



UNICAMP

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO

ACDPQ - Desenvolvimento de Processos Químicos

**ANALISE DA INFLUÊNCIA DE IMPELIDORES LATERAIS NO TEMPO DE
MISTURA EM TANQUES DE ESTOCAGEM DE DIESEL COM O USO DA
FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL**

Aluno: Fredy Antonio Cabrales Navarro

Orientador: Prof. Dr. Jose Roberto Nunhez

Co-orientador: Dr. Nicolas Spogis

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química

Campinas - São Paulo

Novembro - 2011

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE - UNICAMP

C112a Cabrales Navarro, Fredy Antonio
Análise da influência de impelidores laterais no tempo de mistura em tanques de estocagem de diesel com o uso da fluidodinâmica computacional / Fredy Antonio Cabrales Navarro. --Campinas, SP: [s.n.], 2011.

Orientadores: José Roberto Nunhez, Nicolas Spogis.
Dissertação de Mestrado - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Fluidodinâmica Computacional (CFD). 2. Mistura. 3. Combustível diesel. 4. Tanques de armazenamento. I. Nunhez, José Roberto. II. Spogis, Nicolas. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

Título em Inglês: Analysis of the influence of side-entry mixers on the mixing time in diesel storage vessels using computational fluid dynamics

Palavras-chave em Inglês: Computational Fluid Dynamics (CFD), Mixing, Diesel fuel, Storage tanks

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Mestre em Engenharia Química

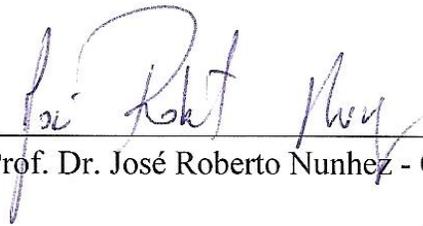
Banca examinadora: Waldir Pedro Martignoni, Leonardo Machado da Rosa

Data da defesa: 23-11-2011

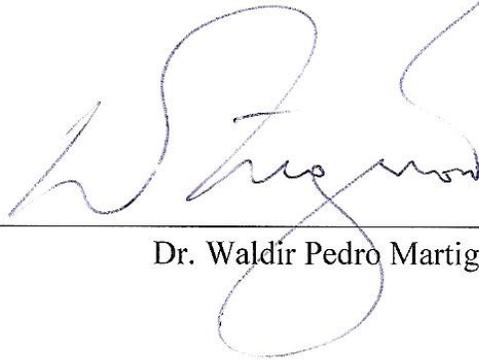
Programa de Pós Graduação: Engenharia Química

FOLHA DE APROVAÇÃO

Dissertação de Mestrado defendida por Fredy Antonio Cabrales Navarro e aprovada em 23 de novembro de 2011 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. José Roberto Nunhez - Orientador



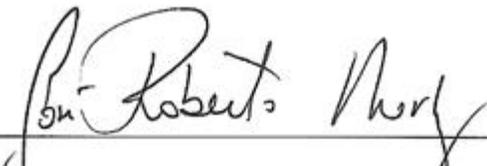
Dr. Waldir Pedro Martignoni



Dr. Leonardo Machado da Rosa

FOLHA DE VERSÃO FINAL

Este exemplar corresponde à versão final da dissertação de mestrado defendida pelo aluno Fredy Antonio Cabrales Navarro, orientada pelo Prof. Dr. José Roberto Nunhez e co-orientada pelo Dr. Nicolas Spogis.



Prof. Dr. José Roberto Nunhez - Orientador

CAMPINAS, 2011

*A minha mãe e ao meu pai,
Pelo seu amor, confiança, compreensão e apoio.*

Agradecimentos

Quero dar os meus agradecimentos a todas as pessoas que de alguma maneira contribuíram para o satisfatório desenvolvimento deste projeto de mestrado.

À minha família, especialmente aos meus pais e irmãos, pela ajuda, pelos conselhos e pela satisfação de ter esse apoio incondicional em todos meus planos apesar da distancia que nos separou durante o transcorrer deste trabalho.

À minha namorada Julie Katerine Rodriguez, por todo o amor, a compreensão, a paciência e por que sempre esteve ao meu lado me apoiando em todos os aspectos.

Ao meu orientador, Prof. Dr. José Roberto Nunhez, pela oportunidade de participar no seu grupo de pesquisa, pela grande amizade, confiança e pelas inestimáveis lições de vida.

Ao meu co-orientador, Dr. Nicolas Spogis, pelos valiosos treinamentos e recomendações para o encaminhamento deste projeto.

A todos meus amigos do L-CFD, Ana Milena Torres, Helver Álvarez, Urbano Montañez, José Luís Gomez, Sebastian Moreno, Diener Volpin, Daniel Simões, e o Dr. Everton Moraes, pela amizade e companheirismo que sempre tivemos e por todas aquelas intermináveis discussões tentando salvar o mundo.

A todos meus amigos colombianos e brasileiros na Unicamp que sempre fizeram muito mais grata minha estadia no Brasil. Sem duvida, compartilhou-se muitas experiências inesquecíveis.

À Unicamp por ter me dado a oportunidade de receber uma excelente educação.

À Petrobras pelo apoio financeiro para o desenvolvimento deste projeto.

RESUMO

O processo de homogeneização de hidrocarbonetos em tanques de estocagem de grande escala equipados com impelidores de entrada lateral desempenha um papel importante na operação de uma refinaria, visto que a qualidade do produto final depende do desempenho deste processo. A Fluidodinâmica Computacional (CFD) é a técnica mais viável para avaliar e otimizar este processo, no qual o trabalho experimental é tecnicamente complicado e custoso.

Neste trabalho, a técnica CFD é empregada para simular um tanque de estocagem de diesel a escala industrial com o uso do pacote comercial *ANSYS CFX 13.0*. A abordagem com múltiplos sistemas de referência (MFR) é empregada para modelar a movimentação do impelidor. Os efeitos turbulentos foram incorporados mediante o modelo de turbulência *Shear Stress Transport* (SST).

Vários arranjos impelidor(es)/tanque obtidos variando o ângulo de deslocamento horizontal em relação à linha central do tanque são usados para avaliar a influência do número de impelidores e o seu posicionamento no desempenho do processo. Perfis hidrodinâmicos, consumos de potência, tempos de homogeneização e outros parâmetros relevantes para processos de mistura são utilizados para comparar os resultados.

Baseando-se nos resultados das simulações, foi possível avaliar os diferentes cenários e determinar a condição mais apropriada para levar a cabo o processo. Considerando o consumo energético, a melhor configuração é utilizando um impelidor desviado 10° e, levando em conta o tempo de homogeneização, o melhor arranjo é com três impelidores sem deslocamento. Adicionalmente, os prós e contras das alternativas foram discutidos e os resultados mais relevantes foram reportados.

Palavras chave: Fluidodinâmica Computacional (CFD), Mistura, Diesel, Tanque de Estocagem, Impelidor.

ABSTRACT

The homogenization process of hydrocarbons in large scale storage tanks equipped with side-entry impellers plays an important role in a refinery operation, since the quality of the final products depends on the performance of this process. Computational Fluid Dynamics (CFD) is the most viable technique to evaluate and to optimize this process, as experimental work is technically complicated and expensive.

In this work, the CFD technique is used to simulate an industrial diesel storage vessel using the commercial package *ANSYS CFX 13.0*. The Multiple Frames of Reference (MFR) approach is used to model the mixer movement. The turbulent effects are incorporated by means of the Shear Stress Transport (SST) turbulence model.

Several impeller(s)/tank layouts obtained by varying the horizontal offset angle from the tank center line are used to assess the influence of the number of impellers and their positioning on the performance of the process. Hydrodynamic profiles, power consumptions, homogenization times and other relevant mixing parameters are also used to compare the results.

Based on the computer simulation results, it was possible to evaluate the different scenarios and to determine the most appropriate conditions to carry out the process. Considering the power consumption, one impeller deviated 10° is the configuration with the best performance and, using three impellers without deviation is the arrangement that gives the shortest mixing time. In addition, the pros-and-cons of the other alternatives are discussed and the most relevant findings are reported.

Key words: Computational Fluid Dynamics (CFD), Mixture, Diesel, Storage Vessel, Impeller.

SUMÁRIO

CAPÍTULO I.....	1
1. INTRODUÇÃO	1
1.1. MOTIVAÇÃO DO PROJETO	1
1.2. OBJETIVOS	2
1.3. DESCRIÇÃO DA DISSERTAÇÃO	2
1.4. ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO.....	3
CAPÍTULO II.....	5
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	5
2.1. INTRODUÇÃO AO CAPÍTULO	5
2.2. CFD APLICADA A TANQUES DE MISTURA DE HIDROCARBONETOS.....	5
2.3. MISTURA EM TANQUES DE GRANDE ESCALA	7
2.4. MISTURADORES DE ENTRADA LATERAL.....	8
2.4.1. Misturadores de ângulo fixo.....	8
2.4.2. Misturadores de ângulo variável.....	11
2.5. VARIÁVEIS DE PROJETO DE SISTEMAS DE MISTURA	12
2.5.1. Torque.....	13
2.5.2. Potência	13
2.5.3. Números adimensionais.....	14
2.5.3.1. Número de Reynolds (Re)	14
2.5.3.2. Número de bombeamento (N_Q)	14
2.5.3.3. Número de mistura (N_θ).....	15
2.5.3.4. Número de potência (N_p).....	15
CAPÍTULO 3	17
3. EQUACIONAMENTO MATEMÁTICO E MÉTODOS NUMÉRICOS EM CFD.....	17
3.1. INTRODUÇÃO AO CAPÍTULO	17
3.2. EQUAÇÕES DE CONTINUIDADE	17

3.3.	EQUAÇÕES DE QUANTIDADE DE MOVIMENTO	18
3.4.	ESCOAMENTOS TURBULENTOS	19
3.4.1.	HIPÓTESE DE BOUSSINESQ	20
3.4.2.	MODELOS DE TURBULÊNCIA	21
3.4.2.1.	Modelo $\kappa - \epsilon$	21
3.4.2.2.	Modelo $\kappa - \omega$	21
3.4.2.3.	Modelo SST (<i>Shear Stress Transport</i>).....	22
3.5.	EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DO ESCALAR PASSIVO	25
3.6.	MÉTODOS NUMÉRICOS.....	26
3.6.1.	Discretização do domínio	26
3.6.2.	Discretização das equações	27
3.6.3.	Esquemas de interpolação	28
3.6.3.1.	Esquema de alta ordem	28
3.6.4.	Convergência	28
CAPÍTULO IV		29
4.	MODELAGEM DE TANQUES AGITADOS EM CFD.....	29
4.1.	INTRODUÇÃO AO CAPÍTULO	29
4.2.	MODELAGEM COM MÚLTIPLOS SISTEMAS DE REFERÊNCIA (MFR)	29
4.3.	INTERFACE GGI	30
4.3.1.	Modelo <i>frozen rotor</i>	31
4.4.	MODELO ALTERNATE ROTATION	31
CAPÍTULO V		33
5.	ABORDAGEM COMPUTACIONAL	33
5.1.	INTRODUÇÃO AO CAPÍTULO	33
5.2.	OBTENÇÃO DAS GEOMETRIAS	33
5.3.	GERAÇÃO DAS MALHAS	36
5.3.1.	Testes de independência de malha do tanque	40
5.4.	PRÉ-PROCESSAMENTO	41
5.4.1.	Estimativa do tempo de mistura	43
5.5.	PROCESSAMENTO	45

5.5.1. Configurações avaliadas	46
5.6. PÓS-PROCESSAMENTO	47
CAPÍTULO VI	49
6. RESULTADOS E DISCUSSÕES	49
6.1. CONVERGÊNCIA.....	49
6.2. TESTES DE INDEPENDÊNCIA DE MALHA	53
6.3. CARACTERIZAÇÃO DO PADRÃO DE FLUXO.....	56
6.4. ESTIMATIVA DO BOMBEAMENTO DO IMPELIDOR	62
6.5. ESTIMATIVA DO TEMPO DE MISTURA	64
6.6. ESTIMATIVA DA POTÊNCIA E CONSUMO DE ENERGIA.....	67
CAPÍTULO VII.....	71
7. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS.....	71
7.1. CONCLUSÕES	71
7.2. TRABALHOS FUTUROS	72
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	75
ANEXO A	79
ANEXO B	81

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Ângulo correto vs. ângulo incorreto de desvio do misturador (PAUL <i>et al.</i> , 2004).....	9
Figura 2. Posicionamento de um misturador	9
Figura 3. Posicionamento de dois misturadores	10
Figura 4. Posicionamento de três impelidores.....	11
Figura 5. Posicionamento de misturadores de ângulo variável (PHILADELPHIA MIXING SOLUTIONS).....	12
Figura 6. Escaner 3D	34
Figura 7. Geometria do impelidor	35
Figura 8. Geometria do domínio estacionário	35
Figura 9. Geometria do domínio rotativo	36
Figura 10. Malha do domínio rotativo.....	38
Figura 11. Camada de prismas na malha do domínio rotativo	38
Figura 12. Malha superficial do impelidor	39
Figura 13. Malha do domínio estacionário	40
Figura 14. Acoplamento domínio estacionário e domínio rotativo	43
Figura 15. Concentração inicial de traçador no tanque	45
Figura 16. Convergência da simulação com <i>LTF</i> . (a) Global (b) Por Domínios	50
Figura 17. Convergência da simulação com <i>Physical Timescale</i> (a) Global (b) Por domínios	52
Figura 18. Perfil de velocidades no jato	54
Figura 19. Perfis de velocidade no plano horizontal (a) Malha 1 (b) Malha 2 (c) Malha 3 (d) Malha 4.....	55
Figura 20. Planos de velocidade (a) Caso 1-0 (b) Caso 1-10 (c) 1-20 (d) Caso 2-0 (e) Caso 2-10 (f) Caso 2-20 (g) Caso 3-0 (h) Caso 3-10 (i) Caso 3-20.....	57
Figura 21. Campos vetoriais (a) Caso 1-0 (b) Caso 1-10 (c) 1-20 (d) Caso 2-0 (e) Caso 2-10 (f) Caso 2-20 (g) Caso 3-0 (h) Caso 3-10 (i) Caso 3-20.....	59
Figura 22. Linhas de corrente (a) Caso 1-0 (b) Caso 1-10 (c) 1-20 (d) Caso 2-0 (e) Caso 2-10 (f) Caso 2-20 (g) Caso 3-0 (h) Caso 3-10 (i) Caso 3-20.....	60
Figura 23. Superfície para o a estimativa do bombeamento	62
Figura 24. Coeficiente de variação em função do tempo	65
Figura 25. Tanque experimental.....	73
Figura 26. Influência da velocidade e da malha no <i>LTF</i> (<i>Ansys CFX Training Manual</i>).....	82

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1. Seleção do número de impelidores	10
Tabela 2. Malhas testadas para o tanque	41
Tabela 3. Propriedades do Diesel	42
Tabela 4. Arranjos utilizados nas simulações.....	47
Tabela 5. Testes de independência de malha.....	53
Tabela 6. Energia cinética turbulenta (k)	61
Tabela 7. Capacidade de bombeamento do(s) impelidor(es)	63
Tabela 8. Números de bombeamento do(s) impelidor(es)	64
Tabela 9. Tempos de homogeneização.....	65
Tabela 10. Potência estimada	68
Tabela 11. Números de potência estimados	68
Tabela 12. Consumo de energia	69

NOMENCLATURA

Letras Latinas

<i>C</i>	Concentração média de traçador
<i>cv</i>	Coefficiente de variação
<i>D</i>	Diâmetro do impelidor
<i>D_m</i>	Coefficiente de difusão molecular do traçador
<i>F₁</i>	Função de combinação do modelo de turbulência
<i>F₂</i>	Função de combinação do modelo de turbulência
<i>F_i</i>	Termo fonte
<i>g</i>	Aceleração da gravidade
<i>k</i>	Constante de proporcionalidade
<i>m</i>	Fluxo massico
<i>N</i>	Velocidade Rotacional do Impelidor
<i>N_Q</i>	Número de bombeamento
<i>N_T</i>	Número de mistura
<i>N_P</i>	Número de potência
<i>p</i>	Pressão
<i>P</i>	Potência
<i>P_k</i>	Limitador de produção do modelo de turbulência SST
<i>Q</i>	Bombeamento

r	Vetor raio
Re	Número de Reynolds
S	Taxa de deformação do modelo de turbulência SST
t	Tempo
u	Vetor velocidade
U	Modulo do vetor velocidade
U_a	Velocidade absoluta
u_i	Vetor velocidade na direção i
u'	Velocidade flutuante na direção u
v'	Velocidade flutuante na direção v
w'	Velocidade flutuante na direção w
x_i	Coordenada cartesiana na direção i
x_j	Coordenada cartesiana na direção j
y	Distância até a parede do modelo de turbulência
y^+	Representação adimensional da distância até a parede

Letras Gregas

α	Constante do modelo de turbulência SST
α_1	Constante do modelo de turbulência SST
β	Constante do modelo de turbulência SST
β^*	Constante do modelo de turbulência SST
δ_{ij}	Matriz identidade da equação de quantidade de movimento
ε	Taxa dissipação da energia cinética turbulenta
κ	Energia cinética turbulenta

μ	Viscosidade dinâmica
μ_T	Viscosidade dinâmica turbulenta
π	Constante $\approx 3,1416$
ν	Viscosidade cinemática
ν_t	Viscosidade cinemática turbulenta
μ_{eff}	Viscosidade efetiva
Ω	Frequência turbulenta
ρ	Densidade
σ_k	Constante do modelo de turbulência SST
σ_T	Número de Schmidt turbulento
σ_ω	Constante do modelo de turbulência SST
$\sigma_{\omega 2}$	Constante do modelo de turbulência SST
σ^2	Variância
σ	Desvio padrão
τ_ω	Tensão de cisalhamento na parede
τ	Torque
ω	Velocidade Angular
ω'	Vorticidade absoluta
Φ_i	Fração volumétrica do traçador i
ϕ	Escalar hipotético

Siglas

CAD	<i>Computer-aided Design</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>

GGI *General Grid Interface*
LTF *Local Timescale Factor*
MFR *Multiple Frames of Reference*
RANS *Reynolds-Averaged Navier-Stokes*
SST *Shear Transport Model*

CAPÍTULO I

1. INTRODUÇÃO

1.1. MOTIVAÇÃO DO PROJETO

Uma mistura apropriada nos tanques de armazenamento de Diesel garante homogeneidade no produto final, evitando assim problemas causados por variações nas propriedades de saída dos produtos. Um dos problemas atuais no processo de estocagem de Diesel a nível industrial é a variação do teor de água presente no combustível processado. Essa quantidade, embora seja pequena, às vezes encontra-se fora da regulamentação nacional, o que pode ocasionar devolução do produto. A causa principal da heterogeneidade das propriedades do produto é a mistura ineficiente nos tanques de estocagem. Portanto, o seu estudo é imprescindível para o entendimento e otimização deste processo.

A fluidodinâmica computacional (CFD) tem sido amplamente usada, tanto academicamente quanto industrialmente, para prever, visualizar e avaliar a maneira como fluidos podem se comportar em certas condições, especialmente em tanques de armazenamento de grande escala, nos quais é praticamente impossível realizar trabalho experimental devido ao seu custo e dificuldade. Adicionalmente, resultados calculados mediante CFD para tanques de mistura deste tipo têm mostrado estarem em acordo com os resultados experimentais. Desta forma, o uso desta técnica aplicada a processos de mistura é válido e pode ser utilizada para a análise do processo de mistura de Diesel considerado neste trabalho.

1.2. OBJETIVOS

Os objetivos principais deste trabalho são: Calcular computacionalmente o tempo de homogeneização às condições atuais de operação em planta de um tanque de armazenamento de diesel a escala industrial e avaliar diferentes alternativas para o melhora da operação de mistura de diesel, visando encontrar as condições ótimas de operação que forneçam uma solução prática aos problemas em planta devido a produtos fora de especificação por causa de mistura inapropriada.

Dentro do desenvolvimento do projeto será estudado o efeito da variação do ângulo de deslocamento horizontal do impelidor, o efeito do número de impelidores e a sua localização no tempo de mistura e, conseqüentemente, no consumo energético do processo.

Os padrões de escoamento de cada configuração impelidor(es)/tanque serão estudados com as ferramentas disponíveis no pacote computacional *Ansys CFX 13.0* e as variáveis mais relevantes para o a análise de processos de mistura serão levadas em conta para facilitar a comparação entre cada caso estudado.

Finalmente, será feita a escolha da melhor opção para a operação em planta em termos do consumo de energia e do tempo de mistura.

1.3. DESCRIÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Na primeira parte deste estudo são apresentadas principalmente a abordagem computacional empregada e a estratégia utilizada para avaliar e otimizar o processo atual de mistura de Diesel, visando minimizar o tempo de homogeneização, mediante a manipulação das variáveis que mais o influenciam, tais como: número de impelidores e seu posicionamento no tanque. Primeiramente, foram avaliadas qualitativamente diferentes alternativas, variando o número de impelidores e a sua posição no tanque, baseando-se em recomendações encontradas na literatura para este tipo de equipamentos e foram calculadas variáveis importantes para processos

de mistura, tais como: número de potência (N_p) e o número de bombeamento (N_Q). Na segunda parte, foi calculado o tempo de mistura mediante a utilização de traçadores passivos e foi feita uma seleção das configurações ótimas para o processo em termos de tempo de homogeneização e o consumo de energia.

