



***Scale-up* de Reatores de Mistura em
Cosméticos: um Estudo com
Fluidodinâmica Computacional**

Bruna Gomes Muxagata Conrado

Monografia em Engenharia Química

Orientador

Tânia Suaiden Klein, Ph.D

Março de 2021

SCALE-UP DE REATORES DE MISTURA EM COSMÉTICOS: UM ESTUDO COM FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Bruna Gomes Muxagata Conrado

Monografia em Engenharia Química submetida ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Química.

Aprovado por:

Heloísa Lajas Sanches, D.Sc.

Felipe Souto da Silva, D.Sc.

Orientado por:

Tânia Suaiden Klein, Ph.D.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil

Março de 2021

Conrado, Bruna Gomes Muxagata.

Scale-Up de Reatores de Mistura em Cosméticos: Um Estudo com Fluidodinâmica Computacional / Bruna Gomes Muxagata Conrado. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2021. 56 p.; Il.

(Monografia) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2021.

Orientadores: Tania Suaiden Klein.

1. Fluidodinâmica Computacional. 2. Fluido Não-Newtoniano. 3. Reator de Mistura. 4. Monografia (Graduação – UFRJ/EQ). 5. Tânia Suaiden Klein

I. Investigação de Técnicas de Scale-Up para Reatores de Mistura – Um Estudo de Fluidodinâmica Computacional.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço aos meus pais, Paulo Cesar e Ercília, por me apoiarem, me incentivarem durante a graduação e por sempre me ajudarem a navegar a vida. Agradeço também aos meus tios, Heloíse e Jair, e a minha avó, Zilda, por apoiarem e estarem presentes durante as conquistas que consegui até então.

Agradeço também ao meu irmão, Eric, por desde criança ter incentivado meu amor e curiosidade pelas ciências exatas e por ter sido meu ídolo principal de dedicação e sucesso no meio da Engenharia. Obrigada por nunca permitir que eu duvidasse da minha capacidade e por sempre tirar minhas dúvidas em durante a escola e a graduação. Sem você e os nossos pais, eu com certeza não teria buscado os sonhos que conquistei até hoje.

Agradeço aos meus amigos de infância Anna, Camila E., Clara B., Clara M., Fernanda V., Giulio, Luiza M., Luísa L., Luana, Maiara, Maria, Marina, Sofia, Vitor M. e Victor F. Vocês me inspiram a cada dia a ser a melhor versão que posso ser. Obrigada por terem dividido mais de 10 anos junto comigo nesta caminhada.

Aos amigos que a graduação me trouxe, meu eterno agradecimento por terem dividido tantos momentos bons dentro da UFRJ e por criarem uma linda rede de apoio durante os momentos ruins. Tenho orgulho de cada um de vocês e sei que todos têm uma bela história a escrever como profissionais da indústria.

Gostaria de agradecer especialmente aos meus gestores de estágio na L'Oréal, Patrícia e Júlio, por terem me incentivado e confiado em mim para conduzir o presente trabalho, me ensinado tanto e servido de inspiração da profissional que desejo ser no futuro. Agradeço também ao Filipe M., que ofereceu conhecimentos valiosos e acreditou muito neste projeto.

Aos amigos que a L'Oréal me deu, Fernanda M., Felipe I., Letícia, Marília, Rodrigo e Vitor, meu agradecimento por terem dividido experiências incríveis nestes últimos dois anos e por inspirarem mais ainda meu amor pela indústria de cosméticos.

Por fim, um agradecimento especial à minha orientadora, Tânia, pela excelente orientação e condução deste projeto. Suas ideias e sua experiência ajudaram de forma essencial a moldar o projeto que apresento.

Meu muito obrigada a todos vocês.

Resumo da Monografia apresentada à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Química.

SCALE-UP DE REATORES DE MISTURA EM COSMÉTICOS: UM ESTUDO COM FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Bruna Gomes Muxagata Conrado

Março de 2021

Orientadores: Prof. Tania Suaiden Klein, Ph.D.

Entender o escoamento de fluidos em um sistema é de grande importância para a modelagem de diversos processos da indústria química como, por exemplo, a passagem de fluidos através de tubulações e a interação em misturas multifásicas. Há ainda o caso da homogeneização em um reator de mistura, onde este fenômeno é amplamente estudado para modelar e compreender diversos processos, sobretudo nas indústrias farmacêutica e de petróleo. Entretanto, esses estudos parecem ater-se apenas a estas indústrias, sendo muito pouco encontrados quando se fala de indústrias alimentícias, cosméticas e de insumos. Nestas indústrias, os estudos de processo parecem estar ainda muito baseados em etapas experimentais de tentativa e erro, que não são capazes de acomodar peculiaridades intrínsecas, quando se tratam de emulsões ou reologias complexas. A técnica presente neste trabalho visa a mudar essa abordagem, baseando-se na suposição de que emulsões com tamanhos de partícula similares resultarão em um produto com viscosidades similares. Sendo conhecido o fato de que emulsões cosméticas são fluidos não-newtonianos, o objetivo deste projeto visa a determinar a velocidade de rotação de turbina necessária em escala piloto para reproduzir fielmente uma mesma emulsão obtida em escala de laboratório. Para isso, foram empregados métodos em fluidodinâmica computacional (CFD) para quantificar a taxa de cisalhamento envolvida no processo, bem como a sua influência no valor dos índices de escoamento que definem fluidos não-newtonianos. O trabalho envolveu uma etapa de coleta de dados reológicos experimentais, através de fabricações em escala de laboratório. O processo de fabricação foi realizado variando gradualmente a taxa de rotação da turbina, com a retirada de alíquotas a cada mudança de velocidade angular. O processo de mistura do fluido no reator de laboratório foi então reproduzido computacionalmente através do programa de CFD Fluent 2019 R3, onde pôde-se quantificar, via simulação, a taxa de cisalhamento média envolvida na fabricação. Correlações entre taxa de cisalhamento, velocidade de turbina e as constantes K e n , de caracterização do fluido como pseudoplástico pela lei de potência, foram determinadas. Estas correlações foram então utilizadas nas simulações do processo em escala piloto, que permitiram o cálculo da taxa de cisalhamento média e das duas constantes de caracterização do fluido, para cada velocidade de turbina estudada. Dessa forma, foi possível determinar a taxa de rotação da turbina do reator piloto que fornece a mesma taxa de cisalhamento média que aquela testada em laboratório. Simulações numéricas adicionais, com taxas de rotação não utilizadas experimentalmente foram conduzidas para comprovar a consistência do método. A validação do mesmo deu-se comparando os valores de K e n obtidos experimentalmente em escala piloto com aqueles previstos pela simulação numérica no mesmo reator.

ÍNDICE

1. INTRODUÇÃO	10
1.1. OBJETIVO.....	11
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	12
2.1. REOLOGIA DE COSMÉTICOS.....	12
2.2. COMPONENTES DE REATORES E EFEITOS NA EMULSÃO.....	13
2.3. SCALE-UP DE REATORES DA INDÚSTRIA COSMÉTICA.....	14
2.4. CFD – FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL	16
2.4.1. GEOMETRIA	17
2.4.2. MALHA	18
2.4.3. MODELAGEM MATEMÁTICA.....	21
2.4.4. MODELAGEM PARA DOMÍNIOS EM MOVIMENTO.....	23
2.4.5. SIMULAÇÃO NUMÉRICA.....	26
3. METODOLOGIA.....	28
3.1. COLETA DE DADOS EXPERIMENTAIS.....	29
3.2. SIMULAÇÕES CFD.....	30
3.2.1 GEOMETRIA.....	30
3.2.2. MALHA.....	31
3.2.3. SIMULAÇÕES NUMÉRICAS	32
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	36
4.1 DADOS EXPERIMENTAIS.....	36

4.2 TESTE DE MALHA	39
4.3 SIMULAÇÃO NUMÉRICA.....	40
4.3.1 REATOR DE LABORATÓRIO.....	40
4.3.2 REATOR PILOTO	43
4.3.3. MÉTODO DE SCALE-UP PROPOSTO	45
4.3.4 TESTE DE CONSISTÊNCIA DO MÉTODO DE SCALE-UP	47
4.3.5 VALIDAÇÃO DO MÉTODO DE SCALE-UP COM RESULTADOS EXPERIMENTAIS	49
5. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	52
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	54

NOMENCLATURA

ρ	Densidade
\vec{v}	Vetor velocidade
\vec{v}_r	Vetor velocidade relativa
$\vec{\Omega}$	Vetor velocidade angular
\vec{r}	Vetor posição
\vec{U}	Vetor velocidade no campo tridimensional
P	Pressão
\vec{f}	Vetor gravidade ou de força eletromagnética
$\vec{\tau}$	Vetor tensão
$\dot{\gamma}$	Tensor deformação
μ	Viscosidade
μ_{eff}	Viscosidade Efetiva
K	Índice de consistência de fluido
n	Índice de comportamento de fluido

1. Introdução

Os produtos cosméticos têm um papel importante em nosso dia a dia, garantindo nossos cuidados com higiene pessoal sob a forma de sabonetes, cremes para pele e cabelos, xampus, condicionadores, géis, entre diversos outros. Não é de se surpreender, portanto, que o mercado de cosméticos projete atingir um valor de, aproximadamente, seiscentos bilhões de dólares até 2026 (DATA BRIDGE, 2020).

Desta forma, as diversas práticas de controle de qualidade destes produtos tornam-se extremamente necessárias na indústria, pois permitem garantir a excelência dos produtos destinados ao mercado e otimizar a experiência do consumidor. A ANVISA (2008) orienta em seu Guia de Controle de Qualidade de Produtos Cosméticos os principais testes a serem realizados no que tange a garantia de qualidade, sendo eles: ensaios organolépticos (aspecto, cor e odor), ensaios microbiológicos e ensaios físico-químicos (pH, densidade e comportamento reológico).

Dentre estes ensaios, pode-se argumentar que o mais importante seja a caracterização reológica destes produtos, pois ela está intrinsecamente relacionada à aceitação pelo consumidor e ao desempenho da formulação em questão, podendo afetar inclusive fatores como fixação no cabelo (DEMOLINER *et al*, 2018) e penetrabilidade na pele (SCHMIDBERGER *et al*, 2019). Além disso, em conjunto com os demais aspectos vistos acima, pode-se considerar que a reologia é a “impressão digital” de um produto cosmético – é ela que distingue uma formulação da outra e permite identificar um determinado produto.

Sendo assim, a reprodutibilidade destes parâmetros é importante no momento de sua fabricação, ou seja, é preciso garantir o mesmo comportamento reológico do cosmético independente da batelada ou do equipamento utilizado. Por isso, torna-se importante compreender e quantificar detalhadamente os parâmetros físico-químicos de um produto em questão, para aplicá-los nas etapas de formulação e engenharia de processos.

Na indústria química em geral, isto é geralmente feito com o auxílio de plantas-piloto, unidades de produção pré-comercial de médio ou pequeno porte, que tem como objetivo compreender e elucidar todas as operações unitárias envolvidas no

processo de fabricação e escalonamento (scale-up), bem como garantir a integridade do produto até que ele passe a ser produzido em fábricas reais.

Além disso, têm-se fortalecido na indústria química nos últimos anos o uso de ferramentas computacionais para modelar processos industriais e formulações em geral. Ainda assim, o uso de modelos computacionais no setor de cosméticos é ainda muito pouco explorado. Jansen e Hoodgland (2014) destacaram, por exemplo, a importância da Fluidodinâmica Computacional na área através de um estudo semi-empírico de variáveis de processo e scale-up em emulsões alimentícias e cosméticas, enquanto Farell (2018) propõe que as evoluções computacionais em CFD, já muito consolidadas na indústria farmacêutica, também seriam métodos perfeitamente capazes de reproduzir estudos de processo, desempenho e envase de produtos na indústria de cosméticos como um todo.

1.1. Objetivo

O presente trabalho tem como objetivo aliar a fluidodinâmica computacional ao estudo de scale-up de um processo de fabricação de emulsão cosmética, entre um reator de laboratório e um reator de planta piloto e propor um método de simulação computacional para prever a taxa de cisalhamento resultante nos dois reatores, como forma de garantir a reprodutibilidade do processo e compreender detalhada e numericamente as diversas variáveis envolvidas no mesmo.

Para isso, avaliou-se a correlação entre o comportamento reológico da emulsão, a geometria dos dois reatores e a velocidade de rotação dos seus componentes, bem como a teorização da sua influência nas propriedades físico-químicas da amostra.

2. Revisão Bibliográfica

2.1. Reologia de Cosméticos

A ANVISA (2005) define os produtos cosméticos como formulações contendo substâncias e princípios ativos naturais ou sintéticos, para uso externo do corpo e com objetivo de embelezamento ou manutenção da higiene pessoal. Por isso, os mais diversos tipos de produto pertencem à essa família, como xampus, condicionadores, esmaltes, maquiagens e loções. Assim como a finalidade de seu uso, cada tipo de cosmético difere muito em sua composição. A indústria cosmética possui o mais variado arsenal de matérias primas à disposição, porém, pode-se destacar dois principais alicerces – água e óleo.

À dispersão de um componente em outro dá-se o nome de emulsão, que constitui a base de grande parte dos produtos cosméticos presentes no mercado. Sabe-se que água e óleo são imiscíveis e, por isso, outros ingredientes estabilizadores devem ser adicionados à fórmula para garantir a estabilidade da emulsão (ROSEN, 2015).

As emulsões são composições termodinamicamente instáveis e constantemente sujeitas a influências químicas, microbiológicas, de temperatura e até mesmo forças cisalhantes. O processo de emulsificação envolve, em sua essência, a quebra das partículas de óleo e a formação de um filme interfacial água-óleo estável. Por isso, gotículas insuficientemente processadas acabam resultando em coalescência, gerando duas fases completamente separadas (BRUMMER, 2006).

Essa junção de fatores acaba gerando um comportamento reológico singular e torna muito importante a compreensão detalhada das forças que agem sobre esse determinado tipo de fluido no momento da sua fabricação.

Um estudo conduzido por Rajinder Pal (1996) mostrou que há dois fenômenos contrários concomitantes agindo no fluido – um macroscópico e outro microscópico. Por um lado, há o comportamento pseudoplástico característico de emulsões cosméticas em que, sob cisalhamento, as moléculas se rearranjam de tal forma a estarem na mesma direção do escoamento, diminuindo assim a viscosidade aparente conforme as forças cisalhantes aumentam.

Por outro lado, nota-se que o tamanho das gotículas de óleo tem uma forte influência na reologia da emulsão, porém de maneira contrária: quanto menor o

tamanho da gotícula, mais viscoso o fluido será. Este fenômeno, apesar de inicialmente contrário ao comportamento macroscópico, acaba na verdade auxiliando-o, pois foi demonstrado (PAL, 1996) que o efeito pseudoplástico é muito maior em emulsões mais finas (muitas partículas pequenas) do que em emulsões menos processadas (poucas partículas grandes).

