UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

ESTUDO DO FLUXO GERADO POR AGITADORES TIPO ÂNCORA

ANTONIO CARLOS DE ANDRADE RÜDINGER

Orientador: Prof. Dr. José Roberto Nunhez

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

Campinas - São Paulo - Brasil

Agosto - 2002

UNICAMP BIBLIOTECA CENTRAL

CHAMA	DA TIUNICAMP R8342
I TOMBO B	EX CI <u>51244</u> 6.837100
C	N\$11,00 23/10/02
DATA Nº CPD _	2011010

CM00175699-9

BIB 10 265433

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

R834e
Rüdinger, Antonio Carlos de Andrade Estudo do fluxo gerado por agitadores tipo âncora / Antonio Carlos de Andrade Rüdinger.--Campinas, SP: [s.n.], 2002.
Orientador: José Roberto Nunhez. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.
1. Simulação por computador. 2. Mistura (Química).
3. Dinâmica dos fluidos. 4. Processos químicos. I. Nunhez, José Roberto. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título. DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DEFENDIDA E APROVADA EM 1° DE AGOSTO DE 2002 PELA BANCA EXAMINADORA CONSTITUÍDA PELOS PROFESSORES DOUTORES:

Prof. Dr. José Roberto Nunhez

(Orientador)

eee. Rec lee 1 eg

Prof. Dr. Milton Mori

Prof. Dr. Efraim Cekinski

ESTA VERSÃO CORRESPONDE À REDAÇÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO EM ENGENHARIA QUÍMICA, DEFENDIDA PELO ENGENHEIRO QUÍMICO ANTONIO CARLOS DE ANDRADE RÜDINGER E APROVADA PELA COMISSÃO JULGADORA EM 1º DE AGOSTO DE 2002.

rof. Dr. José Roberto Nunhez

(Orientador)

Dedico este trabalho à toda a minha grande pequena família, especialmente ao meu querido filho Nicolas. À minha esposa Muna e ao meu filho Nicolas, que me dão apoio incondicional. À minha mãe, Ruth, que apesar de longe sempre me deu apoio. Aos meus tios: Catarina e João Evangelista. Aos meus colegas do Laboratório de Fluidodinâmica Computacional (L-CFD): Pastor, Nicolas e Simone e ao professor José Roberto. Aos professores e funcionários da Faculdade de Engenharia Química.

À FAPESP pelo apoio financeiro.

RESUMO

Agitação e mistura são o coração da indústria química, e provavelmente os equipamentos para esses fins são os mais antigos que se possa imaginar quando se fala em processamento de matérias primas visando-se a obtenção de produtos. Devido à sua grande importância para a indústria, os processos vem se desenvolvendo ao longo do tempo e, nas últimas décadas, técnicas computacionais tem sido utilizadas para o projeto e otimização desses equipamentos. Em especial destaca-se a fluido-dinâmica computacional – CFD (*Computational Fluid Dynamics*).

Este trabalho tem como objetivo a aplicação de técnicas de CFD para o estudo de sistemas com agitadores tipo âncora, utilizados em geral para fluidos altamente viscosos e, portanto com alto consumo de energia. O estudo por sua vez, através do entendimento dos fluxos no interior do tanque, tem como objetivo propor soluções e modificações a fim de melhorar a mistura e minimizar o gasto de energia no processo.

O pacote computacional CFX 4.4. foi empregado como ferramenta de CFD para a realização dos estudos contidos neste trabalho, tendo sido obtidos resultados esclarecedores dos fenômenos envolvidos e coerentes com os dados experimentais disponíveis em literatura.

Conclui-se que as ferramentas utilizadas são apropriadas para o estudo de tanques agitados e que possibilitam tanto o projeto como também a otimização de sistemas existentes, com economia de tempo e dinheiro. Quando comparada à técnicas experimentais, a técnica provou fornecer resultados precisos e confiáveis. A sugestão para estudos futuros é o cálculo simultâneo de reações químicas, para o entendimento de reatores químicos, especialmente em reações onde a viscosidade varia com o tempo.

Palavras chave: CFD, tanques agitados, agitador tipo âncora, simulação computacional

ABSTRACT

Stirred vessels and mixing systems are the core of the chemical industries, and probably they are the oldest equipment in chemical processing for desired products. Due its great importance to the industry, these processes have been developed through the time, and in the last decades, computational techniques have been used in the project and optimization of these equipments. Particularly the Computational Fluid Dynamics – CFD.

The objective of this work is to apply CFD techniques in the study of systems agitated by anchor impellers, generally used for highly viscous fluids and therefore with high power consumption. The study has the objective to propose changes in the system so mixing can be optimized and the power consumption minimized, through the understanding of the flow patterns inside the tank.

The computational package CFX 4.4. has been used as a CFD tool to generate the numerical results, which are useful to clarify the phenomena and are coherent with experimental data available in the literature.

The study showed that the tools that have been used are appropriated to the study of stirred vessels and are able to design new systems and optimize actual systems, leading to money and time saving. When compared to experimental techniques, the tools used showed that it is able to provide precise and reliable results. The suggestion for future studies is the simultaneous calculus of chemical reactions, which can lead to a better understanding of chemical reactors, especially those in which viscosity varies along time.

Keywords: CFD, stirred tanks, anchor impeller, computational simulation.

NOMENCLATURA

LETRAS GREGAS

ф	:	Propriedade física
γ	:	Taxa de tensão
μ	:	Viscosidade
θ	:	Tempo de mistura
ρ	:	Densidade
σ	•	Tensor tensão
τ	:	Tensão de cisalhamento

LETRAS LATINAS

Fr	:	Número de Froude
N _p	:	Número de potência
Re	:	Número de Reynolds
D	:	Diâmetro do agitador
Ν	:	Velocidade rotacional

SUMÁRIO:

1. INTRODUÇÃO

-

1.1 Motivação do projeto	1
1.2. – Objetivos	3
1.3 Organização da dissertação	3

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. – Introdução.	4
2.2 Revisão de Artigos/Livros	4
2.3 Comentário sobre a revisão bibliográfica	27

3. FORMULAÇÃO DO MODELO

3.1. Introdução	29
3.2. Equações fundamentais	29
3.3. Aspectos Geométricos	31
3.4. Propriedades Físicas	32
3.5. Características do modelo - motivação ao uso do CFX	32
3.6. Condições de contorno - estratégias de resolução MRF e SG	33
3.7. Comentário sobre o modelo	33

4. RESOLUÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO

4.1.	Introdução	34
4.2.	Técnicas de resolução (MEF, MVF)	39
4.3.	Método utilizado pelo pacote computacional	43

5. RESULTADOS

5.1. Introdução	45
5.2. Análise do efeito do número de blocos	46
5.3. Análise da independência da malha	49
5.4. Comparação entre as estratégias de resolução: MRF e SG	53
5.5. Análise dos efeitos da variação do número de Reynolds	56
5.5.1. Variação da viscosidade	56
5.5.2. Variação da velocidade de agitação	59
5.6. Análise do escoamento de fluidos pseudoplásticos	60
5.7. Geometrias de casos reais	62
5.8. Geometria da literatura – validação dos resultados numéricos	68

6. ANÁLISE DOS RESULTADOS

6.1. Aspectos gerais – qualitativos	70
6.2. Análise dos resultados (5.2. a 5.7)	70
6.3. Validações com base em dados experimentais (5.8)	71
6.4. Conclusões	72
7. PROPOSTA PARA ESTUDOS FUTUROS	73
8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	74

1. INTRODUÇÃO

1.1. - Motivação do projeto

O estudo de tanques agitados tem sido um campo de pesquisa por várias décadas, devido à grande importância destes sistemas para a indústria química. A grande maioria dos processos de agitação envolve agitadores tipo turbina (ex. Rushton turbine, turbina de pás retas e turbina de pás inclinadas) em escoamento turbulento. Conseqüentemente a maioria dos estudos em laboratório e computacionais considera o regime turbulento. Da mesma maneira, poucos trabalhos abordam o escoamento laminar, e um número ainda menor analisa o agitador tipo âncora. Mesmo sendo de grande importância, os trabalhos computacionais disponíveis sobre o agitador tipo âncora normalmente utilizam geometrias simplificadas e malhas computacionais grosseiras. Esse trabalho aborda tanques com agitadores tipo âncora, amplamente utilizado para fluidos altamente viscosos (10-100 Pa.s), em geometrias mais realistas e utilizando malhas mais finas. Há muitas aplicações industriais, como condicionadores para cabelos e outros produtos que necessitam de agitadores que funcionem também como raspadores, minimizando assim a possibilidade de existir zonas mortas e de ocorrer queda na eficiência de troca térmica por deposição de sólidos nas paredes do vaso. O sistema reacional em questão é usado tipicamente em reações poliméricas e em alguns processos da indústria alimentícia.

A maioria das correlações utilizadas no projeto de tanques agitados foram obtidas a partir de dados experimentais, e são usadas para o *scale-up* de sistemas específicos. Essas correlações são capazes de prever somente características de fluxo globais do sistema. Entretanto, o projeto de tanques mais eficientes requer um melhor entendimento dos fluxos locais no interior desses sistemas, o que pode revelar a presença de zonas mortas e outras ineficiências no interior do tanque. O desenvolvimento de sistemas de agitação mais eficientes fornece um maior rendimento das reações químicas envolvidas, o que ,por sua vez, implica em produtos de maior qualidade, processos mais econômicos e corretos ambientalmente, pois menos resíduos indesejáveis são formados. Um projeto de tanques mais eficientes requer um conhecimento dos mecanismos de transferência de massa, de calor e de quantidade de movimento, energia e massa ao sistema geram um sistema de equações que não possuí solução analítica para a geometria em questão, por isso se torna necessário o uso de cálculo numérico.

De uma maneira geral, dois métodos básicos de resolução são utilizadas para o sistema de equações obtido pela aplicação das leis de conservação de maneira acoplada, sendo estes o métodos dos elementos finitos (MEF) e o método dos volumes finitos (MVF). O método das diferenças finitas também pode ser aplicado, mas este não garante a conservação das quantidades do sistema. A fluido dinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics* - CFD), que utiliza os métodos citados acima, com o desenvolvimento de algoritmos mais potentes e com o próprio desenvolvimento de computadores com maior capacidade de processamento, tem sido utilizada cada vez mais nas últimas duas décadas para a análise desses sistemas, juntamente com validações experimentais das simulações computacionais.

A CFD tem a capacidade de predizer os campos de fluxo juntamente com a distribuição de temperatura e concentração para uma dada geometria, dadas as condições de contorno correspondentes e as propriedades reológicas do fluido. O método de análise computacional deste trabalho utiliza um procedimento de cálculo baseado no método dos volumes finitos acoplados a um sistema de coordenadas generalizadas, necessário para acomodar a geometria do problema. O recente desenvolvimento de códigos com a utilização das coordenadas generalizadas possibilitou ao método dos volumes finitos acomodar, a princípio, todas as geometrias possíveis, tendo este fato grande importância para o crescimento da utilização do MVF, visto que o método sempre foi bem aceito por ser baseado em balanços para cada volume de controle, porém possuía a limitação de necessitar de malhas estruturadas e, em muitas geometrias isso não era possível. O modelo é tridimensional e representa muito proximamente um tanque real. A malha computacional é suficientemente fina, de maneira que os resultados são independentes do tamanho dos volumes de controle (um estudo de independência da malha é realizado). Três diferentes estratégias de resolução são revisadas: Multiple Reference Frame (MRF), Sliding Grid (SG) e Single Rotating Frame of Reference (SRFR) e todas são aplicáveis para o scale-up do processo, pois se pode modelar um tanque de qualquer tamanho após o método ter sido validado para uma escala qualquer como, por exemplo, a laboratorial, fornecendo maiores subsídios para o projeto desses tanques.

No caso específico deste trabalho, foi possível coletar dados para o número de potência na literatura para um tanque real. Dados coletados em um tanque real são necessários para indicar se o método apresenta resultados coerentes ou se ainda precisa ser melhorado, caso não apresente resultados coerentes com os coletados.

1.2. - Objetivos

O objetivo principal deste trabalho é modelar tridimensionalmente um tanque agitado por um impelidor tipo âncora, a fim de se obter os fluxos no interior do tanque. Adicionalmente, planeja-se estudar a influência de parâmetros importantes para a simulação computacional de tanques agitados, como influência do número de blocos e de volumes de controle e diferentes estratégias de resolução na rapidez e a precisão da solução numérica, além de parâmetros importantes para o estudo dos fluxos no interior dos tanques como variação do número de Reynolds, distribuição de viscosidade em um fluido pseudoplástico. Uma aplicação do método objetiva mostrar a utilidade deste para o projeto de sistemas mais eficientes, onde o agitador tipo âncora é substituído por um sistema descentralizado com três agitadores de pás inclinadas. Finalmente, planeja-se realizar estudos baseados em dados da literatura, necessários para a validação das simulações numéricas.

1.3. - Organização da dissertação

Este documento visa apresentar ao leitor, de maneira clara e objetiva, os aspectos estudados sobre tanques agitados e simulações computacionais (Capítulo 2 - Revisão bibliográfica), bem como a formulação e resolução do modelo matemático (Capítulos 3 e 4) utilizado para a obtenção dos resultados numéricos (Capítulo 5) que são analisados e comentados (Capítulo 6). São feitas sugestões para estudos futuros (Capítulo 7).

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. - Introdução

Atualmente há poucos trabalhos sobre tanques agitados por impelidores tipo âncora. Os trabalhos de simulação publicados sobre este tipo de impelidor geralmente utilizam geometrias simplificadas do tanque e malhas (*grids*) grosseiras. Porém, quando se procura por algo menos específico sobre o assunto considerado, a literatura é bastante abundante. Para ajudar no entendimento e na resolução do problema proposto para a tese de mestrado, foram estudados artigos referentes à tanques de mistura, à fluido dinâmica computacional, aos efeitos de mistura em reações químicas e às reações poliméricas. Foram também estudados alguns livros referentes à mistura [37] [46], os manuais do pacote computacional utilizado (CFX 4.4.) e o material do Curso de agitação e mistura [47].

2.2. - Revisão de Artigos/Livros

Pedrosa (2000) utiliza a CFD para a simulação do tanque de mistura com agitador tipo âncora abordando o problema com uma malha bi-dimensional. A geometria, entretanto, é bem definida (representa fielmente o sistema real para 2-D) e os resultados mostram que a CFD é uma ferramenta eficiente para o problema da fluido dinâmica em tanques agitados. O artigo reafirma a adequação do agitador tipo âncora para fluidos altamente viscosos e tixotrópicos. Também é sugerido o estudo tri-dimensional do problema, sugerindo que a utilização de ferramentas computacionais de alta performance é necessária.

Peixoto (2000) utiliza a CFD para a simulação do tanque de mistura com agitador tipo âncora abordando o problema de forma pseudo tri-dimensional, fornecendo resultados representativos do fluxo e gradiente de temperatura no tanque agitado que são úteis ao projeto eficiente desses sistemas. Também ressalta que há um compromisso entre gasto de energia e a circulação dentro do tanque.

