



UNIVERSIDADE DA BEIRA INTERIOR
Engenharia

**Estudos sobre a Uniformização do Escoamento em
Câmaras de Mistura usando CFD
Análise da câmara da experiência CLOUD no CERN
(Versão final após defesa)**

Sílvio Miguel Rodrigues Cândido

Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em
Engenharia Eletromecânica
(2º ciclo de estudos)

Orientador: Professor Doutor José Carlos Páscoa Marques
Coorientador: Professor Doutor António Rodrigues Tomé

Covilhã, julho de 2019

Agradecimentos

O meu especial agradecimento ao meu orientador, Professor Doutor José Carlos Páscoa Marques pelas oportunidades que me tem concedido e por todo o apoio e disponibilidade.

Agradeço ao meu coorientador Professor Doutor António Rodrigues Tomé por possibilitar e facilitar a colaboração com a equipa da experiência CLOUD do CERN, equipa à qual agradeço igualmente, especialmente, ao Dr. Stefan Weber e ao Prof. Dr. António Amorim.

Um grande obrigado a toda a minha família pelo incentivo ao longo dos anos, em especial, aos meus pais e irmão pelo apoio incondicional e confiança depositada. Igualmente, um grande obrigado à minha madrinha e padrinho pelo suporte moral e ajuda prestada nesta etapa.

A todos os meus amigos(as) que me apoiaram ao longo destes anos, um grande obrigado. Ainda agradeço a todos os colegas do ClusterDEM pela disponibilidade, ajuda e companheirismo que demonstraram.

Apoio

Trabalho desenvolvido com o apoio do Center for Mechanical and Aerospace Sciences and Technology (CMAST), unidade da Fundação para a Ciência e Tecnologia (FCT) número 151, e do Instituto Dom Luís (IDL), laboratório associado número 50019. O trabalho enquadra-se parcialmente nas atividades do projeto CERN/FIS-COM/0014/2017, Sistema de aquisição de dados e desenvolvimento de algoritmos de computação paralela para CLOUD.

Resumo

As câmaras de mistura são diversamente utilizadas em toda a indústria com o objetivo de uniformizar diversos tipos de misturas, nomeadamente, líquidos com líquidos, de líquidos com sólidos, entre outros. Neste trabalho é mostrada a predominância de fenómenos turbulentos dentro destas e o seu impacto na mistura de diversas espécies presentes nas câmaras.

A dinâmica dos fluidos computacional (CFD) tem vindo a ser vastamente utilizada na predição dos fenómenos turbulentos de forma a caracterizar as estruturas do escoamento dentro deste tipo de câmaras. A literatura descreve que os modelos RANS, que não têm em consideração as características transitórias, falham diversas vezes nesta tarefa e que os modelos de resolução completa da turbulência são demasiados dispendiosos para a utilização na indústria.

Nesta dissertação é feita a investigação dos impactos dos fenómenos de turbulência na mistura de gases, com o objetivo de modelar computacionalmente o funcionamento da câmara da experiência CLOUD no CERN. Para tal é inicialmente enquadrado o objetivo nas características e no estado da arte da modelação deste tipo de câmaras.

Posteriormente, são descritas as formulações físico-matemáticas dos processos de transporte que estão na base da modelação numérica da mistura turbulenta. Os estudos têm por base a utilização do modelo multifásico "MIXTURE" do código comercial FLUENT com duas variantes para o modelo de turbulência, em que será utilizado o modelo $k - \omega$ SST URANS e o SAS.

Os resultados obtidos são validados com dados da literatura, analisando a mistura de dois gases numa junção em T. É utilizada uma geometria de forma a que se consiga ter pouca difusão numérica e de facto ver a relação do modelo de turbulência com os fenómenos de mistura de espécies.

Por fim, é aplicado o modelo multifásico para a mistura de Ar e de SO_2 na câmara de mistura da experiência CLOUD. As simulações foram feitas em articulação com ambos os modelos de turbulência, SST e SAS, que demonstraram resultados significativamente diferentes. O modelo de turbulência comporta-se sempre melhor do que o SST para os vários casos analisados.

Palavras-chave

Câmaras de mistura, Dinâmica de fluidos computacional (CFD), Mistura turbulenta, Junção T.

Abstract

Mixing chambers are used throughout the industry in order to homogenize various types of mixtures, namely liquids with liquids, liquids with solids, among others. In this work it is shown the predominance of turbulent phenomena within these and their impact on the mixture of several species present in the chambers.

Computational Fluid Dynamics (CFD) has been widely used in the prediction of turbulent phenomena in order to characterize the flow structures within this type of chambers. The literature describes that RANS models, which do not take into account the transient characteristics, fail several times in this task and that complete turbulence resolution models are too expensive for use in industry.

In this dissertation the investigation of the impact of the turbulence phenomena in the gas mixture is made, with the objective of computationally modeling the camera operation of the CLOUD experiment at CERN. To this end, it is initially framed the objective in the characteristics and state of the art of the modeling of this type of chambers.

Subsequently, the physical-mathematical formulations of the transport processes that underlie the numerical modeling of the turbulent mixture are described. The studies are based on the multi-phase model "MIXTURE" of the FLUENT commercial code with two variants for the turbulence model, in which the model $k - \omega$ SST URANS and SAS will be used.

The results obtained are validated with data from the literature, analyzing the mixture of two gases in a T junction. A geometry is used in order to have little numerical diffusion and in fact to see the relation of the turbulence model with the phenomena of mixture of species.

Finally, the multiphase model for the mixture of Ar and SO_2 in the mixing chamber of the CLOUD experiment is applied. The simulations were done in conjunction with both turbulence models, SST and SAS, which demonstrated significantly different results. The turbulence model always behaves better than the SST for the various cases analyzed.

Keywords

Mixing Chambers, Computational Fluid Dynamics (CFD), Turbulent Mixing, T-junction.

Conteúdo

1	Introdução	1
1.1	Considerações gerais sobre câmaras de mistura	1
1.1.1	Impacto na indústria e problemas adjacentes	2
1.1.2	Constituição típica	2
1.1.3	Padrões e estruturas do escoamento consoante o tipo de arranjos e geometrias	4
1.2	Mecanismos de mistura turbulenta	4
1.3	Objetivos do presente trabalho	7
1.3.1	Descrição da câmara da experiência CLOUD	8
1.4	Estrutura da dissertação	9
2	Estado da Arte do Estudo de Câmaras de Mistura	11
2.1	Estudos e técnicas experimentais relevantes	11
2.2	Modelação numérica dentro de câmaras mecanicamente agitadas	12
2.2.1	Resolução numérica dos fenómenos turbulentos	12
2.2.2	Tratamento de zonas rotativas	14
2.3	Modelação numérica de escoamentos multifásicos	16
2.4	Síntese do estado da arte	17
3	Fundamentos Teóricos de Mistura Turbulenta	19
3.1	Análise dimensional da mistura turbulenta	19
3.1.1	Instabilidades do Escoamento	21
3.2	Formulação Físico-Matemática da Mistura Turbulenta	21
3.3	Mistura turbulenta em jatos cruzados	24
4	Modelação Numérica	29
4.1	Equações de governo do modelo multifásico	29
4.1.1	Conservação de massa	29
4.1.2	Conservação da quantidade de movimento	30
4.1.3	Conservação da energia	30
4.2	Modelação do escoamento turbulento	31
4.2.1	Modelo $k - \omega$ SST	31
4.2.2	Modelo SAS	31
4.2.3	Tratamento junto das paredes	33
4.3	Modelação de escoamentos com zonas rotativas com a formulação <i>Multiple Reference Frame</i>	34
4.4	Considerações numéricas referentes a estudos em regime transitório	36
5	Caso de Teste para Validação do Modelo Multifásico	37
5.1	Descrição da geometria e condições de funcionamento	37
5.1.1	Metodologia Numérica	39
5.2	Resultados	40
5.3	Sumário da análise da mistura turbulenta na junção em T	41

6	Análise da câmara da experiência CLOUD	47
6.1	Descrição da geometria da câmara	47
6.2	Discretização numérica da malha de cálculo	47
6.3	Descrição do caso de teste	49
6.3.1	Pontos e parâmetros de monitorização	51
6.4	Metodologia Numérica	52
6.5	Resultados	52
6.5.1	Análise do campo de velocidades	53
6.5.2	Caso de estudo complementar à validação do campo de velocidades	56
6.5.3	Distribuição espacial e temporal das concentração de SO_2	61
6.5.4	Análise tridimensional	62
6.6	Sumário da análise à câmara de mistura	64
7	Conclusão	71
7.1	Trabalhos futuros	71
	Bibliografia	73

Lista de Figuras

1.1	(a) Esquema representativo de um arranjo típico dos constituintes de uma câmara de mistura. (b) Um possível agitador que, como numa turbomáquina, pode apresentar um rotor e um estator. Estes são muitas vezes combinados para criar maiores tensões de corte no escoamento.	3
1.2	Visualização dos diferentes tipos de agitadores que devem ser usados consoante a viscosidade do fluido de trabalho (a) Hélices (b) Turbina Radial (Rushton) (c) Turbina Axial.	3
1.3	Influência nas estruturas do escoamento de três fatores geométricos (<i>offset</i> , existência de defletores e tipo de agitador) na agitação hidrodinâmica de um tanque cilíndrico. (a) Padrão base de apenas um agitador (b) Agitador desviado horizontalmente do centro (com <i>offset</i> horizontal) (c) Agitador do tipo axial na presença de defletores (d) Agitador do tipo radial na presença de defletores.	5
1.4	Visualização da mistura turbulenta de uma descarga de um jato em várias posições. (a) a (c) são diferentes planos de visualização aumentando a distância a jusante da saída do jato. Este tipo de mistura pode ser equiparada à denominada “mistura de jatos coaxial”, onde em (a) corresponde à região inicial, (b) a zona de transição ou intermédia e (c) a zona de mistura completa.	7
1.5	Imagens referentes à câmara CLOUD no CERN (2012) (a) Fotografia do aparato. (b) Esquema representativo do funcionamento e componentes da experiência.	8
1.6	Esquema do tipo de estruturas de escoamento provocadas pelas hélices que surgiram na câmara do caso de estudo. As hélices podem girar nos dois sentidos de rotação e entre si podem estar em co-rotação ou em contra-rotação. A velocidade máxima de rotação de cada uma é de cerca de 400 rpm.	9
2.1	Visualização das estruturas resolvidas por diferentes modelos de turbulência para o escoamento sobre um cilindro. (Esquerda) Modelo URANS (Direita) Modelo SAS. A cor é referente ao tamanho característico do vórtice, sendo que vórtices maiores aproximam-se da cor vermelha.	14
2.2	Considere-se três domínios distintos, que rodeiam um agitador. A zona com linhas inclinadas para a direita representa-se o domínio “Di”, a quadrados temos o domínio “Dii” e por fim a zona com linhas inclinadas para a esquerda o domínio “Diii”. A abordagem <i>black box</i> resolve apenas o domínio Di+Dii. A abordagem IO calcula para o domínio Di+Dii (Outer) e para o domínio Dii+Diii (Inner).	15
3.1	Curva de energia em função do número de escala κ . Em (a) temos a zona de produção de energia cinética governada por grandes escalas anisotrópicas. A sub região (b) corresponde à zona inercial que redistribui as grandes escalas em elementos cada vez mais pequenos. Em (c) é a zona de dissipação dos vórtices em energia térmica.	20
3.2	Visualização do efeito do número de Reynolds e do transporte de um escalar passivo em dois tipos de escoamento. Em (a), temos um escoamento líquido para um número de Reynolds igual a $1.75 \cdot 10^3$. Em (b) o mesmo tipo de escoamento mas para um número de Reynolds igual a $2.3 \cdot 10^4$	24

3.3	Em cima apresenta-se uma imagem experimental das estruturas formadas pela injeção vertical de um fumo num escoamento horizontal. Em baixo, é esquematizado o caso de cima onde são descritas as três zonas importantes. (a) Parede (b) Par de vórtices em contra-rotação (c) Vórtices a montante (d) Vórtices de esteira (e) Vórtices de ferradura.	25
3.4	Esquema representativo de um corte bidimensional de uma junção em T. A tracejado representa-se o volume de controlo a que são aplicadas as equações. . .	26
4.1	Perfil de velocidades na camada limite turbulenta.	33
4.2	Esquema da diferença entre acoplar a malha na parede (sem função de parede) e usar uma função de parede sendo visualizado como (a) e (b), respetivamente. . .	34
4.3	Ilustração de uma geometria típica com uma zona de rotação inserida numa estacionária	35
5.1	Geometria da junção em T que será investigada. Unidades em milímetros.	37
5.2	Condições de fronteira aplicadas à geometria. (a) Entrada de A_r (<i>velocity inlet</i>). (b) Entrada de N_2 (<i>velocity inlet</i>). (c) Saída do escoamento para o ambiente (<i>pressure outlet</i>).	38
5.3	Malha de cálculo utilizada. (a) Corte vertical normal a $y=0$ m (b) Corte vertical normal a $x=0,125$ m. As superfícies da malha contém 7826 pontos e o volume contém 112912 nós de cálculo.	39
5.4	Contornos na parede da distância adimensional y^+ . (a) Para uma razão de mistura igual a 0,1. (b) Para uma razão de mistura igual a 0,2.	42
5.5	Dados obtidos para os cálculos com o modelo SST e o SAS em comparação com os resultados experimentais e outros numéricos. O maior desvio relativo foi para o modelo SST, com uma razão de mistura de 0,2, que teve um valor de 13%, aproximadamente.	42
5.6	Velocidade adimensional do escoamento [$u^* = u/u_{N_2}$] para o modelo SST e o SAS, num corte vertical normal a $y=0$ m. Tempo de 2 segundos.	43
5.7	Fracção volúmica, ξ , de N_2 para o modelo SST e o SAS, num corte vertical normal a $y=0$ m. Tempo de 2 segundos.	43
5.8	Energia cinética turbulenta adimensional [$k^* = k/u_{N_2}^2$] para o modelo SST e o SAS, num corte vertical normal a $y=0$ m. Tempo de 2 segundos.	44
5.9	Critério Q para o modelo SST e o SAS. Para um valor de $Q_{cr} = 1000 \text{ s}^{-2}$. Tempo de 2 segundos. Vórtices coloridos pela velocidade adimensional u^*	44
5.10	Para uma razão de mistura 0,1 o SST e o SAS apresentam um desvio relativo ao analítico de 1,94% e 0,76%, respetivamente, veja-se a seta no gráfico. Para uma razão de mistura 0,2 o SST e o SAS apresentam um desvio relativo ao analítico de 29,85% e 33,90%, respetivamente.	45
6.1	Visão geral da câmara completa com referência a algumas medidas relevante. . .	48
6.2	Visão aproximada da zona de rotação inferior. (Em cima) Visualização do estator, do veio e das entradas inferiores da câmara. (Em baixo) Visualização apenas do ventilador inferior.	48
6.3	Visualização da malha de calculo utilizada. (a) Corte seccional vertical mediano.(b) Corte seccional horizontal nas pás do ventilador inferior.	49
6.4	Ilustração da geometria utilizada com referência às suas condições de fronteira.	50

6.5	Pontos de monitorização dos valores de magnitude da velocidade do escoamento e das concentrações volumétricas do gás SO_2 . Esta figura também é fonte de especificação do referencial da geometria, dado que é a superfície plana dada por $z = 0$ m.	51
6.6	Comparação do campo de velocidades de resultados de estado estacionários anteriores e os modelos não-estacionários utilizados neste estudo de modo a evidenciar a alteração na estrutura do escoamento. Na linha superior apresenta-se a magnitude da velocidade absoluta e na inferior a velocidade segundo a direção vertical. O campo de velocidade é apresentado num plano de corte vertical pelo meio da câmara. Tempo de escoamento de 304 segundos.	53
6.7	Valores da magnitude da velocidade normalizada para os pontos monitores (d) e (e). Para o ponto (d) $\overline{u_n} = 0,2052 \text{ m.s}^{-1}$. Para o ponto (e) $\overline{u_n} = 0,2022 \text{ m.s}^{-1}$. O desvio padrão é de 3% para o ponto (d) e de 2% para o ponto (e). A figura (a) é com o modelo SST e a figura (b) com o modelo SAS, o que mostra o carácter mais flutuante da solução deste último.	54
6.8	Momento aplicado nas pás da hélice superior (a) Extração da variação do número de potência ao longo de 300 segundos (corresponde a quase 2000 rotações) $\langle M \rangle$ é o valores médio das flutuações e std é o desvio padrão para a amostra retirada. .	55
6.9	Variação da velocidade adimensional u^* para os modelos SST e SAS em diferentes alturas da câmara, ao longo da direção radial $x^* = x/T$, para cinco alturas diferentes que correspondem às linhas de corte na figura da direita.	56
6.10	Variação das diferentes componentes da velocidade para diferentes alturas da câmara e ainda a energia cinética turbulenta. As velocidades são normalizadas pela velocidade da ponta das pás e a energia cinética turbulenta pelo quadrado da velocidade da ponta das pás. Sendo que: u_{y^*} é a velocidade axial adimensional; u_{x^*} é a velocidade radial adimensional; u_{z^*} é a velocidade tangencial adimensional e k^* a energia cinética turbulenta adimensional.	57
6.11	Visualização da energia cinética turbulenta adimensional [$k^* = k/(u_{tip}^2)$] para o tempo de 340s. Dados apresentados num plano de corte vertical pelo meio da câmara.	58
6.12	Visualização dos valores de y^+ . Em cima temos os contornos na parte exterior da câmara. Em baixo temos o estator e a hélice inferior. Tempo de escoamento de 340 segundos.	59
6.13	Visualização das linhas de corrente com início na entrada de ar até à saída da câmara. A coloração é feita com a variação da magnitude da velocidade absoluta. Apresenta-se igualmente um corte horizontal, para uma altura de 2,1 metros, sobre o qual é representada a linha na qual foram retirados os dados das velocidades para comparação com os experimentais. Tempo de escoamento de 240 segundos. .	60
6.14	Gráfico da velocidade absoluta do escoamento (u), em função da distância radial (rd), da linha horizontal referida na Figura 6.13. Aqui compara-se os dados experimentais facultados e os resultados para os casos de teste com o modelo SST e o SAS. Tempo de escoamento de 240 segundos. Dados experimentais facultados pela equipa da experiência CLOUD.	61
6.15	Contornos da Uniformidade para uma concentração final de 5 ppmv num plano de corte em $y=0,2$ m (através das hélices inferiores) com linhas de corrente no plano de corte.	63

6.16	Distribuição normal da uniformidade segundo os parâmetros médio e desvios apresentados na Figura 6.15. A verde apresenta-se a distribuição para um tempo de escoamento igual a 100 segundos e a vermelho para 340 segundos.	64
6.17	Contornos da Uniformidade, para uma fração volumétrica final de 1 ppmv com vetores velocidade no plano de corte.	65
6.18	Variação da Uniformidade média para os diferentes planos da Figura 6.17 e acrescentados pontos para planos de corte de alturas y [m] = (0,675; 1,625 ; 2,575; 3,525).	66
6.19	Visualização dos contornos da Uniformidade junto às paredes da câmara. Em cima, apresenta-se a comparação dos modelos com visualização das faces dianteiras da câmara. Em baixo temos a visão do lado oposto da câmara, que denominamos por traseira.	67
6.20	Visualização das iso-superfícies com um valor de $Q_{cr} = 0,5 s^{-2}$. (a) Iso-superfícies coloridas pela uniformidade, calculada para uma concentração final de $\xi_f = 1 ppmv$. (b) Iso-superfícies coloridas para a velocidade adimensional u^*	68
6.21	Visualização das linhas de corrente que intersectam a saída, com uma integração de 2,5 metros. As linhas são coloridas pela função da uniformidade U , calculada para uma concentração final de $\xi_f = 1 ppmv$	69
6.22	Visualização das linhas de corrente que partem da entrada do gás SO_2 , com uma integração de 2,5 metros. As linhas são coloridas pela função da uniformidade U , calculada para uma concentração final de $\xi_f = 1 ppmv$	70

Lista de Tabelas

5.1	Velocidades utilizadas nas entradas do sistema. As velocidades foram calculadas com o uso da Equação 5.1 para um número de Reynolds de 10000.	38
6.1	Descrição das diversas dimensões associadas à geometria da câmara CLOUD vista nas Figuras 6.1 e 6.2	47
6.2	Propriedades de massa específica e de viscosidade dos fluidos utilizados	49
6.3	Tabela de condições de fronteira aplicadas. Nota: O nome das condições é referente à Figura 6.4.	50
6.4	Relação da percentagem de potência vs velocidade em RPM. A velocidade de rotação da hélice relaciona-se com a velocidade de rotação do veio do motor numa razão de velocidades de 0,289.	51
6.5	Coordenadas dos pontos de monitorização das velocidades e das concentrações do escoamento ao longo do tempo, num plano cartesiano a meio da câmara. . .	52

Lista de Acrónimos

CERN	Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant-Friedrichs-Levy
CLOUD	Cosmic Leaving Outdoor Droplets
CMAST	Center for Mechanical and Aerospace Sciences and Technology
DNS	Direct Numerical Simulation
DPM	Discrete Particle Model
FCT	Fundação para a Ciência e a Tecnologia
IO	Inner-Outer
LDA	Laser-Doppler Anemometer
LDV	Laser Doppler Velocimety
LES	Large Eddy Simulation
MRF	Multiple Reference Frame
PIV	Particle Image Velocimetry
RANS	Reynolds Average Navier-Stokes
SAS	Scale Adaptive Simulation
SG	Sliding Grid
SM	Sliding Mesh
SRS	Scale Resolving Simulation
SST	Shear Stress Transport
UBI	Universidade da Beira Interior
URANS	Unsteady Reynolds Average Navier-Stokes
VOF	Volume Of Fluid

Nomenclatura

Letras latinas	Descrição	Unidade
BPF	Frequência de passagem da pá	[Hz]
d	Diâmetro do tubo secundário ou do cubo	[m]
D	Diâmetro do tubo principal ou da hélice	[m]
D_α	Coefficiente de difusão de α	[$m^2 s^{-1}$]
f	Fluido	
F	Força mássica	[N]
h	Altura da pá	[m]
H	Altura câmara	[m]
J	Fluxo da Lei de Fick	[-]
k	Energia cinética Turbulenta	[$m^2 \cdot s^{-2}$]
l	Comprimento característico	[m]
L	Comprimento tubo principal	[m]
\dot{m}	Caudal mássico	[$kg \cdot s^{-1}$]
n_p	Número de pás por agitador	[-]
N	Velocidade de rotação	[rpm]
p	Pressão estática	[Pa]
p_t	Pressão total	[Pa]
P	Potência mecânica	[W]
Q	Caudal volumétrico	[$m^3 \cdot s^{-1}$]
Q_{cr}	Critério de identificação de vórtices	[s^{-2}]
s	Área da secção transversal	[m^2]
S_0	Desvio padrão	[-]
S_1	Parâmetro de mistura	[-]
t	Tempo	[s]
T	Diâmetro da câmara	[m]
u	Velocidade absoluta	[$m \cdot s^{-1}$]
w	Largura da pá	[m]
Letras gregas		
κ	Número de onda	[m^{-1}]
μ	Viscosidade dinâmica	[Pa.s]
Γ_k, Γ_ω	Difusividade de k e ω	[$m^2 \cdot s^{-1}$]
ν	Viscosidade cinemática	[$m^2 \cdot s^{-1}$]
ρ	Massa específica	[$kg \cdot m^{-3}$]
$\lambda_\kappa, \lambda_B$	Comprimento da escala de Kolmogorov e de Batchelor, respetivamente	[m]
τ	Tempo de relaxação	[s]
ϕ	Escalar passivo	[-]
ε	Taxa de dissipação de energia turbulenta	[$m^2 \cdot s^{-3}$]
ω	Taxa específica de dissipação de turbulência	[s^{-1}]

Estudos sobre a Uniformização do Escoamento em Câmaras de Mistura usando CFD

Índices

x, y, z	Eixo ou direção x, y e z	[-]
1, 2, 3	Entrada principal, entrada secundária e saída, respectivamente	
$\bar{\quad}$	Valor médio	[-]
∞	Escoamento livre	[-]
'	Valor da flutuação	[-]
p	Partícula	[-]
m	Média	[-]
f	Fase ou fluido	[-]
*	Número normalizado	[-]
Grupos adimensionais		[-]
Re	Número de Reynolds	[-]
St	Número de Stokes	[-]
Sc	Número de Schmidt	[-]
y^+	Distância adimensional da parede	[-]
U	Uniformidade	[-]
ξ	Fração volumétrica	[-]
ξ_f	Fração volumétrica final	[-]
r_m	Razão de mistura	[-]
r_d	Razão de densidades	[-]

Capítulo 1

Introdução

Atualmente, a indústria depara-se constantemente com a necessidade de melhorar a rentabilidade, a rapidez e a eficiência dos processos industriais. O desenvolvimento de ferramentas de apoio a estes processos torna-se, pois, imperativo.

Neste sentido, têm vindo a ser utilizados métodos numéricos capazes de reproduzir os fenómenos físicos, sem a necessidade da construção real de protótipos, e, conseqüentemente, conseguindo uma redução de custos. Uma das ferramentas que o possibilita é a *Dinâmica dos Fluidos Computacional* (CFD), que tem vindo a destacar-se no projeto e otimização de sistemas de engenharia. Em CFD a capacidade de resolução de problemas cada vez mais complexos aumenta com o desenvolvimento da tecnologia e com as capacidades de computação. Para além desta dependência, que muitas vezes se torna um desafio, a CFD apresenta atualmente impasses na modelação de alguns fenómenos mais complexos, como é o caso da turbulência [1].

Uma das aplicações dos códigos CFD é a modelação dos escoamentos dentro de câmaras de mistura, principalmente quando a mistura se dá devido à presença de agitadores mecânicos (turbomáquinas) que transferem uma quantidade de movimento para o fluido/sólido em questão.

A agitação cria campos de velocidades e, na maioria dos casos, de turbulência que, quando modelados, podem dar-nos indicações dos fatores que influenciam a eficiência da mistura. Estas câmaras são extremamente utilizadas na indústria nos mais diversos processos.

1.1 Considerações gerais sobre câmaras de mistura

Na prática, os fenómenos que ocorrem numa câmara de mistura são multifacetados, no entanto devem ser tidos em consideração fatores como: o tipo de fases de trabalho, sejam líquidas, sólidas, gasosas; os modos de mistura; as condições de funcionamento; os tipos de agitadores; os níveis necessários de uniformização; etc..

Nestas aplicações devem ser distinguidos dois termos utilizados: “agitar” e “misturar” [2].

“Agitar” é o fenómeno de dispersar as partículas no domínio da câmara conseguido através dos movimentos dos agitadores.

“Misturar” trata-se do fenómeno de interação entre as diversas fases de trabalho, constituintes que interagem entre si em diversas escalas, sendo envolvidas propriedades de viscosidade e de difusão molecular.

No que concerne aos modos de funcionamento, existe um grande leque de possíveis estados de operação. Podemos ter mistura de gás-gás ou gás-líquido. Estes normalmente consideram-se como “dispersões” caso o líquido tenha a maior fração volumétrica ou de *sprays* se forem gotículas de líquido em soluções gasosas.

Ainda podem existir misturas de gás-sólido, líquido-líquido, líquido-sólido ou sólido-sólido, podendo ser chamado de suspensões ou ainda sólido-sólido. Para o tipo de mistura desejada devem ser bem planeados os constituintes da câmara bem como as zonas de funcionamento para um maior rendimento [3].

1.1.1 Impacto na indústria e problemas adjacentes

No último século, tem sido dada preponderância ao desenvolvimento de métodos de análise dos fenómenos físico-químicos que acontecem dentro das câmaras de mistura. Esta importância decorre do facto de serem utilizadas em muitas indústrias como a farmacêutica, a bioquímica, a petroquímica e de processamento de alimentos biológicos.

Visto que a indústria depende do bom funcionamento destas, vê-se perante a necessidade de melhoramento no projeto, de aumento da segurança e da produtividade.

Segundo dados do ano 1993, estima-se que numa multinacional na área da indústria química os Estados Unidos tenham perdido, por ano, cerca de 100 milhões de dólares, exclusivamente devido à fraca qualidade de mistura nas suas câmaras [4]. Para além desta, muitas outras indústrias são afetadas ainda que cada uma na sua escala.

As técnicas experimentais existentes não são suficientemente capazes de providenciar as informações e medições necessárias sobre as estruturas do escoamento e muito menos sobre os processos que ocorrem quando existe mais do que uma fase. Assim, com as ferramentas de cálculo CFD é possível obter informações acerca do transporte de fluidos, gases ou mesmo sólidos e da sua dinâmica dentro das câmaras [1].

1.1.2 Constituição típica

Os constituintes de uma câmara de mistura variam de aplicação para aplicação, dependendo dos fenómenos em que se baseiam para fazer a mistura.

Uma das formas mais comuns de misturar diversos componentes é por agitação, para isso usa-se habitualmente os “misturadores dinâmicos”. Os misturadores dinâmicos funcionam com geometrias que são variantes no tempo, como aqueles que têm a presença de um agitador mecânico. Esta designação deve ser salientada pois existem outros tipos de misturadores, por exemplo, “misturadores estáticos” são aqueles que através de uma geometria estática conseguem gerar suficientemente turbulência para misturar diversos componentes. Neste trabalho, serão discutidas as câmaras que são agitadas mecanicamente por meio de um ou mais agitadores.

A constituição usual é exemplificada na Figura 1.1. As dimensões de cada componente fazem variar os requisitos de potência para as diversas operações de mistura, desta forma o dimensionamento destes é crucial.

A câmara é, por norma, um tanque cilíndrico cujo diâmetro pode ultrapassar os 10 metros em grandes instalações industriais. Estas podem ser abertas na parte de cima para a atmosfera ou fechadas. O formato da zona inferior pode variar, sendo que é muitas vezes curvo para consumo de menor potência.

Os defletores são usados quando há necessidade que gerar mais vórtices, ou seja, para criar estruturas no escoamento mais aleatórias e caóticas. Muitas vezes são utilizados por forma a prevenir a criação de vórtices centrais. Os vórtices centrais são um fenómeno em que o escoamento global roda apenas sob o eixo de rotação do agitador, como um todo. Isto é muito usual quando o escoamento apresenta baixos números de Reynolds¹ e são normalmente colocados igualmente espaçados entre si, no sentido radial, e junto às paredes da câmara.

O agitador, mais concretamente o rotor, é o componente fundamental na agitação dos fluidos e é onde a energia mecânica é convertida em energia hidrodinâmica. Os agitadores são sempre classificados pelo tipo de circulação que criam, duas categorias de axiais e radiais são as que

¹O número de Reynolds é um indicador do regime do escoamento. Seja ele laminar, transitório ou completamente turbulento. Números de Reynolds elevados sugerem escoamentos completamente turbulentos.

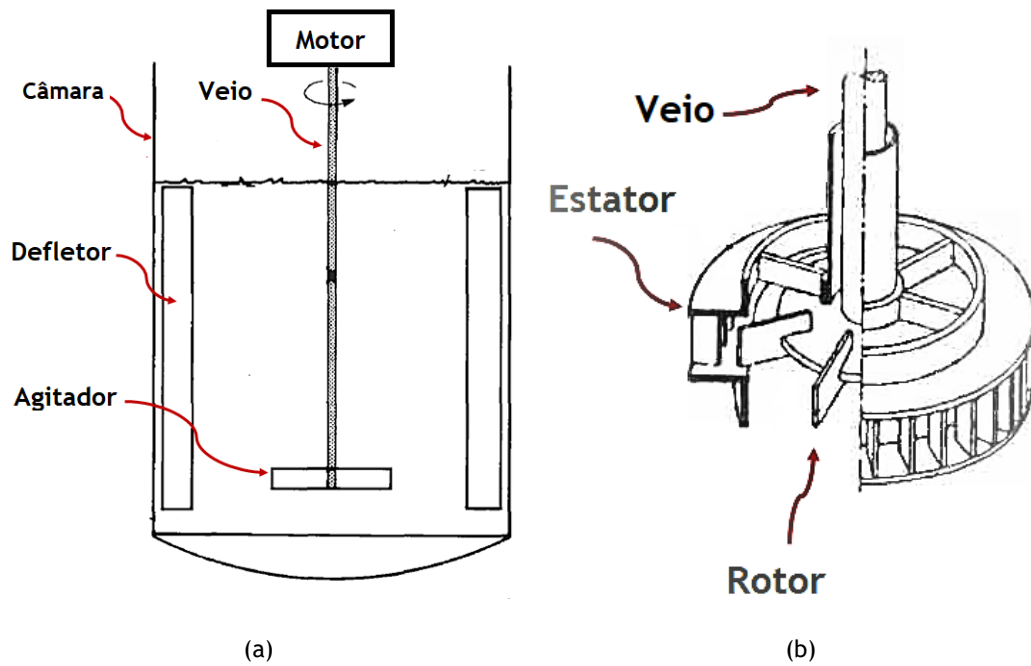


Figura 1.1: (a) Esquema representativo de um arranjo típico dos constituintes de uma câmara de mistura. (b) Um possível agitador que, como numa turbomáquina, pode apresentar um rotor e um estator. Estes são muitas vezes combinados para criar maiores tensões de corte no escoamento. Adaptado de [5].

