

ANÁLISE DO ESCOAMENTO MULTIFÁSICO EM UMA CÉLULA DE FLOTAÇÃO APLICADO À OZONIFICAÇÃO VIA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

FELIPE O. COSTA^{1*}, IRINEU PETRI JÚNIOR²

¹Universidade Federal de Uberlândia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química Faculdade de Engenharia Química ²Universidade Federal de Lavras, Departamento de Engenharia *e-mail: felipeorlandodacosta@gmail.com

RESUMO - Devido ao aumento da poluição e também a escassez de recursos naturais essenciais, como a água doce, a legislação ambiental a cada dia torna-se mais rígida, fazendo com que tecnologias para eliminação dos resíduos presentes na água sejam desenvolvidas. Com isso, a ozonificação tem-se destacado como uma alternativa viável. Uma ferramenta útil para predizer o escoamento turbulento e a interação entre as fases deste equipamento é a fluidodinâmica computacional. Com isso, o objetivo desse trabalho foi realizar a simulação bifásica do flotador, sendo que foram avaliadas diversas propriedades da fase gasosa, utilizando os modelos multifásicos VOF e Mixture. Além disso, ensaios experimentais foram feitos para determinar alguns parâmetros do flotador e, posteriormente, comparar e validar os resultados da simulação com os valores experimentais e das correlações. Através deste comparativo, foi constatado que o modelo VOF apresentou uma melhor performance para predição do comportamento da fase gasosa, no entanto, caso tenha-se uma estimativa inicial com acurária do diâmetro médio das bolhas, o modelo Mixture torna-se uma ótima opção. Tendo em vista o baixo erro relativo na predição dos parâmetros da ozonificação com esse modelo, com exceção dos parâmetros correlacionados com a estimativa inicial, como, diâmetro da bolha e coeficiente de arrasto.

INTRODUÇÃO

Devido ao aumento da poluição e também a escassez de recursos naturais essenciais, como a água doce, a legislação ambiental a cada dia torna-se mais rígida, fazendo com que tecnologias para eliminação dos resíduos presentes na água sejam desenvolvidas. Com isso, os processos de oxidação avançada (*Advanced Oxidation Processes* - AOPs) temse destacado como uma alternativa viável, sendo que dentre esses processos, temos a ozonificação (Lara-Ramos *et al.*, 2019).

A ozonificação possui algumas limitações, devido à baixa seletividade na oxidação e mineralização de compostos orgânicos, outras desvantagens seriam a baixa eficiência na produção de ozônio e alto consumo de energia elétrica. A eficiência do processo de ozonificação está intimamente ligado a uma boa dispersão das bolhas, tempo de contato entre as fases (líquido-gás) e o tamanho das bolhas. Sendo que em geral a ozonificação é realizada utilizando células de flotação, para que haja uma boa dispersão das bolhas e consequentemente uma boa superfície de contato entre as fases (Lara-Ramos *et al.*, 2019).

O processo de flotação é um fenômeno trifásico, que envolve a interação entre sólidos, líquidos e gases. Esta operação unitária tem sido amplamente aplicada em processos da indústria de mineração, para separar minerais valiosos da ganga, a partir da diferença de hidrofobicidade dos sólidos (Boucher *et al.*, 2016).

2

Essa técnica de separação foi um assunto de extensa pesquisa no século XX, com ênfase na melhor compressão das interações físicas e químicas entre as fases (Boucher *et al.*, 2016). Porém, ressalta-se que ainda há detalhes dos fenômenos de interação entre as fases que não foram completamente elucidados na literatura, desse modo, as técnicas de CFD surgem como uma ferramenta viável para elucidação desses fenômenos.

A fluidodinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics* - CFD) é a área da ciência que realiza análise de sistemas que envolvem fluxo de fluido, transferência de calor e massa e reações químicas, por meio de simulações computacionais. Essa é uma técnica extremamente poderosa, que abrange diversas áreas de aplicação industrial, tais como, aerodinâmica de aeronaves e veículos, motores a combustão, bombas, compressores, reatores e etc (Versteeg & Malalasekera, 2007).

As técnicas de CFD começaram a ser utilizadas no seguimento industrial, a partir da década de 1960, na indústria aeroespacial. Essa técnica era utilizada para o projeto de aeronaves e motores a jato. Entretanto, nos dias de hoje as técnicas de CFD estão tornando-se uma ferramenta vital no *design* de equipamentos industriais. Porém, um fator que limita o desenvolvimento dessa ciência, é a falta de *hardwares* de alto desempenho, ou até mesmo sua disponibilidade a um preço não acessivo que inviabiliza a utilização desta ferramenta (Versteeg & Malalasekera, 2007).