Para os cálculos computacionais foi utilizado o pacote computacional *Ansys CFX 13.0* e foi considerado um sistema monofásico. A turbulência foi representada mediante o modelo *Shear Stress Transport (SST)*. Simulações foram feitas em estado estacionário para obter os perfis hidrodinâmicos dentro do tanque para o seu posterior uso na estimativa do tempo de mistura mediante traçadores passivos com simulações em estado transiente.

Finalmente, fez-se uma análise qualitativa e quantitativa dos resultados e foram feitas as respectivas discussões de resultados e as conclusões mais relevantes do projeto de mestrado.

1.4. ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Capítulo 1 – Introdução: Nesta primeira parte é apresentada a problemática que motivou o desenvolvimento deste trabalho e como CFD pode dar suporte na busca de alternativas de solução. Adicionalmente, são apresentados os objetivos do trabalho e a organização da dissertação.

Capítulo 2 – Revisão Bibliográfica: Neste capítulo, são citados os trabalhos mais relevantes de CFD em tanques de grande escala equipados com impelidores de entrada lateral e é feita uma descrição sobre como é realizada industrialmente a mistura neste tipo de tanques e as possíveis alternativas. Finalmente, são explicados os parâmetros mais relevantes para a análise e projeto de processos de mistura.

Capítulo 3 – Equacionamento Matemático e Métodos Numéricos em CFD: São apresentadas as equações, modelos e abordagens numéricas pertinentes para simular tanques de mistura de entrada lateral utilizando CFD.

Capítulo 4 – Modelagem de Tanques Agitados em CFD: Neste capítulo é explicada a abordagem utilizada para a modelagem da movimentação do impelidor, por meio de múltiplos sistemas de referência (MFR) e outros modelos importantes, tais como o *Alternate Rotation Model* e o *Frozen-Rotor*.

Capítulo 5 – Abordagem Computacional: Nesta seção é explicado detalhadamente o procedimento computacional para a criação do modelo de simulação e o cálculo dos diferentes parâmetros necessários para a análise de resultados. Também são apresentadas as condições de contorno, propriedades do fluido e características das malhas utilizadas para a simulação.

Capítulo 6 – Resultados e Discussões: São apresentados os principais resultados computacionais que, basicamente, estão divididos em duas partes: a análise qualitativa dos perfis de velocidade, campos vetoriais e linhas de corrente, e a análise quantitativa, na qual são comparados os tempos de mistura e os consumos energéticos para cada situação avaliada. Adicionalmente, são feitas comparações baseando-se nos números adimensionais considerados para a análise de resultados.

Capítulo 7 – Conclusões e Trabalhos Futuros: Apresentam-se as conclusões obtidas com os resultados deste trabalho e são feitas algumas sugestões de possíveis trabalhos futuros que podem trazer benefícios significativos para o processo.

CAPÍTULO II

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. INTRODUÇÃO AO CAPÍTULO

Este capítulo tem como objetivo principal fazer uma descrição dos trabalhos encontrados na literatura que têm relação com este projeto nos quais utilizou-se CFD, e das metodologias e recomendações de operação para a melhoria do processo estudado. Adicionalmente, são explicados os parâmetros mais importantes para a avaliação de sistemas de mistura.

2.2. CFD APLICADA A TANQUES DE MISTURA DE HIDROCARBONETOS

Embora muitos trabalhos de simulação em CFD tenham sido feitos para processos de mistura, a maioria deles focam-se em misturadores verticais. Poucos trabalhos são encontrados na literatura acerca de tanques de estocagem de hidrocarbonetos equipados com impelidores de posicionamento lateral, os quais, basicamente, têm sido desenvolvidos por um grupo de pesquisa da *Razi University* no Irã para a indústria petrolífera desse país. Alguns outros novos trabalhos têm sido desenvolvidos por firmas internacionais especializadas em processos de mistura, mas a disponibilidade dessa informação é praticamente exclusiva para as firmas. No entanto, alguns trabalhos têm sido apresentados em congressos internacionais, principalmente no *North American Mixing Forum*, fornecendo assim alguma informação importante. Uma descrição de cada um dos trabalhos e as suas conclusões é apresentada a seguir.

RAHIMI, M. *et al.* (2004) utilizaram CFD para simular o processo de homogeneização de um tanque de grande escala para armazenamento de petróleo localizado em uma refinaria do Irã. O tanque, de 19000 m³, equipado com um impelidor de entrada lateral, foi simulado utilizando o método de múltiplos sistemas de referência junto com o modelo de turbulência RNE k-ε mediante um código computacional próprio. Os autores calcularam a variação da massa específica em função do tempo dentro do tanque inicialmente carregado com duas camadas de petróleo de diferente massa específica e viscosidade, para a sua posterior comparação com dados experimentais tomados diretamente do tanque real. Adicionalmente, os autores fizeram uma análise da distribuição de velocidades dentro do tanque através de perfis vetoriais de velocidade. Neste trabalho foi corroborado que os dados calculados mediante CFD concordam com a informação experimental, portanto CFD junto com a técnica de modelagem de impelidores MFR podem ser usados para a modelagem de impelidores de entrada lateral.

RAHIMI, M. em outro trabalho publicado no mesmo ano (2004), estudou o efeito do número de impelidores e o seu posicionamento no tanque no tempo de mistura para tanques de armazenamento de petróleo de grande escala. O autor simulou tanques com 2, 3 e 5 impelidores com dois tipos de orientações dentro do tanque. A primeira, impelidores posicionados no mesmo quadrante do tanque separados por um ângulo de 22,5 graus. A segunda, impelidores distribuídos ao redor do tanque em ângulos iguais. O autor estudou, primeiramente, o padrão de escoamento no estado estacionário para cada caso e posteriormente o tempo de mistura. Neste trabalho, o autor comprovou a alta influência do número de impelidores e seu posicionamento no tempo de mistura. Quando os impelidores são posicionados no mesmo quadrante do tanque, o seu funcionamento é muito melhor que se fossem posicionados no tanque todo. Outra conclusão importante é que a influencia do posicionamento de impelidores no processo de mistura diminui ao aumentar o número de impelidores

Em 2006, RAHIMI, M. *et al.* adicionaram um misturador jato ao lado do impelidor e estudaram, mediante o seu modelo em CFD, o efeito do posicionamento do jato e a sua taxa de bombeamento no tempo de mistura. Os autores provaram que CFD pode ser usada para determinar padrões de escoamento e tempos de mistura neste tipo de equipamentos. Além disso, os tempos de mistura para os arranjos jato - impelidor são menores que usando unicamente

impelidores. No entanto, o custo e as dificuldades técnicas de sistemas de mistura com jato são maiores.

HASTINGS, C. *et al.* (2010) utilizaram CFD para simular tanques de estocagem de petróleo e os principais resultados foram apresentados no *North American Mixing Forum*. Os autores estudaram o efeito das propriedades do fluido, tamanho do tanque, múltiplos impelidores e configurações etc, no escoamento dentro de tanques de até 95m de diâmetro. Desafortunadamente, estes resultados não têm sido publicados já que são propriedade da *Philadelphia Mixing Solutions*, uma das firmas mais importantes e especializadas em processos de mistura.

HIGBEE, R. *et al.* (2010), também da *Philadelphia Mixing Solutions*, fizeram uma otimização de um impelidor para aplicações em tanques de mistura de grande escala, usando CFD, manipulando os perfis helicoidais das pás, a curvatura e outras variáveis, visando maximizar o bombeamento e a velocidade de saída do fluido e minimizar o consumo energético e o custo de produção. O impelidor obtido mostrou ser muito mais eficiente que os impelidores convencionais. Estes resultados também foram apresentados no *North American Mixing Forum*.

2.3. MISTURA EM TANQUES DE GRANDE ESCALA

Existem atualmente muitas abordagens que podem ser consideradas para manter o conteúdo do tanque em movimentação constante. As principais são: impelidores rotativos, bombeamento do fluido e jatos de mistura. Cada uma delas têm vantagens e desvantagens particulares e, usualmente, é o tamanho do tanque e o objetivo do processo, seja simples mistura, prevenção da acumulação de sedimentos e/ou água no fundo do tanque ou homogeneidade, o que estabelece qual tecnologia é a mais apropriada.

Para misturar vários fluidos diferentes e assim obter uma mistura consistente que satisfaça as especificações preestabelecidas num período de tempo determinado (processo conhecido como *blending*), é necessário que haja uma movimentação sucessiva do fundo até o topo em toda parte

do tanque. Este objetivo pode se cumprir por meio da utilização de misturadores de entrada lateral.

2.4. MISTURADORES DE ENTRADA LATERAL

Os misturadores de entrada lateral consistem em um impulsor com fluxo majoritariamente axial anexo a um eixo horizontal instalado na parede do tanque perto do fundo. Este tipo de misturadores é mais utilizado para os tanques de grande escala porque o fluxo pode alcançar todas as partes do tanque. Com um misturador de entrada lateral, há um elemento físico dentro do tanque que força o conteúdo para cima e para baixo, o que efetua a maior parte da homogeneização das propriedades do fluido no tanque.

Existem dois tipos de misturadores de entrada lateral: misturadores de ângulo fixo e os misturadores de ângulo variável. As duas tecnologias serão explicadas detalhadamente a continuação.

2.4.1. Misturadores de ângulo fixo

Este tipo de misturador é o mais usado na indústria petrolífera para tanques de estocagem de hidrocarbonetos. De acordo com PAUL *et al.* (2004), são caracterizados por terem formação de um jato horizontal em forma de espiral que fornece o impulso desejado para desalojar e arrastar os fundos dos equipamentos, onde geralmente são apresentados maiores problemas de mistura devido à acumulação de sedimentos, água o material particulado. Para tanques de mistura de hidrocarbonetos de até 15 m de diâmetro, o eixo do misturador deve ser posicionado num ângulo fixo entre 7° e 10° graus à esquerda do eixo radial do tanque quando o misturador roda em sentido horário olhando do lado do motor do impelidor. Esta sugestão foi um fator comum na literatura encontrada nos sites de firmas como *LIGHTING MIXERS*, *PLENTY MIXERS* e *PHILADELPHIA MIXING SOLUTIONS*. Assim, um padrão de fluxo adequado para a mistura é gerado no tanque todo. Caso contrário, se o impelidor for desviado à direita, o padrão de fluxo

predominante seria tangencial, o qual não é recomendado para processos de mistura. Ver Figura 1.

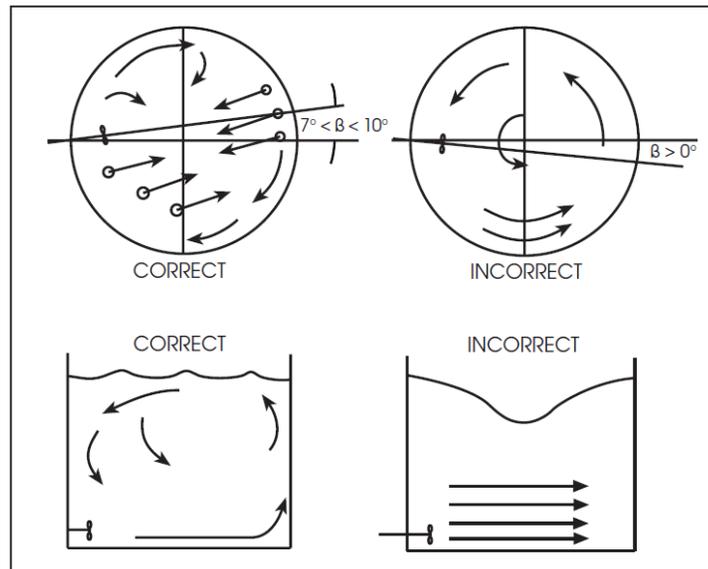


Figura 1. Ângulo correto vs. ângulo incorreto de desvio do misturador (PAUL *et al.*, 2004)

Para agitar fortemente o fundo do tanque e assim suspender sedimentos e água localizada nesse lugar, é recomendado um ângulo fixo de 10° e, para tanques muito grandes, 20° (LIGHTING MIXERS).

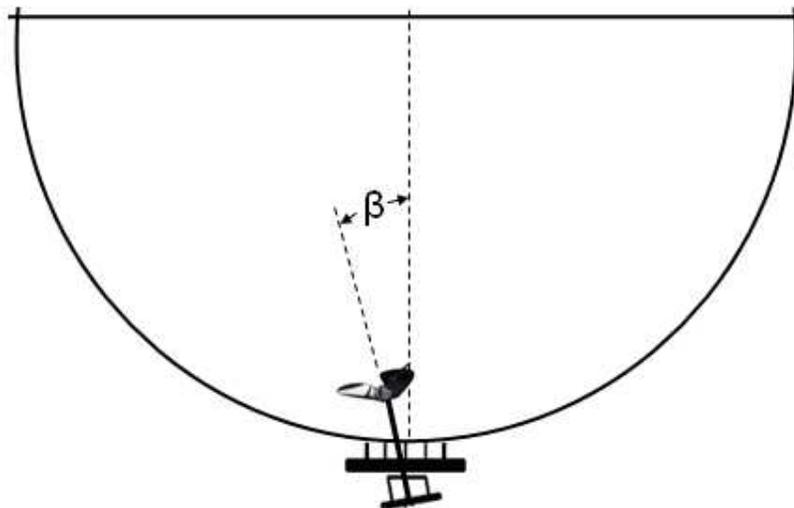


Figura 2. Posicionamento de um misturador

Em muitas aplicações industriais, vários impelidores são empregados para fornecer a energia adequada para a mistura. Orientações para a seleção apropriada do número de impelidores são apresentadas na Tabela 1 (PAUL *et al.*, 2004). O número de misturadores também depende da viscosidade do fluido, para fluidos muito viscosos, vários impelidores podem ser requeridos para ter um processo de mistura efetivo.

Tabela 1. Seleção do número de impelidores

Diâmetro do tanque [m]	<30	30-45	45-60	>60
Número de Impelidores	1	2	3	4-5

Quando dois impelidores são empregados, eles são posicionados, para a maioria dos casos, no mesmo quadrante do tanque, de maneira que a linha central de cada impelidor à parede do tanque esteja separada por 45° como apresentado na Figura 3 (LIGHTING MIXERS).

No caso da utilização de três impelidores, eles também são localizados no mesmo quadrante do tanque, mas as linhas centrais de cada impelidor à parede do tanque são separadas por um ângulo de $22,5^\circ$ de acordo com a Figura 4 (LIGHTING MIXERS).

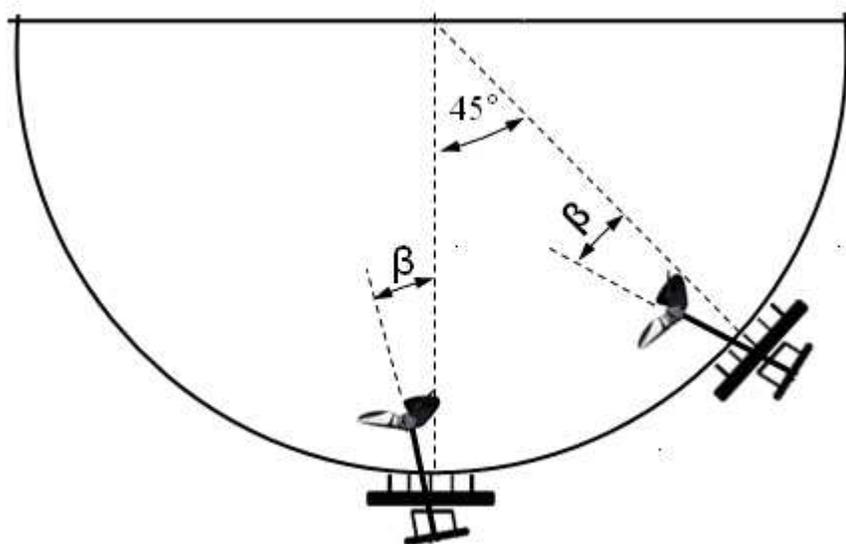


Figura 3. Posicionamento de dois misturadores

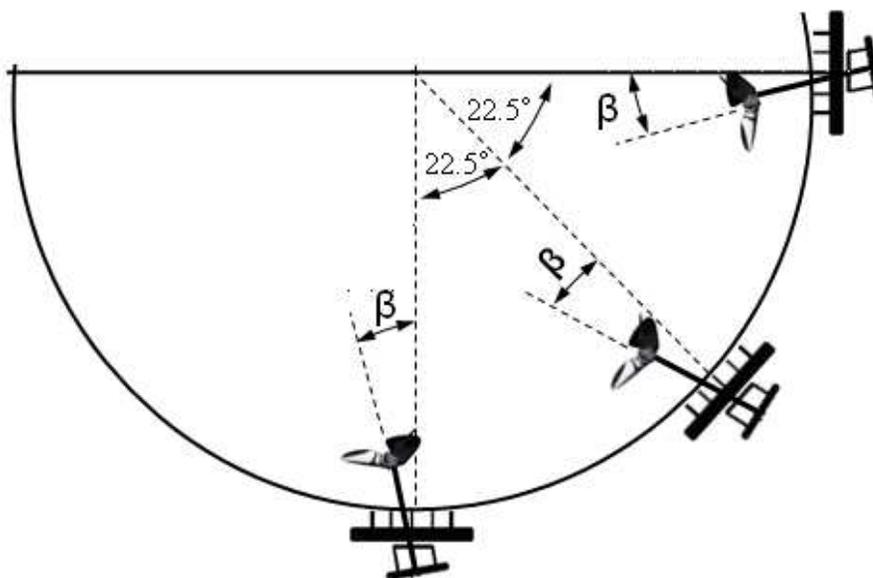


Figura 4. Posicionamento de três impelidores

2.4.2. Misturadores de ângulo variável

Os chamados misturadores de ângulo variável, caracterizados por fazer uma movimentação entre -30° e 30° graus, são os mais efetivos para manter o fundo do tanque limpo e o seu uso assegura uniformidade no topo, meio e fundo do tanque. Adicionalmente, são os mais adequados para evitar a decantação de lodos e água no fundo do tanque (PAUL *et al.*, 2004). Estas funções demandam altas velocidades de circulação durante todo o processo de mistura.

Para atingir os resultados desejados utilizando impelidores de ângulo variável, estes devem estar localizados como é mostrado na Figura 5, para assegurar que o fluxo máximo seja induzido através do fundo do tanque para mantê-lo livre de sedimentos e assim manter limpa a linha de sucção do produto final. A frequência de variação do ângulo depende da aplicação, já que o conteúdo de água e sedimentos depende exclusivamente dos fluidos alimentados ao equipamento.

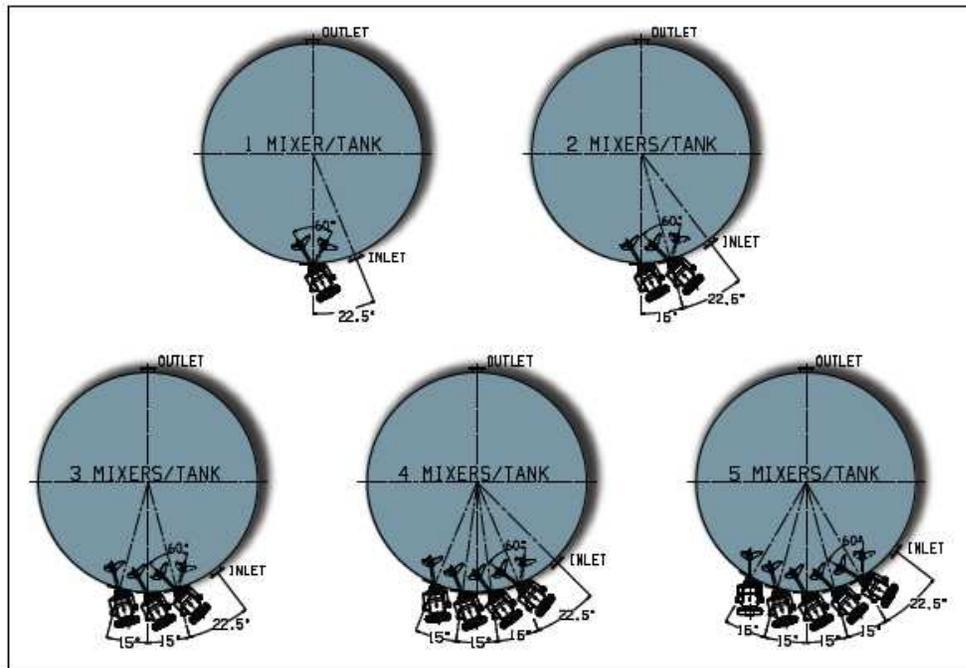


Figura 5. Posicionamento de misturadores de ângulo variável (PHILADELPHIA MIXING SOLUTIONS)

2.5. VARIÁVEIS DE PROJETO DE SISTEMAS DE MISTURA

Existem muitas variáveis que podem ser manipuladas para projetar um sistema de agitação, tais como a velocidade de rotação, propriedades do fluido, geometria do misturador, posicionamento, etc. Todas estas variáveis têm alguma influência no desenvolvimento do processo e o consumo energético. Assim, vários parâmetros têm sido padronizados para correlacionar todas estas variáveis em processos de mistura, visando facilitar a análise do processo, as quais serão explicadas a seguir (PAUL *et al.*, 2004, NAGATA 1995 e JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2010).

2.5.1. Torque

O torque é uma relação entre a velocidade de rotação do impelidor (N) expressada em revoluções por segundo (rps) e a potência consumida no processo (P), definido como o produto da força aplicada sobre o fluido e a distância da pá do impelidor.

