



URBANO MONTAÑEZ VILLAMIZAR

**ESTUDO DA FLUIDODINÂMICA EM UM ERLLENMEYER
COM USO DE CFD**

CAMPINAS

2013



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

URBANO MONTAÑEZ VILLAMIZAR

ESTUDO DA FLUIDODINÂMICA EM UM ERLLENMEYER COM USO DE CFD

Orientador: Prof. Dr. José Roberto Nunhez

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas para obtenção de título de Mestre em Engenharia Química, na área de concentração de Desenvolvimento em Processos Químicos.

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO DA DISSERTAÇÃO
DEFENDIDA PELO ALUNO URBANO MONTAÑEZ VILLAMIZAR, E
ORIENTADO PELO PROF. DR. JOSE ROBERTO NUNHEZ

Prof. Dr. – José Roberto Nunhez

CAMPINAS

2013

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura
Rose Meire da Silva - CRB 8/5974

V712e Villamizar, Urbano Montañez, 1983-
Estudo da fluidodinâmica em um Erlenmeyer com uso de CFD / Urbano
Montañez Villamizar. – Campinas, SP : [s.n.], 2013.

Orientador: José Roberto Nunhez.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de
Engenharia Química.

1. Fluidodinâmica computacional (CFD). I. Nunhez, José Roberto, 1961-. II.
Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III.
Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Study of the fluid dynamics in an Erlenmeyer flask whit CFD

Palavras-chave em inglês:

Computational fluid dynamics

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora:

José Roberto Nunhez [Orientador]

Edimilson Souza

Antonio Carlos Luz Lisboa

Data de defesa: 16-07-2013

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

Dissertação de Mestrado defendida por Urbano Montañez Villamizar e aprovada em 16 de Julho de 2013 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. – José Roberto Nunhez



Prof. Dr Edimilson Souza



Prof. Dr. António C. Luz Lisboa

ABSTRACT

Erlenmeyers have been used as a tool in many biotechnology research and industrial laboratories, especially in its early stages when many experiments can be performed simultaneously at low cost and nearly without supervision. However, these devices offer only limited information on the phenomenological processes occurring within these shake flasks, as the rotational speed which gives an idea of the mixing requirements, etc. This limitation could be a difficulty when trying to scale up new processes developed in laboratories to a pilot plant scale or an industrial processes.

Some experimental research has been carried out to determine important process variables in Erlenmeyer agitation such as volumetric power consumption, oxygen transfer capacity, hydrodynamic stress, etc.

Computational fluid dynamics (CFD) has recently gained importance in the study of transport phenomena, thanks to advances in the development of specialized software, and computational power. The objective of this work is to simulate the mixing process in an Erlenmeyer flask. The software used is CFX version 14. The CFD results is compared with the experimental data available to validate this computational model in order to study the fluid dynamics that develops in these devices.

Key words: Erlenmeyer, phenomenological processes, Computational fluid dynamics.

RESUMO

Os Erlenmeyers agitados têm sido utilizados como uma ferramenta em pesquisa na área biotecnológica e laboratórios industriais, especialmente em estágios iniciais, onde graças a sua praticidade, muitos experimentos podem ser realizados simultaneamente com um baixo custo e virtualmente sem supervisão. No entanto, esses dispositivos só fornecem informação limitada dos processos fenomenológicos que acontecem dentro do Erlenmeyer, tais como a velocidade rotacional, que dá uma ideia dos requerimentos de mistura, etc. Esta limitação pode dificultar a transição de um novo processo da bancada experimental para a escala piloto ou industrial.

Alguns estudos de pesquisa têm sido realizados para determinar importantes variáveis de processo, tais como consumo de potência volumétrico, capacidade de transferência de oxigênio, estresse hidrodinâmico, etc.

A fluidodinâmica computacional (CFD) tem ganhado importância recentemente no estudo dos fenômenos de transporte, graças aos avanços no desenvolvimento de software especializado, e poder computacional. O objetivo desse trabalho é simular o processo de agitação desenvolvido em um Erlenmeyer agitado em máquinas orbitais, utilizando o pacote computacional CFX versão 14. Os resultados CFD são comparados com os dados experimentais disponíveis para validar o modelo com o objetivo de estudar a fluidodinâmica desenvolvida nestes dispositivos.

Palavras chave: Erlenmeyer, processos fenomenológicos, Fluidodinâmica computacional (CFD).

SUMARIO

CAPÍTULO I.....	1
1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1. OBJETIVO GERAL.....	3
1.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	3
1.3. ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO.....	3
CAPÍTULO II.....	5
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	5
2.1. INTRODUÇÃO AO CAPÍTULO.....	5
2.2. TRABALHOS DE PESQUISA RELACIONADOS COM O ESTUDO DOS FENÔMENOS ENVOLVIDOS NO ESCOAMENTO EM ERLLENMEYERS.....	5
CAPÍTULO III.....	17
3. FUNDAMENTOS TEÓRICOS.....	17
3.1. INTRODUÇÃO AO CAPÍTULO.....	17
3.2. GENERALIDADES.....	17
3.3. EQUACIONAMENTO MATEMÁTICO.....	19
3.3.1. Equação da continuidade.....	20
3.3.2. Equações de quantidade de movimento.....	20
3.3.3. Turbulência.....	21
3.3.4. Métodos numéricos.....	29
4. METODOLOGIA.....	33
4.1. IDENTIFICAÇÃO DO PROBLEMA.....	34
4.1.1. Objetivo.....	37
4.1.2. Domínio.....	37
4.2. PRÉ-PROCESSAMENTO.....	37
4.2.1. Geometria.....	38

4.2.2. Malha.....	39
4.2.3. Setup.....	41
4.3. SOLUÇÃO	44
4.4. PÓS-PROCESSAMENTO.....	45
CAPÍTULO V	47
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES	47
5.1. TESTE DE INDEPENDÊNCIA DE MALHA	47
5.1.1. Estimativa do y^+	51
5.2. VALIDAÇÃO DO MODELO.....	53
5.3. ESTUDO DE CASOS PROPOSTO.....	59
5.3.1. Distribuição do líquido	59
5.3.2. Tempo de estabilização	60
5.3.3. Efeito do volume de líquido a velocidade rotacional na altura máxima.....	62
5.3.4. Efeito do volume de líquido e a velocidade na área interfacial	63
5.3.5. Taxa de dissipação turbulenta	64
CAPÍTULO VI	67
6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	67
7. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	69
ANEXO A.....	73

Dedico esse trabalho a meus pais, irmãos e sobrinhos que amo infinitamente e sempre me deram seu apoio para atingir esse logro.

AGRADECIMENTOS

A Deus pai, pela graça de viver essa maravilhosa experiência.

A minha mãe e meu pai, pelo amor e o apoio incondicional.

A meus irmãos e sobrinhos que sempre têm estado no meu lado.

Ao Prof. Roberto Nunhez quem acredito em mim desde o começo, pela sua orientação, mas também pela sua sincera amizade.

Ao Prof. Antônio C. Luz Lisboa e o Prof. Edimilson Souza pelos seus valiosos aportes e correções.

A todos meus colegas do laboratório LCFD, Helver Alvarez, Sebastian Moreno, Jose Luis Gómez, Ana Milena Torres, Diener Volpin, Everton Matos, Fredy Antonio Cabrales que sempre estiveram comigo, me apoiaram e me ajudaram a resolver muitas dúvidas alias da sua valiosa amizade.

A todos os meus amigos, colombianos e brasileiros, e de outras nações: Natalia L. Parada, Marcio Sabino, Ronald Jaimes, Luisa F Rios, Ruben Ramirez, Cintia Gonçalves, Theresa Johana, Manuela Diaz, Kathe Beltran, Danielle Chamovitz, Marcele Passos, Omar Duran, Luz Stella Gaona, David Lopez, Alejandra Herrera, Carlos Espinoza, William Herrera, Regina Coeli, Nataly Galvis, Henderson I. Quintero, Anderson Bonon, Diana Sanchez, Laura Rincon, Larissa Belisiário, Susana Rincon, Gerson Brito, Ismael Lara, Sary Chu, Livia de Luca, Pablo Cocha, Tytah Prado, Julie K. Rodríguez, Marie Vanderghote, Johnnatan Rodriguez, Eduardo E. Altoé, Fernanda Brognaro, Jorge Sanz, Javier Ruano, que estiveram no meu lado ao longo desse processo, e com a sua companhia e amizade fizeram minha estadia no brasil mais feliz e prazerosa.

Agradecimentos especiais ao governo do Brasil por me acolher no seu território, a UNICAMP por me aceitar como estudante, e a CAPES pelo apoio financeiro.

A matemática é o alfabeto com qual, Deus escreveu o universo.
Galileu Galilei.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Constantes modelo k- ω	26
Tabela 2. Constantes modelo SST.	29
Tabela 3. Medidas em milímetros do domínio virtual.	39
Tabela 4. Casos de estudo, validação do modelo.	41
Tabela 5. Configurações do domínio virtual.	42
Tabela 6. Configurações condições de contorno.	43
Tabela 7. Condições iniciais.	43
Tabela 8. Número de Reynolds para as diferentes velocidades rotacionais.	43
Tabela 9. Malhas testadas.	48
Tabela 10. Comparação, máxima altura atingida pelo líquido.	58

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 Técnicas de estudo dos Fenômenos de Transporte.....	19
Figura 2. Técnicas de estudo dos Fenômenos de Transporte [22]......	30
Figura 3. Representação de um volume de controle.	31
Figura 4. Metodologia Fluidodinâmica Computacional.	33
Figura 5 Agitador orbital.....	34
Figura 6. Decomposição do movimento descrito pelo Erlenmeyer.	35
Figura 7. Representação do movimento de um Erlenmeyer.	36
Figura 8. Erlenmeyer Schott, Mainz Germany (a); Erlenmeyer modelo virtual (b)...	38
Figura 9. Geometria virtual.	39
Figura 10. Malha hexaédrica.....	40
Figura 11. Monitores RMS, simulação transiente sistema bifásico Ar-Água.....	45
Figura 12. Malha Hexaédrica 1	48
Figura 13. Malha Hexaédrica 2.....	49
Figura 14. Malha Hexaédrica 3.....	49
Figura 15. Malha Hexaédrica 4.....	50
Figura 16. Malha Hexaédrica 5.....	50
Figura 17. Resultados teste de malha.	51
Figura 18 Estimativa do y^+	52
Figura 19. Comparação entre os resultados experimentais y CFD.....	54
Figura 20. Comparação entre os resultados experimentais y CFD.....	55
Figura 21. Comparação entre os resultados experimentais y CFD.....	56

Figura 22. Comparação entre os resultados experimentais y CFD.....	57
Figura 23. Distribuição do líquido no interior do Erlenmeyer a diferentes velocidades rotacionais.	60
Figura 24. Estudo do tempo de estabilização, planos fracção volumétrica.....	61
Figura 25 Fracção volumétrica ao longo do tempo.	62
Figura 26. Efeito da quantidade de líquido carregado e velocidade rotacional na altura máxima.....	63
Figura 27. Efeito da quantidade de líquido carregado e velocidade rotacional na área interfacial.....	64
Figura 28 Taxa de dissipação turbulenta media em função da velocidade e o volume de liquido.	65

LISTA DE SÍMBOLOS

P : Potência

V : Volume

N : Velocidade rotacional

$\vec{\omega}_1$: Velocidade angular 1

$\vec{\omega}_2$: Velocidade angular 2

V_L : Volume de enchimento

t : Tempo

ρ : Densidade

u_i : Componente da velocidade

x_i : Coordenada espacial na direção i

p : Pressão

μ : Viscosidade molecular

g_i : gravidade em direção i

Re : Numero de Reynolds

d : Diâmetro de rotação

$\overline{u'_i u'_j}$: Tensores de Reynolds

μ_{eff} : Viscosidade efectiva

μ_t : Viscosidade turbulenta

k : Energia cinética turbulenta

ε : Dissipação viscosa

P_k : Produção turbulenta devido às forças viscosas

$P_{kb}, P_{\varepsilon b}$: Produção turbulenta flutuante

S' : Termo fonte

ϕ : Variável escalar

Γ : Difusividade específica da propriedade transportada

U_x : Velocidade na direção x

U_y : Velocidade na direção y

x : Coordenada espacial em direção x

y : Coordenada espacial em direção y

α : Raio de rotação do agitador orbital

LISTA DE SIGLAS

AFD	Análitica Fluid Dynamics
EFD	Experimental Fluid Dynamics
CFD	Computational Fluid Dynamics
CAD	Computer Aided Design
MVF	Método dos Volumes Finitos
RANS	Reynolds Average
OTR	Oxygen Transfer Rate
VOF	Volume of Liquid
PVP	Polyvinylpyrrolidone
SST	Shear Stress Transport

CAPÍTULO I

1. INTRODUÇÃO

A Bioengenharia é uma das áreas mais jovens da engenharia, na qual os princípios das ciências da física, química, matemática e da computação, assim como princípios da engenharia são aplicados para estudar aspectos da biologia, medicina e saúde [1]. Neste campo os biorreatores agitados (*Erlenmeyer Shaking flask*) são uns dos equipamentos mais amplamente usados em pesquisa na área biológica em laboratórios industriais [2] onde se tem mostrado como uma inestimável ferramenta padrão.

Nos estágios iniciais de um determinado desenvolvimento em biotecnologia, muitas experiências podem ser levadas a cabo em paralelo em Erlenmeyers agitados com uma despesa mínima de material e praticamente nenhuma supervisão graças à simplicidade do aparato. Essas experiências servem para determinar a composição ótima do meio, ou para achar uma cepa microbiana adequada para determinado processo [3, 4]. Porém, essas experiências só podem providenciar condições fenomenológicas, tais como a velocidade rotacional que dá uma ideia dos requerimentos de oxigênio e o grau de aeração do processo. E não fornecem parâmetros importantes que forneçam uma melhor caracterização dos fenômenos fluidodinâmicos que acontecem nesses equipamentos[3] tais como, a capacidade de transferência de oxigênio [5, 6] ou o estresse hidromecânico. [7, 8].

Esses parâmetros são dados de muita importância para os processos de scale-up. O cálculo desses parâmetros tradicionalmente é feito com ajuda de correlações empíricas ou semi-empíricas, ou dependem de experiências em escala piloto. Devido a este fato, os resultados obtidos mediante experiências em Erlenmeyer agitados perdem em parte a sua confiança e aumenta o período de transição de um desenvolvimento da escala de bancada experimental para escala industrial. Nesse sentido, ganhar um

entendimento mais profundo desses mecanismos já mencionados, com uma base teórica, e baseados na geometria e os fenômenos físicos próprios que acontecem em esses equipamentos tem uma grande importância[3].

A fluidodinâmica computacional ou “CFD” (Abreviação em inglês de *Computational Fluid Dynamics*) é uma nova linha de estudo dos fenômenos de transporte, que envolve a solução numérica das equações de balanço (massa, quantidade de movimento e energia) de um dado escoamento para uma geometria de interesse. Essa solução envolve também o uso de um conjunto de equações subsidiárias que representam o problema a ser estudado [9], Esses métodos numéricos são implementados em pacotes computacionais desenvolvidos para tal fim. A técnica CFD tem a vantagem que pode fornecer resultados que não podem ser obtidos mediante experimentação a um custo relativamente baixo e independente da geometria [3], a desvantagem dessa técnica é que pelo fato de estar baseada em um método numérico, a sua resposta é uma aproximação, a malha numérica e os modelos empregados alias das outras variáveis envolvidas na obtenção de determinada resposta, tem que escolhidas com um critério que minimize o erro envolvido na solução.

A distribuição do líquido fornece informação importante sobre a área de transferência de quantidade de momento, e sobre a área de transferência de massa. Com o objetivo de ter um melhor entendimento nesse aspecto, BUNCHS, J. e colaboradores [10] desenvolveram um modelo matemático, baseado na geometria nos fenômenos físicos envolvidos, para descrever a distribuição do líquido nesse tipo de equipamento. Porém os resultados desse modelo tem uma pequena diferença com os resultados experimentais dado que não leva em conta a curvatura da superfície do líquido. TIANZHONG L [3]. e colaboradores fizeram uma simulação numérica em CFD do fluxo em Erlenmeyers agitados, e comparou os seus resultados com os dados experimentais reportados por BUNCHS, J. e colaboradores [10] obtendo uma boa aproximação.

BAI, G. e colaboradores [11] fizeram simulações em CFD do processo de agitação de 1 ml de líquido em um frasco de vidro (tipo vial) com 4 modos de agitação diferente (rotador, agitador orbital, agitador magnético e vórtice) para estudar a

natureza do estresse que envolve esses processos e o seu impacto na estabilidade de proteínas que normalmente passam por este estágio nos desenvolvimentos biofarmaceuticos.

O propósito do presente trabalho é estudar o escoamento em Erlenmeyer agitados sob diferentes condições de operação para um Erlenmeyer de tamanho nominal de 250 ml (Scot mainz Germany), que é o mesmo utilizado em vários trabalhos anteriores [3, 4, 10], validar esse modelo com os dados experimentais disponíveis.

Neste trabalho o software comercial ANSYS 14.0 e suas ferramentas CFX e ICFM são utilizadas para gerar as geometrias, malhas, o setup e a análise de resultados.

1.1. OBJETIVO GERAL

Desenvolver um modelo computacional que represente o escoamento num Erlenmeyer agitado de 250 ml de volume nominal, com e sem reação química, para estudar a influência das condições operacionais nas variáveis de interesse no processo.

1.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Desenvolver um teste de malha que garanta a independência do tamanho da malha nas variáveis de interesse
- Avaliar o modelo computacional com dados experimentais disponíveis na literatura.
- Estudar o escoamento da fase líquida dentro do Erlenmeyer sob diferentes condições operacionais, variando a velocidade rotacional e quantidade de líquido carregado.

1.3. ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Capítulo 1 - Introdução: O capítulo 1 contém as generalidades do tema abordado e os objetivos da pesquisa.

Capítulo 2 – Revisão bibliográfica: Neste capítulo é apresentada a revisão da literatura dos trabalhos mais relevantes associados ao estudo da física dos fenômenos que acontecem em Erlenmeyers agitados.

Capítulo 3 – Fundamentos teóricos: O capítulo 3 enquadra a Fluidodinâmica computacional dentro das técnicas existentes para o estudo dos fenômenos de transporte, e apresenta o equacionamento matemático em que é baseada a técnica da Fluidodinâmica Computacional é baseada.

Capítulo 4 – Metodologia: Ilustra os passos da metodologia aplicada no caso particular de estudo, como por exemplo, a construção das geometrias e malhas, e a configuração do setup para a resolução numérica.

Capítulo 5 – Resultados e discussões: No capítulo 5 são apresentados os resultados para a avaliação do modelo computacional adotado e os resultados dos casos de estudo propostos, assim como as discussões pertinentes dos mesmos.

Capítulo 6 – Conclusões: As conclusões obtidas na pesquisa e as sugestões para trabalhos futuros são apresentados neste capítulo.

Referencias Bibliográficas: Nesta seção são citadas as referencias bibliográficas usadas nesta dissertação.

CAPÍTULO II

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. INTRODUÇÃO AO CAPÍTULO

O objetivo deste capítulo é apresentar uma descrição dos principais trabalhos encontrados na literatura que têm relação com o atual projeto.

2.2. TRABALHOS DE PESQUISA RELACIONADOS COM O ESTUDO DOS FENÔMENOS ENVOLVIDOS NO ESCOAMENTO EM ERLENMEYERS

Com o objetivo de ganhar um melhor entendimento dos fenômenos físico-químicos associados aos processos de pesquisa em biotecnologia desenvolvidos em Erlenmeyers agitados vários trabalhos têm sido desenvolvidos.

Um dos aspectos estudados nesta área é o consumo de potência (por unidade de volume), dado que em meios de fermentação tem um papel importante, muito mais em fermentações de micro-organismos aeróbios, esse foi o escopo da pesquisa desenvolvida por BÜCHS, J. e colaboradores. [4].

O objetivo da pesquisa foi modelar uma Equação baseada na física com a qual se obtém um número de potência modificado para Erlenmeyers agitados. Neste trabalho, os pesquisadores usaram uma máquina de mistura rotatória com um sensor para medir a velocidade de rotação e o torque. A velocidade de rotação, o volume de enchimento, a qualidade da superfície das paredes de vidro do recipiente (hidrofílica e hidrofóbica) e o volume nominal deles foram variados.

Como resultado, foi modelada uma Equação com base na física, com só um parâmetro de correção para calcular o número potência modificado e o consumo de potência específico para cálculos em Erlenmeyers.

Pórem, para alguns bioprocessos esse parâmetro não é suficiente, dado que são controlados predominantemente pelo estresse hidrodinâmico. Processos com células animais ou vegetais ou microrganismos que apresentam morfologia filamentosa, ou mesmo, outros processos que contém uma segunda fase líquida de uma fonte de carbono orgânico como óleo vegetal, alcanos, ou químicos insolúveis em água introduzidos para melhorar a bioconversão. Em todos eles, a distribuição do consumo de potência, ou pelo menos o seu valor máximo $(P/V)_{max}$ deve ser conhecido para caracterizar suficientemente o bioprocesso.

Bünch J. e Zoels B. [7] estudaram a relação do consumo de potência máximo sobre o consumo de potência específico $(P/V)_{max}/(P/V)_{\emptyset}$ o que ajuda a estimar melhor as condições de mistura em biorreatores agitados.