Com isso. vale ressaltar que а fluidodinâmica computacional é um dos caminhos mais viáveis para a resolução de problemas multifásicos envolvendo agitação mecânica, como é o caso da flotação. As vantagens da utilização das técnicas de CFD para resolução deste problema, são tanto do ponto de vista científico, como do ponto de vista econômico. A construção de protótipos para coleta de resultados relevantes para a célula de flotação, demandam um altíssimo e frequentemente a coleta desses custo resultados possui grande complexidade e em alguns casos é até mesmo inviável.

Sendo assim, para predizer esses resultados utiliza-se de correlação matemáticas, entretanto, essas correlações apresentam alguns problemas, pois elas normalmente são válidas apenas para determinadas geometrias de agitadores mecânicos e apresentam uma restrita faixa de aplicação, tornando a análise destes parâmetros muito limitada, inviabilizando a otimização e aplicabilidade deste processo em escala industrial.

Desse modo, este trabalho teve como objetivo geral realizar a modelagem via CFD da interação entre as fases (gás-líquido) e predizer o comportamento da fase gasosa e sua dispersão ao longo da célula para a formação das bolhas compostas de oxigênio e ozônio. Vale ressaltar que os modelos multifásicos Volume of Fluid (VOF) e Mixture foram testados. Os objetivos específicos deste trabalho são obter alguns parâmetros essenciais da célula de flotação como: diâmetro das bolhas, deslocamento do nível de líquido, fração volumétrica de gás, velocidade terminal e coeficiente de arrasto. Com essas análises foi possível verificar o modelo multifásico que melhor descreve cada um dos parâmetros avaliados. Além disso, ensaios experimentais foram feitos para determinar alguns parâmetros do flotador e, posteriormente, comparar validar e OS resultados da simulação com os valores obtidos experimental de forma e através das correlações.

MATÉRIAS E MÉTODOS

Metodologia Experimental

A unidade experimental está representada nas Figuras 1 e 2, que contém a configuração do sistema de agitação mecânica com a chicana e representa todo o circuito para alimentação da mistura gasosa associado ao protótipo da célula de flotação experimental, respectivamente. Ressalta-se que a unidade experimental utilizada nesse trabalho foi a mesma utilizado nos trabalhos experimentais de Lara Ramos *et al.*, (2019; 2021).

A alimentação gasosa é constituída de uma mistura de oxigênio e ozônio, com fração mássica de 0,9987 e 0,0013, respectivamente. Vale salientar, que todas as simulações foram realizadas com uma velocidade angular do agitador mecânico de 1500 rpm no sentido antihorário.



Figura 1: Representação da célula de flotação



Figura 2: Representação de toda unidade experimental

O experimento foi realizado com uma vazão volumétrica da mistura oxigênio-ozônio de 1 L/min. Para determinar o deslocamento do nível do líquido experimentalmente, foi utilizado um papel milimetrado, sendo que o mesmo foi inserido na região frontal da célula de flotação. Com isso, foi possível determinar deslocamento, posteriormente esse à estabilização do sistema, que foi obtida aproximadamente 5 após segundos da inicialização do equipamento.

Para obtenção do diâmetro médio das bolhas de forma experimental, foi feito a filmagem do sistema e a partir do vídeo, foram obtidos frames utilizando o *software* Free Video to JPG Converter.

Em seguida, foi realizado o tratamento das imagens utilizando o *software* ImageJ. Sendo a primeira etapa do tratamento de imagem a definição de uma referência de tamanho, para que haja uma razão entre o número de *pixels* por unidade de comprimento. Salienta-se que foi utilizado o diâmetro do chicana como referência (33 mm). O segundo passo foi transformar a imagem para o formato 8 *bits*, o terceiro passo é subtrair o *background* e por fim, o quarto e último passo é aplicar a ferramenta *threshold* para criar um contraste entre a fase líquida e fase gasosa, para que assim seja possível mensurar o diâmetro médio das bolhas.

Para minimizar os erros envolvidos no tratamento de imagens, foi feito a análise somente na região próxima ao agitador mecânico, pois nesta região é possível visualizar claramente a forma das bolhas formadas, conforme pode ser observado na Figura 3. Outro ponto a salientar, é que foi feito o tratamento das imagens e o cálculo do diâmetro médio das bolhas para vários instantes de tempo, para tornar a medição mais representativa e minimizar os erros envolvidos na análise.