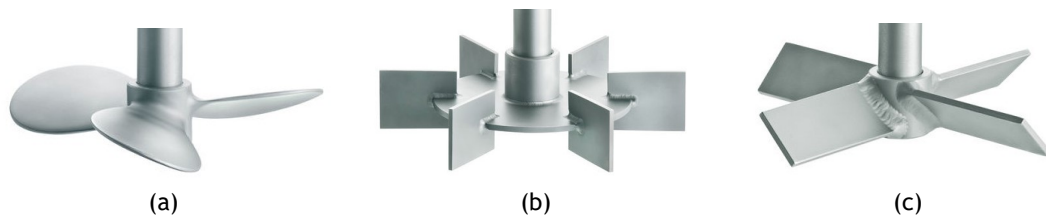


Figura 1.2: Visualização dos diferentes tipos de agitadores que devem ser usados consoante a viscosidade do fluido de trabalho (a) Hélices (b) Turbina Radial (Rushton) (c) Turbina Axial. Fonte: [8]

costumam ser referenciadas. Estes tipos de circulação são conhecidos como “padrões do escoamento” e variam com mais parâmetros que o tipo de rotor, por exemplo, há que ter em conta as viscosidades dos fluidos de trabalho [6].

Na Figura 1.2 podem ser vistos exemplos de rotores que devem ser utilizados consoante a magnitude da viscosidade (viscosidade dinâmica μ^2). As hélices devem funcionar para fluidos de trabalho com viscosidades abaixo dos $2 Pa.s$. As turbinas de Rushton são agitadores predominantemente radiais, que são utilizados até viscosidades de $50 Pa.s$. As turbinas de pás inclinadas são agitadores predominantemente axiais, que são utilizados até viscosidades de $1000 Pa.s$ [7].

Além do tipos de agitadores já referenciados, existem outros formatos diversos, por exemplo, formatos do tipo âncora e helicoidais que são utilizados para viscosidades de grandes magnitudes. É de notar que aqui se pressupõe que, com o aumento da viscosidade, as velocidades de trabalho do rotor aumentam.

²A viscosidade dinâmica ou absoluta é aquela que relaciona a quantidade de força que tem de ser exercida por quantidade de área para o fluido se mover.

1.1.3 Padrões e estruturas do escoamento consoante o tipo de arranjos e geometrias

O escoamento dentro de câmaras mecanicamente agitadas pode apresentar diversos padrões e, muitas vezes, o regime estacionário não é alcançado, não só devido às fortes flutuações do escoamento e à turbulência gerada, como ainda aos processos de mistura por fenómenos de difusão. Como é de pressupor, o padrão das circulações formadas é maioritariamente imposto pela geometria das pás do rotor (e, se houver, do estator) do(s) agitador(es), da existência (ou não) de defletores e do seu número e posição, ou seja, existe um leque de fatores condicionantes da eficiência das câmaras.

A Figura 1.3 (a) representa a constituição base. A constituição base é apenas um tanque cilíndrico e um agitador centrado radialmente. O tipo de circulação gerada num tanque hidrodinâmico cria um vórtice central, fazendo o fluido mover-se todo na mesma direção e não misturando as partículas. Na Figura 1.3 (b) é criado um desvio horizontal, no sentido radial, do agitador, chamado de *offset*. Esta modificação contribui para a não formação de vórtices centrais, criando maiores graus de turbulência, contudo, não gera suficientemente turbulência para os fenómenos de mistura. As Figuras 1.3 (c) e (d) adicionam à configuração base defletores e variam o tipo de agitador, respetivamente, um axial e um radial. A adição de defletores previne a criação de vórtices centrais, criando a turbulência necessária para os fenómenos requeridos.

Adicionando ao escoamento maiores graus de turbulência, verifica-se uma distribuição das partículas nos sentidos radiais e axiais. Maiores distribuições aleatórias provocadas pela turbulência geram maiores graus de uniformização quando se tratam de fluidos multifásicos, por adicionar processos de difusão e não só de convecção. Relativamente à variação do tipo de agitador nas Figuras 1.3 (c) e (d) também são notadas diferenças. Num agitador do tipo axial vemos as circulações a seguirem a direção do eixo de rotação enquanto que no radial as circulações principais seguem o sentido radial.

Até aqui fez-se referência apenas a padrões produzidos por câmaras que são agitadas por apenas um agitador, contudo na indústria é, não raras vezes, utilizado mais do que um agitador e, ocasionalmente, combinações de agitadores. O uso de múltiplos agitadores é útil evidentemente quando as câmaras são de grandes dimensões e é necessária muita potência para poder haver mistura. Contudo podem apresentar uma grande vantagem relativamente ao uso de defletores. Os defletores, apesar de criarem maior turbulência, produzem perdas de pressão locais que conduzem a uma maior potência requerida ao veio. Com o uso de dois agitadores (um em cima e um em baixo) a girarem em sentidos opostos de forma a não criar um vórtice central [9] é uma solução mais viável (se possível a montagem) pois além de gerar mais turbulência requer menos potencia ao veio de cada agitador. Ainda podem ser utilizadas combinações com propriedades de funcionamento diferentes, tornando o estudo do escoamento deveras complexo e difícil de prever.

1.2 Mecanismos de mistura turbulenta

A maioria dos escoamentos que existem na natureza e na engenharia são turbulentos. Os fenómenos turbulentos são deveras fáceis de identificar, contudo, extremamente difíceis de caracterizar. Essa dificuldade relaciona-se nomeadamente com as características aleatórias (irregulares), a difusão ou a convecção existente.

A origem da turbulência deve-se basicamente às diferenças de velocidades, por exemplo, num

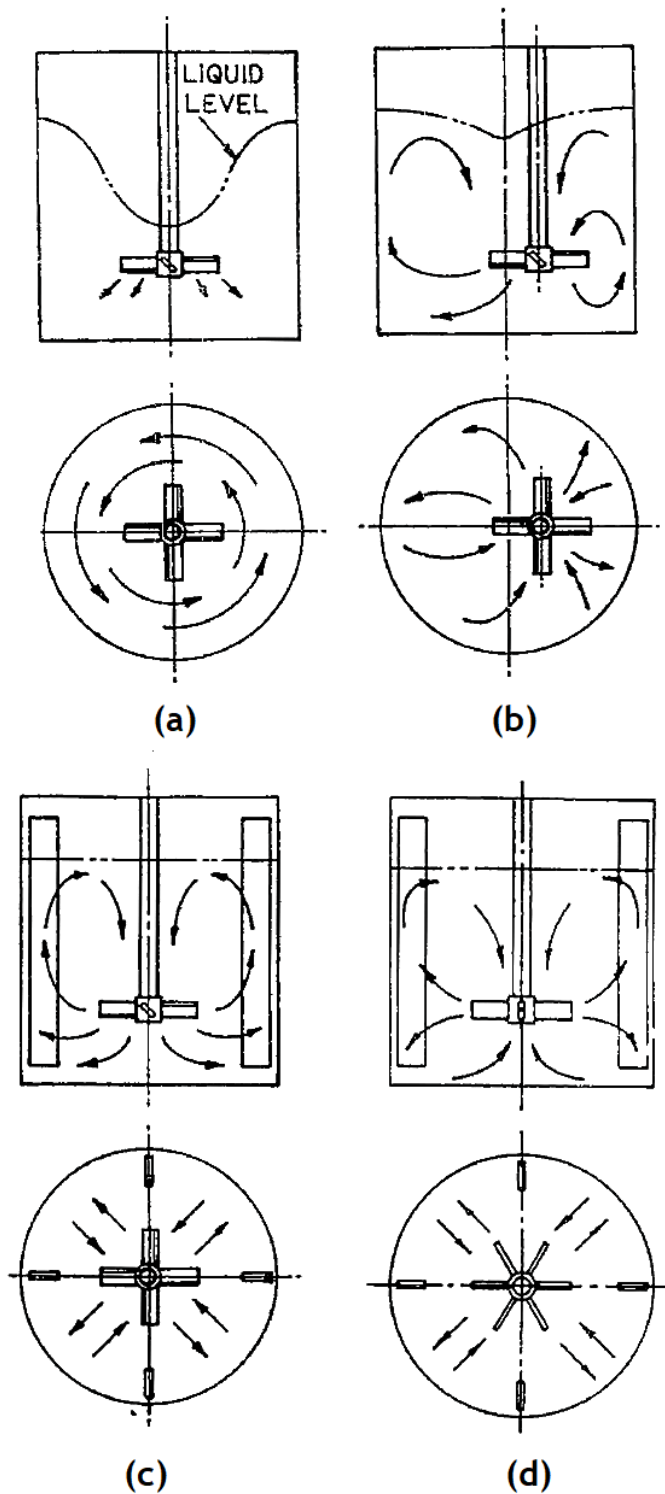


Figura 1.3: Influência nas estruturas do escoamento de três fatores geométricos (*offset*, existência de defletores e tipo de agitador) na agitação hidrodinâmica de um tanque cilíndrico. (a) Padrão base de apenas um agitador (b) Agitador desviado horizontalmente e radialmente do centro (com *offset* horizontal) (c) agitador do tipo axial na presença de defletores (d) Agitador do tipo radial na presença de defletores. Adaptado de [5].

escoamento junto a uma parede, este vai retardar próximo dela enquanto a parte mais afastada continua a mover-se a certa velocidade. Estas diferenças de velocidade formam os chamados vórtices ou turbilhões que são a principal fonte de turbulência. Assim a turbulência é propriedade do escoamento de fluidos.

Se considerarmos um escoamento com um comprimento característico, l_c , composto por um fluido de massa específica, ρ , com uma viscosidade dinâmica, μ , que se move a uma velocidade média do escoamento livre (escoamento sem influência das forças exercidas pela parede) u_∞ , podemos expressar o número de Reynolds Re é o pela Equação 1.1.

$$Re = \frac{\rho u_\infty l_c}{\mu} \quad (1.1)$$

Este número apresenta o quociente das forças de inércia e de viscosidade. Assim para grandes magnitudes de momento e velocidade e fluidos pouco viscosos irá resultar em números de Reynolds altos e regimes de escoamento turbulentos.

A turbulência é o fenómeno mais abundante em câmaras de mistura e é o ponto chave para que exista uma homogeneidade das soluções. Contudo a ligação entre mistura e turbulência vai bem para além de câmaras de mistura, aparecendo não só na indústria, mas também na natureza. Neste último caso, pode ser observada, nomeadamente na mistura no interior das estrelas (astrofísica), dentro do manto da Terra (geologia), nas dispersões na atmosfera (ambiente) ou na reologia das misturas do sangue nas veias (fisiologia) [10]. Consequentemente, denomina-se por “mistura turbulenta” o englobar dos fenómenos turbulentos na geração de uniformidade de escoamentos. Todos estes fenómenos tem uma grande diversidade de escalas (de comprimento e temporais), velocidades, viscosidades e muitos outros parâmetros que têm vindo a ser estudados.

A “mistura turbulenta” tem por base três mecanismos distintos definidos pelas suas escalas características. Estes são normalmente nomeados por *macromixing*, *mesomixing* e *micromixing*. A denominada *macromixing* é usualmente referida como a mistura “distributiva”. Esta engloba a parte do escoamento em que o transporte das partículas é feito por mecanismos de inércia e convectivos. A sua escala é caracterizada pela ordem de grandeza diametral da câmara ou o comprimento característico do sistema que inclui a mistura [11].

É o fenómeno de *macromixing* que determina o tempo de mistura até ser atingida uma uniformidade macroscópica na câmara. Aqui entram em consideração as partes móveis ou alterações geométricas do misturador, pois são estas que geram os gradientes de velocidade e pressão responsáveis pelas tensões de deformação aplicadas aos elementos fluidos, contribuindo desta forma para uma *heterogeneidade espacial*.

A energia destas escalas é dissipada sob a forma de energia turbulenta através de vórtices cada vez mais pequenos. A zona intermédia das grandes escalas para as pequenas é chamada de sub-região inercial e nesta atuam os fenómenos de *mesomixing*.

A *mesomixing* é referida como um processo de “dispersão”. Aqui são descritas as transições que ocorrem desde a injeção nos tubos de admissão até à desintegração inercial por convecção dos grandes turbilhões [12].

Na junção destes fenómenos temos o denominado *stretching* (alongamento) responsável pela dispersão das fronteiras dos elementos do escoamento por todo o domínio de mistura, criando digamos um “embaralhamento” inicial dos diversos elementos. É neste processo que, de facto, se inicializa o processo de mistura.

Até aqui temos fenómenos que comportam efeitos convectivos e de difusão turbulenta, porém

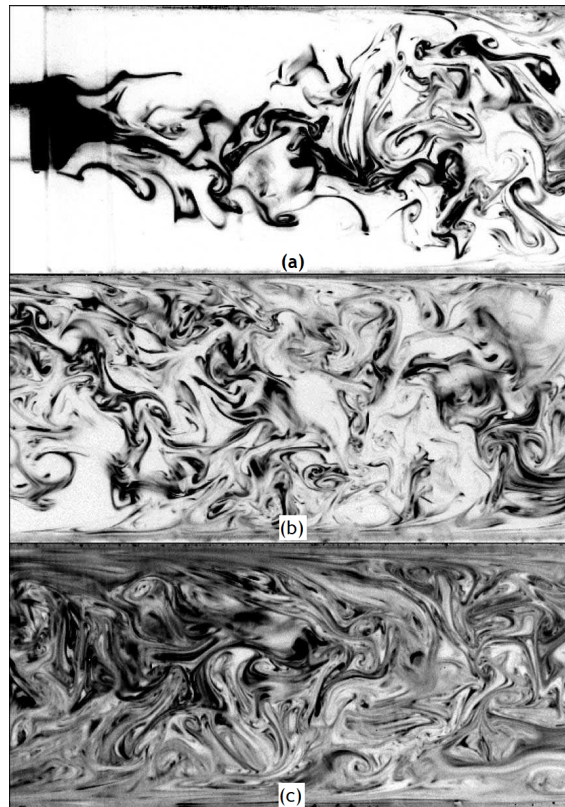


Figura 1.4: Visualização da mistura turbulenta de uma descarga de um jato em várias posições. (a) a (c) são diferentes planos de visualização aumentando a distância a jusante da saída do jato. Este tipo de mistura pode ser equiparada à denominada “mistura de jatos coaxiais”, onde em (a) corresponde à região inicial, (b) a zona de transição ou intermédia e (c) a zona de mistura completa. Adaptado de [13].

ao entrar nas menores escalas de vórtices entramos na *micromixing*. A *micromixing* é regida exclusivamente por efeitos viscosos e de difusão molecular. Esta é principalmente eficaz nas mais pequenas escalas de vórtices, perto das chamadas “escalas de Kolmogorov”.

A difusão molecular é aquela que atua entre os finos filamentos dos elementos fluidos e provoca a quebra destes. Estas quebras nos filamentos provocam uma interpenetração dos diversos elementos, sendo que este movimento é o que gera uma mistura real.

Olhemos para a Figura 1.4, na zona (a) temos grandes e médias estruturas de vórtices onde é adicionada energia ao escoamento que cria a rotação deste, provocando a “distribuição” dos elementos fluidos pelo domínio adjacente (*macromixing*). Ao avançar para a parte (b) da Figura 1.4 vemos o fluido com umas zonas mais claras e outras escuras, sendo que estas escuras notam-se a serem esticadas e deformadas “distribuindo” os elementos provocando trocas espaciais, sendo sinais de *mesomixing*. É depois em (c) que a difusão molecular (*micromixing*) provoca uma verdadeira homogeneidade do escoamento. Podemos assim aferir que as pequenas escalas são importantes para que exista uma boa homogeneidade das soluções e que são os fenómenos turbulentos que conseguem isto.

1.3 Objetivos do presente trabalho

Perante as considerações que até aqui foram feitas podemos considerar que a dinâmica dos fluidos dentro de câmaras de mistura é complexa, mais ainda, quando são misturadores dinâmicos em que a presença de agitadores torna as estruturas do escoamento mais difíceis de prever.

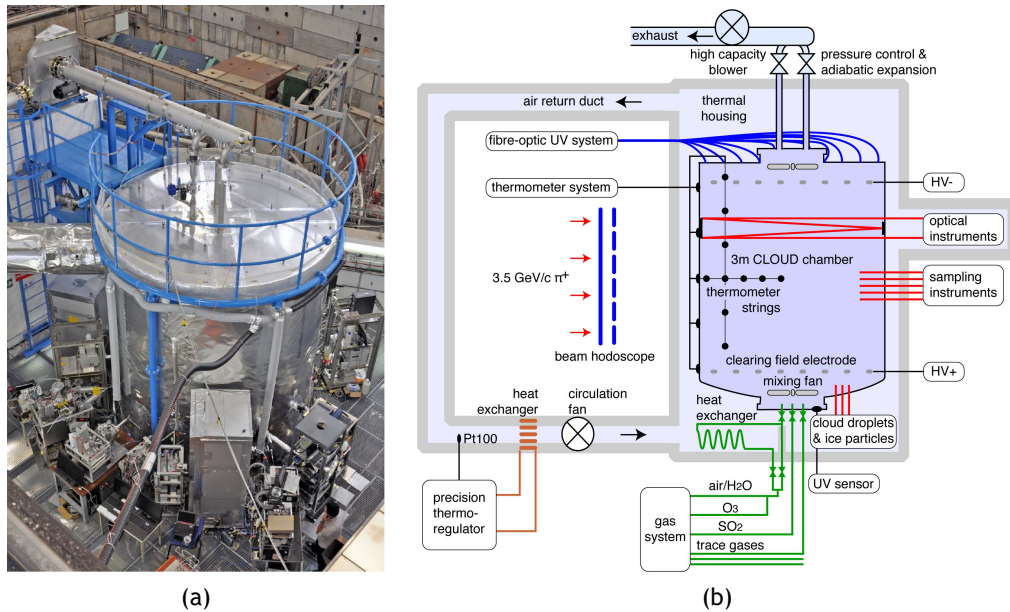


Figura 1.5: Imagens referentes à câmara CLOUD no CERN (a) Fotografia do aparato. Retirada de [14]. (b) Esquema representativo do funcionamento e componentes da experiência. Retirada de [15].

Neste sentido são aqui propostas abordagens computacionais para a previsão das estruturas geradas dentro de uma câmara de mistura. Mais concretamente será objeto principal desta investigação a análise da influência das abordagens de modelação computacional de escoamentos multifásicos na uniformização de fases distintas. Nestes trabalhos pretende-se sempre o estudo da mistura de duas fases gasosas.

Objetivos secundários mas necessários para acoplar de forma apropriada a modelação a efetuar também terão de ser cumpridos. De entre estes destacam-se a revisão bibliográfica das abordagens existentes e já investigadas e ainda o estudo dos conceitos teóricos e a formulação físico-matemática.

É objetivo ainda a validação dos modelos com dados experimentais ou analíticos que possam ser encontrados na literatura. Neste sentido foi proposta a validação do modelo multifásico adotado com um caso de teste de uma mistura turbulenta numa junção em T, que se trata de um simples misturador estático.

Por fim a câmara que será modelada é a da Figura 1.5 (a). Esta câmara é utilizada na experiência CLOUD, desenvolvida para estudos científicos conduzidos no CERN. Um esquema dos dispositivos usualmente incorporados nesta câmara pode ser visto na Figura 1.5 (b). No interior desta é necessário existir uma boa uniformização do escoamento, pelo que é ainda nosso objetivo investigar o quão bem os gases se distribuem dentro da câmara.

1.3.1 Descrição da câmara da experiência CLOUD

A câmara em questão está localizada no CERN e é utilizada na experiência Cosmics Leaving Outdoor Droplets (CLOUD).

A câmara da experiência CLOUD foi desenhada para estudar os efeitos dos raios cósmicos que atingem a atmosfera do planeta Terra na formação das partículas que ativam a formação das nuvens e estudar as concentrações de elementos no ar que proporcionam o seu crescimento. Podem ser vistos os diversos componentes que usualmente compõem a câmara CLOUD na Figura 1.5 (b). A câmara consiste num cilindro com $26,1 m^3$ onde são injetados os componentes prin-

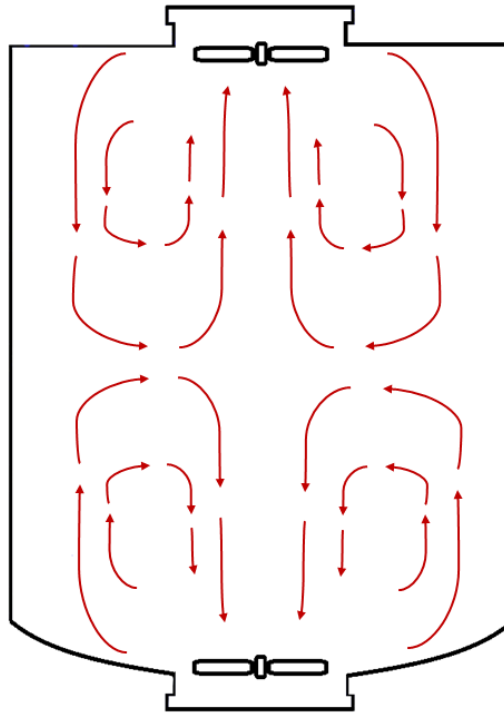


Figura 1.6: Esquema do tipo de estruturas de escoamento provocadas pelas hélices que surgiram na câmara do caso de estudo. As hélices podem girar nos dois sentidos de rotação e entre si podem estar em co-rotação ou em contra-rotação. A velocidade máxima de rotação de cada uma é de cerca de 400 rpm.

cipais constituintes do ar na atmosfera. Os constituintes usuais são azoto (N_2) e oxigénio (O_2), com uma concentração molar de 79:21, respetivamente. Além dos componentes principais podem ser colocadas dispersões de gases, como dióxido de enxofre (SO_2), com uma concentração de 100ppmv, de forma a investigar a influência na formação das nuvens, formação de gelo, etc. Para simular as condições de incidência da radiação solar na atmosfera, é ainda colocado um sistema de luz ultra-violeta (UV). Dentro da câmara tem de se verificar uma boa homogeneização, para este efeito ela é também composta por duas hélices, uma na parte de baixo e outra no topo [15]. Estas considerações estão refletidas na Figura 1.6 onde são considerados os padrões que se espera que sejam criados pelo movimento destas hélices.

1.4 Estrutura da dissertação

Dada a introdução aqui feita sobre os processos existentes nas câmaras de mistura e os objetivos propostos, apresenta-se a estrutura da dissertação.

Primeiramente, uma revisão bibliográfica das técnicas e diferentes abordagens no estudo de câmaras de mistura. Num primeiro tópico serão apresentadas algumas técnicas que foram consideradas relevantes e seguidamente serão apresentadas abordagens para assuntos como: modelação do escoamento turbulento, tratamento das zonas rotativas em misturadores mecanicamente agitados e modelação de escoamentos multifásicos.

O terceiro capítulo começa por descrever dimensionalmente os escoamentos turbulentos por forma a serem compreendidas as escalas de comprimento e temporais que estão envolvidas na mistura turbulenta. Seguidamente é feita uma abordagem aos conceitos físico-matemáticos adjacentes à mistura turbulenta.

Estudos sobre a Uniformização do Escoamento em Câmaras de Mistura usando CFD

Com base nas formulações matemáticas dos processos de transporte em escoamentos turbulentos, o quarto capítulo apresenta a integração das equações de transporte nos modelos computacionais que serão utilizados para resolver a turbulência, nomeadamente, o modelo $k - \omega$ SST e o SAS. Também no quarto capítulo são descritas as equações da abordagem utilizadas para modelar as zonas de rotação e ainda são feitas algumas considerações numéricas sobre cuidados a ter na modelação da camada limite e ainda nos cálculos em regime transitório.

O quinto capítulo descreve a utilização de um caso de teste encontrado na literatura que nos permitiu validar o modelo multifásico. Com este caso, que é uma junção em T, são feitas análises aos dois modelos de turbulência e são analisadas as estruturas que cada um resolve.

Validado o modelo multifásico, é feita a análise da câmara da experiência CLOUD, no capítulo sexto. Neste são descritas as condições de funcionamento em que a câmara foi colocada a funcionar e apresentados resultados para o campo de velocidades do escoamento da mistura de gases. Por fim, no último capítulo, são apresentadas algumas conclusões pertinentes e propostas de trabalhos a realizar no futuro.

Capítulo 2

Estado da Arte do Estudo de Câmaras de Mistura

Segundo Paul, E. *et al.* [4] define-se *misturar* como o processo de reduzir a inhomogeneidade a fim de conseguir obter um resultado final requerido. Esta inhomogeneidade poderá estar correlacionada com a fase do fluido, com a temperatura ou concentração de um certo composto. É nesta definição que assenta o objetivo do estudo das câmaras de mistura. A compreensão da dinâmica de fluidos e das estruturas do escoamento dentro de câmaras de mistura é uma tarefa em contínuo desenvolvimento no último século de industrialização. Até ao momento, foram desenvolvidos métodos de análise numa perspetiva experimental e, recentemente, introduzida uma abordagem numérica. Em cada uma das abordagens, deparamo-nos com vantagens e desvantagens, pelo que é conveniente que se tornem complementares de forma a melhorar a compreensão dos fenómenos que ocorrem.

As investigações que serão em seguida referenciadas englobam o estudo da influência de diversos parâmetros, tais como tipo de diferentes agitadores, a sua localização, etc. Isto implica que os estudos do escoamento em câmaras de mistura, principalmente multifásicos, apresentam um enorme número de possíveis abordagens numéricas e de variáveis de estado de funcionamento. Por esta razão, apenas uma parte será focada, nomeadamente a ligação entre os modelos de turbulência e a sua influência no desempenho da mistura (uniformização).

Neste capítulo, pretende-se avaliar o estado atual da investigação feita sobre as câmaras de mistura que são mecanicamente agitadas. Para tal, primeiro são mencionadas algumas técnicas experimentais relevantes que desempenham um papel importante na validação dos modelos computacionais que serão descritos. Seguidamente são discutidos alguns tópicos importantes na modelação numérica.

2.1 Estudos e técnicas experimentais relevantes

As estruturas criadas devido à agitação mecânica de fluidos são deveras complexas, principalmente devido aos turbilhões criados atrás das pás, neste sentido, as características destes comportamentos turbulentos têm sido alvo de muitas investigações.

Foi com a invenção dos lasers e de métodos computacionais de análise de dados que surgiram técnicas de visualização do escoamento dentro das câmaras, o que possibilitou analisar o seu desempenho e características. Técnicas como *Laser Doppler¹ Velocimetry* (LDV) ou *Laser Doppler Anemometry* (LDA) e *Particle Image Velocimetry* (PIV) foram as que sobressaíram e, nos dias de hoje, ainda são utilizadas. A técnica LDA foi das primeiras a surgir e consiste em incidir raios laser e devido aos fenómenos óticos dos feixes a incidirem nas partículas é possível medir as velocidades do escoamento e visualizar os fluxos criadas.

Wu, H. e Patterson, G. K. [16] reconheceram que o conhecimento dos parâmetros de turbulência e de velocidade são fundamentais para a compreensão da mistura em câmara de mistura. Assim

¹Referente ao efeito Doppler que se traduz no efeito físico da variação da frequência das ondas consoante a sua velocidade relativa ao observador.

utilizaram o LDA num tanque com um agitador de Rusthon, mostrando que 60% da energia mecânica era dissipada muito próximo das pás, contudo as suas medições eram uni-dimensionais. Derksen, J. J. *et al.* [17] foram capazes de estudar tridimensionalmente a região do agitador com a técnica LDA, conseguindo medir simultaneamente as três componentes cartesianas da velocidade. Os autores mostraram que atrás das pás são gerados muitos vórtices e ainda com medições do tensor de Reynolds mostraram uma turbulência anisotrópica nas zonas de agitação. Outra técnica vastamente utilizada é a *Particle Image Velocimetry (PIV)*, que com uso fonte suficientemente luminosa consegue fornecer dados sobre a velocidade do escoamento num plano de corte na câmara. A técnica PIV é uma das mais robustas e eficientes para diversas condições de operação. Bakker *et al.* [18] comparam LDV com PIV e relatou que o apenas o PIV conseguia detetar claramente as grandes instabilidades do escoamento, algo que o LDV não consegue. Porém esta técnica funciona bem com uma fase e não com várias.

Sharp, K. V. e Adrian, R. J. [19] analisaram as pequenas estruturas criadas, conseguindo uma resolução de quatro a oito vezes a escala de Kolmogorov, com campos de velocidades que continham 3600 vetores. Esta enorme quantidade de vetores requer análises estatísticas cuidadas e desenvolvimento de *software* para pós-processamento dos dados.

A necessidade de estratégias estatísticas rigorosas, de processamento de dados e ainda de que tanto o fluido de trabalho como o tanque, onde o primeiro está inserido, sejam transparentes causa consideráveis dificuldades no meio industrial. É perante esta dificuldade que a CFD se torna uma ferramenta muito útil.

2.2 Modelação numérica dentro de câmaras mecanicamente agitadas

Como já referido a turbulência é um movimento tridimensional com flutuações nas propriedades do escoamento completamente aleatórias e não estacionárias, principalmente para números de Reynolds elevados. Estes fenómenos são descritos por meio das equações de Navier-Stokes, contudo, devido à sua complexidade, não existe um tratamento algébrico que as resolva de forma exata. Assim, nas últimas décadas, têm vindo a surgir modelos numéricos (iterativos) para o cálculo destes escoamentos turbulentos.

Numericamente, existem diversas considerações que podem ser feitas, por exemplo, em certas aplicações nas quais os escoamentos são bem comportados, podem-se aplicar certas simplificações como simetrias (simplificação feita nos usuais modelos bidimensionais).

Moroud, K. e Hjewetager, B. [20] usaram um modelo bidimensional para comparar resultados de LDA para a mistura de dois fluidos. Contudo, as abordagens bidimensionais consideram que as câmaras são simétricas, o que não é uma boa aproximação, pois, foi mostrado, que não são capazes de prever os efeitos existentes na câmara uma vez que a turbulência tem, frequentemente, um comportamento anisotrópico.

2.2.1 Resolução numérica dos fenómenos turbulentos

Devido à natureza variante no tempo do escoamento turbulento as modelações usuais em regimes estacionários não são apropriados quando são modeladas zonas rotativas [21]. Neste sentido será feita a revisão bibliográfica de modelações em regime não-estacionário.

A primeira forma de calcular um escoamento turbulento é aplicar diretamente as equações de Navier-Stokes para resolver todas as escalas espaciais e as escalas temporais, obtendo a solução

mais exata possível para cada instante de tempo. Aos modelos que utilizam esta abordagem denominamos de *Direct Numerical Simulation* (DNS).

Gillisen, J. *et al.* [22] aplicaram o modelo DNS a um tanque agitado por uma turbina de Rushton. Para que o modelo pudesse resolver até as escalas de Kolmogorov, necessitaram de ter um tamanho da malha de cálculo muito pequeno, tão pequeno quanto o tamanho da menor escala. Com malhas assim tão refinadas, e resolvendo todo o leque de turbulência, implicando também pequenos passos de tempo, o custo computacional torna-se demasiado elevado para a indústria. A necessidade de malhas com volumes de cálculo muito pequenos torna necessária uma grande quantidade de memória.

Na engenharia, o principal foco é a diminuição das relações custo e benefício, por isso, tem sido feita investigação de forma a formular modelos numéricos suficientemente precisos, mas com menor custo que os DNS.

Revestedt, J. *et al.* [23] usaram o modelo *Large Eddy Simulation* (LES). Este modelo aplica um filtro às mais pequenas escalas, que se encontram abaixo do tamanho da célula local, resolvendo assim apenas uma parte do escoamento turbulento. Comparando o modelo DNS e LES apurou-se que o LES é uma aposta suficientemente precisa para resolver os problemas em câmaras mecanicamente agitadas com aplicação na indústria e o modelo DNS para estudos de cariz unicamente académico [22].

A contornar a necessidade de resolver todo (ou quase todo) o espetro turbulento surgiram os modelos *Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations* (RANS) que usam a decomposição de Reynolds. A decomposição de Reynolds é a transformação das variáveis instantâneas (como velocidade) num valor médio e num valor correspondente à flutuação. Isto é aplicado às equações de Navier-Stokes que resulta no aparecimento de uma parcela não linear conhecida por *tensor de Reynolds*. Este tensor é o que necessita de ser modelado, sendo que as diferentes abordagens à modelação deste é o que os “modelos de turbulência” fazem.

A primeira modelação do tensor de Reynolds foi feita por Boussinesq, J. em 1903, e ficou conhecida por *aproximação de Boussinesq* que simplifica drasticamente o custo computacional. Apesar do menor custo computacional simplifica demasiado os parâmetros físicos, por esta razão, apareceram outros modelos, seguindo o mesmo princípio.

Os modelos seguintes mais simples resolvem duas equações adicionais. Por exemplo, o modelo comum $k-\varepsilon$ que apresenta duas equações de transporte, uma para a energia cinética turbulenta, k , e outra para a dissipação da energia turbulenta, ε . Contudo os resultados apontam para uma má predição de resultados para a dissipação.