Neste trabalho os autores basearam-se no fato que o diâmetro de gota para um sistema bifásico de coalescência inibida em condições de turbulência isotrópica livre depende do consumo de potência máximo ou da taxa de dissipação de energia, sem importar que equipamento de dispersão seja utilizado [12, 13]. Assim expressaram o diâmetro de gota máximo em função do consumo de potência volumétrico máximo $d_{max} = f((P/V)_{max})$.

Os autores desenvolveram um sistema líquido bifásico com uma coalescência estável e bem definida adequada para dispersar e medir diâmetros de gota. Mediram o consumo de potência específico $(P/V)_{\emptyset}$ e a distribuição de tamanho de gota com um espectrômetro de difração laser Fraunhofer para diferentes condições de operação. Com a distribuição de tamanho de gota determinaram o diâmetro máximo estável de gota d_{max} ; calibraram a função $d_{max} = f((P/V)_{max})$ em um tanque agitado bem definido para o qual o consumo de potência máximo $(P/V)_{max}$ sobre diferentes condições de operação é conhecido. Assim com a ajuda da função calibrada, o

consumo de potência máximo foi calculado para diferentes condições de operação e como resultado a relação $(P/V)_{max}/(P/V)_{\emptyset}$ foi calculada.

Como conclusão geral, os autores determinaram que a razão do consumo de potência volumétrico máximo sobre o consumo de potência específico para biorreatores agitados (*Erlenmeyer Shaking Flask*) é pelo menos uma ordem de magnitude menor que para fermentadores de tanque agitados padrão, isto devido a que o consumo de potência em biorreatores agitados tende a ser muito mais distribuído que para tanques agitados.

O resultado obtido concorda com o esperado, dado que para um tanque agitado, um impelidor relativamente pequeno mistura a um tanque relativamente grande, levando um consumo de potência volumétrico alto perto da área do impelidor, e baixos níveis de consumo de potência em regiões longe do impelidor. No entanto nos biorreatores agitados uma área de parede de recipiente relativamente grande em relação ao volume total de líquido introduz a energia, levando a um consumo de potência volumétrico mais homogêneo o que foi de fato encontrado.

Maier U. e Jochen Büchs [5] estudaram a capacidade máxima de transferência de oxigênio (OTR_{max}) na interfase gás-líquido em Erlenmeyers de 250 ml.

Os pesquisadores utilizaram o método de oxidação de sulfito. As condições de operação estudadas foram a frequência de rotação, diâmetro de rotação, volume de enchimento, e viscosidade do meio. A distribuição do líquido foi modelada pela interseção entre o hiperboloide rotativo e a parede interna do recipiente, e validada por meio de fotografias comparando a altura máxima calculada por meio do modelo e a altura máxima atingida pelo líquido nos experimentos. Este modelo permite o cálculo da área específica de troca, o coeficiente de transferência de massa e a capacidade máxima de transferência de oxigênio para determinadas condições de operação conhecidas sem o uso de parâmetros de ajuste.

Entre as conclusões obtidas neste trabalho está que a área da película de líquido na parede interna contribui significativamente na transferência de massa, pelo qual deve ser levada em conta no cálculo do coeficiente de transferência de massa. Das

experiências realizadas os autores modelaram um coeficiente de transferência de massa baseando na teoria de “*Higbie’s penetration theory*” (teoria de penetração de Higbie). O uso desse coeficiente junto com a área calculada disponível pra a transferência de massa calcularam a OTR_{max} . Ao comparar esse valor com os valores experimentais obtiveram uma boa concordância, levando em conta que não precisa de parâmetros de ajuste, com um erro máximo de 20 %.

Posteriormente, Maier U, Losen M. e Büchs J [6] fizeram uma pesquisa onde ampliaram as condições operativas de estudo, e compararam os resultados com seu trabalho anterior [5]. Desta vez, os autores fizeram os estudos experimentais em Erlenmeyers de tamanho nominal de 50, 100, 250, 500 e 1000 ml, volume de enchimento relativo de 4-16%, diâmetro de agitação de 1.25, 2.5, 5, 7, e 10 cm, e velocidade de agitação de 50-500 rpm (com passo de 50 rpm) com um fluido de viscosidade similar a da água.

A OTR_{max} foi estudada experimentalmente usando o sistema químico completamente definido de sulfito de sódio aquoso. Este sistema simula um meio biológico consumidor de oxigênio. Como inovação, neste trabalho, consideraram o frasco de agitação como um modelo de dois sub-reatores para levar em conta os diferentes mecanismos de transferência de massa. O primeiro consiste em um tanque agitado que faz referencia à transferência de massa do volume de líquido que gira dentro do frasco. O segundo é um reator de filme, que está relacionado com o mecanismo de transferência de massa que acontece na camada de líquido aderida à parede interna do frasco.

Duas teorias de transferência de massa foram aplicadas com sucesso para descrever a transferência de massa no volume de líquido, o modelo de *Kawase e de Moo-Young* e o modelo de *Gnielinski*. Para o caso da transferência de massa na camada de líquido foi descrita pela teoria de penetração de *Higbie*. Com resultado obtiveram um modelo que não precisa de nenhum parâmetro de ajuste com um desvio médio padrão de $\pm 30\%$ em relação aos dados experimentais.

Peter C., Suzuki Y e Büchs J[8] estudaram o estresse hidrodinâmico em Erlenmeyers. Neste trabalho, a taxa da dissipação local máxima de energia como a medida para o estresse hidrodinâmico foi caracterizada em Erlenmeyers a través da medição do tamanho máximo de gota estável.

Para calcular o estresse hidrodinâmico, os autores utilizam um método modificado utilizado em um trabalho anterior [7]. Foram utilizados dois sistemas líquidos bifásicos de coalescência estável. Nas experiências foram utilizados um tanque agitado com 4 chicanas e com um impelidor tipo turbina Rushton, e Erlenmeyers sem chicanas de tamanhos nominais de 250, 500 e 1000 ml, alias de dois tipos diferentes de Erlenmeyers com chicanas.

Um dos Erlenmeyers utilizados tinha um volume nominal de 300 ml e três chicanas retas com uma profundidade de chicana relativamente pequena e uma altura grande, e outro Erlenmeyer de 500 ml de volume nominal e três chicanas feitas a medida para serem de uma profundidade maior e menor altura.

A distribuição de tamanho de gota foi medida com um espectrômetro de difração laser Fraunhofer, o tamanho máximo estável de gota foi determinado de acordo ao padrão internacional ISSO 9276-1.

Os resultados mostraram que para todos os casos foi obtido um tamanho de gota maior no Erlenmeyer quando comparado com o tamanho de gota no tanque agitado. A taxa de dissipação de energia local máxima foi determinada pela comparação do diâmetro máximo de gota estável, com o diâmetro de gota estável de um reator de tanque agitado de geometria padrão. Foi encontrado que a razão entre a taxa de dissipação de energia local máxima e seu valor médio e 10 vezes menor em Erlenmeyers do que em reatores de tanque agitado.

Em geral é assumido que o Erlenmeyer com chicanas é melhor quando comprado com o Erlenmeyer sem chicanas, em questão de dispersão. Isto é válido se comparado nas mesmas condições de operação, mas não quando é comparado a medida adimensional da razão entre a taxa de dissipação de energia local máxima e seu valor médio. No Erlenmeyer com chicanas, porém o seu valor de dissipação de energia local

máxima é maior, o mesmo acontece com seu valor médio, por isto a razão entre os dois valores é igual que com os Erlenmeyers sem chicanas.

Como resultado da sua pesquisa, os autores apresentam uma correlação para calcular a taxa da dissipação de energia local máxima em Erlenmeyers, que permite projetar experiências de laboratório em relação ao estresse hidrodinâmico. Aliás os autores propõem em base aos seus resultados, um número de Reynolds crítico para o fluxo turbulento em Erlenmeyers sem chicanas de 60.000.

Büchs J e colaboradores [10] desenvolveram um modelo para a distribuição do líquido em frascos agitados por agitadores rotativos a viscosidades similares a da água.

Os autores justificam esta pesquisa, no fato que a distribuição do líquido da informação importante da área de transferência de quantidade de movimento, que é a área de contato do líquido com a parede interna do Erlenmeyer, e a área de transferência de massa, que é a área exposta ao ar, incluindo a interface gás líquida e a camada de líquido que fica na parede do frasco.

Este modelo baseado na física envolvida serve para calcular a distribuição do líquido dentro do Erlenmeyer e providenciar informação geométrica importante para estudar a quantidade de movimento e a transferência de massa gás/líquido.

No seu trabalho, os pesquisadores descrevem o movimento do Erlenmeyer como uma translação circular, com o raio igual à metade do diâmetro de agitação, mas mantendo a sua orientação relativa com os arredores. Os autores explicam que este movimento pode ser teoricamente descrito como a superposição de dois movimentos individuais.

O primeiro movimento é uma rotação com o eixo deslocado do centro do frasco com um raio igual à metade do diâmetro de agitação. A velocidade angular é definida pela frequência da máquina agitadora (N) assim $|\vec{\omega}_1| = 2\pi N$. O segundo movimento é uma rotação ao redor do centro do frasco, este movimento compensa a primeira rotação mantendo orientação espacial do Erlenmeyer com os arredores. A velocidade angular do segundo movimento é definida como $\vec{\omega}_2 = -\vec{\omega}_1$. O líquido é distribuído no

Erlenmeyer como um parabolóide rotacional, se os efeitos viscosos são negligenciados, no modelo descrito neste trabalho, o fluido é considerado como um líquido sem atrito.

O modelo desenvolvido foi implementado em Visual Basic 6.0 para calcular a distribuição do líquido dentro de um Erlenmeyer sem chicanas. Para validar experimentalmente os cálculos da distribuição do líquido, um Erlenmeyer sem chicanas com um volume nominal de 250 ml (Schott, Mainz, Germany) foi agitado em um agitador orbital (Adolf Kühner AG, Switzerland), e as fotografias foram tiradas com uma câmera Canon.

Foram reportados resultados para quatro condições operacionais diferentes. As condições operacionais para o primeiro estudo de caso são as condições padrão utilizadas em pesquisas da área da Bioengenharia (Volume carregado $V_L = 25\text{ml}$; frequência $N = 250\text{ rpm}$ e diâmetro $d_0 = 50\text{ mm}$) os outros três estudos de caso têm condições operacionais modificadas, uma de cada vez, para estudar a influência de cada um desses parâmetros nas variáveis de resposta. Assim no segundo estudo de caso foi mudada a frequência ($N = 150\text{ rpm}$), no terceiro estudo de caso o volume carregado foi diminuído ($V_L = 10\text{ ml}$) e no quarto estudo de caso o diâmetro de rotação foi mudado ($d_0 = 25\text{ mm}$).

Os resultados obtidos demonstraram que a altura do líquido, a superfície da base coberta e a circunferência do frasco coberta variam como o esperado, com a mudança da força centrífuga e o volume de líquido carregado, os resultados obtidos nas experiências foram muito bem preditos pelo modelo proposto, com um erro na faixa de $\pm 15\%$. Mas os autores sinalizaram que do cálculo se obtém uma distribuição perfeitamente simétrica, no entanto nos resultados experimentais, a distribuição obtida foi assimétrica em maior ou menor medida.

Tan R. e colaboradores [14] estudaram o tempo de mistura em Erlenmeyers com uso de experiências de bancada de laboratório. Neste trabalho um método colorimétrico é utilizado para quantitativamente caracterizar o tempo de mistura em frascos agitados. Devido a que é um método modificado para o estudo de caso particular, foi comparado

com outro método que é frequentemente utilizado. Este faz uso de uma sonda que dá uma leitura contínua em linha de um parâmetro de medição, no caso o pH.

De acordo com a definição comum, o tempo de mistura nos métodos de leitura contínua é atingido quando as flutuações do sinal são menores a $\pm 5\%$ do valor do sinal no equilíbrio, no entanto no caso dos métodos colorimétricos, o tempo de mistura é normalmente referido á localização do reator que apresenta a última resposta à mudança induzida, pelo qual os dados assim obtidos representam a situação no pior caso, isto leva uma grande diferença que separa esses dois métodos, que é que nos métodos colorimétricos não são controlados pelo grau final de homogeneidade.

Duas soluções de teste foram usadas como fase contínua, a primeira é água deionizada, a segunda é uma solução de 55 g/L de polímero polivinilpirrolidona dissolvido em água deionizada. Como indicador de pH foi usada uma solução de Bromotimol que vira para cor azul quando o pH é maior a 6,0 e vira amarelo quando o pH é menor a 5,5. As soluções de teste estão compostas por 2% de solução de indicador e as soluções já mencionadas.

No início de cada experiência, o valor do pH da solução utilizada como fase contínua foi ajustado em 7,5. Uma solução de 2M H₂SO₄ foi utilizada como fase dispersa, em algumas experiências uma solução de 10 M H₂SO₄ também foi utilizada, sendo adicionada lentamente com o uso de uma bomba peristáltica a traves de uma agulha colocada no centro do espaço superior do frasco agitado. Dois diâmetros diferentes de agulha foram usados, para estudar a influência da quantidade de acido adicionado.

Erlenmeyers de tamanho nominal de 100, 250 e 500 ml foram utilizados neste estudo; a bancada experimental incluiu uma câmara rotativa ligada a uma estação de trabalho via Wireless, equipada para gravar a partir desde várias posições relativas ao frasco agitado, alias de uma mesa rotativa que reproduz o movimento típico desenvolvido pelos agitadores orbitais.

O tempo de mistura foi definido para o caso particular como o tempo entre o impacto de uma gota de ácido no volume de líquido rotativo e o desaparecimento da cor

inicial do indicador em todo o volume do líquido. Por tanto está focada no local do biorreator que apresenta a resposta mais lenta à injeção da fase dispersa. Esta técnica representa a velocidade de convecção de mistura do volume e é, no entanto, insensível ao nível final de concentração de equilíbrio do composto injetado, por tanto o resultado representa o nível de macro mistura.

Os resultados mostraram que o tempo de mistura aumenta, quando a relação de volume de enchimento pelo volume nominal do frasco de agitação aumenta de 0,02 para 0,08; mas depois de superar este valor o tempo de mistura não muda. O tempo de mistura em função da velocidade de agitação diminuiu como esperado, alias também se obtiveram tempos de mistura maiores para a solução de viscosidade maior (aproximadamente 38 mPa) correspondente à solução aquosa de PVP 55 g/L.

O diâmetro de agitação não teve uma influência significativa no tempo de mistura para nenhuma das soluções utilizadas, os principais resultados experimentais caíram dentro de um desvio padrão de $\pm 30\%$.

Se o fluido é transferido do regime laminar, para o regime turbulento, o tempo de mistura diminui. Com valores de Reynolds altos, o número adimensional do tempo de mistura adimensional permanece constante, o seja, o tempo de mistura é independente do número de Reynolds a essas condições.

Tianzhong L e colaboradores [3] desenvolveram um modelo fluidodinâmico com o uso de uma malha dinâmica do frasco agitado. Usaram esse modelo para calcular a distribuição do líquido (água) dentro do Erlenmeyer, a área de contato entre a massa do líquido e a parede do frasco, a dissipação da energia, etc. informação requerida para pesquisar a transferência de momento, de massa entre a fase líquida (água) e gasosa (ar), como também o consumo de potência.

Assim como Büchs J e colaboradores [10] os autores neste trabalho descrevem o movimento desenvolvido pelo Erlenmeyer como uma translação circular, com o raio igual à metade do diâmetro de agitação, mas mantendo a sua orientação relativa com os arredores. Este movimento pode ser sintetizado pela superposição de dois

movimentos individuais. O primeiro movimento com uma velocidade angular ω_1 é um movimento translacional circular com o eixo deslocado do centro do frasco com um raio igual à metade do diâmetro de agitação. O segundo movimento é uma rotação simples, ao redor do centro de frasco, com uma velocidade angular $\omega_2 = -\omega_1$, assim, este movimento compensa a primeira rotação, o que mantém a orientação espacial do Erlenmeyer com os arredores.

O modelo de turbulência empregado pelos pesquisadores foi o modelo modificado RNG $k-\epsilon$; e dado que no estudo de caso a fase líquida e gasosa estão sempre separadas por uma interface bem definida, os autores escolheram o modelo VOF (*Volume of Liquid*) para descrever o escoamento no balão Erlenmeyer.

A geometria usada é correspondente aos cinco centímetros da metade inferior de um balão de Erlenmeyer de volume nominal 250 ml (Schott, Mainz, Germany), que é o mesmo utilizado por Büchs [10], só uma parte do Erlenmeyer é empregada para poupar custo computacional, alias o líquido é distribuído nesta zona, e os fenômenos que acontecem na zona superior onde só tem gás não fazem diferença na distribuição do líquido em rotação.

A malha utilizada nesta pesquisa foi gerada no software Gambit 3.20, os autores fizeram um teste de interdependência de malha preliminar, e encontraram que uma malha composta somente de tetraedros com uma densidade de 29779 volumes de controle era fina o suficiente; e razoavelmente econômica em termos de custo computacional.

A densidade e viscosidade para as duas fases, líquida (água) e gasosa (ar) são $1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ e $0,001 \text{ Pa} \cdot \text{s}$, e $1,225 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ e $1,7894 \times 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ respectivamente. A tensão superficial da água é $0,072 \text{ N} \cdot \text{m}$.

Nas simulações volumes de água de 15 ml, 25 ml e 35 ml foram estudadas sobre diferentes velocidades de rotação de 100 rpm, 150 rpm, 200 rpm e 250 rpm.

Um passo de tempo fixo de 0,001 s foi adotado em todas as simulações, alias de um critério de convergência de 10^{-3} nos residuais de erro.

O formato da distribuição do líquido obtido nas simulações apresenta boa concordância com os fotografias apresentados por Bünch e colaboradores [10], embora exista uma pequena diferença em altura para alguns resultados, segundo os autores é devida provavelmente a uma diferença na viscosidade utilizada na simulação e a viscosidade nas experiências de laboratório.

Devido à rotação, o líquido é rejeitado para fora, a maiores velocidades y maior volume de água, a altura máxima atingida pelo líquido aumenta como esperado. No entanto, este valor não aumenta indefinidamente, pelas limitações que impõe a gravidade.

Uma área interfacial maior implica também numa melhor transferência de massa; incrementar a velocidade de rotação acostuma ser um jeito de melhorar a transferência de massa, mas os autores acharam que incrementar a velocidade não aumenta significativamente a área interfacial. De fato para velocidades maiores a 150 *rpm* o aumento é mínimo.

A intensidade da turbulência “*I*” definida como: $I = v'/v_{avg}$, em que v' é a raiz quadrada do quadrado flutuação turbulenta da velocidade, e v_{avg} é a velocidade media; indica o grau da flutuação e a interação entre as micelas do fluido. Os autores acharam que com velocidades de rotação e volumes de carga maiores, incrementam quase linearmente a intensidade turbulenta, como resultado a mistura do líquido é melhor.

Utilizando correlações dadas em estudos anteriores [4, 7] para calcular o consumo de potência volumétrico P/V_L . E por outro lado, de acordo com a definição da taxa de dissipação de energia cinética ϵ , que é consumo de potência por unidade de massa, mas transformando esse valor para consumo de potência volumétrico (multiplicando esse valor pela densidade do líquido); os autores acharam uma relação linear entre os dois valores assim: $\epsilon\rho_L = 0.629 \frac{P}{V_L}$.

Segundo esta relação linear, o valor empírico do consumo de potência volumétrico $P/V_L [W/m^3]$ é muito maior do que o valor de CFD de consumo de potência

volumétrico $\varepsilon\rho_L [W/m^3]$. Pelo qual os autores sinalizaram, que este valor ($\varepsilon\rho_L$) é a potência que realmente é dissipada pelo líquido, e por tanto, é muito mais pratico utilizar esse valor como critério de scale-up de bioprocessos tomados diretamente de frascos agitados.

CAPÍTULO III

3. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

3.1. INTRODUÇÃO AO CAPÍTULO

O propósito deste capítulo é explicar em que consiste a fluidodinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics – CFD*), qual é a sua base teórica, e como funciona, colocando-a dentro de um marco geral junto com as demais técnicas disponíveis no estudo dos fenômenos de transporte.

3.2. GENERALIDADES

Existem diferentes abordagens que podem ser utilizadas no estudo dos fenômenos de transporte. Estas abordagens são: a fluidodinâmica teórica, a fluidodinâmica experimental e a fluidodinâmica computacional. A continuação é feita uma breve explicação de cada uma destas técnicas.

A Fluidodinâmica Analítica (AFD) consiste na solução exata das equações que descrevem os fenômenos de transporte (Equações de Navier-Stokes); porém para que seja possível obter uma resposta exata, só pode ser aplicada em problemas simples, devido a dificuldade na hora de resolver as equações diferenciais que descrevem estes fenômenos.

Por outro lado, a Fluidodinâmica Experimental é uma técnica que utiliza o túnel de vento, modelos em escala, túnel de água, traçadores, etc. para estudar o fluxo de líquidos e gases, com o uso também de equipamentos especialmente projetados para a recopilção de dados experimentais. Esta técnica implica a análise das propriedades do escoamento como a velocidade, pressão, temperatura, etc. Tem a vantagem de providenciar resultados de modelos reais. Porém é uma técnica em termos gerais de alto custo, e em alguns casos sua aplicabilidade não é prática devido à dificuldade em reproduzir as condições reais.

