



**FELIPE ORLANDO DA COSTA**

**ANÁLISE DO ESCOAMENTO MULTIFÁSICO EM  
FLOTADOR COM AGITAÇÃO MECÂNICA VIA  
FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL**

**LAVRAS – MG  
2021**

**FELIPE ORLANDO DA COSTA**

**ANÁLISE DO ESCOAMENTO MULTIFÁSICO EM FLOTADOR COM AGITAÇÃO  
MECÂNICA VIA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL**

Monografia apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Curso de Engenharia Química, para a obtenção do título de Bacharel.

Prof. Dr. Irineu Petri Júnior  
Orientador

**LAVRAS – MG  
2021**

**FELIPE ORLANDO DA COSTA**

**ANÁLISE DO ESCOAMENTO MULTIFÁSICO EM FLOTADOR COM AGITAÇÃO  
MECÂNICA VIA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL**

Monografia apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Curso de Engenharia Química, para a obtenção do título de Bacharel.

APROVADO em 25 de outubro de 2021.

**Banca:**

Dra. Angélica da Silva Reis (FEQ/UFU)

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Isabele Cristina Bicalho (DEG/UFLA)

Prof. Dr. Irineu Petri Júnior (DEG/UFLA)

**LAVRAS – MG  
2021**

*“Alegrem-se na esperança, sejam pacientes na tribulação, perseverem na oração.”*  
Romanos 12:12

*Ao meu Deus e aos meus pais  
por tudo.  
Dedico*

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço ao meu Deus, por ter estado comigo em cada momento dessa caminhada, me dando forças nos momentos mais difícil e me enchendo de esperança a cada momento.

Agradeço ao meu pai José Orlando, a minha mãe Sirlene, ao meu irmão Estevão e minha irmã Danielle por todo apoio e incentivo e principalmente por me ajudarem a ser a pessoa que eu sou hoje.

Agradeço aos meus amigos Renan Vitor, Wilgnner, Maycon e Carlão pela amizade e pelo apoio e todos meus amigos da Rep “X” que me proporcionaram momentos muito especiais. Além disso, quero agradecer as orações de todos irmãos da minha igreja O Brasil para Cristo de Cana Verde – MG.

Agradeço aos professores Fiderman Machuca Martinez e Jose Antonio Lara Ramos pelo apoio nesse projeto, sem a ajuda de vocês esse projeto não seria possível.

Um agradecimento especial ao meu orientador e amigo Irineu Petri Júnior, por ser o meu pai acadêmico e por ter me apresentado e me ensinado tudo que sei sobre as técnicas de CFD. E por além disso ter me ensinado valores pessoais e profissionais que me ajudaram a me tornar um ser humano melhor. Muito obrigado!

## RESUMO

Devido ao aumento da poluição e também a escassez de recursos naturais essenciais, como a água doce, a legislação ambiental a cada dia torna-se mais rígida, fazendo com que tecnologias para eliminação dos resíduos presentes na água sejam desenvolvidas. Com isso, a ozonificação tem-se destacado como uma alternativa viável. Sendo a ozonificação classificada como um processo de oxidação avançada (AOP's), que utiliza uma célula de flotação. Tanto a ozonificação quanto a célula de flotação são processos multifásicos e turbulentos. Logo, uma ferramenta útil para prever o escoamento e a interação entre as fases deste equipamento é a fluidodinâmica computacional (CFD). Sendo que as técnicas de CFD utilizam de métodos numéricos para resolução das equações conservativas. Com isso, o objetivo desse trabalho foi realizar a modelagem completa da turbulência e da interação entre as fases da célula de flotação, qual foi realizada de forma gradativa. O primeiro capítulo contempla a simulação monofásica, com foco no estudo dos modelos de turbulência a dois parâmetros do *software* FLUENT® em comparação com o modelo LES, e além disso, foi avaliada a influência da velocidade angular na mistura do fluido na célula de flotação. O segundo capítulo aborda a simulação bifásica da célula de flotação, sendo que foram avaliadas diversas propriedades da fase gasosa, utilizando os modelos multifásicos VOF e *Mixture*. Por fim, o terceiro capítulo contempla a simulação trifásica do flotor, constituído da fase líquida (água), da fase gasosa (oxigênio-ozônio) e da fase sólida (particulado inerte), sendo o foco deste capítulo a predição do comportamento da fase sólida no interior da célula de flotação. Na simulação monofásica, foi determinado que o modelo que melhor prediz a turbulência na célula de flotação é o modelo RNG k- $\epsilon$ . Através da análise da influência da velocidade angular na qualidade de mistura do flotor, foi constatado que conforme há um aumento da velocidade angular, uma maior fração da energia cinética disponibilizada ao sistema fica concentrada na região do agitador mecânico. Para a simulação bifásica, foi constatado que o modelo VOF apresentou uma melhor performance para predição do comportamento da fase gasosa, no entanto, caso tenha-se uma estimativa inicial precisa do diâmetro médio das bolhas, o modelo *Mixture* torna-se uma ótima opção. E para a simulação trifásica, o modelo *Mixture* apresentou uma boa capacidade preditiva para a fase sólida, sendo que com esse modelo foi possível prever a deposição do material e até detalhes do escoamento, como oscilações mais frequentes para um dos lados da célula de flotação. Desse modo, esse trabalho alcançou seu objetivo de modelar de forma completa e gradativa a turbulência e a interação entre as fases da célula de flotação aplicada à ozonificação.

**Palavras-chave:** Modelos multifásicos, ozonificação; célula de flotação, modelo de turbulência; bolhas.

Due to the increase in pollution and also the scarcity of essential natural resources, such as fresh water, environmental legislation becomes more rigid every day, making technologies for the elimination of waste present in water to be developed. As a result, ozonation has emerged as a viable alternative. Ozonification is classified as an advanced oxidation process (AOP's), which uses a flotation cell. Both ozonification and the flotation cell are multiphase and turbulent processes. Therefore, a useful tool to predict the flow and the interaction between the phases of this equipment is Computational Fluid Dynamics (CFD). CFD techniques use numerical methods to solve conservative equations. Thus, the objective of this work is to carry out the complete modeling of turbulence and the interaction between the phases of the flotation cell, and this is done gradually. The first chapter approaches the single-phase simulation, focusing on the study of the two-parameter turbulence models of the FLUENT<sup>®</sup> software in comparison with the LES model, and in addition, the influence of the angular velocity on the fluid mixture in the flotation column was evaluated. The second chapter approaches the two-phase simulation of the flotation cell and various properties of the gas phase were evaluated, using the multiphase models VOF and Mixture. Finally, the third chapter contemplates the three-phase simulation of the cell flotation, consisting of the liquid phase (water), the gas phase (oxygen-ozone) and the solid phase (inert particulate), the focus of this chapter being the prediction of solid phase behavior inside the flotation cell. In the single-phase simulation, it was determined that the model that best predicts the turbulence in the flotation cell is the RNG k- $\epsilon$  model. Through the analysis of the influence of angular velocity on the quality of the flotation cell mixture, it was found that as there is an increase in angular velocity, a greater fraction of the kinetic energy available to the system is concentrated in the region of the impeller. For the two-phase simulation, it was found that the VOF model showed a better performance for predicting the behavior of the gas phase, however, if you have an accurate initial estimate of the average diameter of the bubbles, the Mixture model becomes a great option. For the three-phase simulation, the Mixture model presented a good predictive capacity for the solid phase, and with it, it was possible to predict the material deposition and flow details, such as more frequent oscillations to one side of the flotation column. Thus, this work achieved its objective of modeling in a complete and gradual way the turbulence and the interaction between the phases of the flotation cell applied to ozonation.

**Keywords:** Multiphase models, ozonation; flotation cell, turbulence model; microbubbles.

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\rho$	Densidade do fluido	[kg/m <sup>3</sup> ]
$u$	Velocidade do fluido na direção X	[m/s]
$v$	Velocidade do fluido na direção Y	[m/s]
$w$	Velocidade do fluido na direção Z	[m/s]
$P$	Pressão do sistema	[Pa]
$\mu$	Viscosidade dinâmica	[Pa.s]
$t$	Tempo	[s]
$g_x$	Aceleração gravitacional na direção X	[m/s <sup>2</sup> ]
$g_y$	Aceleração gravitacional na direção Y	[m/s <sup>2</sup> ]
$g_z$	Aceleração gravitacional na direção Z	[m/s <sup>2</sup> ]
$k$	Energia cinética turbulenta	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]
$\varepsilon$	taxa de dissipação	[m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]
$G_k$	Geração de energia cinética de turbulência devido aos gradientes de velocidade média	[kg/m.s <sup>3</sup> ]
$G_b$	Geração de energia cinética de turbulência devido à flotabilidade	[kg/m.s <sup>3</sup> ]
$Y_M$	Dilatação flutuante na turbulência compressível	[kg/m.s <sup>3</sup> ]
$S_k$	Termo fonte definido pelo usuário	[kg/m.s <sup>3</sup> ]
$S_\varepsilon$	Termo fonte definido pelo usuário	[kg/m.s <sup>3</sup> ]
$\sigma_k$	Números de Prandtl turbulentos para k	[-]
$\sigma_\varepsilon$	Números de Prandtl turbulentos para $\varepsilon$	[-]
$\mu_t$	Viscosidade turbulenta	[Pa.s]
$u_i$	Velocidade do fluido na direção i	[m/s]
$C_{1\varepsilon}$	Constante do modelo	[-]
$C_{2\varepsilon}$	Constante do modelo	[-]
$R_\varepsilon$	Termo adicional	[kg/m.s <sup>3</sup> ]
$\alpha_k$	Números de Prandtl efetivos inversos para k	[-]
$\alpha_\varepsilon$	Números de Prandtl efetivos inversos para $\varepsilon$	[-]
$\mu_{eff}$	Viscosidade efetiva	[Pa.s]

$C_1$	Parâmetro adicional	[-]
$\omega$	Taxa de dissipação específica	[1/s]
$G_\omega$	Geração de $\omega$	[kg/m <sup>3</sup> .s <sup>2</sup> ]
$Y_\omega$	Dissipação de k devido à turbulência	[kg/m <sup>3</sup> .s <sup>2</sup> ]
$S_\omega$	Dissipação de $\omega$ devido à turbulência	[kg/m <sup>3</sup> .s <sup>2</sup> ]
$\Gamma_k$	Difusividade efetiva de k	[kg/m.s]
$\Gamma_\omega$	Difusividade efetiva de $\omega$	[kg/m.s]
$\phi_p$	Grandeza genérica do escoamento	[-]
$f$	Fator adimensional	[-]
$\Delta t$	passo de tempo da simulação	[s]
$\dot{m}_{pq}$	Transferência de massa da fase p para a fase q	[kg/m <sup>3</sup> .s]
$\dot{m}_{qp}$	Transferência de massa da fase q para a fase p	[kg/m <sup>3</sup> .s]
$S_{\alpha_q}$	Termo de fonte	[kg/m <sup>3</sup> .s]
$\rho_q$	Densidade da fase q	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\alpha_q$	Fração volumétrica da fase q	[-]
$\vec{v}_q$	Velocidade da fase q	[m/s]
$\vec{g}$	Gravidade	[m/s <sup>2</sup> ]
$F$	Forças de campo	[N]
$\rho_m$	Densidade da mistura	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\vec{v}_m$	Velocidade da mistura	[m/s]
$\nabla p$	Gradiente de pressão	[Pa]
$\mu_m$	Viscosidade da mistura	[Pa.s]
$\alpha_k$	Fração volumétrica da fase secundária	[-]
$\rho_k$	Densidade da fase secundária	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\vec{v}_{dr,k}$	Velocidade deriva	[m/s]
$\mu_k$	Viscosidade da fase secundária	[Pa.s]
$C_D$	Coefficiente de arrasto	[-]
$Re$	Número de Reynolds	[-]
$\rho_L$	Densidade do líquido	[kg/m <sup>3</sup> ]

$U_t$	Velocidade do líquido	[m/s]
$d_p$	Diâmetro da partícula	[m]
$\mu_L$	Viscosidade do líquido	[kg/m.s]
$a_1, a_2, a_3$	Parâmetros adimensionais	[-]
$\rho_{pq}$	Densidade média entre as fases	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\mu_{pq}$	Viscosidade média entre as fases	[Pa.s]
$d_{pq}$	Diâmetro médio entre as fases	[m]
$C_{D_{vis}}$	Coefficientes de arrasto para o regime viscoso	[-]
$C_{D_{dis}}$	Coefficientes de arrasto para o regime de distorção da bolha	[-]
$C_{D_{cap}}$	Coefficientes de arrasto para o regime de bolha encapsulada	[-]
$\lambda_{RT}$	Comprimento de onda de instabilidade de Rayleigh-Taylor	[-]
$C_{D_{ellipse}}$	Coefficientes de arrasto para bolhas elípticas	[-]
$C_{D_{sphere}}$	Coefficientes de arrasto para bolhas esféricas	[-]
$C_{exp}$	expoente de correção da fração de volume	[-]
$\alpha_q$	Fração volumétrica para a fase q	[-]
$U_t$	Velocidade terminal	[-]
$E_o$	Número de Eötvös	[-]
$\sigma$	Tensão superficial	[N/m <sup>2</sup> ]
$(1 - \beta)$	Fração volumétrica da fase gasosa	[-]
$\sigma_L$	Tensão superficial do líquido	[N/m <sup>2</sup> ]
$u_g$	Velocidade superficial do gás	[m/s]
$h_T$	Alturas da célula de líquido com alimentação de gás	[m]
$h$	Alturas da célula de líquido sem a alimentação de gás	[m]
$Q_g$	Vazão volumétrica do gás	[m <sup>3</sup> /s]
$A_c$	Área de seção transversal da célula de flotação	[m <sup>2</sup> ]
$\mu_{s,kin}$	Viscosidade granular	[Pa.s]
$\theta_s$	Temperatura granular	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]
$e_{ss}$	Coefficiente de restituição	[-]

$g_{0,ss}$	Função de distribuição radial	[-]
$p_s$	Pressão de sólidos	[Pa]
$\mu_{fric}$	Viscosidade friccional	[Pa.s]
$\alpha_{s,max}$	Limite de empacotamento	[-]
$K_{sl}$	Coefficiente de troca sólido-fluido	[-]
$f$	Fator de atrito	[-]
$\tau_s$	Tempo de relaxação do particulado	[s]
$v_{r,s}$	velocidade relativa do sólido	[m/s]
$\vec{v}_s$	Velocidade do sólido	[m/s]
$\vec{v}_l$	Velocidade do líquido	[m/s]

## SUBÍNDICES

s	Sólido
i	Direções
q.p	Fase
l	líquido
p	Partícula
m	Mistura
k	Fases sólidas

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Célula de flotação com agitação mecânica autoaerada. ....	6
Figura 1.2 – Célula de flotação com agitação mecânica com aeração forçada. ....	6
Figura 1.3 – Elementos com valores altos e baixos de razão de aspecto. ....	8
Figura 1.4 – Elementos com valores altos e baixos de <i>skewness</i> . ....	8
Figura 1.5 – Elementos com valores altos e baixos de razão jacobiana. ....	8
Figura 1.6 – Unidade experimental antes da injeção do corante. ....	17
Figura 1.7 – Geometria e dimensões do agitador mecânico. ....	18
Figura 1.8 – Geometria e dimensões do <i>baffle</i> utilizado. ....	18
Figura 1.9 – Representação esquemática da célula de flotação. ....	18
Figura 1.10 – Malha da célula de flotação, referente a malha com 757.138 células. ....	20
Figura 1.11 – Malha da superfície externa do <i>baffle</i> , referente a malha com 757.138 células. ....	20
Figura 1.12 – Malha da superfície externa do agitador mecânico, referente a malha com 757.138 células. ....	20
Figura 1.13 – Representação da geometria da célula de flotação com seu respectivo eixo de coordenadas. ....	23
Figura 1.14 – Representação das seções de análise das velocidades médias tangenciais, radiais e axiais. ....	24
Figura 1.15 – Campo de velocidade (a) da malha com 348.823 elementos; (b) da malha com 757.138 elementos e (c) da malha com 1.007.417 elementos. ....	25
Figura 1.16 – Gráfico da <i>Aspect Ratio</i> para a malha com 757.138 elementos. ....	27
Figura 1.17 – Gráfico da <i>Skewness</i> para a malha com 757.138 elementos. ....	28
Figura 1.18 – Gráfico da <i>Jacobian Ratio</i> para a malha com 757.138 elementos. ....	28
Figura 1.19 – Comportamento das velocidades médias tangenciais (a), radiais (b) e axiais (c) para todos modelos de turbulência analisados para diferentes $x_2/H$ . ....	30
Figura 1.20 – Comportamento das velocidades médias tangenciais (a), radiais (b) e axiais (c) utilizando 900, 1500 e 3300 rpm, para diferentes $x_2/H$ . ....	38
Figura 2.1 – Representação de todo o circuito que compõe a célula de flotação. ....	57
Figura 2.2 – Escala utilizada para mensurar o deslocamento do nível. ....	58
Figura 2.3 – Região na qual foi feito o tratamento de imagens para obtenção do diâmetro das bolhas. ....	59
Figura 2.4 – Malha da célula de flotação. ....	61
Figura 2.5 – Malha da superfície externa do <i>baffle</i> . ....	61
Figura 2.6 – Malha da superfície externa do agitador mecânico. ....	61
Figura 2.7 – Posições na qual foi feito o tratamento de imagens para obtenção do diâmetro médio das bolhas. ....	65
Figura 2.8 – Contorno de fração volumétrica utilizando o modelo VOF com as linhas de corrente para o cálculo da velocidade terminal das bolhas. ....	66
Figura 2.9 – Contorno de fração volumétrica utilizando o modelo <i>Mixture</i> com as linhas de corrente para o cálculo da velocidade terminal das bolhas. ....	66
Figura 2.10 – Gráfico de <i>Aspect Ratio</i> . ....	67
Figura 2.11 – Gráfico de <i>Skewness</i> . ....	68

Figura 2.13 – Contorno de fração volumétrica para as bolhas utilizando o modelo VOF (a) e o modelo <i>Mixture</i> (b). .....	72
Figura 3.1 – Partículas inertes adicionadas à célula de flotação. ....	87
Figura 3.2 – Perfil de fração volumétrica para a fase granular antes do início da simulação. .	90
Figura 3.3 – <i>Frames</i> nos seguintes instantes de tempo do experimento com o flotor: (a) 10 s, (b) 20 s e (c) 30 s. ....	92
Figura 3.4 – Perfil de fração volumétrica para a fase granular no instante de 30 segundos. ...	93
Figura 3.5 – Velocidade tangencial para a mistura na base da célula de flotação.....	93
Figura 3.6 – Velocidade radial para a mistura na base da célula de flotação.....	94
Figura A.1 – Campo vetorial de velocidade (a) da malha com 348.823 elementos; (b) da malha com 757.138 elementos e (c) da malha com 1.007.417 elementos. ....	102
Figura A.2 – Contornos de fração volumétrica para o gás com o modelo VOF utilizados para determinação do diâmetro médio das bolhas nas seguintes posições: (a) $x_2 = 56,6$ mm; (b) $x_2 = 66,6$ mm; (c) $x_2 = 76,6$ mm; (d) $x_2 = 86,6$ mm; (e) $x_2 = 96,6$ mm; (f) $x_2 = 106,6$ mm; (g) $x_2 = 116,6$ mm; (h) $x_2 = 126,6$ mm; (i) $x_2 = 136,6$ mm; (j) $x_2 = 146,6$ mm e (k) $x_2 = 156,6$ mm.....	104
Figura A.3 – Contornos de fração volumétrica para o gás com o modelo <i>Mixture</i> utilizados para determinação do diâmetro médio das bolhas nas seguintes posições: (a) $x_2 = 56,6$ mm; (b) $x_2 = 66,6$ mm; (c) $x_2 = 76,6$ mm; (d) $x_2 = 86,6$ mm; (e) $x_2 = 96,6$ mm; (f) $x_2 = 106,6$ mm; (g) $x_2 = 116,6$ mm; (h) $x_2 = 126,6$ mm; (i) $x_2 = 136,6$ mm; (j) $x_2 = 146,6$ mm e (k) $x_2 = 156,6$ mm.....	107

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1.1 – Dimensões da célula de flotação.....	18
Tabela 1.2 – Condições iniciais e de contorno. ....	21
Tabela 1.3 –Valores de velocidade média, máxima e número de Reynolds simuladas para o reator de flotação. ....	25
Tabela 1.4 – Valores mínimos, máximos, médio e o desvio padrão para <i>Aspect Ratio</i> , de <i>Skewness</i> e de <i>Jacobian Ratio</i> para as três malhas utilizadas.....	26
Tabela 1.5 –Valores de erros relativos máximo, mínimo e médio para $\langle u_1 \rangle$ , $\langle u_2 \rangle$ e $\langle u_3 \rangle$ para diferentes $x_2/H$ . ....	33
Tabela 2.1 – Valores das propriedades físicas utilizadas. ....	59
Tabela 2.2 – Condições iniciais e de contorno. ....	62
Tabela 2.3 – Propriedades físicas para as substancias puras e para a mistura.....	63
Tabela 2.4 – Valores mínimos, máximos e médio para <i>Aspect Ratio</i> e <i>Skewness</i> . ....	67
Tabela 2.5 – Valores do deslocamento do nível calculados experimentalmente, através da correlação e com uso dos modelos multifásicos VOF e <i>Mixture</i> . ....	68
Tabela 2.6 – Valores do diâmetro médio das bolhas calculados experimentalmente, através da correlação e com uso dos modelos multifásicos VOF e <i>Mixture</i> . ....	70
Tabela 2.7 – Valores da fração volumétrica de gás calculados através da correlação matemática e dos modelos multifásicos VOF e <i>Mixture</i> . ....	73
Tabela 2.8 – Valores da velocidade terminal calculados através da correlação matemática e dos modelos multifásicos VOF e <i>Mixture</i> .....	74
Tabela 2.9 – Valores do coeficiente de arrasto calculados através da correlação matemática e dos modelos multifásicos VOF e <i>Mixture</i> . ....	75
Tabela 3.1 – Condições iniciais e de contorno. ....	88
Tabela 3.2 – Modelos utilizados para descrever as propriedades físicas do particulado. ....	89
Tabela 3.3 – Modelos utilizados para descrever a interação entre as fases. ....	90

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO GERAL .....	1
1.1	OBJETIVOS .....	3
2	CAPÍTULO 1 .....	5
2.1	INTRODUÇÃO .....	5
2.1.1	Definição e aplicação das técnicas de CFD.....	6
2.1.2	Equações de Conservação para sistemas isotérmicos.....	8
2.1.3	Modelos de turbulência .....	9
2.1.4	Métodos de discretização.....	13
2.1.5	Trabalhos correlatos .....	14
2.2	OBJETIVOS .....	16
2.3	MATERIAIS E MÉTODOS .....	16
2.3.1	Metodologia experimental.....	16
2.3.2	Metodologia numérica.....	17
2.3.2.1	Geometria e Dimensões .....	17
2.3.2.2	Discretização do domínio geométrico.....	19
2.3.2.3	Condições de contorno .....	21
2.3.2.4	Comparação entre os modelos de turbulência.....	22
2.4	RESULTADOS E DISCUSSÕES .....	24
2.4.1	Teste de Independência de Malha .....	24
2.4.2	Qualidade das Malhas Obtidas .....	26
2.4.3	Análises dos Modelos de Turbulência.....	29
2.4.4	Influência da rotação na fluidodinâmica da célula de flotação .....	36
2.5	CONCLUSÕES .....	41
2.6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	42
3	CAPÍTULO 2 .....	47
3.1	INTRODUÇÃO .....	47
3.1.1	Modelos multifásicos.....	48
3.1.1.1	Modelo Volume of Fluid (VOF) .....	48
3.1.1.2	Modelo Mixture.....	49
3.1.2	Correlações para células de flotação .....	54
3.1.3	Trabalhos correlatos .....	55
3.2	OBJETIVOS .....	56
3.3	MATERIAIS E MÉTODOS .....	57
3.3.1	Metodologia experimental.....	57
3.3.2	Metodologia numérica.....	60
3.3.2.1	Discretização do domínio geométrico.....	60
3.3.2.2	Condições de contorno .....	62
3.3.3	Determinação do diâmetro médio e da velocidade terminal via CFD.....	64
3.3.3.1	Diâmetro médio.....	64
3.3.3.2	Velocidade terminal .....	65
3.4	RESULTADOS E DISCUSSÕES .....	66
3.4.1	Qualidade da malha .....	66

3.4.2	Deslocamento do nível do líquido .....	68
3.4.3	Diâmetro das bolhas .....	69
3.4.4	Fração volumétrica de gás .....	73
3.4.5	Velocidade terminal.....	73
3.4.6	Coeficiente de arrasto .....	74
3.5	CONCLUSÕES .....	75
3.6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	77
4	CAPÍTULO 3 .....	80
4.1	INTRODUÇÃO .....	80
4.1.1	Fase granular.....	81
4.1.2	Interação entre as fases .....	83
4.1.2.1	Modelos de arrasto sólido-fluido.....	83
4.1.2.2	Tensão superficial e área interfacial.....	85
4.1.3	Trabalhos correlatos .....	86
4.1.4	Objetivos.....	86
4.2	MATERIAIS E MÉTODOS .....	87
4.2.1	Metodologia Experimental .....	87
4.2.2	Metodologia Numérica .....	88
4.2.2.1	Condições de Contorno .....	88
4.2.2.2	Condições da fase granular .....	90
4.3	RESULTADOS E DISCUSSÕES .....	91
4.4	CONCLUSÕES .....	94
4.5	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	95
5	CONCLUSÕES GERAIS .....	98
5.1	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS .....	100
6	REFERÊNCIAS .....	101
7	APÊNDICE .....	102

## 1 INTRODUÇÃO GERAL

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

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

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

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

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

As técnicas de CFD começaram a ser utilizadas no seguimento industrial, a partir da década de 1960, na indústria aeroespacial. Essa técnica era utilizada para o projeto de aeronaves

e motores a jato. Entretanto, nos dias de hoje as técnicas de CFD estão tornando-se uma ferramenta vital no *design* de equipamentos industriais. Porém, um fator que limita o desenvolvimento dessa ciência, é a falta de *hardwares* de alto desempenho, ou até mesmo sua disponibilidade a um preço não acessivo que inviabiliza a utilização desta ferramenta (VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007).

Com isso, vale ressaltar que a fluidodinâmica computacional é um dos caminhos mais viáveis para a resolução de problemas multifásicos envolvendo agitação mecânica, como é o caso da flotação. As vantagens da utilização das técnicas de CFD para resolução deste problema, são tanto do ponto de vista científico, como do ponto de vista econômico. A construção de protótipos para coleta de resultados relevantes para a célula de flotação, demandam um altíssimo custo e frequentemente a coleta desses resultados possui grande complexidade e em alguns casos é até mesmo inviável. Sendo assim, geralmente para prever esses resultados utiliza-se de correlação matemáticas, entretanto, essas correlações apresentam alguns problemas, pois elas normalmente são válidas apenas para determinadas geometrias de agitadores mecânicos e apresentam uma restrita faixa de aplicação, tornando a análise destes parâmetros muito limitada, inviabilizando a otimização e aplicabilidade deste processo em escala industrial.

O diferencial deste trabalho está na modelagem completa da célula de flotação, de forma gradativa até o modelo real. Muitos parâmetros da célula de flotação podem ser obtidos através de um modelo simplificado, tais como, qualidade da mistura, linhas de fluxo e velocidades tangenciais, radiais e axiais, tornando desnecessário a simulação do caso mais complexo em algumas situações.

Porém, quando os parâmetros de interesse estejam relacionados a fase secundária (gás), pode-se utilizar a modelagem para um sistema bifásico. E caso os resultados de interesse estejam relacionados a fase terciária (material particulado), é necessário realizar a simulação do caso mais completo.

Outro ponto que diferencia este trabalho dos demais, é a análise detalhada dos modelos multifásicos disponíveis no *software* FLUENT® e dos modelos de arrasto, que engloba a interação entre as fases.

## 1.1 Objetivos

Este trabalho tem como objetivo realizar a modelagem completa de uma célula de flotação, que é um equipamento de grande utilidade industrial, com isso, será possível prever dados do equipamento que afetam diretamente a sua eficiência. Também será possível prever o tempo de contato entre as bolhas e o líquido, que está relacionado com as velocidades tangenciais, radiais e axiais do fluido. Além disso, será avaliado o diâmetro das bolhas formadas que está relacionado com a vazão de alimentação da mistura gasosa e as características do agitador mecânico, tais como, geometria e velocidade angular.

Para atingir os objetivos gerais apresentados, foram desenvolvidos objetivos específicos que foram distribuídos em três capítulos.

O primeiro capítulo trata da modelagem da célula de flotação em um sistema monofásico (líquido), utilizando somente a água, para que assim, fosse possível analisar o movimento do fluido no interior da célula de flotação, e através disso correlacionar o movimento do fluido com o trajeto das bolhas, pois as mesmas são arrastadas pelo movimento da água. Para determinar tais parâmetros, previamente foi realizado o teste de independência de malha e de turbulência para este equipamento e, posteriormente analisou-se a influência da velocidade angular do agitador mecânico nas velocidades tangenciais, radiais e axiais do fluido em diferentes posições na célula de flotação. As rotações utilizadas foram 900, 1500 e 3300 rpm. Com essa modelagem é possível realizar a otimização da geometria da célula e do agitador mecânico a baixo custo, sendo possível, propor novas geometrias que otimizem a qualidade da mistura na célula de flotação.

O segundo capítulo trata da modelagem da célula de flotação em um sistema bifásico (líquido-gás), constituído de água e uma mistura gasosa contendo oxigênio e ozônio. O objetivo deste capítulo foi analisar a interação entre as fases e alguns parâmetros de extrema importância das bolhas formadas, tais como, deslocamento do nível de líquido, diâmetro das bolhas, fração volumétrica de gás, velocidade terminal e coeficiente de arrasto. Os mesmos serão comparados com valores obtidos experimentalmente e/ou através de correlações válidas para o agitador mecânico utilizado. Utilizando essa modelagem, será possível analisar como o comportamento do escoamento influencia a eficiência da ozonificação, que está diretamente relacionada com algumas propriedades das bolhas formadas, sendo estas, boa dispersão das bolhas, tempo de contato entre as fases (líquido-gás) e o tamanho das bolhas na célula de flotação. Utilizando a modelagem presente neste estudo, poderá ser minimizada umas das principais desvantagens da

ozonificação, que é sua baixa eficiência, tornando este processo economicamente viável do ponto de vista industrial.

O terceiro capítulo trata da modelagem de um sistema trifásico (líquido-gás-sólido), constituído de água, uma mistura gasosa de oxigênio e ozônio e partículas de um sólido inerte, sendo assim, neste caso tem-se o sistema real para uma célula de flotação, com isso, o objetivo deste capítulo é analisar a interação entre as três fases. Entretanto, predizer o movimento do material particulado no interior da célula é primordial, pois só assim este modelo será consistente e válido para trabalhos futuros que terão como objetivo realizar a análise química da oxidação de materiais granulares e predizer o processo de oxidação em células de flotação.

## 2 CAPÍTULO 1

O primeiro capítulo deste trabalho contempla a simulação de uma célula de flotação com agitação mecânica, para um sistema monofásico, utilizando somente a água. Parte deste trabalho já foi apresentado e publicado no 4º *Congreso Colombiano de Procesos Oxidación Avanzada* (4CCPAOX).

### 2.1 Introdução

A flotação é uma técnica de concentração de minerais ou de outras espécies químicas, que utiliza da diferença das propriedades interfaciais entre o material de interesse e o material a ser descartado, para efetuar a separação. O princípio de separação está baseado na adesão dos sólidos às bolhas formadas no fundo da célula (MADRID, 2012).

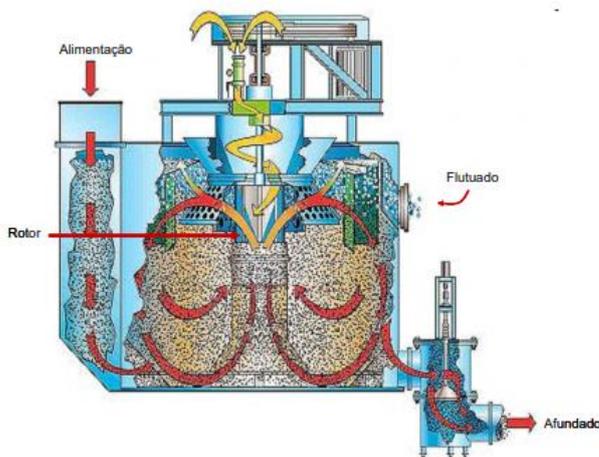
Esse equipamento permite que o material sólido se mantenha em suspensão, evitando a sedimentação, favorecendo a dispersão das bolhas, o que favorece a redução de seu tamanho e promove a colisão partícula-bolha, que é primordial para o processo de separação (LARA RAMOS *et al.*, 2019).

A célula de flotação com agitação mecânica é um dos equipamentos mais utilizados na concentração de minérios ao redor do mundo (WILLS, 1988). Este equipamento é classificado como uma turbomáquina, sendo essa classe de equipamentos baseada na ação do agitador mecânico. Tendo como funcionalidade as seguintes tarefas: suspensão dos sólidos, dispersão do gás injetado em pequenas bolhas, agitação turbulenta que proporciona colisões entre o material particulado e as bolhas, transferência da polpa de uma célula para outra (aplicado para circuitos em série) e formação de uma camada de espuma no topo da célula de flotação (EK, 1992).

Os flotadores são divididos em dois grupos, células autoaeradas e células de aeração forçada. As células autoaeradas são aquelas nas quais a injeção do gás é resultado do gradiente de pressão negativo na região do agitador mecânico do flotador. Vale ressaltar que o gradiente de pressão nas células autoaeradas é promovido pelo giro do agitador mecânico e quando o gradiente é alto o suficiente ocorre a sucção do ar para o interior da célula. Com isso, a vazão de ar que é injetada no interior do equipamento é proporcional à velocidade angular do agitador mecânico. A Figura 1.1 contém a representação de uma célula de flotação com agitação mecânica autoaerada (PATWARDHAN & JOSHI, 1999).

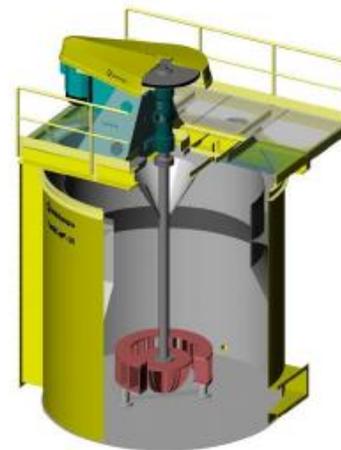
As células de aeração forçada são aquelas na qual a injeção de gás é feita por meio de um compressor externo (NELSON & LELINSKI, 2000). Quando o gás atinge a região do agitador mecânico, o mesmo sofre cisalhamento e como consequência, o gás é disperso na forma de pequenas bolhas (PATWARDHAN & JOSHI, 1999). Vale ressaltar que, em geral a célula de flotação contém outros acessórios, como, o *baffle*, que nada mais é que um quebra ondas, que é utilizado para aumentar a turbulência no interior do equipamento e favorecer o cisalhamento do gás que tem como consequência a redução de tamanho das bolhas formadas. A Figura 1.2 contém a representação de uma célula de flotação com agitação mecânica do tipo aeração forçada.

Figura 1.1 – Célula de flotação com agitação mecânica autoaerada.



Fonte: Lima, 2009.

Figura 1.2 – Célula de flotação com agitação mecânica com aeração forçada.



Fonte: Lima, 2009.

Devido a esse princípio de funcionamento, a célula de flotação com agitação mecânica é um simples e eficiente reator para o processo de ozonificação, pois permite uma distribuição uniforme das bolhas e da fase sólida no interior do flotador. A eficiência do processo de ozonificação utilizando o flotador depende diretamente da boa dispersão das bolhas de ozônio, do tempo de contato entre as fases (líquido-gás) e do diâmetro das bolhas formadas. Sendo a ozonificação uma operação unitária que tem como função a degradação de material orgânica utilizando uma fase gasosa contendo ozônio (LARA RAMOS *et al.*, 2019).

### 2.1.1 Definição e aplicação das técnicas de CFD

As técnicas de CFD utiliza de métodos numéricos para resolução das equações de conservação. A aplicação de um método numérico também pode ser dividida em três etapas principais, que são: pré-processamento, processamento e pós-processamento. Na etapa de pré-

processamento, define-se o domínio geométrico, e posteriormente é feita a discretização do domínio, formando assim a malha, os *softwares* mais utilizados para o desenvolvimento da geometria são: SpaceClaim<sup>®</sup>, DesignModeler<sup>®</sup>, Gambit<sup>®</sup>, SolidWorks<sup>®</sup>, etc. e para o desenvolvimento da malha, os mais utilizados são ICEM<sup>®</sup>, Meshing<sup>®</sup> e Gambit<sup>®</sup>. Nesta etapa podem ser definidas as propriedades físicas do fluido e demais parâmetros (condições de contorno e iniciais) necessários para a solução do problema (LIMA, 2005).

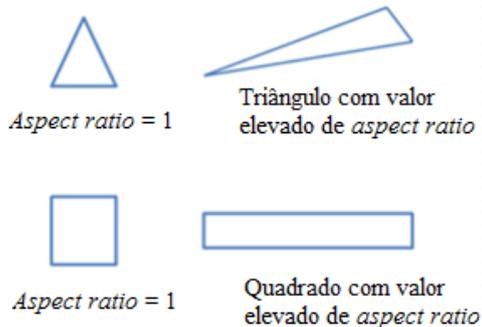
As malhas a serem geradas podem possuir diferentes formatos, tais como, triangular, quadrilátero, tetraédrico, hexaédrico, piramidal e prismático, sendo que, dentro de uma mesma malha pode-se ter várias formas de elementos. A qualidade dos resultados obtidos está diretamente ligada ao número de células da malha, entretanto, conforme há um aumento do número de células também há um aumento do custo computacional envolvido no processo. Malhas de melhor qualidade não são homogêneas, ou seja, elas não possuem o mesmo número de elementos em todas as regiões do equipamento, elas devem possuir um maior número de células nas regiões onde os fenômenos de transporte são predominantes, para que assim, obtenha-se resultados de alta exatidão com o menor número de elementos possível (VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007).

A qualidade de uma malha também pode ser verificada utilizando-se de alguns parâmetros, os mais utilizados são *Aspect Ratio*, *Skewness* e *Jacobian Ratio*. A razão de aspecto é definida como a razão entre a maior e menor aresta de um elemento e quanto mais próximo essa razão estiver de um, melhores são os resultados da simulação. Na Figura 1.3 estão representados os elementos com alto e baixo valor de razão de aspecto. O *Skewness* é definido como o desvio do vetor que conecta o centro dos volumes vizinhos e o centro da face, essa propriedade varia de 0 a 1, sendo que quanto mais próximo de 0, menor é a deformação do elemento (MOHAMMADI, 2011). A Figura 1.4 ilustra os elementos com alto e baixo *Skewness*. Altos valores de razão jacobiana, indicam que as células não são confiáveis do ponto de vista computacional (DILL, 2011). A Figura 1.5 contém o comportamento de células triangulares e quadriláteras com o aumento da razão jacobiana.