Bartels, C. *et al.* [24] fizeram uma comparação entre os modelos RANS (utilizando o modelo $k-\varepsilon$) com uma simulação em DNS e foi notória a grande diferença entre alguns resultados (principalmente na energia cinética turbulenta). O modelo RANS mostrou valores muito superiores de energia turbulenta, não apresentando bons resultados numéricos para câmaras mecanicamente agitadas, sobretudo perto das zonas de rotação.

Menter, F. R. [25] apresentou um modelo RANS para melhorar a resolução numérica da viscosidade dos vórtices que provocava resultados díspares para a dissipação de energia cinética turbulenta. Estes modelo ao invés de solucionar a quantidade ε utiliza uma equação para a resolução da taxa específica de dissipação turbulenta ω . Este modelo apresenta melhores resultados pois é capaz de suportar gradientes de pressão muito mais adversos e é capaz de prever as separações dos escoamentos que os modelos $k-\varepsilon$ não conseguem. Este modelo foi denominado de SST (*Shear Stress Transport*).

Coughtrie, A. R. *et al.* [26] aplicaram o modelo SST num escoamento de gás multifásico e compararam com uma versão do modelo $k-\varepsilon$ onde concluíram que o $k-\omega$ SST providência

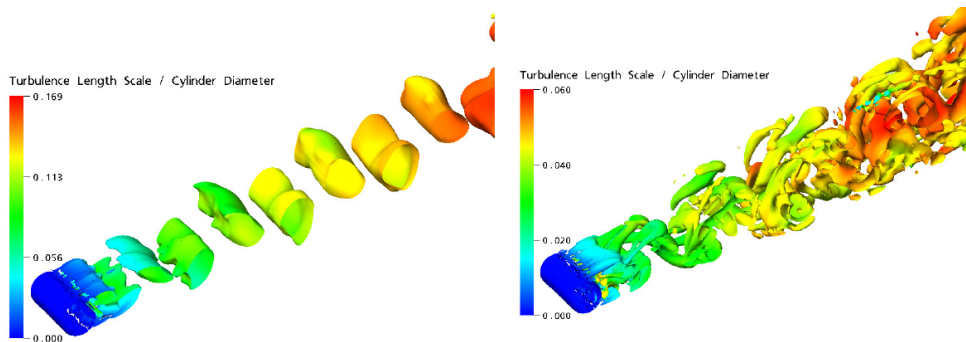


Figura 2.1: Visualização das estruturas resolvidas por diferentes modelos de turbulência para o escoamento sobre um cilindro. (Esquerda) Modelo URANS (Direita) Modelo SAS. A cor é referente ao tamanho característico do vórtice, sendo que vórtices maiores aproximam-se da cor vermelha. Imagens retiradas de [27].

melhores resultados quando comparados com a experiência.

Menter, F. R. *et al.* [27] apresentaram um modelo capaz de resolver as diferentes escalas de turbulência introduzindo no modelo SST-URANS² a escala de turbulência de von-Kármán. Esta providência a resolução das escalas, que os modelos URANS não conseguem, de uma forma dinâmica, sem necessitar de resolver todo o domínio com uma resolução do tipo LES. Veja-se como o modelo de turbulência tem grande impacto na resolução adequada dos vórtices na Figura 2.1. Para obter estes resultados foi utilizado um modelo URANS e o modelo *Scale Adaptive Simulation* (SAS) sendo que a diferença da quantidade de estruturas resolvidas é completamente visível. O modelo SST apenas resolve as grandes estruturas de vórtices e o modelo SAS apresenta um leque muito maior de estruturas.

2.2.2 Tratamento de zonas rotativas

Além da escolha do modelo de turbulência adequado, outra das grandes dificuldades na modelação numérica de câmaras de mistura e de turbomáquinas é o tratamento das zonas de rotação. A necessidade de um tratamento assenta-se no princípio de que o domínio de cálculo apresenta zonas que estão sob constante movimento de rotação (agitadores) enquanto outras estão em regime estacionário (câmara, defletores ou outros componentes existentes).

Ranade [28] salientou que as primeiras abordagens eram conhecidas por *BlackBox*. Nesta abordagem, a zona envolvente do agitador é substituída por uma “caixa negra”, o que significava que a zona mais próxima do agitador não é explicitamente resolvida, sendo as condições de fronteira definidas apenas por dados puramente empíricos. Estes dados eram normalmente relativos às componentes médias das velocidades e das grandezas de turbulência. O problema desta abordagem é que as condições de fronteira são extremamente importantes pois têm uma grande influência no resto da câmara. Significando que a abordagem referida não constitui uma boa ferramenta de projeto, dado que é preciso testar experimentalmente para poder resolver numericamente.

Com vista a contornar a necessidade de impor valores experimentais e resolver a zona de agitação, surgiu a abordagem *Inner-Outer* (IO). Nesta, o domínio de cálculo é dividido num volume correspondente à zona do agitador e outra ao resto do domínio da câmara, sendo estes dois parcialmente sobrepostos. Os resultados publicados com este modelo, em comparação com os

²URANS é a designação para as equações RANS em regime não estacionário.

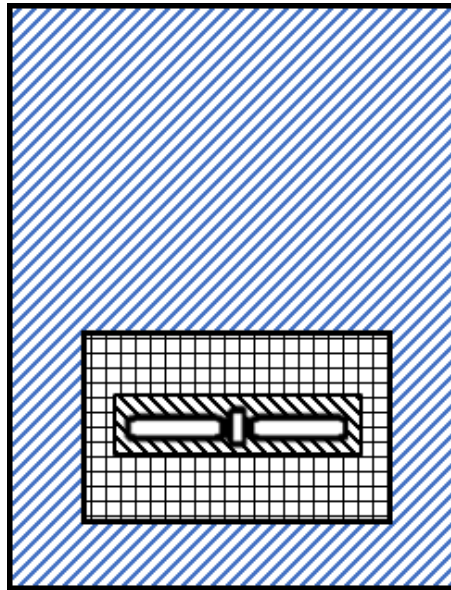


Figura 2.2: Considere-se três domínios distintos, que rodeiam um agitador. A zona com linhas inclinadas para a direita representa-se o domínio “Di”, a quadrados temos o domínio “Dii” e por fim a zona com linhas inclinadas para a esquerda o domínio “Diii”. A abordagem *black box* resolve apenas o domínio Di+Dii. A abordagem IO calcula para o domínio Di+Dii (Outer) e para o domínio Dii+Diii (Inner).

de *black box*, mostram a possibilidade de estudar a variação do tipo de agitadores e velocidades de funcionamento, sendo possível tirar dados de potência ao veio, caudal de ejeção, etc. [29]. De forma a ser melhor visualizada a diferença entre as abordagens foi feito o esquema apresentado na Figura 2.2. Na abordagem *black box* o domínio do agitador (Diii) não é resolvido, sendo o domínio de cálculo igual à junção do Di+Dii e as fronteiras entre Dii e Diii são definidas segundo dados empíricos. Na abordagem IO, é resolvido o Di+Dii (*outer*) e o Dii+Diii (*inner*), estes são resolvidos separadamente em regime estacionário e trocadas informações de velocidade e parâmetros de turbulência para que, de forma iterativa, os domínios que estão sobrepostos se igualem.

Naude, I. *et al.* [30] utilizaram o modelo *multiple reference frame* (MRF). O modelo MRF é parecido ao IO pois apresenta um domínio estacionário e um de rotação, contudo, não existe sobreposição. Assim o modelo MRF tem um domínio estacionário (Di) e outro que se denomina por *frozen rotor* (Dii+Diii), que é o domínio de rotação. De notar que o domínio de rotação escolhido foi Dii+Diii pois a distância da zona de fronteira entre os domínios tem influência nos resultados. Os mesmos autores compararam com resultados experimentais, obtidos por LDA, a uma geometria tridimensional completa, conseguindo obter resultados muito coerentes para um bom refinamento da malha. Ainda neste estudo foram utilizadas funções de parede de forma a reduzir a necessidade de tempo de CPU.

Os modelos anteriores descritos não contam com a variação temporal das disposição espacial das pás, neste sentido, foi desenvolvida outra abordagem denominada por *sliding grid* (SG) ou *sliding mesh* (SM). O SM tem o mesmo seguimento do modelo MRF, pois tem os domínios de rotação e estacionários separados por uma interface. Contudo, neste caso, a modelação é inteiramente em regime não estacionário, onde o domínio de rotação vai “deslizando” ao longo do tempo, variando a posição relativa das pás no espaço da câmara. O modelo em questão é estritamente para cálculos em regimes não estacionários, porém, na maioria das vezes, tem de se acoplar malhas dinâmicas que têm de contar com a variação das zonas de rotação da malha ao longo do tempo, para tal tornam-se em cálculos muito dispendiosos a nível de tempo e memória.

Bakker, A. *et al.* [31] mostraram resultados similares a experimentais com a utilização desta técnica em simulações transientes. Ainda afirmou que com os métodos recentes de modelação das zonas rotativas deixa de existir a necessidade de resultados experimentais para a uma caracterização aceitável do escoamento em regimes laminares. Para regimes turbulentos Kysela, B. *et al.* [32] utilizaram o SM com o modelo LES, mostrando flutuações das velocidades parecidas às experimentais.

Porém, em regimes turbulentos, ainda hoje se continua a tentar melhorar a precisão destes resultados. Contudo a precisão já não tem tanto a ver com a modelação das zonas rotativas mas sim com o modelo de turbulência utilizado.

2.3 Modelação numérica de escoamentos multifásicos

Quando se trata de escoamentos multifásicos, existem dois tipos de formulações consoante o tratamento das partículas e o seu referencial de observação. Por um lado existe a abordagem Euler-Euler onde todas as fases são vistas como um escoamento contínuo e as velocidades são calculadas localmente através das equações de governo. Por outro lado existe outra abordagem que é a Euler-Lagrangiana, onde é considerada uma fase como um escoamento contínuo, mas as outras são tratadas como partículas e são conhecidas como *Discrete Particle Model* (DPM) o que tem um impacto maior no custo computacional pois as velocidades das partículas são calculadas a partir da sua origem [33].

Rihani, R. *et al.* [34] utilizaram uma abordagem Euler-Lagrange em que, para os momentos iniciais, se verificaram resultados díspares dos experimentais, mas, quando atingiu um estado estável, apresentaram enquadramento experimental. Isto significa que as transições iniciais que devem ser muito turbulentas não foram bem modeladas, mas, chegado a um estado “estacionário”, sim.

Além da forma como são tratadas as diferentes fases que compõem o escoamento, um dos grandes desafios são as interfaces que existem entre fases dos escoamentos e as descontinuidades que aparecem. Habitualmente existem nos códigos comerciais como o FLUENT (para uma abordagem Euler-Euler) três modelos para contemplar os escoamentos multifásicos, sendo estes o modelo *Volume of Fluid* (VOF), o modelo *MIXTURE* e ainda o modelo *Eulerian*. Cada um deles deve ser aplicado consoante o caso em estudo, devendo ser seguidas as recomendações de cada um para serem obtidos os resultados mais coerentes e precisos quanto possível. Mais detalhadamente, o modelo VOF deve ser aplicado quando a interface entre as fases de fluidos imiscíveis é bem definida e a tensão de superfície entre estes é saliente.

Wang *et al.* [35] estudaram o comportamento de um escoamento composto por um líquido e bolhas de gás num reservatório tridimensional constituído por turbinas com seis pás e quatro defletores nas paredes do reservatório. As suas simulações transientes, nas quais se utilizou o modelo multifásico Euleriano, permitiram concluir que o aumento da velocidade de rotação tem um maior efeito nos padrões das estruturas do escoamento que o caudal de entrada do gás.

Madhania, *et al.* [36] apresentaram a modelação computacional de uma geometria de um tanque mecanicamente agitado, completamente resolvido em três dimensões. Foi simulado o escoamento transiente da mistura de dois líquidos miscíveis, utilizando o modelo multifásico *MIXTURE*, acoplado ao modelo de turbulência $k - \epsilon$.

Jahoda, M. *et al.* [37] simularam um tanque com duas fases, um líquido e um gás e compararam os modelos MRF e SM, tendo obtido resultados coerentes com os experimentais. Ainda que o MRF tenha obtido resultados mais díspares para condições volumétricas altas, apresenta a vantagem

de ser mais rápido a calcular.

2.4 Síntese do estado da arte

As câmaras de mistura têm sido alvo de investigações desde que começaram a ser utilizadas na indústria, há cerca de duas décadas, principalmente aquelas que são mecanicamente agitadas. Os primeiros estudos utilizam métodos experimentais com a conhecida técnica de LDA pela sua característica não intrusiva e conseguir medir as velocidades do escoamento. Técnicas mais recentes e com algumas melhorias têm vindo a ser desenvolvidas, contudo, devido à usual necessidade de utilização de meios óticos não são muito apropriadas para a indústria.

Perante este facto, os métodos numéricos começam a ser desenvolvidos e, devido à necessidade de precaver as instabilidades geradas dentro destas câmaras, os modelos transitórios são mais apropriados. Estes foram classificados como URANS, SRS (*Scale Resolving Simulation*), LES, DNS (pela sua ordem de custo computacional).

A resolução completa das escalas temporais e espaciais torna-se impossível para geometrias complexas devido ao seu custo computacional e modelos URANS, muitas vezes, não são capazes de resolver as escalas importantes para os processos de mistura turbulenta. Neste sentido, os modelos SRS parecem os mais apropriados para estes casos. Além dos modelos de turbulência, quando se pretende modelar geometrias com zonas rotativas deve ser escolhido o modelo apropriado para tal.

As modelações numéricas de câmaras de mistura têm sido baseadas em estudos monofásicos e estudadas, por exemplo, as flutuações de velocidade, quantidade de movimento, etc. Ainda que quanto à modelação de mais do que uma fase, existam diversas abordagens e a sua escolha deva ser feita consoante as características fundamentais da interação entre as fases; a maioria dos estudos são de mistura de fases líquidas ou de líquidas com gases, sendo que resultados de misturas de gases com gases em câmaras mecanicamente agitadas ainda são poucos.

Tendo estas ideias em consideração, a aplicação de um modelo URANS e um modelo SRS parece apropriada para testar as capacidades de resolução dos fenómenos turbulentos e resolver o escoamento multifásico com uso do modelo MIXTURE [38]. Para a resolução da zona rotativa a aplicação de um modelo completamente transitório (abordagem *Sliding Mesh*) levaria a um grande custo computacional, por esta razão pensa-se que o modelo MRF predirá resultados coerentes, permitindo ainda estudar a mistura de gases.

Capítulo 3

Fundamentos Teóricos de Mistura Turbulenta

Os escoamentos turbulentos são caracterizados pela sua diversidade de escalas de comprimento e temporais. Estas são cada vez mais diversas quanto maior o número de Reynolds. É a junção destas diversas escalas que proporciona a capacidade de mistura de forma eficaz de diferentes fases de escoamentos.

Neste capítulo serão detalhadas as características do escoamento turbulento, mais propriamente feita uma análise dimensional que será relacionada com os processos de mistura. Além disso, será detalhada a formulação físico-matemática que descreve os processos de transporte que envolvem a mistura de algum escalar no escoamento turbulento, i.e., será descrito o modelo matemático dos fenômenos da mistura turbulenta. Só sabendo os fenômenos de mistura turbulenta e a sua descrição matemática é que é possível modelar computacionalmente os mesmos.

3.1 Análise dimensional da mistura turbulenta

Segundo Kolgomorov [39], o escoamento turbulento pode ser representado por um espectro de energia, em que para vários degraus de energia temos diferentes escalas características dos vórtices. Neste espectro existem as grandes escalas turbulentas caracterizadas pelo seu comportamento anisotrópico. Estas são geradas pela geometria, ou seja, por exemplo numa câmara mecanicamente agitada estas serão geradas pela influência dos agitadores e por outras características geométricas que a câmara possa ter.

As grandes escalas são normalmente da ordem de grandeza do comprimento característico da geometria, se for o caso de uma câmara de mistura poderá ser o diâmetro do agitador ou da câmara em si. Estas contêm uma certa energia cinética que é transferida para outras pequenas escalas. Nestas divisões é transferida energia cinética das grandes escalas para as mais pequenas. A esta taxa de transferência de energia cinética chamamos de “taxa de dissipação de energia”, ε . Esta pode ser expressa pela seguinte equação, se considerarmos que l_0 é a escala de comprimento dos grandes vórtices e u_0 a velocidade da escala, temos de:

$$\varepsilon = \frac{u_0^3}{l_0} \quad (3.1)$$

Esta taxa de dissipação descreve muitas vezes a função do espectro de energia. Este espectro pode ser visto na Figura 3.1 e denomina-se por “cascata de energia turbulenta” [40]. Nesta figura temos que $E(k)$ é a energia para um certo número de onda k . Onde a função que nos dá a cascata é dada por:

$$E(k) = C\varepsilon^{2/3}k^{-5/3} \quad (3.2)$$

Onde C é uma constante que depende do escoamento e k é definido por $2\pi\lambda^{-1}$, sendo λ o

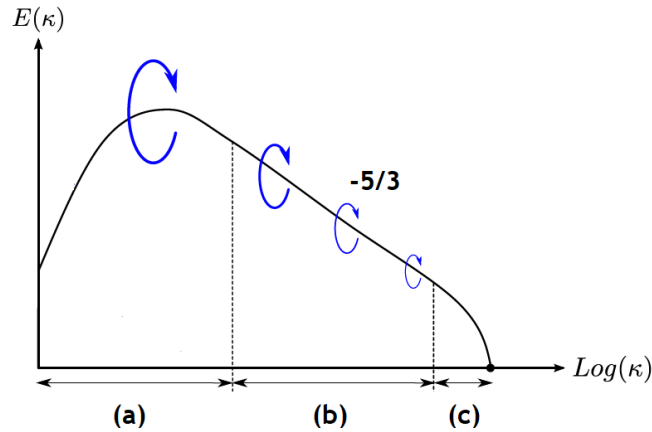


Figura 3.1: Curva de energia em função do número de escala κ . Em (a) temos a zona de produção de energia cinética governada por grandes escalas anisotrópicas. A sub região (b) corresponde à zona inercial que redistribui as grandes escalas em elementos cada vez mais pequenos. Em (c) é a zona de dissipação dos vórtices em energia térmica. Adaptado de [41].

comprimento do vórtice. Na Figura 3.1, podemos ver que existe uma primeira região que se refere ao aumento da energia cinética turbulenta produzida pelas grandes escalas turbulentas provocadas pela agitação do escoamento (ou outra geometria) que provoca gradientes de velocidade. Esta zona apresenta uma turbulência anisotrópica que a partir de mais ou menos um comprimento de escala seis vezes mais pequeno que l_0 começa a transferir energia para escalas mais pequenas por um processo inercial.

O processo de transferência de energia (não viscosa) acontece na sub-região (b) da Figura 3.1 e denomina-se por sub-região inercial. Este é caracterizado por uma taxa de descida de $-5/3$. Ao ser transferida energia de escala para escala é atingido um ponto em que os vórtices não têm energia rotacional suficiente para sustentar o seu movimento e é por esta razão que se dissipam por efeitos viscosos.

Na sub-região dissipativa a energia é dissipada em energia térmica. Esta última escala de vórtices denominam-se por “escala de Kolmogorov” e definem-se por:

$$\lambda_k = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (3.3)$$

Designando λ_k como o comprimento da escala de Kolmogorov e $\nu[m^2.s^{-1}]$ a viscosidade cinemática. Para números de Reynolds suficientemente elevados estas escalas são caracterizadas por serem completamente isotrópicas. São nestas escalas que a difusão molecular ganha grande impacto e onde a *micromixing* atua de forma a misturar os diversos elementos fluidos. A aplicação da *micromixing* nas câmaras de mistura mostra-se mais eficiente ao criar estes pequenos vórtices que aumentam a taxa de homogeneidade nas câmaras [42]. O número de Schmidt, Sc , é um número adimensional que descreve o quão “rápido” o transporte da quantidade de movimento é em relação ao transporte das moléculas do escoamento.

Dado pelo quociente entre a viscosidade cinemática e a difusão molecular, $D_\alpha[m^2.s^{-1}]$, sendo expresso pela Equação 3.4.

$$Sc = \frac{\nu}{D_\alpha} \quad (3.4)$$

Estudos sobre a Uniformização do Escoamento em Câmaras de Mistura usando CFD

Para fases gasosas, este número é perto da unidade e para líquidos anda na grandeza de 10^3 [43].

Os fluidos de baixa viscosidade são aqueles que tendem a produzir escalas cada vez mais pequenas, por exemplo a água, sendo um fluido com baixa viscosidade, apresenta escalas dentro a ordem de 30 a 100 μm . Quando se trata de escoamentos com dispersões, existe um número adimensional que nos consegue informar o equilíbrio cinemático da dispersão no escoamento envolvente. Este é o número de Stokes, St , que é expresso pela Equação 3.5.

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f} \quad (3.5)$$

Sendo, τ_p o tempo de relaxação das partículas da dispersão e τ_f a escala temporal do escoamento integral, ou seja, o número St relaciona o tempo de resposta das partículas dispersas com o tempo do escoamento global [44]. Estes tempos são dados pelas Equações 3.6 e 3.7.

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_f} \quad (3.6)$$

$$\tau_f = \frac{l_f}{u_f} \quad (3.7)$$

Onde se designa l_f é o comprimento característico do escoamento, por norma, é o diâmetro num escoamento dentro de um tubo. Para números de Stokes muito menores que a unidade, as partículas podem ser consideradas como perto da velocidade do escoamento portador, contudo para números maiores do que a unidade as partículas da dispersão não vão estar em equilíbrio com o envolvente, tornando relevantes os efeitos da inércia.

3.1.1 Instabilidades do Escoamento

A presença da variedade de estruturas de diferentes escalas cria grandes instabilidades no escoamento dentro de câmaras de mistura. Dentro de câmaras mecanicamente agitadas existem três tipos de sistemas de escoamento [45].

O primeiro refere-se às estruturas que aparecem atrás das pás dos agitadores onde são gerados diversos vórtices, que podem ser chamados de *impeller flows*. Gerado também pelo agitador, existem os *wall flows* que englobam os possíveis jatos provocados por este, as camadas limites, etc. Por fim, os *bulk tank flow* que são as grandes áreas de circulação do escoamento dentro da câmara.

O aglomerar de todos estes tipos de comportamento nas câmaras torna o escoamento deveras instável, por esta razão os estudos transitórios são importantes e necessários.

3.2 Formulação Físico-Matemática da Mistura Turbulenta

Como vimos o comportamento do escoamento e as escalas influenciam os mecanismos de mistura. Sendo que nas pequenas escalas deve ser tido em conta o processo de difusão. Neste sentido serão aqui apresentadas as formulações físico-matemáticas necessárias para a modelação da interação de múltiplas fases ou múltiplas espécies no escoamento.

O número de Stokes consegue-nos informar se o tipo de mistura turbulenta de uma espécie influencia, devido à sua inércia, a quantidade de movimento do escoamento adjacente. Assim, se considerarmos a mistura de gases temos números de Stokes baixos, que é o que esta dissertação trata. Tratando-se de uma mistura de duas espécies de gases, podemos considerar que os fenómenos de mistura estão maioritariamente dentro da *mesomixing*

Como não existem reações químicas o transporte das diferentes espécies no nosso escoamento é denominado por transporte passivo onde existe uma partilha de quantidade de movimento aplicada a todas as fases do escoamento. Se traduzirmos as espécies que serão misturas no escoamento principal como um escalar passivo ϕ , podemos escrever a lei de Fick para o transporte difusivo entre dois gases;

$$J_i = -D_\alpha \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \quad (3.8)$$

Onde i será a direção genérica e α é referente à espécie transportada. Podemos ainda expressar o transporte por convecção e difusão de um dado escalar no campo $\phi = \phi(x, t)$ pela Equação 3.9 [43].

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial u_j \phi}{\partial x_j} = D_\alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j \partial x_j} \quad (3.9)$$

Este escalar passivo ϕ é genérico, pode ser a temperatura, ou a concentração de um contaminante do escoamento com uma *difusividade* D_α apropriada.

Num escoamento turbulento podemos dizer que os escalares apresentam uma componente média ao longo do tempo e uma flutuação, tanto para as velocidades como para as concentrações escalares, ou seja:

$$u = \bar{u} + u' \quad (3.10)$$

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (3.11)$$

Designando \bar{u} como o valor médio e u' a flutuação da velocidade. A isto chama-se uma *decomposição* similar à decomposição de Reynolds para os modelos de turbulência do tensor. Aplicando esta decomposição à Equação 3.9 obtemos o seguinte:

$$\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_j \bar{\phi}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_\alpha \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x_j} - \overline{u'_j \phi'} \right) \quad (3.12)$$

Da equação 3.12 vemos que aparece uma correlação dada por $u'_j \phi'$, que representa o transporte turbulento do escalar ϕ na direção x_j , i.e., é este o termo que descreve o efeito da turbulência na evolução do valor médio do escalar em questão, no nosso caso a concentração, e é usualmente denominado por fluxo de Reynolds [43].

Consideramos agora apenas uma direção j , ou seja, seja $u = u_j$. A difusão molecular acontece de forma rápida nas pequenas escalas e é esta que contribui para a diminuição das inhomogeneidades criadas pelos efeitos das tensões de corte nas grandes escalas de turbulência. O termo de transporte das grandes escalas, da Equação 3.12, é da ordem de $\phi u / l'$, onde l' é o comprimento característico da escala dos gradientes do escalar médio. Já a difusão molecular é da ordem de $D_\alpha \phi / l'^2$. Pode ser calculada a escala característica pela definição do número Sc , i.e., a razão

Estudos sobre a Uniformização do Escoamento em Câmaras de Mistura usando CFD

entre as macro escalas e as micro escalas, respetivamente, viscosidade e difusão molecular, tendo assim a razão dada na Equação 3.13.

$$\underbrace{\frac{u\phi}{l'}}_{macroescala} / \underbrace{\frac{D_\alpha\phi}{l'^2}}_{microescala} = \frac{ul'}{D_\alpha} \quad (3.13)$$

Com o aumento rápido da dissipação turbulenta nas grandes escalas, e considerando, uma mistura de gases (Sc perto de 1), esta razão torna-se relativamente grande o que significa que os efeitos de difusão molecular se tornam desprezáveis nas grandes escalas de turbulência, ou seja, não irão influenciar as concentrações médias do escalar [46].

Com base na flutuação da concentração deste escalar passivo que é feita com base na flutuação do comprimento macroscópico característico, neste caso l' , podemos reformular a Equação 3.12 e descrever o fenómeno em função da média macroscópica da concentração do escalar:

$$\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\overline{u\phi_\alpha} - \overline{u'l'} \frac{\partial\phi_\alpha}{\partial x} \right) = D_\alpha \frac{\partial^2\phi_\alpha}{\partial x^2} \quad (3.14)$$

Designando $\overline{u'l'}$ por κ , que é um coeficiente de difusão turbulenta, podemos simular ao coeficiente de difusão molecular. Assim podemos considerar a Equação 3.14 e escrever na seguinte forma;

$$\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (u\phi_\alpha) = D_\alpha \frac{\partial^2\phi_\alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial\phi_\alpha}{\partial x} \right) \quad (3.15)$$

Computacionalmente é difícil resolver todos estes fenómenos de mistura turbulenta pois é necessário uma resolução de malha e de passo de tempo suficientemente fina de forma a resolver a concentração média e as suas flutuações. Sendo que com modelos RANS a estimativa é realmente pobre devido à incapacidade de resolução das pequenas flutuações que são geradas pelas micro escalas de mistura, perto das escalas de Kolmogorov [47].

Considerando novamente o escalar passivo ϕ , que irá sofrer alongamentos e deformações no transporte, devido ao escoamento turbulento, este sofrerá, concomitantemente, processos de difusão molecular. Ainda que como, já referido, o transporte turbulento, designadamente *macro-mixing* predomina sobre a difusão molecular, designadamente a *micromixing*, sem a difusão não pode haver uma ligação intrínseca entre duas espécies num escoamento.

Na Figura 3.2 podemos visualizar o transporte de um escalar em dois regimes de escoamento. Nestas imagens nota-se que para haver uma homogeneidade do escalar presente no campo é necessário a existência de pequenas estruturas. A escala mínima a que se referem estes processos de homogeneização ao nível molecular é dada pela escala de Batchelor λ_B , que é definida pela Equação 3.16.

$$\lambda_B = Sc^{-1/2} \lambda_K \quad (3.16)$$

Como já referido para gases, o número Sc é perto da unidade, por esta razão, num processo de mistura entre duas espécies de gases, a escala mínima de turbulência que deve ser modelada é mais ou menos igual à escala de Kolmogorov.

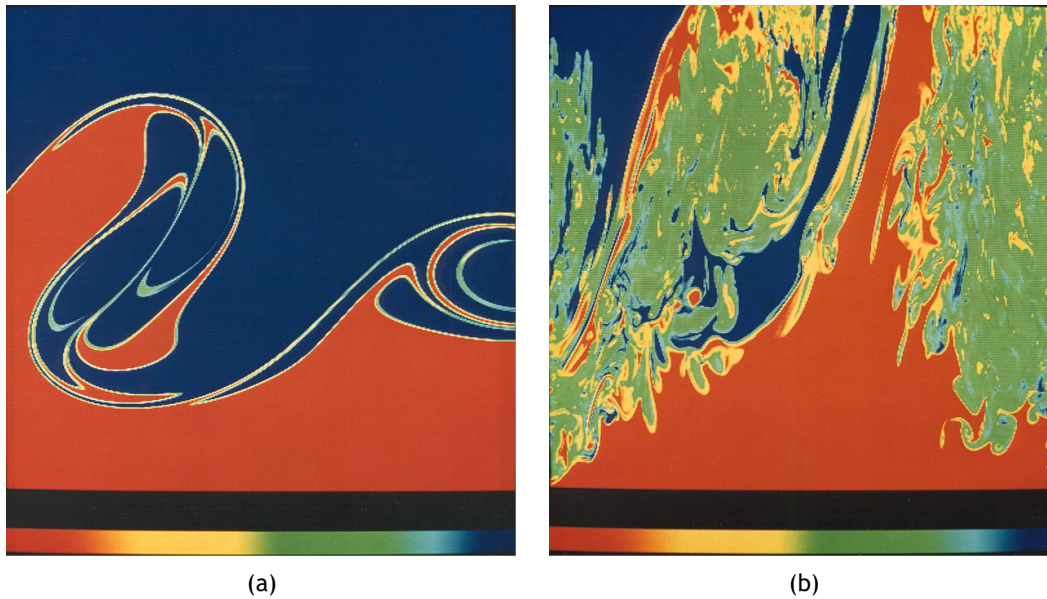


Figura 3.2: Visualização do efeito do número de Reynolds e do transporte de um escalar passivo em dois tipos de escoamento. Em (a), temos um escoamento líquido para um número de Reynolds igual a $1.75 \cdot 10^3$. Em (b) o mesmo tipo de escoamento mas para um número de Reynolds igual a $2.3 \cdot 10^4$ [48].

Agora considerando que o número de onda κ da escala de Kolmogorov é cerca de $Re_0^{3/4} l_0^{-1}$. Apenas os métodos DNS conseguem resolver desde as grandes escalas até às de Kolmogorov, sendo que estes métodos são insuportáveis para a indústria devido ao poder computacional necessário. Os modelos LES conseguem resolver a maioria das escalas importantes para a engenharia, tal que com malhas de cálculo finas conseguem resolver até ao fim da sub-região inercial da cascata de energia (Figura 3.1), sendo apenas a sub-região modelada. Contudo, os modelos RANS apenas conseguem resolver cerca de metade da sub-região das grandes escalas (sub-região (a) da Figura 3.1) modelando quase todas as estruturas turbulentas. Entre os modelos LES e RANS encaixa-se o SAS que consegue resolver escalas até dentro da sub-região inercial.

3.3 Mistura turbulenta em jatos cruzados

A geometria mais simples para misturar dois gases é utilizando dois jatos que, ao se cruzarem e devido à turbulência, se misturam. A mistura entre dois jatos é normalmente feita por dois modos, ou através de dois jatos co-axiais ou transversos. O tipo de escoamento com jatos axiais foi visto no capítulo introdutório (Figura 1.4), aqui apenas será discutido o caso transversal (ou normal). Apenas será discutido este pois a mistura por jatos transversos (ou normais) é aquilo que acontece nas junções em T, que será a nossa base de validação do modelo multifásico.

Neste tipo de escoamentos existe escoamento principal ao qual intersecta-se um outro fluido e, devido à turbulência gerada, espera-se que saia uma mistura mais ou menos homogênea. Este tipo de mistura é conhecida por mistura turbulenta de fluxo cruzado. Na Figura 3.3 podemos ver o comportamento de um fumo a ser injetado normalmente à direção de outro escoamento. Nesta vemos que o escoamento principal deflete o injetado transversalmente. Sendo que diversas estruturas são visualizadas.