Finalmente temos a Fluidodinâmica Computacional (*Computational fluid dynamics* - *CFD*), uma ferramenta de simulação. Utiliza computadores com alto poder computacional e aplica matemáticas para modelar o escoamento de fluidos para prever a troca de calor, massa e momento[15].

Na fluidodinâmica computacional ou CFD são resolvidas as equações matemáticas que descrevem os fenômenos de transporte, esta solução envolve o uso de métodos numéricos para obter uma resposta aproximada. Esta solução é obtida com a ajuda de software especialmente desenvolvido para tal fim. Na última década, a técnica CFD tem sido considerada como uma poderosa ferramenta para ajudar no desenvolvimento da engenharia química. Neste período, os modelos em que é baseada a técnica CFD foram significativamente melhorados; e graças ao aumento do poder computacional, a velocidade de cálculo tem aumentado muito. De modo que cada vez, esta técnica é mais utilizada para simular a hidrodinâmica de fluxos complexos, tais como os fluxos bifásicos[16, 17]. Na Figura 1 apresenta-se um resumo das técnicas disponíveis no estudo dos fenômenos de transporte.

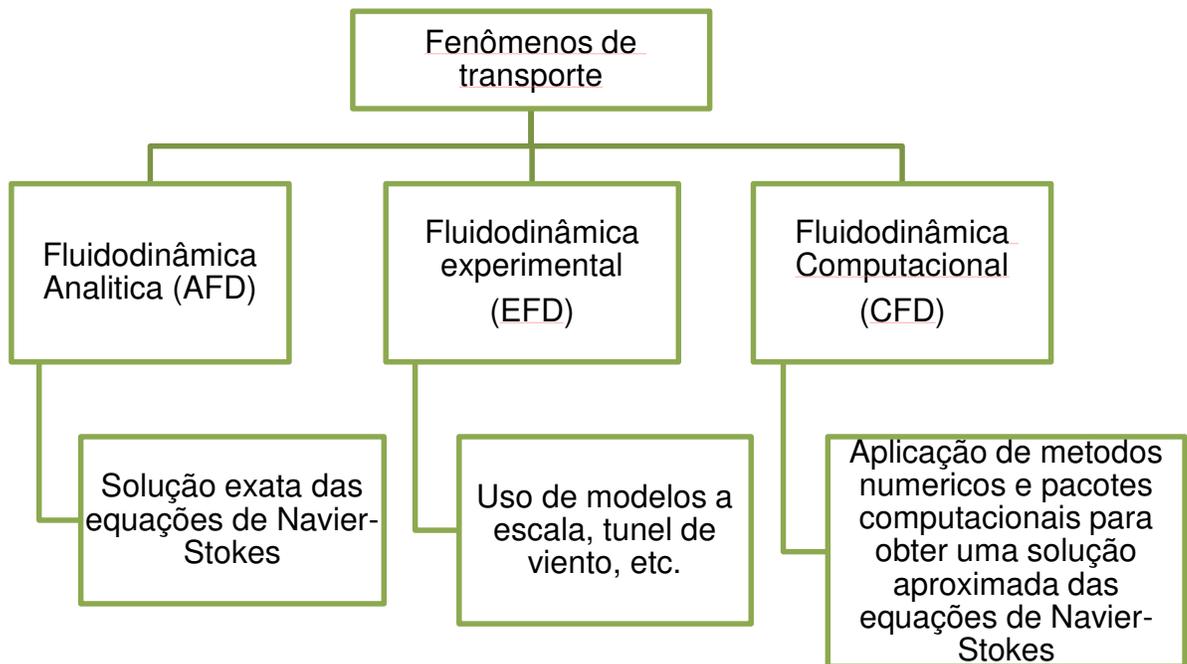


Figura 1 Técnicas de estudo dos Fenômenos de Transporte.

3.3. EQUACIONAMENTO MATEMÁTICO

O equacionamento matemático refere-se à base teórica em que é sustentada a Fluidodinâmica Computacional. Estas equações matemáticas representam o comportamento dos fluidos. Em CFD são aplicados métodos numéricos para obter uma solução aproximada de estas equações de conservação da massa, energia e quantidade de movimento. Assim, com a aplicação de métodos numéricos, estas equações diferenciais são discretizadas e solucionadas.

Além destas equações, a técnica CFD também utiliza modelos de turbulência, com o objeto obter uma resposta realística com um custo computacional razoável, caso contrário, as escalas de tempo e espaço teriam que ser muito menores para levar em

conta esses efeitos turbulentos, e o tempo computacional aumentaria a um nível não admissível.

3.3.1. Equação da continuidade

A Equação de continuidade para fluido incompressível representa a lei da conservação da massa, é dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(\rho u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(\rho u_3)}{\partial x_3} = 0 \quad (3.1)$$

Na notação de Einstein a Equação 3.1 fica:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.2)$$

3.3.2. Equações de quantidade de movimento

As equações de quantidade de movimento também conhecidas como equações de Navier-Stokes, representam a conservação da quantidade de movimento no tempo e nas três componentes espaciais.

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t}}_I + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j)}_{II} = - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial x_i}}_{III} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right]}_{IV} + \underbrace{\frac{\rho g_i}{V}}_V + \underbrace{F_i}_{VI} \quad (3.3)$$

Em que:

- (I) Termo transiente
- (II) Termo convectivo
- (III) Gradiente de pressão
- (IV) Termo difusivo
- (V) Força gravitacional
- (VI) Termo fonte

O termo fonte é uma forma geral de representar as demais forças envolvidas.

3.3.3. Turbulência

A turbulência consiste em flutuações no escoamento no tempo e no espaço. É um processo complexo, principalmente porque é um fenômeno tridimensional, instável e consiste em muitas escalas. A turbulência ocorre quando as forças inerciais do fluido tornam-se significantes, em comparação com as forças viscosas. Isto é caracterizado pelo número de Reynolds[18]. O número de Reynolds para Erlenmeyer agitados está dado por [3, 14]:

$$Re = \frac{\rho N d^2}{\mu} \quad (3.4)$$

Em que:

ρ = Densidade [kg m⁻³]

N = Número de revoluções por segundo [s⁻¹]

d = Diâmetro de rotação [m]

μ = Viscosidade [Pa s]

As equações de Navier-Stokes em princípio deveriam descrever ambos tipos de escoamentos, o laminar e o turbulento; sem precisar de informação adicional. No entanto, os fluxos turbulentos abrangem uma ampla faixa de comprimento turbulento e escalas de tempo, o que geralmente envolve escalas espaciais muito menores do que o menor tamanho de volume finito de malha utilizado de maneira prática em análises numéricas. Uma simulação numérica direta (*Direct Numerical Simulation* – DNS) destes escoamentos precisaria de um poder computacional de várias ordens de magnitude maior do que disponível no momento[18].

Os modelos de turbulência têm sido desenvolvidos para levar em conta esses efeitos, dispensando o uso de malhas muito refinadas que resultam proibitivas na maioria dos casos devido ao alto custo computacional.

Um método para modelar os efeitos turbulentos em um escoamento é incluir a turbulência na Equação de Navier-Stokes, neste caso a quantidade transportada é considerada como a soma de um valor de equilíbrio (média) e um valor flutuante, $u_i + u'_i$. Assim a Equação da conservação de quantidade de movimento (Equação 3.3) é modificada, deixando os demais termos idênticos da Equação original, obtendo assim a Equação RANS (*Reynolds-Average Navier-Stokes*) para o momento descrita na Equação 3.5:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) \\ &= -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{u'_i u'_j}) + \rho g_i + F_i \end{aligned} \quad (3.5)$$

Os novos termos $\overline{u'_i u'_j}$ são conhecidos como os tensores de Reynolds. A barra indica que os valores são medidos no tempo. Os modelos de turbulência são os modelos desenvolvidos para aproximar os tensores de Reynolds.

3.3.3.1. Hipótese de Boussinesq

A hipótese de Boussinesq, conceito que é adotado em todos os modelos de turbulência, assume que os tensores de Reynolds podem ser expressos em termos de gradientes de velocidade média, tal como se apresenta na Equação 3.6:

$$\overline{\rho u'_i u'_j} = \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} + \left(\mu_t \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] \right) \quad (3.6)$$

A Equação 3.6 introduz uma constante com as dimensões da viscosidade, esta constante recebe o nome de viscosidade turbulenta. Ao substituir a Equação 3.6 na Equação 3.5 (Equação RANS), e agrupar os termos que contêm as derivadas parciais obtém-se uma nova viscosidade que recebe o nome de viscosidade efetiva.

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (3.6)$$

Esta hipótese também introduz uma nova variável, a energia cinética turbulenta, que é definida em termos das velocidades flutuantes nas três dimensões.

$$k = \frac{1}{2}(\overline{u^2} + \overline{v^2} + \overline{w^2}) \quad (3.7)$$

Os modelos de turbulência foram desenvolvidos para calcular os tensores de Reynolds que são substituídos na Equação 3.5. Existem modelos de zero, duas ou mais equações, isto quer dizer que dependem de zero, duas ou mais equações. Quanto mais equações possua um modelo, mais exatidão tem o modelo, aumentando também o custo computacional. Por isto a importância da escolha apropriada do modelo que gere uma resposta exata o suficiente com um custo computacional razoável.

3.3.3.2. Modelos de Turbulência de Duas equações

Esses modelos são chamados de “Duas equações” porque ambas a escala de velocidade e o comprimento são solucionados usando equações de transporte separadas. São amplamente utilizados por terem uma relação favorável entre precisão e custo computacional[18].

Os modelos de duas equações $k - \varepsilon$ e $k - \omega$ utilizam o gradiente de difusão como hipótese para relacionar o *Reynold Stresses* do principal gradiente de velocidade e a viscosidade turbulenta. A viscosidade turbulenta é modelada como o produto da velocidade turbulenta e escala de comprimento turbulento.

Nos modelos de duas equações, a escala da velocidade turbulenta é calculada a partir da energia cinética turbulenta, que é proveniente da solução de sua Equação de transporte. A escala de comprimento turbulenta é estimada a partir de duas propriedades do campo turbulento, usualmente a energia cinética turbulenta e a sua taxa de dissipação. A taxa de dissipação da energia cinética turbulenta é providenciada pela solução de sua Equação de transporte.

Modelo $k - \varepsilon$

No modelo $k - \varepsilon$, para modelar o efeito da turbulência, duas equações são utilizadas, uma para a energia cinética turbulenta k , e outra para a dissipação da energia cinética turbulenta ε [19]. A Equação de continuidade fica igual a Equação 3.2, a Equação de momento é:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial P'}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{eff} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + \rho g_i + F_i \quad (3.8)$$

Em que F_i é o termo fonte, a viscosidade efetiva é calculada pela Equação 3.6, a pressão P' é a pressão modificada, está dada pela Equação 3.9.

$$P' = P + \frac{2}{3} \rho k + \frac{2}{3} \mu_{eff} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \quad (3.9)$$

A viscosidade turbulenta está dada pela Equação 3.10, C_μ é uma constante.

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.10)$$

As equações para modelar a energia cinética turbulenta k e a dissipação da energia cinética turbulenta ε estão dadas por:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \rho \varepsilon + P_{kb} \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_{\varepsilon 1} P_{\varepsilon b}) \quad (3.12)$$

Em que $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_k e σ_ε são constantes. P_{kb} e $P_{\varepsilon b}$ representam a influencia das forças de flutuação. P_k é a produção de turbulência devido as forças viscosas, está dada por:

$$P_k = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \left(3\mu_t \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \rho k \right) \quad (3.12)$$

Modelo $k - \omega$

Este modelo possui uma vantagem na formulação no tratamento de parede para cálculos com baixo Reynolds. O tratamento de parede automático desenvolvido neste modelo possibilita o uso de malhas com densidade na parede relativamente grossa, quando não é possível atingir o valor de y^+ requerido por outros modelos de turbulência (o y^+ é um valor adimensional utilizado como referência para medir a qualidade da malha na camada limite, ver anexo A).

O modelo $k - \omega$ assume que a viscosidade turbulenta esta ligada à energia cinética turbulenta e à frequência turbulenta pela relação seguinte:

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \quad (3.13)$$

A formulação do modelo $k - \omega$ soluciona duas equações de transporte, uma para a energia cinética turbulenta k (Equação 3.14), e a outra para a frequência turbulenta ω (Equação 3.15). O tensor tensão é calculado a partir do conceito de viscosidade de turbilhão.

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \beta' \rho k \omega + P_{kb} \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \omega) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta \rho \omega^2 + P_{\omega b} \quad (3.15)$$

A densidade, ρ , e o vetor velocidade, \mathbf{u} , são tratados como quantidades conhecidas tiradas das equações de Navier-Stokes. P_k é calculado igual que no modelo $k - \varepsilon$. As constantes do modelo estão apresentadas na **Tabela 1**:

Tabela 1. Constantes modelo $k-\omega$.

Constante	Valor
β'	0,09
α	5/9
β	0,075
σ_k	2
σ_ω	2

O tensor de estresse desconhecido do Reynolds é calculado conforme dito na Equação 3.16

$$-\rho \overline{u_i u_j} = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right) \quad (3.16)$$

Modelo SST (*Shear Stress Transport*).

O modelo $k - \omega$ tem uma precisão muito maior quando comparado com o modelo $k - \varepsilon$ no cálculo nas camadas perto da parede, e da uma boa predição em fluxos com gradientes de pressão moderados, mas falha para escoamentos com separação

induzida pela pressão. Adicionalmente a Equação- ω apresenta uma forte sensibilidade a valores de ω no escoamento livre fora da camada limite, o que tem limitado a sua implementação ao invés do modelo k - ϵ , apesar da sua superioridade na região perto da parede. Este fato motivou o desenvolvimento do modelo SST (*Shear Stress Transport*)[20].

O modelo de turbulência SST foi desenvolvido para obter melhores previsões em casos em que o cálculo de camadas limites falhem quando o modelo k - ϵ é utilizado, e neste novo modelo desenvolvido por Menter [21], a formulação por zonas no modelo SST esta baseada na combinação de funções, o que garante a seleção correta do modelo $k - \omega$ ou $k - \epsilon$ sem a interação do usuário.

A característica que dá uma vantagem a este modelo é o tratamento preciso e robusto perto da parede, alias que a solução tem uma grande independência respeito da resolução da malha nessa zona. Para escoamentos industriais com um nível de complexidade considerável, o requerimento de $y^+ < 2$ normalmente não pode ser atingido em todas as paredes do domínio. Por outro lado, o uso de funções de parede que possibilitam a utilização de malhas mais grossas, limita a precisão do modelo quando malhas finas são utilizadas. Assim com o modelo SST é possível aproveitar a simples e robusta formulação do modelo $k - \omega$ nas regiões perto da parede, e mudar automaticamente para modelo $k - \epsilon$ no escoamento, esta troca de modelo é feita multiplicando cada Equação por uma função de combinação, então esta função de combinação tem um valor unitário no interior da camada limite e torna-se zero paulatinamente fora da mesma.

A formulação do modelo SST é dada por:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j k)}{\partial x_j} = \tilde{P}_k - \beta \rho k \omega + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i \omega)}{\partial x_i} = \alpha \rho S^2 - \beta \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\mu + \sigma_\omega \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right] + 2(1 - F_1) \rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \quad (3.18)$$

Com a função de combinação F_1 definida como:

$$F_1 = \tanh \left\{ \left\{ \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho\sigma_{\omega 2} k}{CD_{k\omega} y^2} \right] \right\}^4 \right\} \quad (3.19)$$

Com:

$$CD_{k\omega} = \max \left(2\rho\sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i}, 10^{-10} \right) \quad (3.20)$$

Em que y é a distância da parede mais próxima. F_1 é igual a zero (0) longe da parede (modelo $k - \varepsilon$), e muda para um (1) dentro da camada limite (modelo $k - \omega$).

A viscosidade turbulenta é definida por:

$$\nu = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, S F_2)} \quad (3.21)$$

Em que S é a medida fixa da taxa de deformação e F_1 é a segunda função de combinação definida por:

$$F_2 = \tanh \left[\left[\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right) \right]^2 \right] \quad (3.22)$$

Um limitador da produção é usado no modelo SST para prevenir a acumulação de turbulência em regiões de estagnação:

$$P_k = \mu_t \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \rightarrow \tilde{P}_k = \min(P_k, 10 \cdot \beta^* \rho k \omega) \quad (3.23)$$

Todas as constantes são calculadas por uma combinação entre as constantes correspondentes do modelo $k - \varepsilon$ e modelo $k - \omega$ assim:

$$\alpha = \alpha_1 F + \alpha_2 (1 - F) \quad (3.24)$$

As constantes para este modelo se apresentam na Tabela 2:

Tabela 2. Constantes modelo SST.

Constante	Valor
β^*	0,09
α_1	5/9
β_1	3/40
σ_{k1}	0,85
$\sigma_{\omega 1}$	0,5
α_2	0,44
β_2	0,0828
σ_{k2}	1
$\sigma_{\omega 2}$	0,856

3.3.4. Métodos numéricos

Até agora foram apresentadas os modelos matemáticos em que está baseada a técnica da Fluidodinâmica Computacional CFD. Mas para obter uma solução aproximada desses modelos, nesta técnica, são empregados métodos numéricos para discretizar as equações diferenciais no tempo e no espaço.

A tarefa do método numérico é resolver as equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes por expressões algébricas que envolvem a função incógnita. Assim obtém-se uma solução aproximada da Equação diferencial em um número discreto de pontos com determinado erro. Quando maior for esse número de pontos, mais perto da solução exata será a solução numérica, mas também o custo computacional aumenta devido ao maior número de equações lineares a serem resolvidas. A **Figura 2** exemplifica a tarefa do método numérico [22].

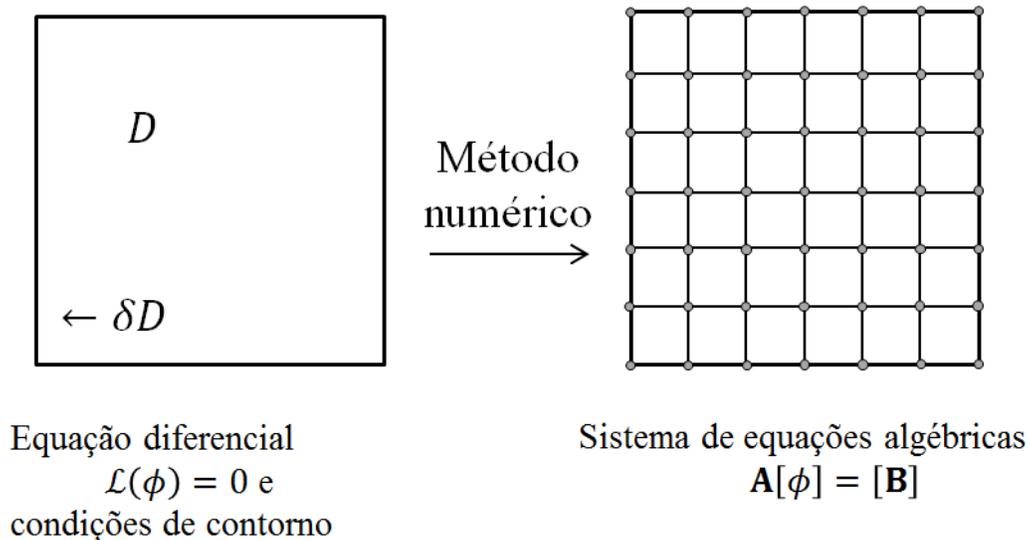


Figura 2. Técnicas de estudo dos Fenômenos de Transporte [22].

3.3.4.1. Método dos volumes finitos

O presente trabalho foi desenvolvido no software ANSYS CFX 14, em que o método numérico aplicado é o método dos volumes finitos MVF, no qual o domínio (representação virtual do espaço físico ocupado pelo volume de fluido o fluidos onde acontecem os fenômenos que são de interesse para determinado estudo) é discretizado em volumes de controle. Para isto cria-se uma malha que divide o domínio em milhares ou ate milhões de células (chamados de volumes de controle); esta malha tem que ser refinada o suficiente para gerar uma solução que represente o problema real, sem chegar a ser tão fina que implique um custo computacional inaceitável.

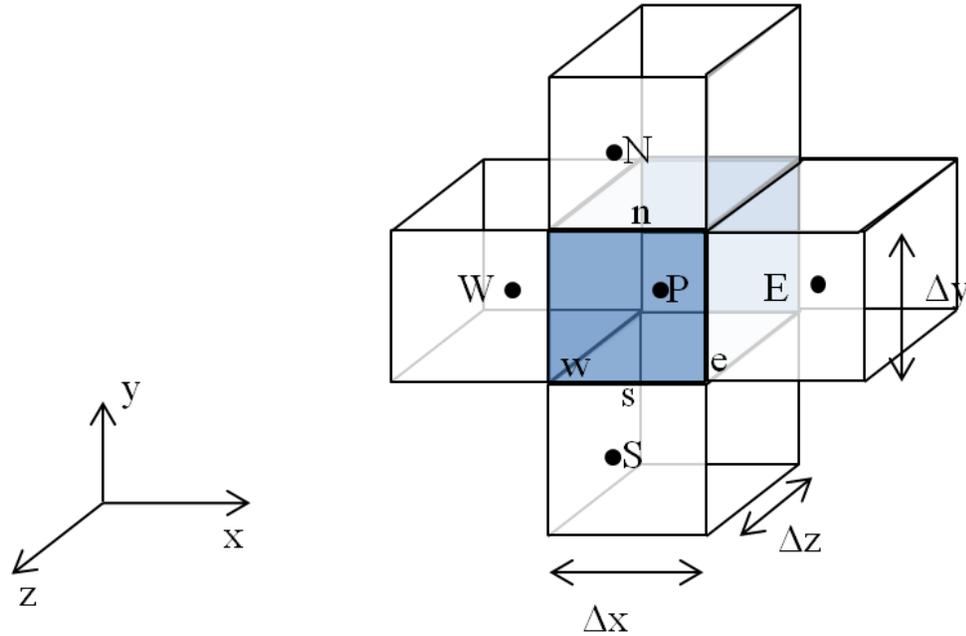


Figura 3. Representação de um volume de controle.