Brucato (1998) apresenta uma comparação entre três métodos alternativos para a simulação do campo de fluxo em tanques de mistura com chicanas, em regime turbulento.

No primeiro método, o agitador não é explicitamente simulado, sendo seus efeitos modelados por imposição de condições de contorno apropriadas (perfis de velocidade, por exemplo), obtidas empiricamente, para o fluxo externo ao mesmo.

No segundo método, todo o volume do tanque é dividido em duas regiões concêntricas que estão parcialmente em contato. Na região interior, que contém o agitador, os campos de fluxos são simulados em referência rotacional (*rotating reference frame*) e a região exterior é estacionária. As informações são trocadas iterativamente na fronteira entre as duas regiões. Esse procedimento é conhecido como IO (*Inner-outer procedure* ou *Inner-outer approach*). Ver figura 1.



Figura 1. [4] Procedimento IO: domínios computacionais para as simulações internas (a) e externas (b). Will é a região excluída dos cálculos, Σ_1 e Σ_2 são as superfícies de controle onde as condições de contorno são impostas iterativamente.

O método descrito como IO pelos autores no artigo referenciado é muito similar ao método conhecido como *Multiple Reference Frame* (MRF), possuindo diferenças na maneira em que as informações são trocadas na fronteira entre a região em referência estacionária e a região em referência rotacional.

No terceiro método, o volume do tanque é dividido em dois blocos concêntricos, o bloco interno rodando com o agitador e o externo estacionário. Os dois blocos deslizam

entre si, sendo os cálculos realizados através do uso de uma malha transiente, e são conectados pelo uso da técnica de *sliding-mesh* ou *sliding-grid* (SG). Ver figura 2.



Figura 2. [4] Procedimento sliding-grid. (a) bloco central rodando, (b) bloco externo estacionário e Σ fronteira.

Foram obtidos resultados computacionais para várias geometrias usando os três métodos de complexidade e demanda computacional crescentes: O método em estado estacionário de condições de contorno no agitador (IBC – *impeller boundary condition*), o método IO e o método dependente do tempo *sliding-grid*. As seguintes conclusões por comparação foram delineadas:

- O método IBC não tenta simular o fluxo no agitador, e modela o seu efeito por imposição ao fluxo externo das condições de contorno apropriadas, de origem empírica. É o método que requer menor tempo computacional, mas como depende de dados experimentais, depende fortemente da disponibilidade e precisão desses dados para o tipo de tanque considerado. Sua capacidade de predição é, portanto, limitada.

- O método IO é baseado no acoplamento iterativo de duas soluções em estados estacionários. Provou ter valor preditivo e permitiu simulações satisfatórias dos campos de fluxo e turbulência sem o uso de dados empíricos. Em geral produziu dados mais precisos que os obtidos pelo método IBC. Apesar de necessitar de um tempo de computação maior, quando comparado ao IBC, possui a vantagem de não requerer o recurso de *sliding-grid*, que é ainda mais custoso em termos de tempo computacional. O método deve ser utilizado

com cautela. Ele não é apropriado quando grandes variações de pressão ocorrem próximas à interface de conexão entre os blocos.

- O método SG forneceu as melhores concordâncias com os dados experimentais em considerando-se quantidades de fluxo médias, mesmo tendendo à não predição da energia turbulenta. Como o método IO, mostrou-se totalmente preditivo e aplicável a configurações de tanques/agitadores arbitrárias. Por outro lado, foi o que requereu mais esforço computacional entre os métodos comparados aqui. Vale ressaltar que outros autores citam este procedimento como excelente preditor das propriedades de turbulência.

O artigo comenta, em geral, que os resultados obtidos foram bons. Este trabalho é o único até o momento a revisar as três estratégias de solução. Relembra que os resultados satisfatórios podem ser frutos do uso de malhas mais finas e critérios de convergência mais rigorosos.

Brucato (2000) utiliza o fluxo em um reator tipo tanque agitado predito pela CFD para simular um processo dependente da mistura em que ocorrem duas reações paralelas, competindo por um reagente comum:

$$A + B \rightarrow$$
 Produto 1 e $A + C \rightarrow$ Produto 2

Foi realizado um experimento, onde A = OH, $B = \frac{1}{2}Cu^{++}$ e C = etil-cloroacetato. Sendo que para o experimento, a seletividade final do processo foi medida pela análise colorimétrica do Cu⁺⁺ residual. A seletividade foi observada como sendo dependente da velocidade de agitação e, portanto, da eficiência de mistura durante o processo em batelada.

Os campos de fluxo obtidos pelas simulações tridimensionais forneceram resultados muito próximos aos dados experimentais, sem o uso de parâmetros ajustáveis. Esses resultados promissores foram obtidos modelando-se somente o fenômeno de *macromixing*, tendo sido descartados os fenômenos de *micromixing*, confirmando assim a hipótese de o sistema ser perfeitamente misturado localmente.

Ciofalo (1996) realizou simulações numéricas do campo de fluxo turbulento em tanques de mistura sem chicanas com agitadores radiais, sem o uso de dados empíricos e utilizando no agitador a técnica de *rotating reference frame*. Problemas de superficie livre também foram simulados, nos quais o perfil do vórtice central foi calculado como parte da solução por meio de técnica iterativa. Os campos preditos de velocidade e turbulência ao longo de todo o vaso e os consumos de energia foram confrontados com dados da literatura, perfis de superficie livre também foram comparados com dados experimentais obtidos em um tanque experimental modelo. Ressalta-se a importância da inclusão da força de Coriolis.

Jaworski (1997) usa a CFD de maneira totalmente preditiva para modelar o fluxo em um tanque com chicanas, validando os resultados para escoamento laminar. O procedimento de cálculo utiliza um pacote comercial de CFD com a capacidade de utilizar a técnica de *sliding mesh*. A comparação realizada no artigo entre os valores experimentais e os computacionais mostraram a concordância dos valores, ressaltando que os pacotes avançados de CFD agora podem fornecer subsídios apropriados para aspectos da engenharia de processos como um projeto integrado de tanque agitado, incluindo a engenharia mecânica e outros aspectos. No artigo são comentados vários artigos que utilizam a técnica de *rotating frame of reference* mas, baseado em resultados anteriores do autor, espera-se que, para o problema em estudo que possui chicanas, a precisão da modelagem seja aumentada pelo uso da técnica de *sliding mesh*.

O método *sliding mesh* é mais custoso em termos de tempo computacional, porém com a boa qualidade de ser totalmente preditivo e não necessitar de dados experimentais. Entretanto, na ausência de chicanas, um método mais simples, que emprega uma única *rotating frame of reference*, pode ser usado desde que as paredes do tanque sejam simétricas em relação ao eixo axial e sejam co-axiais com o eixo do agitador.

Perng (1993) descreve o desenvolvimento de um procedimento de movingdeforming mesh para a simulação de fluxo em tanques de mistura. A malha (grid) junto ao agitador se move e causa deformação dos volumes adjacentes.



Figura 3. [7] Movimento do grid por deformação: (a) início, (b) grid se move e deforma, (c) a fronteira da direita e as células são deslocadas para a esquerda, (d) o grid avança a distância de uma célula.

A figura 3 mostra a seqüência de movimento da malha. No tempo inicial a domínio é dividido em uma malha única como mostrado na figura 3a. Uma condição de contorno rotacional cíclica é impostas às fronteiras esquerda e direita. As pás do agitador movem-se em sentido anti-horário e levam o *mesh* com elas. Quando a deformação atinge um limite pré estabelecido (figura 3b), há a mudança imediata para a célula anterior (figura 3c), de maneira que um movimento contínuo do *mesh* é obtido. O método foi validado por comparação ao método *rotating frame* e em seguida a escoamentos transientes laminares e turbulentos em tanques bi e tri-dimensionais. As características de fluxo foram corretamente observadas (reproduzidas). Este método foi o precursor da técnica de *sliding mesh*.

Sandhu (1992) estudou de maneira preditiva os padrões de fluxo em tanques agitados, em regimes laminar e turbulento, através do uso dos pacotes de fluido dinâmica computacional FIDAP e STAR-CD. Foram feitas comparações entre os dois pacotes quando apropriado. Observa-se que o pacote FIDAP não se mostrou hábil para a resolução de problemas em regimes turbulentos. As simulações usando o STAR-CD envolveram o uso da técnica de *sliding-mesh* para o cálculo do regime turbulento. É ressaltada a importância de se obter resultados independentes da malha para mostrar que os mesmos são consistentes. Os resultados foram comparados com resultados experimentais e mostraram-se coerentes, considerando-se os erros experimentais devido á técnica experimental empregada em alguns dos estudos referenciados.

Abid (1994) estudou a mistura em tanques com agitadores *paddle* e de duas lâminas (*two blade*) com diferentes larguras das lâminas. Foi utilizada a fluido dinâmica computacional para a resolução da dinâmica do fluido em "todos os pontos" no interior do tanque, obtendo-se os padrões de fluxo, as componentes de tensão e a função de dissipação viscosa. Os resultados são comparados com dados experimentais e é observada boa concordância. Por exemplo, para o agitador *paddle* o fluxo é quase que totalmente azimutal longe das paredes, de maneira que para se criar uma circulação axial é necessário de diminuir a altura do agitador em relação ao fundo do tanque. O artigo mostra a habilidade da CFD em modelar mudanças nos padrões de fluxo tridimensionais em tanques agitados.



Figura 4. [9] Agitadores de duas lâminas.

Os agitadores de lâminas grandes são em geral usados para a mistura em regime laminar de fluidos altamente viscosos. Quando as lâminas do agitador de duas lâminas se tornam menores no sentido radial, esse agitador passa a ser chamado de turbina (como o *Rushton turbine*). As equações de Navier-Stokes são escritas em coordenadas cilíndricas e resolvidas com o uso da técnica de *rotating frame of reference*. A superficie livre (topo do tanque) do líquido é considerada como sendo plana e horizontal, correspondendo ao fato da aceleração centrifuga ser pequena comparada a gravidade (Fr << 1). Este efeito é conseguido pelo uso de chicanas ou defletores. Foram realizados cálculos com três malhas com ordem crescente de precisão: 15x24x20, 21x27x31 e 23x35x33. Porém observou-se que a malha de precisão intermediária apresentou um melhor compromisso entre esforço computacional e precisão dos resultados obtidos. Os resultados obtidos para malhas mais finas que a segunda não modificaram o perfil de fluxo obtido. A comparação dos resultados obtidos mostrou-se dificil devido à escassez de informações na literatura e aos resultados publicados estarem focados no fluxo longe do fundo do tanque e da superfície livre. A validação completa do modelo necessitaria de uma comparação de todo o campo de velocidades com um campo medido usando, por exemplo, a técnica de *Laser Doppler Anemometry* (LDA).

Blackburn (2000) utilizou um método híbrido para estudar fluxos turbulentos em vasos de mistura com agitadores axiais. O fluxo médio no tempo na região do agitador é modelado usando a *blade element theory* e o fluxo no restante do vaso é simulado pelo uso de método numérico de volumes finitos de segunda ordem com Reynolds médio. Os dois modelos são acoplados iterativamente através de condições de contorno e do cálculo da energia dissipada no vaso de mistura. O procedimento em questão é menos exigente em termos de tempo computacional do que as alternativas que necessitam de detalhes do fluxo na região do agitador. Os resultados da simulação foram comparados a experimentos detalhados de *Laser-Doppler* no vaso experimental do laboratório. Os resultados mostraram uma diferença absoluta média da ordem de 1% na ponta do agitador, e o consumo de energia foi predito com precisão de dois dígitos. O equipamento experimental é descrito em detalhes, como sendo um tanque cilíndrico de acrílico, com fundo plano, e o mesmo foi posicionado dentro de um tanque quadrado de vidro para minimizar a distorção ótica.

A Blade element theory é explicada em detalhes, com as equações finais fornecidas. As pás do agitador são modeladas de maneira detalhada. O fluxo no restante do tanque foi simulado pelo uso do solver CFX-4.2 (AEA Technology). No pacote foi utilizado o método SIMPLEC para implementação do acoplamento pressão-velocidade.



Figura 5. [10] Layout do sistema de medidas com dois componentes LDV (laser-Doppler velocimetry).

Patwardhan (1999) estudou a relação entre os padrões de fluxo e a eficiência de mistura. Foram examinados os padrões de fluxo gerados por cerca de 40 agitadores de fluxo axial. Os agitadores possuíam diferentes ângulos nas pás, rotações nas pás, larguras das pás, diâmetros, localizações e direções de bombeamento. O fluxo médio e as características de turbulência foram medidas com o uso de laser-Doppler velocimetry (LDV). Com base nos dados de LDV os padrões de fluxo foram estabelecidos pelo uso da fluido dinâmica computacional (CFD), e posteriormente usados para simular o processo de mistura. Os tempos de mistura preditos tiveram excelente concordância com os valores experimentais. Foi mostrado que o tempo de mistura adimensional (θ) varia inversamente com o número de fluxo secundário do agitador. Comparações dos agitadores com base de igual consumo de energia por unidade de massa mostraram que o tempo de mistura é proporcional ao número de potência do agitador e ao diâmetro do tanque e inversamente proporcional ao número de fluxo secundário do agitador. O modelo de CFD mostrou a possibilidade de se reduzir o turbilhão em cerca de 20% do valor atual e, ainda assim, conseguir o mesmo tempo de mistura. Essa redução no turbilhão representa uma economia substancial nos custos operacionais.

Xuereb (1996) partiu do princípio que algumas reações químicas na fase liquida podem ocasionar mudanças drásticas no comportamento reológico do fluido. Isso geralmente acontece em tanques agitados com chicanas, que são em geral fluxos dependentes do regime hidrodinâmico – laminar ou turbulento. A partir desse princípio foram realizadas simulações por fluido dinâmica computacional, para o cálculo de campo de velocidades e dissipação localizada de energia onde o líquido é inicialmente pouco viscoso e se torna altamente viscoso e posteriormente pseudo-plástico.

As simulações indicam que os padrões de fluxo gerado pelos dois agitadores são bastante diferentes, especialmente com grandes zonas de recirculação e zonas mortas no regime laminar. Dependendo das propriedades reológicas do fluido, a dissipação de energia ocorre nas vizinhanças dos agitadores ou nas paredes ou perto delas.

Lamberto (1999) caracterizou a estrutura do fluxo laminar em um tanque agitado sem chicanas, com um agitador radial de seis lâminas, usando experimentos para a visualização de fluxos, experimentos de PIV (particle image velocimetry) e simulações computacionais de CFD (fluido dinâmica computacional). Como esperado as estruturas de fluxo secundário eram predominantemente dois anéis de vórtices, acima e abaixo do agitador. Essas regiões secundárias de circulação eram segregadas do seio do fluxo e para números de Reynolds no agitador baixos (5 < Re < 100), as posições e tamanho dos "anéis" foram dependentes do número de Reynolds e da localização das pás do agitador. A capacidade de bombeamento e o "fluxo de circulação" do agitador foram quantificados e os resultados indicaram que o "fluxo de circulação" é cerca de quatro vezes a capacidade de bombeamento do agitador. Os cálculos apresentados no artigo representam um ponto de vista Euleriano (rotating frame of reference), de maneira que não podem ser usados para analisar em detalhes os efeitos como flutuações na velocidade das pás na estrutura de fluxos do sistema. Entretanto, as simulações servem como ponto de início para simulações Lagrangeanas, as quais serão usadas (segundo o autor) para se "seguir" partículas inertes através do fluxo, em uma tentativa de se captar a natureza dinâmica do processo de mistura.

