



UNICAMP

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

MAIRA PURIDADE MARQUES DA SILVA

OBTENÇÃO DE UMA CORRELAÇÃO PARA O NÚMERO DE NUSSELT COM O USO
DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD) PARA UM TANQUE DE MISTURA
COM SERPENTINAS HELICOIDAIS AGITADO POR DOIS IMPELIDORES TIPO
RUSHTON

CAMPINAS, 2017

MAIRA PURIDADE MARQUES DA SILVA

OBTENÇÃO DE UMA CORRELAÇÃO PARA O NÚMERO DE NUSSELT COM O USO
DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD) PARA UM TANQUE DE MISTURA
COM SERPENTINAS HELICOIDAIS AGITADO POR DOIS IMPELIDORES TIPO
RUSHTON

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia
Química da Universidade de Campinas como parte dos
requisitos exigidos para a obtenção de título de Mestra
em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. José Roberto Nunhez

Coorientador: Ronald Jaimes Prada

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL
DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELA ALUNA
MAIRA PURIDADE MARQUES DA SILVA, E
ORIENTADA PELO PROF. DR. JOSÉ ROBERTO
NUNHEZ

CAMPINAS, 2017

Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s): CAPES, 33003017034P8

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura
Luciana Pietrosanto Milla - CRB 8/8129

Si38o Silva, Maira Puridade Marques da, 1987-
Obtenção de uma correlação para o número de Nusselt com o uso da Fluidodinâmica Computacional (CFD) para um tanque de mistura com serpentinas helicoidais agitado por dois impelidores tipo Rushton / Maira Puridade Marques da Silva. – Campinas, SP : [s.n.], 2017.

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

1. Fluidodinâmica computacional (CFD). 2. Calor - Coeficiente de transferência. 3. escoamento turbulento. I. Nunhez, José Roberto, 1961-. II. Jaimes Prada, Ronald, 1982-. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Obtaining a Nusselt equation with the use of Computational Fluid Dynamics (CFD) for a stirred tank with helical coil agited by two Rushton Impellers

Palavras-chave em inglês:

Computational fluid dynamics
(CFD) Heat - Transfer coefficient
Turbulent flow

Área de concentração: Engenharia de Processos

Titulação: Mestra em Engenharia Química

Banca examinadora:

José Roberto Nunhez [Orientador]
Celso Fernandes Joaquim Junior
Guilherme José de Castilho

Data de defesa: 16-05-2017

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

Folha de aprovação

Dissertação de Mestrado defendida por Maira Puridade Marques da Silva e aprovada em 16 de maio de 2017 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. José Roberto Nunhez

Prof. Dr. Celso Fernandes Joaquim Junior

Prof. Dr. Guilherme José de Castilho

Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no processo de vida acadêmica do aluno.

“Não sei como o mundo me vê, mas eu me sinto como um garoto brincando na praia, contente em achar aqui e ali, uma pedra mais lisa ou uma concha mais bonita, mas tendo sempre diante de mim, ainda por descobrir o grande oceano de verdades. ”

Isaac Newton

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus e aos espíritos de luz que me auxiliam nessa caminhada.

Agradeço a minha mãe Ana Maria por ser um exemplo de garra e perseverança, por sempre ter acreditado em mim e em meus irmãos e por ser essa mulher que me inspira a ser quem eu sou e a seguir em frente todos os dias.

À minha irmã Mariana por ser esse exemplo de mulher e profissional e por ser essa amiga e motivadora em tempo integral. A ela e ao meu cunhado Gabriel agradeço por terem aberto os seus corações e a sua casa para me receber para que eu pudesse iniciar esse que seria um grande desafio, o meu curso de Mestrado. Aos meus irmãos Mário e Henrique exemplos de força e perseverança que mesmo de longe me animam e incentivam sempre.

Agradeço ao meu companheiro de jornada Vinícius pelo amor, paciência e dedicação à mim, por me dar forças quando precisei, ser o ombro amigo para eu chorar e a companhia perfeita dos momentos de alegria.

Agradeço em especial a Sara por abrir a sua casa para me receber quando ainda mal nos conhecíamos. Agradeço a ela e a todos os meus amigos, novos e antigos, aos que estão perto e aos que estão longe por toda força e carinho.

Ao meu orientador professor Dr. José Roberto Nunhez agradeço pela confiança e oportunidade para desenvolver esse trabalho, pela sua orientação e oportunidade de participar do seu grupo de pesquisa e ao meu coorientador Dr. Ronald Jaimes Prada pelo auxílio e pela oportunidade de continuar esse projeto tão inovador.

Agradeço aos meus colegas de laboratório Diener, Maria, Alexandre, Silvia, Nayla, Matheus, Reynaldo e Vilmar pelas conversas altamente construtivas, pelo apoio e momentos de descontração.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas e à CAPES pela concessão da bolsa.

Enfim, quero agradecer a todos que participaram direta ou indiretamente na realização desta etapa da minha vida.

Resumo

Operações com tanques de mistura são realizadas em um grande número de processos nas indústrias. Sua aplicação é requerida quando há a necessidade de reduzir qualquer gradiente de temperatura, composição ou acelerar uma reação existente no processo. Embora muitos dos processos utilizem tanques de mistura com mais de um impelidor, não foram encontrados na literatura estudos para obtenção de correlações do número de Nusselt para tanques de mistura agitados por dois impelidores do tipo Rushton e aquecidos (ou resfriados) por serpentinas helicoidais, o que motivou o desenvolvimento deste trabalho. Foi desenvolvido um modelo computacional tridimensional com o uso da Fluidodinâmica Computacional que mostrou, com base nos resultados, ser capaz de representar qualitativamente e quantitativamente os fenômenos envolvidos. Para o desenvolvimento do modelo foram admitidos os mesmos fluidos, considerações geométricas, condições de contorno, modelos de turbulência e faixas de velocidade, Reynolds, diâmetro de serpentina e dos impelidores utilizados por Jaimes (2015). O posicionamento dos impelidores promove um fluxo paralelo, conforme descrito por Rutherford *et al.* (1996). Este trabalho apresenta como resultado a obtenção de uma correlação do número de Nusselt para o sistema já descrito. Os valores de Nusselt calculados a partir dessa correlação apresentaram desvio médio com relação aos dados simulados de 13,0%. Foi observado que a inclusão do segundo impelidor no tanque aproximadamente dobrou o coeficiente de transferência de calor e o consumo de potência para todos os fluidos quando comparado com o tanque com um impelidor nas mesmas condições de operação.

Palavras chave: Fluidodinâmica Computacional (CFD), Coeficiente de transferência de calor, Tanque de mistura, escoamento turbulento.

Abstract

Stirred tank operations are carried out in a large number of processes in an industry. Its use is required when there is a need to reduce any temperature gradient, composition or accelerate an existing reaction in a determined process. Although many processes use stirred tanks with more than one impeller, no studies were found in the literature to obtain correlations for the Nusselt number for stirred tanks with two Rushton impellers and heated (or cooled) by internal helical coils, motivating the development of this work. A three-dimensional computational model was developed with the use of Computational Fluid Dynamics that showed, based on the results, to be able to represent qualitatively and quantitatively the phenomena involved. For the development of the model, the same fluids, geometric considerations, boundary conditions, turbulence models and velocity (Reynolds) range, Reynolds, coils and impeller diameters used by Jaimes (2015) were adopted. The impeller positioning promoted a parallel flow pattern, as described by Rutherford *et al.* (1996) The final result is a correlation for the Nusselt number for the system already described. The Nusselt values calculated from this correlation showed a mean deviation from the simulated data of 13.0%. It was observed that the inclusion of the second impeller in the tank approximately doubled the heat transfer coefficient and power consumption for all fluids when compared to the tank with a single impeller in the same operating conditions.

Keyword: Computational Fluid Dynamics (CFD), Heat transfer coefficient, Stirred tank, Turbulent flow.

Lista de Figuras

Figura 1: Reator com geometria convencional.....	25
Figura 2: Vasos para tanques de mistura. a) Vaso com fundo abaulado; b) Vaso com fundo reto; c) Vaso com fundo cônico.	26
Figura 3: Parte de taque dotado de duas serpentinas helicoidais. Fonte: STEAMBRITE	27
Figura 4: Impelidores rudimentares utilizadas por volta de 1556. Fonte: Hoover e Hoover (1950).	29
Figura 5: a) Naval; b) Rushton com 6 pás; c) Disco Cawles; d) Hidrofólio; e) Pás retas inclinadas a 45°; f) Pás retas; g) Smith; h) Fita helicoidal; i) Âncora. Fonte: Direct Industry.	30
Figura 6: Padrão de mistura (na presença de chicanas) dos impelidores para os impelidores geradores de fluxo Axial. Fonte: Couper <i>et al.</i> (2005).	31
Figura 7: Padrão de mistura (na presença de chicanas) dos impelidores para os impelidores geradores de fluxo Radial. Fonte: Couper <i>et al.</i> (2005).	32
Figura 8: Padrão de escoamento a) fluxo paralelo; b) fluxo de fusão; c) fluxo divergente. Fonte: Rutherford <i>et al.</i> (1996).	33
Figura 9: Desenvolvimento da camada limite no transporte de energia por convecção.	43
Figura 10: Desenvolvimento da camada limite térmica.	44
Figura 11: Desenvolvimento da camada limite de velocidade e regiões de escoamento da camada limite. 1)Subcamada viscosa; 2) Camada amortecedora; 3) Subcamada inercial.	45
Figura 12: Subdivisões da região da camada limite. (Adaptado de ANSYS, Inc. 2011).	47
Figura 13: Modelos de turbulência. Fonte: (VERGEL, 2013).	53
Figura 14: Discretização do volume de controle.	60
Figura 15: Fluxograma da metodologia da construção de projetos em CFD (adaptado de ANSYS, 2016).	62
Figura 16: Geometria utilizada nos trabalhos de Oldshue e Gretton (1954) e Jaimes (2015). Fonte: Jaimes (2015)	64
Figura 17: Geometria utilizada nesse trabalho. Fonte: Adaptado de Jaimes (2015).	64
Figura 18: Ângulo (Θ) de inclinação da serpentina helicoidal.	65
Figura 19: Configuração do Impelidor tipo Rushton de 6 pás. Fonte: Jaimes (2015).	66
Figura 20: Posição dos impelidores no eixo central e distribuição dos domínios.	67

Figura 21: Elementos de malha nas superfícies. a) Pás dos impelidores superior e inferior; b) Parede do tanque, serpentinas helicoidais, chicanas, eixo e região das interfaces superior e inferior; c) Disco do impelidor e fundo do tanque; d) Interface rotacional e pá do impelidor inferior; e) Parede do tanque e serpentinas helicoidais.....	72
Figura 22: Cortes dos planos para rotação do tanque e para os impelidores.	73
Figura 23: Condição de contorno para a distribuição das serpentinas no tanque.	73
Figura 24: Monitoramento da convergência para o coeficiente de transferência de calor (h_o) da água para a velocidade 100rpm e diâmetro do impelidor de 12 in.	80
Figura 25: Monitoramento do erro residual calculado pelo RMS para a água a uma velocidade de 100rpm e diâmetro do impelidor de 12 in.	81
Figura 26: Testes de independência de malha realizados para a obtenção do coeficiente de transferência de calor (h_o) e fluxo de calor (q) na superfície da serpentina helicoidal.	83
Figura 27: Plano perpendicular ao fundo do tanque para a glicerina a 300 rpm. a) Campo e b) Perfil de velocidade radial.	84
Figura 28: Vetores de velocidade e padrão de fluxo do escoamento da glicerina obtidos para o tanque de mistura com dois impelidores na presença de serpentinas helicoidais para a glicerina a 300 rpm.	85
Figura 29: Campo de velocidade de escoamento simulado no reator para a glicerina a 300 rpm.	85
Figura 30: Vetores de velocidade para o escoamento do óleo para diversas velocidades. a) 100 rpm; b) 200 rpm e c) 300 rpm.	91
Figura 31: Campos de velocidade para o escoamento do óleo para diversas velocidades. a) 100 rpm; b) 200 rpm e c) 300 rpm.	92
Figura 32: Fluxo de calor médio para cada anel da serpentina helicoidal de resfriamento para glicerina nas três velocidades.....	94
Figura 33: Fluxo de calor médio para cada anel da serpentina helicoidal de resfriamento para o óleo vegetal nas três velocidades.	95
Figura 34: Fluxo de calor médio para cada anel da serpentina helicoidal de resfriamento para a água nas três velocidades.	95
Figura 35: Escoamento do fluido dentro do tanque de mistura para o caso com dois impelidores de 16 in de diâmetro e serpentinas helicoidais com diâmetro de 0,875 in. a) Corte radial; b) 89	
Figura 36: Comparação entre os valores de Nu preditos pelas correlações em relação ao valor calculado a partir das simulações em CFD.	100

Lista de Tabelas

Tabela 1: Correlações para o número de Nusselt com um impelidor do tipo Rushton.	38
Tabela 2: Dimensões para as serpentinas helicoidais.	65
Tabela 3: Relações Geométricas para a construção do tanque e dos impelidores.	66
Tabela 4: Propriedades dos fluidos. Fonte: Jaimes (2015).	68
Tabela 5: Casos simulados para obtenção da correlação para o Número de Nusselt.	75
Tabela 6: Avaliação do coeficiente de transferência de calor (h_o), fluxo de calor (q) e altura da camada limite nas paredes do tanque e serpentina helicoidal.	82
Tabela 7: Fluxo de calor médio retirado pelos anéis de esfriamento para a glicerina, óleo vegetal e água para as três velocidades consideradas (100, 200 e 300) rpm.	93
Tabela 8: Fluxo de calor dos anéis das serpentinas helicoidais dos tanques com um e com dois impelidores tendo a água como fluido de processo.	96
Tabela 9: h_o para tanques de mistura com um e com dois impelidores. Erro! Indicador não definido.	
Tabela 10: Comparação da potência consumida em tanques de mistura com um e com dois impelidores para os três fluidos estudados com velocidade dos impelidores de 200 rpm e diâmetro do impelidor de 16 in.	88
Tabela 11: Número de potência para o tanque de mistura com um e dois impelidores para uma velocidade de 200 rpm. (a) refere-se ao impelidor superior; (b) ao impelidor inferior.	88
Tabela 12: Cálculos realizados a partir das propriedades dos fluidos e dos resultados das simuações.	98

Nomenclatura

Letras Latinas

A_s	Área da superfície em contato com o fluido.
A_{st}	Área total das superfícies das serpentinas helicoidais
A_t	Área total da parede e da base do tanque
C	Altura do impelidor em relação ao fundo do tanque
C_1	Distâncias do impelidor inferior em relação ao fundo
C_2	Distância entre os impelidores
C_3	Distância entre o impelidor superior e o topo
C_c	Altura da serpentina helicoidal
C_p	Calor específico
$C_{\varepsilon 1}$	Constante empírica do modelo de turbulência
$C_{\varepsilon 2}$	Constante empírica do modelo de turbulência
D	Diâmetro da serpentina helicoidal
D	Diâmetro do impelidor
D_b	Largura das pás do impelidor
D_c	Diâmetro da serpentina helicoidal
D_d	Diâmetro do disco do impelidor
$D_{k\omega}$	Porção positiva do termo de difusão cruzada
D_o	Diâmetro externo da serpentina helicoidal
D_w	Comprimento das pás do impelidor
F_1, F_2	Função de combinação
G_c	Correção geométrica
G	Aceleração da gravidade
h, h_o	Coefficiente de transferência de calor por convecção
J	Largura das chicanas
K	Condutividade térmica e a energia cinética turbulenta
L_c	Diâmetro do vaso
N	Número de casos simulados
N	Velocidade rotacional do impelidor

N_p	Número de potência
Nu	Número de Nusselt
N_{Nu_s}	Número de Nusselt calculado a partir das simulações
N_{Nu_c}	Número de Nusselt calculado a partir da correlação
P	Pressão
Pr	Número de Prandtl
Q	Taxa de transferência de energia
Q	Fluxo de energia
Re	Número de Reynolds
Re_{cr}	Número de Reynolds crítico
Sc	Distância entre os centros dos anéis da serpentina helicoidal
T	Diâmetro do reator
T	Tempo
T_∞	Temperatura do fluido na região de livre escoamento
T_s	Temperatura da superfície em contato com o fluido
U	Velocidade tangencial à parede na distância Δy
U_τ	Atrito da velocidade
\vec{U}	Vetor velocidade
u^+	Velocidade próxima a parede
u_i, u_j	Componentes da velocidade em coordenadas generalizadas
$\overline{u'_i u'_j}$	Tensor de Reynolds
W	Comprimento da pá do impelidor
Y	Distância da camada até a parede
y^+	Distância adimensional da parede
Z	Altura do fluido tanque
Z_c	Comprimento do feixe de serpentinas

Letras Gregas

A	Difusividade térmica
B	Constante empírica do modelo de turbulência
β'	Constante empírica do modelo de turbulência
β^*	Constante empírica do modelo de turbulência
Δy	Distância entre o primeiro nó da malha e a parede
δ_{ij}	Delta de Kronecker
Δ	Espessura da camada limite
δ_T	Espessura da camada limite térmica
δ_x	Espessura da camada limite de velocidade
E	Dissipação da energia cinética
ϵ_{ij}	Tensor taxa de deformação
Θ	Ângulo de crescimento da serpentina helicoidal
M	Viscosidade dinâmica
μ_R	Correlação entre viscosidades
μ_t	Viscosidade turbulenta
N	Viscosidade cinemática
v^+	Velocidade próxima a parede
Ω	Energia cinética turbulenta ou velocidade rotacional
ρ	Massa específica
σ_ϵ	Constante empírica do modelo de turbulência
σ_k	Constante empírica do modelo de turbulência
$\sigma_{\omega 2}$	Constante empírica do modelo de turbulência
τ	Tensão de cisalhamento
τ_{ij}	Tensor tensão

Siglas

CFD	Computational Fluid Dynamics
DNS	Direct Numerical Simulation
EVM	Eddy Viscosity Models
GRG	Gradiente Reduzido Generalizado
LES	Large Eddy Simulations
PIV	Particle Image Turbine
RMS	Root Mean Square
RSM	Reynolds Stress Model
SST	Shear Stress Transport

Sumário

Capítulo 1.....	20
1. Introdução.....	20
1.1. Objetivo.....	22
1.1.1. Objetivo Geral.....	22
1.2. Objetivo Específico.....	22
1.3. Organização do Trabalho.....	23
Capítulo 2.....	24
2. Fundamentação Teórica órica.....	24
2.1. Tanque de mistura.....	24
2.1.1. Tanques.....	26
2.1.2. Serpentinas Helicoidais e Transferência de Calor.....	26
2.1.3. Chicanas.....	28
2.1.4. Impelidores.....	28
2.2. Revisão Bibliográfica.....	33
Capítulo 3.....	39
3. Modelagem matemática.....	39
3.1. Equações de Balanço.....	39
3.1.1. Conservação de Massa.....	39
3.1.2. Conservação de Momento.....	40
3.1.3. Conservação da Energia.....	41
3.2. Transferência de Calor por Convecção.....	42
3.2.1. Camada Limite Térmica.....	43
3.3. Potência.....	47
3.4. Números adimensionais típicos de sistemas agitados com Transferência de Calor..	48
3.4.1. Número de Reynolds (Re).....	48

3.4.2.	Número de Prandtl (Pr)	49
3.4.3.	Número de Nusselt (Nu).....	50
3.5.	Hipótese de Boussinesq	51
3.5.1.	Modelos de Turbulência	52
3.6.	Método dos Volumes Finitos.....	59
3.6.1.	Fluidodinâmica Computacional.....	60
Capítulo 4	62
4.	Metodologia	62
4.1.	Caracterização do Problema e Validação do Modelo.....	63
4.2.	Pré-Processamento.....	64
4.2.1.	Aspectos Geométricos	64
4.2.2.	Propriedades Físicas dos Fluidos.....	68
4.2.3.	Geração da Malha.....	68
4.2.4.	Considerações e Condições de Contorno	70
4.2.5.	Aspectos Numéricos e Modelos Físicos.....	74
4.2.6.	Casos Simulados.....	74
4.3.	Simulação (Solver)	75
4.4.	Pós-Processamento	77
4.4.1.	Consumo de Potência	77
4.4.2.	Correlação para o Número de Nusselt.....	77
Capítulo 5	79
5.	Resultados	79
5.1.	Monitoramento e Convergência.....	79
5.2.	Influência do y^+ médio no fluxo de calor.....	81
5.3.	Perfil de velocidade característico e Padrão de fluxo.....	83
5.4.	Consumo de energia para tanques de mistura com um e dois impelidores	86

5.7. Correlação de Nusselt.....	97
5.8. Comparação entre as correlações de Nusselt para um e para dois impelidores	99
Capítulo 6.....	101
6. Considerações Finais	101
6.1. Conclusão	101
6.2. Sugestões para trabalhos futuros	102

Capítulo 1

Introdução

Tanques de mistura são de interesse para a indústria devido a diversidade de processos aos quais podem ser aplicados, tais como na produção de tintas, produtos farmacêuticos, polímeros e combustíveis. De acordo com Malik *et al.* (2016), a maior parte da produção de produtos químicos finos e fármacos é feita utilizando tanques de mistura em batelada e mais de 25% das reações químicas são efetuadas em reatores agitados equipados com impelidores do tipo Rushton com 6 pás. Esses equipamentos consistem, geralmente, de um tanque cilíndrico com um ou mais impelidores, um motor, camisa ou serpentinas para troca térmica e, em sua maioria, chicanas para a promoção de maior turbulência no interior do tanque.

A transferência de calor é a operação mais empregada nas indústrias químicas, visto que muitos processos que ocorrem em tanques de mistura acontecem com liberação ou absorção de energia. Para o controle da temperatura, são adicionados aos sistemas dispositivos promotores de transferência de calor que fazem a manutenção do fluxo de calor necessário para o desenvolvimento desses processos. O transporte de calor nesses equipamentos ocorre, principalmente, por convecção.

A convecção é gerada pela movimentação global do fluido decorrente da rotação do impelidor. Tendo em vista a sua importância, muitos estudos têm sido desenvolvidos para obtenção de parâmetros que forneçam informações adicionais sobre os processos com transferência de calor.

A grande dificuldade nos estudos relativos ao escoamento e à transferência de calor em tanques de mistura é que esses sistemas são tridimensionais, complexos e de natureza caótica, compreendendo uma gama de escalas espaciais e temporais. Isso causa consideráveis incertezas no projeto e no dimensionamento desses equipamentos (LANE *et al.*, 2000; MALIK *et al.*, 2016).

Uma série de correlações tem sido desenvolvida com a finalidade de caracterizar a transferência de calor em tanques de mistura, como os trabalhos desenvolvidos por Oldshue e Gretton (1954), Jaimes (2015) e Rosa *et al.* (2017) que desenvolveram correlações para o coeficiente de transferência de calor (h_o). Esse coeficiente é utilizado para indicar a capacidade do sistema de promover a transferência de calor por unidade de temperatura e área.

Em sua maioria, as correlações existentes foram obtidas por experimentação em laboratório e cálculos analíticos. Porém, estudos mais recentes fazem uso de ferramentas computacionais para obter correlações cada vez mais precisas, a exemplo da Fluidodinâmica Computacional (*Computational Fluid Dynamics – CFD*). Isso se deu devido ao desenvolvimento de métodos matemáticos mais precisos e do aumento significativo do poder computacional.

A fluidodinâmica computacional tem desempenhado um importante papel para a compreensão dos fenômenos e um grande suporte para a identificação de condições ótimas de operação, temperatura e pressão desses e de outros tipos de equipamentos. Também tem sido empregada na identificação prematura de possíveis pontos de concentração e falhas, com maior rapidez na obtenção de previsões para padrões de comportamento dos equipamentos e, também, para servir de apoio em processos de escalonamento (*scale-up*) (JOSHI *et al.*, 2011; MOILANEN *et al.*, 2008; MONTANTE *et al.*, 2001). Verifica-se a importância da aplicação de ferramentas de otimização como a CFD dado que a eficiência das operações impacta diretamente nos custos e na qualidade dos produtos.

Uma breve investigação das vantagens associadas ao emprego da modelagem em CFD mostra que a Fluidodinâmica Computacional (CFD) promove uma excelente adequação dos seus resultados em comparação com os obtidos por métodos experimentais. Segundo Maliska (2004), a experimentação em laboratório tenderá a ser utilizada como fonte de validação de modelos matemáticos e na investigação de fenômenos que ainda não o foram, assim como, na última etapa de projetos.

Embora muitos estudos tenham sido realizados na direção de se obter correlações para a transferência de calor em tanques de mistura, durante o desenvolvimento deste trabalho não foram encontrados na literatura estudos com essa finalidade para tanques de mistura com dois impelidores, ainda que esses equipamentos sejam amplamente utilizados na indústria.

Com os avanços relacionados à qualidade e precisão dos resultados em estudos realizados com a utilização da CFD e tendo em vista a escassez de estudos sobre correlações para processos de troca térmica em tanques de mistura com dois impelidores, este trabalho tem por objetivo propor uma correlação do número de Nusselt para um tanque de mistura com dois impelidores do tipo Rushton com 6 pás.

Conforme aponta Bezerra (1997) é factível simular situações complicadas e desfavoráveis utilizando a Fluidodinâmica Computacional e que a validação de um trabalho simulado pode ocorrer tanto a partir de dados experimentais, quanto a partir de casos simulados que já foram validados por outros autores. À vista disto, o estudo desenvolvido neste trabalho baseia-se nos trabalhos realizados por Oldshue e Gretton (1954), seguindo uma metodologia experimental, e

por Jaimes (2015) que utilizou uma abordagem computacional por meio da CFD. Em seus estudos, esses autores desenvolveram correlações do número de Nusselt para um tanque de mistura dotado de serpentinas helicoidais com um impelidor.

1.1. Objetivo

1.1.1. Objetivo Geral

O objetivo geral deste trabalho é a proposição de uma correlação para o número de Nusselt a partir do estudo de um tanque de mistura dotado de um arranjo de serpentinas helicoidais com dois impelidores do tipo Rushton com 6 pás por meio da utilização da fluidodinâmica computacional (CFD).

1.2. Objetivo Específico

- Comparar o coeficiente de transferência de calor entre dois tanques de mistura dotados de serpentinas helicoidais com um e dois impelidores.
- Calcular e comparar o consumo de potência do tanque de mistura com um e com dois impelidores para as mesmas condições de escoamento.
- Comparar a capacidade de troca térmica em tanques com um e com dois impelidores.

1.3. Organização do Trabalho

Este trabalho está dividido em seis capítulos. Os capítulos 2 à 4 apresentam a definição e descrição dos principais conceitos explorados, situando o leitor acerca dos principais aspectos do objeto de investigação deste estudo.

No Capítulo 2 é apresentada a fundamentação teórica com uma breve revisão sobre estudos referentes a tanques de mistura. Esta revisão consistiu no passo inicial deste trabalho e demonstra as contribuições que o presente trabalho pode proporcionar para o estudo da transferência de calor em tanques de mistura com dois impelidores do tipo Rushton com 6 pás e serpentinas helicoidais.

No Capítulo 3 são introduzidas as equações de conservação, números adimensionais e métodos matemáticos utilizados.

No Capítulo 4 são apresentados os procedimentos metodológicos adotados para a elaboração deste estudo. É apresentada a caracterização do problema e os procedimentos adotados para a elaboração do modelo computacional. São descritas as propriedades físicas do fluido, as geometrias consideradas, a geração da malha e as condições de contorno necessárias para a correta formulação do modelo matemático.

No Capítulo 5 são discutidos os resultados deste estudo e é apresentada a correlação para o número de Nusselt.

Por fim, no Capítulo 6 são apresentadas as conclusões obtidas com os resultados deste trabalho, assim como algumas sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Fundamentação Teórica

O grande número de processos nos quais são necessárias a utilização de tanque de mistura mostra que esse equipamento é bastante versátil. Além de serem empregados em inúmeros processos com reação, esses equipamentos são aplicados em processos para obtenção de suspensão de sólidos, mistura de fluidos miscíveis e imiscíveis, dispersão de gases em líquidos, dissoluções, entre outros (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2012).

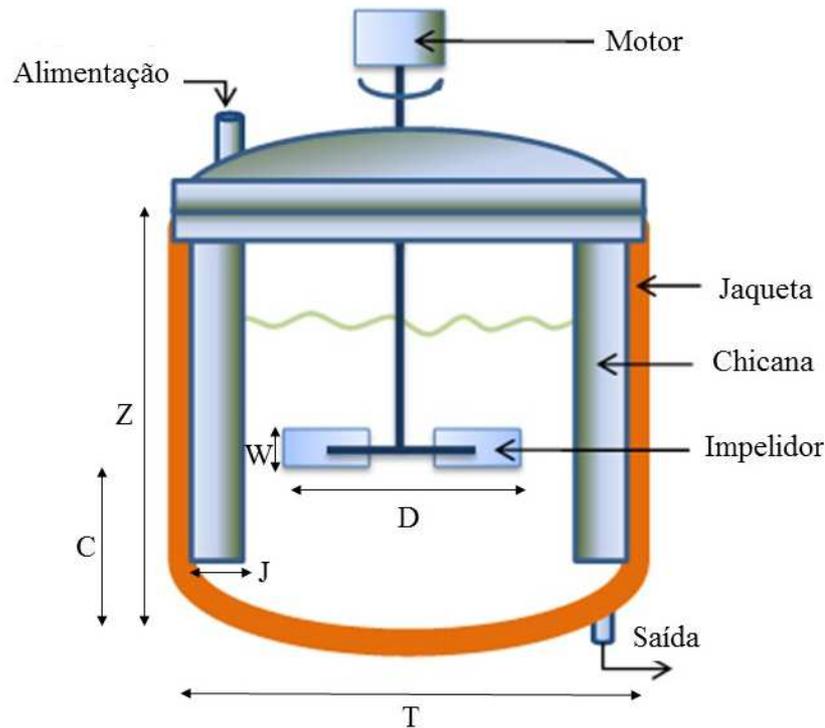
Na primeira parte deste capítulo são descritos os elementos que compõem um tanque, tais como vaso, impelidores e chicanas e a relação entre eles e alguns conceitos sobre esses elementos. Na segunda parte será apresentada uma breve revisão de trabalhos experimentais e computacionais referentes ao escoamento de fluidos em tanques de mistura, com enfoque nos processos de transferência de calor, incluindo o comportamento do sistema de troca térmica quando o número de impelidores é aumentado para dois.