2.2. Componentes de Reatores e Efeitos na Emulsão

A redução do tamanho de partícula é, portanto, de caráter crucial na reologia do fluido que será fabricado. Essa redução ocorre através da aplicação de tensões normais ou tangenciais na interface entre as fases aquosa e oleosa. Por isso, é necessário escolher criteriosamente o tipo de equipamento envolvido na produção de uma emulsão cosmética.

Uma partícula de emulsão óleo em água se divide em partes menores quando as tensões cisalhantes aplicadas superam, em magnitude, as forças interfaciais que dão forma às gotículas. Para que isso ocorra, geralmente utiliza-se um equipamento do tipo rotor-estator (também denominado de turbina ou emulsificador) para dissipar a energia nas interfaces entre as duas fases. Uma distância pequena entre a parte rotatória e a parte estacionária do equipamento, geralmente na casa de milímetros, acelera a emulsão através da força centrífuga do rotor ao mesmo tempo que a desacelera devido a ação do estator. As forças cisalhantes resultantes acabam diminuindo o tamanho da partícula, que escoia dentro do reator de maneira laminar (BRUMMER, 2006).

Segundo Rosen (2015), manual bem conhecido na indústria cosmética, é necessário que a emulsão esteja uniforme ao longo de todo o conteúdo presente no reator. Isto é conquistado graças a três fenômenos que ocorrem simultaneamente em um processo de mistura deste tipo: o escoamento do próprio fluido, a mistura convectiva e a mistura difusiva. Além da turbina, empregam-se mais dois componentes que asseguram a homogeneidade da mistura – os raspadores e as hélices.

Rosen (2015) explica que, inicialmente, as forças aplicadas por esses componentes criam um gradiente de velocidade (e dessa forma uma taxa adicional de cisalhamento) nas partículas do fluido que, por sua vez, estão se movendo em

velocidades distintas entre si. Uma vez que estas velocidades se tornam todas iguais, pode-se considerar que a mistura está ocorrendo corretamente.

Ainda de acordo com Rosen (2015), as hélices são o componente responsável por mover a porção do fluido que está na superfície em direção à turbina, para que as gotículas possam ser quebradas e para que o fluido possa ser propriamente recirculado. Geralmente, são compostas por dois ou três impelidores, têm um diâmetro relativamente pequeno e admitem velocidades entre 150 e 2500 rpm.

Devido ao seu formato, as hélices geram um escoamento predominantemente axial que deslocam o fluido para baixo, ao mesmo tempo que seu deslocamento radial também move o fluido tangencialmente. Rosen (2015) elucida que a junção destes dois tipos de velocidade é responsável, inclusive, pela geração de um vórtice em torno dos impelidores.

Os raspadores, por sua vez, têm como função principal a remoção de partes do fluido que possam vir a estar coladas na parede do reator. Quanto mais viscoso o fluido, mais a ação dos raspadores é necessária. O escoamento tangencial criado por eles confere cisalhamento adicional, garante a redistribuição espacial do fluido e cria, em conjunto com a hélice, um escoamento de caráter laminar.

Devido à essa combinação de atributos, a junção de turbina, hélices e raspadores compõe a grande maioria dos reatores empregados da indústria de cosméticos. (ROSEN, 2015).

2.3. Scale-Up de Reatores da Indústria Cosmética

O controle dos três componentes é o principal foco de um estudo de scale-up, pois são eles que garantem todo o perfil mecânico da mistura. Caso os fenômenos que ocorrem na etapa de desenvolvimento em reator de laboratório não se repita em um reator de maior escala, não há como garantir a qualidade da emulsão ou do produto como um todo.

O scale-up torna-se um estudo bastante complexo no caso de emulsões especificamente, pois as variáveis que determinam o perfil de forças variam muito com o volume, tamanho e formato dos componentes do reator. De maneira geral, os principais pontos a serem considerados em um scale-up são: a qualidade da mistura, o tamanho e formato da hélice, a velocidade da hélice, a razão D/T (diâmetro da hélice

sobre diâmetro do tanque), taxa de recirculação e troca de calor e energia.

Segundo Rosen (2015), há três “regras de ouro” que garantem confiabilidade a um scale-up. São elas:

- O mesmo formato de impelidor deve ser utilizado no laboratório, na planta piloto e na fábrica.
- A velocidade tangencial (produto entre a velocidade angular e o raio) da extremidade da hélice deve manter-se na mesma magnitude.
- A taxa de recirculação dentro do reator deve ser mantida a mesma. Esta é calculada através da capacidade de bombeamento da hélice, dado usualmente fornecido pelo fabricante da peça.

Há, contudo, dois pontos de atenção importantes para estas regras. A primeira questão é a dependência de dados fornecidos pelo fabricante dos componentes. A grande maioria dos testes de desempenho (como a própria taxa de recirculação, por exemplo) são feitos usando água como fluido de estudo. Isto claramente não contempla casos de fluidos não-newtonianos ou fórmulas mais complexas, fazendo com que seja necessário a condução de um novo estudo para cada fórmula ou grupo de fórmulas a ser fabricado.

O segundo ponto a ser considerado é que, para a grande maioria das indústrias cosméticas atuantes hoje em dia, a sua coleção de reatores e equipamentos disponíveis já é fixa. O estudo de scale-up não tratará, portanto, de escolher o design apropriado de um reator de larga escala, pois o mesmo já existe. Desta forma, escolher o formato e tamanho das hélices e da turbina como variável de controle torna-se inviável, já que esta mudança não pode ser feita dentro do prazo de um novo projeto e pode inclusive acarretar um investimento muito elevado.

Dessa forma, o estudo do scale-up na indústria é feito muitas vezes com métodos experimentais e generalizados, sendo muito dependente da prática empregada nas fabricações e sendo baseado em grande parte na experiência industrial dos engenheiros. Isto acaba dando margem à ocorrência de perdas no processo e não-conformidades no produto final, devido à efeitos que não podem ser facilmente previstos empiricamente. Faz-se necessário, portanto, um mecanismo matemático que estabeleça uma análise crítica das variáveis de processo envolvidas, que aumente a reprodutibilidade do mesmo e cujo sucesso seja menos dependente

do operador humano.

Como elucidado anteriormente, a complexidade físico-química das emulsões que compõem o portfólio da indústria de cosméticos adiciona um grau de dificuldade no que tange ao scale-up do seu processo de fabricação. Idealmente, o scale-up deveria envolver uma análise extremamente detalhada do mecanismo de quebra de partículas da fase oleosa, devido à sua considerável influência na reologia do fluido em questão. É natural fazer a associação de que duas emulsões de mesma composição química e com igual perfil de distribuição de partículas terão mesma viscosidade. Garantir a reprodutibilidade do tamanho de partículas da emulsão em diferentes escalas seria, em sua essência, garantir a reprodutibilidade do processo.

Esta proposta, contudo, é extremamente desafiadora. O mecanismo de quebra e balanço populacional de partículas em emulsões cosméticas não foi, até o momento, descrito matematicamente em qualquer literatura. O estudo deste mecanismo e a criação de uma modelagem matemática para ele é um trabalho bastante complexo, que envolve testes em equipamentos específicos de análise físico-química e cuja dedução matemática pode se mostrar muito laboriosa.

Tendo como base estas complexidades e a literatura disponibilizada por Rosen (2015), acredita-se que a melhor alternativa para garantir o perfil fluidomecânico entre dois ou mais reatores é, então, a manutenção da taxa de cisalhamento média dentro do reator. Ao olhar-se apenas para o cisalhamento, remove-se a complexidade do estudo de balanço populacional das partículas, ao mesmo tempo em que se permite garantir uma análise suficientemente aprofundada do processo. A estratégia abordada pelo presente trabalho é, portanto, utilizar a fluidodinâmica computacional para propor um método de scale-up a partir da taxa de cisalhamento média, para modelos de reatores já instalados em plantas de cosméticos existentes atualmente.

2.4. CFD – Fluidodinâmica Computacional

A Fluidodinâmica Computacional ou CFD (do inglês *Computational Fluid Dynamics*) é uma área de Fenômenos de Transporte que usa métodos numéricos e recursos gráficos para analisar e resolver problemas complexos envolvendo escoamento de fluidos.

Devido à importância de compreender os diversos tipos de escoamento e à disponibilidade no mercado de diversos *softwares* renomados, os estudos em CFD se estendem hoje em dia pelas mais diversas áreas das ciências, tais como a aerodinâmica, engenharia biomédica, engenharia ambiental, meteorologia e mecânica (ANSYS, 2011).

Tais métodos empregados por CFD visam a solucionar numericamente as equações de conservação de massa e movimento, podendo também acoplar equações de energia e de espécie química, a depender da configuração do problema.

Independentemente de sua área de aplicação, a resolução de um problema de fluidodinâmica computacional envolve cinco etapas: confecção da geometria, elaboração da malha, descrição matemática do cenário, resolução numérica e pós-processamento dos dados. Algumas destas etapas são discutidas detalhadamente a seguir.

2.4.1. Geometria

A geometria é, em sua essência, a representação bi ou tridimensional do espaço físico onde há escoamento de fluido, denominado domínio computacional. Este pode ser, por exemplo, o espaço interno e/ou externo de um equipamento ou a região em torno de uma planta industrial. É, portanto, a representação gráfica e computacional do cenário presente na vida real.

Geometrias podem ser confeccionadas com o auxílio de programas especializados de CAD (*Computer Aided Design*) e devem ser feitas de forma a representar fielmente a realidade, levando em conta todos os componentes do domínio e os fatores externos a ele que possam servir de influência. Contudo, devido ao fato de simulações em CFD geralmente exigirem muito poder computacional e estarem consideravelmente propensas a problemas de convergência, pode-se fazer necessária a realização de determinadas simplificações. Tais simplificações podem envolver, por exemplo, a suavização de ângulos e bordas, a utilização de eixos de simetria e até mesmo a supressão de alguns componentes em áreas da geometria com pouca influência no resultado final (ANSYS, 2011).

2.4.2. Malha

As equações diferenciais de continuidade e conservação de movimento linear possuem apenas soluções numéricas para a grande maioria dos casos, apresentando um considerável problema no que tange as suas soluções analíticas (SCHIFFEL, 2001). Desta forma, para tornar possível a análise dos mais diversos tipos de escoamento, uma estratégia necessária envolve a discretização do domínio em pequenos subvolumes, onde as soluções para estas equações serão calculadas localmente.

A classificação mais pertinente de uma malha diz respeito à conectividade entre seus subvolumes, podendo ela ser uma malha estruturada ou não-estruturada.

Uma malha estruturada (Figura 1a) tem seus elementos regularmente conectados e distribuídos em uma estrutura de linhas e colunas. É uma malha em que cada elemento possui o mesmo número de elementos em sua vizinhança e onde se segue um padrão reproduzido igualmente em todas as direções do espaço 3D ou 2D.

No caso das malhas não-estruturadas (Figura 1b), a regra acima não é vista, apresentando-se apenas uma conectividade irregular. A distribuição dos subvolumes da geometria é praticamente aleatória, podendo ser formada por elementos tetraédricos, hexaédricos e prismáticos e sem nenhuma regularidade quanto ao número de elementos vizinhos (ALLISON, 2020).

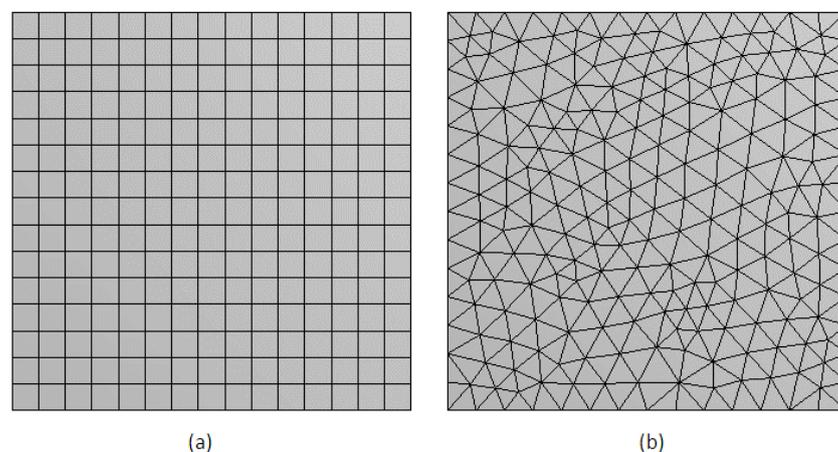


Figura 1 – a) Malha estruturada b) Malha não-estruturada.

O método de malha não-estruturada emergiu como uma alternativa no caso da discretização de geometrias mais complexas, pois ele promove técnicas adaptativas que melhor distribuem os elementos e nós nestas áreas. Por outro lado, este método

possui a desvantagem de demandar maior esforço computacional e dificultar a convergência (BONO e AWRUCH, 2007). Sendo assim, uma alternativa usualmente aplicada para estes casos envolve a criação de uma malha híbrida (Figura 2), combinando partes estruturadas e não-estruturadas.

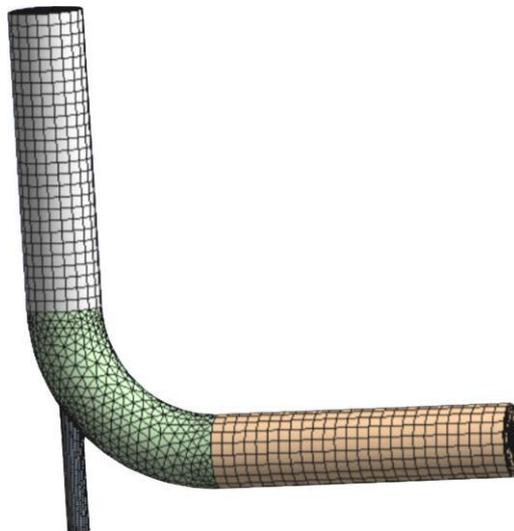


Figura 2 – Exemplo de malha híbrida em um tubo de injeção.

Quando malhas não-estruturadas são utilizadas, é comum a utilização de uma camada de elementos prismáticos na parte mais singular das geometrias: as paredes. Isto porque a velocidade de um fluido que escoia imediatamente próximo a uma parede sólida deve ter a mesma velocidade tangencial que ela, fenômeno que recebe o nome de condição de não deslizamento (GRAEBEL, 2002). Esta condição acaba uma camada limite, onde grandes gradientes de velocidade ocorrem.

O número de elementos e qualidade da malha são cruciais para a obtenção de uma solução numérica próxima do real, que garanta a confiabilidade do resultado. O refinamento da malha em elementos de tamanhos menores pode aumentar a acurácia da solução, porém, quanto menor o tamanho dos elementos, mais esforço computacional é requerido. A qualidade da malha, por sua vez, é avaliada através alguns parâmetros geométricos importantes, sendo os dois principais chamados de *Skewness* e *Orthogonal Quality*.