Na fase de processamento, aplica-se um *solver* baseado no modelo numérico, para resolução das equações conservativas de continuidade, de momento e de energia, para obtenção das grandezas de interesse (velocidade, pressão, temperatura). Os *softwares* comerciais mais utilizados no processamento da simulação são FLUENT<sup>®</sup> e CFX<sup>®</sup>, ambos pertencentes ao pacote computacional da ANSYS<sup>®</sup>. Na etapa de pós-processamento os resultados da simulação, que podem ser grandezas primárias, como, velocidades, pressões e temperaturas, ou até mesmo

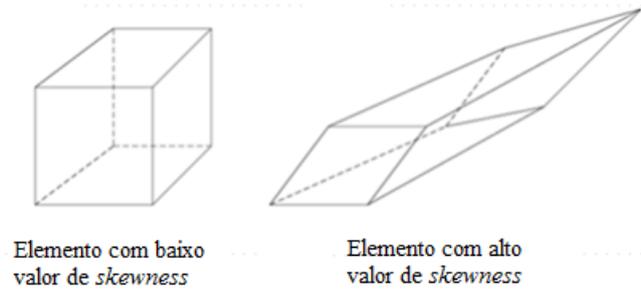
grandezas secundárias, como, coeficientes de arrasto, torque e coeficientes de transferências de calor são analisados para se verificar a validade do modelo numérico. Um dos métodos mais clássicos para validação de um modelo número é através de um comparativo dos resultados da simulação com resultados experimentais (LIMA, 2005).

Figura 1.3 – Elementos com valores altos e baixos de razão de aspecto.



Fonte adaptada: Petri (2020)

Figura 1.4 – Elementos com valores altos e baixos de *skewness*.



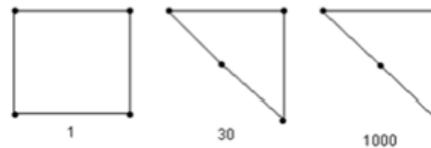
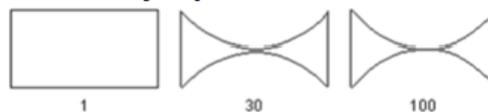
Fonte adaptada: Petri (2020)

Figura 1.5 – Elementos com valores altos e baixos de razão jacobiana.

*Jacobian ratio* para triângulos



*Jacobian ratio* para quadriláteros



Fonte adaptada: Petri (2020)

### 2.1.2 Equações de Conservação para sistemas isotérmicos

Para escoamento de fluidos newtonianos, incompressíveis e isotérmicos. A equação da continuidade e de Navier-Stokes, formam um conjunto de quatro equações diferenciais parciais não lineares e acopladas entre si para  $u$ ,  $v$ ,  $w$  e  $P$ . Porém, vale ressaltar que esse conjunto de equações possui apenas resolução analítica, para um número muito restrito de casos, onde a geometria e condições iniciais ou de contorno são simples (FOX *et al.*, 2018).

A equação da continuidade para um fluido newtoniano está representada na Equação 1.1 e as Equações 1.2.1, 1.2.2 e 1.2.3 representam a equação de Navier-Stokes para as direções x, y e z respectivamente (VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (1.1)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = - \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \rho g_x \quad (1.2.1)$$

$$\rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = - \frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \rho g_y \quad (1.2.2)$$

$$\rho \left( \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = - \frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + \rho g_z \quad (1.2.3)$$

Nestas equações,  $\rho$  é a densidade do fluido,  $u$  é a velocidade em x,  $v$  é a velocidade em y,  $w$  é a velocidade em z,  $P$  é a pressão do sistema,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica,  $t$  é o tempo e  $g_x$ ,  $g_y$  e  $g_z$  são as acelerações gravitacionais em suas respectivas direções (VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007).

### 2.1.3 Modelos de turbulência

Devido a impossibilidade de utilizar-se Navier-Stokes diretamente via simulação DNS (*Direct Numerical Simulation*), para resolver as flutuações de velocidade geradas pelas pequenas escalas de turbulência, torna-se necessário a utilização dos modelos de turbulência. Sendo a turbulência um regime de operação de qualquer sistema dinâmico cuja operação pode ser caracterizada por um número de graus de liberdade suficientemente alto, ela se caracteriza pelo elevado número de Reynolds. O fenômeno da turbulência está presente em diversas aplicações práticas de grande interesse das engenharias (VIEIRA, 2006).

A turbulência é um fenômeno contínuo, e qualquer escoamento de fluidos newtonianos, pode ser modelado pelas equações de Navier-Stokes (densidade e viscosidade dos fluidos constantes), entretanto, quanto maior o número de Reynolds, mais largo se torna o espectro de energia do escoamento, isso implica em altas frequências ou estruturas viscosas muito pequenas, sendo assim, se torna necessário malhas cada vez mais refinadas, conseqüentemente, isso requer um maior custo computacional (VIEIRA, 2006).

O escoamento turbulento é sempre tridimensional e transiente, caracterizado pela presença de muitos vórtices que ocupam uma larga faixa de escalas de comprimento e de tempo

e, portanto, para a resolução de todas estas escalas é requerida uma discretização espacial e temporal extremamente refinada, o que demanda um grande esforço computacional. Uma característica dos escoamentos turbulentos é o seu alto grau de liberdade, o qual corresponde ao número de equações lineares discretizadas a resolver em todos os pontos da malha, para que se possa caracterizar o escoamento de forma satisfatória (VIEIRA, 2006).

O *software* FLUENT<sup>®</sup>, possui os modelos de turbulência dentro da categoria *Reynolds Averaged Navier-Stokes* (RANS), essa categoria engloba os seguintes modelos, Spalart-Allmaras,  $k-\epsilon$ ,  $k-\omega$  e o *Reynolds Stress Model* (RSM), também possui o modelo LES que utiliza as características tanto da simulação *Direct Numeric Simulation* (DNS) quanto RANS e o modelo DES sendo a junção do modelo LES com o RANS. O *software* FLUENT<sup>®</sup> ainda possibilita a simulação com o modelo laminar, que despreza a turbulência no volume de controle e com fluidos invíscido, onde é desprezado a viscosidade do fluido, conseqüentemente é aplicado a equação de Euler.

O modelo *Standard*  $k-\epsilon$  foi proposto por Launder & Spalding (1972), ele possui duas equações de transporte, sendo que a resolução dessas equações separadamente, fornece de forma independente a velocidade de turbulência e as escalas de comprimento, este é um modelo semi-empírico. Este modelo assume que o escoamento é totalmente turbulento e os efeitos de viscosidade molecular são desprezíveis, logo o modelo *Standard*  $k-\epsilon$  somente é válido para escoamento totalmente turbulentos (ANSYS, 2018).

O modelo *Standard*  $k-\epsilon$  é baseado no modelo das equações de transporte para a energia cinética turbulenta ( $k$ ), que está representada na Equação 1.3 e para a taxa de dissipação ( $\epsilon$ ), que está representada na Equação 1.4 (ANSYS, 2018).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \epsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (G_k + C_{3\epsilon} G_b) - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k} + S_\epsilon \quad (1.4)$$

Onde,  $G_k$  representa a geração de energia cinética de turbulência devido aos gradientes de velocidade média,  $G_b$  é a geração de energia cinética de turbulência devido à flotabilidade,  $Y_M$  representa a contribuição da dilatação flutuante na turbulência compressível à taxa de dissipação global,  $\sigma_k$  e  $\sigma_\epsilon$  são os números de Prandtl turbulentos para  $k$  e  $\epsilon$ ,  $S_k$  e  $S_\epsilon$  são termos de fonte definidos pelo usuário,  $\rho$  é a densidade,  $\mu$  é a viscosidade,  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta,  $u_i$  é a velocidade do fluido,  $C_{1\epsilon}$  e  $C_{2\epsilon}$  são constantes do modelo (ANSYS, 2018).

A otimização desse modelo provém do modelo RNG (*Re-Normalisation Group*) k-ε proposto por Yakhot *et al.*, (1992), que melhorou os seguintes aspectos em comparação ao modelo *Standard* k-ε: possui um termo adicional em sua equação que melhora a precisão dos fluxos de tensão rápida, engloba o efeito de redemoinho na turbulência, logo aumenta a precisão para este tipo de fluxo e insere uma forma analítica para cálculo do número turbulento de Prandtl, sendo que para o modelo *Standard* k-ε, este valor é uma constante definida pelo usuário (ANSYS, 2018).

Para o modelo RNG k-ε, temos a equação diferencial para a energia cinética turbulenta (k), que está representada na Equação 1.5 e a equação diferencial para a taxa de dissipação (ε), que está representada na Equação 1.6.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (1.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} - R_\varepsilon + S_\varepsilon \end{aligned} \quad (1.6)$$

Sendo que, nestas equações,  $G_k$  representa a geração de energia cinética de turbulência devido aos gradientes de velocidade média,  $G_b$  é a geração de energia cinética de turbulência devido à flotabilidade,  $Y_M$  representa a contribuição da dilatação flutuante na turbulência compressível à taxa de dissipação global e  $R_\varepsilon$  é um termo adicional em relação ao modelo padrão. As quantidades  $\alpha_k$  e  $\alpha_\varepsilon$  são os números de Prandtl efetivos inversos para k e ε, respectivamente.  $S_k$  e  $S_\varepsilon$  são termos de fonte definidos pelo usuário,  $\rho$  é a densidade,  $\mu_{eff}$  é a viscosidade efetiva,  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta,  $u_i$  é a velocidade do fluido e  $C_{1\varepsilon}$ ,  $C_{2\varepsilon}$  são constantes do modelo (ANSYS, 2018).

Outra otimização para os modelos k-ε, é o modelo *Realizable* k-ε proposto por Shih *et al.*, (1995). Sendo que o modelo *Realizable* k-ε difere do modelo *Standard* k-ε principalmente em dois pontos, sendo eles, a inclusão de uma formulação alternativa para o cálculo da viscosidade turbulenta e uma equação de transporte modificada para a taxa de dissipação, que foi derivada de uma equação exata para o transporte da flutuação de vorticidade quadrada média. As Equações 1.7 e 1.8 contém a equação diferencial para a energia cinética turbulenta (k), e a equação diferencial para a taxa de dissipação (ε) (ANSYS, 2018).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (1.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \varepsilon u_j) \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \rho C_1 S \varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b + S_\varepsilon \end{aligned} \quad (1.8)$$

Onde,  $G_k$  representa a geração de energia cinética de turbulência devido aos gradientes de velocidade média,  $G_b$  é a geração de energia cinética de turbulência devido à flotabilidade,  $Y_M$  representa a contribuição da dilatação flutuante na turbulência compressível à taxa de dissipação global,  $\alpha_k$  e  $\alpha_\varepsilon$  são os números de Prandtl turbulentos para  $k$  e  $\varepsilon$ ,  $S_k$  e  $S_\varepsilon$  são termos de fonte definidos pelo usuário,  $\rho$  é a densidade,  $\mu$  é a viscosidade,  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta,  $u_j$  é a velocidade do fluido,  $C_1$  é um parâmetro adicional,  $C_{1\varepsilon}$  e  $C_2$  são constantes do modelo (ANSYS, 2018).

Seguindo um modelo com uma abordagem semelhante ao anterior, temos o modelo de turbulência *Standard*  $k$ - $\omega$  proposto por Wilcox (1998), este modelo possui novas modificações em relação ao  $k$ - $\varepsilon$ , sendo ela, incorporar efeitos de compressibilidade e expansão, a baixos Reynolds (ANSYS, 2018). Uma variante desse modelo foi proposta por Menter (1994), esse modelo é conhecido como SST-  $k$ - $\omega$  (*Shear-Stress Transport*).

Para o modelo *Standard*  $k$ - $\omega$ , temos a equação diferencial para a energia cinética turbulenta ( $k$ ), que está representada na Equação 1.9 e a equação diferencial para a taxa de dissipação específica ( $\omega$ ), que está representada na Equação 1.10 (ANSYS, 2018).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k - Y_k + S_k \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \omega u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + G_\omega - Y_\omega + S_\omega \quad (1.10)$$

Em estas equações,  $G_k$  representa a geração de energia cinética de turbulência devido ao gradiente de velocidade média,  $G_\omega$  representa a geração de  $\omega$ ,  $\Gamma_k$  e  $\Gamma_\omega$  representam a difusividade efetiva de  $k$  e  $\omega$ , respectivamente.  $Y_k$  e  $Y_\omega$  representam a dissipação de  $k$  e  $\omega$  devido à turbulência.  $S_k$  e  $S_\omega$  são termos de fonte definidos pelo usuário (ANSYS, 2018).

O modelo de turbulência de grandes escalas, *Large Eddy Simulation* (LES), não utiliza o conceito de média temporal de Reynolds, ao invés disso, esse modelo utiliza o processo de filtragem espacial das grandes escalas do escoamento, para que, através disso sejam encontradas

as equações de conservação da massa, quantidade de movimento e da conservação da energia (1° lei da termodinâmica). A aplicação do processo de filtragem espacial implica a imposição do tamanho do filtro, normalmente esse tamanho é definido como o tamanho dos volumes de controle da malha já construída (PEDRÃO, 2010).

A resolução das equações dos modelos de turbulência simultaneamente à resolução das equações de conservação e constitutivas de maneira analítica é inaplicável para a grande maioria dos casos de engenharia. Assim sendo, torna-se necessário o uso de aproximações numérica para resolução destas equações, sendo que para aplicar resoluções numéricas, inicialmente é necessário a discretização do domínio geométrico.

#### **2.1.4 Métodos de discretização**

Existem diversas técnicas de aproximação numérica que são implementadas as técnicas de CFD, sendo as mais comumente utilizadas: o método das diferenças finitas (MDF), o método dos elementos finitos (MEF) e o método dos volumes finitos (MVF). Vale ressaltar que outros métodos de discretização, como, o método espectral e o método dos elementos de contorno, também podem ser aplicados. Porém, os mesmos são aplicados a casos restritos, como, por exemplo, o método espectral, que somente pode ser utilizado para problemas periódicos, pois as equações de conservação são resolvidas no espaço de Fourier (LEMOS, 2011).

O método dos volumes finitos é a técnica mais empregada pelos pacotes comerciais de CFD, segundo Maliska (2005). Vale salientar que o *software* FLUENT® pertencente ao pacote computacional ANSYS® também utiliza o MVF. O primeiro passo para aplicar o método dos volumes finitos é dividir o domínio em volumes de controle discretos, para manufatura da malha computacional. O segundo passo, que é o passo chave, é definido por realizar a integral das equações de governo em cada um dos nós para alterar as equações da forma diferencial para a forma algébrica. Vale ressaltar que com a resolução da integral as variáveis estão nas faces do volume de controle. Como os valores das variáveis nas faces do volume de controle são desconhecidas é necessário utilizar os métodos de interpolação espacial e temporal, que são utilizados com intuito de obter valores aproximados para as faces dos volumes de controle, conhecendo os valores das variáveis no centro do volume de controle. E o último passo da aplicação do MVF é a resolução do sistema de equações algébricas (VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007).

Os métodos de interpolação espacial mais conhecidos são o método das diferenças centrais e método *Upwind*. Sendo que no método das diferenças centrais, considera-se que as

faces do volume estejam situadas no meio da distância entre os pontos nodais e este método é característico por representar fielmente as regiões de alto gradiente, mas pode fornecer resultados não-realísticos nas proximidades dos gradientes. Já o método *Upwind* aproxima os valores dos nós aos valores das faces, com relação à direção do escoamento de fluido, sendo que o uso do método *Upwind* em problemas de advecção dominante gera soluções fisicamente coerentes, porém suaviza os altos gradientes (PETRI, 2020).

Os principais métodos de interpolação temporal podem ser representados pela Equação 1.11.

$$\int_{\Delta t}^{t+\Delta t} \phi_P dt = [f\phi_P^{t+\Delta t} + (1-f)\phi_P^t]\Delta t \quad (1.11)$$

Onde,  $t$  é o tempo,  $\Delta t$  é o passo de tempo da simulação,  $\phi_P$  é uma grandeza genérica do escoamento e  $f$  é um adimensional, que vale 0 para o esquema explícito, vale 1 para o esquema implícito e vale 0,5 para o esquema semi-implícito. Sendo que no caso da formulação explícita são geradas equações desacopladas e para as formulações implícita e semi-implícita são geradas equações acopladas (PETRI, 2020).

Já os fatores de relaxação são valores que alteram as estimativas iniciais da simulação, que para casos isotérmicos são a pressão, a densidade, as forças de corpo e o momento. Os fatores de relaxação são importantes pois são eles que irão determinar a convergência inicial da simulação, devido ao fato que com as estimativas iniciais é feito a interpolação espacial e temporal dos parâmetros para posterior resolução numérica das equações de conservação (PETRI, 2020).

Um ponto importante, para assegurar a qualidade dos resultados obtidos é o critério de convergência, sendo esse parâmetro definido como o erro máximo permitido associado a resolução numérica das equações de conservação e constitutivas envolvidas na simulação. O *Time Step Size* representa o tamanho do passo de tempo da simulação, e quanto maior o passo de tempo, maior serão os resíduos associados a simulação, podendo assim, fazer com que o erro ultrapasse o critério de convergência.

### **2.1.5 Trabalhos correlatos**

Vários trabalhos já foram desenvolvidos com objetivos correlatos, como a modelagem monofásica de tanque agitados. Vale ressaltar que este trabalho contempla a simulação de uma célula de flotação, para a abordagem inicial da modelagem apenas da fase primaria (água), com

isso, nessa condição a célula de flotação assemelha-se aos tanques agitados, variando apenas as geometrias usuais do sistema de agitação e *baffle*. Deste modo, alguns trabalhos similares estão descritos a seguir.

Joshi *et al.*, (2011a,b) realizou uma detalhada revisão da literatura para fluxos turbulentos monofásicos e multifásicos para reatores de tanques agitados, onde foi realizado o ajuste dos parâmetros dos modelos de turbulência para diversos tipos de agitadores mecânicos. Através das comparações dos resultados obtidos nas simulações com valores obtidos experimentalmente de velocidade tangenciais, radiais e axiais em diferentes pontos do tanque agitado. Por meio desta análise, recomenda-se o modelo LES para obter previsões com alta precisão do escoamento turbulento na região do impulsor, entretanto o modelo LES possui um altíssimo custo computacional para tanques de tamanho industrial com altos números de Reynolds.

Basavarajappa *et al.*, (2015) estudou via simulações CFD o fluxo turbulento de um sistema monofásico para um tanque agitador em escala laboratorial. Foi realizado essa análise para a turbina Rushton e para o impelidor de flotação. O fluido de operação foi a água nas condições padrões. Os parâmetros utilizados para validação das simulações foram as velocidades radiais e axiais em diferentes pontos do tanque. E foram avaliados os modelos de turbulência  $k-\epsilon$  com suas variantes e o modelo de *Reynolds Stress Model* (RSM). Ambos modelos apresentam resultados semelhantes para prever as velocidades radiais.

O trabalho de Murthy & Joshi (2008) avaliou detalhadamente a capacidade preditiva de alguns modelos de turbulência, sendo eles, o modelo *Standard*  $k-\epsilon$ , o modelo *Reynolds-Stress Transport Model* (RSTM) e o modelo *Large Eddy Simulations* (LES). E esta análise foi feita para vários tipos de impelidores. Os valores simulados de velocidades médias radiais, axiais e tangenciais, além do valor da energia cinética turbulenta foram comparadas com dados experimentais. Com isso, o modelo LES foi aquele que apresentou a melhor performance para todas as variáveis de fluxo. Já os modelos *Standard*  $k-\epsilon$  e RSTM não apresentaram resultados satisfatórios para prever a energia cinética turbulenta na região do impelidor.

Desse modo, como pode-se constatar o modelo LES é aquele recomendado para simulação de tanques agitados de acordo com a literatura, com isso, o mesmo será definido como a referência, para avaliar o desempenho dos demais modelos de turbulência utilizados em comparação com o modelo LES.

## 2.2 Objetivos

Sendo assim, este trabalho teve como objetivo geral realizar um estudo hidrodinâmico para a célula de flotação. Com isso, o primeiro passo foi realizar o teste de independência de malha, para se obter a malha com o menor número de células, na qual os erros envolvidos no processo de discretização tornam-se desprezíveis.

Para a simulação da célula de flotação foram utilizados os seguintes modelos de turbulência: *Standard k- $\epsilon$* , *RNG k- $\epsilon$* , *Realizable k- $\epsilon$*  e *Standard k- $\omega$*  e, os resultados obtidos com esses modelos foram comparados com os valores obtidos com o modelo LES, para que assim, seja possível determinar o modelo no qual os resultados mais se assemelham ao modelo de referência.

Esses modelos foram escolhidos principalmente devido a sua robustez e aplicabilidade para o caso simulado, tendo em vista, que estes são os principais modelos utilizados para simulação de sistemas agitados de acordo com a literatura. Vale ressaltar que outro ponto crucial para simulação destes modelos, foi poder avaliar a diferença dos resultados entre os modelos que consideram e desprezam os efeitos de redemoinhos de turbulência. Sendo este um princípio extremamente importante para a simulação deste equipamento, tendo em vista o movimento rotacional do fluido.

Posteriormente a escolha da malha e do modelo de turbulência mais adequados, foi realizado a análise da influência da velocidade angular do agitador mecânico na mistura do fluido no tanque, avaliando as velocidades tangenciais, radiais e axiais em diferentes posições da célula de flotação. As rotações utilizadas foram de 900, 1500 e 3300 rpm.

## 2.3 Materiais e Métodos

### 2.3.1 Metodologia experimental

Os experimentos foram realizados na planta piloto da *Universidad del Valle* (Univalle), na cidade de Cali, Colômbia. A unidade experimental está representada na Figura 1.6, sendo a mesma utilizado nos trabalhos experimentais de Lara Ramos *et al.*, (2019) e (2021). Porém, ressalta-se que os resultados experimentais que serão apresentados foram realizados especificamente para esse trabalho. A célula estava preenchida com água a temperatura ambiente, e foi feito o experimento para as rotações iguais a 900, 1500 e 3300 rpm.

Para analisar o comportamento do escoamento do fluido no interior da célula de flotação foi feita a gravação de vídeos sem a injeção de oxigênio e ozônio, trabalhando apenas com água no equipamento. Ressalta-se que esses resultados obtidos apenas qualitativos.

Figura 1.6 – Unidade experimental antes da injeção do corante.



Fonte: Do autor (2021)

### 2.3.2 Metodologia numérica

O domínio da solução numérica foi dividido em pequenos volumes de controle, para que posteriormente as equações de transporte pudessem ser aplicadas. A manufatura da geometria e das malhas computacionais, advém dos *softwares* comerciais SpaceClaim® e Meshing®, respectivamente. A estrutura base das malhas foi utilizada pelo *software* FLUENT®, durante as simulações. O *software* FLUENT® pertence ao pacote ANSYS®.

#### 2.3.2.1 Geometria e Dimensões

No ambiente SpaceClaim® foi construído a geometria da célula de flotação, que é constituída por um recipiente cilíndrico, um *baffle* e um agitador mecânico. Sendo o *baffle* um quebra ondas, que é uma parede sobreposta ao agitador mecânico, que tem como função, aumentar a turbulência no interior da célula de flotação e favorecer o cisalhamento da mistura oxigênio-ozônio, que contribui para redução de tamanho das bolhas.

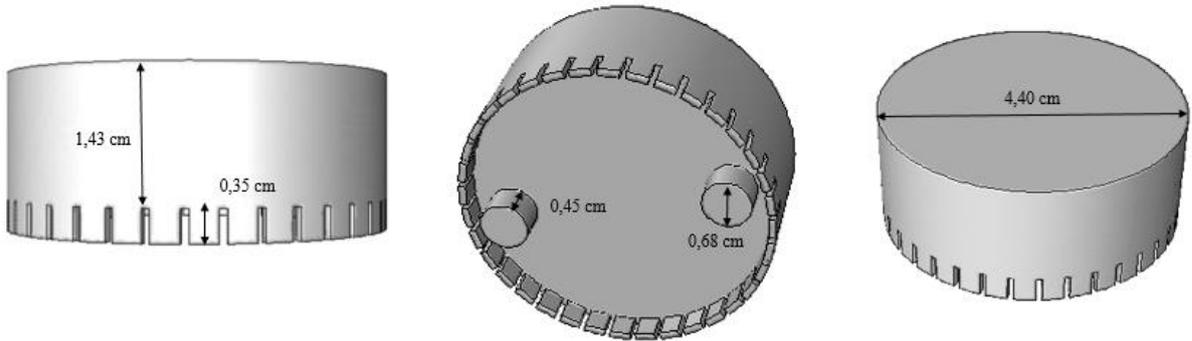
A geometria da célula de flotação (1) e as características do *baffle* (2) e do agitador mecânico (3) estão detalhadas na Tabela 1.1 e Figuras 1.7, 1.8 e 1.9.

Tabela 1.1 – Dimensões da célula de flotação.

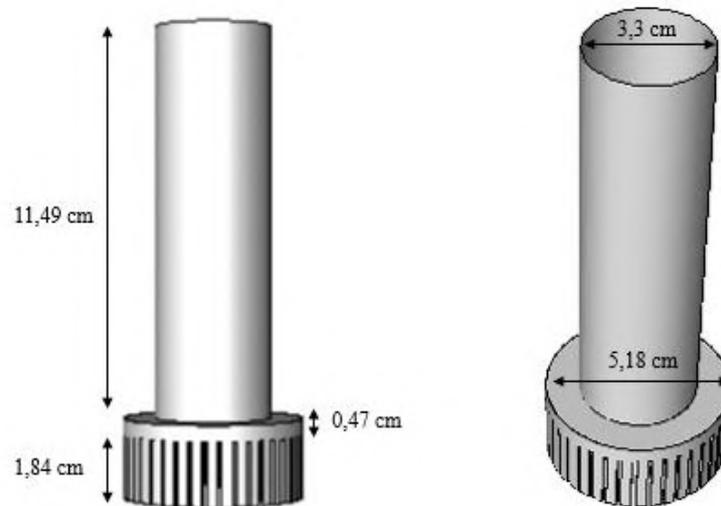
<b>Célula</b>	Altura (H)	16,15 cm
	Diâmetro (D)	13,18 cm
	Distância entre fundo e o agitador mecânico (C)	2,45 cm
<b>Agitador e baffle</b>	Diâmetro do agitador mecânico (d)	4,4 cm
	Número de dentes ( $N_b$ )	40
	Comprimento do dente do <i>baffle</i> (A)	1,84 cm
	Largura do dente do agitador mecânico (l)	0,286 cm
	Diâmetro do <i>baffle</i> ( $d_b$ )	5,18 cm

Fonte: Do autor (2021)

Figura 1.7 – Geometria e dimensões do agitador mecânico.

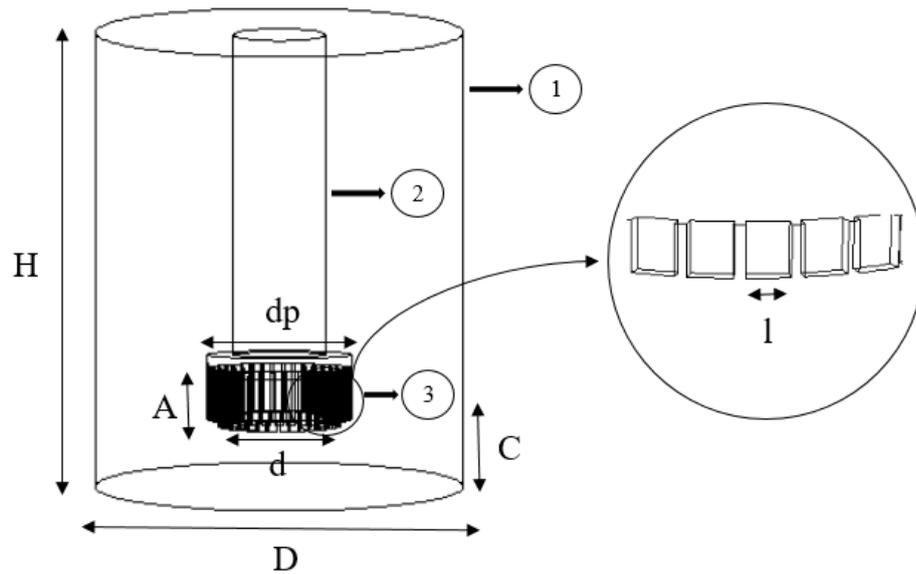


Fonte: Do autor (2021)

Figura 1.8 – Geometria e dimensões do *baffle* utilizado.

Fonte: Do autor (2021)

Figura 1.9 – Representação esquemática da célula de flotação.



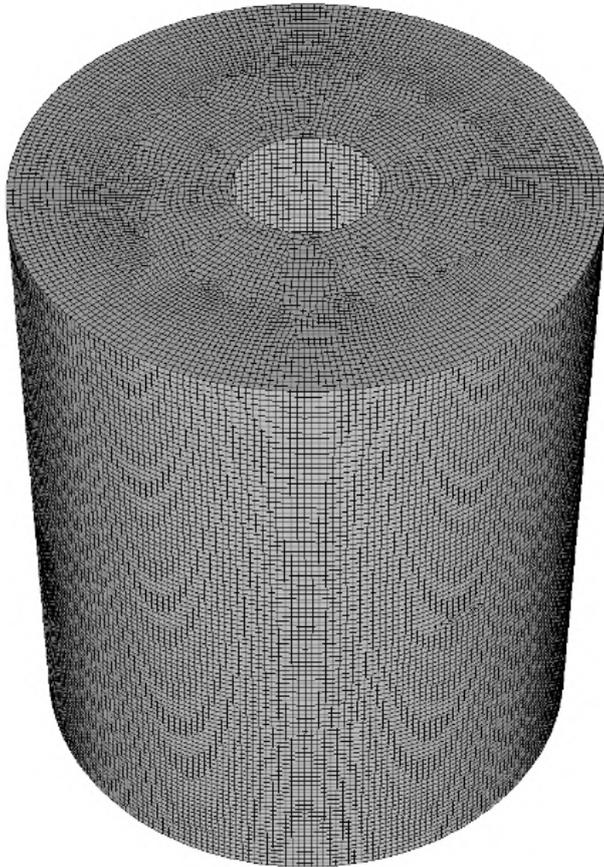
Fonte: Do autor (2021)

### 2.3.2.2 Discretização do domínio geométrico

Posteriormente a construção da geometria, a mesma foi exportada ao *software* Meshing<sup>®</sup> e foram construídas três diferentes malhas, para realizar o teste de independência de malha. Os números de células utilizados foram 348.823, 757.138 e 1.007.417. As malhas foram manufaturas com elementos predominantemente hexaédricos, sendo esse o tipo de elementos ideal e recomendado para a aplicação do método dos volumes finitos (MVF), tendo em vista que ele melhora a acurácia dos resultados obtidos e minimiza recursos computacionais.

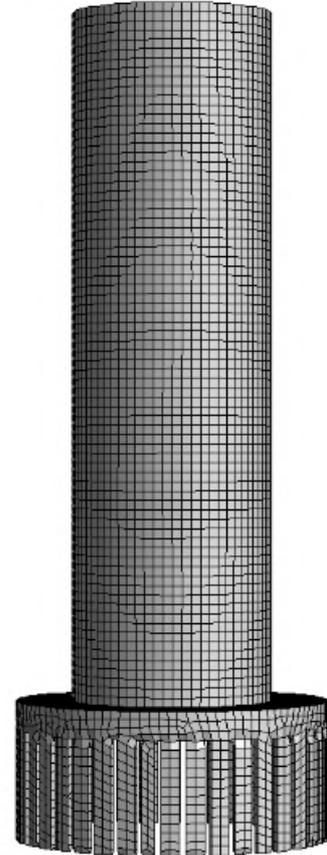
A malha da célula de flotação, da superfície externa do *baffle* e da superfície externa do agitador mecânico estão representadas nas Figuras 1.10, 1.11 e 1.12, respectivamente, para a malha com 757.138 elementos. Analisando essas figuras podemos verificar que a pequena quantidade de elementos não hexaédricos estão predominantemente presente na região central do agitador mecânico e nos dentes do agitador mecânico e do *baffle*. Ressaltar que não foi manufatura uma malha computacional no volume do agitador mecânico e do *baffle*, mas apenas na região do domínio do escoamento.

Figura 1.10 – Malha da célula de flotação, referente a malha com 757.138 células.



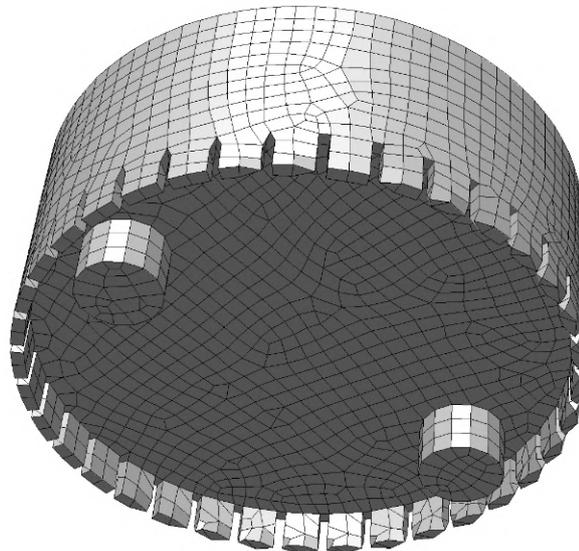
*Fonte: Do autor (2021)*

Figura 1.11 – Malha da superfície externa do *baffle*, referente a malha com 757.138 células.



*Fonte: Do autor (2021)*

Figura 1.12 – Malha da superfície externa do agitador mecânico, referente a malha com 757.138 células.



*Fonte: Do autor (2021)*

### 2.3.2.3 Condições de contorno

Antes da transferência da malha do Meshing® para o FLUENT®, deve-se atribuir a cada face um tipo de fronteira, para que, em um momento posterior e oportuno, as mesmas estejam aptas a receberem as condições de contorno necessárias para posterior simulação. No Meshing® é criada a região, para que depois no FLUENT® seja definido a natureza da região criada. A face superior da célula de flotação é definida como *pressure outlet*, as demais faces da célula de flotação são definidas como *wall*, o agitador mecânico e o *baffle* também são definidos como *wall*, entretanto no caso do agitador mecânico é definido uma velocidade angular.

A Tabela 1.2 contém as condições iniciais e de contorno para a simulação da célula de flotação. As simulações básicas foram feitas utilizando a rotação de 900 rpm e para todas as simulações foi utilizado a condição de não deslizamento nas paredes. O método de acoplamento pressão-velocidade utilizado para as simulações monofásicas foi o SIMPLE.

Tabela 1.2 – Condições iniciais e de contorno.

• Simulação 3D e em dupla precisão	
• Regime transiente e isotérmico	
• Saída: Pressão atmosférica da cidade de Cali (101000 Pa)	
• Método de discretização da pressão: Standard	
• Método de discretização do momentum: First Order Upwind	
• Método de partição da malha: Metis (COSTA <i>et al.</i> , 2020)	
• Fatores de relaxação (PETRI <i>et al.</i> , 2009)	Pressure = 0,3 Momentum = 0,1 Body Force = 1 Density = 1
• Criterio de Convergencia = $10^{-4}$	
• Time Step Size (s) = $10^{-6}$ a $3 \cdot 10^{-4}$	

Fonte: Do autor (2021)

A simulação começou com o *Time Step Size* de  $10^{-6}$  e conforme o tempo passa esse valor vai sendo alterado até o limite superior de  $3 \cdot 10^{-4}$ . Foram simulados 10 segundos, pois com esse tempo foi possível garantir que o equipamento atingiu o estado estacionário.

Outro ponto importante para essa simulação, foi a inicialização do problema, pois como não há entradas e saídas de fluido no equipamento, a simulação apresentou problemas na convergência inicial da equação da continuidade. Para resolver este problema, o caso foi inicializado utilizando a inicialização padrão a partir da opção “*all zones*” e foi inserido uma velocidade muito baixa na direção axial, com magnitude de 0,01 m/s. Com isso, a simulação obteve convergência nas interações iniciais, e o valor de velocidade inserido na inicialização,

vai diminuindo seu valor até zero, que é o valor correto, devido ao fato, que neste caso o equipamento não possui entradas e saídas.

#### 2.3.2.4 Comparação entre os modelos de turbulência

Para a modelagem da fluidodinâmica no interior da célula de flotação, a turbulência é um dos fatores mais importante, assim sendo, foi feita a análise dos modelos de turbulência disponíveis no *software* FLUENT®. Com isso, foi avaliado o comportamento dos modelos  $k-\epsilon$  e suas variantes (*Standard*, RNG e *Realizable*) e do modelo *Standard*  $k-\omega$  em comparação ao modelo *Large Eddy Simulation* (LES), que notoriamente é o modelo que melhor descreve o comportamento do escoamento de água no interior de tanques com agitação mecânica. Sendo que este fato pode ser constatado em Joshi *et al.*, (2011 a, b) e Murthy & Joshi (2008).

Porém, para tanques industriais o custo computacional do modelo LES é consideravelmente elevado, outro ponto que limita a aplicação industrial deste modelo, é que para tanques com alto número de Reynolds, a modelagem de filtração espacial das grandes escalas não é completamente resolvida, sendo, portanto, necessário um refino maior da malha computacional, para resolução desses casos, aumentando ainda mais o custo computacional.

Sendo assim, se faz necessário estudos que comparem os modelos de turbulência com custo computacional inferior, como os modelos utilizados, em comparação ao modelo LES, a fim de determinar quais modelos podem ser utilizados sem comprometer a qualidade dos resultados computacionais obtidos, que viabilizem uma possível aplicação industrial.

Para avaliar o modelo  $k-\epsilon$  e suas variante e o modelo *Standard*  $k-\omega$  em comparação ao modelo LES, foram utilizados os valores das velocidades médias tangenciais ( $\langle u_1 \rangle$ ), radiais ( $\langle u_2 \rangle$ ) e axiais ( $\langle u_3 \rangle$ ) em diferentes posições.

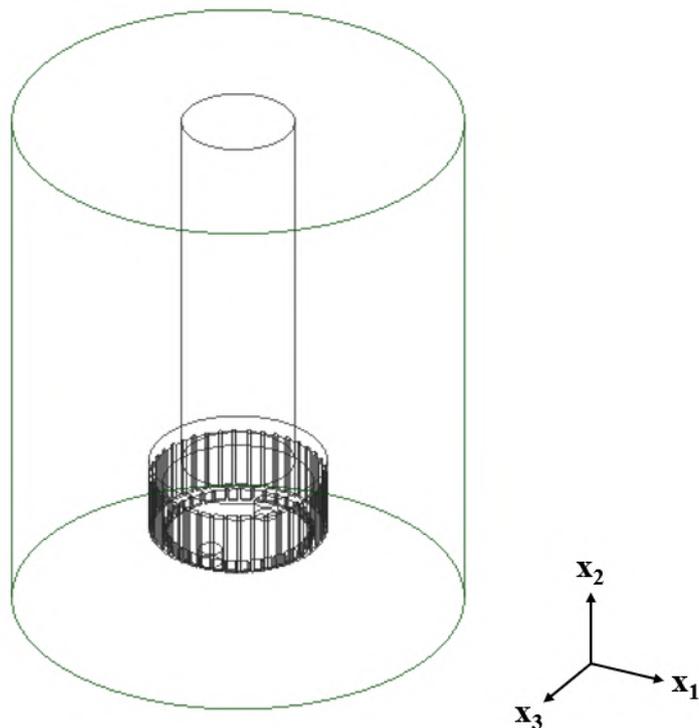
Para que a análise dos modelos de turbulência e do efeito da velocidade angular na agitação do fluido pudessem ser comparadas, foi feita adimensionalização das velocidades médias tangenciais, radiais e axiais utilizando a velocidade linear máxima do agitador ( $U_{lip}$ ), sendo que esse valor é encontrado nas extremidades do agitador. Além disso, para facilitar o estudo das velocidades em coordenadas cilíndricas em diferentes posições axiais ( $x_2$ ), esse eixo foi adimensionalizado utilizando a altura do tanque (H).