Ismailov (1997) estudou um reator tanque com chicanas agitado. O fluxo turbulento foi gerado por um agitador *hyperboloid* de baixo atrito, a um número de Reynolds constante (5600), e foi usado um anemômetro *diode fiber laser-Doppler*. Os

resultados experimentais foram confrontados com um programa de CFD baseado no modelo k-ε. O perfil do fluxo próximo ao agitador é caracterizado por uma série de jatos de vórtices que se prolongam periodicamente para baixo dentro de uma extensão radial de 0.5D a 0.7D. A maior medida de velocidade tangencial foi de 96% da velocidade na extremidade do agitador. Nessa região a energia cinética é extensamente dissipada. Variações maiores do que D/5 influenciam sensivelmente a estrutura do fluxo e a distribuição de energia cinética.

Gosman (1992) estudou a possibilidade de se predizer o fluxo turbulento bifásico, sólido-líquido e gás-líquido, em um vaso agitado com chicanas. Um modelo Euleriano de dois fluxos é aplicado, baseado na hipótese principal de uma fase interpenetrante e contínua. As equações de conservação de massa e momento linear são resolvidas para cada fase e os efeitos de turbulência são modelados estendendo-se o modelo k-e de monofásico para bifásico. O sistema de equações acopladas resultante da modelagem é então resolvido por um algoritmo implícito bifásico, que permite o cálculo de uma variedade grande de frações em cada fase, tamanhos de partícula e taxas de densidade das fases. Os resultados preditos são apresentados para escoamentos sólido-líquido e gás-líquido (*bubbly*). Foram feitas comparações com os dados experimentais para as velocidades médias das fases e fração volumétrica, velocidade de escorregamento média e quantidades de turbulência.

Como condições de contorno, foram aplicadas as seguintes:

 Agitador: de importância primordial no modelo computacional. O agitador típico é a *Rushton-turbine* que cria um fluxo altamente complexo nas suas vizinhanças. De maneira simplificada, foram impostas a velocidade e os valores de k-e no volume varrido pelo agitador por referência aos dados experimentais.

- Superficies sólidas: condição de contorno de não escorregamento é imposta a toda superficie sólida para a fase "contínua". São introduzidas no cálculo como "funções parede". Como uma primeira aproximação, a mesma condição é aplicada na fase discreta.

- Superficie livre: a superficie livre é assumida como sendo plana, ela segue a velocidade normal, as tensões tangenciais, os fluxos normais de k e ε e finalmente, o gradiente da fase sólida se torna nulo na superficie. Entretanto, nos sitemas gás-líquido a velocidade normal do gás não é nula. Nesses sistemas as forças axiais mais importantes, próximas a superficie livre, são o arraste e forças de "buoyancy"

As aplicações para os sistemas gás-líquido e sólido-líquido demonstraram a capacidade do método de produzir predições fisicamente realistas do fluxo e da distribuição das fases. Comparação com dados experimentais mostrou concordância quantitativa razoável. Entretanto o método proposto precisa ser ainda desenvolvido e testado para várias condições operacionais antes de se tornar uma ferramenta de projeto.

Micale (2000) simulou o campo de fluxo tridimensional pelo uso da CFD, resolvendo as equações de fluxo utilizando um modelo de turbulência bem conhecido. O objeto de estudo foi um tanque agitado, com chicanas, por um ou vários agitadores.

Duas estratégias para a modelagem foram tentadas. Em um método mais simples o campo de fluxo é simulando desprezando-se a influência da fase sólida, com o campo de fluxo obtido, um modelo muito simples de sedimentação é empregado para a resolução das equações de balanço de massa para o sólido, visando a obtenção do campo de concentrações de sólido. Nesse caso, nenhum efeito inercial nas partículas sólidas foi considerado, de maneira que as trocas por convecção e difusão da fase sólida são assumidas como idênticas as da fase líquida.

Em uma estratégia mais avançada, as equações de balanço e de momento para as fases sólida e líquida são simultaneamente resolvidas, de maneira que os efeitos da presença da fase sólida no campo de fluxo da fase líquida são levados em conta. Em ambas estratégias de resolução foram realizadas simulações totalmente preditivas utilizando a abordagem *Inner-Outer* (IO). Ou seja, nenhum dado experimental se fez necessário. Devido ao uso dessa técnica de modelagem do agitador, todo o volume do vaso é dividido em duas

regiões. Na região interior, que contém o agitador, o campo de fluxo é simulado em *rotating frame of reference*. Enquanto que na região exterior, as simulações são conduzidas na referência do laboratório. As informações são trocadas iterativamente entre as duas regiões, após se ponderar azimutalmente e transformar para o movimento relativo.

Os resultados das simulações são comparados com perfis de concentração axial experimentais para as geometrias estudadas. A comparação entre os dados experimentais e os resultados das simulações foi satisfatória para ambas estratégias de resolução, ao menos para a geometria com um único agitador. Foram discutidas as diferenças entre as duas estratégias, no que tange à precisão e ao esforço computacional.

Schäfer (1998) identificou os vórtices que seguem próximos as laminas do agitador como o principal mecanismo de fluxo responsável pela mistura e dispersão em certos tanques agitados, sendo que esses altos níveis de turbulência tem efeitos importantes em fenômenos como quebra de gotas e danos celulares em reatores biológicos. Computações numéricas desses fluxos requerem informações mais detalhadas nas características da velocidade geradas por diferentes agitadores disponíveis em literatura. No estudo em questão, o fluxo médio e a estrutura turbulenta gerados por um impelidor de pás retas inclinadas em 45° revelaram que em cada lamina é formado um vórtice que a segue. Foram realizadas medidas de LDA (*Laser-Doppler Anemometry*), medidas experimentais que fornecem um conjunto de dados mais explicativo do fluxo médio e do campo de fluxo para um agitador de fluxo axial até a data do artigo. Essas medidas se provaram muito úteis para a validação de futuras predições por CFD do fluxo.

Lee (1998) estudou a estrutura do fluxo em um vaso agitado por uma turbina *Rushton* usando técnicas de medição baseadas na *laser Doppler anemometry*. Foram determinadas as escalas de tempo e comprimento da turbulência. Essas características foram então utilizadas para se estimar a taxa de dissipação de energia turbulenta. Os autores notaram que os níveis de energia turbulenta e dissipação turbulenta são altos próximos à turbina e decrescem rapidamente com o aumento da distância das laminas do agitador. A turbulência na corrente do agitador é em sua maioria anisotrópica próxima às laminas do agitador. Os resultados são comparados com estudos prévios.

Ottino (1994) fez uma revisão com o objetivo de complementar as revisões anteriores, focando algo mais do que os aspectos clássicos de mistura relativos à engenharia de reações químicas, fornecendo mais uma perspectiva da mecânica dos fluidos destacando os recentes desenvolvimentos na área. O artigo aborda uma descrição visual e física do fluxo de fluidos, incluindo não homogeneidades espaciais que podem levar à predições de uma ampla variedade de situações, tanto em fluxos laminares quanto turbulentos.

É comentado que o tratamento da mistura laminar de fluidos viscosos está sendo tratada de maneira apropriada, apoiada nos desenvolvimentos baseados na teoria do caos e nos crescentes recursos computacionais, bem como desenvolvimentos na mecânica dos fluidos e novos resultados experimentais. Nesse caso o conhecimento atual satisfaz a necessidade de uma maior compreensão que leve ao entendimento do fenômeno. O panorama da mistura turbulenta, ao contrário do regime laminar, ainda é definido de uma maneira menos cristalina e não há modelos universais para o entendimento e predição como ferramenta de engenharia.

Sheng (1998) estudou de maneira preditiva o fluxo em um vaso agitado. Ele utilizou métodos para validar as simulações de CFD baseadas na equação de *Reynolds Average Navier-Stokes* (RANS) por comparação com medições experimentais utilizando a *Particle Image Velocimetry* (PIV). Foram obtidos um total de 1024 campos de velocidade 2D, instantâneos e seqüenciais, ao longo do plano axial central de um vaso agitado por um agitador axial P-4, através de medições de PIV. Dos dados de PIV foram extraídos os campos de velocidade média, energia turbulenta viscosa, tensões de Reynolds e taxas de dissipação. Pela introdução de várias ferramentas para quantificar as similaridades e diferenças entre os campos bidimensionais, as simulações de CFD do campo de velocidades são validados por comparação aos dados de PIV. Usando-se a PIV e LDV (*Laser-Doppler Velocimetry*) os efeitos das condições de contorno nas simulações de CFD também é examinado. O efeito das diferentes abordagens para as tensões de Reynolds na predição do fluxo também é estudado. O estudo reflete a viabilidade de se utilizar a CFD para tanques agitados.

Hamill (1998) comentou os avanços da fluido dinâmica computacional (CFD) nos últimos 15 anos que, através de pré-processadores mais intuitivos e *solvers* mais avançados, estão tornando a CFD mais fácil de ser usada, mais precisa e mais rápida. Nos últimos 15 anos a CFD se tornou uma parte importante nos projetos de engenharia e no ambiente de análises. Com a CFD os engenheiros podem simular escoamentos e a transferência de calor em fase de projeto e entender como será o funcionamento do equipamento antes de produzi-lo. Desta maneira diminui-se o numero de protótipos até se alcançar o projeto final, diminuindo-se o tempo de desenvolvimento. A CFD fornece uma boa relação custo/beneficio para se testar novos projetos, os quais poderiam ser custosos e arriscados de se pesquisar apenas através de um enfoque experimental.

As técnicas de CFD envolvem a solução das equações de Navier-Stokes que descrevem o processo de escoamento de fluidos. Essas equações são extremamente complexas, e por muitos anos, um esforço considerável foi feito para o desenvolvimento de técnicas básicas de modelagem para a resolução dessas equações. Inicialmente, somente institutos de pesquisa e universidades desenvolviam programas de CFD, e a falta de interfaces apropriadas para os usuários restringiam esses primeiros pacotes a poucos *experts* no assunto.

Na década de 1980 se deu o início da comercialização da CFD. Com o aumento do número de usuários de CFD os beneficios se tornaram mais evidentes para a indústria, o que demandou um aumento por softwares mais facilmente utilizáveis. Hoje em dia CFD é um grande negócio, e qualquer produtor desses pacotes deve antecipar as necessidades do mercado.

Gosman (1998) apresenta uma revisão geral dos progressos realizados na última década no desenvolvimento da fluido dinâmica computacional (CFD) como uma

ferramenta industrial, com ênfase particular nas capacidades de se trabalhar com geometrias mais complexas. É demonstrado que, pela introdução de malhas não-estruturadas e altamente flexíveis, juntamente com a habilidade de se distorcer, escorregar, inserir e remover regiões específicas, tornou-se possível se aplicar a CFD a teoricamente todos os tipos de equipamentos industriais. Quando combinada com os progressos na geração de malhas, *solvers* numéricos, modelagem física, interfaces computacionais e *hardware* computacional o resultado final é que cada vez mais esta técnica está sendo utilizada para o projeto de equipamentos.

Sharratt (1990) fez uma revisão dos problemas estudados e de aplicações de CFD. A fluido dinâmica computacional atraiu uma atenção considerável das indústrias de processo, entretanto é necessário se estudar a relevância que ela tem para a engenharia de processos. O artigo discute a CFD como ferramenta para a resolução de problemas de engenharia química.

Weetman (1997) descreve um procedimento implementado no pacote de CFD Fluent para preparar simulações para diversas configurações de tanques agitados (préprocessamento). Os resultados das simulações numéricas, obtidos pelos procedimentos de *Multiple Reference Frame* (MRF) e *Sliding Mesh* foram comparados a resultados experimentais obtidos por LDV (*Laser Doppler Velocimeter*)



Figura 6 - [39] Malha gerada para o cálculo por MRF (a) e para o cálculo por sliding mesh (b)

Ressalta-se a utilização de uma malha em que a parte contendo o agitador e a parte externa possuem uma conexão elemento a elemento para o método de MRF (fig. 6a) e uma malha em que as duas partes não possuem elementos conectados na fronteira (fig. 6b), utilizada no cálculo utilizando o procedimento de *sliding mesh*. Uma diferença fundamental é que o procedimento de cálculo utiliza uma malha transiente para o cálculo por *sliding mesh*. Os resultados obtidos numericamente foram concordantes com os resultados experimentais, tanto para a velocidade média como para o torque observado (com um erro relativo maior neste último caso).

Bakker (1998) calcula os padrões de fluxo gerados por uma turbina (*pitched blade turbine*) através do procedimento de *sliding mesh*. O artigo ressalta que o procedimento de cálculo não necessita de dados experimentais para as condições de contorno, o que é altamente desejável. Os resultados foram concordantes com os obtidos por LDV (*laser-Doppler velocimetry*), o que conduz a conclusão de que o método de cálculo é apropriado para a predição de padrões de fluxo em tanques agitados.



Figura 7 – [40] Malha utilizada pelo método de *Sliding Mesh* em dois instantes. A malha na região do agitador (região central) se move com ele e "escorrega" em relação a malha estacionária do resto do tanque.

Os resultados obtidos em fluxo laminar para os tanques agitados descritos no artigo foram bastante precisos. O aspecto negativo das simulações é o alto tempo computacional gasto, comparando-se a simulações em estado estacionário (o método de *sliding mesh_*utiliza o estado transiente para a malha). O artigo ressalta o importante papel do método para o desenvolvimento de novos agitadores para aplicações industriais.



Figura 8 – [40] A magnitude da velocidade média é mostrada como função do número de Reynolds (a) e a velocidade tangencial (b).

O artigo calcula as velocidades para diferentes Reynolds, um aspecto importante é se observar que o número de revoluções para se alcançar o estado estacionário aumenta com o número de Reynolds, bem como as velocidades, o que era de se esperar. A velocidade tangencial converge de maneira mais lenta que as demais (figura 8).



Figura 9 – [40] Comparação entre os dados experimentais e os resultados por *sliding mesh* para diferentes números de bombeamento (*impeller pumping number*), em função de diferentes Reynolds.

A figura 9 mostra a boa concordância entre os dados experimentais e os dados obtidos por simulações numéricas. O número de bombeamento foi calculado com base no fluxo líquido total que deixa o agitador.

Bertrand (1988) é um dos primeiros artigos a apresentar simulações numéricas de tanques com agitadores tipo âncora. Os agitadores tipo âncora são utilizados para fluidos viscosos, tanto Newtonianos como pseudoplásticos. Os resultados obtidos nas simulações apresentaram boa concordância com os resultados experimentais, bem como com os resultados obtidos em trabalhos anteriores.

São apresentados resultados para as tensões de cisalhamento, para a viscosidade aparente, para as taxas de dissipação viscosa e resultados locais para as velocidades. O artigo conclui que as simulações se tratam de importante ferramenta para o desenvolvimento de agitadores em função da geometria do tanque e características reológicas do fluido.