As equações aproximadas são obtidas integrando as equações diferenciais (apresentadas nas seções anteriores) em cada região discreta do domínio, os valores das grandezas de interesse (velocidade, concentração, temperatura, etc.) são calculados em cada volume de controle da malha numérica. A **Figura 3** é uma representação de um volume de controle.

A continuação ilustra se a discretização de uma Equação diferencial de transporte, que em forma geral pode ser escrita como:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i \phi)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S' \quad (3.25)$$

Nesta Equação, o parâmetro Γ representa o coeficiente de difusão do escalar ϕ . Se por exemplo o escalar é uma componente da velocidade o parâmetro Γ seria a

viscosidade, S' representa o termo fonte onde estão inclusas as demais forças (força gravitacional, gradiente de pressão, etc.).

Posteriormente a integração da Equação de transporte no volume de controle P (**Figura 3**) e mudando a integral de volume em integral de superfície aplicando o teorema da divergência, para uma velocidade positiva na direção x , assumindo que não existe dependência do tempo, e considerando que as faces e e w têm área igual a A , obtém-se a Equação de transporte:

$$(\rho_e u_e \phi_e - \rho_w u_w \phi_w)A = \left(\Gamma_e \left[\frac{d\phi}{dx} \right]_e - \Gamma_w \left[\frac{d\phi}{dx} \right]_w \right) A + S \quad (3.26)$$

Em que S é a integral de todos os termos fontes inclusos em S' . A Equação 3.26 tem quatro termos que são avaliados nas faces. Para obter os valores nas faces desses termos em função dos valores armazenados nos centros, é empregado um esquema de interpolação.

3.3.4.2. Esquemas de interpolação

Dado que em um problema particular, todas as variáveis são calculadas no centro dos volumes de controle, os valores que estão na face têm que ser expressos em termos dos valores centrais. Para isto utiliza-se uma função de interpolação.

Atualmente existem diferentes funções de interpolação, no Ansys CFX 14, tem implementado o esquema *Upwind* e o esquema de alta ordem (*High resolution*), entre outros. O esquema *Upwind* é bem robusto em termos de convergência, mas introduz erros de discretização difusivos, o que significa que suaviza o valor de uma variável em casos onde o gradiente for muito grande. O esquema de alta ordem (*High resolution*) é uma correção do esquema *Upwind* em que um fator de mistura β (*blend factor*), varia ao longo do domínio entre 0 e 1, dependendo do campo de solução local, para áreas com gradientes grandes o fator de mistura se aproxima a 0, e para gradientes baixos o fator de mistura tende a 1.

CAPÍTULO IV

4. METODOLOGIA

A técnica CFD envolve uma metodologia que pode ser descrita nos passos apresentados a seguir:

- Identificação do problema
- Pré-processamento
- Solução numérica
- Pós-processamento

Os estudos conduzidos empregando a técnica CFD seguem uma metodologia com o fim de garantir a exatidão e relevância nos resultados, a **Figura 4** apresenta um resumo desta metodologia.

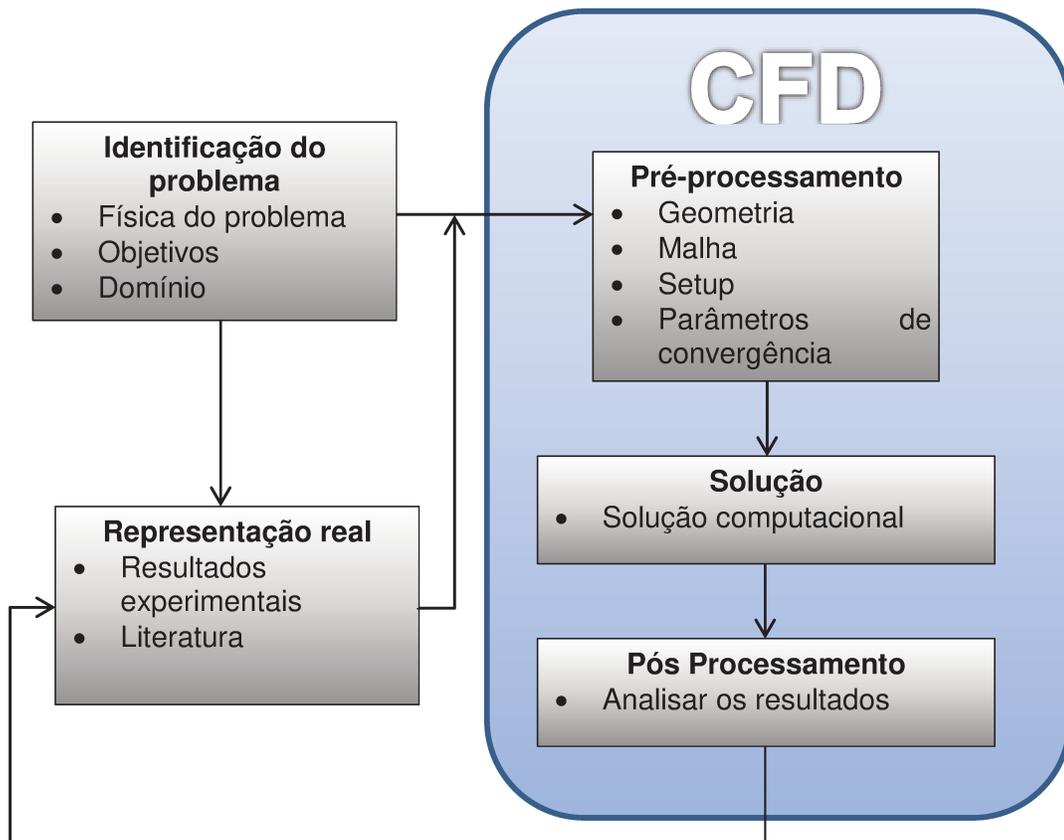


Figura 4. Metodologia Fluidodinâmica Computacional.

4.1. IDENTIFICAÇÃO DO PROBLEMA

Comumente nos estágios iniciais em projetos de pesquisa na área de biotecnologia experiências em Erlenmeyer de agitação são utilizadas. Geralmente nestas experiências máquinas de agitação orbital são empregadas para misturar os reagentes.

Nesses equipamentos o Erlenmeyer fica preso na mesa do agitador orbital. Com o agitador orbital em operação, o Erlenmeyer faz um movimento translacional, descrevendo um círculo, com um raio igual à metade do diâmetro do agitador orbital, mas mantendo a sua orientação relativa com os arredores (ver Figura 5).

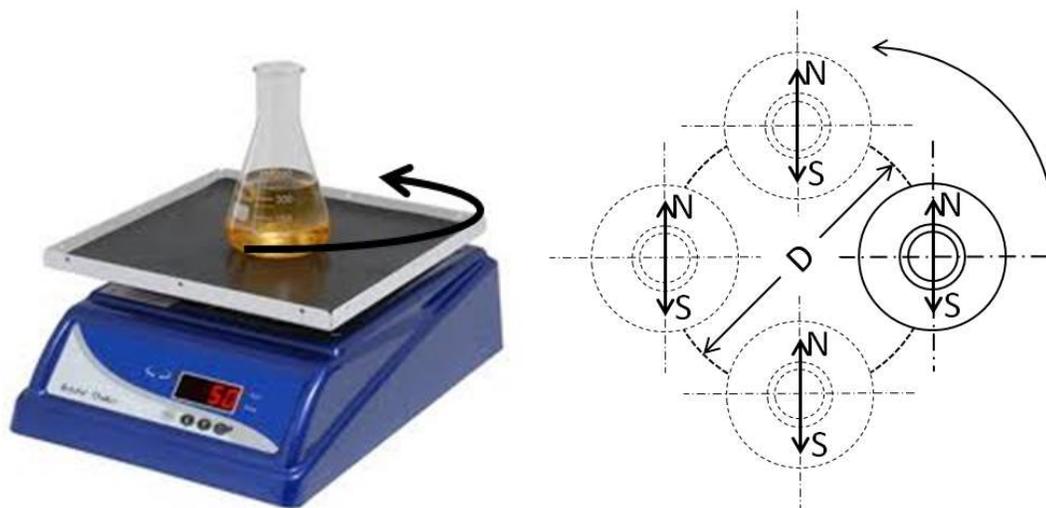


Figura 5 Agitador orbital.

Este movimento pode ser interpretado matematicamente pela superposição de dois movimentos individuais (ver **Figura 6**). O primeiro movimento é uma translação com uma velocidade angular ω_1 com o eixo de rotação (eixo 1 na **Figura 7**) deslocado do centro do frasco uma distância igual à metade do diâmetro de rotação do agitador orbital, o segundo movimento é uma rotação com uma velocidade ω_2 com o eixo localizado no centro do frasco. Sendo que $\omega_2 = -\omega_1$, o Erlenmeyer mantém a sua orientação espacial relativa com os arredores.

A velocidade de rotação é dada por:

$$\omega_1 = 2\pi N \quad (4.1)$$

Em que N é a frequência de rotação do agitador orbital. As **Figura 6** e **Figura 7** ilustram o movimento desenvolvido pelo Erlenmeyer.

Geralmente esses equipamentos descrevem uma trajetória circular, pelo qual o movimento pode ser representado pelas equações embaixo.

$$x^2 + y^2 = a^2 \quad (4.2)$$

$$U_x = a\omega \cdot \cos(\omega t) \quad (4.3)$$

$$U_y = a\omega \cdot \sin(\omega t) \quad (4.4)$$

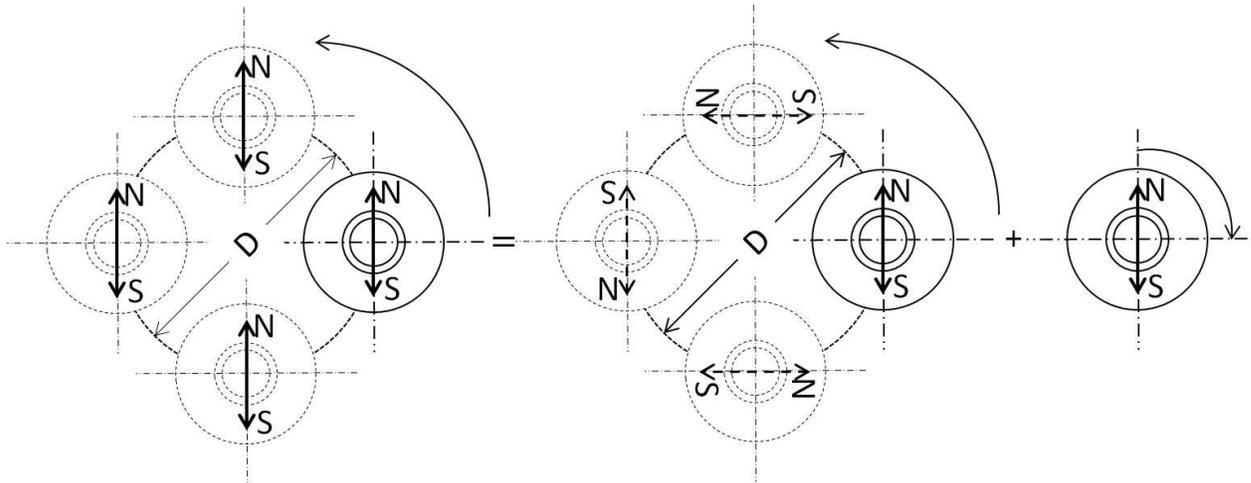


Figura 6. Decomposição do movimento descrito pelo Erlenmeyer.

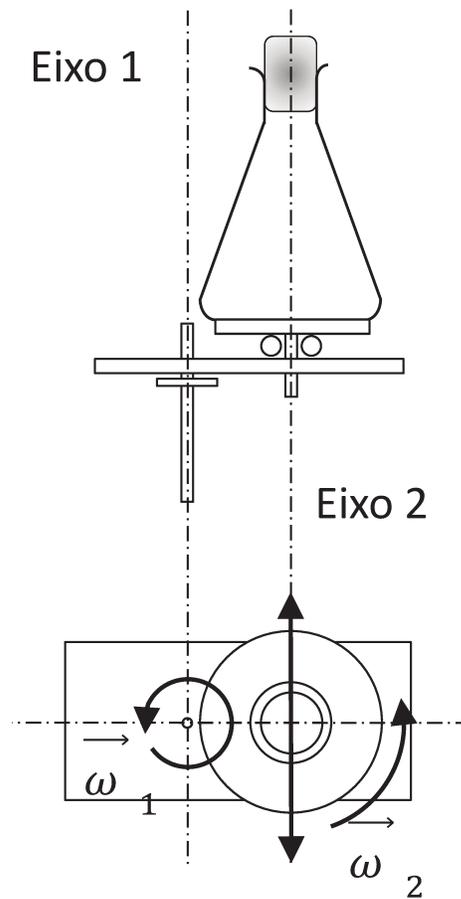


Figura 7. Representação do movimento de um Erlenmeyer.

Ao integrar as Equações 4.3 e 4.4 (Equações de velocidade) obtém-se as expressões para a posição em função do tempo apresentadas embaixo:

$$x = a \cdot \text{sen}(\omega t) \quad (4.5)$$

$$y = -a \cdot \text{cos}(\omega t) \quad (4.6)$$

Em que:

x = Coordenada no eixo x .

y = Coordenada no eixo y .

α = Raio de rotação do agitador orbital.

ω = Velocidade angular.

t = Tempo.

U_x = Componente da velocidade em x.

U_y = Componente da velocidade em y.

4.1.1. Objetivo

Criar um modelo computacional que represente a fluidodinâmica de um Erlenmeyer agitado a diferentes velocidades rotacionais e quantidade de líquido inicial para um sistema bifásico de ar-água.

4.1.2. Domínio

A geometria virtual empregada na simulação é extraída de um Erlenmeyer com um volume nominal de 250 ml (Schott Maiz, Germany), que foi o mesmo utilizado em pesquisas anteriores[10, 11]. Esta geometria corresponde ao espaço interno do Erlenmeyer ocupado pelo fluido até uma altura de 55 ml. A altura do domínio foi limitada devido a que na zona superior do Erlenmeyer não acontecem fenômenos fluidodinâmicos de interesse (para todos os casos simulados, a distribuição do líquido acontece unicamente na zona inferior e não atingi alturas maiores a 55 ml), desconsiderar a zona superior do Erlenmeyer poupa custo computacional, e alias não faz diferença na distribuição do líquido em rotação.

4.2. PRÉ-PROCESSAMENTO

É nesta etapa que o processo da Fluidodinâmica Computacional propriamente dito começa. Refere-se a criação do domínio, malhas, a escolha dos modelos, propriedades

dos fluidos, condições de contorno e iniciais, obtenção e visualização da solução numérica, etc. Esses passos são explicados com mais detalhe nas próximas seções no caso particular de estudo.

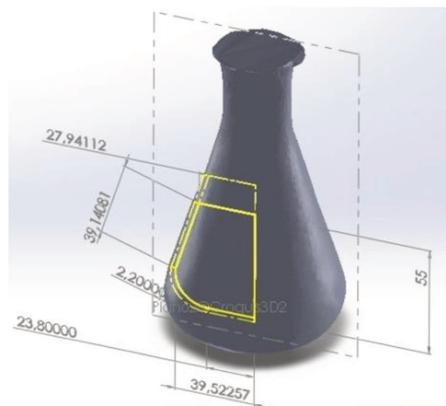
Neste projeto, a plataforma *Workbench Ansys 14.0* foi utilizada para a criação da geometria, malha, setup, e pos processamento.

4.2.1. Geometria

Para obter a geometria a partir do Erlenmeyer real (**Figura 8 a.**), um scanner 3D foi utilizado para construir um modelo virtual do Erlenmeyer (**Figura 8 b.**). Sob esse modelo com ajuda de ferramentas CAD, foram tiradas as medidas, para criar a geometria virtual (**Figura 9**) no Ansys 14 Design Modeler, as medidas são apresentadas na **Tabela 3**.



a.



b.

Figura 8. Erlenmeyer Schott, Maiz Germany (a); Erlenemyer modelo virtual (b).

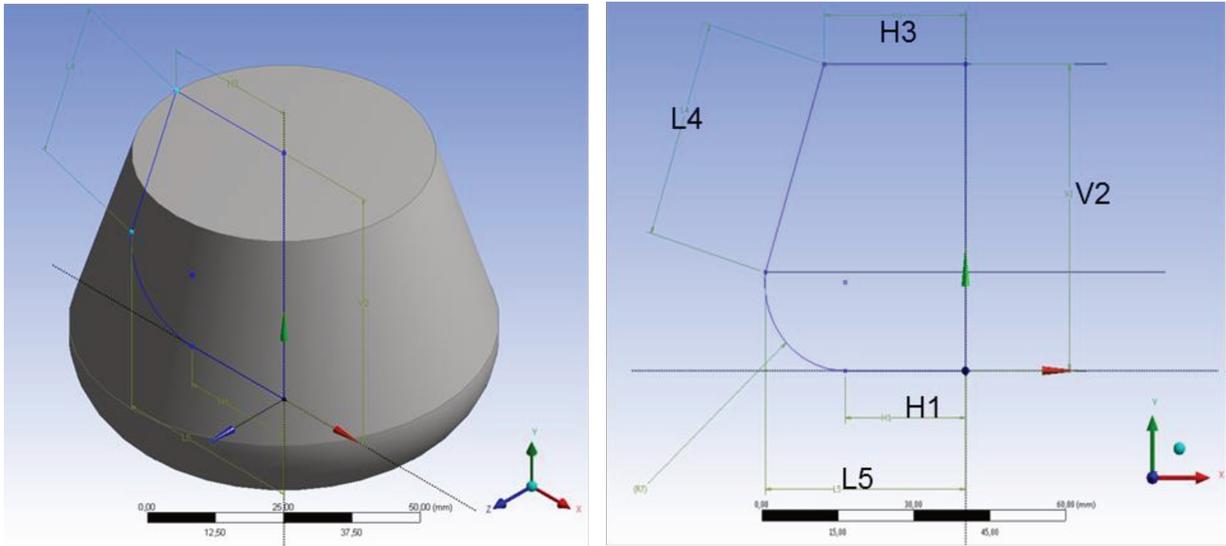


Figura 9. Geometria virtual.

Tabela 3. Medidas em milímetros do domínio virtual.

Dimensão	Valor
H1	23,800 mm
H3	27,941 mm
L4	39,141 mm
L5	39,552 mm
V2	55,000 mm

4.2.2. Malha

Como dito anteriormente, para obter uma solução discreta das equações de conservação da quantidade de movimento, massa, energia; o domínio de interesse precisa ser discretizado. Em outras palavras, é necessário criar uma malha numérica que se encaixe perfeitamente nesse domínio.

No Ansys CFX 14 basicamente existem três tipos de malhas: hexaédrica, tetraédrica e mista. Em termos gerais, as malhas tipo hexaédricas tem a vantagem de fornecer melhores resultados quando comparadas com malhas tetraédricas. Mas em casos onde a geometria é muito complexa, a sua utilização não é pratica, devido a que sua construção pode ser muito complicada. No entanto, as malhas tetraédricas possuem a vantagem de serem fáceis de fazer, mas com um erro maior, especialmente

nas paredes. Já as malhas mistas combinam a utilização de tetraedros no seio do fluido com refinamento utilizando prismas perto das paredes onde existem os maiores gradientes. Este tipo de malha tem melhorado as malhas tetraédricas, minimizando o erro perto da parede que era a sua maior desvantagem graças ao uso de elementos ortogonais em essa zona.

A escolha do tipo de malha a ser utilizado depende muito da facilidade de aplicação e da física do problema. No caso particular devido a que a geometria não impõe uma grande dificuldade, foi escolhido o tipo de malha hexaédrica. Foi feita em Ansys ICEM, com um refinamento perto da parede; para determinar a densidade apropriada na malha numérica, testes de independência de malha devem ser feitos, isto garante que os resultados não dependem do tamanho da malha e alias que o custo computacional utilizado é razoável.