Esta variável é de grande importância no projeto de sistemas de mistura, já que influencia diretamente o custo do equipamento. Para o cálculo do torque são consideradas várias variáveis características do processo de mistura, tais como: tamanho do eixo do impelidor, peso do impelidor e as propriedades do fluido a misturar.

Para sistemas de agitação, pode-se calcular o torque pela Equação 1.

$$\tau = \frac{P}{2\pi N} \quad (1)$$

O valor do torque pode-se estimar no *Ansys CFX-post*.

2.5.2. Potência

A potência está relacionada diretamente com o custo da energia necessária para um processo de mistura, o qual é o principal custo de operação. Além da potência transferida do impelidor para o fluido, outros consumos energéticos causados por aspectos mecânicos devem ser considerados para o projeto de equipamentos de mistura, tais como a perda de carga no motor, mas neste caso só foi considerado o primeiro; a energia por unidade de tempo necessária para superar as forças atuantes nas pás do impelidor (GRANGEIRO DA SILVA, 2002).

A potência consumida no processo é proporcional à velocidade de rotação, ao diâmetro do impelidor (D) e à densidade (ρ) de acordo com a Equação 2.

$$P = k\rho N^3 D^5 \quad (2)$$

A estimativa da potência em tanques agitados com uso de CFD é feita mediante o cálculo computacional do Torque, o qual é substituído na Equação 1 para obter a potência do processo.

2.5.3. Números adimensionais

Como na maioria de processos químicos, existem vários números adimensionais que caracterizam o desenvolvimento de processos de mistura. Para os processos de mistura convencionais existem muitas correlações empíricas que podem ser utilizadas para estimar estes parâmetros, mas para o caso de tanques de grande escala equipados com impelidores de entrada lateral a informação disponível é muito limitada. Nestes casos, CFD pode ser utilizada para a sua determinação.

A seguir serão explicados os números adimensionais mais relevantes para o tanque de mistura estudado neste projeto.

2.5.3.1. Número de Reynolds (Re)

O número de Reynolds é um dos mais comuns para sistemas agitados, definido como a razão entre as forças inerciais e as forças de atrito ou forças viscosas. Para tanques de mistura o número de Reynolds é definido pela Equação 3.

$$\text{Re} = \frac{ND^2\rho}{\mu} \quad (3)$$

Onde, μ é a viscosidade dinâmica do fluido.

2.5.3.2. Número de bombeamento (N_Q)

O número de bombeamento é a medida mais usada globalmente para a capacidade de bombeamento do impelidor em sistemas agitados, e relaciona a taxa de bombeamento do

impelidor com a velocidade de rotação e o tamanho do impelidor. Este parâmetro adimensional está definido pela seguinte equação:

$$N_Q = \frac{Q}{ND^3} \quad (4)$$

Na Equação 4, Q é a taxa de fluxo induzida pelo impelidor, a qual pode ser facilmente calculada em CFD posicionado uma superfície circular na região de descarga na frente do impelidor (impelidores axiais), e integrando o fluxo total de saída na superfície.

2.5.3.3. Número de mistura (N_θ)

O número de mistura é um dos parâmetros mais importantes para o desenvolvimento deste projeto, já que correlaciona o tempo de mistura com a velocidade de rotação, está definido pela Equação 5.

$$N_\theta = N\theta \quad (5)$$

Na qual, θ é o tempo de mistura, que é explicado detalhadamente na seção 5.4.1.

2.5.3.4. Número de potência (N_p)

O número de potência fornece uma medida adimensional do requerimento energético do impelidor para a operação de mistura e é definido pela Equação 6.

$$N_p = \frac{P}{\rho N^3 D^5} \quad (6)$$

CAPÍTULO III

3. EQUACIONAMENTO MATEMÁTICO E MÉTODOS NUMÉRICOS EM CFD

3.1. INTRODUÇÃO AO CAPÍTULO

O fundamento da fluidodinâmica computacional está baseada na solução aproximada das equações que representam o movimento dos fluidos, como o caso da movimentação de diferentes fluidos num tanque de mistura, mediante a implementação de métodos numéricos apropriados. Estas equações características, conservação da massa, energia e quantidade de movimento são discretizadas e solucionadas numericamente com condições de contorno preestabelecidas de acordo à descrição do fenômeno físico.

Adicionalmente, alguns modelos são necessários para a solução destas equações. Portanto, é absolutamente necessário que os modelos usados representem corretamente a física do problema a resolver para obter resultados confiáveis.

3.2. EQUAÇÕES DE CONTINUIDADE

A equação de continuidade é a lei da conservação da massa, a qual é dada pela seguinte expressão:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(\rho u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(\rho u_3)}{\partial x_3} = 0 \quad (7)$$

Na notação de Einstein a expressão fica:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (8)$$

No estado estacionário, a equação fica:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (9)$$

Se a densidade for constante:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (10)$$

3.3. EQUAÇÕES DE QUANTIDADE DE MOVIMENTO

Estas equações, conhecidas como equações de *Navier-Stokes*, representam a conservação da quantidade de movimento nas três componentes espaciais. Adicionalmente ao transporte de momento por convecção e difusão, vários outros termos estão envolvidos nestas equações.

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right] + \rho g_i + F_i \quad (11)$$

A parte esquerda da Equação 11 leva em consideração os efeitos convectivos e temporais, enquanto que no lado direito estão os seguintes termos: o gradiente de pressão, o termo responsável pela difusão do momento, a força gravitacional e o termo fonte que representa demais forças de forma generalizadas.

3.4. ESCOAMENTOS TURBULENTOS

Baseando-se no valor do número de Reynolds, definido para o caso de tanques de mistura pela Equação 3, o escoamento pode se classificar em laminar, para valores pequenos de Re (menores que 10), e turbulento para valores altos deste número adimensional (maiores que 10000). Para valores de Reynolds entre 10 e 10000 o escoamento é considerado de transição. No entanto, é importante indicar que o número de Re e, portanto a turbulência, são altamente influenciados pela geometria do misturador e do tanque, fato pelo qual os valores de referência mencionados podem variar dependendo do caso (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007).

No regime turbulento, que é necessário para ter um processo de mistura eficiente, ocorrem flutuações na velocidade e outras variáveis que devem ser incorporados no modelo em CFD para obter resultados significativos. Para que as equações de *Navier-Stokes* consigam levar em conta a turbulência, seria necessário o uso de escalas de tempo e espaço muito pequenas e, mesmo com os recursos computacionais atuais, isso ainda é praticamente impossível. A forma usada atualmente para considerar estes efeitos turbulentos é mediante a utilização de um modelo de turbulência.

Existem vários métodos para incluir a turbulência nas equações de *Navier-Stokes*. A maioria deles envolve o cálculo de médias no tempo das equações de conservação. Quando a turbulência é incluída nas equações de *Navier-Stokes*, a quantidade transportada é considerada como a soma de um componente de equilíbrio e um flutuante, $u_i + u'_i$. Os termos restantes são idênticos à equação de conservação da quantidade de movimento mencionada anteriormente, Equação 11. Levando em conta as considerações anteriores obtém-se a equação RANS (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) para o momento, Equação 12:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_i' u_j'}) + \rho g_i + F_i \quad (12)$$

Estes novos termos que envolvem $\overline{u_i' u_j'}$ são chamados de tensores de Reynolds e são valores médios no tempo.

3.4.1. HIPÓTESE DE BOUSSINESQ

A hipótese de Boussinesq faz a suposição que os tensores de Reynolds podem ser expressos em termos dos gradientes da velocidade média, assim:

$$\overline{\rho u_i' u_j'} = \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} + \left(\mu_t \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] \right) \quad (13)$$

Na equação anterior aparece uma nova constante com as mesmas dimensões da viscosidade. Dita constante é a viscosidade turbulenta. Quando a Equação 13 é substituída na Equação RANS (Equação 12), os termos que contêm as derivadas parciais podem ser agrupados para obter uma nova viscosidade chamada viscosidade efetiva.

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (14)$$

A hipótese de Boussinesq também introduz o conceito de energia cinética turbulenta, definida em termos das flutuações da velocidade u' , v' e w' nas três coordenadas espaciais.

$$k = \frac{u'^2 + v'^2 + w'^2}{2} \quad (15)$$

A função dos modelos de turbulência é calcular os tensores de Reynolds para substituí-los na Equação 12. Em alguns casos, isto é feito computando inicialmente os parâmetros k e μ_t (ou k e μ_{eff}) para a sua posterior substituição na Equação 13 e finalmente na Equação 12 e assim obter o valor do tensor.

3.4.2. MODELOS DE TURBULÊNCIA

A escolha do modelo de turbulência adequado depende das condições físicas do problema e do grau de exatidão requerido. Existem modelos de zero, uma, duas e quatro equações e, à medida que o número de equações aumenta e, portanto a exatidão do modelo, o custo computacional também se incrementa, por conseguinte, é necessário ter clareza nos objetivos do trabalho para saber se adianta o uso de um modelo de turbulência complexo ou se é possível obter bons resultados com modelos mais simples, de tal forma que o custo seja razoavelmente menor.

Na seguinte secção será explicado detalhadamente o modelo *Shear Stress Transport (SST)*, que foi utilizado neste trabalho e adicionalmente é feita uma breve descrição das principais características dos modelos $\kappa - \epsilon$ e $\kappa - \omega$, nos quais baseia-se o modelo SST.

3.4.2.1. Modelo $\kappa - \epsilon$

Este é um dos mais importantes e utilizados modelos de turbulência de duas equações para simulações em CFD e é considerado como o modelo standard para a indústria. Este modelo tem provado ser estável, numericamente robusto e tem uma boa capacidade de predição. Pelo fato de ter duas equações, uma para o cálculo da escala de velocidade e outra para comprimento de escala, este modelo é mais robusto que os outros modelos como o de zero equações. O modelo $\kappa - \epsilon$ é semi-empírico e é baseado em grande parte em observações de escoamentos com número de Reynolds elevado (PAUL *et al.*, 2004, Manual ANSYS CFX 13.0 e JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007)

3.4.2.2. Modelo $\kappa - \omega$

Uma das vantagens da formulação deste modelo de duas equações é o tratamento perto da parede para escoamentos de número de Reynolds baixo. Um novo tratamento automático de parede foi desenvolvido para este modelo para facilitar o uso de malhas relativamente grossas na parede, já que na maioria de problemas industriais é muito difícil cumprir com o requisito de $y^+ < 2$. O y^+ é uma medida adimensional da distância de separação entre a parede e o primeiro nó em direção ortogonal (explicado detalhadamente no Anexo A). Adicionalmente, este modelo

assume que a viscosidade turbulenta está ligada à energia cinética turbulenta e à frequência turbulenta (Manual ANSYS CFX 13.0)

3.4.2.3. Modelo SST (*Shear Stress Transport*)

O principal problema do modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$, é o cálculo de camadas limites, com uma tendência errada no cálculo do início e a quantidade de separação, o que influencia o funcionamento global de muitos equipamentos, tais como: difusores, pás de turbina e corpos aerodinâmicos. Separação também tem uma forte influência em outros processos, tais como transferência de calor na parede e fenômenos multifásicos. A predição de uma separação reduzida resulta em uma predição otimista do desempenho da máquina, fato que pode trazer consequências indesejáveis (Manual ANSYS CFX 13.0 e MENTER, 2003).

Para solucionar estes problemas, novos modelos têm sido desenvolvidos. Um dos mais eficazes é o SST (do inglês *Shear Stress Transport*), criado por MENTER (1994). Neste novo modelo, o tratamento da parede é feito utilizando um modelo baseado em energia cinética turbulenta / frequência ($\kappa - \omega$) e o modelo $\kappa - \epsilon$, para o fluxo. Uma função de combinação assegura uma transição suave entre os dois modelos.

Para muitos escoamentos industriais, o requerimento de $y^+ < 2$ é excessivo e pode não ser satisfeito na maioria dos casos para todas as paredes do sistema. Por outro lado, o uso estrito de uma função de parede, a qual permite o uso de malhas grossas, limita a exatidão do modelo em malhas finas. Assim, é utilizado um novo tratamento da parede, o qual aproveita a simples e robusta formulação nas regiões perto da parede do modelo $\kappa - \omega$, e muda automaticamente de uma formulação de número de Reynolds baixo para uma função de tratamento de parede baseada na densidade da malha. Assim, é possível fazer um uso ótimo do modelo para praticamente qualquer malha. Com esta nova abordagem podem ser obtidos resultados com variações de só 2 % para malhas com uma grande diferença no espaçamento perto da parede ($0,2 < y^+ < 100$), segundo MENTER (2003). De acordo com o Manual do software *Ansys CFX 13.0*, com este tratamento de automático de parede podem ser utilizadas malhas cujo y^+ pode atingir valores de até 200 sem ter uma variação relevante no resultado.

O modelo de duas equações SST, escrito em forma de conservação, é dado pelas seguintes expressões:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i k)}{\partial x_i} = \tilde{P}_k - \beta^* \rho k \omega + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] \quad (16)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i \omega)}{\partial x_i} = \alpha \rho S^2 - \beta \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\mu + \sigma_\omega \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right] + 2(1 - F_i) \rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \quad (17)$$

Onde a função de combinação é definida por,

$$F_i = \tanh \left\{ \left\{ \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho\sigma_{\omega 2} k}{CD_{kw} y^2} \right] \right\}^4 \right\} \quad (18)$$

Com,

$$CD_{kw} = \max \left(2\rho\sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i}, 10^{-10} \right) \quad (19)$$

Onde,

y é a distância da parede.

F_i é igual a zero para zonas longe da superfície (modelo $\kappa - \epsilon$), e vira para um valor de um dentro da camada limite (modelo $\kappa - \omega$).

A viscosidade turbulenta é:

$$\nu_t = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, SF_2)} \quad (20)$$

Onde, S é a invariante medida da taxa de tensão e F_2 é a segunda função de combinação definida assim:

$$F_2 = \tanh \left[\left[\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right) \right]^2 \right] \quad (21)$$

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

$$P_k = \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \rightarrow \tilde{P}_k = \min(P_k, 10\beta^* \rho k \omega) \quad (22)$$

Todas as constantes são computadas por uma mistura entre as constantes correspondentes do modelo $\kappa - \varepsilon$ e o $\kappa - \omega$ por meio da seguinte expressão:

$$\alpha = \alpha_1 F + \alpha_2 (1 - F) \quad (23)$$

As constantes para este modelo são:

$$\begin{aligned} \beta^* &= 0,09 \\ \alpha_1 &= 5/9 \\ \beta_1 &= 3/40 \\ \sigma_{k1} &= 0,85 \\ \sigma_{\omega1} &= 0,5 \\ \alpha_2 &= 0,44 \\ \beta_2 &= 0,0828 \\ \sigma_{k2} &= 1 \\ \sigma_{\omega2} &= 0,856 \end{aligned}$$

3.5. EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DO ESCALAR PASSIVO

Para a estimativa do tempo de mistura foram utilizados traçadores passivos, os quais foram monitorados em função do tempo até atingir um critério de homogeneidade preestabelecido. Esta metodologia será explicada detalhadamente na seção 5.4.1.

O transporte do escalar passivo esta determinado pela Equação 24, segundo MONTANTE *et al.* (2005).

$$\frac{\partial(\rho\Phi_i)}{\partial t} + \nabla(\rho u\Phi_i) = \nabla\left(\rho D_m \nabla\Phi - \frac{\mu_T}{\sigma_T} \nabla\Phi\right) \quad (24)$$

Na Equação 24, Φ_i é a fração volumétrica de traçador, D_m é o coeficiente de difusão molecular, σ_T é o número de Schmidt turbulento e μ_T é a viscosidade turbulenta do fluido. Neste trabalho, o transporte por difusão não foi considerado, já que a o transporte por convecção é os efeitos da turbulência são predominantes no escoamento.

Assim, a equação de transporte de traçador fica da seguinte maneira:

$$\frac{\partial(\rho\Phi_i)}{\partial t} + \nabla(\rho u\Phi_i) = \nabla\left(\frac{\mu_T}{\sigma_T} \nabla\Phi\right) \quad (25)$$

3.6. MÉTODOS NUMÉRICOS

As equações diferenciais apresentadas nas seções anteriores descrevem o movimento contínuo do fluido em função do espaço e o tempo. Para solucionar essas equações numericamente é necessário discretizar o domínio e assim mudar de uma solução contínua para uma discreta.

3.6.1. Discretização do domínio

Para obter a solução discreta das equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, é requerido que o domínio de interesse, neste caso o volume ocupado pelo fluido dentro do tanque, seja descrito por uma malha computacional feita de numerosas células, geralmente chamadas volumes de controle. Dita malha deve se encaixar na geometria a ser analisada, mesmo se ela for muito complexa, para aumentar a sua representação do processo real.

Existem basicamente três tipos de malhas: tetraédrica, hexaédrica e mista. A sua escolha depende da facilidade de aplicação e da física do problema. Geralmente malhas hexaédricas fornecem melhores resultados do que as tetraédricas, mas em muitos casos, a criação de malhas hexaédrica é muito difícil. Atualmente, é muito comum o uso de malhas tetraédricas com refinamento com prismas na parede, melhorando assim um dos principais problemas das malhas tetraédricas: erros no cálculo perto da parede. Desta maneira, aproveitam-se os benefícios do uso de elementos ortogonais na parede e a facilidade de construção de uma malha tetraédrica.

De modo geral, a densidade de elementos a ser utilizada numa simulação deve ser suficientemente fina para capturar adequadamente os efeitos do escoamento, mas não deve ser refinada de forma exagerada porque o custo computacional seria muito alto. Assim, é necessário fazer testes de independência da malha para garantir que os resultados não dependam do tamanho dos elementos utilizados na discretização.

3.6.2. Discretização das equações

As equações que governam o escoamento (explicadas nas secções anteriores) são integradas em cada volume de controle da malha, de maneira que as quantidades relevantes (massa, momento, energia, etc.) sejam conservadas num sentido discreto em cada volume. O software *Ansys CFX 13.0* utiliza o método dos volumes finitos para a discretização das equações de interesse.

Para ilustrar a discretização de uma equação de transporte típica, uma equação generalizada pode ser utilizada. A forma da expressão é:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S' \quad (26)$$

O parâmetro Γ é usado para representar o coeficiente de difusão do escalar ϕ . Se o escalar representasse algum dos componentes da velocidade, Γ representaria a viscosidade e S' , que representa todos os termos fonte, seria a soma do gradiente de pressão, a força gravitacional, e qualquer outra fonte de quantidade de movimento.

Após integrar as equações de transporte no volume de controle, a integral de volume pode ser convertida numa integral de superfície aplicando o teorema de divergência. Usando uma velocidade positiva na direção x , considerando independente do tempo e assumindo que as faces e e w têm área A , a equação de transporte integrada fica:

$$(\rho_e u_e \phi_e - \rho_w u_w \phi_w)A = \left(\Gamma_e \left[\frac{d\phi}{dx} \right]_e - \Gamma_w \left[\frac{d\phi}{dx} \right]_w \right) A + S \quad (27)$$

Onde S é a integral de volume dos termos fonte contida em S' .

A expressão anterior contém quatro termos que são avaliados nas faces. Para obter o valor na face desses termos em função dos valores armazenados nos centros, um esquema de interpolação é necessário.

3.6.3. Esquemas de interpolação

Devido a que todas as variáveis do problema são calculadas para o centro dos volumes de controle, os valores na face precisam ser expressos em termos dos valores centrais.

Existem muitas funções de interpolação que são empregadas atualmente como o esquema *Upwind*, utilizado em situações nas que o fluxo é dominado pela convecção. Este esquema pode ser de primeira ou segunda ordem, de acordo com o número de volumes de controle utilizado para a interpolação. O esquema utilizado neste trabalho é o de Alta Ordem (do inglês *High Resolution*), explicado a seguir.

3.6.3.1. Esquema de alta ordem

Neste modelo, um fator de mistura, ou *Blend Factor*, varia em todo o domínio baseando-se no campo de solução local. Em regiões do escoamento com gradientes baixos, o fator de mistura será próximo a um. Em áreas onde os gradientes são grandes, o fator de mistura tenderá a zero.

3.6.4. Convergência

O critério de convergência é uma condição preestabelecida para os resíduos das equações discretizadas que determina se a solução obtida convergiu. O critério utilizado como padrão no software *Ansys CFX* é que a soma de todos os resíduos normalizados seja igual o menor que 1×10^{-4} . Para qualquer critério escolhido, é feita a suposição de que a solução não muda mais quando a condição for atingida. Algumas vezes é necessário monitorar outras variáveis de interesse, como a potência, torque ou velocidade, para garantir convergência na simulação.

CAPÍTULO IV

4. MODELAGEM DE TANQUES AGITADOS EM CFD

4.1. INTRODUÇÃO AO CAPÍTULO

Existem diferentes métodos para modelar a movimentação do impelidor num tanque agitado através de CFD. Hoje em dia, são 4 os métodos comumente usados: a modelagem com dados experimentais para o impelidor, modelagem com uso de sistemas de referência rotacional, modelagem com múltiplos sistemas de referência e o último, e mais robusto, a modelagem com malhas deslizantes. O fator comum nestes quatro métodos é que eles estão todos desenhados para capturar o movimento de um misturador rotativo num tanque estacionário. A variação entre eles é o grau de exatidão no resultado final. Os três primeiros destes métodos são em estado estacionário e o último em transiente.

No desenvolvimento deste trabalho, a modelagem com múltiplos sistemas de referência foi utilizada, a qual será explicada detalhadamente a seguir.

