



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

RONALD JAIMES PRADA

OBTENÇÃO DE CORRELAÇÕES DE NUSSELT EM REATORES DE TANQUE
AGITADO ATRAVÉS DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)

OBTAINING NUSSELT EQUATIONS FOR STIRRED TANK REACTORS WITH
THE USE OF COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS (CFD)

CAMPINAS
2015

RONALD JAIMES PRADA

OBTENÇÃO DE CORRELAÇÕES DE NUSSELT EM REATORES DE TANQUE
AGITADO ATRAVÉS DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)

Tese apresentada à Faculdade de Engenharia Química
da Universidade Estadual de Campinas como parte
dos requisitos exigidos para a obtenção do título de
Doutor em Engenharia Química, na Área de Engenharia Química.

Orientador: PROF. DR. JOSÉ ROBERTO NUNHEZ

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE
À VERSÃO FINAL DA TESE DEFEN-
DIDA PELO ALUNO RONALD JAIMES
PRADA, E ORIENTADA PELO PROF.
DR. JOSÉ ROBERTO NUNHEZ

CAMPINAS
2015

Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s): CAPES

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

J1990 Jaimes Prada, Ronald, 1982-
Obtenção de correlações de Nusselt em reatores de tanque agitado através da fluidodinâmica computacional (CFD) / Ronald Jaimes Prada. – Campinas, SP : [s.n.], 2015.

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

1. Calor - Coeficiente de transferência. 2. Reatores químicos. 3. Mistura (Química). 4. Fluidodinâmica computacional (CFD). 5. Escoamento turbulento. I. Nunhez, José Roberto, 1961-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Obtaining Nusselt equations for stirred tank reactors with the use of computational fluid dynamics (CFD)

Palavras-chave em inglês:

Heat - Transfer Coefficient
Chemical reactors
Mixture (Chemistry)
Computational fluid dynamics (CFD)
Turbulent flow

Área de concentração: Engenharia de Processos

Titulação: Doutor em Engenharia Química

Banca examinadora:

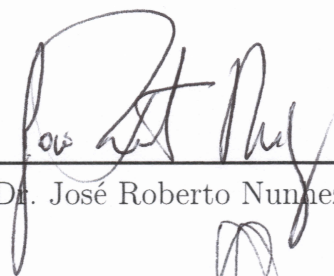
José Roberto Nunhez [Orientador]
Celso Fernandes Joaquim Junior
Lucrécio Fábio dos Santos
Antônio Carlos Luz Lisboa
Diener Volpin Ribeiro Fontoura

Data de defesa: 01-12-2015

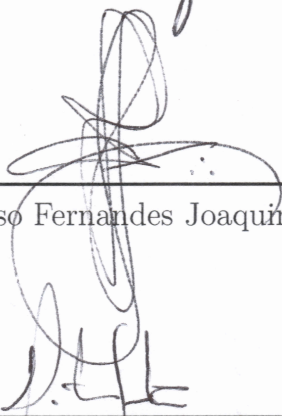
Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

Folha de aprovação

Tese de Doutorado defendida por Ronald Jaimes Prada e aprovada em 01 de dezembro de 2015 pela banca examinadora constituída pelos doutores: :



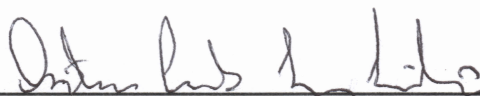
Prof. Dr. José Roberto Nunhez – Orientador



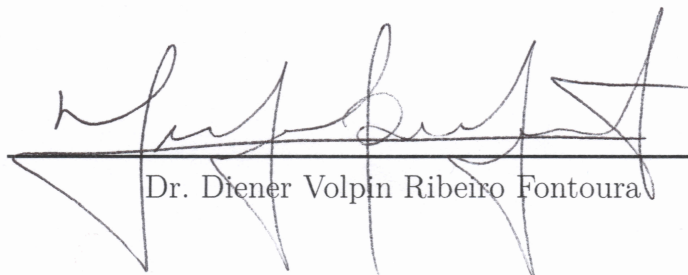
Prof. Dr. Celso Fernandes Joaquim Junior



Prof. Dr. Lucrécio Fábio dos Santos



Prof. Dr. Antônio Carlos Luz Lisboa



Dr. Diener Volpin Ribeiro Fontoura

DEDICO ESTE TRABALHO AO MEU PAI JORGE ELIECER JAIMES QUINTANA, À MINHA MÃE MARLENE PRADA RAMIREZ, À MINHA ESPOSA DIANA ISABEL SÁNCHEZ FORERO, E ÀS MINHAS FILHAS NICOLE VALERIA JAIMES SUAREZ E ANA PAULA JAIMES SÁNCHEZ POR SEREM AS PESSOAS RESPONSÁVEIS PELOS MOMENTOS MAIS FELIZES DA MINHA VIDA.

Agradecimentos

Agradeço,

A Deus, pela vida e por ser a luz que ilumina meu caminho.

Aos meus pais, Jorge Eliecer e Marlene, que com seu amor, apoio, paciência e sacrifício, tornaram possível a minha formação.

À minha esposa Diana Isabel pela sua colaboração, apoio e paciência durante meus momentos de ansiedade e estresse neste processo.

À minha filha Nicole Valeria, pelo amor dedicado a mim e por compreender a minha ausência durante parte da sua infância.

À minha filha Ana Paula, que me trouxe junto com os seus 6 meses de vida, muita felicidade e inspiração.

Ao Prof. Dr. José Roberto Nunhez, pela sua amizade e sábia orientação durante o desenvolvimento deste projeto de pesquisa.

Aos meus colegas e amigos do laboratório de fluidodinâmica computacional (LCFD), Vilmar, Diener, Alexandre e Maria Gorete.

À CAPES pelo apoio financeiro, à UNICAMP pela formação, e ao Brasil pelo acolhimento e pela oportunidade que me proporcionou de tornar-me uma pessoa melhor.

"O que sabemos é uma gota; o que ignoramos é um oceano."

Isaac Newton

Resumo

Muitos processos químicos industriais necessitam de tanques de mistura com transferência de calor. Quando ocorre uma alta liberação de energia, camisas e serpentinas (helicoidais ou axiais) são usadas para promover uma transferência de calor mais eficiente. O principal problema associado às serpentinas helicoidais é que estas podem limitar o fluxo no interior do reator, pois fornecem resistência à circulação do fluido. Devido à complexidade do fluxo no interior desses equipamentos, correlações obtidas experimentalmente são necessárias para a obtenção do coeficiente de transferência de calor por convecção. No entanto, essas correlações além de serem utilizadas para determinada configuração geométrica, não descrevem detalhadamente a influência do escoamento na transferência de calor, pois fornecem valores médios do coeficiente de transferência de calor que impossibilitam uma melhora local no projeto desses internos. Esta pesquisa apresenta uma inovação: foi desenvolvido um modelo tridimensional com o uso da Fluidodinâmica Computacional (CFD) capaz de representar qualitativa e quantitativamente os fenômenos físicos envolvidos nesses sistemas. As predições das simulações foram validadas com dados experimentais obtidos da literatura. Resultados mostram uma forte dependência do refino próximo à superfície da serpentina helicoidal para uma precisão dos resultados computacionais de transferência de calor. Correlações do Número de Nusselt foram obtidas para duas diferentes configurações (uma convencional e outra modificada) apresentando um desvio médio de 10,7 % nos resultados. A remoção dos anéis que impedem a circulação do fluido na frente das pás do impelidor Rushton na geometria modificada proporcionou uma melhor circulação global do fluido. Entretanto, foi observado um menor coeficiente de transferência de calor global.

Palavras-chave: Transferência de Calor, Tanques de Mistura, Serpentina Helicoidal, Fluidodinâmica Computacional (CFD), Escoamento Turbulento.

Abstract

Many industrial processes require the use of stirred tanks with heat transfer. When a high amount of energy is transferred, jacket and coils (helical or axial) are used to provide a more efficient heat transfer. The main problem associated with helical coils is that they can restrict the flow within the reactor because they provide resistance to flow circulation. Due to the complexity of the flow within such equipment, experimental correlations are needed to obtain the convection heat transfer coefficient. However, these correlations are used for a given geometric configuration and besides they do not describe in detail the influence of the flow on the heat transfer because they provide mean values of heat transfer coefficient, which does not allow for a local improvement in the design of these internals. This work presents an innovation. A three-dimensional model has been developed with the use of Computational Fluid Dynamics (CFD) which is able to represent qualitatively and quantitatively the physical phenomena involved in these systems. The predictions of the simulations were validated with experimental data from the literature. Results show that mesh refinement around the coils surface has a strong influence on the heat transfer prediction and hence on the final film coefficient prediction. Nusselt Number Correlations were obtained for two different configurations (one conventional and the other one modified) with an average deviation on the results of about 10.7 %. The removal of the coil ring in front of the blades of the Rushton impeller improved overall fluid flow circulation. However, a lower overall heat transfer coefficient was observed.

Key-words: Heat Transfer, Stirred Tanks, Helical Coil, Computational Fluid Dynamics (CFD), Turbulent Flow.

Lista de Figuras

3.1	Esquema de um tanque de mistura convencional (JOAQUIM JUNIOR <i>et al.</i> , 2007)	48
3.2	Impelidores utilizados em escoamento laminar. (a) Tipo âncora. (b) Tipo helicoidal (POST MIXING OPTIMIZATIONS AND SOLUTIONS, 2015)	50
3.3	Padrões de fluxo em tanques de mistura. (a) Axial. (b) Radial (POST MIXING OPTIMIZATIONS AND SOLUTIONS, 2015)	51
3.4	Impelidores mais utilizados em escoamentos turbulentos. (a) Tipo pás retas. (b) Tipo naval. (c) Tipo turbina. (b) Tipo pás inclinadas (POST MIXING OPTIMIZATIONS AND SOLUTIONS, 2015)	51
4.1	Esquema de camadas na região próxima à superfície (adaptado de ANSYS, Inc. 2011)	67
4.2	Subdivisões da região próxima à parede (adaptado de ANSYS, Inc. 2011) .	69
4.3	Abordagens para o tratamento de parede (adaptado de ANSYS, Inc. 2011)	71
5.1	Fluxograma da metodologia CFD (adaptado de ANSYS, Inc. 2007)	73
5.2	Geometria usada no trabalho experimental de OLDSHUE e GRETTON (1954)	75
5.3	Impelidor tipo Rushton de seis pás	75
5.4	Domínios estacionário e rotativo na geometria estudada	77
5.5	Elementos prismáticos nas superfícies. (a) Disco do impelidor e eixo. (b) Pá do impelidor. (c) Parede do tanque e serpentina helicoidal.	80

5.6	Plano transversal das cinco malhas não estruturadas 3D utilizadas no teste de independência de malha. a) Nível 1. b) Nível 2. c) Nível 3. d) Nível 4. e) Nível 5.	81
5.7	Superfícies do sistema de agitação na condição de periodicidade a) Domínio estacionário. b) Domínio rotativo.	84
5.8	Condição de contorno da serpentina helicoidal. Os anéis de esfriamento e aquecimentos são representados pelas cores azul e vermelho respectivamente.	84
5.9	Configurações geométricas da serpentina helicoidal. (a-b) Diâmetro interno de 7/4 in da configuração convencional e modificada respectivamente. (c-d) Diâmetro interno de 7/8 in da configuração convencional e modificada respectivamente.	88
6.1	Monitoramento do critério de convergência no estudo de caso N°24 apresentado na Tabela 5.6	92
6.2	Monitoramento do coeficiente de transferência de calor (h_o) no decorrer da solução	92
6.3	Variação da estimativa do coeficiente de transferência e fluxo de calor em função da redução do y^+ na superfície da serpentina helicoidal	94
6.4	Malha não estruturada 3D com elementos tetraédricos e prismáticos. a) Malha da superfície do impelidor. b) Malha do domínio rotativo com impelidor de 16 in . c) Malha do domínio estacionário. d) Malha do domínio estacionário para os estudos de caso 22, 23 e 24	95
6.5	Padrão de fluxo estimado na malha Nível 1	96
6.6	Padrão de fluxo estimado na malha Nível 2	97
6.7	Padrão de fluxo estimado na malha Nível 3	97
6.8	Padrão de fluxo estimado na malha Nível 4	98
6.9	Padrão de fluxo estimado na malha Nível 5	98
6.10	Dispersão dos resultados no cálculo do Número de Nusselt pela correlação obtida na modelagem CFD	101

6.11	Dispersão dos resultados no cálculo do Número de Nusselt pela correlação obtida por OLDSHUE e GRETTON (1954)	102
6.12	Número de Nusselt em função do Número de Reynolds para os dados preditos pelas correlações experimental e CFD	103
6.13	Dispersão dos resultados no cálculo do Número de Nusselt pela nova correlação	104
6.14	Comparação dos dados experimentais com a Equação 6.1 obtida pelo Modelo CFD	105
6.15	Número de Nusselt em função do Número de Reynolds para as geometrias convencional e modificada	108
6.16	Número de Nusselt dividido pelo Número de Reynolds à $2/3$ em função do Número de Prandtl para as geometrias convencional y modificada	109
6.17	Número de Nusselt dividido pelo Número de Prandtl à $0,37$ em função do Número de Reynolds para as geometrias convencional e modificada	110
6.18	Plano axial utilizado no cálculo dos perfis de velocidade	111
6.19	Vetores de velocidade da água para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) 300 rpm. (b) 200 rpm. (c) 100 rpm	112
6.20	Vetores de velocidade da água para a geometria sugerida por STREET e MCGREAVY (1991). (a) 300 rpm. (b) 200 rpm. (c) 100 rpm	113
6.21	Vetores de velocidade do óleo vegetal para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) 300 rpm. (b) 200 rpm. (c) 100 rpm	114
6.22	Vetores de velocidade do óleo vegetal para a geometria sugerida por STREET e MCGREAVY (1991). (a) 300 rpm. (b) 200 rpm. (c) 100 rpm	115
6.23	Vetores de velocidade da glicerina para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) 300 rpm. (b) 200 rpm. (c) 100 rpm	116
6.24	Vetores de velocidade da glicerina para a geometria sugerida por STREET e MCGREAVY (1991). (a) 300 rpm. (b) 200 rpm. (c) 100 rpm	117

6.25	Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954) em diferentes velocidades de rotação. (a) Água. (b) Óleo vegetal. (c) Glicerina	119
6.26	Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991) em diferentes velocidades de rotação. (a) Água. (b) Óleo vegetal. (c) Glicerina	120
6.27	Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para água a diferentes diâmetros do impelidor com velocidade de 200 rpm. (a) Geometria convencional. (b) Geometria modificada	125
6.28	Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para óleo vegetal a diferentes diâmetros do impelidor com velocidade de 200 rpm. (a) Geometria convencional. (b) Geometria modificada	126
6.29	Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para glicerina a diferentes diâmetros do impelidor com velocidade de 200 rpm. (a) Geometria convencional. (b) Geometria modificada	127
6.30	Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para água, $D = 16$ in e $V = 200$ rpm	129
6.31	Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para óleo vegetal, $D = 16$ in e $V = 200$ rpm	129
6.32	Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para glicerina, $D = 16$ in e $V = 200$ rpm	130
A.1	Vetores de velocidade da água para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) $D = 12$ in. (b) $D = 16$ in. (c) $D = 20$ in	146
A.2	Vetores de velocidade da água para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) $D = 24$ in. (b) $D = 28$ in	147
A.3	Vetores de velocidade da água para a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991). (a) $D = 12$ in. (b) $D = 16$ in. (c) $D = 20$ in	148
A.4	Vetores de velocidade da água para a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991). (a) $D = 24$ in. (b) $D = 28$ in	149

A.5	Vetores de velocidade do óleo vegetal para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) $D = 12$ in. (b) $D = 16$ in. (c) $D = 20$ in	150
A.6	Vetores de velocidade do óleo vegetal para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) $D = 24$ in. (b) $D = 28$ in	151
A.7	Vetores de velocidade do óleo vegetal para a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991). (a) $D = 12$ in. (b) $D = 16$ in. (c) $D = 20$ in	152
A.8	Vetores de velocidade do óleo vegetal para a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991). (a) $D = 24$ in. (b) $D = 28$ in	153
A.9	Vetores de velocidade da glicerina para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) $D = 12$ in. (b) $D = 16$ in. (c) $D = 20$ in	154
A.10	Vetores de velocidade da glicerina para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) $D = 24$ in. (b) $D = 28$ in	155
A.11	Vetores de velocidade da glicerina para a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991). (a) $D = 12$ in. (b) $D = 16$ in. (c) $D = 20$ in	156
A.12	Vetores de velocidade da glicerina para a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991). (a) $D = 24$ in. (b) $D = 28$ in	157
A.13	Vetores de velocidade para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954) com diâmetro de tubulação de $7/8$ in e $N = 200$ rpm. (a) Água. (b) Óleo Vegetal. (c) Glicerina	159
A.14	Vetores de velocidade para a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991) com diâmetro de tubulação de $7/8$ in e $N = 200$ rpm. (a) Água. (b) Óleo Vegetal. (c) Glicerina	160

Lista de Tabelas

3.1	Relações geométricas padrão em tanques de mistura (JOAQUIM JUNIOR <i>et al.</i> , 2007)	49
3.2	Classificação dos impelidores segundo o padrão de fluxo	52
4.1	Valores das constantes do Modelo SST (MENTER, 1993)	66
5.1	Dimensões das serpentinas	76
5.2	Relações geométricas	76
5.3	Parâmetros de malha utilizados na superfície da serpentina helicoidal . . .	79
5.4	Propriedades físico-químicas dos fluidos	82
5.5	Condições iniciais e de contorno utilizadas nas simulações	86
5.6	Estudos de caso para validação do modelo computacional	89
6.1	Variação do coeficiente de transferência e fluxo de calor na parede da superfície da serpentina helicoidal	94
6.2	Resultados obtidos pelo modelo CFD na validação	100
6.3	Resultados obtidos pelo modelo CFD da nova configuração	107
6.4	Influência da velocidade do impelidor na transferência de calor para as duas configurações geométricas	121
6.5	Influência do diâmetro do impelidor na transferência de calor para as duas configurações geométricas	124
6.6	Influência do diâmetro de tubulação da serpentina helicoidal na transferência de calor para as duas configurações geométricas	130

Nomenclatura

Letras Latinas

$\bar{v}_i$	Componente de velocidade média
Δy	Distância entre o primeiro nó da malha e a parede
$\overline{v_i \cdot v_j}$	Tensores de Reynolds
τ_{ij}	Trabalho viscoso
$\vec{r}$	Vetor localização
$\vec{v}$	Vetor velocidade
B	Largura da chicana ou constante da camada logarítmica que depende da rugosidade da parede
B_n	Número de pás do impelidor
C	Altura do impelidor
C_ν	Constante empírica do modelo de turbulência
C_c	Altura da serpentina helicoidal
C_p	Capacidade calorífica a pressão constante
$C_{\epsilon 1}$	Constante empírica do modelo de turbulência
$C_{\epsilon 2}$	Constante empírica do modelo de turbulência
$C_{p,j'}$	Capacidade calorífica da espécie j'
$CD_{k\omega}$	Distância mais próxima da parede
D	Diâmetro do impelidor
d	Diâmetro de tubo da serpentina helicoidal
D_b	Comprimento da pá do impelidor
D_c	Diâmetro da serpentina helicoidal
D_d	Diâmetro do disco do impelidor tipo Rushton
D_i	Diâmetro da serpentina helicoidal
D_o	Diâmetro externo da serpentina helicoidal

D_w	Largura da pá do impelidor
E	Energia
F_1, F_2	Função de combinação
g	Aceleração da gravidade
h	Coeficiente de transferência de calor por convecção ou entalpia
h_c	Coeficiente de transferência de calor por convecção em serpentinas
h_j	Coeficiente de transferência de calor por convecção em jaquetas
h_o	Coeficiente global de transferência de calor por convecção
$J_{j'}$	Fluxo de difusão da espécie j'
K	Constante de Karman
k	Energia cinética turbulenta
k_{ef}	Condutividade térmica efetiva
$m_{j'}$	Fracção mássica da espécie j'
N	Velocidade rotacional do impelidor
n	Número de pontos da amostra
No	Constante
Nu	Número adimensional de Nusselt
P	Passo da serpentina
p	Pressão
P_k	Produção de turbulência devido às forças viscosas
Pr	Número adimensional de Prandtl
Q	Taxa de transferência de calor
q	Fluxo de calor ou taxa de crescimento da malha
R	Número de chicanas ou voltas da serpentinas
Re	Número adimensional de Reynolds
Re_L	Número de Reynolds baseado no comprimento característico L
S	Passo do impelidor ou termo fonte
S_c	Distância entre os centros dos anéis da serpentina helicoidal
T	Diâmetro do tanque ou temperatura
t	Tempo
T_∞	Temperatura distante da superfície
T_s	Temperatura da superfície de troca térmica

T_{ref}	Temperatura de referência
u	Velocidade de borda do impelidor
u^+	Velocidade próximo à parede
u_*	Velocidade de atrito
u_δ	Velocidade de escoamento na borda da subcamada viscosa
v'_i	Componente de velocidade flutuante
$v_i, v_j, v_k,$	Componentes de velocidade
y	Distância à parede
y^+	Distância adimensional da parede
Z	Altura de líquido no tanque
Z_c	Altura do feixe de serpentinas

Letras Gregas

α	Difusividade térmica ou constante empírica do modelo de turbulência
β	Constante empírica do modelo de turbulência
β'	Constante empírica do modelo de turbulência
β^*	Constante empírica do modelo de turbulência
δ_{subcam}	Espessura da subcamada viscosa
ϵ	Dissipação da energia cinética
η	Número de nós na camada limite
κ	Condutividade térmica
μ	Viscosidade dinâmica
μ_s	Viscosidade dinâmica próximo da parede
ν	Viscosidade cinemática
ν_t	Viscosidade turbulenta
ν_{ef}	Viscosidade efetiva
ω	Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta
ρ	Massa específica
σ_ϵ	Constante empírica do modelo de turbulência
σ_ω	Constante empírica do modelo de turbulência
σ_k	Constante empírica do modelo de turbulência
τ	Tensor tensão

τ_w	Tensão de cisalhamento na parede
$\vec{\omega}$	Velocidade angular

Siglas

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
FBT	<i>Flat Blade Turbine</i>
IBM	<i>Impeller Boundary Conditions approach</i>
IO	<i>Inner and Outer Iterative Procedure</i>
LDA	<i>Laser-Doppler Anenometry</i>
LDV	<i>Laser-Doppler Velocimetry</i>
LES	<i>Large Eddy Simulations</i>
MFR	<i>Multiple Frames of Reference</i>
PBT	<i>Pitch Blade Turbine</i>
PIV	<i>Particle Image Velocimetry</i>
QUICK	<i>Quadratic Upstream Interpolation</i>
RMS	<i>Root Mean Square</i>
RNG	<i>Renormalization Group</i>
RSM	<i>Reynolds Stress Model</i>
SG	<i>Sliding Grid</i>
SM	<i>Sliding Mesh</i>
SS	<i>Source-sink approach</i>
STR	<i>Stirred Tank Reactor</i>

Sumário

1	Introdução	33
1.1	Objetivos	35
1.1.1	Objetivo Geral	35
1.1.2	Objetivos Específicos	35
2	Revisão Bibliográfica	37
2.1	Fluidodinâmica Computacional (CFD) Aplicada a Tanques de Mistura . .	37
2.2	Transferência de Calor em Tanques Agitados	41
3	Reatores Tipo Tanque Agitado	47
3.1	Tanques de Mistura	47
3.2	Tipos de Impelidores	49
3.3	Transferência de Calor em Tanques Agitados	52
3.3.1	Análise Dimensional	53
3.3.1.1	Número de Reynolds (Re)	55
3.3.1.2	Número de Prandtl (Pr)	55
3.3.1.3	Número de Nusselt (Nu)	56
4	Modelagem Matemática	57
4.1	Equações de transporte	57
4.2	Turbulência	59

4.2.1	Hipótese de Boussinesq	61
4.2.2	Modelos de Turbulência	62
4.2.2.1	Modelo de turbulência $k - \epsilon$	62
4.2.2.2	Modelo de turbulência $k - \omega$	63
4.2.2.3	Modelo de turbulência SST (<i>Shear Stress Transport</i>)	64
4.3	Camada Limite	66
4.3.1	Abordagem próxima à parede (<i>Near-Wall Modelling</i>)	69
4.3.2	Função de Parede (<i>Wall Function</i>)	70
5	Metodologia	73
5.1	Identificação do problema	74
5.2	Pré-processamento	76
5.2.1	Geometria	77
5.2.2	Geração da malha	78
5.2.3	Configuração do Modelo de Simulação CFD	79
5.2.3.1	Propriedades Físicas dos Fluidos	82
5.2.3.2	Condições de Contorno	82
5.2.3.3	Modelos Físicos e Esquemas Numéricos	85
5.2.3.4	Simulações para a obtenção da correlação do Número de Nusselt: Validação do Modelo	86
5.2.3.5	Simulações para a obtenção da correlação do Número de Nusselt da nova configuração	87
5.3	Solver	90
5.4	Pós-processamento	90
6	Resultados	91
6.1	Convergência e monitoramento da solução	91

6.2	Efeito do y^+ no coeficiente de transferência de calor e padrão de fluxo no reator de tanque agitado	93
6.3	Obtenção da correlação do Número de Nusselt: Validação do Modelo . . .	99
6.4	Obtenção da correlação do Número de Nusselt para a nova configuração . .	106
6.5	Estudos de casos propostos	110
6.5.1	Variação da velocidade de rotação do impelidor	111
6.5.2	Variação do diâmetro do impelidor	122
6.5.3	Variação do diâmetro do tubo da serpentina	128
7	Conclusões e Sugestões	133
7.1	Conclusões	133
7.2	Sugestões	135
	Referências	142
	Apêndice	142
A	Vetores de velocidade para os diferentes fluidos	145
A.1	Variação do diâmetro do impelidor nas configurações convencional e modificada	145
A.2	Variação do diâmetro de tubo da serpentina nas configurações convencional e modificada	158

Capítulo 1

Introdução

Reatores de tanque agitado (em inglês STR – *Stirred Tank Reactor*) nos quais um ou mais impelidores são utilizados para gerar o fluxo e a mistura desejados encontram-se entre os equipamentos mais usados na indústria química e afins. As operações de cristalização, extração líquido-líquido, lixiviação, reações catalíticas heterogêneas, fermentação, são alguns exemplos de operações industriais realizadas em tanques de mistura. A finalidade principal desses equipamentos consiste em obter uma melhoria na homogeneização, na transferência de calor e massa, além do aspecto reacional.

O reator de tanque agitado consiste normalmente em um tanque cilíndrico equipado com um impelidor, um motor e um dispositivo para promover a troca térmica. Em reações em que o calor de reação é alto, o aquecimento ou esfriamento do sistema de reação é necessário para aumentar a eficiência da reação e garantir a segurança de operação. Para manter o fluido no reator na temperatura desejada, calor deve ser adicionado ou removido por uma camisa na parede do tanque ou através de uma serpentina helicoidal.

Estudos experimentais têm a grande vantagem de tratar com a configuração real, contudo, são normalmente caros e consomem um tempo demasiadamente grande. Além disso, a experimentação muitas vezes não pode ser realizada por questões de segurança ou pela dificuldade de reprodução das condições reais. Como alternativa, tem-se a aplicação da fluidodinâmica computacional (CFD) que tem por característica apresentar um baixo custo e rapidez, além de servir de apoio em processos de *scale-up*.

Em geral, o procedimento computacional na fluidodinâmica tem o intuito de fazer as investigações experimentais mais eficientes, possibilitando um entendimento mais profundo dos processos de escoamento. Deve ficar bem claro, portanto, que a fluidodinâmica

computacional não tem o objetivo de substituir a fluidodinâmica experimental. Antes, ambas proporcionam um entendimento muito mais claro do processo como um todo.

Quase todos os estudos têm um caráter basicamente experimental, muito embora a partir dos anos 80 muita ênfase tenha sido dada à investigações computacionais utilizando a fluidodinâmica computacional (em inglês CFD – *Computational Fluid Dynamics*), as quais têm sido possíveis graças ao significativo aumento do poder computacional e sofisticação dos pacotes gráficos. Nesse sentido, este trabalho consiste em simular um reator de tanque agitado considerando uma modificação da configuração inicialmente estudada por OLDSHUE e GRETTON (1954), que sugerem que o coeficiente de transferência térmica de reatores utilizando serpentinas helicoidais pode ser calculado utilizando a seguinte correlação experimental baseada no Número de Nusselt (Equação 1.1). Esta expressão é válida para números de Reynolds entre 400 e $1,5 \times 10^6$.

$$N_u = 0,17(R_e)^{0,67}P_r^{0,37} \left(\frac{D}{T}\right)^{0,1} \left(\frac{d}{T}\right)^{0,5} \quad (1.1)$$

A mesma equação pode ser re-escrita como:

$$\frac{h_o d}{\kappa} = 0,17 \left(\frac{ND^2 \rho}{\mu}\right)^{0,67} \left(\frac{C_p \mu}{\kappa}\right)^{0,37} \left(\frac{D}{T}\right)^{0,1} \left(\frac{d}{T}\right)^{0,5} \quad (1.2)$$

Em que h_o é o coeficiente de transferência de calor, κ a condutividade térmica do fluido, d o diâmetro de tubo da serpentina, N e D a velocidade e diâmetro do impelidor respectivamente, C_p o calor específico e μ a viscosidade dinâmica.

No estudo inicial de OLDSHUE e GRETTON (1954) foi considerada a geometria de um tanque de mistura com serpentinas helicoidais e chicanas na parede do tanque. Este arranjo experimental é ainda muito utilizado nas indústrias para projeto desses reatores. Contudo, esta geometria mostrou ter uma circulação interna no tanque prejudicial, devido à presença de serpentinas posicionadas na altura das lâminas do agitador, reduzindo a transferência global de calor (PEDROSA e NUNHEZ, 2003; STREET, 1991; STREET e MCGREAVY, 1991).

1.1 Objetivos

1.1.1 Objetivo Geral

Este projeto de doutorado tem como objetivo geral o estudo de um arranjo modificado de serpentinas helicoidais em tanques de mistura com o uso da fluidodinâmica computacional (CFD). Na primeira parte do trabalho, será desenvolvido um modelo tridimensional CFD capaz de representar detalhadamente o escoamento e a sua influência na transferência de calor nestes equipamentos. Posteriormente, correlações do Número de Nusselt serão obtidas, tanto na configuração convencional como na modificada, além da avaliação de diferentes configurações geométricas e condições operacionais.

1.1.2 Objetivos Específicos

Os objetivos específicos deste trabalho são:

- Analisar o efeito do refino de malha próximo à parede da serpentina no coeficiente de transferência de calor por convecção.
- Reproduzir por meio de experimentação numérica a correlação baseada no Número de Nusselt apresentado no trabalho experimental de OLDSHUE e GRETTON (1954).
- A partir do modelo validado na etapa anterior, o arranjo modificado de serpentinas helicoidais proposto por STREET e MCGREAVY (1991) será estudado e uma correlação do Número de Nusselt será obtida para esta nova configuração.
- A eficiência dos projetos será avaliada por meio do valor do coeficiente de troca térmica expresso pelo Número de Nusselt, com fins de comparação.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Neste capítulo serão apresentados alguns trabalhos encontrados na literatura visando auxiliar o entendimento de processos de escoamento e troca térmica em tanques de mistura. Primeiramente, serão apresentados estudos focados nos parâmetros relevantes na fluidodinâmica computacional, tais como: densidade de malha, esquemas de discretização, modelos de turbulência e abordagens para representar a interação impelidor-chicana.

Posteriormente, diversas correlações experimentais do coeficiente de transferência de calor serão apresentadas e bem como sua dependência de uma série de parâmetros, tais como: tipo e dimensões do impelidor, forma do tanque, internos e propriedades físicas do fluido em estudo.

2.1 Fluidodinâmica Computacional (CFD) Aplicada a Tanques de Mistura

Os modelos de simulação CFD em tanques de mistura precisam, entre outras coisas, de uma apropriada resolução da malha, esquema de discretização, modelo de turbulência e de uma adequada abordagem para representar a interação impelidor-chicana. A seleção das considerações numéricas mencionadas anteriormente podem ter uma influência marcada na acurácia dos resultados e no custo computacional exigido (DEGLON e MEYER, 2006).

A resolução da malha computacional é um fator importante em qualquer simulação CFD e está diretamente relacionada com o custo computacional da solução. Para obter uma malha com boa precisão nos resultados, além de um custo computacional razoável,

é necessário realizar simulações com diferentes densidades de malha até atingir valores constantes das variáveis de interesse. WECHSLER *et al.* (1999) mostraram no seu estudo de sensibilidade de malha, que para isolar erros numéricos na predição das quantidades turbulentas é necessário trabalhar com malhas refinadas.

O efeito do esquema de discretização na precisão do fluxo predito tem sido investigado por alguns autores. SAHU e JOSHI (1995) utilizaram a técnica IBM (*Impeller Boundary Conditions*) para simular um impelidor de pás inclinadas (PBTs) e compararam três diferentes esquemas de discretização de primeira ordem (*Upwind*, *Upwind*–diferenças centrais e o esquema da lei de potência). Os autores observaram que o esquema de discretização *Upwind* apresentou diferenças significativas em comparação com os outros dois esquemas, os quais apresentaram resultados semelhantes, embora o esquema *Upwind* tenha atingido rapidamente a convergência. Os esquemas foram avaliados com dados experimentais, encontrando-se o esquema da lei de potência mais robusta e com maior exatidão.

BRUCATO *et al.* (1998) compararam o esquema de discretização híbrido *Upwind* (diferença central) com o esquema de discretização de alta ordem QUICK (*Quadratic Upstream Interpolation*), observando que os campos de fluxo não possuem diferença significativa entre os dois esquemas de discretização utilizados. Os autores concluíram que para malhas muito finas os efeitos de difusão numérica associados com o esquema *Upwind* não foram significativos, e a difusão turbulenta foi altamente dominante. Além disso, o esquema numérico QUICK tende a reproduzir taxas ligeiramente altas de recirculação no topo e fundo do tanque.

AUBIN *et al.* (2004) estudaram o efeito de três esquemas de discretização (*Upwind*, *Upwind*–diferença central e QUICK) e constataram que a escolha do esquema de discretização tem pouco efeito nas velocidades médias (concordando com os resultados obtidos por BRUCATO *et al.* (1998)); não obstante, no esquema *Upwind* foi encontrada uma subestimação do turbilhão na região abaixo do impelidor. No entanto, os três esquemas de discretização apresentaram uma subestimação na predição da energia cinética turbulenta.

Diferentes enfoques têm sido desenvolvidos para descrever a interação impelidor–chicana nas simulações CFD. Esses enfoques podem ser classificados dentro de duas categorias: estado estacionário e estado transiente. Na primeira categoria, as equações do modelo são resolvidas em estado estacionário e na segunda categoria as interações (de-

pendentes do tempo) impelidor–fluido são modeladas (JOSHI *et al.*, 2011a).

Os enfoques utilizados para modelar a rotação do impelidor podem incluir condições de contorno no impelidor (IBC–*impeller boundary conditions approach*), especificando o termo fonte/sumidouro de quantidade de movimento nas pás do impelidor/chicanas (SS–*source-sink approach*) ou incorporando marcos de referência rotativos e estacionários. Os modelos frequentemente utilizados são MFR (*Multiple Frames of Reference*) e malhas deslizantes (SM). Conforme alguns autores, a abordagem MFR de LUO *et al.* (1993) apresenta resultados adequados com um menor custo computacional em comparação com outras abordagens transientes na simulação de tanques de mistura (DEGLON e MEYER, 2006; AUBIN *et al.*, 2004; MICALE *et al.*, 1999; BRUCATO *et al.*, 1998).

O modelo de turbulência $k - \epsilon$ é o modelo mais utilizado em escoamentos turbulentos em tanques de mistura. Na maioria desses estudos, o modelo apresentou deficiências na predição de quantidades turbulentas devido à suposição da turbulência isotrópica, limitando a predição de vórtices ou recirculação de fluxos (ABUJELALA e LILLEY, 1984; ARMENANTE *et al.*, 1997; JENNE e REUSS, 1999). A predição do fluxo em tanques de mistura foi estudada por vários autores, utilizando variações do modelo $k - \epsilon$ tais como Chen Kim e *Renormalization Group* (RNG) (RANADE *et al.*, 1989; JENNE e REUSS, 1999; JAWORSKI e ZAKRZEWSKA, 2002; AUBIN *et al.*, 2004).

JAWORSKI *et al.* (1997) estudaram o fluxo produzido pelo impelidor Rushton utilizando a abordagem de malhas deslizantes. Eles reportaram que o modelo de turbulência não tem muita influência nas velocidades médias. As quantidades turbulentas foram altamente subestimadas pelos dois modelos. Embora foram encontrados melhores resultados para o modelo $k - \epsilon$ padrão em comparação com o modelo RNG $k - \epsilon$.

BAKKER *et al.* (1996) pesquisaram padrões de fluxo laminar e turbulento para um impelidor tipo PBT de 4 pás, utilizando três modelos de turbulência ($k - \epsilon$ padrão, RNG $k - \epsilon$ e RSM). Os autores mostraram que o campo de velocidades axial-radial predito pelos três modelos apresentaram resultados similares e razoáveis em relação aos dados experimentais. Predições da dissipação turbulenta foram marginalmente diferentes para os três modelos estudados. SHENG *et al.* (1998) também predisseram o padrão de fluxo para um impelidor PBT de 4 pás, usando os modelos RNG $k - \epsilon$ e RSM. Como os autores anteriores, eles encontraram boa predição do campo de velocidades médias em comparação

com dados experimentais obtidos pela técnica PIV (*Particle image velocimetry*) e LDV (*Laser-Doppler Velocimetry*), mas as quantidades turbulentas foram subestimadas.

OSHINOWO *et al.* (2000) estudaram o efeito dos modelos de turbulência $k - \epsilon$ padrão, RNG $k - \epsilon$ e RSM no campo de velocidades tangenciais, utilizando a abordagem MFR. Eles encontraram regiões de vórtices invertidos na parte superior do tanque que não estão de acordo com a física do fenômeno, as quais poderiam ser reduzidas usando o modelo RNG e ainda mais com o modelo RSM.

MONTANTE *et al.* (2001) realizaram simulações de tanques de mistura equipados com impelidores tipo Rushton mediante as abordagens SG e IO (*Inner-outer iterative procedure*). As simulações foram comparadas com dados experimentais obtidos pela técnica LDA (*Laser-Doppler Anemometry*) mostrando uma correta predição do padrão de fluxo na transição quando uma redução da distância entre o fundo do tanque e o impelidor é feita. Eles também observaram uma subestimação da energia cinética turbulenta apresentada no modelo $k - \epsilon$.

AUBIN *et al.* (2004) fizeram estudos sobre os modelos de turbulência ($k - \epsilon$ e RNG $k - \epsilon$) sobre as velocidades médias, energia cinética turbulenta e quantidades globais, tais como número de potência e bombeamento. Eles encontraram efeitos não significativos nos campos de velocidade radial e axial ou no movimento tangencial invertido na parte superior do tanque, ao contrário de OSHINOWO *et al.* (2000).

MURTHY e JOSHI (2008) pesquisaram detalhadamente a capacidade preditiva de vários modelos de turbulência, tais como $k - \epsilon$ padrão, RSM e LES (*Large Eddy Simulations*). A técnica LDA foi utilizada junto com simulação para prever o fluxo de diferentes impelidores. Os valores de simulação de velocidade média axial, radial e tangencial, além de energia cinética turbulenta foram comparados com dados experimentais obtidos na técnica LDA. O modelo LES apresentou melhores predições de todas as variáveis do fluxo, enquanto os modelos de turbulência padrão $k - \epsilon$ e RSM subestimam os perfis de energia cinética turbulenta principalmente na região do impelidor. O modelo RMS capturou bem os fluxos característicos, mas o modelo $k - \epsilon$ falhou no cálculo dos fluxos médios associados com turbilhões fortes.

Os autores concluíram que os modelos apresentaram pequenas mudanças nas predições turbulentas e em alguns casos, o modelo padrão mostrou melhores resultados. No

entanto, têm-se feito sugestões indicando que os modelos de turbulência que não estejam baseados na suposição da turbulência isotrópica, poderiam fornecer melhores resultados. Porém, alguns trabalhos publicados baseados em modelos turbulentos não isotrópicos RSM (*Reynolds Stress Model*) mostram que os perfis da velocidade cinética turbulenta apresentam maiores desvios dos dados experimentais, que aqueles obtidos usando o modelo padrão $k - \epsilon$ (DEGLON e MEYER, 2006).

2.2 Transferência de Calor em Tanques Agitados

A transferência de calor em tanques agitados pode ser realizada através de camisas externas ao vaso ou por meio de serpentinas imersas no líquido. A taxa de transferência de calor para ou a partir do fluido agitado depende das propriedades físicas dos fluidos (fluido agitado e o fluido usado para a troca térmica), de parâmetros geométricos e do grau de agitação. Na literatura foram propostas numerosas correlações de transferência de calor que incorporam estes determinantes. A transferência de calor para serpentinas em tanques agitados pode ser expressa sob a forma descrita na Equação 2.1.

$$N_u = K(R_e)^a(P_r)^b(V_i)^c \quad (2.1)$$

A maioria dos pesquisadores recomendam valores de $2/3$ para o expoente do número de Reynolds (a), $1/3$ para o expoente do número de Prandtl (b) e $0,14$ para o expoente da relação de viscosidade (c). O valor da constante (K) depende do tipo de impelidor e da superfície de transferência de calor, tomando valores de $0,3$ a $1,5$. Todas as constantes anteriores são avaliadas experimentalmente e a correlação gerada só pode ser usada quando existe similaridade da geometria e do processo. Com o intuito de aumentar a faixa de validade da correlação para uma vasta gama de geometrias, alguns pesquisadores têm incorporado fatores de relações geométricas (MOHAN *et al.*, 1992).

CHILTON *et al.* (1944) realizaram o primeiro estudo do coeficiente de película em tanques agitados com serpentinas helicoidais usando agitadores do tipo *flat paddle*. Uma correlação de transferência de calor por convecção forçada foi proposta, sendo o diâmetro do tanque usado como o parâmetro da correlação. Quatro fluidos foram usados (água, dois óleos e glicerol) e a diferença de temperatura através da superfície de transferência de calor foi variada.

PRATT (1947) desenvolveu uma correlação para os coeficientes de transferência de calor na película interna e externa de tanques de mistura quadrados e cilíndricos, equipados com serpentinas helicoidais mediante o uso de impelidores tipo *flat paddles* para a agitação. Em seu estudo a influência da geometria da serpentina foi analisada incorporando alguns parâmetros na correlação como o diâmetro e a altura total da serpentina. Devido à faixa operacional dos testes, o número de Reynolds na correlação de Pratt (18,800 - 513,000) apresenta um baixo expoente, próximo a 0,5, em comparação ao valor geral de $2/3$ das outras correlações apresentadas na literatura.

CUMMINGS e WEST (1950) apresentam uma correlação para o coeficiente de transferência de calor por convecção forçada em tanques agitados. Em seu estudo experimental utilizaram seis líquidos com diferentes propriedades físicas e térmicas (água, tolueno, álcool isopropílico, etilenoglicol, glicerol e óleo mineral) e dois tipos de impelidor; *retreating-blade* e 45° *pitched-blade*. Os autores estenderam a correlação reportada por CHILTON *et al.* (1944) para o estudo de equipamentos de grandes dimensões.

OLDSHUE e GRETTON (1954) estudaram o coeficiente de transferência de calor para tanques de mistura com serpentinas helicoidais e chicanas na parede do tanque. O efeito da variação do diâmetro do impelidor (*Flat-blade*) e o diâmetro da serpentina foram estudados para aquecimento e esfriamento. Uma faixa do Número de Reynolds de 400 a $1,5 \times 10^6$ foi usada. Comparando-se os resultados deste estudo com resultados de outros pesquisadores é enganoso utilizar unicamente a correlação do Número de Nusselt-Reynolds. Deve ser apontado que os pesquisadores que usam um tubo de maior diâmetro automaticamente obtêm um maior Número de Nusselt para o mesmo Número de Reynolds. Além disso, a utilização de um impelidor com maior consumo de energia em um determinado Número de Reynolds proporciona um maior coeficiente de transferência de calor devido, principalmente, à entrada de energia mais elevada.