Shamlou (1989) apresenta medições do consumo de energia para agitadores tipo âncora em um tanque de 0.15m de diâmetro e um de 0.40m de diâmetro. A figura 10 ilustra os perfis criados atrás das lâminas do agitador. Os dados para os fluidos Newtonianos e não Newtonianos são correlacionados pelo uso do conceito de viscosidade aparente. O artigo discute a importância das proporções geométricas do tanque, fornecendo correlações para o projeto de tanques, tanto para escoamentos em regime laminar quanto para escoamentos em regime turbulento.





Re 30



Red 200

Re: 500

Figura 10 - [42] Padrões de fluxo ao redor da lâmina do agitador para vários números de Reynolds

O artigo conclui que as correlações obtidas são validas somente para agitadores tipo ancora planos e descrevem os dados experimentais do estudo atual e dos estudos anteriores com um razoável grau de precisão.

No material: AIChE Equipment Testing Procedure - Mixing Equipment (Impeller Type) – A Guide to Performance Evaluation (1987), são apresentados, de maneira detalhada, métodos para conduzir e interpretar testes de desempenho em equipamentos de mistura com agitadores. Os testes podem ser conduzidos para determinar o desempenho no processo de mistura, a confiabilidade mecânica ou a apropriação do equipamento para o uso desejado.

Os testes também podem servir para critérios de mudança de escala ou para o desenvolvimento de equipamentos de outros tamanhos. Já as razões para a realização de testes podem ser variadas, entretanto os métodos apresentados geralmente se aplicam à maioria das situações. Cuidados devem ser tomados em se determinar as prioridades do teste e na seleção dos métodos para a situação em questão. O material também apresenta uma revisão detalhada sobre a nomenclatura e os grupos adimensionais utilizados em tanques agitados.

No material do Curso de Agitação e Mistura na Indústria, referente a um curso ministrado de 25 a 27 de setembro de 2001 no IPT em São Paulo capital, estão contidos os tópicos apresentados nas palestras e, portanto o material é uma boa referência bibliográfica e engloba a maioria dos aspectos importantes para o entendimento dos mecanismos de agitação e mistura.



Figura 11 - [44] Tanque de homogeneização dotado de agitador tipo âncora

Os agitadores tipo âncora com a configuração espacial conforme a figura 11 foram amplamente utilizados na indústria de suco de laranja para homogeneização, pois promovem uma movimentação lenta do fluido, com baixa tendência à formação de vórtices ou turbulências, minimizando assim a geração de espuma ou a aeração do produto e sua conseqüente oxidação. Existe hoje uma forte tendência para se mudar esta configuração para agitadores de pás retas inclinadas a 45° e descentralizadas, devido, principalmente, ao menor consumo de potência e menor tempo de mistura.

Oldshue et al (1983) apresentam um verdadeiro guia para a mistura de fluidos, onde são abordados desde os conceitos básicos até aspectos de *scale-up* e de projeto mecânico. Há outras referências com informações semelhantes, entre elas Nagata (1975). O livro de Oldshue traz informações convenientes para o objetivo deste estudo como, por exemplo, o dado que cerca de 2% das aplicações de mistura na indústria envolvem fluidos altamente viscosos. Nestes casos o processo de mistura é de extrema importância (pág. 35).

A maioria dos fluidos altamente viscosos são pseudoplásticos, ou seja, são fluidos não Newtonianos, onde a viscosidade decresce rapidamente com o aumento da taxa de cisalhamento. Para os fluidos altamente viscosos são recomendados três tipos de agitadores, os agitadores helicoidais, os agitadores de "contorno", como o âncora, e os agitadores *open*

type, cada um para uma faixa de viscosidade. Os agitadores tipo âncora tem bom desempenho para viscosidades de até 50.000 Pa.s. Os agitadores tipo âncora e tipo hélices são agitadores *close range* (as pás se movimentam próximas às paredes do tanque) e fornecem uma baixa movimentação axial do fluido (*low top to bottom motion*).

Os manuais do pacote de CFD utilizado no desenvolvimento deste trabalho, o CFX 4.4, descrevem de forma detalhada todos os componentes do pacote computacional. O pacote é basicamente dividido em três grupos: pré-processamento, *solver* e pós-processamento.

O pré-processamento engloba toda a descrição do problema por parte do usuário, o que inclui a construção da geometria e a implementação das condições de contorno. Nessa etapa, selecionam-se também os modelos que serão utilizados para a resolução do problema.

A geometria deve ser inserida em um gerador de malha para a resolução numérica pelo *solver*. A criação da malha é, de um modo geral, a etapa mais trabalhosa da modelagem. O pacote computacional CFX 4.4 possui como geradores de malha basicamente o MESHBUILD e o BUILD, entretanto é possível sejam utilizar outros pacotes, como o CFX-HEXA. Um aspecto importante do CFX 4.4 é a necessidade da utilização de malhas estruturadas. As malhas estruturadas são mais complexas para serem geradas, entretanto facilitam a convergência e em geral a tornam mais rápida. As malhas estruturadas são aquelas em que as matrizes de coeficientes são ordenadas e, em geral, são compostas por elementos hexaédricos, ou seja, elementos com seis faces.

Uma outra parte do pré-processamento é a criação de um arquivo de comando (command file - fc), onde estão descritas todas as funções a serem executadas pelo solver. Caso se deseje executar uma rotina que não está prevista pelo solver, pode ser necessário o uso de uma sub-rotina. Há algumas subrotinas já criadas e descritas no manual, porém também é possível a criação de novas sub-rotinas.
No pacote computacional estão previstos diversos modelos de fluidos não-Newtonianos, ou seja, fluidos que não obedecem uma relação linear simples entre tensão de cisalhamento (*shear stress*) e taxa de tensão (*rate of shear strain*), dada pela equação a seguir. Vários modelos estão disponíveis no CFX-4 para os modelos simples de fluidos não-Newtonianos, onde a tensão de cisalhamento é uma função não linear, ou dependente do tempo.

$$\sigma = -p\delta + (\varsigma - \frac{2}{3}\mu)\nabla \bullet U\delta + \mu(\nabla U + (\nabla U)^{T})$$

Onde σ é o stress tensor (tensor tensão).

A relação pode ser descrita da seguinte forma:

$$\gamma = F(\tau) e \mu = \frac{\tau}{\gamma}$$

Onde γ é a taxa de tensão, τ é a tensão de cisalhamento e μ é a viscosidade molecular laminar.

Existem cinco modelos de fluidos não-Newtonianos disponíveis no CFX4, são eles: Bingham, Bird-Carreau, Cross, Herschel-Bulkley e Power Law. O equacionamento matemático dos modelos é dado a seguir:

Herschel-Bulkley Model:
$$\mu = \frac{\tau_Y}{\gamma} + K_N \gamma^{n-1}$$

Bingham Model:
$$\mu = \frac{\tau_{\gamma}}{\gamma} + K_N$$

Bird-Carreau Model:
$$\mu = \eta_1 + (\eta_0 + \eta_1)(1 + (K_N \gamma)^2)^{\frac{n-1}{2}}$$

Cross Model:
$$\mu = \frac{\eta_0}{1 + (K_N \gamma)^n}$$

Power Law Model:	$\mu = K_N \gamma^{n-1}$
Para esses fluidos:	se n < 1 pseudoplásticos
	se $n = 1$ Newtoniano
	se $n > 1$ dilatantes

Sendo, K_N a consistência (*consistency*), geralmente dada em Pa.sⁿ e sempre maior que zero, n o índice de potência (*power index*), $\eta_0 e \eta_1$ as viscosidades para baixas e altas tensões e τ_y o *yield stress*. Deve se observar que, no modelo de Bingham, o K_N pode também ser conhecido como a viscosidade plástica (plastic viscosity). Os valores destas constantes são inseridos no pacote através de um arquivo de comando conhecido como fc. Caso o fluido não obedeça a nenhum dos modelos previstos no pacote, é necessária a criação de uma sub-rotina para descrever o seu comportamento reológico.

O solver ou o processamento é o coração do programa, onde são realizados os cálculos e onde é criado o arquivo de saída no formato dmp. O processamento é realizado em concordância com os comandos do fc. Portanto, todo o cuidado deve ser tomado ao se escrever o arquivo de comando para que todos os aspectos importantes para o problema sejam observados. As condições de contorno (entrada, saída, parede, etc...) podem ser criadas no fc ou na criação da malha (arquivo geo).

Finalmente, o pós-processamento é uma ferramenta para visualização dos resultados fornecidos pelo processamento. Através do uso do CFX ANALYSE ou do CFX VISUALISE é possível a criação de diversos tipos de gráficos, que permitem um melhor entendimento dos resultados numéricos.

2.3. - Comentário sobre a revisão bibliográfica

A revisão bibliográfica mostrou que ainda não foram publicados outros trabalhos sobre simulações computacionais de tanques de mistura com agitador tipo âncora. Entretanto há vários trabalhos que utilizam pacotes computacionais como o utilizado neste trabalho com sucesso para a simulação de tanques agitados.

Também se observa que as ferramentas de fluido dinâmica computacional tem se tornado mais acessíveis e mais poderosas com o passar do tempo. Isso tem implicado em um aumento da utilização destas ferramentas pelas indústrias, que tem visualizado que é possível se otimizar os processos que envolvem escoamentos de maneira totalmente preditiva, geralmente com economia de tempo e dinheiro.

Como leitura básica para o entendimento da fluido dinâmica computacional, recomenda-se a leitura dos livros de Patankar (1980) e Maliska (1995), que abordam de maneira clara e objetiva toda a formulação utilizada no cálculo numérico baseado no método dos volumes finitos, que por sua vez é o coração da maioria dos pacotes de CFD.

3. FORMULAÇÃO DO MODELO

3.1. Introdução

,

Neste trabalho foram realizadas simulações numéricas a partir de um modelo matemático. Os resultados numéricos somente serão coerentes com a realidade se os aspectos relevantes para o fenômeno físico forem considerados de maneira apropriada, ou seja, as equações que representam o fenômeno devem levar em conta todos os aspectos que tem influência no processo em estudo.

3.2. Equações fundamentais

As equações de conservação, que descrevem um fluxo qualquer, estão descritas a seguir:

Equação da continuidade

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho r u_r) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}(\rho u_{\theta}) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_z) = 0$$

Navier-Stokes - Radial

$$\rho \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \cdot \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_T}{r} \cdot \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_T^2}{r} + u_z \cdot \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) =$$
$$= -\frac{\partial P}{\partial r} + \mu \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (r \cdot u_r) \right) + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 u_r}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial u_T}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} \right)$$

Tangencial

$$\rho \left(\frac{\partial u_{\theta}}{\partial t} + u_r \cdot \frac{\partial u_{\theta}}{\partial r} + \frac{u_{\theta}}{r} \cdot \frac{\partial u_{\theta}}{\partial \theta} + \frac{u_{\theta} \cdot u_r}{r} + u_z \cdot \frac{\partial u_{\theta}}{\partial z} \right) =$$
$$= -\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial P}{\partial \theta} + \mu \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (r \cdot u_{\theta}) \right) + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 u_{\theta}}{\partial \theta^2} + \frac{2}{r^2} \cdot \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 u_{\theta}}{\partial z^2} \right)$$

Axial

$$\rho \cdot \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \cdot \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_{\theta}}{r} \cdot \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \cdot \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) =$$
$$= -\frac{\partial P}{\partial z} + \rho \cdot g + \mu \cdot \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 u_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right)$$

Observe que as equações estão escritas para um problema tri-dimensional, pois o pacote computacional permite a resolução de problemas tridimensionais. O pacote computacional também possibilita que sejam resolvidas as equações da conservação de energia e reação química de maneira acoplada às equações descrita acima. Isto é necessário, pois as equações são interdependentes já que, por exemplo, a viscosidade depende da temperatura.

Esta possibilidade não foi explorada no presente trabalho, visto que este se atentou ao estudo dos fluxos dentro do tanque, entretanto uma sugestão para trabalhos futuros é a inserção das equações de energia e de um modelo de reação química para o estudo de uma reação de polimerização, visto que o tanque com agitador tipo âncora é comumente utilizado para tais reações.

Para que as equações possam simular as variações de viscosidade em função da reação química e da temperatura, da taxa de reação em função da temperatura e outras dependências existentes no sistema, é necessário que se obtenha os parâmetros dessas equações como, por exemplo, as constantes das reações envolvidas no processo.

3.3. Aspectos Geométricos

Geometrias Estudadas

Um aspecto importante da modelagem matemática, e certamente uma das etapas mais trabalhosas de ser implementada nos pacotes computacionais, é a criação do domínio computacional de cálculo, ou seja, o domínio de cálculo do modelo matemático que representa a geometria real.

No passado, os pacotes computacionais não tinham a capacidade de criar malhas computacionais que representassem geometrias complexas, como a deste caso, de maneira apropriada. Isto ocorria principalmente com os pacotes baseados no método dos volumes finitos que exigiam malhas estruturadas e não ofereciam a possibilidade de se usar coordenadas generalizadas. Em geral eram necessárias simplificações, o que implicava em uma fonte de erros, ou desvios do caso real. Os pacotes atuais, mesmo os baseados no MVF tem ferramentas mais poderosas que permitem, a princípio, que qualquer geometria tenha uma malha computacional criada sem qualquer simplificação.

Na figura a seguir, é apresentada uma geometria utilizada para simulações computacionais, através das estratégias de solução comentadas anteriormente. Deve-se observar que o domínio de cálculo é dividido em duas regiões. A região em cinza claro e o agitador constituem o bloco que é rotacionado. O bloco externo, em branco, representa o bloco estacionário.



Figura 12 - Geometria do tanque com agitador tipo âncora, onde foi gerada a malha computacional.

3.4. Propriedades Físicas

As propriedades físicas relevantes para o problema em estudo são a viscosidade e a densidade. As propriedades físicas podem variar em função da temperatura (viscosidade e densidade). No problema em estudo alguns fluidos possuem a viscosidade aparente dependente da tensão de cisalhamento, sendo fluidos não-Newtonianos pseudoplásticos. Esses aspectos devem ser considerados com cuidado para não implicarem em erros nas simulações computacionais. Também é necessário que dados precisos de viscosidade e densidade sejam obtidos para não implicar em erros de simulação.

3.5. Características do modelo - motivação ao uso do CFX

O modelo matemático obtido através da aplicação das equações de conservação, juntamente com as condições de contorno impostas pela geometria do problema, não possui resolução numérica analítica. Por isso torna-se necessário o uso de cálculo numérico. O sistema de equações algébricas resultantes do modelo matemático, por sua vez, é de dificil resolução, principalmente por serem equações acopladas. Seria possível a criação de um programa para a resolução do problema, entretanto esta etapa consumira um tempo maior do que o tempo deste estudo, e o objetivo deste estudo não é o entendimento do procedimento de cálculo, mas a interpretação detalhada dos fluxos gerados por sistemas agitados pelo impelidor tipo âncora. Portanto, para que o estudo fosse viável, escolheu-se uma ferramenta amplamente utilizada e já validada experimentalmente para problemas semelhantes, o CFX 4.4., o pacote computacional é bastante confiável e adequado para a resolução do modelo, motivo pelo qual foi utilizado. No caso deste estudo, a ferramenta computacional será utilizada com o intuito de se obter dados numéricos do modelo proposto no trabalho.