2.1. Tanque de mistura

Operações de agitação são realizadas em muitos processos na indústria quando há a necessidade de reduzir qualquer gradiente de temperatura, composição ou acelerar uma reação existente no processo. A realização de uma mistura eficiente em um sistema de agitação ocorre quando este é bem dimensionado, o que acarreta em menor tempo e custos de operação, uma maior qualidade do produto e melhor troca térmica no sistema. A sua performance pode ser otimizada por ajustes nos seus internos (impelidor, chicana, entre outros), nos parâmetros de operação como a configuração do vaso (diâmetro e comprimento do vaso, localização das chicanas, nível de líquido) e em função das propriedades físico-químicas do fluido (JOSHI *et al.*, 2011; VERGEL, 2013).

Um tanque de mistura consiste, geralmente, de um tanque cilíndrico com um ou mais impelidores, motor, camisa ou serpentinas para troca térmica, e em sua maioria chicanas para a promoção de maior turbulência no interior do tanque. A agitação refere-se ao movimento circular induzido mecanicamente pelo rotor sobre o eixo no qual está contido o impelidor. Um esquema de tanque de mistura e seus componentes pode ser visto na Figura 1 a seguir.

Figura 1: Tanque de mistura.



Fonte: Elaborada pelo autor.

As dimensões geométricas geralmente empregadas na construção de um tanque de mistura são $D/T=1/3$; $J/T=1/12$; $W/D=1/5$; $C/D=1$ e $Z/T=1$ (COUPER *et al.*, 2005; JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2012), sendo T o diâmetro do tanque, D o diâmetro do impelidor, W o comprimento da pá do impelidor, B a largura das chicanas, C a altura do impelidor em relação ao fundo do tanque e Z a altura do tanque. Embora muito utilizadas, estas dimensões não são as melhores opções para muitos processos, por exemplo para sistemas com mistura de líquidos imiscíveis, regime de escoamento na faixa de transição entre o laminar e o turbulento, na presença de fluidos não newtonianos e/ou sistemas sensíveis ao cisalhamento (COKER, 2010; DUCOSTE *et al.*, 1997; JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2012; MAVROS, 2001).

Segundo Couper *et al.* (2005), para a remoção e adição de calor nos processos são usados tanques com jaquetas, chicanas tubulares, serpentinas espirais ou helicoidais. No entanto, para tanques de grandes volumes, as serpentinas helicoidais apresentam maiores vantagens, como a obtenção de uma superfície de transferência maior (FOUAD *et al.*, 2013). Outra vantagem destes dispositivos em relação aos demais é o baixo custo de investimento (ROSA *et al.*, 2017).

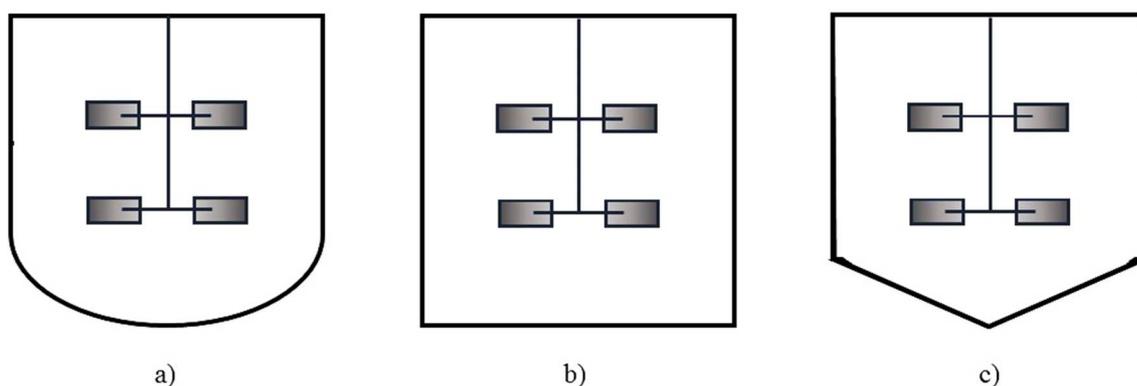
Nos processos em que há transporte de calor é necessário muito cuidado na seleção do dispositivo de troca térmica, pois estes não são igualmente eficazes, visto que o fluxo de calor

produzido depende do tipo de superfície, localização do dispositivo no tanque, número de tubos e espaço entre eles, entre outras características do tanque e do fluido (PAUL *et al.*, 2004).

2.1.1. Tanques

Os tanques são cilindros verticais ou horizontais com fundo abaulado (normalmente torisférico), plano ou cônico, como mostrados na Figura 2. Seu comprimento, diâmetro, forma do fundo e material de construção estão diretamente relacionados ao objetivo do processo, tais como suspensões de sólidos, reações químicas, emulsões, entre outros.

Figura 2: Vasos para tanques de mistura. a) Vaso com fundo abaulado; b) Vaso com fundo reto; c) Vaso com fundo cônico.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Muitos processos de agitação e mistura não envolvem reações químicas. No entanto, quando estas ocorrem, o processamento reacional normalmente é exotérmico ou endotérmico e, por isso, é necessário o uso de dispositivos para a remoção ou adição de calor (DEBAB *et al.*, 2011).

2.1.2. Serpentina Helicoidais e Transferência de Calor

Serpentina helicoidais são tubulações construídas geralmente em aço, cobre ou ligas dispostas em forma de helicoides (Figura 3), instaladas dentro de um tanque de mistura. Segundo Kern (1950), este modelo é o mais econômico para processos em tanques de mistura que necessitam de transferência de calor.

Figura 3: Parte de taque dotado de duas serpentinas helicoidais.



Fonte: STEAMBRITE¹

Para cada operação que envolve a transferência de calor em um tanque de mistura existe um coeficiente de transferência de calor (h_o) que depende das propriedades físicas do fluido de trabalho, das propriedades físicas do fluido utilizado para aquecimento ou resfriamento, da geometria do tanque e do tipo e grau de agitação do impelidor (LOPES, 2013; PERARASU *et al.*, 2011).

As serpentinas são utilizadas na indústria em processos que necessitam de grande área de troca térmica como em processos de recuperação de calor, sistemas de refrigeração e reatores químicos. Essas serpentinas podem ser helicoidais ou axiais. Elas afetam consideravelmente o fluxo dentro do reator, pois impõem uma resistência adicional à circulação do fluido. Dessa forma, o número e a localização das serpentinas, bem como o raio dos tubos e o diâmetro do feixe são parâmetros de concepção importantes para os sistemas nas quais estão presentes (PEDROSA; NUNHEZ, 2003).

Alguns autores em seus trabalhos como Street (1991) e Nunhez (1994) indicaram que o escoamento do fluido dentro do tanque é prejudicado pela presença das serpentinas na altura dos impelidores. No entanto, Jaimes (2015) mostrou por simulação em CFD que quando se

¹<http://www.steam-brite.com/prochem-prochem-performer-legend-engine-exhaust-heat-exchanger-stainless-steel-57520074-pi-88678.html>

retira as serpentinas dessa região o sistema apresenta uma menor transferência de calor global, embora possa ser obtida uma melhor circulação global do fluido nessa condição.

2.1.3. Chicanas

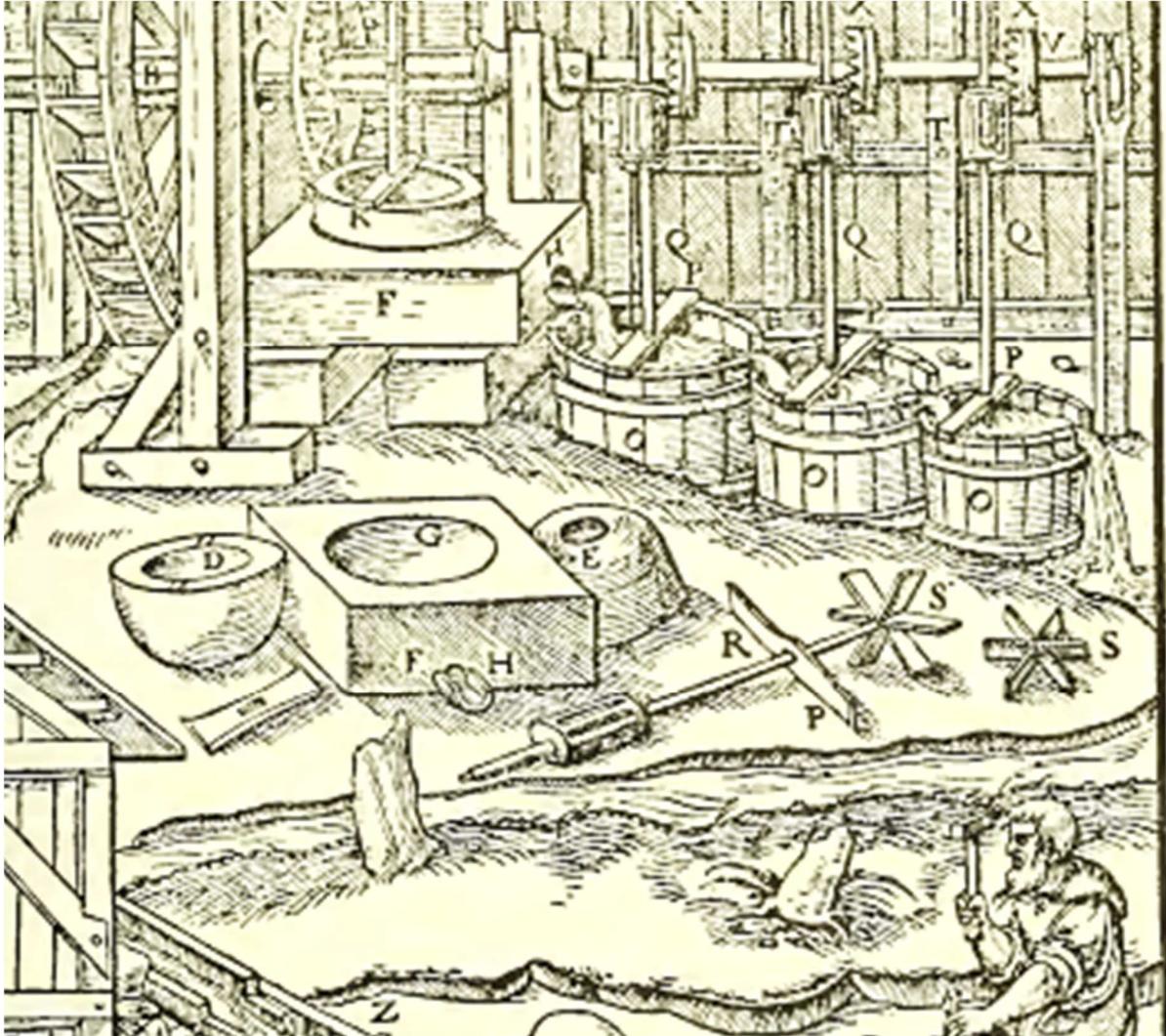
As chicanas (ou defletores) são chapas metálicas fixadas na parede do reator e interferem no fluxo interno dentro do tanque (VERGEL, 2013). Em seu trabalho, Nogueira *et al.* (2014) estudaram a influência desses dispositivos no escoamento de um fluido em um tanque de mistura e mostraram que sua presença promove a redução do tempo de mistura, com aumento da potência requerida, bem como do cisalhamento, promovendo maior turbulência. Com a turbulência gerada pela presença de chicanas, há a formação de vórtices e redemoinhos no fluido. Esses vórtices rompem as linhas de corrente e eliminam a rotação sólida promovida pelo impelidor sem a presença de chicanas. As chicanas eliminam o vórtice central resultando em uma superfície livre quase plana. As chicanas também ajudam na transferência de massa. Sua presença também evita a entrada de ar no sistema de mistura que é causada pela formação de um vórtice ao redor da haste do agitador (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2012; RIBEIRO, 2012; PAUL, 2004).

O tipo e tamanho adequados das chicanas devem ser escolhidos em função do impelidor utilizado (VERGEL, 2013). Normalmente, são utilizadas três ou quatro chicanas, todas equidistantes umas das outras e com uma largura (w) entre $T/12$ a $T/10$, onde T é o diâmetro do tanque (COUPER *et al.*, 2005; JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2012; PAUL *et al.*, 2004).

2.1.4. Impelidores

Pás rudimentares e hélices eram usados para agitar e misturar conteúdos de vasos há séculos (Figura 4). Entretanto, a necessidade da otimização industrial e de processos levou ao desenvolvimento de uma grande variedade de impelidores, também chamados de agitadores (MAVROS; BAUDOU, 1997).

Figura 4: Impelidores rudimentares utilizados por volta de 1556.



Fonte: Hoover e Hoover (1950).

O impelidor é um componente rotativo dotado de pás para a promoção de transferência de movimento, calor e massa dentro de um tanque de mistura. A seleção do impelidor mais adequado para um determinado processo requer informações precisas sobre as propriedades do fluido, condições do processo e particularidades do mesmo (GHOTLI *et al.*, 2013).

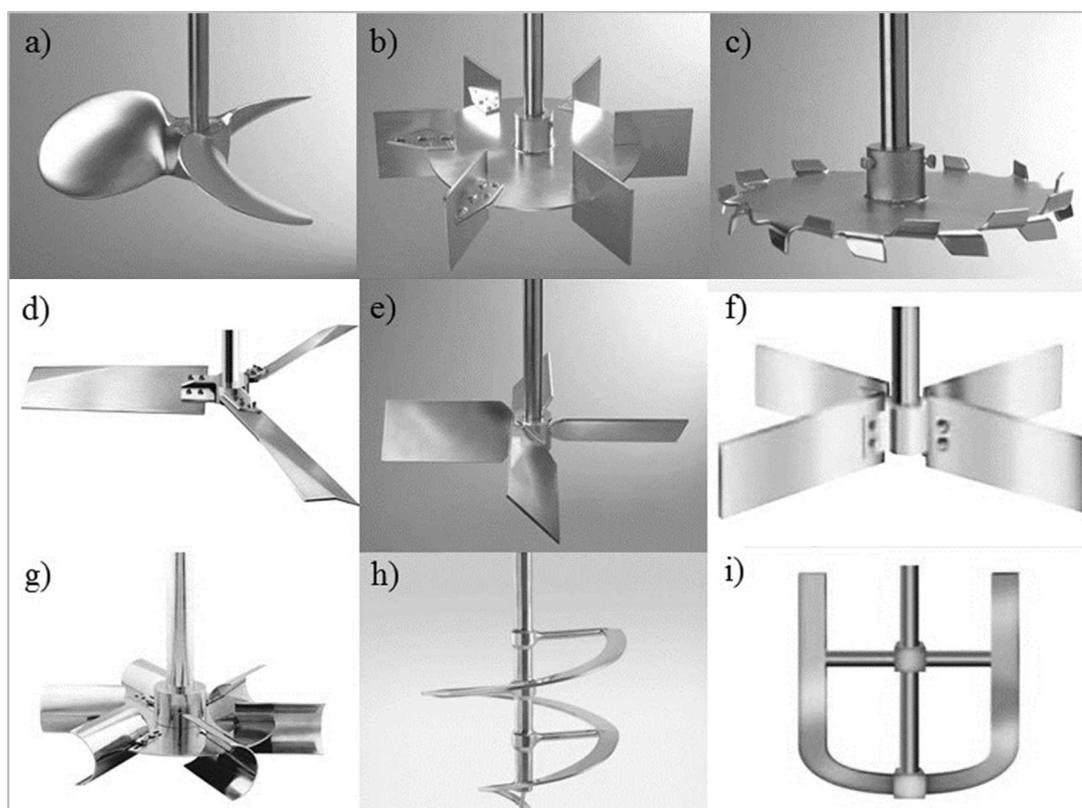
Operações de mistura ineficientes podem causar grande impacto sobre a qualidade da mistura e da transferência de calor. A qualidade da mistura depende da capacidade de um impelidor específico promover movimento ao fluido no tanque de modo a evitar o aparecimento de regiões as quais o fluido seja ineficientemente misturado.

Quando se julga o objetivo da presença do impelidor nos sistemas de agitação, as forças de superfície são aquelas de interesse, visto que essas relacionam-se com a dispersão da mistura. Contudo há processos em que o bombeamento é requerido e para esses casos as forças de

interesse são as normais (MARTINI, 2010). Dessa forma, a escolha do tipo de impelidor empregado em um tanque deve levar em consideração o objetivo do processo.

Os impelidores normalmente utilizados na indústria química de acordo com Couper *et al.* (2005), são os impelidores de pás retas inclinadas a 45 graus, o naval, do tipo Rushton com 6 pás, o disco Cawles, do tipo Hidrofólio, o de pás retas, o Smith, o de fita helicoidal e o do tipo âncora, conforme é apresentado na Figura 5, a seguir.

Figura 5: Impelidores mais empregados na indústria química. a) Naval; b) Rushton com 6 pás; c) Disco Cawles; d) Hidrofólio; e) Pás retas inclinadas a 45°; f) Pás retas; g) Smith; h) Fita helicoidal; i) Âncora.



Fonte: Direct Industry².

Dos impelidores apresentados na Figura 5, os mais utilizados são o tipo naval, o tipo pás (retas ou inclinadas) e o tipo turbina (representado na figura acima pela turbina Rushton). Esses três tipos de impelidores são empregados em mais de 80% dos processos com tanque de mistura na indústria (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2012).

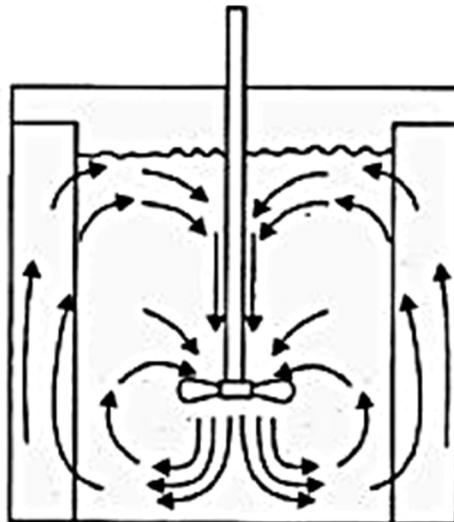
²Disponível em: <http://www.directindustry.com/pt/fabricante-industrial/helice-agitador-76887.html>. Acesso em: 02/11/2016.

Os impelidores são, geralmente, classificados conforme o fluxo produzido (radial ou axial), sendo que estes fluxos são determinados pelas suas características geométricas (JAIMES, 2015; SPOGIS, 2002).

2.1.4.1. Impelidores Indutores de Fluxo Axial

Os impelidores do tipo axial geram escoamento com linhas de fluxo paralelas ao eixo do agitador, impulsionando o volume do fluido para o topo ou fundo do tanque, como mostrado na Figura 6. Geralmente, são empregados para a promoção de transferência de calor, mistura de produtos líquidos e suspensão de sólidos.

Figura 6: Padrão de mistura (na presença de chicanas) dos impelidores geradores de fluxo Axial.



Fonte: Revista TAE³.

Algumas das características principais dessa classe de impelidores são o baixo consumo de potência e a baixa agressividade ao produto quando comparados com os impelidores radiais. Pertencem a esse grupo os impelidores do tipo naval, hidrofólio e turbina de pás inclinadas.

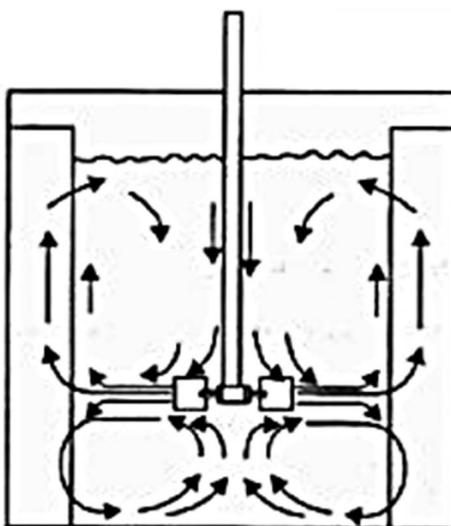
2.1.4.2. Impelidores Indutores de Fluxo Radial

Os impelidores do tipo radial geram fluxo perpendiculares ao eixo do agitador, ou seja, na direção da parede do tanque, produzindo dois vórtices que vertem a partir de cada pá causando

³ Disponível em: <http://www.revistatae.com.br/noticiaInt.asp?genero=9&id=5464>. Acesso em: 29/05/2017.

um alto cisalhamento e quebrando as gotas maiores em gotículas menores⁴. Nesse processo ocorre a formação de duas regiões de circulação: uma acima e outra abaixo do impelidor (COKER, 2010), como mostrado na Figura 7. Esses impelidores são usados quando há a necessidade de produzir cisalhamento no sistema e, geralmente, são empregados para promover uma melhor transferência de massa e calor, na dispersão de gases e na dissolução de materiais sólidos.

Figura 7: Padrão de mistura (na presença de chicanas) dos impelidores geradores de fluxo Radial.



Fonte: Revista TAE⁵.

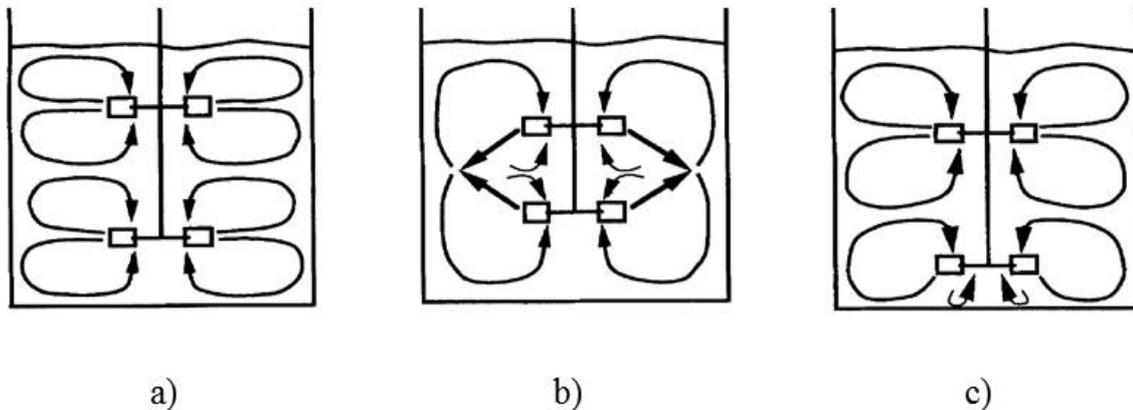
Algumas características importantes sobre esses tipos de impelidores são o alto consumo de potência e a grande capacidade dispersiva. Enquadram-se nessa classificação os impelidores do tipo turbina de pás curvas e retas como o impelidor do tipo Smith e a turbina do tipo Rushton com 6 pás, respectivamente.

O uso de mais de um impelidor pode trazer benefícios para o processo, como no caso de sistemas com transferência de calor, onde a agitação auxilia na convecção térmica. Em 1996, Rutherford e colaboradores fizeram um estudo no qual obtiveram três configurações diferentes para o padrão de escoamento em tanques de mistura com dois impelidores. Na Figura 8, são mostrados três padrões de fluxo encontrados por eles: o fluxo paralelo, de fusão e divergente.

⁴Disponível em: <http://www.chemineer.com/products/chemineer/impellers.html>. Acesso em 16/06/2016.

⁵Disponível em: <http://www.revistatae.com.br/noticiaInt.asp?genero=9&id=5464>. Acesso em: 29/05/2017.

Figura 8: Padrão de escoamento a) fluxo paralelo; b) fluxo de fusão; c) fluxo divergente.



Fonte: Rutherford *et al.* (1996).

O fluxo paralelo (Figura 8 a) caracteriza-se pela independência de escoamento dos impelidores, ou seja, cada impelidor opera sem influenciar no escoamento do outro. No fluxo de fusão (Figura 8 b), linhas de corrente que deixam os impelidores colidem e misturam-se numa região média entre os dois impelidores para formar dois grandes anéis de vórtices. No fluxo divergente (Figura 8 c), como há uma proximidade muito grande entre o impelidor inferior e o fundo do tanque há, apenas, a produção de um único grande vórtice acima deste, enquanto que o impelidor superior produz dois anéis bem definidos (RUTHERFORD *et al.*, 1996).

O impelidor utilizado nesse trabalho é de fluxo radial do tipo Rushton com 6 pás. Este apresenta bom custo-benefício para operações a baixas concentrações de líquidos imiscíveis e dispersão gás-líquido, nas quais o efeito de cisalhamento é necessário (COUPER *et al.*, 2005)

2.2. Revisão Bibliográfica

A influência dos componentes internos dos tanques de mistura no fluxo e transporte de energia tem sido investigada em vários trabalhos experimentais. Mais recentemente, esses equipamentos passaram a ser estudados com o uso da CFD, o que possibilitou um maior conhecimento das particularidades dos processos realizados nesses equipamentos. A seguir serão apresentados alguns estudos desenvolvidos sobre tanques de mistura que serviram de base para a realização deste trabalho.

O tanque de mistura aqui estudado possui um eixo com dois impelidores do tipo Rushton com 6 pás, que são utilizados juntamente com as serpentinas helicoidais e as chicanas para

promover a troca de calor dentro do tanque de mistura. Como o padrão de fluxo com dois impelidores Rushton é muito dependente da distância entre eles, são mostrados a seguir alguns trabalhos que analisam a influência da distância entre esses impelidores no padrão de escoamento.

Rutherford *et al.* (1996) estudaram o perfil de fluxo característico de um tanque agitado por dois impelidores do tipo radial Rushton com 6 pás variando a altura dos impelidores no eixo central, como mostrado na seção 2. 1. 4. 2. Nesse estudo eles obtiveram três perfis de fluxo o paralelo, o fluxo de fusão e o de fluxo divergente como mostrado na Figura 8.

Ranade e Deshpande (1998) usaram uma abordagem computacional que chamaram de Snapshot modificada para avaliar a extensão da interação entre os fluxos gerados por dois impelidores do tipo Rushton e compararam com o trabalho de Rutherford *et al.* (1996). Os resultados encontrados pelos autores concordaram com os reportados por Rutherford *et al.* (1996). Entretanto, o nível de predição de turbulência em geral foi inferior. Segundo Ranade e Deshpande (1998), a discrepância entre os resultados pode ter sido causada pela baixa eficiência do modelo de turbulência $k-\epsilon$ em descrever o fluxo na região próxima a camada limite.

CHUNMEI *et al.* (2008) semelhante à Rutherford *et al.* (1996), avaliaram o padrão de escoamento em tanques de mistura por dois impelidores do tipo Rushton. Os autores variaram o diâmetro dos impelidores a fim de verificar o padrão de fluxo gerado em cada condição. Eles concluíram que para a mesma distância entre os impelidores o padrão de fluxo varia para diferentes diâmetros do impelidor.

O efeito do número de pás no formato do vórtice desenvolvido ao redor do impelidor foi estudado por Lu e Yang (1998). Os impelidores usados foram do tipo Rushton com 2, 4, 6 e 8 pás. Foram avaliados dados de velocidades médias, taxas de deformação, energia cinética turbulenta e taxas de dissipação de energia. Como resultados, eles obtiveram informações detalhadas do fluxo e caminho dos vórtices formados por cada uma das pás do impelidor e concluíram que para os que possuíam 4 e 6 pás foram observados vórtices com melhor definição e que as taxas de cisalhamento médias são mais intensas com uma maior dissipação de energia turbulenta.

Para prever a homogeneização líquida em um tanque de mistura com a utilização da CFD, Jahoda *et al.* (2007) realizaram um estudo utilizando diferentes modelos de simulação. Em seu estudo, os autores consideraram os métodos de modelagem rotacional do impelidor MRF e o de Malhas Deslizantes (*Sliding Mesh*) juntamente com os modelos de turbulência $k-\epsilon$ (SKE) e LES (*Large Eddy Simulation*) para um tanque com um e com dois impelidores. Concluíram que os perfis de velocidade obtidos utilizando o modelo de turbulência SKE tiveram boa

representatividade dos fenômenos e foram semelhantes e independentes no método de modelagem rotacional do impelidor.

Zadghaffari *et al.* (2009) estudaram o campo de fluxo e o tempo de mistura (utilizando um traçador) de um tanque de mistura com dois impelidores do tipo Rushton com 6 pás por dois métodos, um a partir da técnica de medição de Velocimetria por Imagem de Partícula (*Particle Image Velocimetry – PIV*) e o outro por simulação em CFD. Segundo os autores, a utilização de ferramentas em CFD geraram resultados satisfatórios quando comparados com os dados experimentais e os mesmos afirmam que essas ferramentas possuem um grande potencial para a sua utilização no estudo de tanques de mistura.

Perarasu *et al.* (2011) estudaram a influência do tipo de impelidor em um tanque de mistura com serpentina helicoidal. Verificaram que o coeficiente de transferência de calor é diretamente proporcional à taxa de transferência de calor para o impelidor do tipo Rushton, enquanto que para o impelidor do tipo naval ocorre um aumento dessa taxa até um certo valor e, depois, diminui. Dessa forma, os autores concluíram que a agitação induzida por um impelidor radial oferece maior transferência de calor do que o do tipo axial.