Vale ressaltar que as velocidades tangenciais, radiais e axiais, são calculadas com base no sistema de coordenadas que é definido pelo eixo de rotação e pela origem especificada ao sistema, sendo que para este caso o eixo de rotação definido foi o eixo  $x_2$  na direção positiva e

a origem especificada ao sistema foi um ponto de simetria com relação ao eixo  $x_2$  para a célula de flotação. Com o referencial inercial definido ao sistema, velocidades tangenciais positivas são baseadas na regra da mão direita usando o eixo de rotação positivo, velocidades radiais positivas apontam radialmente para fora do eixo de rotação e velocidades axiais positivas estão na direção do vetor do eixo de rotação. A Figura 1.13 contém a geometria da célula de flotação com seu respectivo eixo de coordenadas, para facilitar a visualização do sentido das velocidades analisadas.

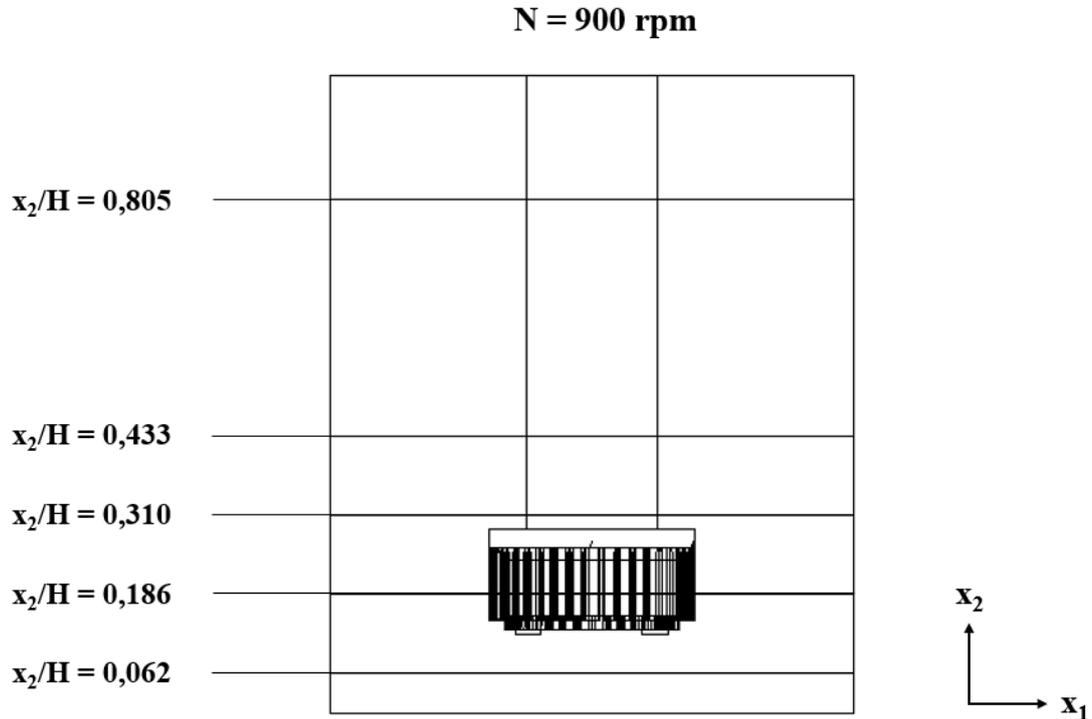
Como já foi dito, para analisar os modelos de turbulência avaliados em comparação ao modelo LES, foi utilizado as velocidades médias tangenciais, radiais e axiais em diferentes posições axiais, sendo escolhidas 5 diferentes posições, conforme pode ser observado na Figura 1.14. A rotação utilizada foi de 900 rpm no sentido anti-horário ( $Re = 28.901$ ), para assegurar o escoamento no turbulento.

Figura 1.13 – Representação da geometria da célula de flotação com seu respectivo eixo de coordenadas.



Fonte: Do autor (2021)

Figura 1.14 – Representação das seções de análise das velocidades médias tangenciais, radiais e axiais.



Fonte: Do autor (2021)

Para avaliar os desempenhos dos modelos a dois parâmetros em comparação ao modelo LES, foi utilizado o erro relativo, sendo que a Equação 1.12 contém a expressão matemática para o cálculo deste parâmetro estatístico.

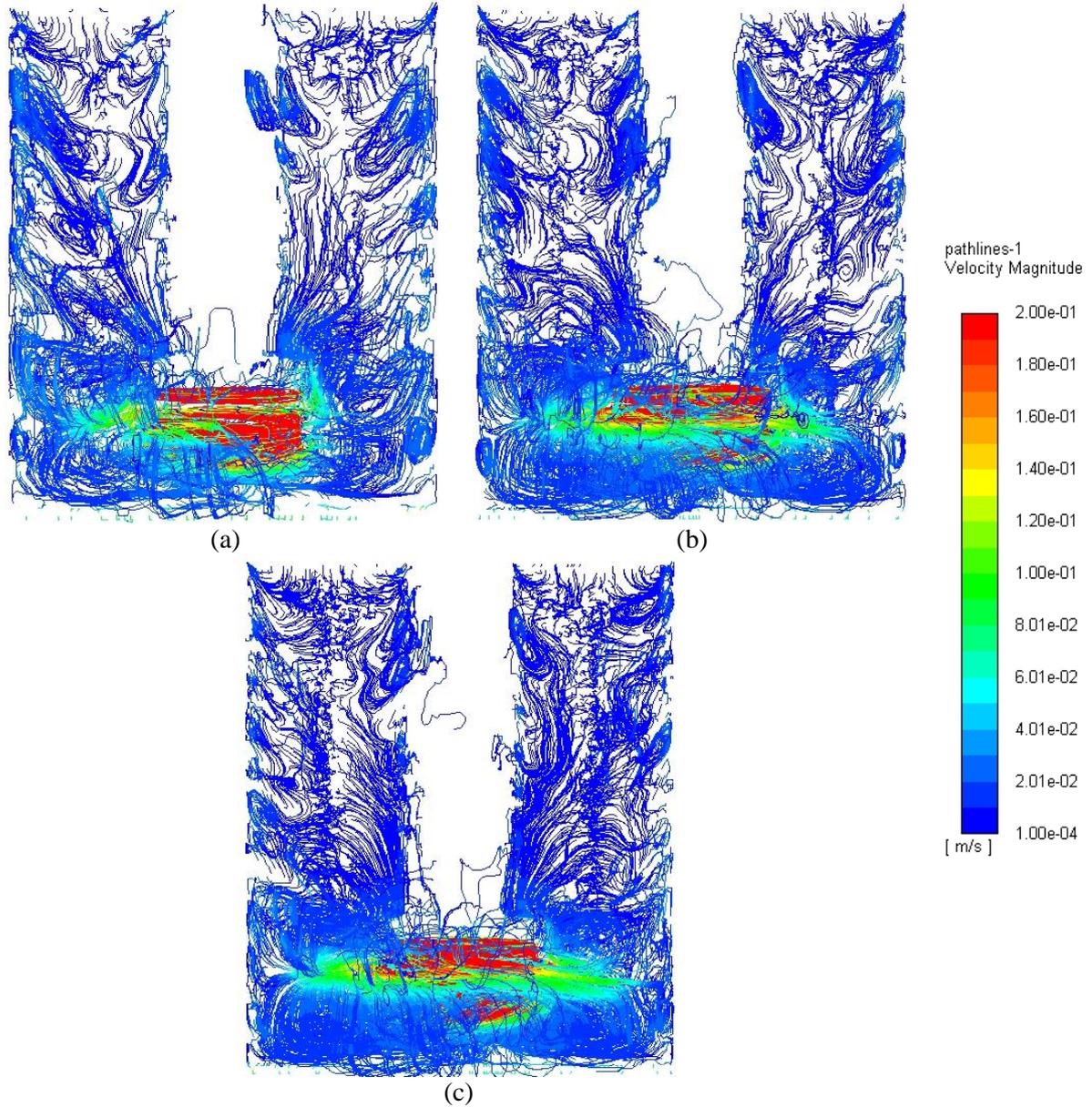
$$\text{Erro Relativo (\%)} = \frac{\text{Valor real} - \text{Valor teórico}}{\text{Valor real}} \times 100 \quad (1.12)$$

## 2.4 Resultados e Discussões

### 2.4.1 Teste de Independência de Malha

O teste de independência de malha é realizado para tornar desprezíveis os erros relacionados ao processo de discretização, com isso, através desta análise é encontrado o menor número de células necessário para simular o equipamento em questão. Para a célula de flotação foram utilizadas três diferentes malhas com 348.823, 757.138 e 1.007.417 elementos. Para avaliar essas malhas, foram utilizados o campo vetorial de velocidade (disponível no apêndice deste trabalho na Figura A.1) e o campo de velocidade (Figura 1.15). Além disso, também foram utilizados os valores de velocidade média, máxima e o número de Reynolds médio, conforme pode ser observado na Tabela 1.3. Ressalta-se que os erros relativos foram calculados com base na malha mais refinada.

Figura 1.15 – Campo de velocidade (a) da malha com 348.823 elementos; (b) da malha com 757.138 elementos e (c) da malha com 1.007.417 elementos.



Fonte: Do autor (2021)

Tabela 1.3 – Valores de velocidade média, máxima e número de Reynolds simuladas para o reator de flotação.

N° de elementos	Velocidade média (m/s)	Erro relativo (%)	Velocidade máxima (m/s)	Erro relativo (%)	Reynolds médio	Erro relativo (%)
348.823	0,025	25%	1,585	91%	3240	24%
757.138	0,021	5%	0,788	5%	2782	7%
1.007.417	0,02	-	0,831	-	2606	-

Fonte: Do autor (2021)

Analisando as Figuras A.1 e 1.14 e Tabela 1.3, pode-se concluir que a malha com 757.138 é aquela na qual os erros de discretização são desprezíveis, pois observando os campos vetoriais de velocidade e o campo de velocidade, pode-se constatar que quase não há diferença entre os campos, para as malhas com 757.138 e 1.007.417 células. No entanto, com a malha com 348823 células, essa diferença é acentuada, entretanto, vale ressaltar que analisando a Tabela 1.3, essa conclusão torna-se mais simples, pois a velocidade média, a velocidade máxima e o número de Reynolds médio são próximos entre as malhas com 757.138 e 1.007.417 células. Porém, para a malha com 348.823 células essas diferenças foram significativas, devido aos altos valores de erros relativos obtidos, ficando nítido os erros por discretização, demonstrando que os erros por discretização na malha com menor número de elementos não são desprezíveis.

#### 2.4.2 Qualidade das Malhas Obtidas

Para analisar a qualidade das malhas geradas foram utilizados parâmetros de *Aspect Ratio*, de *Skewness* e de *Jacobian Ratio*. A Tabela 1.4 contém os valores mínimos, máximos, médios e desvio padrões, considerando toda a malha manufaturada, que é constituído majoritariamente de elementos hexaédricos, entretanto também contém elementos do tipo tetraédrica, prismático e piramidal.

Tabela 1.4 – Valores mínimos, máximos, médio e o desvio padrão para *Aspect Ratio*, de *Skewness* e de *Jacobian Ratio* para as três malhas utilizadas.

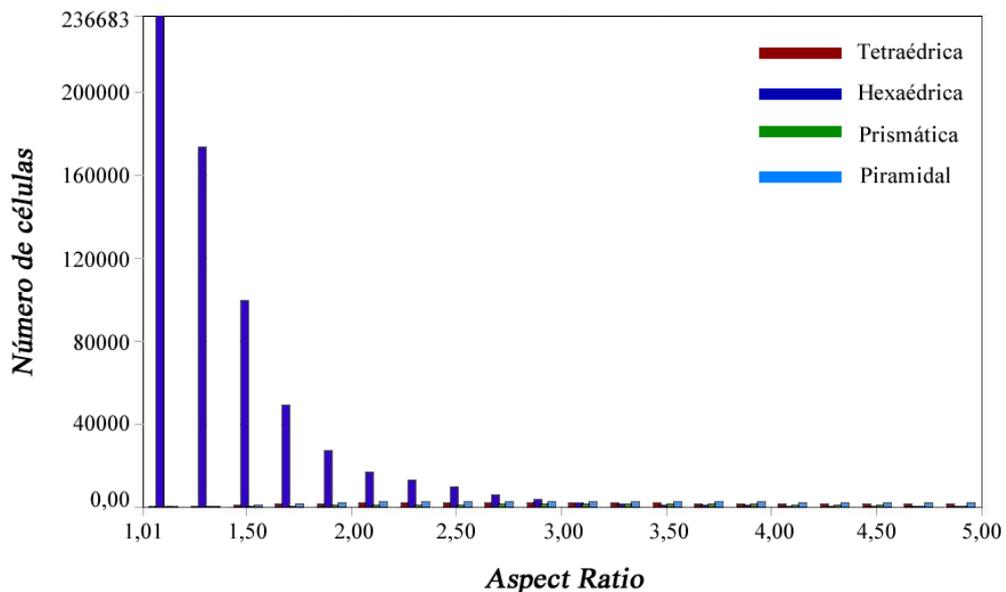
	N° de células	348.823	757.138	1.007.417
<i>Aspect Ratio</i>	<b>Mínimo</b>	1,008	1,005	1,004
	<b>Máximo</b>	428	2152	28617
	<b>Média</b>	2,372	2,218	2,439
	<b>Desvio padrão</b>	4,492	5,180	36,010
<i>Skewness</i>	<b>Mínimo</b>	0,0017	0,0016	0,0011
	<b>Máximo</b>	1,000	1,000	1,000
	<b>Média</b>	0,221	0,192	0,217
	<b>Desvio padrão</b>	0,270	0,259	0,273
<i>Jacobian Ratio</i>	<b>Mínimo</b>	1,000	1,000	1,004
	<b>Máximo</b>	128	103	28617
	<b>Média</b>	1,439	1,376	2,439
	<b>Desvio padrão</b>	1,094	0,859	36,014

Fonte: Do autor (2021)

Analisando os valores médios de *Aspect Ratio*, *Skewness* e *Jacobian Ratio* obtidos para as três malhas manufaturadas, é possível concluir que todas as malhas geradas, possuem em geral uma boa qualidade. Analisando os valores mínimos obtidos, também pode-se concluir que todas as malhas possuem elementos com a mais alta qualidade, entretanto observando os valores de máximos obtidos, pode-se constatar que as malhas manufaturadas também possuem elementos de baixa qualidade, porém em menor quantidade.

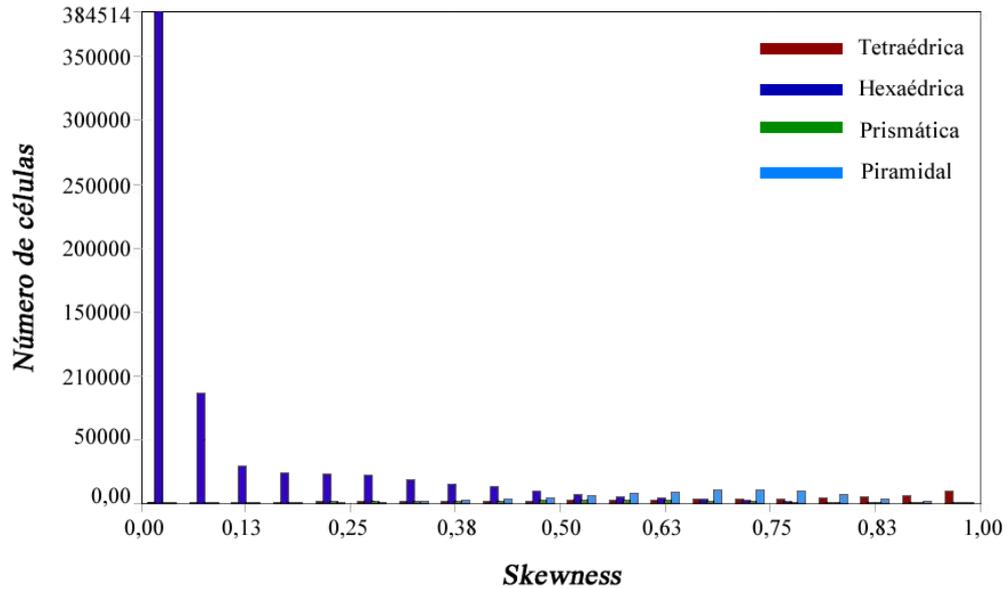
Outro detalhe que se pode constatar é que conforme há um aumento do número de elementos a qualidade média dos elementos tende a melhorar, no entanto os valores de máximo e de desvio padrão tem um aumento considerável, indicando que surgem elementos de péssima qualidade, sendo esse comportamento esperado para que a malha possa ser manufaturada em todo domínio geométrico. Entretanto a malha com 1.007.417 células, obteve um aumento muito significativo nos valores de máximo e de desvio padrão obtidos e, também apresentou um leve aumento dos valores médios, indicando que essa malha no geral possui uma menor qualidade. Portanto a malha com 757.138 células é a que possui a melhor qualidade analisando o *Aspect Ratio*, o *Skewness* e o *Jacobian Ratio*. As Figura 1.16, 1.17 e 1.18 contém os gráficos de *Aspect Ratio*, de *Skewness* e de *Jacobian Ratio*, respectivamente, para a malha com 757.138 células,

Figura 1.16 – Gráfico da *Aspect Ratio* para a malha com 757.138 elementos.



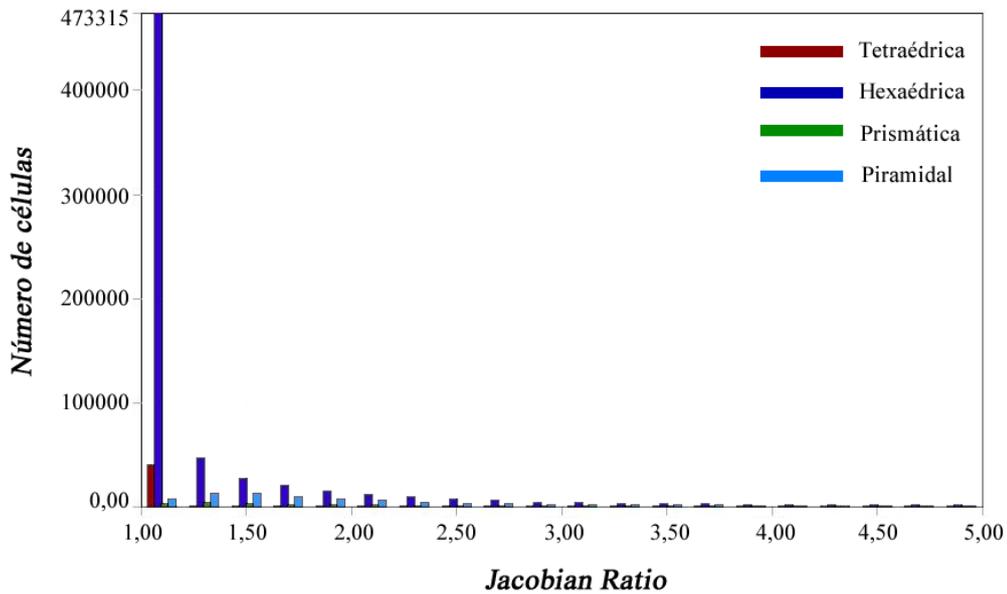
Fonte: Do autor (2021)

Figura 1.17 – Gráfico da *Skewness* para a malha com 757.138 elementos.



Fonte: Do autor (2021)

Figura 1.18 – Gráfico da *Jacobian Ratio* para a malha com 757.138 elementos.



Fonte: Do autor (2021)

Portanto a malha com 757.138 elementos foi utilizada em análises posteriores, pois com ela os erros de discretização são desprezíveis e tem-se um menor custo computacional em comparação a malha com 1.007.417 células. Além disso, outro ponto que torna a malha com 757.138 células preferencial entre as demais, é o fato de esta malha possuir uma maior qualidade de seus elementos.

### 2.4.3 Análises dos Modelos de Turbulência

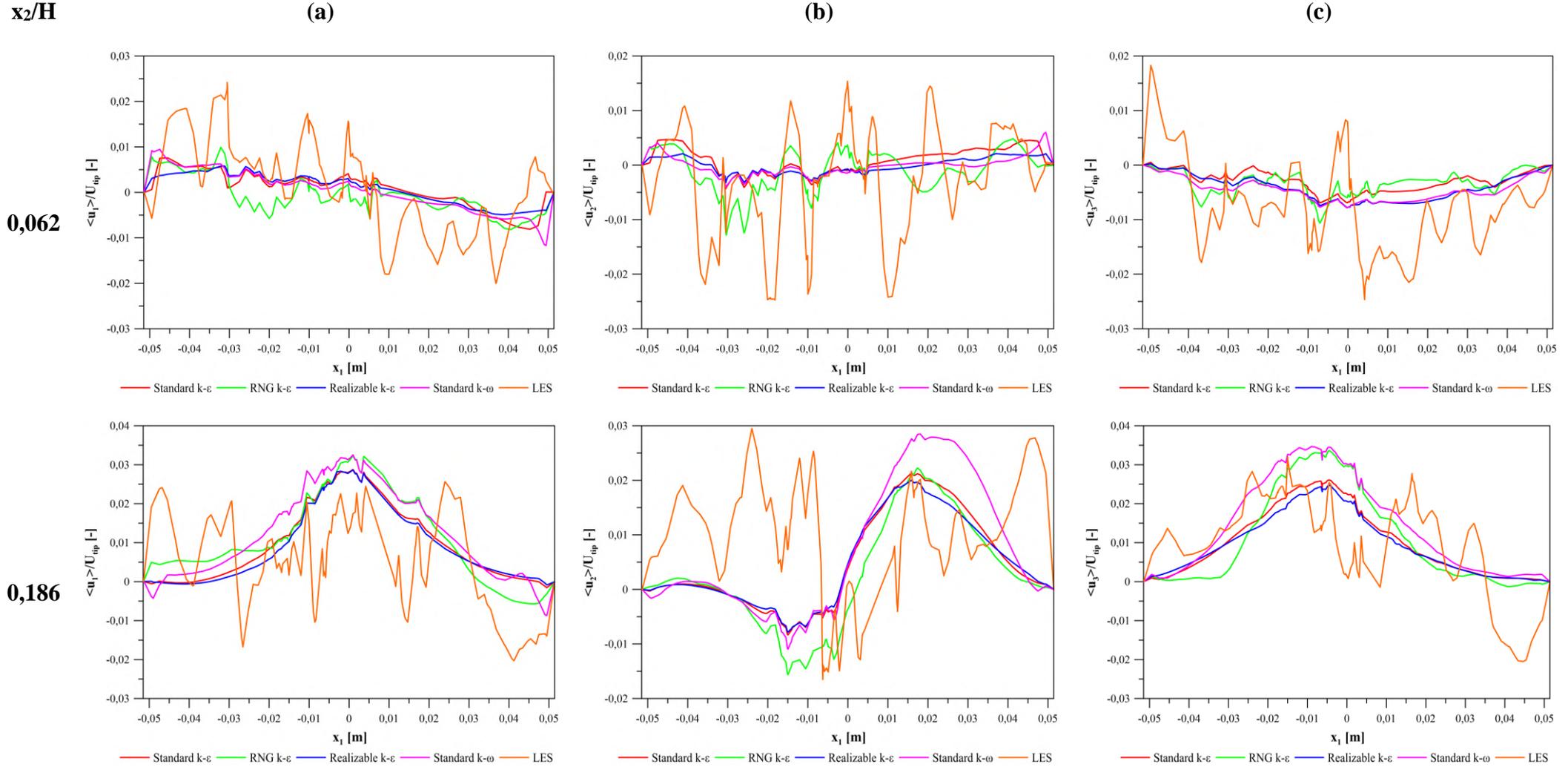
Para avaliar o desempenho dos modelos  $k-\varepsilon$  e suas variante e do modelo *Standard*  $k-\omega$ , foram avaliadas as velocidades médias tangenciais  $\langle u_1 \rangle$ , radiais  $\langle u_2 \rangle$  e axiais  $\langle u_3 \rangle$  nas posições expressas pela Figura 1.14. A Figura 1.19 e Tabela 1.5 contém o comportamento de  $\langle u_1 \rangle$ ,  $\langle u_2 \rangle$  e  $\langle u_3 \rangle$  e os erros relativos (ER) máximos, mínimos e médios para  $x_2/H = 0,062$ ;  $x_2/H = 0,186$ ;  $x_2/H = 0,310$ ;  $x_2/H = 0,433$  e  $x_2/H = 0,805$ , respectivamente.

Na posição  $x_2/H = 0,186$  pode-se observar que principalmente nas regiões de maior velocidade, foi obtido um desvio na magnitude das velocidades entres os modelos a dois parâmetros testados. Sendo que em geral os modelos *Standard*  $k-\omega$  e RNG  $k-\varepsilon$  apresentaram uma maior magnitude, com exceção para a velocidade radial, sendo que para essa variável, a magnitude obtida com o modelo *Standard*  $k-\omega$  foi relativamente superior aos valores obtidos com os demais modelos a dois parâmetros. Porém, salienta-se que essa maior velocidade radial obtida aproximadamente para  $x_1 = 0,02$  m, utilizando o modelo *Standard*  $k-\omega$ , não é condizente com a amplitude obtida com o modelo LES.

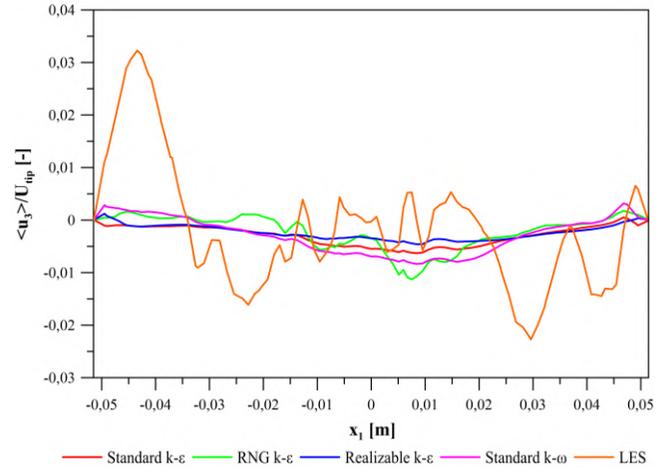
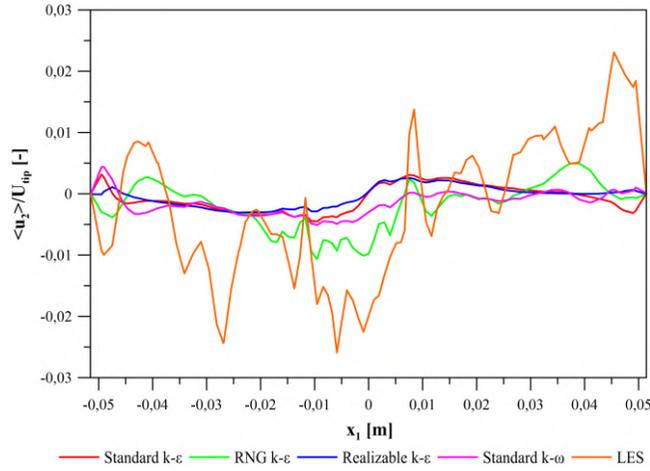
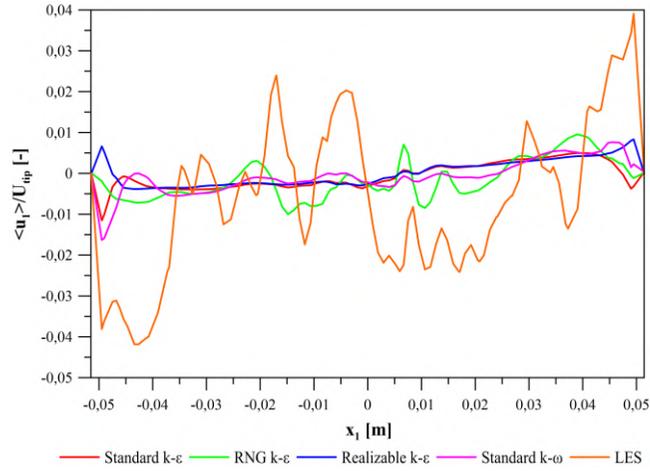
Para a posição  $x_2/H = 0,805$ , pode-se observar que os modelos a dois parâmetros simulados apresentaram comportamento semelhantes, quando se avalia as velocidades tangenciais e as axiais, porém para a velocidade radial, houve uma diferença considerável com relação ao modelo RNG  $k-\varepsilon$  dos demais modelos a dois parâmetros. Sendo que para os demais modelos a dois parâmetros foi obtido valores de velocidades radiais médias muito próximos de zero, sendo que com o modelo RNG  $k-\varepsilon$  foram obtidos gradientes das velocidades analisadas com uma magnitude considerável.

Avaliando os modelos  $k-\varepsilon$  e suas variante e o modelo *Standard*  $k-\omega$  em relação ao modelo LES, utilizando a Figura 1.19, pode-se constatar que os modelos avaliados seguem em grande parte o comportamento e a tendência do modelo LES, porém um fato a destacar, são oscilações e gradientes das velocidades avaliadas, quando utiliza-se o modelo LES. Sendo que o modelo LES apresentou gradientes de velocidades mais significativos e isso pode ser observado através dos erros relativos (Tabela 1.5). Sendo que, para alguns pontos específicos do escoamento, foram obtidas diferenças relativamente altas, sendo isso indicando por erros relativos máximos altos. Porém, analisando os erros relativos mínimos, pode-se constatar que para alguns pontos do tanque foi obtido um ajuste fino entre os modelos.

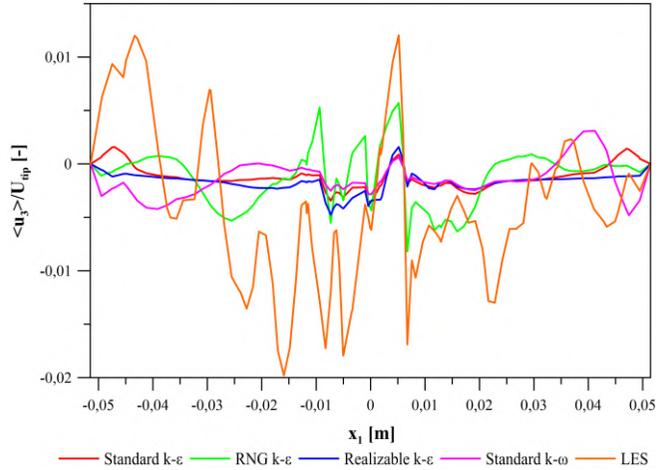
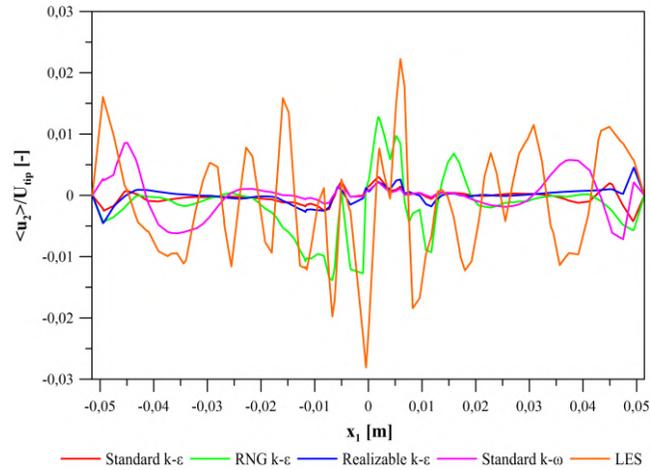
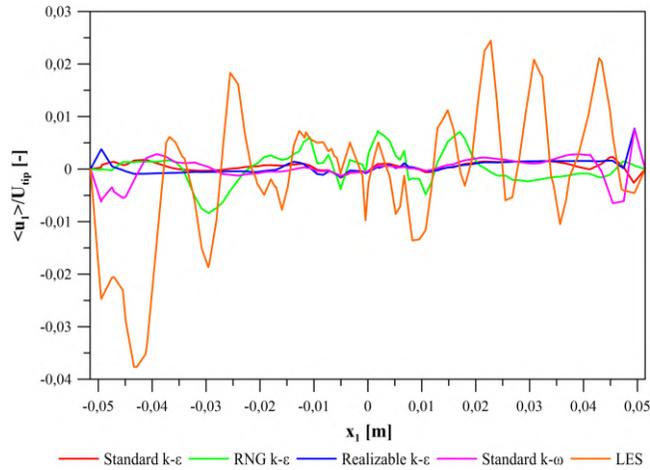
Figura 1.19 – Comportamento das velocidades médias tangenciais (a), radiais (b) e axiais (c) para todos modelos de turbulência analisados para diferentes  $x_2/H$ .



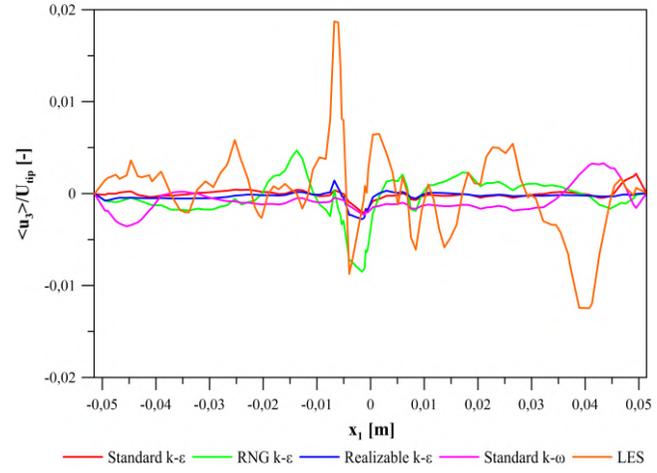
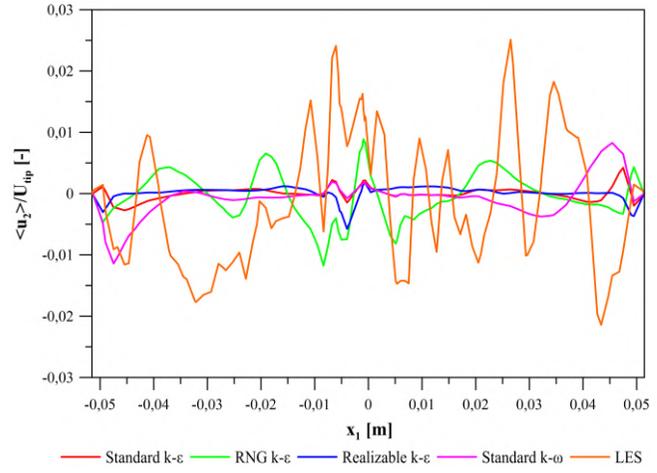
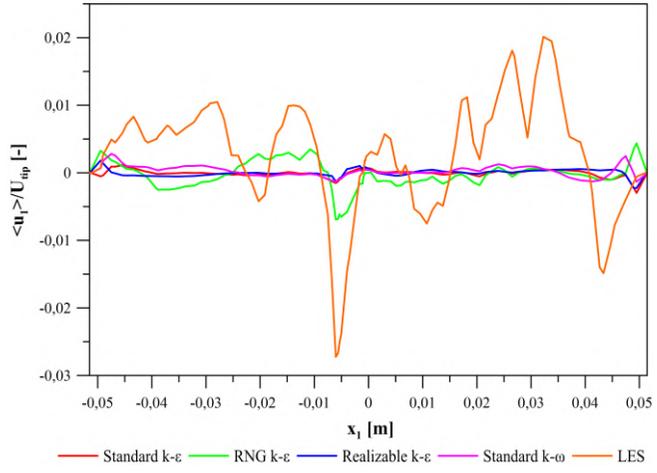
0,310



0,433



0,805



Fonte: Do autor (2021)

Tabela 1.5 –Valores de erros relativos máximo, mínimo e médio para  $\langle u_1 \rangle$ ,  $\langle u_2 \rangle$  e  $\langle u_3 \rangle$  para diferentes  $x_2/H$ .

	$x_2/H = 0,062$			$x_2/H = 0,186$			$x_2/H = 0,310$			$x_2/H = 0,433$			$x_2/H = 0,805$		
	Máx (%)	Mín (%)	Médio (%)	Máx (%)	Mín (%)	Médio (%)	Máx (%)	Mín (%)	Médio (%)	Máx (%)	Mín (%)	Médio (%)	Máx (%)	Mín (%)	Médio (%)
<b>Standard k-<math>\epsilon</math></b>															
<b>Velocidade Tangencial</b>	12864%	5%	188%	12864%	5%	188%	1846%	1%	136%	277%	25%	105%	28349%	36%	398%
<b>Velocidade Radial</b>	1443%	0%	121%	1443%	0%	121%	634%	5%	101%	815%	2%	106%	28349%	36%	398%
<b>Velocidade Axial</b>	949%	2%	98%	949%	2%	98%	8643%	0%	264%	2211%	23%	124%	3661%	19%	175%
<b>RNG k-<math>\epsilon</math></b>															
<b>Velocidade Tangencial</b>	3545%	1%	142%	3545%	1%	142%	2313%	1%	146%	1450%	5%	134%	99023%	0%	1100%
<b>Velocidade Radial</b>	1117%	1%	107%	1117%	1%	107%	500%	1%	82%	5551%	1%	202%	728%	5%	129%
<b>Velocidade Axial</b>	768%	5%	90%	768%	5%	90%	14726%	6%	299%	1126%	1%	98%	40402%	2%	662%
<b>Realizable k-<math>\epsilon</math></b>															
<b>Velocidade Tangencial</b>	10720%	2%	163%	10720%	2%	163%	1580%	1%	130%	333%	24%	109%	31571%	29%	483%
<b>Velocidade Radial</b>	654%	7%	112%	654%	7%	112%	552%	3%	99%	1331%	21%	111%	359%	14%	110%
<b>Velocidade Axial</b>	1564%	3%	106%	1564%	3%	106%	6273%	7%	203%	2088%	7%	124%	1939%	3%	159%
<b>Standard k-<math>\omega</math></b>															
<b>Velocidade Tangencial</b>	7669%	0%	151%	7669%	0%	151%	2408%	1%	136%	499%	5%	109%	16136%	8%	391%
<b>Velocidade Radial</b>	1099%	1%	117%	1099%	1%	117%	443%	22%	98%	938%	13%	122%	441%	2%	109%
<b>Velocidade Axial</b>	1606%	3%	111%	1606%	3%	111%	11452%	1%	315%	2132%	6%	129%	4204%	4%	261%

Fonte: Do autor (2021)

Analisando a Figura 1.19 pode-se observar que os modelos  $k-\varepsilon$  e suas variante e o modelo *Standard*  $k-\omega$  apresentaram entre si valores médios das velocidades tangenciais, radiais e axiais muito semelhantes. No entanto, vale destacar que em geral utilizando o modelo RNG  $k-\varepsilon$ , foi obtido algumas pequenas diferenças com relação aos demais, pois esse modelo apresentou mais oscilações ao longo do diâmetro do tanque, indicando maiores gradientes de velocidade.