- *Skewness*

Define-se por *skewness* a diferença percentual entre o formato do elemento e o formato de um elemento equilateral de mesmo volume. É uma medida para expressar

o quanto um elemento está distorcido e longe do formato considerado ideal. Células com altos índices de skewness tendem a gerar soluções numéricas inverídicas.

- Orthogonal Quality

Orthogonal Quality trata-se, por sua vez, do quão próximo o ângulo entre as faces adjacentes de um elemento aproxima-se do ideal. Assim como o *skewness*, também é expresso em percentual, mas tem dependência oposta – quanto maior o índice, mais a solução numérica se aproxima do valor real. A Tabela 1 indica os valores recomendados de ambos os parâmetros.

Tabela 1 – Métricas de qualidade da malha

Parâmetro	Valores Recomendados
Skewness	0 – 0,8
Orthogonal Quality	0,2 – 1

Embora esta seja a faixa recomendada, uma regra geral de criação de uma boa malha dita que a skewness máxima não deve ultrapassar 0,95. Valores acima disso podem causar dificuldades de convergência e forçar o emprego de métodos numéricos de maior demanda computacional (ANSYS, 2011). Cabe ao usuário, portanto, definir o limite aceitável para suas simulações através de testes com diversas malhas.

Todas estas ferramentas contribuem para a criação de uma malha adequada, apesar de não serem os únicos requisitos necessários. Adicionalmente, uma boa prática para a validação de uma simulação em CFD é a realização de um “Teste de Independência de Malha”, que consiste em comparar os resultados obtidos para diferentes graus de refino. Um resultado poderá ser considerado confiável se este for independente da malha utilizada. Existem diversos métodos para este tipo de análise, sendo interessante destacar o Método GCI (*Grid Convergence Index*), que consiste na comparação entre pelo menos três malhas através de um índice de convergência pré-estabelecido (BAKER *et al*, 2019).

2.4.3. Modelagem Matemática

A fluidodinâmica computacional (CFD) consiste em resolver numericamente as equações governantes de um escoamento, que contemplam as leis de conservação da física:

- Conservação de Massa: a massa de um sistema fechado deve ser constante ao longo do tempo; nada pode ser adicionado ou removido.
- Conservação de Momento: a taxa de variação de momento deve ser igual à soma das forças exercidas sobre um corpo (2ª Lei de Newton).
- Conservação de Energia: a taxa de variação de energia deve ser igual à soma de calor adicionado ou removido e do trabalho exercido sobre uma partícula (1ª Lei da Termodinâmica).

Para cada tipo de estudo e cenário, outras leis ou relações constitutivas podem ser necessárias para modelar matematicamente o problema. Alternativamente, algumas simplificações podem ser aplicadas também à essas equações governantes e constitutivas.

A equação da continuidade ou de conservação de massa e a equação da conservação de momento linear para um escoamento de fluido compressível, transiente e tridimensional são apresentadas nas Equações 1 e 2 (BIRD *et al.*, 2002):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\vec{\nabla}P + \rho \vec{f} - \vec{\nabla} \cdot \vec{\tau} \quad (2)$$

em que \vec{v} é o vetor velocidade, ρ é a densidade, P é o gradiente de pressão, f representa forças gravitacionais ou eletromagnéticas e τ é o tensor cisalhamento.

A Equação 1 expressa matematicamente a relação de igualdade entre a taxa de variação de massa dentro de um determinado volume de controle e o fluxo de massa convectivo líquido, que passa pelas faces do volume de controle.

Na Equação 2, o termo à esquerda é a derivada substantiva do momento, representando as mudanças causadas pelo transporte convectivo e sua variação com o tempo. O primeiro termo do lado direito é o gradiente de pressão, que rege que o fluido deverá escoar na direção de maior mudança de pressão. O segundo termo do lado direito, por sua vez, classifica as forças externas que agem sobre o fluido, como, por exemplo, a gravitacional e a eletromagnética. Por fim, o terceiro termo do lado

direito trata da taxa líquida do fluxo de momento linear devido aos efeitos moleculares (viscosos) difusivos. Este termo precisa ser modelado através de uma equação constitutiva.

As forças viscosas estão diretamente relacionadas à natureza das interações moleculares de um determinado fluido. Este termo diz respeito a como a viscosidade de um fluido reage a forças cisalhantes aplicadas sobre o mesmo. Alguns fluidos como água, glicerina, ar e álcool possuem viscosidade constante e independente dessas forças de cisalhamento aplicadas, sendo conhecidos como fluidos newtonianos. Nesses casos, o fluxo de momento é expresso pela lei da Viscosidade de Newton (Equação 3), em que o mesmo é diretamente proporcional ao tensor deformação ($\dot{\gamma}$), também conhecido como taxa de cisalhamento. A constante de proporcionalidade, por sua vez, é o que chamamos de viscosidade (μ), uma propriedade intrínseca do fluido.

$$\tau = -\mu\dot{\gamma} = -\mu(\nabla\vec{v} + \nabla\vec{v}^T) \quad (3)$$

Há, contudo, uma outra categoria de fluidos que não segue a Lei da Viscosidade de Newton e cuja viscosidade é uma função das tensões cisalhantes aplicadas sobre ele. A este grupo dá-se o nome de fluidos não-newtonianos, que podem se dividir em algumas subcategorias importantes (TROPEA *et al*, 2007).

Tabela 2 – Tipo de fluidos não-newtonianos

Tipo de Fluido		Descrição
Viscoelásticos	Material Kelvin ou Anelásticos	Combinação de efeitos elásticos e viscosos
Viscosidade Dependente do Tempo	Reopético	A viscosidade aparente aumenta ao longo da duração da tensão
	Tixotrópico	A viscosidade aparente diminui ao longo da duração da tensão
Viscosidade Independente do Tempo	Dilatante	A viscosidade aparente aumenta conforme a tensão aumenta
	Pseudoplástico	A viscosidade aparente diminui conforme a tensão aumenta

Fonte: Tropea *et al*, 2007

A expressão matemática do termo difusivo é diferente para cada tipo de fluido, e os modelos que melhor o descrevem também não são únicos. Um fluido não-newtoniano pode ser descrito por diversos modelos, tais como a Lei de Potência, Cross, Bird-Carreau e Herschel-Bulkley, por exemplo. A escolha do melhor modelo dependerá de uma análise aprofundada de dados experimentais (BARNES *et al*, 1993).

Este trabalho trata de um fluido não-newtoniano, pseudoplástico e em conformidade com a Lei de Potência, também conhecida como correlação de Ostwald–de Waele. Nesses casos, a relação entre viscosidade e cisalhamento é definida através de uma variável chamada viscosidade aparente (μ_{eff}), conforme expresso na Equação 4.

$$\mu_{eff} = K(\dot{\gamma})^{n-1} \quad (4)$$

em que K recebe o nome de índice de consistência do fluido e tem unidade de Pa.sⁿ e n recebe o nome de índice de comportamento do fluido, que por sua vez é adimensional. Quanto maior K , mais “viscoso” é o fluido e, quanto mais próximo n for de 1, menor o desvio com relação a um fluido newtoniano. Se n for igual a 1, é um fluido newtoniano; se n for menor que 1, o fluido é pseudoplástico; e se n for maior que 1, o fluido é dilatante (BLAIR, 1939).

No presente trabalho, será abordado um escoamento laminar, incompressível e no regime estacionário de um fluido não-newtoniano que obedece a lei da potência para a viscosidade aparente. Dessa forma, as equações de continuidade e movimento vistas anteriormente podem ser escritas de acordo com as Equações 5 e 6, respectivamente:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (5)$$

$$\rho \vec{\nabla} \cdot (v\vec{v}) = -\vec{\nabla}P + \vec{\nabla} \cdot (\mu_{eff}\dot{\gamma}) \quad (6)$$

2.4.4. Modelagem para Domínios em Movimento

De acordo com o manual de usuário do Fluent (2019), há duas abordagens possíveis no programa para modelar domínios em movimento. Se o domínio em questão não altera seu formato à medida que se movimenta (ou seja, se ele possui um movimento rígido), o escoamento do fluido neste domínio pode ser modelado através do que se chama de *Moving Reference Frame*.

Esta modelagem é usada para descrever, principalmente, o escoamento de fluidos em turbomáquinas e tanques de mistura. Em CFD, usualmente busca-se modelar o escoamento a partir de um ponto de referência inercial, no que, para a proposta de turbinas e tanques, não se aplica.

A modelagem através de *Moving Reference Frame* surge para remediar esta questão. Ela se trata, em sua essência, de adicionar um componente de aceleração do referencial às equações de movimento. O que estará se movendo não é o fluido em torno de um ponto de origem inerte. O que estará se movendo é, na verdade, o sistema de coordenadas junto com o próprio domínio. Desta forma, a porção de fluido presente naquele domínio estará parada em relação ao referencial, pois estará se movimentando junto com ele. A porção de fluido que estiver fora do domínio de referência, por sua vez, estará em movimento em relação ao ponto de referência (ANSYS, 2011).

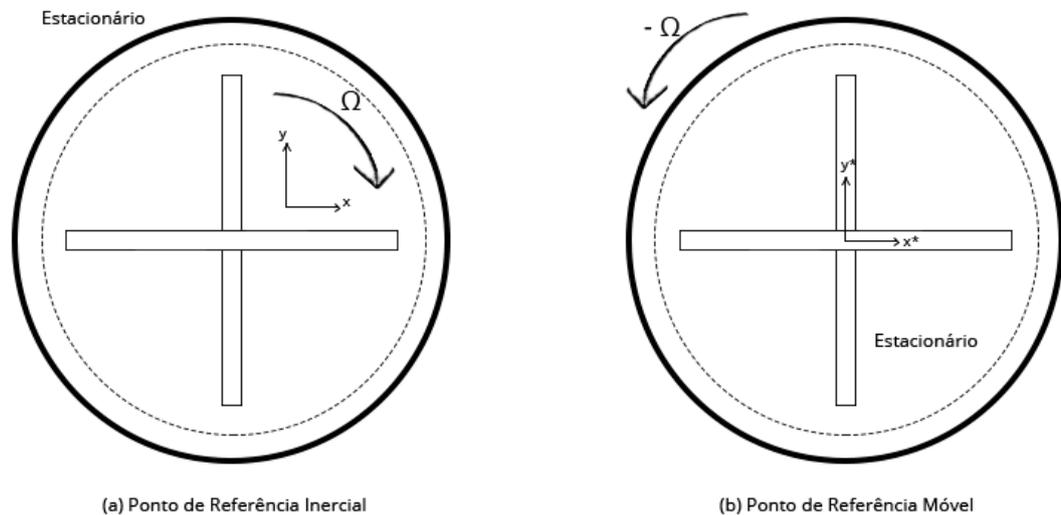


Figura 3 – Reference Frame Usual vs. Moving Reference Frame em rotor-estator.

A Figura 3 ilustra a diferença entre o modelo usual e o Moving Reference Frame através da esquematização de um rotor-estator. No modelo usual, pode-se perceber que a parte que se move com uma velocidade rotacional Ω é o rotor. Isto é natural e equivalente ao que um observador enxergaria acontecendo na vida real. No modelo de Moving Reference Frame, por outro lado, percebe-se que o rotor está

estacionário em relação à nova origem e quem se move na verdade é o fluido exterior a este domínio.

Os problemas envolvendo um ponto de referência em movimento rotacional podem ser resolvidos usando a velocidade absoluta (v) ou a velocidade relativa (v_r) de um domínio, cuja relação é expressa pela Equação 7, onde r é o vetor posição e Ω o vetor velocidade angular.

$$\vec{v}_r = \vec{v} - (\vec{\Omega} \times \vec{r}) \quad (7)$$

A velocidade absoluta v pode então ser substituída nas Equações 5 e 6.

Dentro das modelagens de *Moving Reference Frame*, há três métodos possíveis de serem utilizados. Aquele utilizado no presente estudo é o *Multiple Reference Frame*. Este método é considerado o mais simples dos três. Ele recebe o nome de Single Reference Frame quando há apenas um domínio móvel, e de Multiple Reference Frame quando são necessários diversos domínios diferentes para descrever o movimento do fluido, o que é o caso no presente trabalho. O SRF pode ser exemplificado em um caso em que haja uma única hélice responsável pelo escoamento do fluido, enquanto o MRF é empregado quando há hélices em eixos diferentes, múltiplos rotor-estatores ou outros componentes de mistura com trajetórias de diferentes raios, por exemplo.

Trata-se de uma aproximação no estado estacionário do movimento dos domínios. Neste caso, considera-se que os domínios estão girando junto com suas origens e desconsidera-se a interação entre domínios vizinhos. Embora seja apenas uma aproximação, este método é capaz de descrever com facilidade um modelo de escoamento médio em relação ao tempo. Isto quer dizer que este método não é capaz de demonstrar como o escoamento do fluido muda de acordo com o tempo, mas sim fornece a configuração do escoamento uma vez que este atinge o estado estacionário.

Segundo aconselhado pelo manual (ANSYS, 2019), o SRF/MRF descreve muito bem casos em que as interações entre o domínio estacionário e o rotatório são relativamente fracas. Devido às suas simplificações, considera-se a principal vantagem desse método a menor exigência computacional.

Quando a interação entre os dois domínios é consideravelmente maior (por exemplo, num regime turbulento e de alto cisalhamento), os resultados obtidos

através do SRF/MRF podem ser usados como estimativa inicial para o método *Sliding Mesh*, que é um modelo mais refinado (ANSYS, 2011).

Quando uma solução acurada em função do tempo é necessária, utiliza-se este método. É o método mais exato para descrever um problema de Moving Reference Frame, justamente pelo fato de considerar o componente do escoamento transiente, ou seja, dependente do tempo. Por outro lado, é o método de maior demanda computacional. A sua grande diferença em relação ao MRF é que o movimento dos domínios é calculado com foco na interface entre duas zonas vizinhas, de forma a explicitar o mais detalhadamente possível a interação entre os domínios.

O Fluent (ANSYS, 2011) traz ainda mais uma alternativa aos dois métodos anteriores. É sabido que o modelo MRF não é apropriado para casos em que o escoamento entre dois domínios não é uniforme. Por outro lado, sabe-se também que o Sliding Mesh oferece necessariamente uma solução transiente e de alto custo computacional. Em casos onde não é possível descrever o problema por MRF, mas onde uma solução por Sliding Mesh também não é factível, surge uma terceira opção: o método de *Mixing Plane*.

De acordo com o manual, sua principal diferença para o MRF é que os espaços adjacentes entre dois domínios não são descritos fisicamente como interfaces, mas sim como paredes de entrada ou saída de pressão e velocidade. Desta forma, a interação entre dois domínios pode ser calculada através de perfis de velocidade circunferencialmente distribuídos.