APPLETON e BRENNAN (1966) estudaram o desenho do impelidor, o efeito da geometria e superfície da serpentina para a determinação do coeficiente de transferência de calor de líquidos agitados em tanques de fundo plano. Os autores trabalharam em uma ampla faixa de números de Prandtl e Reynolds. Além disso, observaram que o expoente do número de Reynolds depende da viscosidade, fenômeno que explicaram qualitativamente pela influência do incremento da velocidade do agitador na transferência de calor, sendo

menor para altos valores da viscosidade.

APPLETON e BRENNAN (1966) mostraram que a dissipação da energia entre o impelidor e a serpentina é maior para fluidos mais viscosos, e o incremento da velocidade do fluido nas proximidades da serpentina devido ao incremento de velocidade do impelidor torna-se menor a altas viscosidades. O principal objetivo de seu trabalho foi estudar o efeito da rugosidade superficial. Assim, encontraram que o número do expoente de Reynolds apresenta maiores valores para superfícies rugosas comparados com tubos lisos nas mesmas condições de trabalho, o que produz aumento da turbulência na parede para altas velocidades do impelidor. Concluíram que este tipo de superfície gera maior ganho na velocidade de transferência, tanto para a serpentina helicoidal como para o arranjo tipo *baffle*, enquanto para superfícies lisas, os coeficientes de transferência são aproximadamente iguais para números de Reynolds semelhante.

NOORUDDIN e RAO (1966) estudaram o efeito das propriedades físicas do líquido agitado, a geometria e as condições de operação do impelidor sobre o coeficiente de transferência de calor na saída da serpentina. Mais tarde, JHA e RAO (1967) predisseram o número de Nusselt baseados na geometria da serpentina helicoidal e da localização do agitador dentro do tanque. Para seu estudo utilizaram cinco tipos de serpentinas e variaram a velocidade e localização do impelidor.

NAGATA *et al.* (1972) determinaram as equações de correlação dos coeficientes de transferência de calor para a parede de uma camisa de esfriamento (h_j) e de um impelidor de serpentina rotatória (h_c) trabalhando com líquidos não-Newtonianos de alta viscosidade nas regiões de escoamento laminar e turbulento. Observaram que o coeficiente h_c é aproximadamente três vezes maior que o coeficiente h_j , devido à maior taxa de cisalhamento local fora da superfície da serpentina pelo fato de se encontrar concentrada a tensão de cisalhamento nesta região, além, da influencia da menor viscosidade aparente que apresentam os líquidos que se comportam como fluidos pseudoplásticos ou plásticos de Bingham.

BALAKRISHNA e MURTHY (1980) propuseram um modelo para transferência de calor em um tanque agitado com impelidor tipo *turbine*. Neste modelo foi considerada a contribuição de troca térmica na mistura entre a camada limite e o fluido fora desta. Resultados mostraram uma melhor predição da temperatura a diferentes tempos de mistura,

em comparação com modelos que não consideram a troca térmica na mistura da camada limite. Os autores observaram que para sistemas com uma baixa faixa de viscosidade a taxa de transferência de calor é maior em comparação com sistemas líquidos de alta faixa de viscosidade.

HAVAS *et al.* (1982) estudaram o coeficiente de transferência de calor em defletores de tubo verticais em um tanque agitado. Introduziram o Número modificado de Reynolds (produto da velocidade do fluido na serpentina e o diâmetro do tubo externo) na equação de transferência de calor e reportaram que este número modificado é adequado para o ajuste dos dados experimentais e a obtenção de uma melhor predição dos coeficientes para serpentinas de diferentes geometrias.

HAVAS *et al.* (1987) analisaram o coeficiente de transferência de calor para tanques de mistura com serpentinas helicoidais. Eles desenvolveram uma correlação empírica pela introdução do número de Reynolds modificado e mostraram que este é adequado também para predizer os coeficientes de transferência de calor em serpentinas helicoidais. Os dados experimentais mostraram que o efeito de chicanas é insignificante para a troca térmica nestes equipamentos.

MCGREAVY e STREET (1991) publicaram o primeiro trabalho computacional estudando os fenômenos de transferência de calor em reatores resfriados por serpentinas helicoidais por meio do método dos elementos finitos. Eles utilizaram um modelo assimétrico bidimensional que gera soluções para as três componentes de velocidade. O trabalho estudou fluidos Newtonianos e não-Newtonianos utilizando arranjos simples de agitadores. Este primeiro estudo apontou que o arranjo de serpentinas sugerido por OLDSHUE e GRETTON (1954) e, posteriormente, UHL (1966) limita consideravelmente o escoamento interno no tanque de mistura.

KARCZ e STREK (1995) estudaram o efeito dos parâmetros geométricos das chicanas no coeficiente de transferência de calor. Estes experimentos foram desenvolvidos em um tanque de mistura com jaquetas para três diferentes impelidores (*Rushton disc turbine, pitched-blade, e propeller*). Os autores ao contrário dos resultados obtidos por HAVAS *et al.* (1987) para sistemas com serpentinas helicoidais, encontraram que os parâmetros geométricos das chicanas possuem um significativo efeito no coeficiente de transferência de calor em tanques de mistura equipados com impelidores de alta velocidade.

PEDROSA e NUNHEZ (2003) estudaram um arranjo modificado de serpentinas helicoidais, proposto por STREET e MCGREAVY (1991), com o intuito de melhorar a circulação interna dentro do tanque, principalmente na região envolvida entre a serpentina e a parede do tanque. Seus resultados mostraram que pequenas mudanças, especialmente na forma de disposição da serpentina (sem anéis da serpentina na altura do impelidor), geram um ganho no desempenho da transferência de calor.

PERARASU *et al.* (2011) estudaram um tanque agitado com serpentinas usando dois tipos de impelidores (*propeller* e *disk turbine*) com variação da entrada de calor. Os autores encontraram que o efeito da entrada de calor no coeficiente de transferência de calor muda com o tipo de impelidor. A uma velocidade dada, o coeficiente de transferência de calor no impelidor tipo *disk turbine* aumenta com o aumento da entrada de calor, enquanto para o impelidor tipo *propeller* o coeficiente de transferência de calor aumenta até certo ponto e depois diminui. As correlações empíricas propostas pelos autores se ajustam aos dados experimentais em uma faixa de $\pm 15\%$ para os dois agitadores.

Capítulo 3

Reatores Tipo Tanque Agitado

Uma das principais operações unitárias utilizada na indústria refere-se ao processo de mistura, considerado como o movimento aleatório de duas ou mais fases inicialmente separadas. Quando dentro do sistema existe um movimento induzido de um material em forma determinada, geralmente circulatória, chama-se de processos de agitação; operação que por sua vez auxilia a realização de processos químicos e físicos de diferentes aplicações como mistura de líquidos, formação de dispersões, transferência de calor e uniformização de temperatura.

A eficiência do processo de agitação está relacionada ao tempo e gasto energético para atingir a mistura e, portanto, minimizar custos de investimento e operacionais, proporcionando assim rendimentos elevados. Segundo NAGATA (1975), os processos de agitação podem ser classificados em cinco tipos de aplicação: líquido-sólido, líquido-gás, líquidos imiscíveis, líquidos miscíveis e movimentação de fluido; os mais utilizados são aqueles que contêm líquidos de viscosidades baixas e moderadas.

Como os processos da agitação não são completamente abrangidos, diversos parâmetros devem ser considerados, sendo a fluidodinâmica e a geometria a chave para entender este tipo de processo, embora as propriedades dos fluidos possam influenciar o desempenho da operação.

3.1 Tanques de Mistura

O tanque agitado em sua forma mais simples consiste em um tanque cilíndrico, vertical, aberto ou fechado, ligado a um conjunto de um ou mais impelidores, motor e

chicanas. Quando há troca térmica são utilizadas serpentinas ou jaquetas térmicas (Figura 3.1). O desenho e otimização de um tanque agitado precisa da compreensão de todas as variáveis que possam afetar o desempenho desta unidade. Algumas dessas variáveis incluem propriedades geométricas do equipamento como o tamanho do tanque; tipo, número e geometria do impelidor; chicanas, distância entre o impelidor e o fundo do tanque (*Clearance*), entre outras.

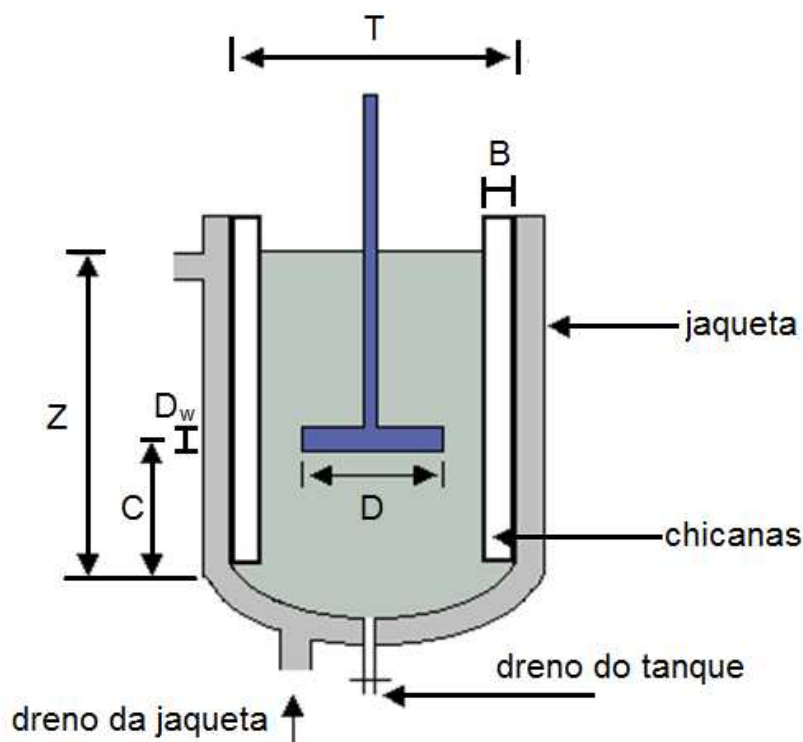


Figura 3.1: Esquema de um tanque de mistura convencional (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007)

As proporções e diâmetro dos tanques são variáveis que dependem da natureza da agitação, porém as dimensões dos internos estão relacionadas com a dimensão característica do tanque T (diâmetro do tanque). As principais relações geométricas padrão em tanques de mistura estão apresentadas na Tabela 3.1, em que D é o diâmetro do impelidor, Z altura do tanque, C a distância desde a posição do impelidor até o fundo do tanque, B a largura da chicana e D_w a altura da pá do impelidor. As relações geométricas padrão apresentadas podem variar de acordo com a aplicação e as características do fluido envolvido (HEMRAJANI e TATTERSON, 2004). Por outro lado existem diferentes configurações do fundo do tanque (abauladas, cônicas, planas, entre outras) que envolvem aspectos tais

como: resistência mecânica, influência no padrão de fluxo, limpeza e sanitariedade, sendo o fundo abaulado o mais empregado (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007).

Tabela 3.1: Relações geométricas padrão em tanques de mistura (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007)

Relação Geométrica	Valores
D/T	1/4 - 1/2
Z/T	1
C/T	1/6 - 1/2
B/T	1/10 - 1/12
D_w/D	1/4 - 1/6

3.2 Tipos de Impelidores

A agitação dentro do tanque é promovida por elementos de mistura denominados impelidores. A escolha do tipo de impelidor depende das características da mistura, propriedades físicas do sistema, e da eficiência desejada no processo. Geralmente, os impelidores são classificados segundo o regime de mistura (laminar ou turbulento).

Para regimes laminares são utilizados os impelidores tipo âncora (Figura 3.2a), que possuem uma forte componente da velocidade tangencial, ou impelidores de projeto mais complexo como o impelidor tipo helicoidal (Figura 3.2b) que além do tangencial, apresenta o componente axial da velocidade. O diâmetro desses impelidores é aproximadamente o diâmetro do tanque (T), fato que auxilia o aumento da transferência de quantidade de movimento que neste tipo de regime é caracteristicamente baixo. Além disso, pelo seu tamanho, esses impelidores podem atuar como raspadores e assim evitar o uso de chicanas (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007).

Geralmente no regime laminar se apresenta padrões de fluxo tangencial, em que as linhas de fluxo são circulares, usando-se impelidores que trabalham a altas viscosidades (5000 cp), com o intuito de impulsionar o líquido ao redor das paredes do tanque. Estes impelidores se caracterizam pelo alto consumo de potência e elevado torque e comumente são utilizados em aplicações como homogeneização de resinas, mistura de fluidos viscosos, e em dissolução de materiais sólidos em meios viscosos.

Já nos regimes turbulentos, em que se apresenta boa transferência de quantidade de movimento, os impelidores correspondem tipicamente de 1/4 a 1/2 do diâmetro do

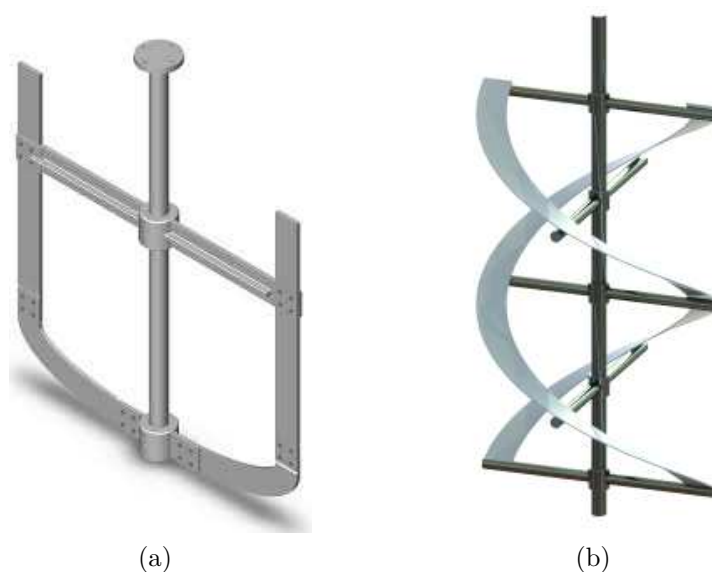


Figura 3.2: Impelidores utilizados em escoamento laminar. (a) Tipo âncora. (b) Tipo helicoidal (POST MIXING OPTIMIZATIONS AND SOLUTIONS, 2015)

tanque (TATTERSON, 1991). Neste regime os impelidores são reclassificados segundo o padrão de fluxo que se produz: axial ou radial como observado na Figura 3.3. A Tabela 3.2 apresenta as principais características e modelos de impelidores utilizados para cada um destes padrões. Embora exista grande variedades de impelidores, os mais empregados comercialmente para regime turbulento são: o impelidor naval (*Marine propeller*), de pás retas (FBT), de pás inclinadas (PBT) e tipo Rushton. Na Figura 3.4 podem ser vistos os desenhos típicos dos impelidores mais utilizados para o fluxo turbulento.

Por outro lado, as chicanas são dispositivos localizados dentro do tanque com o intuito de perturbar ou redirecionar o fluxo. Usualmente a largura de suas paredes corresponde a 10% do diâmetro do tanque, já no caso da presença de sólidos ou de dispositivos de troca térmica, são deslocadas a uma distância igual a um sexto da largura da chicana (COUPER *et al.*, 2005). Geralmente são utilizadas para minimizar a rotação sólida em misturas turbulentas (*fluid swirl*), e em evitar a entrada de ar no sistema causado pelo vórtice na superfície (PAUL *et al.*, 2004), além de ajudarem a melhorar a estabilidade do sistema (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007). Em ausência de chicanas se observa a presença de um fluxo tangencial gerado pela ação do impulsor.

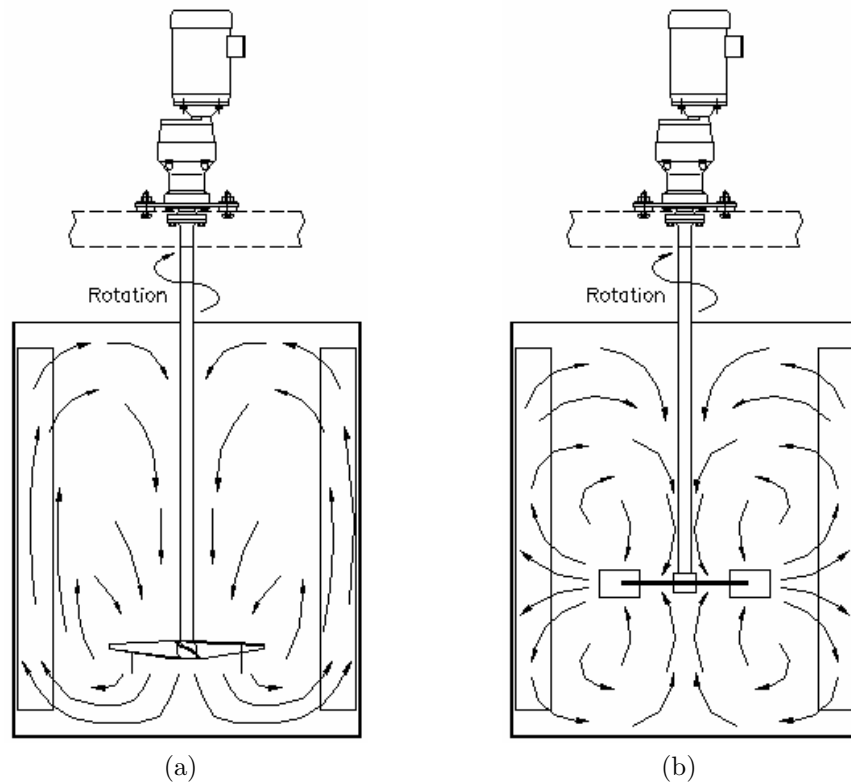


Figura 3.3: Padrões de fluxo em tanques de mistura. (a) Axial. (b) Radial (POST MIXING OPTIMIZATIONS AND SOLUTIONS, 2015)

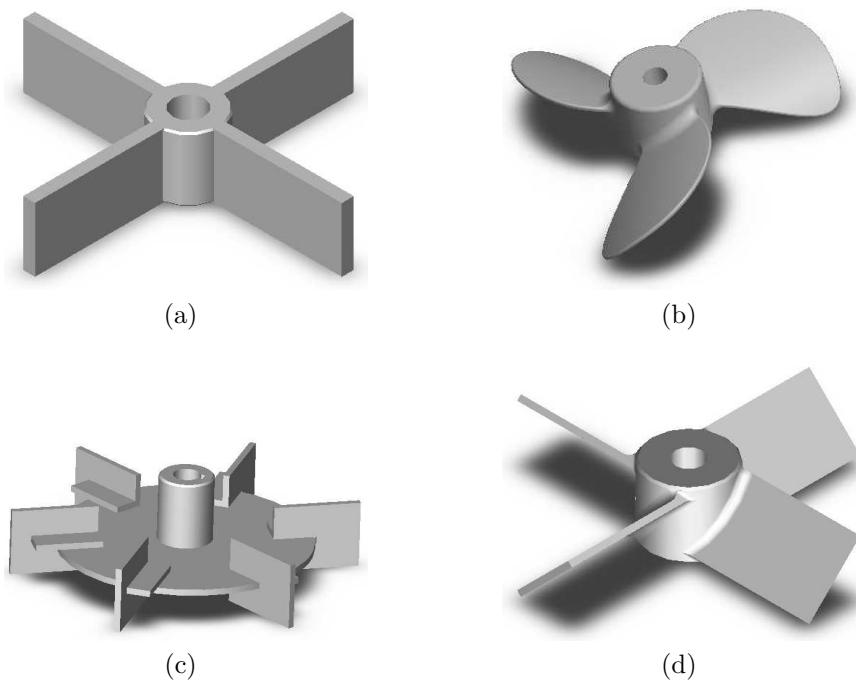


Figura 3.4: Impelidores mais utilizados em escoamentos turbulentos. (a) Tipo pás retas. (b) Tipo naval. (c) Tipo turbina. (d) Tipo pás inclinadas (POST MIXING OPTIMIZATIONS AND SOLUTIONS, 2015)

Tabela 3.2: Classificação dos impelidores segundo o padrão de fluxo

FLUXO RADIAL	FLUXO AXIAL
Este tipo de impelidores geram linhas de fluxo perpendiculares ao eixo do agitador. Como se observa na Figura 3.3b o líquido é impulsionado contra as paredes do tanque.	As linhas de fluxo produzidas são paralelas ao eixo do agitador, ou seja, a massa líquida é impulsionada contra o fundo do tanque (Figura 3.3a).
Características	
- Alto consumo de potência - Grande capacidade dispersiva - Agressivos ao produto	- Baixo consumo de potência - Grande abrangência pela distribuição geométrica do fluxo dentro do tanque - Baixa agressão ao produto do fluxo dentro do tanque
Aplicações	
- Dispersão de gases - Transferência de massa - Dispersão de material sólido	- Mistura de produtos líquidos - Sólidos em suspensão - Transferência de calor
Tipo de impelidor	
- Turbina de pás retas - Turbina de disco: Rushton ou Smith	- Hélice naval - Turbina de pás inclinadas - Turbina de alto rendimento

3.3 Transferência de Calor em Tanques Agitados

Na maioria das aplicações dos sistemas de tanques agitados é necessário adicionar ou remover calor com o intuito de manter a temperatura de operação requerida pelo sistema (HAAM *et al.*, 1992; HAVAS *et al.*, 1987; ISHIBASHI *et al.*, 1979). Quando estes tanques são utilizados para reações altamente exotérmicas, dispositivos externos (jaquetas) ou internos (serpentinhas) são empregados para a remoção de calor. O maior problema associado às serpentinhas helicoidais é que estas podem limitar o fluxo no interior do reator, pois as serpentinhas fornecem resistência à circulação do fluido. Quando a geração ou remoção de calor necessária é muito grande, dispositivos internos são usados para fornecer superfícies de transferência de calor adicional (juntamente com jaquetas), sendo comumente utilizadas serpentinhas helicoidais, de placa ou defletores (PAUL *et al.*, 2004).

A transferência de energia térmica nesses equipamentos é dada principalmente pela movimentação global do fluido fornecida pelo impelidor. Esse mecanismo, conhecido como transferência de calor por convecção forçada, ocorre entre o fluido em movimento

e uma superfície quando os dois se encontram a diferentes temperaturas. A transferência de calor por convecção pode-se apresentar em dois tipos de escoamentos: internos ou externos. A convecção em escoamentos internos refere-se quando um fluido é confinado por uma superfície, restringindo o desenvolvimento da camada limite, enquanto, no escoamento externo as camadas limite se desenvolvem livremente, sem restrições impostas por superfícies adjacentes. Consequentemente, sempre existirá uma região do escoamento externa à camada limite, em que os gradientes de velocidade e temperatura são desprezíveis (BERGMAN *et al.*, 2011).

Independentemente da natureza convectiva do processo de troca térmica, a taxa de transferência de calor é descrita pela lei do resfriamento de Newton, a qual estabelece que a taxa de perda de calor de um corpo é proporcional à diferença entre as temperaturas do corpo e seus arredores (Equação 3.1), em que T_s é a temperatura da superfície, T_∞ é a temperatura distante da superfície, A corresponde à área de troca térmica e h é o coeficiente local de transferência de calor por convecção.

$$Q = hA(T_s - T_\infty) \quad (3.1)$$

Este coeficiente de transferência de calor por convecção h depende da camada limite, que por sua vez é influenciada pela geometria da superfície, por propriedades termodinâmicas do fluido e pela mesma natureza do escoamento, sendo assim, um parâmetro chave no estudo da convecção. De tal modo, o problema se reduz aos diferentes procedimentos pelos quais h pode ser determinado. Consequentemente, a complexidade dos cálculos para sua obtenção faz com que o entendimento do fenômeno seja um desafio. Portanto, através dos últimos anos o cálculo da taxa de transferência de calor tem sido extensamente estudada apresentando-se na literatura numerosas correlações empíricas que permitem determinar o valor de h através de números adimensionais que agrupam as diferentes propriedades que influenciam o sistema.

3.3.1 Análise Dimensional

Aplicando técnicas como a análise dimensional, pretende-se interpretar o significado físico das expressões que determinam a transferência de calor dentro de um sistema. Utilizando termos com as mesmas dimensões, reduz-se o número de variáveis que influenciam a operação, obtendo quando correlacionados os parâmetros, o valor de h_0 . A análise

dimensional leva ao cálculo da transferência de calor por meio do Número adimensional de Nusselt, que na maioria dos trabalhos apresentados na literatura sobre transferência de calor em tanques agitados é função de outros grupos adimensionais tais como: Número de Reynolds, Número de Prandtl e Número de Froude que envolvem parâmetros geométricos, cinemáticos e propriedades do fluido, baseado em dados experimentais.

O teorema pi de Buckingham fornece uma expressão adimensional geral, composta por 16 termos adimensionais, para a relação entre o h_o e as variáveis mencionadas anteriormente, como mostrado na Equação 3.2 (SETH e STAHEL, 1969).

$$f\left(\frac{D^2N}{\mu}, \frac{DN^2}{g}, \frac{h_o d}{\kappa}, \frac{c\mu}{\kappa}, \frac{\mu}{\mu_s}, \frac{T}{D}, \frac{Z}{D}, \frac{C}{D}, \frac{S}{D}, \frac{D_b}{D}, \frac{D_w}{D}, \frac{B}{D}, \frac{N_o}{B_n}, \frac{N_o}{R}, \frac{P}{D}, \frac{D_i}{D}\right) = 0 \quad (3.2)$$

Os quatro primeiros termos da Equação 3.2 consideram as propriedades do fluido e grau de agitação, o quinto termo corresponde à relação entre as viscosidades do fluido afastada (μ) e próxima à parede do tanque (μ_s). Os termos $h_o d/\kappa$, P/D e D_i/D representam a geometria da serpentina e os termos de 6 até 14 consideram a geometria do tanque. A Equação 3.2 assume que a convecção natural é insignificante, o tanque possui um só impelidor localizado no centro do tanque e que este possui o fundo reto.

O vórtice como um efeito gravitacional também é comum em sistemas de mistura de líquidos, mas em casos em que a serpentina helicoidal e as chicanas minimizam sua formação, o Número adimensional de Froude (DN^2/g) pode ser omitido na Equação 3.2. Uma equação mais simplificada pode ser obtida restringindo-se para sistemas geometricamente similares. Portanto, os últimos 11 termos da equação podem ser omitidos nessa situação. A Equação 3.2 pode ser simplificada, como mostrado na seguinte expressão (Equação 3.3).

$$f(N_{Re}, N_{Nu}, N_{Pr}, N_{vis}) = 0 \quad (3.3)$$

Uma solução para esta equação é:

$$\frac{h_o d}{\kappa} = f_1\left(\frac{D^2 N \rho}{\mu}\right) f_2\left(\frac{c\mu}{\kappa}\right) f_3\left(\frac{\mu}{\mu_s}\right) \quad (3.4)$$

Uma forma na qual as funções f_1 , f_2 e f_3 dos números adimensionais apresentados

na equação anterior podem ser expressas pela seguinte expressão:

$$\frac{h_{od}}{\kappa} = K \left(\frac{D^2 N \rho}{\mu} \right)^a \left(\frac{c \mu}{\kappa} \right)^b \left(\frac{\mu}{\mu_s} \right)^c \quad (3.5)$$

Esta equação é limitada para tanques de mistura geometricamente similares ao equipamento utilizado no cálculo dos parâmetros da correlação, além de utilizar as mesmas características geométricas da serpentina e do impelidor. Portanto, podem ser adicionados mais parâmetros adimensionais com o intuito de ampliar a faixa de validade da Equação 3.5.

A seguir serão apresentados os números adimensionais mais relevantes na Equação 3.5 para a obtenção do coeficiente de transferência de calor por convecção.

3.3.1.1 Número de Reynolds (Re)

O número de Reynolds representa a relação entre as forças inerciais e viscosas atuantes no sistema, que para sistemas de tanque agitado é definida conforme a Equação 3.6.

$$Re = \frac{D^2 N \rho}{\mu} \quad (3.6)$$

Em que N e D representam a velocidade e diâmetro do impelidor respectivamente, ρ a massa específica e μ a viscosidade dinâmica do fluido.

3.3.1.2 Número de Prandtl (Pr)

O número de Prandtl expressa a relação entre a difusão de quantidade de movimento e a difusão térmica dentro do próprio fluido (Equação 3.7).

$$Pr = \frac{C_p \mu}{\kappa} = \frac{\nu}{\alpha} \quad (3.7)$$

Em que C_p é o calor específico, κ a condutividade térmica do fluido, ν a viscosidade cinemática e α a difusividade térmica. O número de Prandtl é utilizado como medida de eficiência das transferências de quantidade de movimento e de calor nas camadas limites hidrodinâmica e térmica, respectivamente. Desta forma, em casos de transferência de calor, permite controlar a espessura relativa das camadas limite térmica e de momento. Por exemplo, um número Pr pequeno representa o fenômeno em que o calor difunde-se mais facilmente comparado com a velocidade.

3.3.1.3 Número de Nusselt (Nu)

O Número de Nusselt é uma grandeza que fisicamente representa a razão entre a transferência de calor de um fluido por convecção e condução. Quando o fluido está completamente em repouso, o Número de Nusselt é igual a zero, tendo em vista que o sistema não apresenta transferência de calor por convecção, apenas condução. Portanto, quanto maior for este número mais transferência de calor entre as superfícies esta sendo dada por convecção do que por condução do fluido. Dependendo do dispositivo de troca térmica existem diferentes expressões para calcular o Número de Nusselt que para tanques de mistura com serpentinas helicoidais pode ser expresso pela Equação 3.8.

$$\text{Nu} = \frac{h_o d}{\kappa} \quad (3.8)$$

Capítulo 4

Modelagem Matemática

A modelagem matemática é uma representação da realidade por meio de equações com o objetivo de interpretar e compreender os mais diversos fenômenos físicos e químicos. O fenômeno físico envolvido no movimento do fluido no processo de agitação e mistura foi modelado mediante as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia. A seguir serão apresentadas as equações que governam a movimentação de um fluido em qualquer escoamento.

4.1 Equações de transporte

A conservação de massa, também conhecida por equação da continuidade para um sistema genérico de coordenadas é dada pela Equação 4.1.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (4.1)$$

em que ρ representa a massa específica e $\vec{v}$ o vetor velocidade. A equação da continuidade em coordenadas cartesianas para ρ constante, pode ser escrita de acordo com a Equação 4.2.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \left[\frac{\partial v_i}{\partial x_i} + \frac{\partial v_j}{\partial x_j} + \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right] = 0 \quad (4.2)$$

As equações da quantidade de movimento indicam a conservação do momento nas três componentes espaciais. Estas são conhecidas como equações de Navier-Stokes e podem ser representadas para cada uma das direções pela seguinte equação:

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \vec{\mathbf{v}}) \right] = -\nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \cdot \vec{\mathbf{g}} + \sum S \quad (4.3)$$

em que p e $\vec{\mathbf{g}}$ são a pressão do fluido e a aceleração da gravidade, respectivamente. S é o termo fonte e $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor tensão. O lado esquerdo da Equação 4.3 leva em consideração os efeitos convectivos e temporais e o lado direito os termos de gradiente de pressão, os termos de difusão de momento, devido às forças viscosas, a força gravitacional e o termo fonte que representa as demais forças externas que interagem sobre o fluido. Na equação de transporte de quantidade de movimento, deve-se acrescentar o termo fonte responsável pelas forças centrífuga e de Coriolis, quando é considerado um escoamento sob um marco de referência rotativo.

$$S = S_{\text{coriolis}} + S_{\text{centrifuga}} \quad (4.4)$$

$$S_{\text{coriolis}} = -2\rho \vec{\omega} \times \vec{\mathbf{v}} \quad (4.5)$$

$$S_{\text{centrifuga}} = \rho \vec{\omega}^2 \times \vec{\mathbf{r}} \quad (4.6)$$

em que, $\vec{\omega}$ é a velocidade angular e $\vec{\mathbf{r}}$ é o vetor localização. A Equação 4.3 pode ser representada em coordenadas generalizadas na direção x como segue:

$$\rho \left[\frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial (v_i v_j)}{\partial x_j} \right] = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \vec{\mathbf{v}} \right) \right] + \rho g_i + \sum F_i \quad (4.7)$$

em que μ é a viscosidade dinâmica do fluido.

A transferência de calor é aproximada numericamente por meio da equação de conservação de energia. O calor pode ser gerado ou extraído pelo uso de serpentinas helicoidais imersas no fluido e camisas externas ou pela liberação ou absorção de calor durante as reações químicas. A conservação de energia (expresso em termos de entalpia total) é dada pela seguinte equação:

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial [v_i (\rho E + p)]}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[k_{ef} \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{j'} h_{j'} J_{j',i} + v_j (\tau_{ij})_{ef} \right] + S_{ji} \quad (4.8)$$

O primeiro termo do lado esquerdo da equação é o termo temporal da variação de energia e o segundo termo é um termo convectivo de transporte de energia. O primeiro termo do lado direito da equação representa a transferência de calor difusiva e o segundo termo representa a transferência de calor devido a difusão das espécies químicas. O terceiro termo representa as perdas de calor devido à dissipação viscosa e o quarto termo é o termo fonte em que podem ser consideradas as fontes de calor devidas às reações químicas, radiação entre outras. Na Equação 4.8, a energia E é relacionada com a entalpia h . A seguinte relação envolve a pressão e a magnitude da velocidade:

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \quad (4.9)$$

Quando o escoamento é incompressível com espécies químicas sendo misturadas, a entalpia é definida em termos de frações mássicas $m_{j'}$ e entalpias $h_{j'}$ de cada espécie química individual.

$$h = \sum_{j'} m_{j'} h_{j'} + \frac{p}{\rho} \quad (4.10)$$

A entalpia de cada espécie j' é dada pela seguinte expressão como uma função dependente da temperatura do calor específico da espécie.

$$h_{j'} = \int_{T_{ref}}^T C_{p,j'} dT \quad (4.11)$$

4.2 Turbulência

O número adimensional usado em mecânica de fluidos para caracterizar o movimento de um fluido é o Número de Reynolds, o qual, para o caso de tanques de mistura, foi definido pela Equação 3.6. O escoamento pode ser classificado em laminar quando o número adimensional de Reynolds possui valores pequenos (menores que 10) e turbulento

para valores maiores que 10.000. A transição entre o regime laminar e turbulento (zona de transição) ocorre ao longo de um intervalo entre 10 e 10.000.

Os campos de fluxos que ocorrem num tanque agitado sob condições de fluxo turbulento são bastante complexos, pelo fato de a turbulência ser rotacional e tridimensional com altos níveis de flutuação de momento angular ou velocidade (TATTERSON, 1991). Para obter-se um processo de mistura eficiente é necessário um elevado grau de turbulência, definindo-se esta com movimentos caóticos que geram aumento significativo na transferência de massa, momento e energia, devido às flutuações das quantidades de transporte no espaço e no tempo.

As equações de continuidade e movimento poderiam ser aplicadas diretamente no cálculo dos perfis de velocidade em regime turbulento, caso o cálculo seja levado ao nível da escala de turbilhão e de tempo envolvidos no escoamento (BIRD *et al.*, 2007). Neste tipo de abordagem, conhecida como simulação numérica direta (*Direct Numerical Simulation* – DNS), não seria necessário arranjar as equações de continuidade e movimento para adicionar novos termos, mas seria preciso um poder computacional de várias ordens de magnitude maior do que disponível no momento (ANSYS, 2011).

Para que o modelo proporcione resultados significativos, os efeitos turbulentos necessitam ser incorporados dentro do modelo CFD mediante a utilização de um modelo de turbulência. Estes modelos têm sido desenvolvidos para considerar os efeitos da turbulência, sem recorrer ao uso de malhas extremadamente finas e simulação numérica direta (DNS) que possuem restrições na maioria dos casos devido ao limitado poder computacional.

Conforme TATTERSON (1991), a literatura sobre os campos de fluxos em tanques agitados pode ser dividida em três categorias: estudos com parâmetros globais, estudos com turbulência estatística e estudos com turbulência estruturada. A turbulência estatística foi primeiramente sugerida por Osborne Reynolds, que sugere utilizar quantidades médias no tempo em vez de usar valores instantâneos. Quando é incluída a turbulência na equação de Navier-Stokes a quantidade transportada é considerada como a soma de uma componente no equilíbrio (média) e uma flutuação devida à turbulência (Equação 4.12).

$$v_i = \bar{v}_i + v'_i \quad (4.12)$$

Após se integrar na média para um tempo muito maior do que as flutuações turbulentas como descrito na Equação 4.13, a soma das flutuações será zero e sobrarão apenas os valores médios, o que não acontece com aqueles que correspondem ao produto de termos flutuantes. Os termos restantes são semelhantes à equação de conservação da quantidade de movimento (Equação 4.7) e baseando-se no conceito de tempo médio obtém-se a Equação 4.14. Esta abordagem pode ser usada para qualquer propriedade de transporte como a pressão e a temperatura.

$$\bar{v}_z = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} v_z \, dt \quad (4.13)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{v}_i \bar{v}_j)}{\partial x_j} \right] = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \bar{\mathbf{v}} \right) \right] - \frac{\partial (\rho \bar{v}_i \bar{v}_j)}{\partial x_j} + \rho g_i + \sum F_i \quad (4.14)$$

Os novos termos $\overline{v'_i v'_j}$ são os tensores de Reynolds que são obtidos utilizando expressões aproximadas a partir de equações semi-empíricas, conhecidas como modelos de turbulência RANS (*Reynolds-Average Navier-Stokes*).

4.2.1 Hipótese de Boussinesq

A hipótese de Boussinesq assume que os tensores de Reynolds podem ser expressos em termos de gradientes de velocidade média; portanto postulando que o tensor turbulento possa ser escrito de forma similar ao tensor de um fluido Newtoniano, se obtém a seguinte equação:

$$\overline{\rho v'_i v'_j} = \mu_t \left[\nabla \bar{\mathbf{v}} + (\nabla \bar{\mathbf{v}})^T - \frac{2}{3} (\rho k + \delta_{ij} \nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}) \right] \quad (4.15)$$

em que a nova constante μ_t é a viscosidade turbulenta. Diferente da viscosidade molecular (laminar), ela é uma propriedade do escoamento e não do fluido. Modelos deste tipo são conhecidos como modelos de viscosidade turbulenta ou EVM's (*eddy viscosity models*). Uma nova viscosidade chamada de viscosidade efetiva é obtida ao substituir a Equação 4.15 na Equação 4.14:

$$\mu_{\text{ef}} = \mu + \mu_t \quad (4.16)$$

$$\left[\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{v}_i \bar{v}_j)}{\partial x_j} \right] = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) \right] \quad (4.17)$$

Esta hipótese também introduz a variável energia cinética turbulenta k e pode ser definida em termos das velocidades flutuantes nas três dimensões, como segue:

$$k = \frac{1}{2} (\bar{u}^2 + \bar{v}^2 + \bar{w}^2) \quad (4.18)$$

Os modelos de turbulência foram desenvolvidos para determinar os tensores de Reynolds estimando os valores da viscosidade turbulenta (modelos de zero, uma e duas equações). No entanto, existem modelos de turbulência que não dependem da viscosidade turbulenta como os modelos das tensões de Reynolds e os baseados em relações algébricas. Em ambos os grupos é necessário obter equações de transporte adicionais para o cálculo da viscosidade turbulenta ou para o fechamento alternativo das equações médias de Reynolds.

4.2.2 Modelos de Turbulência

Segundo JOSHI *et al.* (2011b) as abordagens para a modelagem da turbulência em CFD podem ser classificadas como: Simulação Numérica Direta (DNS), Simulação de Grande Vórtice (LES) e Navier-Stokes com Média de Reynolds (RANS). As abordagens DNS e LES requerem um enorme poder computacional limitando seu uso a equipamentos de escala reduzida e números de Reynolds baixos. A seguir, será apresentado o modelo de turbulência RANS de duas equações SST (*Shear Stress Transport*), o qual é amplamente utilizado por ter uma relação favorável entre precisão e custo computacional. Além disso, será feita uma breve descrição dos modelos $k - \epsilon$ e $k - \omega$, nos quais é baseado o modelo SST.

4.2.2.1 Modelo de turbulência $k - \epsilon$

Este é um dos modelos mais importantes e utilizados em tanques de mistura para modelar o efeito da turbulência, devido à alta estabilidade, robustez numérica e boa capacidade de predição em escoamentos desenvolvidos a altos números de Reynolds. O modelo é semiempírico e utiliza duas equações para determinar os tensores de Reynolds.

No modelo $k - \epsilon$, a viscosidade turbulenta μ_t é definida como uma função da energia cinética turbulenta k e de sua taxa de dissipação de turbulência ϵ . A viscosidade turbulenta é dada pela Equação 4.19, em que C_μ é uma constante determinada empiricamente.

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\epsilon} \quad (4.19)$$

As equações de transporte a serem determinadas para a energia cinética turbulenta k e a dissipação da energia cinética turbulenta ϵ estão dadas por:

$$\frac{\partial (\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \epsilon \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial (\rho \epsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \epsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + \frac{\epsilon}{k} C_{\epsilon 1} P_k - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} \quad (4.21)$$

em que $C_{\epsilon 1}$, $C_{\epsilon 2}$, σ_k , e σ_ϵ são constantes determinadas empiricamente e o termo P_k representa a produção de turbulência devido às forças viscosas.

É importante enfatizar que no modelo $k - \epsilon$ padrão os efeitos da viscosidade molecular (efeitos de escoamento a baixos números de Reynolds) são desprezíveis. Quando os efeitos de escoamento a baixos números de Reynolds devem ser levados em conta (escoamento próximo da parede) é necessário inserir funções amortecedoras no modelo. Nos códigos comerciais utilizam-se as chamadas funções de parede em conjunto com o modelo.

4.2.2.2 Modelo de turbulência $k - \omega$

O modelo $k - \omega$ proposto inicialmente por WILCOX (1988) possui uma vantagem na formulação no tratamento do escoamento próximo à parede (baixos números de Reynolds). O tratamento automático de parede desenvolvido neste modelo facilita a criação de malhas na parede, sendo menos rigorosa em comparação com outros modelos de turbulência. Este modelo baseia-se na utilização da energia cinética turbulenta e da taxa de dissipação específica como parâmetros de definição para o cálculo da viscosidade turbulenta.

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \quad (4.22)$$

A formulação do modelo $k - \omega$ soluciona duas equações de transporte, uma para a energia cinética turbulenta k Equação 4.23, e a outra para a taxa de dissipação específica ω Equação 4.24. O tensor tensão é calculado a partir do conceito de viscosidade de turbilhão, a densidade ρ e o vetor velocidade $\mathbf{v}$ são tratados como quantidades conhecidas retiradas das equações de Navier-Stokes. As constantes β' , α , β , σ_k e σ_ω são determinadas empiricamente e o termo P_k representa a produção de turbulência devido às forças viscosas.

$$\frac{\partial (\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \beta' \rho k \omega \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial (\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \omega) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega \right] + \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta \rho \omega^2 \quad (4.24)$$

4.2.2.3 Modelo de turbulência SST (*Shear Stress Transport*)

Como foi citado anteriormente, um dos principais problemas no modelo de turbulência de duas equações $k - \epsilon$ é o cálculo da camada limite, com uma estimativa errada no cálculo do local e a quantidade de fluxo separado. O modelo $k - \omega$ tem uma precisão muito maior quando comparado com o modelo $k - \epsilon$ no cálculo na camada limite, mas possui uma imprecisão devido a forte sensibilidade que apresenta a Equação- ω a valores de ω no escoamento livre fora da camada limite.