E quando se analisa os erros relativos médios, observa-se que também foram obtidos erros significativos, no entanto, esses valores elevados podem ser principalmente justificados devido aos altos valores de desvios para algumas posições, pois analisando a Figura 1.19 e os valores mínimos dos erros relativos, pode ser constatado um ajuste razoável na maioria dos pontos.

Outro ponto a salientar é o comportamento da velocidade nas regiões próximo as paredes, sendo que nestas regiões, com o modelo LES foi obtido altos valores de velocidade, enquanto com os modelos avaliados, foram obtidos valores próximos de zero. Sendo estas regiões as principais fontes dos maiores erros relativos, que tem como consequência um aumento global dos valores médios dos erros relativos. Com isso, pode-se constatar que os modelos a dois parâmetros apresentam melhores performances para predizer o escoamento nas regiões mais próximas ao centro da célula de flotação e nas regiões mais próximas às paredes há um aumento das incertezas dos modelos avaliados para o cálculo da velocidade.

Para a posição  $x_2/H = 0,062$  (Tabela 1.5) o modelo RNG  $k-\varepsilon$  foi aquele que apresentou a melhor performance dentro os modelos avaliados, tendo em vista, os menores erros relativos médios e menores erros relativos máximos e mínimo para a grande maioria dos casos.

Quando se avalia os erros relativos para a posição  $x_2/H = 0,186$  (Tabela 1.5), pode constatar novamente pontos com altos valores de erros relativos máximos, sendo estes pontos principalmente encontrados próximos às paredes do tanque, no entanto, novamente para alguns pontos foi obtido um ajuste de excelente qualidade entre os resultados. Sendo que como pode ser observado na Figura 1.19 ( $x_2/H = 0,186$ ), para a maioria dos pontos, foi obtido um ajuste razoável, sendo que esse fato não é muito bem representado através do erro relativo médio, pois devido aos altos desvios para alguns pontos, o valor médio é superestimado.

Vale salientar, que o modelo *Realizable*  $k-\varepsilon$ , para  $x_2/H = 0,186$  (Tabela 1.5), foi aquele que apresentou a melhor performance dentro os modelos avaliados, analisando os erros relativos. Porém com resultados muito semelhantes ao obtidos pelos modelos *Standard*  $k-\varepsilon$  e RNG  $k-\varepsilon$ , sendo que o único que apresentou uma performance aquém dos demais modelos foi o *Standard*  $k-\omega$ . Outro ponto a salientar, é que em comparação aos desvios obtidos para  $x_2/H$

= 0,062, os mesmos apresentaram valores superiores para essa posição ( $x_2/H = 0,186$ ), sendo que isso pode ser justificado devido à posição desta análise, que está alinhada ao agitador, conseqüentemente essa é uma região com altos gradientes de velocidade, que foram representados com menor acurácia em comparação a posição  $x_2/H = 0,062$ , utilizando os modelos a dois parâmetros.

Para a posição  $x_2/H = 0,310$ , a velocidade tangencial média foi melhor descrita utilizando o modelo *Realizable* k- $\epsilon$ , já para velocidade radial média o modelo RNG k- $\epsilon$  obteve melhores resultados e para velocidade axial média o modelo *Realizable* k- $\epsilon$  foi aquele que apresentou a melhor performance, conforme pode ser observado na Tabela 1.5. Porém destaca-se que ambos modelos RNG k- $\epsilon$  e *Realizable* k- $\epsilon$  apresentaram resultados semelhantes para as três velocidades analisadas.

Através da Tabela 1.5 ( $x_2/H = 0,433$ ), pode-se observar que em alguns pontos do escoamento foi obtido um excelente ajuste, principalmente utilizando o modelo RNG k- $\epsilon$ , conforme pode ser constatado através dos erros relativos mínimos. Analisando numericamente os erros relativos médio, pode-se concluir que o modelo *Standard* k- $\epsilon$  foi aquele que melhor prediz a velocidade tangencial e radial, sendo que para velocidade axial, o modelo RNG k- $\epsilon$  foi aquele no qual foi obtido o melhor desempenho. Porém quando se analisa os resultados graficamente através da Figura 1.19 ( $x_2/H = 0,433$ ), pode-se observar que o modelo *Standard* k- $\epsilon$  não segue nitidamente o comportamento do modelo LES, porém o modelo RNG k- $\epsilon$  apresenta em boa parte do escoamento oscilações e gradientes semelhantes, sendo que isso não é bem quantificado e representado através do erro relativo médio, devido a alguns pontos de alto desvio que superestimam os erros utilizando o modelo RNG k- $\epsilon$ .

Quando se compara o comportamento das velocidades tangenciais, radiais e axiais dos modelos a dois parâmetros e o modelo LES, pode-se observar que para  $x_2/H = 0,805$  (Tabela 1.5), os modelos k- $\epsilon$  e suas variante e o modelo *Standard* k- $\omega$  não apresentaram boas performances, principalmente para a velocidade tangencial, sendo que com os modelos a dois parâmetros, a velocidade tangencial foi praticamente nula em todos os pontos.

Já para velocidade radial, o modelo *Standard* k- $\omega$  apresentou os melhores resultados, analisando os erros relativos médios e para velocidade axial, o modelo *Realizable* k- $\epsilon$  foi aquele que apresentou a melhor performance, novamente utilizando o valor do erro relativo médio. Porém um fato interessante novamente detectado é que o modelo RNG k- $\epsilon$  foi aquele no qual foram obtidos os menores erros relativos mínimos, isso pode novamente ser justificado pois o

modelo RNG k-  $\epsilon$  apresentou as maiores oscilações e gradientes de velocidade, possuindo em geral na região central do tanque, um comportamento semelhante ao do modelo LES.

Desse modo, pode-se concluir que os modelos a dois parâmetros utilizados, suavizaram os gradientes de velocidade, dificultando um prognóstico quantitativo da velocidade e agitação nas regiões próximo às paredes da célula de flotação, porém na região central, os modelos a dois parâmetros apresentaram comportamentos semelhantes aos observados no modelo LES. Outro ponto a salientar é que o modelo RNG k-  $\epsilon$  apresentou visivelmente uma suavização dos gradientes de velocidade inferior aos demais modelos a dois parâmetros. Sendo que isso pode ser justificado, pois o modelo RNG k-  $\epsilon$  engloba um termo adicional em sua equação quando comparado aos demais modelos k-  $\epsilon$ , que melhora a precisão dos fluxos de tensão rápida e que engloba o efeito de redemoinho na turbulência.

Uma justificativa para os altos valores de erro obtidos utilizando os modelos a dois parâmetros é devido às condições do escoamento, pois a turbulência em tanque com agitação mecânica é altamente anisotrópica e não homogênea, sendo que os modelos k-  $\epsilon$  e suas variantes e o *Standard* modelo k- $\omega$ , não representam essa anisotropia, devido a inerências destes modelos. Sendo assim, o melhor que pode ser realizado é utilizar combinações de parâmetros dos modelos em diferentes zonas para melhorar os prognósticos (Joshi *et al.*, 2011, a).

Comparando os resultados obtidos neste presente trabalho com os resultados obtidos nos trabalhos de (Joshi *et al.*, 2011 a, b), pode-se observar que em geral a amplitude máxima obtida para as velocidades analisadas em (Joshi *et al.*, 2011 a, b) foram superiores. Porém outro fato a destacar, é que neste presente trabalho as oscilações e gradientes de velocidade foram superiores. O que pode justificar esses comportamentos são a geometria do agitador mecânico e do *baffle* e a velocidade angular adotada. Sendo que nos trabalhos de (Joshi *et al.*, 2011 a, b) foi utilizado uma rotação de 270 rpm enquanto no presente trabalho foi utilizado 900 rpm e a geometria utilizada em ambos trabalhos foi completamente diferente e, esses fatores impactam diretamente os gradientes de velocidade do escoamento. Com relação as geometrias do *baffles*, foram utilizados *designs* totalmente diferentes, sendo que em de (Joshi *et al.*, 2011 a, b) os *baffles* estavam localizados nas paredes do tanque, enquanto no presente trabalho o *baffle* era uma estrutura no centro da célula de flotação.

#### **2.4.4 Influência da rotação na fluidodinâmica da célula de flotação**

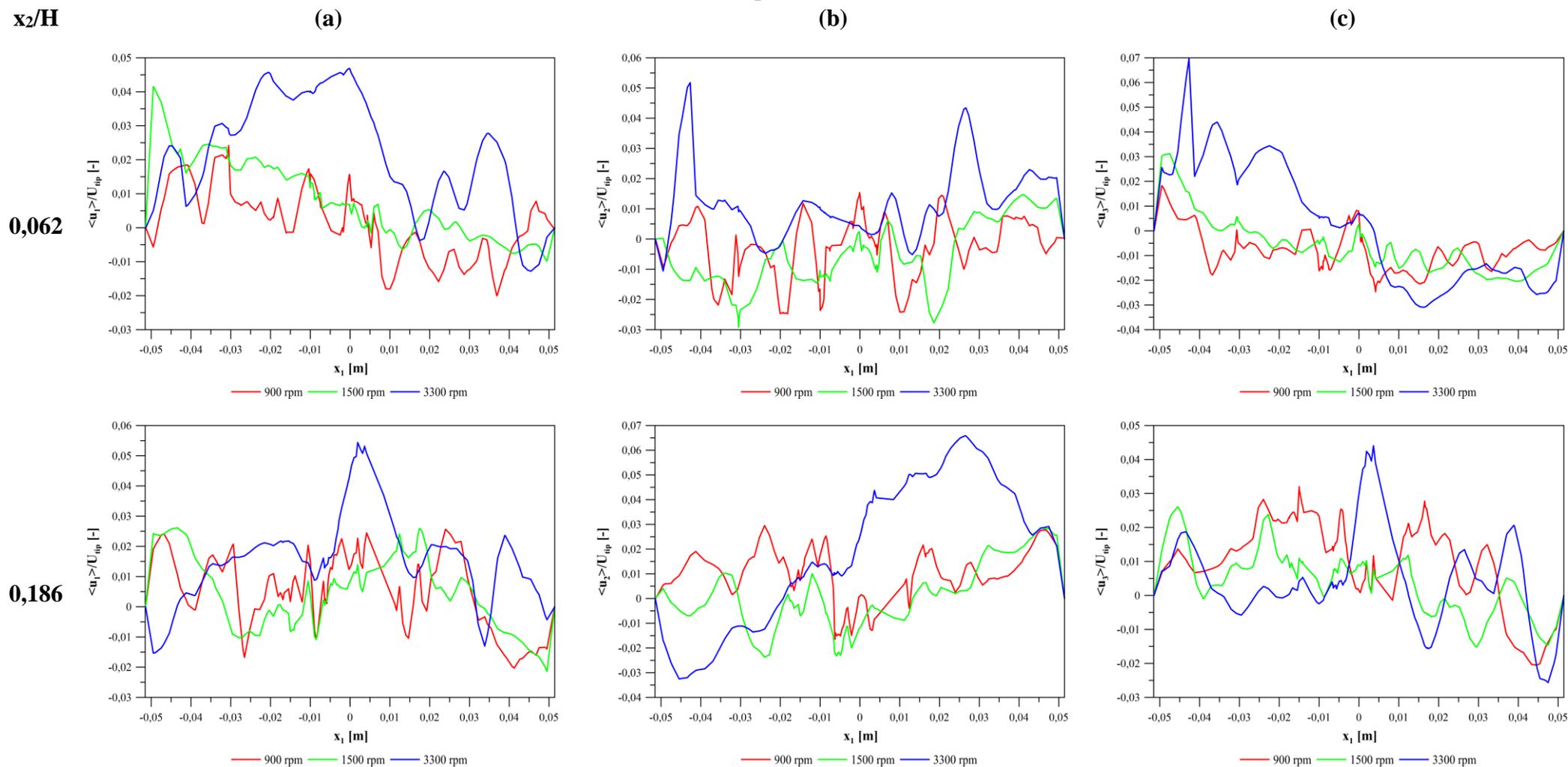
Com o intuito de avaliar o efeito da velocidade angular na agitação da célula de flotação foi simulado o mesmo sistema com as rotações de 900 ( $Re = 28.901$ ), 1500 ( $Re = 48.168$ ) e

3300 rpm ( $Re = 105.970$ ). E foi comparado as velocidades tangenciais  $\langle u_1 \rangle$ , radiais  $\langle u_2 \rangle$  e axiais  $\langle u_3 \rangle$  nas posições expressas pela Figura 1.14 para as três condições de velocidade angular. Vale ressaltar que para avaliar o efeito da velocidade angular foi utilizado o modelo de turbulência LES e as condições iniciais e de contorno expressas na Tabela 1.2. A Figura 1.20 contém o comportamento de  $\langle u_1 \rangle$ ,  $\langle u_2 \rangle$  e  $\langle u_3 \rangle$  para  $x_2/H = 0,062$ ;  $x_2/H = 0,186$ ;  $x_2/H = 0,310$ ;  $x_2/H = 0,433$  e  $x_2/H = 0,805$ .

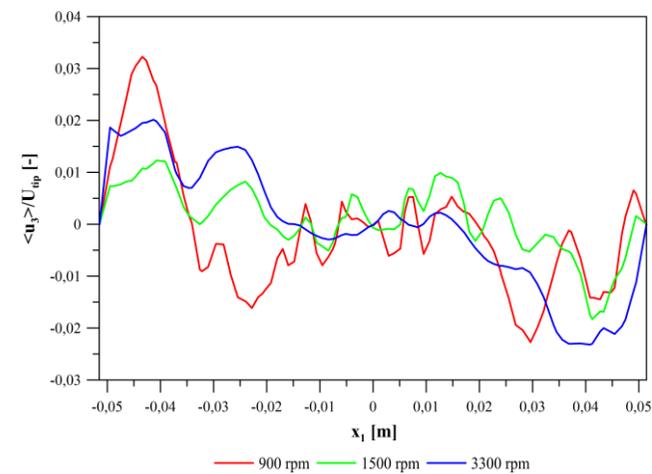
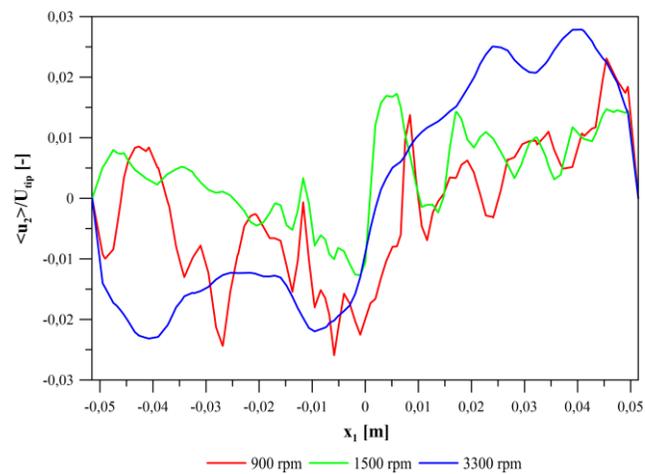
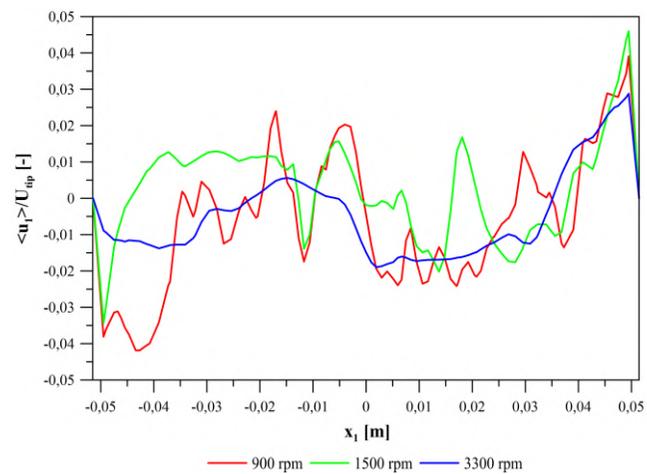
Analisando a Figura 1.20 pode-se constatar que as velocidades analisadas apresentaram diferentes comportamentos, mesmo sendo utilizada as mesmas condições e modelos para as três velocidades angulares analisadas. E ressalta-se que como as velocidades foram normalizadas com relação à velocidade linear máxima do agitador ( $U_{lip}$ ), todas apresentam escalas de mesma magnitude. Sendo que estes diferentes comportamentos podem ser justificados devido a turbulência no interior da célula de flotação, sendo que com o aumento da turbulência, há um aumento da aleatoriedade no escoamento.

Outro ponto que vale destacar é para as simulações com as maiores velocidades angulares em  $x_2/H = 0,062$  e  $x_2/H = 0,186$  as intensidades das velocidades são superiores. Porém, para  $x_2/H = 0,310$  as velocidades adimensionalizadas apresentam em geral intensidades semelhantes e para  $x_2/H = 0,433$  e  $x_2/H = 0,805$  observa-se que a intensidade das velocidades adimensionalizadas são superiores para as simulações com menor velocidade angular. Com isso, pode-se concluir que com o aumento da velocidade angular, grande parte da energia cinética disponibilizada ao sistema fica concentrada nas regiões mais próximas ao agitador mecânico e que quanto mais próximo ao topo da célula de flotação menor é a transmissão de energia cinética para essas regiões com o aumento da velocidade angular. Sendo assim, provavelmente existe uma velocidade angular “ótima” na qual tem-se gradientes de velocidade mais homogêneos ao longo das posições axiais da célula de flotação.

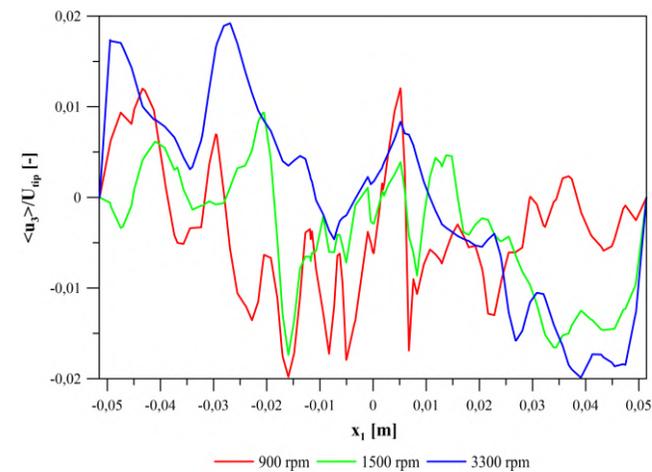
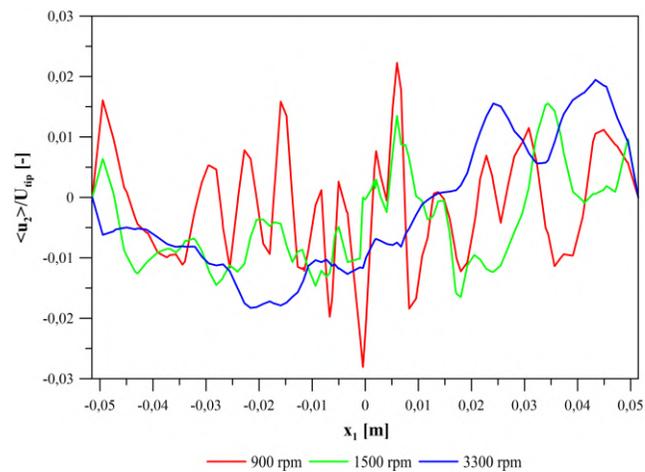
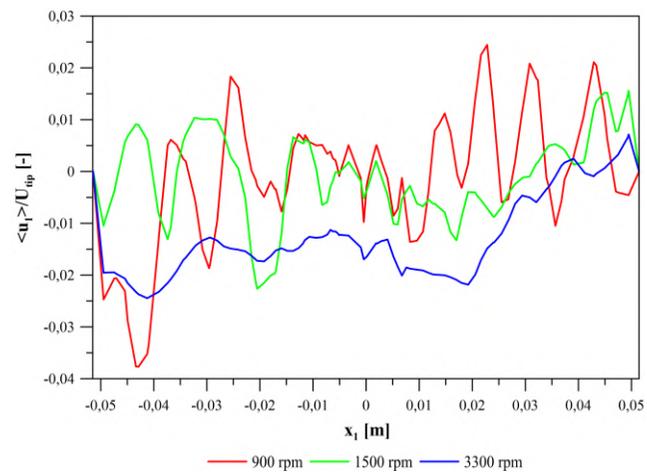
Figura 1.20 – Comportamento das velocidades médias tangenciais (a), radiais (b) e axiais (c) utilizando 900, 1500 e 3300 rpm, para diferentes  $x_2/H$ .



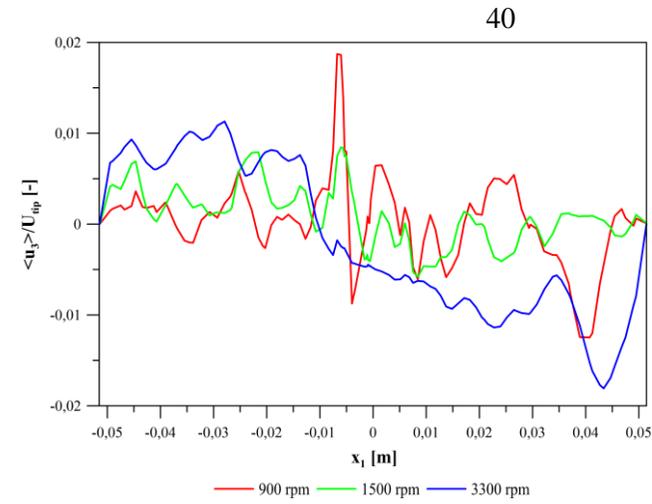
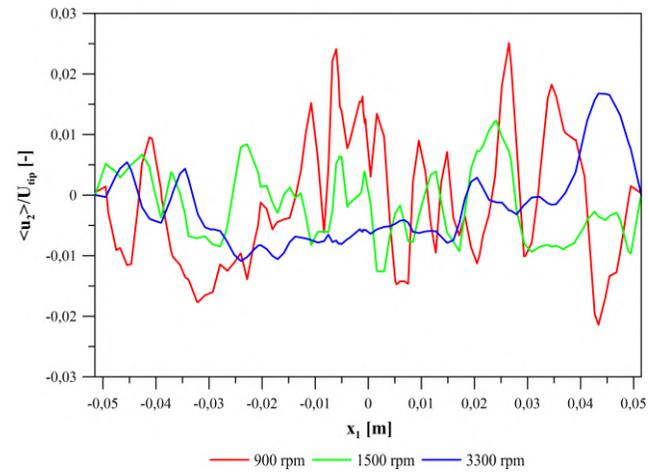
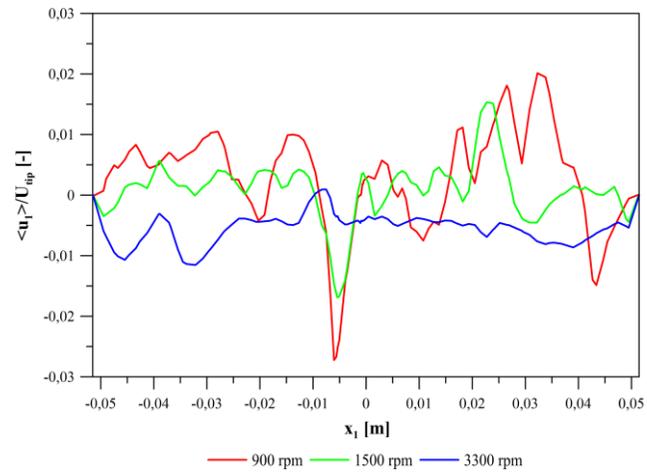
0,310



0,433



0,805



Fonte: Do autor (2021)

## 2.5 Conclusões

Para o teste de independência de malha, pode-se concluir que com a malha de 757.138 células, os erros envolvidos no processo de discretização do domínio geométrico tornam-se desprezíveis. Pois com uma redução de aproximadamente 25% no número de células utilizadas na simulação da célula de flotação, foram obtidas diferenças relativas com relação a malha com 1.007.417, menores ou iguais a 7%, para os parâmetros avaliados (velocidade média, velocidade máxima, número de Reynolds médio). Sendo esta uma diferença relativamente baixa, quando se avalia simulação com as técnicas de CFD para tanques agitados.

A qualidade das malhas manufaturadas para as simulações computacional da célula de flotação, foram avaliadas utilizados os parâmetros de *Aspect Ratio*, de *Skewness* e de *Jacobian Ration*. Com isso, pode-se concluir que a malha com 757.138 células foi aquela na qual foi obtido a melhor regularidade e confiabilidade computacional dos elementos manufaturados, isso pode ser constatado analisando os valores médios dos parâmetros avaliados, sendo que para a malha com 757.138 elementos, o *Aspect Ratio*, e o *Jacobian Ration* ficaram mais próximos da unidade e o *Skewness* ficou mais próximo da nulidade, em comparação às demais malhas testadas.

Além disso, outro fator que corrobora para que a malha com 757.138 células tenha a melhor qualidade em comparação às demais malhas avaliadas, são os menores desvios padrões encontrados nessa malha, indicando uma baixa variabilidade da qualidade dos elementos manufaturados. E isso pode ser também constatado com os valores mínimos e máximo para os parâmetros avaliados, sendo quem em geral, para a malha com 757.138, foram obtidos os menores valores, indicando novamente uma boa qualidade dos elementos e uma baixa variabilidade na qualidade.

Para a análise dos modelos de turbulência, pode-se constatar que os modelos a dois parâmetros apresentaram resultados semelhantes entre si, com singelas diferenças para o modelo RNG k- $\epsilon$ , sendo que este modelo apresentou maiores gradientes de velocidade em comparação aos demais modelos a dois parâmetros avaliados. Quando se compara os modelos k- $\epsilon$  e suas variantes (*Standard*, RNG e *Realizable*) e o modelo *Standard* k- $\omega$  em comparação ao modelo LES, pode-se observar que houve uma suavização dos gradientes de velocidade por parte dos modelos a dois parâmetros, porém nas regiões centrais da célula de flotação, principalmente o modelo RNG k- $\epsilon$ , apresentou um comportamento semelhante ao obtido com o modelo LES, sendo que nas regiões próximas às paredes isto não ocorre e conseqüentemente

os erros relativos provenientes destas regiões superestimaram o valor médio dos erros relativos. Desse modo, pode-se concluir que o modelo RNG k-  $\epsilon$  pode ser utilizado para prever de forma qualitativa o comportamento do fluido no interior do tanque, sendo que para algumas regiões, como pontos mais próximos do centro do flotor, uma análise quantitativa também pode ser realizada.

Avaliando o efeito da velocidade angular no escoamento do fluido no interior da célula de flotação, pode-se constatar que conforme há um aumento da velocidade angular do agitador mecânico, maior parte da energia cinética disponibilizada ao sistema fica concentrada nas regiões próximas ao agitador mecânico. Diferentemente do comportamento obtido para rotações mais baixas, sendo que para 900 rpm, foram obtidos perfis mais homogêneos de velocidade ao longo do eixo axial, ou seja, a energia cinética disponibilizada pelo agitador mecânico, foi mais homogeneamente distribuída no volume do equipamento.

Portanto, este capítulo fornece ferramentas para predição do escoamento monofásico de uma célula de flotação, trazendo uma análise robusta e consistente da análise dos modelos de turbulência e da influência da velocidade angular para o escoamento de fluido no interior deste equipamento. Além disso, esta análise foi feita adimensionalizando-se as variáveis, para facilitar correlações e extrapolações dos resultados para outras células de flotação e tanques agitados em geral, que possuam diferentes dimensões e geometrias.

## 2.6 Referências Bibliográficas

ANSYS. **Fluent User's Guide and Theory Guide**. Canonsburg: [s.n.], 2018. Disponível em: <https://ansyshelp.ansys.com>. Acesso em: 30 jan. 2021.

BASAVARAJAPPA, M., DRAPER, T., TOTH, P., RING, T. A., & MISKOVIC, S. **Numerical and experimental investigation of single phase flow characteristics in stirred tanks using Rushton turbine and flotation impeller**. *Minerals Engineering*, v. 83, p. 156–167, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2015.08.018>. Acesso em: 15 fev. 2021.

COSTA, F.O.; MATEUS, F. L. B.; PETRI, I. J. **Influence of Partitioning Methods on Computational Cost of CFD Simulations Applied to Hydrocyclones**. *The Journal of Engineering and Exact Sciences*. v. 6 n. 4, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.18540/jcecvl6iss4pp0528-0532>. Acesso em: 20 fev. 2021.

- DILL, E. H. **The Finite Element Method for Mechanics of Solids with ANSYS Applications**. New York: CRC Press, 2011. ISBN: 9781439845837. Acesso em: 22 fev. 2021.
- EK, C. **Flotation kinetics**. In: MAVROS, P.; MATIS, K. A. (Ed). **Inovations in flotation technology**. NATO ASI Series. Series E, Applied Sciences, v. 208, p. 183-209, 1992. ISBN: 978-94-011-2658-8. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-94-011-2658-8>. Acesso em: 26 maio. 2021.
- FOX, R. W.; MCDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J.; MITCHELL, J. **Introdução à mecânica dos fluidos**. 9ª ed., Rio de Janeiro: LTC, 2018. ISBN-10: 8521634811. Acesso em: 27 mar. 2021.
- JOSHI, J. B., NERE, N. K., RANE, C. V., MURTHY, B. N., MATHPATI, C. S., PATWARDHAN, A. W., RANADE, V. V. **CFD simulation of stirred tanks: Comparison of turbulence models. Part I: Radial flow impellers**. The Canadian Journal of Chemical Engineering, v. 89, n. 1, p. 23–82, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/cjce.20446>. Acesso em: 12 jun. 2021. (a)
- JOSHI, J. B., NERE, N. K., RANE, C. V., MURTHY, B. N., MATHPATI, C. S., PATWARDHAN, A. W., RANADE, V. V. **CFD simulation of stirred tanks: Comparison of turbulence models (Part II: Axial flow impellers, multiple impellers and multiphase dispersions)**. The Canadian Journal of Chemical Engineering, v. 89, n. 4, p.754–816, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/cjce.20465>. Acesso em: 17 jul. 2021. (b)
- LARA-RAMOS, J. A., SÁNCHEZ-GÓMEZ, K., VALENCIA-RINCÓN, D., DIAZ-ANGULO, J., MUESES, M., MACHUCA-MARTÍNEZ, F. **Intensification of the O<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub>/UV advanced oxidation process using a modified flotation cell**. Photochemical & Photobiological Sciences, v. 18, n. 4, p. 920–928, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1039/c8pp00308d>. Acesso em: 03 jan. 2021.
- LARA-RAMOS, J. A., CONSTAIN-ESCOBAR, A. M., ROJAS-ORTIZ, K. V., DIAZ-ANGULO, J., & MACHUCA-MARTÍNEZ, F. **A novel high rotation bubble reactor for the treatment of a model pollutant in ozone/goethite/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and UV/goethite coupled processes**. Environmental science and pollution research international, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11356-020-12299-2>. Acesso em: 22 jul. 2021.

- LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. **Lectures in Mathematical Models Models of Turbulence**. Academic Press, London, England, 1972. ISBN: 0124380506. Acesso em: 28 jul. 2021.
- LEMOS, E. M. **IMPLEMENTAÇÃO DE UM MÉTODO DE VOLUMES FINITOS DE ORDEM SUPERIOR COM TRATAMENTO MULTIBLOCO APLICADO À SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO DE FLUIDOS VISCOELÁSTICOS**. Tese (Doutorado em Engenharia Química) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2011. Disponível em: [http://objdig.ufrj.br/60/teses/coppe\\_d/EduardoMoreiraLemos.pdf](http://objdig.ufrj.br/60/teses/coppe_d/EduardoMoreiraLemos.pdf). Acesso em: 06 jul. 2021.
- LIMA, R. C. **Simulação de Grandes Escalas de escoamentos Incompressíveis com Transferência de Calor e Massa por um Método de Elementos Finitos e Subdomínios**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Universidade Estadual Paulista, Ilha Solteira, 2005. Disponível em: [https://repositorio.unesp.br/bitstream/handle/11449/88877/lima\\_rc\\_me\\_ilha.pdf?sequence=1&isAllowed=y](https://repositorio.unesp.br/bitstream/handle/11449/88877/lima_rc_me_ilha.pdf?sequence=1&isAllowed=y). Acesso em: 10 dez. 2020.
- LIMA, O. A. **Suspensão de partículas grossas em células mecânicas de flotação**. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009. Disponível em: [https://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/3/3134/tde-01092009-162645/publico/Tese\\_Revisada\\_Odair\\_Alves\\_Lima.pdf](https://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/3/3134/tde-01092009-162645/publico/Tese_Revisada_Odair_Alves_Lima.pdf). Acesso em: 12 dez. 2020.
- MADRID, R. A. G. **Evaluación por Modelación CFD del Proceso de Flotación en una Celda de Agitación Mecánica y del Efecto de la Granulometría en la Recuperación de Mineral**. Trabalho de conclusão de curso (Graduação em Engenharia) - Universidad de Chile, Santiago de Chile, 2012. Disponível em: [http://repositorio.uchile.cl/bitstream/handle/2250/110946/cf-garcia\\_rm.pdf?sequence=1&isAllowed=y](http://repositorio.uchile.cl/bitstream/handle/2250/110946/cf-garcia_rm.pdf?sequence=1&isAllowed=y). Acesso em: 27 dez. 2020.
- MALISKA, J. **Transferência De Calor e Mecânica Dos Fluidos Computacional**. 2 ed. Brasil, Ltc Editora, 2005. ISBN: 9788521633358. Acesso em: 20 maio. 2021.

- MENTER, F. R. **Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models For Engineering Applications**. AIAA Journal, v. 32, n. 8, p. 1598-1605, 1994. Disponível em: <https://doi.org/10.2514/3.12149>. Acesso em: 02 jan. 2021.
- MOHAMMADI, K. **Investigation of the Effects of Baffle Orientation, Baffle Cut and Fluid Viscosity on Shell Side Pressure Drop and Heat Transfer Coefficient in an E-Type Shell and Tube Heat Exchanger**. Tese (Doutorado em Engenharia) - University of Stuttgart, Germany, 2011. Disponível em: <https://d-nb.info/1017972672/34>. Acesso em: 02 jan. 2021.
- MURTHY, B. N., JOSHI, J. B. **Assessment of standard, RSM and LES turbulence models in a baffled stirred vessel agitated by various impeller designs**. Chemical Engineering Science, v. 63, n. 22, p. 5468–5495, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2008.06.019>. Acesso em: 09 jan. 2021.
- NELSON, M. G.; LELINSKI, D. **Hydrodynamic design of self-aerating flotation machines**. Minerals Engineering, v. 13, n. 10-11, p. 991-998, 2000. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0892-6875\(00\)00085-6](https://doi.org/10.1016/S0892-6875(00)00085-6). Acesso em: 17 maio. 2021.
- PATWARDHAN, A. W.; JOSHI, J. B. **Design of gas-inducing reactors**. Industrial and Engineering Chemistry Research, v. 38, n. 1, p. 49-80, 1999. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/ie970504e>. Acesso em: 11 fev. 2021.
- PEDRÃO, N. **Estudo comparativo entre modelos LES e DES para simulação de escoamento compressível turbulento**. Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Universidade de São Paulo, São Paulo, 2010. Disponível em: <https://teses.usp.br/teses/disponiveis/3/3150/tde-03032010-104135/publico/DISSERTACAONelsonPedrao.pdf>. Acesso em: 01 fev. 2021.
- PETRI, I. J.; C. R. DUARTE.; L.G. M. VIEIRA. **Aplicações das técnicas de CFD para predição da distribuição de vazões volumétricas em hidrociclones dispostos em distintas baterias**. Enemp, 2009. Disponível em: [https://7006bdce-4e1b-4e27-b4a4-e221d0e0d253.filesusr.com/ugd/b9cd9f\\_f0e8e77b0b324ad69eb8b6f8df0ec87b.pdf?index=true](https://7006bdce-4e1b-4e27-b4a4-e221d0e0d253.filesusr.com/ugd/b9cd9f_f0e8e77b0b324ad69eb8b6f8df0ec87b.pdf?index=true). Acesso em: 02 ago. 2021.
- PETRI, I. J. **Introdução à Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD)**. Lavras, 2020. Disponível em: <<https://www.irineupetri.com/icfd>>. Acesso em: 05 março. 2021.
- SHIH, T.-H., LIOU, W. W., SHABBIR, A., YANG, Z., & ZHU, J. **A new k- $\epsilon$  eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows**. Computers & Fluids, v. 24, n. 3, p. 227–238, 1995. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0045-7930\(94\)00032-t](https://doi.org/10.1016/0045-7930(94)00032-t). Acesso em: 10 abril. 2021.

- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics**. Person, Second Edition, 2007. ISBN: 978-0-13-127498-3. Acesso em: 10 jan. 2021.
- VIEIRA, L. G. M. **Otimização dos Processos de Separação em Hidrociclones Filtrantes**. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2006. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/bitstream/123456789/15053/1/LGMVieira1TESPRT.pdf>. Acesso em: 27 fev. 2021.
- WILCOX, D.C. **Turbulence Modeling for CFD**. 3 ed. Estados Unidos, DCW Industries, 1998. ISBN: 978-1928729082. Acesso em: 15 jan. 2021.
- WILLS, B. A. **Mineral processing technology**. 4th ed. Oxford: Pergamon Press. 4 ed, p. 785, 1988. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/c2009-0-11089-9>. Acesso em: 12 jun. 2021.
- YAKHOT, V.; ORSZAG, S.A.; THANGAM, S.; GATSKI, T. B.; SPEZIALE, C. G. **Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique**. Physics of Fluids A: Fluid Dynamics, v. 4, n. 7, p. 1510-1520, 1992. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.858424>. Acesso em: 22 jun. 2021.

## 3 CAPÍTULO 2

O segundo capítulo deste trabalho contempla a simulação de uma célula de flotação com agitação mecânica, para um sistema multifásico, utilizando água e uma mistura de oxigênio e ozônio que será injetado na célula, sendo a entrada na região inferior do *baffle*. Para que assim, seja possível analisar a interação entre as fases.

### 3.1 Introdução

O escoamento no interior da célula de flotação é considerado multifásico, pois existe múltiplas fases na operação desse equipamento. A fase contínua do meio é composta por água, a fase do oxidante é formada por uma a mistura de oxigênio e ozônio e a fase sólida a ser oxidada, que é formada normalmente por um material granular. Sendo assim, se faz necessário modelos multifásicos que descrevem este tipo de sistema, levando em conta a interação entre essas fases. O *software* FLUENT<sup>®</sup> possui quatro modelos multifásicos, sendo eles, o modelo de *Volume of Fluid* (VOF), modelo *Mixture*, modelo Euleriano e o modelo Lagrangeano.

O modelo VOF pode ser utilizado para modelagem de dois ou mais fluidos imiscíveis, sendo que uma única equação do momento é resolvida para todas as fases com o rastreamento da fração volumétrica de cada um dos fluidos para todo o domínio computacional. Este modelo é comumente utilizado para prever a quebra de jatos líquidos, o movimento de bolhas em um líquido, o movimento do líquido após a ruptura de uma barragem e para qualquer simulação estacionária ou transiente de qualquer escoamento que possua interface líquido-gás (ANSYS, 2018).

O modelo *Mixture* pode simular tanto a fase fluida como a fase particulada, sendo este um modelo multifásico simplificado. Sendo que este modelo é frequentemente utilizado para simular sedimentações, ciclones e fluxos borbulhantes onde a fração volumétrica de gás permanece baixa (ANSYS, 2018).