2.4.5. Simulação Numérica

Geralmente, alguns métodos numéricos de discretização são escolhidos para atingir a solução aproximada das equações de movimento e continuidade, sendo alguns deles: o método dos elementos finitos, método dos volumes finitos e o método das diferenças finitas.

O Método dos Elementos Finitos (*FEM*) envolve a criação de elementos de dimensões estabelecidas (e desta forma, finitas), conectados entre si por nós. Para cada elemento, as equações parciais diferenciais de conservação são formuladas individualmente como funções mais simplificadas e descritas por um determinado número de graus de liberdade (SJODIN, 2016). As contribuições de cada elemento

são então combinadas em um sistema de equações algébricas na forma matricial, que é resolvido de forma a encontrar a solução final.

O Método de Diferenças Finitas (*FDM*) é matematicamente definido como um método de aproximação das equações parciais diferenciais através de equações de diferença, que se aproximam das derivadas reais. É considerado o método de implementação mais simples, mas por outro lado é tipicamente usado apenas para geometrias regularmente distribuídas. Dessa maneira, não costuma ser recomendado para geometrias complexas e irregulares (OSSES, 2016).

O Método de Volumes Finitos (*FMV*), por sua vez, também divide a geometria em pequenos volumes simplificados. Contudo, este baseia-se na conservação das leis físicas dentro de um volume de controle: o que entra no volume de um lado, deverá sair do outro lado. A simplificação das derivadas abrange, portanto, a formulação de equações integrais de conservação do fluxo dentro de cada célula. Estas integrais são então resolvidas de forma numérica e o valor aproximado da solução é obtido pelo sistema algébrico já mencionado anteriormente.

Dessa forma, o sistema de equações diferenciais é transformado em um sistema de equações algébricas, que deve ser resolvido numericamente para cada elemento da malha computacional.

3. Metodologia

A proposta do presente trabalho visa a criar um método de scale-up, entre um reator de laboratório e um reator semi-industrial, do processo de mistura de uma emulsão cosmética. O método proposto terá como base a premissa vista anteriormente de que este tipo de fluido é consideravelmente afetado pela taxa de cisalhamento aplicada sobre ele e que, mantendo a mesma taxa média em dois reatores diferentes, pode-se inferir que as emulsões resultantes serão similares. Dessa forma, faz-se necessário a determinação da velocidade de turbina necessária no reator de escala piloto que garanta a mesma taxa de cisalhamento obtida no mesmo processo no reator menor, de laboratório.

Para isso, foi realizada uma primeira etapa de coleta de dados experimentais da emulsão fabricada em laboratório, para melhor compreender a reologia do fluido e como o mesmo se altera conforme o aumento da velocidade da turbina do reator. Em seguida, a taxa de cisalhamento média para cada velocidade de turbina empregada foi encontrada através de simulações computacionais. Por fim, os resultados foram analisados de forma a estabelecer uma correlação matemática entre as velocidades de turbina, taxa de cisalhamento e as constantes K e n do fluido não-newtoniano. Isto foi feito com o intuito de elucidar o método de scale-up, cujas etapas estão resumidas na Figura 4 e serão vistas detalhadamente nesta seção.

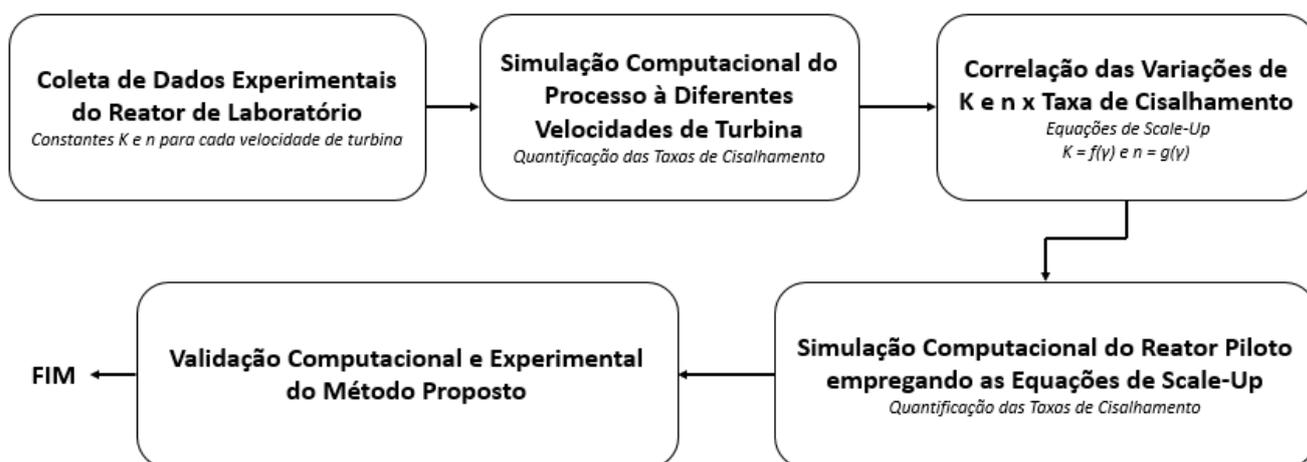


Figura 4 – Fluxograma do método de scale-up proposto.

3.1. Coleta de Dados Experimentais

A primeira etapa do presente estudo deu-se na forma experimental, com o objetivo de caracterizar o fluido estudado. Para isto, o fluido foi primeiramente fabricado no reator de laboratório, em esquema de triplicata.

Devido ao fato da turbina/homogeneizador ser responsável por empregar a maior tensão cisalhante no fluido (ROSEN, 2015), optou-se por empregar as velocidades mínimas de operação permitidas para as hélices e para o raspador. A formulação foi fabricada até a última etapa de homogeneização, seguindo o protocolo recomendado. Detalhes do processo de fabricação não poderão ser explicitados neste trabalho devido a questões de sigilo industrial.

Durante a etapa de homogeneização da formulação, o estudo de influência da turbina foi feito de forma a variar gradualmente a velocidade rotacional da mesma, desde a velocidade mínima permitida até a velocidade máxima, em intervalos de 500 rpm cada. O fluido foi então agitado nessas configurações durante 5 minutos, à temperatura e pressão constantes de 25°C e 1 atm. Entre cada intervalo, alíquotas de cerca de 80 mL foram retiradas para análise da reologia.

O mesmo procedimento foi feito para a fabricação em escala piloto, com o objetivo de obter-se uma batelada confirmatória dos dados computacionais, para validação experimental do método. Como o reator de escala piloto possui um intervalo de operação menor, obtiveram-se menos alíquotas que no reator de laboratório e, portanto, o intervalo de estudo da influência da turbina foi menor. É importante salientar também que os dados experimentais da planta piloto consistem apenas de uma única fabricação (ou seja, não possuindo duplicata ou triplicata), devido a limitações não previstas no tempo de projeto. A Tabela 3 ilustra os parâmetros escolhidos para a fabricação nas duas escalas.

Em seguida, a reologia das alíquotas coletadas foi caracterizada com o auxílio de um reômetro rotacional de placas paralelas, modelo Anton Paar MCR 102. Para cada alíquota (e conseqüentemente para cada velocidade de turbina empregada), foi obtida uma curva de caracterização de viscosidade (em Pa.s) versus taxa de cisalhamento (1/s). Destas curvas, foram retirados os coeficientes n e K da Lei de Oswald-de Waele, apresentados na Equação 4.

Tabela 3 – Dados Operacionais da Fabricação em Batelada

Tipo de Reator	Velocidade dos Raspadores (rpm)	Velocidade das Hélices (rpm)	Intervalo de Velocidades de Turbina (rpm)
Laboratório	20	45	500 - 4500
Piloto	20	45	500 - 3000

Uma quarta fabricação no reator de laboratório foi feita após a realização das simulações computacionais seguindo os mesmos protocolos, de forma a validar o resultado encontrado pelas simulações e garantir a reprodutibilidade do processo.

3.2. Simulações CFD

3.2.1 Geometria

A geometria foi desenhada com o auxílio do programa Space Claim 2020 R1, componente do pacote ANSYS 2020 R1. Por se tratar de um estudo de scale-up entre um reator de escala laboratorial e um de escala piloto, os dois tanques foram desenhados tridimensionalmente no programa, de acordo com os desenhos técnicos concedidos pelos fabricantes.

A estratégia escolhida foi criar uma geometria que representasse apenas a região dos reatores preenchida pelo fluido. Em seguida, foram criados subdomínios cilíndricos para cada parte das duas geometrias de reatores: um domínio para a turbina, um domínio para o raspador e domínios para as pás das hélices (3 para o reator de laboratório; 2 para o reator do piloto). A região restante compõe então o domínio principal do fluido.

A escolha deste tipo de geometria e das subdivisões empregadas foi feita com o intuito adequá-la ao uso do método *Multiple Reference Frame* (MRF). Portanto, trata-se na realidade de simular o fluido se movendo em torno das turbinas, hélices e raspadores, ao invés de simular esses três componentes se movendo em seu próprio eixo e movimentando o fluido.

3.2.2. Malha

Para a etapa de criação das malhas, utilizou-se o programa Meshing 2020 R1, também embutido no pacote ANSYS. Devido aos fatores de qualidade já destacados anteriormente, foram criadas malhas híbridas utilizando-se elementos tetraédricos, prismáticos e piramidais. Foram aplicadas também camadas de *inflation* nas paredes que cerceiam o fluido para melhor descrever o escoamento nas paredes, usando o método de *Smooth Transition* e gerando um total de 4 camadas. A qualidade das malhas, por sua vez, foi quantificada pelos dois critérios já mencionados anteriormente, *skewness* e *orthogonal quality*.

De modo a realizar o teste de independência de malha, foram feitas 3 malhas para cada geometria, aumentando-se gradativamente o refino entre elas, de forma que a malha seguinte possuísse pouco mais do dobro de elementos da malha anterior. Este trabalho buscava inicialmente o emprego do método GCI, contudo, devido à complexidade das geometrias e limitações de poder computacional, este teste não foi possível. Em vez disso, a independência das malhas foi abordada através da comparação e monitoramento de variáveis importantes para o processo, avaliando se estas variáveis mantinham-se constantes entre as três malhas, bem como o grau de erro entre cada uma delas.

Escolheu-se como parâmetro principal a taxa de cisalhamento média no domínio da turbina, na maior velocidade possível (4500 rpm para o laboratório e 3000 rpm para o piloto). A escolha deste parâmetro foi feita devido ao fato de que esta região apresenta a maior velocidade rotacional dentro do reator e, portanto, representa o caso de maior stress no fluido.

A Tabela 4 demonstra as malhas geradas, bem como os parâmetros de qualidade obtidos para elas. A Figura 5, por sua vez, destaca parte das malhas geradas para o reator de laboratório e o reator de piloto. Pode-se observar a presença de *inflation* e de diversos elementos tetraédricos.

Tabela 4 – Parâmetros de Qualidade das Malhas

Parâmetro	Reator de Laboratório			Reator de Piloto			
	Malha 1	Malha 2	Malha3	Malha 4	Malha 5	Malha 6	
Número de Elementos	2.732.717	5.732.109	13.754.481	3.718.269	5.638.800	11.056.791	
Skewness	Mín	0	0	0	0	0	
	Máx	0,998	0,9715	0,967	0,9661	0,965	0,958
	Média	0,252	0,244	0,229	0,265	0,257	0,236
Orthogonal Quality	Mín	0,001	0,01	0,03	0,03	0,03	0,04
	Máx	0,9972	0,9981	0,9986	0,999	0,999	0,999
	Média	0,737	0,755	0,768	0,729	0,735	0,762

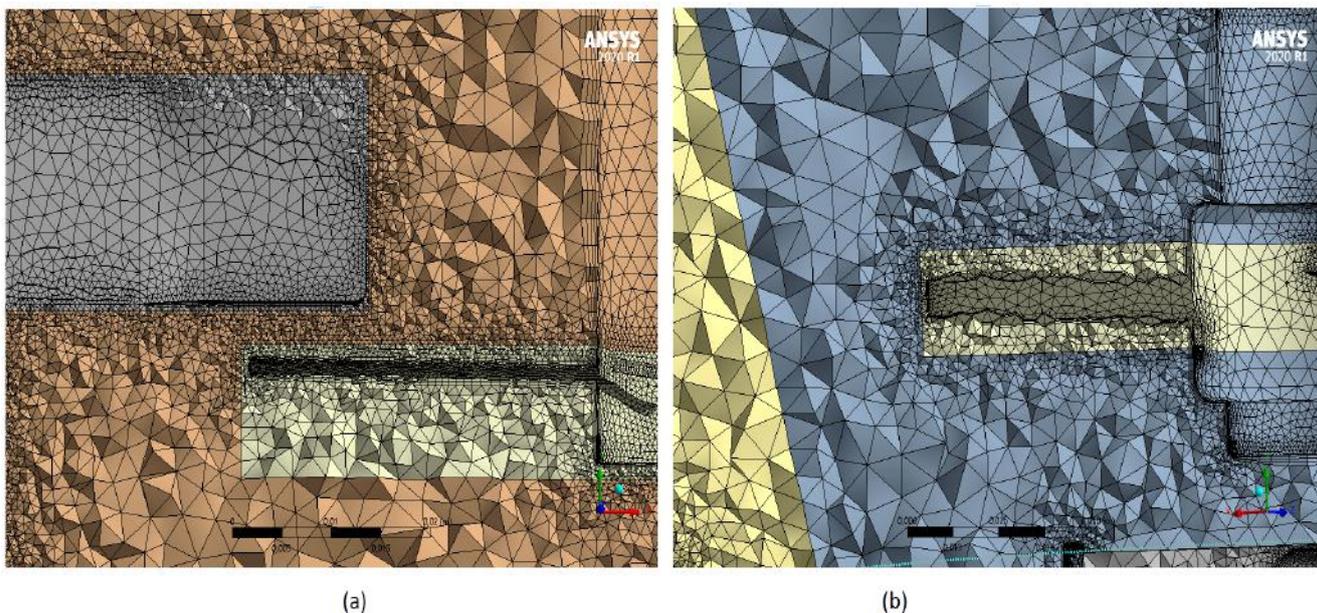


Figura 5 – Destaque parcial da malha do reator de laboratório (a) e de piloto (b).

3.2.3. Simulações Numéricas

As simulações numéricas foram realizadas com o programa Fluent 2019 R2.

Como visto anteriormente, o estudo dividiu o fluido presente nos reatores em domínios de hélices (três domínios para o reator de laboratório e dois para o reator de piloto), um domínio para o eixo dos raspadores e um domínio para a porção rotatória da turbina. A velocidade de cada zona foi configurada no programa conforme os dados explicitados na Tabela 3.