Vergel (2013) avaliou em seu trabalho a qualidade dos resultados das simulações realizadas em CFD e o efeito da malha computacional, dos modelos de turbulência e do esquema de discretização na simulação de um tanque de mistura. O autor comparou seus resultados com dados experimentais. Foi observado que a precisão da resolução numérica das equações da modelagem depende da resolução da malha. Outra observação feita por ele é que devido a resolução da camada de cisalhamento superior aos elementos tetraédricos, a camada de prisma nas paredes do tanque estudado mostrou-se importante para uma boa conformidade dos resultados. Em seu trabalho o autor mostrou que a utilização do modelo de turbulência SST (*Shear Stress Transport*) fornece bons resultados com baixo desvio padrão e boa predição do perfil de velocidade do fluido no tanque estudado.

Trabalhos como os realizados por Jahoda *et al.* (2007) e Vergel (2013) e tantos outros mostram a boa acurácia dos cálculos realizados em CFD quando definidos corretamente os efeitos dos modelos de turbulência, do grau de refinamento da malha computacional e dos esquemas de discretização.

Correlações para o número de Nusselt são utilizadas para a determinação do coeficiente de transferência de calor (h). Em sua maioria, as correlações para o número de Nusselt (Nu) publicadas na literatura são do tipo mostrado na Equação 1.

$$Nu = K \cdot Re^a \cdot Pr^b \cdot \mu_R^c \cdot G_c$$

1

Onde,

K, a, b e c são constantes;

μ_R é uma correlação entre viscosidades;

G_c representa a correção geométrica;

Re é o número de Reynolds, que relaciona as forças inerciais com as forças viscosas;

Pr é o número de Prandtl, que dá a medida da eficiência relativa do transporte de momentum e energia por difusão.

Para a transferência de calor em tanques de mistura dotados de serpentinas helicoidais, o número de Nusselt é calculado como mostrado na Equação 2.

$$Nu = \frac{h \cdot L_c}{k_T}$$

2

Com,

Nu é o número de Nusselt para tanques de mistura com camisa;

h é o coeficiente de transferência de calor;

L_c refere-se ao diâmetro da serpentina helicoidal;

k_T é a condutividade térmica.

Appleton e Brennan (1966) realizaram análises experimentais em um tanque de mistura dotado de serpentinas helicoidais para dois tipos de impelidores: um do tipo pás retas inclinadas a 45° com 3 pás e outro tipo Rushton com 6 pás. Eles compararam os dados obtidos experimentalmente com as correlações desenvolvidas por Chilton *et al.* (1944), Cummings e West (1950), Dunlap e Rushton (1953) e Oldshue e Gretton (1954) e concluíram que os valores do coeficiente de transferência de calor obtidos pelas correlações dos autores supracitados e obtidos por eles experimentalmente estavam em concordância. Dessa forma, utilizaram-se dessas correlações para avaliar a transferência de calor gerada pelos dois impelidores (tipo pás retas inclinadas a 45° e o tipo Rushton com 6 pás). Os autores observaram que uma maior transferência de calor foi desenvolvida pelo impelidor do tipo Rushton com 6 pás. Avaliaram, também, a influência da rugosidade das pás dos impelidores e verificaram que a mesma não afetou significativamente a transferência de calor.

Hagedorn e Salamone (1967) desenvolveram quatro correlações do número de Nusselt para fluidos Newtonianos e pseudo-plásticos para tanques de mistura dotados de serpentinas helicoidais com um impelidor. Essas correlações são semelhantes à Equação 1 com a inclusão de termos adicionais.

Lopes (2013) propôs, com a utilização de dados experimentais, correlações para o coeficiente de transferência de calor (h_o) para um tanque de mistura dotado de serpentinas helicoidais com duas configurações distintas: um com impelidor do tipo Rushton com 6 pás e o outro com impelidor do tipo pás retas inclinadas a 45° . O autor comparou a transferência de calor gerada pelos dois impelidores e obteve um maior valor de h_o para a configuração com o impelidor radial, corroborando com os resultados em trabalhos anteriores.

Oldshue e Gretton (1954) propuseram uma correlação para o coeficiente de transferência de calor (h_o) em um tanque de mistura. O tanque era composto por quatro chicanas situadas na parede dispostas equidistantes uma das outras, serpentinas helicoidais e agitado por um impelidor do tipo Rushton com 6 pás. Para a obtenção da correlação de Nusselt, diferentes diâmetros de impelidores e serpentinas helicoidais foram utilizadas e a faixa do Número de Reynolds considerada no estudo foi de 400 a $1,5 \times 10^6$. A Tabela 1 mostra a equação proposta em seu trabalho, a qual considerou outras variáveis além dos números adimensionais de Reynolds e Prandtl, como as relações $\frac{d}{T}$ e $\frac{D}{T}$. Com d igual ao diâmetro da serpentina helicoidal, D é o diâmetro do impelidor e T é o diâmetro do tanque.

A configuração do tanque empregada para esse estudo ainda é muito utilizada na indústria, embora apresente uma redução na velocidade média do fluido quando o fluxo radial gerado pelo impelidor colide com o feixe de serpentinas (JAIMES; NUNHEZ, 2015; JAIMES, 2015).

Jaimes (2015) realizou um estudo em CFD para obtenção de uma correlação do número de Nusselt para um tanque de mistura dotado de serpentinas helicoidais baseado no trabalho de Oldshue e Gretton (1954). O modelo computacional desenvolvido pelo autor ofereceu boa representação do fenômeno físico real. Esse modelo foi validado com a comparação dos valores de Nu obtidos por ele a partir da correlação desenvolvida em CFD e os valores de Nu obtidos pela correlação proposta por Oldshue e Gretton (1954). Os dados preditos computacionalmente apresentaram um desvio médio de 10,7% dos apresentados pela correlação obtida experimentalmente. Assim, o autor propôs a correlação descrita na Tabela 1 para o número de Nu , sendo que esta correlação apresentou desvio médio de 6,7% em relação aos dados experimentais. O estudo realizado por Jaimes (2015) é o primeiro trabalho na literatura no qual

uma correlação para o número de Nusselt é sugerida a partir de um modelo computacional utilizando a fluidodinâmica computacional (CFD).

Na tabela 1, a seguir, são mostradas algumas correlações do número de Nusselt obtidas para tanques de mistura dotados ou não de serpentinas helicoidais com um impelidor. Não foi possível incluir nessa tabela correlações para o Nusselt com mais de um impelidor, visto que não foram encontradas na literatura trabalhos com esse tema.

A ausência das correlações para tanques de mistura com múltiplos impelidores e presença de serpentinas helicoidais demonstra a importância desse estudo, além de, como citado anteriormente, tanques desse tipo são empregados na indústria.

Tabela 1: Correlações para o número de Nusselt com um impelidor do tipo Rushton.

$$Nu = KRe^a Pr^b Vi^c \left(\frac{D}{T}\right)^f \left(\frac{d}{T}\right)^g$$

Referências	K	a	b	c	F	g
Cummings e West (1950)*	0,68	2/3	1/3	0,14	-	-
Oldshue e Gretton (1954)	0,17	0,67	0,37	-	0,1	0,5
Strek e Masiuk (1967)*	0,76	2/3	1/3	0,14	-	-
Jaimes (2015)	0,35	0,67	0,37	-	0,32	0,59
Rosa <i>et al.</i> (2017)	0,10	0,83	0,33	0,14	-	-

*Foumeny (1990).

Na equação acima K, a, b, c, f e g são constantes;

Nu é o número de Nusselt;

Re é o número de Reynolds;

Pr é o número de Prandtl;

Vi é uma correlação para a viscosidade;

D é o diâmetro do impelidor;

T é o diâmetro do tanque e

d é o diâmetro da serpentina helicoidal.

Capítulo 3

Modelagem matemática

Os fenômenos de transporte estão presentes na vida cotidiana das pessoas, desde do processo de resfriamento do corpo num dia frio até o lançamento de um ônibus espacial. No entanto, prever o modo como esses processos irão ocorrer é o grande desafio do estudo dos fenômenos de transporte.

A fluidodinâmica computacional (CFD) apresenta-se como forma de elucidar o entendimento dos fenômenos de transporte, de se obter estimativas das especificidades locais (por exemplo temperatura, velocidade ou até mesmo tensão de cisalhamento em um determinado ponto) e prever quantitativamente e qualitativamente o comportamento dos fluidos durante um escoamento. Isso é realizado por meio da resolução das equações de conservação discretizadas e de equações auxiliares, tais como modelos de turbulência e funções de combinação (*Blend Function*).

Nesse capítulo são apresentadas as equações de transporte e números adimensionais, modelos de turbulência e detalhamento dos fundamentos considerados pertinentes para a realização deste trabalho.

3.1. Equações de Balanço

As equações de conservação de momento, massa e energia que governam os fenômenos de transporte para o escoamento dos fluidos em tanques de mistura são apresentadas a seguir. Elas são expressas na forma vetorial, válida para qualquer sistema ortogonal de coordenadas.

3.1.1. Conservação de Massa

A equação para a conservação da massa, também conhecida como equação da continuidade, é apresentada na forma vetorial pela Equação 3 e para o sistema tridimensional pela Equação 4.

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

Sendo ρ a massa específica e \vec{U} o vetor velocidade.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k) = 0 \quad 4$$

3.1.2. Conservação de Momento

As equações da quantidade de movimento para fluidos Newtonianos, conhecidas como equações de Navier-Stokes, são equações diferenciais que descrevem o escoamento dos fluidos. A partir delas, é possível demonstrar que mudanças no momento e na aceleração de uma partícula fluida são o resultado das mudanças na pressão e forças viscosas dissipativas atuantes nesse fluido. Elas podem ser representadas na forma vetorial pela Equação 5.

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \rho \cdot \vec{g} - \vec{\nabla} p - \nabla \cdot \vec{\tau} + \sum F \quad 5$$

O termo a esquerda da equação corresponde aos efeitos temporais e convectivos. A direita da equação os termos representam a gravidade, a força externa que atua sobre o fluido (gradiente de pressão), os termos referentes ao transporte molecular (efeitos difusivos) e um termo fonte que representa as demais forças externas que atuam sobre o fluido (JAIMES, 2015; JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2012).

Segundo Çengel e Cimbala (2007), para o escoamento de um fluido Newtoniano incompressível, o tensor tensão (τ_{ij}) é por definição linearmente proporcional ao tensor taxa de deformação (ϵ_{ij}). Dessa forma, verifica-se que o tensor de tensão viscosa pode ser calculado pela Equação 6 para um fluido newtoniano.

$$\tau_{ij} = 2\mu\epsilon_{ij} \quad 6$$

Em que μ é a viscosidade dinâmica.

Assim, na forma generalizada a equação do movimento para um fluido Newtoniano com ρ e μ constantes pode ser descrita pela Equação 7 a seguir (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007).

$$\frac{\partial(\rho \cdot u_i)}{\partial t} + \rho \frac{\partial(\rho \cdot u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \rho g_i + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\overline{u'_i u'_j}) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + F \quad 7$$

Em que u_i e u_j referem-se aos componentes de velocidade.

Do lado esquerdo da equação estão os termos temporais e advectivos, já do lado direito estão o gradiente de pressão, a força gravitacional, os termos relativos à difusão de momento e o termo fonte que representa o somatório de todas as outras forças que atuam sobre o fluido. O termo $\overline{u'_i u'_j}$ refere-se à média dos tensores de Reynolds. Este termo representa a turbulência a partir da média temporal do fluxo de momento devido às flutuações existentes nesse tipo de escoamento, sendo utilizado na modelagem da turbulência pelas equações semi-empíricas dos modelos de turbulência do tipo RANS (Reynolds Average Navier-Stokes).

3.1.3. Conservação da Energia

A primeira lei da termodinâmica clássica trata da diferença de energia de um sistema em dois estados de equilíbrio. A equação da energia é então uma extensão aplicada a um elemento de volume através do qual ocorre escoamento de um fluido (BIRD *et al.*, 2004).

Para um tanque de mistura, o transporte de energia pode ser aproximado pela equação da conservação da energia que é apresentada na Equação 8 para o sistema de coordenadas generalizadas.

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial [U_i (\rho E - p)]}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[k_{ef} \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{j'} h_{j'.i} + U_j (\tau_{ij})_{ef} \right] + S_{ij} \quad 8$$

O primeiro termo do lado esquerdo refere-se à variação da energia no tempo e o segundo termo corresponde ao transporte convectivo de energia. O primeiro termo do lado direito refere-se ao transporte de energia por difusão e o segundo esse transporte de energia por difusão das espécies químicas. O terceiro termo corresponde ao trabalho feito sobre o fluido pelas forças viscosas. E por último deste lado da equação tem-se um termo fonte referente à reações e demais fenômenos.

3.2. Transferência de Calor por Convecção

Quando um fluido escoar sobre uma superfície e há uma diferença de temperatura entre eles ocorre uma transferência de calor do mais quente para o mais frio. Esse mecanismo de troca térmica, que é facilmente observado na natureza, é denominado como convecção. A convecção pode ocorrer de duas formas: pela convecção forçada ou pela convecção natural. Será considerado um processo de convecção forçada se o movimento do fluido for promovido artificialmente por diferença de pressão e será considerado convecção natural quando a transferência de calor ocorrer por diferenças de massas específicas (forças de empuxo) (BRAGA FILHO, 2004).

O processo de convecção forçada pode diferenciar-se ainda, pelo tipo de escoamento desenvolvido pelo fluido: interno ou externo. É dita convecção em escoamentos internos quando um fluido é confinado em uma superfície que restringe o desenvolvimento da camada limite. Já no escoamento externo ocorre o desenvolvimento de uma camada limite livre, sem que haja a imposição de restrições ao escoamento (BERGMAN *et al.*, 2008).

A transferência de calor por convecção inclui o transporte de energia pelo movimento aleatório das moléculas do fluido (condução) e pelo movimento global das suas partículas (advecção) (BERGMAN *et al.*, 2008). Independente da forma como a transferência de calor por convecção ocorre, o fluxo de calor (q) trocado nesse tipo de processo é descrito pela Lei de Resfriamento de Newton, apresentado na Equação 9.

$$q = h_o(T_s - T_\infty) \quad 9$$

No qual,

T_s é a temperatura da superfície em contato com o fluido;

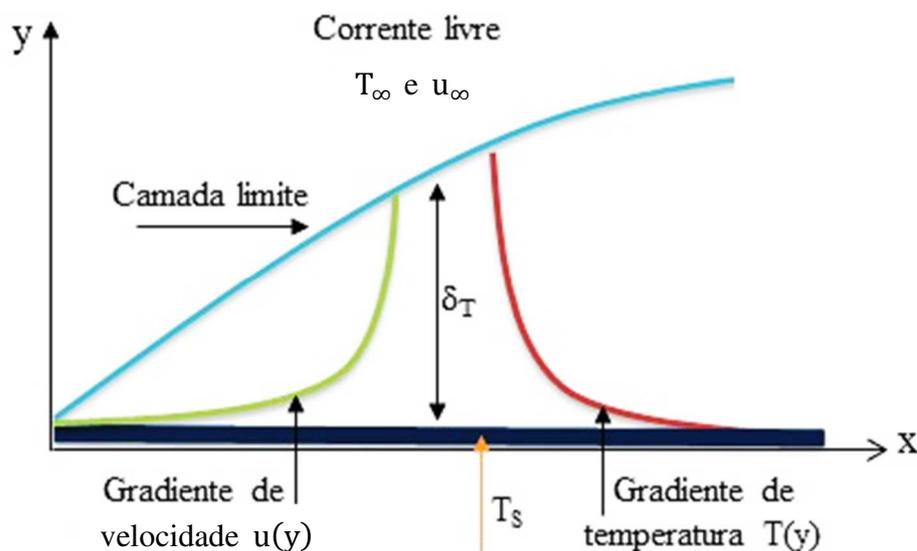
T_∞ é a temperatura do fluido;

h_o é o coeficiente de transferência de calor por convecção.

O coeficiente de transferência de calor é, na verdade, uma constante de proporcionalidade entre o fluxo de transferência de calor do sistema e a diferença de temperaturas. Fatores como a natureza e velocidade relativa do escoamento do fluido, a geometria e o acabamento da superfície em contato com esse fluido afetam grandemente no valor do coeficiente de transferência de calor (BRAGA FILHO, 2004).

Uma região chamada camada limite é formada em consequência da interação entre o fluido e a superfície (Figura 9). Na superfície, a velocidade de escoamento do fluido é igual a velocidade desta superfície, a esse comportamento é denominado condição de não-eskorregamento. Então, essas partículas próximas à superfície passam a retardar o movimento das partículas na camada de fluido adjacente e assim sucessivamente até que, em uma distância $y = \delta$ da superfície esse efeito passa a ser desprezível (BRAGA FILHO, 2004; GALEAZZO, 2005; BERGMAN *et al.*, 2008). Dessa forma, fica claro que o estudo e a observação dos fenômenos relacionados à camada limite são fundamentais para a entendimento do transporte de energia por convecção.

Figura 9: Desenvolvimento da camada limite no transporte de energia por convecção.



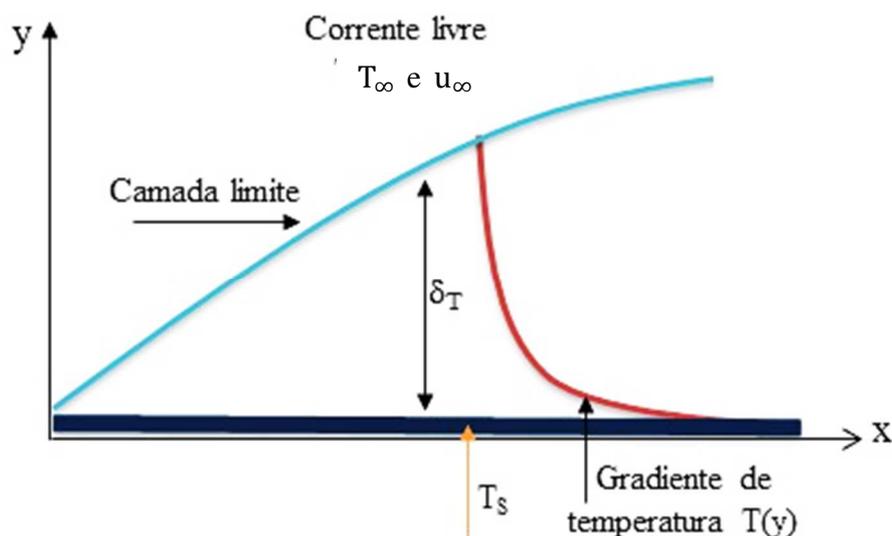
De um modo geral, as camadas limites térmica e de velocidade apresentam espessuras diferentes, correspondentes à facilidade com que ocorrem o transporte de calor e a difusão de momento (BIRD *et al.*, 2004).

3.2.1. Camada Limite Térmica

Durante o escoamento de um fluido sobre uma superfície é desenvolvida uma região próxima a esta superfície denominada camada limite térmica. Esta região apresenta um gradiente de temperatura formado pela diferença entre a temperatura da superfície (T_s) e a

temperatura da corrente livre (T_∞), onde o δ_T é a espessura da camada limite que varia ao longo do escoamento. Na Figura 10 é possível observar a região da camada limite térmica.

Figura 10: Desenvolvimento da camada limite térmica.



3.2.2. Camada Limite de Velocidade

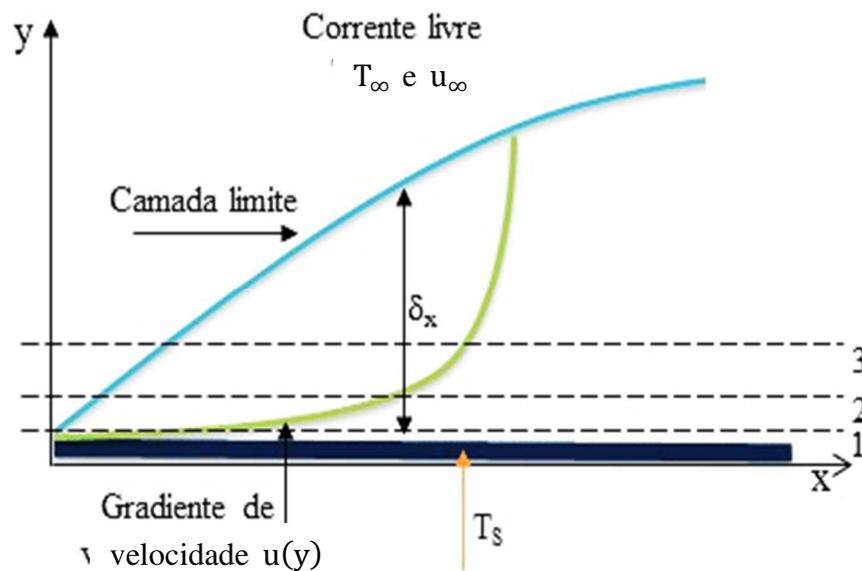
Da mesma forma como ocorre a formação da camada limite térmica quando há diferença entre as temperaturas do fluido na corrente livre e da sua superfície, uma camada limite de velocidade é desenvolvida quando há escoamento de um fluido sobre uma superfície (BERGMAN *et al.*, 2008).

Em 1904, Prandtl mostrou que no escoamento ao redor de um corpo há duas regiões distintas. A primeira região é externa ao corpo, na qual as forças viscosas podem ser desprezadas e a média temporal da distribuição de velocidade é quase plana. A outra região é formada por uma fina camada ao redor do corpo onde essas forças viscosas são consideráveis. Assim, para descrever o escoamento na região próxima à superfície dos sólidos, uma solução aproximada é obtida das componentes da velocidade considerando a viscosidade do fluido (SOUZA *et al.*, 2011; FREIRE, 1990).

A região da camada limite para escoamento em regime turbulento pode ser, ainda, dividida em três faixas: subcamada viscosa, camada amortecedora e subcamada inercial. (Figura 11). A subcamada viscosa encontra-se mais próxima da parede, na qual o escoamento é laminar e a viscosidade molecular é dominante e muito importante na transferência de calor e movimento. A camada amortecedora (camada tampão), está acima da subcamada viscosa, possui

escoamento dominado pelas forças viscosas e os efeitos turbulentos passam a se tornar significativos. A próxima camada é a subcamada inercial situada acima da camada amortecedora. Nela os efeitos turbulentos são mais significativos, mas ainda não são dominantes (BIRD *et al.*, 2004).

Figura 11: Desenvolvimento da camada limite de velocidade e regiões de escoamento da camada limite. 1) Subcamada viscosa; 2) Camada amortecedora; 3) Subcamada inercial.



A grandeza δ , mostrada na Figura 11, representa a espessura da camada limite. O retardamento do movimento sofrido pelo fluido na região da subcamada viscosa está associado à ação de tensões de cisalhamento (τ) que atuam em planos paralelos à velocidade do fluido (BERGMAN *et al.*, 2008). A formulação matemática da tensão de cisalhamento para um fluido newtoniano é apresentada na Equação 10.

$$\tau = \mu \frac{du}{dy} \quad 10$$

Onde y a distância da camada até a parede e μ a viscosidade cinemática.

Na região da subcamada viscosa, é possível relacionar a velocidade tangencial (U) com a tensão de cisalhamento (τ). Essa relação é feita por meio de expressões em função da distância adimensional da parede (y^+), sendo apresentada na Equação 11. A mesma relação pode ser aplicada para a região turbulenta como representada na Equação 12.

$$u^+ = \frac{U}{U_\tau} = y^+ \quad 11$$

$$u^+ = \frac{U}{U_\tau} = \frac{1}{k} \ln(y^+) + C \quad 12$$

Com,

$$y^+ = \frac{\rho \Delta y U_\tau}{\mu} \quad 13$$

$$U_\tau = \left(\frac{\tau}{\rho} \right)^{1/2} \quad 14$$

Com,

k e C são constantes, cujos valores são determinados empiricamente de aproximadamente 0,40 e 0,50, respectivamente (JAIMES, 2015).

u^+ é a velocidade perto da parede;

U_τ é o atrito da velocidade;

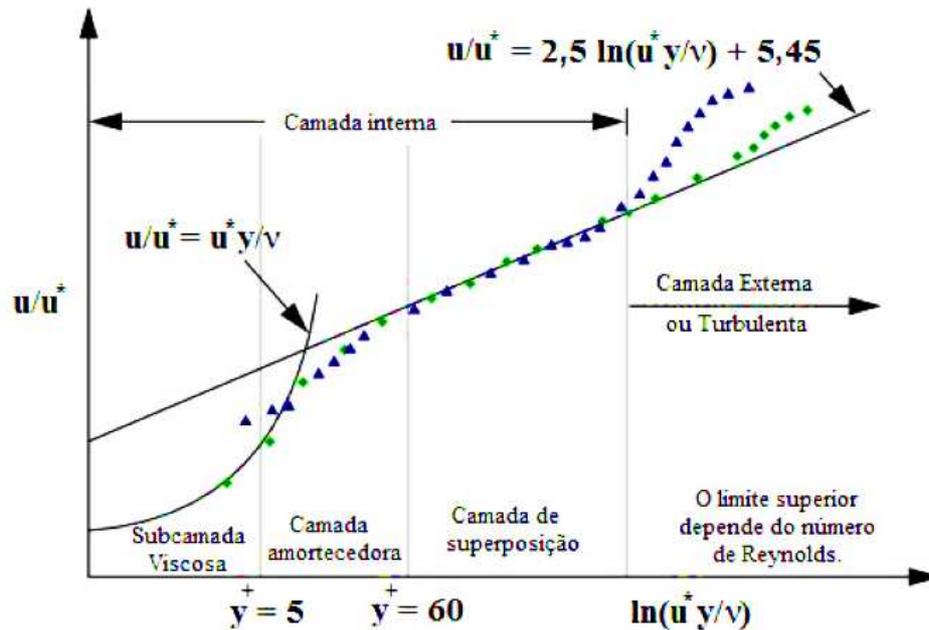
U é a velocidade tangencial à parede na distância Δy ;

Δy é a distância entre o primeiro nó da malha e a parede;

Uma das principais importâncias do y^+ em simulações com a Fluidodinâmica Computacional é distinguir as regiões perto da parede para que a modelagem matemática possa representar corretamente os efeitos na região da camada limite. Na Figura 12 é apresentada uma curva de dados experimentais da velocidade u^+ em relação ao logaritmo da distância da parede y^+ .

Devido ao alto gradiente de velocidade, a região da camada limite deve ser muito bem representada para que os resultados sejam representativos e confiáveis (JAIMES, 2015; NOGUEIRA, 2007; SPOGIS, 2002).

Figura 12: Subdivisões da região da camada limite. (Adaptado de ANSYS, Inc. 2011).



3.3. Potência

Como o consumo de potência é uma variável muito importante para os processos químicos, ele tem sido muito discutido na literatura. Um dos parâmetros significativos de concepção para um tanque de mistura é a Potência (P) que é afetado pelas propriedades físicas do fluido, parâmetros de funcionamento e seus parâmetros geométricos (TAGHAVI *et al.*, 2011).

A potência em um tanque de mistura pode ser definida como a quantidade de energia no tempo transferida do impelidor para o fluido necessária para gerar o movimento rotacional deste dentro de um vaso. O seu cálculo pode ser realizado por diferentes métodos pois depende do tipo de processo, do regime de escoamento e das características do fluido. Contudo, para escoamentos turbulentos de sistemas homogêneos, a potência pode ser estimada a partir do torque (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007).

A grandeza adimensional utilizada para representar a potência é o número de potência (N_P) e para o escoamento em tanque de mistura ela é calculada como apresentado na Equação 15 a seguir. Em CFD, a potência é estimada pelo produto da integral do torque, realizada sobre toda superfície do impelidor, pela sua velocidade de rotação.

$$N_P = \frac{P}{\rho N^3 D^5}$$

Onde,

P é a potência;

N é a velocidade de rotação do impelidor;

D é o diâmetro do impelidor.

Os parâmetros que influenciam a potência fornecida pelos impelidores ao fluido são a presença, número e espessura das chicanas e a altura (C) do impelidor em relação ao fundo do tanque. As chicanas atuam como uma barreira ao escoamento rotacional demandando o emprego de uma maior potência transferida, visto que criam uma componente radial de velocidade. Para um mesmo tipo de impelidor a variação da sua posição dentro do tanque pode causar um aumento ou diminuição da potência requerida, como por exemplo para um impelidor do tipo Rushton, quando se muda a relação C/T de 0,3 para 1,0 o número de Potência passa de 4 para 6 (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007).

3.4. Números adimensionais típicos de sistemas agitados com Transferência de Calor

As análises através dos números adimensionais se baseiam no fato de que as leis naturais são independentes das unidades (VERGEL, 2013). É a partir deles que podem ser obtidas as correlações para previsão do escoamento em sistemas reais. Essas correlações são desenvolvidas por meio de experimentação em pequena escala que devem obedecer as condições de similaridade geométrica (as razões entre todas as dimensões devem ser constantes para todo instante de tempo) e dinâmica (a preservação do mesmo valor para os números adimensionais e forças agindo sobre uma partícula fluida) (BIRD *et al.*, 2004).

3.4.1. Número de Reynolds (Re)

O número de Reynolds é utilizado para determinar o regime de escoamento do fluido. Ele dá a relação das forças inerciais, associada aos efeitos convectivos do movimento do fluido com as forças viscosas (BIRD *et al.*, 2004). As forças inerciais são desenvolvidas durante o escoamento pela transferência da quantidade de movimento. Já as forças viscosas ocorrem pela existência das tensões de cisalhamento no sistema, que fazem com que uma camada se movimente mais rápida ou mais lentamente que as camadas adjacentes.

Para escoamentos em que o sistema apresenta valores abaixo do número de Reynolds crítico (Re_{cr}), o escoamento é dado em camadas adjacentes de fluido que escorregam umas sobre as outras de modo ordenado. O Re_{cr} é o valor no qual ocorre a transição entre os regimes laminar e turbulento (BIRD *et al.*, 2004). O regime é dito laminar se as condições de escoamento são constantes ao longo do tempo. De outro modo, para valores acima do número de (Re_{cr}), uma série de complicações de eventos ocorrem e conduzem a mudanças radicais na característica do escoamento. Há a formação de movimento caótico e vórtices que imprimem flutuações intensas em todo o campo do escoamento. As condições de contorno aplicadas não são constantes ao longo do tempo e a velocidade e todas as outras propriedades variam de forma caótica. Este regime é denominado escoamento turbulento (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995).