O modelo Euleriano pode ser utilizado para simular gases, líquidos e sólidos em praticamente qualquer combinação. Sendo que utilizando esse modelo, a abordagem Euleriana é utilizada para cada fase. Vale ressaltar que para essa abordagem, as fases são consideradas contínuas e interpenetrantes. Diferentemente do modelo Lagrangeano que utiliza o modelo da fase discreta para a fase sólida, sendo assim, cada partícula é acompanhada individualmente e é feito um balanço de forças para cada partícula, levando em conta a interação entre partículas, através das leis de contato. Aplicações típicas para os modelos Euleriano envolvem o

escoamento de fases granulares, como, tambores rotativos e leitos de jorro (ANSYS, 2018; NASCIMENTO, 2018; DUARTE, 2006)

Deste modo, neste capítulo será utilizado apenas os modelos multifásicos VOF e *Mixture*, pois os mesmos são aplicáveis ao caso simulado neste capítulo, que é um sistema bifásico com interação gás-líquido, sem a presença de fases granulares, sendo, portanto, não adequado a utilização dos modelos Euleriano e Lagrangeano.

### 3.1.1 Modelos multifásicos

#### 3.1.1.1 Modelo Volume of Fluid (VOF)

O modelo VOF, é uma técnica de localização da interface aplicada a malhas eulerianas fixas. Este modelo é empregado quando a interface entre dois ou mais fluidos imiscíveis é bem definida, esta modelagem é normalmente aplicada a escoamentos quando existem estratificações, superfícies livres em tanques agitados, quebra de jatos líquidos, *air core* em hidrociclones e etc (VIEIRA, 2006).

Para o rastreamento das interfaces entre as fases presentes no escoamento, é necessário utilizar a Equação 2.1, que representa a solução da equação da continuidade para a fração volumétrica de uma (ou mais) das fases (ANSYS, 2018).

$$\frac{1}{\rho_q} \left[ \frac{\partial(\alpha_q \rho_q)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) \right] = S_{\alpha_q} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \quad (2.1)$$

Onde q e p são os índices das fases,  $\dot{m}_{pq}$  é a transferência de massa da fase p para a fase q,  $\dot{m}_{qp}$  é a transferência de massa da fase q para a fase p,  $S_{\alpha_q}$  é o termo de fonte, que por *default* é igual a 0, porém esse valor pode ser especificado,  $\rho$  é a densidade e  $\alpha$  é a fração volumétrica. Vale ressaltar que a equação da fração volumétrica não é resolvida para a fase primaria, sendo que esse valor é calculado com base na restrição representada pela Equação 2.2 (ANSYS, 2018).

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1 \quad (2.2)$$

Utilizando o modelo VOF uma única equação de momento é resolvida para todo o domínio computacional, conforme representado pela Equação 2.3. Consequentemente o campo de velocidade resultante é compartilhado entre as fases (ANSYS, 2018).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (2.3)$$

Onde,  $\vec{v}$  é a velocidade,  $\vec{g}$  é a gravidade,  $\vec{F}$  representa as forças de campo,  $\rho$  e  $\mu$  são a densidade e a viscosidade que são calculadas com base nas frações volumétricas de cada uma das fases. Vale ressaltar, que uma limitação da obtenção do campo de velocidades compartilhado para as fases, é que caso exista grandes diferenças nas magnitudes das velocidades entre as fases, a acurácia no cálculo das velocidades nas proximidades das interfaces pode ser comprometida (ANSYS, 2018).

### 3.1.1.2 Modelo Mixture

O modelo *Mixture* é um modelo multifásico simplificado, que pode modelar diferentes tipos de sistemas. Ele pode ser usado para modelar fluxos multifásicos, onde as fases possuem diferentes velocidades, entretanto estas fases assumem um equilíbrio local de escalas curtas de comprimento espacial. Outra aplicação seria modelar fluxos homogêneos com acoplamento e fases muito fortes movendo-se com a mesma velocidade, por último, o modelo *Mixture* também é utilizado para calcular a viscosidade não-newtoniana (ANSYS, 2018).

A principal vantagem do modelo *Mixture* é sua capacidade de modelar tanto a fase fluida como a fase particulada, resolvendo as equações de momento, continuidade e energia para a mistura. O modelo *Mixture* pode ser um bom substituto para o modelo Euleriano para vários casos, tendo em vista, que um modelo multifásico completo pode não ser viável quando há uma ampla distribuição da fase particulada ou quando as leis de interface são desconhecidas ou sua confiabilidade pode ser questionada (ANSYS, 2018).

Para esses casos se faz necessário o uso de um modelo mais simplificado, como é o caso do modelo *Mixture*. As aplicações típicas para esse modelo incluem sedimentação, separadores ciclônicos, fluxos carregados de partículas com baixa carga e fluxos borbulhantes onde a fração de volume de gás permanece baixa. Para a modelagem utilizando o modelo multifásico *Mixture*, é utilizado a Equação 2.4, que é a equação do momento aplicada ao modelo *Mixture* e para a utilização dessa equação, é necessário utilizar também a Equação 2.5, que é a equação para o cálculo da viscosidade da mistura (ANSYS, 2018).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \vec{v}_m) + \nabla \cdot (\rho_m \vec{v}_m \vec{v}_m) \quad (2.4)$$

$$= -\nabla p + \nabla \cdot [\mu_m (\nabla \vec{v}_m + \nabla \vec{v}_m^T)] + \rho_m \vec{g} + \vec{F}$$

$$- \nabla \cdot \left( \sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \vec{v}_{dr,k} \vec{v}_{dr,k} \right)$$

$$\mu_m = \sum_{k=1}^n \alpha_k \mu_k \quad (2.5)$$

Onde  $n$  é o número de fases,  $\rho_m$  é a densidade da mistura,  $\vec{v}_m$  é a velocidade da mistura,  $\nabla p$  é o gradiente de pressão,  $\mu_m$  é a viscosidade da mistura,  $\vec{g}$  é a gravidade,  $\vec{F}$  é a força de corpo,  $\alpha_k$  é a fração volumétrica da fase secundária,  $\vec{v}_{dr,k}$  é a velocidade deriva e  $\mu_k$  é a viscosidade das fases presentes (ANSYS, 2018).

Para utilização do modelo *Mixture* é necessário resolver a Equação 2.4 simultaneamente à Equação 2.6, que é a equação para cálculo da fração volumétrica. (ANSYS, 2018).

$$\frac{\partial(\alpha_p \rho_p)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_p \vec{v}_m) = \nabla \cdot (\alpha_p \rho_m \vec{v}_{dr,k}) + \sum_{q=1}^n (\dot{m}_{qp} - \dot{m}_{pq}) \quad (2.6)$$

Onde  $q$  e  $p$  são os índices das fases,  $\dot{m}_{pq}$  é a transferência de massa da fase  $p$  para a fase  $q$ ,  $\dot{m}_{qp}$  é a transferência de massa da fase  $q$  para a fase  $p$ ,  $\rho$  é a densidade e  $\alpha$  é a fração volumétrica (ANSYS, 2018).

E para sistemas multifásicos, uma das características mais importantes do escoamento é o arrasto. Com o modelo *Mixture* habilitado, diversos modelos estão disponíveis para modelar essa característica do escoamento e predizer o coeficiente de arrasto ( $C_D$ ). Sendo eles, Schiller-Naumann, Morsi-Alexander, Symmetric, Universal-Drag, Grace, Tomiyama e Ishii-Zuber.

Vale ressaltar que outros modelos também estão disponíveis, porém para condições de contorno mais restritas e também quando se habilita o modelo Euleriano (ANSYS, 2018). Utilizando o coeficiente de arrasto é possível calcular o coeficiente de atrito por intermédio da Equação 2.7 e para isso primeiramente deve-se calcular o número de Reynolds ( $Re$ ) para a bolha, utilizando a Equação 2.8 (BURDILES, 2017).

$$f = \frac{C_D Re}{24} \quad (2.7)$$

$$Re = \frac{\rho_L U_t d_p}{\mu_L} \quad (2.8)$$

Onde  $\rho_L$  é densidade do líquido,  $U_t$  é a velocidade terminal da bolha,  $d_p$  é o diâmetro da bolha e  $\mu_L$  é a viscosidade do líquido (BURDILES, 2017).

O modelo Schiller-Naumann é utilizado para sistemas fluido-fluido, sendo frequentemente aplicável com resultados satisfatórios para cálculos multifásicos neste tipo de sistema (ANSYS, 2018). O coeficiente de arrasto utilizando este modelo é calculado por intermédio da Equação 2.9.

$$C_d = \begin{cases} 24(1 + 0,15Re^{0,687})/Re & Re \leq 1000 \\ 0,44 & Re > 1000 \end{cases} \quad (2.9)$$

O modelo Morsi-Alexander é utilizado para sistemas fluido-fluido. Sendo este o modelo de arrasto mais completo disponível, pois ele ajusta-se frequentemente a um grande espectro de número de Reynolds, no entanto, os cálculos utilizando este modelo, podem apresentar uma menor estabilidade numérica em relação aos demais modelos disponíveis. As Equações 2.10 e 2.11 contém a equação do coeficiente de arrasto e os parâmetros adimensionais utilizando para o cálculo de  $C_D$  para cada faixa de número de Reynolds, respectivamente (ANSYS, 2018).

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2} \quad (2.10)$$

$$a_1, a_2, a_3 = \begin{array}{ll} 0,24,0 & 0 < Re < 0,1 \\ 3,690; 22,73; 0,0903 & 0,1 < Re < 1 \\ 1,222; 29,1667; -3,8889 & 1 < Re < 10 \\ 0,6167; 46,50; -116,67 & 10 < Re < 100 \\ 0,3644; 98,33; -2778 & 100 < Re < 1000 \\ 0,357; 148,62; -47500 & 1000 < Re < 5000 \\ 0,46; -490,546; 578700 & 5000 < Re < 10000 \\ 0,5191; -1662,5; 5416700 & Re \geq 10000 \end{array} \quad (2.11)$$

O modelo Symmetric é utilizado para sistemas fluido-fluido. Sendo este modelo recomendado para escoamentos onde a fase secundária, em uma região do domínio da simulação, se torna fase primária em outra região. Um exemplo clássico para representar um caso de aplicação deste modelo é recipiente cheio de água até a metade, sendo que com a injeção de ar na base do recipiente, o ar será a fase secundária na primeira metade do recipiente e na segunda metade o ar será a fase primária. O coeficiente de arrasto utilizando este modelo é calculado com a mesma equação empregada pelo modelo Schiller-Nauman (Equação 2.9). Porém a densidade, viscosidade e diâmetro da fase são calculados utilizando as Equações 2.12, 2.13 e 2.14, respectivamente (ANSYS, 2018).

$$\rho_{pq} = \alpha_p \rho_p + \alpha_q \rho_q \quad (2.12)$$

$$\mu_{pq} = \alpha_p \mu_p + \alpha_q \mu_q \quad (2.13)$$

$$d_{pq} = \frac{1}{2}(d_p + d_q) \quad (2.14)$$

Onde, q e p representam os subíndices para as fases primárias e secundárias,  $\rho$  é a densidade,  $\mu$  é a viscosidade,  $\alpha$  é a fração de volume e d é o diâmetro (ANSYS, 2018).

O modelo Universal-Drag é utilizado para sistemas bolha-liquido e/ou gotículas-gás. Sendo este modelo recomendando quando o comprimento característico do domínio de fluxo for muito maior do que o tamanho médio das bolhas/gotículas. As Equações 2.15, 2.16 e 2.17 representam os coeficientes de arrasto para o regime viscoso, para o regime de distorção da bolha e para o regime de bolha encapsulada, onde há uma forte deformação, respectivamente (ANSYS, 2018).

$$C_{D_{vis}} = \frac{24}{Re} (1 + 0,1Re^{0,75}) \quad (2.15)$$

$$C_{D_{dis}} = \frac{2}{3} \left( \frac{d_p}{\lambda_{RT}} \right) \left( \frac{1 + 17,67f^{*6/7}}{18,67f^*} \right); f^* = (1 - \alpha_p)^{1,5} \quad (2.16)$$

$$C_{D_{cap}} = \frac{8}{3} (1 - \alpha_p)^2 \quad (2.17)$$

Onde p representa o subíndice para a fase secundária, d é o diâmetro,  $\alpha$  é a fração de volume e  $\lambda_{RT}$  é comprimento de onda de instabilidade de Rayleigh-Taylor. O regime viscoso, o regime de distorção e o regime de bolha encapsulada e seus respectivos coeficientes de arrastos são calculados e definidos através das Equações 2.18, 2.19 e 2.20, respectivamente.

$$Se C_{D_{dis}} < C_{D_{vis}}; então: C_D = C_{D_{vis}} \quad (2.18)$$

$$Se C_{D_{vis}} < C_{D_{dis}} < C_{D_{cap}}; então: C_D = C_{D_{dis}} \quad (2.19)$$

$$Se C_{D_{dis}} > C_{D_{cap}}; então: C_D = C_{D_{cap}} \quad (2.20)$$

Os modelos Grace e Tomiyama são utilizados para sistemas fluido-fluido, sendo estes modelos recomendados para escoamentos gás-líquido, sendo que as bolhas podem ter diversas formas, tais como, esférica, elíptica e cápsula esférica. Vale ressaltar que a principal diferença entre esses modelos é a necessidade de inserir uma constante experimental no caso do modelo Grace. Assim sendo, o cálculo do coeficiente de arrasto utilizando o modelo Grace é feito aplicando a Equação 2.21, sendo que essa equação é resolvida sequencialmente com as

Equações 2.22, 2.23 e 2.24, que representam os coeficientes de arrasto para bolhas esféricas, elípticas e capsula esféricas, respectivamente (ANSYS, 2018).

$$C_d = \alpha_q^{C_{exp}} \cdot \max \left[ \min \left( C_{D_{ellipse}}, C_{D_{cap}} \right), C_{D_{sphere}} \right] \quad (2.21)$$

$$C_{D_{sphere}} = \begin{cases} 24/Re & Re < 0,01 \\ 24(1 + 0,15Re^{0,687})/Re & Re \geq 0,01 \end{cases} \quad (2.22)$$

$$C_{D_{ellipse}} = \frac{4 g d_p (\rho_q - \rho_p)}{3 U_t^2 \rho_q} \quad (2.23)$$

$$C_{D_{cap}} = \frac{8}{3} \quad (2.24)$$

Onde, q e p representam os subíndices para as fases primárias e secundárias,  $\alpha_q$  é a fração de volume para fase primária,  $C_{exp}$  é o expoente de correção da fração de volume, g é gravidade,  $d_p$  é o diâmetro da fase secundária (bolha),  $U_t$  é a velocidade terminal e  $\rho$  é a densidade. Para altas frações de volume para as bolhas, um valor diferente de zero deve ser definido para  $C_{exp}$ , sendo que este valor a ser definido depende do tamanho da bolha. Para o modelo Tomiyama, o coeficiente de arrasto deve ser calculado utilizando a Equação 2.25, sendo necessário previamente calcular o número de Eötvös, utilizando a Equação 2.26 (ANSYS, 2018).

$$C_D = \max \left\{ \min \left[ \frac{24}{Re} (1 + 0,15Re^{0,687}), \frac{72}{Re} \right], \frac{8}{3} \frac{E_o}{E_o + 4} \right\} \quad (2.25)$$

$$E_o = \frac{g(\rho_q - \rho_p)d_p^2}{\sigma} \quad (2.26)$$

Onde, q e p representam subíndices para as fases primárias e secundárias, g é gravidade,  $d_p$  é o diâmetro da fase secundária (bolha),  $\rho$  é a densidade e  $\sigma$  é a tensão superficial (ANSYS, 2018).

O modelo Ishii-Zuber é também utilizado para sistemas fluido-fluido, sendo que para este modelo as bolhas podem possuir diversas formas, como nos modelos Grace e Tomiyama. Sendo que o modelo Ishii-Zuber leva em conta automaticamente enxames de bolhas que se movem juntas em frações de alto volume de gás. O coeficiente de arrasto utilizando o modelo Ishii-Zuber é calculado por meio da Equação 2.27, porém previamente deve ser determinado o coeficiente de arrasto para um regime viscoso ( $C_{D_{vis}}$ ) e para um regime distorcido ( $C_{D_{dis}}$ ), utilizando as Equações 2.28 e 2.29, respectivamente (ANSYS, 2018).

$$C_D = \min (C_{D_{vis}}, C_{D_{dis}}) \quad (2.27)$$

$$C_{D_{vis}} = \frac{24}{Re} (1 + 0,15Re^{0,75}) \quad (2.28)$$

$$C_{D_{vis}} = \frac{2}{3} \frac{d_p}{\sqrt{\frac{\sigma}{g|\rho_q - \rho_p|}}} \quad (2.29)$$

Onde, q e p representam subíndices para as fases primárias e secundárias, g é gravidade,  $d_p$  é o diâmetro da fase secundária (bolha),  $\rho$  é a densidade e  $\sigma$  é a tensão superficial (ANSYS, 2018).

Deste modo, analisando os modelos de arrasto disponíveis, para a utilização do modelo *Mixture*, conclui-se que os modelos Tomiyama e Grace são os mais recomendados para o sistema gás-líquido presente na célula de flotação. Além desses modelos, outra possibilidade é a utilização do modelo Schiller-Naumann, devido a sua ampla faixa de aplicações. Pois os demais modelos de arrasto disponíveis são para casos mais restritos de escoamento e com isso, podem comprometer a convergência do problema.

Assim sendo, os modelos multifásicos são ótimas opção para determinação dos parâmetros das bolhas formadas em células de flotação, no entanto, usualmente esses modelos associados as técnicas de CFD não são utilizados para predição do diâmetro de bolhas, velocidade terminais, fração de gás retido e etc. Sendo que, a ferramenta normalmente empregada para obter estimativas destes valores são correlações matemáticas e empíricas que serão abordadas a seguir.

### 3.1.2 Correlações para células de flotação

O diâmetro das bolhas em uma célula de flotação é um dos parâmetros mais essenciais para avaliar o bom desempenho deste equipamento, pois é o diâmetro das bolhas que irá definir a área de contato entre as fases. Assim sendo, Beltrán (2003) propôs uma correlação para cálculo do diâmetro das bolhas formadas para tanques com agitação mecânica, sendo esta correlação representada pela Equação 2.30.

$$\frac{6(1 - \beta)}{d_p} = 2 \left( \frac{\rho_L g}{\sigma_L} \right)^{0,5} \frac{u_g}{\left( \frac{\sigma_L g}{\rho_L} \right)^{0,25}} \quad (2.30)$$

Onde,  $(1-\beta)$  é a fração volumétrica da fase gasosa,  $d_p$  é o diâmetro médio das bolhas,  $\rho_L$  é a densidade da fase líquida, g é a gravidade,  $\sigma_L$  é a tensão superficial do líquido e  $u_g$  é a

velocidade superficial do gás. Vale ressaltar que a fração volumétrica da fase gasosa pode ser calculada utilizando a Equação 2.31 (BELTRÁN, 2003).

$$(1 - \beta) = 1,2 \left( \frac{u_g u_L}{\sigma_L} \right) \left[ \frac{u_g}{\left( \frac{\sigma_L g}{\rho_L} \right)^{0,25}} \right]^{0,5} \quad (2.31)$$

Sendo que a fração volumétrica da fase gasosa também pode ser facilmente calculada através de dados experimentais, obtendo a altura da célula de líquido com e sem a alimentação de gás e aplicando a Equação 2.32 (BELTRÁN, 2003).

$$(1 - \beta) = \frac{h_T - h}{h_T} \quad (2.32)$$

Onde,  $h_T$  e  $h$  são as alturas da célula de líquido com e sem a alimentação de gás, respectivamente. Além disso, para o cálculo do diâmetro das bolhas é necessário calcular a velocidade superficial do gás, para isso é utilizado a Equação 2.33 (LARA, *et al.*, 2021).

$$u_g = \frac{Q_g}{A_c} \quad (2.33)$$

Onde,  $Q_g$  é vazão volumétrica do gás e  $A_c$  é a área de seção transversal da célula de flotação. Além disso, outro parâmetro de extrema importância em uma célula de flotação é a velocidade terminal das bolhas formadas, sendo esta variável calculada utilizando a Equação 2.34 (BURDILES, 2017).

$$U_t = \frac{g \rho_L d_p^2}{18 \mu_L (1 + 0,15 Re^{0,687})} \quad (2.34)$$

### 3.1.3 Trabalhos correlatos

Devido à grande importância das células de flotação e dos tanques agitados no ambiente industrial, diversos trabalhos já foram desenvolvidos com o enfoque em analisar o comportamento e interação entre as fases. Deste modo, alguns trabalhos com similaridades com o presente trabalho desenvolvido estão descritos a seguir.

Murthy *et al.*, (2007) realizou o estudo monofásico e multifásico para tanques agitados, onde foi utilizado o modelo de turbulência *Standard k-ε* e, para validação do modelo, foi utilizado o número de potência simulado e experimental. No caso da simulação multifásica, foi utilizado o modelo multifásico Euleriano e foi habilitado o modelo de arrasto Morsi & Alexander. O objetivo deste trabalho foi analisar e comparar para o sistema monofásico e

bifásico as regiões de baixa pressão, os perfis de velocidade e a pressão estática no agitador mecânico, e também analisar o diagrama de fase ar-água no sistema bifásico.

O trabalho de Basavarajappa & Miskovic (2016) teve como objetivo realizar o estudo do modelo de equilíbrio populacional acoplado a dinâmica dos fluidos computacionais, para investigar a distribuição de tamanho das bolhas formadas em estado estacionário. Essa abordagem foi utilizada para caracterizar diferentes regimes de fluxo que ocorrem em uma célula de flotação, para diferentes taxas de aeração e velocidade angulares. Para este trabalho conclui-se que as pequenas bolhas estão perto da região de alta turbulência e as grandes bolhas estão concentradas na região superior do tanque.

Kerdouss *et al.*, (2006) realizou a modelagem da dispersão de um gás em um tanque agitado utilizando as técnicas de CFD. Foi feita a modelagem tridimensional e foi utilizado a abordagem Euleriana para modelar a dispersão do gás e a dinâmica das bolhas na água. Vale ressaltar que neste trabalho foi implementado uma equação de densidade do número de bolhas, com o intuito de contabilizar o efeito combinado de quebra de bolha e coalescência no tanque. Outro ponto que vale salientar, é que para esta modelagem foi utilizado o modelo padrão de arrasto, que é o modelo de Schiller & Naumann.

### **3.2 Objetivos**

Sendo assim, este trabalho teve como objetivo geral realizar a modelagem via CFD da interação entre as fases (gás-líquido) e prever o comportamento da fase gasosa e sua dispersão ao longo da célula para a formação das bolhas compostas de oxigênio e ozônio.

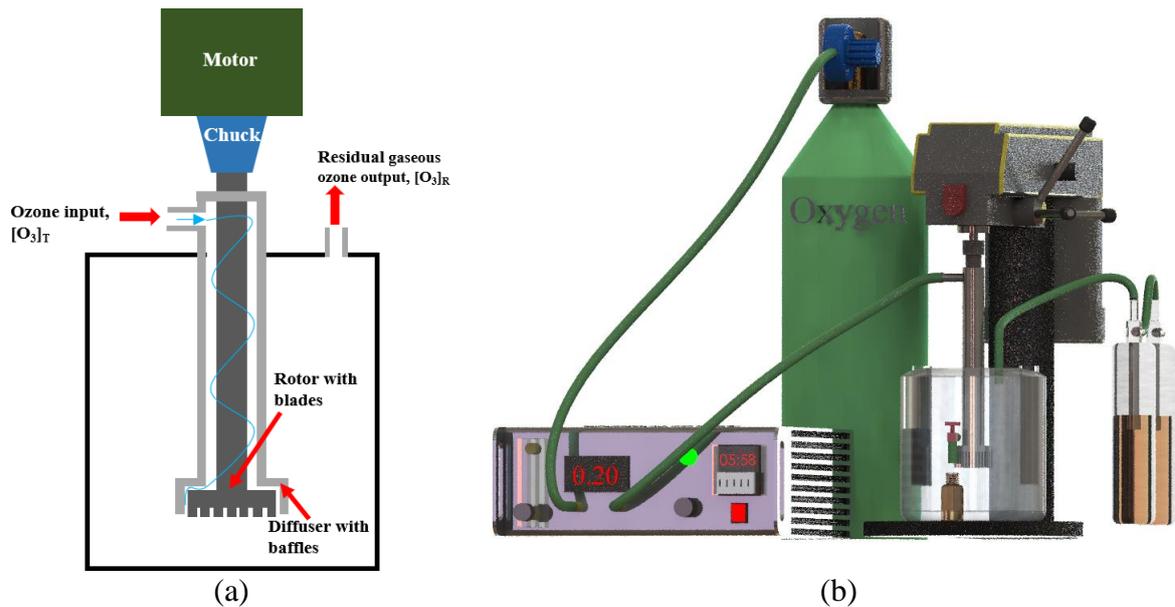
Os objetivos específicos deste trabalho são obter alguns parâmetros essenciais da célula de flotação como: diâmetro das bolhas, deslocamento do nível de líquido, fração volumétrica de gás, velocidade terminal e coeficiente de arrasto. Com essas análises será possível verificar o modelo multifásico que melhor descreve cada um dos parâmetros avaliados. Além disso, ensaios experimentais serão feitos para determinar alguns parâmetros do flotador e, posteriormente, comparar e validar os resultados da simulação com os valores obtidos de forma experimental e através das correlações.

### 3.3 Materiais e Métodos

#### 3.3.1 Metodologia experimental

O sistema simulado foi o mesmo do Capítulo 1 (Seção 2 deste trabalho), porém foi levado em conta a injeção da mistura gasosa no interior da célula de flotação. Vale ressaltar que a alimentação gasosa é constituída de uma mistura de oxigênio e ozônio, com fração mássica de 0,9987 e 0,0013, respectivamente. Outro ponto que vale salientar, é que todas as simulações neste capítulo foram realizadas com uma velocidade angular do agitador mecânico de 1500 rpm. A Figura 2.1a contém a configuração do sistema de agitação mecânica com o *baffle* e também elucida claramente a forma de alimentação da mistura gasosa ao sistema e a Figura 2.1b representa todo o circuito para alimentação da mistura gasosa associado ao protótipo da célula de flotação experimental.

Figura 2.1 – Representação de todo o circuito que compõe a célula de flotação.



Fonte adaptada: Lara et al., (2021)

O experimento foi realizado com uma vazão volumétrica da mistura oxigênio-ozônio de 1 L/min. Para determinar o deslocamento do nível do líquido experimentalmente, foi utilizado um papel milimetrado, sendo que o mesmo foi inserido na região frontal da célula de flotação, conforme pode ser observado na Figura 2.2 Com isso, foi possível determinar esse deslocamento, posteriormente à estabilização do sistema, que foi obtida aproximadamente após 5 segundos da inicialização do equipamento. Vale ressaltar que a leitura do deslocamento de nível foi feita de maneira visual.

Figura 2.2 – Escala utilizada para mensurar o deslocamento do nível.



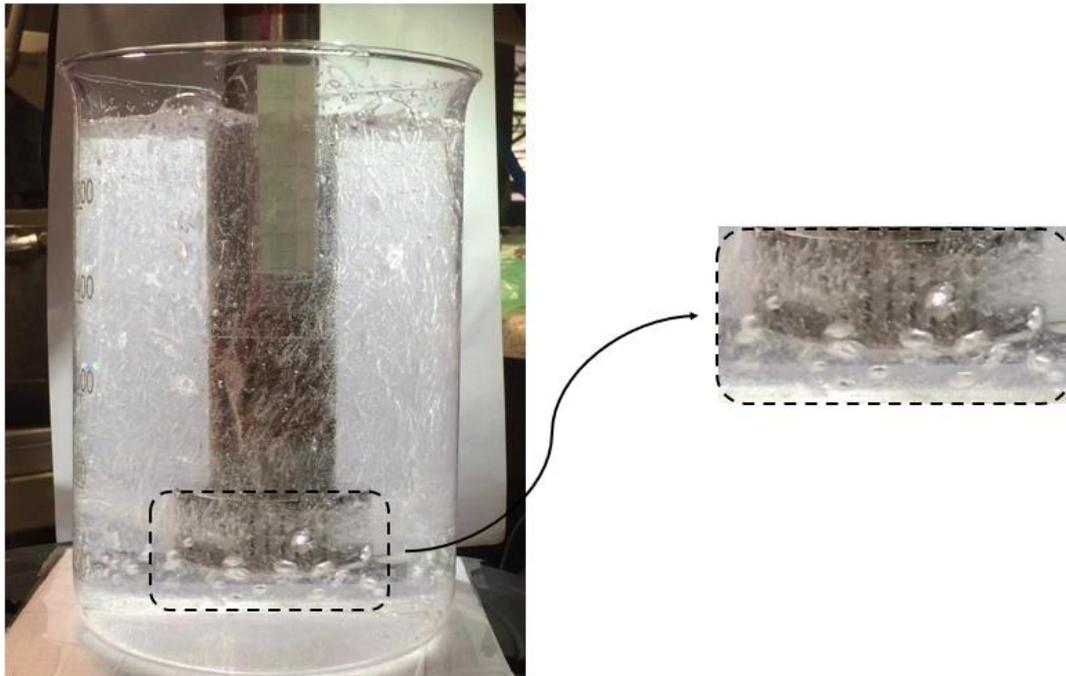
Fonte: Do autor (2021)

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

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

Para minimizar os erros envolvidos no tratamento de imagens, foi feito o analisado somente na região próxima ao agitador mecânico, pois nesta região é possível visualizar claramente a forma das bolhas formadas, conforme pode ser observado na Figura 2.3. Outro ponto a salientar, é que foi feito o tratamento das imagens e o cálculo do diâmetro médio das bolhas para vários instantes de tempo, para tornar a medição mais representativa e minimizar os erros envolvidos na análise.

Figura 2.3 – Região na qual foi feito o tratamento de imagens para obtenção do diâmetro das bolhas.



Fonte: Do autor (2021)

Com os experimentos realizados, não foi possível determinar os demais parâmetros de interesse para a célula de flotação, como, fração volumétrica de gás, velocidade terminal e coeficiente de arrasto. No entanto, essas variáveis foram estimadas utilizando as correlações representadas pelas Equações 2.31, 2.34 e 2.25.

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

Para o cálculo dos parâmetros envolvidos na célula de flotação, os valores contidos na Tabela 2.1 foram utilizados para as propriedades física da fase líquido, que no caso específico deste trabalho, é a água (LARA *et al.*, 2021; ANSYS, 2018).

Tabela 2.1 – Valores das propriedades físicas utilizadas.

<b>Propriedades físicas</b>	<b>Valores</b>
$\sigma_L$ (N/m)	0,0712
$\rho_L$ (kg/m <sup>3</sup> )	998,2
$\mu_L$ (Pa.s)	0,001003

Fonte adaptado: (LARA *et al.*, 2021; ANSYS, 2018).

### 3.3.2 Metodologia numérica

O primeiro passo para realizar simulações utilizando as técnicas de CFD é a construção de geometria do equipamento, para isso, foi utilizado o *software* SpaceClaim<sup>®</sup>. Vale ressaltar que a geometria utilizada neste capítulo foi a mesma utilizada no Capítulo 1, que está representada na Figura 1.8. Posteriormente à construção da geometria da célula de flotação, o domínio da solução numérica foi dividido em volumes de controle, através da técnica do Método dos Volumes Finitos (MVF), para manufatura da malha computacional.

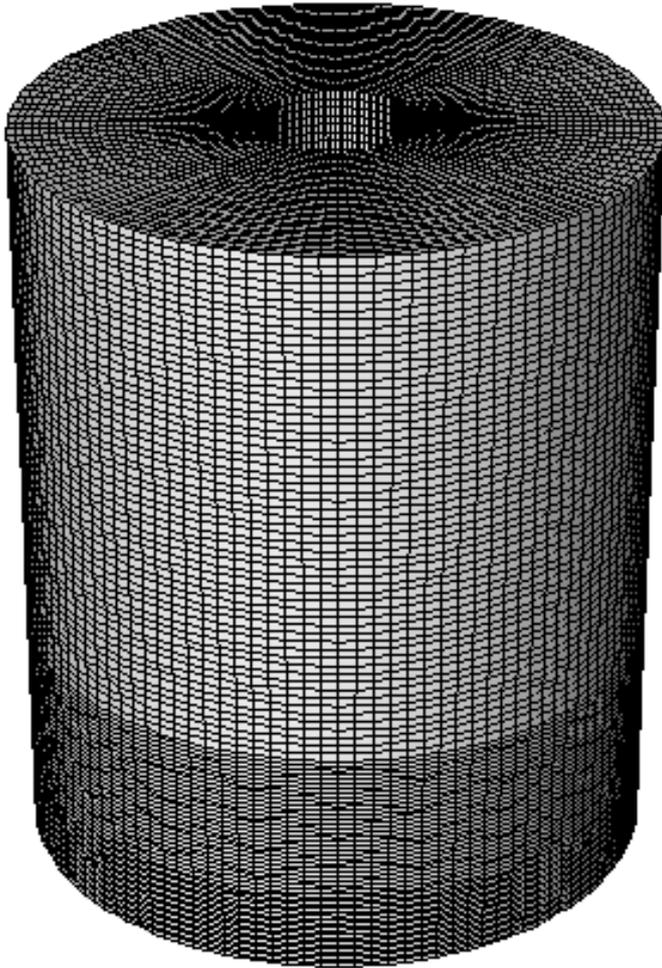
#### 3.3.2.1 Discretização do domínio geométrico

Devido ao aumento da complexidade da simulação, foi necessário aumentar o número de células da malha, para uma descrição mais precisa da fluidodinâmica no interior da célula de flotação. Sendo assim, foi utilizado uma malha com 1.082.259 elementos e a discretização do domínio geométrico foi feita utilizando o *software* GAMBIT<sup>®</sup>. Vale ressaltar que não foi utilizado as malhas manufaturadas no *software* Meshing<sup>®</sup>, pois as mesmas não convergiram quando habilitado o modelo multifásico.

A malha manufaturada é majoritariamente hexaédrica, porém há elementos tetraédricos na região do agitador, devido à complexidade da geometria nessa região. Outro ponto que vale salientar é o refino da malha na região do agitador mecânico e abaixo do mesmo. Esse refino foi realizado, pois essa é uma região crítica para o escoamento, assim sendo, é necessário um maior número de células para aumentar a exatidão dos resultados. A malha da célula de flotação da superfície externa do *baffle* e da superfície externa do agitador mecânico estão representadas nas Figuras 2.4, 2.5 e 2.6, respectivamente.

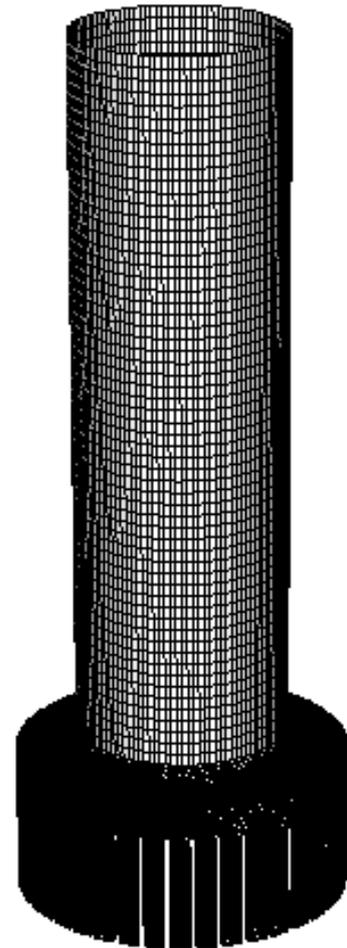
No *software* GAMBIT<sup>®</sup> também é definido a natureza de cada face da geometria, para que posteriormente sejam aplicadas as condições de contorno do problema. Sendo assim, a face superior da célula de flotação é definida como *pressure outlet*, as demais faces da célula de flotação são definidas como *wall*, a entrada é definida como *mass-flow-inlet/velocity-inlet*, vale ressaltar que a entrada é a face inferior do *baffle*, ou seja, a face do *baffle* que está localizada acima do agitador mecânico, o agitador mecânico e o *baffle* também são definidos como *wall*, entretanto no caso do agitador mecânico é definido uma velocidade angular, com magnitude de 1500 rpm no sentido anti-horário.

Figura 2.4 – Malha da célula de flotação.



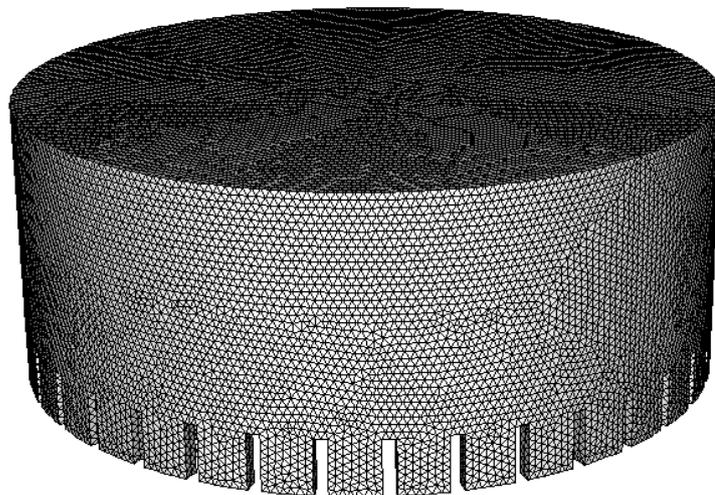
*Fonte: Do autor (2021)*

Figura 2.5 – Malha da superfície externa do *baffle*.



*Fonte: Do autor (2021)*

Figura 2.6 – Malha da superfície externa do agitador mecânico.



*Fonte: Do autor (2021)*

### 3.3.2.2 Condições de contorno

A Tabela 2.2 contém as condições iniciais e de contorno para a simulação da célula de flotação. As simulações foram feitas utilizando a rotação de 1500 rpm e para todas as paredes foi utilizado a condição de não deslizamento. O método de acoplamento pressão-velocidade utilizado para as simulações multifásicas foi o SIMPLE.

Tabela 2.2 – Condições iniciais e de contorno.

• Simulação 3D e em dupla precisão	
• Regime transiente e isotérmico	
• Saída: Pressão atmosférica da cidade de Cali (101000 Pa)	
• Vazão da alimentação: 1 L/min (mistura de oxigênio e ozônio)	
• Método de discretização da pressão: PRESTO!	
• Método de discretização do momentum: First Order Upwind	
• Modelo de turbulência: RNG k- $\epsilon$	
• Método de partição da malha: Metis (COSTA <i>et al.</i> , 2020)	
• Fatores de relaxação (PETRI <i>et al.</i> , 2009)	Pressure = 0,3 Momentum = 0,1 Body Force = 1 Density = 1
• Critério de Convergencia = $10^{-4}$	
• Time Step Size (s) = $10^{-6}$ a $10^{-5}$	

Fonte: Do autor (2021)

A simulação começou com o *Time Step Size* de  $10^{-6}$  e conforme o tempo passava esse valor ia sendo alterado até o limite superior de  $10^{-5}$ , resalta-se que esse foi o valor máximo que foi utilizado para que os erros envolvidos na resolução numérica não ultrapassassem o critério de convergência.

Foi simulado 30 segundos, para garantir que o escoamento da fase gasosa atingisse o estado estacionário. A inicialização desta simulação foi feita com relação à entrada, conseqüentemente a convergência inicial deste caso foi favorecida em comparação ao caso simulado no Capítulo 1, pois como neste sistema tem-se um sistema contínuo, ou seja, há entrada e saída de fluido, a convergência da equação da continuidade foi favorecida.