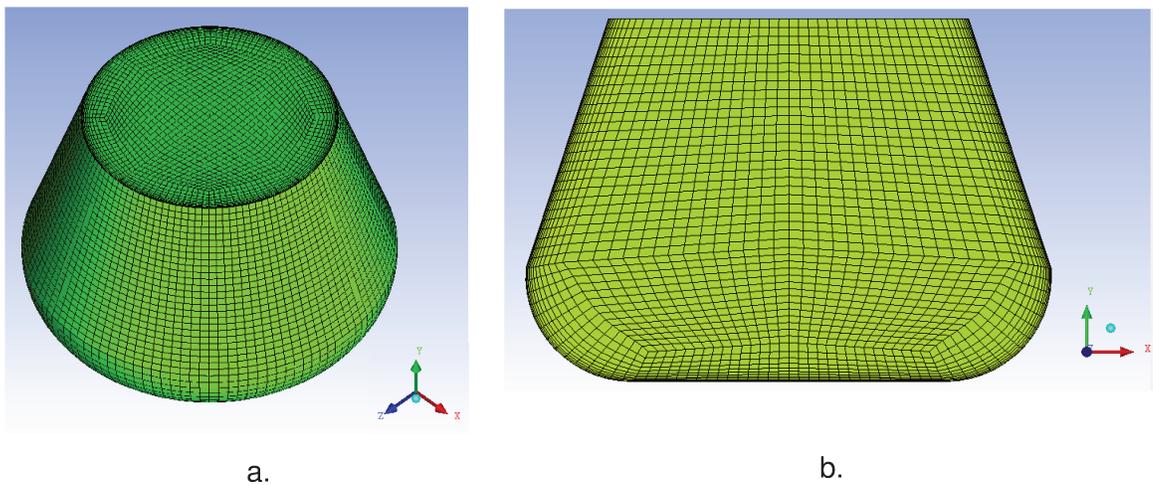


Figura 10. Malha hexaédrica vista isométrica (a); Corte transversal vista frontal (b).

A **Figura 10** ilustra a malha hexaédrica desenvolvida para o presente estudo com vista isométrica (**Figura 10 a.**) e uma vista frontal de um corte transversal (**Figura 10 b**)

4.2.3. Setup

4.2.3.1. Simulações do sistema bifásico ar-água: Validação do modelo.

O objetivo destas simulações é validar o modelo computacional com os dados experimentais apresentados por Büchs e colaboradores[10]. Para isto a distribuição do líquido no Erlenmeyer e a altura máxima atingida pelo líquido, dados que são obtidos experimentalmente são comparadas com os resultados numéricos.

Quatro casos foram simulados utilizando os mesmos valores de velocidade rotacional, quantidade de líquido carregada e diâmetro de rotação reportado por Büchs e colaboradores[10], essas variáveis de processo são apresentadas na Tabela 4

Tabela 4. Casos de estudo, validação do modelo.

Caso de estudo	Variável	Valor
Caso 1.	Velocidade angular	250 rpm
	Quantidade de Líquido	25 ml
	Diâmetro rotacional	5 cm
Caso 2.	Velocidade angular	150 rpm
	Quantidade de Líquido	25 ml
	Diâmetro rotacional	5 cm
Caso 3.	Velocidade angular	250 rpm
	Quantidade de Líquido	10 ml
	Diâmetro rotacional	5 cm
Caso 4.	Velocidade angular	250 rpm
	Quantidade de Líquido	25 ml
	Diâmetro rotacional	2,5 cm

Condições iniciais, de contorno, modelos utilizados, propriedades dos fluidos e demais informações da configuração do setup são apresentados em detalhe na próxima seção.

4.2.3.2. Simulação do sistema bifásico ar-água.

Nestas simulações a velocidade rotacional e a carga inicial de líquido foram variadas para estudar o seu efeito nas variáveis de resposta. Para as velocidades os valores escolhidos foram: 100 rpm, 150 rpm, 200 rpm e 250rpm; e os valores para a carga inicial de água foram: 15 ml, 25 ml, e 35 ml. O diâmetro do agitador orbital foi fixado em 5 cm.

As propriedades para o ar são: Densidade $1,185 \text{ [kg m}^{-3}\text{]}$, viscosidade $1,831 \times 10^{-5} \text{ [Pa s]}$; e para a água: massa específica $1000 \text{ [kg m}^{-3}\text{]}$, viscosidade $0,001 \text{ [Pa s]}$, a tensão superficial entre os dois líquidos é $0,072 \text{ [N m]}$

As configurações gerais do domínio, as condições de contorno e as condições iniciais utilizadas nestas simulações são apresentadas na **Tabela 5**, **Tabela 6** e **Tabela 7** respectivamente.

Tabela 5. Configurações do domínio virtual.

Tipo de análise	Transiente: 5 [s]	
Tipo de domínio	Estacionário	
Materiais		
Fluido do domínio	Ar	Fluido contínuo
	Água	Fluido contínuo
Configurações		
Modelo de flotação	Ativo	
	Densidade de referencia	$1.185 \text{ [kg m}^{-3}\text{]}$
	Gravidade	$-9.8 \text{ [m s}^{-2}\text{]}$ Em direção -y
Deformação da malha	Regiões de movimento especificado	
Pressão de referencia	1 [atm]	
Modelo multifásico	Modelo homogêneo	
Modelo de turbulência	SST	
Função de parede	Automática	

Tabela 6. Configurações condições de contorno, * a (diâmetro do agitador orbital [cm]), ω (velocidade angular [rpm]), t (tempo [s]).

Condição de contorno tipo	Parede	
Massa e momento	Parede sem deslizamento	
Movimento da malha	Deslocamento especificado	
	Deslocamento	Coordenadas cartesianas.
	Componente do deslocamento em x	$a \cdot \text{sen}(\omega t)$ [m]*
	Componente do deslocamento em y	0 [m]
	Componente do deslocamento em z	$-a \cdot \text{cos}(\omega t)$ [m]*
Rugosidade da parede	Parede lisa.	

Tabela 7. Condições iniciais.

Tipo de velocidade	Coordenadas cartesianas	
Componentes da velocidade	Componente da velocidade em x	0 [m s ⁻¹]
	Componente da velocidade em y	0 [m s ⁻¹]
	Componente da velocidade em z	0 [m s ⁻¹]
Pressão	Pressão hidrostática	

Tabela 8. Número de Reynolds para as diferentes velocidades rotacionais.

N	Re
100	10.520
150	15.780
200	21.040
250	26.300

Um tempo de simulação de cinco segundos foi escolhido para garantir que os perfis de velocidade, a distribuição do líquido estejam totalmente desenvolvidos. Os resultados das simulações são tomados das últimas iterações.

Neste trabalho foi escolhido o modelo de turbulência SST (*Shear Stress Transport*), graças a que sua abordagem mista entre os modelos $k - \omega$ e $k - \varepsilon$, oferece bons resultados na estimativa das variáveis de interesse, perto da parede e no seio do fluido. Outro fator pelo qual este modelo foi escolhido é que os valores de número de

Reynolds calculados para as condições de operação que caracterizam o fluxo escoamento no Erlenmeyer estão na faixa de 10500 e 26300 (ver Tabela 8), e segundo Tan Rung-Kai e colaboradores[14] o escoamento atinge um regime totalmente turbulento acima de Reynolds de 50000. Devido a esse fato, pelo qual não seria aconselhável a utilização do modelo o $k - \varepsilon$, pois o mesmo foi desenvolvido para escoamentos altamente turbulentos.

O esquema de interpolação escolhido foi o esquema de alta ordem (*High resolution*). Este esquema oferece bons resultados e boa estabilidade numérica, o passo de tempo foi fixado em 0,001 [s], para a interpolação transiente é utilizado o método de Euler de segunda ordem (*Second Order Backward Euler*) graças a que é robusto, e reduz a difusão numérica que apresenta o esquema de primeira ordem.

Em toda simulação numérica um critério de convergência tem que ser definido pelo usuário, este valor é relativo a o erro numérico que é assumido como aceitável pelo usuário, como critério de convergência foi selecionado um valor de 1×10^{-4} .

4.3. SOLUÇÃO

Nesta etapa o *solver* aplica o método numérico para obter a solução ao projeto definido no Pré-processamento, em Ansys CFX 14 o método numérico utilizado é o método dos volumes finitos.

Dependendo da complexidade particular do problema, tamanho da malha, passo de tempo, critério de convergência, etc. Esta etapa pode demandar um alto custo computacional, que em outras palavras quer dizer, tempos de processamento altos. Durante este período é possível acompanhar a solução com os monitores dos resíduos numéricos ou também com monitores pré-definidos pelo usuário das variáveis de interesse.

A **Figura 11** apresenta os monitores RMS para uma simulação transiente. O tempo computacional simulado é de cinco segundos. Nas primeiras iterações a convergência de 1×10^{-4} não é atingida, isto é devido as condições iniciais o campo de

velocidades terem um valor de zero. Mas uma vez que a simulação avança, a convergência é atingida e mantida ao longo da simulação. No pós-processamento o resultados das simulações são extraídos das últimas iterações, em que o campo de velocidade, perfil do líquido, e os perfis de outras grandezas de interesse estão plenamente desenvolvidos.

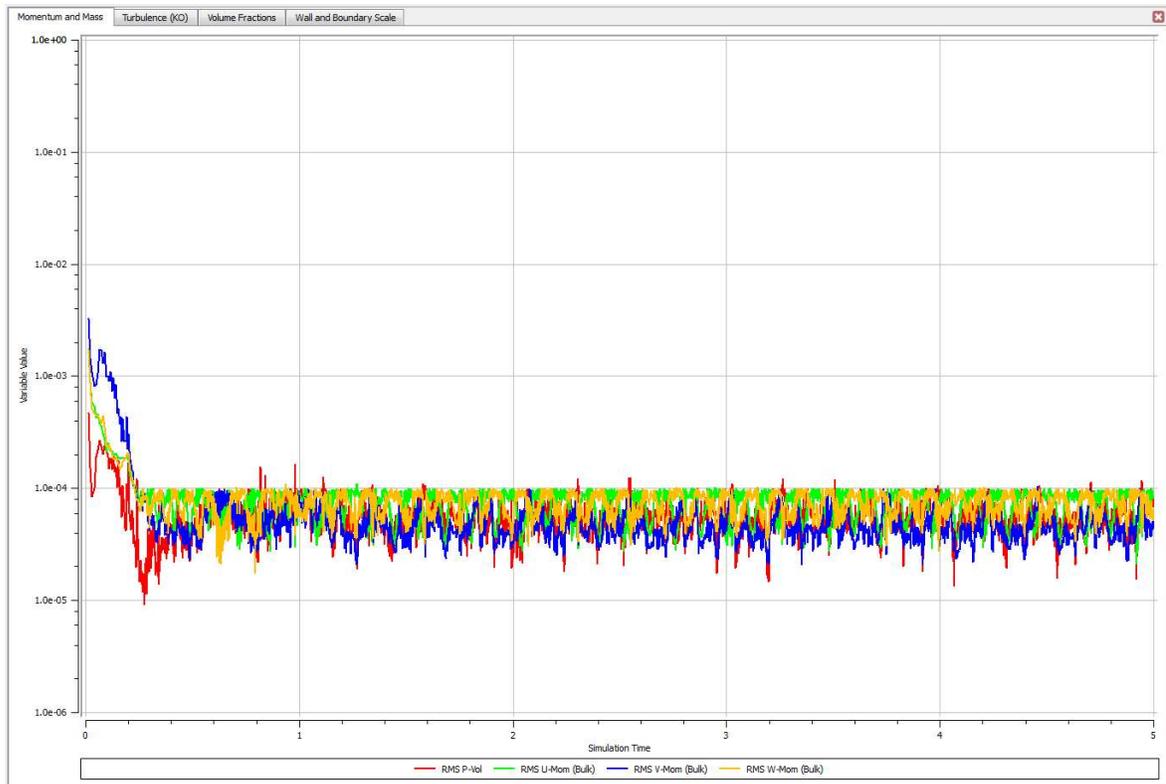


Figura 11. Monitores RMS, simulação transiente sistema bifásico Ar-Água.

4.4. PÓS-PROCESSAMENTO

Nesta etapa os resultados gerados pela simulação do problema são analisados. Para isto as ferramentas de visualização, próprias do software Ansys CFX Post-CFD são utilizados.

Nesta etapa, são apresentados o teste de malha, a validação do modelo e os resultados para os casos de estudo propostos. Esses resultados são apresentados no seguinte capítulo.

CAPÍTULO V

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo apresentam-se os resultados e a sua análise correspondente. O capítulo está subdividido em três seções principais, correspondentes aos resultados dos testes de independência de malha, a validação do modelo e os casos de estudo propostos.

5.1. TESTE DE INDEPENDÊNCIA DE MALHA

Uma solução em fluidodinâmica computacional tem que ser independente do tamanho da malha. Testes de independência de malha são desenvolvidos para atingir este requerimento. No presente trabalho para o teste de malha a altura máxima atingida pelo líquido foi escolhida como variável. Este teste consiste em estudar uma variável como com varias densidades de malha. A densidade da malha é aumentada gradativamente até que a variável de resposta seja estável.

No presente trabalho para o teste de independência de malha foram utilizadas cinco malhas. As densidades de cada malha são apresentadas na **Tabela 9**. No Ansys ICEM 14 para malhas hexaédricas um parâmetro importante é o parâmetro chamado *qualidade*, é um valor numérico na faixa de 0-1, com 0 a qualidade é nula e com 1 é máxima. O mínimo recomendado é 0,5, todas as malhas testadas atingiram este parâmetro de qualidade.

Tabela 9. Malhas testadas

Malha	Volumes de controle	Qualidade
Malha 1	45760	0,569 min 0,984 máx.
Malha 2	52704	0,567 min 0,984 máx.
Malha 4	64116	0,576 min 0,983 máx.
Malha 5	74776	0,602 min 0,983 máx.
Malha 7	98700	0,615 min 0,984 máx.

As **Figura 12** a **Figura 16** apresentam uma vista isométrica, lateral e superior das diferentes malhas testadas. Para testar as malhas, foi utilizada a variação da altura máxima atingida pelo líquido quando os perfis estão plenamente desenvolvidos.

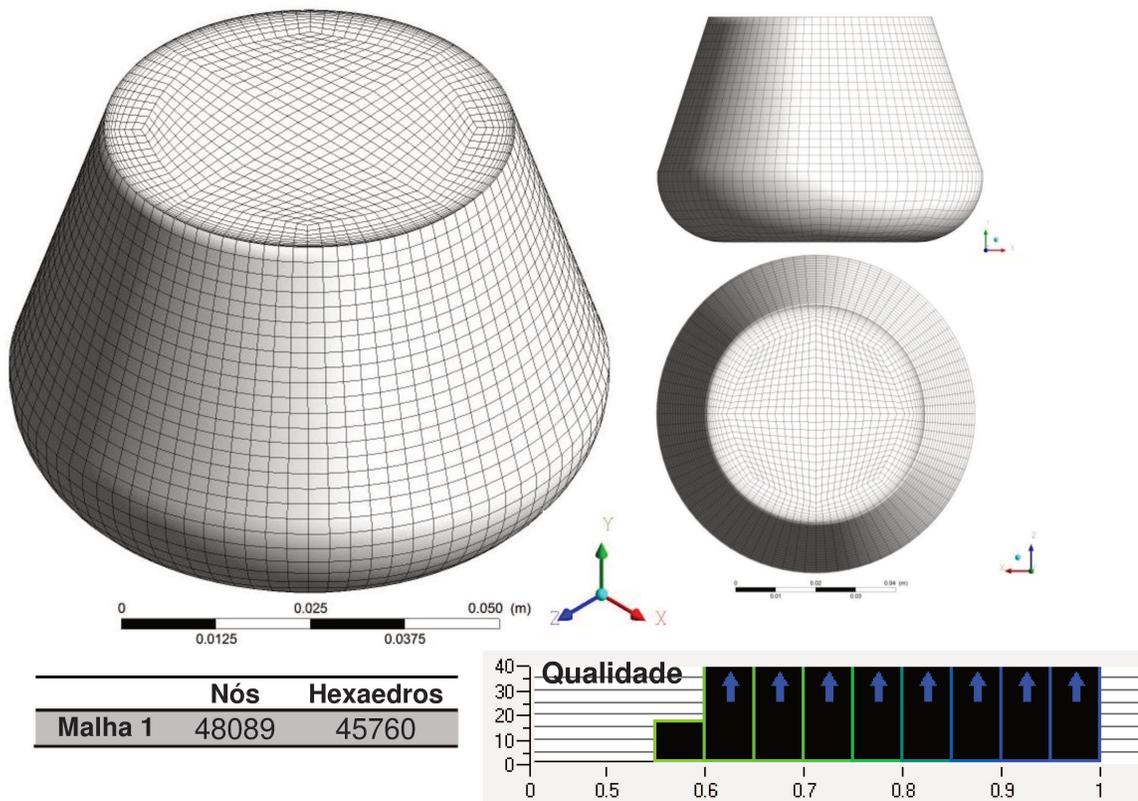


Figura 12. Malha Hexaédrica 1

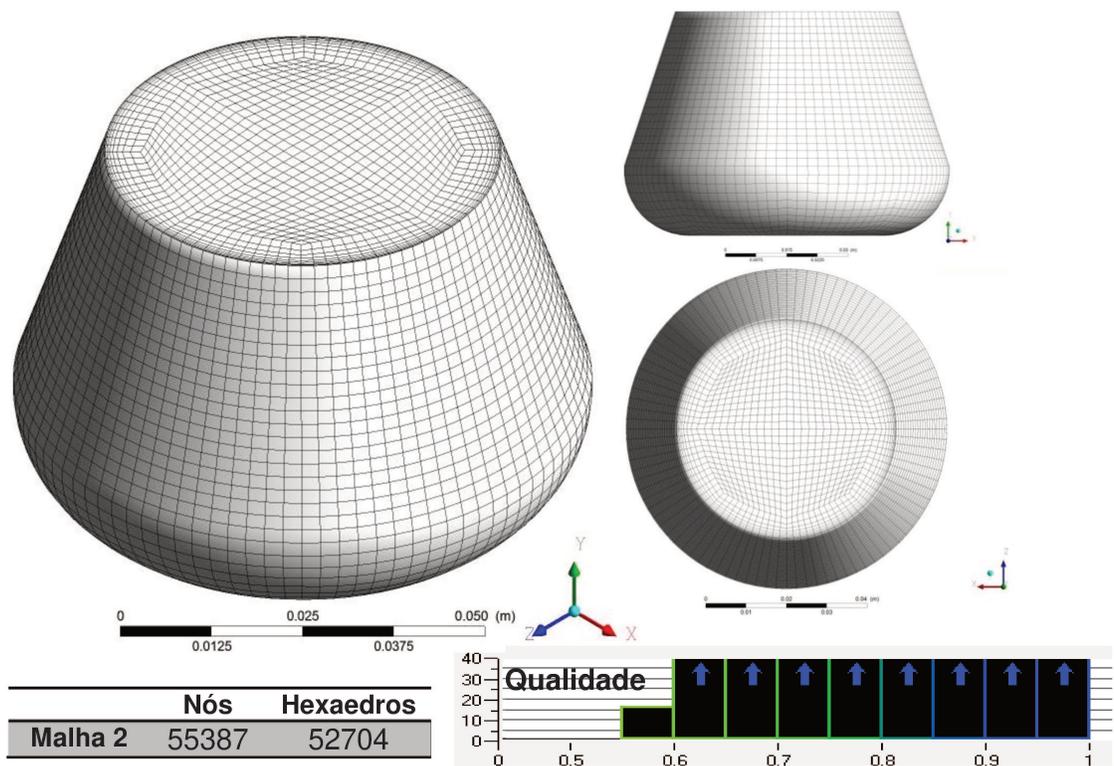


Figura 13. Malha Hexaédrica 2.

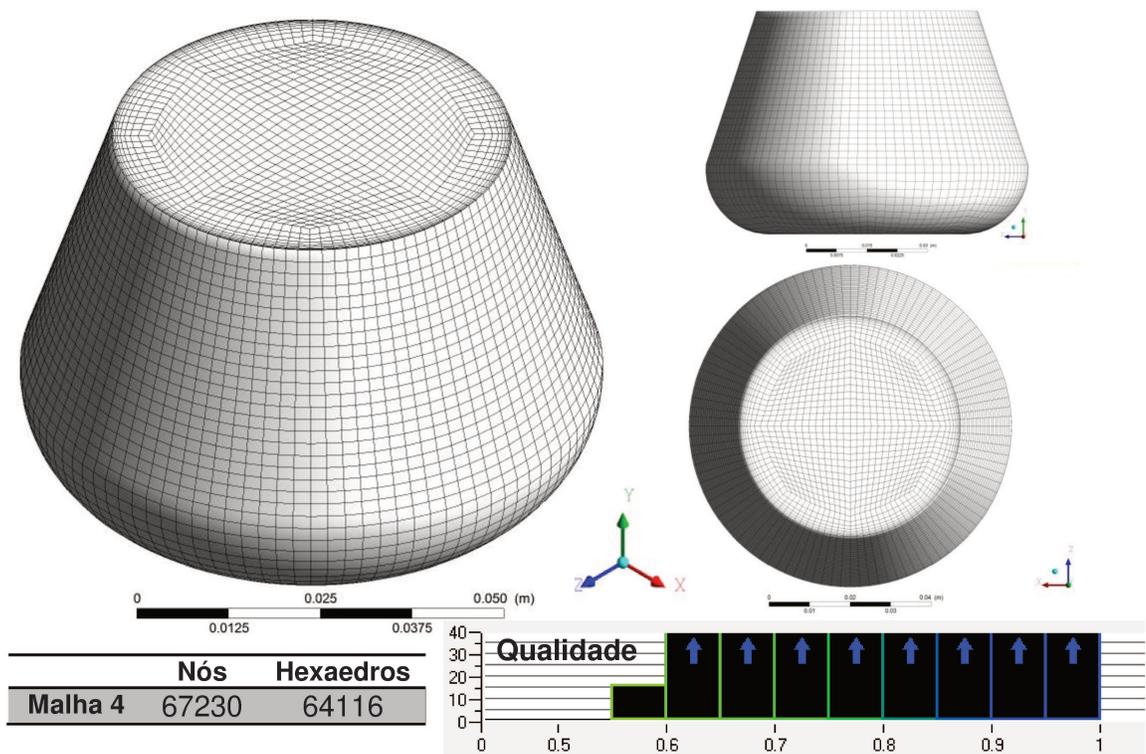


Figura 14. Malha Hexaédrica 3.