Em um sistema de tanque de mistura, o número de Reynolds é calculado como mostrado na Equação 16.

$$Re = \frac{\rho \cdot N \cdot D^2}{\mu} \quad 16$$

Nos quais ρ , μ , N e D são a massa específica, a viscosidade dinâmica do fluido, a velocidade de rotação e o diâmetro do impelidor, respectivamente.

3.4.2. Número de Prandtl (Pr)

O número de Prandtl é uma medida da eficiência relativa do transporte de momento e energia por meio de difusão nas camadas limite hidrodinâmica e térmica e está relacionado as espessuras relativas dessas camadas (BRAGA FILHO, 2004). A correlação adimensional representada pelo número de Prandtl é dada pela razão entre a difusão de quantidade de movimento e a difusão térmica dentro do próprio fluido (Equação 17).

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{C_p \cdot \mu}{k} \quad 17$$

Onde,

C_p é o calor específico;

k é a condutividade térmica do fluido;

ν é a viscosidade cinemática;

α é a difusividade térmica.

Para valores de $Pr > 1$ a camada limite de velocidade é maior que a térmica e no caso inverso, $Pr < 1$, tem-se que a camada limite térmica é maior. Sendo assim, quando $Pr = 1$, tem-se que as duas camadas possuem a mesma espessura.

3.4.3. Número de Nusselt (Nu)

Utilizado para a determinação do coeficiente de transferência de calor (h_0), o número de Nusselt é a razão da transferência de calor por convecção e condução (BERGMAN *et al.*, 2008). Deste modo, quanto maior o número de Nusselt, maior é a transferência de calor por convecção no sistema. Para o cálculo do número de Nusselt em tanques de mistura com serpentinas helicoidais o comprimento característico é dado pelo diâmetro da serpentina, como mostrado na Equação 18.

$$Nu = \frac{h \cdot d}{k} \quad 18$$

Onde,

h é o coeficiente de transferência de calor;

d é o diâmetro da serpentina helicoidal;

k é a condutividade térmica do fluido.

A transferência de calor em tanques de mistura com serpentinas helicoidais é influenciada principalmente por três coeficientes: 1 - coeficiente de transferência de calor dentro do tanque de mistura; 2 - coeficiente de transferência de calor do fluido dentro da serpentina helicoidal e 3 - resistência à transferência de calor da espessura da parede da serpentina (PERARASU *et al.*, 2011). À vista disso, inúmeras proposições para a correlação do número de Nusselt podem ser encontradas na literatura. Grande parte dessas correlações são compostas pelos números adimensionais Reynolds (Re), Prandtl (Pr) e uma relação de viscosidade (μ_i). Uma proposição geral é expressa pela Equação 19.

$$Nu = k \cdot Re^a \cdot Pr^b \cdot \mu_i^c \quad 19$$

k , a , b e c são constantes.

Segundo Mohan *et al.* (1992), os valores $2/3$, $1/3$ e $0,14$ para os expoentes são frequentemente usados para as constantes a , b e c e o valor de k varia entre $0,3$ e $1,5$ dependendo do tipo de impelidor e da superfície de transferência de calor. Para Moilanen *et al.* (2008) tais valores são úteis somente se os parâmetros de operação e geometria do vaso forem semelhantes. Em vista dessa limitação, alguns pesquisadores passaram a incorporar parâmetros relacionados à geometria a fim de aumentar a faixa de validade dessas correlações. Isso é alcançado pelo uso de um fator de correção de geometria (G_c) como mostrado na Equação 1.

3.5. Hipótese de Boussinesq

Em analogia à Lei de viscosidade de Newton (Equação 10), foi proposto por Boussinesq em 1877 um conceito de viscosidade turbulenta (também chamada de viscosidade de vórtice) (SOUZA *et al.*, 2011; FREIRE, 2005). Essa viscosidade turbulenta (μ_t) está relacionada com o escoamento, diferentemente da viscosidade dinâmica (μ) que é propriedade do fluido (BIRD *et al.*, 2004). Essa hipótese faz a suposição de que os tensores de Reynolds ($-\overline{u'_i u'_j}$) podem ser expressos em termos de gradientes das velocidades médias para descrever o escoamento turbulento. Neste tipo de escoamento há a formação de turbilhões pela ação das forças viscosas próprias do fluido (viscosidade molecular) ou pelo escoamento (viscosidade turbulenta) (SOUZA *et al.*, 2011; FREIRE, 2005). Os modelos que se baseiam nessa hipótese negligenciam todas as correlações de segunda ordem que aparecem entre as propriedades de flutuação durante a decomposição de Reynolds (PERES, 2002; VERGEL, 2013).

Segundo a hipótese de Boussinesq, as tensões turbulentas de Reynolds (Equação 20) são proporcionais aos gradientes de velocidade média do escoamento, o qual têm-se a viscosidade turbulenta (μ_t) como coeficiente de proporcionalidade (NETO, 2005).

$$-\overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad 20$$

Sendo,

δ_{ij} é o Delta de Kronecker (sendo 1, se $i=j$ e 0, se $i \neq j$).

O primeiro termo do lado direito da Equação 20 refere-se às tensões de cisalhamento e o segundo termo garante que seja feita uma correta consideração das tensões normais que compõem a diagonal principal do tensor das tensões turbulentas, quando $i = j$.

A energia cinética turbulenta (k) é calculada pela Equação 21 a seguir:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_j} = \frac{1}{2} (\overline{u_1'^2} + \overline{u_2'^2} + \overline{u_3'^2}) \quad 21$$

Onde u' representa flutuação da velocidade.

Os modelos de turbulência que são baseados nessa hipótese da viscosidade turbulenta são conhecidos como EVM's (*eddy viscosity models*). Muitos modelos de turbulência foram desenvolvidos a partir da hipótese de Boussinesq como os modelos k - ϵ e k - ω e SST (*Shear Stress Transport*). Também há modelos de turbulência que não fazem uso da viscosidade turbulenta como os modelos RSM (*Reynolds stress Model*), DNS (*Direct Numerical Simulation*) e LES (*Large Eddy Simulation*) (JAIMES, 2015; JOSHI *et al.*, 2011; VERGEL, 2013).

Nas operações de agitação e mistura, a formação de vórtices ou turbilhões contribuem com o movimento do fluido e com a transferência de energia nas diferentes escalas de turbilhões até serem dissipadas pelas forças viscosas em energia interna. Para mensurar sistemas com escoamento turbulento em escala industrial as equações de modelos de turbulência são adicionadas às equações de movimento.

3.5.1. Modelos de Turbulência

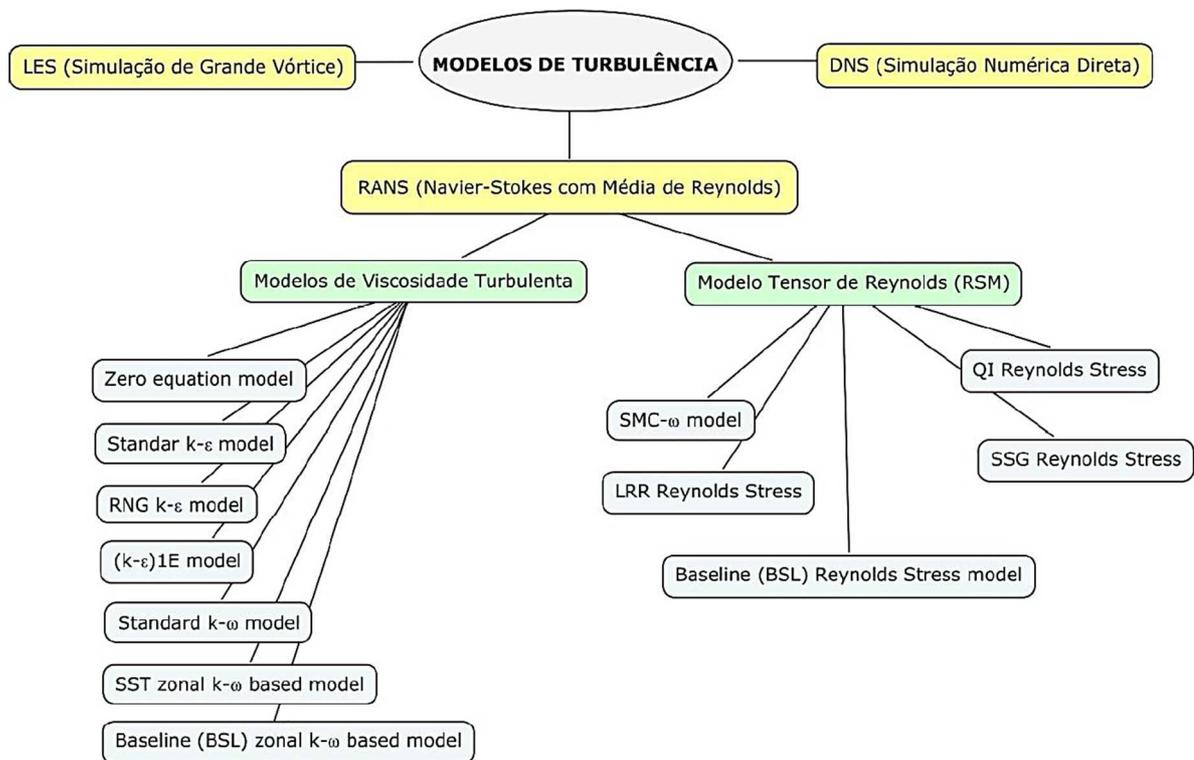
A turbulência é um fenômeno bastante complexo. Apresenta grande variabilidade comportamental no transporte de energia, momentum e massa. Assim, é possível afirmar que quanto maior o regime turbulento, mais caótico e desordenado o sistema se encontrará.

Nos últimos trinta anos os métodos computacionais de fluidodinâmica (CFD) baseados nas equações de Navier-Stokes passaram a ser uma ótima ferramenta para a predição de fluxos e homogeneização de líquidos em tanques de mistura. Uma vantagem dos métodos utilizados na CFD é que as equações fundamentais que regem o fluxo dos fluidos são “resolvidas” e, conseqüentemente, são eliminados os problemas de escalonamento (*scale-up*), já que a modelagem é realizada para a escala real dos equipamentos (JAHODA *et al.*, 2007). O

entendimento sobre o transporte de calor nos tanques é essencial para projetos confiáveis e eficientes. Para isso, informações sobre a velocidade, a pressão, a distribuição da energia cinética e dissipação local são necessários no tempo e domínio espacial (JOSHI *et al.*, 2011).

O modelo de turbulência tem um importante papel, principalmente, em equipamentos sem chicanas para os quais a componente tangencial da velocidade é predominante (RIBEIRO, 2012). Inúmeros destes modelos foram desenvolvidos e estão disponíveis. De acordo com Joshi *et al.* (2011) as técnicas de modelagem em CFD podem ser classificadas como: Navier-Stokes com Média de Reynolds (RANS), Simulação Numérica Direta (DNS) e Simulação de Grande Vórtice (LES), apresentadas na Figura 13 abaixo.

Figura 13: Modelos de turbulência.



Fonte: (VERGEL, 2013).

Problemas de turbulência em CFD podem ser resolvidos diretamente pelos modelos DNS, pois consideram todos os tamanhos dos vórtices formados. No entanto exigem um elevado esforço computacional (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007; JOSHI *et al.*, 2011; MALISKA, 2004; SPOGIS, 2002; VERGEL, 2013).

A modelagem com modelos do tipo LES também resolvem os problemas para a escala de turbilhão. No entanto, para as pequenas escalas, isotrópicas na natureza, são utilizados modelos

em escala sub-malhas que fornecem a dissipação adequada para a energia transferida das grandes escalas para pequenas escalas (JOSHI *et al.*, 2011). Contudo, a sua aplicação ainda é restrita devido ao seu custo computacional.

Como a modelagem utilizando os modelos DNS e LES exigem grande esforço computacional e tempo é comum na indústria a utilização dos modelos do tipo RANS que apresentam boa convergência para diversos sistemas.

3.5.1.1. Modelo k - ε (k - ε)

O modelo de turbulência k - ε é um modelo semi-empírico fundamentado na viscosidade turbulenta, que assume a existência de uma turbulência isotrópica para o escoamento com altos números de Reynolds. É modelado a partir de duas equações de transporte, um para a energia cinética turbulenta (k) (Equação 22) e outra referente à dissipação da energia cinética (ε) (Equação 23).

O modelo é muito utilizado para tanques de mistura para modelar os efeitos de turbulência devido à sua alta estabilidade, robustez numérica e capacidade de predição (ANSYS, 2014; JAIME, 2015; VERGEL, 2013). No entanto, a modelagem das equações de transporte para k e ε apresentam dificuldade de descrever a curvatura das linhas de corrente, deformação rotacional e outros efeitos de força de campo (JOSHI *et al.*, 2011), acarretando uma má predição de turbulência (DEGLON; MEYER, 2006).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = P_k - \rho \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad 22$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \varepsilon u_j) = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \quad 23$$

$C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_k , e σ_ε são constantes determinadas experimentalmente por decomposição turbulenta, escoamento cisalhante turbulento e otimização.

O termo P_k nas duas equações representa a geração de energia cinética turbulenta devido ao gradiente de velocidade média (VIESER *et al.*, 2002). Ele é calculado pela Equação 24.

$$P_k = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad 24$$

O modelo para a turbulência viscosa μ_t , (Equação 25) é calculado considerando que os tensores de Reynolds (Equação 26) são proporcionais aos gradientes de velocidade média.

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad 25$$

Onde C_μ é uma constante.

$$\rho \overline{u'_i u'_j} = -\mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad 26$$

3.5.1.2. Modelo $k-\omega$ (k - ω)

O modelo de turbulência $k-\omega$, assim como o $k-\varepsilon$, é um modelo semi-empírico fundamentado na viscosidade turbulenta. Ele é modelado a partir da equação para a energia cinética turbulenta (k) e da equação para a razão específica de dissipação da energia cinética turbulenta (ω), equações 27 e 28, respectivamente. Esse modelo é normalmente empregado em escoamentos com baixos valores de Reynolds onde os efeitos viscosos próximos a parede são significativos (JAIMES, 2015).

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho k u_j) = P_k - \beta' \rho k \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad 27$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \omega u_j) = \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] \quad 28$$

Onde β' , β , α , σ_ω e σ_k são constantes.

A viscosidade turbulenta nesse modelo é calculada pela Equação 29.

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega}$$

3.5.1.3. Modelo SST (Shear Stress Transport)

Embora tenha sido originalmente usado para aplicações aeronáuticas, o modelo SST tem sido utilizado na maioria das investigações industriais, comerciais e de muitos códigos de pesquisa (MENTER *et al.*, 2003).

Um dos principais problemas encontrados na utilização de modelos para a turbulência com duas equações é a inadequada representação das regiões de livre escoamento e da camada limite, simultaneamente (JAIMES, 2015; MENTER, 1994; VERGEL, 2013). Dentre os principais modelos de turbulência com duas equações, o modelo $k-\varepsilon$ representa muito bem as regiões do escoamento para elevados números de Reynolds e o modelo $k-\omega$ faz o mesmo para a região da camada limite, no entanto, a região oposta apresenta baixa confiabilidade para ambos os casos. O modelo SST proposto por Menter (1994) é um modelo híbrido que incorpora esses dois modelos de turbulência.

Para a modelagem da região de livre escoamento, no modelo SST, o cálculo da turbulência é realizado com o uso do modelo $k-\varepsilon$, para a região da camada limite ele é calculado pelo modelo $k-\omega$, já na região intermediária entre o escoamento livre e o escoamento na região da parede uma combinação desses dois modelos é realizada, acarretando em uma melhor predição de todas as regiões do sistema. Essa seleção da região e do modelo a ser usado é feita automaticamente dependendo da proximidade com a parede, sendo esta última a principal complexidade adicional na formulação do modelo SST em comparação com os modelos de turbulência padrões. Para isso são utilizadas as funções de combinação (*Blend Function*) (MENTER *et al.*, 2003).

Os parâmetros de combinação (F1 e 1-F1) são responsáveis pela transição suave entre os modelos em qualquer condição de escoamento do modelo SST e não afetam nos cálculos causando erro. Ao passar do modelo $k-\varepsilon$ para a formulação do modelo $k-\omega$, o modelo $k-\varepsilon$ é multiplicado por um parâmetro de combinação (1-F1) e o modelo $k-\omega$ multiplicado por F1, que varia de 0 à 1. F1 assume o valor de um próximo da superfície da parede e diminui até zero fora da camada limite. Assim, na região da camada limite com F1 igual a um, é ativado o modelo $k-\omega$, já na região fora da camada limite é o modelo $k-\varepsilon$ que é ativado, e na região de transição têm suas equações somadas (ATAÍDES, 2009; JAIMES, 2015; VERGEL, 2013; VIESER *et al.*, 2002).

A formulação para o modelo SST é apresentada a seguir pelas equações 30 e 31.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \nabla(\rho k u) = \nabla \cdot [(\mu + \mu_t \sigma_k) \nabla k] + \tilde{P}_k - \beta^* \rho k \omega \quad 30$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \nabla(\rho k u) = \varphi \rho S^2 - \beta \rho \omega^2 + \nabla \cdot [(\mu + \mu_t \sigma_k) \nabla \omega] + \dots \\ \dots + (1 - F1) 2 \rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \nabla k \nabla \omega \end{aligned} \quad 31$$

Um limitador de produção mostrado na Equação 32 é usado no modelo SST para evitar a acumulação de turbulência nas regiões de estagnação.

$$\tilde{P}_k = \min(\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}; c_1 \varepsilon) \quad 32$$

A função de combinação para o uso dos modelos $k-\varepsilon$ e $k-\omega$ no modelo SST é apresentada na Equação 33.

$$\varphi = F1 \varphi_1 + (1 - F1) \varphi_2 \quad 33$$

φ_1 e φ_2 são as constantes que representam os coeficientes dos modelos $k-\omega$ e $k-\varepsilon$, respectivamente.

σ_ω , σ_k , c_1 , k , β e β^* são constantes e $F1$ é dado pela Equação 34.

$$F1 = \tanh \left\{ \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}; \frac{500v}{\omega y^2} \right); \frac{4 \rho \sigma_{\omega 2} k}{CD_{k\omega} y^2} \right] \right\}^4 \quad 34$$

Onde, y é a distância até a parede e $D_{k\omega}$ é a porção positiva do termo de difusão cruzada.

$$CD_{k\omega} = \max \left(2 \rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}; 1.0 e^{-10} \right) \quad 35$$

É realizada uma imposição de um limite para a formulação da viscosidade turbulenta mostrada pela Equação 36. Esse limitador é utilizado para melhorar a previsão de escoamentos com gradientes adversos de pressão, com regiões de separação ou em escoamentos em superfícies lisas ou cisalhamento livre (JAIMES, 2015; NOGUEIRA, 2007).

$$v_t = \frac{\alpha_1 k}{\max(\alpha_1 \omega, SF2)} \quad 36$$

Sendo S a medida invariante da taxa de deformação e F2 a segunda função de combinação que é calculada pela Equação 37.

$$F2 = \tanh \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500v}{\omega y^2} \right) \right]^2 \quad 37$$

Quanto à modelagem da influência da parede no escoamento do fluido o *software* ANSYS CFX 16.0 possui duas abordagens, a abordagem *Near-Wall Modelling* e a *Wall Function*. As funções de parede quando aplicadas na maioria dos fluxos a altos números de Reynolds geram uma economia substancial do custo computacional. Essas funções são muito utilizadas pois são econômicas, robustas e razoavelmente precisas (DANGE; VISAVALE, 2016).

3.5.1.4. Modelagem Próxima à Parede (*Near-Wall Modelling*)

Neste método, que também é conhecido como formulação de baixo número de Reynolds ou lei logarítmica, os modelos de turbulência são modificados para permitir os efeitos viscosos na parede considerando a condição de não-escorregamento (VERGEL, 2013). Assim, usando escalas muito pequenas de malha na direção normal da parede consegue-se traçar diretamente o perfil da camada limite.

Os modelos de turbulência baseados nas equações de frequência turbulenta (ω), como SST e k- ω , são adequados para o uso deste método. A desvantagem deste método é o alto custo computacional empregado, devido à presença de malhas muito finas na zona próxima à parede.

3.5.1.5. Função de Parede (*Wall Function*)

Neste método é utilizada uma função semi-empírica para proporcionar as condições de contorno na parede para as equações de transporte sem resolver a camada limite (JAIMES, 2015) Isso permite uma transição suave nos modelos de turbulência baseados na taxa de dissipação turbulenta (ϵ).

A sua principal vantagem é a possibilidade de modelar altos gradientes de cisalhamento na região próxima à parede com malhas menos robustas, acarretando numa redução significativa

do tempo de simulação. Além disso, o uso da função da parede evita a necessidade de qualquer alteração do modelo de turbulência para que sejam considerados os efeitos da presença da parede (VERGEL, 2013).

3.6. Método dos Volumes Finitos

O *software* utilizado para a realização deste trabalho, assim como a maioria dos *softwares* comerciais, é baseado em métodos numéricos (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007; MALISKA, 2004). Segundo Maliska (2004), a resolução de problemas a partir de métodos numéricos se dá pela substituição das derivadas nas equações diferenciais por expressões algébricas que envolvam as incógnitas. Esses métodos são aplicados quando não é possível obter solução analítica das equações, o que gera erro em relação ao resultado real. No entanto, quando o modelo numérico é aplicado corretamente, percebe-se que quanto maior o número discreto de pontos, mais próxima será a solução numérica com a real.

A escolha de um modelo numérico para um determinado sistema pode apresentar simplificações para as equações de conservação (GONÇALVES, 2007; SPOGIS, 2002) como pouca representatividade de alguns termos, como dos termos advectivos, agregando erro na solução. Para uma boa representação dos fenômenos de um sistema a escolha das simplificações realizadas e as restrições consideradas no modelo computacional requerem conhecimento aprofundado do problema e dos fenômenos que nele ocorrem.

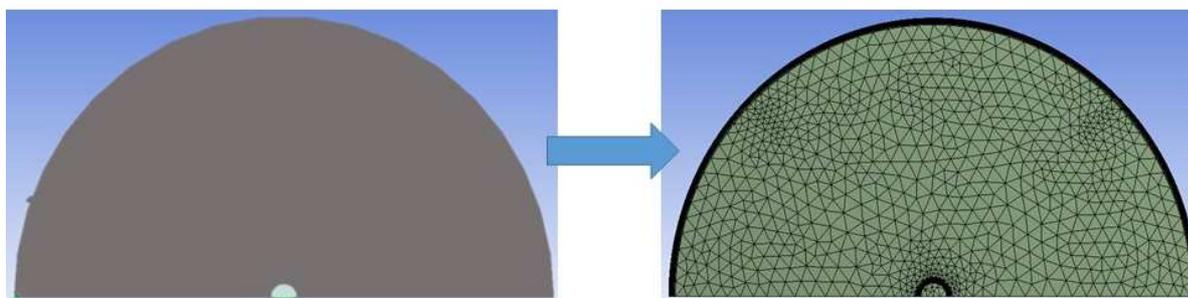
A discretização deve ser realizada em todo o volume de controle para que possam ser simulados a distribuição da velocidade, turbulência, tensão de cisalhamento, pressão, temperatura e os fluxos primários e secundários gerados pela movimentação do impelidor (SPOGIS, 2002).

O método dos volumes finitos (assim como o Método dos Elementos Finitos) foi empregado inicialmente para a resolução de problemas bidimensionais. Ele caracteriza-se pela utilização da definição de volume de controle, pois utiliza como ponto de partida a forma diferencial da equação da conservação. Isso permite a sua utilização em sistemas de coordenadas generalizadas, passando a resolver problemas em geometrias irregulares (MALISKA, 2004; PATANKAR, 1980; VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995).

O domínio é discretizado num conjunto de volumes de controle elementares não sobrepostos, que podem ser irregulares no tamanho e na forma, satisfazendo a conservação das propriedades de transporte para cada volume, como mostrado na Figura 14. As equações

aproximadas são obtidas integrando no espaço e tempo as equações massa, momentum e energia em sua forma diferencial (GONÇALVES, 2007).

Figura 14: Discretização do volume de controle.



No estudo de escoamento utilizando métodos computacionais, a determinação do tamanho do primeiro elemento (o mais próximo à superfície) na região da camada limite deve-se calcular a partir do valor de y^+ , que depende do modelo de turbulência utilizado. Também, os elementos próximos à parede são criados usando o primeiro valor de altura de célula calculado com uma taxa de crescimento gradual para a malha, de modo que a maioria dos efeitos são capturados evitando a geração de uma malha muito densa (DANGE; VISAVALE, 2016).

3.6.1. Fluidodinâmica Computacional

O estudo em Fluidodinâmica Computacional (*Computational Fluid Dynamic – CFD*) pode ser descrito como uma área de estudo que utiliza simulação numérica para descrever numericamente o escoamento de fluidos, calor e de espécies químicas, podendo estimar, inclusive, reações químicas⁶. É uma forma de resolução numérica das equações de conservação de massa, momento e energia, com a utilização de técnicas matemáticas e computacionais. Sua resolução considera a geometria do equipamento juntamente com o conjunto de equações auxiliares (por exemplo quando se estima a radiação na troca térmica) para prever o comportamento de um determinado escoamento (HARRIS *et al.*, 1996; JOSHI *et al.*, 2011).

A simulação em CFD é um dos recursos mais econômicos para se adquirir as informações detalhadas sobre campos de turbulência necessários para simulações mais realistas (MONTANTE *et al.*, 2001).

⁶ <http://www.esss.com.br/blog/2016/06/fluidodinamica-computacional-o-que-e/>. Acesso em: 02/08/2016.

A aplicação das técnicas de CFD no estudo de tanques de mistura traz uma riqueza de detalhes relativos ao comportamento global e local do sistema. Informações de como a transferência de calor ocorre dentro do tanque, a existência, ou não, de pontos de estagnação, entre outras, são obtidas com o uso de CFD e são dificilmente entendidas por técnicas experimentais.

A Fluidodinâmica Computacional apresenta vantagens em relação aos métodos experimentais devido à flexibilidade na mudança de parâmetros de processo e regimes de fluxo, além de prover uma rota rápida e fácil na determinação do tempo e da qualidade da mistura (SPOGIS, 2002), outras vantagens são apresentadas como a possibilidade de obter informações do processo, como dados de velocidade e temperatura local, sem interferir no sistema. No entanto, a formulação de alguns desses modelos são baseados em dados experimentais, por exemplo, as propriedades das substâncias, que são necessários tanto para construir os modelos matemáticos dos fenômenos envolvidos como para validá-los (KRESTA; WOOD, 1991).

Deglon e Meyer (2006) fizeram um estudo no qual demonstraram que para a resolução de problemas mais complexos em tanques de mistura, como por exemplo, a previsão da turbulência, é importante a seleção adequada do esquema de discretização, da densidade da malha, do modelo de turbulência e da abordagem utilizada para descrever o sistema. Tendo em vista essa observação e o que foi proposto por Porciúncula (2007), algumas ações envolvidas no estudo de processos utilizando o CFD podem ser listadas independentemente do tipo de simulação e do pacote computacional utilizado:

- Geração de um conjunto de volumes nos quais as variáveis a serem calculadas são armazenadas;
- Ajuste do tamanho dos elementos para garantir a boa representatividade dos fenômenos envolvidos;
- Especificação das propriedades físicas do fluido, das condições inicial e de contorno apropriadas para o caso;
- Determinação dos parâmetros de controle que afetam a solução numérica das equações (número máximo de iterações, convergência desejada, métodos alternativos de solução).

Capítulo 4

Metodologia

Neste capítulo são apresentados os passos da simulação em CFD. A metodologia indicada para a resolução de projetos em CFD segue uma sequência de quatro passos básicos: a definição do problema, o pré-processamento, a solução numérica e pós-processamento, como esquematizado na Figura 15.

Figura 15: Fluxograma da metodologia da construção de projetos em CFD (adaptado de ANSYS, 2016).



O primeiro passo é a definição do problema e do domínio. Em seguida, são realizados na etapa de pré-processamento, construção das geometrias, geração de malhas e a discretização do modelo para os respectivos domínios. É feito, ainda, a inclusão dos modelos físicos, modelos de turbulência e das condições de contorno. A etapa seguinte caracteriza-se pela solução numérica do modelo computacional. Por fim, o pós-processamento no qual são realizadas as análises dos resultados (JAIMES, 2015; PERES, 2002; PORCIÚNCULA, 2007).

O trabalho foi desenvolvido usando a ferramenta Workbench do *software* Ansys na versão 14.0. Esta ferramenta permite a representação gráfica dos projetos de sistemas ligados em um

fluxograma como diagrama. Dessa forma são exibidas todas as etapas da construção deste projeto, o que facilita o entendimento da sequência de ações que devem ser realizadas para o seu desenvolvimento.

4.1. Caracterização do Problema e Validação do Modelo

O trabalho consiste da construção de um modelo em 3D com utilização da Fluidodinâmica Computacional (CFD) para obtenção de uma correlação para o número de Nusselt que represente a troca térmica no caso estudado. Em seguida, é realizada uma comparação da transferência de calor em tanques de mistura com um e dois impelidores com base no coeficiente de transferência de calor (h) e no consumo de potência de cada sistema.