Para a simulação deste equipamento foi necessário inserir a viscosidade e densidade da mistura oxigênio-ozônio, assim sendo, foi feito a média ponderada dos valores para as substâncias puras e esses valores foram obtidos na base de dados do *software* FLUENT®, conforme representado na Tabela 2.3. Vale salientar que a mistura de oxigênio e ozônio, contém uma fração mássica de 0,9987 e 0,0013 para os componentes, respectivamente.

Tabela 2.3 – Propriedades físicas para as substâncias puras e para a mistura.

	Oxigênio	Ozônio	Mistura
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	1,299900	2,143930	1,301002
$\mu$ (Pa.s)	1,91900E-05	1,72000E-05	1,91874E-05

Fonte: Do autor (2021)

Ressalta-se que foi utilizado as propriedades médias para não criar uma fase adicional, que teria como consequência um aumento do custo computacional, sem agregar valor para o caso em questão. Pois o intuito desta simulação era avaliar a interação fluidodinâmica do escoamento, no entanto, vale ressaltar que caso o interesse estivesse na parte química do escoamento, como, reações químicas, seria necessário criar uma nova fase, para incorporar esses fenômenos.

O modelo VOF foi testado para este caso, pois a interface entre as bolhas e a água na célula de flotação são bem definidas, assim sendo, esse modelo multifásico torna-se uma boa opção para essa simulação.

O modelo *Mixture* também foi testado para esse caso, devido a sua robustez mesclado com sua aplicabilidade para diversos casos. Para essa simulação também foi utilizado a tensão superficial entre as bolhas e a água de 0,073 N/m (ARAGÃO, *et al.*, 2020).

Para facilitar a convergência do modelo VOF, foi utilizado a formulação implícita, também foi inserido o valor da tensão superficial entre as bolhas e a água com valor de 0,073 N/m (ARAGÃO, *et al.*, 2020). Vale ressaltar que esse é o valor utilizado para a tensão superficial ar-água, no entanto por falta de dados disponíveis na literatura, esse foi o valor utilizado.

Conforme citado na Seção 3.1.1.2 os modelos de arrasto que melhor adequam-se ao escoamento multifásico líquido-gás da célula de flotação são o Schiller & Naumann, o Grace e o Tomiyama. Sendo assim, inicialmente foi testado o modelo Schiller & Naumann, no entanto, o mesmo não convergiu para a célula de flotação empregada neste trabalho. Posteriormente o objetivo era testar o modelo Grace, porém utilizando esse modelo uma constante experimental que depende do tamanho das bolhas e da fração volumétrica ( $C_{exp}$ ) deveria ser inserida, no entanto, por falta desta constante experimental, esse modelo não foi testado. Assim, o arrasto entre a fase líquida e a fase gasosa para a célula de flotação foi modelado utilizando o modelo Tomiyama, que apresentou uma boa convergência.

Para essa simulação a velocidade de deslizamento foi desprezada, tendo em vista, que a mesma é desprezível para casos onde o arrasto é dominante (ANSYS, 2018). Outra variável que foi inserida é o diâmetro médio das bolhas, sendo que este valor foi calculado através da

Equação 2.30, sendo obtido um valor de 6,44 mm. Vale ressaltar que esse parâmetro deve ser inserido devido a necessidade do diâmetro médio para o cálculo de alguns parâmetros do modelo, no entanto, durante o escoamento pode haver coalescência ou quebra, modificando o tamanho das bolhas geradas.

### 3.3.3 Determinação do diâmetro médio e da velocidade terminal via CFD

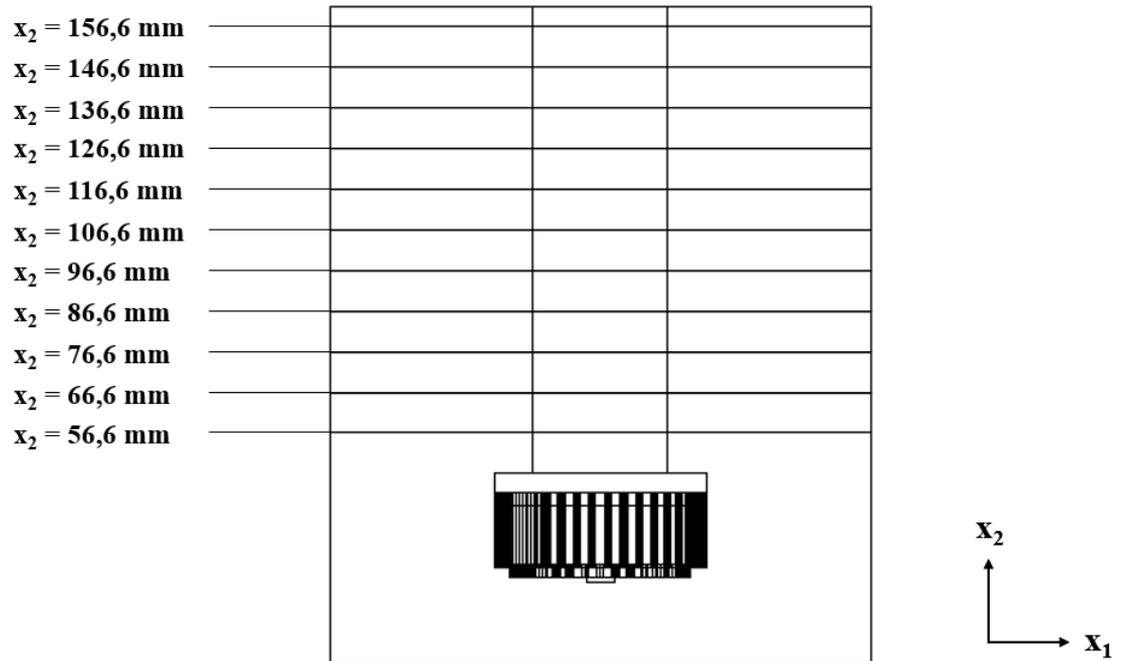
#### 3.3.3.1 Diâmetro médio

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

Para minimizar ao máximo os erros envolvidos na análise de imagens utilizando o *software* ImageJ, foi feito o cálculo do diâmetro médio para 11 diferentes planos radiais, sendo que a posição de cada plano pode ser contemplada na Figura 2.7. Devido ao contraste de cores obtidos através dos contornos de fração volumétrica e utilizando o diâmetro do *baffle* (33 mm) como escala para obter a razão número de *pixels* por unidade de comprimento, foi possível obter o diâmetro das bolhas para ambos modelos multifásicos utilizados.

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

Figura 2.7 – Posições na qual foi feito o tratamento de imagens para obtenção do diâmetro médio das bolhas.



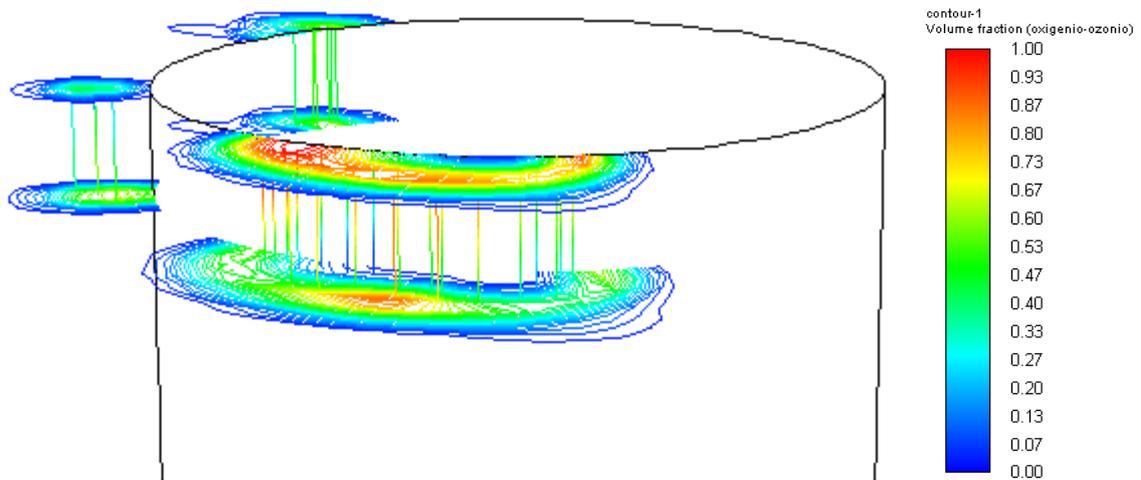
Fonte: Do autor (2021)

### 3.3.3.2 Velocidade terminal

A determinação direta da velocidade terminal das bolhas utilizando a abordagem Euleriana também é inviável, devido ao mesmo motivo já citado para inviabilizar a determinação do diâmetro médio, que é a perda das informações locais devido à resolução das integrais. No entanto, para contornar esse problema para o cálculo da velocidade terminal, foram construídas linhas de corrente que acompanhavam a trajetória das bolhas. Sendo que as Figuras 2.8 e 2.9 contém a representação das linhas de corrente construídas para o modelo VOF e *Mixture*, respectivamente. Vale salientar, que as linhas de corrente foram construídas nas regiões onde o somatório das forças estava igual a zero, ou seja, quando a força de empuxo é igual a soma da força gravitacional e da força de arrasto.

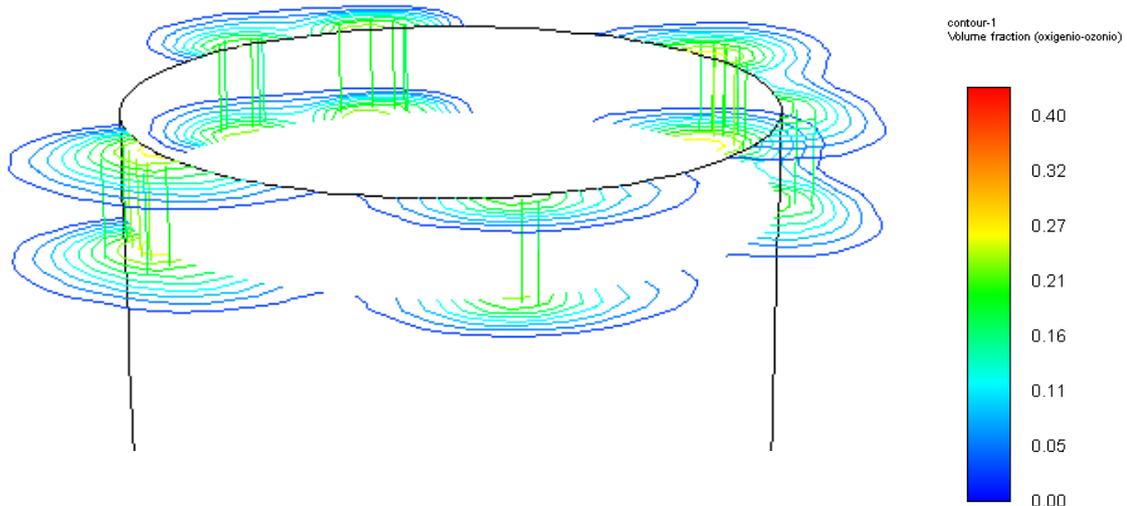
Conforme pode ser observado nas Figuras 2.8 e 2.9 foram utilizadas um alto número de linhas de corrente, sendo este número definido quando as variações na velocidade terminal se tornaram desprezíveis.

Figura 2.8 – Contorno de fração volumétrica utilizando o modelo VOF com as linhas de corrente para o cálculo da velocidade terminal das bolhas.



Fonte: Do autor (2021)

Figura 2.9 – Contorno de fração volumétrica utilizando o modelo *Mixture* com as linhas de corrente para o cálculo da velocidade terminal das bolhas.



Fonte: Do autor (2021)

## 3.4 Resultados e Discussões

### 3.4.1 Qualidade da malha

Para avaliar a qualidade da malha manufaturada no *software* GAMBIT®, foram utilizados os parâmetros de *Aspect Ratio* e de *Skewness*. A Tabela 2.4 contém os valores mínimos, máximos e médios, considerando toda a malha manufaturada, que é constituído

majoritariamente de elementos hexaédricos, entretanto também contém elementos do tipo tetraédrico, localizados na região do agitador mecânico e do *baffle*.

Tabela 2.4 – Valores mínimos, máximos e médio para *Aspect Ratio* e *Skewness*.

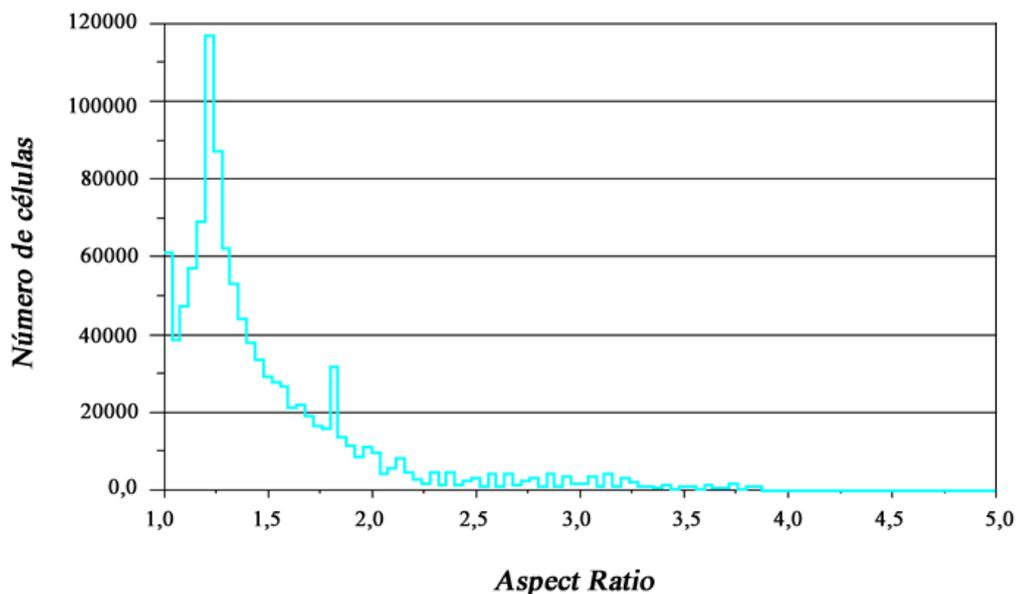
	<b>Mínimo</b>	<b>Máximo</b>	<b>Média</b>
<i>Aspect Ratio</i>	1,00000	211,50080	1,49182
<i>Skewness</i>	0,00152	0,99999	0,24552

Fonte: Do autor (2021)

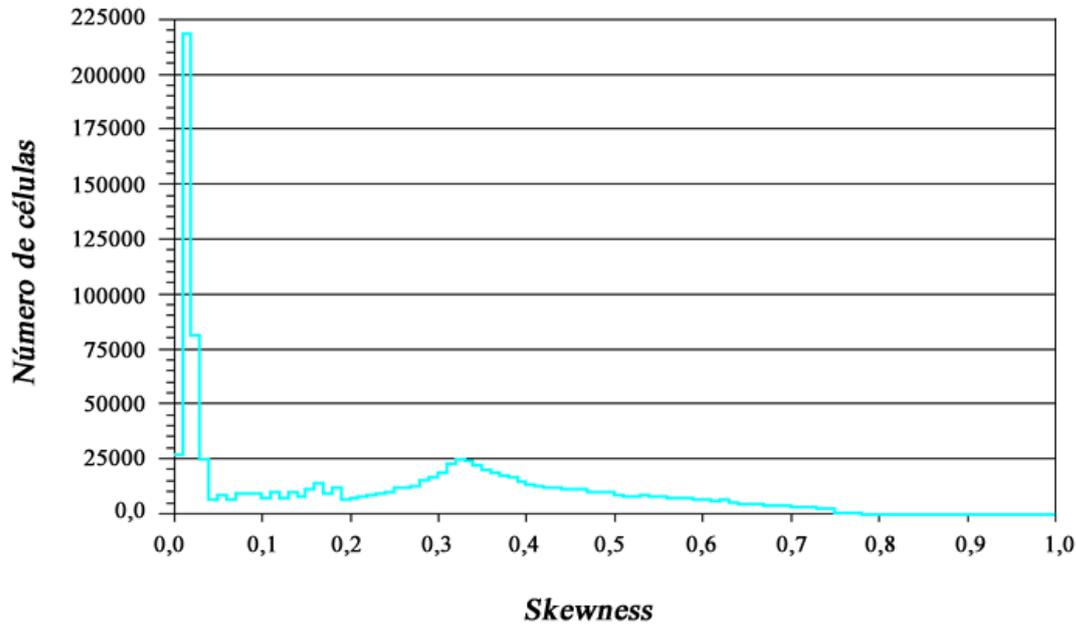
Analisando os valores de *Aspect Ratio* e *Skewness* obtidos, pode-se constatar que foi obtida uma malha computacional com boa qualidade, com baixas distorções tridimensionais dos elementos, tendo em vista que valor médio de *Aspect Ratio* aproximou-se da unidade e valor médio de *Skewness* aproximou-se da nulidade. No entanto, analisando os valores máximos para ambos parâmetros avaliados, pode-se concluir que existem elementos com baixa qualidade, porém de forma minoritária. Em contrapartida, analisando os valores mínimos, também pode-se concluir que existem elementos com uma qualidade excelente. As Figuras 2.10 e 2.11 contém os gráficos de *Aspect Ratio* e *Skewness*, respectivamente.

Analisando as Figuras 2.10 e 2.11 pode-se reafirmar a boa qualidade da malha manufaturada, tendo em vista, que a grande maioria dos elementos possuíram um *Aspect Ratio* inferior a 2,0 e um *Skewness* inferior a 0,05, indicando que as células manufaturadas possuem uma alta regularidade, com baixíssimas distorções. Ressalta-se que os gráficos representados nas Figuras 2.10 e 2.11 foram construídos no *software* Meshing mode do FLUENT®.

Figura 2.10 – Gráfico de *Aspect Ratio*.



Fonte: Do autor (2021)

Figura 2.11 – Gráfico de *Skewness*.

Fonte: Do autor (2021)

### 3.4.2 Deslocamento do nível do líquido

Utilizando um papel milimetrado foi possível determinar o deslocamento do nível do líquido da célula de flotação causado pela alimentação de 1 L/min da mistura gasosa de oxigênio e ozônio. Sendo que através das simulações computacionais utilizando os modelos multifásicos VOF e *Mixture* também foi possível determinar esse valor. Além disso, o deslocamento do nível de líquido também foi calculado através da correlação matemática expressa pela Equação 2.32, sendo esses valores representados através da Tabela 2.5.

Tabela 2.5 – Valores do deslocamento do nível calculados experimentalmente, através da correlação e com uso dos modelos multifásicos VOF e *Mixture*.

	Experimental	Correlação	Modelo VOF	Modelo <i>Mixture</i>
<b>Deslocamento do nível (<math>h_T-h</math>) (mm)</b>	3,00	1,22	1,31	1,49
<b>ER-Experimental (%)</b>		59%	56%	50%
<b>ER-Correlação (%)</b>	145%		7%	22%

Fonte: Do autor (2021)

Analisando a Tabela 2.5, pode-se constatar que avaliando a performance dos modelos multifásicos e da correlação em comparação ao resultado experimental, tem-se uma divergência considerável. Isso pode ser avaliado e observado através dos erros relativos com base no valor experimental (ER-Experimental). Sendo que esse desvio pode ser justificado principalmente devido à dificuldade de medição dessa grandeza, tendo em vista, que essa medição foi feita com

forte agitação na célula de flotação (1500 rpm) e também com a alimentação da mistura gasosa, logo o nível da fase líquida apresentava certas flutuações, que dificultavam a medição.

Outro ponto que dificultava a leitura do deslocamento do nível é o efeito de refração da água, tendo em vista, que devido aos diferentes índices de refração do ar e da água, a interface entre as fases apresentava leves distorções, dificultando a leitura da escala, conforme pode ser observado na Figura 2.2. Além disso, o erro sistemático dessa medida experimental é definido como metade do menor valor da escala, sendo que o menor valor da escala utilizado é 1 mm, assim sendo, o erro sistemático do deslocamento de nível experimental é igual a 0,5 mm. Logo essa medida apresentou um significativo erro sistemático, que corresponde a 17% do valor experimental obtido. E o erro aleatório também foi considerável, devido à dificuldade de medição, devido a agitação, alimentação de gás e efeitos de refração.

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

Comparando os resultados obtidos neste presente trabalho com os resultados obtidos no trabalho de Lara *et al.*, 2021, pode-se constatar que as vazões volumétricas utilizadas foram de 0,3 e 0,5 L/min, sendo a corrente composta exclusivamente de ozônio e quando se avalia os deslocamentos do nível de líquido, é obtido 2 mm e 3 mm, respectivamente. Com isso, pode-se observar que o valor obtido para a vazão de 0,5 L/min é exatamente igual ao obtido neste trabalho com 1 L/min e vale salientar que o sistema de medição e escala foram exatamente iguais.

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

### **3.4.3 Diâmetro das bolhas**

Um dos principais parâmetros para a célula de flotação é o diâmetro médio das bolhas de oxigênio-ozônio formadas. Experimentalmente e através dos contornos de fração volumétrica obtidos nas simulações, o diâmetro médio foi obtido através do tratamento de imagens utilizando o *software* ImageJ, conforme descrito na seção 3.3.1.1.

Conforme já foi citado, para o caso experimental, o cálculo do diâmetro médio foi feito na região próxima ao agitador mecânico (Figura 2.3), pois nessa região as bolhas estavam mais nítidas. Já para as simulações utilizando os modelos multifásicos VOF e *Mixture*, o diâmetro médio foi obtido através da análise de 11 planos horizontais (Figura 2.7), para uma maior representatividade dos resultados. Os contornos de fase utilizados estão representados nas Figuras A.2 e A.3 contidas no Apêndice. A Tabela 2.6 contém o diâmetro médio experimental, obtido por meio da correlação (Equação 2.30) e através dos modelos VOF e *Mixture*.

Tabela 2.6 – Valores do diâmetro médio das bolhas calculados experimentalmente, através da correlação e com uso dos modelos multifásicos VOF e *Mixture*.

	<b>Experimental</b>	<b>Correlação</b>	<b>Modelo VOF</b>	<b>Modelo <i>Mixture</i></b>
<b>Diâmetro médio (mm)</b>	2,67	6,44	2,83	5,30
<b>ER-Experimental (%)</b>		141%	6%	99%
<b>ER-Correlação (%)</b>	59%		56%	18%

Fonte: Do autor (2021)

Analisando os valores contidos na Tabela 2.6, pode-se constatar que o modelo VOF foi aquele no qual obteve-se o menor erro relativo com base no valor experimental e consequentemente este modelo apresentou uma capacidade preditiva superior ao modelo *Mixture* e à correlação matemática. Isso pode ser justificado principalmente devido à característica fundamental para a aplicação do modelo VOF, que é um escoamento multifásico com a região da interface muito bem definida, sendo está uma característica do escoamento bifásico de células de flotação.

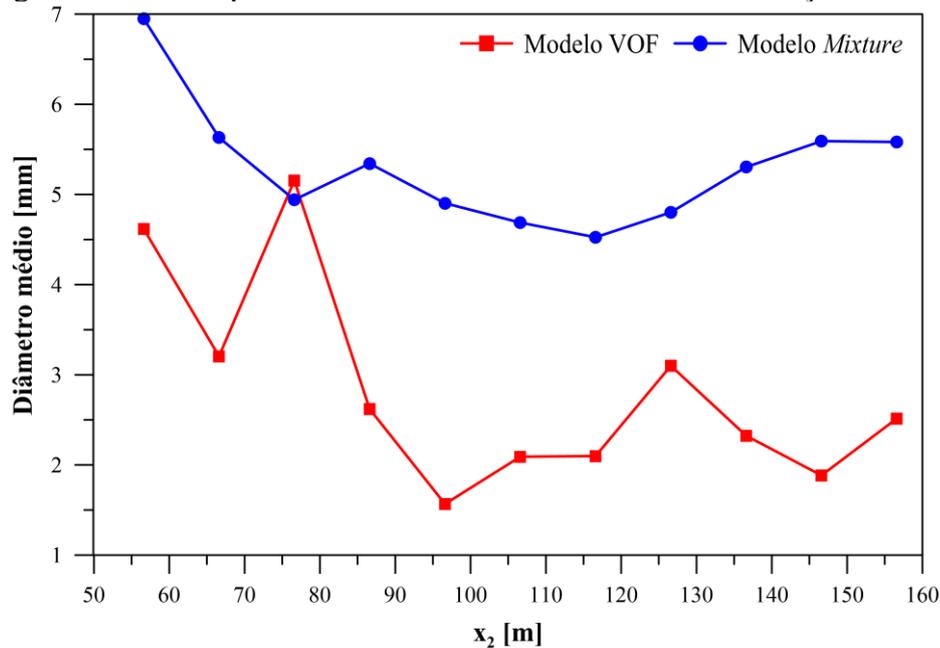
No entanto, ressalta-se que o que pode justificar o desvio apresentado quando se utiliza o modelo *Mixture* é que para fases secundárias deve-se obrigatoriamente inserir um valor de diâmetro para essa fase, assim sendo, foi inserido o valor obtido através da correlação matemática. Isso foi feito pois, de maneira prática, o valor obtido através da correlação seria mais facilmente calculado para uma posterior simulação do sistema. Com isso, quando se compara o erro relativo com base na correlação do modelo *Mixture* tem-se um erro relativo de 18%, indicando que este modelo apresentou um resultado satisfatório levando em conta o *input* inicial. Desse modo, a fonte proveniente de erro para o cálculo do diâmetro médio das bolhas

utilizado o modelo *Mixture* foi a própria estimativa de diâmetro obtida através da correlação matemática.

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

Além da limitação da obtenção apenas de valor médios de diâmetros utilizando as correlações matemáticas, pode-se observar que a mesma não apresentou um resultado satisfatório para a célula de flotação com sistema de agitação empregado neste trabalho. Com isso, as simulações computacionais além de apresentarem uma capacidade preditiva muito superior à correlação, elas permitem analisar a variação de diâmetros com relação à altura da célula. Sendo este um parâmetro extremamente útil para a otimização da eficiência de ozonificação nas células de flotação, tendo em vista, que sabendo sobre a variação de diâmetros com relação ao eixo axial da célula, pode-se redimensionar a mesma, com o intuito de cisalhar as bolhas em regiões de maior diâmetro, com o intuito de aumentar a área superficial de contato entre a fase gasosa e a fase sólida. Com isso, a Figura 2.12 contém a distribuição de tamanhos para as 11 posições verticais analisadas.

Figura 2.12 – Comportamento do diâmetro das bolhas com relação à altura.

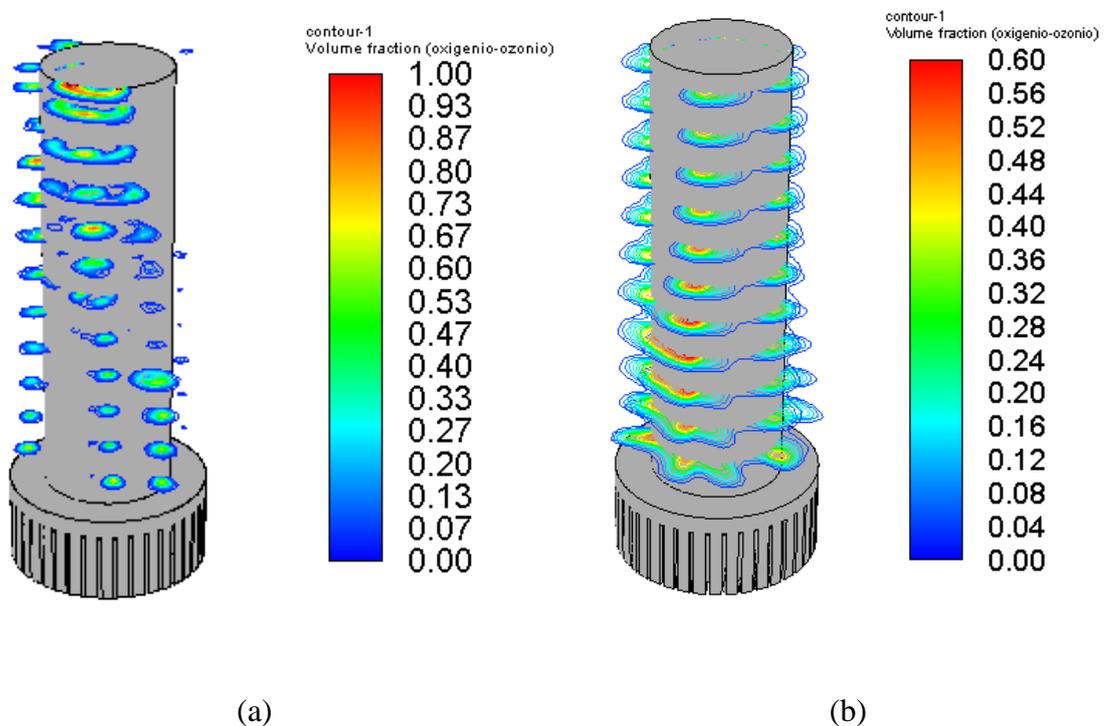


Fonte: Do autor (2021)

Analisando a Figura 2.12 pode-se constatar comportamento similares para ambos modelos multifásicos utilizados, com exceção do comportamento apresentado para o ponto  $x_2 = 76,6$  mm. Sendo que para ambos os modelos, pode-se identificar que os maiores diâmetro das bolhas estão próximos da alimentação e conseqüentemente do agitador mecânico. Outro fato identificado é que na região intermediária da célula tem-se os menores diâmetro médios e ao final do deslocamento ascensional das bolhas, pode-se observar um aumento do diâmetro das bolhas.

Porém, pode-se verificar algumas diferenças, sendo a primeira delas a magnitude da dimensão do diâmetro médio, conforme já foi citado. Outro contraste identificado é que com o modelo VOF foi obtido maiores oscilações do diâmetro médio com relação à altura da célula, em contramão do comportamento obtido do *Mixture*, que apresentou uma menor variação e dependência do diâmetro das bolhas formadas com relação ao descolamento ascensional. Sendo este fenômeno melhor visualizado através da Figura 2.13.

Figura 2.13 – Contorno de fração volumétrica para as bolhas utilizando o modelo VOF (a) e o modelo *Mixture* (b).



Além disso, outro fato que pode ser constatado através da Figuras 2.13 é a maior concentração de bolhas principalmente na região do *baffle*. E outro ponto a salientar é fração volumétrica dos contornos para ambos modelos, sendo que para o modelo VOF tem-se bolhas com uma maior fração volumétrica diferentemente do que é observado com o modelo *Mixture*, onde tem-se uma menor fração volumétrica.

#### 3.4.4 Fração volumétrica de gás

Outro parâmetro avaliado para a célula de flotação foi a fração volumétrica de gás no interior do flotador. A Tabela 2.7 contém os valores obtidos de fração volumétrica de gás utilizando os modelos multifásicos avaliados e a correlação matemática.

Tabela 2.7 – Valores da fração volumétrica de gás calculados através da correlação matemática e dos modelos multifásicos VOF e *Mixture*.

	Correlação	Modelo VOF	Modelo <i>Mixture</i>
$1 - \beta$ (-)	0,007526	0,008028	0,009139
ER-correlação (%)		7%	21%

Fonte: Do autor (2021)

Observando a Tabela 2.7 pode-se constatar que a correlação matemática e os modelos VOF e *Mixture* apresentaram valores similares, com erros relativos de 7% e 21% em comparação à correlação (ER-correlação), respectivamente. Com isso, pode-se concluir que ambos modelos multifásicos e a correlação apresentaram resultados satisfatórios para predição de frações volumétricas em células de flotação. Tendo em vista à proximidade dos valores obtidos.

#### 3.4.5 Velocidade terminal

A velocidade terminal é um parâmetro essencial para avaliar a eficiência do processo de ozonificação em células de flotação, tendo em vista, que este parâmetro está intimamente ligado ao tempo de contato entre as fases. Consequentemente, impacta diretamente na eficiência do processo. Experimentalmente, a obtenção de estimativas da velocidade terminal são complexas e envolvem um alto custo. Com isso, como já foi citado, os modelos multifásicos VOF e *Mixture* foram utilizados para predizer esse parâmetro, além da correlação matemática (Equação 2.34). Esses valores estão representados na Tabela 2.8. Salienta-se que, computacionalmente, a velocidade terminal foi calculada através de dezenas de linhas de correntes que acompanhavam a trajetória da bolha, conforme já citado na seção 3.3.1.2.

Tabela 2.8 – Valores da velocidade terminal calculados através da correlação matemática e dos modelos multifásicos VOF e *Mixture*.

	<b>Correlação</b>	<b>Modelo VOF</b>	<b>Modelo <i>Mixture</i></b>
<b>U<sub>T</sub> (m/s)</b>	0,565618	0,440992	0,437413
<b>ER-correlação (%)</b>		22%	23%

Fonte: Do autor (2021)

Analisando a Tabela 2.8 pode-se observar que os valores obtidos através das simulações computacionais utilizando os modelos VOF e *Mixture* apresentaram altíssima similaridade entre si, sendo a diferença entre esses valores igual a aproximadamente 1%. No entanto, avaliando os modelos multifásicos em comparação à correlação matemática, através do erro relativo com relação a correlação (ER-correlação), pode-se constatar que há uma diferença considerável.

Sendo que esse desvio pode ser justificado principalmente devido aos parâmetros utilizados para o cálculo da velocidade terminal utilizando a Equação 2.34, pois um deles foi previamente calculado utilizando outra correlação matemática (Equação 2.30), que é o diâmetro médio das bolhas e conforme já foi discutido, essa correlação matemática não apresentou uma boa performance para predição do comportamento experimental. Assim sendo, a utilização de um valor incoerente do ponto de vista experimental, como foi o caso do diâmetro médio, pode ter comprometido a capacidade preditiva da correlação matemática para o cálculo da velocidade terminal (Equação 2.34), justificando o desvio apresentado dos valores obtidos através da simulação em comparação ao resultado da correlação matemática.

### 3.4.6 Coeficiente de arrasto

O coeficiente de arrasto quantifica a força resistiva das bolhas ao escoamento ascendente. Com isso, este parâmetro está intrinsecamente ligado à velocidade terminal, pois a mesma é alcançada quando a força de empuxo é igual ao somatório da força gravitacional e a força de arrasto. Sendo assim, os coeficientes de arrasto obtidos através dos modelos multifásicos utilizados e a correlação matemática estão expressos na Tabela 2.9. Vale salientar que os coeficientes de arrasto foram calculados utilizando o modelo Tomiyama, assim sendo, foi utilizado a Equação 2.25.

Tabela 2.9 – Valores do coeficiente de arrasto calculados através da correlação matemática e dos modelos multifásicos VOF e *Mixture*.

	<b>Correlação</b>	<b>Modelo VOF</b>	<b>Modelo <i>Mixture</i></b>
$C_D$	1,566057	0,576538	1,308400
<b>ER-correlação (%)</b>		63%	16%

Fonte: Do autor (2021)

Analisando a Tabela 2.9 observa-se que o modelo *Mixture* apresentou uma boa similaridade em comparação a correlação matemática, analisando o erro relativo com base na correlação (ER-correlação). Em contrapartida, com o modelo VOF foi obtido um desvio considerável. No entanto, um fato que pode justificar essa diferença é que o coeficiente de arrasto é uma grandeza indireta, assim sendo, a mesma é calculada com base em grandezas fundamentais, como, diâmetro médio e velocidade terminal das bolhas, conseqüentemente os desvios e erros obtidos através das correlações para essas grandezas são carregados e impactam diretamente o calculado do coeficiente de arrasto.

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

### 3.5 Conclusões

A qualidade da malha manufaturada para as simulações computacional da célula de flotação para um sistema multifásico, foram avaliadas utilizados os parâmetros de *Aspect Ratio* e de *Skewness*. Com isso, pode-se concluir a malha manufaturada possui uma boa qualidade, devido à proximidade do valor médio da unidade e da nulidade para o *Aspect Ratio* e o *Skewness*, respectivamente. Desse modo, tem-se uma malha com alta regularidade, que tem como consequência o aumento da acurácia dos resultados.

Avaliando os resultados experimentais obtidos para célula de flotação, que foram o deslocamento do nível de líquido e diâmetro médio das bolhas, tem-se no caso do deslocamento do nível, para ambos modelos multifásicos e para correlação matemática foram obtidos erros relativos consideráveis. No entanto, esse fato pode ser justificado devido à dificuldade de medição do deslocamento de nível, que é afetada devido a agitação da célula, alimentação de gás e efeitos de refração, sendo que esses fatores juntamente com a incerteza sistemática do

sistema de medição do deslocamento de nível justificam os erros relativos obtidos para os modelos multifásicos e para correlação matemática em comparação ao valor experimental.

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

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

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

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

### 3.6 Referências Bibliográficas

ANSYS. **Fluent User's Guide and Theory Guide**. Canonsburg: [s.n.], 2018. Disponível em: <https://ansyshelp.ansys.com>. Acesso em: 30 fev. 2021.

ARAGÃO, M. M. C. A.; NETO, S. R. F.; LEITE, B. E. **Comportamento fluidodinâmico da interface água-ar: Modelagem e simulação**. O Empoderamento Científico e seus Aspectos Inovadores. Editora Poisson, 2020. Disponível em: [https://www.poisson.com.br/livros/individuais/Empoderamento\\_Cientifico/Empoderamento\\_Cientifico.pdf#page=67](https://www.poisson.com.br/livros/individuais/Empoderamento_Cientifico/Empoderamento_Cientifico.pdf#page=67). Acesso em: 30 fev. 2021.

BASAVARAJAPPA, M., MISKOVIC, S. **Investigation of gas dispersion characteristics in stirred tank and flotation cell using a corrected CFD-PBM quadrature-based moment method approach**. Minerals Engineering, v. 95, p. 161–184, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2016.06.026>. Acesso em: 01 ago. 2021.

BELTRÁN F. J. **Ozone reaction kinetics for water and wastewater systems**, 1. ed. CRC Press, London, 2003. ISBN-13: 978-1566706292. Acesso em: 30 fev. 2021.

BURDILES, C. O. M. **Caracterización de la Hidrodinámica del Enjambre de Burbujas en Ductos Confinados para Aplicaciones en Flotación de Minerales**. Trabalho de conclusão de curso (Graduando em Engenharia) - Universidad Tecnica Federico Santa Maria, Valparaíso, 2017. Disponível em: <https://repositorio.usm.cl/bitstream/handle/11673/23703/3560900258295UTFSM.pdf?sequence=1&isAllowed=y>. Acesso em: 30 fev. 2021.

DUARTE, C. R. **Estudo experimental e de simulação da fluidodinâmica e recobrimento em leito de jorro**. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2006. Disponível em:

<https://repositorio.ufu.br/bitstream/123456789/15049/1/claudio.pdf>. Acesso em: 23 jul. 2021.

KERDOUSS, F., BANNARI, A., PROULX, P. **CFD modeling of gas dispersion and bubble size in a double turbine stirred tank**. Chemical Engineering Science, v. 61, n.10, p. 3313–3322, 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2005.11.061>. Acesso em: 30 fev. 2021.

LARA-RAMOS, J. A., CONSTAIN-ESCOBAR, A. M., ROJAS-ORTIZ, K. V., DIAZ-ANGULO, J., & MACHUCA-MARTÍNEZ, F. (2021). **A novel high rotation bubble reactor for the treatment of a model pollutant in ozone/goethite/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and UV/goethite coupled processes**. Environmental science and pollution research international, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11356-020-12299-2>. Acesso em: 22 jul. 2021.