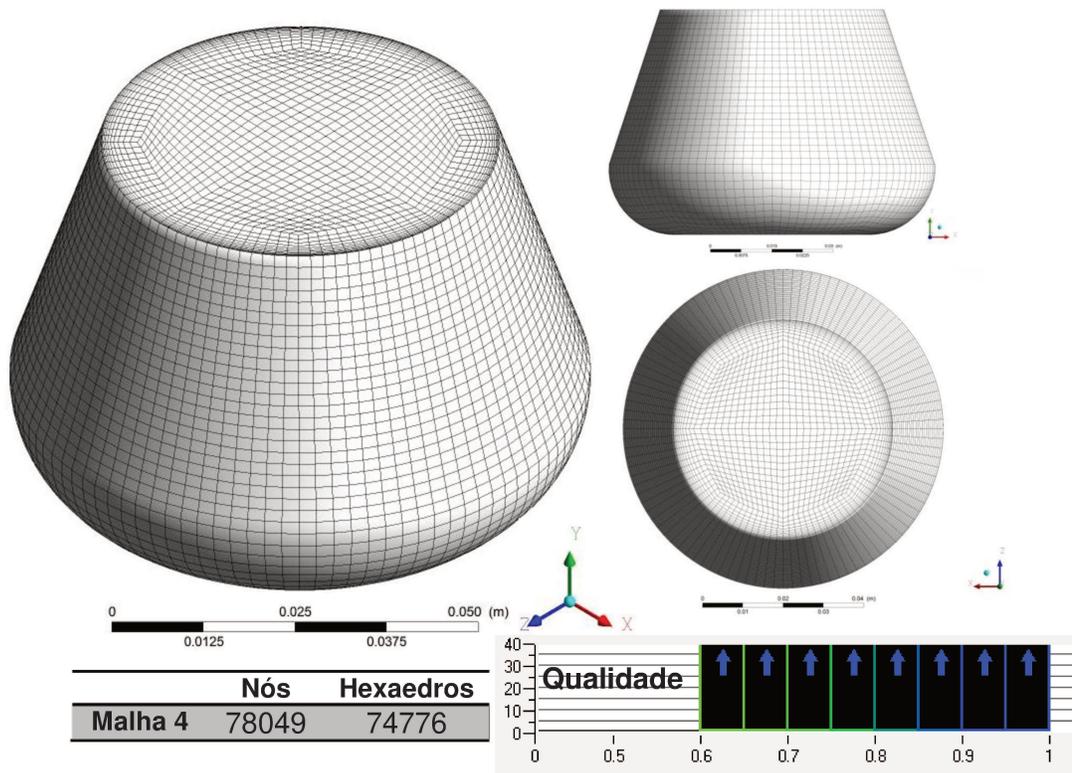


Figura 15. Malha Hexaédrica 4.

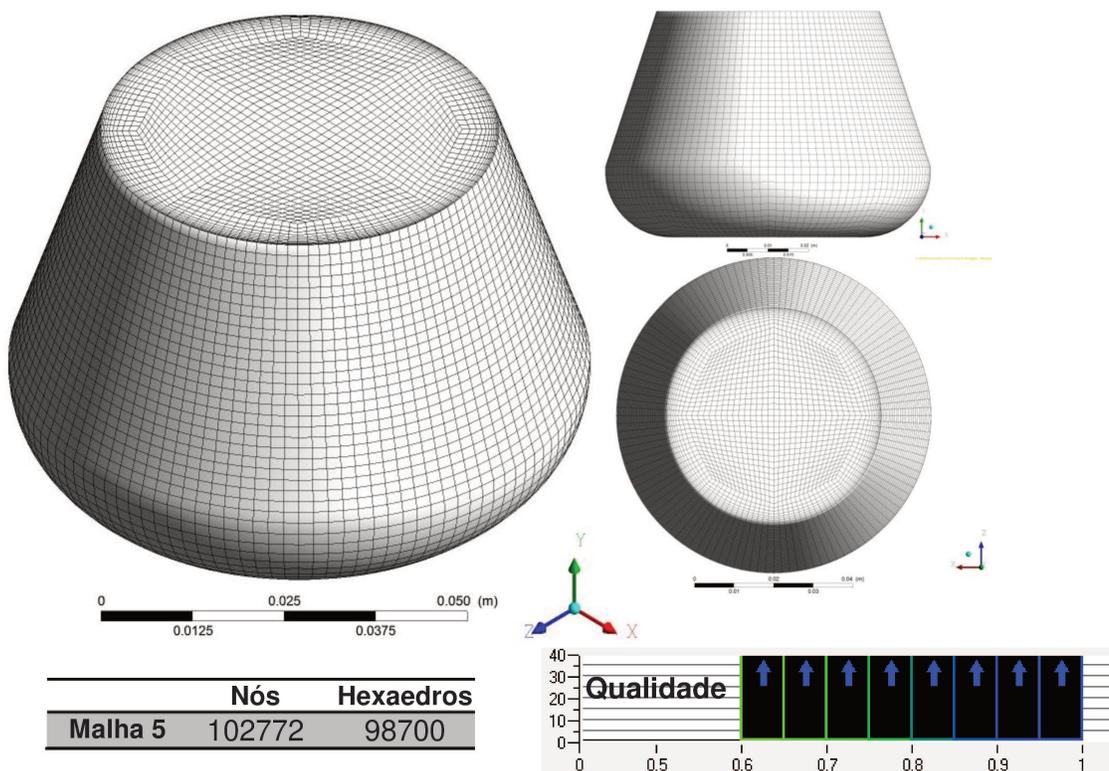


Figura 16. Malha Hexaédrica 5.

Testes independência de malha

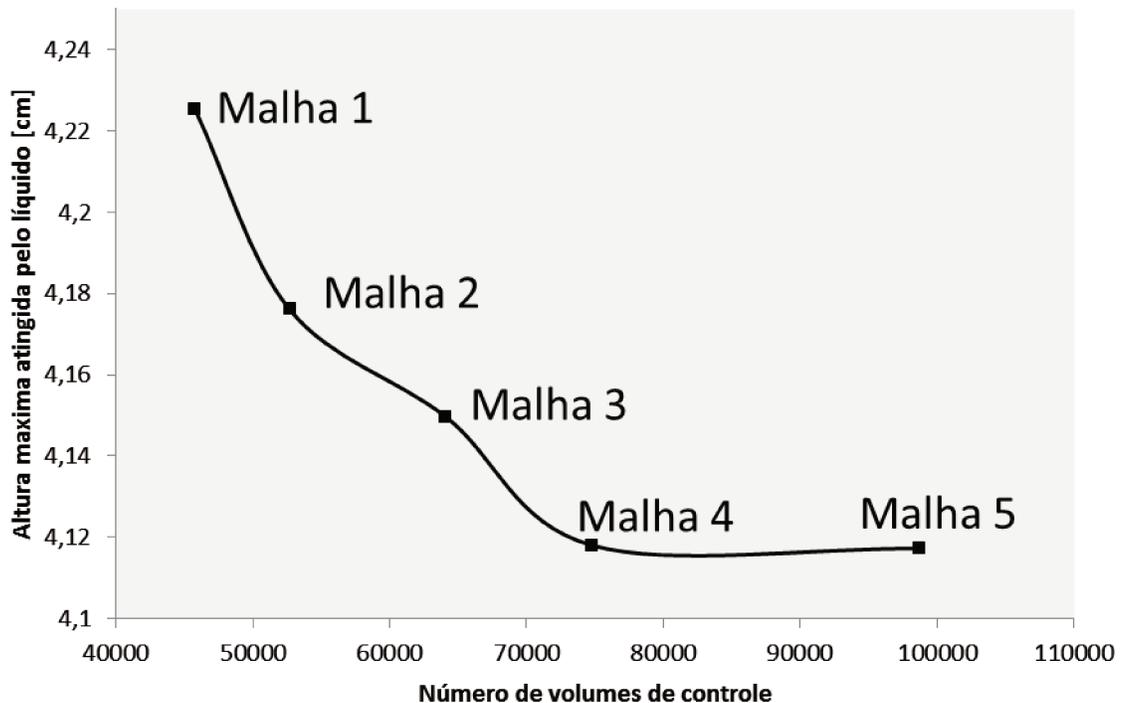


Figura 17. Resultados teste de malha.

Na Figura 17 foi plotado o parâmetro para medir a independência de malha, o parâmetro escolhido foi a altura máxima atingida pelo líquido em rotação em função do tamanho da malha. Pode-se visualizar que a altura máxima atingida pelo líquido praticamente não variou comparando a malha 3 e a malha 4, o que quer dizer que para estas duas simulações o tamanho da malha não influenciou nos resultados. Portanto esta malha foi escolhida para a realização das simulações.

5.1.1. Estimativa do y^+

A malha empregada neste estudo tem um refinamento nos elementos da parede para manter o y^+ em um valor aceitável. A **Figura 18** mostra a estimativa do y^+ na

parede do Erlenmeyer para o caso com a velocidade maior. Assim obtém-se a estimativa do y^+ para o caso mais restritivo.

Para muitos escoamentos em processos industriais, o requerimento de $y^+ < 2$ é excessivo e não pode ser satisfeito na maioria dos casos. O modelo de turbulência utilizado neste trabalho permite utilizar valores para o y^+ em uma ampla faixa ($0,2 < y^+ < 100$), sem comprometer a exatidão dos resultados[20]. No presente estudo um valor médio de 5,77 foi obtido para o caso da maior velocidade. Este valor é ainda um valor baixo e garante um cálculo aproximado aceitável.

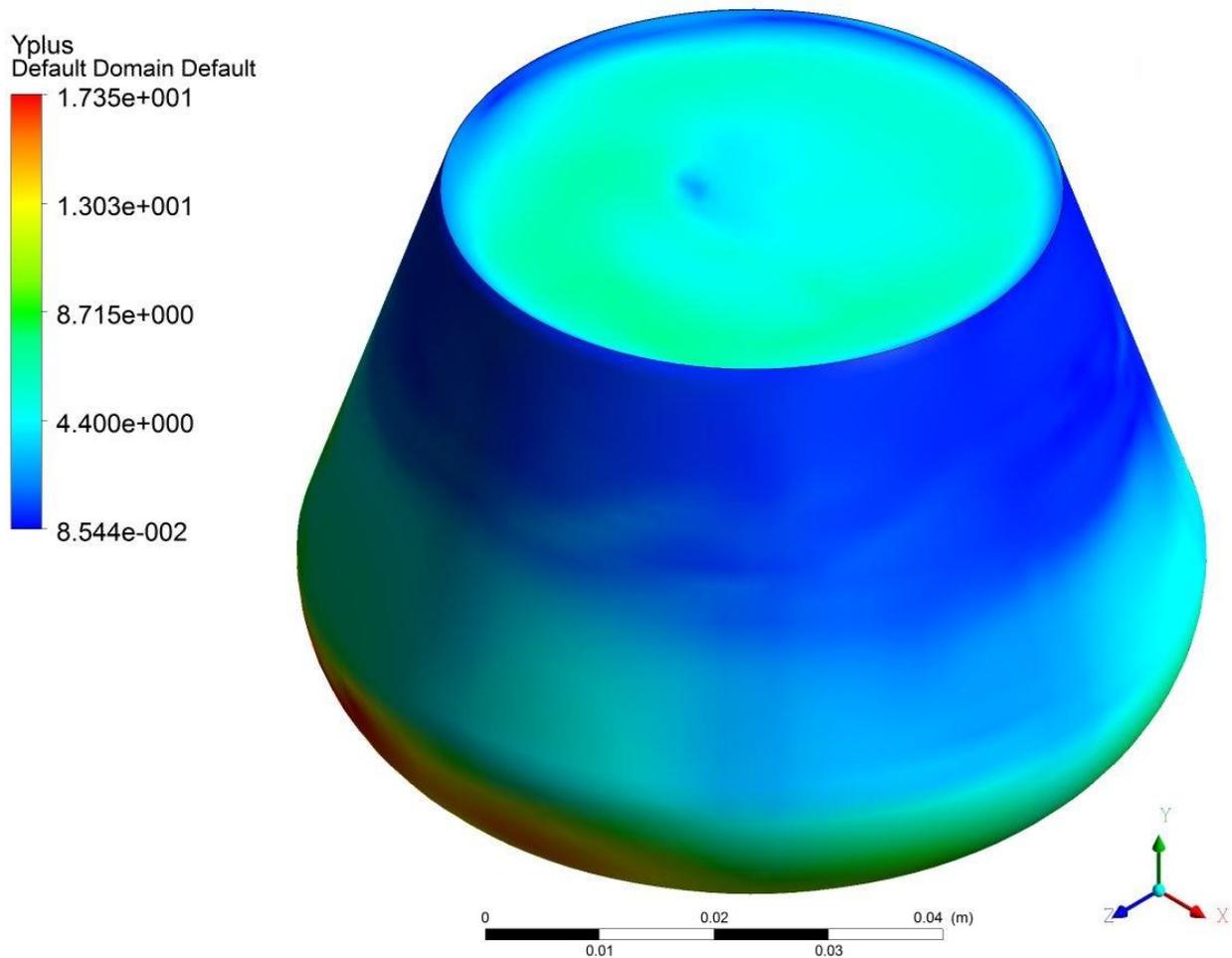


Figura 18 Estimativa do y^+ .

5.2. VALIDAÇÃO DO MODELO.

A força centrífuga gerada pela rotação empurra o líquido contra as paredes do Erlenmeyer. A quantidade de líquido, a velocidade e raio de rotação influenciam a distribuição e a forma do líquido em rotação. Com o objetivo de validar o modelo computacional foram desenvolvidas quatro simulações com as condições apresentadas na Tabela 4. Estas condições são correspondentes às utilizadas por Büchs e colaboradores[10]. A altura máxima atingida pelo líquido e a distribuição do líquido no interior do Erlenmeyer nas simulações (**Figura 19 A**, **Figura 20 A**, **Figura 21 A** e **Figura 22 A**) foram comparadas com os resultados experimentais (**Figura 19 B**, **Figura 20 B**, **Figura 21 B**, **Figura 22 B**). Os resultados experimentais foram lidos com ajuda da aplicação *WebPlotDigitizer*, de código aberto disponível na internet para o navegador *Google Chrome*. Esses resultados são apresentados a seguir.

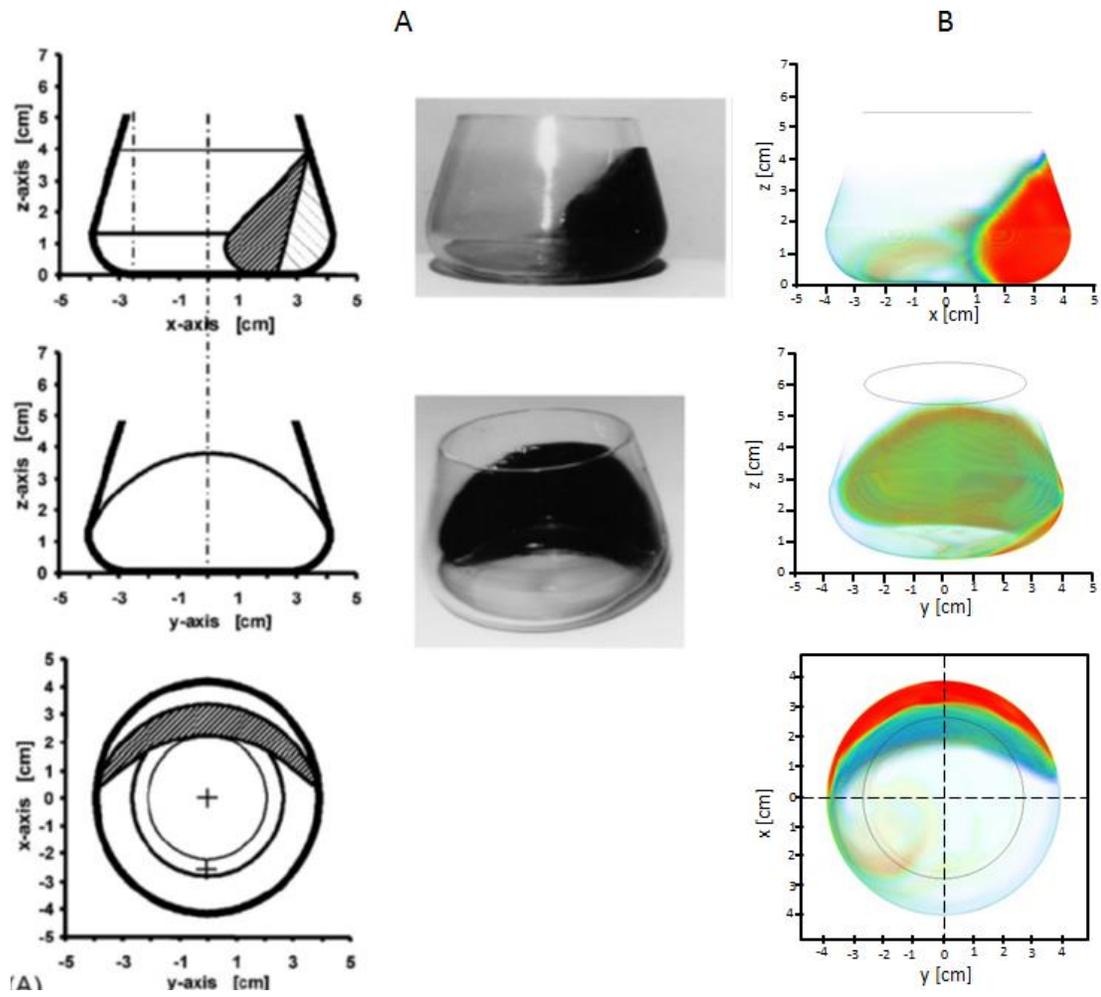


Figura 19. Comparação entre os resultados experimentais e CFD. (A) e os previstos pela simulação CFD (B), Condições: VL= 25 ml, N= 250 rpm, d0= 5cm.

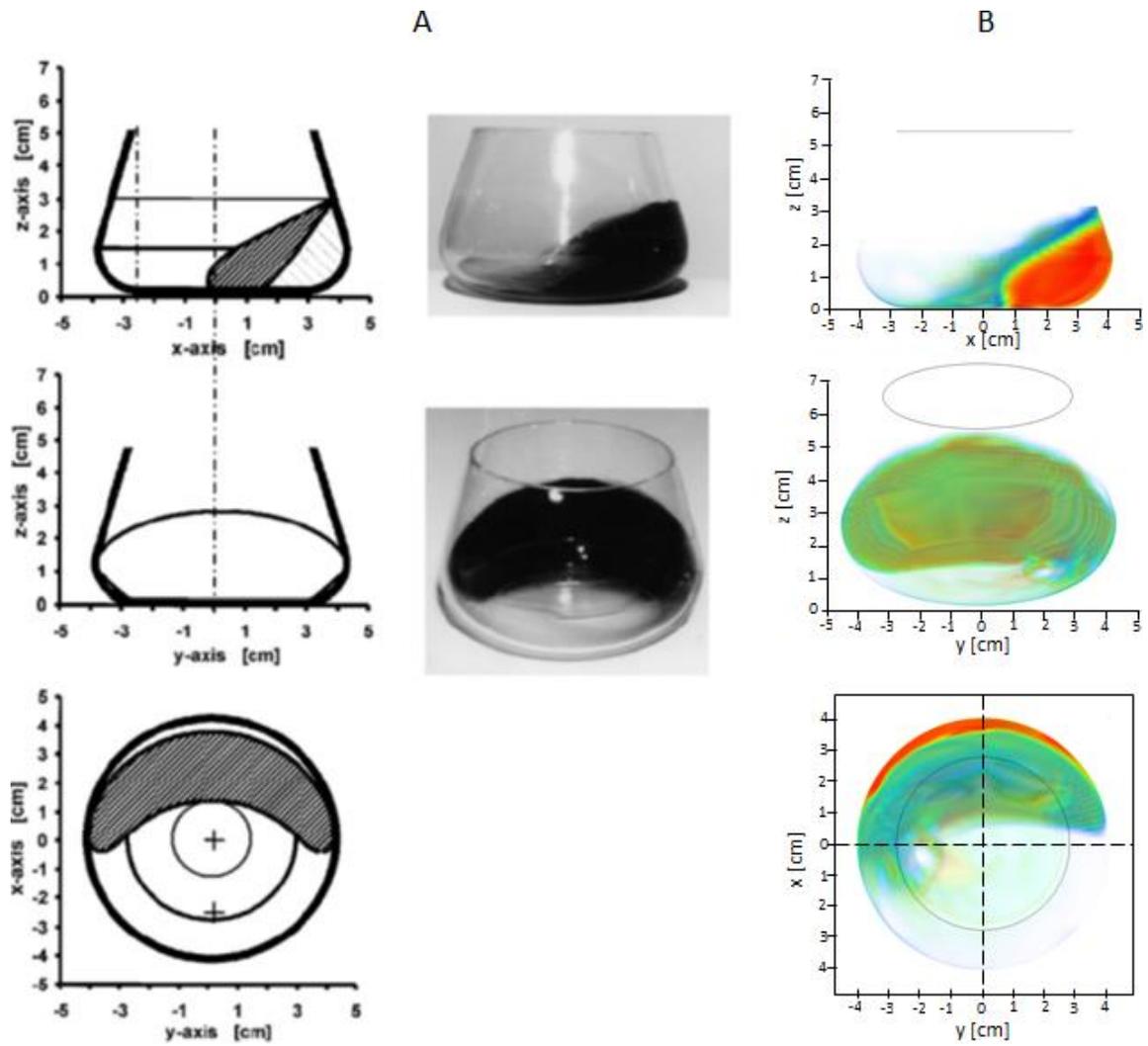


Figura 20. Comparação entre os resultados experimentais e CFD (A) e os previstos pela simulação CFD (B), Condições: VL= 25 ml, N= 150 rpm, d0= 5cm.