Para solucionar estes problemas, o modelo de turbulência SST foi desenvolvido com o intuito de obter melhores predições em casos em que o cálculo da camada limite falhe quando o modelo $k - \epsilon$ for utilizado. Este modelo de turbulência foi proposto por MENTER (1993), o qual utiliza o equacionamento do modelo $k - \epsilon$ na região de livre escoamento (onde as velocidades são altas) e $k - \omega$ na região próxima à parede (onde as velocidades são baixas) onde os modelos baseados na dissipação turbulenta ϵ apresentam falhas.

Funções de combinação (*Blend Function*) são utilizadas no modelo SST para que possa usar qualquer modelo, dependendo das condições do escoamento e garantindo uma

transição suave entre os modelos $k - \epsilon$ e $k - \omega$. Após transformar o modelo $k - \epsilon$ para uma formulação de $k - \omega$, este é multiplicado por uma função de combinação $1 - F_1$, enquanto o modelo $k - \omega$ é multiplicado por uma função F_1 . A função de combinação F_1 toma valor de 1 próximo da superfície da parede e diminui até 0 fora da camada limite, por tanto na borda e fora da camada limite o modelo $k - \epsilon$ é utilizado.

O modelo SST é dado pelas seguintes expressões:

$$\frac{\partial (\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v k) = \nabla \cdot [(\mu + \sigma_k \mu_t) \nabla k] + P_k - \beta^* \rho k \omega \quad (4.25)$$

A equação da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta ω , no modelo SST é dada pela expressão:

$$\frac{\partial (\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \omega) = \alpha \rho S^2 - \beta \rho \omega^2 + \nabla \cdot [(\mu + \sigma_\omega \mu_t) \nabla \omega] + 2(1 - F_1) \rho \sigma_{\omega^2} \frac{1}{\omega} \nabla k \nabla \omega \quad (4.26)$$

em que a função de combinação F_1 é definido como:

$$F_1 = \tanh \left\{ \left\{ \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y'}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho \sigma_{\omega^2} k}{CD_{k\omega} y^2} \right] \right\}^4 \right\} \quad (4.27)$$

em que $CD_{k\omega}$ é representado pela Equação 4.28, y é a distância mais próxima à parede e ν é a viscosidade cinemática.

$$CD_{k\omega} = \max \left(2\rho \sigma_{\omega^2} \frac{1}{\omega} \nabla k \nabla \omega, 1 \times 10^{-10} \right) \quad (4.28)$$

Em escoamentos em superfícies lisas ou cisalhamento livre, a formulação da viscosidade turbulenta foi limitada como se mostra na Equação 4.29. Esta limitação foi feita devido ao modelo apresentar sobre predições da viscosidade turbulenta.

$$\nu_t = \frac{\alpha_1 k}{\max(\alpha_1 \omega, SF_2)} \quad (4.29)$$

Sendo S a medida invariante da taxa de deformação e F_2 é a segunda função de combinação definida por:

$$F_2 = \tanh \left[\left[\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta^* \omega y'}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right) \right]^2 \right] \quad (4.30)$$

Todas as constantes são calculadas por uma combinação entre as constantes correspondentes do modelo $k - \epsilon$ e modelo $k - \omega$ como mostradas na Equação 4.31 e as constantes para o modelo SST são apresentadas na Tabela 4.1:

$$\alpha = \alpha_1 F + \alpha_2 (1 - F) \quad (4.31)$$

Tabela 4.1: Valores das constantes do Modelo SST (MENTER, 1993)

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

4.3 Camada Limite

Em escoamentos externos com alto Número de Reynolds, pode ser observado que os efeitos da viscosidade sobre as quantidades de transporte estão principalmente confinados em uma camada delgada do fluido (camada limite) próxima da superfície, o que fornece uma redução das flutuações da velocidade próxima ao corpo. Na região fora da camada limite o efeito da viscosidade é desprezível, porém a turbulência aumenta rapidamente por conta da energia cinética turbulenta gerando grandes gradientes na velocidade média devido ao transporte vigoroso de quantidade de movimento.

O conceito de camada limite concebido em 1904 por Prandtl define que o escoamento a altos números de Reynolds pode ser dividido em quatro regiões, conforme a Figura 4.1. Uma região muito fina próxima à parede (camada limite), chamada de subcamada viscosa, na qual o escoamento é laminar e a viscosidade molecular é muito importante na transferência de calor e movimento. Ao lado da subcamada viscosa encontra-se a camada amortecedora, na qual os efeitos turbulentos estão se tornando significativos, mas o escoamento ainda é dominado pelos efeitos viscosos. Acima da camada amortecedora está a camada de superposição ou transição (também chamada de subcamada inercial), na qual os efeitos turbulentos são mais significativos, mas ainda não são dominantes. Finalmente acima da camada de superposição encontrasse a região de escoamento potencial

(camada turbulenta) onde o fluido se comporta como um fluido não viscoso e as equações de transporte são dominadas pelos efeitos de turbulência (CENGEL e CIMBALA, 2006).

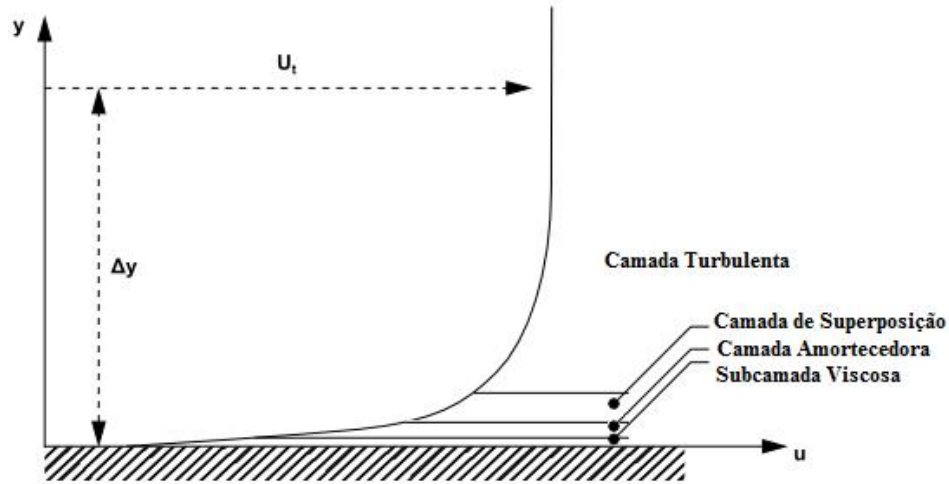


Figura 4.1: Esquema de camadas na região próxima à superfície (adaptado de ANSYS, Inc. 2011)

A camada fina próxima à parede tem papel dominante nas características do escoamento por conta dos grandes gradientes de velocidade que ela envolve, porém, a modelagem desses fenômenos dentro da simulação deve representar muito bem o escoamento nas regiões próximas à parede para obter resultados mais confiáveis. Na subcamada viscosa o perfil de velocidade permanece quase constante em $dv/dt = v/y$, e a tensão de cisalhamento da parede pode ser expressa como:

$$\tau_w = \mu \frac{u}{y} = \rho \nu \frac{u}{y} \quad (4.32)$$

em que y é a distância da parede. A quantidade τ_w/ρ é frequentemente encontrada na análise dos perfis de velocidade turbulenta, tendo sua raiz quadrada dimensões de velocidade. Esta velocidade fictícia é chamada de velocidade de atrito que substituída na Equação 4.32, o perfil de velocidade na subcamada viscosa pode ser dado adimensionalmente como segue:

$$\frac{u}{u_*} = \frac{yu_*}{\nu} \quad (4.33)$$

Esta equação é conhecida como a Lei da Parede. Assim, a espessura da subcamada viscosa é de aproximadamente:

$$y = \delta_{\text{subcam}} = \frac{5\nu}{u_*} = \frac{25\nu}{u_\delta} \quad (4.34)$$

em que u_δ é a velocidade de escoamento na borda da subcamada viscosa. Pode-se concluir que a espessura da subcamada viscosa é proporcional à viscosidade cinemática e inversamente proporcional a velocidade de escoamento média, ou seja, esta espessura diminui com o aumento da velocidade (aumento do numero de Reynolds). Na análise da camada limite é necessário trabalhar com a distância e a velocidade adimensional definidas como:

$$y^+ = \frac{\rho \Delta y u_*}{\mu} \quad (4.35)$$

$$u^+ = \frac{u}{u_*} \quad (4.36)$$

Assim, a Lei da Parede Equação 4.33 torna-se simplesmente:

$$y^+ = u^+ \quad (4.37)$$

Pode ser observado que a velocidade de atrito u_* é usada para adimensionalizar tanto y quanto u , e que y^+ se parece com a expressão do número de Reynolds. Na Figura 4.2 é apresentada uma curva de dados experimentais da velocidade u^+ em relação ao logaritmo da distancia da parede y^+ . Nesta figura, observa-se na camada de superposição que os dados experimentais de velocidade se alinham em uma linha reta confirmando que a velocidade na camada é proporcional ao logaritmo da distância, e o perfil de velocidade pode ser expresso por:

$$\frac{u}{u_*} = \frac{1}{K} \ln \frac{\rho \Delta y u_*}{\mu} + B \quad (4.38)$$

em que K e B são constantes, cujos valores são determinados empiricamente em torno de 0,40 e 0,50, respectivamente.

Para modelar a influência da parede através do escoamento do fluido o software ANSYS CFX 14.0 possui duas abordagens chamadas de abordagem de parede próxima

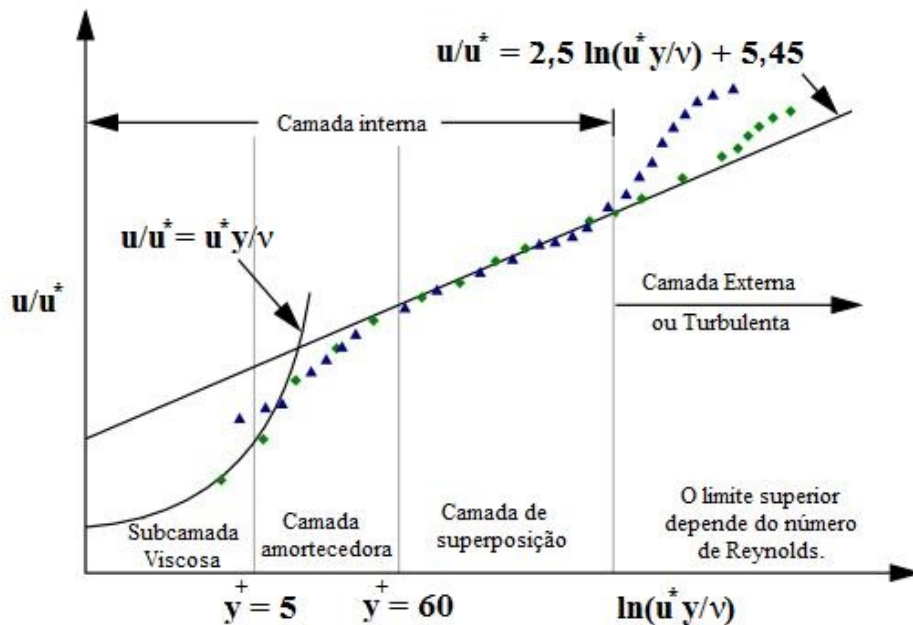


Figura 4.2: Subdivisões da região próxima à parede (adaptado de ANSYS, Inc. 2011)

(*Near-Wall Modelling*) e função de parede (*Wall Function*). A seguir será apresentada uma breve explicação das duas abordagens usadas no simulador comercial.

4.3.1 Abordagem próxima à parede (*Near-Wall Modelling*)

Nesta abordagem, os modelos de turbulência devem ser modificados para permitir os efeitos viscosos na região próxima à parede, na condição de não escorregamento. Este método, conhecido como formulação de baixo número de Reynolds, consegue delinear diretamente o perfil da camada limite por meio de escalas muito pequenas de comprimento de malha na direção normal à parede (camadas do *inflation* muito finas).

Os modelos de turbulência baseados nas equações de frequência turbulenta ω (SST, $k - \omega$) são adequados para o uso do método de baixo número de Reynolds. Cabe ressaltar, que este número de Reynolds se fundamenta na viscosidade turbulenta, o qual apresenta valores baixos em comparação com o número de Reynolds do dispositivo. A desvantagem desta abordagem é o alto esforço computacional envolvido, devido às malhas muito finas na zona próxima à parede (grande número de nós).

Para reduzir os requisitos de resolução, um tratamento automático próximo à parede foi desenvolvido pela ANSYS CFX, que permite uma mudança gradual entre as

funções de parede e a formulação de baixo número de Reynolds sem perda de precisão, quando a malha é refinada. Uma das deficiências conhecidas do modelo de turbulência $k-\epsilon$ é a sua limitação para lidar com baixos números de Reynolds turbulento nos cálculos numéricos.

Funções de amortecimento complexas podem ser adicionadas ao modelo $k-\epsilon$, bem como o requisito de resolução com malhas muito refinadas próximo da parede ($y^+ < 0,2$) em uma tentativa de simular escoamentos com baixo número de Reynolds turbulento. Esta abordagem frequentemente conduz a instabilidade numérica e por isso é recomendável usar o modelo $k-\omega$, tornando-o mais adequado do que o modelo $k-\epsilon$ para escoamentos com um requerimento alto de resolução próximo à parede (por exemplo, transferência de calor elevada na parede).

No entanto, a implementação da formulação de baixo número de Reynolds exigiria também um refino da malha próxima à parede de, pelo menos $y^+ < 2$. Esta condição não pode ser garantida na maioria das aplicações em todas as paredes do sistema. Por este motivo, o tratamento nomeado anteriormente foi desenvolvido (*Automatic Near-Wall Treatment*) para permitir uma transição suave nos modelos nas equações de frequência turbulenta ω .

Esta condição de contorno próximo à parede é usado por *default* no software ANSYS CFX 14.0 para todos os modelos de turbulência baseados nas equações- ω ($k-\epsilon$, SST, ϵ -Reynolds Stress). Para aproveitar as vantagens da redução dos erros que oferece a mudança automática para a formulação de baixo número de Reynolds próxima à parede, a camada limite deve ser resolvida usando no mínimo 10 nós quando são utilizados estes modelos.

4.3.2 Função de Parede (*Wall Function*)

As funções de parede são as mais usadas para levar em conta os efeitos de parede. No software ANSYS CFX 14.0, as funções de parede são usadas para todos os modelos de turbulência baseados na taxa de dissipação turbulenta ϵ . O método usa uma função semiempírica que impõe condições adequadas próxima à parede, sem resolver a camada limite, o que leva a uma redução significativa no custo associado ao tempo computacional. A vantagem principal deste método é que altos gradientes de cisalhamento na região

próxima à parede podem ser modelados com malhas relativamente grossas dando origem a reduções consideráveis no tempo de simulação. Além disso, o uso da função de parede evita alterar o modelo de turbulência para levar em conta os efeitos viscosos pela presença da parede.

A formulação empírica na abordagem de função de parede liga as condições da parede com variáveis dependentes dos nós da malha que estejam próxima à parede, assumindo que eles encontram-se numa região totalmente turbulenta da camada limite. Porém uma aproximação numérica foi proposta assumindo um perfil logarítmico na distribuição das velocidades nessa região próxima à parede, quando não se tiver interesse nos detalhes da camada limite. Na Figura 4.3 pode-se observar graficamente as abordagens utilizadas no software para o tratamento da parede.

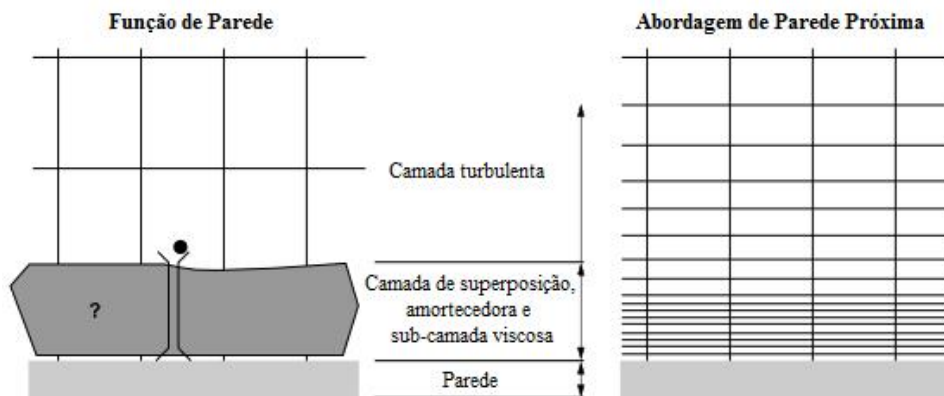


Figura 4.3: Abordagens para o tratamento de parede (adaptado de ANSYS, Inc. 2011)

Os parâmetros levados em conta na geração da malha próxima à superfície são o espaçamento (Equação 4.39) e o número de nós dentro da camada limite (Equação 3.39). Em que Re_L refere-se ao número de Reynolds baseado no comprimento característico, que em tanques de mistura é o diâmetro do impelidor e q a taxa de crescimento espacial da malha. O manual de ANSYS CFX 14.0 sugere utilizar valores mínimos de nós dentro da camada limite entre 10 e 15 com o propósito de garantir que os modelos de turbulência trabalhem adequadamente no cálculo do escoamento próximo à superfície da parede.

$$\Delta y = Ly^+ \sqrt{74} Re_L^{-13/14} \quad (4.39)$$

$$\eta = round \left[\frac{\ln \left[\frac{0,035 L Re_L^{-1/7} (q-1)}{\Delta y} + 1 \right]}{\ln(q)} \right] \quad (4.40)$$

Capítulo 5

Metodologia

Neste capítulo são apresentadas de forma sucinta as etapas fundamentais da metodologia em toda simulação CFD, a qual está resumida no diagrama de fluxo apresentado na Figura 5.1.

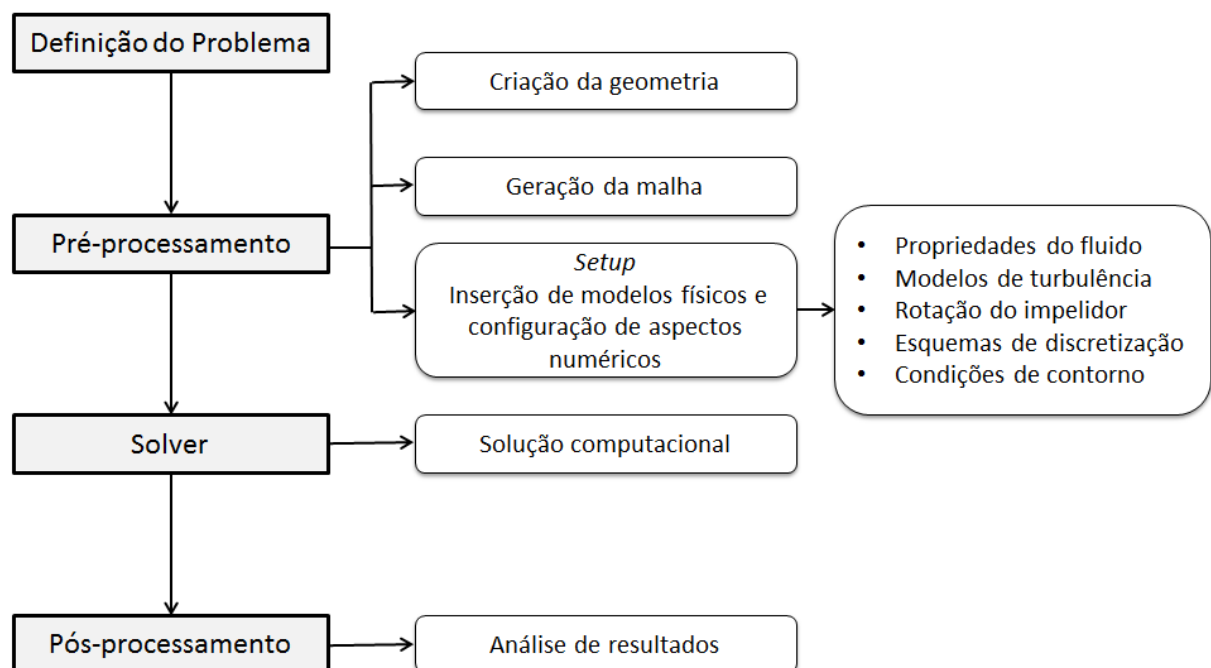


Figura 5.1: Fluxograma da metodologia CFD (adaptado de ANSYS, Inc. 2007)

A primeira etapa consiste em definir o problema por meio da identificação do domínio e pela definição dos objetivos a serem atingidos. Posteriormente é feito um pré-processamento que consiste em gerar as respectivas geometrias, a discretização dos domínios (geração da malha) e a aplicação dos modelos e condições de contorno apropriadas ao fenômeno. A terceira etapa consiste na solução numérica do modelo computacional (solver) seguido por um Pós-processamento para análise dos resultados obtidos.

5.1 Identificação do problema

Neste trabalho, o objetivo da análise CFD consistirá em desenvolver um modelo tridimensional de uma configuração geométrica de tanque de mistura com serpentinas helicoidais, com o intuito de obter, por meio de simulação, uma correlação do Número de Nusselt que represente a troca térmica do dispositivo. Posteriormente será analisada a influência da posição das serpentinas do reator em relação ao escoamento do fluido e à distribuição da temperatura em regime turbulento.

A configuração geométrica do reator consiste de um tanque cilíndrico de fundo reto com 4 chicanas localizadas perpendicularmente à parede do tanque e equipado com um impelidor tipo Rushton de seis pás (*Six-blade Rushton turbine*). Um conjunto de serpentinas distribuídas ao longo de seu comprimento será simulada, como realizado experimentalmente por OLDSHUE e GRETTON (1954) a fim de validar o modelo. Em seguida, uma nova configuração (sem presença de serpentinas na altura das pás do impelidor) na serpentina será simulada (STREET e MCGREAVY, 1991), com o intuito de comparar a transferência de calor e o escoamento global dentro do tanque.

O dimensionamento do tanque agitado com serpentinas helicoidais foi baseado nas dimensões do equipamento usado no trabalho experimental de OLDSHUE e GRETTON (1954). Na Figura 5.2 é apresentado o equipamento experimental utilizado nas simulações. Para uma boa reprodução da correlação do Número de Nusselt por eles obtidas, os seguintes parâmetros geométricos serão simulados:

Configuração do tanque

O diâmetro do tanque é de 48 in, em uma batelada quadrada (ou seja, a altura do líquido é também de 48 in). O tanque é dotado de 4 chicanas e foram usados dois diâmetros de tubo da serpentina, um de $7/8$ in (cobre) com espaçamento de tubo de duas vezes o diâmetro ($7/4$ in) e o outro de $7/4$ in (aço inoxidável) com espaçamento de duas vezes o seu diâmetro ($7/2$ in).

Impelidores Rushton

Os impelidores usados foram do tipo Rushton *turbine* (Figura 5.3) com diâmetro (D) de 12 in, 16 in, 20 in, 24 in e 28 in. Os impelidores foram situados a uma distância do fundo do tanque de 16 in.

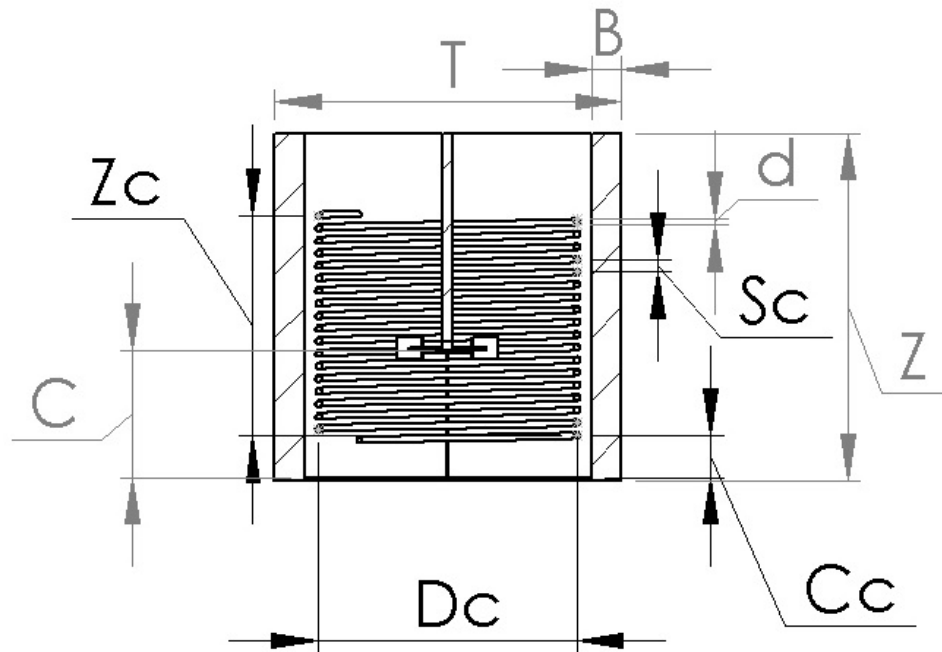


Figura 5.2: Geometria usada no trabalho experimental de OLDSHUE e GRETTON (1954)

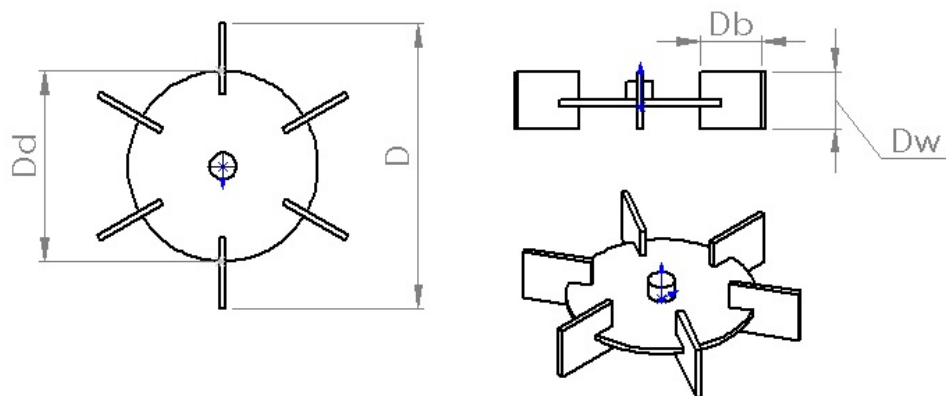


Figura 5.3: Impelidor tipo Rushton de seis pás

Regime de escoamento

Números de Reynolds na faixa de $4,0 \times 10^2$ a $1,5 \times 10^6$ foram estudados.

Dimensões das serpentinas helicoidais

As dimensões das serpentinas utilizadas no trabalho experimental e que serão estudadas são apresentadas na Tabela 5.1 (OLDSHUE e GRETTON, 1954). A Tabela 5.2 apresenta as relações geométricas usadas no dimensionamento do tanque de mistura e do impelidor.

Tabela 5.1: Dimensões das serpentinas

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

Tabela 5.2: Relações geométricas

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

5.2 Pré-processamento

A primeira etapa do pré-processamento da análise CFD constituiu-se da criação da geometria seguida por uma discretização do domínio (malha). Posteriormente foram escolhidos os modelos, considerações numéricas, propriedades dos fluidos, condições iniciais e de contorno que garantam uma aproximação do fenômeno físico que ocorre no sistema agitado. Além disso, foram feitas algumas considerações que ajudaram na simplificação do problema.

5.2.1 Geometria

A criação das geometrias foi feita utilizando a ferramenta CAD (*DesignModeler*) disponível pelo software ANSYS CFX 14.0. A simetria do sistema permitiu uma redução do custo computacional, modelando-se unicamente a metade do reator de tanque agitado, a qual consta de duas chicanas e três pás do impelidor. O domínio na simulação de tanques de mistura compõe-se principalmente de duas regiões, uma interna rotativa (sistema de referência rotacional) e outra, externa estacionária (sistema de referência inercial). A região estacionária é constituída pelas paredes, serpentinas e chicanas do tanque, enquanto a rotativa é formada pelo domínio ao redor do impelidor. Na Figura 5.4 pode-se observar a geometria do tanque agitado com seus respectivos domínios.

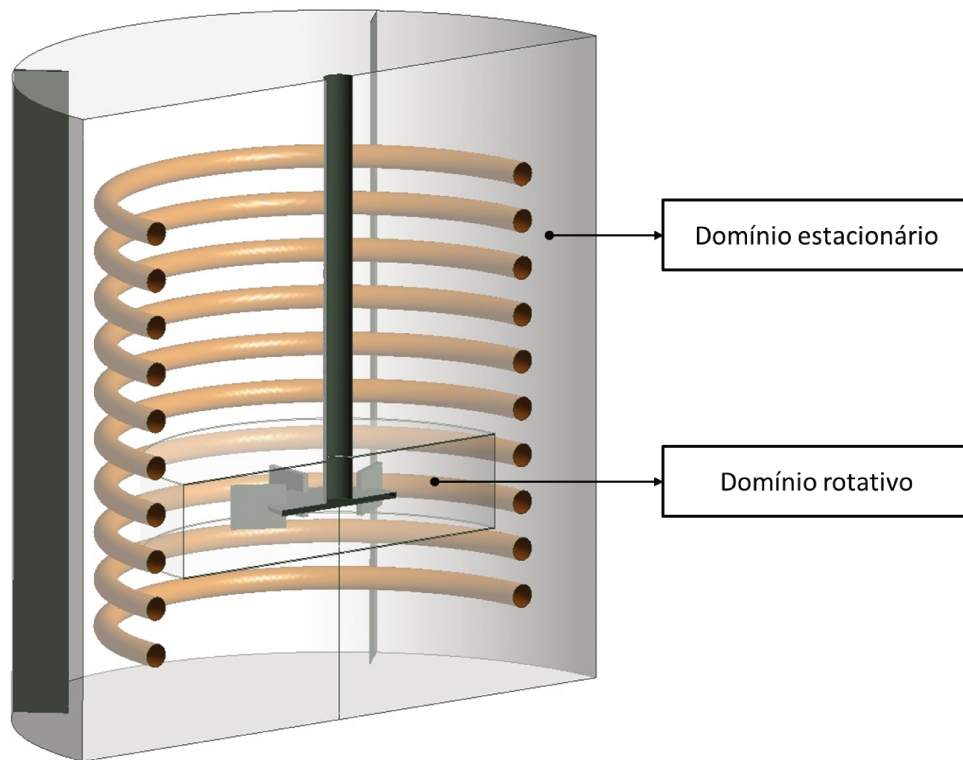


Figura 5.4: Domínios estacionário e rotativo na geometria estudada

As serpentinas helicoidais foram consideradas como uma série de anéis anulares concêntricos com o intuito de simplificar a geometria, utilizando uma malha com menor número de elementos mediante a aplicação da condição de simetria. A interface entre os domínios estacionário e rotativo foi localizada numa distância axial desde o centro do impelidor de $\pm 0.13D$ e uma radial de $r = 0.52D$ (distância média entre as pás do impelidor e a serpentina). Esta distância foi escolhida com relação ao impelidor de maior diâmetro.

5.2.2 Geração da malha

O domínio modelado foi discretizado em pequenos volumes de controle para obter uma solução discreta das equações de conservação da quantidade de movimento, massa e energia. Uma malha foi criada para discretizar o domínio, sendo esta suficientemente refinada para obtenção de uma solução que represente o fenômeno real, sem chegar a ser tão fina que implique um maior custo computacional. Porém, é importante realizar um teste de independência de malha para que os resultados não dependam do tamanho da malha e que, também, o custo computacional seja razoável.

No processo de geração das malhas tetraédricas tridimensionais, o software *Meshing* do ANSYS CFX 14.0 foi utilizado. As malhas tetraédricas não estruturadas com prismas na parede foram feitas levando em consideração importantes parâmetros, tais como tamanho de elemento, taxa de crescimento e o refinamento localizado principalmente em regiões próximas às superfícies das paredes do tanque, serpentina, chicanas e pás do impelidor, onde os efeitos viscosos são importantes. Esta camada de elevados gradientes das propriedades relevantes do processo é conhecida como camada limite.

Muitas malhas não são suficientemente finas próximo à parede para resolver com precisão os perfis de velocidade e temperatura na camada limite, porém funções de parede são utilizadas para modelar a região viscosa por meio de fórmulas empíricas. No entanto, as funções de parede não são recomendadas para escoamentos com presença de regiões de recirculação e com deslocamento/recolamento de camada limite como apresentadas nos processos de tanques de mistura.

Por este motivo, testes de independência de malha foram feitos para obter o valor do y^+ no qual os coeficientes de transferência de calor externo (h_o) mostraram independência do refino de malha próximo à parede da serpentina helicoidal. Desta forma, mudando o tamanho do primeiro prisma e a taxa de crescimento, foram geradas cinco malhas com diferente níveis de refino. Na Tabela 5.3 são apresentados os parâmetros utilizados na discretização no teste de independência de malha. Cabe ressaltar que não foi necessário um teste de independência do número de elementos totais, pois, uma malha suficientemente refinada foi necessária para detalhar as superfícies da serpentina helicoidal.

Os cinco níveis de refino de malha foram conduzidos a uma velocidade rotacional

Tabela 5.3: Parâmetros de malha utilizados na superfície da serpentina helicoidal

Parâmetros	Níveis da malha				
	1	2	3	4	5
Altura da 1ª camada	$8,2 \times 10^{-4}$	$1,6 \times 10^{-4}$	$1,5 \times 10^{-5}$	$2,0 \times 10^{-6}$	$1,6 \times 10^{-6}$
Taxa de crescimento	1,10	1,18	1,28	1,43	1,43
Camada de prismas	10	15	20	20	20
Valor médio y^+	25	6	0,6	0,1	0,06
Elementos do tanque	$1,1 \times 10^6$	$2,9 \times 10^6$	$4,8 \times 10^6$	$4,8 \times 10^6$	$5,0 \times 10^6$

de 200 rpm do impelidor de 16 in, que corresponde ao Número de Reynolds de $6,2 \times 10^5$. A serpentina com maior diâmetro de tubulação (7/4 in) foi utilizada nos testes. Água a 25°C (densidade = 997 kg/m³, viscosidade dinâmica = 0.00089 kg/ms) foi usada como fluido de estudo. Uma camada de prismas entre 10 e 20 elementos foi feita para todas as superfícies do tanque, serpentina e impelidor.

Desse modo, foram feitos cálculos da altura do primeiro elemento e a taxa de crescimento necessária para garantir que todos os prismas estejam dentro da camada limite e que o y^+ esteja na faixa entre $0,06 < y^+ < 25$ para a superfície da serpentina helicoidal e aproximadamente de 1 para as superfícies do tanque e impelidor. Detalhes da aplicação de elementos prismáticos nas superfícies do tanque, impelidor e serpentina helicoidal são mostrados na Figura 5.5.

Na região do impelidor foi gerada uma malha de aproximadamente $4,0 \times 10^5$ elementos (Figura 6.4b), enquanto na região do domínio estacionário foi aumentado o número de elementos devido à diminuição do y^+ , gerando diferentes densidades de malha (Tabela 5.3). Na Figura 5.6 ilustram-se as malhas computacionais do domínio estacionário utilizadas nos testes 1, 2, 3, 4 e 5 com um número aproximado de elementos entre $1,1 \times 10^6$ e $5,0 \times 10^6$.

5.2.3 Configuração do Modelo de Simulação CFD

Nesta etapa são apresentados os modelos empregados para obter um alto nível de acurácia do fenômeno físico. Além disso, são dadas as propriedades do fluido, condições iniciais e de contorno que limitam o problema, como também os parâmetros numéricos a serem considerados.

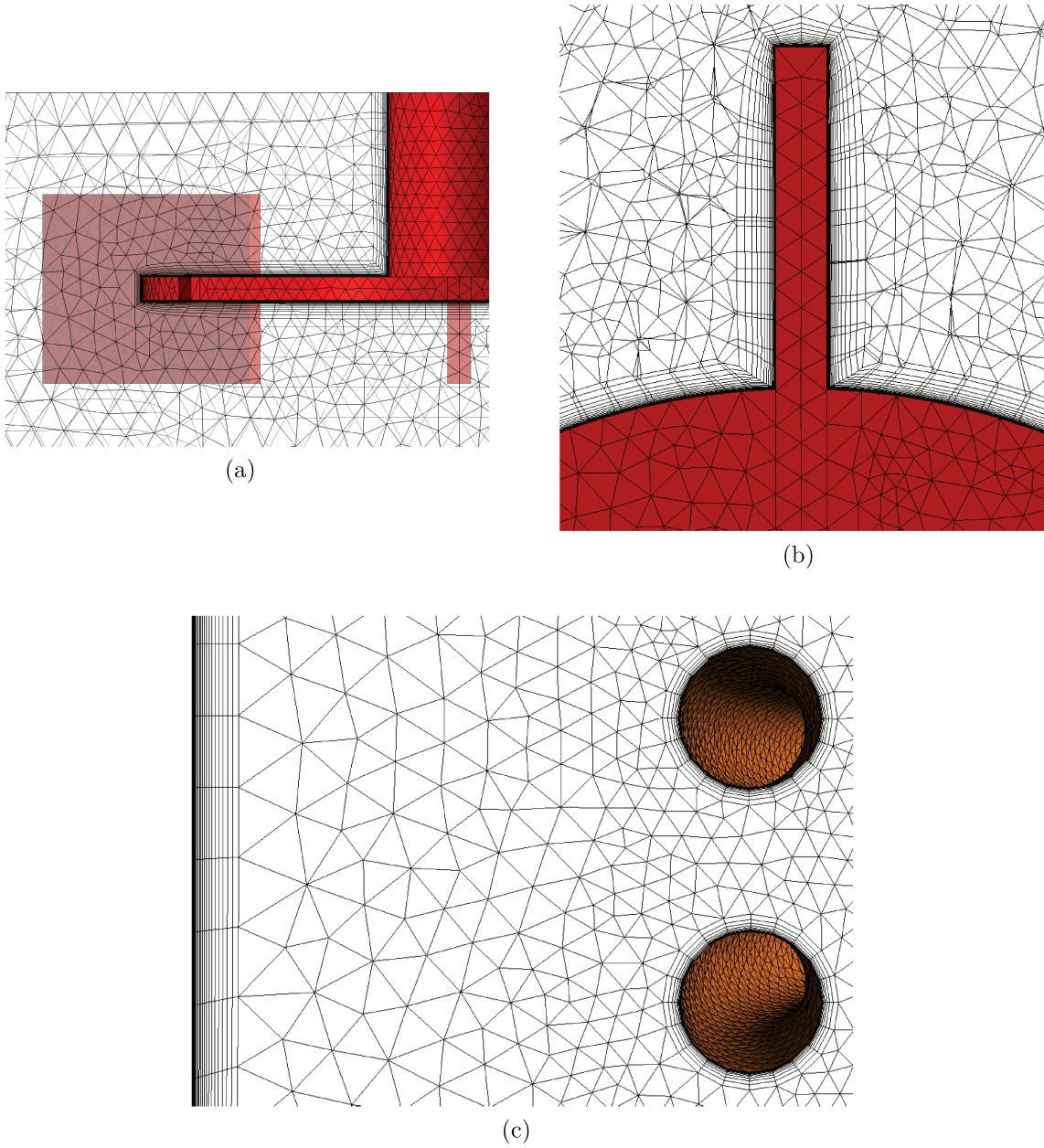


Figura 5.5: Elementos prismáticos nas superfícies. (a) Disco do impelidor e eixo. (b) Pá do impelidor. (c) Parede do tanque e serpentina helicoidal.

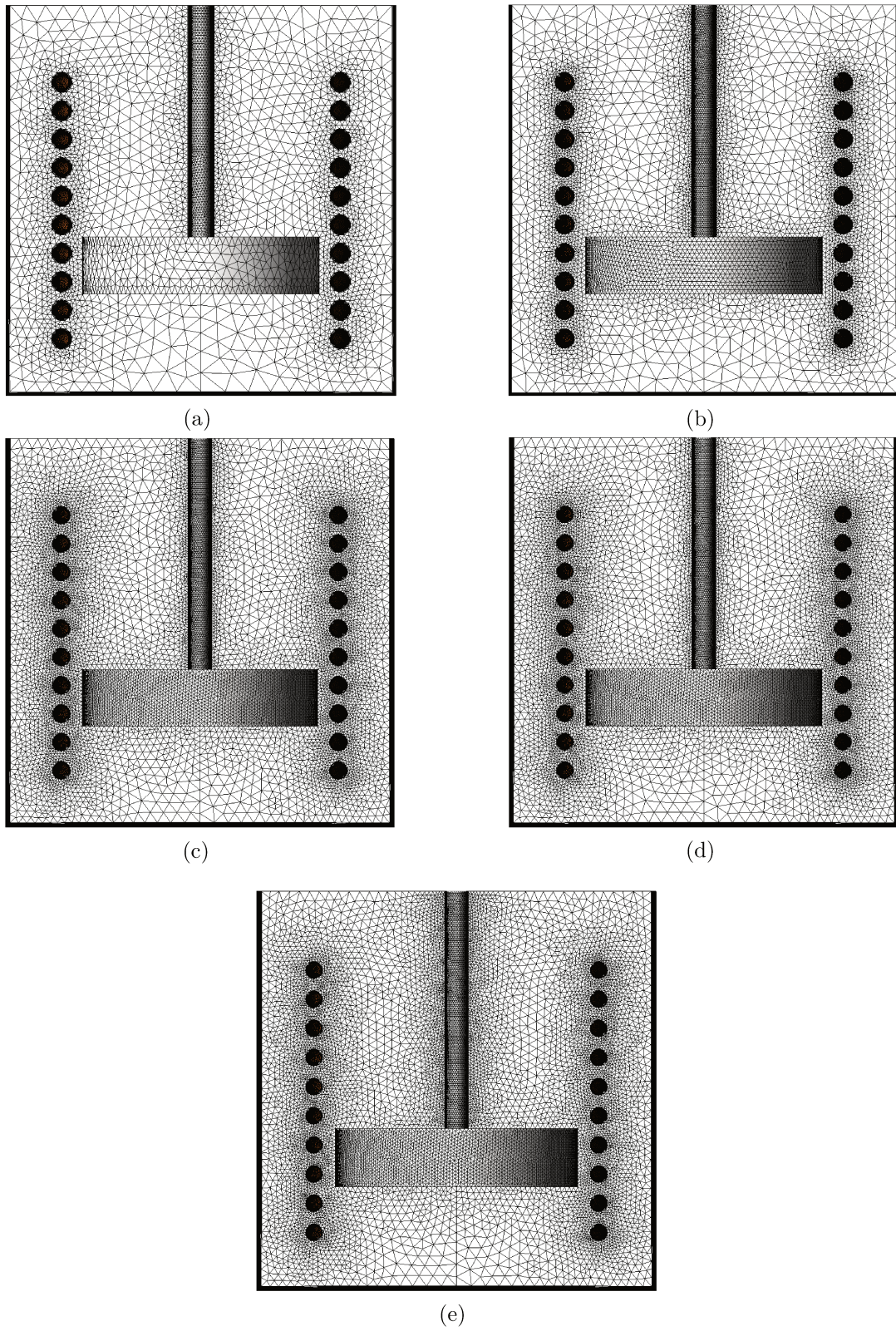


Figura 5.6: Plano transversal das cinco malhas não estruturadas 3D utilizadas no teste de independência de malha. a) Nível 1. b) Nível 2. c) Nível 3. d) Nível 4. e) Nível 5.

5.2.3.1 Propriedades Físicas dos Fluidos

Neste trabalho foi considerado um escoamento monofásico, empregando-se água, óleo vegetal e glicerina como fluidos de análise com o intuito de se trabalhar na mesma faixa de Reynolds utilizada no trabalho experimental. Propriedades constantes, a 25 °C e 1 atmosfera de pressão, foram utilizadas para os três fluidos em estudo. No entanto, para a glicerina uma correlação de quatro parâmetros para a viscosidade dinâmica foi utilizada devido a forte dependência na faixa de temperaturas estudadas.