Figura 3: Região na qual foi feito o tratamento de imagens para obtenção do diâmetro das bolhas

Com os experimentos realizados, não foi possível determinar os demais parâmetros de interesse para a célula de flotação, como, fração volumétrica de gás, velocidade terminal e coeficiente de arrasto. No entanto, essas variáveis foram estimadas utilizando as correlações representadas pelas Equações 1, 2 e 3, sendo o número de Eötvös calculado utilizando a Equação 4.

$$\frac{h_T - h}{h_T} = (1 - \beta) = 1, 2 \left(\frac{u_g u_L}{\sigma_L}\right) \left[\frac{u_g}{\left(\frac{\sigma_L g}{\rho_L}\right)^{0.25}}\right]^{0,5}$$
(1)

$$U_t = \frac{g\rho_L d_p^2}{18\mu_L (1+0.15Re^{0.687})} \tag{2}$$

$$C_D = \max\left\{\min\left[\frac{24}{Re}\left(1 + 0,15Re^{0,687}\right),\frac{72}{Re}\right],\frac{8}{3}\frac{E_0}{E_0+4}\right\}$$
(3)

$$E_0 = \frac{g(\rho_q - \rho_p)d_p^2}{\sigma} \tag{4}$$

Ressalta-se que o cálculo do coeficiente de arrasto foi feito utilizando o modelo Tomiyama, para que assim, seja feita a comparação do valor obtido através da correlação matemática e do valor obtido através da simulação computacional, pois a simulação foi efetuada utilizado esse modelo de arrasto. Desse modo, para desconsiderar o efeito do modelo no cálculo deste parâmetro, foi utilizado o mesmo para ambos.

Para o cálculo dos parâmetros da célula de flotação, os valores contidos na Tabela 1 foram utilizados para as propriedades física da fase líquido, que no caso especifico deste trabalho, é a água (Lara *et al.*, 2021; Ansys, 2018).

Tabela 1: Valores das propriedades físicas

utilizadas.			
Propriedades físicas	Valores		
σ _L (N/m)	0,0712		
$ ho_L (kg/m^3)$	998,2		
μ_{L} (Pa.s)	0,001003		

Metodologia Numérica

O domínio da solução numérica foi dividido em pequenos volumes de controle, para que posteriormente as equações de transporte pudessem ser aplicadas. А manufatura da geometria e das malhas advém computacionais. dos softwares SpaceClaim[®] GAMBIT[®], comerciais e respectivamente. A estrutura base das malhas foram simuladas utilizando o *software* FLUENT[®].

<u>Geometria e dimensões</u>: No ambiente SpaceClaim[®] foi construído a geometria da célula de flotação, que é constituída por um recipiente cilíndrico, uma chicana e um agitador mecânico. Sendo que a chicana tem como função, aumentar a turbulência no interior da célula de flotação e favorecer o cisalhamento da mistura oxigênio-ozônio, que contribui para redução de tamanho das bolhas.

A geometria da célula de flotação (1) e as características da chicana (2) e do agitador mecânico (3) estão detalhadas na Tabela 2 e Figuras 5.

Tabela 2: Dimensões da célula de flotação.			
Célula			
Altura (H)	16,15 cm		
Diâmetro (D)	13,18 cm		
Distância entre fundo e o agitador mecânico (C)	2,45 cm		
Agitador e chicana			
Diâmetro do agitador (d)	4,4 cm		
Número de dentes (Nb)	40		
Comprimento da chicana (A)	1,84 cm		
Largura do dente do agitador mecânico (l)	0,286 cm		
Diâmetro da chicana (d _b)	5.18 cm		



Figura 4: Representação esquemática da célula de flotação

Discretização do domínio geométrico: A malha manufaturada é majoritariamente hexaédrica, porém há elementos tetraédricos na região do agitador, devido à complexidade da geometria nessa região, além disso, foi utilizado uma malha com 1.082.259 células. Outro ponto que vale salientar é o refino da malha na região do agitador mecânico e abaixo do mesmo. Esse refino foi realizado, pois essa é uma região crítica para o escoamento, assim sendo, é necessário um maior número de células para aumentar a exatidão dos resultados.

No *software* GAMBIT[®] também é definido a natureza de cada face da geometria, para que posteriormente sejam aplicadas as

condições de contorno do problema. Sendo assim, a face superior da célula de flotação é definida como pressure outlet, as demais faces da célula de flotação são definidas como wall, a entrada é definida como mass-flowinlet/velocity-inlet, vale ressaltar que a entrada é a face inferior da chicana, ou seja, a face da chicana que está localizada acima do agitador mecânico, o agitador mecânico e a chicana também são definidos como wall, entretanto no caso do agitador mecânico é definido uma velocidade angular, com magnitude de 1500 rpm no sentido anti-horário.

Diâmetro médio: Através da utilização de modelos multifásicos com a abordagem Euleriana, como, o modelo VOF e o modelo Mixture, valores discretos de uma única fase não podem ser obtidos, pois as propriedades locais são perdidas com a resolução das integrais. Com isso, através dos reports do FLUENT® não é possível obter diretamente o diâmetro das bolhas formadas. No entanto, uma opcão para contornar este problema, foi realizar o tratamento de imagens dos contornos de fração volumétrica utilizando o software ImageJ. Vale ressaltar que o procedimento utilizado para determinação do diâmetro médio simulado foi o mesmo utilizado para determinação do resultado experimental.