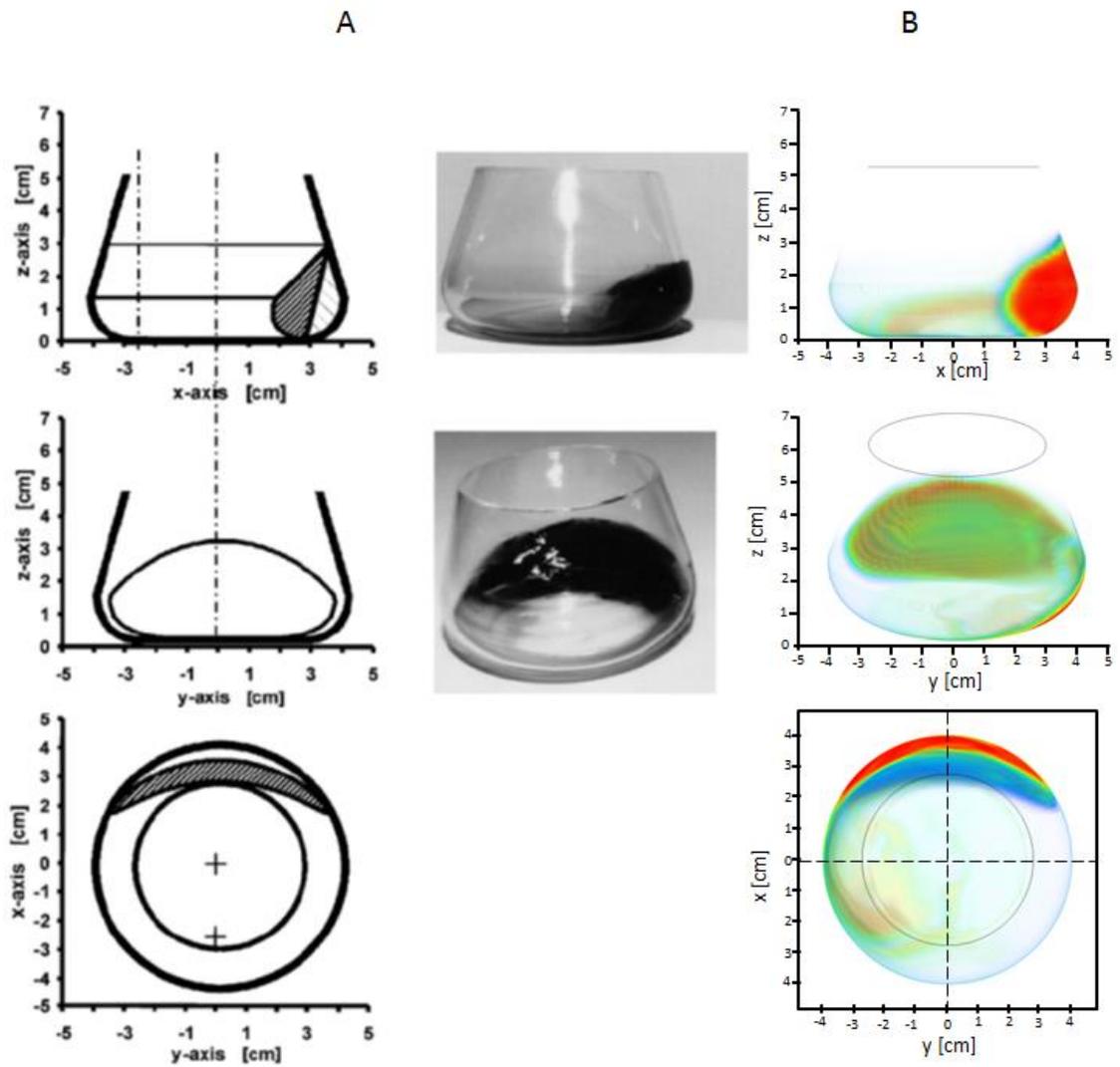


Figura 21. Comparação entre os resultados experimentais e CFD. (A) e os previstos pela simulação CFD (B), Condições: VL= 10 ml, N= 250 rpm, d0= 5cm.

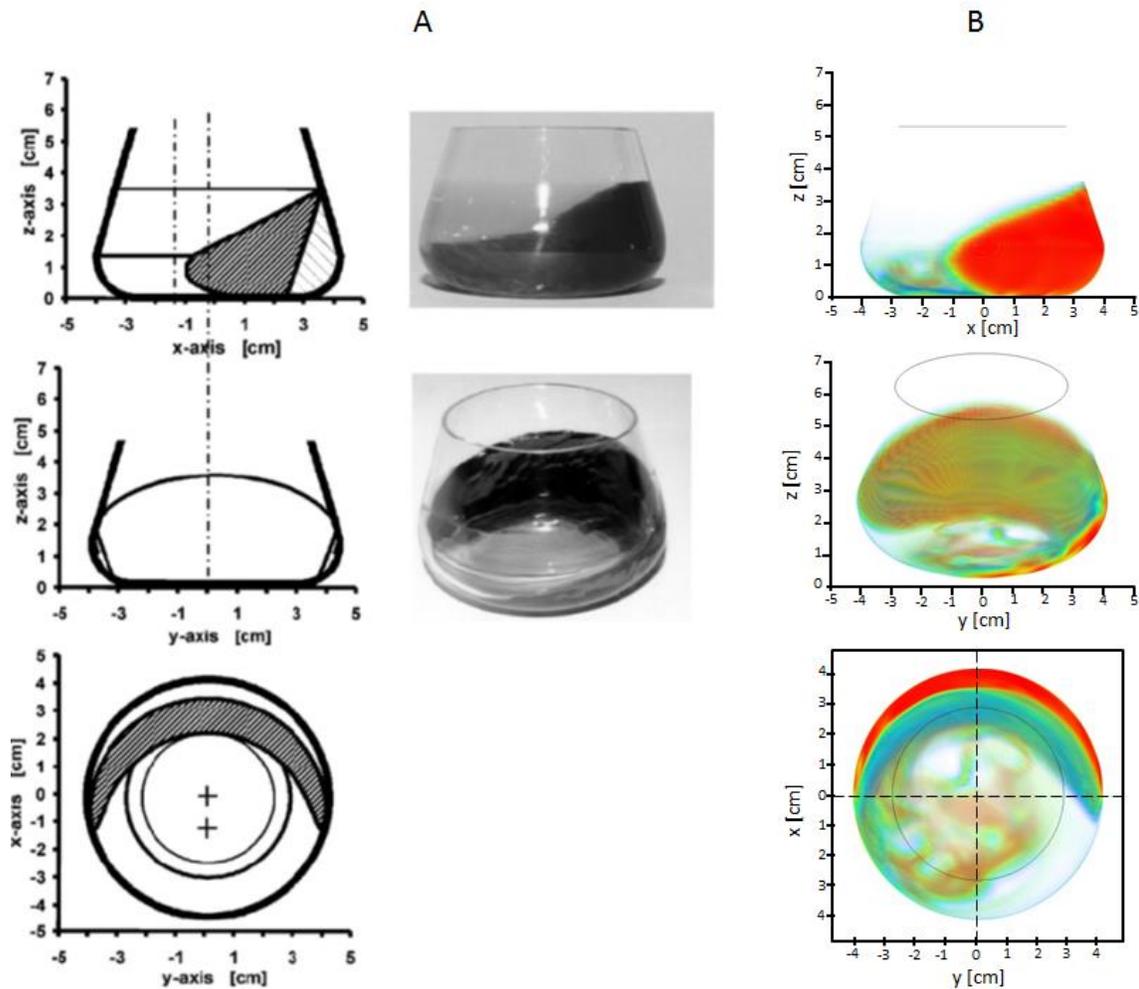


Figura 22. Comparação entre os resultados experimentais e CFD. (A) e os previstos pela simulação CFD (B), Condições: VL= 25 ml, N= 250 rpm, d0= 2,5cm.

A **Figura 19** apresenta os resultados para as condições operacionais padrão mais comumente utilizadas neste tipo de experiências. Já as figuras seguintes (**Figura 20** a **Figura 22**) apresentam variações nessas condições, uma de cada vez. Nesses experimentos a velocidade rotacional, o volume de líquido e o diâmetro rotacional foram mudados. Essas condições afetam a forma em que o líquido é distribuído no interior do Erlenmeyer, e conseqüentemente a altura máxima atingida pelo líquido. Velocidades altas, diâmetros maiores e uma quantidade de líquido maior geram um perfil de líquido

mais alto, do mesmo modo, menor quantidade de líquido, um diâmetro de rotação e velocidade menor geram um perfil mais baixo.

Esse mesmo comportamento foi evidenciado tanto nos resultados experimentais como nas simulações; pode ser observado que existe uma boa concordância quando comparados esses perfis simulados com as fotografias, por quanto pode ser afirmado que o modelo computacional oferece uma boa representação do fenômeno físico real.

O modelo teórico, baseado na física proposto por Büchs e colaboradores[10], apresenta um perfil perfeitamente simétrico, devido às simplificações assumidas no desenvolvimento do modelo. Nesse sentido o modelo proposto neste trabalho, é uma melhora, já que apresenta um perfil não simétrico o que corresponde com o fenômeno real. Este perfil assimétrico é devido a uma combinação das forças inerciais e adesivas que afetam a fase líquida.

Na **Tabela 10** encontra-se a comparação entre a altura máxima atingida pelo líquido nos resultados experimentais e computacionais. Os resultados computacionais obtidos nas simulações tem um erro baixo, apresentam uma boa correspondência com os resultados experimentais. Pode-se afirmar que o modelo computacional é uma aproximação válida do modelo físico real.

Tabela 10. Comparação, máxima altura atingida pelo líquido.

	Altura máxima Atingida pelo líquido, Computacional. [cm]	Altura máxima Atingida pelo líquido, Experimental. [cm]	Diferença porcentual [%]
Caso 1 (Figura 5.6)	4,117	4,030	2,118
Caso 2 (figura 5.7)	3,119	2,977	4,553
Caso 3 (Figura 5.8)	3,176	2,970	6,480
Caso 4 (Figura 5.9)	3,501	3,480	0,588

5.3. ESTUDO DE CASOS PROPOSTO

Nesta seção, os resultados da influência da velocidade e da quantidade de líquido carregado na distribuição do líquido no interior do Erlenmeyer, a altura máxima atingida, e outras variáveis de interesse são apresentados.

5.3.1. Distribuição do líquido

A força centrífuga gerada pela rotação empurra a fase líquida contra as paredes internas do Erlenmeyer, espera-se que quanto maior seja a velocidade rotacional, maior a força centrífuga, o que faz que a fase líquida fique mais colada contra a paredes. Nesse caso a área de contato da fase líquida com o fundo do Erlenmeyer é também diminuída.

A **Figura 23** ilustra como a força centrífuga é afetada pela velocidade rotacional para cargas de líquido inicial de 15 ml (**Figura 23 A**), 25 ml (**Figura 23 B**) e 35 ml (**Figura 23 C**), os resultados computacionais mostram como efetivamente velocidades maiores geram uma força centrífuga maior, concordando com a física real do fenômeno.

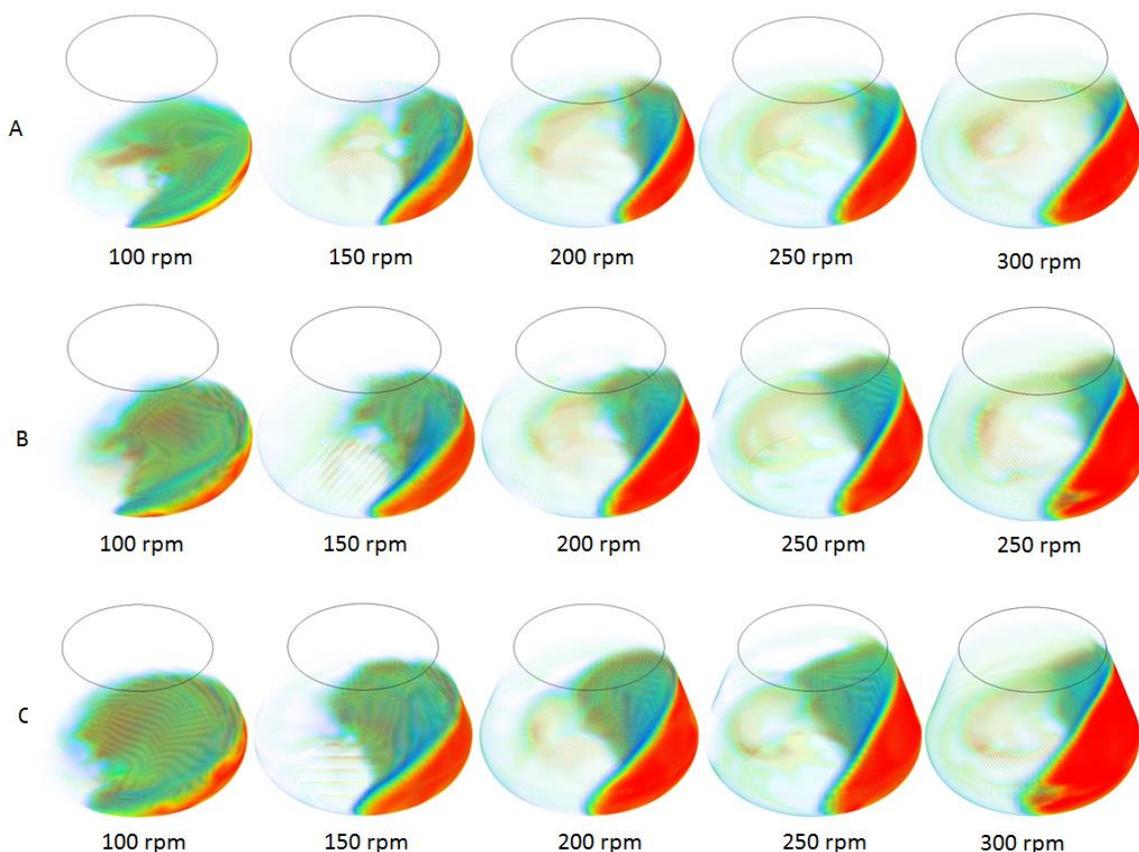


Figura 23. Distribuição do líquido no interior do Erlenmeyer a diferentes velocidades rotacionais, para 15 ml (A), 25 ml (B) e 35 ml (C) de carga inicial de líquido.

5.3.2. Tempo de estabilização

As simulações foram desenvolvidas em estado transiente. Cinco segundos foram simulados, partindo de um estado inicial em que a velocidade é zero. Na medida em que a simulação avança, o líquido atinge um estado periódico, em que a distribuição do líquido não muda de forma significativa, somente alternando a sua posição relativa dentro do Erlenmeyer. Para determinar o tempo em que este estado é atingido, foram desenhados três planos que cortam horizontalmente o domínio em 22mm, 16mm e 10mm de altura a partir do fundo do Erlenmeyer (ver Figura 24). Nesses planos foi calculada a fração volumétrica de líquido ao longo da simulação. Esses resultados são apresentados na **Figura 25**.

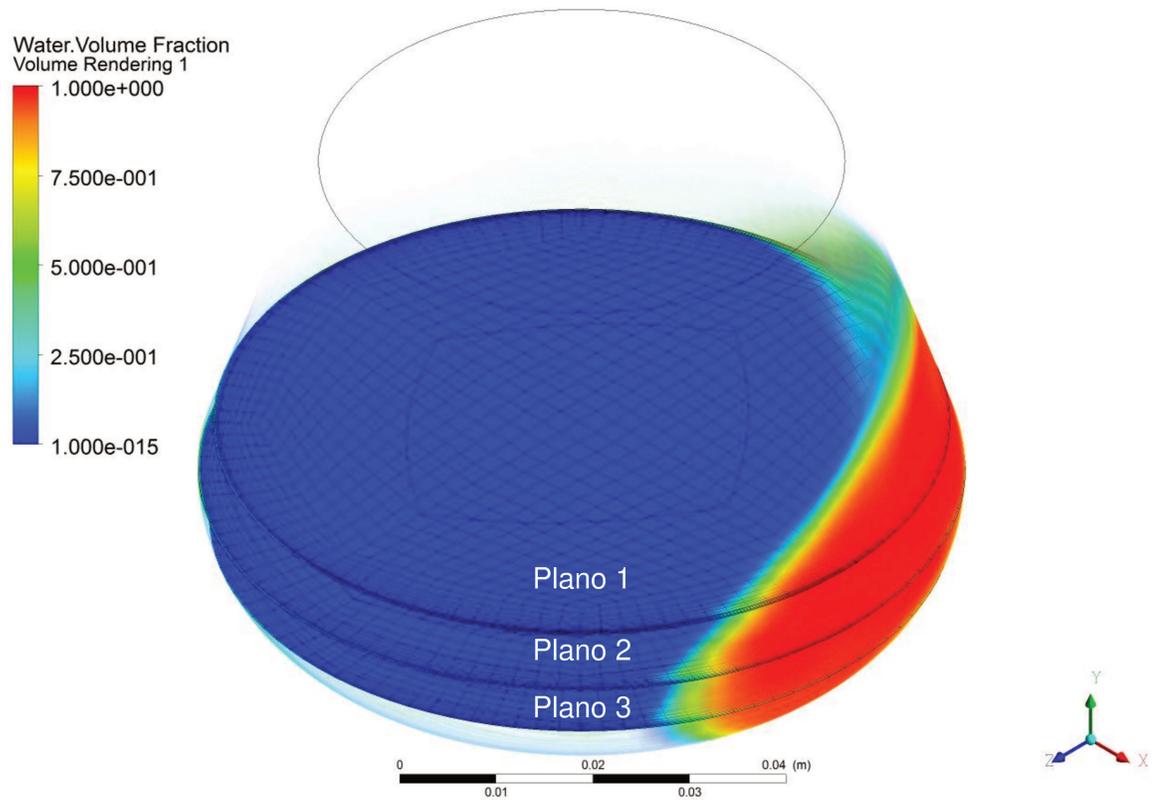


Figura 24. Estudo do tempo de estabilização, planos fração volumétrica.

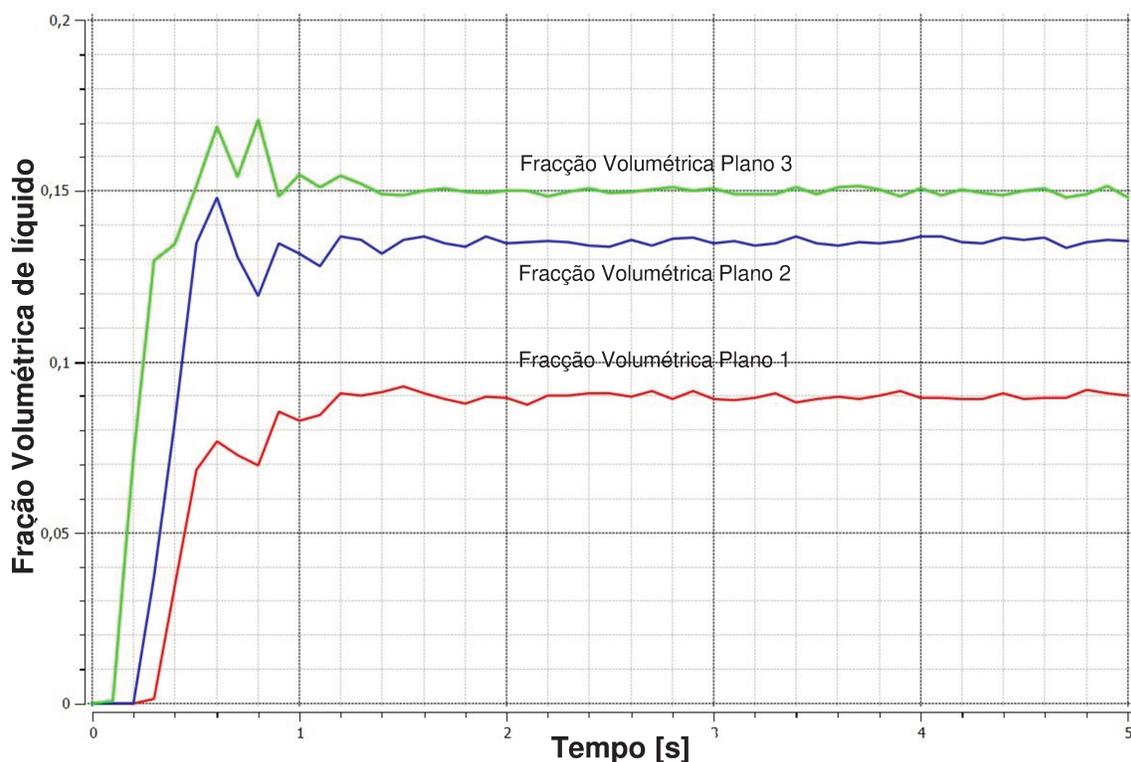


Figura 25 Fração volumétrica ao longo do tempo.