As propriedades físico-químicas para os três fluidos estudados são apresentadas na Tabela 5.4 enquanto a correlação da viscosidade dinâmica de 4 parâmetros desenvolvida por CHEN e PEARLSTEIN (1987) é apresentada na Equação 5.1 em que as constantes D, E, F e G para glicerina pura são $1,007\,58 \times 10^{-5}$, $2,218\,95 \times 10^8$, $7,993\,23 \times 10^{-3}$ e $8,804\,69 \times 10^2$ respectivamente.

$$\mu(T) = D \exp^{E/T^3 + FT + G/T} \quad (5.1)$$

Tabela 5.4: Propriedades físico-químicas dos fluidos

Propriedade		Fluidos de estudo		
		Água	Óleo Vegetal	Glicerina
Massa específica	kg/m ³	997	920	1261
Viscosidade dinâmica	kg/m.s	$8,899 \times 10^{-4}$	$5,009 \times 10^{-2}$	Equação 5.1
Massa Molar	kg/kmol	18,02	885,5	92,0776
Condutividade térmica	W/m.K	0,6069	0,17	0,285
Calor específico	J/kg.K	4181,7	2000	2376

5.2.3.2 Condições de Contorno

Algumas suposições foram aplicadas ao problema físico, a fim de calcular a solução das equações de momento, continuidade, energia e modelo de turbulência para obter uma solução do sistema. Para tanques agitados existem algumas condições de contorno que são comuns em todas as estratégias de resolução. Abaixo, são apresentadas as condições de contorno e suposições adotadas para as simulações em estado estacionário.

-
- A condição de não escorregamento (*No Slip Wall*) foi utilizada em todas as superfícies sólidas, tais como: paredes do tanque, fundo, chicanas, impelidor, eixo e serpentinas. Nesta condição, a velocidade do fluido é reduzida nas regiões próximas da parede até atingir velocidade nula quando o fluido esteja em contato com a superfície.
 - Na superfície livre do líquido, as tensões de cisalhamento e velocidade axial são nulas e uma superfície plana é assumida. Esta condição pode ser utilizada ao considerar que não há fluxo de massa através da superfície livre e que a presença de chicanas evita a formação de vórtice central. Portanto, pode ser aplicada na simulação a condição de livre escorregamento (*Free Slip Wall*) na superfície superior do tanque com altura constante de líquido.
 - No impelidor e eixo-árvore foi assumido que a velocidade do fluido na parede assume a mesma velocidade angular definida pela rotação do impelidor.
 - As interfaces entre domínios para modelos de referências rotacionais são tratadas como superfícies comuns não coincidentes do tipo fluido-fluido (*General Grid Interface* – GGI). Ou seja, o fluxo físico através da interface é permitido embora o tipo de elementos e a localização dos nós entre os blocos não coincidam.
 - A condição de periodicidade rotacional nas superfícies 1 e 2 (Figura 5.7) foi aplicada dado que apenas metade da geometria do tanque foi simulada. O fluxo de entrada no modelo computacional através do plano 1 é idêntico ao fluxo que sai do domínio através do plano periódico oposto 2.
 - Para obter condições de estado estacionário, anéis alternados da serpentina foram utilizados para aquecimento e resfriamento. Além disso, foi considerado o sistema adiabático (condição adiabática na parede, fundo e topo do tanque), semelhante ao que foi utilizado no trabalho experimental de OLDSHUE e GRETTON (1954). Nos anéis de aquecimento foi usada a condição de fluxo constante de 80.000 W/m^2 e nos anéis de esfriamento foi assumido que há quantidade suficiente de líquido frio dentro da serpentina para manter uma temperatura constante de $5 \text{ }^\circ\text{C}$. Na Figura 5.8 são apresentados os anéis de esfriamento e aquecimento na serpentina helicoidal no reator de tanque agitado.

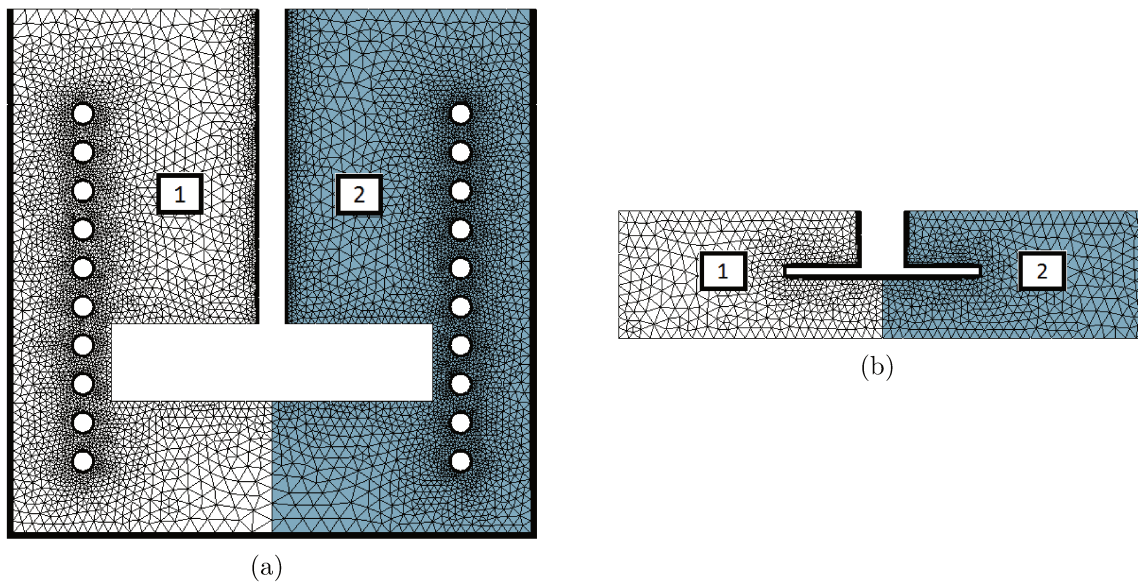


Figura 5.7: Superfícies do sistema de agitação na condição de periodicidade a) Domínio estacionário. b) Domínio rotativo.

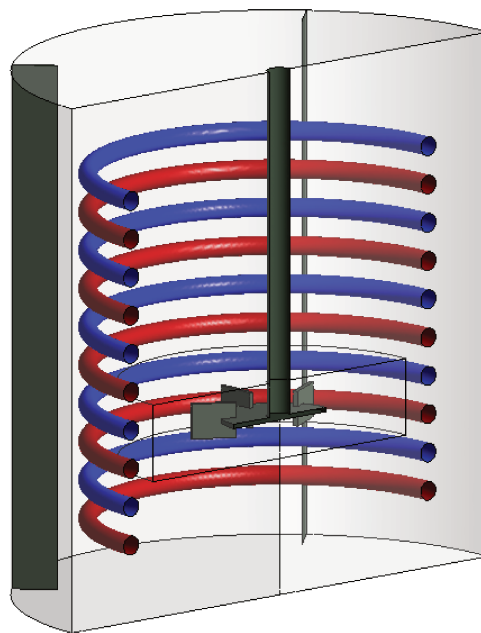


Figura 5.8: Condição de contorno da serpentina helicoidal. Os anéis de esfriamento e aquecimentos são representados pelas cores azul e vermelho respectivamente.

Quando a temperatura na parede da serpentina é fixada, o coeficiente de transferência de calor por convecção é calculado pela lei do resfriamento de Newton como mostrado na Equação 5.2, em que, q é o fluxo de calor na parede, h_f é o coeficiente de transferência de calor, T_w a temperatura na parede da serpentina e T_f é a temperatura média do fluido. As simulações foram realizadas utilizando a abordagem de falso transiente, porém foi necessário inicializar o cálculo através de um campo inicial.

$$q = k_f \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_{\text{Parede}} = h_f (T_w - T_f) \quad (5.2)$$

Componentes de velocidade nulas, temperatura de 25 °C e pressão relativa zero foram escolhidas como condições iniciais das simulações. Os casos serão simulados desde o estado inicial até que o desenvolvimento do padrão de fluxo e o coeficiente de transferência de calor torne-se constantes. As condições de contorno para os componentes de velocidade e referentes à transferência de calor, assim como as condições iniciais utilizadas nas simulações CFD do reator de tanque de mistura, são apresentadas sucintamente na Tabela 5.5.

5.2.3.3 Modelos Físicos e Esquemas Numéricos

A continuação são apresentados os modelos físicos e esquemas numéricos aplicados a todas as simulações feitas na análise CFD. A rotação do impelidor foi modelada utilizando *Multiple Reference Frame* (MRF-Frozen rotor), devido a sua estabilidade numérica e menor custo computacional. O modelo de turbulência *Shear Stress Transport* SST (MENTER, 1993) foi definido em todos os casos, tendo em vista que, este prediz corretamente o deslocamento da camada limite e por isso é possível obter uma boa predição da transferência de calor e da tensão de cisalhamento da parede.

O esquema de interpolação espacial nos termos advectivos *Upwind Difference Scheme* (UDS) foi usado, já que, este esquema de primeira ordem prediz com exatidão os campos de fluxo, atingindo rapidamente a convergência em comparação com esquemas de alta ordem (BRUCATO *et al.*, 1998). Como todas as simulações foram realizadas em regime transiente (abordagem de falso transiente) o esquema *First Order Backward Euler* foi utilizado na interpolação dos termos temporais, o qual é uma formulação robusta e implícita de primeira ordem no avanço do tempo que garante uma estabilidade numérica

Tabela 5.5: Condições iniciais e de contorno utilizadas nas simulações

Local	Condição	Especificações
Paredes do tanque, fundo, chicanas e serpentinas	Não escorregamento	Velocidade nula na parede
Impelidor e eixo	Parede rotativa	Velocidade de rotação
Topo do tanque	Superfície livre plana	Tensores e velocidade normal à superfície nula
Interface entre domínios	Interface fluida-fluida	Mudança do sistema de referência
Superfícies de corte 180 °	Periodicidade rotacional	Fluxo entrada plano 1 = Fluxo saída plano periódico 2

Variável	Condições iniciais	
	Valor	Especificações
Componentes da velocidade	0 ms ⁻¹	
Pressão relativa	0 Pa	Estado inicial para todos os casos simulados
Temperatura	25 °C	

sem limitação do valor do passo de tempo.

Autores sugerem para a abordagem de rotação escolhida (MFR) passos de tempo inferiores a $t < 1/10 \cdot N$, em que N refere-se à velocidade de rotação do impelidor MURTHY e JOSHI (2008). Porém, o estado estacionário foi atingido com um passo de tempo em torno de 0,03s e o intervalo de simulação foi de 18s, tempo no qual o coeficiente de transferência de calor tornou-se constante. Foram considerados para todos os casos valores residuais (RMS) inferiores a $1,0 \times 10^{-5}$ para assegurar a convergência.

5.2.3.4 Simulações para a obtenção da correlação do Número de Nusselt: Validação do Modelo

Com o objetivo de validar o modelo computacional, a configuração utilizada no trabalho experimental de OLDSHUE e GRETTON (1954) foi simulada. Para a obtenção da correlação do Número de Nusselt por eles obtida, foi necessário simular diferentes casos,

com o intuito de mudar os quatro números adimensionais apresentados na correlação, conforme já reportado na (Equação 1.2).

Como no trabalho experimental, diferentes condições operacionais e parâmetros geométricos foram alterados para os três fluidos estudados, tais como velocidade do impelidor (100, 200 e 300 rpm), diâmetro do impelidor (12 in, 16 in, 20 in, 24 in e 28 in) e do tubo da serpentina (0,875 in e 1,75 in). Os 24 testes simulados para a obtenção da correlação do Número de Nusselt são apresentados na Tabela 5.6.

Os parâmetros da correlação do Número de Nusselt obtida por simulação foram ajustados por meio do método de mínimos quadrados, minimizando a soma dos quadrados das diferenças entre a predição da correlação e os dados gerados pelo modelo computacional, ou seja, encontrando a função objetivo que proporcione os parâmetros do modelo que melhor se ajustem aos dados experimentais numéricos. Posteriormente, o modelo foi validado comparando-se a correlação experimental com a obtida numericamente.

5.2.3.5 Simulações para a obtenção da correlação do Número de Nusselt da nova configuração

Após validar o modelo, foi simulada uma nova configuração geométrica do reator de tanque agitado. Esta nova configuração visa melhorar a circulação do fluido no reator mediante a eliminação dos anéis da serpentina posicionados na altura da pá do impelidor. Trabalhos anteriores (NUNHEZ e MCGREAVY, 1994; STREET, 1991; UHL, 1966) mostraram que a serpentina na altura da pá do impelidor prejudica a circulação do fluido especialmente no topo do reator e entre a parede do tanque e a serpentina. Na Figura 5.9 pode-se observar a nova configuração do reator de tanque agitado a qual consiste simplesmente no reposicionamento dos anéis presentes na altura da pá do impelidor.

Devido à mudança geométrica do feixe de serpentinas, a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991) não pôde ser contemplada pela equação apresentada no trabalho experimental desenvolvido por OLDSHUE e GRETTON (1954), visto que, apesar da semelhança entre as geometrias, ambas configurações não representam séries homólogas, de maneira que não pode ser esperado o mesmo coeficiente de película para ambas geometrias.

Assim, na nova configuração geométrica, uma correlação do Número de Nusselt

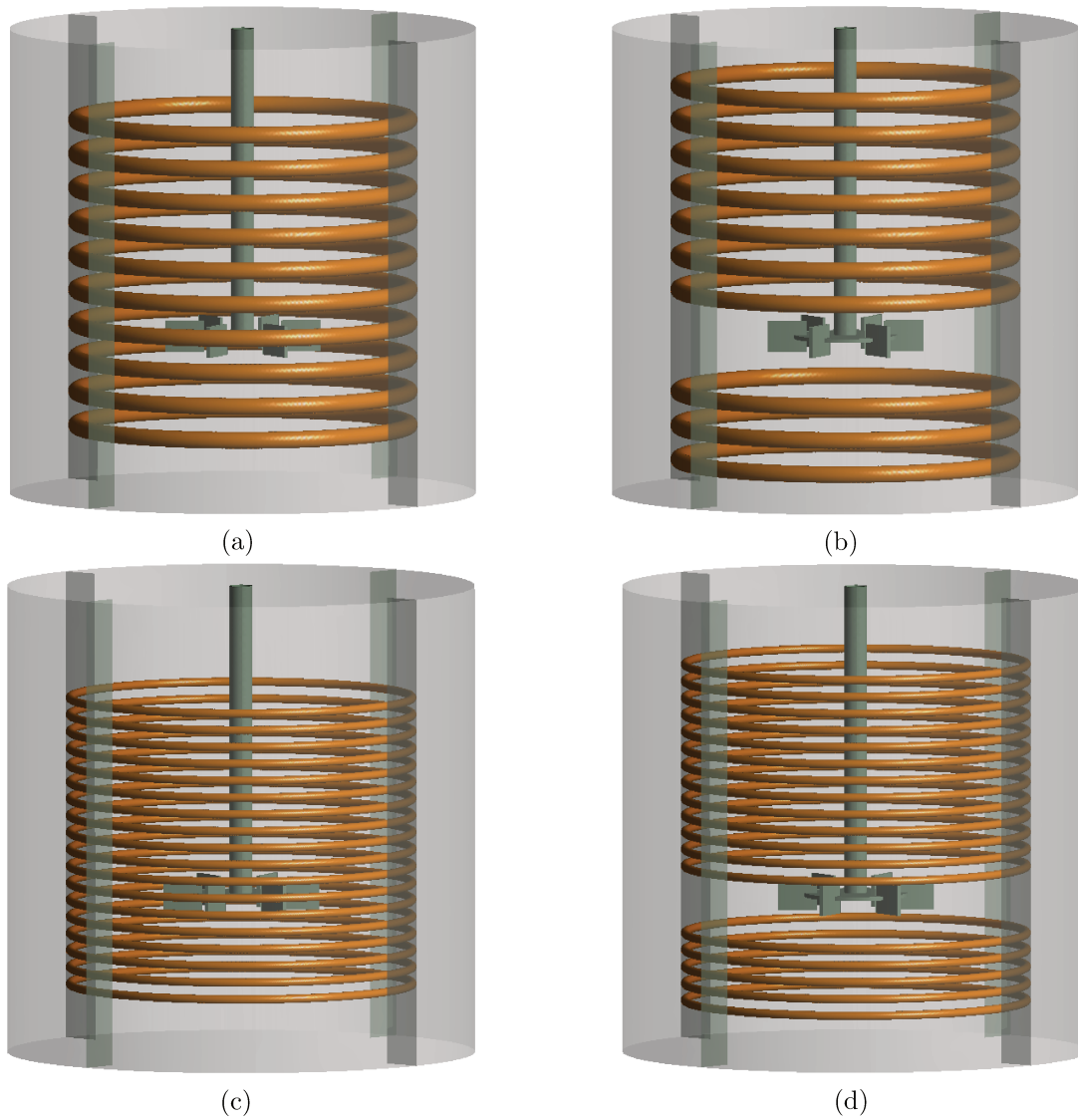


Figura 5.9: Configurações geométricas da serpentina helicoidal. (a-b) Diâmetro interno de 7/4 in da configuração convencional e modificada respectivamente. (c-d) Diâmetro interno de 7/8 in da configuração convencional e modificada respectivamente.

Tabela 5.6: Estudos de caso para validação do modelo computacional

Caso Simulado N°	Fluido	Diâmetro do Impelidor D (in)	Diâmetro da Serpentina d (in)	Diâmetro do Tanque (T) T (in)	Velocidade do Impelidor N (rpm)
1	Água	16	1,75	48	100
2	Água	16	1,75	48	200
3	Água	16	1,75	48	300
4	Glicerina	16	1,75	48	100
5	Glicerina	16	1,75	48	200
6	Glicerina	16	1,75	48	300
7	Óleo vegetal	16	1,75	48	100
8	Óleo vegetal	16	1,75	48	200
9	Óleo vegetal	16	1,75	48	300
10	Água	12	1,75	48	200
11	Água	20	1,75	48	200
12	Água	24	1,75	48	200
13	Água	28	1,75	48	200
14	Glicerina	12	1,75	48	200
15	Glicerina	20	1,75	48	200
16	Glicerina	24	1,75	48	200
17	Glicerina	28	1,75	48	200
18	Óleo vegetal	12	1,75	48	200
19	Óleo vegetal	20	1,75	48	200
20	Óleo vegetal	24	1,75	48	200
21	Óleo vegetal	28	1,75	48	200
22	Água	16	0,875	48	200
23	Glicerina	16	0,875	48	200
24	Óleo vegetal	16	0,875	48	200

foi obtida nas mesmas condições apresentadas na validação (Tabela 5.6). Mudando todos os números adimensionais presentes na correlação apresentada por OLDSHUE e GRETTON (1954), os parâmetros desta foram ajustados por meio do método de mínimos quadrados. A eficiência dos projetos foram comparadas em termos do coeficiente de troca térmica expresso pelo Número de Nusselt. Além disso, foi estudado o escoamento no interior do reator de tanque agitado e as variáveis de projeto, tais como diâmetros dos tubos da serpentina, dos impelidores e número de anéis nas serpentinas.

5.3 Solver

Nesta etapa, o solver do Ansys CFX 14.0 soluciona numericamente o modelo computacional (definido no Pré-processamento) por meio do método numérico dos volumes finitos. A solução foi acompanhada por meio do monitoramento dos resíduos numéricos e o coeficiente de transferência de calor por convecção na superfície da serpentina helicoidal a fim de verificar a estabilidade necessária a ser atingida.

Esta etapa pode demandar um alto custo computacional dependendo da complexidade particular do problema, tamanho de malha, passo de tempo, critério de convergência, abordagem escolhida para simular a interação impelidor chicana, entre outros. As simulações foram realizadas utilizando um computador equipado com Intel®Xeon E5645 com sistema operacional de 64 bits, doze processadores, um total de 24,0 GB de memória RAM e velocidade do processador de 2,40 GHz. Conforme a abordagem de rotação escolhida Frozen Rotor (MFR), cada simulação demorou em torno de 3 dias.

5.4 Pós-processamento

Nesta etapa, os resultados gerados nas simulações foram analisados utilizando a ferramenta do Ansys CFD-Post 14.0. Os resultados obtidos e a análise dos mesmos, conforme a metodologia apresentada para a simulação de um reator de tanque agitado, são apresentados no Capítulo 6.

Capítulo 6

Resultados

No presente capítulo são apresentados os resultados obtidos e a análise, conforme a metodologia descrita no Capítulo 5, para a simulação de um tanque de mistura com serpentinas helicoidais, utilizando diferentes fluidos de estudo, variáveis de processo e configurações geométricas.

6.1 Convergência e monitoramento da solução

Em todos os estudos de caso foram considerados valores RMS residuais inferiores a $1,0 \times 10^{-5}$, para garantir a convergência dos resultados. Os valores RMS são baseados nos erros residuais das soluções numéricas das equações de momento, continuidade e energia. Portanto, a convergência da solução foi monitorada no decorrer da simulação até atingir valores constantes e menores em relação ao critério escolhido como observado na Figura 6.1.

Todas as simulações foram feitas dependentes do tempo, portanto foi necessário rodar um período de tempo no qual os campos de velocidade e as variáveis de interesse atingissem valores constantes. Por esse motivo, foi aplicado um ponto de controle para monitorar o coeficiente de transferência de calor por convecção o qual é a variável de interesse no cálculo do Número de Nusselt a fim de verificar que tenha atingido a estabilidade necessária. Na Figura 6.2 é apresentado o monitoramento do coeficiente de transferência de calor da serpentina helicoidal para o estudo de caso N°24 apresentado na Tabela 5.6.

Na Figura 6.2 pode ser observado que para o estudo de caso N°24 o coeficiente de transferência de calor tornou-se constante em 6 s, mas os valores (RMS) residuais

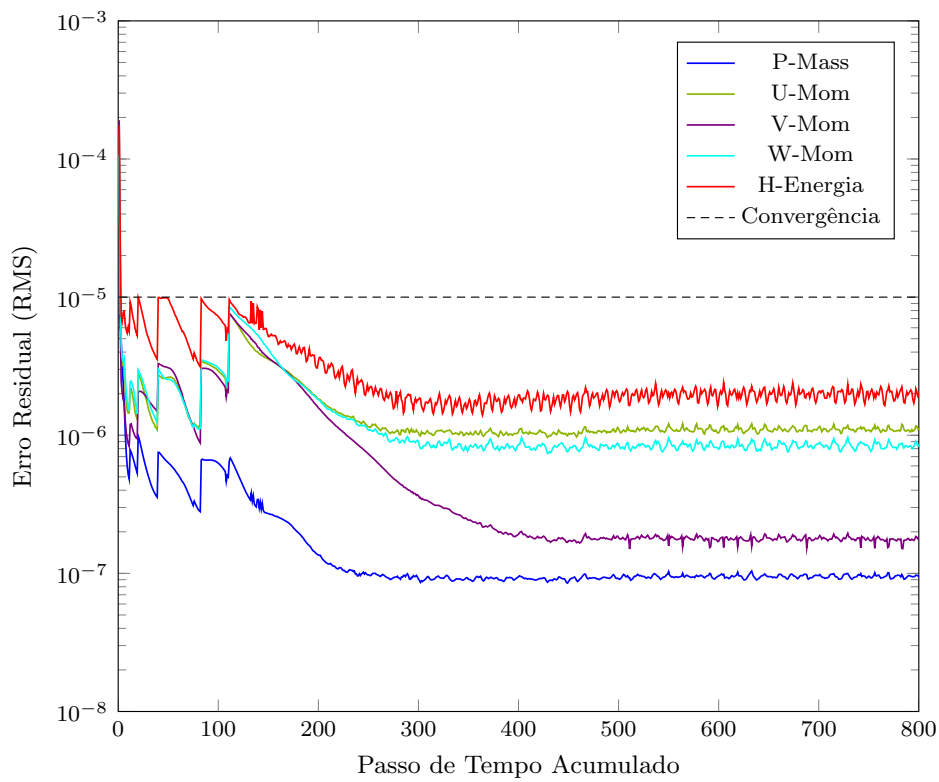


Figura 6.1: Monitoramento do critério de convergência no estudo de caso N°24 apresentado na Tabela 5.6

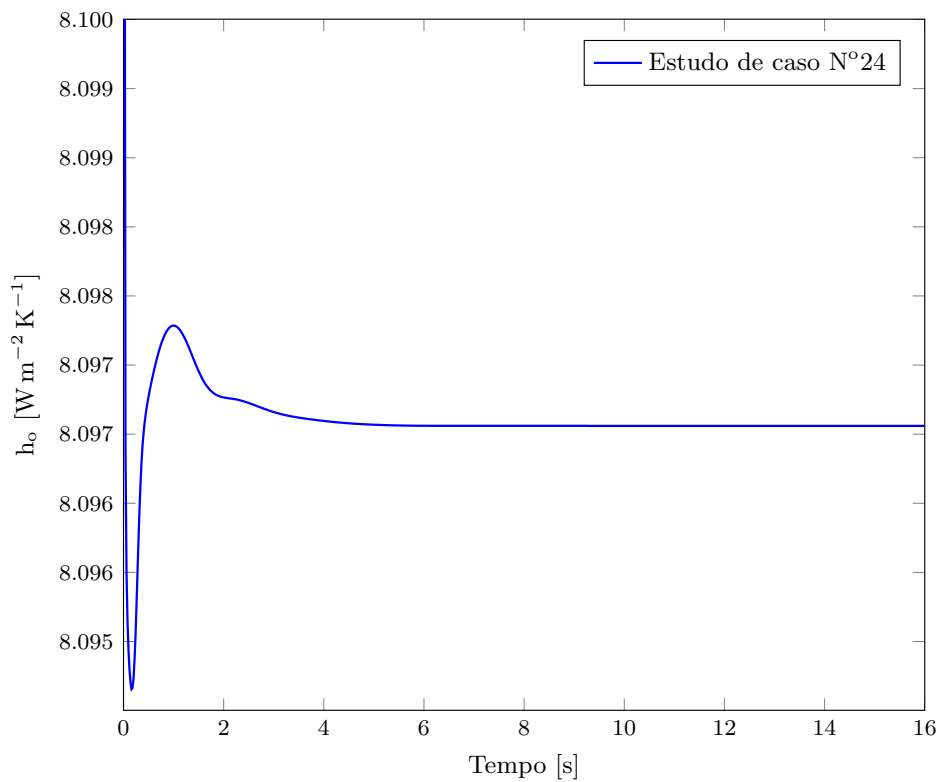


Figura 6.2: Monitoramento do coeficiente de transferência de calor (h_o) no decorrer da solução

mostraram um padrão periódico acima de 10 s (500 passos de tempo acumulados) no decorrer da simulação, como pode ser visto na Figura 6.1. Por conseguinte, foi considerado o valor estacionário após 10 s para o estudo de caso N°24, na estimativa do coeficiente de transferência de calor por convecção.

Como neste trabalho os estudos de caso apresentam diferentes condições operacionais e configurações geométricas, foi necessário rodar um período de tempo de 16 s em todas as simulações a fim de garantir o estado estacionário com estabilidade nos valores RSM residuais e o coeficiente de transferência de calor (h_o).

6.2 Efeito do y^+ no coeficiente de transferência de calor e padrão de fluxo no reator de tanque agitado

Uma solução convergida com adequados modelos físicos e independência de malha fornecerá precisão nos resultados; portanto, uma boa representação do fenômeno físico será obtida. Testes de independência de malha são feitos para atingir independência do tamanho de malha na solução numérica em fluidodinâmica computacional.

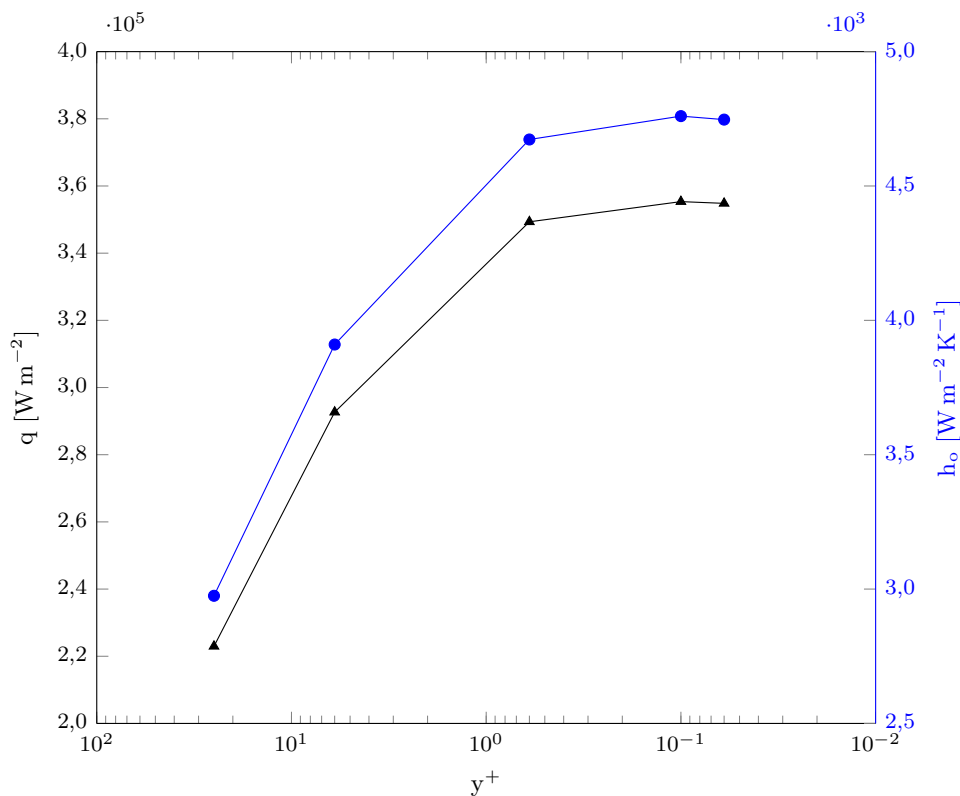
Cinco simulações foram realizadas com diferentes densidades de malhas (Figura 5.6), as quais foram descritas na Subseção 5.2.2. Porém, não foi necessário um teste de independência do número de elementos totais pois a malha precisou de um alto grau de refinamento para capturar os detalhes de curvaturas nas paredes da serpentina. Testes de independência de malha foram feitos com o intuito de observar o efeito do parâmetro adimensional y^+ na parede da serpentina helicoidal sobre o coeficiente de transferência de calor por convecção (h_o), variável importante na obtenção da correlação do Número de Nusselt.

Na Tabela 6.1 são apresentados os resultados obtidos do coeficiente de transferência de calor (h_o) e fluxo de calor (q) para os cinco níveis de malhas testados. Uma malha com cerca de $4,8 \times 10^6$ elementos e $y^+ = 0,1$ mostrou que pode prever resultados do coeficiente de transferência de calor com suficiente precisão. Como observado, a porcentagem de variação dos parâmetros era reduzida à medida que diminuía-se o y^+ das malhas testadas. Assim, a Malha N°4 satisfaz o critério de independência uma vez que a porcentagem de variação entre os níveis de malha 4 e 3 foi menor que 5 %, valor sugerido na literatura (PAKZAD *et al.*, 2008).

Tabela 6.1: Variação do coeficiente de transferência e fluxo de calor na parede da superfície da serpentina helicoidal

Parâmetros	Níveis da malha				
	1	2	3	4	5
Valor médio y^+	25	6	0,6	0,1	0,06
Elementos do tanque	$1,1 \times 10^6$	$2,9 \times 10^6$	$4,8 \times 10^6$	$4,8 \times 10^6$	$5,0 \times 10^6$
h_o [W/m^2K]	2975	3910	4673	4760	4747
% de variação de h_o	-	31,26	19,36	1,72	0,15
q [W/m^2]	$2,2 \times 10^5$	$2,9 \times 10^5$	$3,5 \times 10^5$	$3,6 \times 10^5$	$3,5 \times 10^5$
% de variação de Q	-	31,44	19,52	1,86	0,27

Com o intuito de auxiliar a observação do efeito de refinamento da camada limite na predição da troca térmica na superfície da serpentina helicoidal, foram plotados os parâmetros h_o e q em função do y^+ na parede (Figura 6.3). As simulações mostraram um aumento significativo nos resultados obtidos até se tornarem constantes com valores de $y^+ < 0,1$. Desta maneira, malhas com $y^+ < 0,1$ não influenciaram nos resultados, sendo escolhida a Malha N°4, por fornecer um balanço entre refino, custo computacional e independência dos resultados.

Figura 6.3: Variação da estimativa do coeficiente de transferência e fluxo de calor em função da redução do y^+ na superfície da serpentina helicoidal

A malha tridimensional não estruturada escolhida (Malha N°4) com elementos tetraédricos e prismáticos nos domínios estacionário e rotativo é mostrada na Figura 6.4. A discretização contém aproximadamente de $4,0 \times 10^5$ elementos no domínio rotativo e $4,5 \times 10^6$ no estacionário. No entanto, para os estudos de caso 22, 23 e 24 uma malha com cerca de $9,0 \times 10^6$ de elementos no domínio estacionário foi necessária para descrever com precisão as curvas da serpentina, pois nestes testes o reator possui uma serpentina com menor diâmetro de tubulação (7/8 in) e oito anéis adicionais (18 anéis) em comparação com a malha apresentada na Figura 6.4.

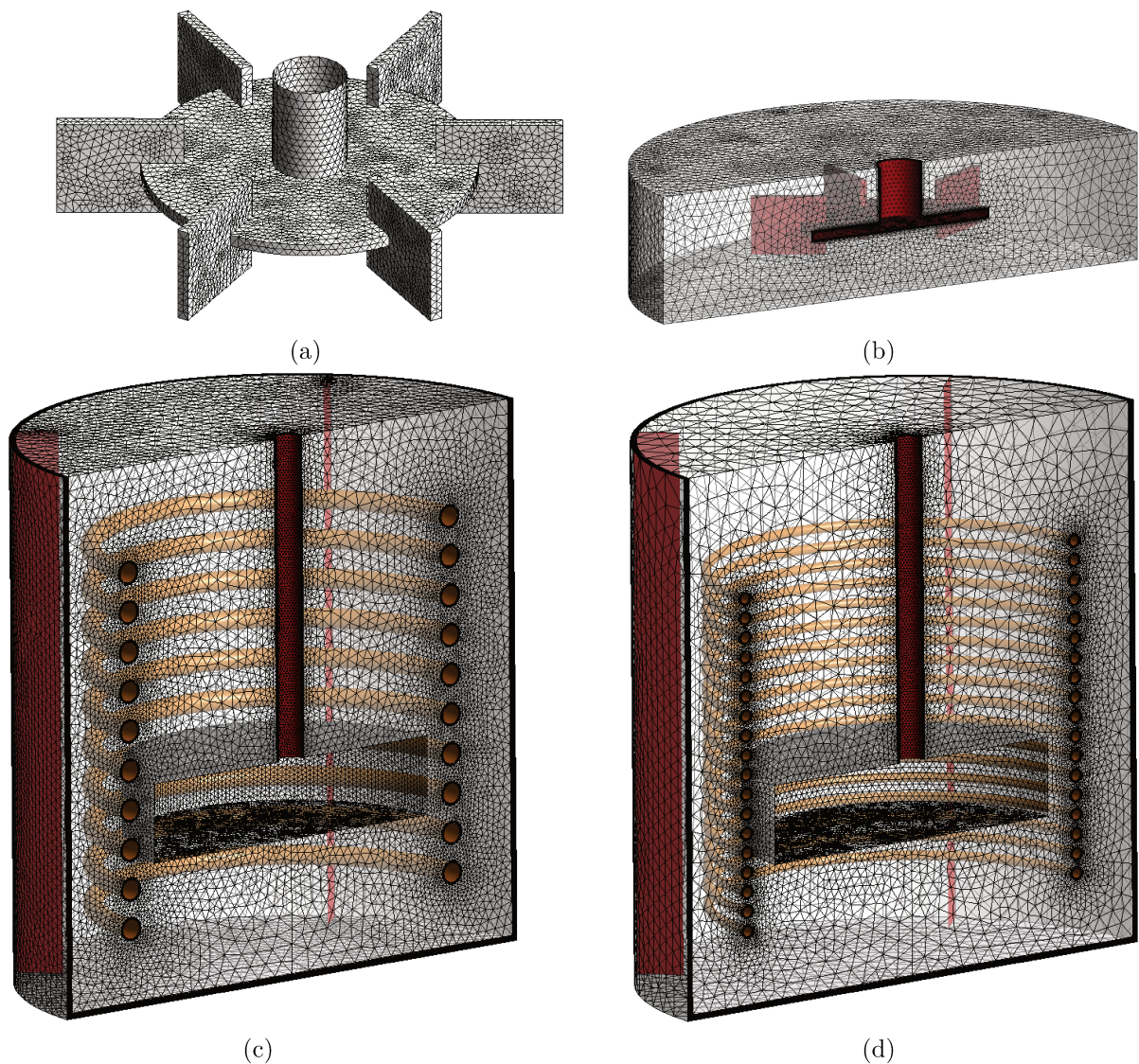


Figura 6.4: Malha não estruturada 3D com elementos tetraédricos e prismáticos. a) Malha da superfície do impelidor. b) Malha do domínio rotativo com impelidor de 16 in . c) Malha do domínio estacionário. d) Malha do domínio estacionário para os estudos de caso 22, 23 e 24

A influencia do y^+ no padrão de fluxo foi analisada de forma qualitativa, traçando

os vetores de velocidade produzidos pelo impelidor (Figura 6.5 a 6.9). Pode-se observar que os padrões de fluxo foram semelhantes para os 5 níveis de malha, apresentando um fluxo intenso produzido pelo impelidor na direção radial, que, ao colidir com a parede, divide a região em duas zonas de recirculação distintas, acima e abaixo do impelidor, o que é típico nestes tipos de propulsores.

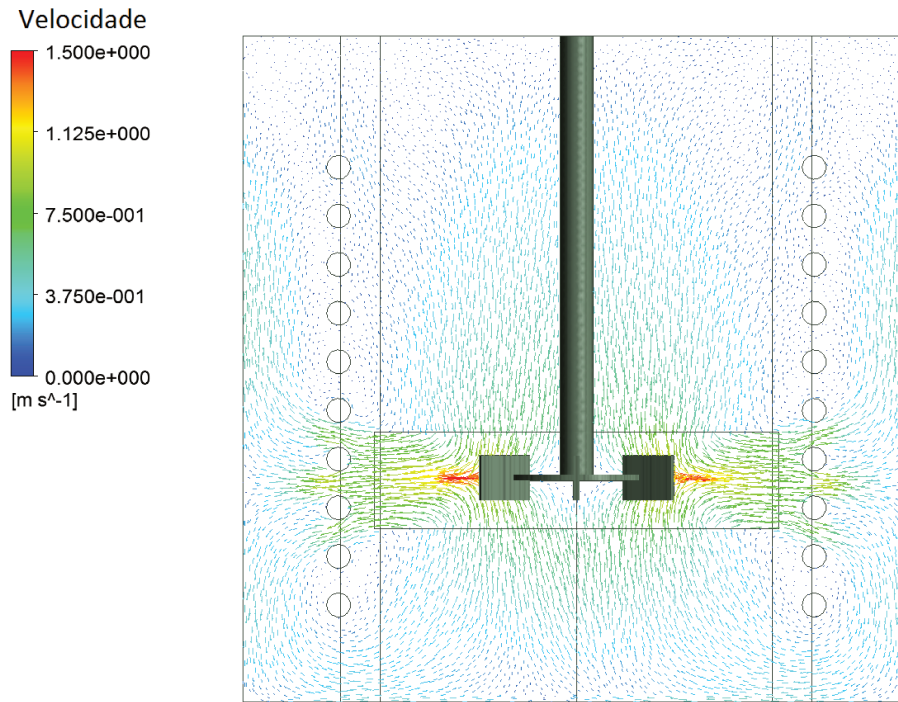


Figura 6.5: Padrão de fluxo estimado na malha Nível 1

Assim, baseando-se nos resultados obtidos, o y^+ não apresenta nenhum efeito significativo na predição dos fluxos primários gerados pelo impelidor, pois os fluxos na maior parte do tanque encontram-se afastados da interação fluido-parede. No entanto, uma forte influência foi observada na predição do h_o , uma vez que para predições de transferência de calor, valores de $y^+ < 0,1$ são necessários para um ótimo desempenho do tratamento de parede (*Near-Wall Treatment*) utilizado por ANSYS CFX, no modelo de turbulência SST. Neste sentido, a região viscosa próxima à parede é baseada na formulação de frequência turbulenta (ω).