O estudo não considerou efeitos de troca térmica ou de energia, devido ao fato de o processo experimental ter-se dado em condições constantes de temperatura e

pressão. Também não foram considerados efeitos gravitacionais no escoamento do fluido.

Conforme explicitado anteriormente, o processo de homogeneização de um cosmético trata-se, na grande maioria das vezes, de um escoamento laminar, fato que também foi especificado nas simulações numéricas.

Em relação às condições de contorno, o estudo apenas se certificou de especificar as “paredes” entre dois domínios adjacentes como interfaces entre duas zonas contendo um fluido. Por tratar-se de reatores em batelada e sistema fechado, não há nenhuma condição de entrada ou saída a ser especificada.

Para um melhor monitoramento da convergência e uma inicial coleta de dados para o teste de malha, foi necessária a criação da taxa de cisalhamento média na turbina como variável de monitoramento. Para isso, criou-se um *report file* para calcular a média volumétrica da taxa de cisalhamento à cada iteração ocorrida. A convergência pôde ser monitorada quantitativa e graficamente através da relação entre o valor da taxa de cisalhamento e os resíduos de continuidade e velocidade.

Para os casos de ambos os reatores, foi feita uma primeira simulação-teste para determinar a mínima grandeza dos resíduos que garantisse a verdadeira convergência da taxa de cisalhamento, utilizando o *report file* descrito acima. As simulações foram consideradas convergidas quando os resíduos de continuidade e velocidade ficaram menores que $1e-07$ e $1e-08$, para o reator do laboratório e piloto respectivamente.

O fluido simulado foi caracterizado como incompressível e não-newtoniano pseudoplástico, modelado de acordo com a Lei da Potência (Equação 4) e de acordo com os dados experimentais obtidos. A fim de reproduzir computacionalmente o que foi obtido experimentalmente, foi necessário especificar diferentes valores de K e n para cada velocidade de turbina empregada. De certa maneira, isto consiste em considerar que para cada velocidade estamos tratando de um fluido diferente, com K e n específicos para aquela velocidade. Isto é uma consideração razoável, dado que cada velocidade de rotação da turbina implica em diferentes taxas de cisalhamento no fluido de mistura e, portanto, diferentes emulsões com diferentes tamanhos e distribuições de partículas.

Desta forma, como as alíquotas experimentais do reator de laboratório foram obtidas em 8 intervalos de 500 rpm cada, foram necessárias 8 simulações distintas, com velocidades de turbina, K 's e n 's distintos. Uma vez que a simulação do caso de menor velocidade (500 rpm) foi convergida, os valores obtidos foram utilizados como chute inicial para a velocidade seguinte, mecanismo que se repetiu até atingir-se a velocidade de turbina mais alta.

Com o resultado da taxa de cisalhamento média no reator de laboratório e os respectivos valores de K e n empregados para cada velocidade, fez-se necessário criar uma correlação para estas três grandezas, de forma a elucidar um método de scale-up para o reator de planta piloto.

Como discutido anteriormente, espera-se que a manutenção de uma mesma taxa de cisalhamento média entre dois reatores garanta um scale-up de sucesso. Ou seja, se for possível garantir a mesma taxa de cisalhamento no reator piloto que aquela obtido em laboratório, pode-se também garantir que o fluido resultante terá o mesmo K e mesmo n , e por consequência terá o mesmo comportamento reológico. Por outro lado, devido às diferentes geometrias dos reatores, não se espera que uma mesma velocidade de rotação da turbina em ambos forneça a mesma taxa de cisalhamento média. Desse modo, considerando-se que o comportamento reológico do fluido no reator piloto é desconhecido no momento do scale-up, o que se pode fazer é, em posse das simulações numéricas do reator de laboratório, obter expressões matemáticas que expressam K e n em função da taxa de cisalhamento.

Para inserir no Fluent K e n como função da taxa de cisalhamento, foram escritas “funções definidas pelo usuário” (User Defined Functions), que consistem em linhas de código em C++ compiladas previamente à etapa de solução numérica do problema.

Uma vez obtidos os resultados das simulações computacionais de laboratório e piloto, pôde-se definir efetivamente o método de scale-up proposto neste trabalho, determinando qual a velocidade na turbina do reator piloto era necessária para se obter a mesma taxa de cisalhamento média para uma dada rotação de turbina no reator de laboratório.

De modo a testar a consistência do método proposto, foram realizadas simulações adicionais para o reator de laboratório com velocidades de rotação de turbina não utilizadas experimentalmente. As velocidades de turbina escolhidas foram

1250, 1750, 2250, 2750, 3250 e 3750 rpm. Para essas simulações, os valores de K e n foram determinados por interpolação linear com os dados experimentais.

Posteriormente, o método de scale-up proposto permitiu determinar qual deveria ser a velocidade de rotação da turbina no reator piloto que garantisse a mesma taxa de cisalhamento obtida nestas simulações adicionais do reator de laboratório. Foi conduzida então mais uma leva de simulações no reator piloto, onde se comparou as taxas de cisalhamento encontradas com aquelas obtidas no reator de laboratório, para verificar se elas realmente eram iguais.

Por fim, a validação do método de scale-up proposto foi feita comparando os resultados obtidos das simulações numéricas do reator piloto com os dados experimentais obtidos na fabricação realizada no mesmo.

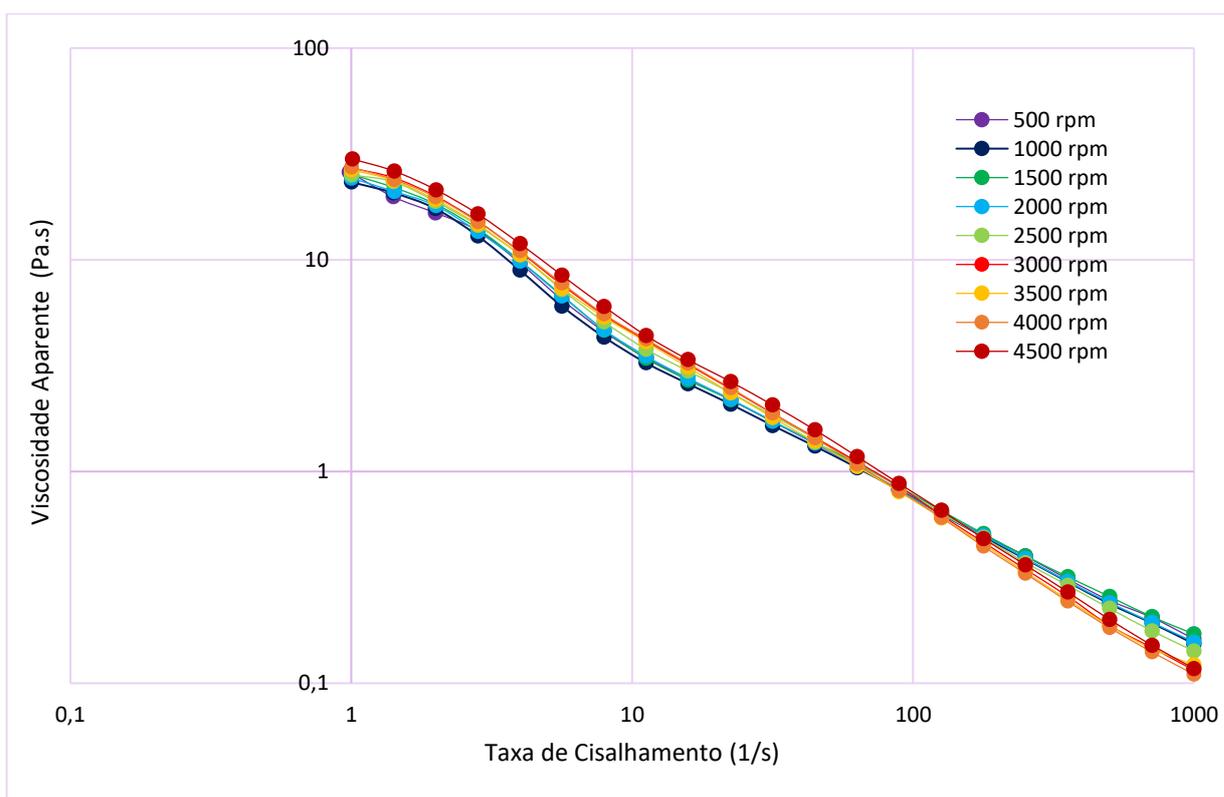
Todas as simulações foram realizadas nas imediações do LabCFD da Universidade Federal do Rio de Janeiro, utilizando um computador com processador Intel Core i7 de 3.4GHz, 8GB de memória RAM e operando com 4 processadores de forma paralela. Para as malhas escolhidas após teste de qualidade, as simulações levaram em torno de 3 horas para o reator de laboratório e cerca de 8 horas para o reator piloto.

4. Resultados e Discussão

Os resultados de cada etapa discutida na metodologia são agora apresentados detalhadamente.

4.1 Dados Experimentais

A Figura 6 apresenta o perfil reológico fornecido pelo reômetro de cada uma das alíquotas retiradas do reator de laboratório para cada velocidade de rotação de turbina especificada nos experimentos. Vale dizer que os valores apresentados se referem à média das triplicatas, cujo desvio padrão máximo foi de 0,0051 Pa.s.



0

Figura 6 – Perfil reológico das amostras do reator do laboratório para cada velocidade de rotação de turbina especificada.

A Figura 6 evidencia que o fluido em questão diminui de viscosidade aparente conforme a taxa de cisalhamento aumenta, podendo então ser tratado como um fluido não-newtoniano com comportamento pseudoplástico.

Pode-se notar ainda na Figura 6 que, para baixas taxas de cisalhamento, a viscosidade aparente da amostra aumenta com a velocidade rotacional da turbina, ou

seja, com a taxa de cisalhamento média no reator. Por exemplo, para uma taxa de cisalhamento de 1 s^{-1} , a alíquota retirada com 500 rpm de rotação no reator do laboratório possui viscosidade aparente de 25,963 Pa.s, enquanto que a amostra de 4500 rpm possui valor consideravelmente maior, de 29,902 Pa.s. Presume-se que isso ocorre devido à memória do fluido, em que ele guarda a memória do cisalhamento submetido pela turbina, hélices e raspador. Como visto anteriormente, quanto maior o cisalhamento aplicado, maior a viscosidade devido a distribuição populacional do óleo na emulsão. Este aumento no cisalhamento será guardado na memória do fluido como sua viscosidade dinâmica e, mesmo sob novo cisalhamento, ele está com a estrutura molecular de sua confecção.

Na medida que o reômetro aplica cisalhamento durante o teste, o fluido preservará o mesmo comportamento, até um determinado ponto onde o cisalhamento do reômetro se equipare ao cisalhamento que o fluido sofreu durante sua fabricação. Pode-se ver na Figura 6 que esta inversão ocorre para taxas de cisalhamento aproximadamente a partir de 126 s^{-1} . Isso corrobora que para cada amostra tem-se um fluido distinto, que deve então ter K e n específicos.

Conforme discutido na Seção 2.1, a tensão provocada por altas velocidades de turbina acaba diminuindo o tamanho das gotículas da fase oleosa, o que acaba aumentando a viscosidade do fluido. Acredita-se que, por um lado, a viscosidade do fluido aumenta em caráter microscópico devido ao stress aplicado pelo rotor-estator; por outro, o cisalhamento aplicado pelas placas paralelas do reômetro não exerce nenhum tipo de tensão microscópica e dessa maneira apenas quantifica a tensão macroscópica sofrida pelo fluido, que causa a diminuição da viscosidade. Seriam necessárias algumas análises físico-químicas adicionais e fora do escopo deste trabalho, como granulometrias ou microscopias, para confirmar que isto de fato ocorre durante o processo de mistura aqui estudado.

As curvas da Figura 6 foram ajustadas à Equação 4, de modo a determinar os valores de K e n para cada velocidade de turbina do reator piloto. Os resultados encontram-se na Tabela 4, onde pode-se confirmar pelos elevados coeficientes de determinação R^2 que a lei de potência modela adequadamente o fluido em questão.

Tabela 5 – Parâmetros da correlação de Oswald-de Waele (Equação 4) para diferentes velocidades de turbina do Reator de Laboratório

Velocidade da Turbina (rpm)	k	n	R ²
500	24,484	0,254	0,9964
1000	23,598	0,254	0,9957
1500	25,318	0,251	0,9949
2000	25,289	0,244	0,9965
2500	28,172	0,220	0,9979
3000	31,758	0,183	0,9989
3500	30,446	0,187	0,9989
4000	32,221	0,174	0,999
4500	34,945	0,174	0,999

A Figura 7 apresenta a caracterização reológica das alíquotas do reator piloto, obtidas para servir como parâmetro para validação do método de scale-up.

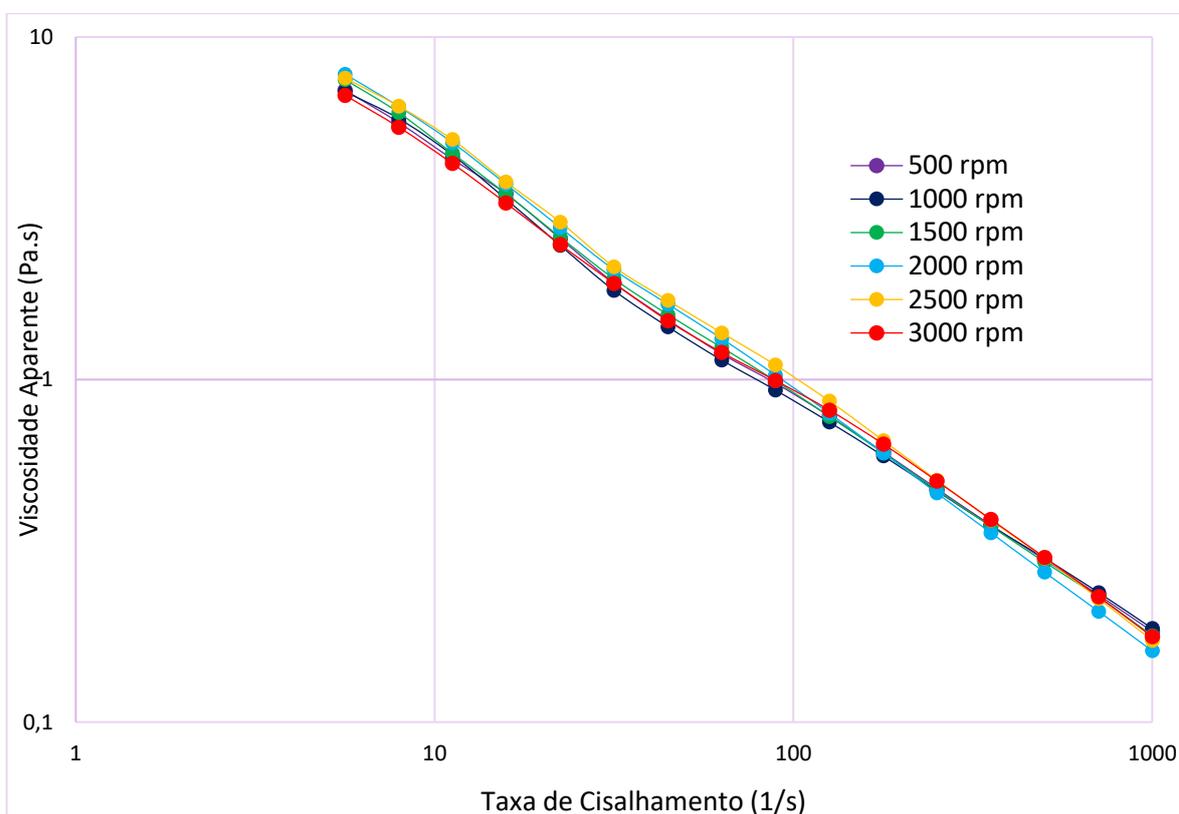


Figura 7 - Perfil reológico das amostras do reator piloto para cada velocidade de rotação de turbina especificada.