Espera-se que quando o escoamento do líquido esteja totalmente desenvolvido, a fração volumétrica de líquido em um plano horizontal também seja estável. Na **Figura 25** esta estabilidade é atingida plenamente em dois segundos. Depois de dois segundos a fração volumétrica de líquido fica estável ao longo da simulação.

5.3.3. Efeito do volume de líquido a velocidade rotacional na altura máxima.

Assim mesmo, a velocidade rotacional e a quantidade de líquido carregado afetam a altura máxima que atinge a fase líquida, a **Figura 26** ilustra este comportamento.

Um aumento em ambos, a velocidade e o volume de água gera um aumento altura máxima de líquido, conforme o esperado. No entanto, o incremento da altura máxima diminui a medida em que a velocidade rotacional aumenta. Isto se evidencia na diminuição da inclinação da curva. Este efeito é devido as limitações que impõe a geometria e a gravidade.

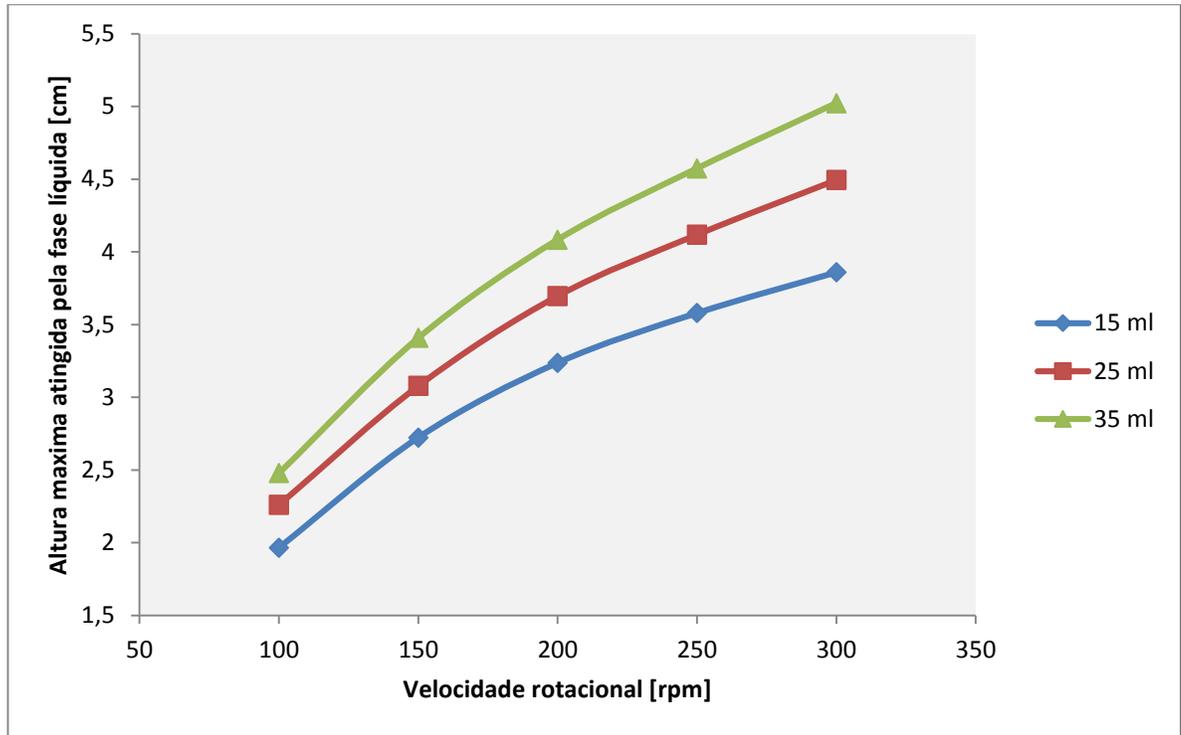


Figura 26. Efeito da quantidade de líquido carregado e velocidade rotacional na altura máxima atingida pela fase líquida.

5.3.4. Efeito do volume de líquido e a velocidade na área interfacial.

Em muitos processos biotecnológicos, a área disponível para a transferência de massa é de grande importância. Por exemplo, em processos onde a transferência de oxigênio controla a velocidade da reação. Essa transferência de massa está controlada em grande parte pela área interfacial entre a fase líquida e gasosa. Uma área interfacial maior ajuda a melhorar a transferência de massa.

A **Figura 27** ilustra como a velocidade rotacional e a quantidade de líquido carregado afeta a área interfacial disponível para a transferência de massa. Sendo que a inclinação nestas curvas é menor quando comparadas com a Figura 26, o que indica que a velocidade rotacional tem uma influência menor na área interfacial do que na altura máxima. Aliás a inclinação diminui para velocidades rotacionais maiores. Em

outras palavras, o ganho em área disponível para a transferência de massa quando se muda a velocidade rotacional de 200 rpm a 250 rpm não é significativo. Por outro lado a quantidade de líquido carregado tem uma influência maior nesta variável, para processos que demandem uma grande transferência de massa, o processo pode ser melhorado aumentando o volume da mistura em reação.

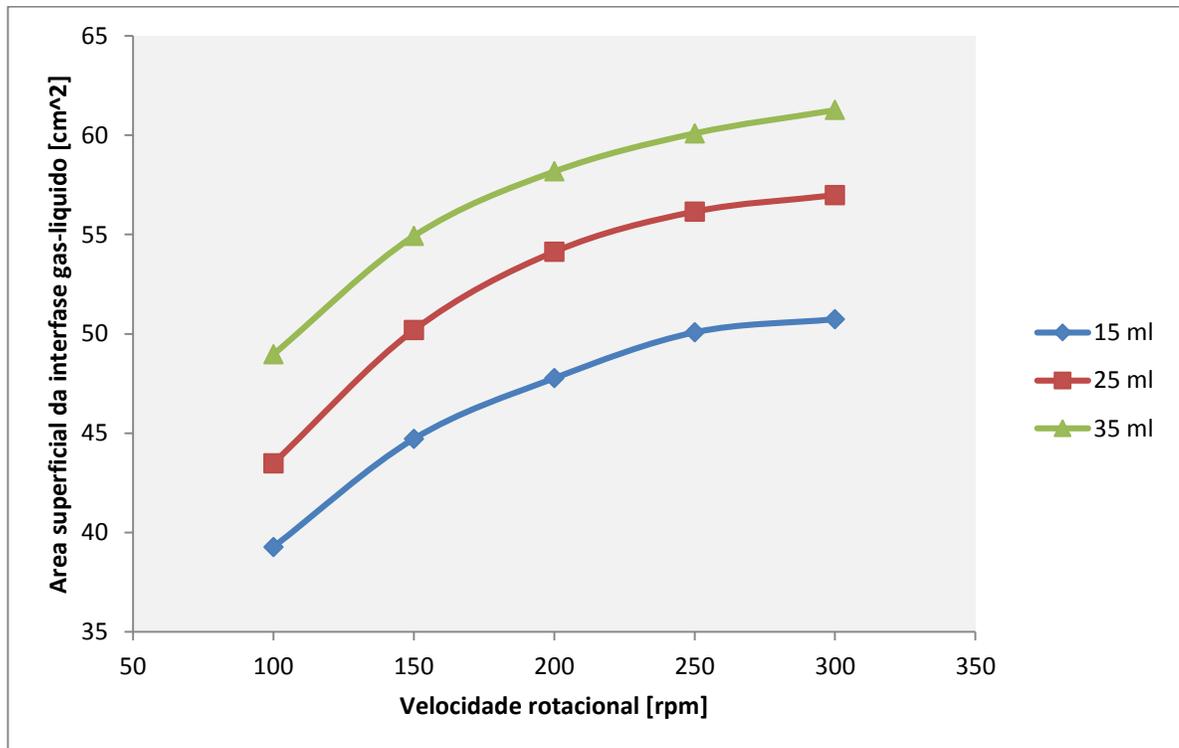


Figura 27. Efeito da quantidade de líquido carregado e velocidade rotacional na área interfacial.

5.3.5. Taxa de dissipação turbulenta

A taxa da dissipação turbulenta refere-se à taxa em que as flutuações da velocidade são dissipadas, tem dimensões de L^2T^{-3} , por exemplo $[m^2 s^{-3}]$. A **Figura 28** apresenta a taxa de dissipação média da turbulência em função do volume de líquido e a velocidade. Esta figura indica que um incremento no volume de líquido carregado e na velocidade, incrementa também a taxa de dissipação de energia

turbulenta em grande medida. No entanto, a influência da velocidade em dito parâmetro é muito maior.

Ao incrementar a velocidade de rotação, a potência introduzida no sistema também é incrementada. Esta energia adicional é principalmente dissipada pela colisão entre as micelas no fluxo turbulento. Conforme esperado a **Figura 28** está apresentando este comportamento, a taxa de dissipação de energia turbulenta depende em grande medida da velocidade.

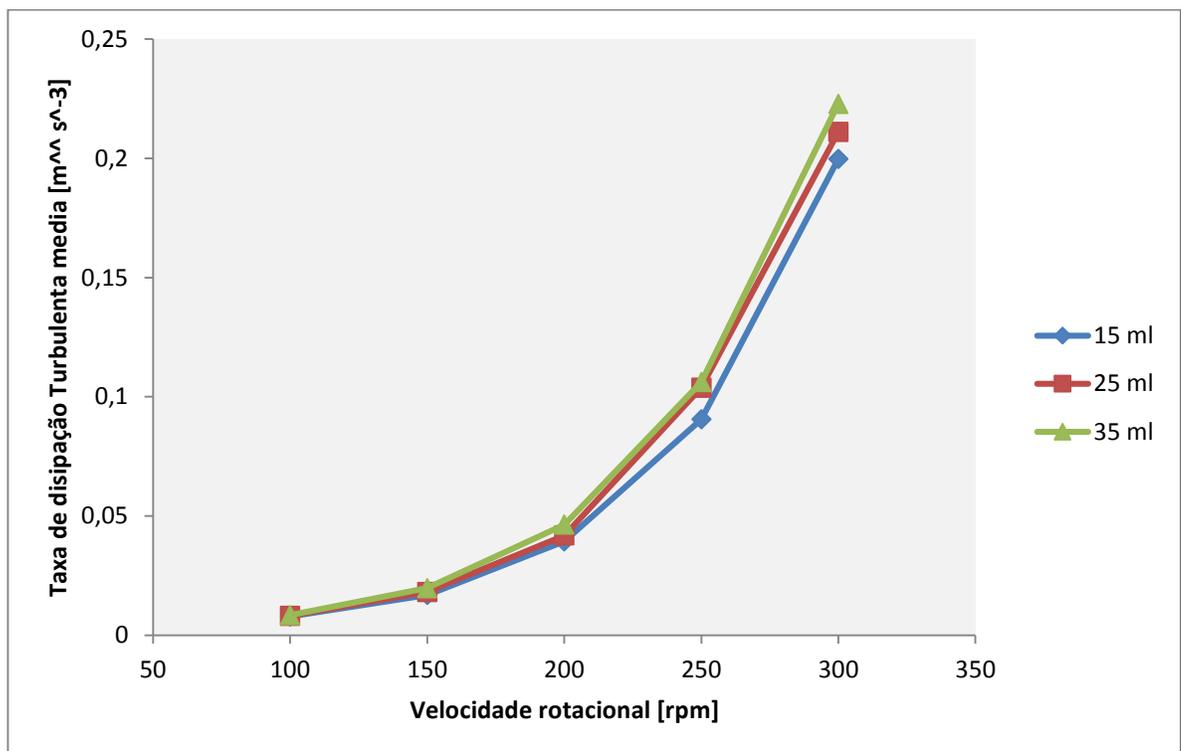


Figura 28 Taxa de dissipação turbulenta média em função da velocidade e o volume de líquido.

CAPÍTULO VI

6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Como resultado dos testes de malhas desenvolvidos para achar uma malha com boa qualidade, a um custo computacional razoável, foi obtida uma malha de 74776 volumes de controle. Essa malha tem um refinamento perto da parede para capturar os efeitos de película. Devido ao este refinamento, um y^+ de 5,77 foi obtido para o estudo de caso com velocidade rotacional maior. Este é um valor bastante baixo, levando em conta que o modelo de turbulência utiliza um tratamento de parede que permite o uso de malhas com valores para y^+ maiores. Por isto considera-se que a malha proposta é adequada para este trabalho.

Foi proposto um modelo computacional desenvolvido em Ansys CFX 14. Nesse modelo foi utilizada uma malha Hexaédrica. Para a caracterização da turbulência foi empregado o modelo de turbulência SST (Shear Stress Transport). O modelo homogêneo (modelo Volume of Fluid – VOF) para o cálculo das fases com deslocamento da malha. Para validar o modelo foram simulados quatro casos utilizando as condições operacionais de um estudo experimental de acordo com a literatura [10]. Os resultados computacionais apresentaram boa concordância com os resultados experimentais, tanto na comparação dos perfis do líquido, como na altura máxima atingida. Portanto o modelo computacional é uma representação válida do fenômeno real.

Conforme esperado, a quantidade de líquido em rotação afeta a altura máxima atingida do mesmo. Maiores quantidades de líquido levam a maiores alturas máximas. A velocidade rotacional apresenta o mesmo efeito, ou seja, um aumento na velocidade rotacional incrementa a força centrífuga que faz o líquido atingir maiores alturas.

A quantidade de líquido carregado tem um efeito maior na área interfacial quando comparado com a velocidade rotacional. Em outras palavras, o ganho em área interfacial devido a um aumento na velocidade rotacional não é significativo. No entanto, o volume de líquido tem um efeito maior. Para processos onde a área interfacial tem um papel predominante, o uso de quantidades maiores de líquido pode melhorar a transferência de massa. De fato, o ganho relativo em termos de área superficial diminui a medida em que a velocidade é incrementada.

Os resultados computacionais indicam que o fluxo do líquido dentro do Erlenmeyer é totalmente desenvolvido depois de dois segundos de simulação. Depois deste tempo, o escoamento atinge um “estado estacionário” periódico, onde o fluido escoar dentro do Erlenmeyer mudando a sua posição relativa, mas sem mudar o seu formato.

O volume de líquido não teve uma influência muito significativa na taxa da dissipação turbulenta, no entanto, um incremento na velocidade incrementa também a taxa de dissipação turbulenta em grande medida. Isto deve-se que ao incrementar a velocidade rotacional, em que a energia introduzida no sistema é dissipada pela colisão entre as micelas no fluxo turbulento.

Baseado no modelo computacional proposto, em trabalhos futuros esse modelo pode ser ampliado a estudos de caso particulares que incluam, por exemplo, o tempo de mistura ou a reação química. Que visem um melhor entendimento dos fenômenos envolvidos neste tipo de processos.

7. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Linsenmeier, R.A. and D.W. Gatchell, *An Introduction to Bioengineering and Biotechnology*, in *Career Development in Bioengineering and Biotechnology*, G. Madhavan, B. Oakley, and L. Kun, Editors. 2008, Springer.
2. Freedman, D., *The Shaker in Bioengineering*, in *Methods in Microbiology*, J.R. Norris and D.W. Ribbons, Editors. 1970, Academic Press. p. 175-185.
3. Tianzhong, L., et al., *Numerical Simulation of Flow in Erlenmeyer Shaken Flask*. Computational Fluid Dynamics 2010.
4. Büchs, J., et al., *Power consumption in shaking flasks on rotary shaking machines: I. Power consumption measurement in unbaffled flasks at low liquid viscosity*. Biotechnology and Bioengineering, 2000. **68**(6): p. 589-593.
5. Maier, U. and J. Büchs, *Characterisation of the gas-liquid mass transfer in shaking bioreactors*. Biochemical Engineering Journal, 2001. **7**(2): p. 99-106.
6. Maier, U., M. Losen, and J. Büchs, *Advances in understanding and modeling the gas-liquid mass transfer in shake flasks*. Biochemical Engineering Journal, 2004. **17**(3): p. 155-167.
7. Uuml, J. Chs, and B. Zoels, *Evaluation of Maximum to Specific Power Consumption Ratio in Shaking Bioreactors*. JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING OF JAPAN, 2001. **34**(5): p. 647-653.

8. Peter, C.P., Y. Suzuki, and J. Büchs, *Hydromechanical stress in shake flasks: Correlation for the maximum local energy dissipation rate*. *Biotechnology and Bioengineering*, 2006. **93**(6): p. 1164-1176.
9. Harris, C.K., et al., *Computational fluid dynamics for chemical reactor engineering*. *Chemical Engineering Science*, 1996. **51**(10): p. 1569-1594.
10. Büchs, J., et al., *Calculating liquid distribution in shake flasks on rotary shakers at waterlike viscosities*. *Biochemical Engineering Journal*, 2007. **34**(3): p. 200-208.
11. Bai, G., et al., *Computational fluid dynamics (CFD) insights into agitation stress methods in biopharmaceutical development*. *International Journal of Pharmaceutics*, 2012. **423**(2): p. 264-280.
12. Bauer, R., *Untersuchungen zur Dispergierung in flüssig-flüssig-Systemen* 1986.
13. Davies, J.T., *A physical interpretation of drop sizes in homogenizers and agitated tanks, including the dispersion of viscous oils*. *Chemical Engineering Science*, 1987. **42**(7): p. 1671-1676.
14. Tan, R.-K., W. Eberhard, and J. Büchs, *Measurement and characterization of mixing time in shake flasks*. *Chemical Engineering Science*, 2011. **66**(3): p. 440-447.
15. Xia, B. and D.-W. Sun, *Applications of computational fluid dynamics (cfd) in the food industry: a review*. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2002. **34**(1–3): p. 5-24.

16. Mousavi, S.M., et al., *CFD simulation and optimization of effective parameters for biomass production in a horizontal tubular loop bioreactor*. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 2010. **49**(12): p. 1249-1258.
17. Raynal, L. and I. Harter, *Studies of gas-liquid flow through reactors internals using VOF simulations*. Chemical Engineering Science, 2001. **56**(21-22): p. 6385-6391.
18. *ANSYS CFX-Solver Theory Guide Manual*. 2011.
19. Hjertager, L.K., B.H. Hjertager, and T. Solberg, *CFD modelling of fast chemical reactions in turbulent liquid flows*. Computers & Chemical Engineering, 2002. **26**(4-5): p. 507-515.
20. MENTER, F.R., M. KUNTZ, and R. LANGTRY. *Ten years of industrial experience with the SST turbulence model*. in *Turbulence Heat and Mass Transfer*. 2003. Antalya, Turkey.
21. Menter, F.R., *Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications*. AIAA Journal, 1994. **32**(8): p. 1598-1605.
22. Maliska, C.R., *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*2004: Livros Tecnicos e Cientificos.

ANEXO A

Y PLUS y^+

O Parametro y^+ é a distancia adimensional do primero nó entre a malha e a parede (Tomado do Manual *Ansys CFX 14.0*). Este conceito anteriormente era muito mais importante quando funções de parede padrão foram utilizadas, devido a que era necessário evitar valres de y^+ menores que aproximadamente 2. Com as opções de funções de parede escaláveis e o tratamento automático de parede, estes valores são fornecidos para informação da resolução da malha na camada limite, já que os valores de y^+ recomendados com estas funções podem ser maiores. Por exemplo, para tratamento automático de parede, podem ser utilizados valores de até 200 sem obter alterações significativas no resultado final.

Equacionamento:

A estimativa do y^+ esta baseada em correlações para um prato plano com número de Reynolds representado pela Equação A-1:

$$Re_L = \frac{\rho U_\infty L}{\mu} \quad \text{A-1}$$

Em que U_∞ é a velocidade característica e L é o comprimento do platô.

A correlação para o coeficiente de cisalhamento na parede, C_f , é dada pela Equação A-2:

$$C_f = 0,025 Re_x^{-1/7} \quad \text{A-2}$$

Em que x é a distancia ao longo do platô a partir da borda. A definição de Δy^+ para esta estimativa é:

$$\Delta y^+ = \frac{\Delta y u_\tau}{\nu} \quad \text{A-3}$$

Com Δy sendo o espaçamento entre a parede e o primeiro nó da malha a partir da parede.

Utilizando a definição,

$$C_f = 2 \frac{\rho u_\tau^2}{\rho U_\infty^2} = 2 \frac{u_\tau^2}{U_\infty^2} \quad \text{A-4}$$

u_τ pode ser eliminado da Equação A-3 para obter:

$$\Delta y = \Delta y^+ \frac{\sqrt{2}}{C_f} \frac{u_\tau}{U_\infty} \quad \text{A-5}$$

C_f pode ser eliminado utilizando a Equação A-2, assim:

$$\Delta y = L \Delta y^+ \sqrt{80} Re_x^{1/14} \frac{1}{Re_L} \quad \text{A-6}$$

Outras simplificações podem ser feitas assumindo que

$$Re_x = C Re_L \quad \text{A-7}$$

Com C igual a alguma fração.

Assumindo que $C^{1/14} \approx 1$, então, exceto para valores muito baixos de Re_x , o resultado é:

$$\Delta y = L \Delta y^+ \sqrt{80} Re_L^{-13/14} \quad \text{A-8}$$

A Equação A-8 permite estabelecer um valor de Δy^+ e assim obter o espaçamento da malha, Δy para os nós na camada limite.