Por instantes reparamos que a montante do jato de fumo são formados pequenos vórtices no sentido de contra rotação dos ponteiros do relógio e a jusante vê-se quase um comportamento caótico que provoca a mistura do fumo com o escoamento principal. Ao mesmo tempo este jato

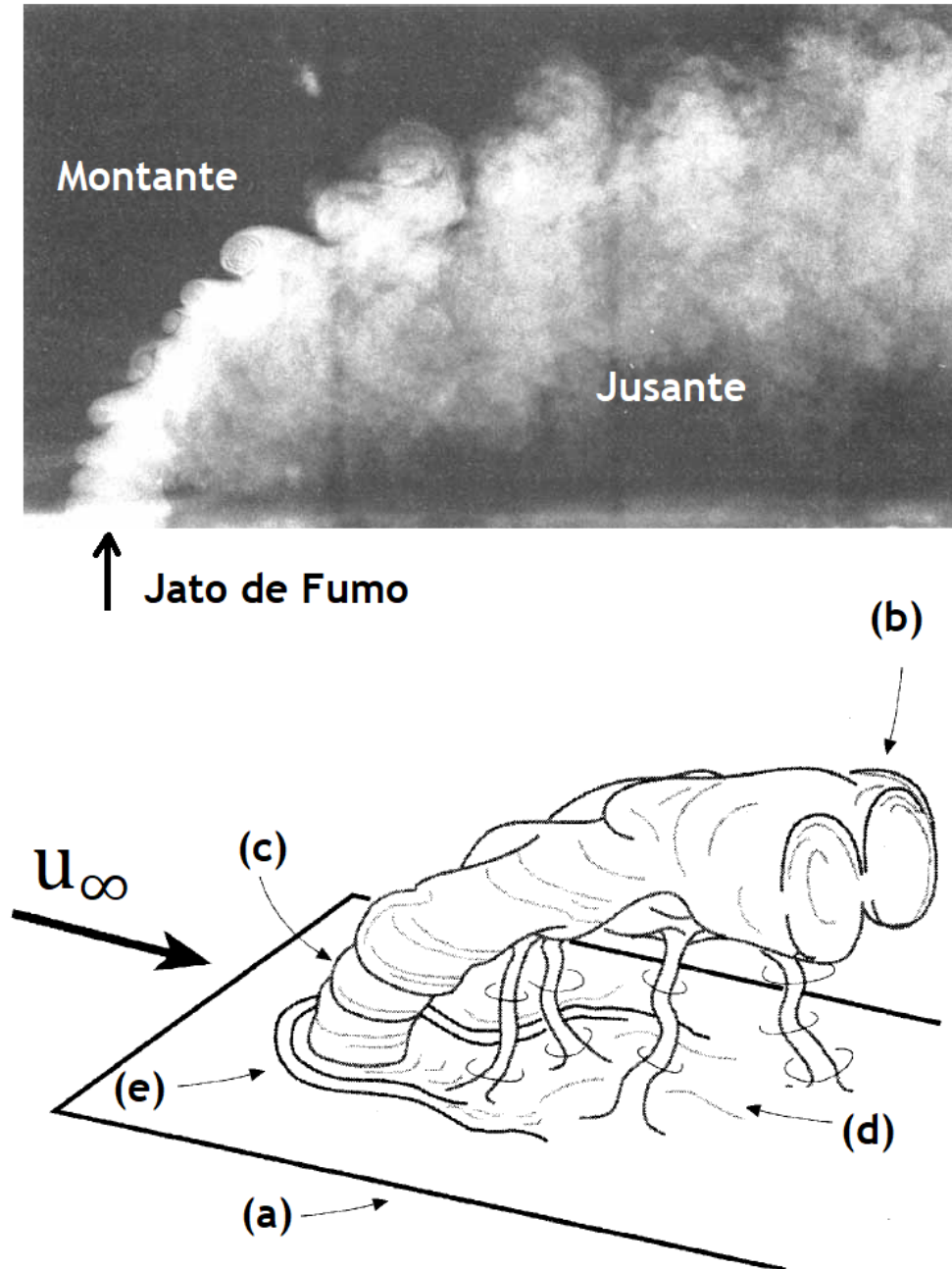


Figura 3.3: Em cima apresenta-se uma imagem experimental das estruturas formadas pela injeção vertical de um fumo num escoamento horizontal. Em baixo, é esquematizado o caso de cima onde são descritas as três zonas importantes. (a) Parede (b) Par de vórtices em contra-rotação (c) Vórtices a montante (d) Vórtices de esteira (e) Vórtices de ferradura. Imagem adaptadas de [49].

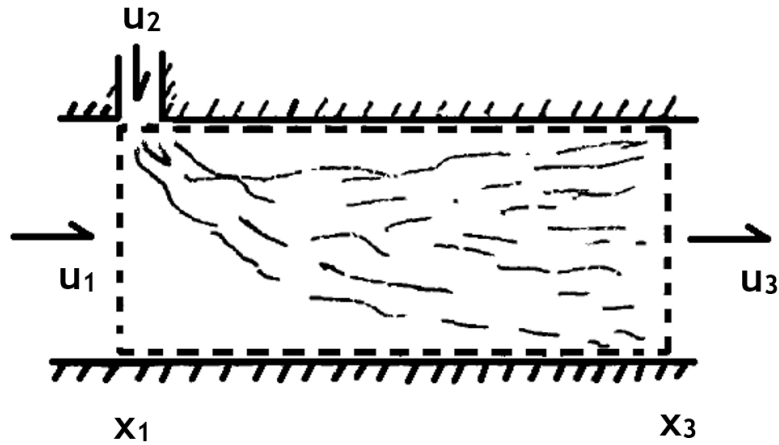


Figura 3.4: Esquema representativo de um corte bidimensional de uma junção em T. A traço interrompido representa-se o volume de controlo a que são aplicadas as equações. Adaptado de [50].

de fumo é “enrolado” para dentro devido ao escoamento principal. Este enrolamento cria dois vórtices bem distintos que estão em contra-rotação (apresentados na Figura 3.3 inferior). Estes vórtices são em grande parte responsáveis pela difusão e mistura das duas fases [49].

Os fenómenos que acontecem nestas misturas de jatos cruzados são os que atuam em junções em T. Pressupõe-se agora o esquema da Figura 3.4. Aqui é considerado um corte bidimensional numa junção T. Esta junção é composta por um tubo principal, com uma secção de entrada s_1 , no qual existe um fluido f_1 , com uma certa velocidade u_1 . A secção de mistura tem um comprimento longitudinal de $x_3 - x_1$.

O tubo principal é intersectado perpendicularmente por outro de secção transversal com área igual a s_2 . Neste tubo secundário é injetado outro fluido f_2 , com uma certa velocidade de entrada u_2 . Considerando que a razão de mistura é r_m , sendo dada por:

$$r_m = \frac{\dot{m}_2}{\dot{m}_1} \quad (3.17)$$

Onde $\dot{m}[\text{kg.s}^{-1}]$ é o caudal mássico. Podemos então considerar que a razão das densidades dos dois fluidos é r_d , sendo dada por:

$$r_d = \frac{\rho_2}{\rho_1} \quad (3.18)$$

Se aproximarmos que não existe transferência de quantidade de movimento no escoamento secundário injetado, i.e., que a velocidade de entrada na secção número dois não terá grande influência no escoamento principal então a queda de pressão é dada, segundo [50], pela seguinte equação:

$$\bar{p}_1 - \bar{p}_3 = p_{t3} + \rho_1 u_1^2 \left[(1 + r_m) \left(1 + r_m \frac{1}{r_d} \right) - 1 \right] \quad (3.19)$$

Que pode ser expressa da seguinte forma:

$$\overline{\Delta p} = p_{t3} + \rho_1 u_1^2 \left[1 + \frac{1}{r_d} + \frac{r_m}{r_d} \right] \quad (3.20)$$

Onde notamos que para uma razão de mistura constante a queda de pressão apenas variará com a velocidade do escoamento principal. Contudo esta equação falha na tradução da complexidade do escoamento turbulento e não tem em conta alguns fatores importantes. Para escoamentos com velocidades elevadas, onde sejam gerados números de Reynolds altos, a equação não tem em conta a tridimensionalidade do escoamento turbulento nem a quantidade de energia cinética turbulenta.

Capítulo 4

Modelação Numérica

Neste capítulo serão descritos os modelos numéricos utilizados para a resolução do escoamento com utilização do código comercial FLUENT. Primeiramente serão enunciadas as equações de governo aplicadas ao sistema, seguidas de uma abordagem à modelação do escoamento turbulento. Por fim, far-se-ão as devidas considerações dos cuidados a ter para obter resultados válidos relativamente às condições da malha junto à parede e às condições de resolução de zonas de rotação.

Serão ainda descritas as equações físico-matemáticas das equações que governam um escoamento de mistura. Além disso serão apresentadas as equações matemáticas de resolução da turbulência para dois modelos, o $k - \omega$ SST e o *SAS*. Estes serão investigados já que, de acordo com a literatura, o primeiro é um modelo capaz de resolver uma grande parte do escoamento turbulento e, por outro lado, o segundo constitui uma melhoria do anterior.

4.1 Equações de governo do modelo multifásico

A dinâmica dos fluidos é baseada nas equações matemáticas representativas das propriedades físicas da dinâmica dos fluidos. Estas são dadas pela lei fundamental da conservação de massa, pela lei da conservação da quantidade de movimento e pela lei da conservação da energia [1]. O presente trabalho pretende investigar a modelação da mistura de dois gases dentro de uma câmara mecanicamente agitada, para tal será utilizado o modelo multifásico do FLUENT, numa abordagem Euler-Euler. Isto significa que todas as fases são tratadas como um fluido contínuo. Contudo, para cada fase, são aplicadas as equações de governo (equações de conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia) sendo depois acopladas as fases com coeficientes interfásicos.

4.1.1 Conservação de massa

A conservação de massa, também denominada por lei da continuidade, tem de ser garantida pelas leis da física. Se na Equação 3.9, considerarmos $\phi = 1$ temos a conservação de massa. Contudo como utilizaremos o modelo MIXTURE, teremos de considerar as diversas fases existentes no escoamento. Fazendo esta consideração, e transpondo a equação para um sistema cartesiano tridimensional, temos que a equação da continuidade pode ser expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_m) + \nabla \cdot (\rho_m \vec{u}_m) = 0 \quad (4.1)$$

Onde, u_m é a velocidade média. A velocidade média tem de ser calculada com base nas diferentes massas específicas de cada fase presente, ou seja é dada por:

$$\vec{u}_m = \frac{1}{\rho_m} \left(\sum_{f=1}^n \alpha_f \rho_f \vec{u}_f \right) \quad (4.2)$$

Onde, ρ_m é a massa específica da mistura e α_f a fração volumétrica da fase f , tal que:

$$\rho_m = \sum_{f=1}^n \alpha_f \rho_f \quad (4.3)$$

4.1.2 Conservação da quantidade de movimento

A taxa da variação da quantidade de movimento tem de ser igual à soma das forças que atuam num volume de controlo. No mesmo seguimento que foi feito para a equação da continuidade (Equação 4.1) se da Equação 3.9 dissermos que $\phi = u$, podemos expressar o seguinte:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_m u_m) + \nabla \cdot (\rho_m \vec{u}_m \vec{u}_m) = & -\nabla p + \nabla \cdot [\mu_m (\nabla \vec{u}_m + \nabla \vec{u}_m^T)] \\ & + \rho_m \vec{g} + \vec{F} + \nabla \cdot \left(\sum_{f=1}^n \alpha_f \rho_f \vec{u}_{dr,f} \vec{v}_{dr,f} \right) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Onde n é o número de fases, o termo \vec{F} é relativo às forças mássicas e μ_m a viscosidade da mistura dada por:

$$\mu_m = \sum_{f=1}^n \alpha_f \mu_f \quad (4.5)$$

De notar que aparece um novo elemento, $\vec{v}_{dr,f}$. Este é a velocidade de deslizamento para a fase secundária f , pois as fases adjacentes (secundárias) à primeira podem ter velocidades diferentes de deslocamento. Esta velocidade de “*drift*” é definida por:

$$\vec{u}_{dr,f} = \vec{u}_f - \vec{u}_m \quad (4.6)$$

4.1.3 Conservação da energia

A energia do sistema também tem de ser conservada. Se designarmos k_{eff} como a condutividade efetiva, para um escoamento incompressível e sem fontes externas de calor, a energia da fase f é $E_f = h_f$. Onde h_f é a entalpia sensível da fase correspondente. Assim a equação para a conservação da energia é dada pela equação 4.7.

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{f=1}^n (\alpha_f \rho_f E_f) + \nabla \cdot \sum_{f=1}^n (\alpha_f \vec{v}_f (\rho_f E_f + p)) = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) \quad (4.7)$$

De notar que o primeiro termo da parcela do lado direito representa a energia transferida por condutividade térmica.

4.2 Modelação do escoamento turbulento

Já foi mencionado que a forma de resolver completamente os fenómenos turbulentos computacionalmente é por DNS, contudo, não se apresenta viável fazê-lo em aplicações industriais devido ao seu custo computacional. Para tal, na maioria dos casos, as pequenas escalas são modeladas e não calculadas. Como é o caso dos modelos RANS, que, em vez de resolver os valores instantâneos do escoamento, resolvem apenas a média temporal.

Existem diversos modelos de turbulência, contudo este trabalho foca-se na aplicação dos modelos SST e SAS.

4.2.1 Modelo $k - \omega$ SST

Quando se procede à decomposição de Reynolds, tal como foi referido na Equação 3.11, para a velocidade e pressão nas equações de governo (Equação 4.1 e 4.4), surge um elemento conhecido por *tensor de Reynolds* que é $-\overline{\rho u_i' u_j'}$. Este tensor representa as tensões que ocorrem devido às flutuações da turbulência, o que adiciona assim a necessidade de resolver seis novas variáveis, o que não é possível diretamente. Com a hipótese de Boussinesq é possível descrever estas tensões desde que seja possível modelar duas variáveis. Estas variáveis são a *viscosidade turbulenta*, μ_t , e a *viscosidade turbulenta cinemática*, ν_t . É à modelação destas variáveis que os modelos de turbulência são aplicados.

O modelo $k - \omega$ SST (Shear-Strees Transport) foi desenvolvido por Menter [25] para melhorar os resultados perto das paredes do modelo de base $k - \varepsilon$ com algumas melhorias. Este modelo resolve a energia cinética turbulenta, k , e a taxa de dissipação específica, ω . As características deste modelo RANS que sobressaem são a introdução do termo de *cross diffusion* e da função *blending* que fazem com que este modelo seja muito robusto na modelação dos escoamentos na parede e na transição para onde o escoamento está completamente desenvolvido.

As equação de transporte para k é dada pela Equação 4.8 e para ω é a Equação 4.9.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k - Y_k + S_k \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \omega u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + G_\omega - Y_\omega + D_\omega + S_\omega \quad (4.9)$$

Destas equações temos que G_k é a geração de energia cinética turbulenta e G_ω a geração da taxa de dissipação específica ω . As constantes do modelo utilizadas foram as definidas por defeito pelo FLUENT.

Nos nossos casos irá ser utilizado o modelo SST, mas em regime transitório, denominado assim por URANS. Enquanto que os modelos RANS apenas providenciam a média temporal a solução os URANS resolvem as flutuações das propriedades ao longo dos passos de tempo, produzindo uma solução variante no tempo.

4.2.2 Modelo SAS

Tal como o modelo SST o SAS também foi desenvolvido por Menter em 2005. Como já referido o SAS é uma melhoria do SST, pois adiciona um termo importante à equação da taxa de dissipação específica (Equação 4.9). O termo a que nos referimos é a escala de comprimento de

von-Kármán, L_{vK} , que é proporcional ao quociente entre a primeira e a segunda derivada da velocidade do escoamento. A resolução desta escala permite ao modelo resolver as estruturas, como no modelo LES e o resto do campo com o modelo URANS. Isto traduz-se numa maior resolução das escalas de turbulência mais pequenas, mas sem o elevado custo computacional do modelo LES.

Em síntese este modelo apresenta as seguintes vantagens [51]:

- O modelo SAS é baseado numa segunda escala mecânica resolvendo os gradientes mais elevados de velocidade. Isto permite que as grandes estruturas turbulentas se dividam no espetro turbulento.
- Em regiões estáveis do escoamento é aplicado o modelo RANS o que leva a uma diminuição do custo computacional em comparação ao LES.
- O amortecimento e dissipação das escalas de alta frequência do espetro turbulento é feito pela resolução da malha, ou seja, quanto mais fina a malha mais estruturas serão resolvidas.

A equação de transporte do k é a mesma que a do modelo SST, contudo aqui substituir-se o coeficiente de difusão Γ_k por:

$$\Gamma_k = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \quad (4.10)$$

Substituindo a Equação 4.10 na Equação 4.8, temos que:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \rho c_\mu k \omega \quad (4.11)$$

Quanto à equação de transporte do ω é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \omega) = & \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha \frac{\omega}{k} G_k - \rho \beta \omega^2 \\ & + (1 - F_1) \frac{2\rho}{\sigma_{\omega,2}} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} + Q_{SAS} \end{aligned} \quad (4.12)$$

Da Equação 4.12, vemos que existem diferenças relativamente à Equação 4.9. Estas diferem pela introdução do termo fonte Q_{SAS} , dado pela equação 4.13, na equação de transporte da taxa de dissipação específica ω .

$$Q_{SAS} = \max \left[\rho \eta_2 \kappa S^2 \left(\frac{L}{L_{vK}} \right)^2 - C \cdot \frac{2\rho k}{\sigma_\Phi} \max \left(\frac{1}{\omega^2} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, \frac{1}{k^2} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right), 0 \right] \quad (4.13)$$

Vemos na Equação 4.13 a implementação do comprimento de escala L e a sua ligação com o comprimento de escala L_{vK} [38]. Em zonas do escoamento estáveis o termo Q_{SAS} tem pouco peso, resolvendo o escoamento como o modelo $k - \omega$ SST, contudo, para zonas instáveis o L_{vK} diminui e assim o termo Q_{SAS} torna-se significativo.

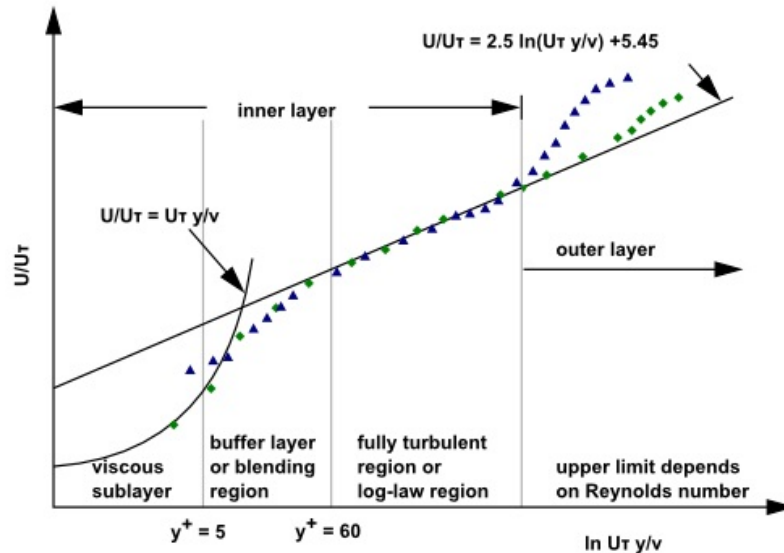


Figura 4.1: Perfil de velocidades na camada limite turbulenta. Note-se que para $y^+ < 5$ temos a “sub-camada viscosa” com um comportamento linear. Para $5 < y^+ < 60$ temos a região intermédia de mistura e para valores superiores a $y^+ = 60$ temos um comportamento de logaritmo caracterizando o escoamento turbulento completamente desenvolvido. [38]

4.2.3 Tratamento junto das paredes

Um tópico importante na modelação numérica são os efeitos que acontecem perto das paredes sólidas. Quando as paredes têm a condição de não deslizamento, o escoamento junto a estas reduz a sua velocidade tangencial e é um dos grandes fatores da geração de fenómenos de turbulência, por esta razão é importante a boa modelação destas zonas.

De testes experimentais foi evidenciado que esta região de retardamento do escoamento, denominada de camada limite, pode ser dividida em três zonas distintas. A camada mais próxima da parede é denominada por “sub-camada viscosa” onde o escoamento é quase laminar e é a viscosidade molecular que apresenta o papel principal na transferência de momento, calor ou massa. A zona mais exterior, onde o efeito da parede no escoamento começa a ser desprezável, denomina-se de “sub-camada completamente turbulenta”, aqui predominam os efeitos turbulentos aos viscosos. Entre estas camadas existe uma zona intermédia onde ambos os efeitos moleculares e turbulentos são igualmente importantes. Estas podem ser vistas na 4.1.

Da figura anteriormente referida temos que y é a distância perpendicular à parede e considerando uma distância adimensional y^+ que é dada por:

$$y^+ = \frac{\rho u_\tau y}{\mu} \quad (4.14)$$

De forma a que sejam modeladas estas zonas existem duas abordagens. A primeira é resolver completamente a camada limite, para tal é necessário que a malha nesta zona seja fina e siga dois critérios recomendados. Primeiramente as células junto às paredes devem estar dentro da “sub-camada viscosa” apresentado um valor de y^+ na ordem da unidade. Depois devem existir, pelo menos, 10 células dentro desta região e com um crescimento de cerca de 1.2 a 1.3. Isto garante que seja resolvida a região logarítmica como vista a Figura 4.1. Podemos ver na Figura 4.2 (a) uma ilustração do tipo de malha a gerar .

A outra abordagem é utilizando uma “função de parede”. As funções de parede são utilizadas

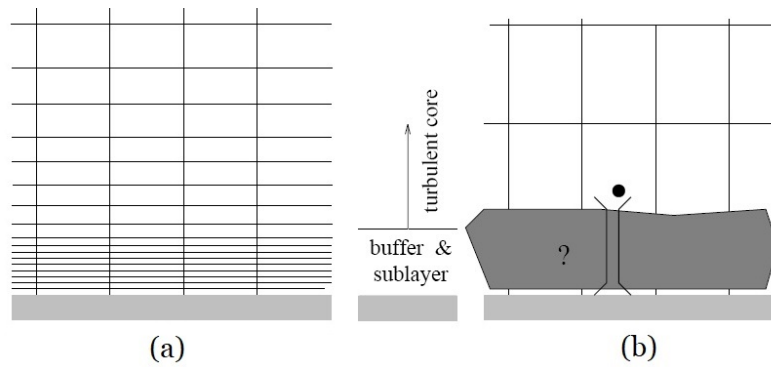


Figura 4.2: Esquema da diferença entre acoplar a malha na parede (sem função de parede) e usar uma função de parede sendo visualizado como (a) e (b), respectivamente. Retirado de [38].

quando o escoamento é altamente turbulento, ou seja, para escoamentos onde o número de Reynolds é alto e a sub-camada viscosa não tem efeitos significativos no escoamento completamente desenvolvido. Assim a região da parede não é resolvida e apenas modelada por funções de carácter empírico. Para a utilização desta abordagem, as células de cálculo são afastadas da parede de forma a que os primeiros pontos estejam fora da zona viscosa. Para tal é recomendado que o valor adimensional y^+ esteja entre 30 e 300, ou seja, não devem ser utilizadas malhas refinadas na parede. Esta abordagem é ilustrada na Figura 4.2 (b).

Estas funções de parede não são apropriadas para escoamentos de baixo número de Reynolds mas para números de Reynolds elevados onde a turbulência do escoamento livre é grande as funções de parede podem ser utilizadas pois a influencia laminar não será muito significativa. Em ambas as abordagens há que ter o cuidado de não ter pontos de cálculo dentro da região de $5 < y^+ < 30$ pois é uma região de mistura, onde o escoamento não será bem modelado nem com uma abordagem de função de parede nem com a integração até à parede.

4.3 Modelação de escoamentos com zonas rotativas com a formulação *Multiple Reference Frame*

No tipo de câmaras aqui em estudo é imprescindível a modelação de partes rotativas. Quando as câmaras apenas são constituídas por uma parte móvel (o agitador apenas com rotor) e uma parte fixa (câmara), é possível aplicar uma rotação a toda a câmara e designar a velocidade das paredes estáticas como nula. Porém basta a adição de um estator, ter mais do que um agitador ou algum outro componente a diferente velocidade de rotação já é necessário a aplicação de diferentes referenciais de rotação.

Já foram abordadas algumas técnicas de processamento deste tipo de câmaras, contudo, nestes estudos será apenas utilizado um modelo. O modelo escolhido foi o *Multiple Reference Frame* (MRF) pois constitui o mais simples e com precisão suficiente para resolver o problema pretendido, por esta razão será agora descrito. Para aplicar este modelo é necessário manipular as equações de movimento de forma a termos uma velocidade absoluta e uma relativa, tal que:

$$\vec{v}_r = \vec{v} - \vec{u}_r \quad (4.15)$$

Designado, \vec{v}_r como a velocidade relativa (velocidade \vec{v} vista de um referencial móvel), \vec{v} como

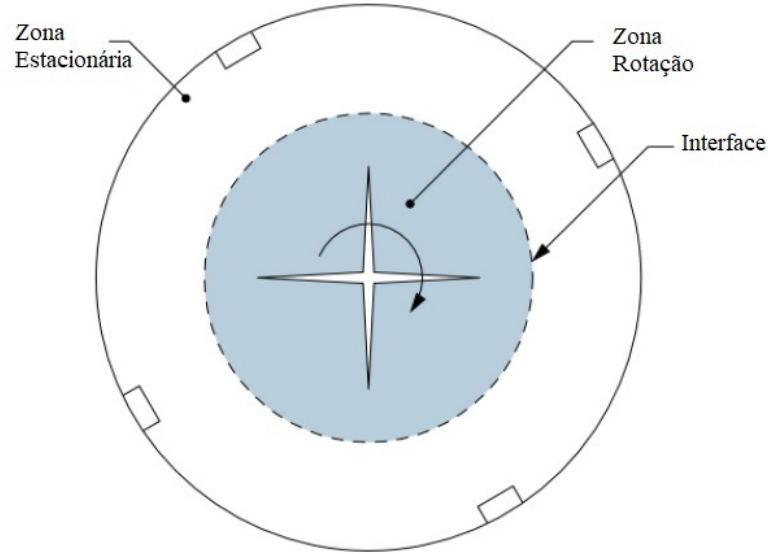


Figura 4.3: Ilustração de uma geometria típica com uma zona de rotação inserida numa estacionária.

a velocidade absoluta (velocidade vista de um referencial estático) e \vec{u}_r a velocidade relativa entre o referencial móvel e o estacionário. Daqui designa-se:

$$\vec{u}_r = \vec{v}_t + \vec{\omega} \times \vec{r} \quad (4.16)$$

Onde, \vec{v}_t é a velocidade de translação e $\vec{\omega}$ é a velocidade angular.

Para resolução de problemas multifásicos deve ser utilizada uma abordagem de cálculo com uma formulação de velocidade absoluta, i.e., a aceleração do fluido é calculada segundo o referencial estático. Se considerarmos as fases do escoamento das equações do modelo multifásico podemos expressar estas hipóteses à equação da continuidade, da quantidade de movimento e de energia, da seguinte forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{v}_r = 0 \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \vec{v} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}_r \vec{v}) + \rho [\vec{\omega} \times (\vec{v} - \vec{v}_t)] = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} + \vec{F} \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho E + \nabla \cdot (\rho \vec{v}_r H + p \vec{v}_r) = \nabla \cdot (k \nabla T + \bar{\bar{\tau}} \cdot \vec{v}) + S_h \quad (4.19)$$

O modelo MRF é a abordagem mais simples quando se tem uma geometria com múltiplas zonas, sendo este uma abordagem em regime estacionário. Neste a zona de rotação fica estacionária (conhecido como *frozen rotor*) e cada célula individual dentro desta é designada por diferentes velocidades de rotação (ou translação). Este modelo pode ser utilizado com o arranjo da Figura 4.3, onde a zona estacionária e a de rotação são separadas por uma interface que depois de calculadas as velocidades em cada domínio faz a conexão.

Apesar de este modelo ser uma aproximação, devido a não ter em conta o movimento real da zona de rotação, fornece uma boa aproximação, contudo não é ideal para casos onde a interação entre o rotor e as zonas estacionárias seja grande ou onde se prevejam efeitos de transição de grande escala.

4.4 Considerações numéricas referentes a estudos em regime transitório

Os cálculos em regime transitório necessitam que seja especificado o passo de tempo. O número de Courant-Friedrichs-Levy (CFL)

$$CFL = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \quad (4.20)$$

Onde Δt é o passo de tempo e Δx é o comprimento mínimo da célula de cálculo. Este número para a melhor resolução da discretização temporal deve ser menor que a unidade.

Por análise à equação é possível tomar nota que para diminuir o CFL podemos diminuir o passo de tempo (que faz aumentar o tempo de cálculo mas providencia melhores resultados) ou aumentar o tamanho das células da malha (sendo que é o comprimento da célula mais pequena que vai influenciar a convergência).

Quando são utilizados códigos implícitos, não é necessário assegurar o CFL menor que um, contudo, quanto mais próximo estiver de um melhor será a resolução das escalas temporais e espaciais da turbulência.

Sendo este número computado pelo código e cada passo de tempo, deve ser analisado e melhorado, o que não exclui o facto de ser necessário e recomendável a exploração de outros, origem também por partes de estabilidade. O controlo da convergência da solução é muito importante, sendo que um critério baixo irá aumentar o número de iterações. Neste modelos o resíduo mais importante é o da continuidade, que deve diminuir aproximadamente duas ordens de grandeza, por passo de tempo, para um CFL igual a um, aproximadamente.

Capítulo 5

Caso de Teste para Validação do Modelo Multifásico

Antes de ser, efetivamente, estudada a câmara da experiência CLOUD foi necessário proceder a uma tentativa de validar o modelo multifásico. A validação torna-se necessária e complementar ao objetivo desta dissertação pois não foi possível obter dados experimentais sobre o escoamento multifásico dentro da câmara da experiência CLOUD.

Neste sentido é aqui apresentada uma investigação do modelo multifásico MIXTURE [38] do FLUENT aplicado numa junção em T, simulando a mistura entre dois gases (ar e azoto) e que é posteriormente comparado com resultados da literatura [52].

5.1 Descrição da geometria e condições de funcionamento

O caso de estudo é constituído por um tubo principal com um diâmetro $D = 0,1 \text{ m}$ e um comprimento de $L = 0,5 \text{ m}$. Este tubo é intersectado por um outro com diâmetro de $d = 0,026 \text{ m}$, num ângulo perfeitamente perpendicular. Estas considerações podem ser vistas na Figura 5.1. Esta junção em T foi utilizada para investigar a mistura turbulenta entre duas espécies gasosas. Os gases utilizados foram Ar e Azoto (N_2), em que o Ar é composto por 79 % de N_2 e 21% de O_2 . A entrada de Ar é feita pela tubo principal e o azoto, N_2 , pelo tubo de intersecção. A relação de entrada de cada um é dada por uma “razão de mistura”, definida pela razão do caudal volumétrico de azoto pelo caudal volumétrico de ar. Esta relação pode ser expressa pelas velocidades e áreas das secções de entrada (ver Equação 5.1).

$$\frac{Q_{N_2}}{Q_{Ar}} = \frac{u_{N_2} s_{N_2}}{u_{Ar} s_{Ar}} = \frac{u_{N_2}}{u_{Ar}} \cdot \left(\frac{d}{D}\right)^2 \quad (5.1)$$

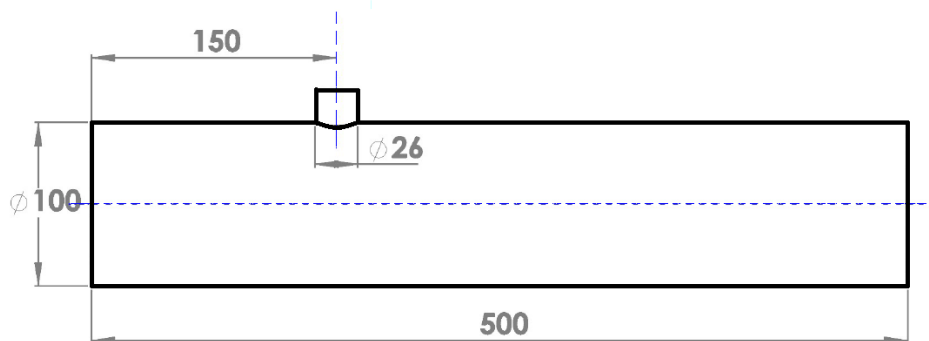


Figura 5.1: Geometria da junção em T que será investigada. Unidades em milímetros. A geometria foi desenhada em SolidWorks e as medidas utilizadas foram as descritas em [52].

Tabela 5.1: Velocidades utilizadas nas entradas do sistema. As velocidades foram calculadas com o uso da Equação 5.1 para um número de Reynolds de 10000.

