohi, A., 2020. Hydrodynamics of solid and liquid phases in a mixing tank containing high solid loading slurry of large particles via tomography and computational fluid dynamics. *Powder Technol* 360, 635–648.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.10.040>
- Lane, G.L., 2017. Improving the accuracy of CFD predictions of turbulence in a tank stirred by a hydrofoil impeller. *Chem Eng Sci* 169, 188–211.
<https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.03.061>
- Lun, C.K.K., Savage, S.B., Jeffrey, D.J., Chepur, N., 1984. Kinetic theories for granular flow: Inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield. *J Fluid Mech* 140, 223–256.
<https://doi.org/10.1017/S0022112084000586>
- Luo, J.Y., Issa, R.I., Gosman, A.D., Group, I. of C.E.F.M.S., 1994. Prediction of impeller induced flows in mixing vessels using multiple frames of reference. 8th European conference on mixing, Institution of chemical engineers symposium series 549–556.
- Menter, F.R., 1994. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA Journal* 32, 1598–1605.
<https://doi.org/10.2514/3.12149>
- Ochieng, A., Lewis, A.E., 2006. CFD simulation of solids off-bottom suspension and cloud height. *Hydrometallurgy* 82, 1–12.
<https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2005.11.004>
- Ochieng, A., Onyango, M.S., 2010. CFD simulation of solids suspension in stirred tanks: Review. *Hem Ind* 64, 365–374.
<https://doi.org/10.2298/HEMIND100714051O>
- Patil, H., Patel, A.K., Pant, H.J., Venu Vinod, A., 2021. CFD simulation model for mixing tank using multiple reference frame (MRF) impeller rotation. *ISH Journal of Hydraulic Engineering* 27, 200–209.
<https://doi.org/10.1080/09715010.2018.1535921>
- Stuparu, A., Susan-Resiga, R., Bosioc, A., 2021. CFD simulation of solid suspension for a liquid–solid industrial stirred reactor. *Applied Sciences (Switzerland)* 11.
<https://doi.org/10.3390/app11125705>
- Suzanne M. Kresta, Arthur W. Etchells III, David S. Dickey, Victor A. Atiemo-Obeng, 2016. *Advances in industrial mixing a companion to the Handbook of industrial mixing*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ.
- Syamlal, M., Rogers, W., O'Brien, T.J., 1993. *MFIX documentation theory guide*. Technology (Singap World Sci) 1004.
<https://doi.org/10.2172/10145548>
- Tamburini, A., Cipollina, A., Micale, G., Brucato, A., Ciofalo, M., 2014. Influence of drag and turbulence modelling on CFD predictions of solid liquid suspensions in stirred vessels. *Chemical Engineering Research and Design* 92, 1045–1063.

<https://doi.org/10.1016/j.cherd.2013.10.020>

- Wang, Y., Hao, L., Zhu, Z., Xu, J., Wei, H., 2022. CFD research on the influence of geometry characteristic on flow pattern and the transition mechanism in Rushton turbine stirred vessels. *International Journal of Chemical Reactor Engineering* 20, 141–152.
<https://doi.org/10.1515/ijcre-2021-0041>
- Zwietering, T.N., 1958. Suspending of solid particles in liquid by agitators. *Chem Eng Sci* 9, 244–253.