3.6. Condições de contorno - estratégias de resolução MRF e SG

Um tanque em uma dada condição operacional pode ser resolvido por mais de uma estratégia de resolução. Apesar de o problema físico ser o mesmo, as condições de contorno utilizadas para a resolução do sistema de equações diferenciais podem variar. Um dos aspectos deste trabalho é justamente estudar a influência das estratégias de resolução na precisão da resposta e no tempo necessário para a convergência numérica. As condições de contorno e estratégias de resolução estão comentadas em detalhes no capítulo sobre resolução do modelo matemático.

3.7. Comentário sobre o modelo

Um aspecto importante sobre o modelo matemático é que o mesmo possibilita a obtenção dos perfis de velocidade no interior do tanque, fundamental para se estudar a eficiência local do sistema agitado proposto neste estudo. Portanto, o modelo é adequado para a resolução do problema, estando em acordo também com os modelos encontrados em literatura.

4. RESOLUÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO

4.1. Introdução

A revisão detalhada da literatura sobre tanques agitados indicou que o problema permite diversas abordagens para a sua resolução. As estratégias adequadas para a resolução do problema deste projeto de pesquisa, através do pacote computacional CFX 4.4, são as seguintes: *Multiple Reference Frame* (MRF), a *Sliding Grid* (SG) e a *Single Rotating Frame of Reference* (SRFR).

As estratégias MRF e SG estão bem descritas na revisão bibliográfica e são aplicáveis a maioria dos os tanques agitados, inclusive os tanques com vários agitadores em eixos e com velocidades de agitação diferentes. O SG tem aplicação geral. Já a estratégia SRFR é aplicável a um número bastante restrito de problemas, entretanto é apropriada ao problema em estudo pelas seguintes razões:

1. O problema satisfaz as premissas de simetria em relação ao eixo axial e de localização centralizada e paralela do eixo do agitador em relação ao eixo axial do tanque;

2. A estratégia de single *rotating frame of reference* é a menos custosa em termos de tempo computacional, dentre as estratégias que são totalmente preditivas (não precisam de dados experimentais);

3. No caso em estudo, devido ao baixo número de Reynolds, não há a necessidade do uso de chicanas (*baffles*), fator que impossibilitaria o uso de single *rotating frame of reference*;

A estratégia já foi utilizada com sucesso, ou seja, os resultados obtidos foram validados por dados experimentais para outros sistemas semelhantes ao sistema em estudo
 [4] [39].

È oportuno ressaltar que é possível se utilizar uma estratégia descrita por Brucato et al (1998) como Impeller Boundary Condition (IBC) para a resolução do problema em estudo. A restrição do método IBC é a necessidade de se saber o perfil de velocidades próximo ao agitador, o que requer, em geral, dados experimentais. Como não se possuí tais dados experimentais para o problema em estudo, fica inviável a utilização deste método.

Definidas as estratégias de solução do problema, o primeiro passo é a criação da geometria do problema, dentro do pacote computacional utilizado, o CFX 4.4 (AEA Technology), através do módulo CFX BUILD 4.4. O pacote computacional possibilita que a geometria seja criada em escala real, ou seja, com quaisquer dimensões. O fato interessante é que, uma vez criada a geometria do problema, é simples se fazer o *scale-up* ou *scale-down* da geometria, visto que esta é uma opção pré-programada do pacote.

Um segundo passo, é a determinação das condições de contorno do problema. No pacote computacional algumas condições de contorno estão pré-programadas e são chamadas de *patches*, como por exemplo, um *patch wall* é uma "superficie" aonde não há fluxo de massa. Quando se deseja introduzir alguma condição de contorno que não está pré-programada no pacote, é necessário que se faça através do arquivo de comandos (fc) ou por uma rotina em Fortran.

Algumas condições de contorno e algumas hipóteses são comuns a todas as estratégias de resolução. Entre elas:

Parede do tanque: Na parede é usado o tratamento de não escorregamento.
 Como as velocidades no interior do tanque são reduzidas, as partículas de fluido em contato com as paredes possuem as mesmas velocidades das paredes.

2. Topo do tanque: essa região é uma superficie livre, porém devido às características do sistema em estudo (fluido altamente viscoso em regime de escoamento laminar) é totalmente aceitável a hipótese de considerar uma superficie plana, com tensores

nulos e velocidade axial nula. Edwards (1972), Abid (1994) e Nunhez (1994) usam essa hipótese em problemas semelhantes. No pacote computacional essa hipótese é introduzida tratando-se o topo do tanque como uma parede (*wall*), pois não há fluxo de massa através do topo do tanque, e com os tensores nulos.

3. As lâminas são modeladas como tendo espessura nula. As condições de contorno são impostas às faces dos volumes em "contato" com a lâmina. Como a espessura da lâmina é muito pequena, na prática, essa simplificação não implica em erros. Também é utilizado o princípio do não escorregamento.

Sobre a ação da força de *Coriolis*, importante para problemas de tanques agitados, é descrito na literatura que o pacote computacional leva os efeitos desta força em conta. Um aspecto interessante é que como o problema tem simetria em torno do eixo central (i.e. o sentido horário é idêntico ao sentido anti-horário), para efeitos de projeto, não fará diferença alguma se o tanque está no hemisfério norte ou no sul.

A técnica de SRFR (single rotating frame of reference) foi a primeira técnica utilizada para tanques de mistura. Ela é particularmente interessante visto ser a técnica que exige o menor tempo computacional. A técnica, na sua forma original, calcula o sistema como uma centrífuga (parede rodando) com um agitador parado no eixo central. Os resultados são então convertidos para um sistema de referência estacionário, onde a parede está estática e o agitador virando. Na verdade a técnica SRFR é pseudo estacionária, visto que o problema é calculado como uma centrífuga e não como um tanque de mistura. A técnica não funciona para o regime turbulento, visto que não é possível se colocar condições de turbulência para a parede móvel, quando na verdade a parede é fixa.

Entretanto, para tanques em regime laminar, como o deste projeto de pesquisa, isto é possível. A técnica não pode ser aplicada imediatamente neste projeto pois o pacote computacional CFX 4.4. não possui um algorítmo para converter os resultados do sistema rotacional para o estático. A alternativa sugerida para o problema pelo fabricante do pacote, para a utilização de um sistema de referência é simular todo o sistema girando e ao mesmo tempo colocar uma condição na parede de girar ao sentido contrário, de maneira que no sistema de referência estácionário a parede esteja com velocidade nula. Esta última alternativa foi implementada sem sucesso, obtendo-se um perfil de velocidades similar a um corpo rígido em rotação.

A estratégia de resolução MRF utiliza domínios de cálculos separados para a região externa e para a região interna que contém o agitador. A região interna é calculada em um sistema de referência que possui a velocidade angular do agitador, já a região externa é calculada em referência estacionária. A informação na fronteira pode ser transmitida de diferentes maneiras, como descrito no manual do *solver* CFX 4.4.

As interfaces entre regiões de diferentes referências rotacionais devem ser especificadas para o pacote computacional como sendo unmatched grid interfaces. As interfaces para referências rotacionais são tratadas como superficies unmatched comuns, o que significa que as interfaces entre os blocos não necessariamente coincidem, mas as faces podem deslisar (overlap). Duas modificações são possíveis para as superficies unmatched quando elas são rotacionais. Um dos tratamentos é chamado de frozen rotor, neste caso a topologia (malha) é assumida como sendo independente do tempo, apesar de não ser fisicamente real, pois na realidade as regiões possuem um movimento relativo entre si. Neste caso a modificação adicional é a permissividade do pacote para a existência de descontinuidades para velocidades e pressões na interface entre as referências, ao se interpolar de células ativas de uma referência para células para uma célula dummy na outra referência. Na aproximação circumferential averaged as conexões através da interface são assumidas como sendo baseadas na média de todas as conexões existentes durante uma revolução completa. Neste caso, além de permitir descontinuidades de velocidades e pressões entre as referências, a interpolação das células dummy precisam levar em conta o procedimento de valores médios. Outra complicação adicional na aproximação circumferential averaged é que, caso sejam empregadas coordenadas cartesianas, não são as componentes de velocidade nas direções do sistema de coordenadas que precisam ter seus valores médios estimados, mas sim os componentes das direções axial, radial e

azimutal, relativos às referências de cálculo rotativas. Isso ocasiona um acoplamento extra entre os componentes de velocidade cartesianos.

Deve-se observar que, independente da modificação empregada, a referência de cálculo do bloco interno possui velocidade angular, entretanto a malha computacional não depende do tempo, como acontece na estratégia de resolução SG.

Na estratégia de resolução *sliding grids* o bloco interno possui velocidade angular, com a malha dependente do tempo, ou seja, a malha é transiente. As malhas dos blocos interno e externo podem ser criadas isoladamente, sedo que a malha do bloco externo possui referência estática e a malha do bloco interno é referenciada em relação à velocidade angular do agitador. As equações do sub-domínio que possui velocidade angular são formalmente escritas com referência ao laboratório e a malha é que gira. Entretanto a rotação da malha dá origem a termos de aceleração totalmente equivalentes às forças que surgem do uso de referencias não inerciais. O algoritmo de *sliding grids* leva em conta o movimento relativo entre os sub-domínios e faz as interpolações necessárias (Brucato et al 1998).

O fato da estratégia de *sliding grids* utilizar uma malha transiente obriga que o problema seja resolvido como um problema transiente, ao passo que a estratégia de MRF possibilita que o problema seja resolvido como se fosse um problema estacionário. Deve-se observar que, devido à ausência de chicanas, que a geometria do problema é totalmente igual para qualquer posição da pá. Isso dá a noção que os perfis de velocidade no plano que contém a pá, assim como em qualquer outro plano referenciado a pá, de fato não mudam com o tempo, sendo a velocidade da pá constante.

4.2. Método dos volumes finitos (MVF)

O método dos volumes finitos é um método numérico para resolução de modelos matemáticos diferenciais baseados nas equações que descrevem um dado fenômeno físico. Para os problemas da dinâmica dos fluidos, o método se torna apropriado, pois é capaz de

resolver o sistema de equações diferenciais obtidos pela modelagem matemática.

Este método preditivo tem a vantagem de não precisar de um modelo físico, ou seja, de dados experimentais. Essa característica gera uma das principais vantagens do método que é o baixo custo para a obtenção dos dados de projeto, já que investigações experimentais se tornam custosas.

No caso de tanques de mistura, um experimento computacional, apesar do custo dos equipamentos necessários, tem um custo baixo quando comparado aos custos laboratoriais. Além disso, um estudo computacional tem a vantagem de ser bastante rápido, principalmente quando são necessários testes para diferentes condições de operação.

Os resultados computacionais obtidos pelo método dos volumes finitos geram informações detalhadas das propriedades físicas do fenômeno, possuindo também a capacidade de simular situações ideais ou condições operacionais que implicariam em risco operacional.

A principal desvantagem da utilização do método numérico é o cuidado necessário para que o modelo matemático seja realmente condizente com a realidade. Para alguns problemas, a modelagem matemática apresenta uma descrição bastante precisa do fenômeno físico, como por exemplo, condução de calor e fluxos laminares. Entretanto, para alguns problemas, como fluxos turbulentos complexos, os modelos matemáticos não fornecem uma descrição precisa do modelo.

As equações diferenciais, que representam os fenômenos físicos, precisam primeiro ser discretizadas, para que, posteriormente, possam ser resolvidas por cálculo numérico. Há várias formas de se discretizar as equações diferenciais, entre elas: série de Taylor, método dos resíduos ponderados e formulação do volume de controle. A formulação dos volumes de controle tem o seguinte princípio: o domínio de cálculo é dividido em vários volumes de controle, tendo cada volume um ponto em seu interior. A equação diferencial é então integrada de uma forma linearizada em cada volume de controle. Os valores dos pontos discretos, que expressam as variações das propriedades físicas são usados para os cálculos das integrais que descrevem o problema. O resultado é a obtenção das propriedades físicas para cada volume da malha computacional.

As equações de discretização obtidas desta maneira expressam a conservação das propriedades físicas, massa, momento linear ou calor, para um volume controle de controle finito, ao contrário das equações diferenciais que expressam a conservação para um número infinito de volumes. A característica mais interessante da formulação de volumes de controle é, portanto, que a solução do sistema resultante implica que as leis de conservação são obedecidas para qualquer grupo de volumes de controle, e conseqüentemente, para todo o domínio, desde que funções de interpolação sejam aplicadas aos termos de derivadas de primeira ordem. O método dos volumes finitos garante a conservação da massa e energia em cada um dos seus volumes.

O método dos elementos finitos e a maioria dos métodos de resíduos ponderados a variação da propriedade física é baseada nos pontos da malha e nas funções de interpolação (ou perfis) entre os pontos da malha, que são utilizadas como solução aproximada.

No método das diferenças finitas somente os valores da propriedade física são considerados para a solução, sem nenhuma referência explícita de como a propriedade varia entre os pontos da malha. Isso requer experimentos laboratoriais para descrever como a propriedade varia em alguns pontos do domínio.

A aplicação do método dos volumes finitos para problemas com duas ou três dimensões, leva à geração de um sistema de matrizes com coeficientes para o cálculo das propriedades físicas. São necessários algoritmos para a resolução dessas matrizes, entre os mais utilizados estão o Gauss-Seidel e o *Tridiagonal Matrix Algorithm* (TDMA). Nessas

soluções iterativas é muitas vezes interessante aumentar ou diminuir a velocidade com que as mudanças ocorrem entre as iterações. Esse processo é chamado de sobre-relaxação ou sub-relaxação.

A formulação preliminar do método calcula os valores das propriedades na fronteira ϕ_e como sendo a média entre o valor no ponto vizinho ϕ_E e o valor no ponto ϕ_P . Essa formulação para alguns casos levava a resultados irreais, portanto foi criado o esquema *upwind* que teve os valores da fronteira ou interface definidos da seguinte forma:

- O valor da propriedade ϕ na interface é igual ao valor de ϕ no ponto da malha do lado *upwind* da face (fronteira).

O lado *upwind* da face refere-se ao lado em que o fluxo F (ou a convecção dependendo da propriedade física) está vindo. A idéia de *upwind*, que pode ser traduzido como levado pelo vento, significa que o valor na fronteira tem o valor do ponto anterior, para uma dada direção do fluxo.

Matematicamente, portanto, o esquema é definido da seguinte forma:

$\phi_e = \phi_P$	caso $F_e > 0$	
$\phi_e = \phi_E$	caso $F_e < 0$.	