$Q_{N_2}/Q_{Ar} [-]$	$u_{N_2} [m.s^{-1}]$	$u_{Ar} [m.s^{-1}]$
0,1	2,157	1,510
0,2	4,314	1,510

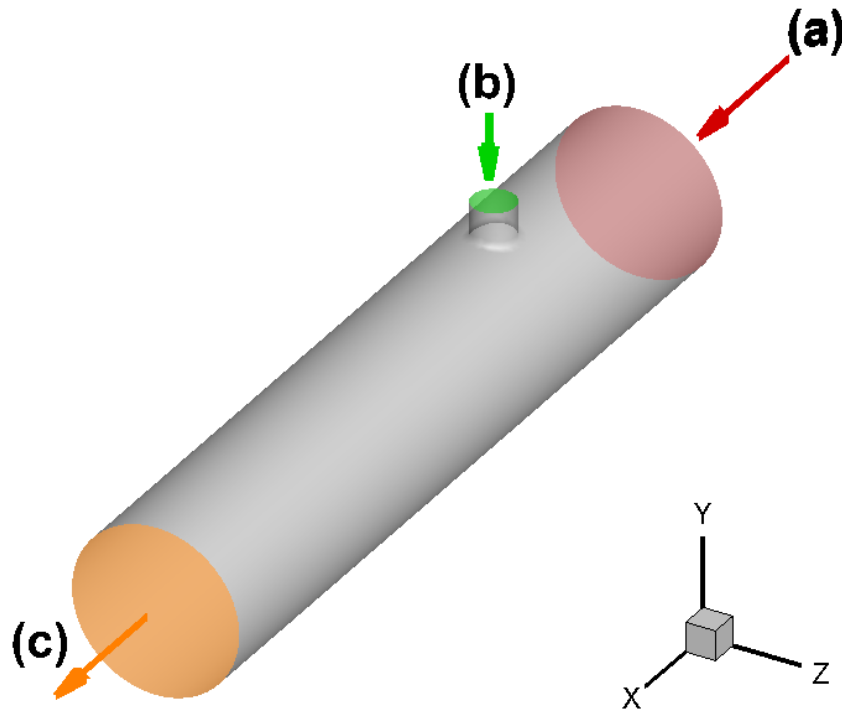


Figura 5.2: Condições de fronteira aplicadas à geometria. (a) Entrada de Ar (*velocity inlet*). (b) Entrada de N_2 (*velocity inlet*). (c) Saída do escoamento para o ambiente (*pressure outlet*).

Os testes experimentais [52] foram todos feitos considerando um número de Reynolds de 10000 e considerado que a mistura de ar e azoto tem uma viscosidade cinemática de $\nu = 1,1504 \cdot 10^{-5} m^2 s^{-1}$. Para o cálculo da velocidade de admissão utiliza-se o número de Reynolds, considerando o diâmetro característico como o diâmetro do tubo de admissão principal, tal que:

$$Re = \frac{uD}{\nu} \quad (5.2)$$

As simulações foram feitas utilizando duas razões de mistura Q_{N_2}/Q_{Ar} e, para cada uma destas, foram obtidos resultados com o modelo de turbulência SST e com o SAS. Para tal foi mantida a velocidade de entrada do escoamento principal e variado o de entrada de azoto, na entrada secundária. As velocidades de entrada são mostradas na Tabela 5.1.

De forma a garantir a convergência temporal da solução foi analisada a evolução do desvio padrão na superfície de saída. Para ambos os modelos, dois segundos de cálculo foram suficientes para estabilizar este valor.

A saída é feita pelo tubo principal e considera-se que seja para a atmosfera. Podemos visualizar as condições de fronteira na Figura 5.2

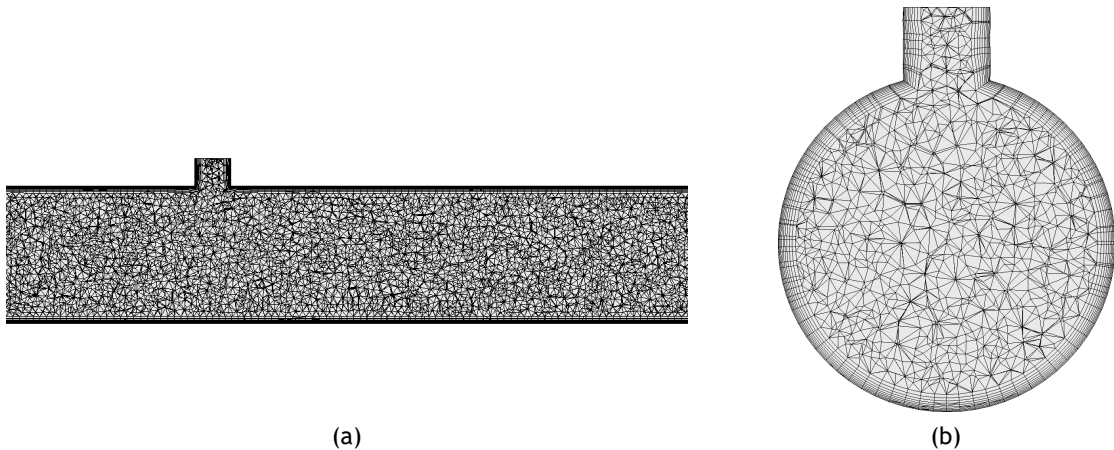


Figura 5.3: Malha de cálculo utilizada. (a) Corte vertical normal a $y=0$ m (b) Corte vertical normal a $x=0,125$ m. As superfícies da malha contém 7826 pontos e o volume contém 112912 nós de cálculo.

Tendo em vista quantificar a quantidade efetiva de homogeneidade da mistura que sai, os autores da experiência utilizaram tubos de amostragem, colocados no final do tubo principal e destes analisaram a fração mássica, existente de oxigénio O_2 , e definiram o parâmetro $y_i = \rho_{O_2} / \rho$. Posteriormente calculou-se o desvio padrão espacial desta fração mássica, tal que:

$$S_0 = \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - y_{avg})^2 / (n - 1)} \quad (5.3)$$

Onde y_{avg} é a média da concentração de oxigénio e n o número de amostras. Será a utilização deste desvio padrão espacial que validará (ou não) o modelo de turbulência aplicado.

5.1.1 Metodologia Numérica

Primeiramente a geometria foi discretizada numa malha de cálculo. A discretização foi feita com um gerador de malhas. Foi utilizada uma malha híbrida (estruturada na região junto à parede e não estruturada no resto do domínio). A escolha de utilizar uma malha não estruturada foi para não obter ângulos grandes em algumas zonas. Além de que no sentido prático são mais fáceis de gerar e, desde que tenham um bom refinamento e junto às paredes sejam células prismáticas, produzem bons resultados, comparando com as malhas completamente estruturadas que requerem mais tempo de manipulação.

A malha final é constituída por 112912 nós de cálculo e pode ser visualizada na Figura 5.3, para dois cortes através desta. Da parede foram inflacionadas 10 células, com uma altura inicial de 0,2 mm. Esta altura é tal que se espera ter uma distância adimensional y^+ em todo o domínio das paredes perto da unidade, para desta forma ser resolvida completamente a camada limite. A qualidade da malha foi verificada e o parâmetro *skewness* tem um valor máximo de 0,50 e uma média no volume total de 0,29. Ainda todas as células perto da parede são prismáticas o que significa uma boa qualidade ortogonal, conferindo assim uma malha de boa qualidade e espera-se pouca difusão numérica devido à discretização da malha de cálculo.

Os modelos de turbulência utilizados foram o SST e o SAS, de forma a estudar o impacto destes na mistura turbulenta. O código de resolução das equações é o FLUENT, sendo utilizada uma abordagem baseada na pressão, i.e., foi utilizado o (*pressure-based solver*) e a acoplação com

a velocidade feita por meio do esquema COUPLED [38].

Como queremos simular a mistura de dois gases, sabemos que não haverão forças inerciais suficientemente grandes para influenciarem o campo de velocidades médio do escoamento, por este motivo, pode ser utilizado o modelo multifásico MIXTURE [38].

De forma a garantir a menor difusão numérica, foram utilizados esquemas de segunda ordem de discretização espacial, mais concretamente um *Upwind*. Para a equação de pressão é que foi utilizado o esquema PRESTO!, que é o mais robusto para escoamentos multifásicos.

Considerando que a menor célula do volume de cálculo (fora da camada limite pois nesta as velocidades são perto de zero) e para uma velocidade máxima de 4 m.s^{-1} podemos calcular um passo de tempo para um CFL igual à unidade de $\Delta t = 0,05 \text{ s}$, contudo de forma a resolver as mais pequenas estruturas que se pensa influenciar a mistura foi escolhido um passo de tempo igual a $\Delta t = 0,001 \text{ s}$. A convergência dos resíduos das equações para cada passo de tempo (convergência espacial) foi colocada a 10^{-6} e para a convergência ao longo do tempo (convergência temporal) foi analisada a evolução do desvio padrão das concentrações na saída do tubo principal.

5.2 Resultados

O primeiro passo de forma a garantir que os resultados obtidos estão bem resolvidos é analisar para todos os casos testados os valores da distância adimensional y^+ . Para tal podemos visualizar a Figura 5.4 dos contornos do y^+ para todos os casos testados.

De forma a comparar os dados obtidos com os experimentais consideremos a seguinte expressão:

$$S_1 = \frac{S_0 * 100}{x_m} \quad (5.4)$$

Onde x_m é a distância axial onde é feita a medida das concentrações, sendo o seu zero onde começa a ser feita a injeção de N_2 . Os resultados obtidos são apresentados no gráfico da Figura 5.5. Deste gráfico retiramos que ambos os modelos dão uma boa previsão, contudo, para uma razão de caudais de 0,2 a discrepância é maior para o SST do que para o SAS. Mais concretamente o modelo SST, para uma razão de mistura de 0,1 e 0,2, apresenta um desvio relativo aos dados experimentais de 2.11% e 12.77% e o modelo SAS apresenta um desvio de 1,13% e de 6,70%, respetivamente. Como é para uma razão de mistura de 0,2 que os valores se distanciam será agora analisado o que poderá influenciar. Primeiro na Figura 5.6 temos os contornos das velocidades num plano de corte vertical. Analisando o campo de velocidades, vemos que o modelo SAS apresenta um comportamento quase caótico na zona a seguir à entrada do azoto, enquanto que o modelo SST parece apresentar uma distribuição linear. Se olharmos para como isto afeta a distribuição da concentração de azoto podemos ver a Figura 5.7.

Na Figura 5.7 também foram colocadas algumas linhas de corrente (que seguem as velocidades tangenciais do escoamento). Estas linhas mostram flutuações para o modelo SAS que no SST seguem um caminho linear. A não existência de flutuações do SST é que leva à não interligação das duas fases gasosas o que não possibilita uma boa difusão. Um dos parâmetros que foi notado apresentar diferenças nos modelos foi a energia cinética turbulenta, k . Podemos ver na Figura 5.8 que os valores para o modelo SST são maiores do que no SAS.

Ainda podemos utilizar o critério Q para visualizar os vórtices e a diferença da resolução dos modelos. O critério Q é muito utilizado para visualizar os vórtices. Este critério representa a ligação entre as tensões de corte e da magnitude da vorticidade que estão aplicadas localmente ao escoamento. Para valores de $Q > 0$ podemos visualizar as áreas onde a vorticidade é maior

que as tensões de deformação, o que se traduz em zonas onde a pressão é maior que a envolvente.

$$Q_{cr} = \frac{1}{2} (\|\Omega\|^2 - \|S\|^2) > 0 \quad (5.5)$$

Onde Ω é o tensor de vorticidade, S o tensor da taxa de deformação e $\|\cdot\|$ é o traço da matriz de cada tensor. Aplicando este critério ao domínio podemos apresentar as iso-superfícies que têm o mesmo valor. Este valor deve ser escolhido de forma a ser maior que zero e de forma a ser perceptível os vórtices. Assim temos Figura 5.9 para um $Q_{cr} = 1000 \text{ s}^{-2}$.

Se utilizarmos a Equação 3.20, do capítulo anterior, considerando que r_m é a nossa razão de mistura aqui calculada Q_{N_2}/Q_{Ar} multiplicada pela razão de densidades, ou seja, considerando que:

$$r_m = \frac{Q_{N_2}}{Q_{Ar}} \cdot \frac{\rho_{N_2}}{\rho_{Ar}} \quad (5.6)$$

Podemos calcular o valor analítico da queda de pressão para esta junção T. Cálculos para ambos os modelos e as duas razões de mistura obtiveram-se os pontos da Figura 5.10.

A comparação entre os resultados analíticos, Equação 3.20, e as simulações aqui realizadas demonstrou que para uma razão de mistura de 0,2 o desvio relativo é superior (cerca de 30%). Podemos dizer que estes resultados são expectáveis tendo em conta as considerações feitas para a dedução da expressão analítica apresentada. Ou seja, como na dedução não foi considerado o comportamento tridimensional da turbulência nem as energias cinéticas turbulentas é normal que para escoamentos cada vez mais turbulentos os valores da queda de pressão simulados (e até reais) fiquem mais díspares dos analíticos (com esta simples expressão).

5.3 Sumário da análise da mistura turbulenta na junção em T

Em síntese, o modelo SST, devido à sua natureza RANS, não conseguiu resolver bem os fenómenos transitórios da turbulência. A pobre resolução das escalas de turbulência implica uma má resolução da mistura turbulenta. Com o modelo SST o azoto injetado segue uma trajetória “linear” (Figura 5.7), para tal, a mistura ocorre apenas devido à difusão na zona a jusante. Por outro lado, o modelo SAS ao conseguir resolver as flutuações proporciona uma mistura com maior homogeneidade espacial, em que o azoto tem uma trajetória “flutuante”.

O desvio padrão das concentrações de oxigénio mostrou-se coerente com os dados da literatura (Figura 5.5). Para maiores velocidades, significando maior turbulência, o desvio padrão tende a diminuir significando uma melhor distribuição das espécies no domínio.

A energia cinética turbulenta mostrou-se inferior para o modelo SAS. Isto é devido à existência certas tensões turbulentas que exigem uma maior dissipação de energia do gradiente do escoamento médio. Como o modelo SST não apresenta tantas tensões turbulentas entre os demais vórtices a energia cinética turbulenta tende a aumentar.

Assim pode concluir-se que, quando se trata do estudo multifásico em que a difusão molecular quer ser resolvida, devem-se utilizar modelos capazes de resolver estes fenómenos de transição. Ainda outro aspeto importante é que com a resolução dos pequenos vórtices possibilita-se a difusão dentro destes e o transporte dos escalares no domínio, como vimos na Figura 5.9.

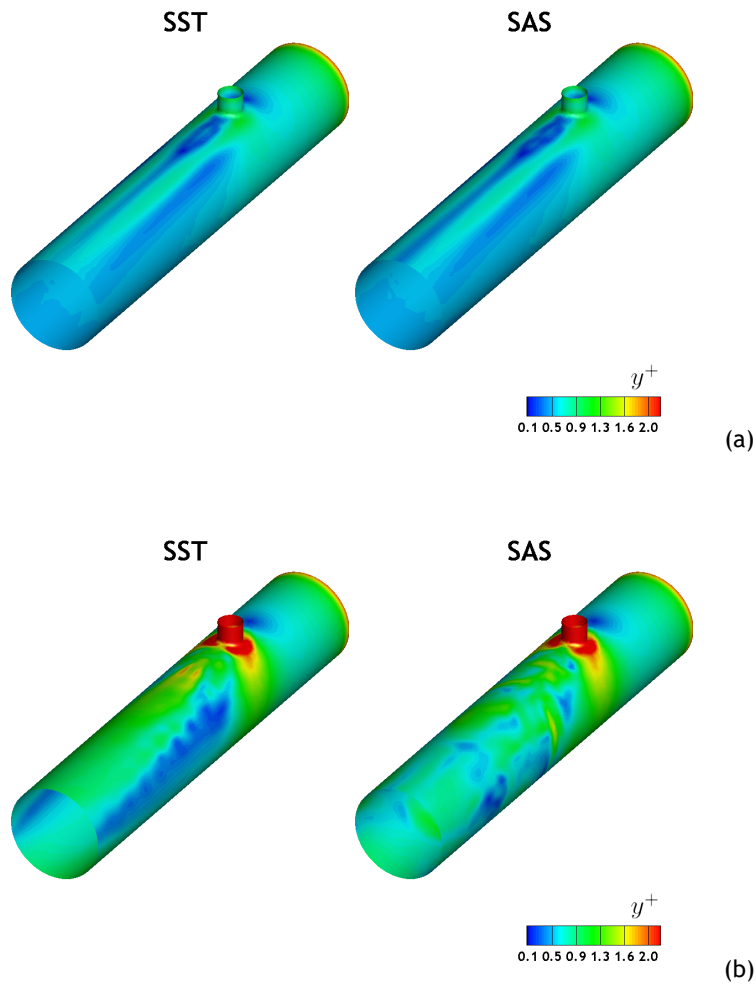


Figura 5.4: Contornos na parede da distância adimensional y^+ . (a) Para uma razão de mistura igual a 0,1. (b) Para uma razão de mistura igual a 0,2.

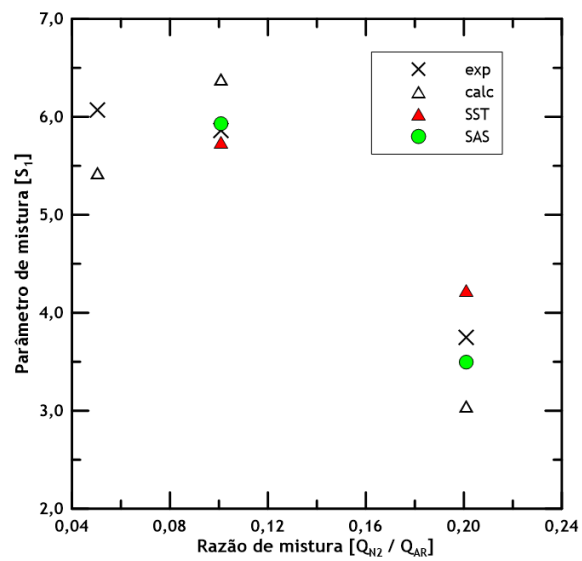


Figura 5.5: Dados obtidos para os cálculos com o modelo SST e o SAS em comparação com os resultados experimentais e outros numéricos de [52]. O maior desvio relativo foi para o modelo SST, com uma razão de mistura de 0,2, que teve um valor de 13%, aproximadamente.

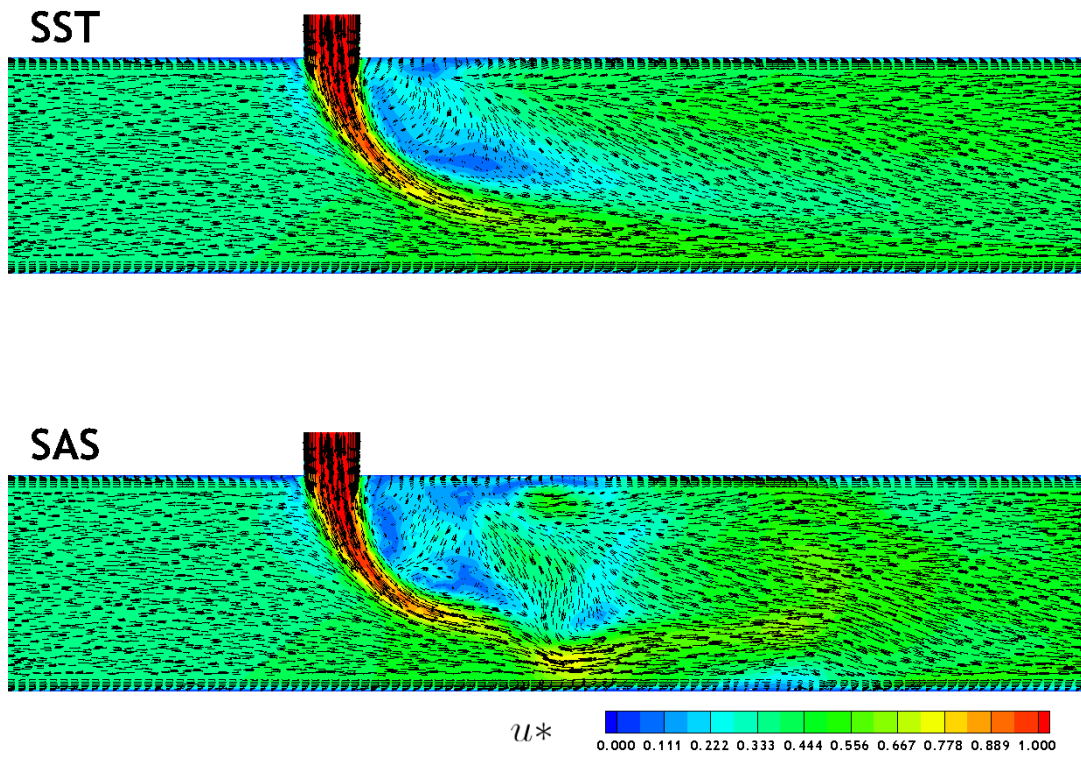


Figura 5.6: Velocidade adimensional do escoamento $[u^* = u/u_{N_2}]$ para o modelo SST e o SAS, num corte vertical normal a $y=0$ m. Tempo de 2 segundos.

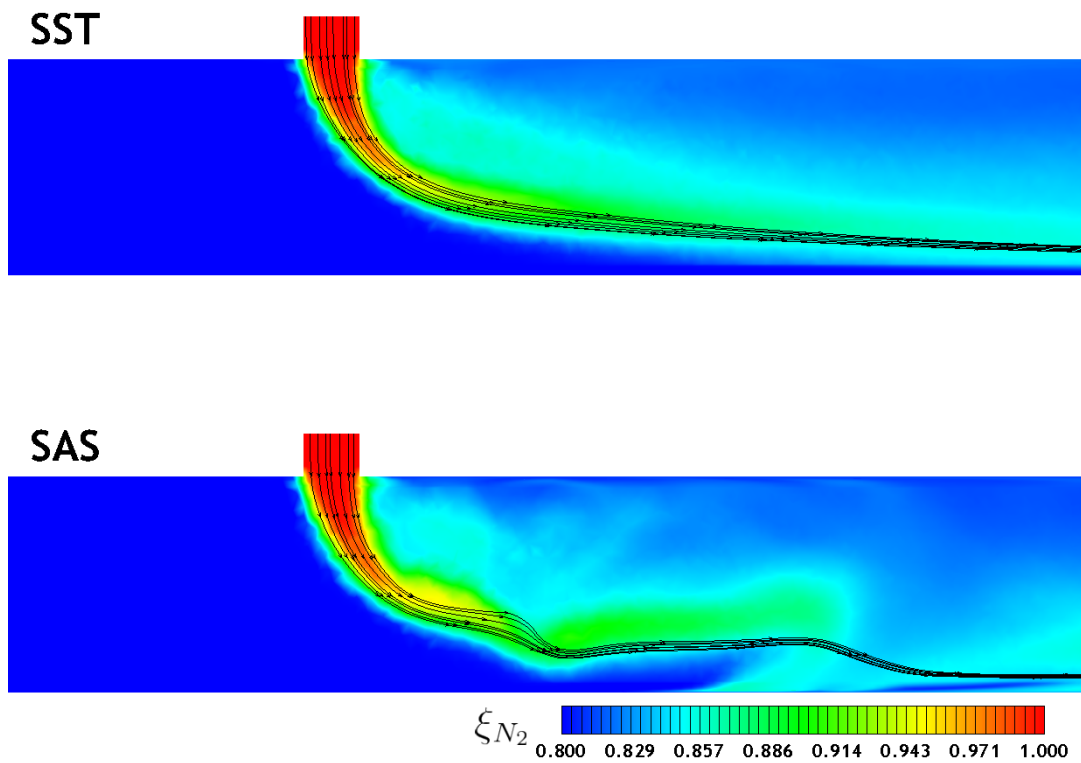


Figura 5.7: Fracção volúmica, ξ , de N_2 para o modelo SST e o SAS, num corte vertical normal a $y=0$ m. Tempo de 2 segundos.

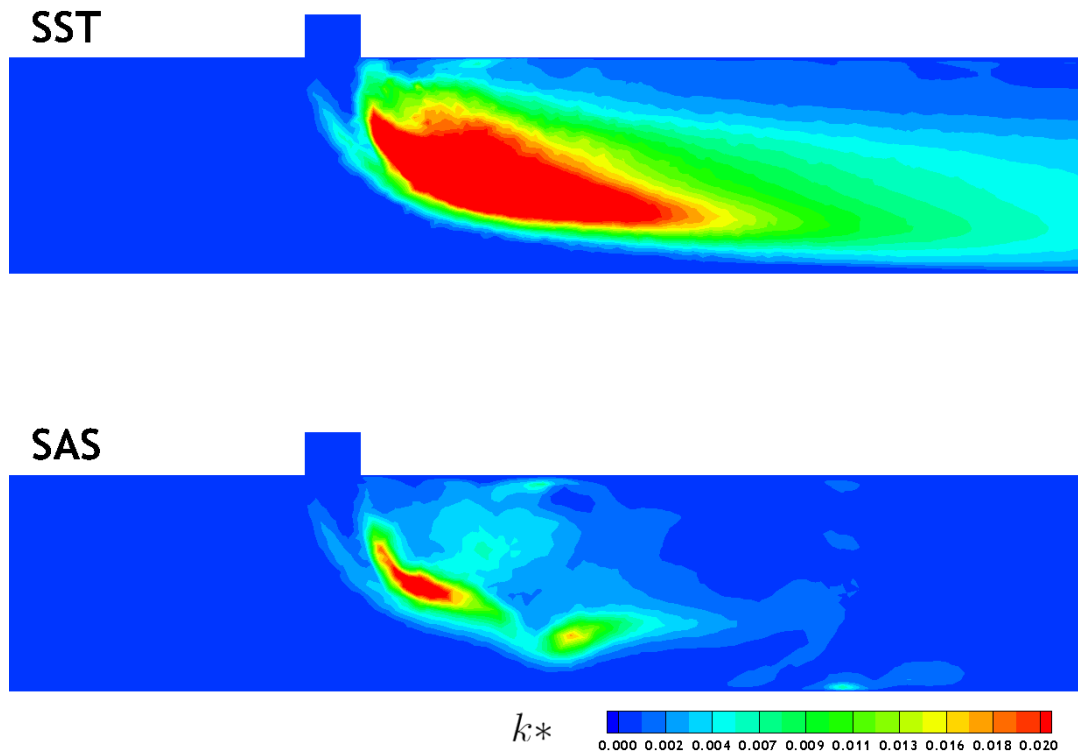


Figura 5.8: Energia cinética turbulenta adimensional [$k^* = k/u_{N_2}^2$] para o modelo SST e o SAS, num corte vertical normal a $y=0$ m. Tempo de 2 segundos.

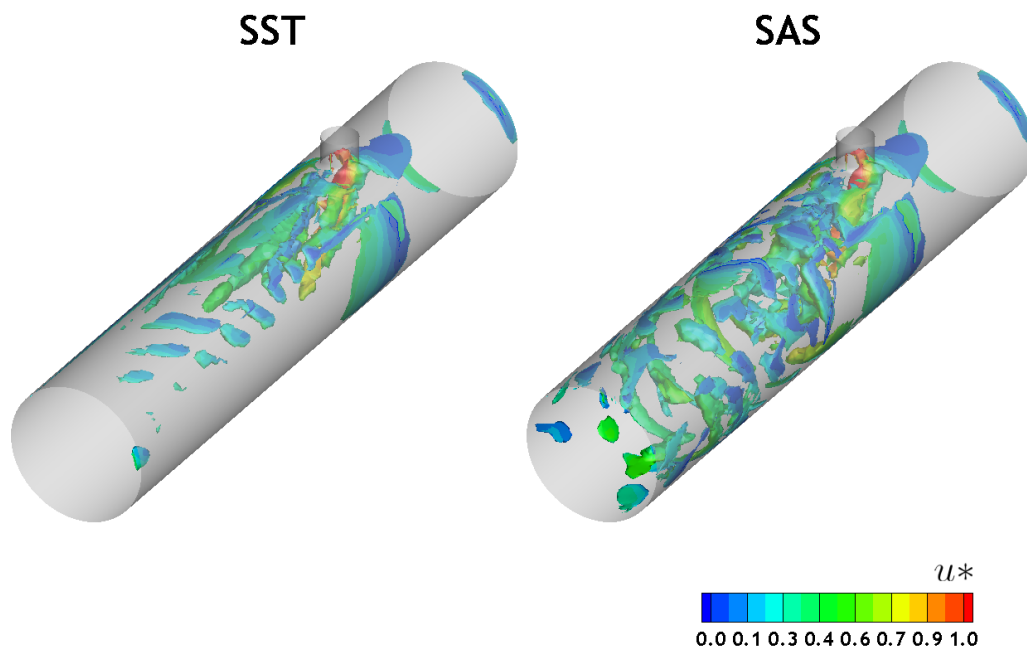


Figura 5.9: Critério Q para o modelo SST e o SAS. Para um valor de $Q_{cr} = 1000 \text{ s}^{-2}$. Tempo de 2 segundos. Vórtices coloridos pela velocidade adimensional u^* .

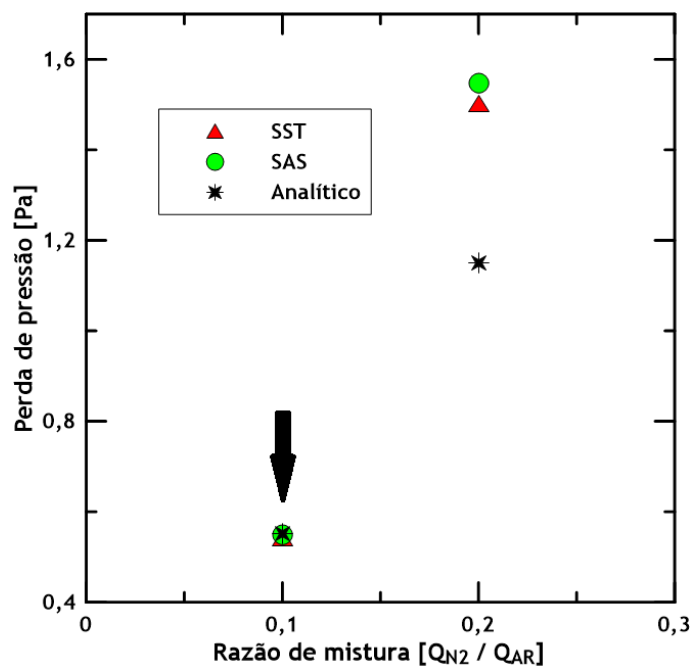


Figura 5.10: Para uma razão de mistura 0,1 o SST e o SAS apresentam um desvio relativo ao analítico de 1,94% e 0,76%, respetivamente, veja-se a seta no gráfico. Para uma razão de mistura 0,2 o SST e o SAS apresentam um desvio relativo ao analítico de 29,85% e 33,90%, respetivamente.

Capítulo 6

Análise da câmara da experiência CLOUD

Neste capítulo é descrita a geometria detalhada da câmara utilizada na experiência CLOUD no CERN. Esta geometria foi discretizada numa malha de cálculo para aplicação dos modelos computacionais anteriormente descritos.

Aqui serão analisados os campos de velocidade gerados pelas hélices da câmara e ainda a distribuição de SO_2 para as condições de funcionamento descritas. Serão ainda mostrados alguns resultados para um caso de teste complementar e efetuada uma comparação com alguns dados experimentais.

6.1 Descrição da geometria da câmara

A câmara em estudo consiste num tanque cilíndrico com um diâmetro $T = 3 \text{ m}$ e uma altura total de aproximadamente $H = 4 \text{ m}$, sendo que é caracterizada por ter o fundo curvo e o topo plano perfazendo um total volumétrico de $26,1 \text{ m}^3$, ver Figuras 6.1 e 6.2. As dimensões são apresentadas na Tabela 6.1.

6.2 Discretização numérica da malha de cálculo

Para aplicar as equações dos modelos na geometria a testar é necessário discretizar o domínio onde existem os fluidos na chamada "malha numérica". Consiste em dividir o domínio a calcular em pequenos volumes de controlo (VC) onde serão aplicadas as equações do escoamento. Nestes estudos foi usada uma discretização não-estruturada.

A discretização do domínio de cálculo foi feita por intermédio de um software de geração de malhas e pode ser visualizada na Figura 6.3. O domínio total foi dividindo o domínio em três zonas, duas zonas de rotação e uma zona estática, para poder ser aplicado do modelo MRF. As zonas de rotação englobam unicamente as hélices e a zona estática corresponde ao restante espaço da câmara, entre estas zonas existem interfaces que ligam os três domínios. Junto às paredes, as células foram inflacionadas o máximo possível de forma a gerar um $y+$ o mais próximo de 30.