4.2. MODELAGEM COM MÚLTIPLOS SISTEMAS DE REFERÊNCIA (MFR)

Este modelo, desenvolvido por LUO e GOSMASN (1994), que é uma modificação da modelagem com sistemas de referência rotacional, permite o uso de mais de um sistema de referência rotativo na simulação, ou seja, vários impelidores podem ser simulados no mesmo tanque para avaliar assim o seu efeito no processo de mistura; este é o principal objetivo deste trabalho.

Nesta abordagem, um sistema rotacional é utilizado para a região que contém os componentes rotativos, enquanto que um sistema estacionário é usado para o resto do tanque. No sistema rotativo, que contém o impelidor, este está parado em relação ao seu sistema rotacional. No sistema estacionário, que contém as paredes do tanque, elas estão sem movimentação.

A malha usada para obter uma solução através de uma modelagem com múltiplos sistemas de referência deve ter uma superfície de revolução perfeita em torno de cada sistema rotativo. Adicionalmente, as equações de momento são solucionadas no seu respectivo sistema. Assim, no sistema rotativo, ditas equações são solucionadas na parte que encerra o impelidor, enquanto que a parte de fora é solucionada no sistema estacionário. Desta maneira, para considerar os efeitos do sistema rotativo no sistema estacionário e vice-versa, é feita uma troca constante de informação na interface dos sistemas rotacional e estático mediante uma *General Grid Interface*.

4.3. INTERFACE GGI

A GGI (*General Grid Interface*), de acordo com o Manual de *ANSYS CFX 13.0*, é um tipo de conexão de malha requerida quando a malha em ambos os lados de duas ou mais superfícies conectadas não corresponde em cada nó. Um algoritmo de intersecção geral permite que a conexão seja feita satisfatoriamente entre as duas superfícies mesmo se elas não coincidirem para formar uma conexão física bem definida. A interface é construída na região de sobreposição entre os dois lados da interface.

O cálculo feito pelo algoritmo numérico é completamente conservativo em massa, energia, momentum, escalares, etc., portanto não prejudica a convergência e robustez da simulação.

O tipo de conexão GGI utilizada neste trabalho é o *Frozen Rotor*, o qual será explicado a seguir.

4.3.1. Modelo *frozen rotor*

Neste modelo, o sistema de referência é mudado, mas a orientação relativa dos componentes através da interface é fixa. Os dois sistemas de referência se conectam tal que cada um tenha uma posição relativa fixa durante tudo o cálculo, mas com a transformação apropriada do sistema na interface.

Este modelo produz uma solução em estado estacionário para múltiplos sistemas de referência levando em conta a interação entre os dois sistemas. Cada lado da interface deve ser uma superfície de revolução e ambos os lados devem coincidir na superfície de revolução. O rotor, composto pelo impelidor, é resolvido num sistema de referência rotacional e o estator, composto pelo tanque, num sistema de referência estacionário. A principal vantagem deste modelo é que o requerimento computacional é relativamente baixo em comparação com outros modelos disponíveis como o *Transient Rotor-Stator*. A principal desvantagem é que os efeitos transientes não são modelados na interface (Manual ANSYS CFX 13.0).

4.4. MODELO ALTERNATE ROTATION

O *Alternate Rotation* é um modelo para o termo de advecção na equação de quantidade de movimento. Em vez de usar a velocidade do sistema relativo U , o solver utiliza a velocidade do sistema absoluto U_{abs} . Esta mudança faz com que haja uma redução significativa no erro numérico quando o escoamento do sistema absoluto é essencialmente um escoamento constante paralelo ao eixo de rotação. Por exemplo, o escoamento de um ventilador ou propulsor é praticamente constante no sistema absoluto, mas altamente rotativo no sistema relativo. Para raios muito grandes, como o tanque simulado neste trabalho, erros pequenos no modelo de advecção do escoamento no sistema relativo viram erros enormes no escoamento do sistema absoluto. Portanto, quando este modelo é utilizado nestas situações, o erro numérico é grandemente reduzido (Manual ANSYS CFX 13.0).

Na equação padrão, o termo de advecção na equação de quantidade de movimento utiliza a velocidade do sistema relativo segundo a Equação 28.

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot \rho U \otimes U = \nabla \cdot [-p\delta + \mu \nabla U + \nabla U^T - 2\rho w \times U - \rho \omega \times (\omega \times r)] \quad (28)$$

A troca de variáveis deste modelo no termo de advecção requer uma modificação do termo fonte referente às forças de Coriolis. A forma final da equação é:

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot \rho U \otimes U_{abs} = \nabla \cdot [-p\delta + \mu \nabla U + \nabla U^T - \rho w \times U - \rho \omega \times (\omega \times r)] \quad (29)$$

CAPÍTULO V

5. ABORDAGEM COMPUTACIONAL

5.1. INTRODUÇÃO AO CAPÍTULO

Geralmente, para elaborar uma simulação em CFD no software *Ansys CFX 13.0*, são necessários 3 passos. O primeiro inclui a geração das respectivas geometrias, a discretização dos domínios ou construção das malhas a partir das geometrias e a aplicação dos modelos e condições de contorno apropriadas. O segundo passo corresponde à solução numérica do modelo computacional e, por último, com os resultados obtidos das simulações, procede-se ao pós-processamento e análise dos resultados.

Na seguinte seção serão explicadas brevemente as metodologias empregadas para cada etapa de simulação.

5.2. OBTENÇÃO DAS GEOMETRIAS

Nesta etapa, a geometria do tanque e do impelidor são desenhadas de acordo com as dimensões e especificações dos modelos reais. A geometria do tanque, pelo fato dela ser relativamente simples, foi feita diretamente no software *Ansys Design Modeler*. Na parte superior da geometria do tanque foi feita uma camada, na qual será adicionado o traçador para a estimativa do tempo de homogeneização.

Por outro lado, para a obtenção da geometria do misturador não foi possível desenhar manualmente já que a sua geometria é muito complexa. Assim, foi necessário usar ferramentas CAD 3D para fazer o escaneamento do equipamento e, desta maneira, reproduzir a sua geometria real (Figura 7). O sistema digitalizador portátil *Handyscan 3D* modelo *Exa-scan* usado para o escaneamento do impelidor é mostrado na Figura 6. O serviço foi fornecido por uma firma especializada em digitalização laser de peças, moldes, modelos, ferramentas e protótipos chamada RBG Serviços.



Figura 6. Escaner 3D

Do CAD 3D, obtém-se um arquivo de fácil importação para qualquer software de geração de malhas. Para completar o domínio rotativo do sistema, Figura 9 foi necessário construir o cilindro em torno do misturador.

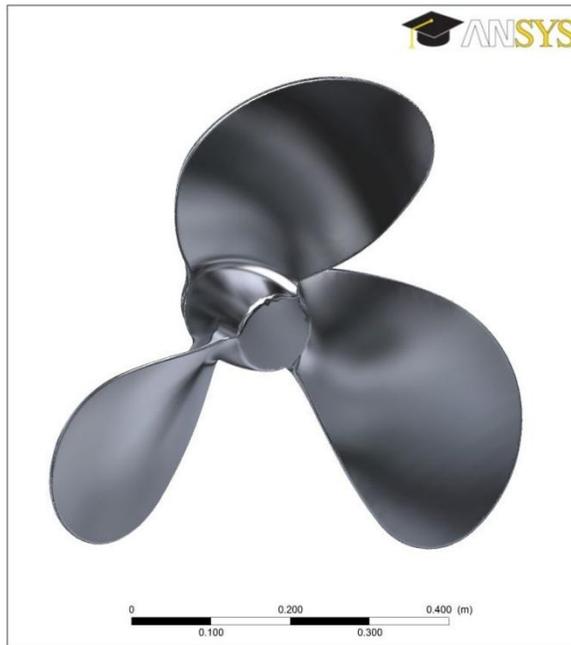


Figura 7. Geometria do impelidor

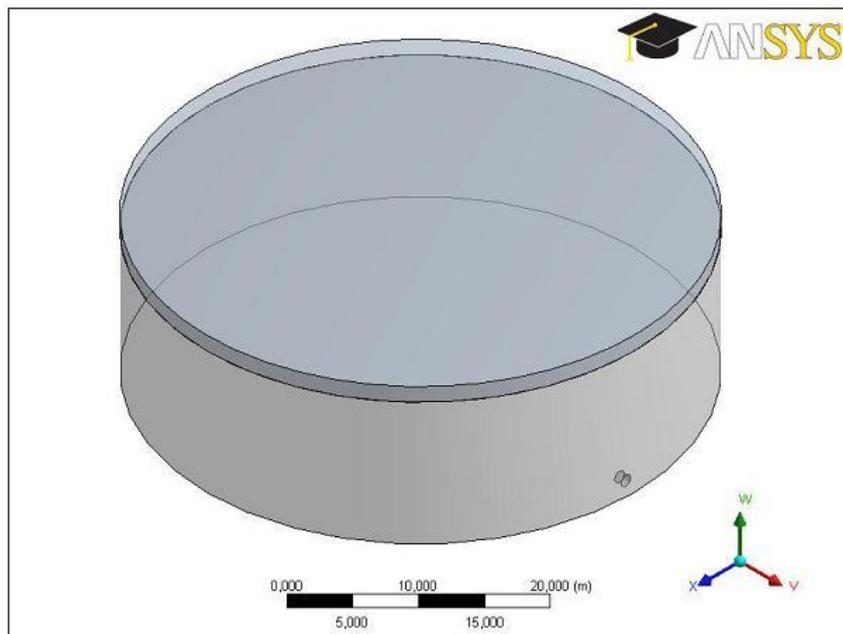


Figura 8. Geometria do domínio estacionário

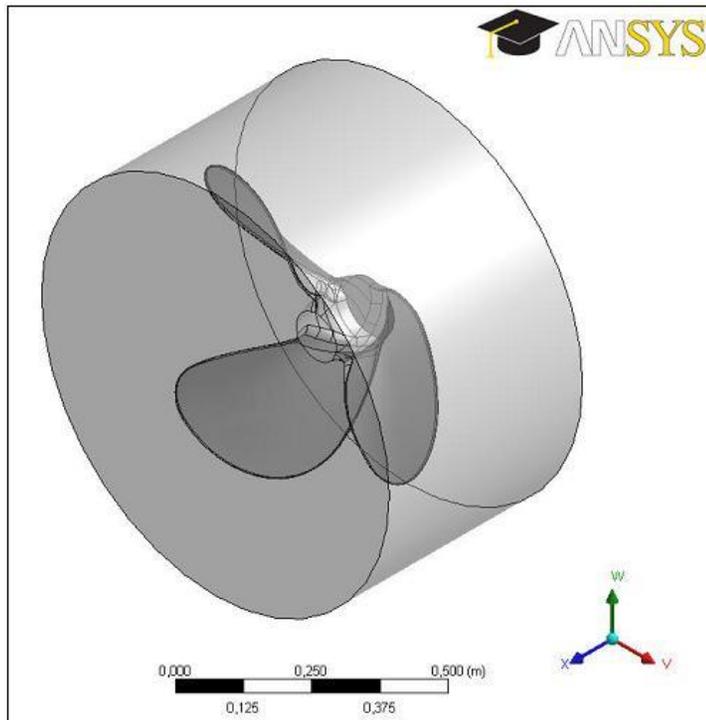


Figura 9. Geometria do domínio rotativo

5.3. GERAÇÃO DAS MALHAS

A qualidade das malhas utilizadas para as simulações influenciam diretamente na facilidade de convergência dos resíduos na solução numérica. Assim, deve-se ter muito cuidado no controle dos principais parâmetros de avaliação de malhas, como a qualidade, obliquidade, razão de aspecto, etc., para garantir que o solver não gere erros numéricos consideráveis devido a problemas na discretização dos domínios. Por exemplo, quanto maior a ortogonalidade da malha, menos erros numéricos, e mais rápida será a convergência da simulação.

Para a geração das malhas foram utilizados diferentes softwares. A malha do domínio estacionário foi feita no *Ansys CFX Meshing*, o qual permite facilmente gerar malhas para geometrias relativamente simples, como é o caso do domínio estacionário. Devido a que a geometria do domínio rotativo é complexa, a sua malha foi gerada no software *Ansys ICEM*,

o qual permite mais controle na criação da malha e, além disso, possui ferramentas para melhorar a qualidade da mesma.

Para ambos os casos, o tipo de malha usado é o tetraédrico já que é muito mais fácil o refino da malha em regiões onde for necessário (MALISKA, 1995), especialmente para a malha do domínio rotativo devido à complexidade geométrica. Adicionalmente, foi feito um refino com camadas de prismas na parede, de acordo com recomendações da literatura (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2007). A camada de prismas ajuda a garantir que a física do problema seja representada adequadamente na camada limite (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2011). Para ambas as malhas, foram feitas camadas de 10 primas com uma taxa de crescimento de 1.2. Um corte transversal da malha do domínio rotativo e apresentado na Figura 10. Na Figura 11 é possível observar em detalhe a camada de prismas feita na superfície do impelidor.

A malha do domínio rotativo tem aproximadamente 1.200.000. Esta quantidade de elementos é relativamente grande, devido à complexidade da geometria, a qual tem muitas faces com curvaturas pequenas nas quais foi necessário fazer o respectivo refino. Na Figura 12 é apresentada a malha da superfície do impelidor, na qual é possível observar o refino feito nas curvaturas da geometria.

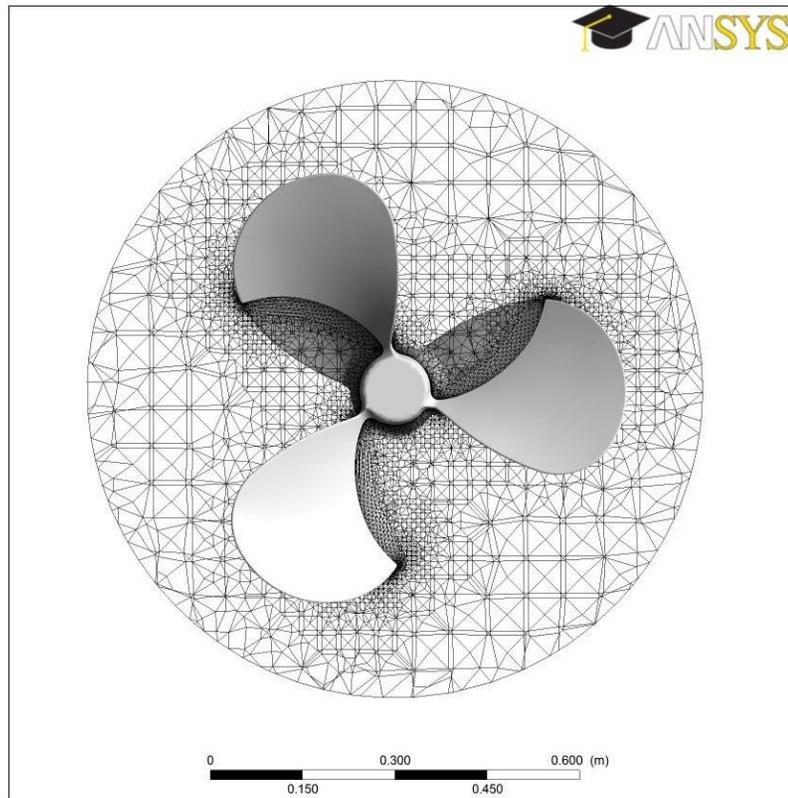


Figura 10. Malha do domínio rotativo

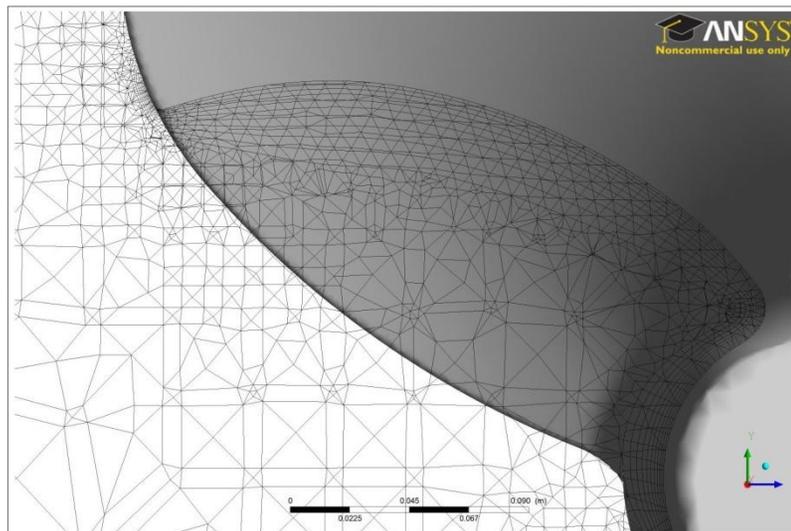


Figura 11. Camada de prismas na malha do domínio rotativo

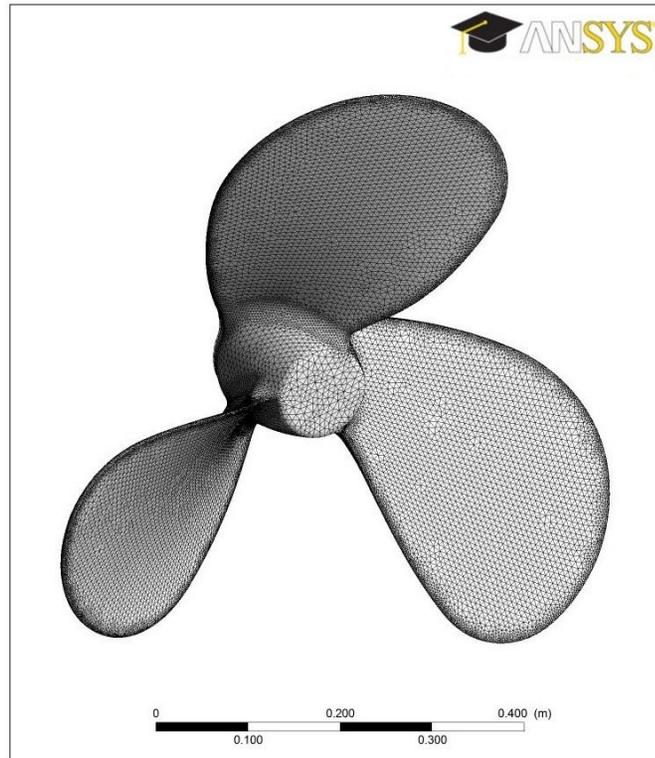


Figura 12. Malha superficial do impelidor

Para fazer a malha do domínio estacionário, composto pelo tanque, foi adotada a mesma metodologia utilizada para a malha do domínio rotativo. Foi feita uma malha tetraédrica com 10 camadas de prismas nas paredes do tanque como pode se observar na Figura 13.

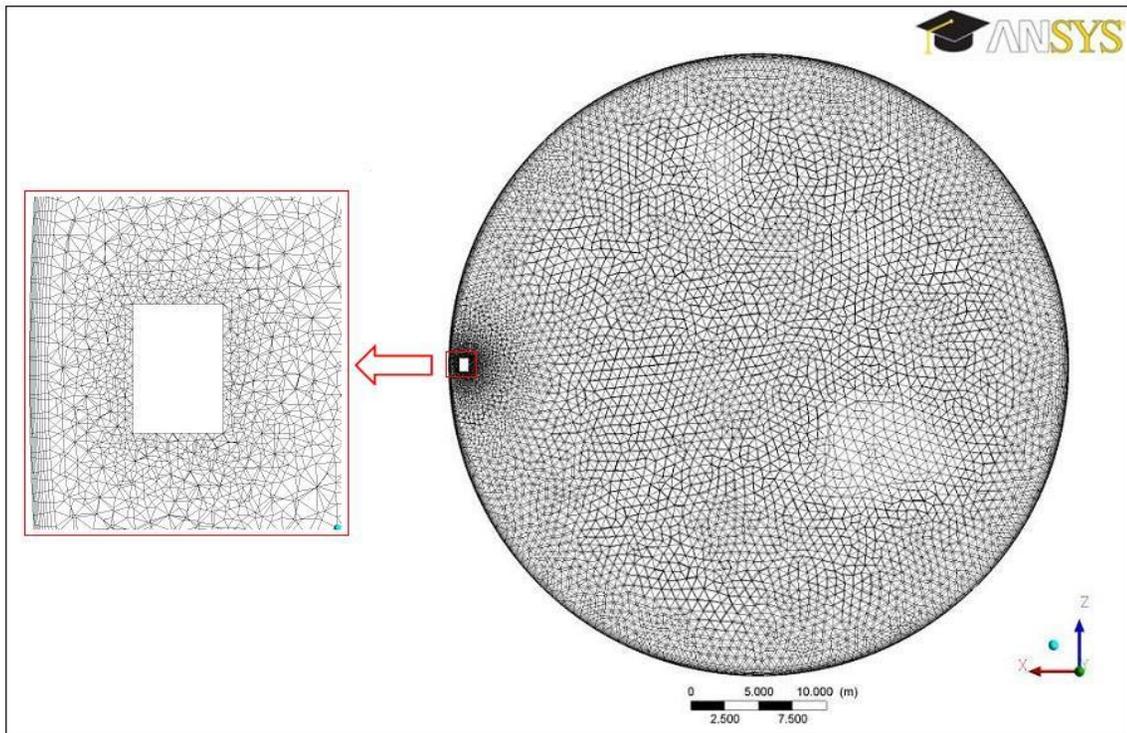


Figura 13. Malha do domínio estacionário

A variável que mais tem influência na estimativa do tempo de mistura é a velocidade em cada ponto do tanque, já que a equação de transporte do traçador (Equação 24) depende do seu valor. Portanto, é um requisito que a velocidade seja independente da malha utilizada, ou seja, a malha deve ser refinada até que os resultados não mudem consideravelmente. Este refinamento é feito mediante testes de independência de malha.