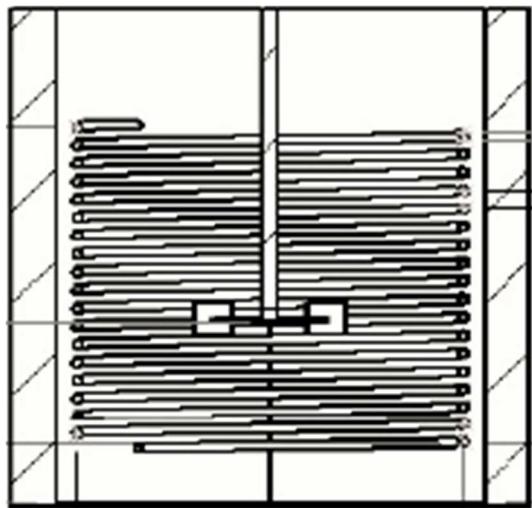
O dispositivo consiste em um tanque cilíndrico de fundo reto composto por 4 chicanas localizadas na parede do tanque e distribuídas equidistantes umas das outras. É equipado de um eixo central dotado de 2 impelidores do tipo Rushton com 6 pás e serpentinas helicoidais distribuídas ao longo de seu comprimento. As dimensões do tanque e seus internos são apresentados na seção 4.2.1.

O estudo realizado neste trabalho segue a linha de pesquisa realizada experimentalmente por Oldshue e Gretton (1954) e com simulação computacional por Jaimes (2015). Em seus estudos, eles desenvolveram correlações para o número de Nusselt (Nu) considerando a mesma configuração de tanque e condições experimentais aplicadas neste trabalho. Jaimes (2015) fez, ainda, um segundo estudo em que modificou o arranjo tanque/serpentina e também desenvolveu uma segunda correlação do Nu para uma geometria diferente da convencional.

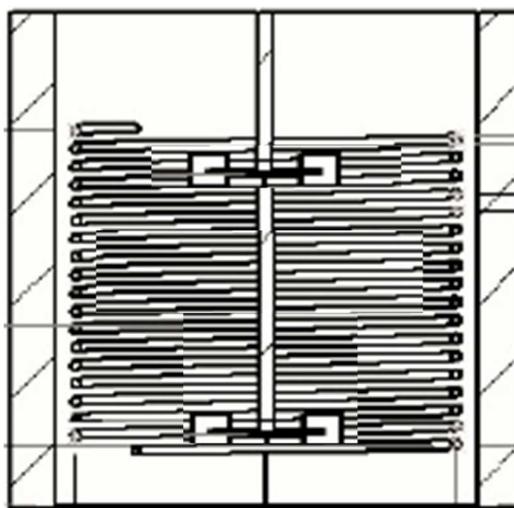
O dimensionamento do tanque e seus internos e as condições de contorno para este trabalho, foram baseados nas dimensões e nas condições de contorno do trabalho realizado por Jaimes (2015). Desse modo, seguindo as configurações geométricas similares e admitindo as mesmas condições de contorno do trabalho realizado por Jaimes (2015) o presente trabalho pode ser validado.

Na Figura 16 é apresentado o tanque utilizado nos trabalhos realizados por Oldshue e Gretton (1954) e posteriormente simulado por Jaimes (2015). A Figura 17 apresenta o tanque utilizado nesse estudo.

Figura 16: Geometria utilizada nos trabalhos de Oldshue e Gretton (1954) e Jaimes (2015).
 Figura 17: Geometria utilizada nesse trabalho. Adaptado de Jaimes (2015).



Fonte: Jaimes (2015).



Fonte: Jaimes (2015).

4.2. Pré-Processamento

Na etapa de pré-processamento são realizadas a construção da geometria e a geração da malha do sistema, inserção das propriedades físicas, inclusão das condições de contorno e modelos físicos e métodos matemáticos.

4.2.1. Aspectos Geométricos

O tanque estudado possui diâmetro e altura de líquido iguais a 48 in, essa configuração também é conhecida como batelada quadrada. Este tanque é dotado de 4 chicanas (chapas metálicas fixadas na parede do reator e distribuídas equidistantes umas das outras), um eixo central com dois impelidores do tipo Rushton com 6 pás e um conjunto de serpentinas helicoidais distribuídas ao longo do tanque. Para as serpentinas helicoidais foram considerados duas configurações: uma em cobre com diâmetro de tubo de $7/8$ in com espaçamento de tubo de duas vezes o seu diâmetro ($7/4$ in) e a outra em aço inoxidável com diâmetro de tubo de $7/4$ in e espaçamento entre os tubos de duas vezes o seu diâmetro ($7/2$ in). As dimensões consideradas para as serpentinas utilizadas no trabalho são apresentadas na Tabela 2.

Tabela 2: Dimensões para as serpentinas helicoidais.

Serpentina	D	D _c	D _o	Z _c	C _c	S _c
Cobre / in	7/8	35,125	36	31,5	7	7/4
Aço inox / in	7/4	34,25	36	31,5	7	7/2

Onde,

d é o diâmetro de tubo da serpentina helicoidal;

D_c é o diâmetro da serpentina helicoidal;

D_o é o diâmetro externo da serpentina helicoidal;

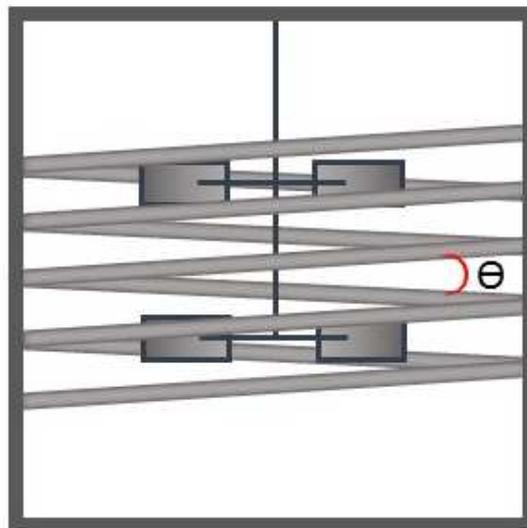
Z_c é a altura do feixe de serpentinas;

C_c Altura da serpentina helicoidal;

S_c Distância entre os centros dos anéis da serpentina helicoidal.

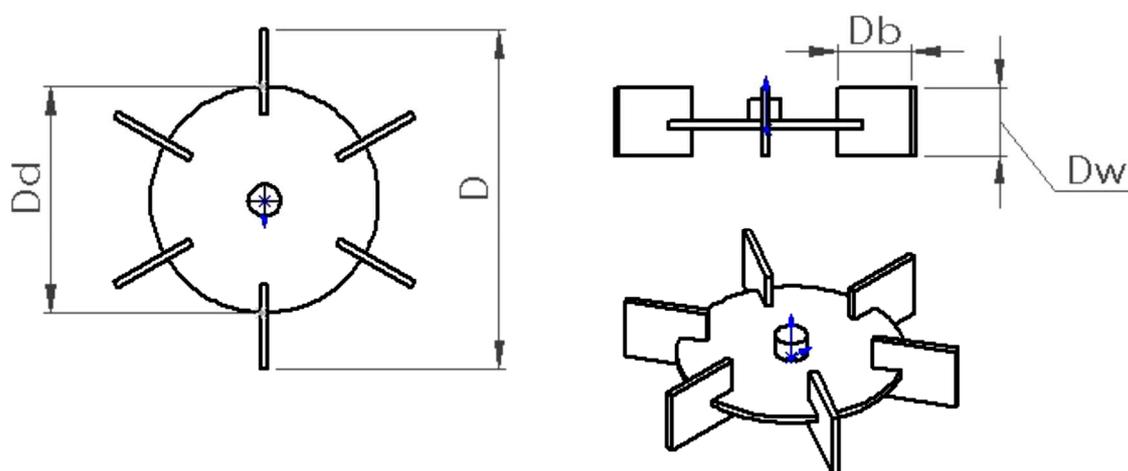
A serpentina helicoidal utilizada neste trabalho possui um ângulo de crescimento do feixe muito pequeno ($\Theta < 1^\circ$) (Figura 18), com isso realizada uma aproximação na serpentina helicoidal para tubos circulares horizontais como mostrado na Figura 20. Essa pequena modificação permite a construção de uma malha com simetria, que resulta em um modelo computacional muito mais rápido pelo menor número de elementos (aproximadamente metade do número de elementos se comparado com a geometria real).

Figura 18: Ângulo (Θ) de inclinação da serpentina helicoidal.



A Figura 19 apresenta a configuração dos impelidores utilizados para a realização deste trabalho e a Tabela 3 apresenta as relações geométricas usadas para o dimensionamento do tanque e dos impelidores.

Figura 19: Configuração do Impelidor tipo Rushton de 6 pás.



Fonte: Jaimes (2015).

Tabela 3: Relações Geométricas para a construção do tanque e dos impelidores.

Relação Geométrica	D/T	Z/T	B/T	D _w /D	D _b /D	D _d /D
Valores	1/4; 1/3; 1/2; 7/12	1	1/12	1/5	1/4	2/3

Fonte: Jaimes (2015).

Onde,

D é o diâmetro do impelidor;

T é o diâmetro do tanque;

Z é a altura do tanque;

B é a largura das chicanas;

D_w é o comprimento das pás do impelidor;

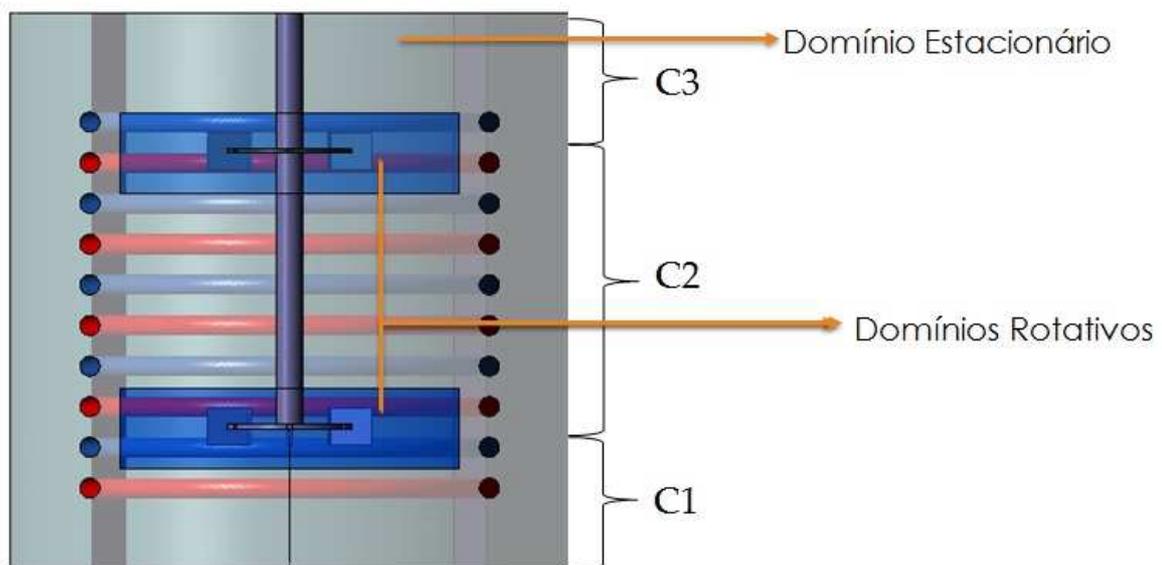
D_b é a largura das pás do impelidor;

D_d é o diâmetro do disco do impelidor.

A distribuição dos impelidores no reator foi adotada considerando a configuração de escoamento paralelo apresentado no trabalho de Rutherford *et al.* (1996). Com isso, a distância entre os impelidores (C2) foi considerada igual a $0,5T$ e as distâncias do impelidor inferior em relação ao fundo do tanque (C1) e o impelidor superior em relação ao topo do tanque (C3) foram consideradas ambas iguais a $0,25T$ como mostrado na Figura 20.

As características do fluxo na região próxima aos impelidores são resolvidas utilizando uma estrutura rotativa e a região externa é resolvida usando uma estrutura estacionária. Essas duas regiões são utilizadas para proporcionar as condições de contorno umas das outras para uma melhor convergência dessas regiões (JOSHI *et al.*, 2011). Dessa forma, são considerados dois tipos de domínio para o escoamento no tanque: o domínio rotativo (na região próxima ao impelidor) e o domínio estacionário (na região externa do domínio rotativo) como é possível observar na Figura 20.

Figura 20: Posição dos impelidores no eixo central e distribuição dos domínios.



A interface entre os domínios estacionário e rotativo foi localizada a uma distância axial de $0,13D$ e uma radial de $0,52D$ do centro do impelidor, considerando o diâmetro do maior impelidor simulado (28 in) como foi realizado por Jaimes (2015). O regime de escoamento considerado para o estudo possui número de Reynolds na faixa de $5,1 \times 10^3$ à $2,8 \times 10^6$.

4.2.2. Propriedades Físicas dos Fluidos

O sistema considerado nesse trabalho é composto por um escoamento monofásico, bem como nos trabalhos realizados por Oldshue e Gretton (1954) e Jaimes (2015), e os fluidos de trabalho considerados são água, óleo vegetal e glicerina. As propriedades dos fluidos nas condições de 1 atm de pressão e temperatura a 25 °C são apresentadas na Tabela 4. Para o caso da glicerina em particular, uma correlação com quatro parâmetros desenvolvida por Chen e Pearlstein (1987), apresentado na Equação 38, foi utilizada para o cálculo da viscosidade dinâmica devido à forte dependência deste fluido com a temperatura. As constantes D, E, F e G são $1,00758 \times 10^{-5}$ cP; $2,21895 \times 10^8$ K³; $7,99323 \times 10^{-3}$ K⁻¹ e $8,80469 \times 10^2$ K, respectivamente.

$$\mu(T) = D \cdot \exp\left(\frac{E}{T^3} + FT + G/T\right) \quad 38$$

Tabela 4: Propriedades dos fluidos.

Propriedades		Fluidos		
		Água	Óleo Vegetal	Glicerina
Massa específica	kg.m ⁻³	$9,97 \times 10^2$	$9,2 \times 10^2$	$1,261 \times 10^3$
Viscosidade dinâmica	kg.m ⁻¹ .s ⁻¹	$8,899 \times 10^{-4}$	$5,002 \times 10^{-2}$	Equação 38
Massa molar	kg.kmol ⁻¹	$1,802 \times 10^1$	$8,855 \times 10^2$	$9,2078 \times 10^1$
Condutividade térmica	W.m ⁻¹ .K ⁻¹	$6,069 \times 10^{-1}$	$1,7 \times 10^{-1}$	$2,85 \times 10^{-1}$
Calor específico	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹	$4,1817 \times 10^3$	$2,0 \times 10^3$	$2,376 \times 10^3$

Fonte: Jaimes (2015).

4.2.3. Geração da Malha

A geração da malha tridimensional tetraédrica foi construída no *Meshing* do *software* ANSYS CFX 14.0, ferramenta esta que produz uma malha apropriada para soluções precisas, com poder de processamento paralelo para redução do tempo necessário para a geração de malha (ANSYS, 2014).

O domínio foi subdividido em elementos de malha (pequenos volumes de controle). A malha formada por estes elementos foi refinada de modo a se obter uma solução com maior representatividade dos fenômenos característicos do tipo de escoamento considerado no estudo (regime de transição à turbulento). A qualidade da representação do domínio e a acurácia da solução numérica para as equações discretizadas são afetadas diretamente pela forma geométrica desses elementos de malha.

A malha tetraédrica utilizada nesse trabalho é do tipo não estruturada (modo no qual os elementos são conectados entre si dentro do domínio discretizado) com prismas para descrever a região da camada limite próxima à parede. A malha foi gerada levando em consideração os parâmetros: taxa de crescimento do tamanho dos elementos e o refinamento realizado em regiões próximas às superfícies das paredes do tanque, serpentina, chicanas, eixo e pás do impelidor. São nessas regiões que os efeitos viscosos são mais significativos e ocorrem a formação de elevados gradientes das propriedades.

Nesta etapa do estudo devem ser efetuados testes de independência de malha, incluindo a obtenção do valor do y^+ , de modo que o modelo proposto tenha uma boa representatividade, solução numericamente independente e resultados confiáveis. Com a realização desses testes é possível garantir que o custo computacional é minimizado. Tais testes consistem na execução de sucessivas simulações com diferentes refinamentos de malha. Essas simulações são realizadas até que não sejam encontradas diferenças significativas nos valores preditos dos parâmetros de controle em pelo menos dois modelos com níveis de refinamento de malha diferentes.

A variável utilizada como parâmetro de controle para a realização dos testes de malha neste trabalho foi o coeficiente de transferência de calor externo (h_o), relativo ao fluido de processo. Visto que a malha tetraédrica apresenta uma baixa qualidade para a solução do modelo nas camadas próximas às paredes, é utilizada uma camada de prismas na região da camada limite, pois esses elementos reproduzem de forma satisfatória o nível do refino necessário para que os efeitos nessa região possam ser bem representados (VERGEL, 2013). Desse modo, foi definida uma camada de prismas com 20 elementos para todas as superfícies do tanque. Os testes foram realizados com os três fluidos à 25 °C para todos os diâmetros de impelidor com velocidade rotacional de 300 rpm e para os dois diâmetros serpentina helicoidal de 7/4 in e 7/2 in. Vale ressaltar que além dos 20 elementos presentes na camada limite, o *software* calcula também uma função de parede.

A altura do primeiro elemento e a taxa de crescimento necessária para garantir que todos os prismas estejam dentro da camada limite foram calculadas considerando o estudo realizado por

Jaimes (2015) que identificou um valor médio de $y^+ \leq 1$ para as superfícies do tanque e impelidor e $y^+ \leq 0,1$ para as paredes das serpentinas helicoidais. Detalhes dos elementos nas superfícies do tanque, impelidor e serpentinas helicoidais são apresentados na Figura 21.

4.2.4. Considerações e Condições de Contorno

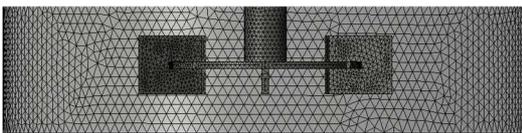
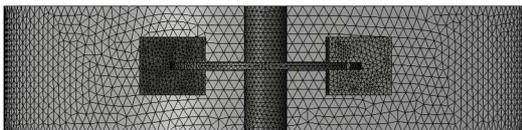
Para a realização das simulações algumas suposições devem ser adotadas para que seja possível estimar uma solução das equações de conservação (momento, continuidade, energia) e do modelo de turbulência. Algumas condições de contorno que devem ser consideradas para a resolução de problemas em tanques de mistura com transferência de calor. A seguir, são apresentadas as suposições e condições de contorno adotadas por Jaimes (2015) para simulações em estado transiente que também foram utilizadas neste trabalho.

- A condição de não escorregamento (*No Slip Wall*) deve ser utilizada em todas as superfícies sólidas. Nesta condição física, o fluido que está em contato com a superfície possui a mesma velocidade que ela. No modelo estudado esta condição foi empregada para a parede e fundo do tanque, chicanas, eixo-árvore, impelidores e serpentinas helicoidais. Dessa forma, assume-se uma velocidade angular do fluido presente na região da parede dos impelidores e eixo-árvore igual a definida para a rotação dos impelidores.
- A condição de livre escorregamento (*Free Slip Wall*) foi aplicada na superfície superior do tanque, considerando uma altura constante de líquido. Em uma superfície livre, a velocidade axial e as tensões de cisalhamento são nulas e assume-se uma superfície plana. Como há a presença de chicanas no tanque é razoável admitir que não há fluxo de massa através da superfície livre, já que a sua presença evita a formação de vórtice central.
- As conexões de Interface Geral da malha (*General Grid Interface – GGI*) foram utilizadas nas regiões de interface entre os domínios estacionário e rotacional (Figura 22). O GGI conecta as duas superfícies sem a necessidade de que elas sejam correspondentes, ou seja, as conexões GGI permitem a não-correspondência de localização de nó, tipo de elemento, extensão de superfície, forma de superfície e até mesmo não correspondência da física de fluxo através da conexão (ANSYS, 2014).

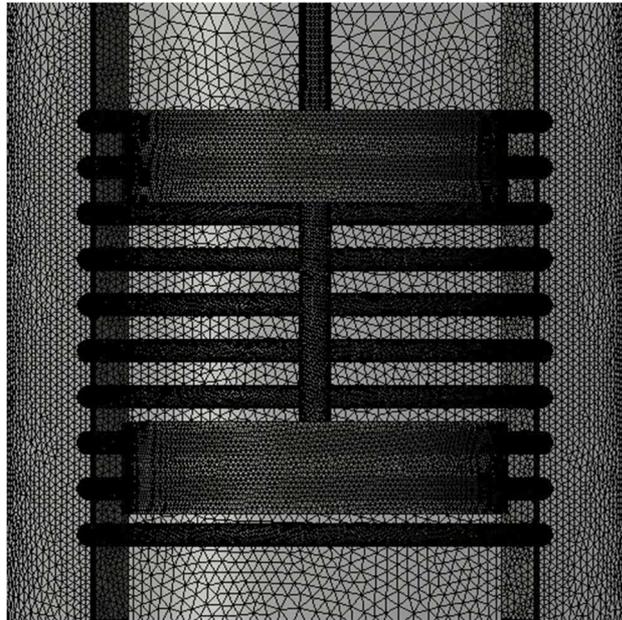
- Como a simulação é realizada para a metade da geometria do tanque, uma condição de periodicidade rotacional é empregada, como é possível observar na Figura 22. O fluxo de saída no modelo computacional através do Plano 1 é o mesmo fluxo que entra no domínio através do plano periódico oposto (Plano 2). Essa consideração foi feita tanto para o domínio estacionário quanto para o rotativo.
- Consideração de sistema adiabático. Todas as superfícies sólidas, exceto serpentinas helicoidais, foram consideradas adiabáticas. Para acelerar e garantir condições de escoamento em estado estacionário e observar os padrões de fluxo na transferência de calor, os anéis das serpentinas helicoidais foram alternados para a realização de correntes de aquecimento e resfriamento. Nos anéis de aquecimento foi utilizada uma condição de fluxo constante de 80.000 W/m^2 e para os anéis de esfriamento foi assumida uma temperatura de 5°C . Na Figura 23 são apresentados os anéis de esfriamento e aquecimento na serpentina helicoidal no reator de tanque de mistura.

Para a realização das simulações foi utilizada uma abordagem de falso transiente para auxiliar à convergência do modelo de modo que este ocorre mais rapidamente. Porém, a condição inicial para a realização dos cálculos foi na condição de estacionário, com as componentes de velocidade e pressão relativa nulas e temperatura de 25°C . O tempo de simulação foi definido como sendo o tempo que a simulação leva do estado inicial até que o desenvolvimento do padrão de fluxo e o coeficiente de transferência de calor tornem-se constantes.

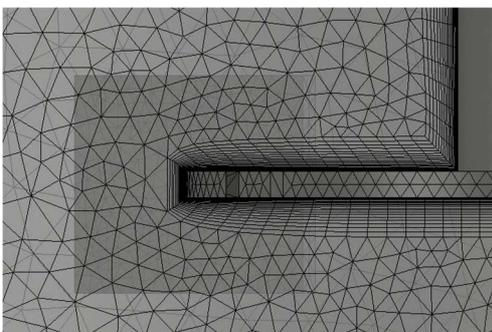
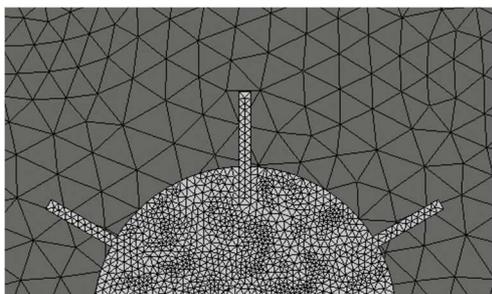
Figura 21: Elementos de malha nas superfícies. a) Pás dos impelidores superior e inferior; b) Parede do tanque, serpentinas helicoidais, chicanas, eixo e região das interfaces superior e inferior; c) Disco do impelidor e fundo do tanque; d) Interface rotacional e pá do impelidor inferior; e) Parede do tanque e serpentinas helicoidais.



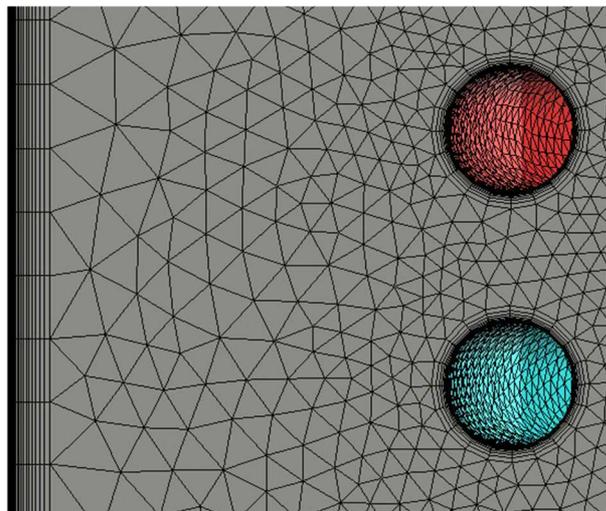
a)



b)



c)



d)



e)

Figura 22: Cortes dos planos para rotação do tanque e para os impelidores.

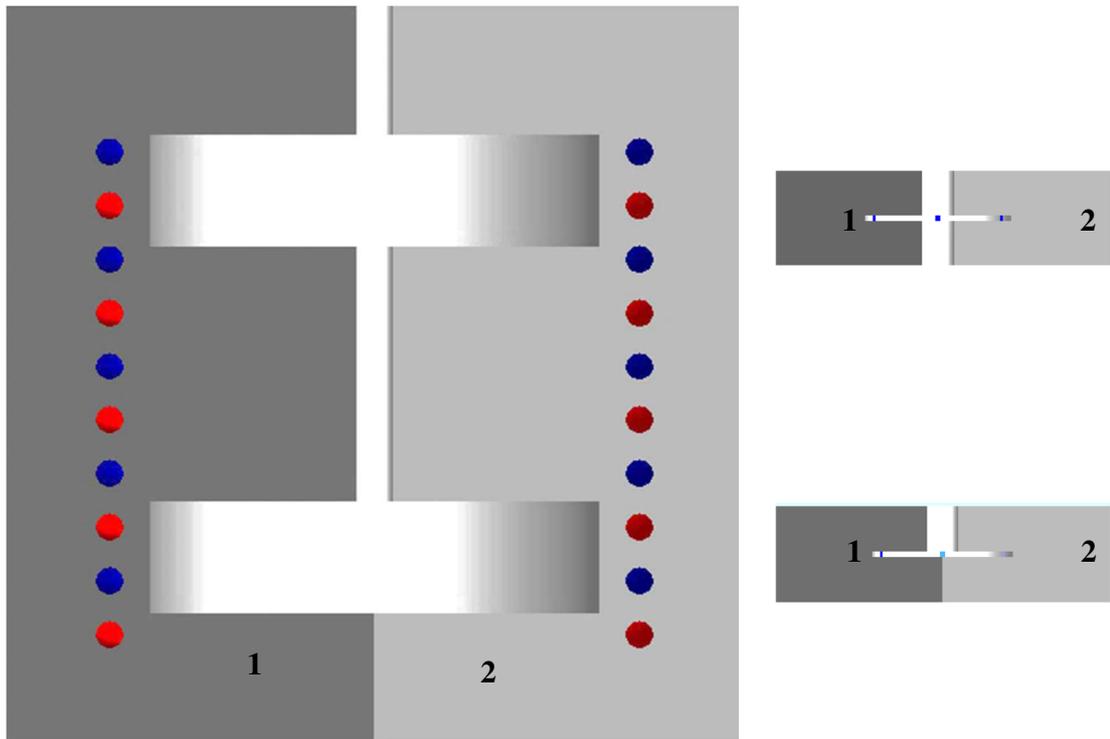
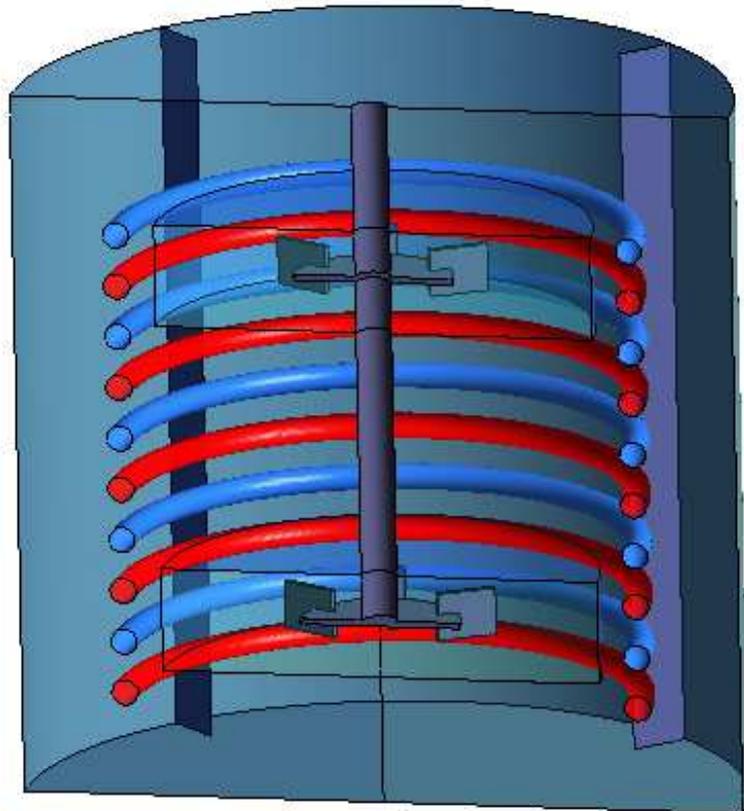


Figura 23: Condição de contorno para a distribuição das serpentinas no tanque.



4.2.5. Aspectos Numéricos e Modelos Físicos

O modelo de turbulência utilizado neste estudo foi o *Shear Stress Transport SST*. Este modelo oferece vantagens significativas na correta predição dos fluxos na região da camada limite turbulenta, da transferência de calor e da tensão de cisalhamento da parede em relação a outros modelos como $k-\epsilon$ e o $k-\omega$ (ANSYS, 2014).