MURTHY, B. N., DESHMUKH, N. A., PATWARDHAN, A. W., JOSHI, J. B. **Hollow self-inducing impellers: Flow visualization and CFD simulation**. Chemical Engineering Science, v. 62, n. 14, p. 3839–3848, 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.03.043>. Acesso em: 30 fev. 2021.

NASCIMENTO, S. M. **Estudo da dinâmica de partículas em tambor rotatório com suspensores: análise experimental e numérica utilizando abordagens Euleriana e Lagrangeana**. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2014. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/bitstream/123456789/21462/3/EstudoDinamicaParticulas.pdf>. Acesso em: 23 jul. 2021.

PRAKASH, R.; MAJUMDER, S.K.; SINGH, A. **Flotation technique: Its mechanisms and design parameters**. Chemical Engineering and Processing - Process Intensification, v. 127, p. 249-270, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2018.03.029>. Acesso em: 10 jul. 2021.

VIEIRA, L. G. M. **Otimização dos Processos de Separação em Hidrociclones Filtrantes**. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2006. Disponível em:

<https://repositorio.ufu.br/bitstream/123456789/15053/1/LGMVieira1TESPRT.pdf>.

Acesso em: 27 fev. 2021.

## 4 CAPÍTULO 3

O terceiro capítulo deste trabalho contempla a simulação de uma célula de flotação com agitação mecânica, para um sistema multifásico, utilizando água, uma mistura de oxigênio e ozônio e um material granular. Para que assim seja possível realizar a modelagem completa para este equipamento, incluindo todas as fases que estão presentes na célula.

### 4.1 Introdução

A célula de flotação apresenta múltiplas fases, sendo geralmente constituída da fase líquida, da fase gasosa, que no caso dos flotadores aplicados à mineração tem a função de provocar a separação seletiva e no caso da ozonificação tem a função de oxidar a fase granular, que é a terceira fase presente na célula, que pode ser o minério a ser enriquecido ou o material a ser oxidado. Deste modo, tem-se um sistema multifásico com uma fase granular nos flotadores, conseqüentemente os modelos multifásicos disponíveis no *software* FLUENT® que contemplam esse caso, são o modelo *Mixture*, o modelo Euleriano e o modelo Lagrangeano.

O modelo *Mixture* é baseado na abordagem Euleriana, sendo utilizado para modelar fluxos multifásicos. Este é um modelo multifásico simplificado, sendo sua principal vantagem, a capacidade de modelar tanto a fase fluida como a fase particulada, resolvendo as equações de momento, continuidade e energia para a mistura. Deste modo, o modelo *Mixture* pode ser um bom substituto para o modelo Euleriano, pois para casos onde há uma ampla distribuição da fase particulada ou quando as leis de interface são desconhecidas ou sua confiabilidade pode ser questionada, um modelo multifásico completo pode não ser viável, devido à estabilidade e convergência da simulação (ANSYS, 2018).

Para esses casos se faz necessário o uso de um modelo mais simplificado, como é o caso do modelo *Mixture*. As aplicações típicas para esse modelo incluem sedimentação, separadores ciclônicos, fluxos carregados de partículas com baixa carga e fluxos borbulhantes onde a fração de volume de gás permanece baixa (ANSYS, 2018).

O modelo Euleriano, representa um dos modelos mais completos fornecido pelo *software* FLUENT®, ele se baseia na resolução de n-equações de momento e continuidade, dependendo do número de fases presentes no escoamento. Neste modelo o acoplamento se dá por intermédio da pressão e dos coeficientes de transferências entre as fases. Para escoamento onde as fases são partículas e fluidos, este recebe a nomenclatura de escoamento Euleriano multifásico granular, já para aqueles onde as fases envolvidas são apenas fluidos este se denomina de

escoamento Euleriano não-granular, exemplos típicos para a aplicação deste modelo seriam, escoamento em célula de bolha, risers e leitos fluidizados (VIEIRA, 2006).

No entanto, ressalta-se que devido às limitações de recursos computacionais, apenas o modelo *Mixture* foi avaliado neste presente trabalho. Sendo que devido ao fato de que as leis de interface são desconhecidas para esse escoamento, um modelo simplificado, como é o caso do modelo *Mixture*, é recomendado ao invés de um modelo completo, como é o caso do modelo Euleriano, devido à problemas de instabilidade e convergência na simulação computacional.

#### 4.1.1 Fase granular

Para simulações multifásicas com fases granulares, alguns parâmetros e modelos devem ser inseridos, a fim de descrever o comportamento do particulado. Assim sendo, o primeiro parâmetro a ser inserido utilizando o *software* FLUENT<sup>®</sup> é o diâmetro médio das partículas, sendo que caso deseje-se utilizar a distribuição granulometria do material, deve-se utilizar a *User-defined function* (UDF), para inserir de forma manual essa distribuição utilizando um algoritmo desenvolvido nas linguagens C ou C++ (ANSYS, 2018).

Outra propriedade importante para descrever a fase granular é a viscosidade granular, sendo que essa propriedade física especifica a parte cinética das partículas. Existem dois modelos disponíveis no *software* FLUENT<sup>®</sup> para descrever essa característica do escoamento, sendo o modelo Syamlal-O'brien e o modelo Gidaspow, que estão representados nas Equações 3.1 e 3.2 (ANSYS, 2018).

$$\mu_{s,kin} = \frac{d_s \rho_s \sqrt{\Theta_s \pi}}{6(3 - e_{ss})} \left[ 1 + \frac{2}{5} (1 + e_{ss})(3e_{ss} - 1) \alpha_s g_{0,ss} \right] \quad (3.1)$$

$$\mu_{s,kin} = \frac{10 \rho_s d_s \sqrt{\Theta_s \pi}}{96 \alpha_s (1 + e_{ss}) g_{0,ss}} \left[ 1 + \frac{4}{5} g_{0,ss} \alpha_s (1 + e_{ss}) \right]^2 \quad (3.2)$$

Onde,  $d_s$  é o diâmetro médio da partícula,  $\rho_s$  é a densidade do material granular,  $\Theta_s$  é a temperatura granular,  $e_{ss}$  é o coeficiente de restituição,  $\alpha_s$  é a fração volumétrica da fase sólida e  $g_{0,ss}$  é a função de distribuição radial.

Outra característica importante para descrever a fase granular é a temperatura granular, que especifica a temperatura para fase sólida, que é proporcional à energia cinética do movimento aleatório das partículas. Para os modelos multifásicos com a abordagem Euleriana, a única opção matemática para o cálculo dessa propriedade é o método algébrico (ANSYS, 2018).

A pressão de sólidos representa o gradiente de pressão, que será utilizado na equação do momento para a fase granular. Essa propriedade é utilizada para fluxos granulares no regime compressível, isto é, quando a fração volumétrica de sólidos é menor que seu valor máximo permitido. Os modelos disponíveis para o cálculo desta propriedade são o modelo Lun-et-al, o modelo Syamlal-O'brien e o modelo Ma-Ahmadi. O modelo Lun-et-al é representado pela Equação 3.3, que engloba o termo cinético (1° termo) e o termo devido à colisão entre as partículas (2° termo). Este modelo deriva da teoria cinética de fluxo granular (ANSYS, 2018; FACURI, 2014).

$$p_s = \alpha_s \rho_s \Theta_s + 2\rho_s(1 + e_{ss})\alpha_s^2 g_{0,ss} \Theta_s \quad (3.3)$$

Onde,  $\alpha_s$  é a fração volumétrica de sólido,  $\rho_s$  é a densidade do sólido,  $\Theta_s$  é a temperatura granular,  $g_{0,ss}$  é a função de distribuição radial e  $e_{ss}$  é o coeficiente de restituição, que por *default* o *software* FLUENT® utiliza 0,9; porém esse valor pode ser ajustado para adequar-se a cada tipo de partícula. O modelo Syamlal-Obrien apresenta a mesma abordagem, com exceção que o termo cinético é desprezado para o cálculo da pressão de sólidos, conforme pode ser observado na Equação 3.4 (ANSYS, 2018)

$$p_s = 2\rho_s(1 + e_{ss})\alpha_s^2 g_{0,ss} \Theta_s \quad (3.4)$$

O modelo Ma-Ahmadi também apresenta uma abordagem semelhante ao modelo Lun-et-al, no entanto, leva em conta a viscosidade friccional ( $\mu_{fric}$ ), conforme pode ser observado na Equação 3.5. Vale ressaltar que o modelo Ma-Ahmadi para a pressão de sólidos deve ser utilizado simultaneamente com o modelo Ma-Ahmadi para a função de distribuição radial (ANSYS, 2018).

$$p_s = \alpha_s \rho_s \Theta_s \left\{ (1 + 4\alpha_s g_{0,ss}) + \frac{1}{2} [(1 + e_{ss})(1 - e_{ss} + \mu_{fric})] \right\} \quad (3.5)$$

Além disso, outro parâmetro que é utilizado para modelar a fase granular é a função de distribuição radial, que representa um fator de correção que modifica a probabilidade de colisões entre grãos quando a fase granular sólida torna-se densa. Os modelos disponíveis para descrever essa propriedade são: Lun-et-al, o Syamlal-O'brien, o Ma-Ahmadi, o Arastapour, sendo que as Equações 3.6, 3.7, 3.8 e 3.9 representam as formulações da função de distribuição para esses modelos, respectivamente.

$$g_{0,ii} = \left[ 1 - \left( \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1} + \frac{1}{2} d_i \sum_{k=1}^N \frac{\alpha_k}{d_k} \quad (3.6)$$

$$g_{0,ki} = \frac{1}{(1 - \alpha_s)} + 3 \left( \sum_{k=1}^n \frac{\alpha_k}{d_k} \right) \frac{d_k d_i}{(1 - \alpha_s)^2 (d_k + d_i)} \quad (3.7)$$

$$g_{0,ii} = \frac{1 + 2,5\alpha_s + 4,59\alpha_s^2 + 4,52\alpha_s^3}{\left[ 1 - \left( \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right)^3 \right]^{0,678}} + \frac{1}{2} d_i \sum_{k=1}^N \frac{\alpha_k}{d_k} \quad (3.8)$$

$$g_{0,ii} = \frac{3}{2} d_i \sum_{k=1}^N \frac{\alpha_k}{d_k} + \frac{1}{\left( 1 - \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right)} \quad (3.9)$$

Onde  $\alpha_s$  é a fração volumétrica de sólido,  $\alpha_{s,max}$  é a fração volumétrica máxima de sólido (limite de empacotamento),  $d$  é o diâmetro do sólido e  $i, k$  são subíndices que representam a  $i$ -enésima e  $k$ -enésima fase granular.

Seguindo Facuri, (2014); Costa *et al.*, (2021) e Santos (2011), o modelo Syamlal-Obrien foi utilizado para descrever a viscosidade granular. Para a temperatura granular foi utilizado o método algébrico e para as demais propriedades (viscosidade granular *bulk*, pressão de sólidos e distribuição radial) foi utilizado o modelo Lun-et-al.

#### 4.1.2 Interação entre as fases

##### 4.1.2.1 Modelos de arrasto sólido-fluido

O arrasto entre a fase fluida e a fase sólida é descrito através do coeficiente de troca sólido-fluido, que é representado de forma geral conforme representado na Equação 3.10. Sendo que para o cálculo deste parâmetro é necessário previamente calcular o tempo de relaxação do particulado, utilizando a Equação 3.11 (ANSYS, 2018).

$$K_{sl} = \frac{\alpha_s \rho_s f}{\tau_s} \quad (3.10)$$

$$\tau_s = \frac{\rho_s d_s^2}{18\mu_l} \quad (3.11)$$

Onde  $\alpha_s$  é a fração volumétrica da fase sólida,  $\rho_s$  é a densidade do sólido,  $\mu_l$  é a densidade do líquido,  $\tau_s$  é o tempo de relaxação do particulado e  $f$  é fator de atrito que é calculado utilizando os modelos para cálculo do coeficiente de arrasto ( $C_D$ ). Os modelos de arrasto para a interação sólido-fluido disponíveis no *software* FLUENT® são o modelo Syamlal-Obrien, modelo Wen-Yu, o modelo Gidaspow e o modelo Gibilaro (ANSYS, 2018).

O modelo Syamlal-Obrien é o modelo de arrasto sólido-fluido *default* do *software* FLUENT®, sendo recomendado quando utilizado em conjunto com o modelo Syamlal-Obrien

para a viscosidade granular. O fator de atrito e coeficiente de arrasto utilizando este modelo são calculados utilizando as Equações 3.12 e 3.13, porém previamente deve-se calcular o número de Reynolds do particulado, utilizando a Equação 3.14.

$$f = \frac{C_D Re_s \alpha_l}{24 v_{r,s}^2} \quad (3.12)$$

$$C_D = \left( 0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{Re_s / v_{r,s}}} \right)^2 \quad (3.13)$$

$$Re_s = \frac{\rho_l d_s |\vec{v}_s - \vec{v}_l|}{\mu_l} \quad (3.14)$$

Onde  $v_{r,s}$  é a velocidade relativa do sólido,  $\alpha_l$  é a fração volumétrica da fase líquida,  $\rho_l$  é a densidade da fase líquida,  $d_s$  é o diâmetro médio do particulado,  $\mu_l$  é a viscosidade do líquido e  $\vec{v}_s$  e  $\vec{v}_l$  são as velocidades do sólido e do líquido, respectivamente.

O modelo Wen-Yu é aplicável para sistemas diluídos, no qual a fração volumétrica da fase secundária é bem inferior ao da fase primária. Para o cálculo do coeficiente de arrasto utilizando este modelo aplica-se a Equação 3.15. Sendo necessário previamente calcular o número de Reynolds para a fase sólida, que é calculado utilizando a Equação 3.14 (ANSYS, 2018).

$$C_D = \frac{24}{\alpha_l Re_s} [1 + 0,15(\alpha_l Re_s)^{0,687}] \quad (3.15)$$

Onde  $\alpha_l$  é a fração volumétrica da fase líquida,  $\rho_l$  é a densidade da fase líquida,  $d_s$  é o diâmetro médio do particulado,  $\mu_l$  é a viscosidade do líquido e  $\vec{v}_s$  e  $\vec{v}_l$  são as velocidades do sólido e do líquido, respectivamente. Um detalhe importante é que utilizando o modelo Wen-Yu o coeficiente de troca sólido-fluido é calculado de outra maneira, conforme representado na Equação 3.16 (ANSYS, 2018).

$$K_{sl} = \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_s \alpha_l \rho_l |\vec{v}_s - \vec{v}_l|}{d_s} \alpha_l^{-2,65} \quad (3.16)$$

Outro modelo de arrasto disponível para prever a interação sólido-fluido é modelo Gidaspow. Sendo a principal aplicação deste modelo, leitos fluidizados densos. Salienta-se que o modelo Gidaspow é a junção do modelo Wen-Yu com a equação de Ergun. Para sistemas diluídos ( $\alpha_l > 0,8$ ), o coeficiente de troca sólido-fluido e o coeficiente de arrasto são calculados da mesma forma que para modelo Wen-yu (Equações 3.14 e 3.15). Porém, quando se tem sistemas concentrados ( $\alpha_l < 0,8$ ), o coeficiente de troca sólido-líquido é calculado utilizando a Equação 3.17 (ANSYS, 2018).

$$K_{sl} = 150 \frac{\alpha_s(1 - \alpha_l)\mu_l}{\alpha_l d_s^2} + 1,75 \frac{\rho_l \alpha_s |\vec{v}_s - \vec{v}_l|}{d_s} \quad (3.17)$$

O modelo Gibilaro possui grande aplicabilidade principalmente em leitos fluidizados circulantes. Sendo o coeficiente de troca sólido-líquido calculado para esse modelo utilizando a Equação 3.18. No entanto, previamente deve-se calcular o número de Reynolds modificado utilizando a Equação 3.19 (ANSYS, 2018).

$$K_{sl} = \left( \frac{18}{Re} + 0,33 \right) \frac{\rho_f |\vec{v}_s - \vec{v}_l|}{d_p} \alpha_s \alpha_l^{-1,8} \quad (3.18)$$

$$Re_s = \frac{\alpha_l \rho_l d_s |\vec{v}_s - \vec{v}_l|}{\mu_l} \quad (3.19)$$

Onde  $\rho_f$  é a densidade do fluido,  $\alpha_l$  é a fração volumétrica da fase líquida,  $\alpha_s$  é a fração volumétrica do sólido,  $\rho_l$  é a densidade da fase líquida,  $d_s$  é o diâmetro médio do particulado,  $\mu_l$  é a viscosidade do líquido e  $\vec{v}_s$  e  $\vec{v}_l$  são as velocidades do sólido e do líquido.

Desse modo, como tem-se uma célula de flotação operando em um sistema diluído, o modelo de arrasto recomendado para descrever este caso é o modelo Wen-Yu. Assim sendo, este modelo de arrasto foi habilitado para prever a interação em a fase fluida e a fase sólida na forma de força resistiva ao deslocamento. Porém, ressalta-se que como foi utilizado o modelo Syamlal-obrien para descrever a viscosidade granular, o mesmo também seria recomendando para predição do arrasto do particulado, no entanto, devido a melhor adequação do modelo Wen-Yu, o mesmo foi utilizado.

#### 4.1.2.2 Tensão superficial e área interfacial

A tensão superficial é um fenômeno físico que ocorre nas interfaces de sistemas multifásicos, sendo explicado devido às forças coesivas das moléculas presentes na interface. Desse modo, essa é uma grandeza física, que é mensurada de forma experimental. Sendo esse valor calculado para cada par de fases (ANSYS, 2018).

Quando a equação de transporte para a concentração da área interfacial não é resolvida, a área interfacial do diâmetro da fase secundária especificado pode ser estimada através de um modelo algébrico. Sendo que os modelos algebricos disponiveis no *software* FLUENT® são o modelo ia-symmetric, o modelo ia-particle e o modelo ia-gradient (ANSYS, 2018).

Sendo que o modelo ia-symmetric considera as frações volumetricas das fases primárias e secundárias para prever a área interfacial. O modelo ia-particle leva em conta apenas a fração volumétrica da fase secundária para estimar a área interfacial e o modelo ia-gradient leva

em conta o gradiente da fração volumétrica na interface para estimar a área interfacial (ANSYS, 2018).

Deste modo, a tensão superficial disponível na literatura foi inserida na simulação e foi utilizado o modelo algébrico *ia-symmetric* para estimar a área interfacial. Logo, ambas frações volumétricas foram utilizadas para o cálculo da área interfacial e esse modelo foi selecionado pois o caso simulado apresenta simetria axial em seu escoamento.

#### **4.1.3 Trabalhos correlatos**

Devido à posição de destaque das células de flotação na indústria da mineração, sendo atualmente um dos processos mais utilizados para separação e beneficiamento de minérios no mundo (MADRID, 2012), diversos trabalhos já foram publicados com o intuito de elucidar a modelagem da interação entre a fase gasosa e fase particulada. Desse modo, alguns trabalhos similares ao presente trabalho desenvolvido estão descritos a seguir.

Karimi *et al.*, (2014) realizou um estudo para um tanque de flotação, onde o enfoque estava na parte cinética, em seu trabalho foi utilizado uma modelagem euleriana-euleriana em conjunto com o modelo de turbulência *Standard k- $\epsilon$* . Foi feita a comparação dos valores da constante cinética em função do diâmetro de partícula, obtida experimentalmente em Pyke *et al.*, (2003), obtido na simulação e obtidos por meio de equações, através das técnicas de CFD foi obtido resultados extremamente satisfatórios.

O trabalho de Liu & Schwarz (2009) teve seu enfoque na eficiência de colisão entre partículas e bolhas em um fluxo turbulento em um tanque agitado, com isso, foi mensurado a eficiência de colisão e também o coeficiente de arrasto para esse sistema em função dos diâmetros das partículas.

Schwarz *et al.*, (2016), realizou um estudo para células de flotação, em um sistema multifásico de células em larga escala, complementado por simulações em micro-escala de CFD de colisões de bolha e partículas, onde foi analisado também perfis de velocidade e de fase.

#### **4.1.4 Objetivos**

Sendo assim, este trabalho teve como objetivo geral realizar a modelagem via CFD da interação entre as fases (gás-líquido-sólido) e com isso principalmente prever o comportamento da fase sólida e sua interação com a fase gasosa, pois essa interação é

responsável pela separação de minérios e também pela degradação de resíduos através da ozonificação.

Os objetivos específicos deste capítulo são prever a trajetória do material particulado através de um modelo multifásico simplificado que engloba a simulação da fase granular, sendo este modelo o *Mixture*, que está disponível no *software* FLUENT®. Com isso, avaliar a capacidade preditiva deste modelo através de dados experimentais qualitativos.

## 4.2 Materiais e Métodos

### 4.2.1 Metodologia Experimental

O protótipo e as condições experimentais para a fase fluida, adotadas neste capítulo foram as mesmas do Capítulo 2. Sendo a célula preenchida com água e o sistema possuindo uma vazão de alimentação de 1 L/min de uma mistura de oxigênio e ozônio com a fração mássica de 0,9987 e 0,0013, respectivamente. Vale ressaltar a velocidade angular do agitador mecânico também foi a mesma adotada no Capítulo 2, que é de 1500 rpm no sentido anti-horário. A única diferença experimental, foi a adição de 10 partículas inertes com 4 mm de diâmetro no interior da célula. Essas partículas estão representadas na Figura 3.1. A densidade das partículas utilizadas é de 2984 kg/m<sup>3</sup>.

Figura 3.1 – Partículas inertes adicionadas à célula de flotação.



Fonte: < <https://www.pedramistica.com.br/conta-esferica-agata-negra-4mm-caagt148>>

Esse material particulado foi o escolhido para avaliar o modelo numérico, pois o mesmo é inerte nas condições operacionais da célula de flotação durante a ozonificação e também devido a facilidade de visualização deste material, pois assim é possível acompanhar a trajetória destas partículas de forma experimental e posteriormente comparar com os resultados obtidos na simulação computacional.

## 4.2.2 Metodologia Numérica

A geometria e malha utilizadas neste capítulo foram construídas utilizando os *softwares* SpaceClaim® e GAMBIT®, respectivamente. Sendo a geometria a mesma utilizada no Capítulo 1 e representada na Figura 1.8 e a malha a mesma utilizada no Capítulo 2 é representada nas Figuras 2.4, 2.5 e 2.6.

### 4.2.2.1 Condições de Contorno

O modelo multifásico utilizado para predição do comportamento da fase granular, foi o modelo *Mixture*. A Tabela 3.1 contém as condições iniciais e de contorno para a simulação da célula de flotação trifásica. As simulações foram feitas utilizando a rotação de 1500 rpm e para todas as paredes foi utilizado a condição de não deslizamento. O método de acoplamento pressão-velocidade utilizado foi o SIMPLE.

Tabela 3.1 – Condições iniciais e de contorno.

• Simulação 3D e em dupla precisão	
• Regime transiente e isotérmico	
• Saída: Pressão atmosférica da cidade de Cali (101000 Pa)	
• Vazão da alimentação: 1 L/min (mistura de oxigênio e ozônio)	
• Método de discretização da pressão: PRESTO!	
• Método de discretização do momentum: First Order Upwind	
• Modelo de turbulência: RNG k-ε	
• Método de partição da malha: Metis (COSTA <i>et al.</i> , 2020)	
• Fatores de relaxação (PETRI <i>et al.</i> , 2009)	Pressure = 0.3 Momentum = 0,1 Body Force = 1 Density = 1
• Criterio de Convergencia = $10^{-4}$	
• Time Step Size (s) = $1.10^{-6}$ a $4.10^{-5}$	

Fonte: Do autor (2021)

Foram simulados 30 segundos, para condizer com as condições experimentais e também para que fosse alcançado o regime estacionário para o particulado. Novamente a convergência deste problema foi favorecida em comparação ao caso simulado no Capítulo 1, pois tem-se neste capítulo um sistema contínuo para a fase gasosa, com a alimentação da mistura de oxigênio-ozônio na região abaixo do agitador mecânico e com a saída da mistura no topo da célula. Deste modo, a convergência da equação da continuidade foi favorecida. Outro ponto que contribuiu para melhorar a convergência deste caso foi o método de inicialização utilizado, sendo feito uma inicialização com base na face de entrada da mistura de oxigênio-ozônio.

A fase gasosa alimentada era constituída de oxigênio e ozônio, sendo neste capítulo novamente utilizada a média ponderada das propriedades físicas com relação à composição. Deste modo foram utilizados os valores já representados na Tabela 2.3. Esse artifício foi utilizado para minimização do custo computacional sem afetar a acurácia dos resultados obtidos, tendo em vista, que novamente as características de interesse do escoamento são físicas.

O arrasto entre as fases fluidas foi modelado utilizando o modelo Tomiyama, já o arrasto presente na interação fluido-sólido foi descrito utilizando o modelo Wen-Yu, pois esse é o modelo mais adequado para modelagem de materiais granulares em sistemas diluídos, conforme citado na seção 4.1.3.1.

Para ambas as simulações foi utilizado a tensão superficial entre as bolhas e a água de 0,073 N/m (ARAGRÃO, *et al.*, 2020). Para essas simulações computacionais a velocidade de deslizamento foi desprezada, tendo em vista, que a mesma é desprezível para casos onde o arrasto é dominante (ANSYS, 2018). E para utilização do modelo *Mixture* é necessária a inserção do diâmetro médio das bolhas da fase gasosa, desse modo, foi utilizado o valor experimental (2,67 mm). Para que assim, tenha-se uma maior acurácia dos resultados da simulação com os resultados experimentais.

A fase granular é descrita utilizando algumas propriedades, sendo elas, a viscosidade granular, a temperatura granular, a pressão de sólidos e a distribuição radial. Com isso, essas propriedades físicas podem ser descritas utilizando modelos matemáticos, que estão descritos na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 – Modelos utilizados para descrever as propriedades físicas do particulado.

	<b>Modelo</b>	<b>Referência</b>
Granular Viscosity (kg/m.s)	Syamlal-Obrien	O'Brien & Syamlal (1993)
Granular Temperature (m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )	algebraic	N/A
Solids Pressure (Pa)	Lun-et-al	Lun et al. (1984)
Radial Distribution	Lun-et-al	Lun et al. (1984)

*Fonte: Do autor (2021)*

Outro detalhe de suma importância para descrever escoamentos multifásicos são as propriedades de interação entre as fases. Vale ressaltar que geralmente a propriedade de interação predominante é o arrasto, no entanto, para uma boa modelagem da interação entre as fases algumas outras características devem ser computadas, sendo elas, a tensão superficial e a

área interfacial. Desse modelo, a Tabela 3.3 contém os modelos utilizados para descrever a interação entre as fases.

Tabela 3.3 – Modelos utilizados para descrever a interação entre as fases.

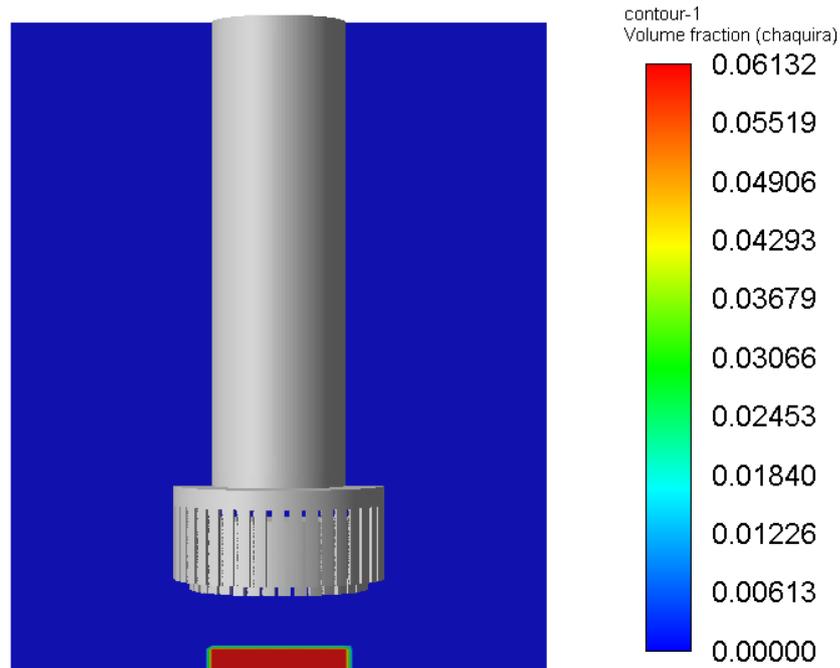
	Gás-água		Partícula-água		Partícula-gás	
	Modelo	Referência	Modelo	Referência	Modelo	Referência
Drag	Tomiyama	Takamasa & Tomiyama (1999)	Wen-Yu	Wen & Yu (1966)	N/A	N/A
Surface Tension	0.073 N/m	Aragão et al., (2020)	none	N/A	none	N/A
Interfacial Area	ia-symmetric	N/A	ia-symmetric	N/A	ia-symmetric	N/A

Fonte: Do autor (2021)

#### 4.2.2.2 Condições da fase granular

A fase granular não possui entradas ou saídas na célula de flotação, sendo que antes da inicialização do equipamento, a fase sólida foi inserida no interior do flotador. Desse modo, o mesmo foi feito de forma computacional. Para isso, previamente utilizando a ferramenta *patch*, foram adicionadas 10 partículas sólidas na célula de flotação, salienta-se que essas partículas foram adicionadas na região abaixo ao agitador mecânico, conforme pode ser observado na Figura 3.2.

Figura 3.2 – Perfil de fração volumétrica para a fase granular antes do início da simulação.



Fonte: Do autor (2021)

Para inserir o sólido exatamente na região abaixo do agitador mecânico foi necessário na etapa de definição das condições de fronteira criar esse volume, para que assim, fosse possível inserir uma fração volumétrica terminada nessa região, ressalta-se que essa etapa foi realizada utilizando o *software* GAMBIT®. Sendo que essa fração volumétrica da fase granular adicionada nesse volume, foi calculada com base no volume de 10 partículas com relação ao volume desta região. Salienta-se que também dentro do *software* FLUENT® poder-se-ia criar essa região, no entanto, devido a fins de praticidade, foi escolhido criar esse volume na etapa da definição das condições de fronteira.

### 4.3 Resultados e Discussões

O comportamento do material granular no interior da célula de flotação foi filmado, para uma comparação qualitativa com os perfis de fração volumétrica obtido através das simulações computacionais. A Figura 3.3 contém 3 *frames* do vídeo desse experimento, ressalta-se que esses *frames* foram obtidos utilizando o *software* Free Video to JPG Converter. Além disso, a Figura 3.4 contém o perfil de fração volumétrica para a fase sólida na simulação.

Conforme pode ser constatado através das Figuras 3.3 e 3.4 a simulação computacional utilizando o modelo multifásico *Mixture* apresentou uma performance satisfatória na predição da posição dos sólidos na célula de flotação, sendo que tanto experimentalmente como computacionalmente, o material particulado ficou retido em movimento circular na região abaixo do agitador mecânico.

No entanto, esse movimento circular apresentou algumas oscilações e também visualmente foi possível detectar uma maior frequência de oscilações para a esquerda, sendo esse comportamento também predito através da simulação computacional, tendo em vista, que o contorno de fração volumétrica para o sólido não foi simétrico, mas apresentada um leve deslocamento para à esquerda. Esse deslocamento para à esquerda também pode ser melhor visualizado através das velocidades axiais e tangencias para a mistura na base da célula, conforme pode ser observado nas Figuras 3.5 e 3.6.

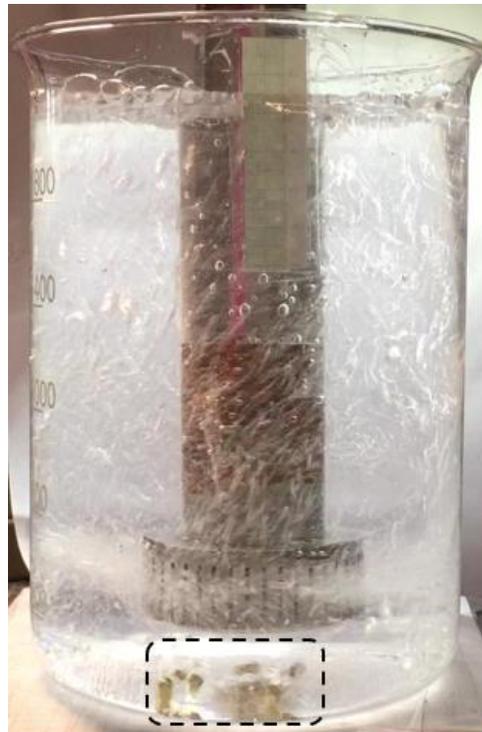
Figura 3.3 – *Frames* nos seguintes instantes de tempo do experimento com o flotador: (a) 10 s, (b) 20 s e (c) 30 s.



(a)



(b)



(c)

Figura 3.4 – Perfil de fração volumétrica para a fase granular no instante de 30 segundos.

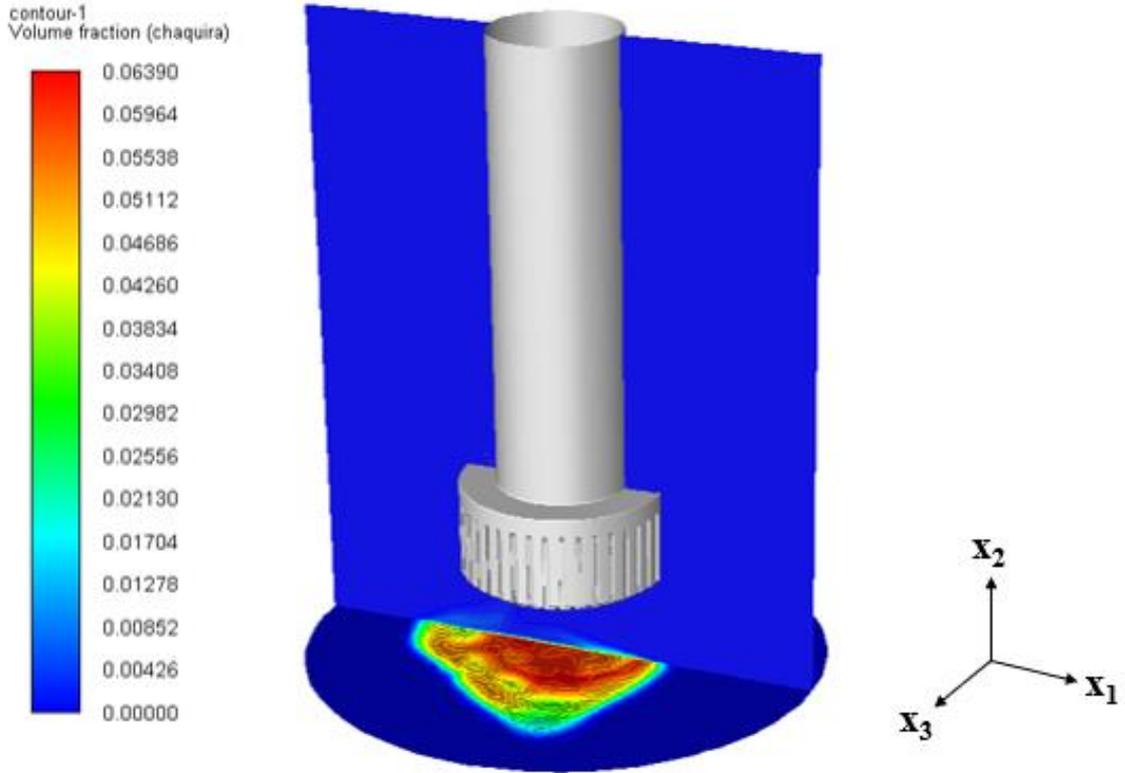


Figura 3.5 – Velocidade tangencial para a mistura na base da célula de flotação.

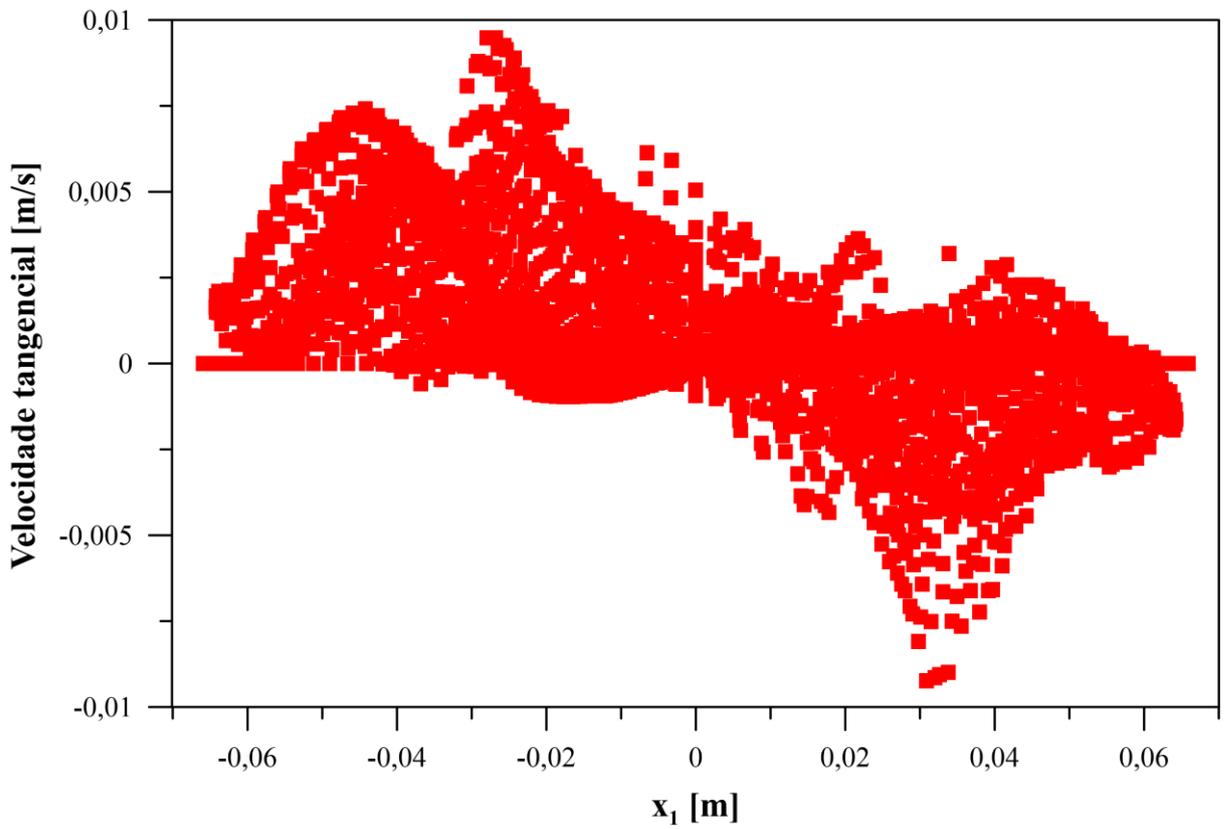
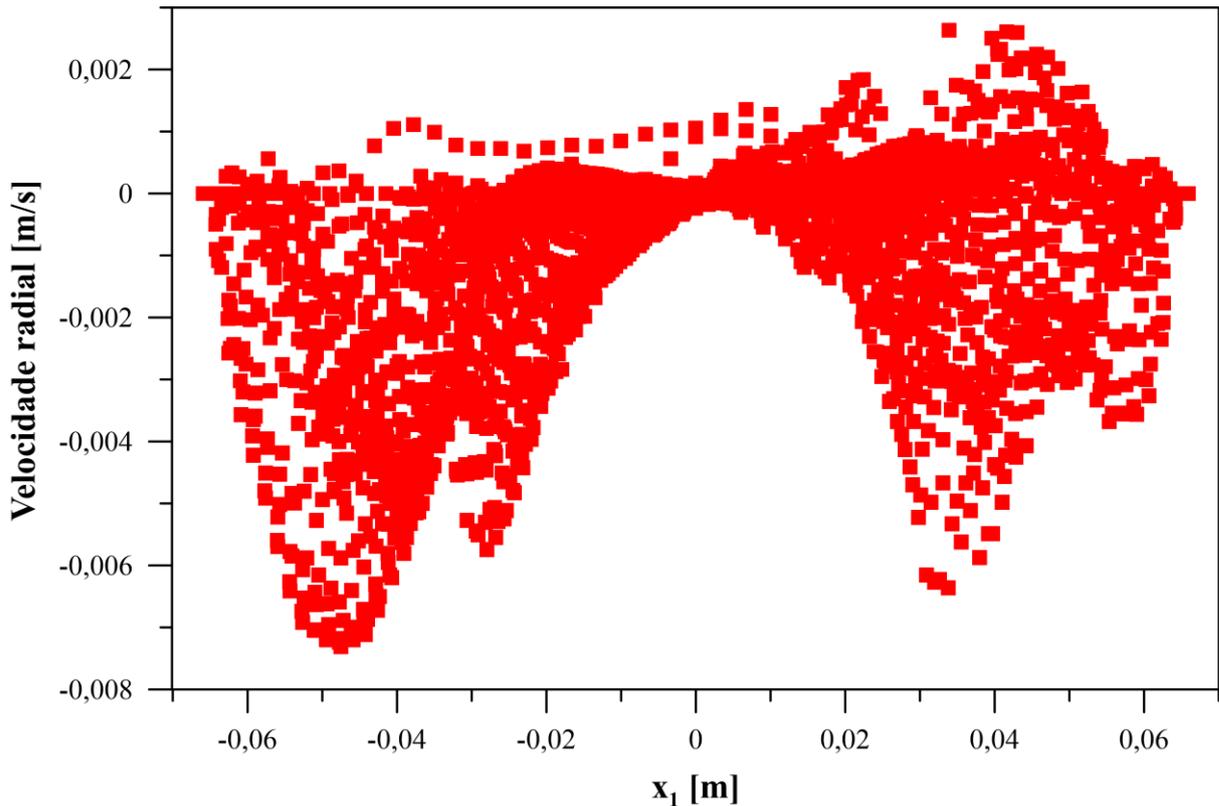


Figura 3.6 – Velocidade radial para a mistura na base da célula de flotação.