5.3.1. Testes de independência de malha do tanque

Para a determinação do número de volumes de controle adequados para a malha, foi feita inicialmente uma malha de 250.000 volumes de controle, dos quais ao redor de 50% é composto pelas 10 camadas de prismas utilizadas nas paredes do tanque. Considerando recomendações feitas na literatura para testes de independência de malha de tanques agitados (PAKSAD *et al.*, 2008), o número de volumes de controle foi duplicado entre cada malha testada. Desta maneira, foram construídas quatro malhas com número de volumes de controle de acordo com a Tabela 2.

Tabela 2. Malhas testadas para o tanque

Malha	Volumes de Controle
Malha1	250.000
Malha2	500.000
Malha3	1.000.000
Malha4	2.000.000

Para quantificar a diferença entre cada malha foi calculada a variância da velocidade considerando todos os volumes de controle do tanque mediante a Equação 30.

$$\sigma^2 = \frac{\sum (v - \bar{v})^2}{n - 1} \quad (30)$$

5.4. PRÉ-PROCESSAMENTO

Neste trabalho, dois tipos de simulações foram feitas. O primeiro corresponde a simulações em estado estacionário para a determinação do perfil hidrodinâmico do fluido no tanque, potência consumida pelo impelidor e bombeamento do impelidor. O segundo corresponde a simulações em estado transiente para a determinação do tempo de homogeneização de traçador. A montagem da simulação para ambos os casos foi feita no software *Ansys CFX 13.0*.

As seguintes condições de contorno e suposições foram adotadas para as simulações em estado estacionário:

- Escoamento monofásico.
- Velocidade de rotação do domínio rotativo constante (420 rpm)
- Nas paredes do tanque, incluindo a tampa, o gradiente de velocidade é igual a zero.
- Pressão relativa inicial no primeiro nó da malha igual a zero (Padrão do Software).

- Propriedades do Diesel constantes (Tabela 3).
- Devido a que as propriedades das cargas de Diesel são parecidas, só uma fase líquida é considerada.
- Não há variações na geometria durante a simulação.
- Efeito do eixo desprezível.
- Transferência de calor desprezível

Tabela 3. Propriedades do Diesel

Densidade	850 kg m ⁻³
Viscosidade	0,003 Pa s

Com as considerações anteriores, foi feito o *setup* para o pré-processamento, acoplando os dois domínios mediante uma conexão GGI com interface *Frozen-Rotor* descritas previamente nas seções 4.3 e 4.3.1. Na Figura 14 é esquematizado o acoplamento do domínio estacionário e o domínio rotativo.

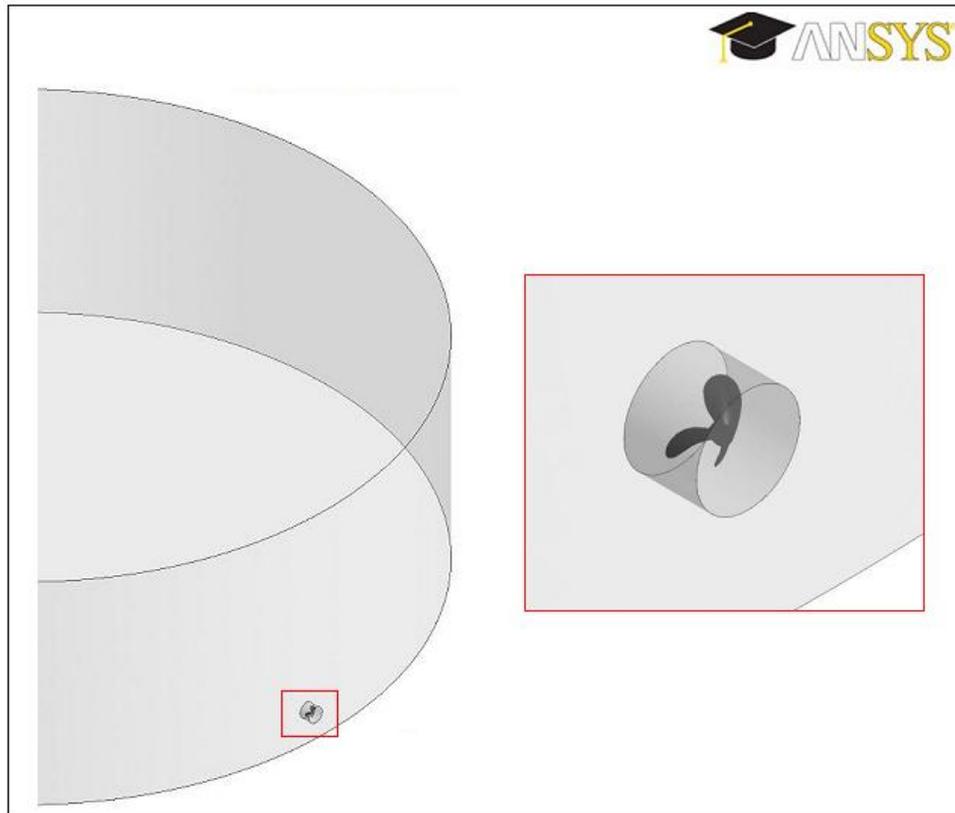


Figura 14. Acoplamento domínio estacionário e domínio rotativo

5.4.1. Estimativa do tempo de mistura

O método ideal para estimar o tempo de homogeneização é mediante simulações transientes até a variável de interesse atingir um valor constante. O principal problema deste tipo de simulações é o alto custo computacional, portanto aproximações apropriadas devem ser feitas. Neste caso, a abordagem utilizada geralmente para o cálculo de tempos de mistura é calculando primeiramente a hidrodinâmica do líquido mediante uma simulação em estado estacionário para posteriormente adicionar um traçador e calcular a sua distribuição em função do tempo mediante a Equação 24 (BUJALSKI, 2002 e MONTANTE e MAGELLI, 2005).

Devido a que a adição do traçador não altera as propriedades do fluido nem a sua hidrodinâmica, não é necessário resolver as equações de momento, continuidade e turbulência, as

quais podem ser desativadas facilmente no programa (PAUL *et al.*, 2004 e Manual ANSYS CFX 13.0)

Muitas pesquisas na área de mistura têm demonstrado a influência do posicionamento dos pontos de adição e monitoramento do traçador no tempo de mistura (BUJALSKI *et al.*, 2002, PAUL *et al.*, 2004, ZHANG *et al.*, 2009 e ALVAREZ-CASTRO, 2011). Portanto, para eliminar o erro devido a posição dos pontos de controle da concentração do traçador, foram considerados todos os pontos ou volumes de controle do tanque para o cálculo, o qual pode ser feito no programa *Ansys CFX-Post*, mas não experimentalmente. O efeito da posição inicial do traçador foi estudado por ALVAREZ-CASTRO (2011) para um tanque similar ao estudado neste trabalho e concluiu-se que a posição para a qual o tempo de mistura é maior corresponde ao topo do tanque, portanto, essa posição foi adotada neste trabalho. Em vez de calcular o tempo no qual a concentração de traçador não varia em função do tempo, foi calculada a variância da concentração de traçador (Equação 31) e o coeficiente de variação (Equação 32) no tanque (JOAQUIM JUNIOR *et al.*, 2011). Esta metodologia fornece uma predição mais confiável já que leva em conta as variações de concentração de todas as regiões do tanque. STREIFF (1979) tem sugerido que o coeficiente de variação (*cv*) é o parâmetro mais representativo para estimar o tempo de mistura.

O tempo no qual o coeficiente de variação seja aproximadamente igual a 0,01, que corresponde ao tempo no qual as variações da concentração de traçador são da ordem de 1 %, foi considerado como tempo de homogeneização.

$$\sigma^2 = \frac{\sum (C - \bar{C})^2}{n-1} \quad (31)$$

O coeficiente de variação é definido pela seguinte expressão:

$$cv = \frac{\sigma}{C} \quad (32)$$

Para o cálculo da distribuição do traçador em função do tempo, foram desativadas as equações de momento, continuidade e turbulência. Após obter o perfil de velocidade em estado

estacionário com as considerações e suposições feitas anteriormente, foi adicionada uma quantidade de traçador correspondente a 10 % do volume total do tanque, mediante uma função pulso. Inicialmente, a concentração de traçador no 10 % superior do tanque é igual a um e no restante do tanque igual zero (Ver Figura 15).

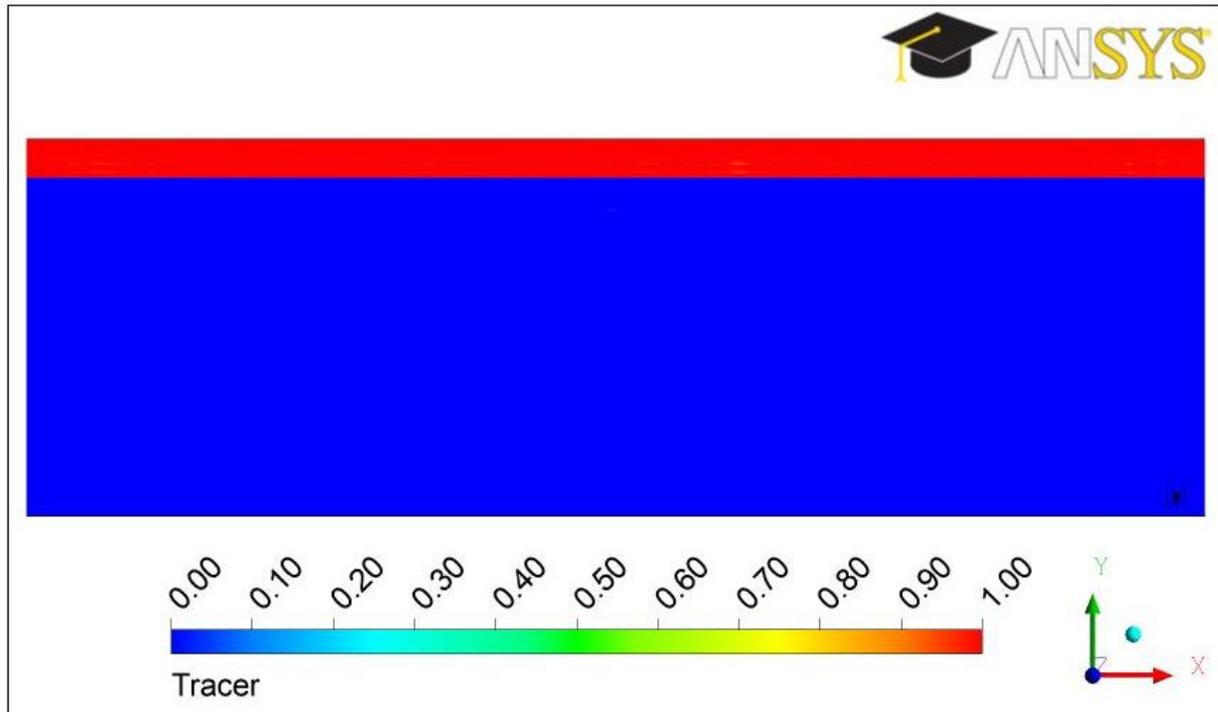


Figura 15. Concentração inicial de traçador no tanque

5.5. PROCESSAMENTO

Para as simulações em estado estacionário, ferramentas do software *Ansys CFX 13.0* foram utilizadas para ajudar à convergência da simulação, a qual pode ser complicada para simulações de tanques de mistura, especialmente para o tipo de tanque de grande escala considerado neste trabalho. Primeiramente, a simulação foi iniciada usando um passo de tempo fixo até que a razão de convergência fosse muito baixa (geralmente 20 iterações). Posteriormente, o passo de tempo

fixo foi mudado para a opção *Local Timescale Factor*, no qual um passo de tempo diferente é usado para cada volume de controle (Ver Anexo B), até atingir o critério de convergência preestabelecido. Finalmente, a simulação foi reiniciada usando um passo de tempo, mas neste caso partindo da solução obtida com o *Local Timescale Factor*, já que, de acordo com o manual de *Ansys CFX*, é preferível terminar a simulação sempre com um passo de tempo fixo até atingir de novo o critério de convergência (Manual ANSYS CFX 13.0). As equações discretizadas foram solucionadas empregando o esquema de interpolação de alta ordem (*High Resolution*). No solver estacionário de *Ansys CFX 13.0*, o passo de tempo não é o tempo físico de integração das equações, mas sim atua como uma relaxação das equações durante a solução (Manual ANSYS CFX 13.0).

Para as simulações transientes também se utilizou o esquema de interpolação de alta resolução para a solução da equação de transporte do traçador. A simulação rodou-se até que o coeficiente de variação (*cv*), definido pela Equação 32, atingisse o valor preestabelecido de 0,01.

Os resíduos das equações discretizadas foram considerados como critério de convergência para todas as simulações tanto em estado estacionário quanto transiente. Foi adotado o valor de $RMS = 5 \times 10^{-5}$. Este valor é menor que o recomendado no *Ansys CFX 13* ($RMS = 1 \times 10^{-4}$), portanto o resultado é mais confiável.

Todas as simulações foram rodadas num computador equipado com um processador Intel Core i7 Quad Core 2,80GHz 64bits Hyper Thread (4 núcleos físicos e 4 virtuais) e uma memória RAM de 8 Gb.

5.5.1. Configurações avaliadas

O objetivo principal deste trabalho é avaliar a influência da posição do impelidor no tempo de mistura, portanto, é necessário testar diferentes arranjos misturador(es)/tanque. Assim, baseando-se em recomendações encontradas na literatura em relação ao posicionamento e número de impelidores neste tipo de equipamentos de grande escala, foi avaliada a hidrodinâmica de 9 arranjos diferentes variando o número de impelidores e o grau de deslocamento horizontal

em relação ao eixo radial do tanque. A Tabela 4 apresenta as características de cada configuração considerada.

Tabela 4. Arranjos utilizados nas simulações

Caso	Número de Impelidores	Ângulo de Deslocamento
Caso 1-0	1	0°
Caso 1-10	1	10°
Caso 1-20	1	20°
Caso 2-0	2	0°
Caso 2-10	2	10°
Caso 2-20	2	20°
Caso 3-0	3	0°
Caso 3-10	3	10°
Caso 3-20	3	20°

5.6. PÓS-PROCESSAMENTO

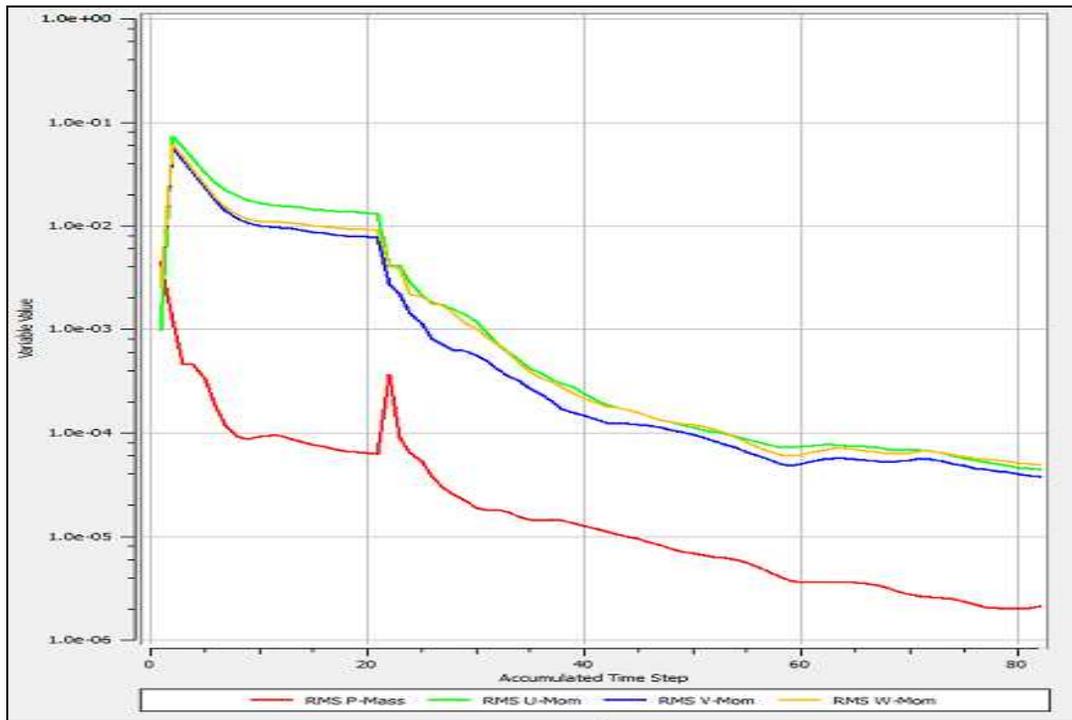
Ferramentas de análise do software *Ansys CFX-post* foram utilizadas para fazer a análise e comparação de resultados, entre elas: campos de velocidade, campos vetoriais, linhas de corrente, etc. Com estes resultados fez-se uma comparação qualitativa das diferentes configurações estudadas neste projeto. Adicionalmente, variáveis importantes para processos de mistura, como: número de potência, número de bombeamento, número de mistura, etc., as quais foram definidas previamente na Seção 2.5, foram consideradas para a análise quantitativa e avaliação das diferentes alternativas para o melhoramento da operação em planta.

CAPÍTULO VI

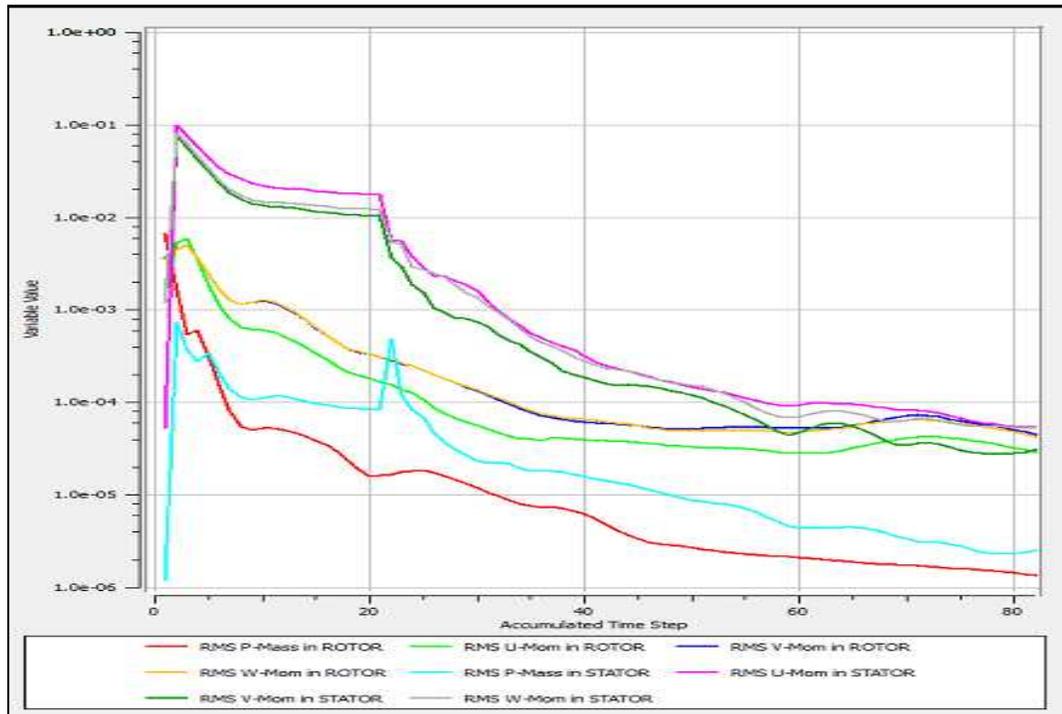
6. RESULTADOS E DISCUSSÕES

6.1. CONVERGÊNCIA

Na Figura 16 é apresentado o histórico de convergência dos resíduos para cada domínio do sistema para a simulação correspondente à configuração original; 1 impelidor sem desvio. Na iteração 20, foi usado o *Local Timescale Factor* ao invés do *Physical Timescale* para acelerar a convergência da simulação. Nesta Figura é notável a diferença entre a convergência do domínio rotativo e o domínio estacionário, a qual diminui constantemente quando o *Local Timescale Factor* é implementado até que os resíduos globais satisfaçam o critério de convergência estabelecido, atingindo o valor de 5×10^{-5} (Figura 16a). Se o *Local Timescale Factor* não fosse utilizado, os resíduos do domínio estacionário ficariam estáveis em torno de 1×10^{-2} , fazendo com que os resíduos globais não atingissem o critério de convergência num tempo razoável.