Para minimizar ao máximo os erros envolvidos na análise de imagens utilizando o *software* ImageJ, foi feito o cálculo do diâmetro médio para 11 diferentes planos radiais, sendo que a posição de cada plano pode ser contemplada na Figura 5.



Figura 5: Posições na qual foi feito o tratamento de imagens para obtenção do diâmetro médio das bolhas

Devido ao contraste de cores obtidos através dos contornos de fração volumétrica e utilizando o diâmetro da chicana (33 mm) como escala para obter a razão número de *pixels* por unidade de comprimento, foi possível obter o diâmetro das bolhas para ambos modelos multifásicos utilizados.

Vale salientar que segundo Prakash *et al.* (2018), a análise de imagens é a técnica mais utilizada para determinação do diâmetro de bolhas, porém existem outras possibilidades, como, a técnica de espalhamento de Mie, a técnica de ressonância magnética bayesiana, o método de contagem de Coulter ou o método de resistência elétrica de poros e difração de *laser*.

<u>Velocidade terminal</u>: A determinação direta da velocidade terminal das bolhas utilizando a abordagem Euleriana também é inviável, devido ao mesmo motivo já citado para inviabilizar a determinação do diâmetro médio, que é a perda das informações locais devido à resolução das integrais.

No entanto, para contornar esse problema para o cálculo da velocidade terminal, foram construídas linhas de trajetória que acompanhavam o movimento das bolhas. Sendo que as Figuras 6 e 7 contém as representações das linhas de trajetória construídas para o modelo VOF e Mixture, respectivamente. Vale salientar, que as linhas de trajetória foram construídas nas regiões onde o somatório das forças estava igual a zero, ou seja, quando a força de empuxo é igual a soma da força gravitacional e da força de arrasto.

Conforme pode ser observado nas Figuras 6 e 7 foram utilizadas um alto número de linhas de trajetória, sendo este número definido quando as variações na velocidade terminal se tornaram desprezíveis.



Figura 6: Contorno de fração volumétrica utilizando o modelo VOF com as linhas de trajetória para o cálculo da velocidade terminal



Figura 7: Contorno de fração volumétrica utilizando o modelo *Mixture* com as linhas de trajetória para o cálculo da velocidade terminal

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Qualidade da malha

Para avaliar a qualidade da malha manufaturada no *software* GAMBIT[®], foram utilizados os parâmetros de *Aspect Ratio* e de *Skewness*. A Tabela 3 contém os valores mínimos, máximos e médios, considerando toda a malha manufaturada, que é constituído majoritariamente de elementos hexaédricos, entretanto também contém elementos do tipo tetraédrico, localizados na região do agitador mecânico e da chicana.

Tabela 3: Valores mínimos, máximos e médio para Aspect Ratio e Skewness.

	Mínimo	Máximo	Média
Aspect Ratio	1,00000	211,50080	1,49182
Skewness	0,00152	0,99999	0,24552

Analisando os valores de Aspect Ratio e Skewness obtidos, pode-se constatar que foi obtida uma malha computacional com boa qualidade. com baixas distorções tridimensionais dos elementos, tendo em vista que valor médio de Aspect Ratio aproximou-se da unidade e valor médio de Skewness aproximou-se da nulidade. No entanto. analisando os valores máximos para ambos parâmetros avaliados, pode-se concluir que existem elementos com baixa qualidade, porém de forma minoritária. Em contrapartida, analisando os valores mínimos, também podese concluir que existem elementos com uma qualidade excelente. As Figuras 8 e 9 contém os gráficos de Aspect Ratio e Skewness, respectivamente.



Figura 8: Gráfico de Aspect Ratio



Figura 9: Gráfico de Skewness

Analisando as Figuras 8 e 9 pode-se a boa qualidade da malha reafirmar manufaturada, tendo em vista, que a grande maioria dos elementos possuíram um Aspect Ratio inferior a 2,0 e um Skewness inferior a 0,05, indicando que as células manufaturadas possuem uma alta regularidade, com baixíssimas distorções. Ressalta-se que os gráficos representados nas Figuras 8 e 9 foram construídos no software Meshing mode do FLUENT[®].

Deslocamento do nível do líquido

Utilizando um papel milimetrado foi possível determinar o deslocamento do nível do líquido da célula de flotação causado pela alimentação de 1 L/min da mistura gasosa de oxigênio e ozônio. Sendo que através das simulações computacionais utilizando os modelos multifásicos VOF e *Mixture* também foi possível determinar esse valor. Além disso, o deslocamento do nível de líquido também foi calculado através da correlação matemática expressa pela Equação 1, sendo esses valores representados através da Tabela 4.