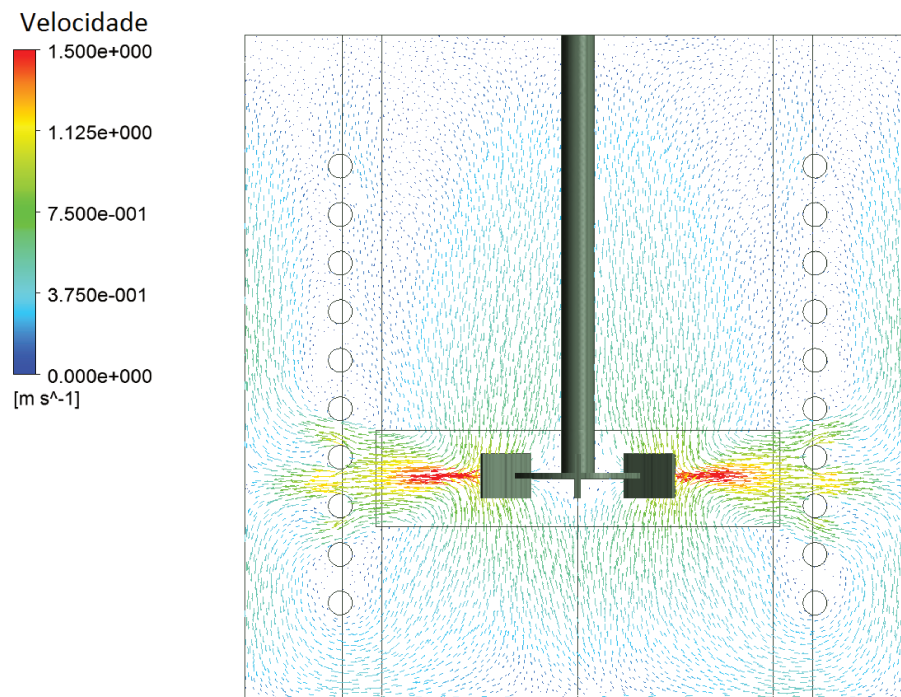


Figura 6.6: Padrão de fluxo estimado na malha Nível 2

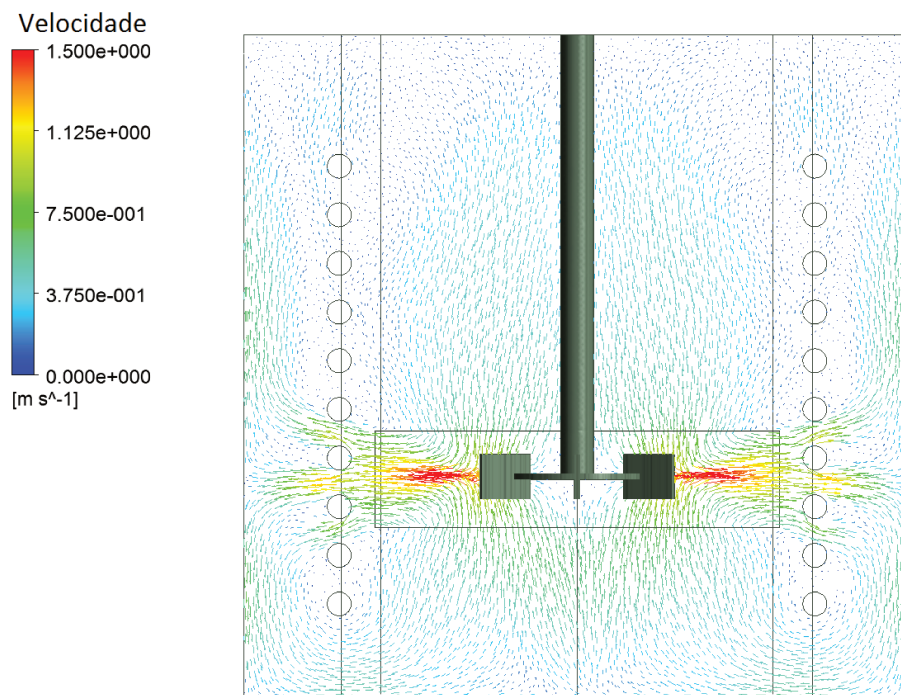


Figura 6.7: Padrão de fluxo estimado na malha Nível 3

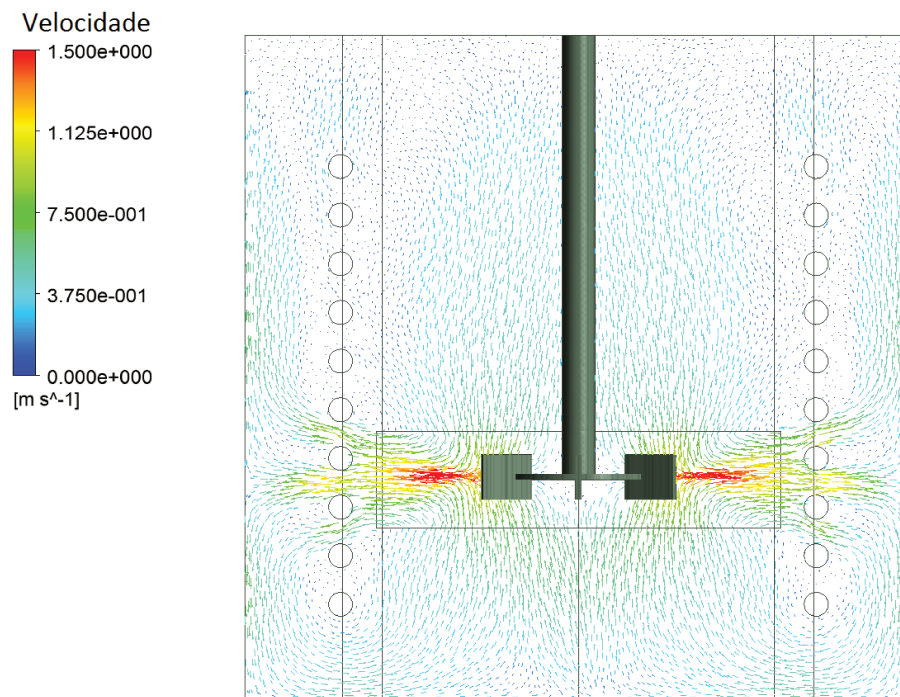


Figura 6.8: Padrão de fluxo estimado na malha Nível 4

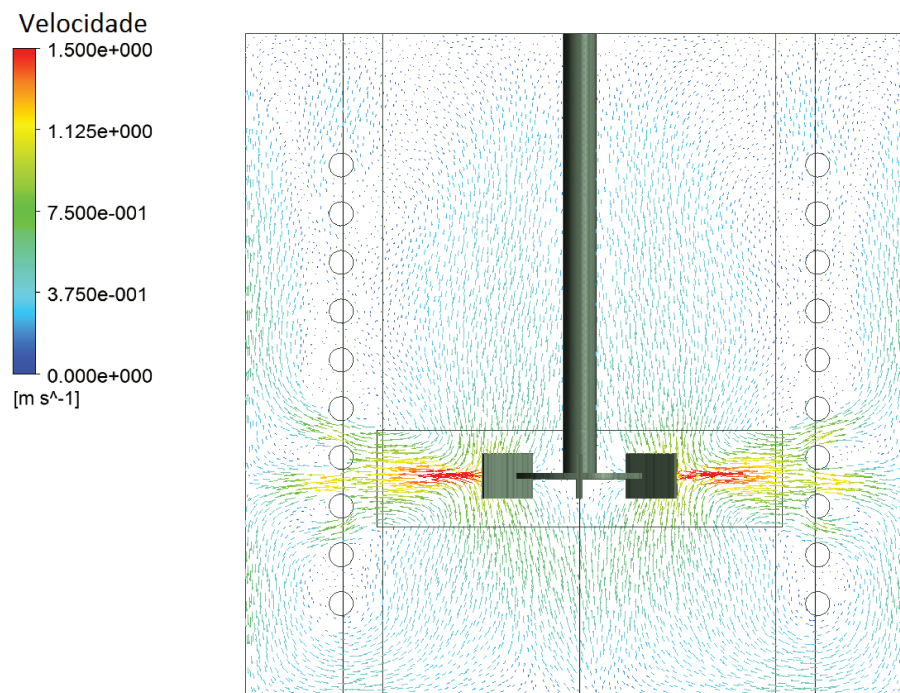


Figura 6.9: Padrão de fluxo estimado na malha Nível 5

6.3 Obtenção da correlação do Número de Nusselt: Validação do Modelo

Nesta seção, é apresentada a correlação obtida por meio do modelo CFD proposto no presente trabalho. Diferentes estudos de caso foram realizados com o objetivo de se obter uma correlação com a mesma faixa de validade proposta no trabalho experimental desenvolvido por OLDSHUE e GRETTON (1954). A configuração do modelo de simulação CFD, condições operacionais e parâmetros geométricos para os 24 estudos de caso foram descritos na Subseção 5.2.3.

Para calcular os parâmetros da correlação do Número de Nusselt obtida pelo modelo CFD, dados de fluxo de calor retirado pela serpentina de esfriamento e temperatura no seio do fluido foram estimados para os 24 testes simulados. O coeficiente de transferência de calor médio foi obtido por meio da lei de esfriamento de Newton (Equação 5.2). Dados do Número de Nusselt (Nu), Reynolds (Re), Prandtl (Pr) e relações geométricas tais como, diâmetro do impelidor e da serpentina com relação ao tanque foram calculados, como mostrado na Tabela 6.2.

Os parâmetros da correlação foram ajustados utilizando o Método do Gradiente Reduzido Generalizado (GRG *Nonlinear*), o qual minimiza a soma dos quadrados das diferenças entre os valores de Nusselt predito pela correlação e o resultado obtido nas simulações. A correlação geral de h_o com outras variáveis obtida pelo modelo CFD é apresentada na Equação 6.1.

$$\frac{h_o d}{k} = 0,35 \left(\frac{ND^2 \rho}{\mu} \right)^{0,67} \left(\frac{C_p \mu}{k} \right)^{0,37} \left(\frac{D}{T} \right)^{0,32} \left(\frac{d}{T} \right)^{0,59} \quad (6.1)$$

Para avaliar a concordância dos resultados preditos pela correlação CFD em relação aos dados experimentais foram quantificados os desvio médio e padrão, conforme as Equações 6.2 e 6.3.

$$\text{Desvio médio} = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{N_{Nu \text{ calculado}} - N_{Nu \text{ medido}}}{N_{Nu \text{ calculado}}} \right) \quad (6.2)$$

$$\text{Desvio padrão} = 100 \left[\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \left(\frac{N_{Nu \text{ calculado}} - N_{Nu \text{ medido}}}{N_{Nu \text{ calculado}}} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (6.3)$$

em que n é definido como o número de pontos da amostra.

Tabela 6.2: Resultados obtidos pelo modelo CFD na validação

Caso Simulado N°	Fluido	Nu	Re	Pr	(D/T)	(d/T)
1	Água	190	66684	26,5	0,333	0,036
2	Água	318	133368	26,5	0,333	0,036
3	Água	433	200052	26,5	0,333	0,036
4	Glicerina	83	1731	1671,6	0,333	0,036
5	Glicerina	128	3462	1671,6	0,333	0,036
6	Glicerina	159	5194	1671,6	0,333	0,036
7	Óleo vegetal	129	5065	588,2	0,333	0,036
8	Óleo vegetal	176	10130	588,2	0,333	0,036
9	Óleo vegetal	205	15195	588,2	0,333	0,036
10	Água	186	75020	26,5	0,250	0,036
11	Água	480	208388	26,5	0,417	0,036
12	Água	669	300078	26,5	0,500	0,036
13	Água	869	408440	26,5	0,583	0,036
14	Glicerina	107	1948	1671,6	0,250	0,036
15	Glicerina	182	5410	1671,6	0,417	0,036
16	Glicerina	222	7791	1671,6	0,500	0,036
17	Glicerina	263	10604	1671,6	0,583	0,036
18	Óleo vegetal	151	5698	588,2	0,250	0,036
19	Óleo vegetal	282	15828	588,2	0,417	0,036
20	Óleo vegetal	334	22792	588,2	0,500	0,036
21	Óleo vegetal	388	31023	588,2	0,583	0,036
22	Água	197	133368	26,5	0,333	0,018
23	Glicerina	86	3462	1671,6	0,333	0,018
24	Óleo vegetal	152	10130	588,2	0,333	0,018

A exatidão das predições feitas pela correlação do Número de Nusselt proposta (Equação 6.1) foram quantificadas utilizando os desvios médio e padrão. Assim, os resultados experimentais obtidos por OLDSHUE e GRETTON (1954) foram comparados com os valores preditos pela correlação CFD para cada um dos pontos dados. A Equação 6.1 descreveu os dados de cerca de 107 pontos com um desvio médio de 10,7 % e padrão de 12,7%.

Conforme os resultados, conclui-se que o modelo mostrou boa concordância na predição do coeficiente de transferência de calor para tanques de mistura com serpentinas helicoidais. Portanto, pode ser afirmado que o modelo computacional oferece uma boa representação do fenômeno físico real. Além disso, a equação proposta pelo modelo CFD pode ser utilizada no projeto de sistemas geometricamente similares na faixa de variáveis

estudadas neste trabalho.

Na Figura 6.10 são mostrados os desvios do Número de Nusselt estimados a partir da correlação CFD em relação aos valores relatados no trabalho experimental de OLDSHUE e GRETTON (1954). De forma geral, observa-se que a correlação CFD apresentou pouca dispersão dos dados estimados, com uma leve superestimação dos resultados do Número de Nusselt.

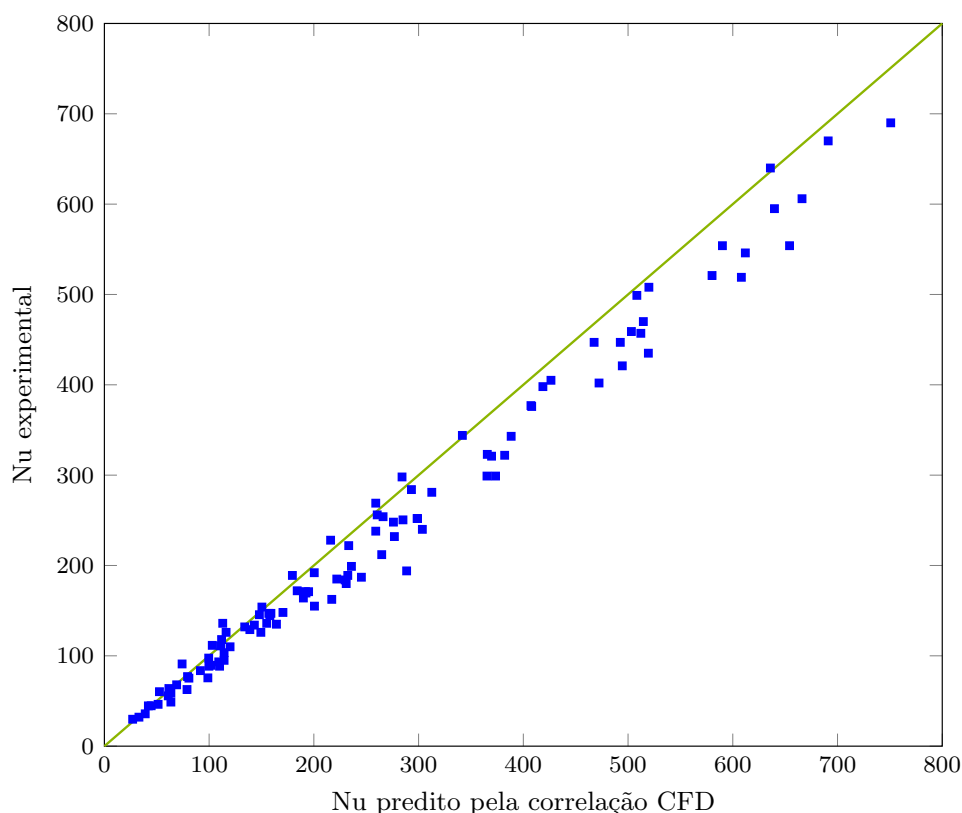


Figura 6.10: Dispersão dos resultados no cálculo do Número de Nusselt pela correlação obtida na modelagem CFD

A correlação experimental também foi avaliada calculando os desvios médio e padrão dos resultados estimados em relação aos dados experimentais para cada ponto dado. A Equação 1.2 descreveu os dados de cerca de 107 pontos com um desvio médio de 11,3 % e padrão de 14,1%. Os desvios do Número de Nusselt estimados a partir da correlação experimental em relação aos valores experimentais de OLDSHUE e GRETTON (1954) são mostrados na Figura 6.11. Observa-se uma subestimação dos resultados do Número de Nusselt preditos pela correlação experimental, contrariando o observado na Figura 6.10.

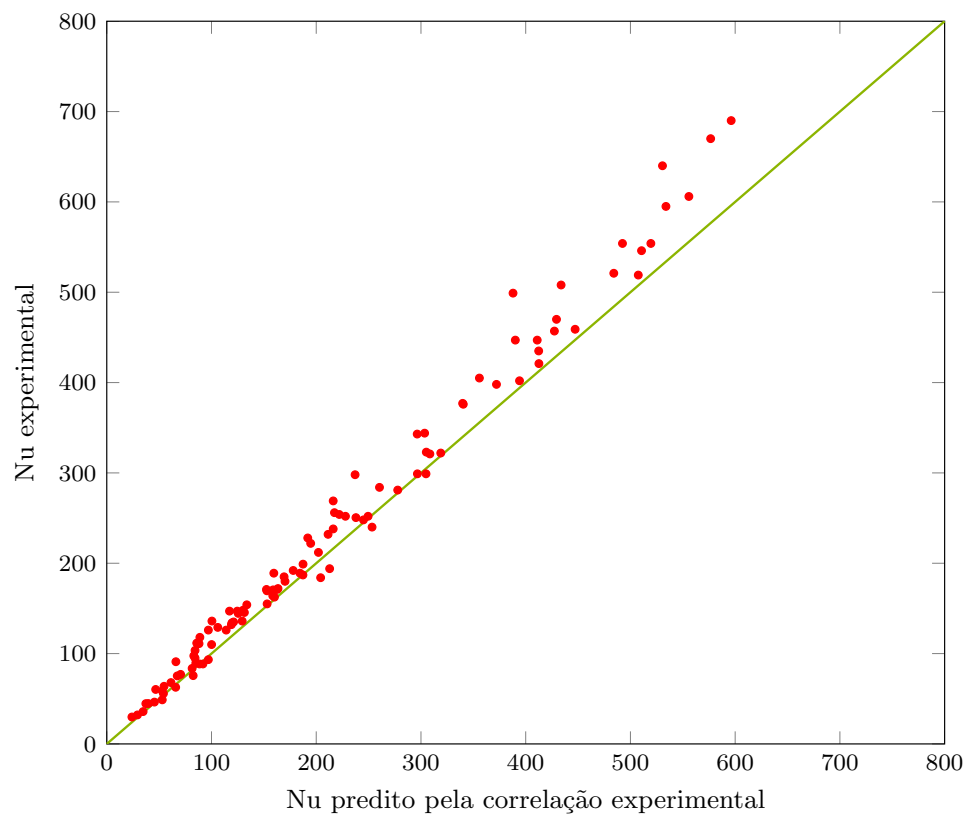


Figura 6.11: Dispersão dos resultados no cálculo do Número de Nusselt pela correlação obtida por OLDSHUE e GRETTON (1954)

A partir dos desvios obtidos pelas correlações experimental e de simulação, pode-se concluir que a correlação CFD apresentou uma menor dispersão dos resultados, pois a correlação experimental foi obtida por métodos gráficos. Um gráfico de Nusselt versus Reynolds foi realizado (Figura 6.12) com o intuito de avaliar a dispersão das previsões obtidas pelas correlações CFD e Experimental em comparação com os dados experimentais reportados por OLDSHUE e GRETTON (1954). Observa-se claramente que o modelo CFD superestima o coeficiente de transferência de calor por convecção, contrariamente à subestimação apresentada pela correlação experimental.

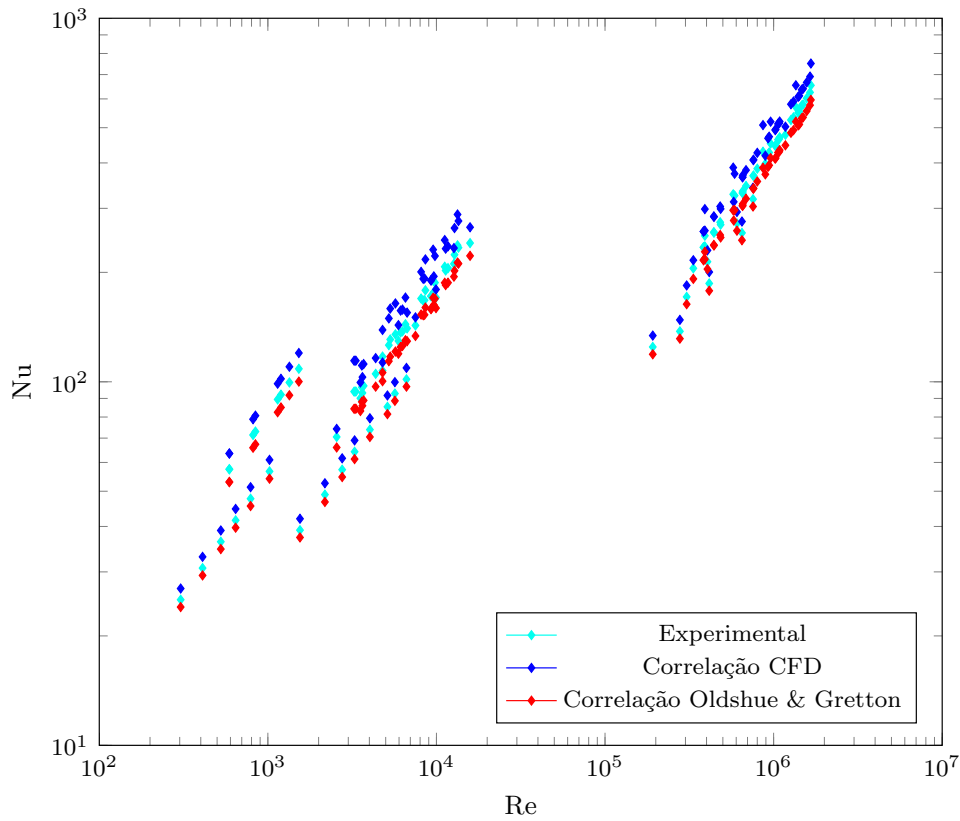


Figura 6.12: Número de Nusselt em função do Número de Reynolds para os dados preditos pelas correlações experimental e CFD

Utilizando-se o Método de Mínimos Quadrados GRG, um melhor ajuste dos parâmetros da correlação do Número de Nusselt foi encontrado por meio dos dados experimentais descritos no trabalho desenvolvido por OLDSHUE e GRETTON (1954). A nova correlação obtida pelo Método de Mínimos Quadrados GRG é apresentada na Equação 6.4.

$$\frac{h_o d}{k} = 0,23 \left(\frac{ND^2 \rho}{\mu} \right)^{0,67} \left(\frac{C_p \mu}{k} \right)^{0,37} \left(\frac{D}{T} \right)^{0,15} \left(\frac{d}{T} \right)^{0,55} \quad (6.4)$$

Um desvio médio e padrão de 6,7 % e 8,6%, respectivamente, foi descrito pela Equação 6.4 na predição dos 107 pontos experimentais (OLDSHUE e GRETTON, 1954). Os desvios do Número de Nusselt estimados a partir da nova correlação em relação aos valores experimentais são mostrados na Figura 6.13. Uma melhor dispersão dos resultados gerados pela nova correlação foi observada, com desvios que podem ser favoravelmente comparados com o erro experimental esperado na medição de propriedades físicas, temperatura e fluxos (RAO e MURTI, 1973).

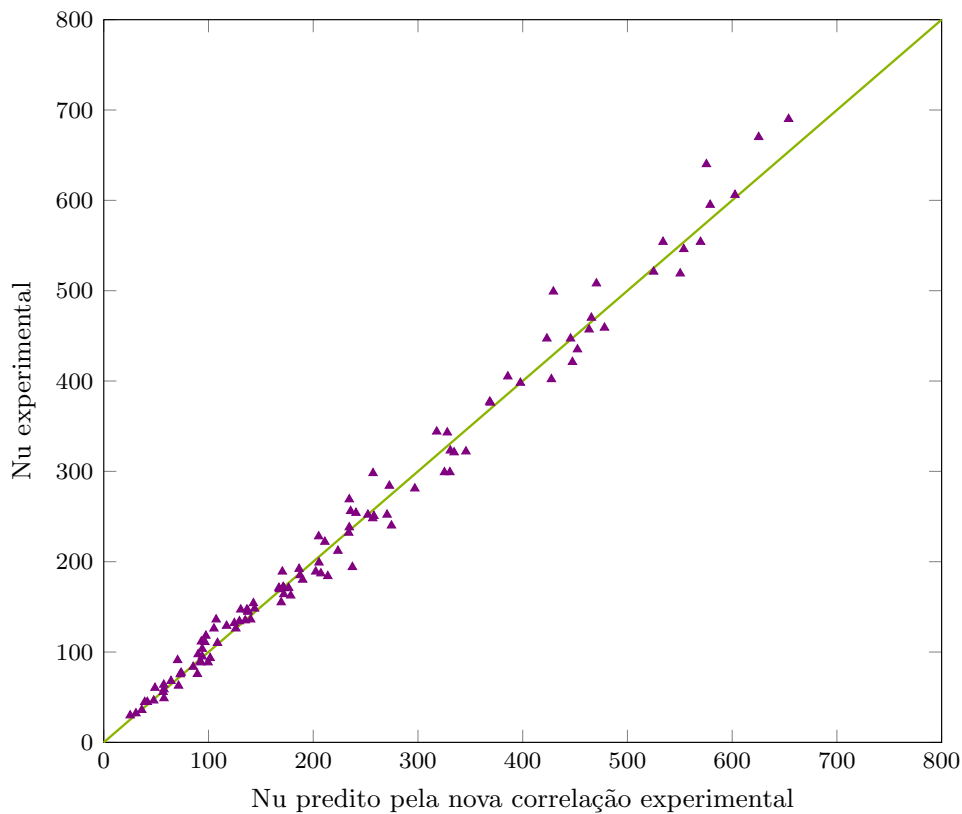


Figura 6.13: Dispersão dos resultados no cálculo do Número de Nusselt pela nova correlação

Para se comparar os dados experimentais com a Equação 6.1 (Correlação CFD), foi plotado um gráfico de Re em função de $Nu/Pr^{0,37}(D/T)^{0,32}(d/T)^{0,59}$, como mostrado na Figura 6.14. Foi estimado o Número de Nusselt predito pela correlação CFD para as condições utilizadas na obtenção dos 107 dados experimentais. Apesar das diferenças dos expoentes dos Números adimensionais (D/T) e (d/T) , foi encontrada uma concordância razoável entre os dados experimentais (OLDSHUE e GRETTON, 1954) e os valores preditos na correlação CFD.

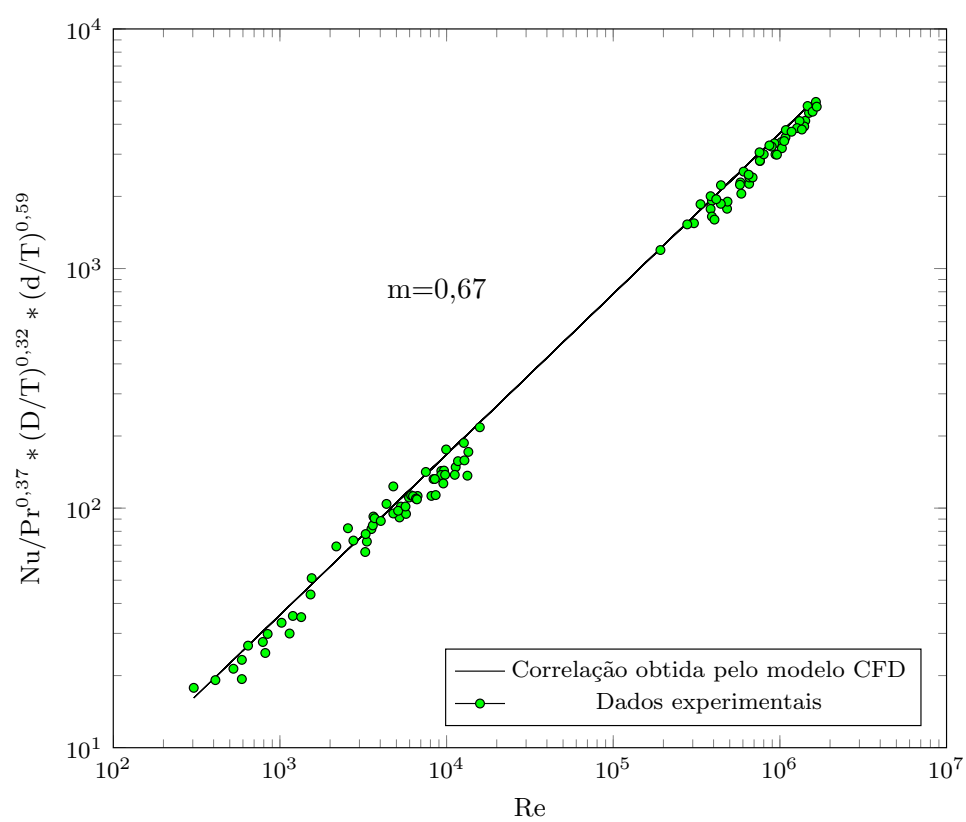


Figura 6.14: Comparação dos dados experimentais com a Equação 6.1 obtida pelo Modelo CFD

Com o modelo validado, uma nova correlação do Número de Nusselt pode ser obtida para a nova configuração geométrica (Seção 6.4). Posteriormente, essas duas correlações serão analisadas com o intuito de saber se a configuração geométrica modificada apresenta um melhor coeficiente de transferência de calor como reportado na literatura (PEDROSA e NUNHEZ, 2003; NUNHEZ e MCGREAVY, 1994; NUNHEZ, 1994; STREET, 1991; STREET e MCGREAVY, 1991).

6.4 Obtenção da correlação do Número de Nusselt para a nova configuração

Nesta seção, será apresentada a correlação determinada por meio do modelo CFD proposto e validado neste estudo. Conforme já foi mencionado na Subseção 5.2.3, uma modificação da configuração proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954) foi sugerida por STREET e MCGREAVY (1991), com o intuito de melhorar a circulação do fluido no reator de tanque agitado e consequentemente a troca térmica dentro destes dispositivos. A nova configuração geométrica foi apresentada na Figura 5.9.

Depois da validação do modelo CFD, uma correlação do Número de Nusselt foi gerada para a nova configuração, conforme explicado na Seção 6.3. As condições operacionais e configurações geométricas utilizadas na obtenção da nova correlação (24 estudos de caso simulados) são as mesmas apresentadas na Tabela 5.6.

Dados do Número de Nusselt (Nu), Reynolds (Re), Prandtl (Pr) e relações geométricas, tais como diâmetro do impelidor e da serpentina com relação ao tanque foram calculados para a nova configuração, como mostrado na Tabela 6.3. A correlação geral de h_o obtida pelo modelo CFD para a nova configuração é apresentada na Equação 6.5, cujos parâmetros foram ajustados utilizando o Método do Gradiente Reduzido Generalizado (GRG *Nonlinear*).

$$\frac{h_o d}{k} = 0,54 \left(\frac{ND^2 \rho}{\mu} \right)^{0,67} \left(\frac{C_p \mu}{k} \right)^{0,37} \left(\frac{D}{T} \right)^{0,21} \left(\frac{d}{T} \right)^{0,78} \quad (6.5)$$

Como observado na Tabela 6.3, um menor Número de Nusselt foi obtido na maioria dos testes simulados da nova geometria em comparação com a configuração convencional. Para uma melhor avaliação da troca térmica gerada pelas duas configurações, o

Tabela 6.3: Resultados obtidos pelo modelo CFD da nova configuração

Caso Simulado N°	Fluido	Nu	Re	Pr	(D/T)	(d/T)
1	Água	165	66684	26,5	0,333	0,036
2	Água	274	133368	26,5	0,333	0,036
3	Água	383	200052	26,5	0,333	0,036
4	Glicerina	73	1731	1671,6	0,333	0,036
5	Glicerina	122	3462	1671,6	0,333	0,036
6	Glicerina	151	5194	1671,6	0,333	0,036
7	Óleo vegetal	131	5065	588,2	0,333	0,036
8	Óleo vegetal	194	10130	588,2	0,333	0,036
9	Óleo vegetal	242	15195	588,2	0,333	0,036
10	Água	161	75020	26,5	0,250	0,036
11	Água	429	208388	26,5	0,417	0,036
12	Água	595	300078	26,5	0,500	0,036
13	Água	743	408440	26,5	0,583	0,036
14	Glicerina	67	1948	1671,6	0,250	0,036
15	Glicerina	162	5410	1671,6	0,417	0,036
16	Glicerina	202	7791	1671,6	0,500	0,036
17	Glicerina	228	10604	1671,6	0,583	0,036
18	Óleo vegetal	129	5698	588,2	0,250	0,036
19	Óleo vegetal	257	15828	588,2	0,417	0,036
20	Óleo vegetal	307	22792	588,2	0,500	0,036
21	Óleo vegetal	340	31023	588,2	0,583	0,036
22	Água	159	133368	26,5	0,333	0,018
23	Glicerina	62	3462	1671,6	0,333	0,018
24	Óleo vegetal	121	10130	588,2	0,333	0,018

Número de Nusselt foi estimado pelas correlações CFD para cada uma das 107 condições reportadas no trabalho experimental. Na Figura 6.15 são mostrados os dados estimados do Número de Reynolds em função do Número de Nusselt para as duas geometrias estudadas.

Trabalhos anteriores descritos na literatura sobre esta geometria indicavam que, aparentemente, essa nova configuração apresentaria um melhor coeficiente de transferência de calor devido à melhoria do escoamento (PEDROSA e NUNHEZ, 2003; NUNHEZ e MCGREAVY, 1994; NUNHEZ, 1994; STREET, 1991; STREET e MCGREAVY, 1991). Entretanto, os resultados atuais com um maior refinamento da malha ao redor das superfícies de troca térmica indicam que, apesar da sensível melhoria do escoamento, a nova geometria não é indicada pois apresentou uma troca térmica inferior.

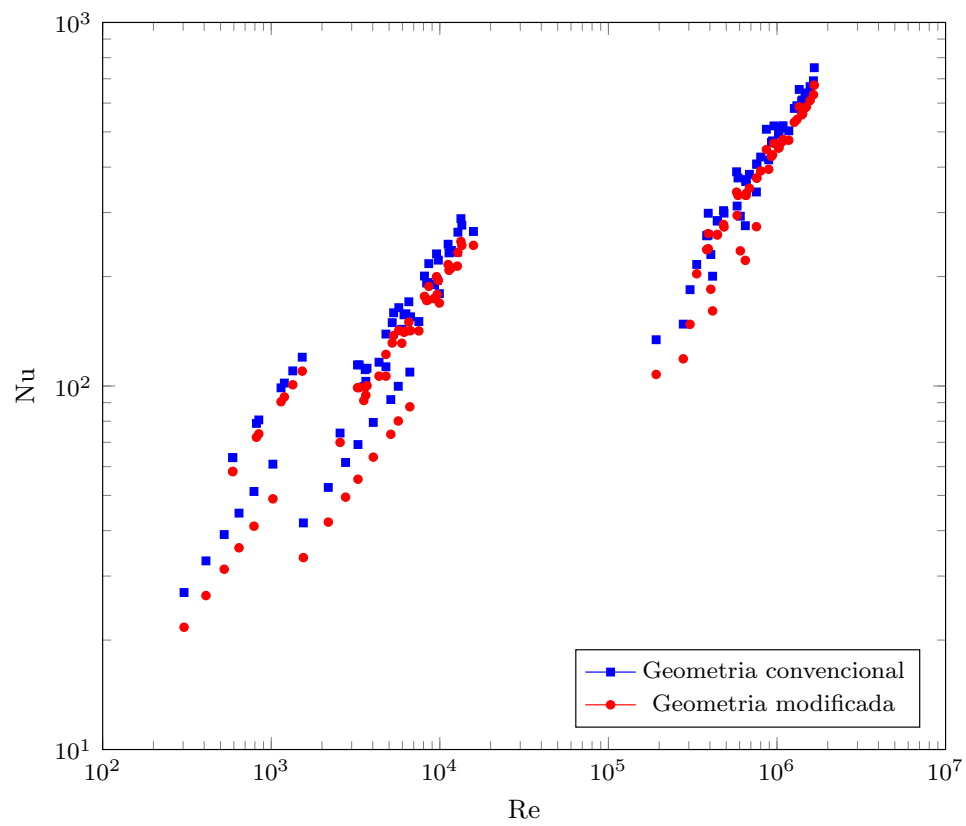


Figura 6.15: Número de Nusselt em função do Número de Reynolds para as geometrias convencional e modificada

O gráfico de Reynolds versus Nusselt, apresentado na Figura 6.15, mostrou a influência da velocidade do impelidor e o tipo de fluido na transferência de calor da superfície. Todas as linhas apresentadas na figura para os diferentes tipos de fluidos mostraram uma inclinação de aproximadamente $2/3$ correspondente ao expoente do Número de Reynolds nas correlações obtidas para as duas geometrias.

Para se obter a relação entre os coeficientes e as propriedades físicas dos fluidos, foi gerado um gráfico do $(Nu/Re)^{2/3}$ em função do Pr (Figura 6.16). Observa-se que as duas séries de dados apresentaram uma inclinação de aproximadamente $0,37$, correspondente ao expoente do Número de Prandtl nas duas correlações.

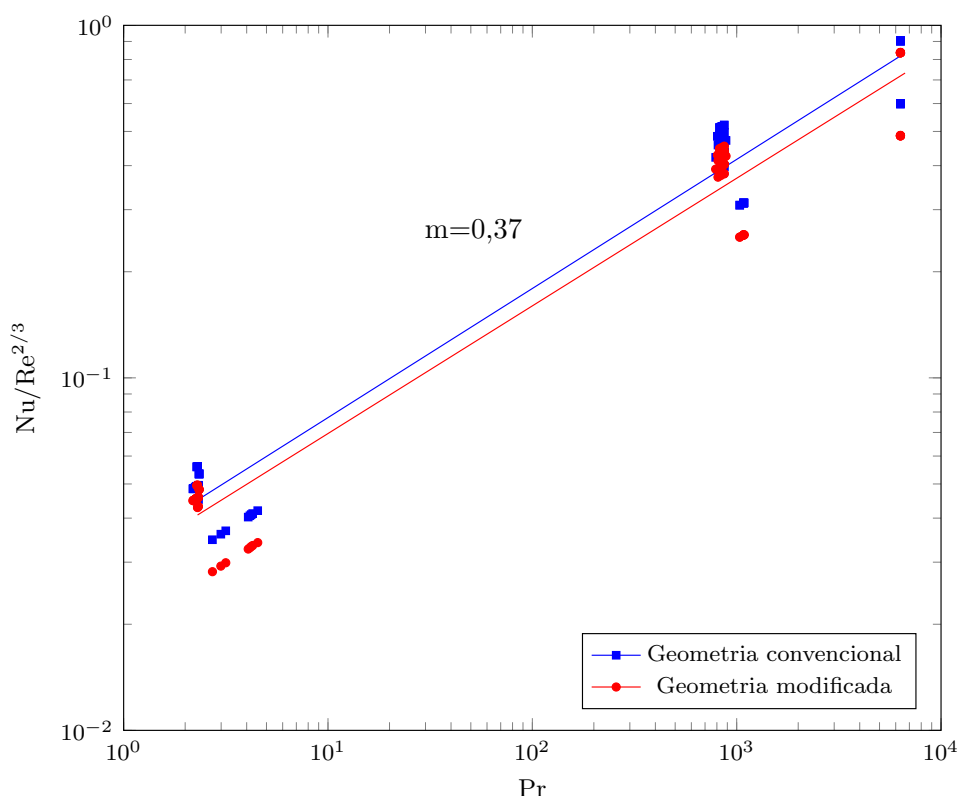


Figura 6.16: Número de Nusselt dividido pelo Número de Reynolds à $2/3$ em função do Número de Prandtl para as geometrias convencional y modificada

Um gráfico do $(Nu/Pr)^{0,37}$ em função de Re foi obtido para as geometrias convencional e modificada, como apresentado na Figura 6.17. Um comportamento linear e paralelo foi observado para as duas configurações geométricas com uma inclinação aproximadamente de $2/3$, determinando o expoente do Número de Reynolds para o sistema estudado. Além disso, para uma configuração geométrica dada, mudanças do diâmetro de tubo da serpentina apresentam diferentes linhas retas, mas paralelas entre si, mos-

trando um maior Número de Nusselt para a serpentina de diâmetro de tubulação maior ($d_1 = 7/4$ in).

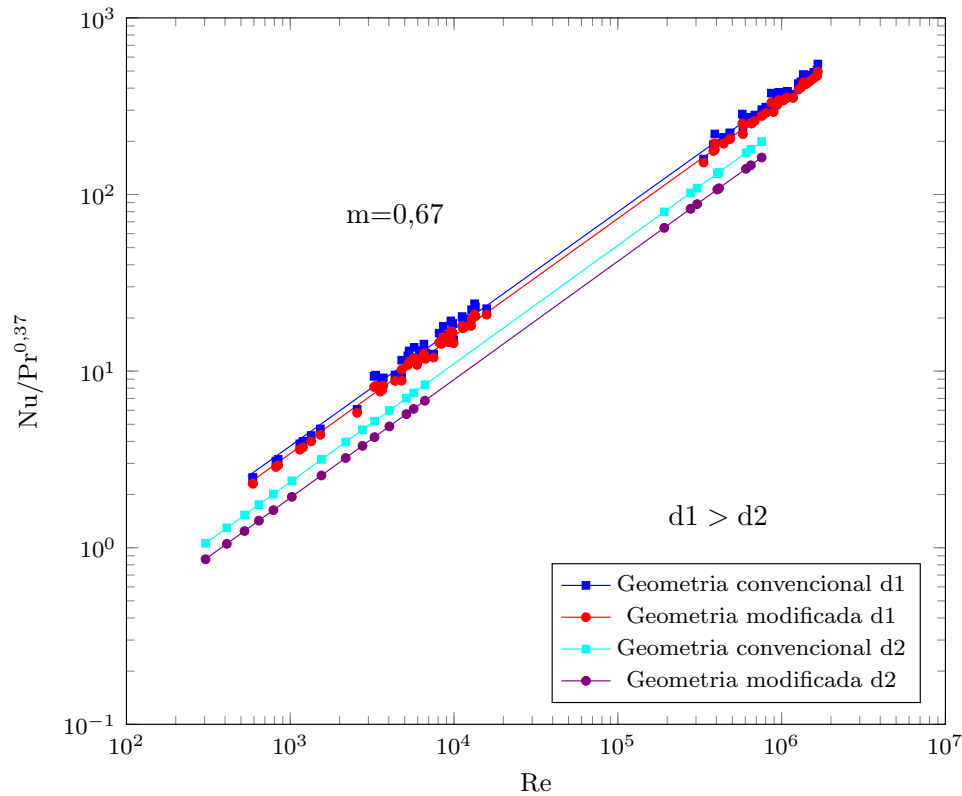


Figura 6.17: Número de Nusselt dividido pelo Número de Prandtl à 0,37 em função do Número de Reynolds para as geometrias convencional e modificada

Finalmente, as duas configurações serão analisadas para um melhor entendimento do escoamento e troca térmica no interior do reator de tanque agitado, além de se obter a transferência de calor das várias partes da serpentina helicoidal para as duas configurações geométricas estudadas no presente trabalho. Perfis de velocidade, fluxo de calor, coeficiente de transferência de calor e energia cinética turbulenta são reportados na Seção 6.5.

6.5 Estudos de casos propostos

Nesta seção, são apresentados os resultados da influência do diâmetro e velocidade do impelidor, tipos de fluidos e diâmetros do tubo da serpentina na transferência de calor e escoamento das configurações propostas por OLDSHUE e GRETTON (1954) e STREET e MCGREAVY (1991).

6.5.1 Variação da velocidade de rotação do impelidor

Para avaliar a influência das velocidades do impelidor, foram utilizados três diferentes velocidades rotacionais: 100, 200 e 300 rpm para cada um dos fluidos mostrados na Tabela 5.4. Uma análise qualitativa foi feita para observar a influência da velocidade do impelidor no padrão de fluxo, sendo traçados os vetores de velocidade para as duas configurações, utilizando o impelidor tipo Rushton de seis pás, conforme mostrado nas Figuras 6.19 à 6.24.

Os resultados dos perfis de velocidade foram tomados em um plano axial localizado desde o centro (metade de uma pá do impelidor) até a parede do tanque (metade de duas chicanas), conforme mostrado na Figura 6.18. Em todos os estudos de casos (Figura 6.19 à 6.24) pode-se observar que o padrão de fluxo apresentado é característico destes tipos de impelidores, mostrando consistência da solução numérica com os fenômenos físicos envolvidos em tanques de mistura com impelidores radiais. Mesmo estes apresentando serpentinas helicoidais imersas no fluido que poderiam diminuir a circulação global ou até mudar o padrão de fluxo, devido ao efeito de arrasto.