Tabela 6.1: Descrição das diversas dimensões associadas à geometria da câmara CLOUD vista nas Figuras 6.1 e 6.2

Nomenclatura	Valor Nominal	Descrição
T	3,00 m	Diâmetro Câmara
H	4,20 m	Altura total Câmara
D	0,60 m	Diâmetro exterior hélices
d	0,12 m	Diâmetro do cubo exterior
h	0,10 m	Altura da pá
w	0,08 m	Largura da pá
α	52,00 °	Menor ângulo da pá com a horizontal

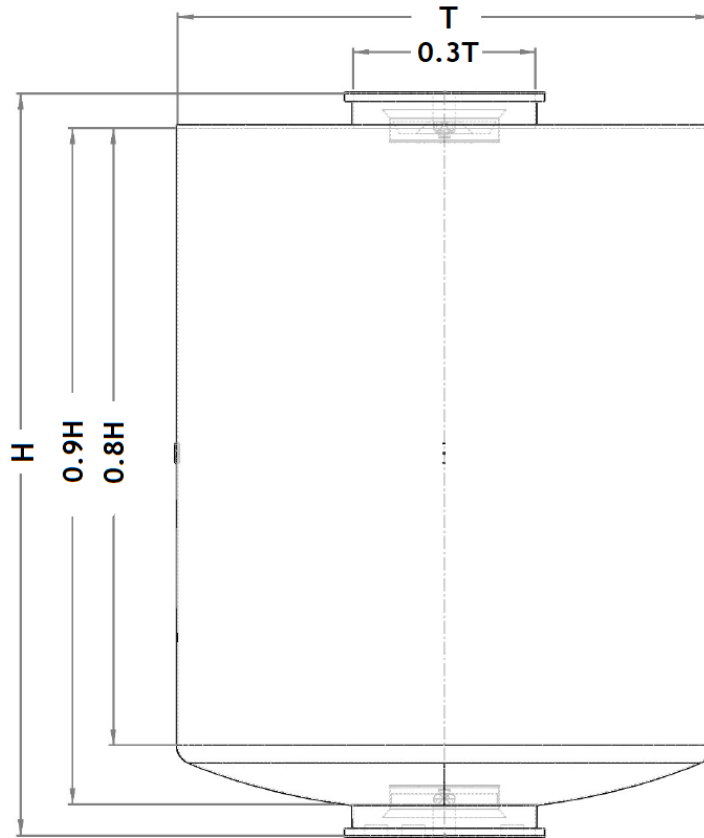


Figura 6.1: Visão geral da câmara completa com referência a algumas medidas relevante.

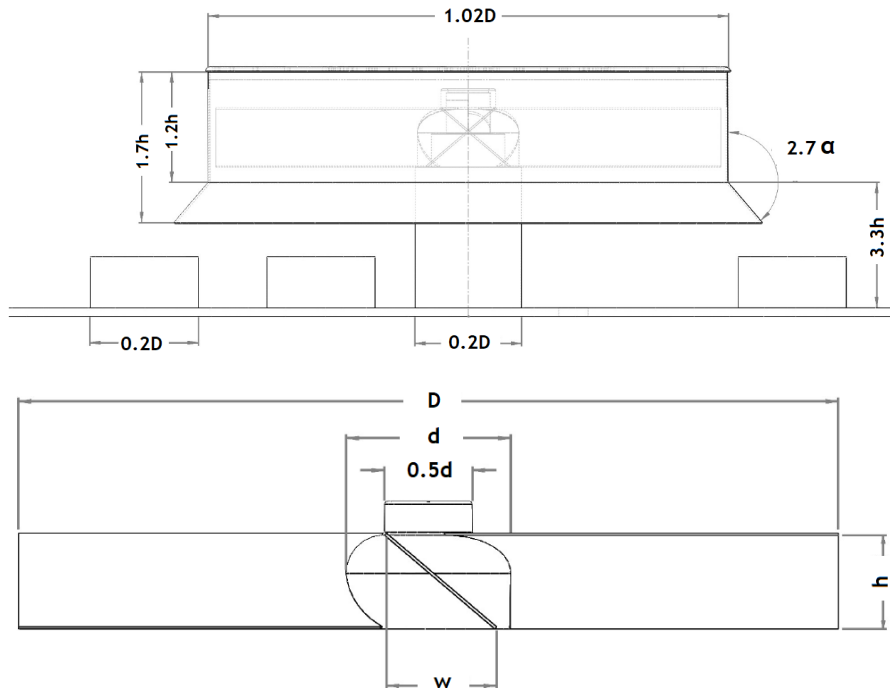


Figura 6.2: Visão aproximada da zona de rotação inferior. (Em cima) Visualização do estator, do veio e das entradas inferiores da câmara. (Em baixo) Visualização apenas do ventilador inferior.

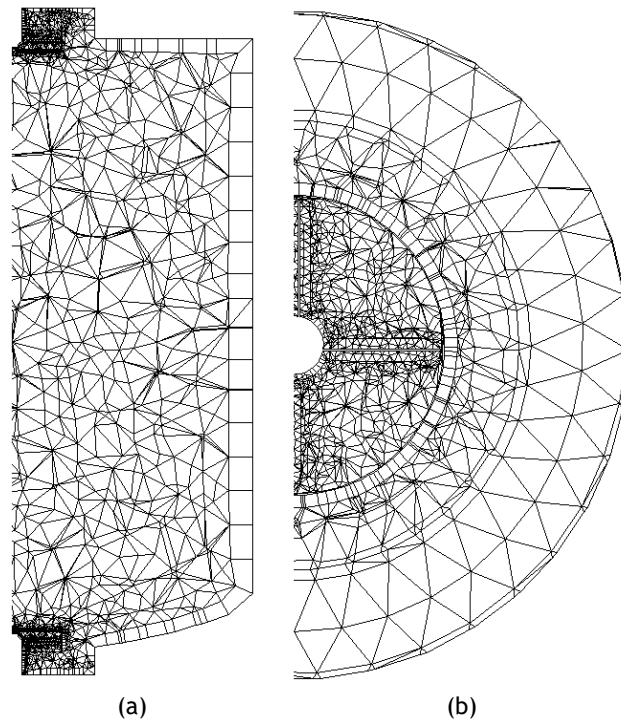


Figura 6.3: Visualização da malha de cálculo utilizada. (a) Corte seccional vertical mediano. (b) Corte seccional horizontal nas pás do ventilador inferior.

Tabela 6.2: Propriedades de massa específica e de viscosidade dos fluidos utilizados. Dados do ANSYS FLUENT.

Fluido	$\rho [kg.m^{-3}]$	$\mu [Pa.s]$
Ar	1,178	$1,720 \cdot 10^{-5}$
SO ₂	2,770	$1,200 \cdot 10^{-5}$

Como a câmara funciona a diferentes velocidades de rotação, é difícil precaver uma malha que tenha sempre este valor acima de 30 e menor que 300. Contudo, a inflação das células da parede foi feita de forma a que os primeiros pontos, junto da parede, estivessem suficientemente longe para não entrarem na camada limite do escoamento.

A avaliação da qualidade da malha foi feita com cuidado. As células do volume garantiram um máximo de *skewness* de 0,96 e uma média global de 0,35. Ainda a malha consiste em cerca de 41 mil nós de cálculo. Este valor máximo de ângulos das células encontra-se em zonas de difícil melhoria. Sendo que não foi possível baixar este valor pois a existência de ângulos agudos entre o contacto das pás e do cubo torna esta tarefa difícil e ainda a grande proximidade do estator e das pás da hélice também cria os maiores ângulos existentes na malha.

6.3 Descrição do caso de teste

Os testes das experiências na câmara CLOUD utilizam ar composto apenas por N_2 e O_2 com uma razão de mistura de 79:21. A câmara é enchida com este gás e depois podem inserir diversos gases vestigiais, em particular SO_2 , a uma taxa de cerca de 100 ppmv. Algumas propriedades dos dois fluidos utilizados podem ser encontradas na Tabela 6.2.

De forma a conseguir as mesmas propriedades do ar utilizado foi criada uma espécie nova no

Estudos sobre a Uniformização do Escoamento em Câmaras de Mistura usando CFD

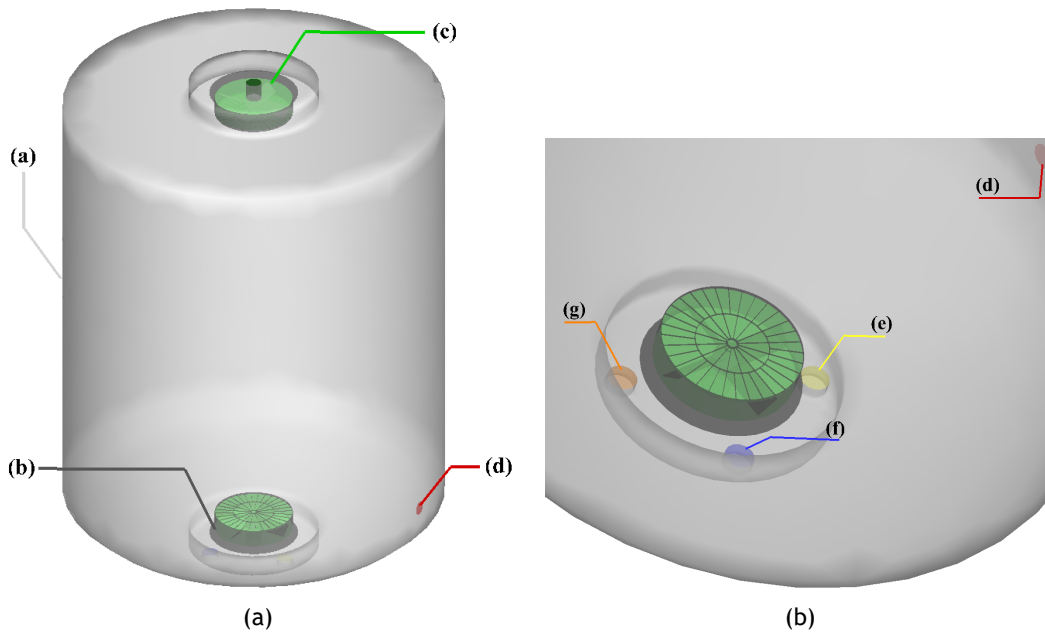


Figura 6.4: Ilustração da geometria utilizada com referência às suas condições de fronteira.

Tabela 6.3: Tabela de condições de fronteira aplicadas. Nota: O nome das condições é referente à Figura 6.4.

Nome	Tipo de condição	Descrição	Valor Absoluto
a	Parede s/ deslizamento	Câmara	N/A
b	Parede s/ deslizamento	Estator e ventiladores	N/A
c	Interface de rotação	N/A	N/A
d	Pressão imposta	Saída	101831 [Pa]
e	Velocidade imposta	Entrada de ar	0,13 [m.s ⁻¹]
f	Velocidade imposta	Entrada de SO ₂	1,30 · 10 ⁻⁵ [m.s ⁻¹]
g	Parede s/ deslizamento	Entrada não utilizada	N/A

FLUENT, com a composição acima descrita. Este fluido será referido no resto da dissertação apenas como “ar”. Assim, as entradas da câmara são duas, uma para a entrada de ar e outra para o SO₂. O escape do escoamento é por uma saída lateral. Algumas considerações visuais podem ser vistas na Figura 6.4.

Neste estudo foi imposto que o ar entrasse com um caudal volumétrico, Q , de 10 l.min⁻¹. Para o diâmetro anteriormente referido das entradas e admitindo a Equação 6.1.

$$Q = u \cdot s \quad (6.1)$$

Relacionando com o diâmetro de entrada,

$$u = \frac{4Q}{\pi \cdot D^2} \quad (6.2)$$

Assim, com a Equação 6.2, com calculadas as velocidades de entrada do escoamento, que podem ser encontradas na Tabela 6.3.

As hélices, por questões de não-contaminação, são magneticamente ativadas. As suas velocidade costumam ser controladas em percentagem e na Tabela 6.4 podem ser visualizados os seus

Estudos sobre a Uniformização do Escoamento em Câmaras de Mistura usando CFD

Tabela 6.4: Relação da porcentagem de potência vs velocidade em RPM. A velocidade de rotação da hélice relaciona-se com a velocidade de rotação do veio do motor numa razão de velocidades de 0,289.

Porcentagem [%]	Velocidade de rotação [rpm]
100	397,4
50	198,7
25	99,4
12	47,7

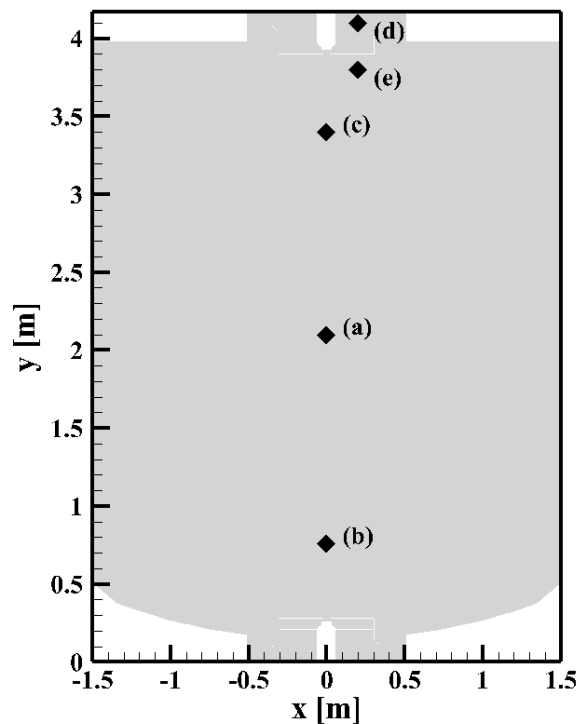


Figura 6.5: Pontos de monitorização dos valores de magnitude da velocidade do escoamento e das concentrações volumétricas do gás SO_2 . Esta figura também é fonte de especificação do referencial da geometria, dado que é a superfície plana dada por $z = 0$ m.

valores nominais correspondentes. No caso de teste para o estudo da distribuição de SO_2 na câmara foi utilizada apenas uma configuração. Nesta configuração a hélices inferior está a rodar no sentido contrário ao dos ponteiros dos relógio (sentido positivo de rotação) e a hélices superior no sentido dos ponteiros do relógio (sentido negativo de rotação). Para ambas as hélices a velocidade de rotação é de 100%, correspondendo a 397,4 rpm.

6.3.1 Pontos e parâmetros de monitorização

Para aferir a convergência dos cálculos das simulações foram definidos certos pontos através dos quais foi monitorizada a magnitude das velocidades e das concentrações volumétricas de SO_2 . Estes pontos têm as coordenadas dadas pela Tabela 6.5 e podem ser visualizados na Figura 6.5.

Além destes pontos foram igualmente monitorizados, ao longo do tempo, o momento aplicado em cada uma das hélices.

Ponto de Monitorização	Coordenada x (m)	Coordenada y (m)	Coordenada z (m)
(a)	0	2,1	0
(b)	0	0,8	0
(c)	0	3,4	0
(d)	0,2	4,1	0
(e)	0,2	3,8	0

Tabela 6.5: Coordenadas dos pontos de monitorização das velocidades e das concentrações do escoamento ao longo do tempo, num plano cartesiano a meio da câmara.

6.4 Metodologia Numérica

O estudo computacional desta malha foi feito com os modelos de turbulência $k-\omega$ SST e SAS. O código utilizado para resolver o escoamento é baseado na pressão (*pressure-based solver*), além de ter sido utilizada uma dupla precisão de forma a garantir a qualidade dos resultados. Para a discretização espacial foi escolhido o *Upwind* de segunda ordem para todas as equações, com exceção da pressão em que foi utilizada a discretização PRESTO! e para a fração volumétrica do modelo multifásico que foi utilizado um *Upwind* de primeira ordem.

O acoplamento da pressão e da velocidade foi feito com o esquema COUPLED [38] devido a ser o mais robusto. Assim podemos concluir que o nosso *solver* é completamente implícito. Ainda para modelar as zonas de rotação foi utilizado o modelo MRF, numa conhecida abordagem de *Frozen Rotor*.

Devido a ser um *solver* implícito, não é necessária a preocupação com um número de Courant inferior à unidade, contudo como uma das componentes que mais nos importa é a resolução dos efeitos turbulentos o passo de tempo foi escolhido de forma a captar as frequências principais do escoamento. A frequência característica do escoamento deve ser a frequência de rotação dos ventiladores, contudo prevê-se que maiores frequências existam. Uma destas, que é importante, é a frequência de passagem das pás (BPF) que pode ser descrita por:

$$BPF = n_b \cdot \frac{N}{60} \quad (6.3)$$

Onde N é o numero de rotações por minuto (RPM) e n_b é o numero de pás por ventilador. Assim caso exista algum segundo harmónico desta frequência também poderá ser resolvido. O passo de tempo foi sempre colocado a 0,01 s, o que garante para uma rotação a 100% há uma frequência de amostragem superior a duas vezes a BPF.

A convergência das soluções foi determinada pela estabilização periódica dos monitores de velocidade, concentração e momento. Em cada passo de tempo foram estabelecidas 10 iterações por passo, para um valor absoluto do resíduo da continuidade de 10^{-3} e dos restantes de 10^{-5} . Ao longo das simulações foi visto que a continuidade estava sempre convergida, apesar dos outros resíduos não estarem sempre abaixo dos 10^{-4} , sendo oscilante. Além disso, foi continuamente verificado o equilíbrio de massa, sendo este valor sempre por volta dos 0,02%.

6.5 Resultados

Os resultados para este caso de teste estão agrupados em duas partes. A primeira parte pretende caracterizar o campo de velocidades e de momentos gerados pela rotação das hélices, bem como comparar estes com valores de estudos computacionais anteriormente feitos a esta

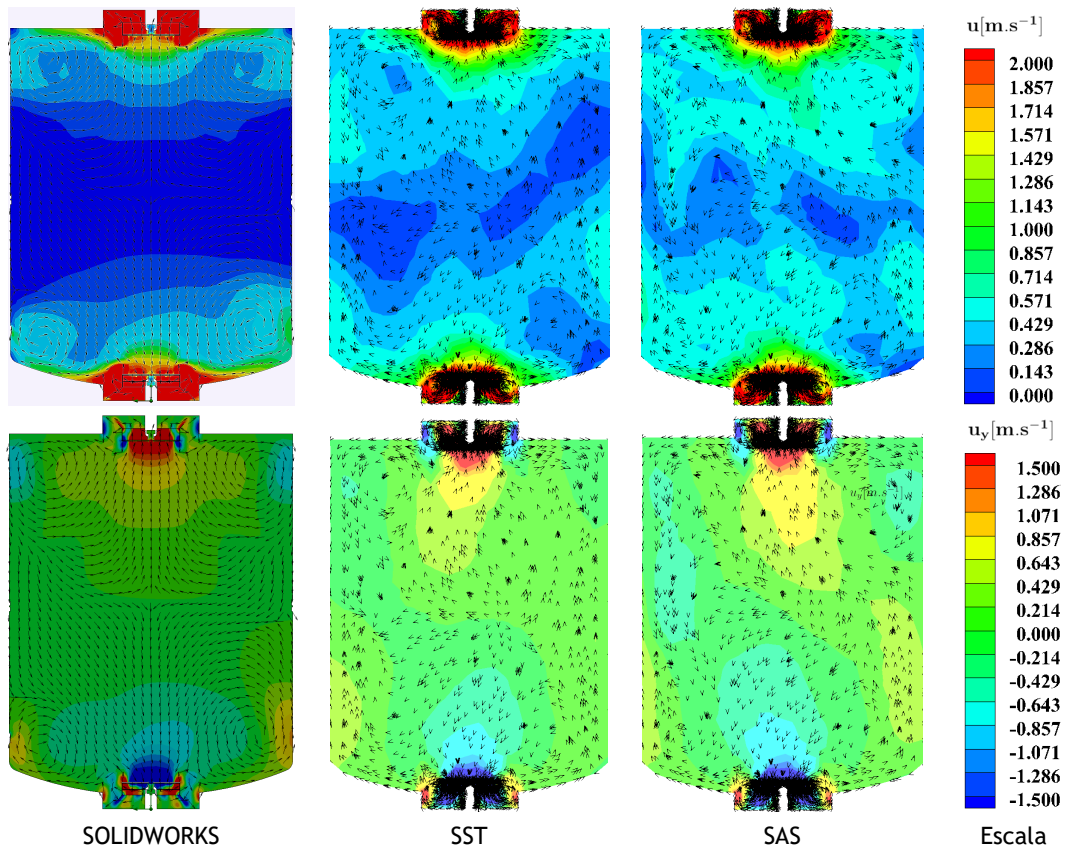


Figura 6.6: Comparação do campo de velocidades de resultados de estado estacionários anteriores e os modelos não-estacionários utilizados neste estudo de modo a evidenciar a alteração na estrutura do escoamento. Na linha superior apresenta-se a magnitude da velocidade absoluta e na inferior a velocidade segundo a direção vertical. O campo de velocidade é apresentado num plano de corte vertical pelo meio da câmara. Tempo de escoamento de 340 segundos. Dados do SolidWorks retirados de [53].

câmara. Numa segunda parte, é feita a análise da evolução e estado da uniformidade das concentrações volumétricas de SO_2 na câmara. E, por fim, foi feita uma visualização tridimensional dos vórtices resolvidos para cada modelo e ainda das linhas de corrente produzidas.

6.5.1 Análise do campo de velocidades

De forma a validar os resultados obtidos, foi possível comparar os resultados calculados com dados que estudos anteriores obtiveram [53]. No estudo tridimensional já feito nesta câmara foi utilizado o software SolidWorks que utiliza um modelo de turbulência $k - \epsilon$, contudo este estudo foi feito em regime estacionário.

Podemos ver a comparação na Figura 6.6. Os casos têm a mesma velocidade de rotação das hélices e a mesma direção de rotação, contudo, no caso do SolidWorks apenas foi considerada a entrada e saída de ar, com um caudal de entrada 10 vezes superior ao utilizado. Da Figura 6.6 podemos aferir que a magnitude das velocidades é semelhante, contudo, as flutuações de velocidade nos modelos SST e SAS da velocidade são notórias enquanto que no modelo em SolidWorks o campo de velocidades parece muito simétrico e amortecido.

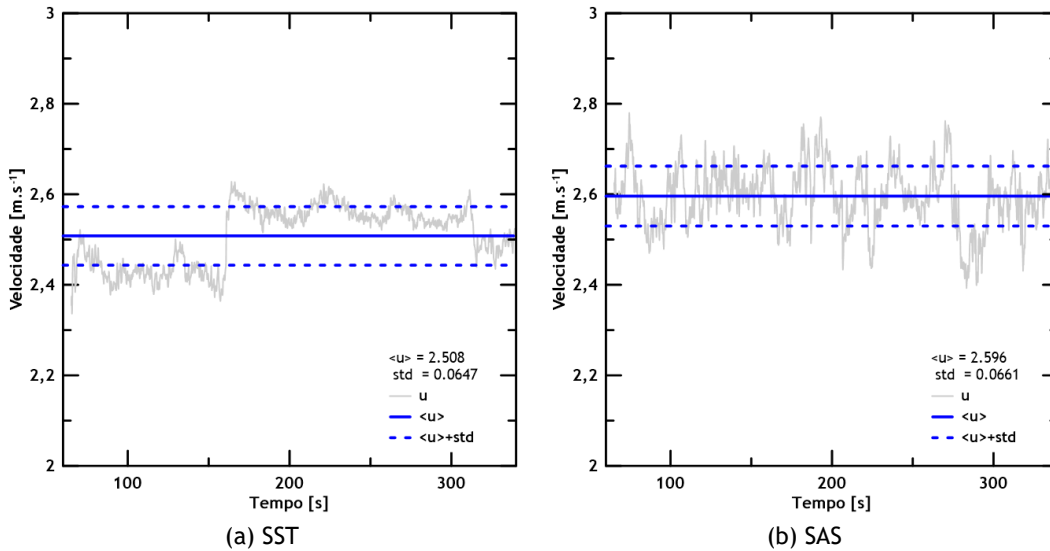


Figura 6.7: Valores da magnitude da velocidade normalizada para os pontos monitores (d) e (e). Para o ponto (d) $\bar{u}_n = 0,2052 \text{ m.s}^{-1}$. Para o ponto (e) $\bar{u}_n = 0,2022 \text{ m.s}^{-1}$. O desvio padrão é de 3% para o ponto (d) e de 2% para o ponto (e). A figura (a) é com o modelo SST e a figura (b) com o modelo SAS, o que mostra o carácter mais flutuante da solução deste último.

6.5.1.1 Estabilidade da solução

De forma a aferir se o campo de velocidades e momentos aplicados está estável ao longo do tempo, utilizamos os monitores anteriormente referidos e analisamos o seu comportamento durante algum tempo. A zona das hélices necessita de muita atenção no que toca às flutuações existentes ao longo do tempo, para tal a Figura 6.7 mostra-nos para ambos os modelos a variação da velocidade do escoamento nos pontos (d) e (e), sendo que correspondem à saída e entrada da zona de rotação, respetivamente.

O momento aplicado nas pás superiores é mostrado num extrato temporal na Figura 6.8. Este valor é negativo, como esperado, pois as pás superiores rodam no sentido contrário ao ponteiro do relógio, o que pelas convenções é o sentido negativo de rotação. Das variações dos momentos vemos que as flutuações no modelo SAS são mais pronunciadas, contudo em ambos os casos o seu desvio médio é menor que 1% do valor médio do momento. Quando se analisa este tipo de câmaras, é usual a referência a números adimensionais para proporcionar uma melhor percepção sobre a variação das grandezas. Por exemplo para a velocidade define-se uma velocidade normalizada, u^* , dada por:

$$u^* = \frac{u}{u_{tip}} \quad (6.4)$$

Onde u_{tip} é a velocidade da ponta das pás, dada por:

$$u_{tip} = \frac{D}{2} \cdot \frac{2\pi N}{60} = \frac{\pi DN}{60} \quad (6.5)$$

Normalizamos pela velocidade da ponta das pás pois pressupõe-se que esta seja a maior velocidade que é imposta mecanicamente ao escoamento, pois não são impostos nem gradientes de pressão adversos nem de temperatura.

A Figura 6.9 mostra-nos alguns valores da magnitude da velocidade normalizada (ou adimensiono-

Estudos sobre a Uniformização do Escoamento em Câmaras de Mistura usando CFD

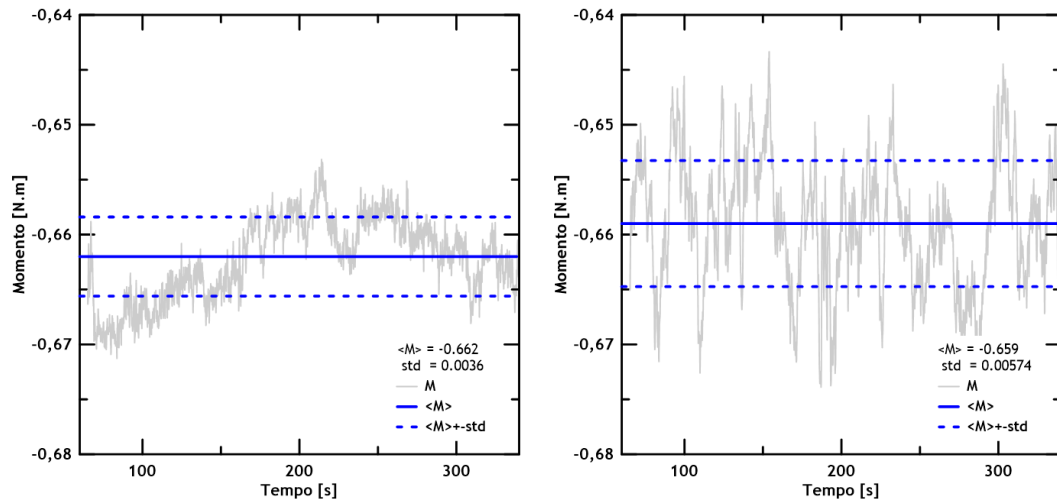


Figura 6.8: Momento aplicado nas pás da hélice superior (a) Extração da variação do número de potência ao longo de 300 segundos (corresponde a quase 2000 rotações) $\langle M \rangle$ é o valores médio das flutuações e std é o desvio padrão para a amostra retirada.

nal). Estes valores correspondem à variação ao longo de linhas horizontais, para nos mostrarem a variação radial da velocidade a diferentes alturas. Da Figura 6.9 analisamos que as variações dos modelos de turbulência residem principalmente na região central. Ainda é de notar os efeitos nas escalas da velocidade, ou seja, devemos reparar que enquanto nas regiões das hélices temos uma escala de 0 a 1, na região central da câmara temos 1/20 da escala (0 a 0,05). Isto é natural pois da geometria da câmara anteriormente descrita pode ver-se que o diâmetro da hélice é cerca de 0,2 vezes menor que o diâmetro da câmara. Como sabemos que a velocidade, pela equação da continuidade, varia com o quadrado do diâmetro, o quadrado de 0,2 é 0,04. Por esta razão podemos aferir que o campo de velocidades está com as grandezas corretas para esta geometria.

Outras análises podem ser feitas à velocidade, nomeadamente às componentes desta. Na Figura 6.10 podemos ver os três primeiros gráficos, que são as componentes axial, radial e tangencial das velocidades da Figura 6.9.

Analisando a velocidade axial é possível verificar que a hélice superior está a elevar o escoamento e a hélice inferior está a baixar. Para a velocidade radial vemos que as hélices têm o mesmo comportamento radial, o que seria de esperar. E por fim, quanto às velocidades tangenciais, vemos nas hélices uma simetria dado que elas estão a girar em sentidos opostos. Em termos de variação do modelo SST e do SAS parece ser nas velocidades radiais que estes mais se diferenciam.

Contudo ainda é apresentado um gráfico da energia cinética turbulenta. E é aqui que se nota uma grande disparidade, tal que, o modelo SAS para toda a câmara é inferior ao modelo SST. Mas de notar os picos com a mesma magnitude nas hélices. Isto mostra que esta é a fonte dos turbilhões e a alimentação dos grandes vórtices.

Para ser melhor visualizada a diferença entre o modelo SST e SAS para a energia cinética turbulenta podemos ver a Figura 6.11.

6.5.1.2 Verificação da resolução da camada limite

Na Figura 6.12 podemos ver os contornos da distância adimensional y^+ . Analisando, vemos que a maioria dos valores se encontra dentro da gama requerida (30 a 300) contudo, devido

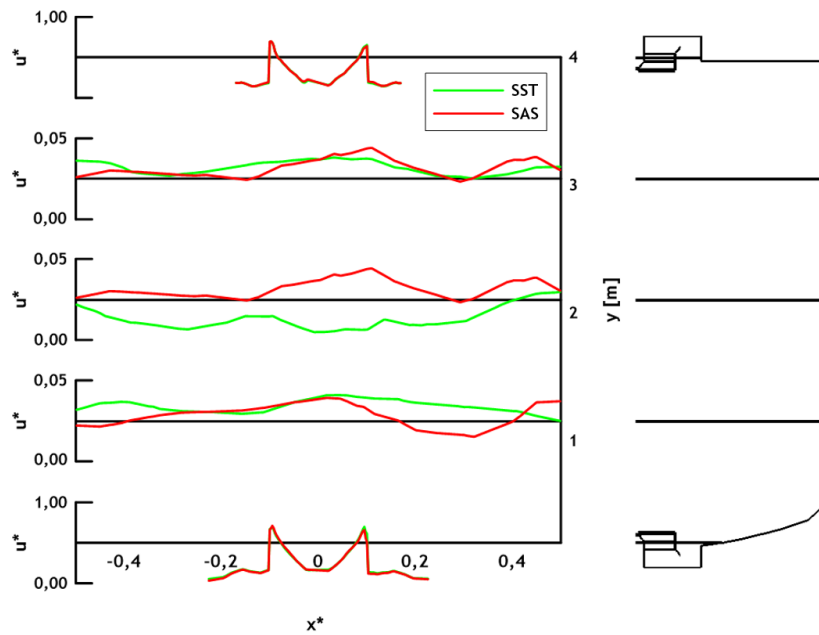


Figura 6.9: Variação da velocidade adimensional u^* para os modelos SST e SAS em diferentes alturas da câmara, ao longo da direção radial $x^* = x/T$, para cinco alturas diferentes que correspondem às linhas de corte na figura da direita.

à existência de velocidades baixas, nomeadamente no cubo da hélice e na zona de saída, os valores estão um pouco abaixo de 30. Estes valores baixos já eram esperados pois não foi possível inflacionar células o suficientemente grandes a partir destas zonas sem deteriorar a qualidade da malha.

Apesar de alguns pontos da câmara terem valores fora da gama recomendada para a utilização da função de parede, como a parte de foco neste estudo é a difusão no global da câmara, as zonas da parede não nos interessam muito.

6.5.2 Caso de estudo complementar à validação do campo de velocidades

Recentemente, a câmara foi sujeita a testes de escoamento de ar para aferir o campo de velocidades criado. Tivemos acesso a alguns destes resultados [54]. Assim foram montados dois casos de teste em que apenas é imposto um caudal de Ar. O caudal na experiência foi variado, mas aqui foi escolhido o máximo, que corresponde a um $Q = 350 \text{ l.m}^{-1}$.

Como procedido anteriormente da Equação 6.2, retirámos uma velocidade de entrada igual a $u_{Ar} = 0,527 \text{ m.s}^{-1}$. A velocidade de rotação das zonas MRF foi colocada a zero, pois nos ensaios experimentais não estavam em funcionamento. A saída é a mesma que anteriormente discutida. A metodologia numérica foi mantida igual ao caso de teste anterior, inclusive o mesmo passo de tempo que foi igual a 0,01 segundos.