	(h _T - h)	ER-Exp.	ER-Correl
	(mm)	(%)	(%)
Exp.	3		145%
Correl.	1,22	59%	
VOF	1,31	56%	7%
Mixture	1,49	50%	22%

Tabela 4: Deslocamento do nível experimental, através da correlação e com uso

Analisando a Tabela 4, pode-se constatar que avaliando a performance dos modelos multifásicos e da correlação em comparação ao experimental, resultado tem-se uma divergência considerável. Isso pode ser avaliado e observado através dos erros relativos com base no valor experimental (ER-Exp.). Sendo que esse desvio pode ser justificado principalmente devido à dificuldade de medição dessa grandeza, tendo em vista, que essa medição foi feita com forte agitação na célula de flotação (1500 rpm) e também com a alimentação da mistura gasosa, logo o nível da fase líquida apresentava certas flutuações, que dificultavam a medição.

Outro ponto que dificultava a leitura do deslocamento do nível é o efeito de refração da água, tendo em vista que devido aos diferentes índices de refração do ar e da água, a interface entre as fases apresentava leves distorções, dificultado a leitura da escala. Além disso, o erro sistemático dessa medida experimental é definido como metade do menor valor da escala, sendo que o menor valor da escala utilizado é 1 mm, assim sendo, o erro sistemático do deslocamento de nível experimental é igual a 0,5 mm. Logo essa medida apresentou um significativo erro sistemático, que corresponde a 17% do valor experimental obtido. E o erro aleatório também foi considerável, devido à dificuldade de medição, devido a agitação, alimentação de gás e efeitos de refração.

No entanto, quando se avalia os valores simulados em relação ao valor obtido através da correlação (ER-correl.), pode-se constatar que há uma boa similaridade entre os valores, pois são obtidos erros relativos baixos, principalmente utilizado o modelo multifásico VOF.

Comparando os resultados obtidos neste presente trabalho com os resultados obtidos no

trabalho de Lara *et al.*, 2021, pode-se constatar que as vazões volumétricas utilizadas foram de 0,3 e 0,5 L/min, sendo a corrente composta exclusivamente de ozônio e quando se avalia os deslocamentos do nível de líquido, é obtido 2 mm e 3 mm, respectivamente. Com isso, podese observar que a valor obtido para a vazão de 0,5 L/min é exatamente igual ao obtido neste trabalho com 1 L/min e vale salientar que o sistema de medição e escala foram exatamente iguais.

Uma possível justificava para que esses deslocamentos de níveis sejam iguais, mesmo com diferentes vazões volumétricas, é a velocidade angular do agitador mecânico, sendo que para este presente trabalho foi utilizado 1500 rpm, enquanto no trabalho de Lara et al., 2021 foi utilizado 1580 rpm. E a velocidade angular impacta diretamente no do nível. Outra possível deslocamento justificativa é a composição da corrente, sendo que para este trabalho foi utilizado uma mistura de oxigênio e ozônio, porém sendo a corrente majoritariamente constituída de oxigênio, enquanto no trabalho de Lara et al., 2021 foi utilizado uma corrente de ozônio pura. Sendo que a composição das bolhas pode afetar as propriedades interfaciais alterando a fração de gás retido, que influência no deslocamento do nível da fase líquida.

Diâmetro das bolhas

Um dos principais parâmetros para a célula de flotação é o diâmetro médio das bolhas de oxigênio-ozônio formadas. Experimentalmente e através dos contornos de fração volumétrica obtidos nas simulações, o diâmetro médio foi obtido através do tratamento de imagens utilizando o *software* ImageJ.

Conforme já foi citado, para o caso experimental, o cálculo do diâmetro médio foi feito na região próxima ao agitador mecânico (Figura 3), pois nessa região as bolhas estavam mais nítidas. Já para as simulações utilizando os modelos multifásicos VOF e Mixture, o diâmetro médio foi obtido através da análise de 11 planos horizontais (Figura 5), para uma maior representatividade dos resultados. A 5 contém Tabela 0 diâmetro médio experimental, obtido por meio da correlação (Equação 1) e através dos modelos VOF e *Mixture*.

Tabela 5: Diâmetro médio das bolhas calculados experimentalmente, através da correlação e com uso dos modelos multifásicos

VOF e <i>Mixture</i> .			
	Diâmetro	ER-Exp.	ER-Correl
	médio (mm)	(%)	(%)
Exp.	2,67		59%
Correl.	6,44	141%	
VOF	2,83	6%	56%
Mixture	5,3	99%	18%

Analisando os valores contidos na Tabela 5, pode-se constatar que o modelo VOF foi aquele no qual obteve-se o menor erro relativo com base no valor experimental e consequentemente este modelo apresentou uma capacidade preditiva superior ao modelo Mixture e à correlação matemática. Isso pode ser justificado principalmente devido à característica fundamental para a aplicação do modelo VOF, que é um escoamento multifásico com a região da interface muito bem definida, sendo está uma característica do escoamento bifásico de células de flotação.