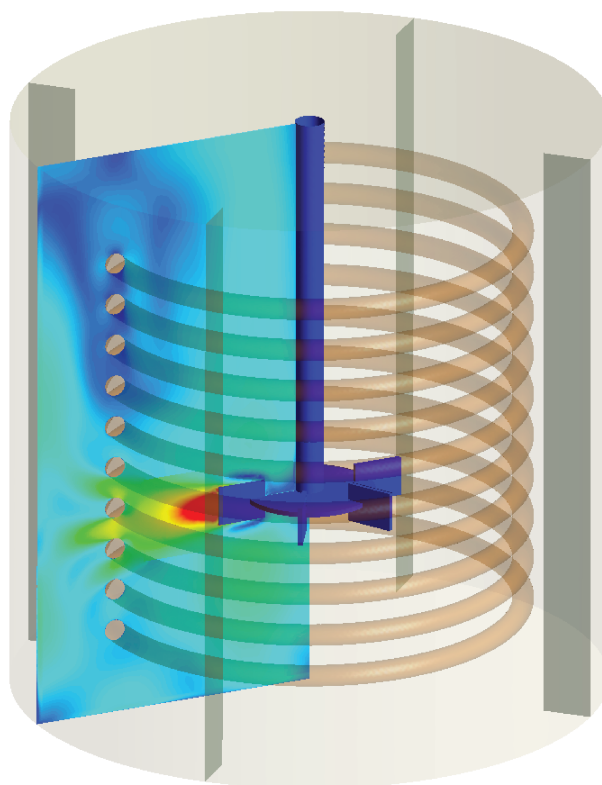


Figura 6.18: Plano axial utilizado no cálculo dos perfis de velocidade

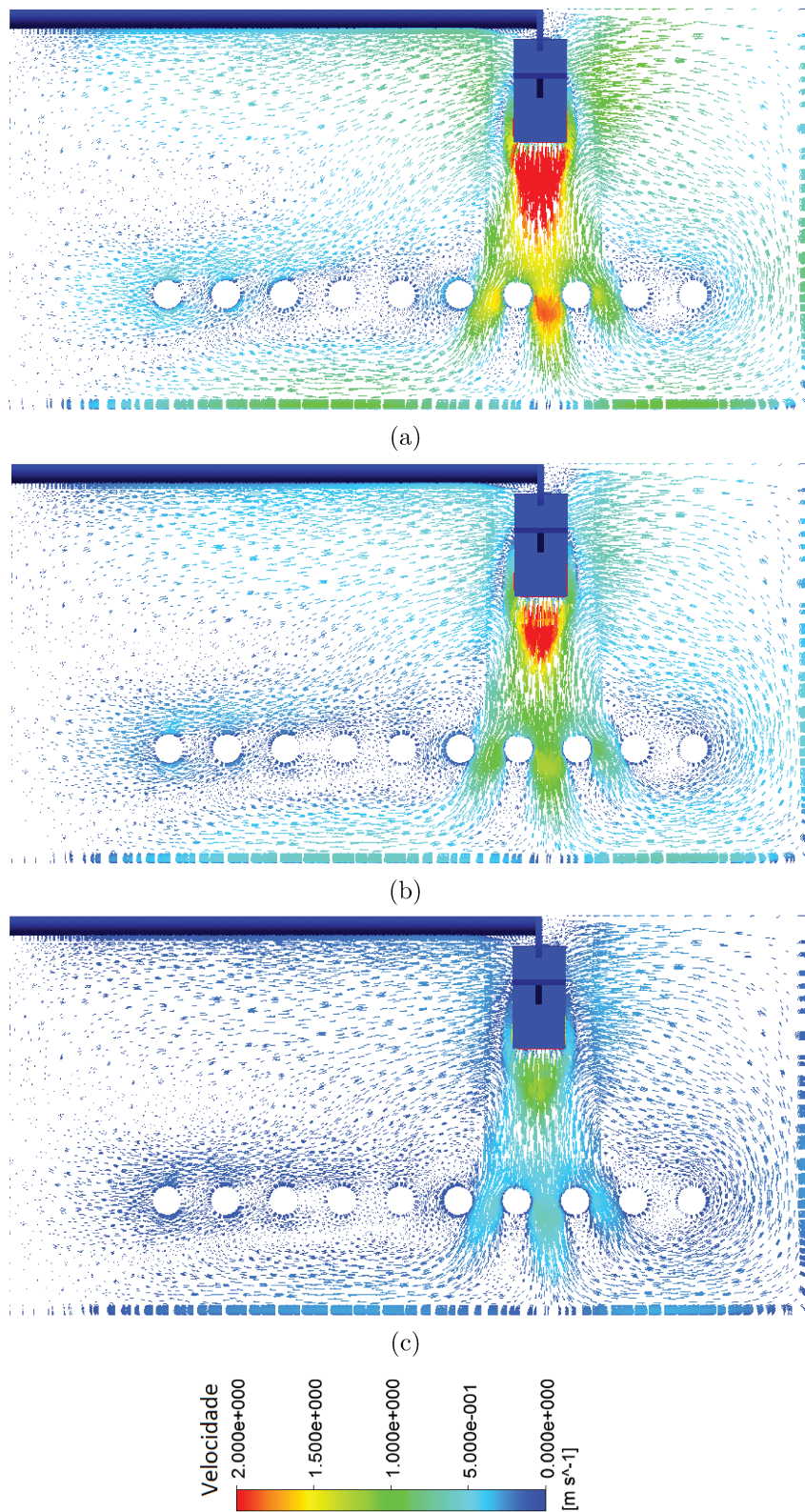


Figura 6.19: Vetores de velocidade da água para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) 300 rpm. (b) 200 rpm. (c) 100 rpm

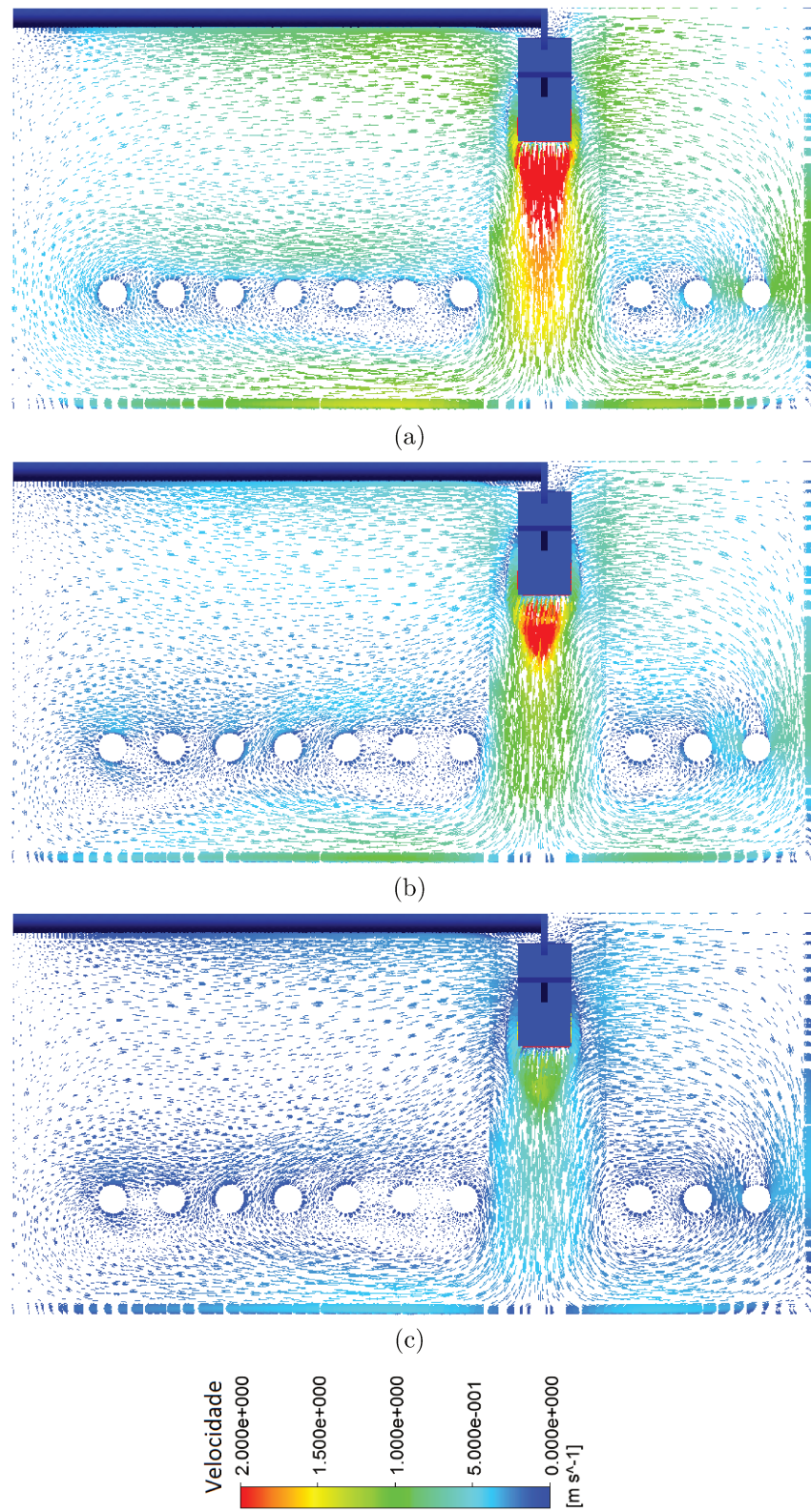


Figura 6.20: Vetores de velocidade da água para a geometria sugerida por STREET e MCGREAVY (1991). (a) 300 rpm. (b) 200 rpm. (c) 100 rpm

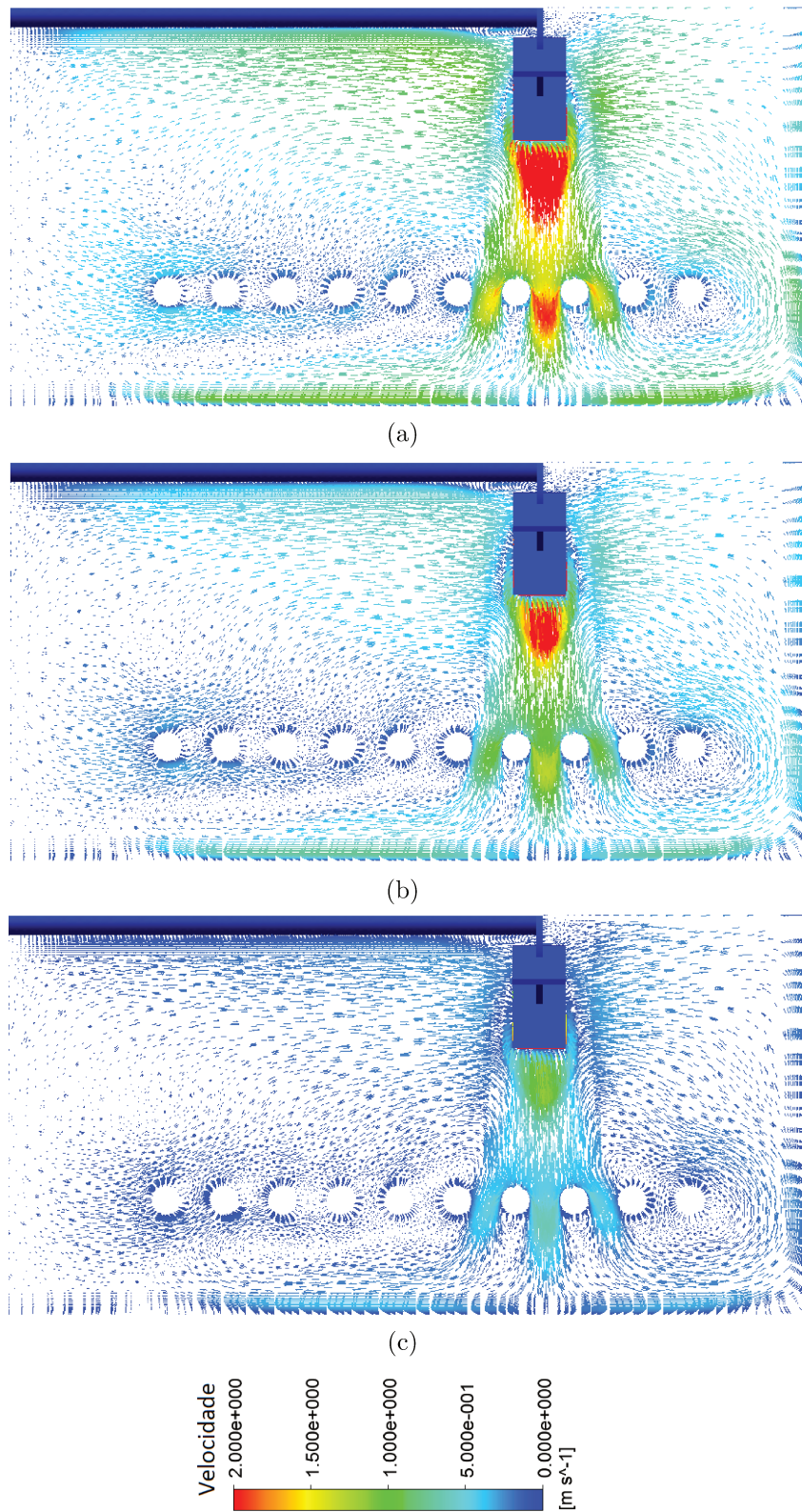


Figura 6.21: Vetores de velocidade do óleo vegetal para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) 300 rpm. (b) 200 rpm. (c) 100 rpm

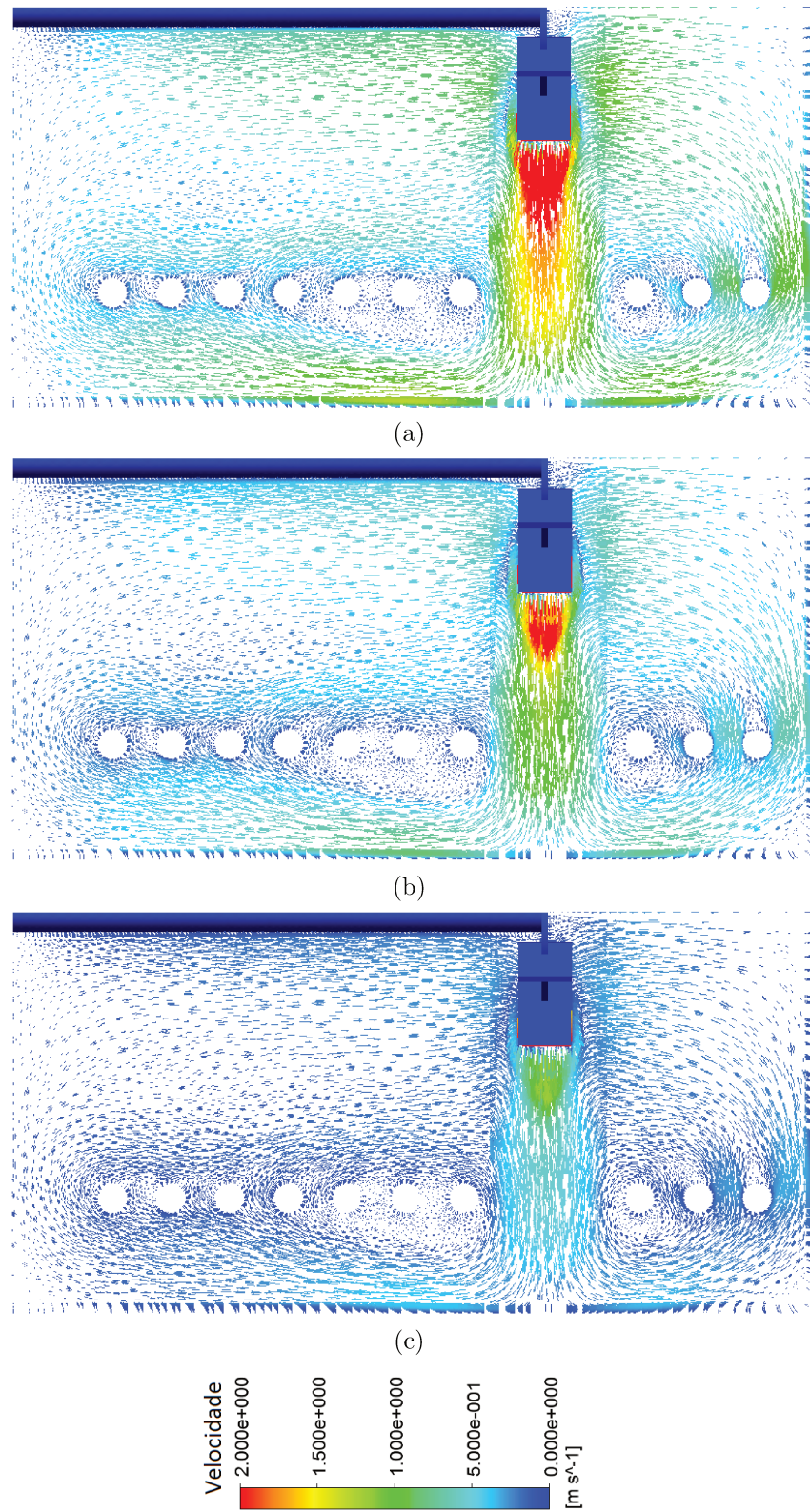


Figura 6.22: Vetores de velocidade do óleo vegetal para a geometria sugerida por STREET e MCGREAVY (1991). (a) 300 rpm. (b) 200 rpm. (c) 100 rpm

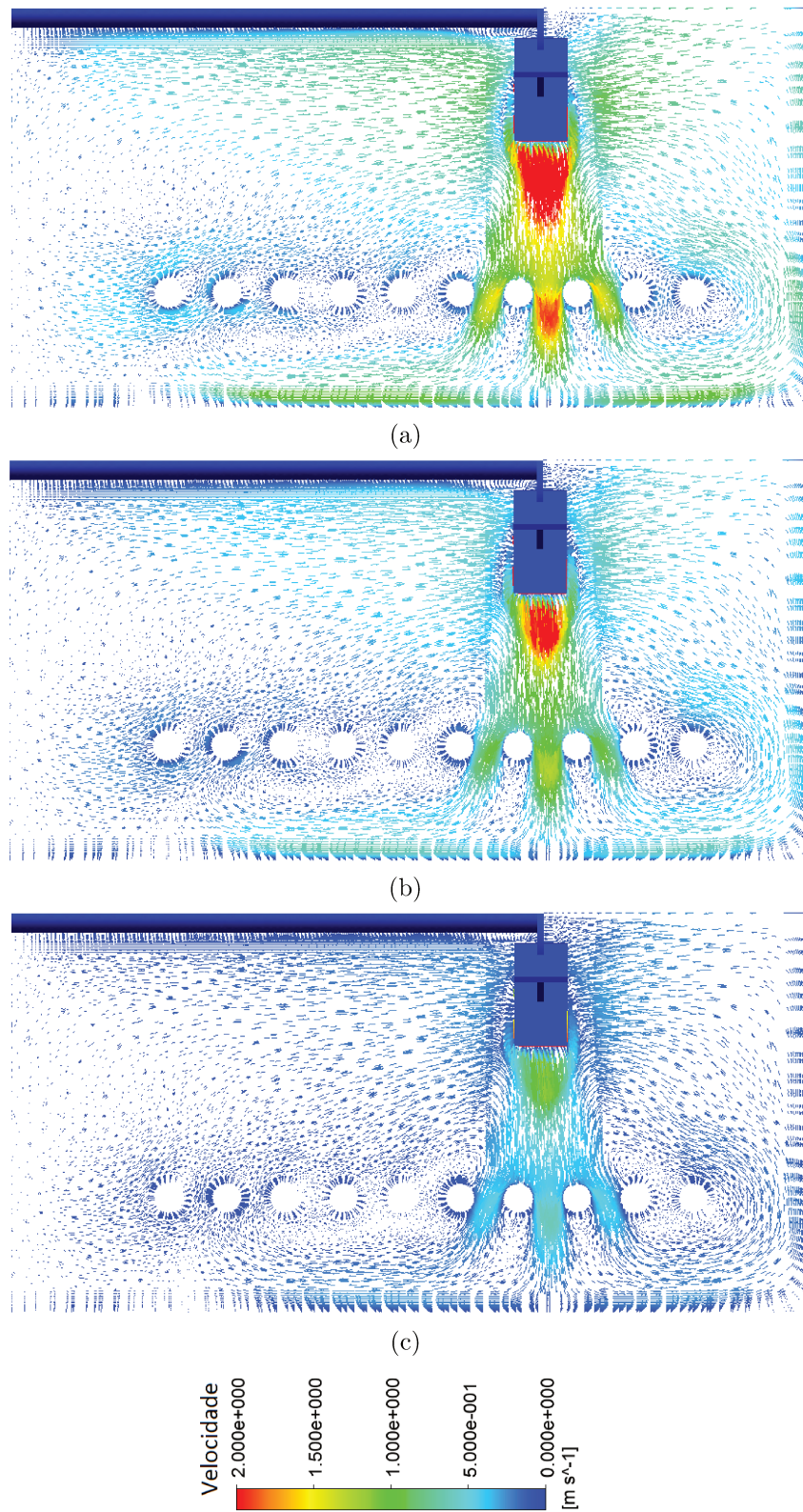


Figura 6.23: Vetores de velocidade da glicerina para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) 300 rpm. (b) 200 rpm. (c) 100 rpm

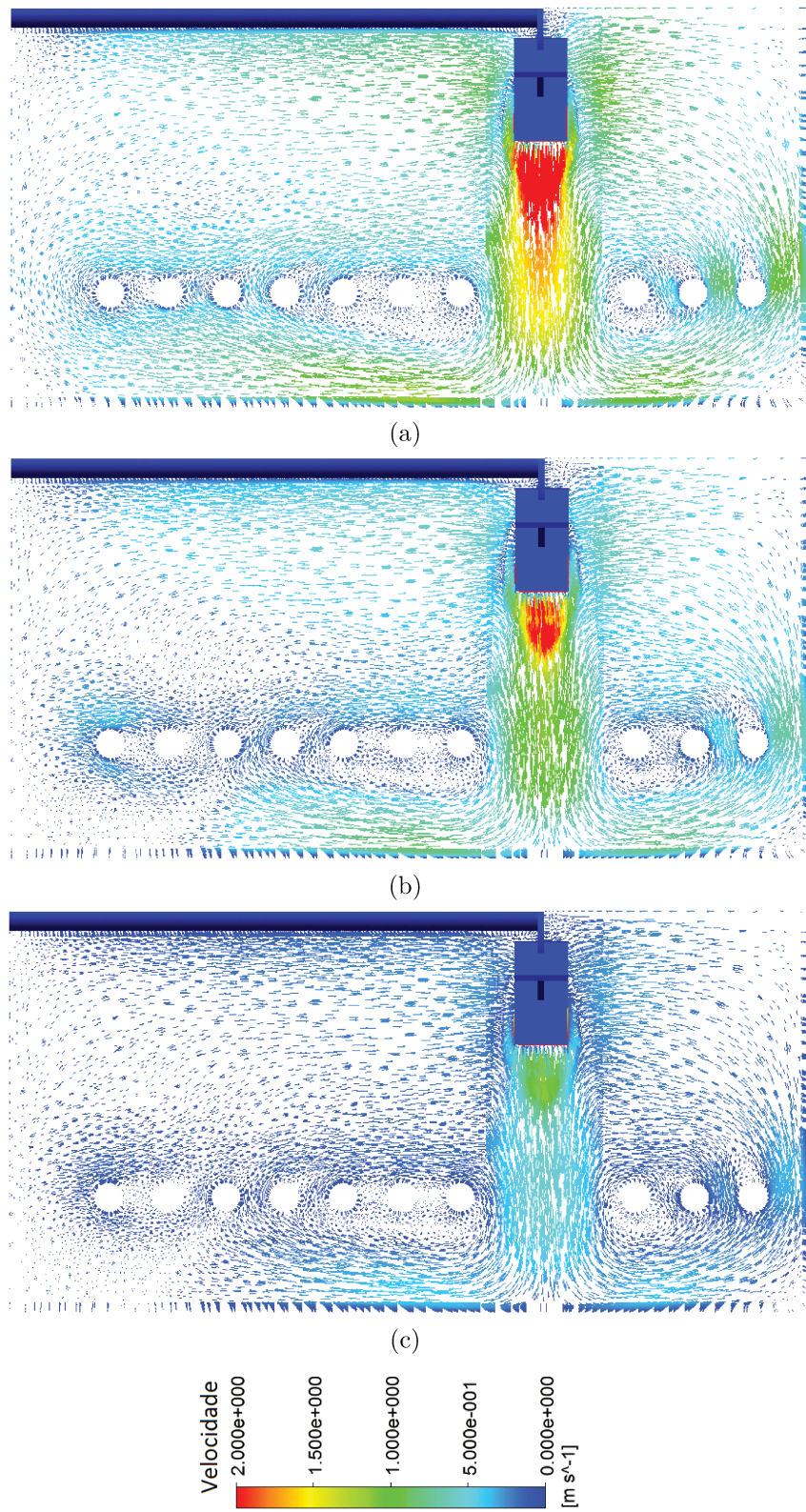


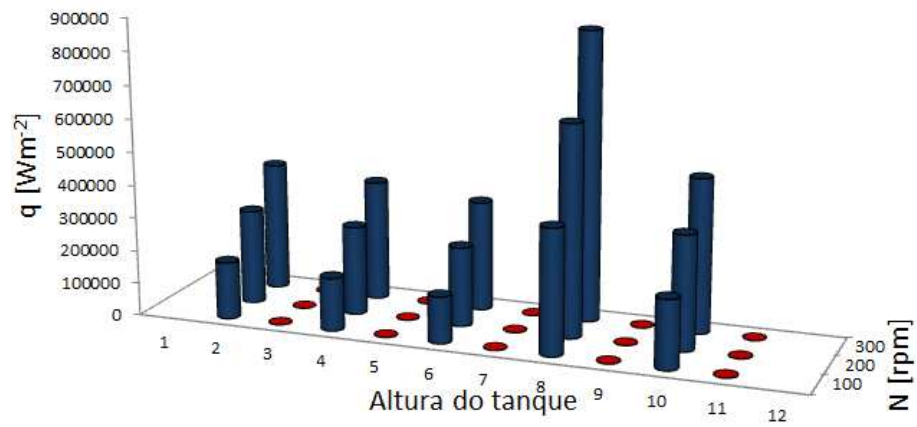
Figura 6.24: Vetores de velocidade da glicerina para a geometria sugerida por STREET e MCGREAVY (1991). (a) 300 rpm. (b) 200 rpm. (c) 100 rpm

Quando comparadas as configurações convencional e modificada, observa-se que na configuração proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954) (convencional) a velocidade média do fluido diminui quando o jato principal que deixa as pás do impelidor encontra-se com os anéis da serpentina localizados na altura do propulsor, fazendo com que a circulação global do fluido seja dificultada.

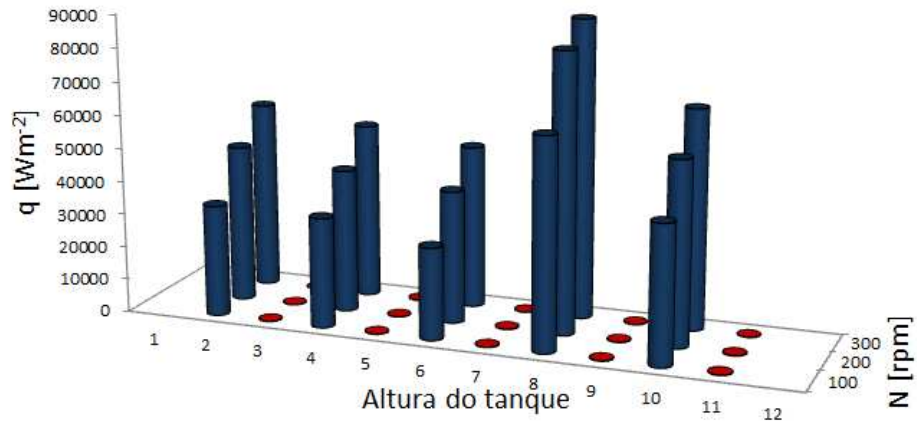
No reator modificado foi observado um leve aumento na velocidade média do fluido entre a parede do tanque e a serpentina helicoidal, quando o fluido de menor viscosidade (água) foi testado nas três velocidades de rotação do impelidor (Figuras 6.19 e 6.20). Portanto, uma melhor circulação do fluido global foi obtida nesta configuração. Isso deve-se ao fato de não possuir superfícies (anéis localizados na altura das pás do impelidor) que desviem parte do fluxo radial fornecido pelo impelidor.

Para os fluidos de maior viscosidade tais como, óleo vegetal e glicerina, uma estagnação na região entre as paredes do tanque e a serpentina foi apresentada na geometria convencional, para as velocidades de rotação testadas (Figura 6.21 à 6.24). Esta estagnação foi totalmente eliminada pela geometria modificada obtendo-se uma boa recirculação dos fluidos com alta viscosidade. Além disso, foi observada uma melhoria na circulação do fluido ao redor das superfícies de troca térmica e no fundo do tanque, com uma modificação simples da posição dos anéis que prejudicavam o fluxo radial fornecido pelo impelidor.

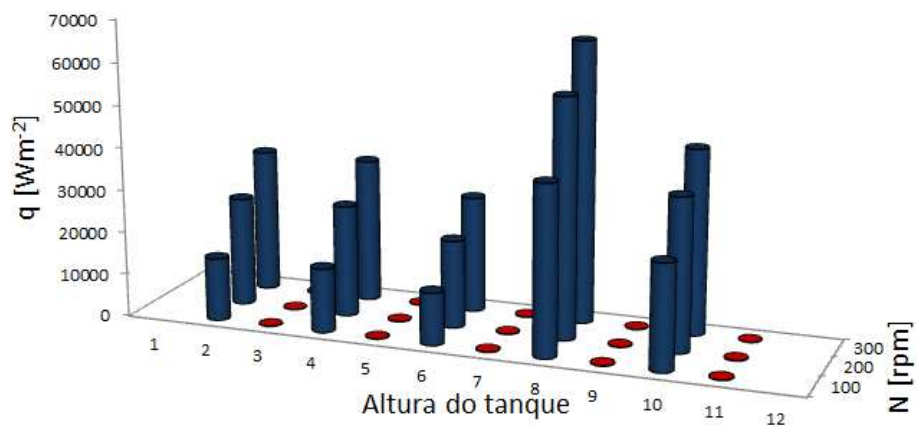
Para observar o efeito dos padrões de fluxo na transferência de calor, anéis alternados foram utilizados para o aquecimento (fluxo constante) e resfriamento (temperatura constante) com a parede do tanque adiabática, como discutido na Subseção 5.2.3. O fluxo de calor médio foi calculado para cada um dos anéis de esfriamento das configurações convencional e modificada, como mostrado nas Figuras 6.25 e 6.26. Três diferentes velocidades do impelidor foram analisadas para cada fluido, com e sem anéis presentes na altura das pás do impelidor (área de transferência de calor constante para as duas configurações). Os pontos vermelhos refere-se aos anéis que estão introduzindo energia ao sistema, enquanto, as barras em azul mostram a quantidade de energia retirada do sistema pelas serpentinas de resfriamento. A altura do tanque foi dividida em 12 seções indicando-se com 1 a região compreendida pelo topo do tanque e entre oito e nove como a região onde impelidor está posicionado.



(a)

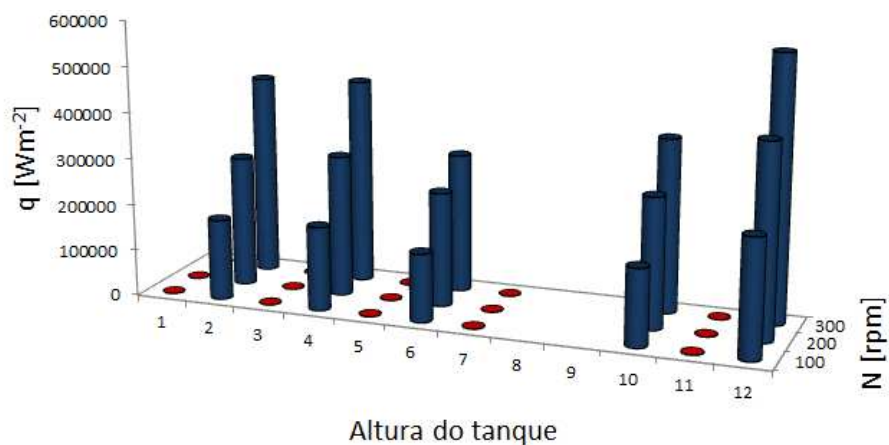


(b)

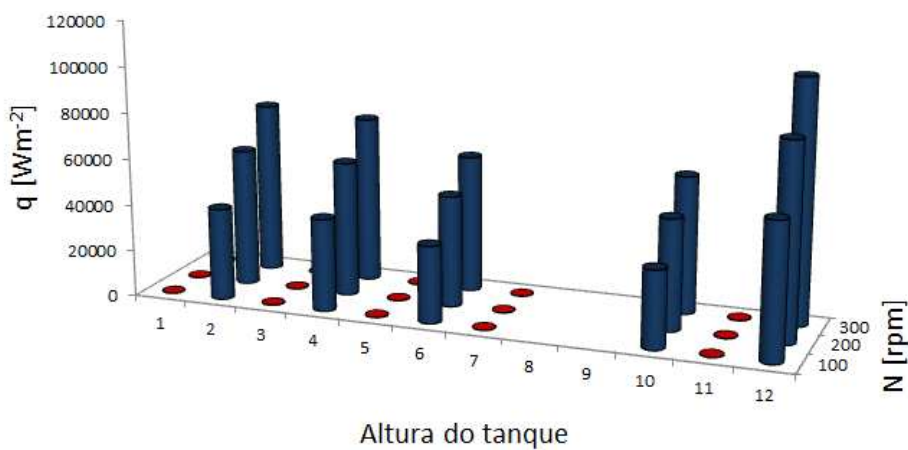


(c)

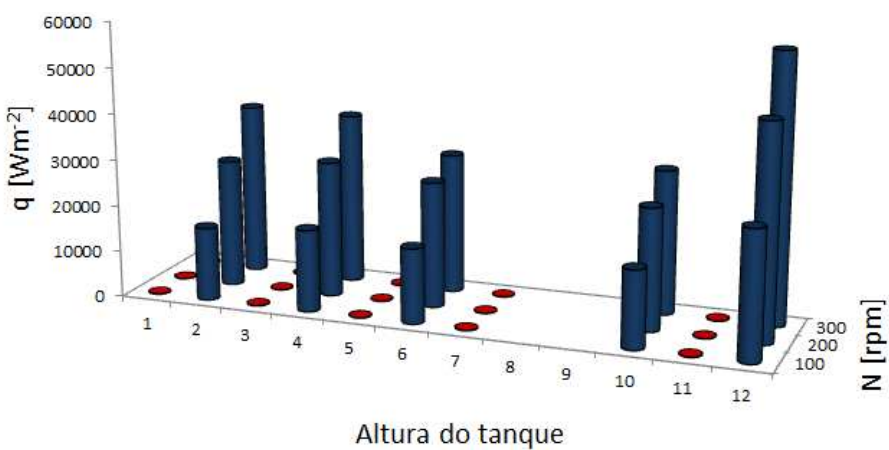
Figura 6.25: Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954) em diferentes velocidades de rotação. (a) Água. (b) Óleo vegetal. (c) Glicerina



(a)



(b)



(c)

Figura 6.26: Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991) em diferentes velocidades de rotação. (a) Água. (b) Óleo vegetal. (c) Glicerina

Conforme esperado na configuração convencional (Figura 6.25), uma alta transferência foi apresentada para os anéis perto do impelidor, em que o fluxo sobre a superfícies de transferência é elevado. Anéis afastados do impelidor mostraram menor fluxo de calor por causa do reduzido escoamento apresentado nesta regiões (Figuras 6.25a, 6.25b e 6.25c). Nas Figuras 6.26a, 6.26b e 6.26c pode ser observado que a remoção dos anéis situados na mesma altura do impelidor proporcionaram uma previsão mais uniforme da transferência de calor local através de toda a serpentina helicoidal devido à melhor circulação global do fluido apresentada na configuração modificada.

A Tabela 6.4 mostra os dados do fluxo de calor médio retirado pelos anéis de resfriamento para as duas configurações geométricas. Na tabela pode se observar que para cada estudo de caso proposto existem 5 anéis da serpentina de resfriamento, sendo o anel 1 e 5 aqueles posicionados próximo ao topo e fundo do tanque, respectivamente. Cabe ressaltar, que os dados apresentados na Tabela 6.4 são referentes aos primeiros nove estudos de caso mostrados na Tabela 5.6 para as duas configurações geométricas.

Tabela 6.4: Influência da velocidade do impelidor na transferência de calor para as duas configurações geométricas

Fluido	Config.	Vel. rot. N (rpm)	Fluxo de Calor (W/m ²)					
			Anéis da serpentina					Serp. total
			1 (topo)	2	3	4	5 (fundo)	
Água	Conv.	100	172600	160000	140400	377900	207400	211658
		200	285100	268400	239400	638400	345400	355346
		300	387700	363500	332500	874500	466800	485032
	Mod.	100	174500	182000	148100	167100	255300	185399
		200	282300	305800	247500	283100	419500	307606
		300	435400	445300	301900	377100	573800	426682
Óleo Veget.	Conv.	100	33490	33000	27640	63250	41570	39787
		200	47200	42960	39750	83800	55410	53824
		300	56420	52640	49010	89810	66120	62800
	Modif.	100	39670	39950	33320	33450	58530	40984
		200	59410	58250	48050	47880	84670	59651
		300	74190	72150	59370	59480	105000	74041
Glicer.	Conv.	100	14710	15050	12260	39810	24710	21307
		200	25460	26140	20570	56060	35850	32815
		300	33660	33720	27270	66030	43410	40818
	Modif.	100	15920	17800	16260	16800	27640	18883
		200	27670	29480	27230	26340	46250	31394
		300	37160	37070	30320	31170	57990	38744

Config. = Configuração; Conv. = Convencional; Modif. = Modificada

Vel. rot. = Velocidade rotacional; Serp. = Serpentina; Veget. = Vegetal; Glicer. = Glicerina

Para a configuração convencional observa-se que a transferência de calor (fluxo de calor) do anel 4 é superior aos outros anéis, mostrando que a transferência global está sendo dada pelo anel posicionado na mesma altura das pás do impelidor. Esta elevada troca de calor se dá porque o fluxo que deixa a pá do impelidor colide diretamente na superfície do anel 4, resultando em uma menor camada limite e por tanto uma maior transferência de calor por convecção. Além disso, pode ser observado que os anéis afastados do impelidor apresentaram reduzida troca térmica devido à pobre circulação do fluido nestas regiões.

Uma melhoria na transferência de calor é observada nos anéis afastados do impelidor para a configuração modificada. Este aumento na transferência deve-se ao fato que nesta nova configuração uma melhor circulação é apresentada entre a parede e a serpentina fazendo com que o fluxo seja superior nas regiões próximas ao topo e fundo do tanque. Portanto, uma melhor distribuição de transferência de calor é obtida nesta nova configuração, embora, um pequeno aumento da fluxo de calor foi apresentado no anel transferido da altura do impelidor para o fundo do tanque. Este aumento ocorreu porque o anel ficou posicionado em um dos vórtices principais no padrão de fluxo apresentado em este tipo de impelidores (impelidor radial).

A geometria modificada apresentou um menor fluxo de calor médio global na serpentina em comparação com a geometria convencional, pois a alta troca térmica apresentada nos anéis próximos ao impelidor aumentam a transferência de calor global da configuração convencional, tornando esta geometria (OLDSHUE e GRETTON, 1954) melhor em termos de transferência de calor, embora apresente uma menor circulação global do fluido. No entanto, na geometria modificada, o óleo vegetal apresentou uma considerável melhoria na transferência de calor nos anéis afastados do impelidor, tornando a troca térmica global ligeiramente melhor, além da boa circulação do fluido apresentada nesta configuração.

6.5.2 Variação do diâmetro do impelidor

Um dos parâmetros adimensionais presentes na correlação do Número de Nusselt proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954) é a relação entre os diâmetros do impelidor e tanque (D/T) (Equação 1.2). Por este motivo, foram utilizados impelidores tipo Rushton de 6 pás com diâmetros de 12 in, 16 in, 20 in, 24 in e 28 in para os diferentes fluidos

apresentados na Tabela 5.4 com o intuito de avaliar este parâmetro adimensional em uma ampla faixa de validade. A velocidade foi mantida constante a 200 rpm para poder avaliar o diâmetro do impelidor nos 24 estudos de caso.

A influência do diâmetro do impelidor no padrão de fluxo foi analisada de forma qualitativa, traçando os vetores de velocidade produzidos pelos diferentes diâmetros do impelidor. No Apêndice A, Seção A.1 são apresentados os vetores de velocidade dos três fluidos nas configurações geométricas convencional e modificada para os cinco diâmetros de impelidor utilizados na obtenção da correlação do Número de Nusselt. A Tabela 6.5 apresenta o fluxo de calor retirado pelos anéis de esfriamento para os três fluidos utilizando diferentes diâmetros de impelidor. Observa-se uma melhoria na transferência de calor (retirada pelas serpentinas de resfriamento), utilizando impelidores de grande diâmetro pois estes aumentam o fluxo convectivo similarmente ao observado no incremento da velocidade de rotação do impelidor para um diâmetro constante do propulsor.

Para uma melhor visualização do efeito do diâmetro da serpentina na transferência de calor, anéis alternados foram utilizados para aquecimento e resfriamento, conforme explicado na Subseção 6.5.1. O fluxo de calor foi medido da mesma forma, um valor médio para cada anel presente na serpentina de resfriamento (5 anéis). As Figuras 6.27 a 6.29 mostram os resultados do fluxo de calor médio para cada anel que conformam a serpentina de esfriamento nas duas configurações geométricas.

Semelhantemente, ao observado na variação da velocidade com diâmetro constante do impelidor, na configuração convencional uma alta taxa de transferência de calor é observada na seção da serpentina (anel 4) que está na mesma altura do impelidor devido à alta velocidade de fluxo que colide com a superfície de troca térmica na saída das pás do impelidor. Além disso, na geometria modificada foi observada uma melhor distribuição da transferência de calor ao longo de toda a serpentina helicoidal para os três fluidos de estudo nos cinco diâmetros de impelidores testados, embora, o fluxo de calor médio na serpentina total tenha sido menor em comparação com a geometria convencional (OLDSHUE e GRETTON, 1954).