A simulações foram feitas tanto para o modelo SST e com SAS. Sendo que para ambas foi calculado um tempo total de escoamento igual a aproximadamente 240 segundos (4 minutos de tempo total). Com estes 240 segundos as velocidades estabilizaram para ambos os modelos. A comparação dos resultados pode ser visualizada na Figura 6.13. Observe-se que o modelo SAS gera uma quantidade significativamente maior de vórtices enquanto que o modelo SST quase que faz linhas de corrente lineares. No plano de corte é notório que no modelo SST a velocidade vai sendo menor, no sentido radial, a partir do ponto onde a injeção de ar passa diretamente

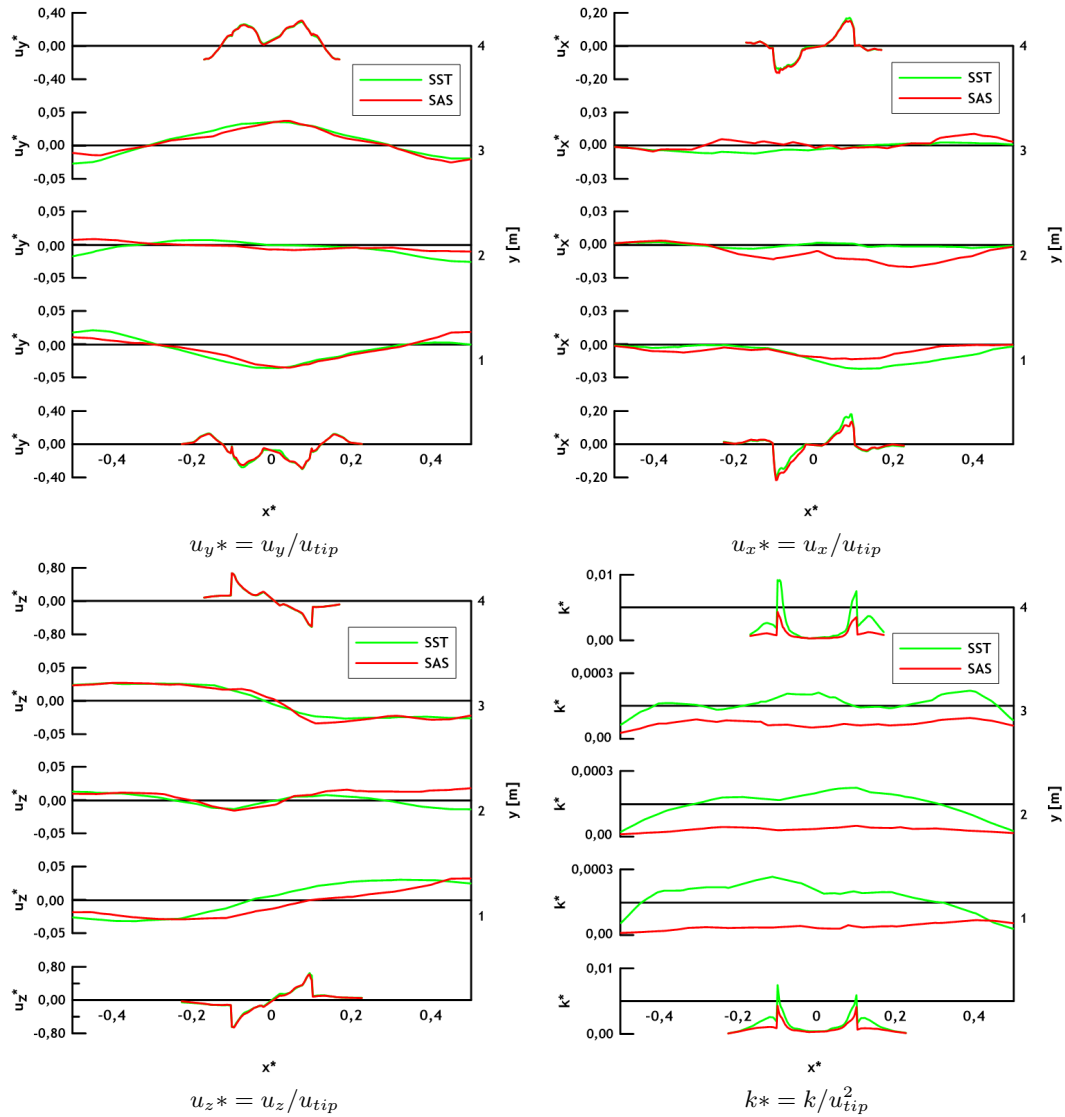


Figura 6.10: Variação das diferentes componentes da velocidade para diferentes alturas da câmara e ainda a energia cinética turbulenta. As velocidades são normalizadas pela velocidade da ponta das pás e a energia cinética turbulenta pelo quadrado da velocidade da ponta das pás. Sendo que: u_y^* é a velocidade axial adimensional; u_x^* é a velocidade radial adimensional; u_z^* é a velocidade tangencial adimensional e k^* a energia cinética turbulenta adimensional.

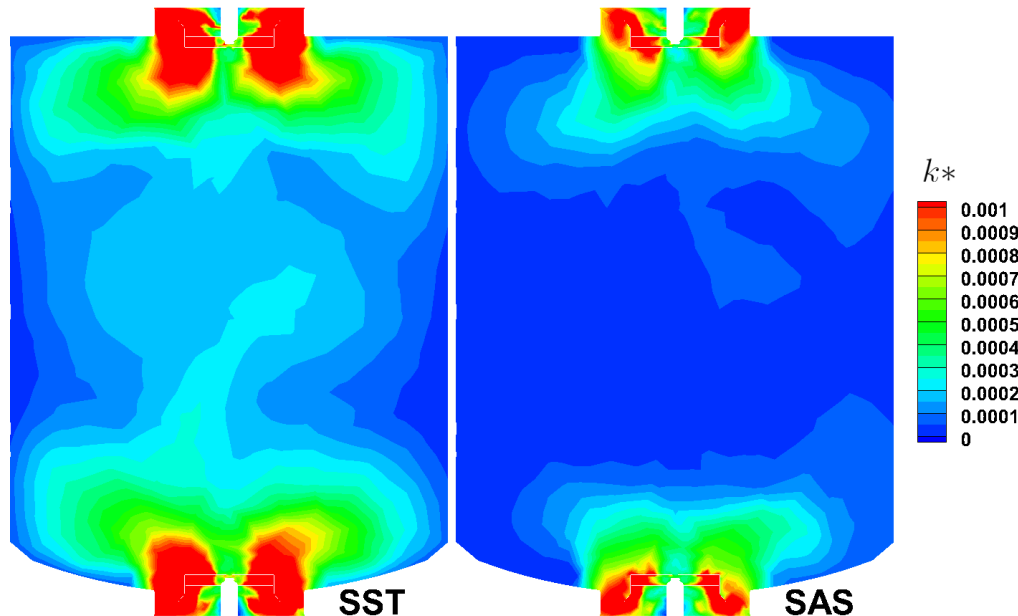


Figura 6.11: Visualização da energia cinética turbulenta adimensional [$k^* = k/(u_{tip}^2)$] para o tempo de 340s. Dados apresentados num plano de corte vertical pelo meio da câmara.

enquanto que o modelo SAS apresenta uma distribuição menos linear.

Para ambos os casos foram retirados os valores das velocidades absolutas numa linha horizontal (que é mostrada na Figura 6.13). Estas velocidades serão comparadas com as medidas experimentalmente para as mesmas condições de funcionamento. Para estas condições de funcionamento foram medidas as velocidades com um anemómetro, colocado a 2,1 metros de altura. Mediu-se a velocidade do escoamento no sentido radial, para metade da câmara, i.e., mediram de 0 cm a 150 cm (sendo que o diâmetro da câmara é 300 cm). Estas medições tiveram de avançar o anemómetro a baixa velocidade para não introduzir velocidades radial parasita.

Foram feitas seis leituras corridas, três de 150 cm a 0 cm e as outras três no inverso. Devido à existência de turbulência, ou seja, um regime não estacionário, as leituras têm flutuações. Por esta razão foram retiradas de oito posições (distâncias radiais), nomeadamente, para posições $r_d = (0; 20; 40; 50; 80; 90; 120; 130; 150)[cm]$. Assim consegue-se tirar seis pontos de velocidade para uma distância radial r_d e calcular o seu valor médio e o desvio para cada ponto.

Feito isto foi produzido o gráfico da Figura 6.14, onde foram introduzidos 100 pontos retirados da linha de medição acima descrita.

O comportamento da velocidade quando se comparam os resultados experimentais e os calculados pelas simulações parece ser coerente. Calculada a média para cada uma temos que os valores experimentais têm uma velocidade média de $\bar{u}_{exp} = 3,31 \text{ cm.s}^{-1}$, o modelo SST apresenta $\bar{u}_{SST} = 2,60 \text{ cm.s}^{-1}$ e o modelo SAS $\bar{u}_{SAS} = 2,90 \text{ cm.s}^{-1}$.

Em termos relativos o modelo SST apresenta um desvio de aproximadamente 21,5% e o modelo SAS um desvio de aproximadamente 12,4%. Significando que o modelo SAS foi capaz de se aproximar melhor aos dados, como seria de esperar.

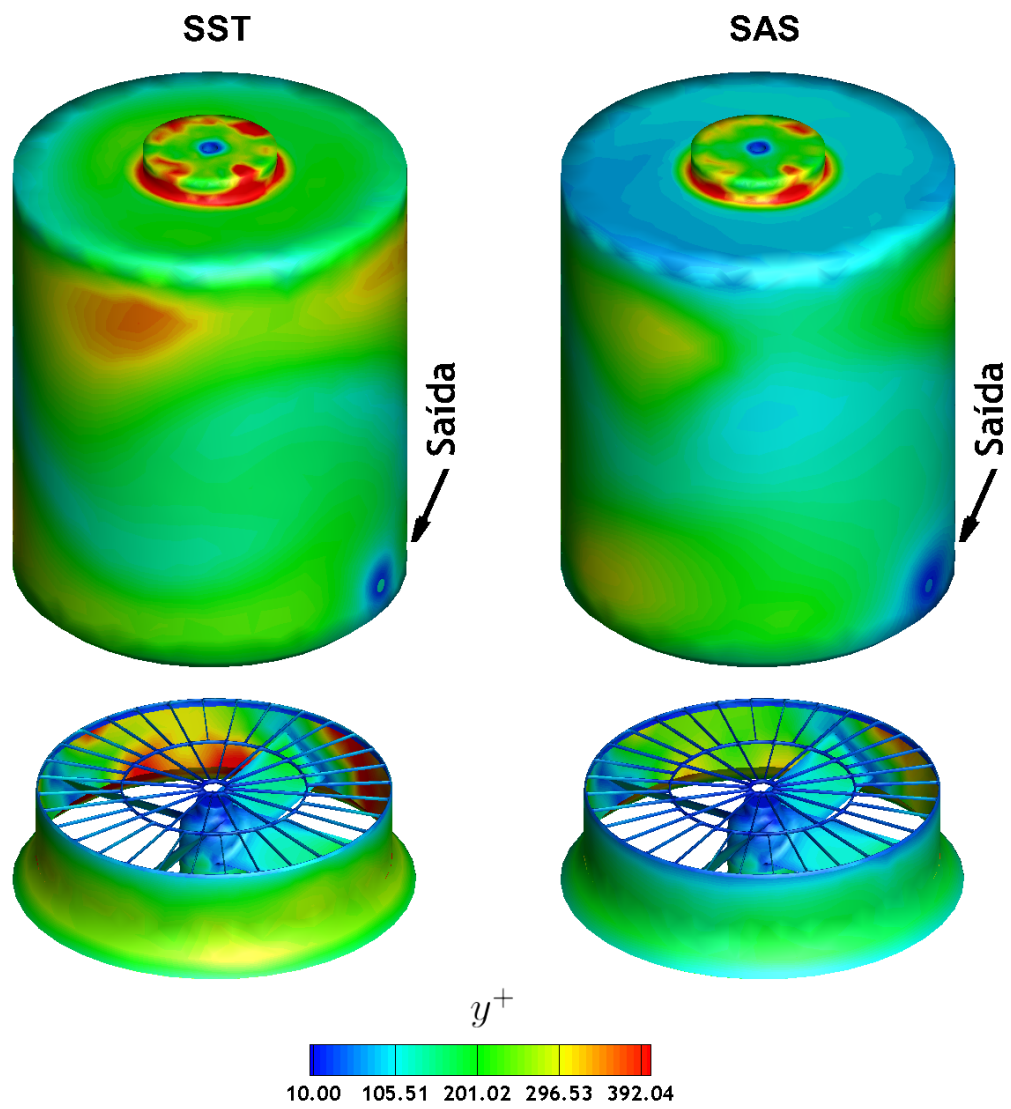


Figura 6.12: Visualização dos valores de y^+ . Em cima temos os contornos na parte exterior da câmara. Em baixo temos o estator e a hélice inferior. Tempo de escoamento de 340 segundos.

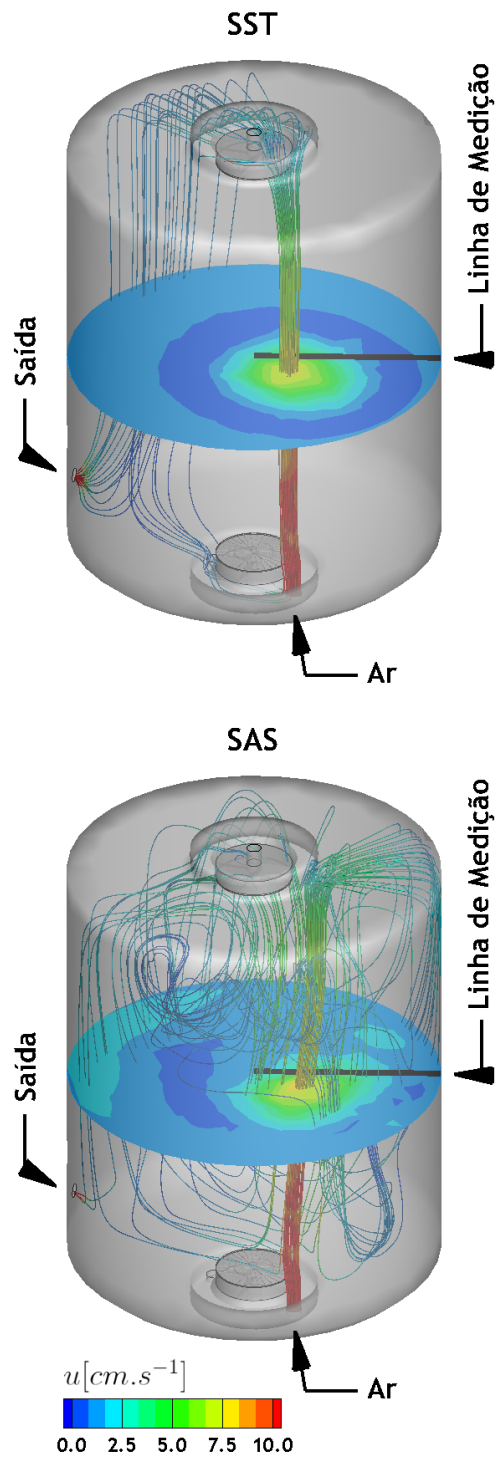


Figura 6.13: Visualização das linhas de corrente com início na entrada de ar até à saída da câmara. A coloração é feita com a variação da magnitude da velocidade absoluta. Apresenta-se igualmente um corte horizontal, para uma altura de 2,1 metros, sobre o qual é representada a linha na qual foram retirados os dados das velocidades para comparação com os experimentais. Tempo de escoamento de 240 segundos.

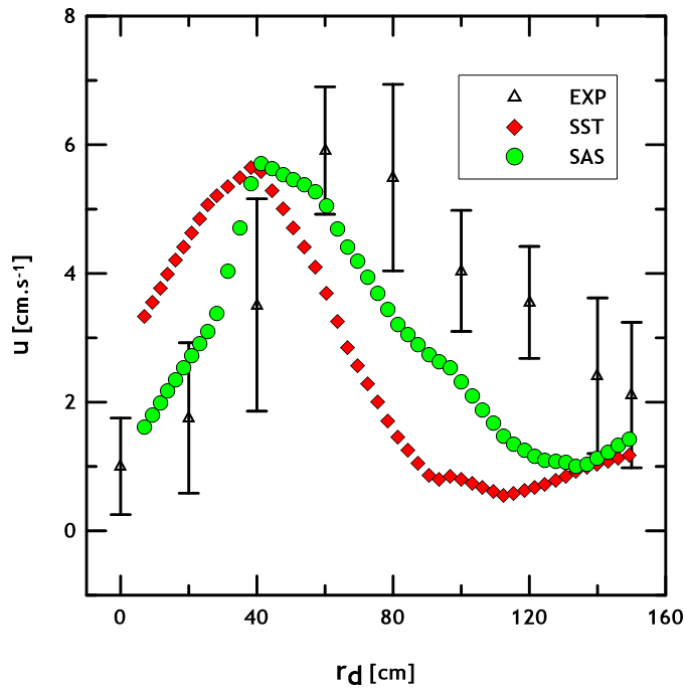


Figura 6.14: Gráfico da velocidade absoluta do escoamento (u), em função da distância radial (rd), da linha horizontal referida na Figura 6.13. Aqui compara-se os dados experimentais facultados e os resultados para os casos de teste com o modelo SST e o SAS. Tempo de escoamento de 240 segundos. Dados experimentais facultados pela equipa da experiência CLOUD [54].

6.5.3 Distribuição espacial e temporal das concentração de SO_2

Aqui será mostrada a variação espacial e temporal das concentrações de SO_2 na câmara CLOUD. Para tal é feito uso do parâmetro de uniformização (anteriormente discutido). Para o cálculo é utilizada a fração volumétrica, ξ .

$$U(t) = 1 - \frac{\xi_t - \xi_f}{\xi_f} \quad (6.6)$$

Na Figura 6.15 podemos ver esta uniformidade para o modelo SST e SAS. Desta é possível visualizar como o gás SO_2 segue a rotação do escoamento. Vemos que existe uma concentração de SO_2 acima da entrada na câmara e depois é dispersado.

Em ambos os modelos vemos que existe uma acumulação de SO_2 na zona traseira das pás. Isto é comum nas câmaras de mistura onde os gases ficam “presos” na zona de rotação e não se dispersam no domínio. Comparando os dois modelos vemos que o SAS apresenta uma maior uniformidade junto à parede, sendo que como o escoamento é tangente às paredes dá uma boa ideia da uniformização dentro desta.

A Figura 6.15 mostra a variação da uniformidade para dois passos de tempo, de forma a poder ser visualizada a forma como se distribui. Nesta figura também são mostrados os valores médios da uniformidade e da sua variância espacial neste plano e para cada tempo. A variância espacial, σ , foi determinada com a seguinte fórmula:

$$\sigma^2 = \frac{1}{N_{i,k}} \sum_{i,k=1}^{N_{i,k}} (U_{i,k} - \bar{U})^2 \quad (6.7)$$

De forma a ser possível calcular o desvio das concentrações, foi imposto que as zonas com concentrações superiores ao limite de 5ppmv sejam consideradas zonas com uma uniformidade igual à unidade.

Se considerarmos uma distribuição gaussiana, tal que:

$$f(U) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{U-\bar{U}}{\sigma}\right)^2} \quad (6.8)$$

Podemos visualizar a uniformização média na Figura 6.16. Nesta vemos que, para os dois passos de tempo, o modelo SAS apresenta um deslocamento para maiores valores de uniformidade. De notar que na Figura 6.16 a prolongação das curvas para valores negativos de Uniformidade representa que existem zonas onde o SO_2 não existe. Para melhor perceção da uniformidade na câmara foram feitos quatro cortes horizontais, linearmente espaçados, para alturas de $y[m] = (0, 2; 1, 2; 2, 1; 3, 1; 4, 0)$, como pode ser visto na Figura 6.17. Note-se que agora a concentração final, ξ_f , de SO_2 foi colocada a 1ppmv, dado que concentração final as concentrações são muito mais pequenas que na zona de rotação da hélice inferior devido à inicial acumulação nesta. Da Figura 6.17, podemos ver como o SO_2 segue as linhas de corrente e que com o passar do tempo os níveis de corte mais altos vão ficando cada vez mais uniformizados. A variação desta uniformização pode também ser calculada

Na Figura 6.18, foi calculada a uniformidade média em cada corte, para as diferentes alturas, sendo que, como descrito na legenda, foram acrescentados mais uns cortes intermédios de forma a conseguirmos ter uma melhor visualização gráfica. Vemos assim que existe uma maior concentração na zona inferior do que nos cortes superiores, mesmo para 340 segundos de escoamento. O que parece acontecer é que existe uma grande acumulação na zona inferior que não se está a propagar ao mesmo ritmo para a zona superior. Ou seja, note-se que a variação da Uniformidade no corte mais baixo, em 240 segundo, foi de 20%, aproximadamente enquanto que no corte mais superior teve um aumento de 5%, aproximadamente. Para a mesmas condições observam-se alguns fenómenos interessantes quando se via a uniformidade perto das paredes da câmara. Veja-se a Figura 6.19, onde temos os contornos da uniformidade no lado dianteiro da câmara e para o lado traseiro, sendo claramente mostradas as diferenças entre os modelos SST e SAS.

Na Figura 6.19 superior reparamos que existe uma grande concentração de SO_2 na zona inferior, em que se repara num grande vórtice que está a misturar o SO_2 contudo parece não estar a ter a difusão que o SAS apresenta. No SAS não existe a grande uniformidade na zona inferior mas existe sim uma maior distribuição espacial pela câmara toda. Na zona traseira (Figura 6.19 inferior) é extremamente visível o alongamento dos elementos fluidos por um grande vórtice anisotrópico, no modelo SST. Este grande vórtice não está a facilitar a mistura das partículas deixando separadas as zonas de Ar e de SO_2 . Já no modelo SAS não encontramos estas estruturas grandes mas sim umas mais pequenas com uma maior isotropia que oferece a mistura das duas fases (pois está a ser espalhada a cor verde)

6.5.4 Análise tridimensional

Até aqui foi analisado o comportamento do escoamento e a variação da uniformidade apenas em superfícies ou cortes sob o domínio. Agora serão analisadas as estruturas tridimensionais e os percursos que as partículas têm.

De forma a visualizar os vórtices podemos recorrer ao critério Q_{cr} e visualizar as iso-superfícies

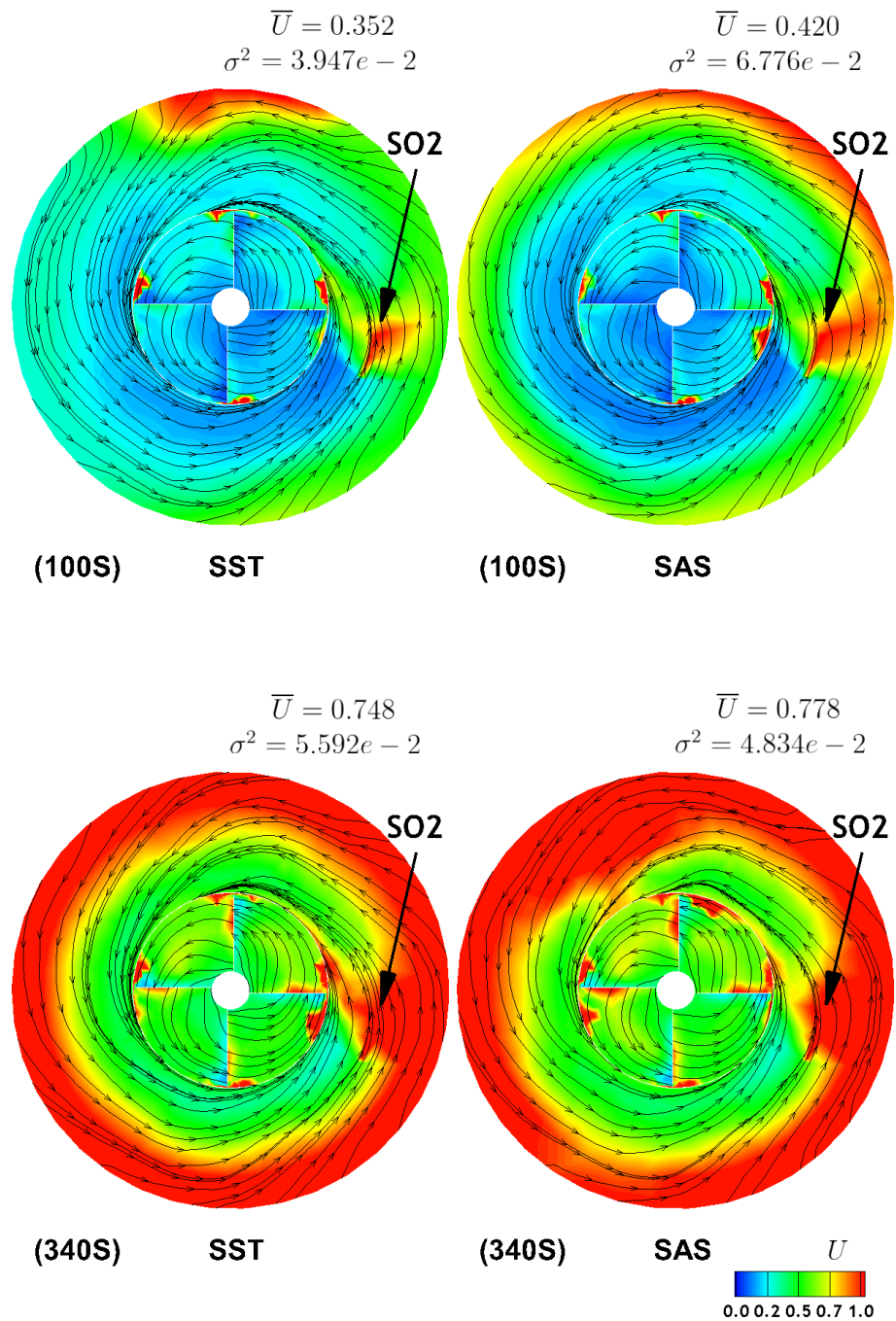


Figura 6.15: Contornos da Uniformidade para uma concentração final de 5 ppmv num plano de corte em $y=0,2$ m (através das hélices inferiores) com linhas de corrente no plano de corte.

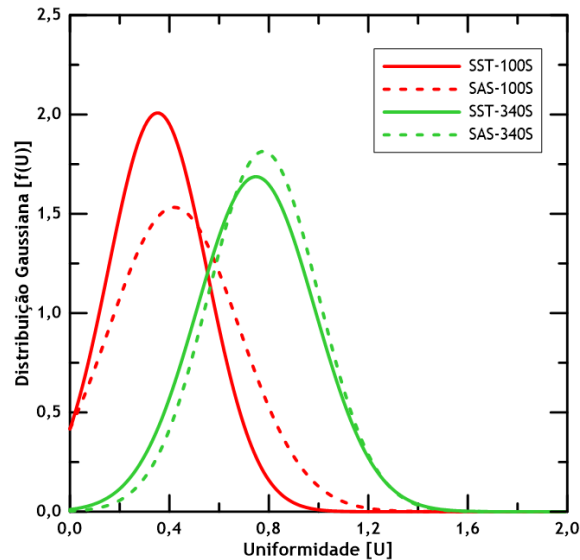


Figura 6.16: Distribuição normal da uniformidade segundo os parâmetros médio e desvios apresentados na Figura 6.15. A verde apresenta-se a distribuição para um tempo de escoamento igual a 100 segundos e a vermelho para 340 segundos.

que contem o mesmo valor, ver Figura 6.20. A figura referida apresenta as iso-superfícies para um $Q_{cr} = 0,5 \text{ s}^{-2}$ e conseguimos ver que o modelo SAS apresenta uma maior divisão das estruturas, por exemplo, na parte superior temos uma estrutura grande que se vai separando em mais pequenas enquanto que no SST a estrutura permanece grande.

As linhas de corrente são percursos (curvas) definidos para um ponto sem massa que segue um caminho consoante a velocidade tangencial do escoamento para cada local do domínio. A Figura 6.21 mostra-nos a linhas de corrente que atingem a saída da câmara. Ao colorir estas linhas de corrente consoante a uniformidade local do escoamento podemos ver que o escoamento sai bem uniformizado .

6.6 Sumário da análise à câmara de mistura

O caso complementar, onde apenas foi simulada a entrada e saída de ar, demonstrou logo diferenças entre os modelos SST e SAS. O modelo SST novamente apresenta comportamentos pouco flutuantes devido a captar apenas os grandes vórtice enquanto que o modelo SAS consegue captar mais estruturas de vórtice (ver linhas de corrente da Figura 6.13). Estas flutuações, resolvidas pelo modelo SAS, proporcionam resultados mais próximos dos medidos, tal que o desvio da média da velocidade foi de apenas 12,4%, para aquela linha de medição. Estes 12,4% são aceitáveis considerando a complexidade da geometria, sendo desejável afinar o modelo e a malha para melhores resultados.

Os casos de teste, com as hélices em funcionamento, mostraram uma grande acumulação de gás SO_2 na zona inferior, ficando este preso e saindo rapidamente para o exterior (ver Figura 6.21). Isto torna-se ainda mais notório para o modelo SST que, devido à fraca resolução das flutuações do escoamento, resolve de forma pouco eficaz a passagem da zona inferior para a superior. (ver Figura 6.22)

A diminuição, do modelo SST para o SAS, da energia cinética turbulenta prevê que mais energia esteja a ser dissipada para mais pequenos vórtices. O que foi mostrado na Figura 6.20, onde o modelo SAS resolve mais estruturas de vórtices.

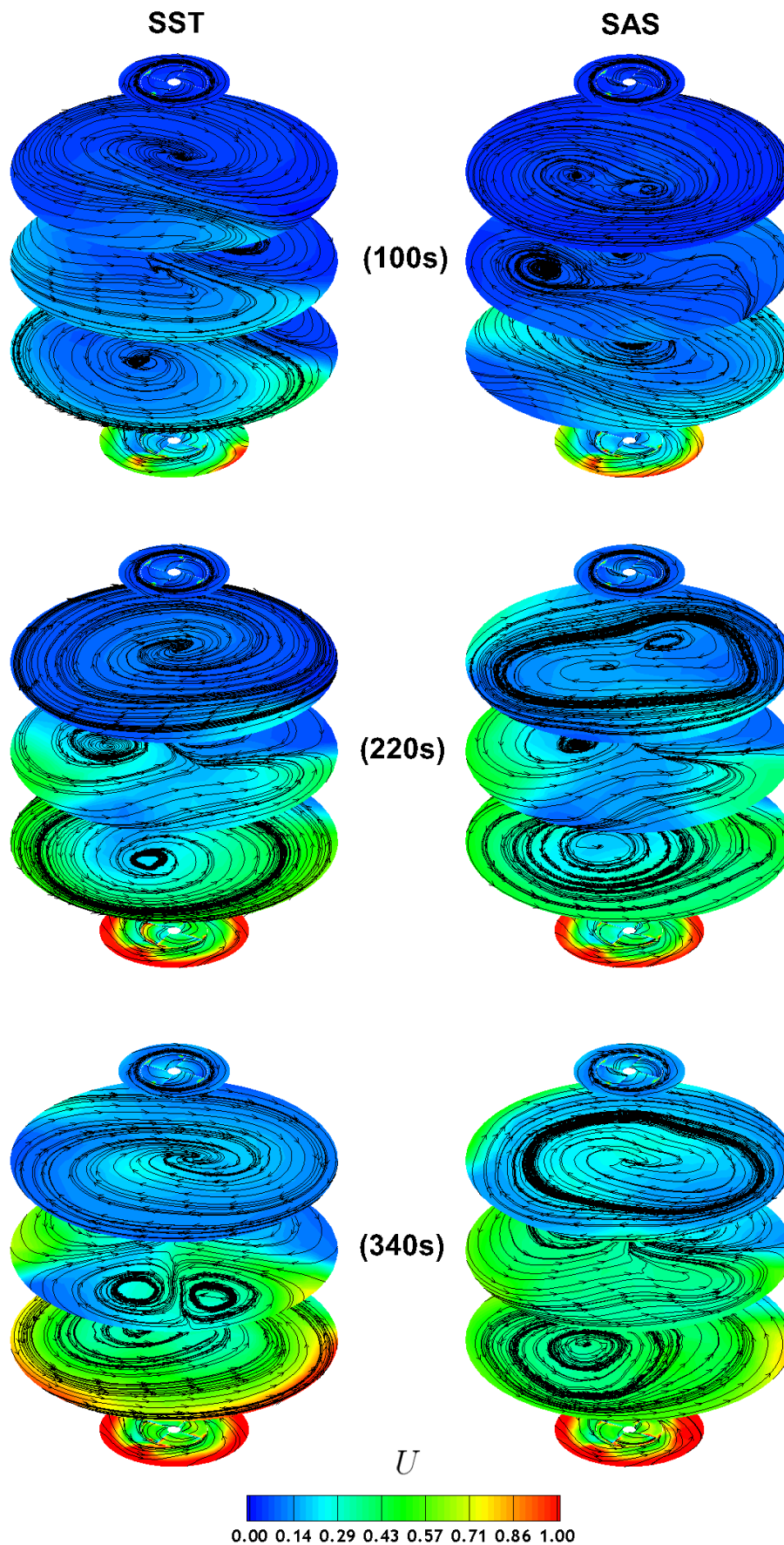


Figura 6.17: Contornos da Uniformidade, para uma fração volumétrica final de 1 ppmv com vetores velocidade no plano de corte.