4.2 Teste de Malha

A geração das 6 malhas indicadas na Tabela 4 mostrou ser um grande desafio, devido à complexidade das duas geometrias envolvidas. A presença de pás com ângulos retos e de raspadores multifacetados acabou acarretando diversos erros iniciais e gerando malhas com altos valores de skewness. A complexidade das geometrias resultou também em uma quantidade mínima de células maior que 1 milhão, o que usualmente é considerado uma malha computacionalmente pesada. A confecção de malhas menos refinadas provou-se impossível, com o programa *Meshing* acusando “tentativas falhas de geração da malha”.

O esforço computacional para processar as maiores malhas de cada reator implicou em simulações pouco práticas e que levaram cerca de três dias para serem calculadas. Desta forma, apesar da inicial intenção de utilizar-se um método mais exato e apropriado de teste de malha (método GCI), o teste foi limitado apenas ao monitoramento da taxa de cisalhamento média, por motivos de altíssima demanda computacional.

A Tabela 6 apresenta o resultado do monitoramento da taxa de cisalhamento média nos domínios do reator de laboratório.

Tabela 6 – Taxas de cisalhamento médias no reator de laboratório com velocidade de rotação da turbina de 4500 rpm para as malhas da Tabela 4

Domínio	Malha 1 (2.732.717 cél.)		Malha 2 (5.732.109 cél.)		Malha 3 (13.754.481)	
	Taxa de Cisalhamento Média (1/s)	Média Total	Taxa de Cisalhamento Média (1/s)	Média Total	Taxa de Cisalhamento Média (1/s)	Média Total
Hélices	30,76	4447,56	15,919	2807,534	15,87	2809,129
Raspadores	10,834		4,9155		4,901	
Turbina	4517,32		2989,12		2902,71	
Fluido	80,55		21,84		22,92	

Os dados acima mostram que os valores das taxas de cisalhamento média para as Malhas 2 e 3 são praticamente iguais, com erros relativos de menos de 1%. A Malha 1, por outro lado, apresenta valores de cisalhamento completamente diferentes. Uma análise gráfica de pós-processamento também demonstra que o perfil do escoamento da Malha 1 é significativamente diferente e de menor qualidade, porém, por não ser possível mostrar detalhes da geometria dos reatores devido a

questões de confidencialidade, este resultado não pode ser mostrado.

Tendo em vista a similaridade de resultados entre a Malha 2 e a Malha 3, o ganho em acurácia no resultado não justifica o aumento significativo da demanda computacional proveniente da criação de 8 milhões de células adicionais. Portanto, a Malha 2 foi escolhida como a mais adequada, por aliar um resultado confiável a uma demanda computacional baixa.

O mesmo tipo de análise também foi feito para o reator de piloto, cujo resultado é expresso pela Tabela 7.

De maneira similar ao reator de laboratório, pode-se perceber que os resultados são praticamente iguais para as Malhas 5 e 6, representando um erro menor que 5%. Este aumento do erro e maior sensibilidade da malha já era esperado devido à maior complexidade da geometria deste reator. Contudo, o erro relativo em si é pequeno e podemos considerar que a Malha 5 é a mais adequada, pelos mesmos motivos elucidados anteriormente.

Tabela 7 – Taxas de cisalhamento médias no reator piloto com velocidade de rotação da turbina de 3000 rpm para as malhas da Tabela 4

Domínio	Malha 4 (3.718.269 cél.)		Malha 5 (5.638.800 cél.)		Malha 6 (11.056.791 cél.)	
	Taxa de Cisalhamento Média (1/s)	Média Total	Taxa de Cisalhamento Média (1/s)	Média Total	Taxa de Cisalhamento Média (1/s)	Média Total
Hélices	23,451	5492,37	15,4603	2858,06	16,126	2873,12
Raspadores	15,782		7,6879			
Turbina	5601,98		2928,4			
Fluido	58,912		44,612			

4.3 Simulação Numérica

4.3.1 Reator de Laboratório

A Tabela 8 apresenta as taxas de cisalhamento médias na turbina obtidas em cada simulação numérica, correlacionando-as também com os valores de K e n empregados em seu cálculo.

Tabela 8 – Taxas de cisalhamento médias na turbina obtidas nas simulações numéricas do reator de laboratório com diferentes velocidades de rotação da turbina

Velocidade de Turbina (rpm)	K	n	Taxa de Cisalhamento Média (1/s)
500	24,484	0,254	85,96
1000	23,598	0,254	253,65
1500	25,318	0,251	507,38
2000	25,289	0,244	814,98
2500	28,172	0,220	1092,45
3000	31,758	0,183	1592,90
3500	30,446	0,187	1886,27
4000	32,221	0,174	2398,74
4500	34,945	0,174	2807,54

Pode-se observar que a taxa de cisalhamento média dentro do reator é significativamente pequena para valores baixos de rotação de turbina, sendo especialmente baixa à 500 rpm. Contudo, pode ser que, nesta configuração, a rotação e o cisalhamento empregados não sejam suficientes para homogeneizar totalmente o fluido, dado que as hélices e turbinas também estão operando na mínima velocidade possível.

Um ajuste dos dados da Tabela 8 permite correlacionar a taxa de cisalhamento no reator de laboratório com a velocidade de rotação de sua turbina de acordo com a Equação 8.

$$\dot{\gamma} = 0,0042 \cdot \Omega^{1,5979} \quad (8)$$

Para esta regressão, obteve-se um coeficiente de determinação (R^2) de 0,9993, o que demonstra que a aproximação por uma função exponencial é apropriada.

A Tabela 8 permitiu também obter expressões de K e n como funções da taxa de cisalhamento para uso posterior nas simulações numéricas do reator piloto. As Figuras 8 e 9 mostram como foram ajustadas essas funções.

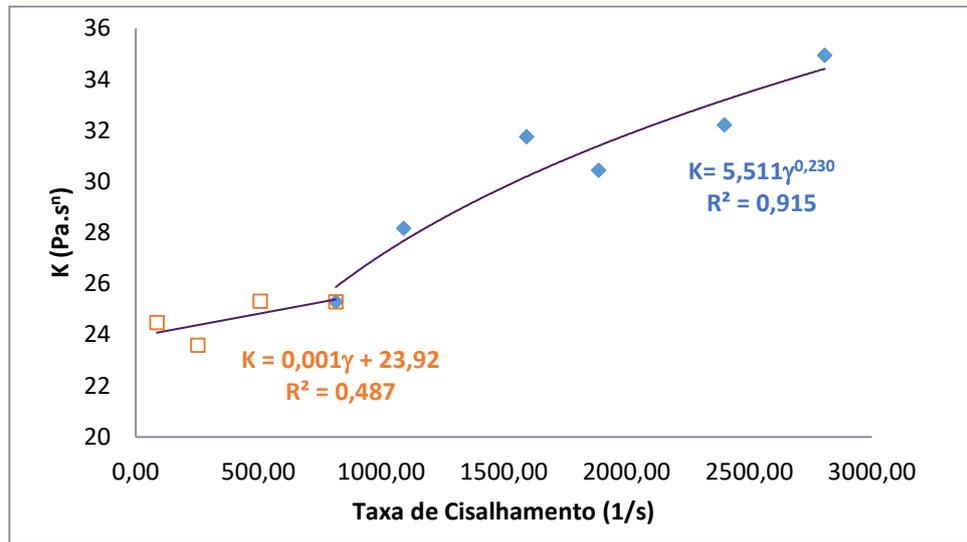


Figura 8 – Ajustes do índice de consistência K como função da taxa de cisalhamento no reator de laboratório.

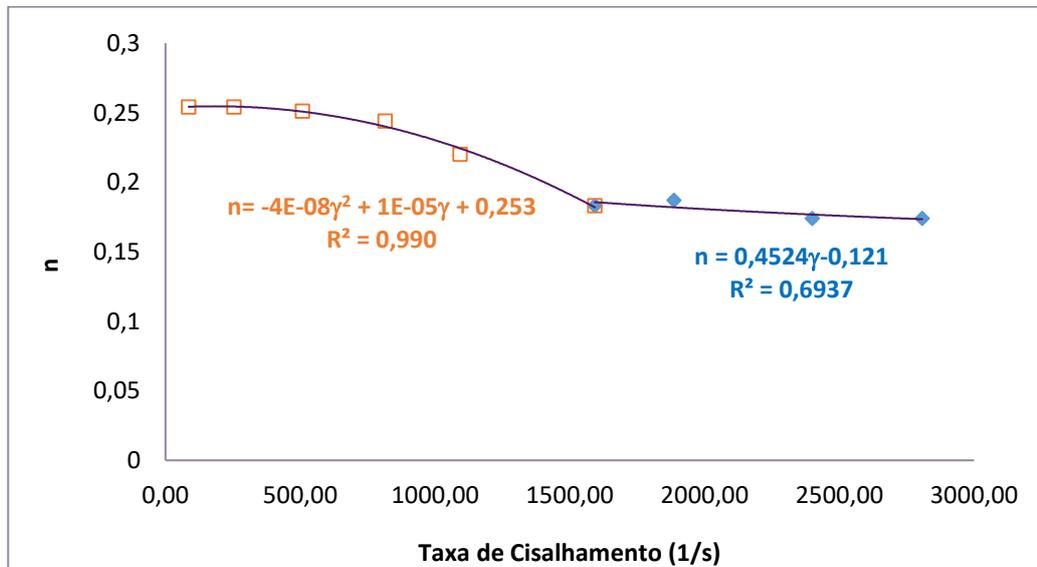


Figura 9 – Ajustes do índice de comportamento do fluido n como função da taxa de cisalhamento no reator de laboratório.

Pode-se perceber que foram necessárias duas funções distintas para modelar ambos K e n como função da taxa de cisalhamento. Os dois parâmetros são divididos em duas zonas de valores, onde possuem comportamentos diferentes. É importante notar que o valor utilizado para a taxa de cisalhamento é necessariamente positivo na Equação 5, tal que não é preocupante a previsão de K e n para valores baixos extrapolados desses parâmetros. Ambas as funções adotadas para baixos K e n retornam valores plausíveis até taxa de cisalhamento nula. As funções adotadas para altos valores de taxa de cisalhamento tendem a um valor aproximadamente constante

dentro da faixa de taxa de cisalhamento esperada, de tal modo que não se espera qualquer problema de extrapolação.

É de se destacar que algumas expressões escolhidas para modelar K e n como função da taxa de cisalhamento nas Figuras 8 e 9 possuem coeficientes de determinação R^2 bem baixos. Apesar disso, os erros de predição resultantes para estas funções também são baixos, mostrando pouco impacto no resultado final dos parâmetros, conforme mostrado na Tabela 9.

Tabela 9 – Erros percentuais de K e n

K	K modelado	Erro (%)	n	n modelado	Erro (%)
24,484	24,084	1,63	0,254	0,254	0,01
23,598	24,386	3,34	0,254	0,253	0,25
25,318	24,842	1,88	0,251	0,248	1,13
25,289	25,396	0,28	0,244	0,235	3,70
28,172	27,686	1,725	0,22	0,217	1,55
31,758	30,203	4,897	0,183	0,185	1,30
30,446	31,404	3,146	0,187	0,182	2,88
32,221	33,194	3,021	0,174	0,176	1,39
34,945	34,422	1,498	0,174	0,173	0,52

4.3.2 Reator Piloto

As simulações numéricas do reator piloto utilizaram as funções de K e n apresentadas nas Figuras 8 e 9 para caracterizar o fluido de mistura. A Tabela 10 explicita as taxas de cisalhamento médio na turbina obtidas com as simulações numéricas para cada velocidade de rotação da turbina. São também apresentados os valores de K e n para essas taxas de cisalhamento médias.

Assim como no caso do reator de laboratório, a regressão dos dados da tabela nos permite concluir que a taxa de cisalhamento média em função da velocidade de turbina pode ser descrita por uma função exponencial (Equação 9) com um bom coeficiente de determinação $R^2 = 0,9967$.

$$\dot{\gamma} = 0,0629\Omega^{1,3454} \quad (9)$$

De modo avaliar a importância de expressar K e n em função da taxa de cisalhamento, as simulações no reator piloto também foram conduzidas para valores de K e n constantes e iguais àqueles determinados experimentalmente no reator de laboratório para as mesmas velocidades de rotação da turbina. Os resultados

qualitativos estão apresentados na Figura 10 e os quantitativos na Tabela 10.