(a)

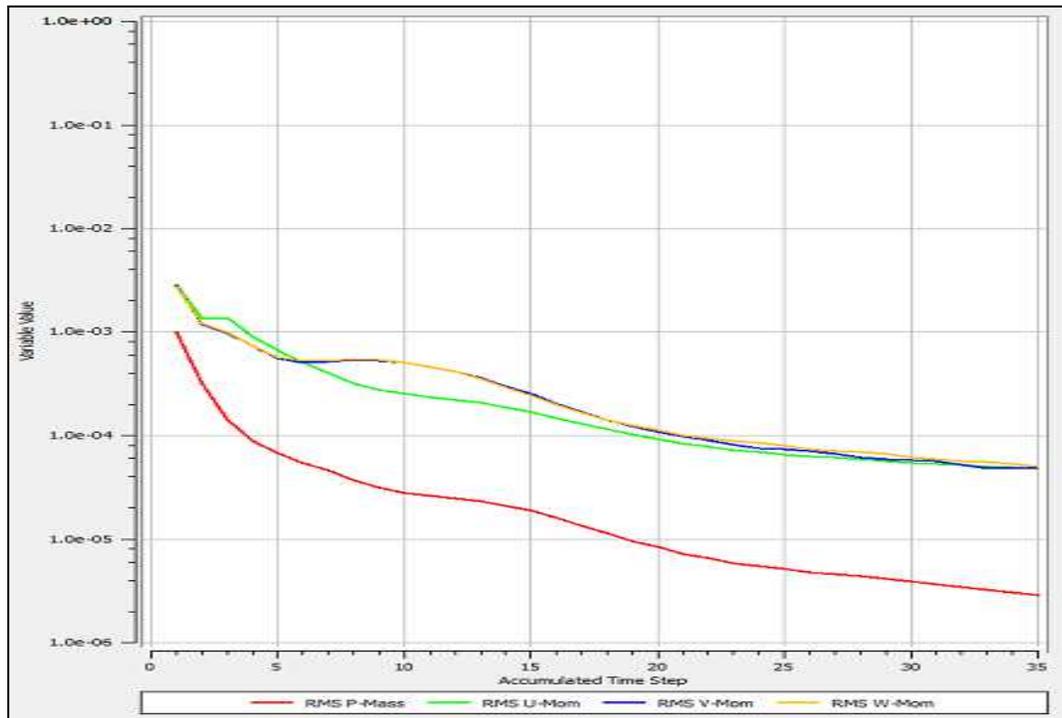


(b)

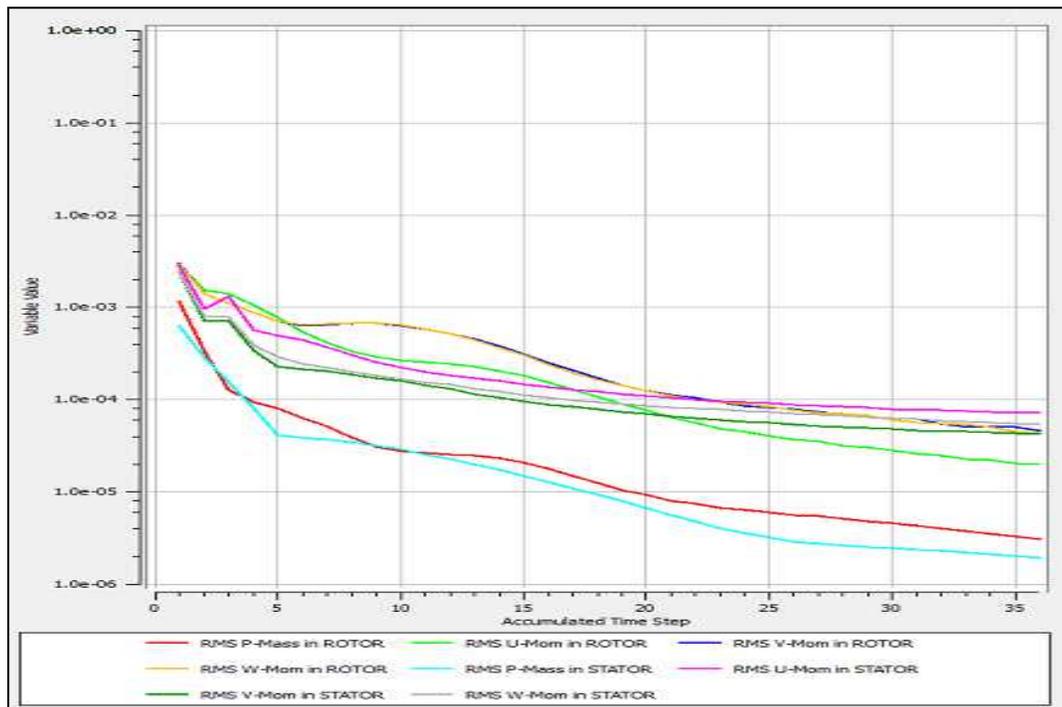
Figura 16. Convergência da simulação com *LTF*. (a) Global (b) Por Domínios

Como foi explicado na seção 5.5, na abordagem computacional, após obter o resultado com o *Local Timescale Factor* a simulação foi reiniciada e rodada com um passo de tempo constante até atingir de novo o critério de convergência. Os resíduos globais são apresentados na Figura 17a.

Os resultados da simulação finalizada com *Local Timescale Factor* e a simulação com *Physical Timescale* mostraram que não há uma diferença significativa entre eles, mas, segundo as recomendações do manual de *Ansys CFX 13.0*, as simulações foram finalizadas com um passo de tempo constante. Como parâmetro de comparação entre os dois resultados foi utilizada a variância da velocidade no tanque. A simulação finalizada com *Local Timescale Factor* tem uma variância da velocidade igual a $\sigma^2 = 0,011694$, enquanto que a terminada com *Physical Timescale* é $\sigma^2 = 0,0114632$. Considerando estes dois valores, há uma diferença de 1,97 % entre eles, que não é significativa.



(a)



(b)

Figura 17. Convergência da simulação com *Physical Timescale* (a) Global (b) Por domínios

6.2. TESTES DE INDEPENDÊNCIA DE MALHA

Quatro simulações foram feitas com as malhas a serem avaliadas, as quais foram descritas na seção 5.3.1. Cada simulação foi rodada até atingir o critério de convergência preestabelecido com a metodologia explicada na seção anterior.

Na Tabela 5 são apresentadas as porcentagens de variação entre cada malha tomando como referência a variância da velocidade.

Tabela 5. Testes de independência de malha

Malha	σ^2	Variação [%]
Malha 1	0,01030	→ 7,30
Malha 2	0,01105	
Malha 3	0,01134	→ 2,58
Malha 4	0,01067	
		→ -5,84

Observando os resultados obtidos, existe uma diferença de 7,30 % na variância da velocidade (S^2) entre a malha de 250.000 (Malha 1) e a de 500.000 (Malha 2) volumes de controle. Entre a Malha 2 e a malha de 1.000.000 (Malha 3) de volumes de controle, a diferença está em torno de 2,58 %. O primeiro valor é maior que os valores sugeridos na literatura, os quais estão ao redor de 5 % (ou menos) de variação (PAKSAD *et al.*, 2008). Por outro lado, a diferença entre a Malha 3 e a Malha 4, de 2.000.000 de volumes de controle, aumenta, mudando a tendência de diminuição entre as outras malhas. Observando a Figura 19d, para a Malha 4, é possível notar que existe um padrão de velocidade no plano, caracterizado por um desvio do jato em direção ao lado esquerdo, que discorda com o esperado. De acordo com informação do suporte técnico da *Ansys*, este fenômeno é apresentado quando malhas muito finas são empregadas, já que o programa captura muitos efeitos transientes devido ao alto refino da malha,

os quais são difíceis de solucionar para o *solver* em estado estacionário, ocasionando assim este tipo de padrões de fluxo. Em outras palavras, o *solver* estacionário é forçado a solucionar um problema que, devido ao alto refino da malha, deve ser solucionado em regime transiente.

Na Figura 18, que apresenta o perfil de velocidade na linha posicionada no eixo X para as quatro malhas testadas, é bastante notável o desvio dos resultados para a Malha 4, principalmente para posições entre o centro e a parede do tanque no lado contrario ao impelidor, nas quais ocorre o desvio do jato.

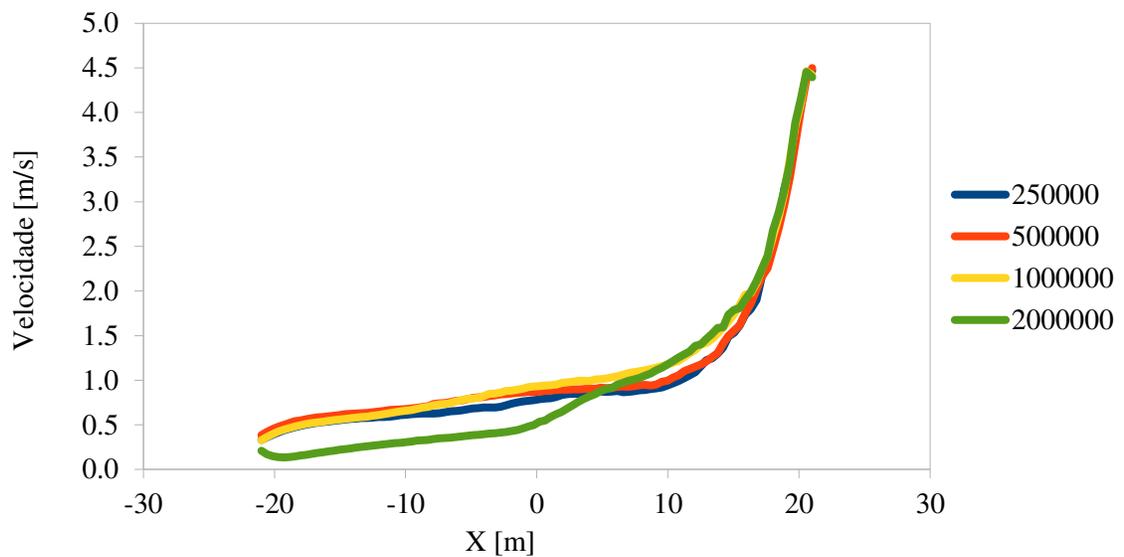


Figura 18. Perfil de velocidades no jato

Nas Figura 18 e 19, não existe uma diferença visual grande entre a malha 1 e a 2, o qual concorda com os resultados da Tabela 5. No primeiro caso, seguramente muitos efeitos do escoamento estão sendo ignorados devido ao grande tamanho dos volumes de controle. A Malha 4, como foi explicado no parágrafo anterior, não dá um resultado tão confiável. Além disso, o custo computacional de uma malha de 2.000.000 de volumes de controle é bastante alto em comparação ao das outras malhas, especialmente para as simulações em estado transiente para o

cálculo do tempo de homogeneização. Desta maneira, a malha ótima para a simulação, a qual dá um balanço entre refino, custo computacional e independência dos resultados, é a Malha 3, de 1.000.000 de volumes de controle.

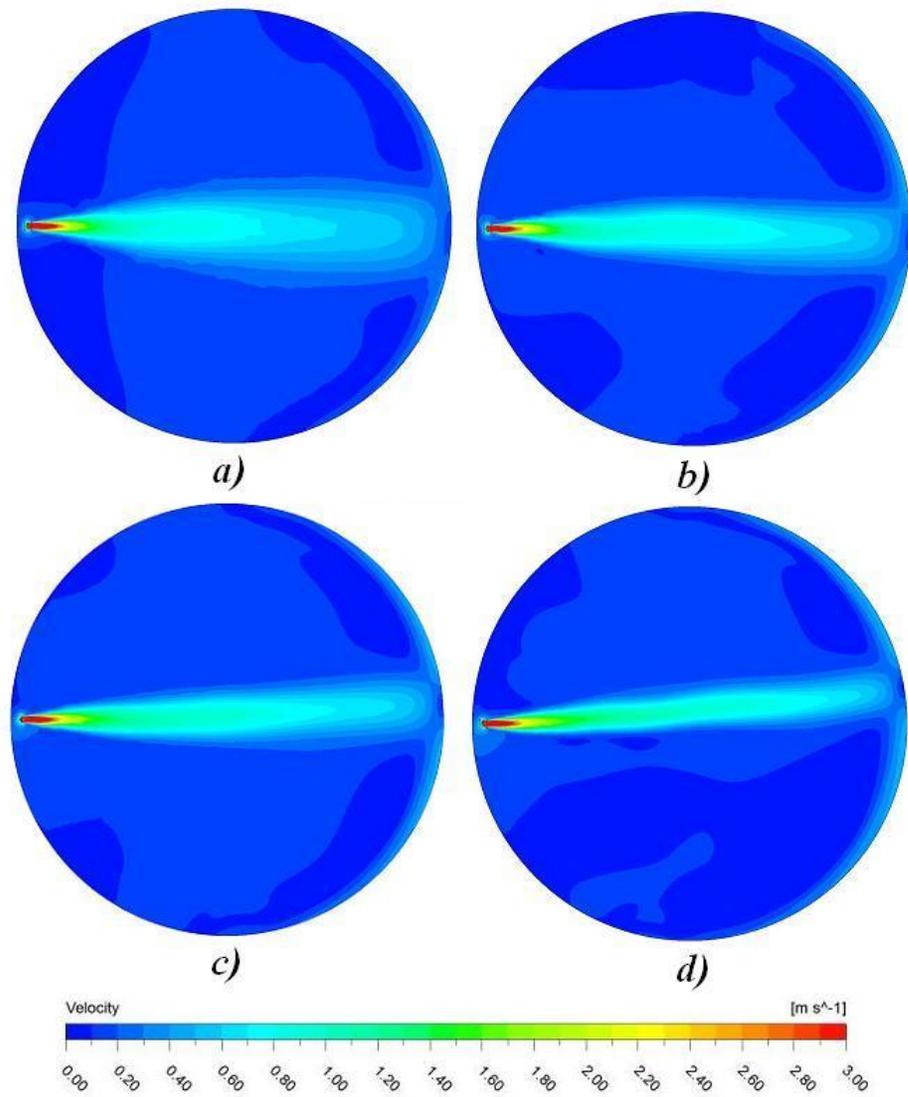


Figura 19. Perfis de velocidade no plano horizontal (a) Malha 1 (b) Malha 2 (c) Malha 3 (d) Malha 4

6.3. CARACTERIZAÇÃO DO PADRÃO DE FLUXO

Nesta seção são apresentadas distribuições de velocidade, campos vetoriais de velocidade e linhas de corrente que representam a movimentação de partículas dentro do tanque. Os planos horizontais considerados para os perfis de velocidade e os campos vetoriais estão localizados à altura do misturador. Posteriormente é apresentada uma análise do padrão de fluxo em cada situação e sua possível influência no processo de mistura, principalmente no tempo de homogeneização.

Analisando o fluxo nos sistemas simulados notou-se que existe formação de um jato em todos os arranjos, onde são registradas as maiores velocidades no plano. A formação destes jatos é típica de misturadores axiais como é o caso do impelidor estudado neste trabalho, no qual, o equipamento empurra o fluido para frente devido à forma física das suas pás.

No caso do arranjo com um impelidor localizado na direção radial (sem deslocamento), os resultados mostram que o fluido desliza até a parede frontal na direção axial, bate na parede onde perde energia e, portanto, velocidade, para depois continuar o escoamento em direção ao impelidor para recircular. Do campo vetorial horizontal (Figura 21), pode-se ver uma distribuição simétrica de fluxo entre o lado direito e esquerdo e, adicionalmente, uma região de sucção de fluido perto do impelidor. O principal problema desta configuração é a grande perda de energia na colisão do fluido com a parede frontal. Adicionalmente, o padrão circulatório formado apresenta zonas mortas no meio do tanque, nas quais a mistura é inapropriada.

Fazendo um deslocamento de 10° na posição do impelidor, além de obter-se um padrão circulatório nas paredes do tanque, obtém-se uma movimentação constante do fluido do fundo até o topo, o qual é desejado para evitar o acúmulo de componentes no fundo do tanque. Empregando dois e três impelidores deslocados 10° , o padrão de fluxo é similar ao obtido com só um impelidor, mas neste caso a movimentação e a recirculação fundo-topo é muito mais forte, já que a velocidade na maioria dos pontos é maior devido a uma maior quantidade de energia fornecida para o sistema através dos misturadores. Assim, nestas configurações é esperado que o tempo de mistura seja menor que com as outras.

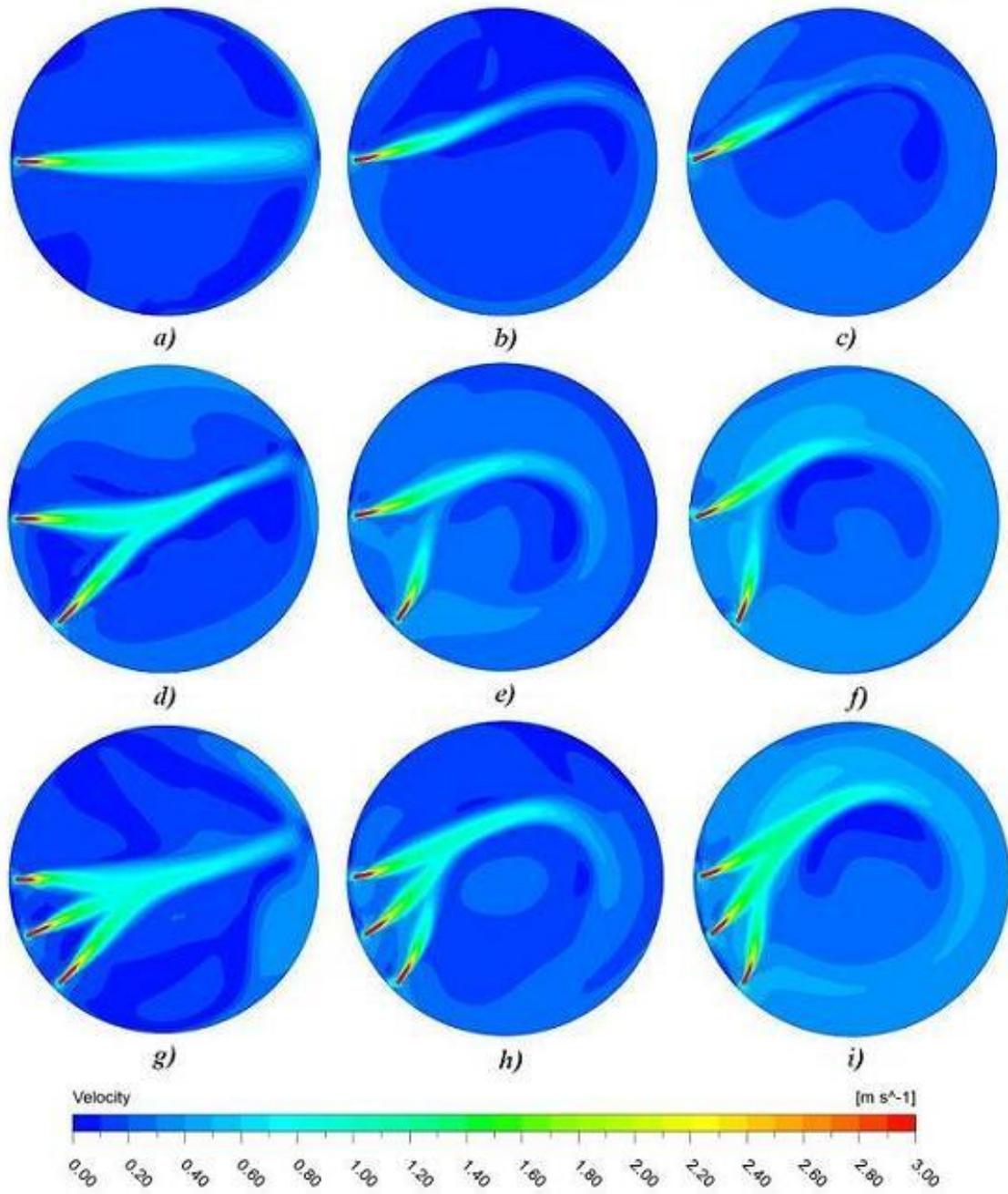


Figura 20. Planos de velocidade (a) Caso 1-0 (b) Caso 1-10 (c) 1-20 (d) Caso 2-0 (e) Caso 2-10 (f) Caso 2-20 (g) Caso 3-0 (h) Caso 3-10 (i) Caso 3-20

Com deslocamentos de 20°, para todos os casos, o padrão de fluxo é dominado por uma movimentação tangencial que não é aconselhável para processos de mistura, devido a uma maior perda de energia (cisalhante) nas paredes. A situação piora a medida que o número de impelidores aumenta, já que a movimentação é mais forte. Nas Figuras 20, 21 e 22, para os casos c, f, i, (correspondentes a deslocamentos de 20°), notou-se a formação de uma região de baixa velocidade e, conseqüentemente, baixa movimentação no centro do tanque, na qual é esperado que a mistura seja inapropriada, causando um aumento do tempo de homogeneização e um eventual aumento do custo energético do processo.

O fluxo para três impelidores sem deslocamento (Caso g) não apresenta um perfil simétrico definido, mas qualitativamente não se pode afirmar se isto melhora ou piora o tempo de mistura. No entanto, é de esperar que a mistura seja melhor com deslocamento visto que a energia perdida na colisão com a parede para as configurações a, d, g faz com que o processo seja ineficiente.

Qualitativamente, também não é possível determinar se o efeito da perda de energia no tempo de mistura é igual, maior o menor que o efeito de deslocamentos de 20° que geram fluxos tangenciais que aumentam o tempo de mistura. Esta análise será feita com mais detalhe baseando-se nos resultados do tempo de homogeneização do traçador para cada situação.