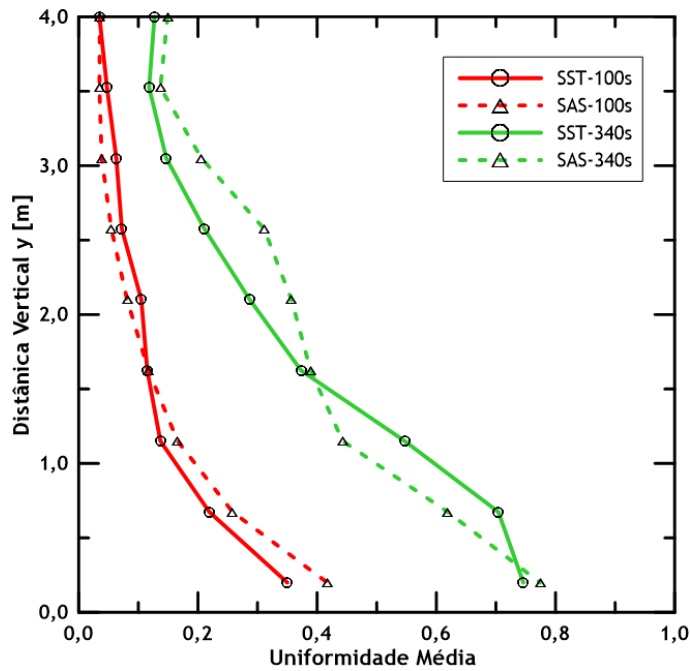


Figura 6.18: Variação da Uniformidade média para os diferentes planos da Figura 6.17 e acrescentados pontos para planos de corte de alturas y [m] = (0,675; 1,625 ; 2,575; 3,525).

Os regimes de 100% da velocidade de rotação das hélices resultaram, para ambos os modelos valores de y^+ razoáveis, apesar de estarem alguns fora do limite de 30 a 300. Podemos dizer que temos uma aceitável aplicação da função de parede, através da equação de intermitência resolvida em ambos os modelos. Contudo, se for testada esta malha para valores de rotação das hélices inferiores é esperado que os valores de y^+ fiquem fora da região admissível.

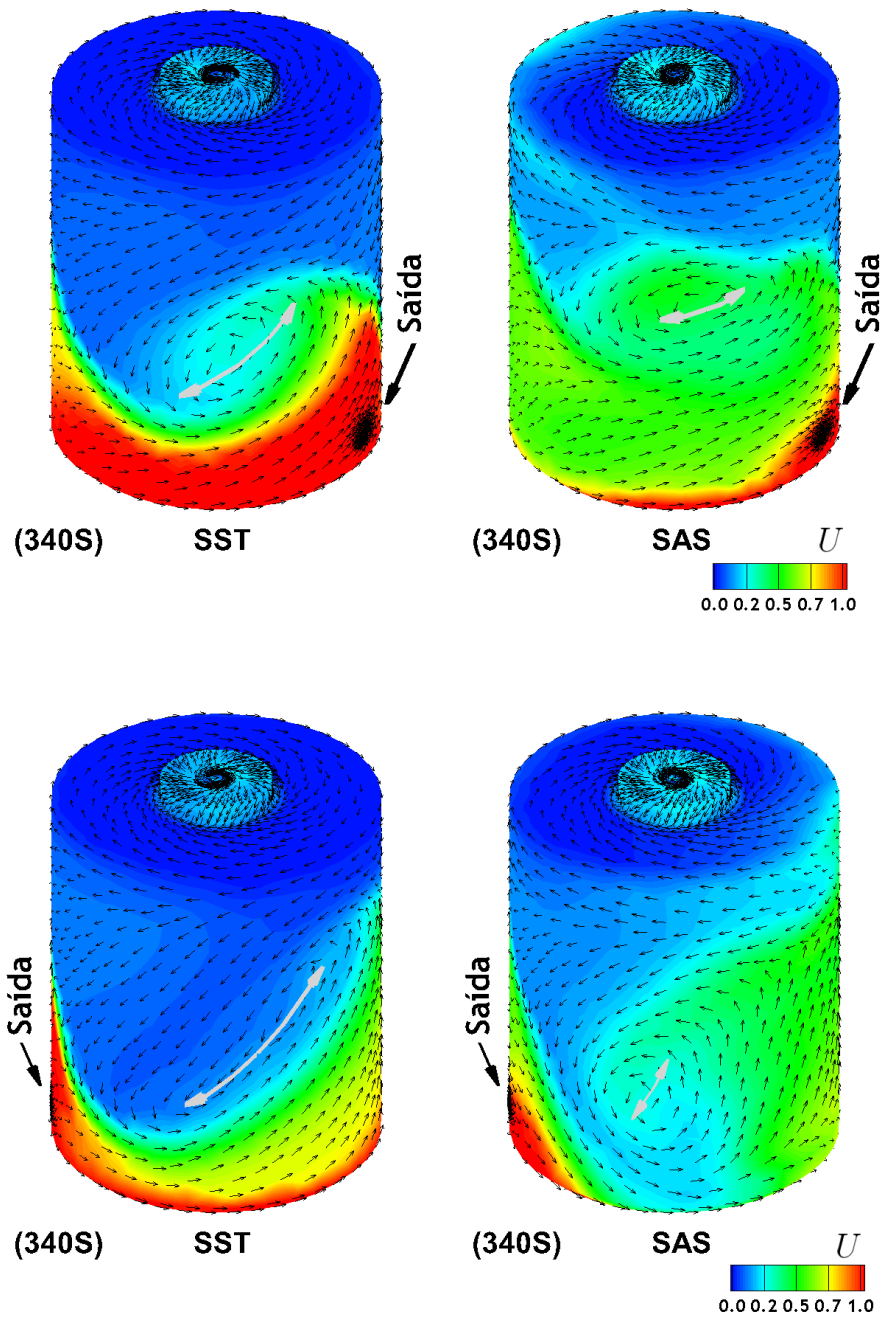
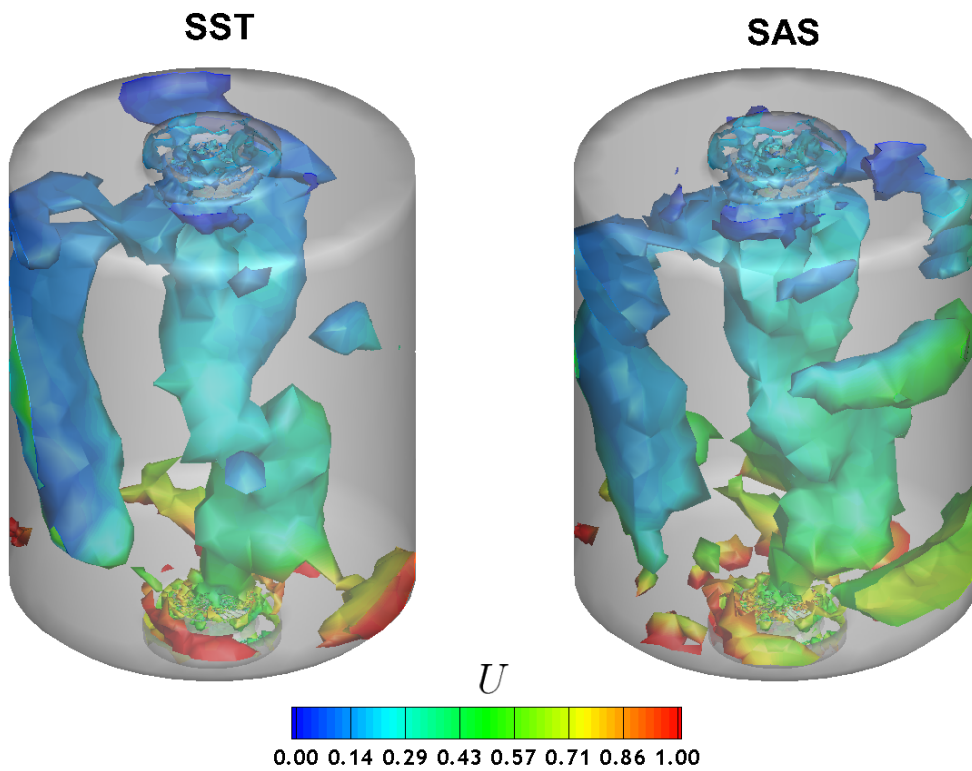
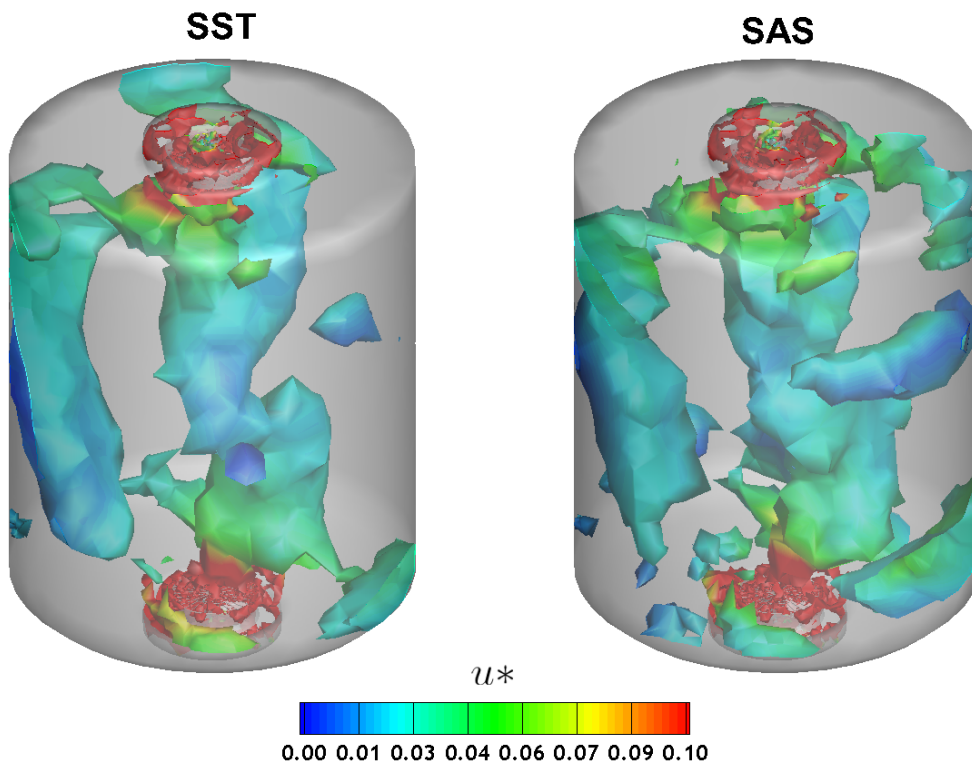


Figura 6.19: Visualização dos contornos da Uniformidade junto às paredes da câmara. Em cima, apresenta-se a comparação dos modelos com visualização das faces dianteiras da câmara. Em baixo temos a visão do lado oposto da câmara, que denominamos por traseira.



(a)



(b)

Figura 6.20: Visualização das iso-superfícies com um valor de $Q_{cr} = 0,5 \text{ s}^{-2}$. (a) Iso-superfícies coloridas pela uniformidade, calculada para uma concentração final de $\xi_f = 1 \text{ ppmv}$. (b) Iso-superfícies coloridas para a velocidade adimensional u^* .

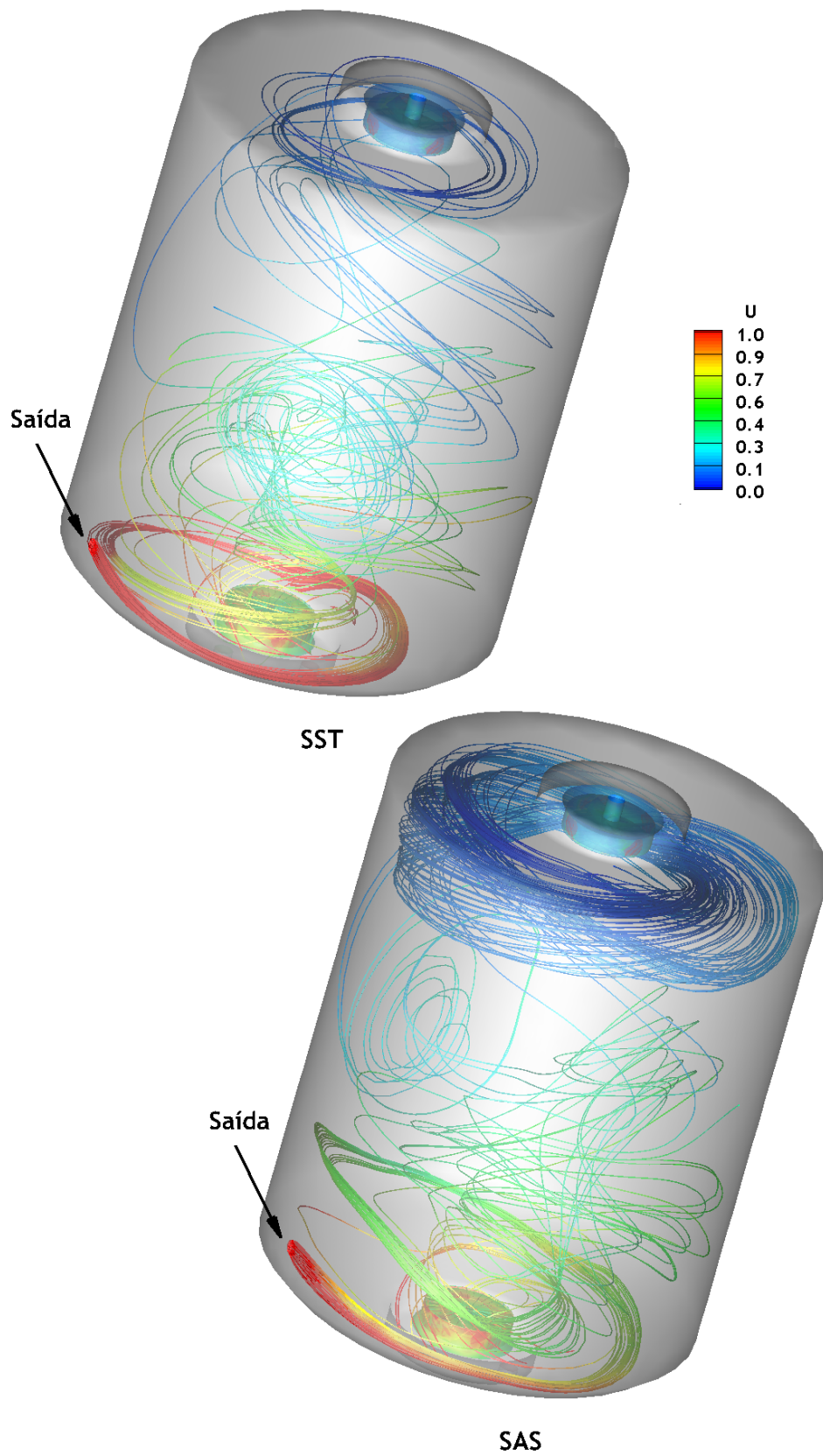


Figura 6.21: Visualização das linhas de corrente que intersectam a saída, com uma integração de 2,5 metros. As linhas são coloridas pela função da uniformidade U , calculada para uma concentração final de $\xi_f = 1 \text{ ppmv}$.

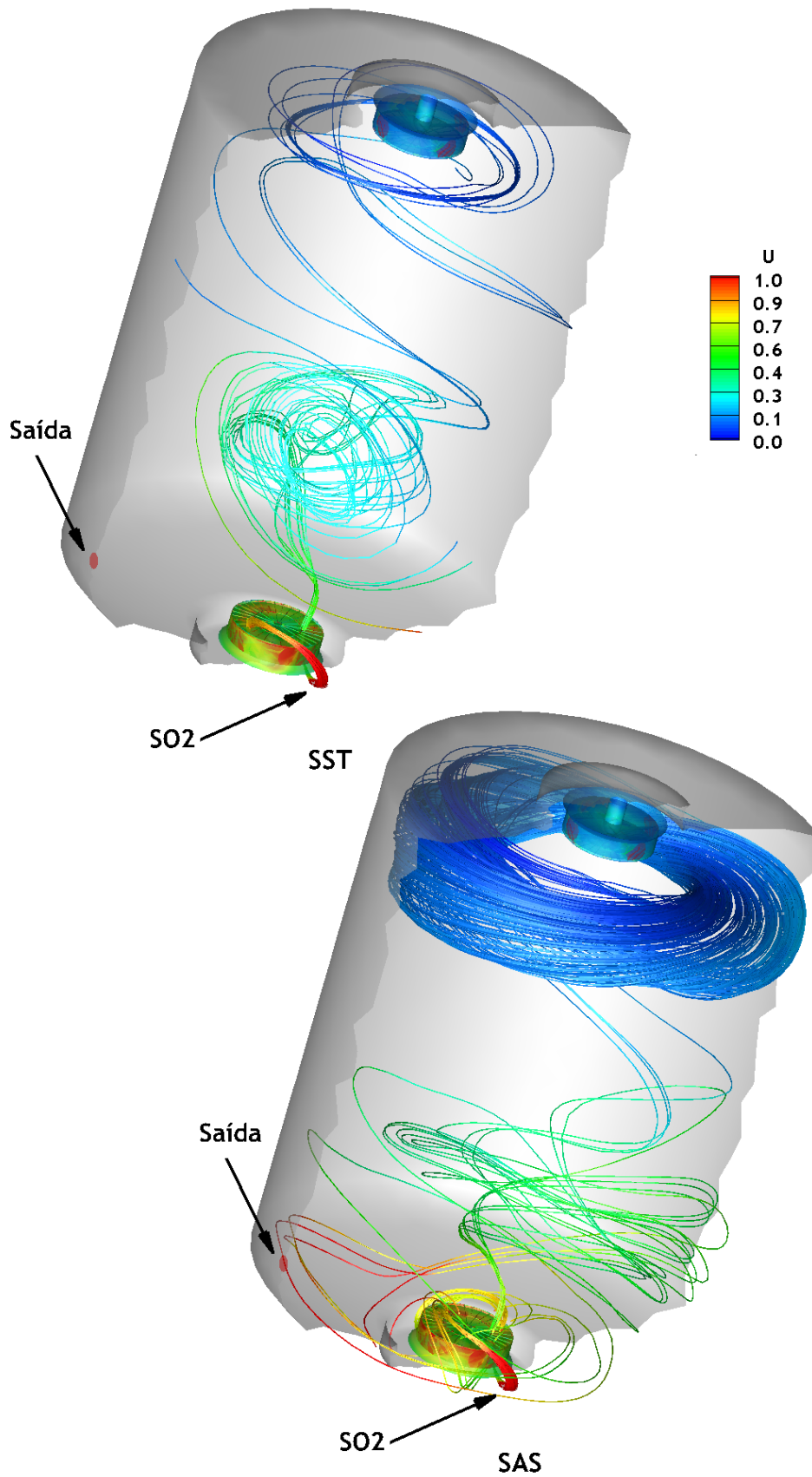


Figura 6.22: Visualização das linhas de corrente que partem da entrada do gás SO_2 , com uma integração de 2,5 metros. As linhas são coloridas pela função da uniformidade U , calculada para uma concentração final de $\xi_f = 1 \text{ ppmv}$.

Capítulo 7

Conclusão

Neste capítulo serão apresentadas algumas das conclusões pertinentes do trabalho desenvolvido e também algumas propostas de trabalhos que devem ser produzidos no futuro.

O caso de teste para a validação do modelo multifásico mostrou que a utilização de malhas híbridas é capaz de resolver de forma eficaz as regiões da parede e sem a necessidade da divisão em diversos subdomínios, que seria necessário caso fosse utilizada uma malha estruturada. Com esta malha foi possível a completa implementação da malha na parede, resolvendo a camada limite, com y^+ perto da unidade.

Em termos de validação do modelo MIXTURE (com a junção em T) foi mostrada a coerência entre os desvios das concentrações das gases com os resultados da literatura, contudo, foi observada (perante os resultados experimentais) uma melhoria com a utilização do modelo SAS, que mostrou um desvio máximo de 7%, em comparação com o SST, que mostrou um desvio máximo de 13%.

A resolução da camada limite completa não foi possível para a câmara de mistura devido à complexidade da geometria e necessidade de uma grande quantidade de memória para o fazer. Neste sentido, foi utilizada a abordagem de função de parede, com valores de y^+ de 30 a 300 que resultou de uma forma geral em valores aceitáveis embora tenha embora tenha impacto na precisão dos resultados junto das paredes.

A uniformização da câmara e as estruturas do escoamento criadas mostraram-se dependentes do modelo de turbulência utilizado. A modelação com o SST, devido à natureza RANS, não providencia a resolução de grande parte das flutuações existentes no escoamento. Sendo que como estas flutuações são importantes para que as diferentes fases do escoamento sejam misturadas de forma realista.

Em ambos os casos de teste a energia cinética turbulenta apresenta uma significativa variação entre os modelos de turbulência aplicados. Particularmente, para ambos, esta é sempre superior quando utilizado o modelo SST, o que faz querer que o aumento da resolução de cada vez mais pequenas escalas turbulentas a energia cinética turbulenta que é produzida diminui nas grandes escalas pois tem de se dissipar para as mais pequenas.

Assim, a escolha do modelo de turbulência a utilizar deve ser cuidadosa e é um facto que terá de ser considerado um aumento de fidelidade dos resultados numéricos usados para simular a câmara da experiência CLOUD.

7.1 Trabalhos futuros

O primeiro passo que propomos é para ambos os casos de teste (junção T e câmara de mistura) proceder a um estudo mais extensivo sobre a independência de malha, para calcular o erro associado à discretização da malha de cálculo. Saber o erro de discretização é feito refinando a malha de cálculo aqui utilizada e ver a diferença entre os resultados. Este trabalho deve ser feito no interior do domínio com cuidado, dado ter impacto sobre as estruturas de vórtices mais pequenas.

Estudos sobre a Uniformização do Escoamento em Câmaras de Mistura usando CFD

Em segundo lugar sugere-se um estudo paramétrico. Neste estudo devem ser estudadas as diversas variáveis do sistema, nomeadamente, as magnitudes dos caudais de entrada, as velocidades de rotação das hélices e também para as seis possíveis configurações de direção de rotação. Isto deve ser feito para saber as melhores condições de funcionamento para os testes da experiência CLOUD. Contudo, aconselha-se, a que este estudo seja feito apenas depois de feito o estudo exaustivo de independência de malha e comparação de casos de teste com experimentais.

Um trabalho interessante é resolver completamente a camada limite, ou seja, discretizar a malha de cálculo de forma a obter um y^+ perto de um (como procedido para a junção em T). Contudo será um trabalho deveras complexo que requer muita memória computacional e ainda muito tempo de processamento.

Por fim, ainda pode ser testado o modelo de *sliding mesh* e investigar se a resolução transiente da zona de rotação tem influência significativa nos resultados computacionais, em particular analisando os efeitos não estacionários de esteira das pás das hélices.

Bibliografia

- [1] J. Tu, G. H. Yeoh, and C. Liu, *Computational Fluid Dynamics, A practical approach*, ser. ISBN: 978-0-7506-8563-4. Elsevier, 2008. 1, 2, 29
- [2] M. Mory, *Micromixing and Macromixing*, ser. ISBN: 978-1-8421-281-7. John Wiley & Sons, Inc., 2011, ch. 10. 1
- [3] C. E. Brennen, *Flow Patterns*. Cambridge University Press, 2005, ch. 7, pp. 163-195. 1
- [4] E. L. Paul, V. A. Atiemo-Obeng, and S. M. Kresta, *Handbook of Industrial Mixing - Science and Practice*, ser. ISBN: 0-471-26919-0. John Wiley Sons, 2003. 2, 11
- [5] S. Walas, *Mixing and Agitation*, ser. ISBN: 0-7506-9385-1. Butterworth-Heinemann, 1990, ch. 10. 3, 5
- [6] N. Harnby, M. F. Edwards, and A. W. Nienow, *Mixing in the Process Industries*, ser. ISBN: 0-7506-3760-9. Butterworth-Heinemann, 1992. 3
- [7] M. F. Edwards and M. R. Baker, *A review of liquid mixing equipment*, ser. ISBN: 0-7506-3760-9. Butterworth-Heinemann, 1992, ch. 7, pp. 118-158. 3
- [8] EKATO. (2017) Ekato high performance impellers. [Online]. Available: <https://www.ekato.com/en/products/agitator-components/impellers/> 3
- [9] P. Satjaritanun, J. Bringley, E. Regalbuto, J. A. Regalbuto, J. Register, J. W. Weidner, Y. Khunatorn, and S. Shimpalee, "Experimental and computational investigation of mixing with contra-rotating, baffle-free impellers," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 130, pp. 63-770, 2018. 4
- [10] J. M. Ottino, "Mixing, chaotic advection and turbulence," *Annual Reviews Fluid Mechanics*, vol. 22, pp. 207-53, 1990. 6
- [11] M. F. Edwards and M. R. Baker, *Mixing in Single-phase Chemical Reactor*, ser. ISBN: 0-7506-3760-9. Butterworth-Heinemann, 1992, ch. 10. 6
- [12] J. Baldyga, J. R. Bourne, and J. Hearn, S, "Interaction between chemical reactions and mixing on various scales," *Chemical Engineering Science*, vol. 52, pp. 457-466, 1997. 6
- [13] E. Gouillart, "Chaotic mixing by rod-stirring devices in open and closed flows," Ph.D. dissertation, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2007. 7
- [14] CERN. (2012) Experimental configuration during the cloud7 run, october 2012. [Online]. Available: <https://ep-news.web.cern.ch/content/glimpse-cloud-experiment> 8
- [15] E. Dunne, H. Gordon, and *et. al*, "Supplementary materials for global atmospheric particle formation from cern cloud measurements," *Science*, vol. 354, 2016. 8, 9
- [16] H. Wu and G. K. Patterson, "Laser-doppler measurements of turbulent-flow parameters in a stirred mixer," *Chemical Engineering Science*, vol. 44, 1989. 11
- [17] J. J. Derksen, M. S. Doelman, and H. E. A. Van den Akker, "Three-dimensional LDA measurements in the impeller region of a turbulently stirred tank," *Experiments in Fluids*, vol. 27, pp. 522-532, 1999. 12

- [18] A. Bakker and H. E. A. Van den Akker, "Single-phase flow in stirred reactor," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 72, pp. 583-593, 1994. 12
- [19] K. V. Sharp and R. J. Adrian, "Piv study of small-scale flow structure around a rushton turbine," *Fluid Mechanics and Transport Phenomena*, vol. 47, pp. 766-778, 2001. 12
- [20] K. E. Morud and B. H. Hjertager, "Lda measurements and cfd modelling of gas-liquid flow in a stirred vessel," *Chemical Engineering Science*, vol. 2, pp. 233-249, 1996. 12
- [21] J. C. Páscoa, C. M. Xisto, and E. Gottlich, "Journal of mechanical science and technology," *Performance assessment limits in transonic 3D turbune tage blade rows using a mixing-plane approach*, vol. 24, pp. 2035-2042, 2010. 12
- [22] J. J. J. Gillissen and H. E. A. Van den Akker, "Direct numerical simulation of the turbulent flow in a baffled tank driven by a rushton turbine," *American Institute of Chemical Engineers Journal*, vol. 58, 2012. 13
- [23] J. Revstedt, L. Fuchs, and C. Tragardh, "Large eddy simulations of the turbulent flow in a stirred reactor," *Chemical Engineering Science*, vol. 53, 1998. 13
- [24] C. Bartels, M. Breuer, K. Wechsler, and F. Dursts, "Computational fluid dynamics applications on parallel-vector computers: computadtions of stirred vessel flows," *Computers & Fluids*, vol. 31, pp. 69-97, 2000. 13
- [25] F. R. Menter, "Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering aplications," *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, vol. 32, pp. 1598-1605, 1994. 13, 31
- [26] A. R. Coughtrie, D. J. Borman, and P. A. Sleight, "Effects of turbulence modelling on prediction of flow characteristics in a bench-scale anaerobic gas-lift digester," *Bioresource Technology*, vol. 138, pp. 297-306, 2013. 13
- [27] F. Menter and Y. Egorav, "A scale-adaptive simulation model using two-equations models," in *Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, vol. 43. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2005. 14
- [28] V. V. Ranade, "An efficient computational model for simulating flow in stirred vessels: a case of rushton turbine," *Chemical Engineering Science*, vol. 52, pp. 4473-4484, 1997. 14
- [29] A. Brucato, M. Ciofalo, F. Grisafi, and G. Micale, "Numerical prediction of flow pelds in bašed stirred vessels: A comparison of alternative modelling approaches," *Chemical Engineering Science*, vol. 53, pp. 3653-3686, 1998. 15
- [30] I. Naude, C. Xuereb, and J. Bertrand, "Direct prediction of the flows induced by a propeller in an agitated vessel using an unstructured mesh," *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 76, pp. 631-640, 1998. 15
- [31] L. R. D. Bakker, A., H. Wang, M, and R. V. Calabrese, "Sliding mesh simulations of laminar flow in stirred reactors," *Trans IChemE*, vol. 75, pp. 42-44, 1997. 16
- [32] B. Kysela, J. Konfršt, I. Folt, and Z. Chára, "Cfd simulation of the discharge flow from standard rushton impeller," *International Journal of chemical Engineering*, vol. 2014, 2014. 16

Estudos sobre a Uniformização do Escoamento em Câmaras de Mistura usando CFD

- [33] S. N. P. Vegendla, G. J. Heynderickx, and G. B. Merin, "Comparasion of eulerian-lagrangian and eulerian-eulerian method for dilute gas-solid flow with side inlet," *Computers and Chemical Engineering*, vol. 35, pp. 1192-1199, 2011. 16
- [34] R. Rihani, J. Legrand, and A. Bensmaili, "Mixing in milli torus reactor under aerated conditions," *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, vol. 48, 2009. 16
- [35] H. Wang, X. Jia, X. Wang, Z. Zhou, J. Wen, and J. Zhang, "Cfd modeling of hydrodynamic characteristics of gas-liquid two-phase stirred tank," *Applied Mathematical Modelling*, vol. 38, pp. 63-92, 2014. 16
- [36] S. Madhania, T. Nurtono, A. Cahyani, Carolina, Y. Muharam, S. Winardi, and W. Purwanto, "Mixing behaviour of miscible liquid-liquid multiphase flow in stirred tank with different marine propeller installment by computational fluid dynamics method," *Chemical Engineering Transactions*, vol. 56, pp. 1057-1062, 2017. 16
- [37] M. Jahoda and M. Tomaskova, L. ans Mostek, "Cfd prediction of liquid homogenisation in a gas-liquid stirred tank," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 87, pp. 460-467, 2009. 16
- [38] *ANSYS Fluent theory Guide*, 2013. 17, 32, 33, 34, 37, 40, 52
- [39] A. N. Kolmogorov, "The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers," *Proceedings: Mathematical and Physical Sciences*, vol. 434, 1991. 19
- [40] P. M. Doran, *Mixing*, ser. ISBN: 978-0-12-220851-5. Academic Press, Elsevier Ltd., 2013, ch. 8. 19
- [41] R. Fransen, "Les based aerothermal modeling of turbine blade cooling systems," Ph.D. dissertation, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2013. 20
- [42] M. Assirelli, W. Bujalski, A. Eaglesham, and A. W. Nienow, "Intensifying micromixing in a semi-batch reactor using a rushton turbine," *Chemical Engineering Science*, vol. 60, pp. 2333-2339, 2005. 20
- [43] P. Dimotakis and H. Catrakis, *Turbulence, Fractals, and Mixing*. Pasadena, 1997, ch. 373, p. 16. 21, 22
- [44] G. H. Yeoh and J. Tu, *Gas-Particle Flows*, ser. ISBN: 978-0-08046-733-7. Butterworht-Heinemann, Elsevier Ltd., 2010, ch. 4. 21
- [45] C. Galleti and E. Brunazzi, *Flow Instabilities in Mechanically Agited Stirred Vessels*, ser. ISBN: 978-953-307-596-9. InTech, 2011, ch. 10, pp. 227-249. 21
- [46] H. Tennekes and J. L. Lumley, *Turbulent Transport*, ser. ISBN: 978-0-262-20019-6. The MIT Press, 2011, pp. 223-247. 23
- [47] B. Andersson, R. Andersson, L. Hakansson, M. Mortensen, R. Sudiyo, and B. Van Wachem, *Turbulent mixing and chemical reactions*. Cambridge University Press, 2011, pp. 113-142. 23
- [48] P. E. Dimotakis, "Turbulent mixing," *Annu. Rev. Fluid Mech.*, vol. 37, 2005. 24

- [49] T. F. Fric and Roshko, "Vortical structure in the wake of a transverse jet," *Journal Fluid Mechanical - Cambridge University Press*, vol. 219, 1994. 25, 26
- [50] P. J. Ortwerth, "Mechanism of mixing of two nonreacting gases," October, 1971. 26
- [51] F. R. Menter and Y. Egorav, "Sas turbulence modelling of technical flows," in *Direct and Large-Eddy Simulation*, vol. VI. Springer, Dordrecht, 2006, pp. 678-694. 32
- [52] J. B. W. Kok and S. van der Wal, "Mixing in t-junctions," *Appl. Math Modelling*, vol. 20, 1996. 37, 38, 42
- [53] T. Frederico, A. Amorim, and A. Tomé, "The 3d solidworks flows model for the cloud camera," Internal Report, Departamento de Física, Universidade de Lisboa, 2019. 53
- [54] S. Weber, "Comunicação privada," Experiência CLOUD, CERN, 2019. 56, 61