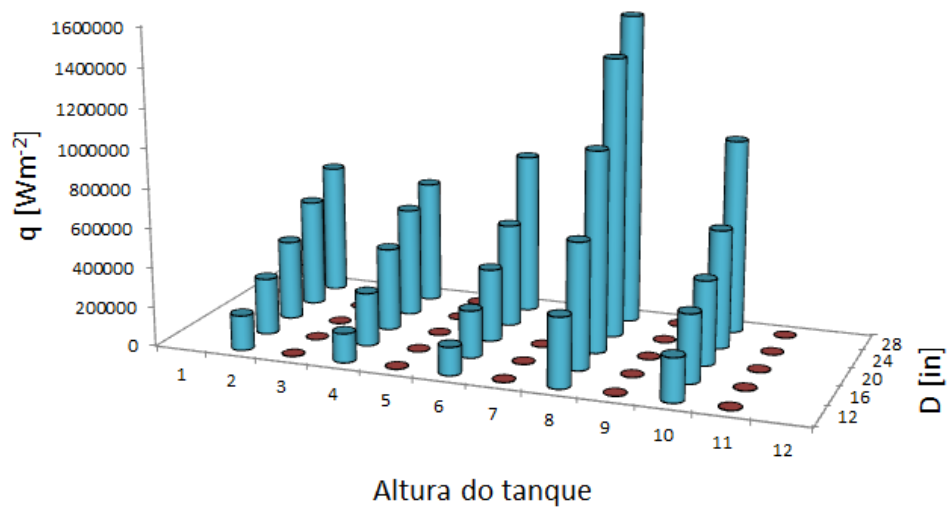
Tabela 6.5: Influência do diâmetro do impelidor na transferência de calor para as duas configurações geométricas

Fluido	Config.	Diâm. imp. D (in)	Fluxo de Calor (W/m²)					
			Anéis da serpentina					Serp. total
			1 (topo)	2	3	4	5 (fundo)	
Água	Conv.	12	176700	147400	142000	352900	219600	207718
		16	285100	268400	239400	638400	345400	355346
		20	402600	418700	368100	1017000	426800	526557
		24	543000	550900	521900	1414000	601900	726298
		28	661400	622600	813300	1577000	986000	932125
	Modif.	12	185500	183100	126600	156500	247100	179773
		16	282300	305800	247500	283100	419500	307606
		20	466500	482800	353800	414400	626400	468775
		24	604700	608000	562800	602400	822100	640028
		28	697100	673500	724400	927700	924000	789345
Óleo Veget.	Conv.	12	35430	37210	30060	74330	54260	46259
		16	47200	42960	39750	83800	55410	53824
		20	69650	73860	56390	153800	76980	86134
		24	83540	85000	70450	186000	85240	102046
		28	94930	90820	93670	190800	120100	118082
	Modif.	12	38570	38770	31020	32220	56990	39512
		16	59410	58250	48050	47880	84670	59651
		20	75370	74570	68530	66620	108900	78800
		24	87150	87870	83920	83360	127200	93897
		28	98840	91660	84460	112800	131300	103807
Glicer.	Conv.	12	18690	21650	19020	54430	23720	27502
		16	25460	26140	20570	56060	35850	32815
		20	33970	35860	28220	91970	43850	46776
		24	43500	44870	36240	113600	46680	56982
		28	50510	48630	52140	116800	68990	67408
	Modif.	12	15140	16920	14000	14620	25390	17215
		16	27670	29480	27230	26340	46250	31394
		20	38860	38500	35220	34940	60900	41684
		24	47240	47580	46190	45560	73890	52090
		28	52650	52190	47300	64000	77880	58803

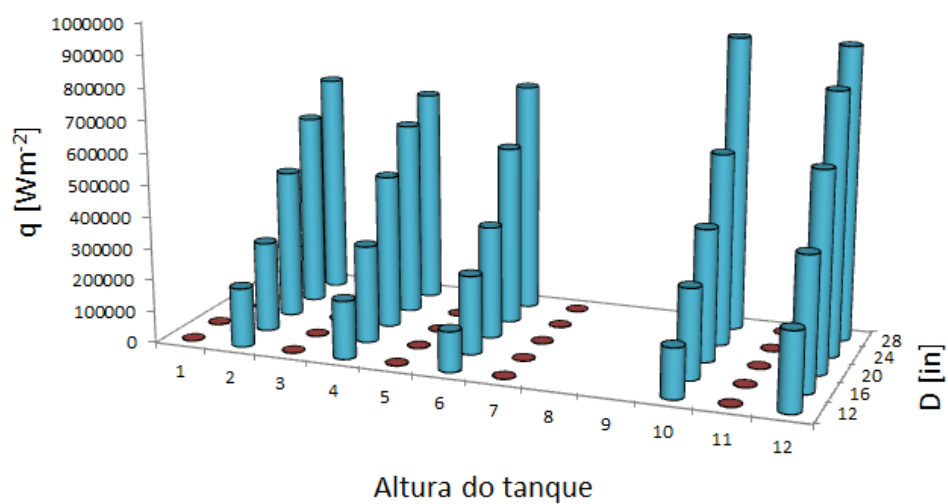
Config.= Configuração; Conv.= Convencional; Modif.= Modificada

Diâm. imp. = Diâmetro do impelidor

Serp. = Serpentina; Veget. = Vegetal; Glicer. = Glicerina

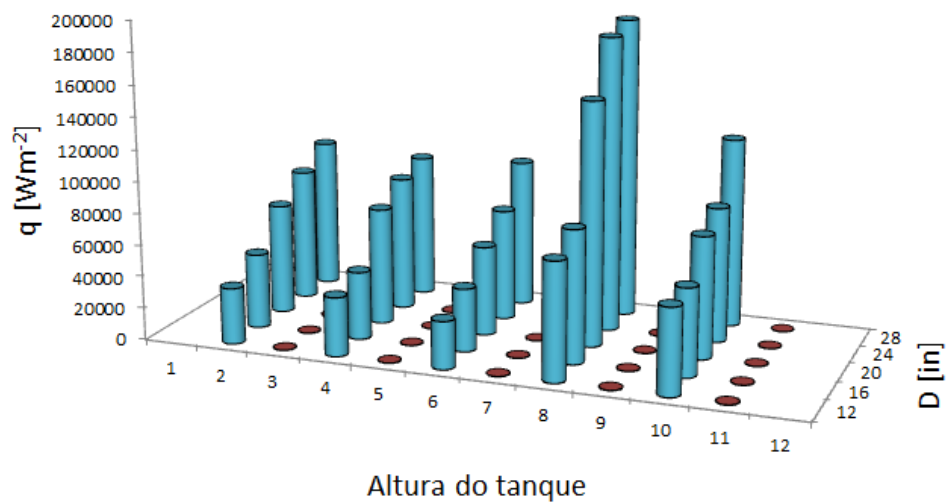


(a)

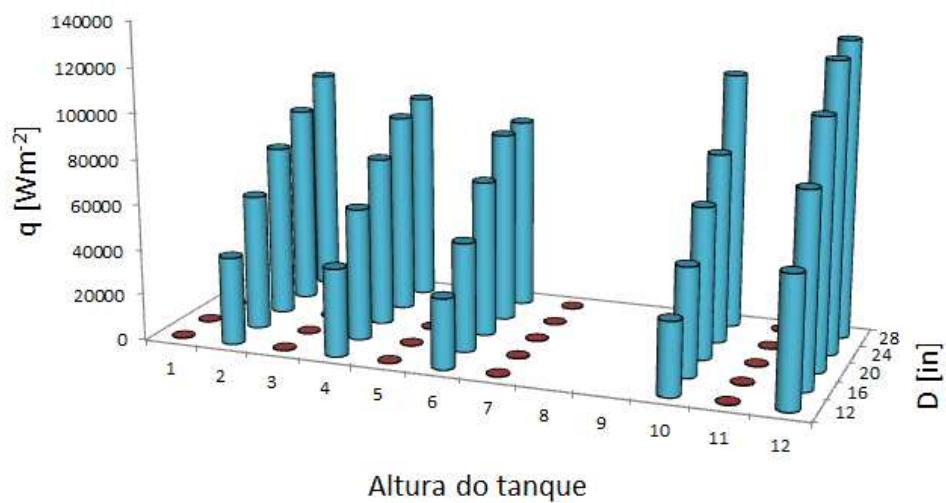


(b)

Figura 6.27: Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para água a diferentes diâmetros do impelidor com velocidade de 200 rpm. (a) Geometria convencional. (b) Geometria modificada

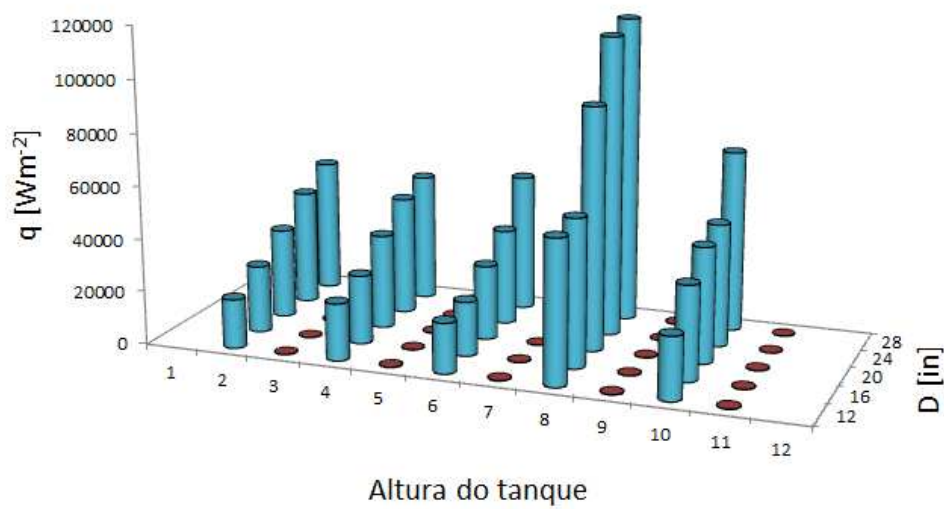


(a)

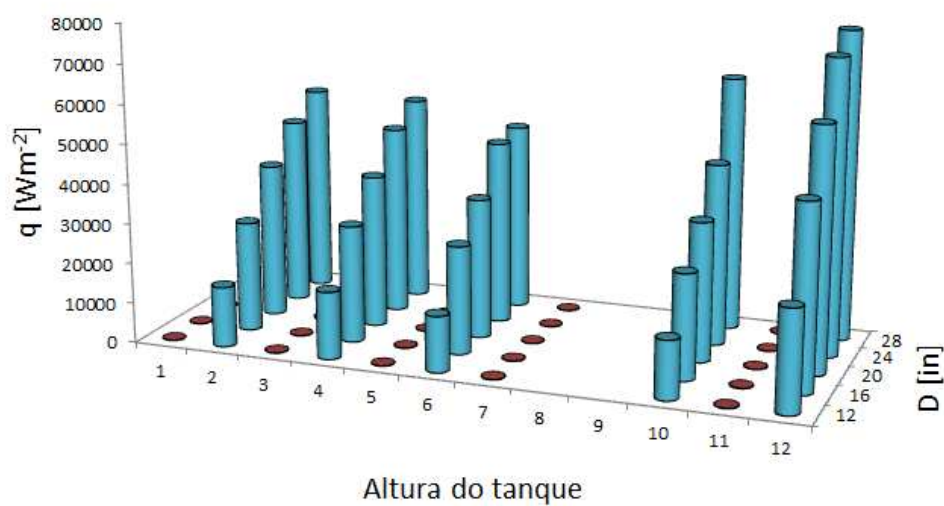


(b)

Figura 6.28: Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para óleo vegetal a diferentes diâmetros do impelidor com velocidade de 200 rpm. (a) Geometria convencional. (b) Geometria modificada



(a)



(b)

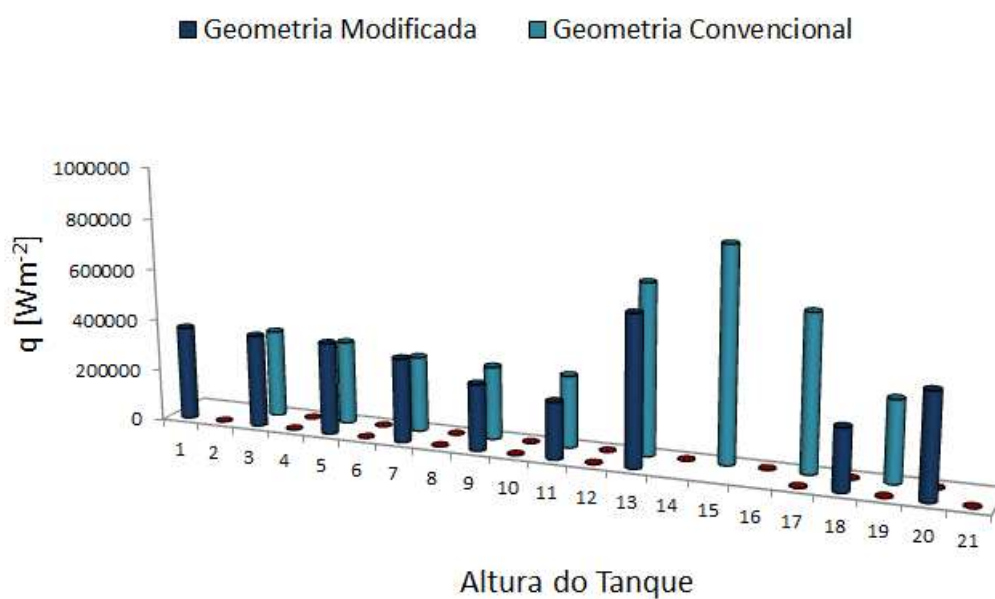
Figura 6.29: Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para glicerina a diferentes diâmetros do impelidor com velocidade de 200 rpm. (a) Geometria convencional. (b) Geometria modificada

6.5.3 Variação do diâmetro do tubo da serpentina

Outro parâmetro importante na correlação do número de Nusselt (OLDSHUE e GRETTON, 1954) é a relação entre o diâmetro da tubulação da serpentina helicoidal e do tanque (d/T), como apresentado na Equação 1.2. Tubos de grande diâmetro aumentam a área de transferência de calor da serpentina mas também inibem a circulação do fluido, portanto, o ótimo diâmetro depende do modo de operação, tipo de impelidor e das propriedades físicas do fluido. Foram utilizadas duas serpentinhas com diferentes diâmetros de tubulação baseado no trabalho experimental de OLDSHUE e GRETTON (1954), 7/4 in (resultados apresentados nas seções anteriores) e 7/8 in com 5 e 9 voltas respectivamente, na seção de refrigeração. No Apêndice A, Seção A.2 são apresentados os vetores de velocidade nas duas configurações geométricas para os três fluidos utilizando o diâmetro de tubulação da serpentina de 7/8 in.

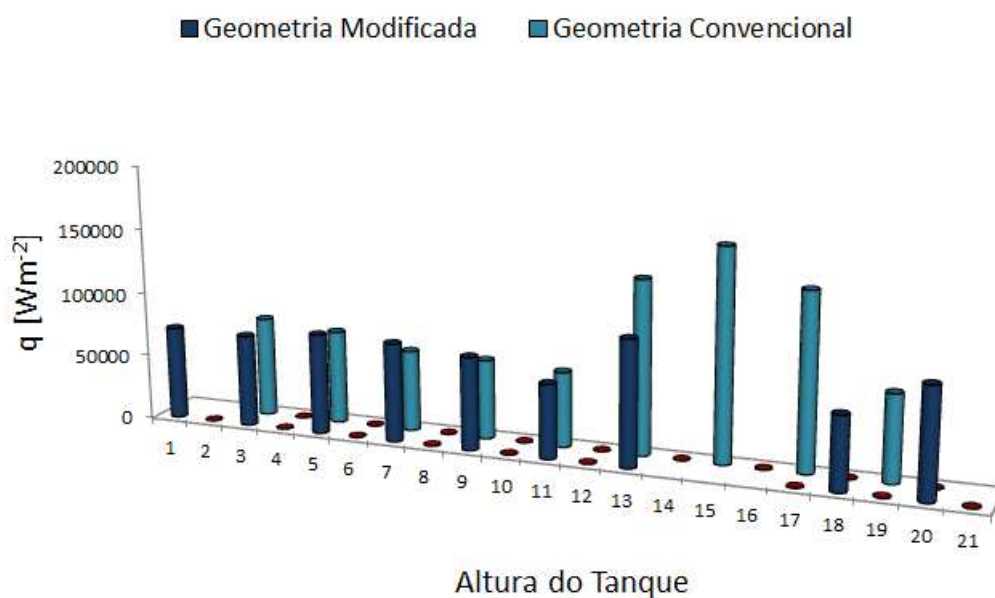
Igual ao observado nas configurações com diâmetro do tubo da serpentina maior (7/4 in), um aumento da velocidade média do fluido foi obtido na região entre a parede do tanque e a serpentina helicoidal. O aumento apresentado nesta região de estagnação forneceu uma melhor circulação global do fluido na configuração modificada para os três fluidos em estudo. As Figuras 6.30 a 6.32 apresentam o fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para os três fluidos nas configurações convencional e modificada. Nestes testes foi utilizada a serpentina helicoidal de menor diâmetro de tubulação (7/8 in) com um impelidor de 16 in de diâmetro a uma velocidade rotacional de 200 rpm. A altura do tanque foi dividida em 21 seções indicando-se com 1 a região compreendida pelo topo do tanque e entre 14 e 16 como a região onde o impelidor está posicionado.

Pelas Figuras 6.30 a 6.32 observa-se que na geometria convencional os anéis posicionados na região de descarga do impelidor (seção 13 a 17) apresentaram um elevado fluxo de calor em comparação aos anéis afastados do impelidor devido ao maior fluxo convectivo apresentado nesta seção. Além disso, pode ser observado que na geometria modificada é apresentada uma melhor distribuição do fluxo de calor ao longo de toda a superfície de transferência devido à melhor circulação global do fluido apresentada nesta nova configuração. Dados do fluxo de calor médio retirado pelos nove anéis de resfriamento para as duas configurações geométricas são resumidos na Tabela 6.6.



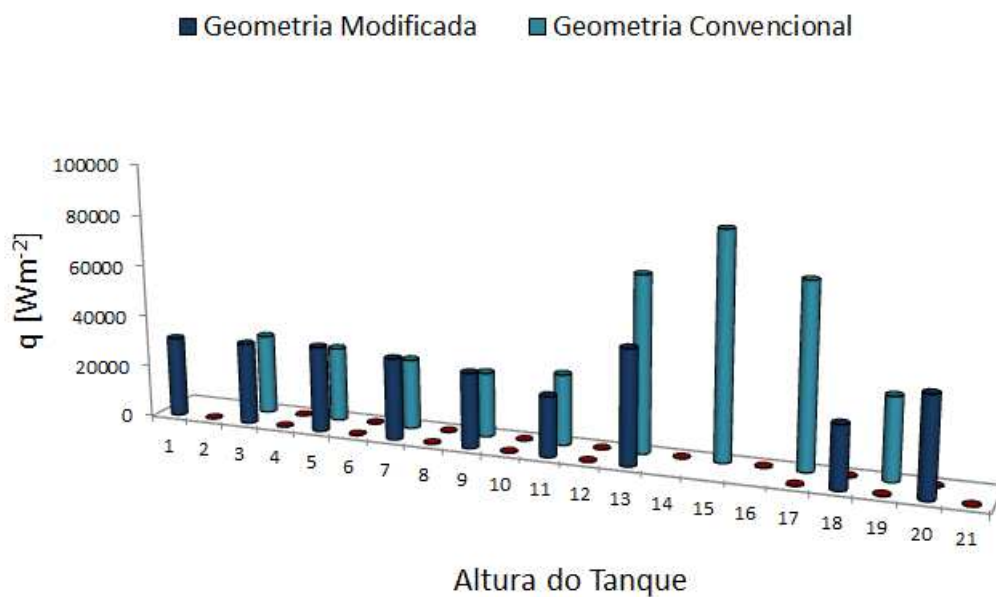
(a)

Figura 6.30: Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para água, $D = 16$ in e $V = 200$ rpm



(a)

Figura 6.31: Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para óleo vegetal, $D = 16$ in e $V = 200$ rpm



(a)

Figura 6.32: Fluxo de calor médio ao longo das superfícies de transferência de calor para glicerina, $D = 16$ in e $V = 200$ rpm

Tabela 6.6: Influência do diâmetro de tubulação da serpentina helicoidal na transferência de calor para as duas configurações geométricas

Serpentina d = 7/8 in	Fluxo de Calor (W/m ²)					
	Água		Óleo Vegetal		Glicerina	
Anéis	Conv.	Modfic.	Conv.	Modfic.	Conv.	Modfic.
1 (topo)	339200	365500	77160	71910	30850	31010
2	324500	360800	72340	71100	28780	31630
3	293900	359700	62760	77940	27150	33320
4	284500	327800	61420	76680	25000	31700
5	280200	258600	58300	72150	27430	29150
6	664000	221700	134600	57750	68310	23430
7	830500	585700	164000	97660	87400	44600
8	606900	241600	136900	57420	71340	24550
9 (fundo)	316400	406800	67260	85390	31920	38740
Média total (W/m ²) d = 7/8 in	437797	347603	92760	74223	44243	32014
Diferença	21 %		20 %		28 %	
Média total (W/m ²) d = 7/4 in	355346	307606	53824	59651	32815	31394
Diferença	13 %		11 %		4 %	

Conv.= Convencional; Modif.= Modificada

Comparando-se os anéis localizados na mesma posição para as duas configurações, pode se afirmar que, aquela modificada apresentou maior fluxo de calor nas serpentinas afastadas do impelidor, embora, o fluxo de calor médio global total da serpentina fosse menor (igual ao observado na serpentina de maior diâmetro de tubulação). Na Tabela 6.6 observa-se a diferença percentual do fluxo de calor entre as serpentinas com diferente diâmetro de tubulação, às mesmas condições de velocidade rotacional e diâmetro do impelidor.

Analisando a tabela pode ser observado que a serpentina de maior diâmetro de tubulação ($d=7/4$ in) apresentou uma menor diferença de fluxo de calor médio global entre as duas configurações, com uma porcentagem máxima de 13% em comparação com a apresentada (28%) na serpentina de menor diâmetro ($d=7/8$ in). Isto deve-se ao fato de a serpentina de menor diâmetro de tubulação apresentar uma menor circulação de fluido por causa do menor espaçamento entre cada anel (Tabela 5.1). No entanto, para a serpentina de menor diâmetro de tubulação, uma maior área de troca térmica está localizada na região do fluxo emitido pelo impelidor fazendo com que esta configuração apresente uma maior troca térmica global.

Capítulo 7

Conclusões e Sugestões

Neste capítulo são apresentadas as principais conclusões das análises feitas no presente trabalho, bem como, sugestões para trabalhos futuros.

7.1 Conclusões

Tanques de mistura com serpentinas helicoidais imersas no fluido fornecem uma troca térmica adicional além de um melhor controle da temperatura. No entanto, reduzem a circulação global do fluido porque a velocidade na superfície das serpentinas é nula. Por este motivo, um estudo da dinâmica do escoamento e sua influência sobre a transferência de calor foi realizado por meio da obtenção de um modelo tridimensional CFD capaz de representar quantitativamente os fenômenos físicos envolvidos neste processo.

O efeito do parâmetro adimensional y^+ sobre o padrão de fluxo e o coeficiente de transferência de calor foi analisado, observando-se que a precisão dos resultados computacionais na transferência de calor depende fortemente do refino da malha próximo à superfície da serpentina helicoidal. Entretanto, notou-se que o refino na parede não apresentou nenhum efeito significativo na predição dos fluxos primários gerados por impelidores tipo Rushton de 6 pás. Para um ótimo desempenho do tratamento de parede (*Near-Wall Treatment*) no modelo de turbulência SST foram necessários valores do parâmetro adimensional y^+ menores que 0,1.

A correlação do Número de Nusselt obtida por meio do modelo CFD proposto neste trabalho apresentou pouca dispersão na predição do coeficiente de transferência de calor para tanques de mistura com serpentinas helicoidais em comparação com os

resultados apresentados no trabalho experimental de OLDSHUE e GRETTON (1954) (ver Figura 6.10), com um desvio médio de 10,7 % e padrão de 12,7 %. Portanto, pode-se afirmar que o modelo tridimensional mostrou boa concordância, tanto na predição qualitativa como na quantitativa em termos da obtenção do coeficiente de transferência de calor h_o e também na obtenção do fluxo característico de impelidores radiais (Rushton de seis pás).

Uma vez validado o modelo, a correlação do Número de Nusselt foi obtida para o novo arranjo de serpentinas helicoidais proposto por STREET e MCGREAVY (1991). Dos resultados, pode-se afirmar que esta nova configuração geométrica apresentou uma menor transferência de calor global, embora, trabalhos descritos anteriormente na literatura afirmavam que, aparentemente, esta nova configuração apresentaria um melhor coeficiente de transferência de calor devido à melhoria do escoamento.

Comparando-se as geometrias convencional e modificada, observa-se que na configuração proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954) (convencional) a velocidade média do fluido é reduzida quando o fluxo radial gerado pelo agitador colide com o feixe de serpentinas, fazendo com que a circulação global do fluido seja dificultada. Além disso, para fluidos viscosos foi verificada uma estagnação na região entre a parede do tanque e o feixe de serpentinas, a qual foi totalmente eliminada com uma modificação simples na posição dos anéis que prejudicavam o fluxo radial fornecido pelo impelidor (STREET e MCGREAVY, 1991).

O fluxo de calor médio foi calculado para cada um dos anéis que compõem o feixe de serpentinas que está retirando energia do sistema. As propriedades do fluido e seu grau de agitação foram variadas trabalhando com três velocidades e cinco diâmetros do impelidor para os três fluidos testados água, óleo vegetal e glicerina. Conforme esperado na geometria convencional, uma alta transferência de calor foi apresentada nos anéis localizados na região em que o fluxo é elevado, ou seja, na mesma altura do agitador. Além disso, esta configuração apresentou um menor fluxo de calor nos anéis afastados do impelidor devido à estagnação do fluido apresentada entre a parede do tanque e o feixe de serpentinas.

Na geometria modificada, a remoção dos anéis que impediam a circulação do fluido proporcionou uma transferência de calor local mais uniforme ao longo do feixe de

serpentinhas de resfriamento, atingindo fluxos maiores nas regiões próximas ao topo, eixo do impelidor e fundo do tanque, devido ao melhor escoamento apresentado entre a parede do tanque e a serpentina helicoidal. Esta modificação geométrica apresentou uma melhor circulação global do fluido, embora, o fluxo de calor médio global da serpentina fosse menor. O maior fluxo de calor médio global apresentado na geometria convencional é devido à alta troca térmica fornecida pelos anéis próximos ao impelidor os quais apresentam um alto gradiente de temperatura na camada limite pela alta velocidade de fluxo que colide com estas superfícies.

Baseado no trabalho experimental de OLDSHUE e GRETTON (1954), dois diferentes diâmetros de tubulação das serpentinhas foram testados com o intuito de, analisar a influência deste parâmetro geométrico no escoamento e transferência de calor. A serpentina de menor diâmetro de tubo apresentou uma maior transferência de calor, embora, uma menor circulação de fluido global foi observada devido ao menor espaçamento entre os anéis deste feixe de serpentinhas. Por outro lado, a serpentina de maior diâmetro apresentou uma menor diferença de transferência de calor global entre as configurações convencional e modificada, com uma porcentagem máxima de 13 % em comparação com o 28 % obtido pela serpentina de menor diâmetro.

A técnica CFD pode ser empregada como uma boa ferramenta na otimização de reatores convencionais. No caso específico deste trabalho, a geometria convencional proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954) mostrou ser a mais conveniente em termos de troca térmica em regime turbulento, e isso pôde ser comprovado sem a necessidade da construção de um protótipo experimental.

7.2 Sugestões

Neste trabalho foi desenvolvido um modelo tridimensional para prever corretamente a transferência de calor em reatores tipo tanque agitado utilizando serpentinhas helicoidais e agitadores tipo Rushton com o objetivo de se prever uma equação de Nusselt para a troca de calor das serpentinhas. Este trabalho foi inédito de forma que muito pode ser feito no sentido de melhorar a metodologia da obtenção da Equação de Nusselt para equipamentos tipo tanque agitado. Como trabalhos futuros são sugeridos os seguintes estudos:

- O estudo da transferência de calor em diferentes dispositivos de troca térmica como serpentinas axiais ou jaquetas tipo espiral, meia cana e dimple com o intuito de se certificar que o modelo proposto é também válido para essas configurações comumente utilizadas em tanques de mistura.
- A importância da modelagem e simulação de tanques de mistura foi evidenciada na obtenção de parâmetros pontuais difíceis de observar por meio de experimentação física como, por exemplo, o coeficiente de transferência de calor local ao longo do feixe de serpentinas em comparação com coeficientes globais fornecidos pela literatura. Portanto, estudos futuros deveriam ser feitos para promover uma otimização do equipamento em função da transferência de calor, por meio da identificação de pontos de ineficiência nas diferentes configurações geométricas e variáveis do processo tais como; tipo de impelidor, dispositivo de troca térmica, chicanas, tipo de fluxo (laminar ou turbulento) dentre outros.
- Em tanques de mistura o tipo de fluxo gerado pelos impelidores é um parâmetro importante para promover uma transferência de calor eficiente. Assim, é necessário um estudo detalhado da influência dos diferentes tipos de impelidores ou a utilização de mais de um impelidor para atingir o fluxo de calor desejado em um determinado processo industrial.
- Foi mostrado que a geometria alternativa não possui a mesma capacidade de troca térmica que a geometria proposta por Oldshue e Gretton (1954). Entretanto, a diferença em termos de troca de calor é muito pequena (11 %), enquanto que a velocidade média dentro do tanque na geometria proposta é superior ao da geometria de Oldshue e Gretton (1954). Seria importante um estudo adicional para avaliar se o ganho em velocidade levaria a uma diminuição do tempo de mistura o que acabaria por compensar a menor eficiência em termos de troca térmica.

Referências

ABUJELALA, M. e LILLEY, D. Limitations and empirical extensions of the $k-\varepsilon$ model as applied to turbulent confined swirling flows. **Chemical engineering communications**, v. 31, n. 1-6, p. 223–236, 1984.

ANSYS. 14.0 user's guide. **ANSYS inc**, 2011.

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

ARMENANTE, P. M.; LUO, C.; CHOU, C.-C.; FORT, I. e MEDEK, J. Velocity profiles in a closed, unbaffled vessel: comparison between experimental ldv data and numerical cfd predictions. **Chemical Engineering Science**, v. 52, n. 20, p. 3483–3492, 1997.

AUBIN, J.; FLETCHER, D. F. e XUEREB, C. Modeling turbulent flow in stirred tanks with cfd: the influence of the modeling approach, turbulence model and numerical scheme. **Experimental thermal and fluid science**, v. 28, n. 5, p. 431–445, 2004.

BAKKER, A.; MYERS, K.; WARD, R. e LEE, C. The laminar and turbulent flow pattern of a pitched blade turbine. **Trans IChmE**, v. 74, n. Part A, 1996.

BALAKRISHNA, M. e MURTHY, M. Heat transfer studies in agitated vessels. **Chemical Engineering Science**, v. 35, n. 6, p. 1486–1494, 1980.

BERGMAN, T. L.; INCROPERA, F. P. e LAVINE, A. S. **Fundamentals of heat and mass transfer**: John Wiley & Sons, 2011.

BIRD, R.; STEWART, W. e LIGHTFOOT, E. **Transport phenomena**. Wiley International edition: Wiley, 2007.

BRUCATO, A.; CIOFALO, M.; GRISAFI, F. e MICALE, G. Numerical prediction of flow

fields in baffled stirred vessels: a comparison of alternative modelling approaches. **Chemical Engineering Science**, v. 53, n. 21, p. 3653–3684, 1998.

CENGEL, Y. A. e CIMBALA, J. M. **Fluid mechanics**. v. 1: Tata McGraw-Hill Education, 2006.

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

CHILTON, T. H.; DREW, T. B. e JEBENS, R. H. Heat transfer coefficients in agitated vessels. **Industrial & Engineering Chemistry**, v. 36, n. 6, p. 510–516, 1944.

COUPER, J.; PENNEY, W.; FAIR, J.; WALAS, S.; JAMES, R.; PENNEY, W.; JAMES, R. e STANLEY, M. Mixing and agitation, in chemical process equipment. 2005.

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

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

HAAM, S.; BRODKEY, R. S. e FASANO, J. B. Local heat transfer in a mixing vessel using heat flux sensors. **Industrial & engineering chemistry research**, v. 31, n. 5, p. 1384–1391, 1992.

HAVAS, G.; DEAK, A. e SAWINSKY, J. Heat transfer coefficients in an agitated vessel using vertical tube baffles. **The Chemical Engineering Journal**, v. 23, n. 2, p. 161–165, 1982.

HAVAS, G.; DEAK, A. e SAWINSKY, J. Heat transfer to helical coils in agitated vessels. **The Chemical Engineering Journal**, v. 35, n. 1, p. 61–64, 1987.

HEMRAJANI, R. R. e TATTERSON, G. B. Mechanically stirred vessels. **Handbook of industrial mixing: science and practice**, p. 345–390, 2004.

ISHIBASHI, K.; YAMANAKA, A. e MITSUISHI, N. Heat transfer in agitated vessels with special types of impellers. **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 12, n. 3,

p. 230–235, 1979.

JAWORSKI, V., Z.; DYSTER, K.; MOORE, I.; NIENOW, A. e WYSZYNSKI, M. The use of angle resolved lda data to compare two different turbulence models applied to sliding mesh cfd flow ssimulation in a stirred tank. **Récents Progès en Génie des Procédés**, v. 11, n. 51, p. 187 – 194, 1997.

JAWORSKI, Z. e ZAKRZEWSKA, B. Modelling of the turbulent wall jet generated by a pitched blade turbine impeller: the effect of turbulence model. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 80, n. 8, p. 846–854, 2002.

JENNE, M. e REUSS, M. A critical assessment on the use of $k-\varepsilon$ turbulence models for simulation of the turbulent liquid flow induced by a rushton-turbine in baffled stirred-tank reactors. **Chemical Engineering Science**, v. 54, n. 17, p. 3921–3941, 1999.

JHA, R. e RAO, M. R. Heat transfer through coiled tubes in agitated vessels. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 10, n. 3, p. 395–397, 1967.

JOAQUIM JUNIOR, C.; CEKINSKI, E.; NUNHEZ, J. e URENHA, L. **Agitação e mistura na indústria**: 2007.

JOSHI, J. B.; NERE, N. K.; RANE, C. V.; MURTHY, B.; MATHPATI, C. S.; PATWARDHAN, A. W. e 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, 2011a.

JOSHI, J. B.; NERE, N. K.; RANE, C. V.; MURTHY, B.; MATHPATI, C. S.; PATWARDHAN, A. W. e RANADE, V. V. Cfd simulation of stirred tanks: Comparison of turbulence models (part ii: Axial flow impellers, multiple impellers and multiphase dispersions). **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 89, n. 4, p. 754–816, 2011b.

KARCZ, J. e STREK, F. Heat transfer in jacketed agitated vessels equipped with non-standard baffles. **The Chemical Engineering Journal and The Biochemical Engineering Journal**, v. 58, n. 2, p. 135–143, 1995.

LUO, J.; GOSMAN, A.; ISSA, R.; MIDDLETON, J. e FITZGERALD, M. Full flow field

computation of mixing in baffled stirred vessels. **Chemical engineering research & design**, v. 71, n. 3, p. 342–344, 1993.

MCGREAVY, C. e STREET, D. A. "a model of the heat transfer in internally cooled reaction vessels", in **heat exchange engineering**. v. II: Simon Schuster Int., 1991.

MENTER, F. R. Zonal two equation k-turbulence models for aerodynamic flows. **AIAA paper**, v. 2906, p. 1993, 1993.

MICALE, G.; BRUCATO, A.; GRISAFI, F. e CIOFALO, M. Prediction of flow fields in a dual-impeller stirred vessel. **AIChE journal**, v. 45, n. 3, p. 445–464, 1999.

MOHAN, P.; EMERY, A. N. e 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.

MONTANTE, G.; LEE, K.; BRUCATO, A. e 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.

MURTHY, B. e JOSHI, J. Assessment of standard k- ϵ , rsm and les turbulence models in a baffled stirred vessel agitated by various impeller designs. **Chemical engineering science**, v. 63, n. 22, p. 5468–5495, 2008.

NAGATA, S. **Mixing: principles and applications**: Halsted Press, 1975.

NAGATA, S.; NISHIKAWA, M.; KAYAMA, T. e NAKAJIMA, M. Heat transfer to cooling coil acting as rotating impeller in highly viscous liquids. **Journal of chemical engineering of Japan**, v. 5, n. 2, p. 187–192, 1972.

NOORUDDIN e RAO, M. R. Heat transfer studies in baffled agitated vessel. **Indian J. Technol.**, v. 4, p. 131, 1966.

NUNHEZ, J. **The influence of geometric factors on the optimum design of stirred tank reactors**. Tese (Doutorado): The University of Leeds, 1994.

NUNHEZ, J. e MCGREAVY, C. The influence of geometric factors on the optimum design

of stirred tank reactors. *Em: AIChE Symposium Series*: 1994, v. 90, p. 55–70.

OLDSHUE, J. Y. e GRETTON, A. T. Helical coil heat transfer in mixing vessels. **Chem. Eng. Prog.**, v. 50, n. 12, p. 615 – 621, 1954.

OSHINOWO, L.; JAWORSKI, Z.; DYSTER, K.; MARSHALL, E. e NIENOW, A. Predicting the tangential velocity field in stirred tanks using the multiple reference frames (mrf) model with validation by lda measurements. *Em: the 10th European Mixing Conference*. Amsterdam: Elsevier: 2000, v. 281.

PAKZAD, L.; EIN-MOZAFFARI, F. e CHAN, P. Using computational fluid dynamics modeling to study the mixing of pseudoplastic fluids with a scaba 6srgt impeller. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 47, n. 12, p. 2218–2227, 2008.

PAUL, E. L.; ATIEMO-OBENG, V. A. e KRESTA, S. M. **Handbook of industrial mixing: science and practice**: John Wiley & Sons, 2004.

PEDROSA, S. e NUNHEZ, J. Improving heat transfer in stirred tanks cooled by helical coils. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 20, p. 111 – 120, 06 2003.

PERARASU, V.; ARIVAZHAGAN, M. e SIVASHANMUGAM, P. Heat transfer studies in coiled agitated vessel with varying heat input. **International Journal of Food Engineering**, v. 7, n. 4, 2011.

POST MIXING OPTIMIZATIONS AND SOLUTIONS. The consulting services in mixing. <http://www.postmixing.com/mixing%20forum/impellers/impellers.htm>, 2015.

PRATT, N. H. The heat transfer in a reaction tank cooled by means of a coil. **Trans. Inst. Chem. Eng.**, v. 25, p. 163 – 180, 1947.

RANADE, V.; JOSHI, J. e MARATHE, A. Flow generated by pitched blade turbines ii: Simulation using k-e model. **Chemical Engineering Communications**, v. 81, n. 1, p. 225–248, 1989.

RAO, K. B. e MURTI, P. Heat transfer in mechanically agitated gas-liquid systems. **Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development**, v. 12,

n. 2, p. 190–197, 1973.

SAHU, A. K. e JOSHI, J. B. Simulation of flow in stirred vessels with axial flow impellers: effects of various numerical schemes and turbulence model parameters. **Industrial & engineering chemistry research**, v. 34, n. 2, p. 626–639, 1995.

SETH, K. e STAHEL, E. Heat transfer from helical coils immersed in agitated vessels. **Industrial & Engineering Chemistry**, v. 61, n. 6, p. 39–49, 1969.

SHENG, J.; MENG, H. e FOX, R. Validation of cfd simulations of a stirred tank using particle image velocity data. **Can. J. Chem. Eng.**, v. 76, p. 611 – 625, 1998.

STREET, D. e MCGREAVY, C. A model of the heat transfer in internally cooled reaction vessels. **Heat Exchange Engineering**, v. 2, p. 279–302, 1991.

STREET, D. A. **Computational modelling of stirred reaction vessels**. Tese (Doutorado): The University of Leeds, 1991.

TATTERSON, G. **Fluid mixing and gas dispersion in agitated tanks**: McGraw-Hill, 1991.

UHL, V. "mechanically aided heat transfer", in **mixing: theory and practice**. v. I: London, 1966.

WECHSLER, K.; BREUER, M. e DURST, F. Steady and unsteady computations of turbulent flows induced by a 4/45 pitched-blade impeller. **Journal of fluids engineering**, v. 121, n. 2, p. 318–329, 1999.

WILCOX, D. C. Multiscale model for turbulent flows. **AIAA journal**, v. 26, n. 11, p. 1311–1320, 1988.

Apêndice

Apêndice A

Vetores de velocidade para os diferentes fluidos

A.1 Variação do diâmetro do impelidor nas configurações convencional e modificada

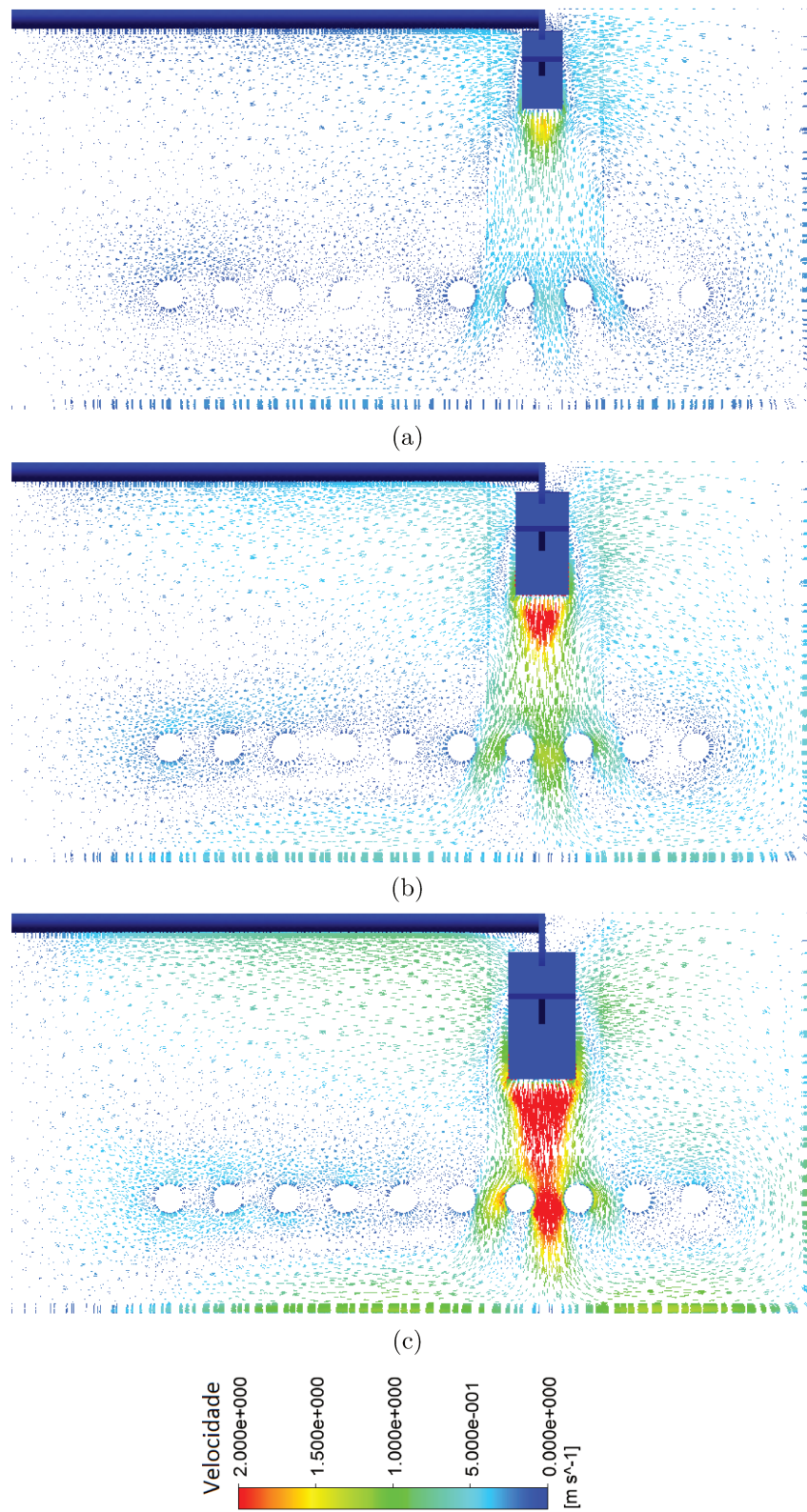


Figura A.1: Vetores de velocidade da água para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) $D = 12$ in. (b) $D = 16$ in. (c) $D = 20$ in

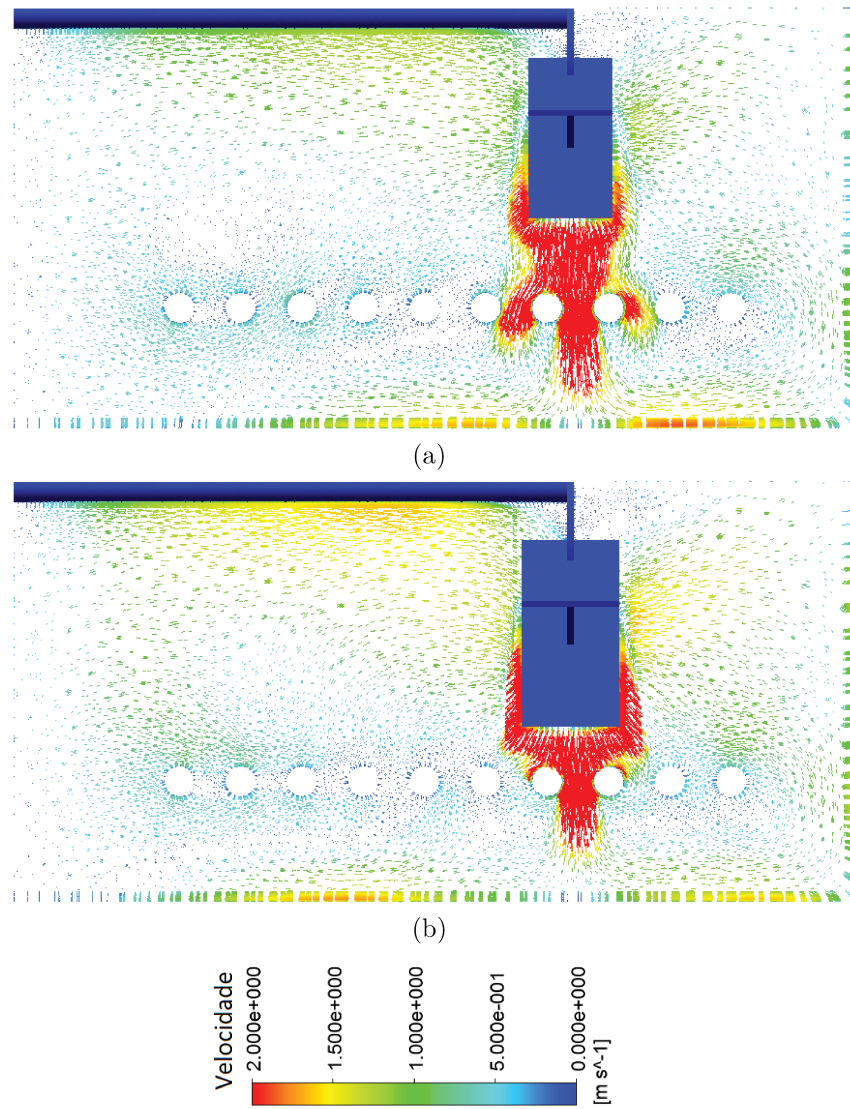


Figura A.2: Vetores de velocidade da água para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) $D = 24$ in. (b) $D = 28$ in