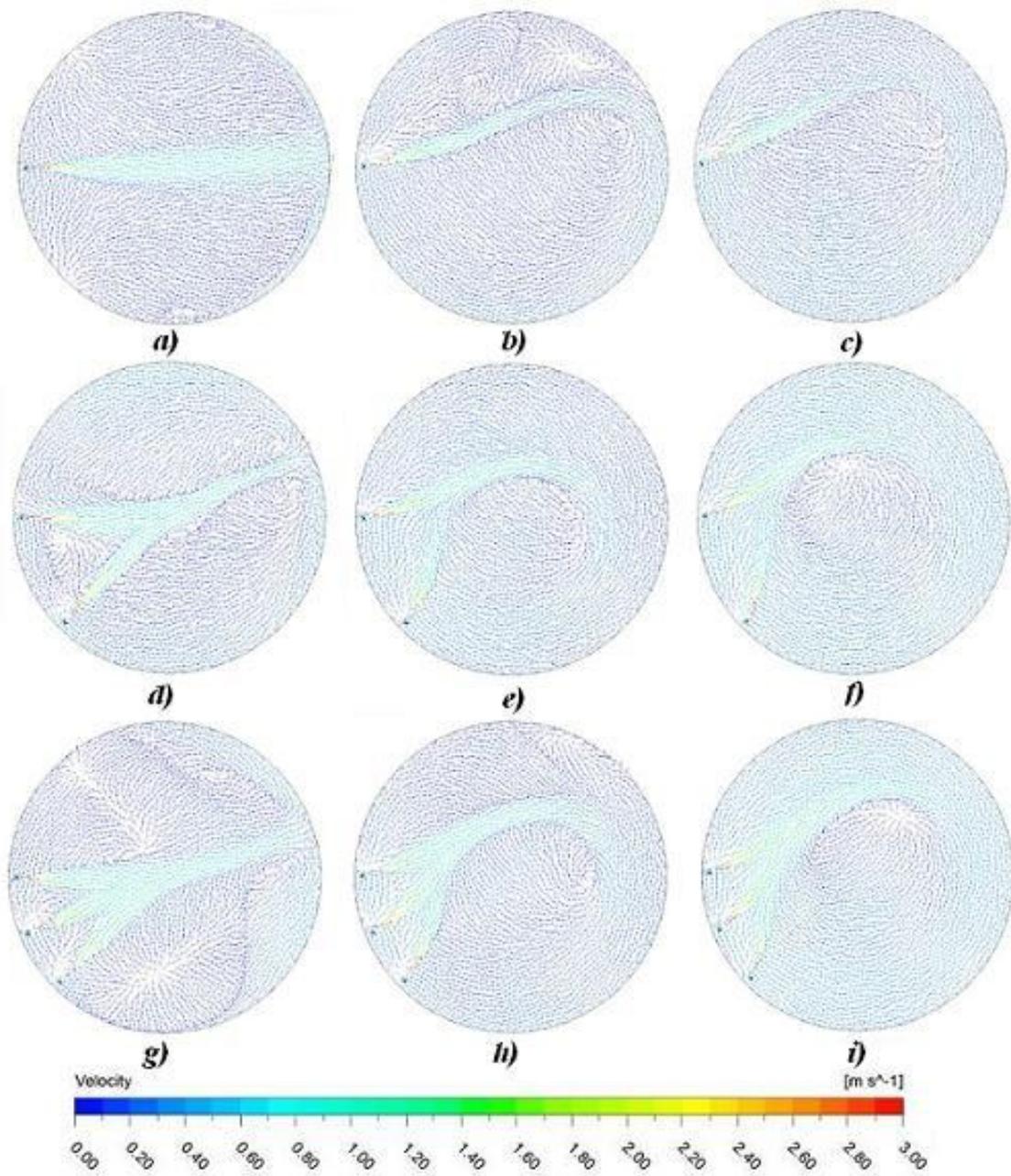


Figura 21. Campos vetoriais (a) Caso 1-0 (b) Caso 1-10 (c) 1-20 (d) Caso 2-0 (e) Caso 2-10 (f) Caso 2-20 (g) Caso 3-0 (h) Caso 3-10 (i) Caso 3-20

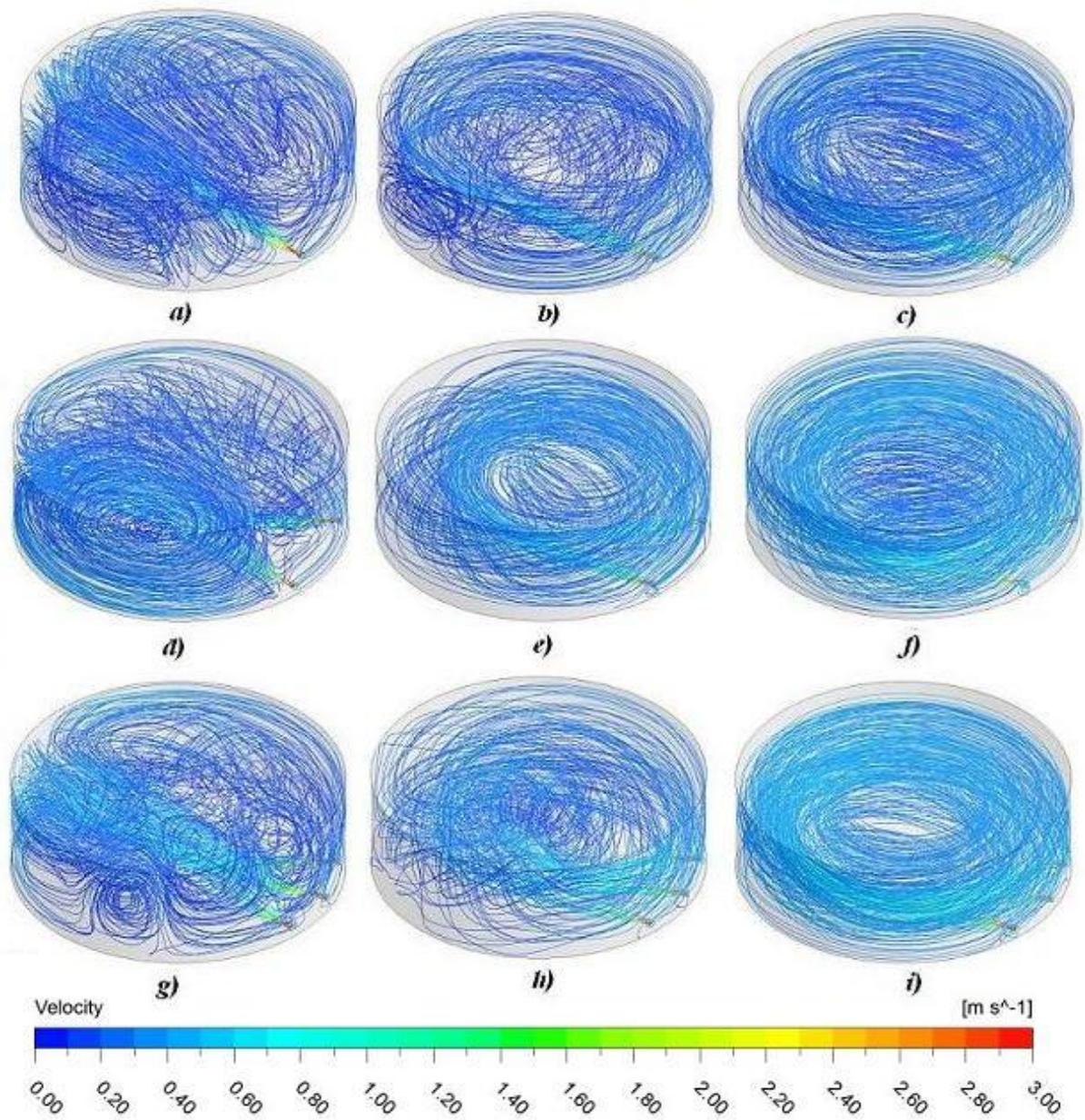


Figura 22. Linhas de corrente (a) Caso 1-0 (b) Caso 1-10 (c) 1-20 (d) Caso 2-0 (e) Caso 2-10 (f) Caso 2-20 (g) Caso 3-0 (h) Caso 3-10 (i) Caso 3-20

Conhecendo o tipo de escoamento produzido por cada um destes arranjos, estabeleceu-se qualitativamente, de acordo com a teoria de tanques de mistura, quais configurações podem

apresentar um comportamento satisfatório para a mistura de hidrocarbonetos de baixa viscosidade (como é o caso do diesel), neste tipo de tanques de grande escala.

Por outro lado, um dos parâmetros mais importantes para ter uma mistura eficiente é o grau de turbulência do sistema. Como foi explicado anteriormente, em simulações em CFD, o encarregado de considerar os efeitos turbulentos é o modelo de turbulência, cujos principais parâmetros para o modelo SST são: energia cinética turbulenta, dissipação viscosa e frequência turbulenta. O valor considerado para quantificar o grau de turbulência dentro do tanque é a energia cinética turbulenta, k , que foi estimada como a média no tanque. Na Tabela 6 são apresentados os valores obtidos.

Tabela 6. Energia cinética turbulenta (k)

Caso	k [J / kg]
Caso 1-0	0,00289902
Caso 1-10	0,00306618
Caso 1-20	0,00299324
Caso 2-0	0,00490687
Caso 2-10	0,00522336
Caso 2-20	0,00453472
Caso 3-0	0,00731527
Caso 3-10	0,00649555
Caso 3-20	0,00612561

De acordo com a tabela acima, o grau de turbulência aumenta com o número de impelidores. Com número de impelidores constante, a energia cinética turbulenta é maior para desvios de 10°, o que está de acordo com a análise qualitativa prévia, exceto para três impelidores, caso no qual a tendência é diferente. Para três impelidores, seria esperado, de acordo ao grau de turbulência, que a mistura seja mais rápida para o caso sem deslocamento, seguido pelo caso com 10° de desvio. Com deslocamentos de 20° a energia cinética turbulenta diminui para todos os casos em relação aos casos com ângulos de 10°, devido ao padrão de fluxo tangencial, com menos formação de turbilhões que movimentem o fluido e aumentem eventualmente a turbulência no processo.

6.4. ESTIMATIVA DO BOMBEAMENTO DO IMPELIDOR

De acordo com a Equação 4, para a estimativa do número de bombeamento é necessário calcular o fluxo de saída do impelidor. A metodologia utilizada para o cálculo desta variável é mediante o posicionamento de uma superfície circular na frente do equipamento, como apresentado na Figura 23, na qual, no *Ansys CFX-post*, pode-se determinar o fluxo mássico total que travessa a superfície. O fluxo mássico dividido pela densidade dá como resultado o bombeamento.

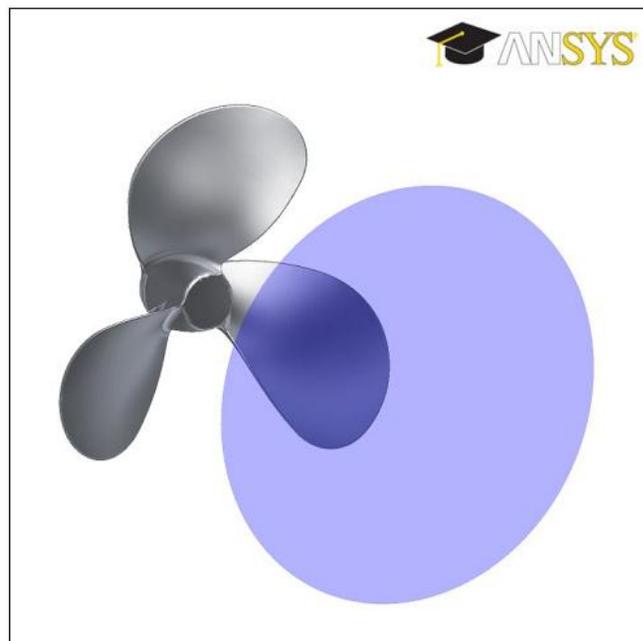


Figura 23. Superfície para a estimativa do bombeamento

Para o caso 1-0, o fluxo mássico calculado na superfície é:

$$m = 1319,48 \text{ kg s} \quad (33)$$

Dividindo pela densidade:

$$Q = \frac{F}{\rho} = \frac{1319,48 \text{ kg s}}{850 \text{ kg m}^3} = 1,55 \text{ m}^3 \text{ s} \quad (34)$$

O número de bombeamento para um impelidor no Caso 1-0 é:

$$N_Q = \frac{Q}{ND^3} = 0,51 \quad (35)$$

Desta maneira foram estimadas as capacidades de bombeamento e os números de bombeamento para cada configuração estudada. Estes resultados são apresentados nas Tabelas 7 e 8 respectivamente, nas quais se pode notar que não há uma diferença muito grande entre os estes parâmetros estimados para cada impelidor. Assim, pode-se afirmar que o escoamento não influencia significativamente a capacidade de bombeamento de fluido do impelidor, a qual é mais influenciada pela forma física do aparelho.

Tabela 7. Capacidade de bombeamento do(s) impelidor(es)

	Impelidor 1	Impelidor 2	Impelidor 3
Caso 1-0	1,55	---	---
Caso 1-10	1,58	---	---
Caso 1-20	1,60	---	---
Caso 2-0	1,55	1,55	---
Caso 2-10	1,59	1,60	---
Caso 2-20	1,59	1,63	---
Caso 3-0	1,57	1,55	1,55
Caso 3-10	1,57	1,59	1,60
Caso 3-20	1,63	1,59	1,60

Tabela 8. Números de bombeamento do(s) impelidor(es)

	Impelidor 1	Impelidor 2	Impelidor 3
Caso 1-0	0,51	---	---
Caso 1-10	0,51	---	---
Caso 1-20	0,52	---	---
Caso 2-0	0,51	0,50	---
Caso 2-10	0,52	0,52	---
Caso 2-20	0,52	0,53	---
Caso 3-0	0,51	0,50	0,50
Caso 3-10	0,51	0,52	0,52
Caso 3-20	0,53	0,52	0,52

6.5. ESTIMATIVA DO TEMPO DE MISTURA

Na Figura 23 é apresentado o comportamento do coeficiente de variação da concentração de traçador em função do tempo para cada configuração estudada. Na Tabela 8, são apresentados os tempos nos quais o coeficiente de variação da concentração de traçador no tanque, para cada arranjo, atinge o valor preestabelecido de $cv = 0,01$.

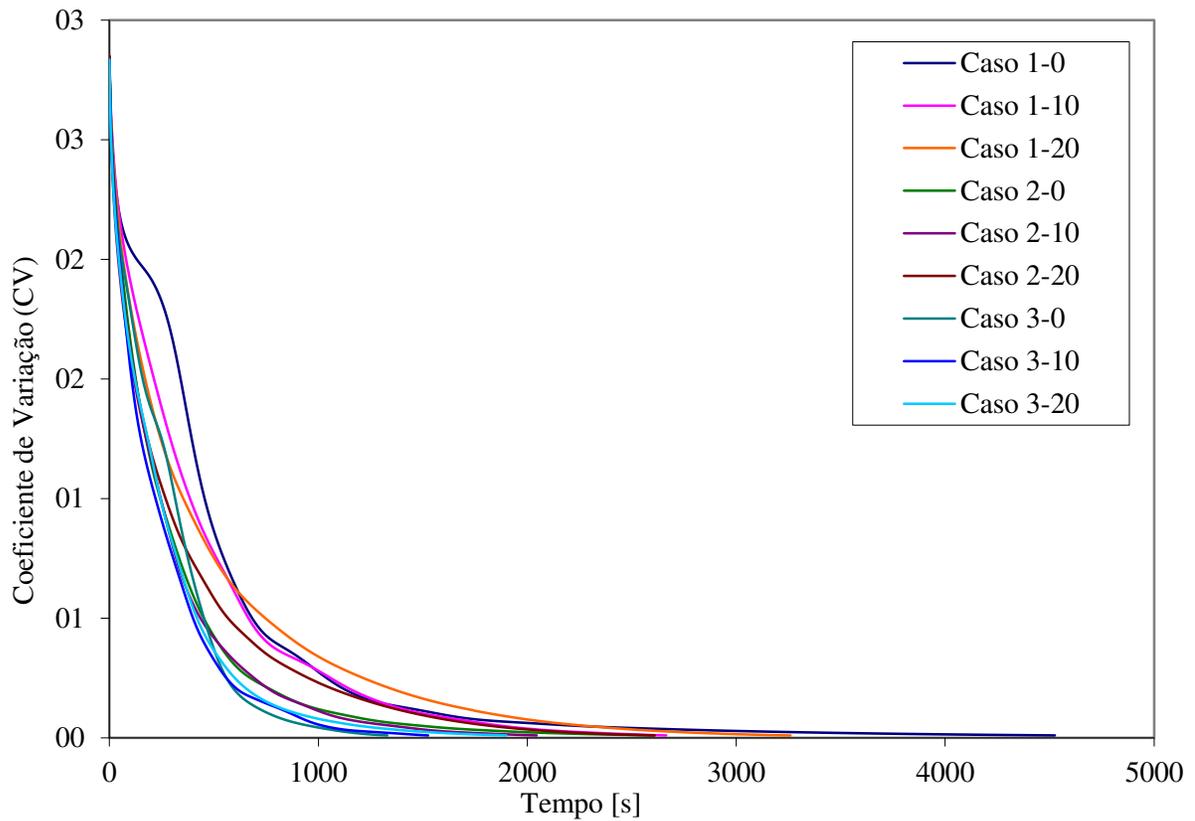


Figura 24. Coeficiente de variação em função do tempo

Tabela 9. Tempos de homogeneização

Caso	Número de Impelidores	Ângulo de Deslocamento	Tempo de Homogeneização [s]
Caso 1-0	1	0°	4525
Caso 1-10	1	10°	2665
Caso 1-20	1	20°	3260
Caso 2-0	2	0°	2605
Caso 2-10	2	10°	2045
Caso 2-20	2	20°	2610
Caso 3-0	3	0°	1330
Caso 3-10	3	10°	1525
Caso 3-20	3	20°	1900

O número de mistura para um impelidor é calculado conforme à Equação 5:

$$N_T = N\theta = 7 \text{ s}^{-1} \cdot 4525 \text{ s} = 31675 \quad (36)$$

Comparando o caso original, sem deslocamento do impelidor, com as variações com desvios de 10° e 20°, pode-se notar que atinge-se uma grande diminuição do tempo de mistura, de 41,20 %, desviando o impelidor 10° no eixo radial. Com o ângulo de 20° a diminuição do tempo de mistura é de 27,96 %, a qual é também representativa. Este comportamento concorda com as recomendações feitas na literatura, tanto no *Handbook of Industrial Mixing* quanto na informação das firmas como *Philadelphia Mixing Solutions* e *LightninMixers*, que aconselham fazer pequenos desvios à esquerda para diminuir o tempo de mistura.

Considerando agora os sistemas com dois impelidores, o ganho em tempo de mistura com deslocamentos de 10°, em comparação com o sistema sem deslocamento, é menor que com um impelidor; a diminuição é de 21,50 %. No entanto, ainda é um valor considerável. Com desvio de 20°, há uma variação desprezível do tempo de mistura, só 0,2 %, devido a que o padrão de fluxo começa a ser de caráter tangencial, o qual concorda com a análise qualitativa prévia. Esta afirmação faz com que seja necessário estimar se desvios de 20° são muito grandes para o diâmetro do tanque avaliado neste trabalho.

Para três impelidores, o resultado é diferente para desvios de 10°, já que neste caso o tempo de mistura, ao invés de diminuir, como era esperado, aumentou em 14,67 %, tomando como referência sempre o sistema sem deslocamento. Por outra parte, com desvios de 20° o tempo de mistura aumenta consideravelmente de 1330 s a 1900 s, ou 42,86 %. Este resultado confirma de novo os resultados qualitativos prévios, já que o escoamento neste caso é totalmente tangencial, como é notável na Figura 21i, correspondente às linhas de corrente. O fluxo tangencial aumenta consideravelmente com o número de impelidores para desvios de 20°.

Fazendo agora uma comparação a número de impelidores variável, sem deslocamento, há uma diminuição de 42,43 % entre o arranjo com um e dois impelidores e 70,61 % entre o primeiro e o arranjo com três impelidores. Pode-se notar que o tempo de homogeneização utilizando um impelidor com 10° de desvio (2665 s) é praticamente igual ao tempo para dois

impelidores sem desvio (2605 s), mas no segundo caso a potência do processo é 100% maior, portanto o custo energético é praticamente o dobro para o mesmo tempo de mistura, o qual não seria economicamente viável.

Adicionalmente, sem considerar os desvios de 20° que geram fluxos tangenciais, o efeito da posição do impelidor(es) diminui com o aumento do número dos mesmos. Para um número de impelidores alto, o processo é mais bem dominado pela velocidade e a energia proporcionada ao processo do que pelo arranjo impelidor(es)/tanque.

Baseando-se nos resultados dos tempos de homogeneização, é possível afirmar que a melhor configuração, em termos do tempo de mistura, é o caso com três impelidores sem deslocamento. Este resultado concorda com os resultados das energias cinéticas turbulentas, já que é nesse caso onde o sistema estudado tem a maior energia cinética turbulenta média no tanque, fato pelo qual era esperado que o processo de mistura fosse melhor.

6.6. ESTIMATIVA DA POTÊNCIA E CONSUMO DE ENERGIA

Para a estimativa da potência consumida por um impelidor para empurrar o fluido calculou-se o torque do impelidor ao redor do eixo de rotação, como explicado na seção 2.5.1. O valor do torque obtido no *Ansys CFX 13.0* para o caso padrão é:

$$\tau = 547,28 \text{ N} \cdot \text{m} \quad (37)$$

Este valor, junto com a velocidade de rotação foi substituído na Equação 1 para obter o valor da potência assim:

$$P = 2\pi \cdot 7 \text{ s}^{-1} \cdot 547,28 \text{ N} \cdot \text{m} = 24070,68 \text{ W} = 32,28 \text{ hp} \quad (38)$$

O número de potência para este caso é:

$$N_p = \frac{P}{\rho N^3 D^5} = 0,33 \quad (39)$$

O mesmo procedimento foi utilizado para a estimativa da potência e o número de potência para cada configuração. Os resultados são apresentados nas Tabelas 10 e 11.