Para a modelagem da rotação do impelidor foi utilizado o MRF - Frozen rotor (*Multiple Reference Frame*) devido a sua estabilidade numérica e menor custo computacional, como mostrado por Jahoda *et al.* (2007). Este modelo faz uma aproximação para o estado estacionário em que podem ser atribuídas diferentes velocidades de rotação e/ou de translação em duas células para permitir que as variáveis de fluxo numa zona sejam utilizadas para calcular fluxos na fronteira da zona adjacente (ANSYS, 2014).

O método de discretização utilizado para a interpolação foi o esquema advectivo UDS (*Upwind Difference Scheme*), visto que este esquema de primeira ordem faz uma predição aceitável dos campos de fluxo, atingindo rapidamente a convergência em comparação com esquemas de alta ordem (JAIMES, 2015, apud Brucato *et al.*, 1998). Adicionalmente, Marshall e Bakker (2004) mencionam que para fluxos alinhados à malha (que é o caso do fluxo próximo à parede, onde o coeficiente de transferência de calor é estimado), o método Upwind pode ser utilizado. O método de discretização faz a substituição das equações de transporte diferenciais por um conjunto de equações algébricas que são resolvidas e fornecem valores das variáveis de interesse em pontos discretos dentro do domínio estudado (REZENDE, 2009). Visto que as simulações foram realizadas considerando regime transiente (pela abordagem de falso transiente), o esquema *First Order Backward Euler* foi utilizado para a interpolação dos termos temporais.

4.2.6. Casos Simulados

Foram realizadas 21 simulações para diferentes condições operacionais e parâmetros geométricos para três fluidos distintos. Para a realização das 21 simulações foram considerados os fluidos glicerina, óleo vegetal e água, em três velocidades de rotação (100, 200 e 300) rpm, quatro diâmetros de impelidor (12, 16, 24 e 28) in e dois diâmetros dos feixes de serpentina helicoidal (0, 875 e 1, 75) in.

Os valores do coeficiente de transferência de calor (h_o) para a obtenção da correlação do número de Nusselt foram obtidos por meio de simulação para os casos mostrados na Tabela 5.

Tabela 5: Casos simulados para obtenção da correlação para o Número de Nusselt.

N° Caso	Fluido	Diâmetro do Impelidor /in	Diâmetro da serpentina /in	Velocidade do impelidor /rpm
1	Glicerina	16	1,75	100
2	Glicerina	16	1,75	200
3	Glicerina	16	1,75	300
4	Óleo vegetal	16	1,75	100
5	Óleo vegetal	16	1,75	200
6	Óleo vegetal	16	1,75	300
7	Água	16	1,75	100
8	Água	16	1,75	200
9	Água	16	1,75	300
10	Glicerina	12	1,75	100
11	Glicerina	24	1,75	200
12	Glicerina	28	1,75	200
13	Glicerina	16	0,875	200
14	Óleo vegetal	12	1,75	100
15	Óleo vegetal	24	1,75	200
16	Óleo vegetal	28	1,75	200
17	Óleo vegetal	16	0,875	100
18	Óleo vegetal	16	0,875	200
19	Água	12	1,75	100
20	Água	24	1,75	200
21	Água	28	1,75	200
22	Água	16	0,875	200

4.3. Simulação (Solver)

A resolução do modelo computacional proposto na etapa de pré-processamento é calculada nesta etapa pelo método de volumes finitos no Solver do Ansys CFX 16.0. Durante o processo de solução computacional, é possível o acompanhamento das variáveis de interesse. Para avaliar a estabilidade e a convergência foram utilizadas como variável o coeficiente de transferência

de calor por convecção na superfície da serpentina helicoidal juntamente com os resíduos numéricos das equações de conservação.

Cada simulação foi realizada utilizando 10 processadores contidos em 1 nó computacional com 64 GB de memória RAM e velocidade do processador de 2 GHz. O tempo de simulação para um passo de 0,03 segundos foi aproximadamente 3 dias.

Existem alguns critérios de convergência necessários para que possa ser possível afirmar que o modelo computacional convergiu. Tais como:

- Se o erro residual atingiu a tolerância;
- Se o desequilíbrio das equações de conservação apresenta variação em torno de 1%;
- Se o parâmetro de controle entrou em estado estacionário.

A tolerância do erro residual para todos os casos desse estudo foi de $1,0 \times 10^{-5}$ como definido por Jaimes (2015). O resíduo foi calculado pelo RMS (*Root Mean Square*) que é uma medida do desequilíbrio local de cada variável das equações de conservação em cada volume de controle (ANSYS, 2014), então cada volume de controle terá um valor residual para cada equação sendo resolvida. Quanto menor o valor residual, mais precisa numericamente a solução. No CFX o erro residual é normalizado para avaliar a convergência. Quando a convergência é atingida o cálculo é parado e se inicia a próxima iteração. O residual é a medida mais importante da convergência, pois avalia diretamente o erro na solução de uma variável particular.

O desequilíbrio do domínio é a soma de uma variável sobre os limites do domínio. Dessa forma, para o transporte de energia, é a soma de todas as entradas mais as saídas (observando que o fluxo para o domínio é positivo e a partir do domínio é negativo). Se a conservação fosse alcançada o desequilíbrio do domínio deveria ser igual a zero (assumindo que não há fontes de calor ou sumidouros, ou acumulação de calor no domínio), entretanto, como se trata de uma representação numérica de um sistema físico, os desequilíbrios da solução CFD nunca serão exatamente zero, mas eles devem ser suficientemente pequenos para que possa ser possível considerar a solução convergida.

Admite-se que uma variável atingiu a estabilidade quando não há variações significativas do seu valor, o que serve como um parâmetro para verificação do tempo de simulação e da convergência do modelo. No entanto, este parâmetro de verificação não pode ser utilizado isoladamente, visto que a estabilidade de uma variável pode ser atingida mesmo que o modelo não tenha convergido.

4.4. Pós-Processamento

Os resultados das simulações dos 22 modelos obtidos na etapa anterior (Solver) são analisados nessa etapa utilizando o Ansys CFD-Post 14.0. O CFD-Post permite a visualização da geometria e dos elementos da malha; a criação de planos, vetores e superfícies que mostram a direção e intensidade das variáveis (temperatura, pressão, velocidade, entre outros) e realização de cálculos.

Nessa etapa são avaliados os padrões de fluxo, perfis de velocidade e o coeficiente de transferência de calor calculados na etapa anterior. O consumo de potência para tanques de mistura com um e com dois impelidores é estimado e propõe-se uma correlação para o número de Nusselt para tanques de mistura dotado de serpentinas helicoidais com dois impelidores do tipo Rushton com 6 pás.

4.4.1. Consumo de Potência

Para avaliar o custo energético do tanque de mistura dotado de serpentinas helicoidais com um e com dois impelidores foi realizado o cálculo da potência consumida para essas duas configurações. Foi feita uma comparação entre as duas configurações a fim de discutir os efeitos da inclusão do segundo impelidor no escoamento dentro do tanque.

4.4.2. Correlação para o Número de Nusselt

Neste trabalho é proposta uma correlação (Equação 39) do número de Nusselt para um tanque de mistura dotado de serpentinas helicoidais com dois impelidores Rushton com 6 pás que possua uma ampla faixa de validade para os números de Reynolds (Re) e Prandtl (Pr), diâmetros dos impelidores (D), das serpentinas helicoidais (d) e o diâmetro do tanque (T). Esta correlação possui uma configuração semelhante as equações obtidas por Oldshue e Gretton (1954) e Jaimes (2015) apresentadas na Tabela 1.

$$\frac{h_0 d}{k} = K(\text{Re})^a (\text{Pr})^b \left(\frac{D}{T}\right)^f \left(\frac{d}{T}\right)^g$$

K, a, b, f e g são as constantes que serão determinadas para a correlação. Essas constantes serão determinadas por ajuste utilizando o GRG (*Generalized Reduced Gradient*) do *software* Excel para minimizar a função objetivo. Este método usa restrições ativas em um ponto para resolver um número igual de variáveis dependentes ou básicas em termos das variáveis independentes restantes (EDGAR *et al.*, 2001). Os valores de h_0 utilizados foram calculados por meio da lei de resfriamento de Newton que foi apresentada na Equação 9. Os valores do fluxo de calor (q) e os valores de temperatura média do tanque (T_m) foram retirados dos resultados dos 22 casos simulados apresentados na Tabela 5.

A correlação para o número de Nusselt desenvolvida neste trabalho somente pode ser aplicada para os casos listados a seguir.

- Para tanques de mistura com geometria semelhante à utilizada neste estudo e que seja agitado por dois impelidores do tipo Rushton com 6 pás;
- Em sistemas homogêneos de fluidos que estejam dentro das faixas de: viscosidade, velocidade, número de Reynolds, diâmetro dos impelidores e de serpentinas helicoidais consideradas nesse estudo.

Capítulo 5

Resultados

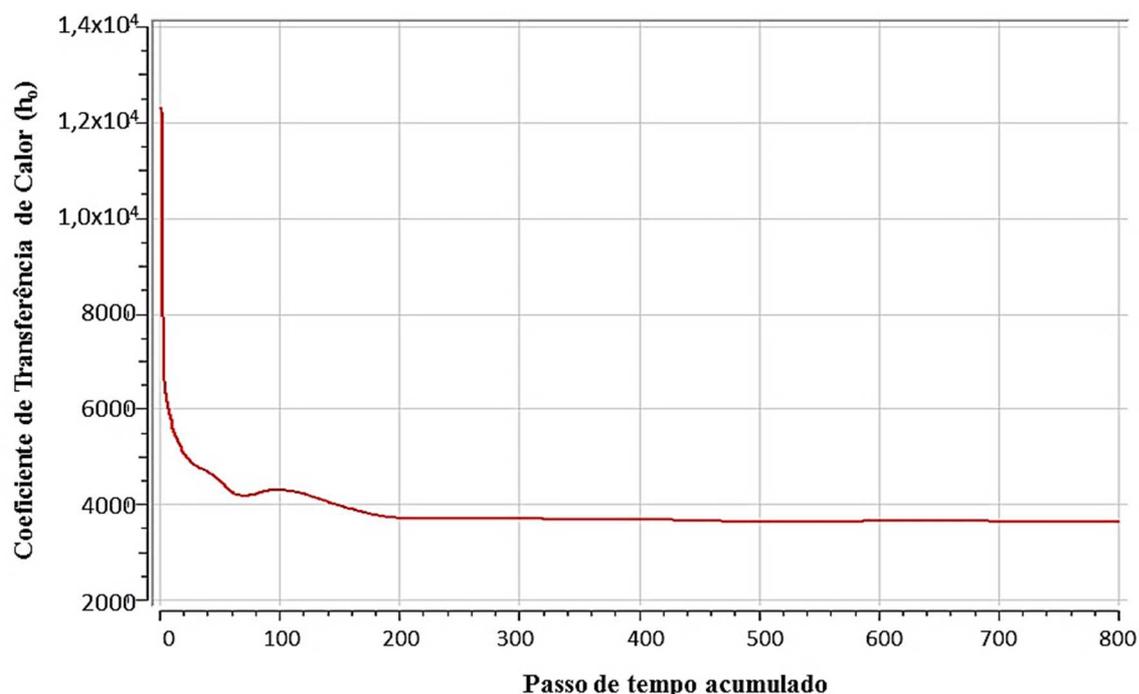
Neste capítulo são apresentadas as análises realizadas para validação dos resultados das simulações. Uma discussão do monitoramento das variáveis e critérios de convergência, das características e perfis de fluxo dos casos estudados apresetando alguns casos para exemplificação. Uma análise comparativa do coeficiente de transferência de calor e do consumo de energia para um tanque de mistura dotado de serpentinas helicoidais com um e dois impelidores foi realizada. Ao final do capítulo é apresentada uma correlação do número de Nusselt desenvolvida para um tanque de mistura dotado de serpentinas helicoidais com dois impelidores Rushton com 6 pás.

5.1. Monitoramento e Convergência

Durante a realização das simulações foram monitorados os erros residuais associados às equações de balanço e campos de velocidade, onde a tolerância máxima de erro considerada foi de $1,0 \times 10^{-5}$ para garantir que a simulação tenha convergido e o coeficiente de transferência de calor para assegurar que a simulação tenha atingido o estado pseudo-permanente. Como as equações de balanço são dependentes do tempo, é importante que as simulações aconteçam por um período de tempo tal que as variáveis de interesse atinjam um valor constante.

A variável utilizada como parâmetro para o acompanhamento da simulação e mostrar que o escoamento tenha atingido a estabilidade foi o coeficiente de transferência de calor (h_o). A Figura 24 apresenta o h_o para o escoamento da água com velocidade do impelidor de 100 rpm e diâmetro do impelidor de 12 in. Nela é possível observar que o coeficiente de transferência de calor atingiu a estabilidade em torno do passo de tempo de simulação 300 para essa velocidade.

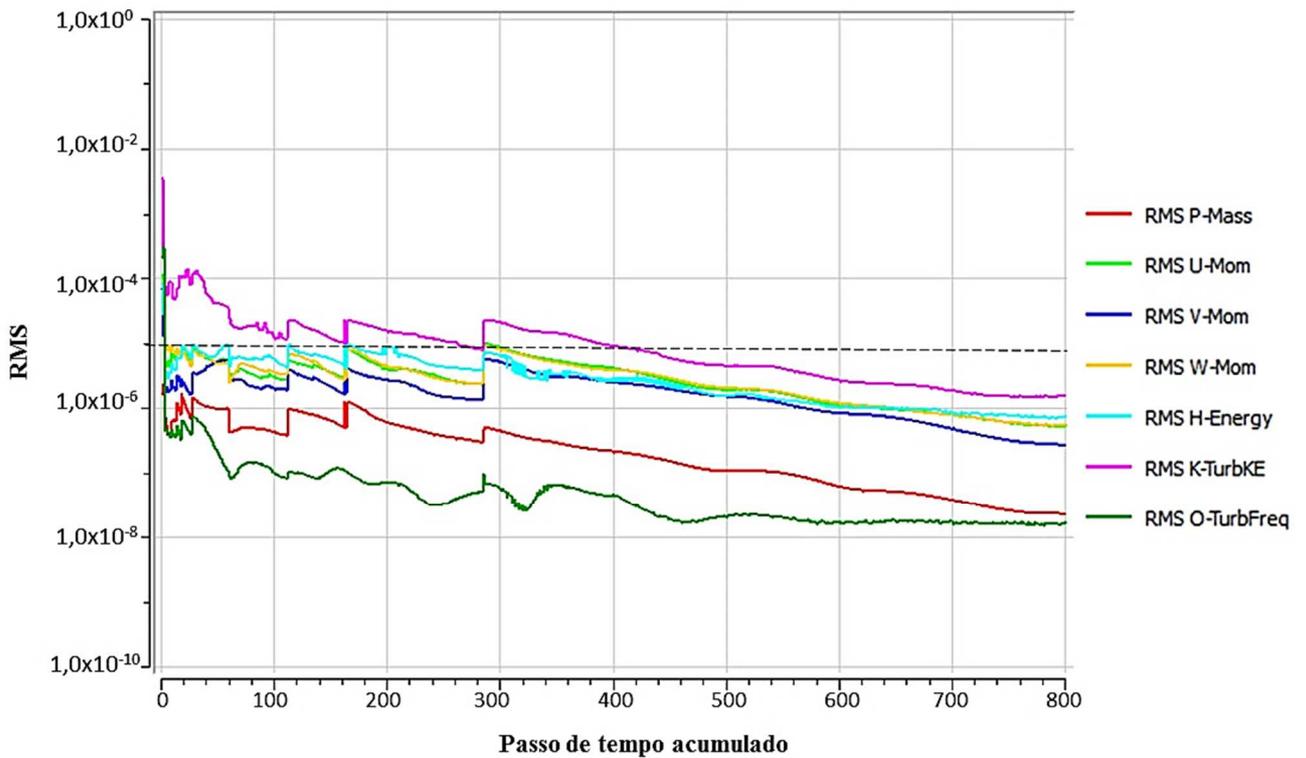
Figura 24: Monitoramento da convergência para o coeficiente de transferência de calor (h_o) da água para a velocidade 100rpm e diâmetro do impelidor de 12 in.



Um regime de escoamento pode ser considerado pseudo-permanente quando em um ponto qualquer do escoamento os fluxos estão bem determinados (estabilizados e com um comportamento praticamente constante em todo o tanque) e há pouca flutuação nos campos de pressão, velocidade e turbulência (SPOGIS, 2002). Dessa forma, é possível admitir esta hipótese, visto que o tempo de simulação para todos os casos foi de 25s, onde todas as variáveis calculadas atingiram a estabilidade e o padrão de fluxo no interior do tanque apresentou um escoamento completamente desenvolvido.

A Figura 25 apresenta o monitoramento dos resíduos para um caso particular dentre as simulações realizadas, sendo possível observar que a tolerância requerida (representada por uma linha preta tracejada) para o critério de convergência determinado foi atingida em torno do passo de tempo 400 o que mostra a boa convergência do modelo. As linhas coloridas mostradas nessa figura, representam os valores residuais das variáveis das equações de conservação para cada volume de controle.

Figura 25: Monitoramento do erro residual calculado pelo RMS para a água a uma velocidade de 100rpm e diâmetro do impelidor de 12 in.



5.2. Influência do y^+ médio no fluxo de calor

Para avaliar a influência do valor do y^+ médio das superfícies do tanque e das serpentinas helicoidais no fluxo de calor e no h_o são apresentados na Tabela 6, a seguir, seis dos testes de refinamento realizados, visto que para todos os diâmetros de impelidores foram realizados testes de independência de malha. Nesta tabela, são apresentados o número de elementos de malha no modelo, o valor do coeficiente de transferência de calor e fluxo de calor obtidos para cada nível de refinamento e a altura da primeira camada de prismas (y^+ médio) nas superfícies das paredes do tanque e das serpentinas helicoidais. O caso apresentado a seguir refere-se à água agitada por impelidores com diâmetro de 28 in e velocidade de 200 rpm.

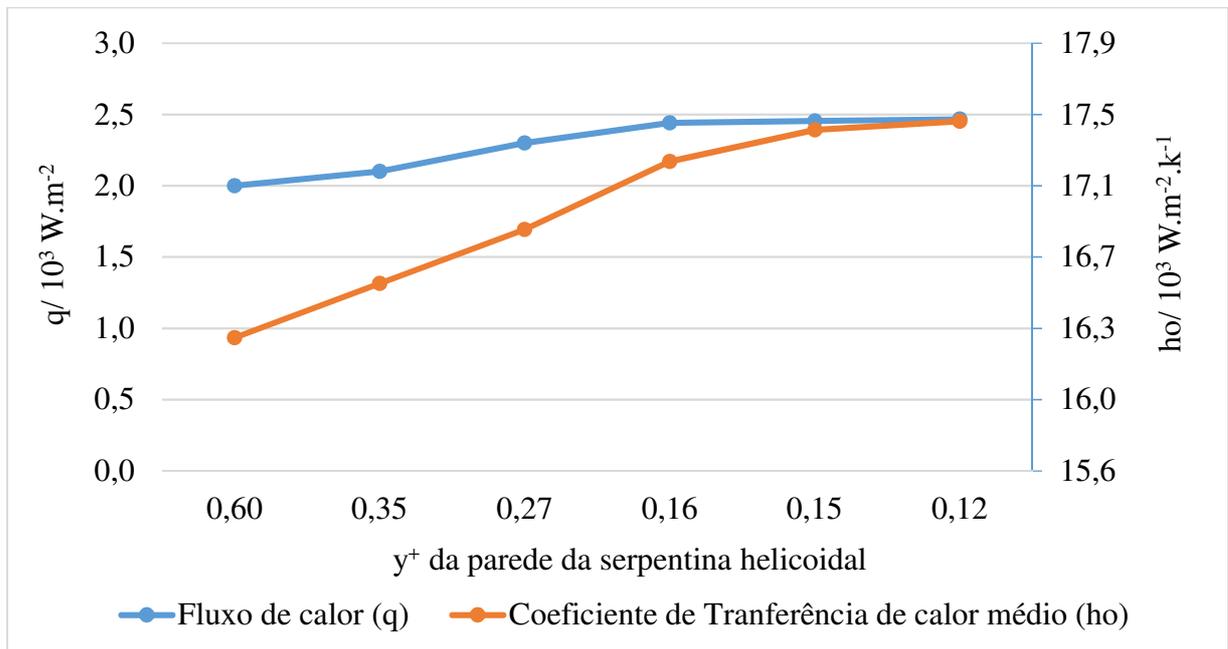
Tabela 6: Avaliação do coeficiente de transferência de calor (h_o), fluxo de calor (q) e altura da camada limite nas paredes do tanque e serpentina helicoidal.

Parâmetros	Testes					
	1	2	3	4	5	6
Nº de elementos / 10^6	5,0	5,1	6,5	5,9	6,0	6,1
$h_o / 10^3 \text{ W.m}^{-2}.\text{k}^{-1}$	16,3	16,6	16,9	17,2	17,4	17,4
$q / 10^5 \text{ W.m}^{-2}$	2,0	2,1	2,3	2,4	2,5	2,5
y^+ médio na serpentina	0,6	0,4	0,3	0,2	0,1	0,1

Na

Figura 26, a seguir, pode-se observar mais claramente a variação do coeficiente de transferência de calor e do fluxo de calor em função do y^+ médio da malha na região da parede das serpentinas helicoidais. Para esse diâmetro de impelidor, a malha escolhida para a continuação do trabalho foi a utilizada no teste número 5. Esta malha mostrou ter qualidade suficiente para prever os resultados com independência em relação ao refino da malha e precisão, além de apresentar o menor custo computacional para a altura da camada limite requerida (y^+ médio $\leq 0,1$).

Figura 26: Testes de independência de malha realizados para a obtenção do coeficiente de transferência de calor (h_o) e fluxo de calor (q) na superfície da serpentina helicoidal.



O refinamento da malha na região da serpentina helicoidal neste trabalho corroborou com o apresentado e discutido por Jaimes (2015). Ele identificou que, para representação de processos que envolvam a transferência de calor através de serpentinas helicoidais, o refino da malha na região de parede dessas serpentinas deve apresentar um valor do y^+ médio $\leq 0,1$.

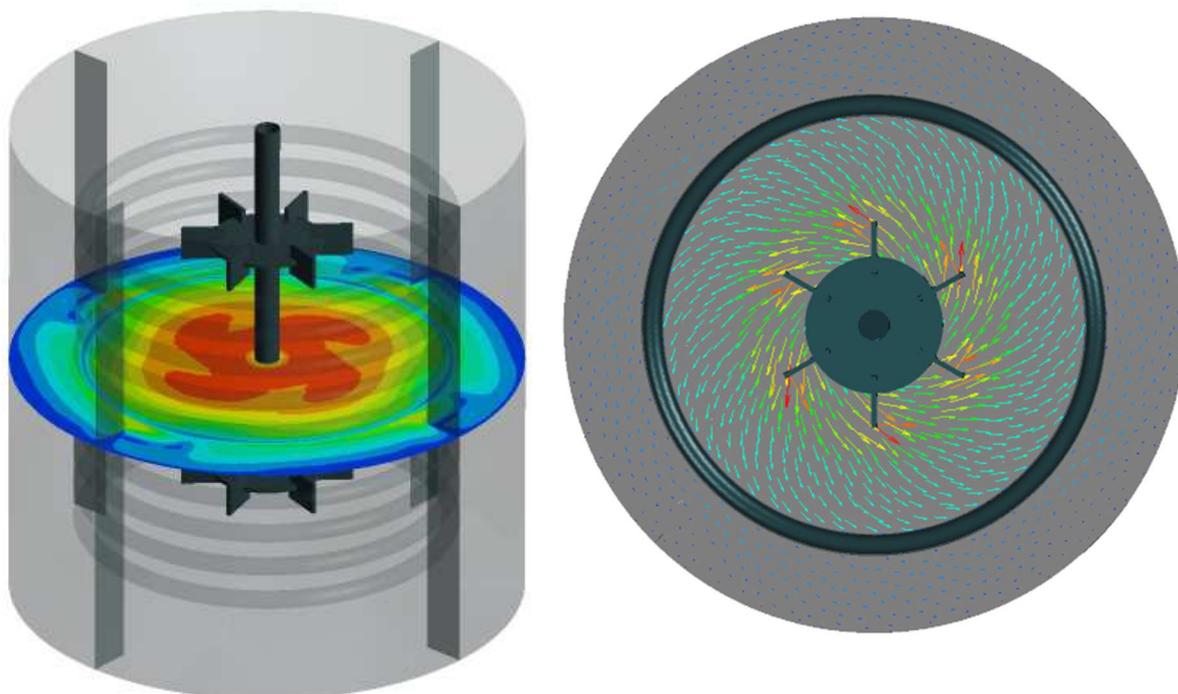
5.3. Perfil de velocidade característico e Padrão de fluxo

Após garantida a convergência das variáveis, uma avaliação da precisão dos métodos e esquemas utilizados na modelagem em CFD foi realizada. Foram analisados os resultados a partir das simulações e investigadas algumas características dos fenômenos físicos que ocorrem com o fluido dentro de um tanque de mistura com impelidores de escoamento radial (impelidores Rushton).

Para investigar o padrão de fluxo e o perfil de velocidade foram traçados dois planos. Um plano axial, perpendicular ao fundo do tanque, a uma distância $z = 3,0 \text{ mm}$ da origem (Figura 27) e outro plano radial, normal ao fundo do tanque, a uma altura de $y = 600,0 \text{ mm}$ (Figuras 28 e 29). Nelas, é possível observar o padrão de fluxo do tipo radial. Esse padrão de fluxo é caracterizado pelo perfil de velocidade tangencial desenvolvido pelos impelidores, que ocorre devido à imposição do fluxo radial na saída do impelidor em direção à parede do tanque formando duas regiões de circulação do fluido uma acima e outra abaixo do impelidor. Esse

resultado corrobora com o encontrado na literatura (COKER, 2010; JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007; CHUNMEI *et al.* (2008); RUTHERFORD *et al.*, 1996; SPOGIS, 2002).

Figura 27: Corte radial do tanque para a glicerina com velocidade de 300 rpm.



A Figura 28, mostra um perfil que denominamos padrão de fluxo do tipo paralelo que é formado quando cada um dos dois impelidores (do tipo Rushton) desenvolvem escoamento bem definido e independente do outro, corroborando com o descrito por Rutherford *et al.*

(1996), em seu trabalho (ver Figura 8). Outra característica do escoamento do fluido em um tanque agitado é o jato de descarga do agitador inferior estar levemente inclinado para cima, isso ocorre devido à proximidade desse impelidor com o fundo do tanque, como pode ser observado na Figura 29, onde é mostrado o perfil de velocidade do fluido em um plano axial q passa pelo centro do eixo de agitação (eixo árvore). A presença das serpentinas helicoidais ocasionou uma redução na velocidade do fluido, sem interferir no padrão de escoamento que se manteve característico, o que já foi observado em resultados encontrados no trabalho de Nunhez e McGreavy (1995).

Figura 28: Vetores de velocidade e padrão de fluxo do escoamento da glicerina obtidos para o tanque de mistura com dois impelidores na presença de serpentinas helicoidais para a glicerina a 300 rpm.

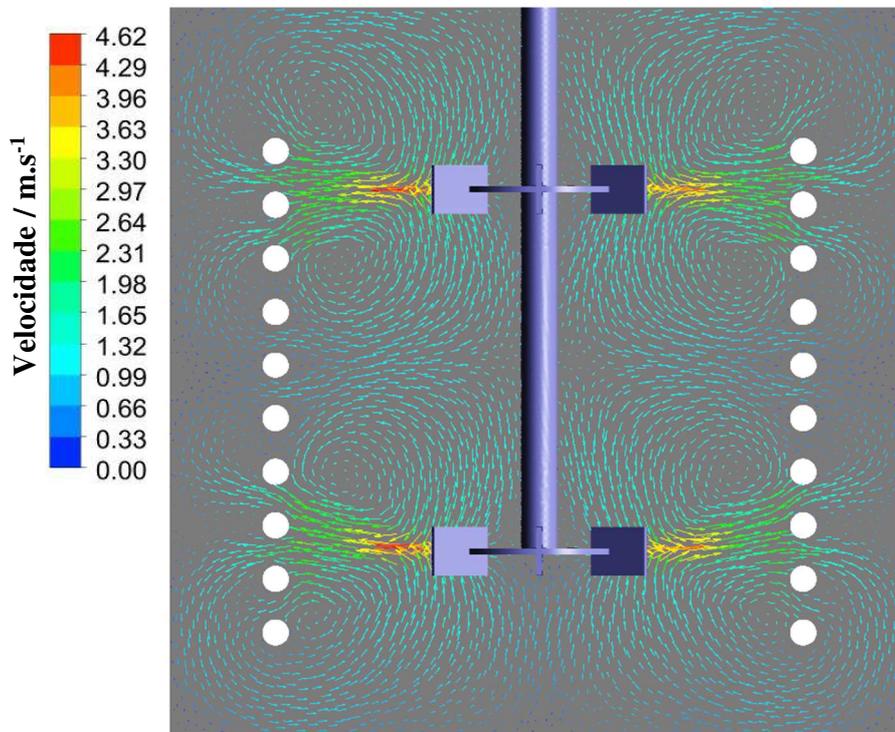
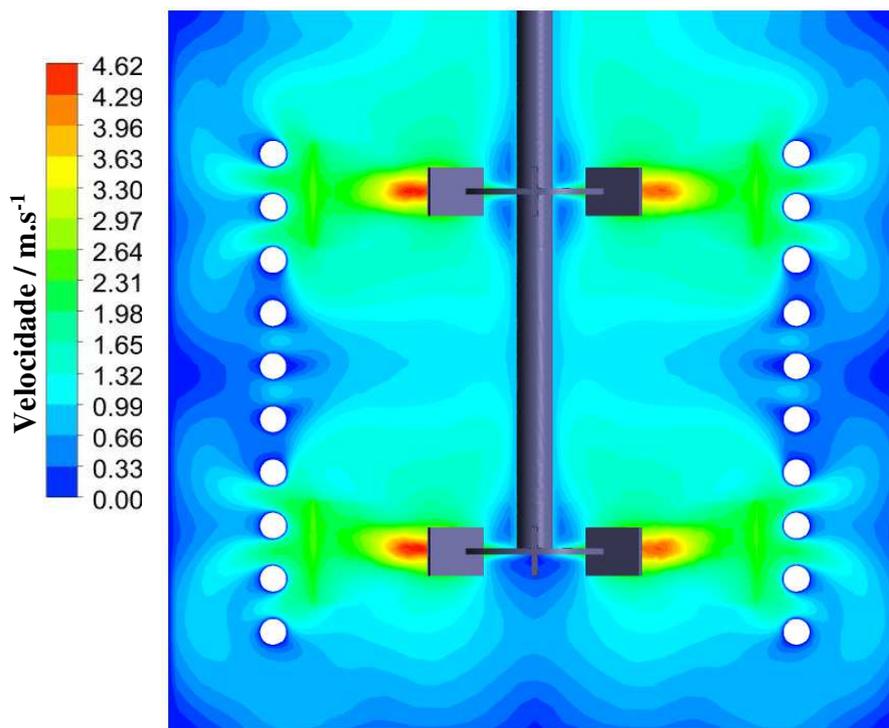


Figura 29: Campo de velocidade de escoamento simulado no reator para a glicerina a 300 rpm.