Tabela 10 – Taxas de cisalhamento médias na turbina e respectivos K e n (Equação 5) obtidos nas simulações numéricas do reator piloto com diferentes velocidades de rotação da turbina

Velocidade de Turbina (rpm)	Taxa de Cisalhamento Média (1/s)	K	n
500	256,99	24,392	0,252
1000	701,50	25,192	0,238
1500	1281,87	26,679	0,195
2000	1762,38	28,712	0,183
2500	2232,91	30,323	0,178
3000	2916,50	32,250	0,172

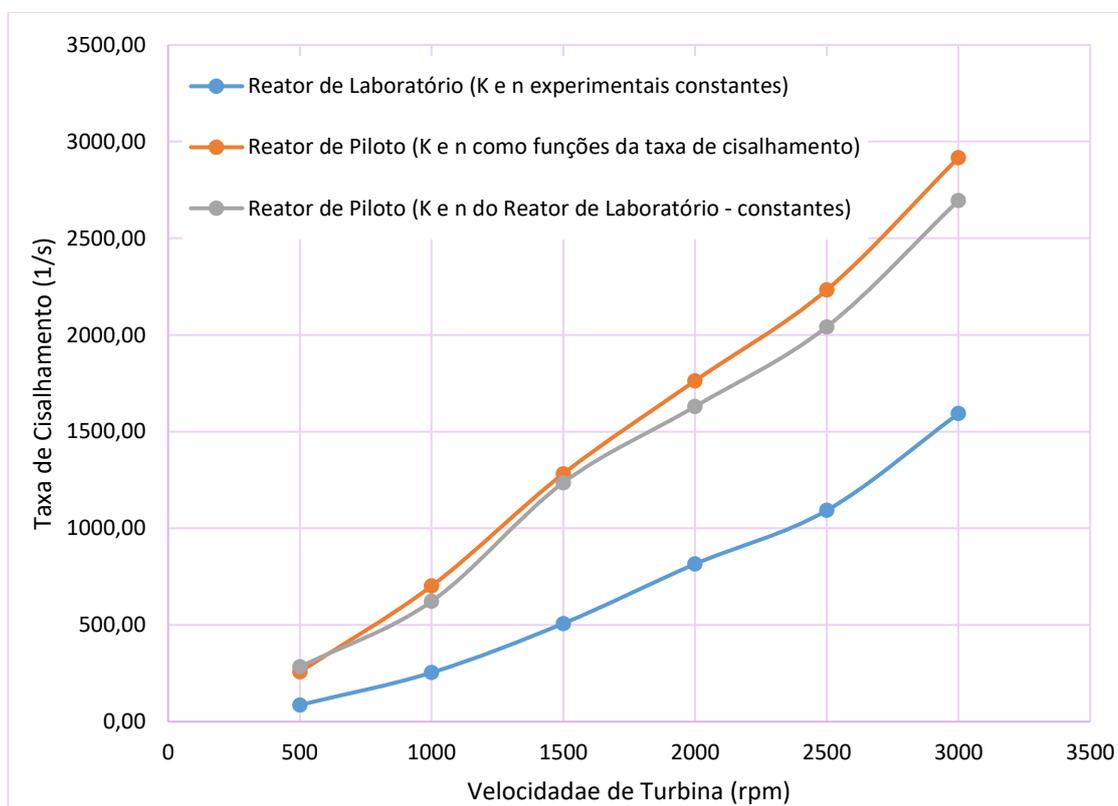


Figura 10 – Curvas de Velocidade de Turbina x Taxa de Cisalhamento para as três abordagens analisadas.

Pode-se ver na Figura 10 que há pouca mudança no perfil da taxa de cisalhamento quando K e n são utilizados como constantes, especialmente para baixas velocidades de turbina, em que a maior diferença, de acordo com a Tabela 11

a seguir, é de aproximadamente 13%. Por outro lado, esta diferença implica em mudanças de mais de 30% na viscosidade resultante do produto.

Tabela 11 – Taxa de Cisalhamento média e viscosidade aparente obtidas nas simulações do reator piloto como função dos valores de K e n utilizados

Velocidade da turbina (rpm)	K e n como função da taxa de cisalhamento		K e n constantes e iguais ao do Reator de Laboratório		Diferença no cálculo da taxa de cisalhamento (%)	Diferença no cálculo da viscosidade aparente (%)
	Taxa de cisalhamento média (1/s)	Viscosidade aparente média (Pa.s)	Taxa de Cisalhamento Média (1/s)	Viscosidade Aparente Média (Pa.s)		
500	256,99	0,385	282,84	0,363	9,14	6,00
1000	701,50	0,171	621,97	0,194	12,79	12,17
1500	1281,87	0,084	1235,62	0,122	3,74	31,15
2000	1762,38	0,064	1629,57	0,094	8,15	32,11
2500	2232,91	0,054	2041,80	0,074	9,36	27,42
3000	2916,50	0,044	2695,31	0,050	8,21	12,58

Dessa forma, conclui-se que levar em conta a variação de K e n com a taxa de cisalhamento é um procedimento relevante, uma vez que não são esperadas (e a Figura 10 confirma) as mesmas taxas de cisalhamento em ambos os reatores para mesmas velocidades de rotação de suas turbinas. Isto ocorre devido às diferentes geometrias dos reatores, conforme já discutido.

4.3.3. Método de Scale-up Proposto

O método proposto pelo presente trabalho envolve, essencialmente, a correlação entre as velocidades de rotação dos reatores e as taxas de cisalhamento resultantes. Este método foi elaborado para que o operador, presente na planta piloto da vida real, possa ter uma tabela, equação ou correspondência visual que indique a velocidade de rotação de turbina a ser empregada, a partir da velocidade utilizada por outros operadores no reator de laboratório.

O método pode ser dividido em três etapas simples:

1. Leitura gráfica da velocidade de turbina que se empregou ou pretende-se empregar no reator de laboratório e leitura, no eixo y , da taxa de cisalhamento correspondente;

2. A partir do valor da taxa de cisalhamento correspondente (ou seja, do valor do eixo y), traça-se uma reta que vá de encontro à curva do reator de piloto;

3. Por último, é feita uma interpolação linear entre os dois pontos da curva que cruzam a reta traçada (pontos A e B na Figura 12), de modo a quantificar a velocidade de turbina do piloto que deve ser empregada para reproduzir o mesmo perfil de escoamento daquele empregado em laboratório.

A Figura 12 auxilia visualmente o passo-a-passo descrito acima.

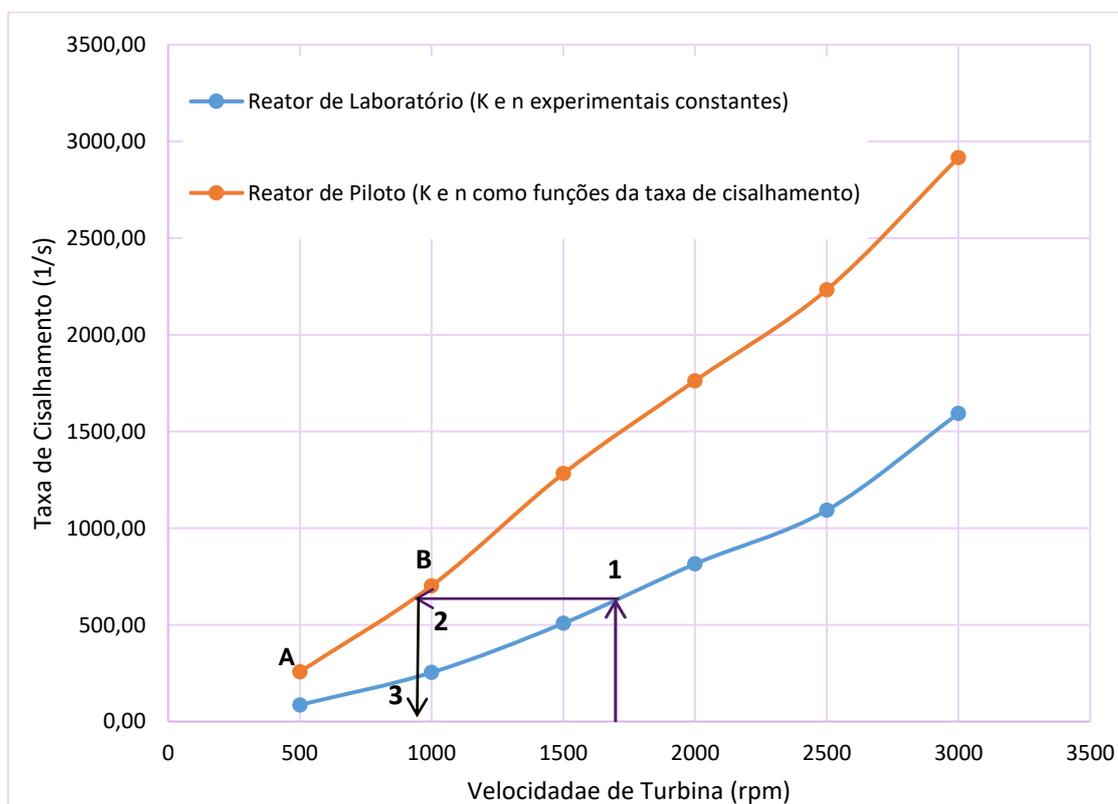


Figura 12 – Representação visual do método de scale-up proposto.

É importante frisar que, em um primeiro momento, foi feita a tentativa de criar uma correlação matemática de scale-up entre as equações das curvas (Equações 8 e 9). Contudo, não foram encontradas correlações que descrevessem todos os pontos das curvas de maneira satisfatória, e, portanto, optou-se por uma abordagem que garantisse o menor erro possível, tal como a abordagem acima.

4.3.4 Teste de Consistência do Método de Scale-up

De modo a testar a consistência do método de scale-up, foram realizadas simulações adicionais do reator de laboratório com valores de velocidade de rotação de turbina não especificados experimentalmente. Assim, as taxas de cisalhamento para valores intermediários de velocidade de rotação de turbina do reator de laboratório foram calculadas computacionalmente.

A Tabela 12 apresenta as taxas de cisalhamento resultantes, bem como os K 's e n 's correspondentes, obtidos através das funções apresentadas nas Figuras 8 e 9. Os resultados apresentados estão condizentes com o esperado, pois seguem a previsão exponencial descrita pela Equação 8.

Aplicando o método de scale-up proposto, pôde-se então determinar qual deve ser a velocidade de rotação da turbina do reator piloto que obtenha a mesma taxa de cisalhamento do reator de laboratório.

Tabela 12 – Taxas de cisalhamento médias na turbina e respectivos K e n (Equação 4) obtidos nas simulações numéricas do reator de laboratório para velocidades de rotação da turbina adicionais

Velocidade da Turbina (rpm)	Taxa de Cisalhamento (1/s)	k	n
1250	362,535	24,458	0,253
1750	609,963	25,304	0,248
2250	919,254	26,731	0,242
2750	1357,426	29,965	0,251
3250	1776,35	31,102	0,185
3750	2057,45	31,334	0,177
4250	2342,89	33,583	0,174

A Tabela 13 apresenta os valores de velocidade de rotação da turbina do reator piloto determinados pelo método de scale up e as respectivas taxas de cisalhamento obtidas com as simulações numéricas do mesmo.

Tabela 13 – Velocidades de rotação da turbina do reator piloto, determinada pelo método de scale-up proposto em função da velocidade de rotação da turbina do reator de laboratório, e respectivas taxas de cisalhamento obtidas com as simulações numéricas do reator piloto

Velocidade de Turbina em Laboratório (rpm)	Taxa de Cisalhamento (1/s)	Velocidade Correspondente no Piloto (rpm)
1250	362,54	618,73
1750	609,96	897,04
2250	919,25	1187,59
2750	1357,43	1578,63
3250	1776,35	2028,44
3750	2057,45	2318,78
4250	2342,89	2587,95

Os valores obtidos acima foram utilizados em novas simulações do reator piloto, conforme mencionado na seção de metodologia, afim de validar a proposta do presente trabalho. A Tabela 14 e a Figura 13 mostram os resultados destas simulações de forma comparativa.

Tabela 14 – Resultados do Teste de Consistência do Método

Velocidade Correspondente no Piloto (rpm)	Taxa de Cisalhamento (1/s)	Taxa de Cisalhamento Encontrada pela Simulação (1/s)	Diferença (%)	K	n
618,73	362,54	366,91	1,19	24,589	0,250
897,04	609,96	628,37	2,93	25,060	0,242
1187,59	919,25	960,37	4,28	24,709	0,225
1578,63	1357,43	1299,76	4,44	27,034	0,188
2028,44	1776,35	1757,71	1,06	28,764	0,183
2318,78	2057,45	2125,21	3,19	29,756	0,180
2587,95	2342,89	2312,50	1,31	30,661	0,177

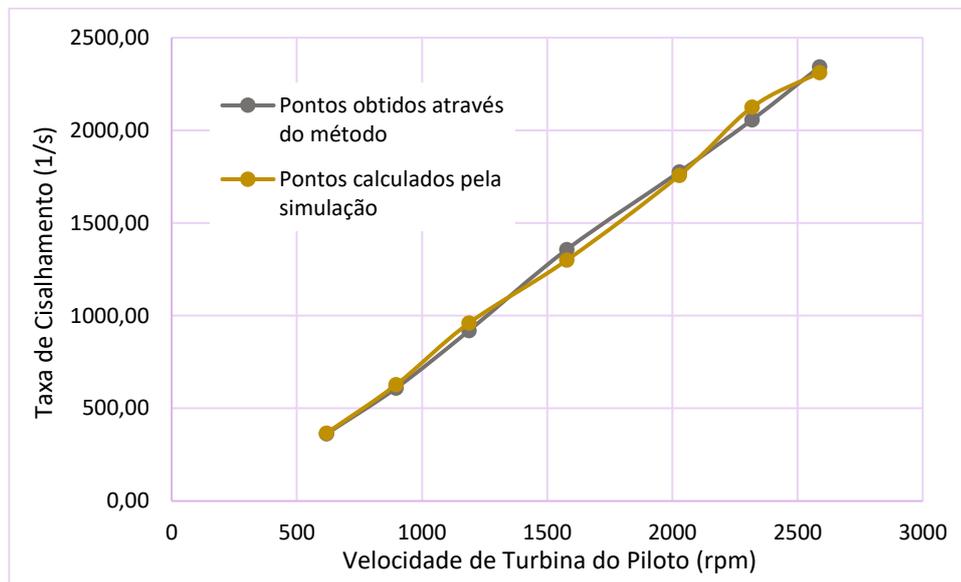


Figura 13 – Comparação gráfica entre a taxa de cisalhamento encontrada pelo método e pelo teste de consistência do mesmo.

Os resultados acima permitem concluir que o método foi realizado com sucesso, pois conseguiu-se determinar com êxito a velocidade de rotação da turbina do reator piloto que retorna taxa de cisalhamento similar àquela observada no reator de laboratório.

4.3.5 Validação do Método de Scale-up com Resultados Experimentais

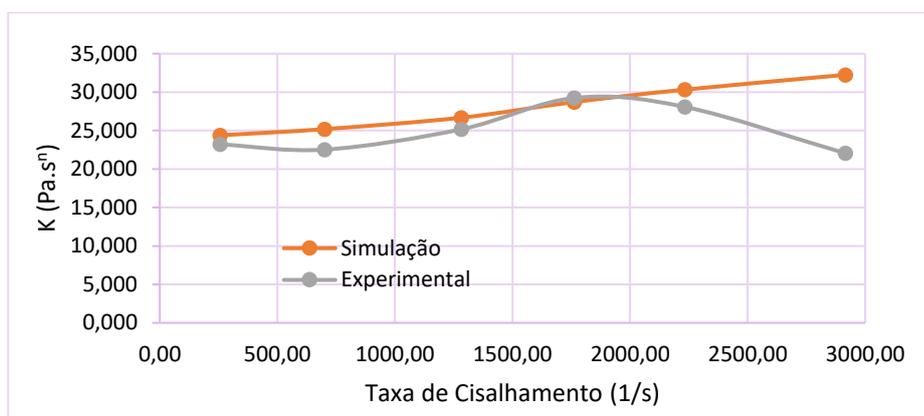
Apesar de valioso, o teste de consistência do método de scale-up proposto ainda não garante que o método funcione na prática. Para isso, é necessário analisar também se os resultados computacionais estão condizentes com os dados experimentais obtidos com o reator piloto. A Tabela 15 e a Figura 14 fazem a análise comparativa entre os dois.