Vários outros esquemas para o valor nas fronteiras do volume de controle foram criados e implementados. Entre os pré-programados no CFX 4.4., além do *upwind*, temos os seguintes esquemas: *hybrid, higher upwind, quick, central, condif, ccct, min-mod,* Van Leer e *superbee*. A escolha do esquema apropriado para o tratamento da convecção é um fator importante para a qualidade e rapidez da convergência do problema estudado. Para o objeto deste trabalho, estudos preliminares sugerem que o *upwind* é adequado para o caso específico de tanques agitados. Nas publicações da AEA Technology, distribuidora deste pacote computacional, é sugerido também o uso do *higher-upwind*. Devido as essas

informações bibliográficas, não foram realizados testes para outros esquemas.

O esquema *high-upwind* ou *Higher-order upwind differencing* (HUM) é o esquema *upwind* com ordem dois de precisão, através da extrapolação de uma face por dois pontos *upwind*.

Outro fator importante para a resolução de problemas a partir do método dos volumes finitos é o acoplamento pressão-velocidade. Os componentes de velocidade e a temperatura em cada ponto estão descritas pelas equações de conservação de momento linear e energia, entretanto o cálculo da pressão depende do escoamento ser compressível ou não. Em relação ao acoplamento de pressão-velocidade, tratam-se como fluidos compressíveis apenas aqueles em que a densidade varia fortemente com a variação de pressão.

Neste estudo não ocorre uma variação apreciável da densidade em função da variação de pressão, por se tratar de um líquido. Portanto, o escoamento é tratado como sendo incompressível. Mais uma vez, através da revisão bibliográfica, percebe-se que o pacote computacional possui uma variedade de opções (SIMPLE, SIMPLEC, PRIME), sendo utilizada para problemas semelhantes o método SIMPLEC. A escolha apropriada do acoplamento pressão-velocidade tem influência, principalmente, na rapidez da convergência do problema.

Um último fator importante para a convergência da solução é o método utilizado para a resolução das equações de transporte linearizadas, os métodos disponíveis no pacote computacional são: *Line Solver, Stone, Block Stone*, ICCG, AMG e *General* AMG. Para o problema em estudo é sugerida, em resoluções anteriores, a utilização do método AMG.

4.3. Método utilizado pelo pacote computacional

O pacote computacional utilizado para a elaboração deste trabalho é baseado no

método dos volumes finitos (MVF). As etapas de discretização das equações de conservação são realizadas pelo pacote computacional, ou seja, estão pré-programadas sem acesso por parte do usuário.



Figura 13 - Discretização cartesiana (a) e coincidente com a fronteira (b) [36]

O pacote faz uso de coordenadas generalizadas. As coordenadas generalizadas permitem que uma malha estruturada seja criada em geometrias complexas, o que não seria possível caso fosse utilizado o sistema cartesiano. A criação de uma malha estruturada, onde cada volume interno tem sempre o mesmo número de vizinhos, é um requisito do pacote computacional utilizado.

Depois de criada a malha computacional em um pacote de pré-processamento, como, por exemplo, o CFX – BUILD 4.4., incluído no pacote computacional, é necessário que seja criado um arquivo de comando para a resolução através do pacote computacional CFX 4.4. Solver. A etapa da criação da malha é muitas vezes a etapa mais trabalhosa da simulação computacional de um problema.

É necessário descrever a fronteira entre o bloco estacionário e o bloco com velocidade angular, como sendo superfícies *unmatched* que são coincidentes, pois isso não pode ser feito no pré-processsador. O fato de serem superfícies *unmatched* significa que os elementos podem ter faces não coincidentes com os elementos no outro bloco, entretanto as áreas totais das superfícies devem ser iguais.

Finalmente, o pacote computacional possui um pós-processador através do qual são gerados gráficos representando os resultados numéricos obtidos. O pós-processador utilizado no atual trabalho é o CFX-VISUALISE 4.4..

5. RESULTADOS

5.1. Introdução

Os resultados aqui apresentados foram obtidos através do pacote computacional CFX 4.4.. O computador utilizado foi um Intel Pentium III de 700 MHz com 256 MB de memória ram que mais tarde foi aumentada para 768 MB. A placa de vídeo de 16 MB mostrou-se suficiente, entretanto é recomendável a utilização de uma placa de pelo menos 32 MB para geometrias complexas, pois o pré e o pós-processamento requerem um processador gráfico razoavelmente poderoso para geometrias complexas ou com um número elevado de elementos. As simulações demoram cerca de 20 horas para a obtenção dos resultados, dependendo do número de elementos, do critério de convergência adotado e do esquema de resolução empregado.

A tabela 1 apresenta de maneira resumida os dados das simulações onde os resultados estão apresentados nos itens 5.2 a 5.6. Caso os dados das simulações difiram dos dados da tabela, estes estão descritos apropriadamente.

Resumo das simulações realizadas e detalhes do tanque simulado (5.2 a 5.6)				
Análise do número de blocos (5.2)	14 blocos, 317 rpm, 45 kg.m ⁻¹ .s ⁻¹	52 blocos, 317 rpm, 45 kg.m ⁻¹ .s ⁻¹		
Análise de independência da malha (5.3)	56.250 volumes de controle 317 rpm, 45 kg.m ⁻¹ .s ⁻¹ ,	102.000 volumes de controle 317 rpm, 45 kg.m ⁻¹ .s ⁻¹ ,	199.656 volumes de controle 317 rpm, 45 kg.m ⁻¹ .s ⁻¹ ,	
Comparação entre as estratégias de resolução (5.4)	MRF, 317 rpm, 45 kg.m ⁻¹ .s ⁻¹	SG, 317 rpm, 45 kg.m ⁻¹ .s ⁻¹		
Análise da variação de Re (5.5)	Reynols: 532, 266, 213, 177 e 133, 317 rpm	Viscosidades: 15, 30, 37,5, 45 e 60 kg.m ⁻¹ .s ⁻¹		
Análise da característica reológica (5.6)	Consistência: 45 kg.m ⁻¹ .s ⁻¹	Índices de potência: 0,375, 0,75 e 0,875		
Dados complementares (todas as simulações)	Densidade: 1320 kg/m ³	Altura do tanque: 1.65m	Diâmetro do tanque: 1.12m	

Tabela 1 – Resumo das simulações realizadas

5.2. Análise do efeito do número de blocos

Um aspecto interessante do pacote computacional utilizado é a capacidade de se trabalhar com vários blocos. Essa característica é necessária para a simulação de tanques agitados quando se utiliza a estratégia de MRF ou a SG. O ideal seria criar geometrias com o menor número de blocos possível, visto que o algoritmo do pacote resolve os blocos separadamente e depois passa as informações de um bloco para outro. Entretanto, para geometrias mais complexas é muitas vezes impossível a criação da malha computacional que represente a geometria física do problema em um único bloco.

Neste ponto, é oportuno comentar que o pacote computacional CFX BUILD 4.4. exige que se crie um número elevado de blocos para geometrias complexas. O BUILD 4.4. exige que os blocos vizinhos tenham faces coincidentes, que um patch seja definido em uma face de um bloco e, principalmente, tem uma capacidade limitada de juntar blocos.

Para definir a geometria de problemas altamente complexos, como o tanque com pás tubulares, fica extremamente difícil a criação de uma malha estruturada no BUILD 4.4.. Para a criação de tais geometrias é necessário o uso de pacotes de pré-processamento mais complexos, como o CFX-HEXA, que trabalha com uma filosofia de criação de malha diferente do BUILD.

Foram realizadas simulações utilizando duas geometrias criadas dentro do pacote de pré-processamento do CFX 4.4 BUILD para análise. A idéia de se usar uma geometria com mais blocos figura 14 (a) se baseia no fato de idealmente a malha não possuir volumes nem se quer remotamente pontiagudos (todos deveriam idealmente ser formados por ângulos de 90° entre todas as faces), ao passo que a geometria com menos blocos figura 14 (b) se baseia no fato que com menos blocos é mais fácil criar um fundo curvo (utilizando uma única função de alisamento de curva) e que há menos esforço computacional para resolver um número menor de blocos.

A figura 14 mostra a metade da seção axial do tanque que contém a pá do agitador.



Figura 14 – Vetores velocidade no plano do tanque que contém o agitador (a) Geometria com mais blocos e (b) Geometria com menos blocos

É possível se observar que a geometria com mais blocos (total 52 blocos) e a geometria com menos blocos (total de 14 blocos) forneceram resultados bastante coerentes entre si. A geometria da figura 14 (a) mostra uma maior "densidade" de vetores velocidade, pois além de possuir mais blocos, possui um número maior de volumes de controle no corte axial. As velocidades calculadas em ambas simulações foram bastante coerentes, o que sugere que a geometria (a) tem um número de blocos maior do que o necessário para o cálculo preciso das velocidades. Adicionalmente, a figura 14 (b) é mais próxima a um tanque real, por utilizar *splines* para a representação das pás e da parede do tanque.

Ambas as simulações foram realizadas com a estratégia MRF, com um fluido de mesma viscosidade e densidade. As condições de contorno para as paredes do tanque e para o topo do tanque (tensores nulos) também foram idênticas para ambas as simulações.

A figura 15 mostra os vetores velocidade para uma seção axial localizada exatamente entre as lâminas do agitador.



Figura 15 – Vetores velocidade no plano do tanque distante do agitador (a) Geometria com mais blocos e (b) Geometria com menos blocos

É possível se observar que as geometrias forneceram, mais uma vez, resultados bastante coerentes. As velocidades calculadas em ambas simulações foram bastante semelhantes, e a zona de recirculação se encontra exatamente no mesmo lugar.

A figura 16 mostra o fluxo primário em um plano horizontal próximo á extremidade da pá do agitador. Observe que as velocidades tangenciais são semelhantes para ambos as simulações e que, nesse corte, a malha criada para a geometria com menos blocos é mais "refinada" que a malha criada para a geometria com mais blocos, ou seja possui um número maior de volumes de controle neste corte.



Figura 16 – Vetores velocidade no plano horizontal do tanque próximo a extremidade do agitador (a) Geometria com mais blocos e (b) Geometria com menos blocos

5.3. Análise de Grid Independency

Como a estratégia de se utilizar um número menor de blocos mostrou-se mais vantajosa por reproduzir a geometria mais fielmente e apresentar resultados coerentes, com um menor custo computacional, o próximo passo é se determinar um número apropriado de volumes de controle. O número apropriado de volumes é obtido levando-se em conta o custo-benefício, visto que aumentar o número de elementos aumenta o tempo de resolução (custo), entretanto fornece respostas, a princípio, mais precisas (benefício).

Um dos recursos utilizados, em tanques agitados, para minimizar o número de volumes de controle é se simular apenas uma parte do tanque (1/2, 1/3, 1/4 ou 1/6), por simplificação, devido a simetria do problema. Entretanto, este recurso não foi utilizado, pois devido ao tempo das simulações não ter sido demasiadamente longo, optou-se por simular o tanque todo. No caso da técnica de *Sliding Grid* não é tão vantajoso se modelar metade do tanque, visto que o eixo rotacional precisa ser totalmente construído e, para o caso do impelidor tipo âncora, o bloco rotacional ocupa praticamente todo o tanque.

O mesmo raciocínio foi aplicado a escolha da malha utilizada nas simulações. Pois uma malha mais "fina" garante a maior precisão nos cálculos e ao mesmo tempo possibilita uma visualização mais detalhada dos resultados. Para mostrar a influência do número de volumes na malha, são mostradas as figuras 17, 18 e 19.



Figura 17 – Vetores velocidade no plano que contém o agitador (a) 56250 volumes de controle (b) 102000 volumes de controle (c) 199656 volumes de controle

As figuras 17, 18 e 19 mostram que os resultados são muito próximos para as três malhas computacionais. Entretanto, devido ao alto desempenho das máquinas atuais, a escolha da malha mais refinada para cálculo se justifica, ao garantir maior precisão de cálculo e uma análise mais detalhada dos resultados.



Figura 18 – Vetores velocidade no plano distante do agitador (a) 56250 volumes de controle (b) 102000 volumes de controle (c) 199656 volumes de controle



Figura 19 – Vetores velocidade no plano horizontal próximo a extremidade do agitador (a) 56250 volumes de controle (b) 102000 volumes de controle (c) 199656 volumes de controle



Figura 20 – Gráfico de velocidade ao longo de uma reta próxima a extremidade do agitador, curva vermelha - 56250 volumes de controle, curva verde -102000 volumes de controle.

A figura 20 mostra um gráfico com valores da velocidade ao longo de uma reta, para duas malhas diferentes. Deve-se notar que os valores são muito próximos. O gráfico, mais uma vez, mostra que os valores de velocidade obtidos pelas três malhas são muito parecidos. Para a malha de 199656 volumes de controle a curva se sobrepõe a curva de 102000, motivo pelo qual ela não faz parte do gráfico.

5.4. Comparação entre as estratégias de resolução: MRF e SG

Foram realizadas simulações utilizando as duas estratégias mais comumente empregadas no estudo de tanques agitados, e os resultados obtidos são mostrados na figuras 21, 22 e 23. Foram realizadas tentativas de resolver o problema utilizando a estratégia de SRFR, entretanto não foram obtidos resultados fisicamente realistas. Ao se utilizar SRFR foi obtido um perfil de velocidades idêntico ao de um sólido rígido em rotação, com as velocidades tangenciais proporcionais à distância do eixo central.

As figuras 21 (a) e (b) mostram comportamento muito próximo para o fluxo secundário. A diferença principal é que as velocidades no agitador não estão representadas no gráfico para MRF.

Ambas as simulações foram realizadas com o CFX 4.4, com um fluido de mesma viscosidade e densidade. As condições de contorno para as paredes do tanque e para o topo do tanque (tensores nulos) também foram idênticas para ambas as simulações.



Figura 21 - Vetores velocidade no plano axial do tanque que contém o agitador (a) MRF e (b) Sliding mesh

É oportuno citar que o CFX 4.4 possui a estratégia de solução por *Multi-frame of Reference* já prevista, ao contrário do que ocorria com as versões anteriores do pacote computacional. A estratégia também é conhecida como *Multiple Reference Frame* (MRF), pois foi primeiramente apresentada no pacote da Fluent Inc., que utiliza essa nomenclatura para a estratégia de resolução. Vários artigos fazem referência à esta estratégia chamando-a MRF.



Figura 22 - Vetores velocidade no plano axial do tanque mais distante do agitador (a) MRF e (b) Sliding mesh

As figuras 22 (a) e (b) mostram que o fluxo secundário no plano mais distante do agitador (perpendicular ao plano mostrado na figura 21) é claramente similar para ambas estratégias de solução. É possível se observar a formação de uma zona de recirculação localizada próxima ao ponto central do gráfico em ambas figuras.

As figuras 23 (a) e (b) mostram que há diferenças no cálculo do fluxo primário, localizado nas proximidades da pá do impelidor. Os cálculos realizados por MRF indicam velocidades tangenciais maiores que as calculadas por *sliding mesh*. Adicionalmente, o MRF mostra as velocidades tangenciais na ponta da pá do impelidor como sendo tangencial, enquanto que a técnica *sliding mesh* indica um ângulo um pouco superior à 90°. Este resultado não totalmente tangencial é também observado nas simulações de outros tipos de impelidores. Isto provavelmente é devido ao fato da lâmina da pá do impelidor

estar muito próxima à parede do tanque, o que proporciona a passagem de fluxo lateral do bloco rotacional para o estático, o que por sua vez é indesejável na técnica MRF.