As características encontradas nos resultados das simulações mostram que houve uma boa concordância com estudos experimentais disponíveis na literatura (OLDSHUE E GRETTON, 1954; PAUL *et. al.*, 2004; RUTHERFORD, 1996) e que o modelo numérico obtido representa adequadamente o sistema estudado.

5.4. Consumo de energia para tanques de mistura com um e dois impelidores

Para avaliar a eficiência da transferência de calor e o consumo de energia aplicada ao eixo árvore de um tanque de mistura com um e dois impelidores foram comparados os coeficientes de transferência de calor (h_o) e o consumo de energia entre eles nas mesmas condições de operação. A Tabela 7 mostra uma comparação do h_o calculado para a água, glicerina e óleo vegetal, para um tanque de mistura com dois impelidores e o h_o apresentado por Jaimes (2015) calculado para as mesmas condições de operação para um tanque de mistura com um impelidor. Os casos apresentados na Tabela 7 são os nove primeiros casos descritos na Tabela 5.

Na Tabela 7, pode-se observar que houve um aumento considerável do h_o com a inclusão do segundo impelidor no tanque, isso ocorre devido o menor gradiente de temperatura no sistema com dois impelidores. A glicerina foi o fluido que apresentou maior aumento percentual do coeficiente de transferência de calor devido a sua maior dependência com a temperatura quando comparada com os outros fluidos estudados. Desse modo, é possível afirmar que a

inclusão de um impelidor no sistema em questão aumenta a eficiência de mistura e troca térmica e, conseqüentemente, diminui o tempo de mistura desses sistemas.

No que diz respeito ao consumo de energia, foi calculada a potência requerida para ambos os tanques de mistura como mostrado na Tabela 8. Observa-se que o tanque com dois impelidores possui um maior consumo de potência global, no entanto quando considerado o consumo de potência por impelidor nota-se que para o sistema com dois impelidores há uma economia de energia. O sistema com dois impelidores promove uma mistura mais eficiente devido a maior movimentação do fluido dentro do tanque, maior transferência de calor por convecção e, conseqüentemente, menor tempo de mistura.

Tabela 7: h_o para tanques de mistura com um e com dois impelidores.

Nº Caso	Fluido	2 imperidores $h_o / W.m^2K^{-1}$	1 impelidor* $h_o / W.m^2K^{-1}$	Aumento %
1	Glicerina	1281	530	242
2	Glicerina	1903	818	233
3	Glicerina	2376	1016	234
4	Óleo vegetal	727	492	148
5	Óleo vegetal	1068	671	159
6	Óleo vegetal	1338	781	171
7	Água	3378	2585	131
8	Água	5639	4327	130
9	Água	7743	5892	131

*Jaimes (2015).

Tabela 8: Comparação da potência consumida em tanques de mistura com um e com dois impelidores para os três fluidos estudados com velocidade dos impelidores de 200 rpm e diâmetro do impelidor de 16 in.

Potência / W			
Fluido	2 impelidores		1 impelidor*
	Total	Por impelidor	
Glicerina	3053,6	1526,8	1796,6
Óleo	2281,2	1140,9	1323,7
Água	2478,8	1239,4	1416,0

*Jaimes (2015).

O número de potência (N_p) também foi calculado para ambos os tanques e observou-se, como mostrado na Tabela 9, que o N_p encontrado neste trabalho para ambos os impelidores é inferior ao esperado e descrito na literatura (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007; PAUL *et. al.*, 2004; SPOGIS, 2002). Contudo há diferença entre os sistemas, o valor de N_p da literatura é baseado em um tanque com apenas um impelidor e sem a presença de serpentinas helicoidais, pois não foi encontrado o número de potência para um sistema semelhante ao estudado. É válido ressaltar que, como discutido na Seção 3.3 deste trabalho, para um mesmo tipo de impelidor a variação da sua posição e tamanho dentro do tanque pode causar aumento ou diminuição da potência requerida.

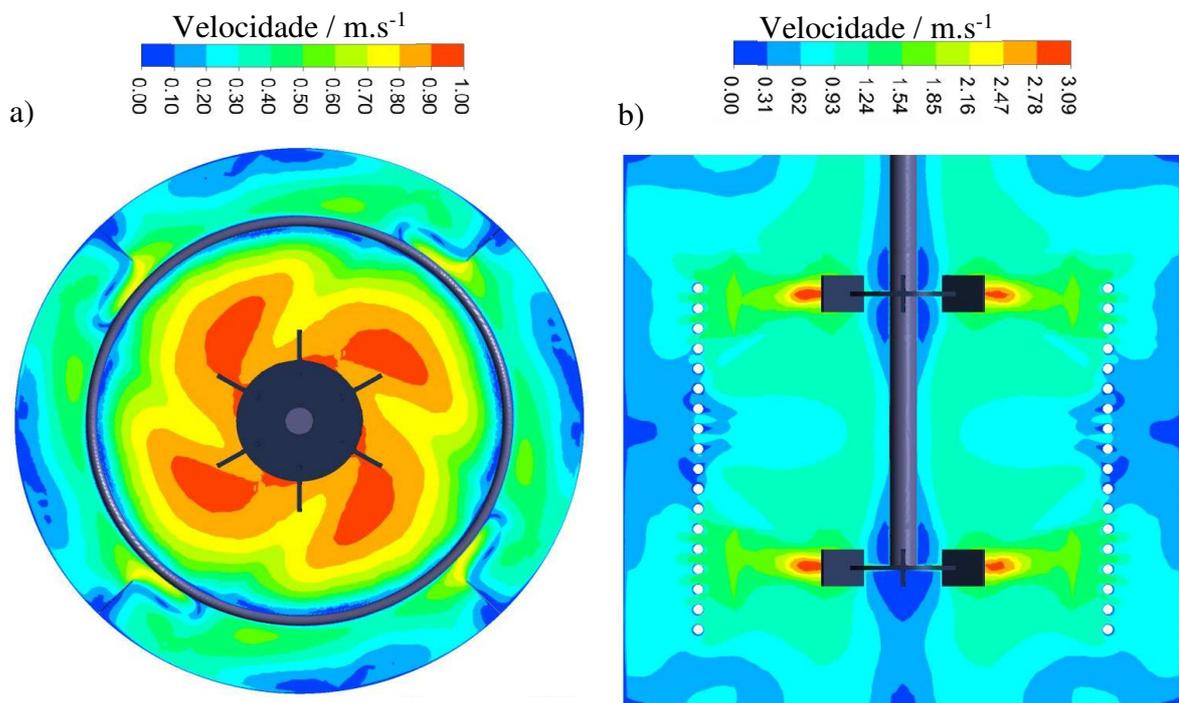
Tabela 9: Comparação entre os números de potência estimado neste trabalho e da literatura.

Fluidos	Número de Potência		
	Neste trabalho	Jaimes (2015)	Literatura*
Glicerina	3,0	3,5	5,0
Óleo	3,0	3,5	5,0
Água	3,0	3,5	5,0

*(JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007; Paul *et. al.*, 2004; SPOGIS, 2002)

Uma justificativa para o baixo número de potência decorre da presença das serpentinas helicoidais entre os impelidores e as chicanas. Por estarem distribuídas ao longo do tanque, as serpentinas helicoidais minimizam a ação das chicanas e reduzindo o efeito destas sobre o consumo de potência. Com isso, o fluxo do fluido na região próxima aos impelidores é mais intenso, com características semelhantes à rotação sólida, fazendo com que a potência requerida para a movimentação do fluido seja menor e, conseqüentemente, um menor número de potência seja obtido. Isso pode ser confirmado pela Figura 30, onde é possível observar uma região em vermelho que representa a velocidade mais alta do fluido e que está concentrada na seção entre o impelidor e as serpentinas helicoidais e uma azul que representa a mais baixa e encontra-se próxima à parede do tanque.

Figura 30: Campo de fluxo do fluido para o caso com dois impelidores de 16 in de diâmetro e serpentinas helicoidais com diâmetro de 0,875 in. a) Corte radial; b) Corte axial.



5.5. Influência da velocidade do impelidor no fluxo de calor

Para verificar a influência da velocidade no padrão de fluxo e da transferência de calor, um plano axial foi traçado perpendicular ao fundo do tanque para as três velocidades de rotação consideradas no estudo: 100 rpm, 200 rpm e 300 rpm. A Figura 31 e a Figura 32 apresentam o perfil e o campo de velocidade do óleo, respectivamente, para cada caso estabelecido.

Foram identificadas regiões de estagnação durante o escoamento para as três velocidades. As regiões de estagnação de fluido são formadas quando há elevada viscosidade do fluido e presença de barreiras durante o escoamento, que para os casos apresentados tais barreiras são configuradas pelas serpentinas helicoidais imersas no fluido e pelas chicanas presentes na parede do tanque. Essas regiões foram notadas nos cantos da parede próximos às chicanas e na região entre as serpentinas helicoidais e a parede do tanque. No entanto, essas regiões se mostraram menores conforme o acréscimo na velocidade de rotação. Jaimes (2015) mostrou em seu trabalho que uma mudança na configuração das serpentinas helicoidais favorece o escoamento global do fluido e, conseqüentemente, reduz a quantidade de regiões desse tipo.

Figura 31: Vetores de velocidade para o escoamento do óleo para diversas velocidades. a) 100 rpm; b) 200 rpm e c) 300 rpm.

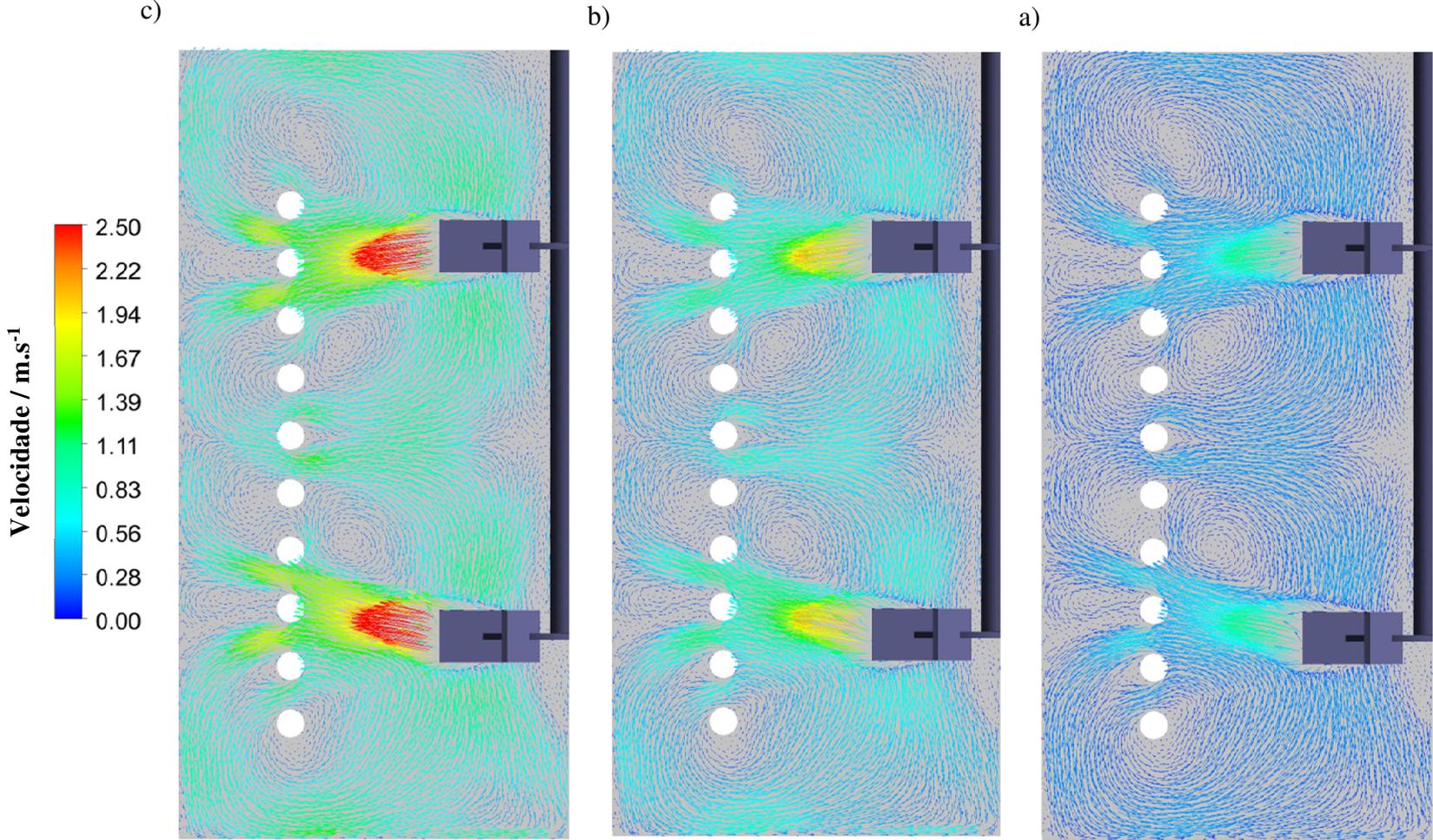
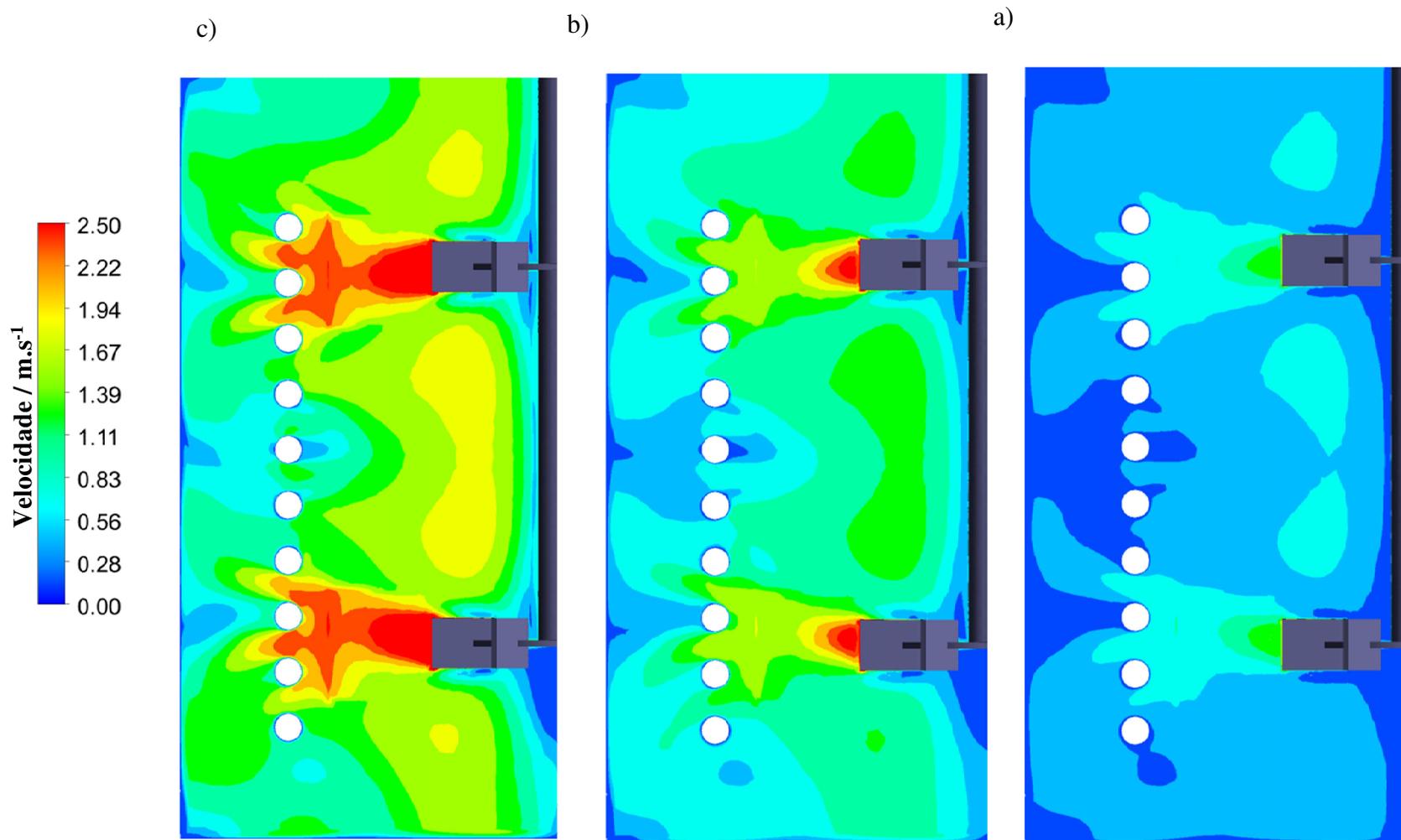


Figura 32: Campos de velocidade para o escoamento do óleo para diversas velocidades. a) 100 rpm; b) 200 rpm e c) 300 rpm.



Para verificar a influência do padrão de fluxo na transferência de calor, foram calculados os valores dos fluxos de calor médios no tanque de mistura nas três velocidades de rotação consideradas do escoamento da água, glicerina e óleo vegetal para o impelidor com diâmetro de 16 in. Esses valores foram calculados na superfície de cada anel da serpentina helicoidal utilizada para o resfriamento, que foram os anéis 1, 3, 5, 7 e 9, onde o anel 1 é o anel mais próximo ao topo do tanque e o anel 9 o mais próximo do fundo do tanque.

A Tabela 10 apresenta os valores de fluxo de calor médio retirado por cada anel de resfriamento. Como mostrado no trabalho de Jaimes (2015), a região na qual ocorre maior troca térmica são nas serpentinas próximas ao impelidor. É possível observar na Tabela 10 que com o aumento da velocidade há um aumento do fluxo de calor no sistema. Isso ocorre devido ao aumento da velocidade da porção de fluido que deixa a pá do impelidor e colide com as serpentinas que provoca uma redução da camada limite do fluido nessas regiões e, consequentemente, um aumento na transferência de calor por convecção.

Tabela 10: Fluxo de calor médio retirado pelos anéis de esfriamento dos sistemas com impelidores de diâmetro de 16 in para a glicerina, óleo vegetal e água para as três velocidades consideradas (100, 200 e 300) rpm.

Fluido	Anel ω	Fluxo de calor / kW.m ⁻²					
		1	3	5	7	9	Total
Glicerina	100 rpm	16,24	23,45	19,49	22,30	21,91	103,39
	200 rpm	24,36	34,39	29,13	32,81	31,92	152,61
	300 rpm	30,27	42,88	36,25	40,98	39,55	189,94
Óleo	100 rpm	11,79	12,91	10,65	12,82	12,66	60,83
	200 rpm	15,87	19,31	16,28	18,98	18,41	88,86
	300 rpm	19,33	24,34	20,79	23,75	22,85	111,05
Água	100 rpm	43,35	60,15	49,87	57,65	53,88	264,91
	200 rpm	72,37	98,95	79,63	94,59	89,01	434,56
	300 rpm	98,70	134,07	105,98	128,19	120,58	587,52

As Figuras 33, 34 e 35 mostram graficamente o que foi apresentado Tabela 10. As barras verticais representam a quantidade de calor liberada para os nove casos apresentados na Tabela 10 (escoamento da água, glicerina e óleo com diâmetro dos impelidores de 16 in nas três velocidades estudadas). Em todos os 22 casos simulados, foi observada uma maior troca térmica na região dos impelidores, sendo que as trocas térmicas mais intensas ocorreram para os anéis da serpentina de resfriamento próximos aos impelidores (barra 2 para o impelidor superior e barra 7 para o impelidor inferior).

Para o óleo vegetal notou-se que a distribuição do fluxo de calor ao longo do reator foi mais homogênea e de menor intensidade com relação aos outros fluidos. Isso ocorreu pois o óleo vegetal apresentou a maior viscosidade ($5 \times 10^{-2} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$) e, conseqüentemente, menor transferência de calor por convecção com relação aos outros fluidos nas mesmas condições de escoamento. Na outra extremidade tem-se a água fluido que apresentou menor viscosidade ($8,9 \times 10^{-4} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$) e maior fluidez.

Figura 33: Fluxo de calor médio para cada anel da serpentina helicoidal de resfriamento para glicerina nas três velocidades.

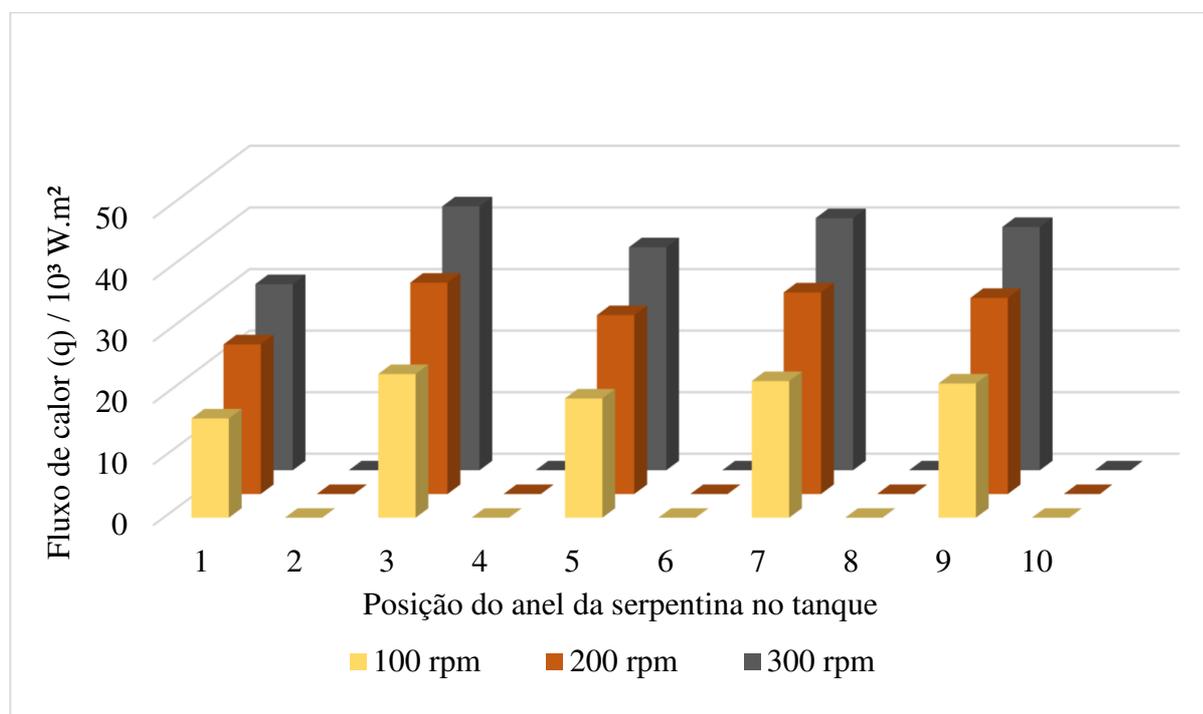


Figura 34: Fluxo de calor médio para cada anel da serpentina helicoidal de resfriamento para o óleo vegetal nas três velocidades.

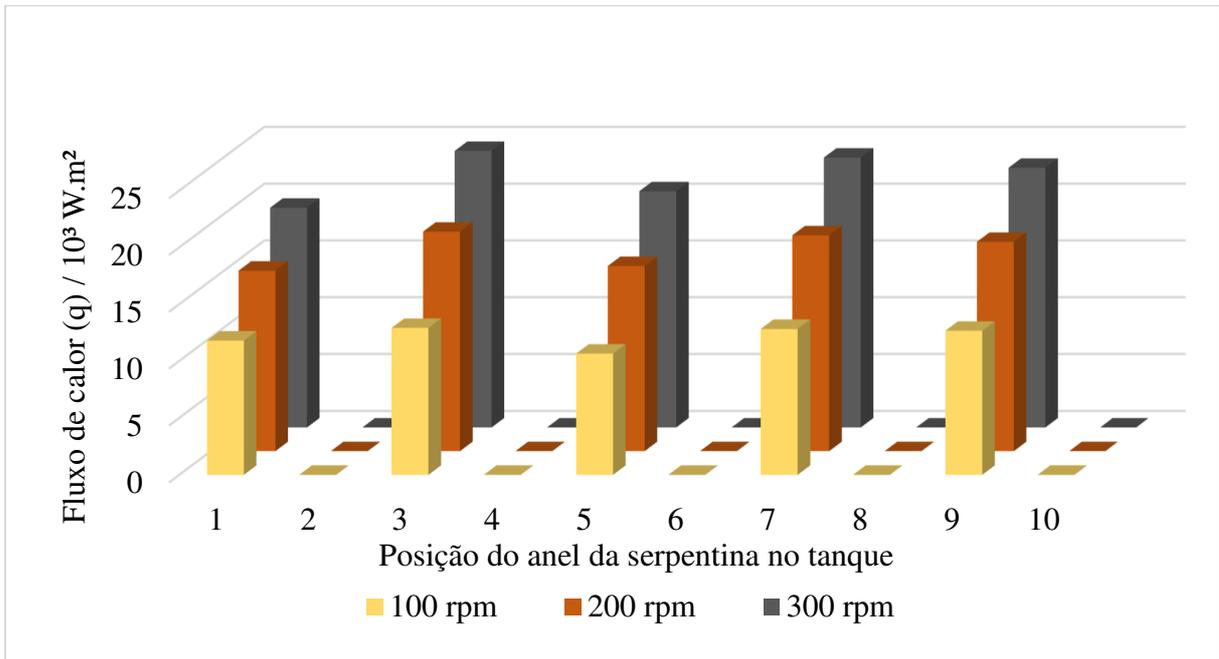
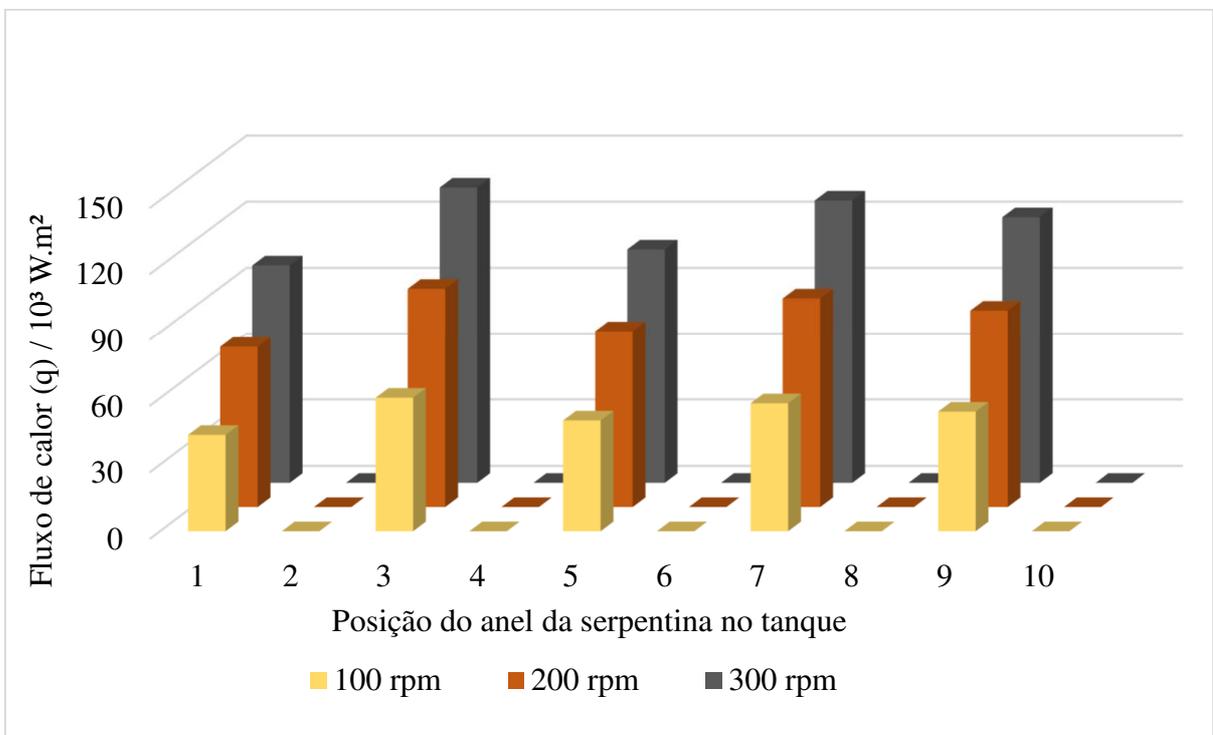


Figura 35: Fluxo de calor médio para cada anel da serpentina helicoidal de resfriamento para a água nas três velocidades.