Tabela 14 – Comparativo dos resultados experimentais e computacionais de K e n para o reator piloto

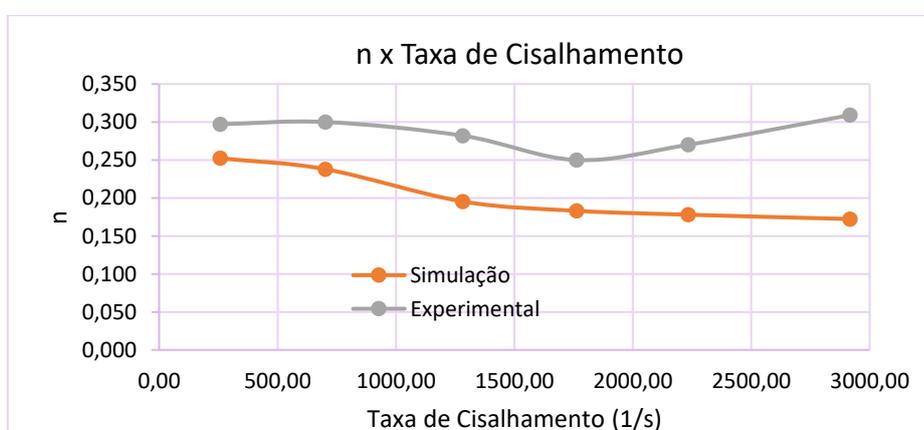
Vel. de Turbina (rpm)	Taxa de Cisalhamento (1/s)	K experimental	k Simulação	Erro %	n experimental	n simulação	Erro %
500	256,989	23,207	24,392	4,86	0,297	0,252	15,05
1000	701,502	22,526	25,192	10,58	0,300	0,238	20,69
1500	1281,867	25,167	26,679	5,67	0,282	0,195	30,72
2000	1762,38	29,239	28,712	-1,84	0,250	0,183	26,75
2500	2232,91	28,080	30,323	7,40	0,270	0,178	34,09
3000	2916,5	22,048	32,250	31,63	0,309	0,172	44,24

Pode-se observar na Tabela 14 que há uma discrepância considerável entre os valores experimentais e as simulações computacionais. Os valores de K (à exceção da velocidade de turbina de 3000 rpm) ainda possuem uma discrepância abaixo de 10%, porém os valores de n apresentam erros percentuais significativos, conforme pode-se observar nas Figuras 15a e 15b.

Esta dúvida fica ainda mais evidente ao analisar em mais detalhes os gráficos da Figura 15: as variações de n e K obtidos experimentalmente no reator piloto possuem um comportamento completamente diferente daquele descrito pela simulação (destacado em laranja) ou pelos dados experimentais do reator de laboratório (apresentado anteriormente nas Figuras 8 e 9), em que K aumenta com a velocidade de rotação da turbina e n diminui. Por se tratar da mesma formulação, esperava-se que os dois resultados experimentais apresentassem perfis iguais de comportamento, o que não é o caso.



(a)



(b)

Figura 15 – Comparação do (a) índice de consistência K e do (b) índice de comportamento n obtidos experimentalmente e por simulação numérica do reator piloto.

Além disso, vale denotar que a forma de coleta das alíquotas do reator piloto foi feita de forma diferente à coleta das alíquotas no reator de laboratório. Devido à diferentes engenharias nos dois reatores, as amostras do reator piloto só podem ser retiradas através de um cano de descarga no fundo do tanque, similar à uma torneira ou barril de chope. É possível que a passagem por este cano acabe conferindo um cisalhamento adicional que não foi considerado na simulação computacional, e que pode acabar sendo parcialmente responsável pela mudança nos valores esperados de K e n .

A resposta, contudo, só poderá ser teorizada a partir da continuação dos estudos propostos no presente trabalho.

5. Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

Este trabalho promoveu uma análise do escoamento de uma emulsão cosmética em dois reatores distintos, de escala laboratorial e semi-industrial, por meio de simulações numéricas utilizando fluidodinâmica computacional. Além disso, o trabalho propôs um método de scale-up entre os dois reatores através da manutenção da taxa de cisalhamento média aplicada sobre o fluido e da sua correlação com os parâmetros reológicos K e n da correlação de Ostwald-de Waele.

O objetivo principal do trabalho foi atingido de maneira satisfatória. A partir dos resultados obtidos pelas simulações, foi possível compreender qualitativa e quantitativamente o escoamento do fluido dentro dos dois reatores, coisa que não seria possível ou factível a olho nu. Os resultados permitiram obter-se diversas expressões matemáticas que caracterizam o escoamento do fluido, mostrando que a variação da taxa de cisalhamento com o aumento da velocidade de turbina se dá de forma exponencial.

Através dos resultados foi possível, também, obter uma correlação entre as velocidades de turbina no reator de laboratório e no reator de piloto, em função de uma taxa de cisalhamento desejada. Isto é importante pois pode permitir que o operador escolha a velocidade de turbina correta no reator de piloto, de forma a reproduzir a mesma taxa de cisalhamento do laboratório e, por consequência, obter uma emulsão cosmética de mesma viscosidade.

A reprodutibilidade das correlações de cisalhamento e velocidade de turbina permitiu testar a consistência do método proposto. Por outro lado, a validação não foi atingida no âmbito experimental, devido à significativa discrepância entre os valores calculados e os valores reais dos coeficientes reológicos K e n . Ou seja, a predição de viscosidade através do método proposto foi comprovada numericamente, porém experimentalmente acabou por obter-se um fluido diferente do esperado.

Uma forma possível de tentar contornar este problema, mantendo ainda a maior parte das simplificações adotadas neste trabalho, seria tentar realizar uma análise de grupos adimensionais e ter como meta a manutenção destes em ambos os reatores. Porém, isto fica como proposta para trabalhos futuros.

Ainda como continuação do presente trabalho, pode-se incluir um planejamento experimental apropriado, de forma a garantir a fabricação em duplicata

da etapa de fabricação no reator piloto, para uma melhor acurácia dos resultados e validação experimental do modelo de scale-up proposto. Além disso, seria interessante também a inserção da etapa de descarregamento do reator, para analisar possíveis influências na taxa de cisalhamento e nos coeficientes reológicos do fluido.

Outro aspecto recomendável para estudos posteriores seria a inclusão de uma avaliação da verdadeira influência da variação das velocidades de rotação das hélices e raspadores. No presente trabalho, essa avaliação limitou-se apenas ao emprego das velocidades mínimas de rotação destes componentes, para estudar apenas a influência da turbina. Em um próximo estudo, seria interessante empregar variações destas velocidades em ambas as partes para entender o verdadeiro impacto destes componentes no processo de mistura como um todo.

Outros estudos possíveis e interessantes seriam, ainda, o emprego de diferentes métodos computacionais, como o *Mixing Plane* ou o *Sliding Mesh*, de forma a obter resultados mais acurados e em estado transiente. Desta forma, seria possível comparar os resultados obtidos com os encontrados no presente trabalho, de forma a encontrar a metodologia mais apropriada para os desafios de acurácia do resultado versus demanda computacional.

Outra proposta atraente seria, também, a inclusão de modelos que descrevam o comportamento da emulsão de acordo com a taxa de cisalhamento. Existem na literatura diversos métodos já bem estabelecidos para modelar balanços populacionais e de mecanismos de quebra de gotículas, com destaque especial para os trabalhos de Naeeni e Pakzad (2019), Gallassi *et al* (2019) e Michael *et al* (2017). Aliando estes modelos às simulações já realizadas, seria possível a quantificação das contribuições microscópicas da emulsão na viscosidade total do fluido, e talvez se possa também explicar as inconsistências encontradas nos resultados experimentais.

6. Referências Bibliográficas

AGÊNCIA NACIONAL DE VIGILÂNCIA SANITÁRIA (Brasil). **Guia de Controle de Qualidade de Produtos Cosméticos: Uma Abordagem sobre os Ensaios Físicos e Químicos**. Brasília, 2. ed. Editora Anvisa, 2008. 120 p. ISBN 978-85-88233-34-8.

ALLISON, Chloe. **Meshing in FEA: Structured vs Unstructured meshes**. Onscale Blog, 1 abr. 2020. Disponível em: <https://onscale.com/blog/meshing-in-fea-structured-vs-unstructured-meshes/>. Acesso em: 14 jan. 2021.

ANSYS INC. **ANSYS Fluent Theory Guide**. 11. ed., 2001.

ANSYS INC. **ANSYS Fluent Theory Guide**. 20.0. ed., 2019.

ARAUJO, Eduardo. Métodos Numéricos para Simulação na Engenharia. **Métodos Numéricos para Simulação em Engenharia**. Blog ESSS, 30 nov. 2017. Disponível em: <https://www.esss.co/blog/metodos-numericos-para-simulacao-na-engenharia/>. Acesso em: 9 jan. 2021.

BAKER, Nazer; KELLY, Ger; O'SULLIVAN, Paul Dennis. A grid convergence index study of mesh style effect on the accuracy of the numerical results for an indoor airflow profile. **International Journal of Ventilation**, v. 19, ed. 4, 5 set. 2019.

BARNES, H. A.; HUTTON, J. F.; WALTERS F.R.S., K. **AN INTRODUCTION TO RHEOLOGY**. 1. ed: Elsevier, 1993. v. 3. ISBN 0-444-87140-3.

BIRD, R. Byron *et al.* Transport Phenomena. 2. ed.: John Wiley & Sons, 2002. ISBN 0-47141077-2.

BLAIR, G.W. Scott. De Waele-Ostwald Law. **Journal of Physical Chemistry**, ano 7, v. 43, p. 853–864, 1 fev. 1939.

BONO, Gustavo; AWRUCH, Armando M. NUMERICAL STUDY BETWEEN STRUCTURED AND UNSTRUCTURED MESHES FOR EULER AND NAVIER-STOKES EQUATIONS. **Mecánica Computacional**, Córdoba, Argentina, v. XXVI, p. 3134-3146, 1 out. 2007

BRUMMER, Rüdiger. **Rheology Essentials of Cosmetic and Food Emulsions**. 1. ed. Springer, 2006.

CHIARI, Bruna Galdorfini *et al.* **Cosmetic's Quality Control**. 1. ed. Intechopen, 2012. DOI 10.5772/51846. Disponível em: <https://www.intechopen.com/books/latest-research-into-quality-control/cosmetics-quality-control>. Acesso em: 7 jan. 2021.

DATA BRIDGE MARKET RESEARCH, 2020. **Cosmetics Market Projected To Reach \$648.31 Billion By 2026 - Tremendous Growth, Industry Demand & Investor Solutions By Leading Players: L'Oréal International, Avon Products, Inc., Procter & Gamble, Unilever**. Disponível em: <https://www.globenewswire.com/fr/news-release/2020/09/15/2094014/0/en/Cosmetics-Market-Projected-to-Reach-648-31-Billion-by-2026-Tremendous-Growth-Industry-Demand-Investor-Solutions-by-Leading-Players-LOreal-International-Avon-Products-Inc-Procter-.html>. Acesso em: 8 jan. 2021.

FELLOWS, P. J. **Food Processing Technology**. 3. ed. Woodhead Publishing, 2009. ISBN 978-1-84569-216-2.

GALLASSI, Mariana *et al.* Numerical and experimental evaluation of droplet breakage of O/W emulsions in rotor-stator mixers. **Chemical Engineering Science**, v. 204, p. 270-286, 31 ago. 2019.

GRAEBEL, W. P. **Advanced Fluid Mechanics**. 2. ed. Elsevier, 2002. ISBN 978-0-12-370885-4.

MICHAEL, Vipin *et al.* CFD-PBM simulation of dense emulsion flows in a high-shear rotor–stator mixer. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 125, p. 494-510, set. 2017.

NAEENI, Sepehr Khajeh; PAKZAD, Leila. Droplet size distribution and mixing hydrodynamics in a liquid–liquid stirred tank by CFD modeling. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 120, p. 100-103, nov. 2019.

OSSES, Juan. **O Método de Volumes Finitos**. Blog ESSS, [S. l.], p. 1, 12 dez. 2016. Disponível em: <https://www.esss.co/blog/o-metodo-de-volumes-finitos/>. Acesso em: 7

jan. 2021.

PAL, Rajinder. Effect of droplet size on the rheology of emulsions. **AICHE Journal: Materials, Interfaces, and Electrochemical Phenomena**, nov. 1996. DOI doi.org/10.1002/aic.690421119. Disponível em: <https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.690421119>. Acesso em: 10 jan. 2021.

ROSEN, Meyer R. **Harry's Cosmeticology**. 9. ed. Chemical Publishing Company, 2015. v. 2. ISBN 978-0820601816.

SCHIFFEL, J. On Analytical Solution of the Navier-Stokes Equations. 2001. **Dissertação (Especialização em CONTROLLED THERMONUCLEAR FUSION AND PLASMA PHYSICS)** - The Alfven Laboratory - Instituto Real de Tecnologia da Universidade de Estocolmo, Estocolmo, 2001.

SCHMIDBERGER, Markus *et al.* Optimization of Rheological Behaviour and Skin Penetration of Thermogelling Emulsions with Enhanced Substantivity for Potential Application in Treatment of Chronic Skin Diseases. **MDP Pharmaceuticals**, v. 11, ed. 8, 24 jul. 2019. DOI [10.3390/pharmaceutics11080361](https://doi.org/10.3390/pharmaceutics11080361). Disponível em: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC6723268/>. Acesso em: 2 jan. 2021.

SJODIN, Bjorn. **What's The Difference Between FEM, FDM, and FVM?** Discussing what separates the finite-element, finite-difference, and finite-volume methods from each other in terms of simulation and analysis. 18 abr. 2016. Disponível em: <https://www.machinedesign.com/3d-printing-cad/fea-and-simulation/article/21832072/whats-the-difference-between-fem-fdm-and-fvm>. Acesso em: 9 jan. 2021.

TROPEA, Cameron; YARIN, Alexander L.; FOSS, John F. **Springer Handbook of Experimental Fluid Mechanics**. Springer, 2007. ISBN 978-3-540-30299-5.

TU, Jiyuan; YEOH, Guan Heng; LIU, Chaoqun. **Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach**. 1. ed. Elsevier, 2008. ISBN 978-0-7506-8563-4.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**. 2. ed. Pearson Education, 2007. ISBN 978-0-13-127498-3.