No entanto, ressalta-se que o que pode-se justificar o desvio apresentado quando se utiliza o modelo *Mixture* devido à necessidade de inserir um valor de diâmetro para a fase secundária, assim sendo, foi inserido o valor obtido através da correlação matemática. Isso foi feito pois, de maneira prática, o valor obtido através da correlação seria mais facilmente calculado para uma posterior simulação do sistema.

Com isso, quando se compara o erro relativo com base na correlação do modelo *Mixture* tem-se um erro relativo de 18%, indicando que este modelo apresentou um resultado satisfatório levando em conta o *input* inicial. Desse modo, a fonte proveniente de erro para o cálculo do diâmetro médio das bolhas utilizado o modelo *Mixture* foi a própria estimativa de diâmetro obtida através da correlação matemática.

Um ponto a destacar é que essa diferença relativa de 18% obtida utilizando o modelo *Mixture* pode ser justificada devido a coalescência ou quebra das bolhas, pois o diâmetro inserido para a fase secundária utilizando o modelo Mixture é um valor inicial, porém, ao longo do escoamento ascensional, com a coalescência ou quebra das bolhas há uma modificação do diâmetro das mesmas.

Além da limitação da obtenção apenas de valor médios de diâmetros utilizando as correlações matemáticas, pode-se observar que a mesma não apresentou um resultado satisfatório para a célula de flotação com sistema de agitação empregado neste trabalho. Com isso, as simulações computacionais além de apresentarem uma capacidade preditiva muito superior à correlação, elas permitem analisar a variação de diâmetros com relação à altura da célula. Sendo este um parâmetro extremamente útil para a otimização da eficiência de ozonificação nas células de flotação, tendo em vista, que sabendo sobre a variação de diâmetros com relação ao eixo axial da célula, pode-se redimensionar a mesma, com o intuito de cisalhar as bolhas em regiões de maior diâmetro, com o intuito de aumentar a área superficial de contato entre a fase gasosa e a fase sólida. Com isso, a Figura 10 contém a distribuição de tamanhos para as 11 posições verticais analisadas.



Figura 10: Comportamento do diâmetro das bolhas com relação à altura

Analisando a Figura 10 pode-se constatar comportamento similares para ambos modelos multifásicos utilizados, com exceção do comportamento apresentado para o ponto $x_2 =$ 76,6 mm. Sendo que para ambos os modelos, pode-se identificar que os maiores diâmetro das bolhas estão próximos da alimentação e consequentemente do agitador mecânico. Outro fato identificado é que na região intermediária da célula tem-se os menores diâmetro médios e ao final do deslocamento ascensional das bolhas, pode-se observar um aumento do diâmetro das bolhas.

Porém, pode-se verificar algumas diferencas, sendo a primeira delas a magnitude da dimensão do diâmetro médio, conforme já foi citado. Outro contraste identificado é que com o modelo VOF foi obtido maiores oscilações do diâmetro médio com relação à altura da célula. em contramão do comportamento obtido do Mixture. que apresentou uma menor variação e dependência do diâmetro das bolhas formadas com relação descolamento ascensional. Sendo este ao fenômeno melhor visualizado através das Figuras 11 e 12.



Figura 11: Contorno de fração volumétrica utilizando o modelo VOF



Figura 12: Contorno de fração volumétrica utilizando o modelo *Mixture*

Além disso, outro fato que pode ser constatado através das Figuras 11 e 12 é a maior concentração de bolhas principalmente na região da chicana. E outro ponto a salientar é fração volumétrica dos contornos para ambos modelos, sendo que para o modelo VOF tem-se bolhas com uma maior fração volumétrica diferentemente do que é observado com o modelo *Mixture*, onde tem-se uma menor fração volumétrica.

Fração volumétrica de gás

Outro parâmetro avaliado para a célula de flotação foi a fração volumétrica de gás no interior do flotador. A Tabela 6 contém os valores obtidos de fração volumétrica de gás utilizando os modelos multifásicos avaliados e a correlação matemática.

Tabela 6: Fração volumétrica de gás calculados através da correlação matemática e dos modelos multifásicos VOF e *Mixture*.

	1 – β (-)	ER-Correl (%)
Correl.	0,007526	
VOF	0,008028	7%
Mixture	0,009139	21%

Observando a Tabela 6 pode-se constatar que a correlação matemática e os modelos VOF e *Mixture* apresentaram valores simulares, com erros relativos de 7% e 21% em comparação à correlação (ER-correl.), respectivamente. Com isso, pode-se concluir que ambos modelos multifásicos e a correlação apresentaram resultados satisfatórios para predição de frações volumétricas em células de flotação. Tendo em vista à proximidade dos valores obtidos.