5.6. Influência do número de impelidores no fluxo de calor

Para julgar a influência do número de impelidores no fluxo de calor (q), foi feita uma estimativa deste fluxo para cada anel da serpentina helicoidal de resfriamento dos tanques de mistura com um e com dois impelidores. Os casos para um impelidor utilizados nesta comparação foram os retratados por Jaimes (2015) nas mesmas condições de escoamento que os casos para dois impelidores, ou seja, com as mesmas velocidades de rotação, diâmetro do impelidor e tipo de fluido. O fluido utilizado nessa comparação foi a água e o diâmetro do impelidor foi de 16 in.

Com os números 1, 3, 5, 7 e 9 representando os anéis da serpentina helicoidal de resfriamento, no qual o anel 1 é o anel mais próximo ao topo do tanque e o anel 9 o mais próximo do fundo do tanque, observa-se na Tabela 11 que o fluxo de calor médio apresentado para o tanque com um impelidor é superior ao com dois impelidores. No entanto essa comparação só é válida para mostrar como o sistema com dois impelidores é mais eficiente do que o com apenas um, visto que o tempo de simulação para os dois casos foi o mesmo de 25s e que num tempo t_{∞} particular para cada simulação os dois sistemas apresentariam o mesmo fluxo de calor, já que este independe do é função tanto do h_0 quanto do gradiente de temperatura dentro do sistema.

Tabela 11: Fluxo de calor dos anéis das serpentinas helicoidais dos tanques com um e com dois impelidores tendo a água como fluido de processo.

Velocidade dos impelidores	Número de impelidores	Fluxo de calor / kW.m ⁻²					
		1	3	5	7	9	Fluxo médio
100 rpm	1	172,60	160,00	140,40	377,90	466,80	211,65
	2	43,35	60,15	49,87	57,65	53,88	52,98
200 rpm	1	285,10	268,40	239,40	638,40	345,40	355,34
	2	72,37	98,95	79,63	94,59	89,01	86,91
300 rpm	1	387,70	363,50	332,50	874,50	466,80	485,03
	2	98,70	134,07	105,98	128,19	120,58	117,50

5.7. Correlação de Nusselt

Foram simulados 22 casos para um tanque de mistura dotado de serpentinas helicoidais com dois impelidores do tipo Rushton com 6 pás. O coeficiente de transferência de calor médio (h_o) foi calculado pela Lei de Resfriamento de Newton (Equação 9) a partir do fluxo de calor médio da parede da serpentina helicoidal de resfriamento e da temperatura média do tanque que foram obtidos a partir das simulações. Com esses valores de h_o , com os diâmetros das serpentinas helicoidais e as condutividades térmicas dos fluidos foram calculados os valores de Nu_s (número de Nusselt calculado a partir dos dados de simulação) pela Equação 18. Em seguida foram calculados os valores de Nusselt a partir da correlação (Nu_c) expressa pela Equação 39.

A correlação para o número de Nusselt concebida neste estudo foi determinada a partir de experimentação numérica feita em CFD. Os valores de D/T , d/T , Reynolds, Prandtl e Nu (obtido a partir do h_o) foram calculados e são apresentados na Tabela 12.

O ajuste de parâmetros foi realizado por minimização da soma quadrática da diferença dos valores do número de Nusselt obtidos a partir das simulações e os valores preditos pela correlação utilizando o Método GRG no Excel. Como estimativa inicial foram considerados os parâmetros da correlação obtida por James (2015), que foram apresentados na Tabela 1. Assim, foi possível ajustar os parâmetros da Equação 39 para a correlação do número de Nusselt expresso pela Equação 40.

$$Nu = 0,56(Re)^{0,575}(Pr)^{0,354} \left(\frac{D}{T}\right)^{0,65} \left(\frac{d}{T}\right)^{0,277} \quad 40$$

A Equação 41 foi utilizada para calcular o desvio médio dos valores preditos pela correlação em relação aos valores calculados a partir dos dados de simulação. O cálculo do desvio padrão, também, foi realizado como expresso pela Equação 42.

$$\text{Desvio} = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{N_{Nu_s} - N_{Nu_c}}{N_{Nu_s}} \right) \quad 41$$

Em que,

n é o número de casos simulados.

N_{Nu_s} é o valor do Nu calculado a partir das simulações;

N_{Nu_c} é o valor do Nu calculado a partir da correlação.

$$\text{Desvio padrão} = 100 \left[\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \left(\frac{N_{Nu_s} - N_{Nu_c}}{N_{Nu_s}} \right)^2 \right]^{1/2} \quad 42$$

Tabela 12: Parâmetros para o cálculo do Nu_c e valores de Nusselt calculados a partir de simulação.

N° Caso	Fluido	D/T	d/T	Pr	Re/10 ³	Nu _s
1	Glicerina	0,33	0,04	105,78	27,36	201
2	Glicerina	0,33	0,04	106,73	54,23	298
3	Glicerina	0,33	0,04	107,18	81,00	372
4	Óleo vegetal	0,33	0,04	588,47	5,06	191
5	Óleo vegetal	0,33	0,04	588,47	10,13	280
6	Óleo vegetal	0,33	0,04	588,47	15,19	351
7	Água	0,33	0,04	6,13	308,40	248
8	Água	0,33	0,04	6,13	616,79	414
9	Água	0,33	0,04	6,13	925,19	569
10	Glicerina	0,25	0,04	104,95	15,51	134
11	Glicerina	0,50	0,04	107,38	121,23	459
12	Glicerina	0,58	0,04	107,23	165,29	754
13	Glicerina	0,33	0,02	3,07	1882,65	576
14	Óleo vegetal	0,25	0,04	588,47	2,85	122
15	Óleo vegetal	0,50	0,04	588,47	22,78	452
16	Óleo vegetal	0,58	0,04	588,47	31,01	647
17	Óleo vegetal	0,33	0,02	588,47	5,06	139
18	Óleo vegetal	0,33	0,02	588,47	10,13	197
19	Água	0,25	0,04	6,13	173,47	153
20	Água	0,50	0,04	6,13	1387,33	951
21	Água	0,58	0,04	6,13	1888,93	1266
22	Água	0,33	0,02	6,13	616,79	301

O desvio relativo à correlação para o Nu_c foi calculado com relação aos dados de simulação, pois neste estudo não foram utilizados dados experimentais. Assim, o modelo apresentou desvio médio de 13,0% e um desvio padrão de 16,9% com relação a esses casos simulados em CFD.

Fatores como a área superficial total das serpentinas helicoidais diferentes para cada diâmetro (3,77m² para a serpentina de maior diâmetro e de 3,46 m² para a de menor) e a presença do segundo impelidor no tanque agitado (escoamento mais caótico e desordenado) podem ter influenciado de forma mais significativa no sistema estudado.

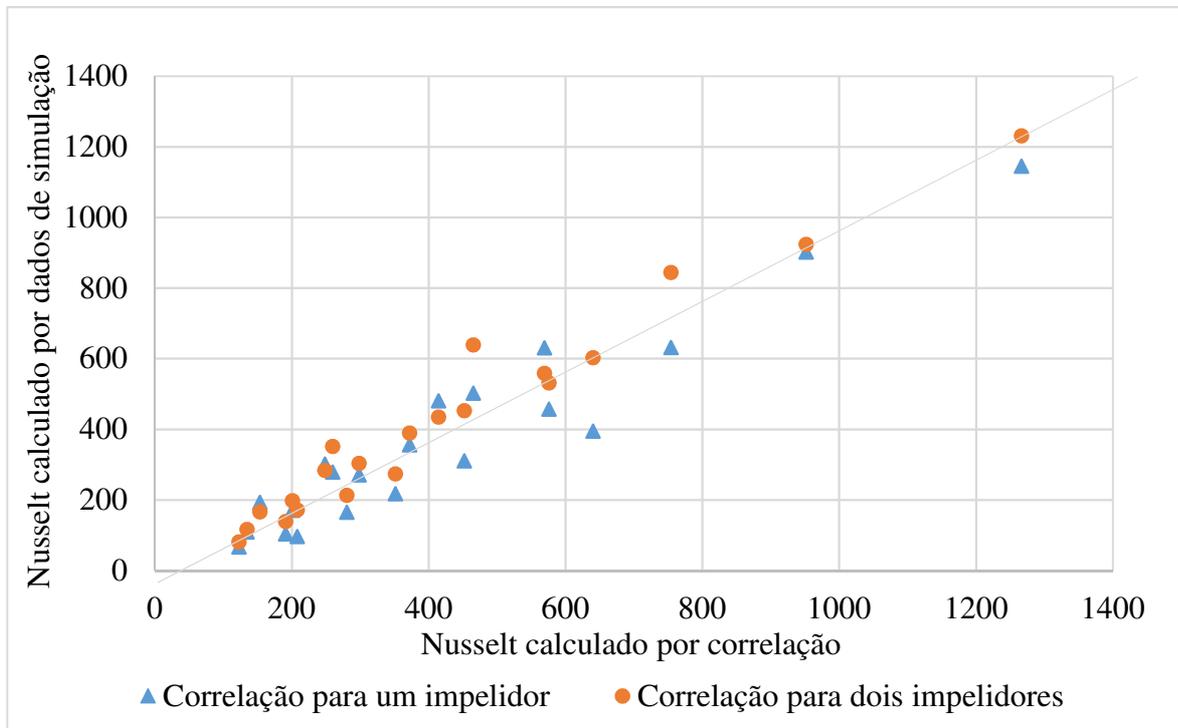
5.8. Comparação entre as correlações de Nusselt para um e para dois impelidores

Para avaliar a qualidade dos valores preditos do número de Nusselt pela correlação desenvolvida neste trabalho, foi feita uma comparação deste com a correlação do Nu para um impelidor. A correlação apresentada por Jaimes (2015) para um impelidor indicada pela Equação 43 foi utilizada nesta análise.

$$Nu = 0,54 \cdot Re^{0,67} \cdot Pr^{0,37} \cdot \left(\frac{D}{T}\right)^{0,21} \cdot \left(\frac{d}{T}\right)^{0,78} \quad 43$$

O Nu calculado a partir da correlação para um impelidor apresentou desvio médio de 23,5%. Um gráfico de dispersão é apresentado na Figura 36, no qual os triângulos referem-se aos valores do número de Nusselt preditos pela correlação para um impelidor e os pontos representam os valores preditos pela Equação 40. Nota-se que os valores preditos por esta última apresentaram uma menor dispersão com relação aos dados de simulação, sendo o que melhor representa o sistema, logo o mais apropriado para a utilização no desenvolvimento de projetos de tanques de mistura com essa configuração.

Figura 36: Comparação entre os valores de Nu preditos pelas correlações em relação ao valor calculado a partir das simulações em CFD.



Capítulo 6

Considerações Finais

Baseado no que foi apresentado e discutido nos capítulos anteriores, este capítulo apresenta as conclusões do trabalho e em seguida algumas sugestões para trabalhos futuros.

6.1. Conclusão

Um estudo para obtenção de correlação para o número de Nusselt foi realizado e, para isso, 22 simulações foram efetuadas com a utilização da fluidodinâmica computacional, as quais precisaram satisfazer requisitos de convergência e estabilidade. Uma representação da fluidodinâmica do tanque de mistura dependente do tempo foi necessária, visto que os fenômenos que ocorrem no interior deste são de natureza tridimensional e periódica.

Com base no modelo computacional para a realização das simulações escolhido a partir dos testes de qualidade de malha, tem-se que os resultados das simulações apresentaram boa convergência, posto que todos os parâmetros apresentaram erro residual abaixo da tolerância que foi de $1,0 \times 10^{-5}$. Com base na variável de monitoramento viu-se que o estado pseudo-permanente foi atingido considerando que as variáveis atingiram uma estabilidade local. O perfil de fluxo desenvolvido por impelidores do tipo radial foram observados nas simulações e o padrão de fluxo para tanques agitados por dois impelidores estava de acordo com o descrito Rutherford *et al.* (1996) que identificou o padrão de fluxo do tipo paralelo em seu estudo. Considerando as informações expostas, é possível afirmar que os resultados apresentados ocorreram devido a boa adequação do modelo computacional para descrever os fenômenos envolvidos no escoamento de fluidos em tanques de mistura com serpentinas helicoidais internas.

Foram utilizadas três velocidades de agitação no tanque para os fluidos água, glicerina e óleo vegetal com dois diâmetros de serpentinas helicoidais e quatro diâmetros de impelidores. A transferência de calor obtida foi proporcional às velocidades de rotação usadas para os impelidores, ou seja, quanto maior foi a velocidade maior foi a transferência de calor, isso devido à diminuição da camada limite na região das paredes das serpentinas helicoidais causada pela maior força do choque da porção de fluido com a parede das serpentinas helicoidais. Em decorrência da presença dos anéis das serpentinas helicoidais imersos no fluido, o sistema

apresentou, nos casos de menor velocidade, pontos de estagnação que foram observadas nas regiões próximas à parede do tanque. Outra consequência da presença das serpentinas helicoidais foi que elas reduziram o efeito das chicanas sobre o fluido, ocasionando a formação de um escoamento semelhante à rotação sólida do fluido na região entre as serpentinas helicoidais e o eixo do impelidor, acarretando em um menor consumo de potência e, conseqüentemente, menor número de potência para esta configuração de tanque de mistura quando comparadas com o impelidor tipo Rushton em um tanque sem serpentinas.

Quanto ao consumo de potência, embora este tenha sido superior para o tanque com dois impelidores com relação ao com apenas um impelidor, os coeficientes de transferência de calor por convecção encontrados foram superiores aos do tanque agitado por apenas um impelidor, sendo possível comprovar que o sistema com dois impelidores possui uma maior capacidade de troca térmica quando comparado com o mesmo tanque agitado por apenas um impelidor.

A correlação final obtida para o número de Nusselt (Equação 40) mostrou-se adequada para utilização em projetos de tanque de mistura com dois impelidores e geometria similar na faixa de validade das variáveis estudadas. Esta foi a principal contribuição desse trabalho, visto que anteriormente não existia uma correlação para tanques com serpentinas helicoidais agitadas por dois impelidores do tipo Rushton. Essa correlação proporciona uma maior segurança no projeto desses sistemas.

Com os resultados deste trabalho e outros da literatura tais como Vergel (2013), Joaquim Junior (2012), Spogis (2011), Ataídes (2008), Deglon e Meyer (2006) e Harris *et al.* (1996) é possível afirmar que a fluidodinâmica computacional (CFD) mostrou-se bastante confiável e a sua aplicação em sistemas agitados apresentou bons resultados quanto à precisão e representação dos fenômenos envolvidos.

6.2. Sugestões para trabalhos futuros

Este trabalho propôs uma correlação para o número de Nusselt a partir da simulação em Fluidodinâmica Computacional considerando as variáveis e condições de contorno requeridas para representar os fenômenos envolvidos. Considerando que ainda não há trabalhos em CFD ou experimentais como este na literatura, sugere-se para trabalhos futuros:

- Realização de um estudo experimental para avaliar o consumo de Potência em tanques de mistura dotado de dispositivos internos de aquecimento/resfriamento para um e mais impelidores.

- Obter computacionalmente correlações para tanques de mistura com jaqueta com mais de um impelidor.
- Desenvolver correlações para serpentinas axiais internas.

Referências

ANSYS. Help. ANSYS inc. , 2014.

APPLETON, W.; BRENNAN, W. Some observations on heat transfer to agitated liquids. *The Canadian Journal of Chemical*. v. 44, n. 5, p. 276–280, 1966.

ATAÍDES, R. S. C. Implementação dos efeitos da não linearidade do tensor de Reynolds em modelos de Turbulência baseados na hipótese de Boussinesq. Brasília. Faculdade de Tecnologia, Universidade de Brasília, 2009. 187 p. Dissertação (Mestrado)

BERGMAN, T. L.; INCROPERA, F. P. Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa. Rio de Janeiro: LTC, 6. ed. 2008.

BEZERRA, V. M. F. Metodologia de obtenção de resultados em fluido-dinâmica computacional: Aplicação a reatores tanques de mistura. Campinas. Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1997. 240 p. Tese (Doutorado)

BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. Fenômenos de Transporte. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.

BOUSSINESQ, J.. Theorie de lécoulement tourbillonnant et tumultueux des liquides dans les lits rectilignes a grande section. Paris: Fautiers-Villars, vol 2, 1877.

BRAGA FILHO, W. Transmissão de Calor. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2004.

CHEN, Y. M.; PEARLSTEIN, A. J. Viscosity-temperature correlation for glycerol-water solutions. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 26, n. 8, p. 1670–1672. 1987.

CHUNMEI, P. A. N.; JIAN, M. I. N.; XINHONG, L. I. U.; ZHENGMING, G. A. O. Investigation of Fluid Flow in a Dual Rushton Impeller Stirred Tank Using Particle Image Velocimetry. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, v. 16, n. 5, p. 693–699, 2008.

COKER, A. K. Ludwig's Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants. v. 4. 2010.

COUPER, J. R.; PENNEY, W. R.; FAIR, J. R. Chapter 10 – Mixing and Agitation. *Chemical*

Process Equipment., 2005. p. 277–328.

CUMMINGS, G. H.; WEST, A. S. Heat transfer data for kettles with jackets and coils. *Industrial & Engineering Chemistry*, v. 42, n. 11, p. 2303-2313, 1950.

ÇENGEL, Y. A.; CIMBALA, J. M. *Mecânica dos Fluidos: Fundamentos e Aplicações*. McGraw-Hill, 2007.

DANGE, S.; VISAVAL, G. Y+ Wall Function in CFD. Pune, India: LearnCAx, CAx education division Centre for Computational Technologies Pvt. Ltd. 2016.

DEBAB, A.; CHERGUI, N.; BEKRENTCHIR, K.; BERTRAND, J. An investigation of heat transfer in a mechanically agitated vessel. *Journal of Applied Fluid Mechanics*, v. 4, n. 3, p. 43–50, 2011.

DEGLON, D. A.; MEYER, C. J. CFD modelling of stirred tanks: Numerical considerations. *Minerals Engineering*, v. 19, n. 10, p. 1059–1068, 2006.

DUCOSTE, J. J.; CLARK, M. M.; WEETMAN, R. J. Turbulence in flocculators: Effects of tank size and impeller type. *AIChE Journal*, v. 43, n. 2, p. 328–338, 1997.

DUNLAP, I. R.; RUSHTON, J. H., *Chem. Eng. Progr. Symposium Series*, 5, v.49, 1953.

EDGAR, T. F.; HIMMELBLAU, D. M.; LASDON, L. S. *Optimization Of Chemical Processes*. 2. ed. McGraw-Hill, 2001.

FOUAD, Y. O.; MALASH, G. F.; ZATOUT, A. A.; SEDAHMED, G. H. Mass and heat transfer at an array of vertical tubes in a square stirred tank reactor. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 91, n. 2, p. 234–243, 2013.

FOUMENY, E. A. Design considerations for heating or cooling of materials in vessels. *Food Control*, v. 1, n. 4, p. 230–235, 1990.

FREIRE, A. P. S.. *Turbulência e seu desenvolvimento histórico*. Apostilas e Mini-cursos. Disponível em: <http://www.fem.unicamp.br/~im450/palestras&artigos/index.htm.backup> Acesso: 19/08/2016.

FREIRE, A. P. S., *Teoria de Camada Limite*. Disponível em: http://www.turbulencia.coppe.ufrj.br/notas_aulas/CursoCamadaLimite_APSF.pdf. Acesso em:

13/04/2016.

GALEAZZO, F. C. C. Modelagem de um Reator com Serpentinhas Axiais Utilizando a Fluido Dinâmica Computacional - CFD. Campinas. Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual De Campinas, 2005. 99 p. Dissertação (Mestrado)

GHOTLI, R. A.; AZIZ, A. A.; IBRAHIM, S.; BAROUTIAN, S.; ARAMI-NIYA, A. Study of various curved-blade impeller geometries on power consumption in stirred vessel using response surface methodology. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, v. 44, n. 2, p. 192–201, 2013.

GONÇALVES, N. D. F. Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas. Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, 2007. 71 p. Dissertação (Mestrado)

HAGEDORN, D.; SALAMONE, J. J. Batch Heat Transfer Coefficients for Pseudoplastic Fluids in Agitated Vessels. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, v. 6, n. 4, p. 469–475, 1967.

HARRIS, C. K.; ROEKAERTS, D.; ROSENDAL, F. J. J.; BUITENDIJK, F. G. J.; DASKOPOULOS, P.; VREENEGOOR, A. J. N.; WANG, H. Computational Fluid Dynamics for Chemical Reactor Engineering. v. 51, n. 10, p. 1569–1594, 1996.

JAIMES, R. P. Obtenção de correlações de nusselt em reatores de tanque de mistura através da Fluidodinâmica Computacional (CFD). . Campinas. Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2015. 160 p. Tese (Doutorado)

JOAQUIM JUNIOR, C. F.; CEKINSKI, E.; NUNHEZ, J. R.; URENHA, L. C. Agitação e Mistura na Indústria. LTC, 2012.

JOSHI, J. B., NERE; N. K.; RANE, C. V.; MURTHY, B. N.; MATHPATI, C. S.; PATWARDHAN, A. W.; RANADE, V. V. CFD simulation of stirred tanks: Comparison of turbulence models. Part I: Radial flow impellers. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 89, n. 1, p. 23–82, 21 fev. 2011.

KERN, D. Q. Process Heat Transfer. Tata McGraw-Hill Education, 1950.

KRESTA, S. M.; WOOD, P. E. Prediction of the three-dimensional turbulent flow in stirred tanks. *AIChE Journal*, v. 37, n. 3, p. 448–460, 1991.

LANE, G. L.; SCHWARZ, M. P.; EVANS, G. M. Chapter 34 - Comparison of CFD Methods for Modelling of Stirred Tanks. 10th European Conference on Mixing, (eds.) Akker, H. E. A. V. D., Derksen, J. J., Elsevier Science, Amsterdam, 2000.

LOPES, M. D. Comparação experimental da troca térmica entre tanque com serpentina helicoidal e com chicana tubular, para impelidor radial e axial. Santos. Universidade Santa Cecília, 2013. 88 p. Dissertação (Mestrado)

LU, W.-M.; YANG, B. Effect of Blade Pitch on the Structure of the Trailing - Vortex around Rushton Turbine Impellers. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 76, 1998.

MALIK, S.; LÉVÊQUE, E.; BOUAIFI, M.; GAMET, L.; FLOTTES, E.; SIMOËNS, S.; EL-HAJEM, M. Shear improved Smagorinsky model for large eddy simulation of flow in a stirred tank with a Rushton disk turbine. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 108, p. 69–80, 2016.

MALISKA, C. R. Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional. 2º ed., 2004.

MARTINI T. L., Influência dos impelidores na produção de insumos químicos para o setor coureiro. Porto Alegre. Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2010. 39 p.

MARSHALL E.M.; BAKKER A. Chapter 5, Computational Fluid Mixing, p. 325, [in:] PAUL E.L.; ATIEMO-OBENG V.A.; KRESTA S.M. (Eds.). *Handbook of Industrial Mixing*, Wiley-Interscience: Hoboken, NJ (2004).

MAVROS, P. Flow Visualization in Stirred Vessels: A Review of Experimental Techniques. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 79, n. 2, p. 113–127, 2001.

MAVROS, P.; BAUDOU, C. Quantification of the Performance of Agitators In Stirred Vessels: Definition and Use of an Agitation Index. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 75, n. 8, p. 737–745, 1997.

MENTER, F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA journal*, v. 32, n. 8, p. 1598–1605, 1994.

MENTER, F. R.; KUNTZ, M.; LANGTRY, R. Ten Years of Industrial Experience with the SST Turbulence Model. *Turbulence Heat and Mass Transfer 4*, v. 4, p. 625–632, 2003.

MOHAN, P.; NICHOLAS EMERY, A.; AL-HASSAN, T. Review heat transfer to Newtonian fluids in mechanically agitated vessels. *Experimental Thermal and Fluid Science*, v. 5, n. 6, p. 861–883, 1992.

MOILANEN, P.; LAAKKONEN, M.; VISURI, O.; ALOPÆUS, V.; AITTAMAA, J. Modelling mass transfer in an aerated 0.2 m³ vessel agitated by Rushton, Phasejet and Combijet impellers. *Chemical Engineering Journal*, v. 142, n. 1, p. 95–108, 2008.

MONTANTE, G.; LEE, K. C.; BRUCATO, A.; YIANNESKIS, M. Numerical simulations of the dependency of flow pattern on impeller clearance in stirred vessels. *Chemical Engineering Science*, v. 56, n. 12, p. 3751–3770, 2001.

NETO, A. da. S. Fundamentos da turbulência nos fluídos. Apostilas e Mini-cursos. Disponível em: <http://www.fem.unicamp.br/~im450/palestras&artigos/index.htm.backup> Acesso: 19/08/2016.

NOGUEIRA, A.; GOMES, J. L.; CEKINSKI, E. Estudo de CFD sobre a influência da configuração da chicana em tanques de mistura. Florianópolis, 2014.

NOGUEIRA, A. L. Desenvolvimento de Reator Tubular para a Produção de Polímeros em Suspensão. Florianópolis. Departamento de Engenharia Química e Alimentos, Universidade Federal De Santa Catarina, 2007. 246 p. Tese (Doutorado)

NUNHEZ, J. R. The influence of geometric on the optimum design of stirred tank reactors. Ph.D. Thesis, The University of Leeds, 1994.

OLDSHUE, J. Y.; GRETTON, A. T. Helical coil heat transfer in mixing vessels. *Chemical Engineering Progress*, v. 50, n. 12, p. 615–621, 1954.

PATANKAR, S. Numerical heat transfer and fluid flow. CRC press, 1980.

PAUL, Edward L.; ATIEMO-OBENG, Victor A.; KRESTA, Suzanne M. (Ed.). Handbook of industrial mixing: science and practice. John Wiley & Sons, 2004.

PEDROSA, S. M. C. P.; NUNHEZ, J. R. Improving heat transfer in stirred tanks cooled by helical coils. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 2, n. 20, p. 1–12, 2003.

PERARASU, V. T.; ARIVAZHAGAN, M.; SIVASHANMUGAM, P. Heat Transfer Studies

in Coiled Agitated Vessel with Varying Heat Input. *International Journal of Food Engineering*, v. 7, n. 4, 2011.

PERES, A. P. Técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) aplicadas a escoamentos em ciclones. Campinas. Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual De Campinas, 2002. 151 p. Tese (Doutorado)

PORCIÚNCULA, C. B. Simulação Fluidodinâmica Computacional de Processos de Separação por Membranas. Porto Alegre. Escola de Engenharia, Universidade Federal Do Rio Grande Do Sul, 2007. 165 p. Dissertação (Mestrado)

RANADE, V. V.; DESHPANDE, V. R. Computational Flow Modelling of Dual Rushton Impeller Stirred Vessels. Citeseer, 1998.

REZENDE, A. L. T. Análise Numérica da Bolha de Separação do Escoamento Turbulento Sobre Placa Plana Fina Inclinada. Rio de Janeiro. Pontifícia Universidade Católica. Rio de Janeiro, 2009. 25 p. Tese (Doutorado)

RIBEIRO, D. C. Modelagem e simulação do escoamento de sistemas multifásicos em reatores agitados mecanicamente. Florianópolis. Universidade Federal de Santa Catarina, 2012. 206 p. Tese (Doutorado)

ROSA, V. S.; TAQUEDA, M. E. S.; DE PAIVA, J. L.; DE MORAES, M. S.; MORAES, D. Nusselt's correlations in agitated tanks using the spiral coil with Rushton turbine and PBT 45° impeller. Comparison with tanks containing vertical tube baffles. *Applied Thermal Engineering*, v. 110, p. 1331–1342, 2017.

RUTHERFORD, K. LEE, K. C.; MAHMOUDI, S. M. S.; YIANNESKIS, M. Hydrodynamic characteristics of dual Rushton impeller stirred vessels. *AIChE Journal*, v. 42, n. 2, p. 332–346, 1996.

SOUZA, J. F. A.; OLIVEIRA, L. R. D.; AZEVEDO, J. L. L. D.; SOARES, I. D.; MATA, M. M. Uma revisão sobre a turbulência e sua modelagem. *Revista Brasileira de Geofísica*, v. 29, n. 1, p. 21–41, 2011.

SPOGIS, N., Metodologia para determinação de curvas de potência e fluxos característicos para impelidores axiais, radiais e tangenciais utilizando a fluidodinâmica computacional. Campinas.

Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2002. 189 p.
Dissertação (Mestrado)

STREET, D. A., Computational modelling of stirred reaction vessels., The University of Leeds, 1991. . Thesis (Ph.D)

TAGHAVI, M.; ZADGHAFARI, R.; MOGHADDAS, J.; MOGHADDAS, Y. Experimental and CFD investigation of power consumption in a dual Rushton turbine stirred tank. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 89, n. 3, p. 280–290, 2011.

VERGEL, J. L. G. Estudo da influência da malha computacional, modelos de turbulência e aspectos numéricos da modelagem CFD em impelidores PBT usando malhas não-estruturadas. Campinas. Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2013.157 p. Dissertação (Mestrado)

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method*. 1995.

VIESER, W.; ESCH, T.; MENTER, F. Heat transfer predictions using advanced two-equation turbulence models. *CFX Validation Report. CFX-VAL*, v. 10, 2002.

ZADGHAFARI, R.; MOGHADDAS, J. S.; REVSTEDT, Johan. A mixing study in a double-Rushton stirred tank. *Computers & chemical engineering*, v. 33, n. 7, p. 1240-1246, 2009.