Tabela 10. Potência estimada [hp]

	Impelidor 1	Impelidor 2	Impelidor 3
Caso 1-0	32,28	---	---
Caso 1-10	34,08	---	---
Caso 1-20	34,14	---	---
Caso 2-0	32,76	36,06	---
Caso 2-10	32,26	32,16	---
Caso 2-20	32,43	31,83	---
Caso 3-0	27,65	33,22	36,78
Caso 3-10	30,34	31,60	34,43
Caso 3-20	31,25	31,32	31,85

Tabela 11. Números de potência estimados

	Impelidor 1	Impelidor 2	Impelidor 3
Caso 1-0	0,33	---	---
Caso 1-10	0,34	---	---
Caso 1-20	0,34	---	---
Caso 2-0	0,33	0,36	---
Caso 2-10	0,33	0,32	---
Caso 2-20	0,33	0,32	---
Caso 3-0	0,28	0,34	0,37
Caso 3-10	0,31	0,32	0,35
Caso 3-20	0,32	0,32	0,32

Os valores estimados para o número de potência estão numa ordem de grandeza similar aos apresentados por Hastings *et al.* (2010) da *Philadelphia Mixing Solutions*, para um impelidor similar, cujo valor é $N_p = 0,27$.

A potência total consumida no processo é definida como a soma da potência consumida por cada impelidor. O consumo de energia é determinado multiplicando a potência total pelo tempo de mistura, que corresponde ao tempo que o equipamento deveria permanecer ligado. Os consumos energéticos estão reportados na Tabela 12, a seguir:

Tabela 12. Consumo de energia

Caso	Potência Total [hp]	Energia Consumida [kJ]
Caso 1-0	32,28	108919,81
Caso 1-10	34,08	67732,37
Caso 1-20	34,14	83002,14
Caso 2-0	68,83	133697,87
Caso 2-10	64,43	98248,22
Caso 2-20	64,26	125065,31
Caso 3-0	97,65	96848,14
Caso 3-10	96,37	109585,62
Caso 3-20	94,41	133765,43

Em termos de consumo de energia, a configuração impelidor/tanque que apresenta o menor consumo energético corresponde ao Caso 1-10, no qual só um impelidor é utilizado. A segunda melhor situação é com um impelidor deslocado 20°. Utilizando dois e três impelidores, embora o tempo de homogeneização diminua, a energia consumida aumenta devido ao número de impelidores, portanto não há uma tendência sistemática de diminuição de energia com o número de impelidores, como acontece com o tempo de mistura, o qual tende a diminuir.

A tendência geral é escolher como o arranjo ótimo aquele que apresentar o menor consumo de energia e a maior facilidade técnica para a sua implementação no tanque real. Quando o número de impelidores aumenta, as dificuldades técnicas aumentam, além dos custos iniciais dos

equipamentos e, um fator muito importante, os custos de manutenção que sempre são consideráveis. No entanto, em algumas situações quando frações pesadas de petróleo ou outros hidrocarbonetos, que geralmente contém sedimentos e material particulado, precisam ser misturados, o uso de múltiplos impelidores é obrigatório para evitar o acúmulo de substâncias no fundo do tanque, mas neste estudo não foram consideradas estas situações.

Assim, baseando-se nos resultados obtidos, o arranjo ótimo que apresenta a maior facilidade técnica e menores custos energéticos corresponde ao arranjo com um misturador deslocado 10° , seguido com um impelidor deslocado 20° . Quando mais de um impelidor é empregado, ângulos de 20° não são recomendados. De maneira geral, o ângulo ótimo de desvio corresponde a 10° .

CAPÍTULO VII

7. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

7.1. CONCLUSÕES

Neste projeto foi aplicada a técnica CFD para simular e analisar, qualitativamente e quantitativamente, tanques de grande escala com impelidores de entrada lateral.

Da análise qualitativa feita para os diferentes arranjos impelidor(es)/tanque comprovou-se que o tipo de escoamento nos tanques de mistura não depende só do número de impelidores, podendo ser fortemente influenciado pelo seu posicionamento, efeito que diminui com o número de impelidores.

Os resultados obtidos aplicando desvios do impelidor em relação ao eixo radial do tanque estão de acordo com a informação encontrada na literatura, na qual, estas variações geram recirculação de fluxo entre o fundo e o topo do tanque. Deslocamentos de 20° para todos os arranjos geram padrões de fluxo tangencias que podem não ser recomendáveis para processos de mistura. Pelo contrário, desvios de 10° aumentam a recirculação do fluido e geram um escoamento mais apropriado para este processo.

Dos resultados quantitativos concluiu-se que a melhor configuração para o desenvolvimento deste processo, em termos do menor consumo energético é com um impelidor desviado 10°, e em termos do menor tempo de homogeneização é com três impelidores sem deslocamento.

Os tempos de homogeneização calculados para os casos com desvios de 20° corroboram a informação dos resultados qualitativos, já que nestes casos o tempo de mistura tende a aumentar.

7.2. TRABALHOS FUTUROS

Estes seriam alguns possíveis trabalhos futuros para dar continuidade ao projeto

➤ **Otimização da Geometria do Impelidor**

A otimização da geometria do impelidor, cujo resultado seria mesmo patenteável, poderia ser feita utilizando CFD para modificar as variáveis de projeto deste tipo de impelidores, tais como relação passo/diâmetro, perfil das pás, número de pás, etc. O objetivo principal seria maximizar o bombeamento do impelidor, maximizar a velocidade de saída do fluido e minimizar o consumo energético e o custo de produção do equipamento.

Firmas como “*Philadelphia Mixing Solutions*” têm desenvolvido impelidores de alto desempenho, mas focados em aplicações gerais. A ideia neste caso seria desenvolver um protótipo para o processo de homogeneização de diesel estudado neste trabalho.

➤ **Análise do Processo mediante Misturadores a Jato**

Este trabalho seria importante já que permitiria considerar alternativas ao processo e compará-las com a atual. A ideia seria utilizar CFD para simular e otimizar o processo de mistura de um tanque equipado com um misturador a jato. Algumas simulações preliminares foram feitas e comprovou-se que esta técnica computacional pode ser efetivamente utilizada para esta simulação.

➤ **Tanque para trabalhos experimentais**

Um possível trabalho futuro que seria muito interessante estaria baseado na aquisição de um tanque experimental a escala de laboratório para comparar resultados experimentais com os

computacionais. No tanque real é tecnicamente muito difícil realizar testes experimentais e o seu custo seria elevado, mas num tanque de pequena escala, como o apresentado na Figura 25, utilizado por RAHIMI e PALVAREH (2005) seria relativamente barato e, adicionalmente, a sua implementação seria simples.

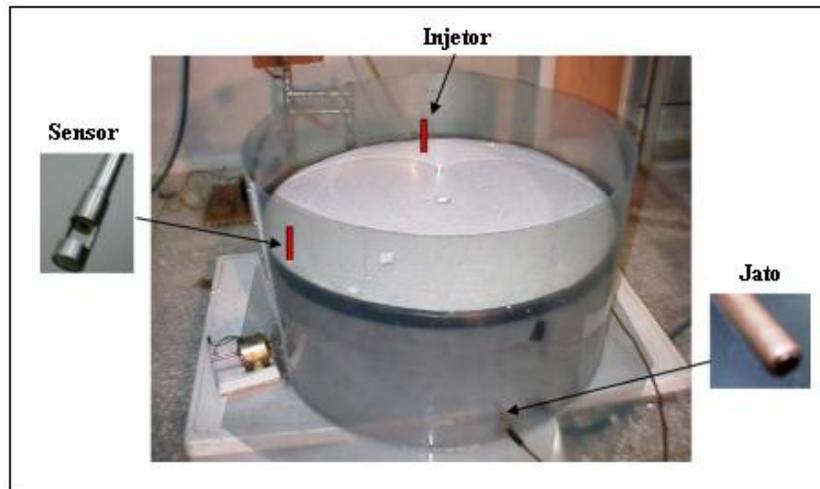


Figura 25. Tanque experimental

Este equipamento poderia ser utilizado com misturadores a jato e misturadores de entrada lateral. Adicionalmente, seria possível analisar a estabilidade de emulsões diesel/água, que são um problema comum de Refinaria. As principais variáveis a considerar no estudo seriam:

- Quantidade de Emulsificador/Desemulsificador
- Relação Diesel/Água
- Velocidade de Agitação
- Tempo de Mistura
- Temperatura

Para concluir, há muitas opções para continuar na pesquisa e todas são bem interessantes e poderiam dar resultados relevantes para melhorar o processo de estocagem de hidrocarbonetos em tanques de grande escala.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALEXOPOULOS, A. H., MAGGIORIS, D., KIPARISSIDES, C. CFD analysis of turbulence non-homogeneity in mixing vessels Atwo-compartment model. *Chemical Engineering Science*, v.57, p.1735-1752, 2002.

ALVAREZ-CASTRO, H. Estudo do tempo de mistura em tanques de diesel com o uso da fluidodinâmica computacional. Campinas, SP: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, 2011. Dissertação de Mestrado.

ANSYS CFX 13.0 Manual, United States, 2010.

ALIZADEH, A., RAHIMI, M. CFD simulation of homogenization in large-scale crude oil storage tanks. *Petroleum Science & Engineering*, v.43, p.151-161, 2004.

AUBIN, J., FLETCHER, D.F., XUEREBA, 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, p.431-445, 2004.

BUJALSKI, J.M., JAWORSKI, Z., BUJALSKI, W., NIENOW, W. The influence of the addition position of a tracer on CFD simulated mixing times in a vessel agitated by a rushton turbine. *Trans. Icheme.*, v.80, part A, p.824-831, 2002.

Homepage - CFD Brasil. <http://www.cfd-brasil.com>. Acessado por primeira vez em Outubro de 2009.

Homepage - CFD Online. <http://www.cfd-online.com>. Acessado por primeira vez em Outubro de 2009.

GIBBARDO, B., MICALÈ, G., GRISAFI, F., BRUCATO, A., CIOFALO, M. Numerical simulation of low-reynolds flow fields in unbaffled stirred vessels. 12th european Conference on Mixing, Bologna, June 27-30, 2006.

GRANDEIRO-DA-SILVA, J. Análise crítica das correlações e parâmetros fundamentais em sistemas de agitação. Campinas, SP: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2002, Dissertação de Mestrado.

HASTINGS, C., WYCZALKOWSKI, W., WU, B. Mixing in Large Petroleum Storage Vessels. North American Mixing Forum, Mixing XXII, Victoria, BC Canada, June 20-25, 2010.

HIGBEE, R.W., WYCZALKOWSKI, W., WU, B. Novel super-pitch, circular rake, cambered, zero-velocity-sump propeller design performance evaluated as a function of number of blades. In NORTH AMERICAN MIXING FORUM, Mixing XXII, Victoria, BC Canada, June 20-25, 2010.

Homepage - LIGHTNING MIXERS. <http://www.lightninmixers.com/>. Acessado por primeira vez em Janeiro de 2010.

Homepage - PHILADELPHIA MIXING SOLUTIONS. <http://www.philadelphiamixers.com>. Acessado por primeira vez em Janeiro de 2010.

Homepage - PLENTY MIXERS. <http://www.plentymixers.com>. Acessado por primeira vez em Janeiro de 2010.

Homepage – RGB SERVIÇOS. <http://www.rgbservicos.com.br>. Acessada por primeira vez em Agosto de 2010.

INNOVATIVE TURBULENCE MODELING - ANSYS. <http://www.ansys.com/assets/tech-briefs/cfx-sst.pdf>. Acessado em Outubro de 2010.

JOAQUIM-JUNIOR, C. Desenvolvimento e otimização de misturador estático com o uso da fluidodinâmica computacional (CFD). Campinas, SP: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, 2008. Tese (Doutorado).

JOAQUIM-JUNIOR, C. F., CEKINSKI, E., NUNHEZ, J. R., URENHA, L. C. Agitação e mistura na indústria. LTC Editora, 2007.

JOAQUIM-JR., C. F., REYNOL, A., CEKINSKI, E., SECKLER, M. M., NUNHEZ, J. R. Development of static mixers for miscible fluids in laminar flow with the use of computational fluid dynamics. The Canadian Journal of Chemical Engineering, v89, p.734-744, 2011.

- LUO, J.Y., GOSMAN, A.D., Prediction of impeller-induced flows in mixing vessels using multiple frames of reference. IChemE Symp. Ser. 136, p.549-556, 1994.
- MALISKA, C. Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional, 2 ed., Rio de Janeiro, LTC Editora, 2004.
- MENTER F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. AIAA Journal, v.32, No. 8, p.1598-1605, August 1994.
- MENTER, F. R. Zonal two-equation k-w turbulence model for aerodynamic flows. AIAA Paper 1993-2906, 1993.
- MENTER, F. R., KUNTZ, M., LANGTRY, R. Ten years of industrial experience with the SST turbulence model. Turbulence Heat and Mass Transfer, v.4, p.625-632, 2003.
- MONTANE, G. MOSTEK, M., JAHODA, M., MAGELLI, F. CFD simulations and experimental validation of homogenisation curves and mixing time in stirred Newtonian and pseudoplastic liquids. Chemical Engineering Science, v.60, p.2427-2437, 2005.
- MONTEIRO-OLINO, A. Otimização do impelidor kpc utilizando fluidodinâmica computacional (CFD). Campinas, SP: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2010. Dissertação de Mestrado.
- NAGATA, S. Mixing: Principle and Applications, Wiley, 1975.
- PAKSAD, L., EIN-MOZAFFARI, F., CHAN, P. Using computational fluid dynamics modeling to study the mixing of pseudoplastic fluids with a Scaba 6SRGT impeller. Chemical Engineering and Processing, v.47, p.2218-2227, 2008.
- PAUL, E., ATIEMO-OBBERG, V., KRESTA, S. Handbook of industrial mixing: Science and Practice. Wiley-Interscience, 2004.
- RAHIMI, M. The effect of impellers layout on mixing time in a large-scale crude oil storage tank. Petroleum Science & Engineering, v.46, p.161-170, 2005.
- RAHIMI, M., PARVAREH, A. CFD study on mixing by coupled jet-impeller mixers in a large crude oil storage tank. Computers & Chemical Engineering, v.31, p.737-744, 2007.

RAHIMI, M., PARVAREH, A. Experimental and CFD investigation on mixing by a jet in a semi-industrial stirred tank. *Chemical Engineering Journal*, v.115, p.85-92, 2005.

SAHU, A.K., KUMAR, P., PATWARDHAN, A.W., JOSHI, J.B. CFD modelling and mixing in stirred tanks. *Chemical Engineering Science*, v.54, p.2285-2293, 1999.

SPOGIS, N. Metodologia para determinação de curvas de potência e fluxos característicos para impelidores axiais, radiais e tangenciais utilizando a fluidodinâmica computacional. Campinas, SP: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2002. Dissertação de Mestrado.

SPOGIS, N., NUNHEZ, J. R. Design of a high-efficiency hydrofoil through the use of computational fluid dynamics and multiobjective optimization. *AIChE Journal*, v.55, No 7, p.1723-1735, 2009.

STREIFF, F. A. Adapted motionless mixer design. Third European Conference of Mixing, paper C2, p. 171-188, 1979.

YAKHOT, V., ORZAG, S. A. Renormalization group analysis of turbulence: I. Basic theory. *Journal of Scientific Computing*, v.1, p.3-51, 1986.

ZHANG, Q., YONG, Y., MAO, Z., YANG, C. Experimental determination and numerical simulation of mixing time in a gas-liquid stirred tank. *Chemical Engineering Science*, v.64, p.2926-2933, 2009.

ANEXO A

YPLUS $y +$

Tomando como referência o Manual de *Ansys CFX* 13.0, o $y +$ é a distancia adimensional do primeiro nó entre a malha e a parede. Este conceito anteriormente era muito mais importante quando funções de parede padrão foram utilizadas, devido a que era necessário evitar valores de $y +$ menores que aproximadamente 2. Com as opções de funções de parede escaláveis e o tratamento automático de parede, estes valores são fornecidos para informação da resolução da malha na camada limite, já que os valores de $y +$ recomendados com estas funções podem ser maiores. Por exemplo, para tratamento automático de parede são podem ser utilizados valores de até 200 sem obter alterações significativas no resultado final.

Equacionamento:

A estimativa do $y +$ está baseada em correlações para um prato plano com número de Reynolds representado pela Equação 40:

$$Re_L = \frac{\rho U_\infty L}{\mu} \quad (40)$$

Onde U_∞ é a velocidade característica e L é o comprimento do prato.

A correlação para o coeficiente de cisalhamento na parede, C_f , é dada pela Equação 41:

$$C_f = 0,025 Re_x^{-1/7} \quad (41)$$

Onde x é a distancia ao longo do plato a partir da borda.

A definição de Δy^+ para esta estimativa é:

$$\Delta y^+ = \frac{\Delta y u_\tau}{\nu} \quad (42)$$

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

Utilizando a definição,

$$C_f = 2 \frac{\rho u_\tau^2}{\rho U_\infty^2} = 2 \frac{u_\tau}{U_\infty}^2 \quad (43)$$

u_τ pode ser eliminado da Equação 42 para obter:

$$\Delta y = \Delta y^+ \frac{\overline{2} u_\tau}{C_f U_\infty} \quad (44)$$

C_f pode ser eliminado utilizando a Equação 41, assim:

$$\Delta y = L \Delta y^+ \overline{80} Re_x^{1/4} \frac{1}{Re_L} \quad (45)$$

Outras simplificações podem ser feitas assumindo que

$$Re_x = C Re_L \quad (46)$$

Onde C é alguma fração.

Assumindo que $C^{1/4} \approx 1$, então, exceto para valores muito baixos de Re_x , o resultado é:

$$\Delta y = L \Delta y^+ \overline{80} Re_L^{-1/4} \quad (47)$$

A equação anterior permite estabelecer um valor de Δy^+ para certa posição x e obter o espaçamento da malha, Δy para os nós na camada limite.

ANEXO B

LOCAL TIMESCALE FACTOR (LTF)

De acordo com o manual de *Ansys CFX 13.0* e com informação do *Ansys Customer Portal*, o *Local Timescale Factor* (LTF) é uma abordagem diferente da convencional para controlar o passo de tempo, relaxando as equações dependendo da densidade da malha. Este fator é aplicado ao coeficiente central da equação somente após a equação linear ter recebido todas as contribuições, ex: advecção, difusão, etc. Cada um destes termos individuais contribuirá ao coeficiente central e levará em consideração um passo de tempo baseado na malha e na física do fenômeno.

De maneira geral, o LTF é uma relaxação que controla quão rápido o tempo pode mudar na solução em cada espaço de tempo.

O LTF é um multiplicador do *Local Timescale* definido pela Equação 48. De acordo com a Eq. 48, o *Local timescale* é diretamente proporcional ao tamanho de malha e inversamente proporcional à velocidade da malha local.

$$\text{Local Timescale} = \frac{\text{Local Mesh Length Scale}}{\text{Local Velocity Scale}} \quad (48)$$

Várias afirmações podem ser feitas em relação à definição de *Local Timescale* e consequentemente, ao *Local Timescale Factor*:

- O passo de tempo varia espacialmente em todo o volume.

- O passo de tempo, como apresentado na Figura 26, é pequeno onde existem volumes de controle pequenos e grande onde volumes de controle são maiores.
- Apresenta ótimo funcionamento quando as malhas são bem uniformes, já que elementos pequenos têm passos de tempo pequenos que podem diminuir a taxa de convergência.
- A maioria de malhas na camada limite não funcionam adequadamente com o *Local Timescale Factor* devido aos volumes de controle na camada limite que tendem a ser pequenos em comparação ao volumes de controle no núcleo do escoamento.

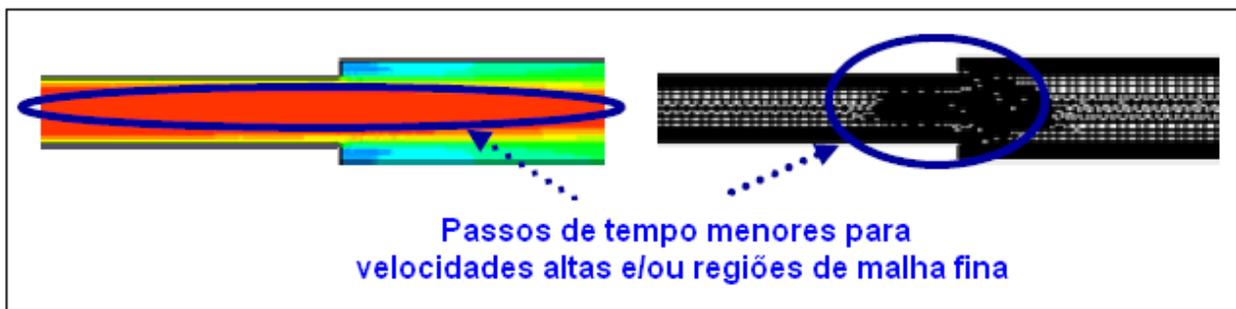


Figura 26. Influência da velocidade e da malha no LTF (*Ansys CFX Training Manual*)

Considerando os pontos mencionados anteriormente, é possível afirmar que a opção de trabalhar com o *Local Timescale Factor* pode causar problemas de convergência dependendo da física do problema e as características da malha. Portanto a sua escolha deve ser feita com muito cuidado para garantir uma solução numérica correta do problema e aproveitar assim as vantagens desta metodologia.