Velocidade terminal

A velocidade terminal é um parâmetro essencial para avaliar a eficiência do processo de ozonificação em células de flotação, tendo em vista, que este parâmetro está intimamente ligado ao tempo de contato entre as fases. Consequentemente, impacta diretamente na eficiência do processo. Experimentalmente, a obtenção de estimativas da velocidade terminal são complexas e envolvem um alto custo. Com isso, como já foi citado, os modelos multifásicos VOF e *Mixture* foram utilizados para predizer esse parâmetro, além da correlação matemática (Equação 2). Esses valores estão representados na Tabela 7. Salienta-se que computacionalmente, a velocidade terminal foi calculada através de dezenas de linhas de trajetória que acompanhavam a trajetória da bolha, conforme já citado.

Tabela 7: Velocidade terminal calculados através da correlação matemática e dos modelos multifásicos VOF e *Mixture*.

	U _T (m /s)	ER-Correl (%)
Correl.	0,566	
VOF	0,4412	22%
Mixture	0,437	23%

Analisando a Tabela 7 pode-se observar que os valores obtidos através das simulações computacionais utilizando os modelos VOF e Mixture apresentaram altíssima similaridade entre si, sendo a diferença entre esses valores igual a aproximadamente 1%. No entanto, avaliando os modelos multifásicos em comparação à correlação matemática, através do erro relativo com relação a correlação (ERcorrel.), pode-se constatar que há uma diferença considerável. Sendo que esse desvio pode ser principalmente devido justificado aos parâmetros utilizados para o cálculo da velocidade terminal utilizando a Equação 2, pois um deles foi previamente calculado correlação utilizando outra matemática (Equação 1), que é o diâmetro médio das bolhas e conforme já foi discutido, essa correlação matemática não apresentou uma boa performance para predição do comportamento experimental.

Assim sendo, a utilização de um valor incoerente do ponto de vista experimental, como foi o caso do diâmetro médio, pode ter comprometido a capacidade preditiva da correlação matemática para o cálculo da velocidade terminal (Equação 2), justificando o desvio apresentado dos valores obtidos através da simulação em comparação ao resultado da correlação matemática.

Coeficiente de arrasto

O coeficiente de arrasto quantifica a força resistiva das bolhas ao escoamento ascendente. Com isso, este parâmetro está intrinsicamente ligado à velocidade terminal, pois a mesma é alcançada quando a força de empuxo é igual ao somatório da força gravitacional e a força de arrasto. Sendo assim, os coeficientes de arrasto obtidos através dos modelos multifásicos utilizados e a correlação matemática estão expressos na Tabela 8. Vale salientar que os coeficientes de arrasto foram calculados utilizando o modelo Tomiyama, assim sendo, foram utilizadas as Equações 3 e 4.

Tabela 8: Coeficiente de arrasto calculados através da correlação matemática e dos modelos multifásicos VOF e *Mixture*.

	Ср	ER-Correl (%)
Correl.	1,566	
VOF	0,576	63%
Mixture	1,308	16%

Analisando a Tabela 8 observa-se que o modelo Mixture apresentou uma boa similaridade em comparação a correlação matemática, analisando o erro relativo com correlação base na (ER-correl.). Em contrapartida, com o modelo VOF foi obtido um desvio considerável. No entanto, um fato que pode justificar essa diferença é que o coeficiente de arrasto é uma grandeza indireta, assim sendo, a mesma é calculada com base em grandezas fundamentais, como, diâmetro médio e velocidade terminal das bolhas, consequentemente os desvios e erros obtidos através das correlações para essas grandezas são carreados e impactam diretamente o calculado do coeficiente de arrasto.

Já o modelo VOF, apresentou alta capacidade preditiva para o diâmetro médio das bolhas e no caso da velocidade terminal, foi obtido um valor relativamente próximo ao obtido na correlação. Consequentemente menores desvios impactaram o resultado final do coeficiente de arrasto via modelo VOF. Deste modo, tem-se que o modelo VOF é aquele que possui o valor mais confiável, em comparação ao valor obtido com o modelo *Mixture* e a correlação.

CONCLUSÕES

Com relação ao diâmetro médio experimental, foi constatado que o modelo VOF apresentou alta capacidade preditiva destas variáveis, sendo obtido um erro relativo

de 6%. Já quando se avalia o modelo Mixture e a correlação matemática foram obtidos erros relativos significativos. No entanto, o desvio obtido para o modelo Mixture pode ser justificado devido à obrigatoriedade da inserção de um diâmetro para a fase secundária, que neste caso é a mistura de oxigênio e ozônio. Sendo assim, foi inserido o valor obtido através da correlação, porém o mesmo apresentou-se como uma má estimativa, quando se compara com o resultado experimental. Portanto, uma possível justificativa para o desvio obtido entre o valor experimental e o valor obtido com o modelo Mixture relacionada está principalmente com o erro inicial relacionado a inserção do diâmetro da fase secundária (oxigênio-ozônio).