As Figuras 3.5 e 3.6 corroboram a constatação experimental e numérica de um deslocamento mais frequente do material granular à esquerda da célula, sendo que isso pode ser concluído, pois as velocidades tangenciais e radiais da mistura apresentam uma maior intensidade e frequência à esquerda. Porém ressalta-se que ambas as curvas apresentam um certo grau de simetria, indicando novamente o comportamento experimental que é do movimento rotacional das partículas abaixo do agitador mecânico.

#### 4.4 Conclusões

Avaliando o perfil de fração volumétrica para a fase granular e os gráficos de velocidades tangenciais e radiais em comparação com o comportamento experimental, pode-se concluir que o modelo *Mixture* performou de forma satisfatória para predição da posição dos sólidos no interior da célula de flotação, sendo que além de prever a deposição do material na região abaixo do agitador mecânico, também foi possível prever as oscilações do movimento rotacional do particulado e com isso, constatar de forma numérica a maior frequência de oscilações do material granular à esquerda da célula, conforme foi constatado visualmente de forma experimental.

Além disso, a ferramenta *patch* se mostrou eficiente para a inserção do material particulado no interior da célula. Pois com essa ferramenta foi possível inserir o particulado de forma a favorecer a convergência da simulação e minimizar o custo computacional.

#### 4.5 Referências Bibliográficas

ARAGÃO, M. M. C. A.; NETO, S. R. F.; LEITE, B. E. **Comportamento fluidodinâmico da interface água-ar: Modelagem e simulação**. O Empoderamento Científico e seus Aspectos Inovadores. Editora Poisson, 2020. Disponível em: [https://www.poisson.com.br/livros/individuais/Empoderamento\\_Cientifico/Empoderamento\\_Cientifico.pdf#page=67](https://www.poisson.com.br/livros/individuais/Empoderamento_Cientifico/Empoderamento_Cientifico.pdf#page=67). Acesso em: 30 fev. 2021.

ANSYS. **Fluent User's Guide and Theory Guide**. Canonsburg: [s.n.], 2018. Disponível em: <https://ansyshelp.ansys.com>. Acesso em: 30 fev. 2021.

COSTA, F. O., MATEUS, F. L. B., PETRI JÚNIOR, I. **Optimization of hydrocyclon for phosphatic rock separation using CFD**. The Journal of Engineering and Exact Sciences, v. 7, n. 3, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.18540/jcecv17iss3pp12779-01-11e>. Acesso em: 11 set. 2021.

FACURI, R. M. **Estudo do Escoamento Laminar Sólido-Líquido em Anular Excêntrico Empregando a Técnica de Dinâmica de Fluidos Computacional**. Dissertação (Mestrado em Engenharia) – Universidade Federal do Espírito Santo, São Mateus, 2014. Disponível em: [https://repositorio.ufes.br/bitstream/10/5342/1/tese\\_8463\\_Rafael%20Manache%20Facuri.pdf](https://repositorio.ufes.br/bitstream/10/5342/1/tese_8463_Rafael%20Manache%20Facuri.pdf). Acesso em: 01 ago. 2021.

KARIMI, M., AKDOGAN, G., BRADSHAW, S. M. **A computational fluid dynamics model for the flotation rate constant, Part I: Model development**. Minerals Engineering, v. 69, p. 214–222, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2014.03.028>. Acesso em: 25 jul. 2021.

LIU, T. Y., SCHWARZ, M. P. **CFD-based multiscale modelling of bubble–particle collision efficiency in a turbulent flotation cell**. Chemical Engineering Science, v. 64, n. 24, p. 5287–5301, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2009.09.014>. Acesso em: 26 jul. 2021.

- LUN, C. K. K., JEFFREY, D. J., CHEPURNIY N. (1984). **Kinetic Theories for Granular Flow: Inelastic Particles in Couette Flow and Slightly Inelastic Particles in a General Flow Field**. *J. Fluid Mech.* v. 140, n. 1, p. 223-256. doi:10.1017/S0022112084000586
- MADRID, R. A. G. **Evaluación por Modelación CFD del Proceso de Flotación en una Celda de Agitación Mecánica y del Efecto de la Granulometría en la Recuperación de Mineral**. Trabalho de conclusão de curso (Graduação em Engenharia) - Universidad de Chile, Santiago de Chile, 2012. Disponível em: [http://repositorio.uchile.cl/bitstream/handle/2250/110946/cf-garcia\\_rm.pdf?sequence=1&isAllowed=y](http://repositorio.uchile.cl/bitstream/handle/2250/110946/cf-garcia_rm.pdf?sequence=1&isAllowed=y). Acesso em: 27 dez. 2020.
- O'BRIEN, T. J., SYAMLAL, M. **Particle Cluster Effects in the Numerical Simulation of a Circulating Fluidized bed**. 4<sup>th</sup> International CFB Conference, Pennsylvania, USA, 1993. Acesso em: 20 ago. 2021.
- PYKE, B., FORNASIERO, D., & RALSTON, J. **Bubble particle heterocoagulation under turbulent conditions**. *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 265, n. 1, p. 141–151, 2003. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/s0021-9797\(03\)00345-x](https://doi.org/10.1016/s0021-9797(03)00345-x). Acesso em: 04 ago. 2021.
- SANTOS, K. G. **Aspectos fundamentais da pirólise de biomassa em leito de jorro: fluidodinâmica e cinética do processo**. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2011. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/15058>. Acesso em: 27 fev. 2021.
- SCHWARZ, M. P., KOH, P. T. L., VERRELLI, D. I., FENG, Y. **Sequential multi-scale modelling of mineral processing operations, with application to flotation cells**. *Minerals Engineering*, v. 90, p. 2–16, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2015.09.021>. Acesso em: 27 jul. 2021.
- TAKAMASA, T., TOMIYAMA, A. **Three-Dimensional Gas-Liquid Two-Phase Bubbly Flow in a C-Shaped Tube**. 9<sup>th</sup> International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-9). San Francisco, CA, 1999. Acesso em: 27 ago. 2021.
- VIEIRA, L. G. M. **Otimização dos Processos de Separação em Hidrociclones Filtrantes**. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2006. Disponível em:

<https://repositorio.ufu.br/bitstream/123456789/15053/1/LGMVieira1TESPRT.pdf>.

Acesso em: 27 fev. 2021.

WEN, C. Y., YU, Y. H. **Mechanics of Fluidization**. Chem. Eng. Prog. Symp. Series. V.62, n.1, p. 100-111, 1966. Acesso em: 27 ago. 2021.

## 5 CONCLUSÕES GERAIS

Através da análise dos modelos de turbulência utilizando um sistema monofásico, pode-se constatar que o modelo RNG k- $\epsilon$  foi aquele que melhor se assemelhou ao comportamento do modelo LES, que segundo Joshi *et al.*, (2011 a, b) e Murthy & Joshi (2008) é o modelo adequado para simulação da turbulência em tanques agitados. No entanto, salienta-se que os modelos a dois parâmetros incluindo o modelo RNG k- $\epsilon$  apresentaram uma melhor capacidade preditiva nas regiões centrais da célula de flotação, sendo que próximo às paredes houve uma diferença considerável entre os valores obtidos para as velocidades tangenciais, radiais e axiais. Logo, em geral os modelos a dois parâmetros não devem ser utilizados de forma quantitativa para predição do escoamento nas regiões próximas às paredes.

Quando se compara os resultados obtidos neste presente trabalho, com estudos semelhantes disponíveis na literatura, como os de Joshi *et al.*, 2011 (a, b), é observado que a magnitude das velocidades obtidas foi superior. No entanto, quando se avalia os gradientes de velocidade, que estão associados às oscilações e a turbulências do escoamento, a célula de flotação apresentada neste trabalho teve um melhor desempenho. Sendo essas divergências justificadas devido principalmente ao *design* do impelidor e do *baffle*. Outro ponto que pode ter interferido nesses resultados é a diferença na velocidade angular utilizada, sendo que em Joshi *et al.*, 2011 (a, b) foi utilizado 270 rpm e neste trabalho foi utilizado 900 rpm.

Avaliando a influência da velocidade angular do agitador mecânico no comportamento fluidodinâmico da fase líquida da célula de flotação, pode-se observar que conforme há um aumento da velocidade angular, maior é a concentração de energia cinética na região do impelidor, sendo que para menor velocidade angular (900 rpm), foi detectado uma distribuição mais homogênea da energia cinética no interior do flotador.

Desse modo, pode-se concluir que a utilização de uma abordagem simplificada, como a simulação de um modelo monofásico, foi satisfatória para predição do comportamento da fase líquida em diferentes condições de escoamento. Além disso, a principal vantagem para a utilização de uma abordagem simplificada em casos semelhantes a esse, é a redução de custos computacionais para predição de parâmetros relacionados apenas a fase líquida. No entanto, essa simplificação é representativa apenas quando se tem sistemas diluídos, sendo que para o caso apresentado neste trabalho, a fase líquida corresponde há mais de 99% da fração volumétrica do sistema.

Para a modelagem bifásica, ambos modelos multifásicos utilizados (VOF, *Mixture*) apresentaram resultados satisfatórios para predição dos parâmetros avaliados para a célula de flotação, com exceção do diâmetro das bolhas, que não foi predito de maneira satisfatória utilizando o modelo *Mixture*. No entanto, isso é justificado devido a necessidade da inserção de um diâmetro médio para fase secundária (oxigênio-ozônio) para o cálculo de alguns parâmetros do escoamento. Com isso, o valor utilizado foi a estimativa obtida através da correlação matemática, que também não performou de maneira satisfatória para predição do diâmetro médio das bolhas, conseqüentemente, devido às imprecisões da estimativa inicial, o valor final obtido para esse parâmetro foi afetado.

Contudo, avaliando em geral os demais parâmetros da célula de flotação, o modelo VOF e *Mixture* apresentaram comportamento semelhantes. Porém destaca-se que do ponto de vista convergência numérica, o modelo *Mixture* apresentou uma maior estabilidade e conseqüentemente, uma redução do custo computacional envolvido na simulação. Com isso, caso tenha-se uma estimativa inicial com alta acurácia para o diâmetro médio, a utilização do modelo *Mixture* torna-se recomendada, no entanto, caso esse valor seja desconhecido, devido à praticidade, robustez e alta acurácia do modelo VOF, o mesmo torna-se a melhor opção.

Portanto, novamente a simplificação do flotador para um sistema bifásico para avaliar o comportamento da fase gasosa apresentou resultados satisfatórios, pois em geral os parâmetros avaliados para célula de flotação foram preditos com exatidão, sendo a principal divergência o deslocamento do nível do líquido. No entanto, esse desvio é justificado devido à dificuldade de medição dessa variável, pois a medição é dificultada devido a agitação e a alimentação de gás, que provocam oscilações no menisco do tanque e devido ao efeito de refração, que dificulta a leitura do instrumentador. Além disso, o erro da medição corresponde à aproximadamente 17% do valor total, aumentando a imprecisão da medida experimental.

Para a simulação trifásica, o modelo *Mixture* apresentou uma boa performance, tendo em vista, que com esse modelo foi possível prever a posição das partículas, sendo que a simulação computacional apresentou o mesmo comportamento experimental, que foi a estagnação do material granular na região abaixo do agitador mecânico com um movimento rotacional. Sendo que além disso, com o modelo *Mixture* foi possível observar uma maior frequência de oscilações à esquerda da célula, exatamente como foi observado de forma experimental. O método de inserção das partículas também foi validado, sendo que foi utilizado um *patch* para adicionar uma fração volumétrica de sólidos na célula. Desse modo, conclui-se que a

modelagem utilizada foi satisfatória e conseguiu prever as características do escoamento trifásico do flotor.

### 5.1 Sugestões para trabalhos futuros

Para avaliar com mais detalhes a modelagem da fase líquida em células de flotação, um estudo experimental é recomendado, a fim de ajustar de forma precisa os parâmetros dos modelos, para uma representação com alta exatidão do processo real. Além disso, outro ponto a ser estudado é o impacto da geometria do agitador mecânico e do *baffle* no escoamento, com o intuito de avaliar estruturas geométricas que otimizam a eficiência da ozonificação na célula de flotação.

A vazão de alimentação da fase gasosa e a velocidade angular do agitador mecânico interferem diretamente no diâmetro médio das bolhas formadas, com isso, seria interessante utilizar métodos estatísticos de planejamento de experimentos, como, o planejamento experimental em dois ou três níveis e o planejamento composto central (PCC), para quantificar através de superfícies de resposta a influência dessas variáveis no diâmetro das bolhas. Assim, uma equação simples de predição possa ser desenvolvida a fim de estimar valores de diâmetro das bolhas em diferentes condições operacionais. Consequentemente, dependendo do comportamento das funções desenvolvidas empiricamente, pode ser obtido um ponto ótimo de operação, que irá otimizar a eficiência de ozonificação, minimizando uma das principais desvantagens da ozonificação, que é seu alto consumo energético, permitindo o avanço desta tecnologia no mercado industrial.

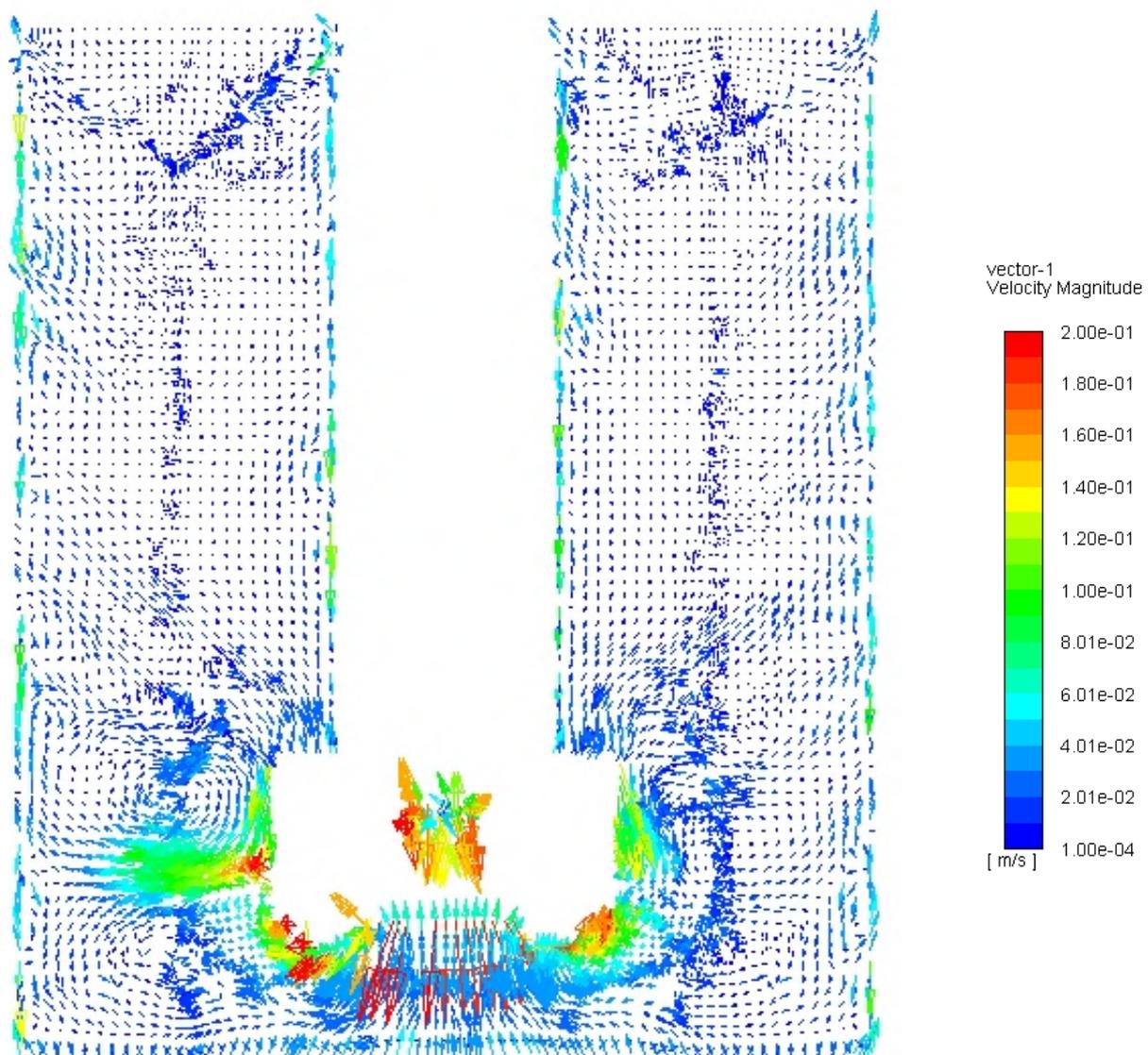
A ozonificação e flotores em geral envolvem processos químicos, sendo que no caso da ozonificação tem-se reações de oxidação e no caso de flotores convencionais aplicados a mineração tem-se interações físicas e químicas entre as fases, para separação do minério de interesse através de propriedades de superfície do sólido, que são impactadas pela hidrofobicidade ou hidrofiliabilidade do material. Desse modo, um estudo da modelagem trifásica avaliando o comportamento químico entre as fases seria de grande valor para esse processo de separação e no desenvolvimento dessa nova tecnologia, que é a ozonificação.

## 6 REFERÊNCIAS

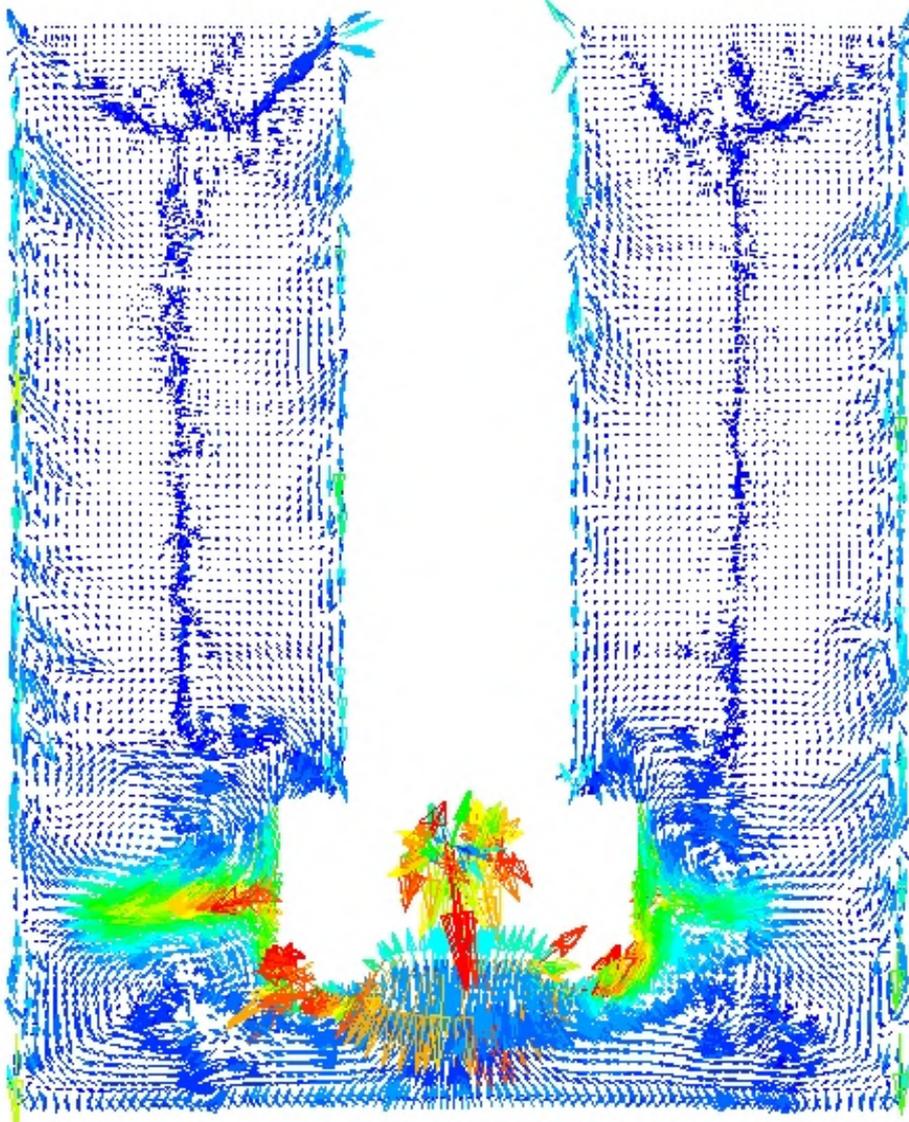
- BOUCHER, D., JORDENS, A., SOVECHLES, J., LANGLOIS, R., LEADBEATER, T. W., ROWSON, N. A., WATERS, K. E. (2017). **Direct mineral tracer activation in positron emission particle tracking of a flotation cell**. *Minerals Engineering*, v. 100, p. 155–165, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2016.10.022>. Acesso em: 02 jan. 2021.
- JOSHI, J. B., NERE, N. K., RANE, C. V., MURTHY, B. N., MATHPATI, C. S., PATWARDHAN, A. W., RANADE, V. V. **CFD simulation of stirred tanks: Comparison of turbulence models. Part I: Radial flow impellers**. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 89, n. 1, p. 23–82, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/cjce.20446>. Acesso em: 12 jun. 2021. (a)
- JOSHI, J. B., NERE, N. K., RANE, C. V., MURTHY, B. N., MATHPATI, C. S., PATWARDHAN, A. W., RANADE, V. V. **CFD simulation of stirred tanks: Comparison of turbulence models (Part II: Axial flow impellers, multiple impellers and multiphase dispersions)**. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 89, n. 4, p.754–816, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/cjce.20465>. Acesso em: 17 jul. 2021. (b)
- LARA-RAMOS, J. A., SÁNCHEZ-GÓMEZ, K., VALENCIA-RINCÓN, D., DIAZ-ANGULO, J., MUESES, M., MACHUCA-MARTÍNEZ, F. **Intensification of the O<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub>/UV advanced oxidation process using a modified flotation cell**. *Photochemical & Photobiological Sciences*, v. 18, n. 4, p. 920–928, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1039/c8pp00308d>. Acesso em: 03 jan. 2021.
- MURTHY, B. N., JOSHI, J. B. **Assessment of standard, RSM and LES turbulence models in a baffled stirred vessel agitated by various impeller designs**. *Chemical Engineering Science*, v. 63, n. 22, p. 5468–5495, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2008.06.019>. Acesso em: 09 jan. 2021.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics**. Person, Second Edition, 2007. ISBN: 978-0-13-127498-3. Acesso em: 10 jan. 2021.

## 7 APÊNDICE

Figura A.1 – Campo vetorial de velocidade (a) da malha com 348.823 elementos; (b) da malha com 757.138 elementos e (c) da malha com 1.007.417 elementos.



(a)



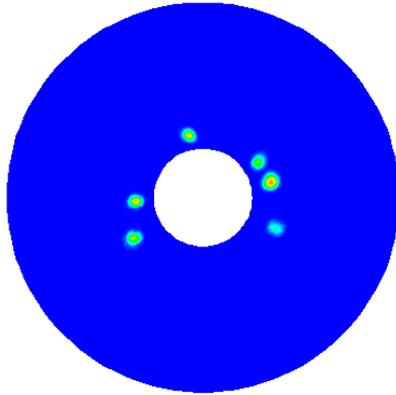
(b)



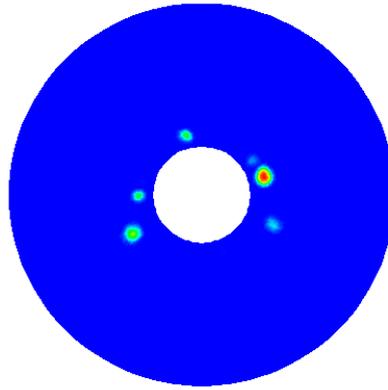
(c)

Figura A.2 – Contornos de fração volumétrica para o gás com o modelo VOF utilizados para determinação do diâmetro médio das bolhas nas seguintes posições: (a)  $x_2 = 56,6$  mm; (b)  $x_2$

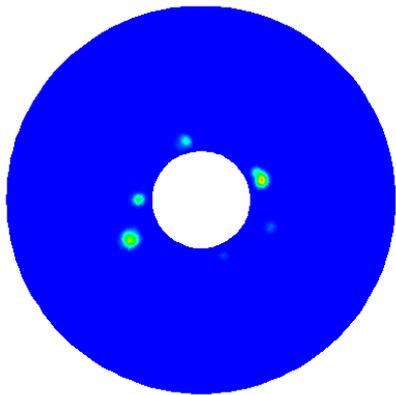
=66,6 mm; (c)  $x_2 = 76,6$  mm; (d)  $x_2 = 86,6$  mm; (e)  $x_2 = 96,6$  mm; (f)  $x_2 = 106,6$  mm; (g)  $x_2 = 116,6$  mm; (h)  $x_2 = 126,6$  mm; (i)  $x_2 = 136,6$  mm; (j)  $x_2 = 146,6$  mm e (k)  $x_2 = 156,6$  mm.



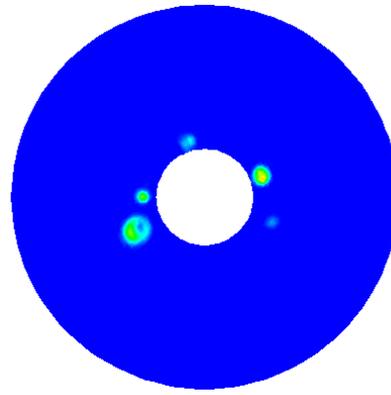
(a)



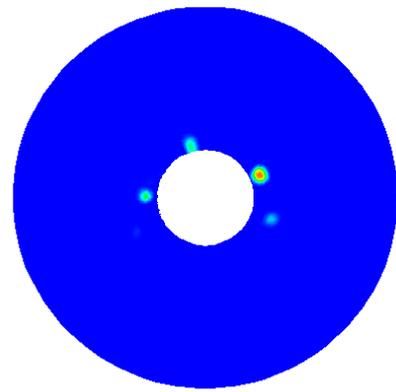
(b)



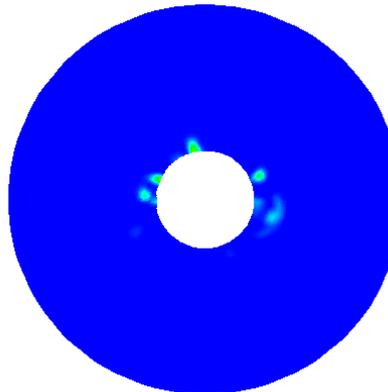
(c)



(d)

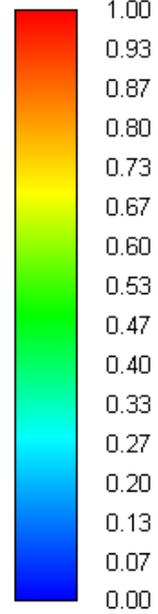


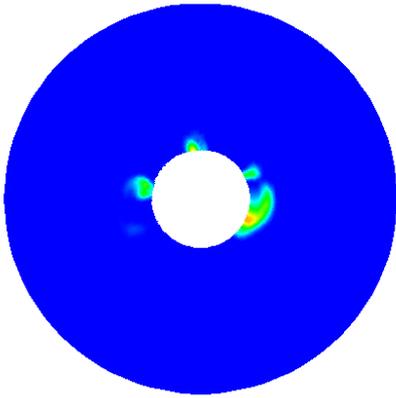
(e)



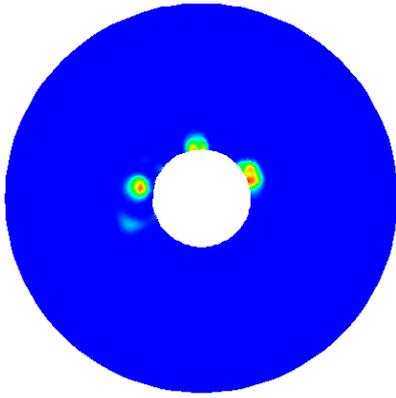
(f)

contour-1  
Volume fraction (oxigenio-ozonio)

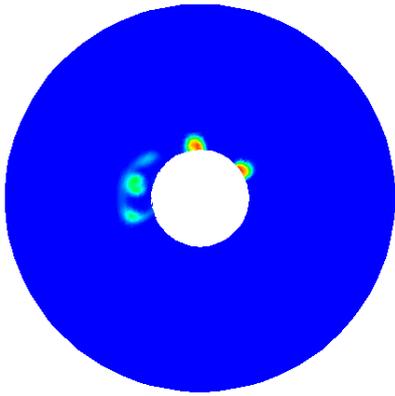




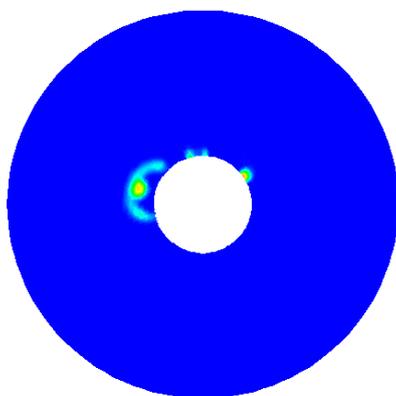
(g)



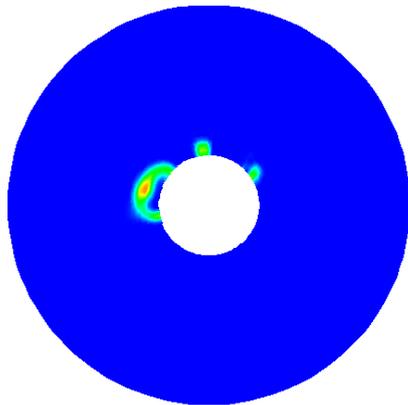
(h)



(i)

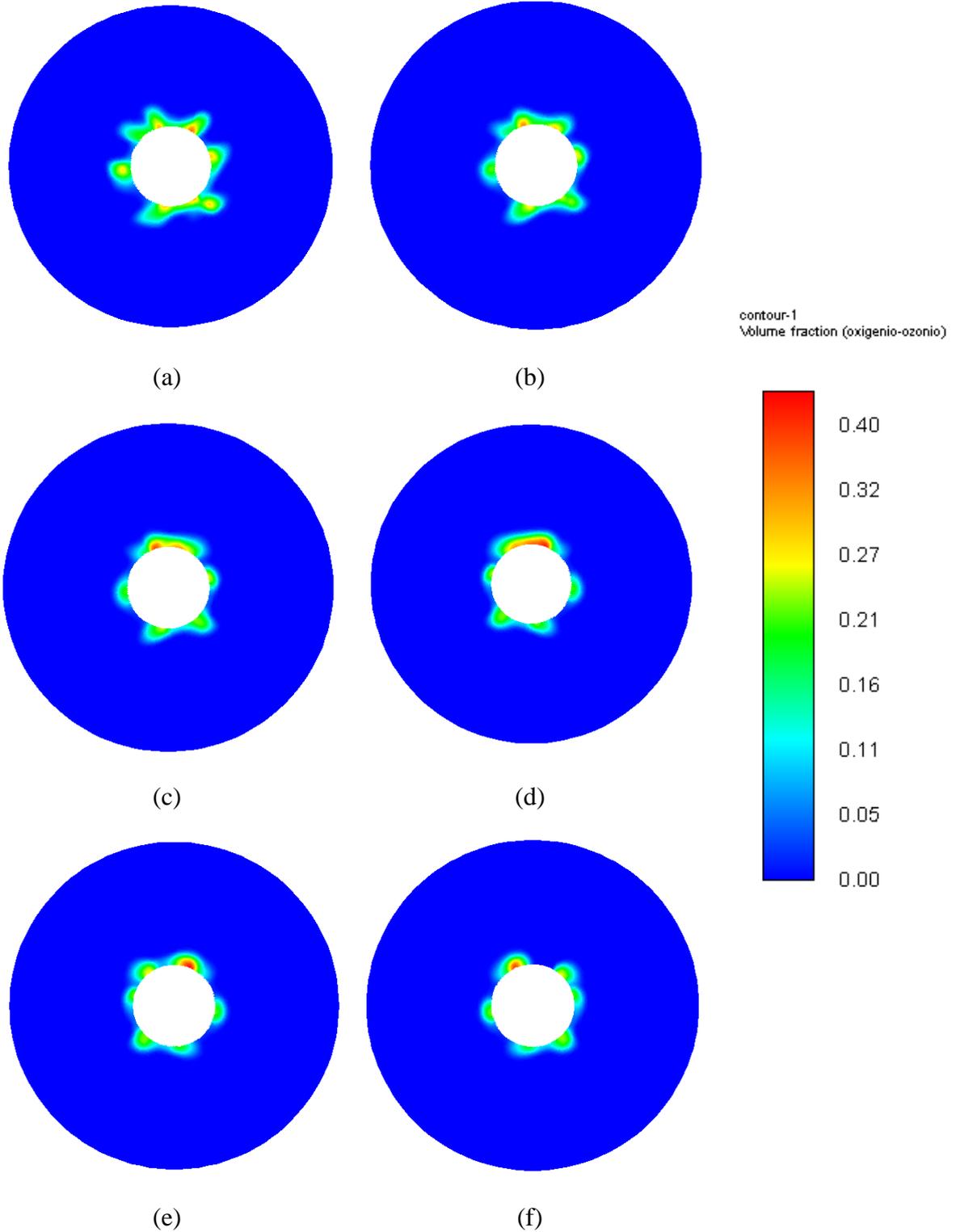


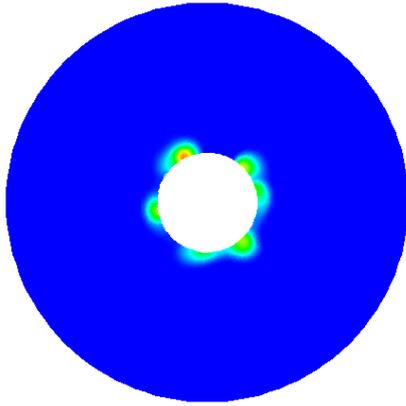
(j)



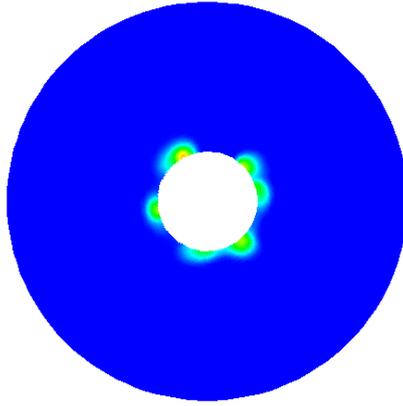
(k)

Figura A.3 – Contornos de fração volumétrica para o gás com o modelo *Mixture* utilizados para determinação do diâmetro médio das bolhas nas seguintes posições: (a)  $x_2 = 56,6$  mm; (b)  $x_2 = 66,6$  mm; (c)  $x_2 = 76,6$  mm; (d)  $x_2 = 86,6$  mm; (e)  $x_2 = 96,6$  mm; (f)  $x_2 = 106,6$  mm; (g)  $x_2 = 116,6$  mm; (h)  $x_2 = 126,6$  mm; (i)  $x_2 = 136,6$  mm; (j)  $x_2 = 146,6$  mm e (k)  $x_2 = 156,6$  mm.

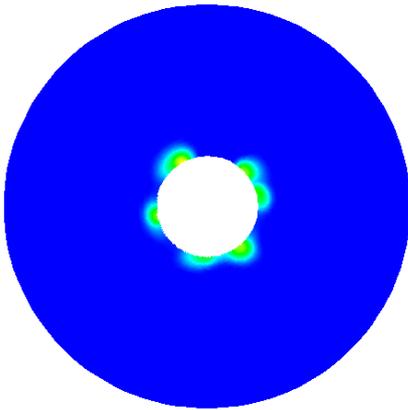




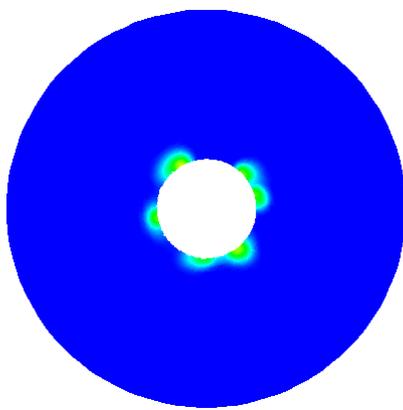
(g)



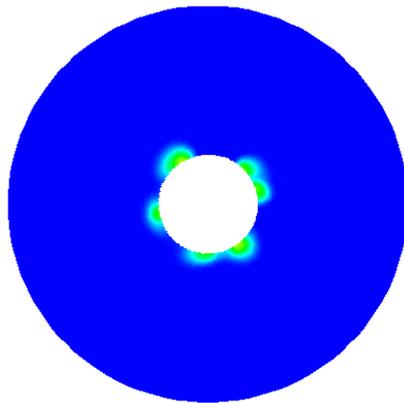
(h)



(i)



(j)



(k)