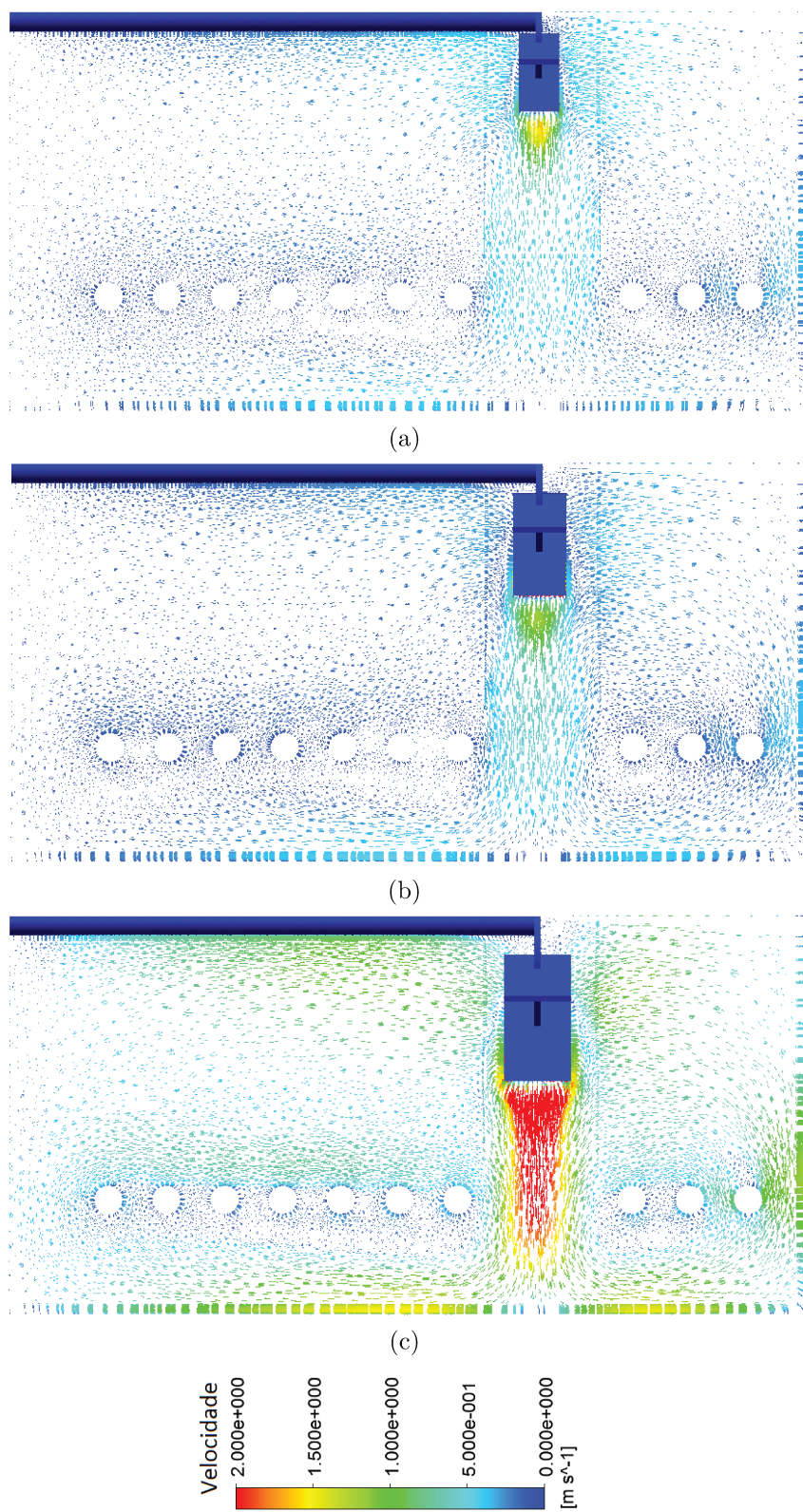


Figura A.3: Vetores de velocidade da água para a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991). (a) $D = 12\ in.$ (b) $D = 16\ in.$ (c) $D = 20\ in$

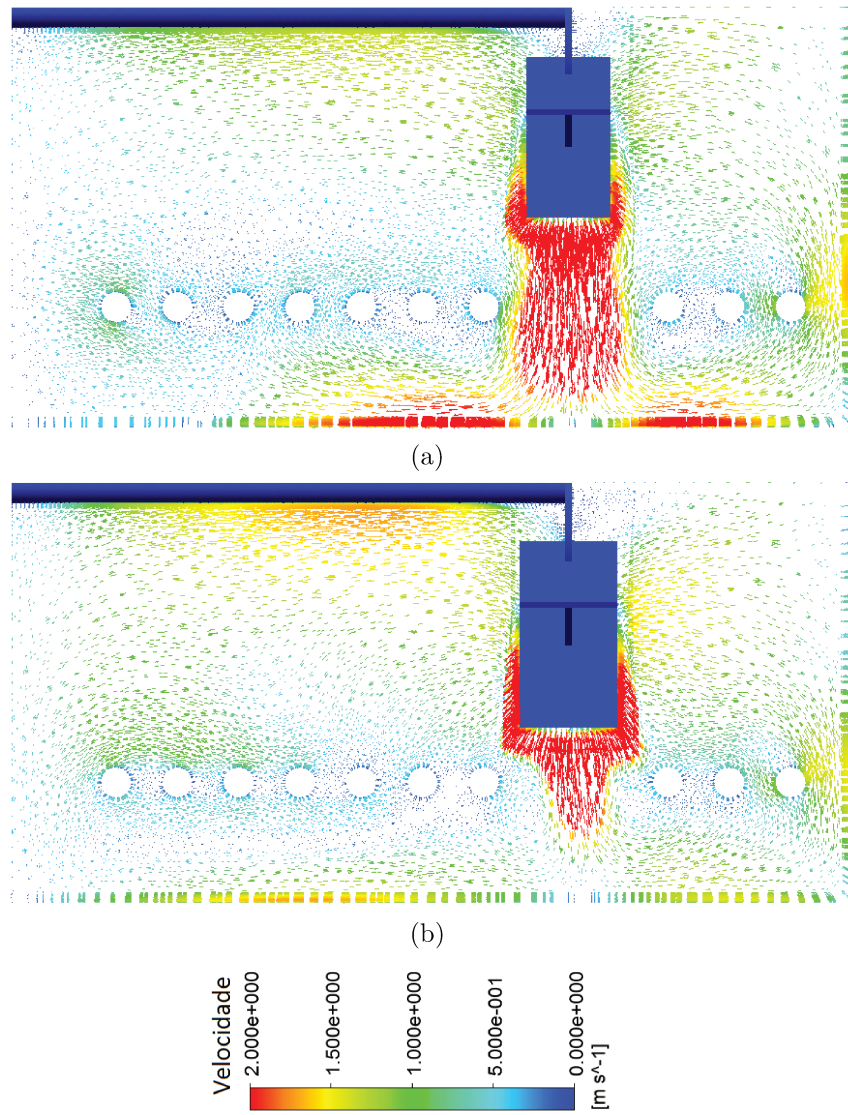


Figura A.4: Vetores de velocidade da água para a geometria proposta por STREET e McGREAVY (1991). (a) $D = 24$ cm. (b) $D = 28$ cm

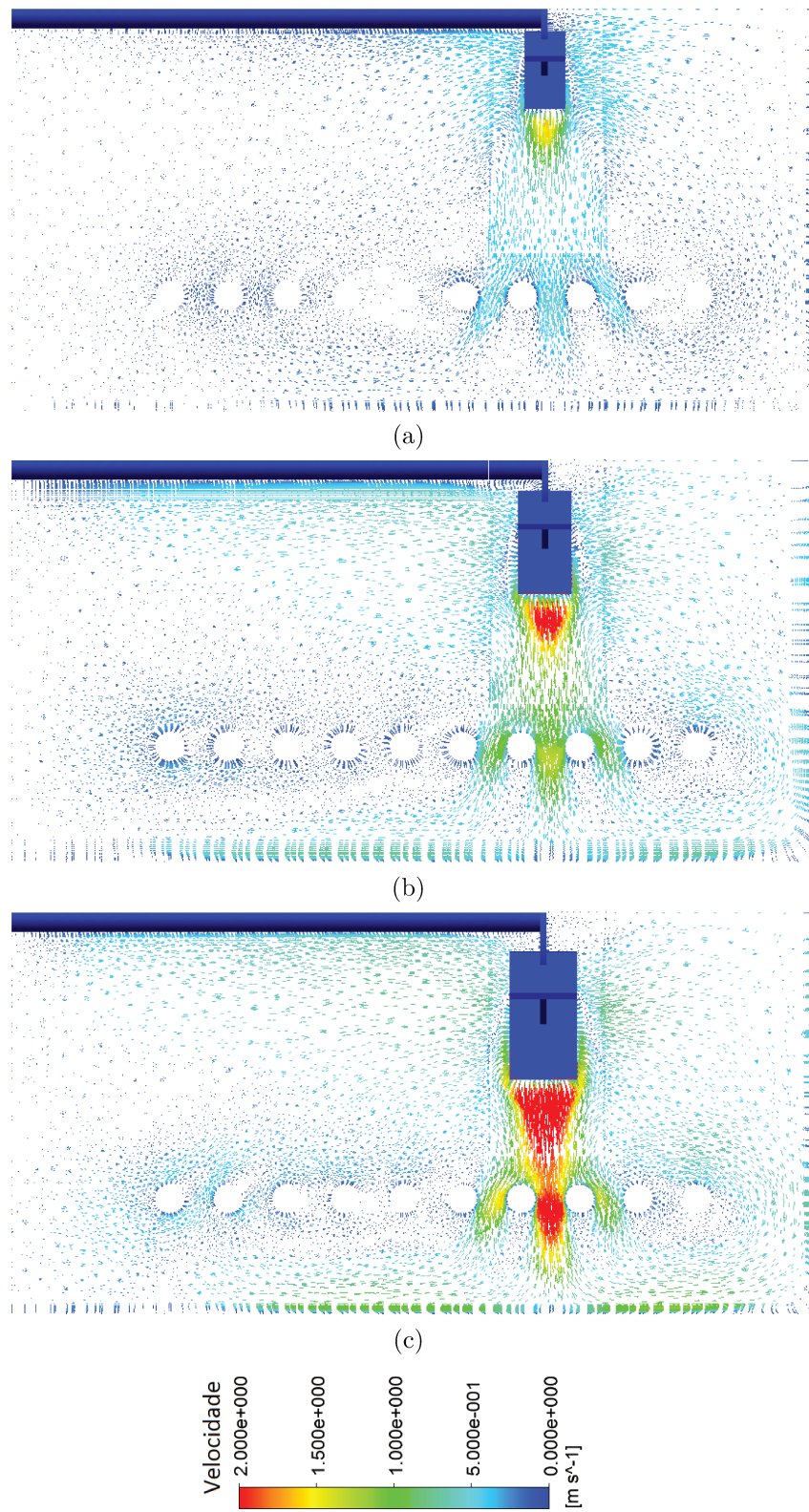


Figura A.5: Vetores de velocidade do óleo vegetal para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) $D = 12$ in. (b) $D = 16$ in. (c) $D = 20$ in

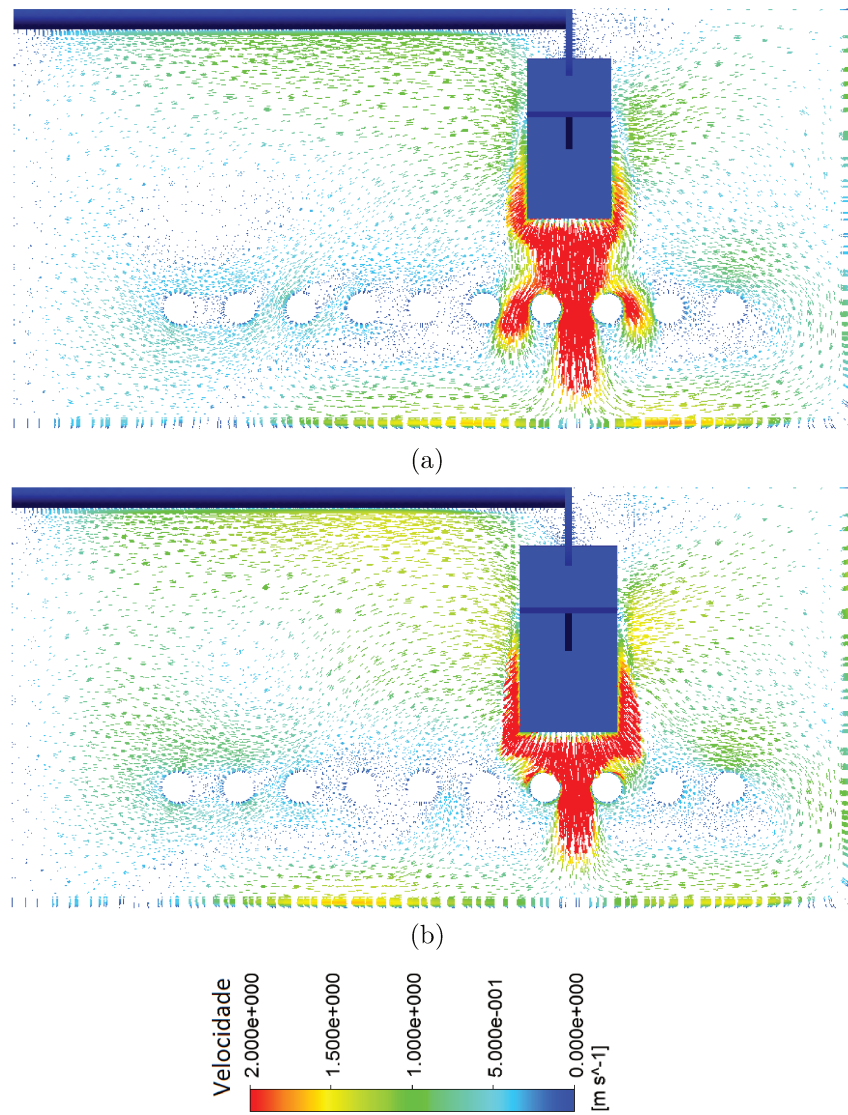


Figura A.6: Vetores de velocidade do óleo vegetal para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) $D = 24$ in. (b) $D = 28$ in

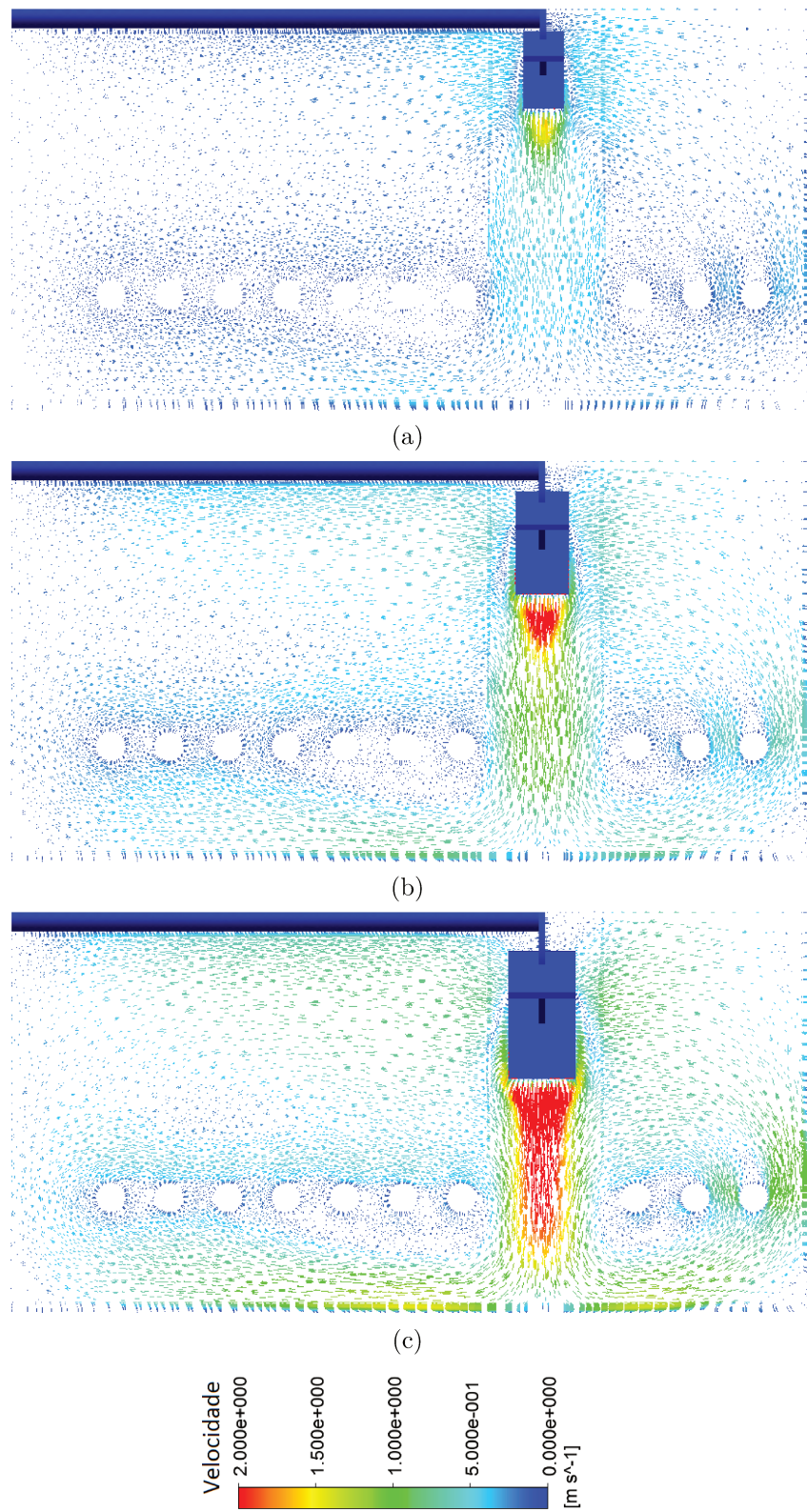


Figura A.7: Vetores de velocidade do óleo vegetal para a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991). (a) $D = 12$ in. (b) $D = 16$ in. (c) $D = 20$ in

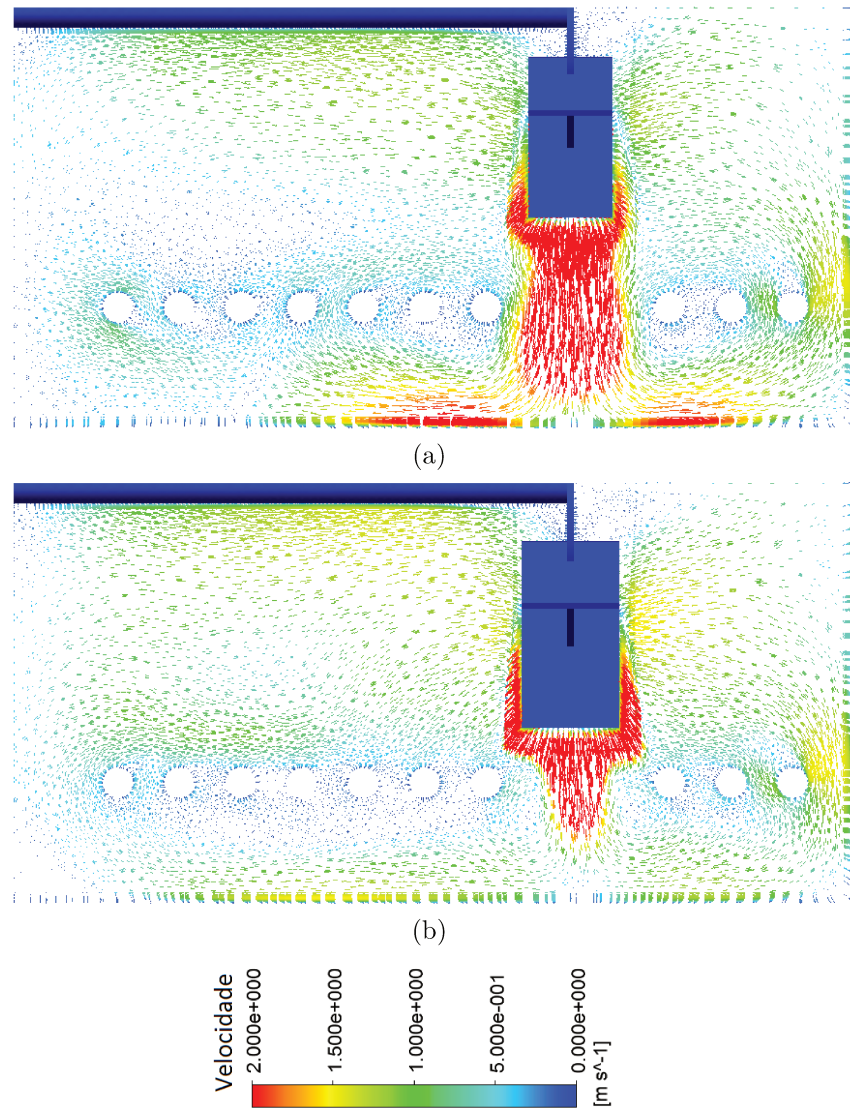


Figura A.8: Vetores de velocidade do óleo vegetal para a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991). (a) $D = 24$ in. (b) $D = 28$ in

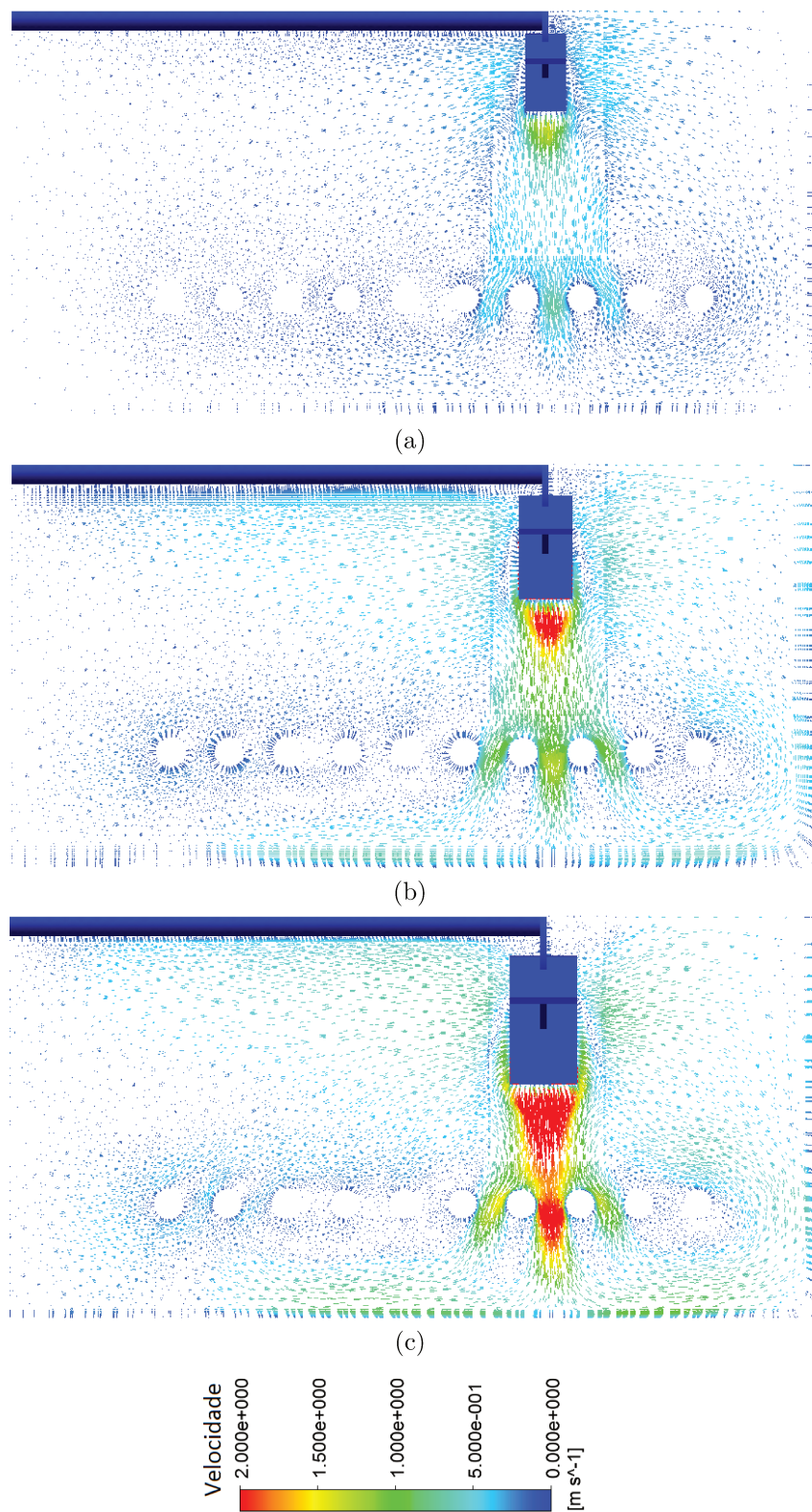


Figura A.9: Vetores de velocidade da glicerina para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) $D = 12$ in. (b) $D = 16$ in. (c) $D = 20$ in

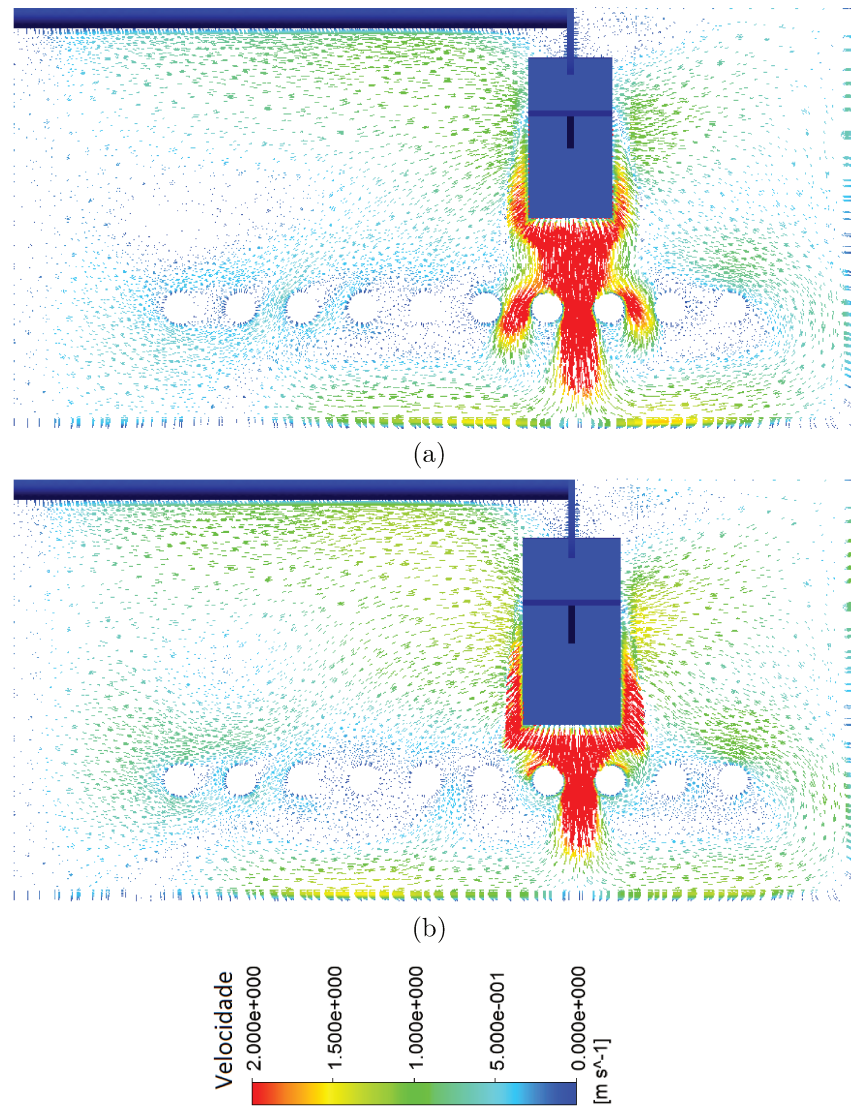


Figura A.10: Vetores de velocidade da glicerina para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954). (a) $D = 24$ in. (b) $D = 28$ in

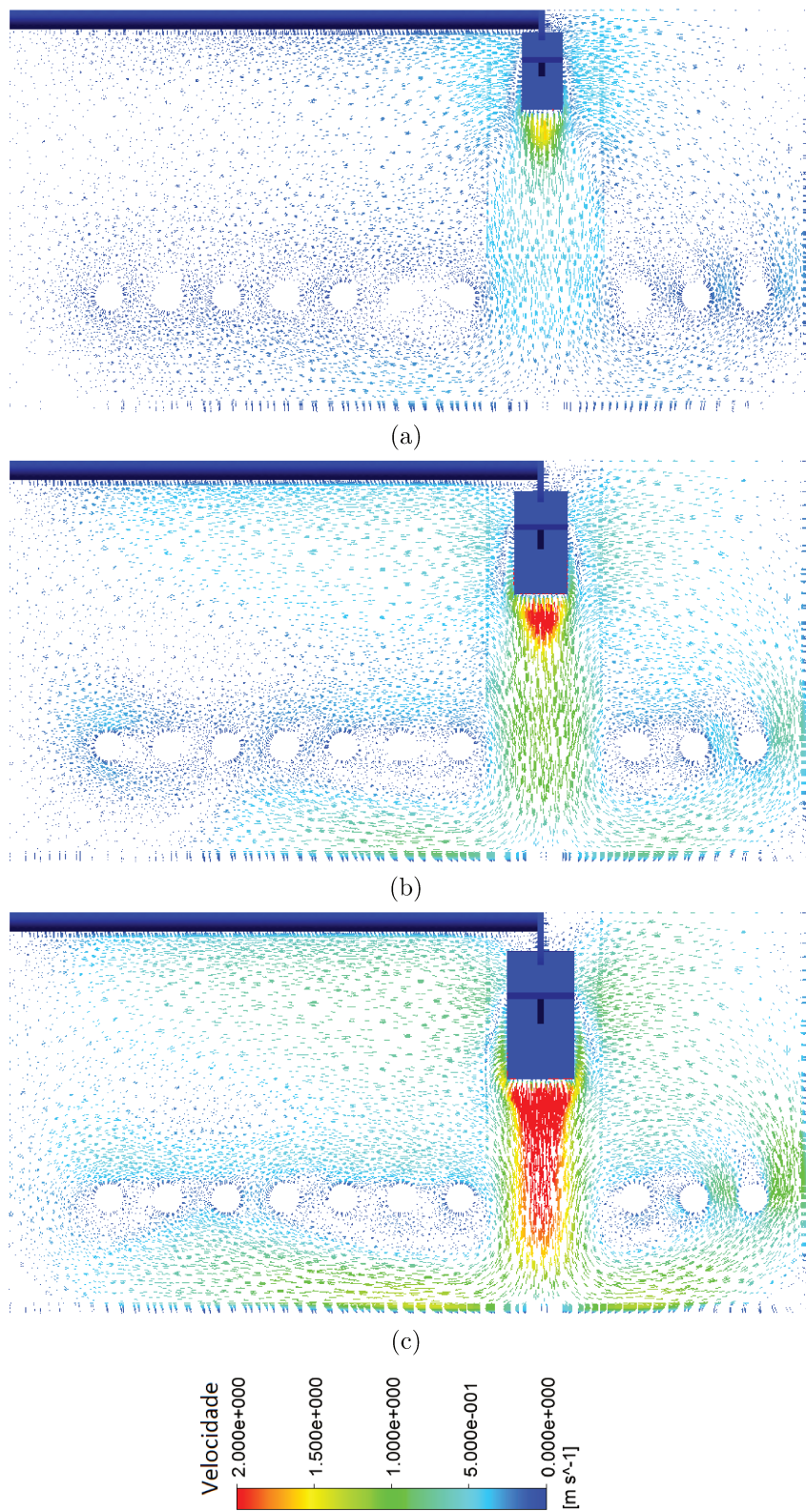


Figura A.11: Vetores de velocidade da glicerina para a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991). (a) $D = 12$ in. (b) $D = 16$ in. (c) $D = 20$ in

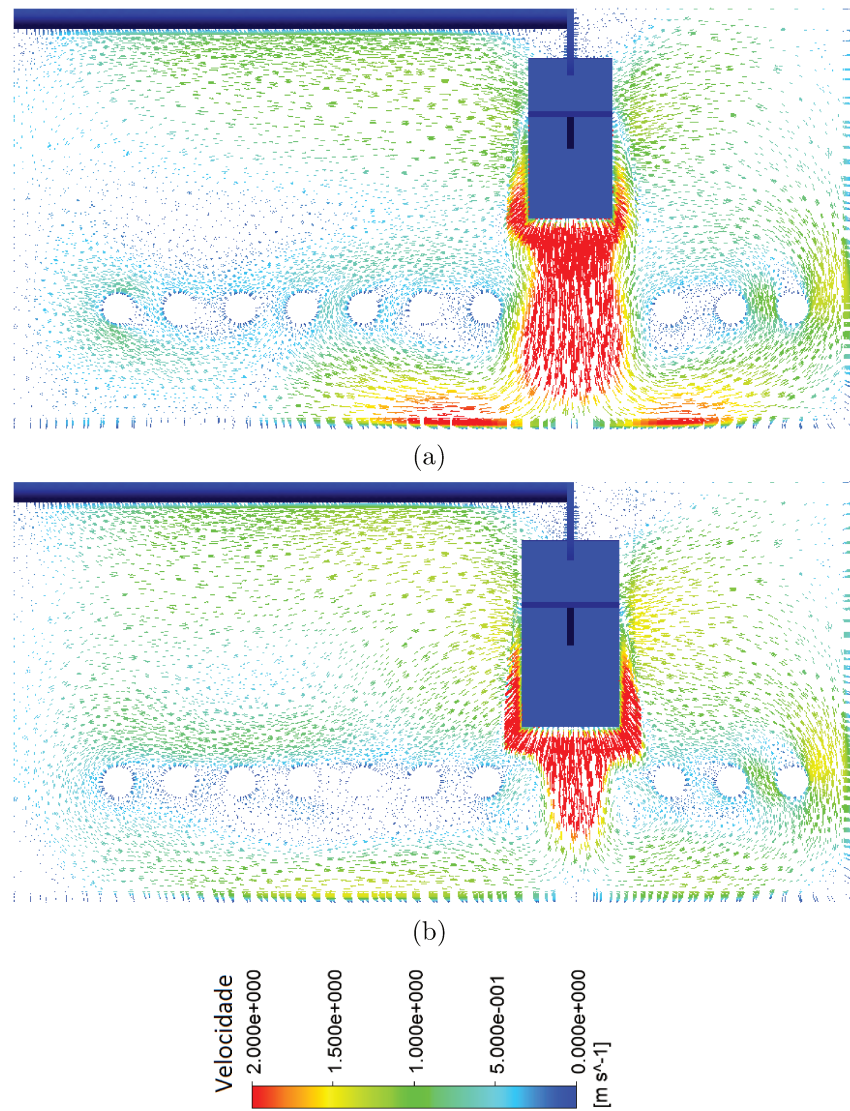


Figura A.12: Vetores de velocidade da glicerina para a geometria proposta por STREET e McGREAVY (1991). (a) $D = 24$ in. (b) $D = 28$ in

A.2 Variação do diâmetro de tubo da serpentina nas configurações convencional e modificada

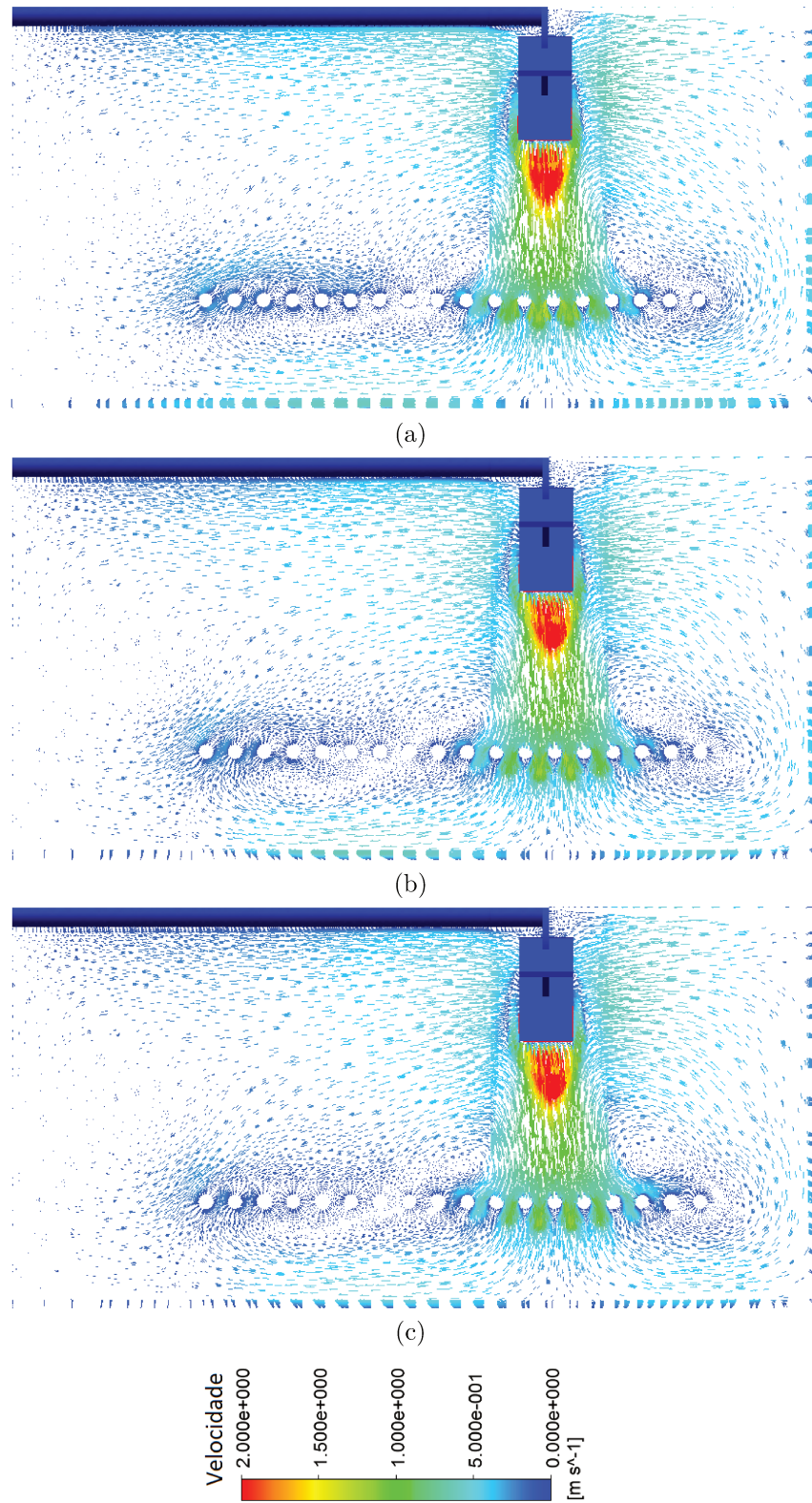


Figura A.13: Vetores de velocidade para a geometria proposta por OLDSHUE e GRETTON (1954) com diâmetro de tubulação de 7/8 in e $N = 200$ rpm. (a) Água. (b) Óleo Vegetal. (c) Glicerina

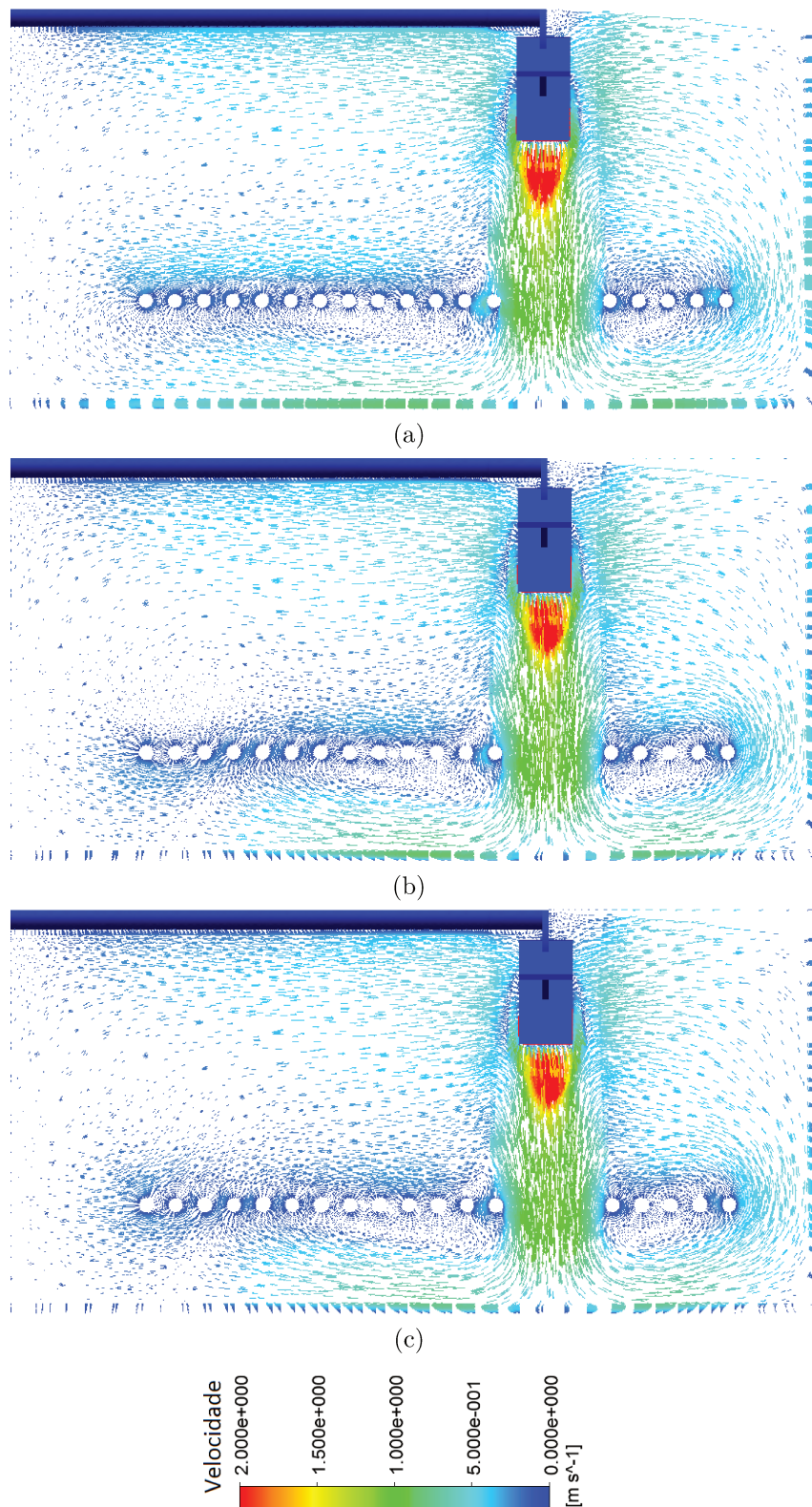


Figura A.14: Vetores de velocidade para a geometria proposta por STREET e MCGREAVY (1991) com diâmetro de tubulação de 7/8 in e $N = 200$ rpm. (a) Água. (b) Óleo Vegetal. (c) Glicerina