Figura 23 - Vetores velocidade em plano horizontal localizado próximo a ponta do agitador (a) MRF e (b) Sliding mesh

5.5. Análise dos efeitos da variação do número de Reynolds

5.5.1. Variação da viscosidade

Foram realizadas simulações variando-se a viscosidade do fluido e mantendo-se a densidade, a velocidade do agitador, a geometria e as demais características do fluido e condições de contorno constantes.

A variação da viscosidade implica em uma variação proporcional (ou inversamente proporcional) do número de Reynolds para tanques agitados (R_e) do escoamento. Para o sistema em questão, o R_e é dado pela equação .

$$R_e = \frac{D^2 N \rho}{\mu}$$
equação 5.1

Sendo:
$$D = diâmetro do agitador (m)$$

 $N = velocidade rotacional (rotações por segundo - s-1)$
 $\mu = viscosidade (Pa.s = kg.m-1.s-1)$
 $\rho = densidade do fluido (kg.m-3)$

As figuras 24, 25 e 26 e são referentes as variações de viscosidade (15, 30, 37,5 45 e 60 kg.m⁻¹.s⁻¹), o diâmetro do agitador é 1,07m.



Figura 24 – Vetores velocidade no plano do tanque que contém o agitador (a) R_e =532 (b) R_e =266 (c) R_e =213



Figura 25 – Vetores veloc. no plano distante do agitador (a) R_e =532 (b) R_e =266 (c) R_e =213 (d) R_e =177 (e) R_e =133



Figura 26 – Vetores velocidade. em plano próximo a extremidade do agitador (a) R_e =532 (b) R_e =266 (c) R_e =213

(d) $R_e=177$ (e) $R_e=133$

As figuras 24, 25 e 26 mostram comportamentos parecidos para os N_{Re} estudados. Isso pode ser explicado pelo fato da faixa de estudo ser pequena. A maior variação de um escoamento para outro será a potência consumida para manter a velocidade angular, que é igual para todos os casos.

$$N_p = \frac{P}{\rho N^3 D^5}$$
 equação 5.2

 $N_p = K (N_{\rm Re})^{-1} \qquad \text{equação 5.3}$

Sendo N_p o número de potência do escoamento, P a potência consumida e K uma constante de proporcionalidade (válida para escoamentos laminares).

Matematicamente, o fenômeno pode ser entendido partindo-se das equações 5.1, 5.2 e 5.3, para se obter a relação 4, onde a potência consumida é diretamente proporcional a viscosidade, para a mesma velocidade angular.

$$P = K\mu N^2 D^3 \qquad \text{equação 5.4}$$

5.5.2. Variação da velocidade de agitação

Foram realizadas simulações variando-se a velocidade de agitação e mantendo-se a densidade, a viscosidade, a geometria e as demais características do fluido e condições de contorno constantes.

A variação da velocidade de agitação implica em uma variação diretamente proporcional do número de Reynolds para tanques agitados (N_{Re}) do escoamento. Para o sistema em questão, o N_{Re} é dado pela equação 5.1. A equação 5.4 mostra que a potencia consumida pelo sistema é proporcional ao quadrado da velocidade de agitação, portanto, aumentar a velocidade de agitação para melhorar a mistura, em geral, é muito custoso em termos de custos energéticos para realizar a mistura no interior do vaso.

5.6. Análise do escoamento de fluidos pseudoplásticos

Foram realizadas simulações variando-se o número de potência do fluido e mantendo-se a consistência do fluido, a velocidade do agitador e as demais características do fluido e condições de contorno constantes.

Modelo Power Law:
$$\mu = K_N \gamma^{n-1}$$
 equação 5.5

Sendo, K_N a consistência, n o número de potência (*power index*) e γ a tensão de cisalhamento. Para fluidos que são representados pelo modelo *power law*:

Se n < 1 fluido pseudoplástico Se n = 1 fluido Newtoniano Se n > 1 fluido dilatante

A variação do número de potência implica em uma viscosidade local mais ou menos dependente da tensão de cisalhamento. O efeito global no tanque será uma percepção de maior ou menor alteração na viscosidade total aparente em função do número de potência do fluido. Mais modelos de fluidos presentes no CFX 4.4 estão citados na revisão bibliográfica.



Figura 27 - Valores de viscosidade ao longo de um corte no plano que contém o agitador (kg.m⁻¹.s⁻¹)

A figura 27 mostra a variação da viscosidade ao longo do reator. É observado que a viscosidade em nenhum ponto chega a ser igual a consistência, pois não há nenhum ponto no vaso com velocidade nula (e conseqüentemente sem tensão de cisalhamento). É possível se observar também que a viscosidade atinge seu valor mínimo na região entre a pá e a parede do tanque, pois essa é a região onde existem as maiores tensões de cisalhamento.

A comparação de vários índices de potência, figura 28, permite observar que, quanto maior o índice de potência, maiores as velocidades próximas ao agitador. Assim a mistura é favorecida. Esse fato se deve à diminuição das viscosidades em função do fluido pseudoplástico. A diminuição da viscosidade (com conseqüente aumento de velocidade) será maior quanto maior for o índice de potência (n).


Figura 28 – Vetores velocidade em um corte distante plano que contém o agitador (a) n=0.375 (b) n=0.75 (c) n=0.875

Um aspecto interessante e importante de ser ressaltado é que, para os fluidos pseudoplásticos, qualquer aumento na velocidade de agitação, aumenta a tensão no fluido em contato com a pá que se torna pouco viscoso. Com isso, a transmissão da tensão através do seio do líquido pode ser prejudicada. Sendo assim, o efeito do aumento da velocidade de agitação pode ter efeitos negativos para a mistura no interior do tanque, especialmente onde as velocidades do fluido forem baixas.

5.7. Geometrias de casos reais

A figura 11 mostra uma geometria de um agitador tipo âncora modificado, com pás tipo cantoneiras. Este agitador foi substituído em um tanque utilizado para homogeneizar suco de laranja com um sistema descentralizado com três agitadores de pás retas inclinadas a 45°.

O objetivo das simulações é a visualização dos fluxos no interior do tanque, para o entendimento dos motivos pelo qual a mistura é mais rápida e o sistema gasta menos energia. Para o caso da pá com cantoneiras, a geometria foi criada rodado-se cinco graus, e criando nas faces adjacentes ao desenho da âncora original paredes, que possuem dimensões muito próximas às reais.

A geometria representativa dos agitadores descentralizados foi criada também de maneira bastante fiel à geometria real, sendo que o eixo deslocado causou a necessidade de se criar mais blocos, para evitar que a malha ficasse distorcida, o que é extremamente ruim para a resolução numérica do problema.



Figura 29 - Esquema de blocos para a geometria com o eixo descentralizado - vista superior

As simulações forneceram resultados bastante esclarecedores dos fluxos que ocorrem no interior dos dois sistemas. As figuras 30, 31 e 32 mostram vetores velocidade no interior destes tanques.



Figura 30 - Vetores de velocidade em um plano no centro do tanque (a) âncora e (b) decentralizado

Na figura 30 é possível se observar que o agitador tipo âncora gera um fluxo tipicamente tangencial, característica que pode ser atribuída também ao sistema descentralizado, entretanto, neste último observa-se uma região de recirculação próxima aos agitadores que tem uma contribuição importante para a mistura.

As velocidades mostradas para o agitador tipo âncora são maiores que as velocidades no sistema com os agitadores descentralizados. Entretanto há dois aspectos importantes a se ressaltar:

 i) As velocidades maiores no sistema com agitador tipo âncora são efeito direto do seu grande diâmetro, visto que a velocidade de rotação do eixo é menor (30 rpm vs. 43 rpm do eixo descentralizado),

ii) Os maiores valores absolutos de velocidade não são determinantes para a mistura, visto que a figura deixa claro que essas velocidades para o sistema com o

agitador tipo âncora possuem componentes quase que totalmente tangenciais, o fluido possui um aspecto semelhante ao rodar de um corpo sólido, sendo as velocidades proporcionais ao raio. Essa rotação sólida não gera mistura e pode ser fruto da alta viscosidade do sistema (60.000 cP).

	8PEED
	2.815E+00
	2 6745-00
	LINITLIV
	2.534E+00
	2.393E+00
	2 2578+00
	2.2480.00
	2.111E+00
	1.970E+00
	1 8305-00
ang da 2 10 3 k 1 k // 1000 4000 min an	1.689E+00
where the first part of the second	1,548E+00
	1.407E+00
and a set of the set o	
	1.267E+00
aufleten al M. An antiperprovedance and and and and and and an and an an an and an and an	1.126E+00
	9.854E-01
ματοποία έτα το πο ^{τη} τ ^τ α που που τομίτα _μ μ	8.446E-01
	7.038E-01
	5.631E-01
designed a second secon	4 646P 61
niminus - ZTTZZZZ	4.223E-01
WINNING LALE I STORE THE STORE STORE STORE	2.815E-01
	1.407E-01
	0.000E+00

Figura 31 - Vetores de velocidade no plano axial com o impelidor tipo âncora

Na figura 31 é possível se observar que o agitador tipo âncora, no caso com *crossarms*, gera duas zonas de recirculação. Entretanto no restante do tanque há pouco movimento de cima para baixo do fluído. Essas zonas de recirculação têm uma influência restrita às proximidades do agitador, como indica a figura.

Os resultados obtidos neste conjunto de simulações indicam que o agitador tipo âncora realmente possui um fluxo secundário (velocidades axiais e radiais) precário e que o fluxo primário (velocidades tangenciais) realmente contribuem pouco para a mistura. O grande diâmetro do agitador e sua proximidade das paredes do tanque são seguramente os motivos do grande consumo de energia desses sistemas.

A figura 32 nos permite visualizar os fluxos axial e radial no interior do tanque com o eixo descentralizado. Apesar do fluxo possuir características tangenciais importantes como o observado na figura (30), observa-se também que há componentes axiais e radiais mais importantes, além de zonas de recirculação próximas aos agitadores que contribuem para a mistura. O sistema descentralizado possui um gasto de energia grande, quando comparado a sistemas com eixo centralizado, entretanto o consumo é pequeno quando comparado ao do sistema com agitador tipo âncora.

Sistema	Rpm	Potência Calculada / kW		
Âncora	30	33,5		
Descentralizado	43	4,55		

Foram feitas simulações do consumo de energia nos dois sistemas e os seguintes resultados foram obtidos:

Tabela 2 – Consumo de energia dos sistemas



Figura 32 - Vetores de velocidade no plano axial com os agitadores descentralizados

Os resultados do consumo de energia para os tanques estudados mostram que é importante um projeto cuidadoso dos sistemas de agitação, que um consumo alto de energia não necessariamente significa melhor mistura e que a CFD pode contribuir para projetos e otimizações de sistemas de agitação. Neste caso, ambos os sistemas eram apropriados, mas o conjunto com três impelidores se mostrou mais eficiente e mais econômico

5.8. Geometrias da literatura - validação dos resultados numéricos

Os resultados numéricos são confiáveis, especialmente pelo grande cuidado tomado nas modelagens deste trabalho. Entretanto, como foram feitas algumas hipóteses, como espessura nula da pá e superficie plana do fluido, podem ocorrer desvios do caso real. Para provar que estas hipóteses não possuem efeito significativo e que os procedimentos de cálculo adotados são válidos e estão corretamente empregados, foram realizadas simulações com um tanque com agitador tipo âncora descrito na literatura.

Características do tanque utilizado nas simulações para o cálculo do número de potência:

Diâmetro do tanque (D _T):	24 in.
Altura do líquido / D _T :	1.22
Altura da pá / D _T :	0.89
Distância entre o tanque e a pá (clearance)/ D _T :	0.02
Largura da pá / D _T :	0.128

Diversas simulações (uma para cada número de Reynolds) forneceram os dados utilizados para a criação da curva do número de potência (Np) versus o número de Reynolds (Ne), parâmetros bastante utilizados no projeto e no estudo de tanques agitados. O número de potência é um adimensional e, para escoamentos turbulentos, é calculado dividindo-se a potência consumida pelo produto da densidade, cubo da velocidade de rotação e diâmetro do impelidor elevado à quinta potência., para escoamentos laminares ele é proporcional ao inverso do número de Reynolds.



Figura 33 - Gráfico de Número de Potência vs. Número de Reynolds

Os valores calculados são concordantes com os valores presentes na literatura, sendo que a curva criada (figura 33) possui valores muito próximos aos obtidos experimentalmente (losangulos pretos) [46]. A curva 33 foi criada a partir dos valores da tabela 3.

Simulação	RPM	Densidade	Viscosidade	Reynolds	Número de Potência
1	120	1320	452,0707	2	6,7676E+01
2	120	1320	301,3804	3	4,5907E+01
3	120	1320	226,0353	4	3,5072E+01
4	120	1320	180,8283	5	2,8605E+01
5	120	1320	150,6902	6	2,4334E+01
6	120	1320	129,1630	7	2,1310E+01
7	120	1320	90,4141	10	1,5947E+01
8	120	1320	45,2071	20	1,0053E+01
9	120	1320	30,1380	30	8,0370E+00
10	120	1320	22,6035	40	6,9946E+00
11	120	1320	18,0828	50	6,3589E+00
12	120	1320	15,0690	60	5,9413E+00
13	120	1320	12,9163	70	5,6437E+00
14	120	1320	11,3018	80	5,4252E+00
15	120	1320	10,0460	90	5,2585E+00
16	120	1320	9,0414	100	5,1280E+00

Tabela 3 – Dados obtidos nas simulações com a geometria da literatura.

6. ANÁLISE DOS RESULTADOS

6.1. Aspectos gerais

Os resultados obtidos nas simulações numéricas estão de acordo com os dados experimentais e computacionais da literatura e com os resultados esperados pelos pesquisadores. É importante ressaltar que as simulações forneceram resultados corretos numericamente.

Ainda mais, as simulações com diferentes números de blocos para a mesma geometria, com diferentes números de volumes de controle e, principalmente, com diferentes estratégias de resolução (MRF e SG) forneceram resultados coerentes entre si, um indício adicional que os resultados são coerentes bastante confiáveis, pois são pouco sensíveis à esses parâmetros.

6.2. Análise dos resultados (5.2. a 5.7)

Os resultados para um número menor de blocos (14) indicam que é vantajoso se utilizar um número pequeno de blocos, mesmo quando são criados alguns poucos volumes com ângulos mais agudos ou obtusos. Já que não foram observados erros devido a esses volumes e o tempo de resolução diminuiu. Os *softwares* de geração de malha mais modernos, como o CFX-HEXA, possuem a capacidade de ordenar os elementos de forma a gerar um número ainda menor de blocos, sem perda da qualidade da malha, ou seja, sem que seja necessário que a malha possua elementos com ângulos menores do que 30° ou maiores do que 150°.

A análise de *grid independency* é extremamente importante, principalmente na ausência de dados experimentais, pois permite encontrar um número de apropriado de volumes de controle para a malha. É sabido que um número muito pequeno de volumes pode não capturar fielmente os fenômenos físicos e um número muito grande faz com que o problema demore muito para convergir.