Analisando a fração volumétrica de gás tem-se que o modelo VOF apresentou uma melhor capacidade preditiva, comparando com o resultado obtido através da correlação, porém, ressalta-se que com o modelo Mixture também foi obtido um valor próximo. Quando se avalia a velocidade terminal, tem-se performances similares para o modelo VOF e Mixture, porém analisando os valores obtidos através dos modelos multifásicos em comparação ao resultado da correlação, foi obtido um erro relativo significativo. E para o coeficiente de arrasto foi obtido o mesmo comportamento que para o modelo VOF e uma possível justificativa para esse desvio é que tanto a velocidade terminal como o coeficiente de arrasto utilizam o diâmetro médio das bolhas em seu cálculo, assim sendo, como o diâmetro médio obtido através da correlação apresentou um alto erro relativo com relação ao resultado experimental (141%), esse desvio é carreado para as demais variáveis, podendo comprometer a acurácia das mesmas.

Desse modo, pode-se concluir que o modelo VOF apresentou uma boa capacidade preditiva dos parâmetros de uma célula de flotação, no entanto, o modelo *Mixture* também apresentou uma boa performance, que poderia ter sido otimizada caso a estimativa inicial do diâmetro da fase secundária tivesse uma maior acurácia. Portanto, caso haja uma estimativa confiável para o diâmetro da fase secundária, os resultados dos parâmetros da célula de flotação provavelmente se ajustariam de forma mais adequada aos dados experimentais. Com isso, o modelo VOF se destaca na predição dos parâmetros da célula de flotação e não apresenta nenhuma limitação quanto a utilização de uma estimativa previa do diâmetro das bolhas, facilitando sua aplicação em casos laboratoriais e industriais.

Е as correlações matemáticas se mostraram limitadas para predição dos parâmetros da célula de flotação. Sendo que pode ser justificado isso devido as características únicas do agitador mecânico e da chicana utilizada, que afetam o escoamento e consequentemente os parâmetros da célula de flotação. Porém devido a sua altíssima praticidade na aplicação e uso, alguns parâmetros podem ser estimados incialmente com o auxílio das correlações matemáticas, como, o deslocamento do nível, a fração volumétrica do gás e a velocidade terminal.

NOMENCLATURA

C_D	Coeficiente de arrasto	[-]
Re	Número de Reynolds	[-]
$ ho_L$	Densidade do líquido	[kg/m³]
d_p	Diâmetro da partícula	[m]
Ľ,	Viscosidade do	[kg/m.s]
PL	líquido	[1.8, 11.5]
U_t	Velocidade terminal	[-]
E_O	Número de Eötvös	[-]
σ	Tensão superficial	[N/m²]
(1 - R)	Fração volumétrica da	[_]
(1)	fase gasosa	[-]
σ.	Tensão superficial do	$[N/m^2]$
o_L	líquido	
11	Velocidade superficial	[m/s]
u_g	do gás	
	Altura da célula de	
h_T	líquido com	[m]
	alimentação de gás	
	Altura da célula de	
h	líquido sem a	[m]
	alimentação de gás	
	Elevação do nível do	
$(h_T - h)$	líquido devido à	[m]
	alimentação de gás	
g	Aceleração da	$[m/s^2]$
	gravidade	
$ ho_q$	Densidade da fase q	[kg/m³]
$ ho_p$	Densidade da fase p	[kg/m³]
	-	-

REFERÊNCIAS

- ANSYS (2018), Fluent User's Guide and Theory Guide. Canonsburg: [s.n.], 2018.
- BOUCHER, D., JORDENS, A., SOVECHLES, J., LANGLOIS, R., LEADBEATER, T.
 W., ROWSON, N. A., WATERS, K. E. (2017). Direct mineral tracer activation in positron emission particle tracking of a flotation cell. Minerals Engineering, v. 100, p. 155–165.
- LARA-RAMOS, J. A., SÁNCHEZ-GÓMEZ, K., VALENCIA-RINCÓN, D., DIAZ-ANGULO, J., MUESES, M., MACHUCA-MARTÍNEZ, F. (2019), Intensification of the O3/TiO2/UV advanced oxidation process using a modified flotation cell. Photochemical & Photobiological Sciences, v. 18, n. 4, p. 920–928.

- LARA-RAMOS. J. A., CONSTAIN-ESCOBAR, A. M., ROJAS-ORTIZ, K. V., DIAZ-ANGULO, J., & MACHUCA-MARTÍNEZ, F. (2021). A novel high rotation bubble reactor for the treatment pollutant of a model in ozone/goethite/H2O2 and UV/goethite coupled processes. Environmental science pollution research and international.
- PRAKASH, R.; MAJUMDER, S.K.; SINGH, A. (2018), Flotation technique: Its mechanisms and design parameters. Chemical Engineering and Processing -Process Intensification, v. 127, p. 249-270.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. (2007), An Introduction to Computational Fluid Dynamics. Person, Second Edition. ISBN: 978-0-13-127498-3.