As simulações utilizando as técnicas de resolução MRF e SG foram quase sempre concordantes, pois forneceram resultados semelhantes entre si. Isso é mais um indício de fidedignidade de resultados. Para o problema em questão o método SG mostra-se mais apropriado, tendo sido mais utilizado nas simulações deste trabalho.

Na verdade, como o vaso não possui chicanas, o perfil de velocidade, no plano do agitador, por exemplo, não deve variar com a posição do agitador dentro do tanque, mantida a velocidade angular constante. Isso pode ser observado, para a técnica de SG, olhando os perfis de velocidade para diferentes posições do agitador, em diferentes tempos.

As variações do número de Reynolds forneceram resultados de acordo com o esperado, sendo que é importante observar como o projeto otimizado pode contribuir drasticamente para um menor consumo de energia, pois este varia muito com o aumento da velocidade de agitação. Para fluidos com características pseudoplásticas fica claro que é necessário um cuidado ainda maior no projeto de tanques, pois mesmo um aumento de velocidade pode não ser suficiente para que se obtenha a mistura desejada no interior do vaso.

A mudança do impelidor âncora por um sistema de eixo descentralizado com três agitadores de pás inclinadas mostrou que o agitador âncora possui um consumo de energia realmente alto e em certas ocasiões pode ser substituído, trazendo ganhos em energia e tempo de mistura. Ressalta-se, entretanto, que o agitador tipo âncora possui características importantes para a transferência de calor e para evitar estagnação nas paredes pelo seu efeito de raspador, sendo algumas vezes insubstituível.

6.3. Validações com base em dados experimentais (5.8)

A comparação com dados experimentais tem o objetivo de validar as hipóteses e procedimentos de cálculo, mostrando a correção ou não dos resultados numéricos obtidos. Os resultados obtidos nas simulações com o tanque semelhante ao tanque em que foram obtidos dados experimentais mostram que as hipóteses e os procedimentos utilizados fornecem resultados corretos.

6.4. Conclusões

O pacote computacional é uma ferramenta extremamente versátil para a predição do perfil de velocidades, temperatura e pressão em qualquer problema de fluido dinâmica computacional. Entretanto, o pacote computacional utilizado neste trabalho, assim como outros pacotes semelhantes, ainda são ferramentas que exigem um conhecimento avançado para que se crie a geometria do problema e um conhecimento bastante profundo dos fenômenos de fluido-dinâmica para que as simulações sejam realistas e os resultados precisos.

Os pacotes computacionais têm conseguido melhorar os *softwares* para a criação da malha computacional, tornando-os mais versáteis e mais poderosos, e os processadores com maior desempenho tem conseguido resultados em um tempo mais curto. Isso indica, que em um futuro próximo, seja possível criar algoritmos para otimização de equipamentos onde o *software* faça alterações na geometria e em condições operacionais (velocidade de agitação, por exemplo) para otimizar o equipamento, seja reduzindo o tempo de processamento ou minimizando o gasto de energia.

Atualmente, entretanto, os pacotes devem ser utilizados para testes específicos, sendo que no caso de tanques agitados é imprescindível que um tipo adequado de agitador seja escolhido com base nos dados experimentais que foram colhidos nas últimas décadas e que a literatura contendo esses dados é capaz de reduzir para alguns poucos os tipos de agitadores apropriados para a mistura desejada. Mais uma vez, reafirma-se que o pacote atualmente deve ser utilizado para otimização de equipamentos ou para a simulação de novos equipamentos, sendo desejável, mas não estritamente necessária uma validação com dados experimentais. Visto que os procedimentos para cálculo são conhecidos e dominados.

7. PROPOSTA PARA ESTUDOS FUTUROS

O estudo de tanques agitados mostra-se uma área de muito interesse e carente de estudos computacionais, devido a grande variedade de tanques agitados que existe. A expressão "cada caso é um caso" é particularmente válida para tanques agitados. Os esforços experimentais realizados intensamente nas décadas de 70 e 80 mostram que é impossível prever com precisão geometrias otimizadas para uma dada condição de processo.

As técnicas de simulação de tanques agitados encontram-se bem desenvolvidas, fornecendo resultados corretos para os mais diversos tipos de tanque, tendo sido extensamente estudadas e validadas para o agitador tipo Rushton *turbine*, o agitador mais comumente encontrado na indústria.

Como sugestão para estudo nesta área sugere-se adicionar à modelagem de fenômenos envolvendo reações químicas. Esta modelagem seria extremamente interessante para reações onde a taxa depende fortemente da concentração local, pois seria possível otimizar a taxa de reação global do sistema. Para reações poliméricas, aplicação típica do agitador tipo ancora, é interessante observar que a viscosidade do meio depende do caminho da reação, pois reagentes e produtos podem ter características muito diferentes, sendo provavelmente necessário que esse fenômeno (mudança de viscosidade) seja cuidadosamente modelado.

A simulação de um reator de polimerização, com um agitador tipo ancora, é a sugestão para a continuidade desse estudo. A geometria utilizada aqui pode ser aproveitada, caso não se tenha dados de um reator real, entretanto é interessante observar que as técnicas para obtenção dos perfis de velocidade são as mesmas. Após obtido um perfil "inicial" de velocidades pode-se adicionar equações para a viscosidade, para a reação química, para a temperatura e qualquer outra que seja necessária, afim de representar todos os fenômenos físicos importantes para o processo.

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] Ciofalo, M., Brucato, A., Grisafi, F. & Torraca, N. (1996) Turbulent Flow In Closed And Free-Surface Unbaffled Tanks Stirred By Radial Impellers. *Chemical Engineering Science*, Vol. 51, No. 14, pp. 3557-3573.

[2] Pedrosa, S.M.C.P. & Nunhez, J.R. (2000) The behavior of stirred vessels with anchor type impellers. Computers and Chemical Engineering, 24, pp.1745-1751.

[3] Peixoto, S.M.C., Nunhez, J.R. & Duarte, C.G. (2000) Characterizing the Flow of Stirred Vessels with Anchor Type Impellers. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 17, No. 04-07, pp. 925-935.

[4] Brucato, A., Ciofalo, M., Grisafi, F. & Micale, G. (1998) Numerical prediction of flow fields in baffled stirred vessels: A comparison of alternative modeling approaches. *Chemical Engineering Science*, Vol. 53, No. 21, pp. 3653-3684.

[5] Brucato, A., Ciofalo, M., Grisafi, F. & Tocco, R. (2000) On the simulation of stirred tank reactors via computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Science*, Vol. 55, pp. 291-302.

[6] Jaworski, Z., Wyszynski, M. L., Moore, I. P. T. & Nienow, A. W. (1997) Sliding mesh computational fluid dynamics. *Proc. Instn. Mech. Engrs.*, Vol. 211 Part E, pp. 149-156.

[7] Perng, C. Y. & Murthy, J.Y. (1993) A Moving-Deforming-Mesh Technique for Simulation of Flow in Mixing Tanks. *Process Mixing – Chemical and Biochemical Applications: Part II, AIChE SYMPOSIUM SERIES*, Vol. 211, No. 293, 37-41.

[8] Sandhu, K. S. & Foumeny, E. A. (1992) Computational Modeling of Fluid Dynamics In Stirred Vessels. Comunicação interna – Universidade de Leeds.

[9] Abid, M., Xuereb, C. & Bertrand, J. (1994) Modeling of the 3D Hydrodynamics of 2-Blade Impellers in Stirred Tanks Filled With a Highly Viscous Fluid. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 72, pp. 184-193.

[10] Blackburn, H. M., Elston, J. R., Niclasen, D. A., Rudman, M. & Wu, J. (2000) A hybrid method for simulation of axial flow impeller driven mixing vessels. *Aplied Mathematical Modelling*, Vol. 24, pp. 795-805.

[11] Patwardhan, A. W. & Joshi, J. B. (1999) Relation between Flow Patern and Blending in Stirred Tanks. Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 38, pp. 3131-3143.

[12] Xuereb, C. & Bertrandt, J. (1996) 3-D Hydrodynamics in a Tank Stirred by a Double-propeller System and Filled With a Liquid Having Evolving Rheological Properties. *Chemical Engineering Science*, Vol. 51, No. 10, pp. 1725-1734.

[13] Fox, R. O. (1998) On the relationship between Lagrangian micromixing models and computational fluid dynamics. *Chemical Engineering and Processing*, Vol. 37, pp. 521-535.

[14] Ismailov, M., Schefer, M., Durst, F. & Kuroda, M. (1997) Turbulent Flow Pattern Of Hyperboloid Stirring Reactor. Journal of Chemical Engineering of Japan, Vol. 30, No. 6, pp. 1090-1097.

[15] Tanguy, P.A., Thibault, F., Fuente, E.B., Espinosa-Solares, T. & Tecante, A. (1996) Mixing performance induced by coaxial flat blade-helical ribbon impellers rotating at different speeds. *Chemical Engineering Science*, Vol. 52, No. 11, pp. 1733-1741.

[16] Gosman, A. D., Lekakou, C., Politis, S., Issa, R.I. & Looney, M.K. (1992) Multidimensional Modeling of Turbulent Two-Phase Flows in Stirred Vessels. *AIChE Journal*, Vol. 38, No. 12, 1946-1956.

[17] Fokema, M. D., Kresta, S. M. & Wood, P. E. (1994) Importance of Using the Correct Impeller Boundary Conditions for CFD Simulations of Stirred Tanks. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 72, pp. 177-183.

[18] Micale, G. & Montante, G. (2000) On The Simulation of Two-phase Solid-Liquid Stirred Vessels. Presented at 'CFX International Users Conference', Friedrichshafen, 1/4/99.

[19] Schäfer, M., Yianneskis, M., Wächter, P. & Durst, F. (1998) Trailing Vortices around a 45° Pitched-Blade Impeller. *AIChE Journal*, Vol. 44, No. 6, 1233-1246.

[20] Lee, K. C. & Yianneskis, M. (1998) Turbulence Properties of the Impeller Stream of a Rushton Turbine. AIChE Journal, Vol. 44, No. 1, 13-24.

[21] Bakker, R. A. & Van Den Akker, H. E. A. (1994) A Computational Study of Chemical Reactors on the Basis of Micromixing Models. *Trans. IChemE*, Vol. 72, Part A, 733-738.

[22] Kiparissides, C. (1996) Polymerization Reactor Modeling: A Review of Recent Developments and Future Directions. *Chemical Engineering Science*, Vol. 51, No. 10, pp. 1637-1659.

[23] Elias, H. G., (1993) An Introduction to Plastics, VCH Weinheim.

[24] Kolhapure, Nitin H. & Fox, R. O. (1999) CFD analysis of micromixing effects on polymerization in tubular low-density polyehtylene reactors. *Chemical Engineering Science*, Vol. 54, pp. 3233-3242.

[25] Ottino, J. M. (1994) Mixing and Chemical Reactions – A Tutorial. *Chemical Engineering Science*, Vol. 49, No. 24A, pp. 4005-4027.

[26] Harris, C. K., Roekaerts, D. & Rosendal, F. J. J. (1996) Computational Fluid Dynamics for Chemical Reactor Engineering. *Chemical Engineering Science*, Vol. 51, No. 10, pp. 1569-1594.

[27] Funes-Gallanzi, M. (1996) High accuracy measurement of unsteady flows using digital particle image velocimetry. *Optics & Laser Technology*, Vol. 30, pp. 349-359.

[28] Sheng, J., Meng, H. & Fox, R. O. (1998) Validation of CFD Simulations of a Stirred Tank Using Particle Image Velocimetry Data. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 76, pp. 611-625.

[29] Hamill, N. (1998) Streamlinig fluid dynamics. Mechanical Engineering, March 1998, pp. 76-78.

[30] Baker, A. J., Kelso, R. M., Gordon, E. B., Roy, S. & Schaub, E. G. (1997) Computational Fluid Dynamics: A Two-Edged Sword. ASHRAE Journal, August, 1997, pp. 51-58.

[31] Gosman, A. D. (1998) Developments in Industrial Computational Fluid Dynamics. Trans. IChemE, Vol. 76, Part A, 153-161.

[32] Sharratt, P. N. (1990) Computational Fluid Dynamics and its Application in the Process Industries. *Trans. IChemE*, Vol. 68, Part A, 13-18.

[33] Bezzo, F., Macchirtto, S. & Pantelides, C. C. (2000) A general framework for the integration of computational fluid dynamics and process simulation. *Computers & Chemical Engineering*, Vol. 24, pp. 653-658.

[34] Lamberto, D. J., Alvarez, M. M. & Muzzio, F. J. (1999) Experimental and computational investigation of the laminar flow structure in a stirred tank. *Chemical Engineering Science*, Vol. 54, pp. 919-942.

[35] Patankar, S. V. (1980) Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Hemisphere Publishing Corporation, New York.

[36] Maliska, C. R. (1995) Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional – Fundamentos e Coordenadas Generalizadas. *LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A.*, Rio de Janeiro.

[37] Oldshue, J. Y., Herbst, N. R. & Post, T. A. (1990) A Guide To Fluid Mixing. Lightnin, Rochester, New York, U.S.A.

[38] AEA Technology, CFX-4.4: Solver, AEA Technology, UK, 1998.

[39] Weetman, R. J. (1997) Automated Sliding Mesh CFD Computations for Fluidfoil Impellers. Presented at 9th European Conference on Mixing, Paris, France, 19-21 March 1997.

[40] Bakker, A., LaRoche, R. D., Wang, M.-H., Calabrese, R. V. (1998) Sliding Mesh Simulation of Laminar Flow in Stirred Reactors, The Online CFM Book, http://www.bakker.org/cfm

[41] Ciofalo, M., Brucato, A., Grisafi, F. and Torraca, N. (1996) Turbulent Flow In Closed And Free-Surface Unbaffled Tanks Stirred By Radial Impellers. *Chemical Engineering Science*, Vol. 51, No. 14, pp. 3557-3573.

[42] Nunhez, J. R. and McGreavy, C. (1994) Industrial Mixing Technology: Chemical and Biological Applications. *AIChE Symposium Series*, Vol. 90, pp. 55-70.

[43] Edwards, M.F. and Wilkinson, W. L. (1972) Heat transfer in agitated vessels - part I. The Chemical Engineer, pp. 310-319.

[44] Bertrand, J., Couderc, P. (1988) Numerical and experimental study of flow induced by an anchor in viscous, Newtonian and pseudo-plastic fluids. *International Chemical Engineering*, Vol. 28, No. 2, pp. 257-270.

[45] Shamlou, P.A., Edwards, M. F. (1989) Power Consumption of Anchor Impellers in Newtonian and Non-Newtonian Liquids. Chem. Eng. Res. Des., Vol. 67, pp. 537-543.

[46] Holland, F. A. and Chapman. F. S., (1966) Liquid Mixing and Processing in Stirred Tanks. Lwver Brothers Company, New York, NY.

[47] Cekinski, E., Urenha, L. C., Nunhez, J. R. e Joaquim Júnior, C. F. (2001) Curso de agitação e mistura, IPT - São Paulo.