



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

Área de Concentração

Desenvolvimento de Processos Químicos

Modelagem de um Reator com Serpentinhas
Axiais Utilizando a Dinâmica dos Fluidos
Computacional - CFD

Autor: Eng. Flavio Cesar Cunha Galeazzo

Orientador: Prof. Dr. José Roberto Nunes – UNICAMP

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

Campinas – São Paulo

Outubro de 2005

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

G131m Galeazzo, Flavio Cesar Cunha
Modelagem de um reator com serpentinas axiais
utilizando a fluido dinâmica computacional – CFD / Flavio
Cesar Cunha Galeazzo.--Campinas, SP: [s.n.], 2005.

Orientador: José Roberto Nunhez
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Simulação por computador – Dinâmica dos fluidos. 2.
Esterificação (Química). 3. Reatores químicos. 4.
Escoamento turbulento. I. Nunhez, José Roberto. II.
Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de
Engenharia Química. III. Título.

Titulo em Inglês: Modelling of a reactor with axial coils using computational fluid
dynamics

Palavras-chave em Inglês: Computational fluid dynamics, Esterification, Chemical
reactors, Turbulent flow

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora: André Gonçalves Antunha e Efraim Cekinski

Data da defesa: 25/10/2005

Dissertação de Mestrado defendida por Flavio Cesar Cunha Galeazzo e aprovada em 25 de Outubro de 2005 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. José Roberto Nunhez - Orientador

Prof. Dr. André Gonçalves Antunha

Prof. Dr. Efraim Cekinski

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química.

Prof. Dr. José Roberto Nunhez - Orientador

Agradecimentos

Em primeiro lugar, gostaria de agradecer ao Prof. Dr. José Roberto Nunhez pela oportunidade de realizar meus estudos de mestrado no Laboratório de Fluido Dinâmica Computacional da Unicamp. Sem a sua orientação sempre presente e ativa esta dissertação não existiria.

Agradeço também aos meus colegas Márcio Machado, Bruno de Souza, Jefferson, Antônio e Antônio Rudinger pelas conversas sempre animadas. Em especial agradeço ao Thiago Fermozei Ganino, sempre uma boa companhia, por ter me ajudado na correção do texto dessa dissertação.

Sou grato à FAPESP pela bolsa concedida, que possibilitou meus estudos em Campinas.

Agradeço ao meu irmão Rafael, pelas opiniões sempre pertinentes e pelo riso que sempre provoca com suas piadas, e à minha namorada Vivianne pelo seu valoroso suporte durante todo o período do mestrado.

Não posso nunca esquecer de agradecer meus pais, Enivaldo e Maria Inêz. Sem o seu amor incondicional e seu suporte em toda minha vida eu com certeza não estaria aqui.

Por fim, agradeço a Deus, porque sem Ele nada disso seria possível.

Dai-me um ponto de apoio e levantarei o mundo

Arquimedes

Resumo

O trabalho analisou o impacto que alterações nas condições operacionais e na geometria causam no desempenho térmico de um reator de esterificação de porte industrial da empresa M&G. As análises utilizaram um modelo numérico criado com o software FLUENT. A hipótese simplificadora de se considerar somente uma fase líquida, apesar do sistema reacional real ser trifásico, foi competente em mostrar as principais características do escoamento e da transferência de calor no interior do reator, como zonas de estagnação e área de atuação dos impelidores, além da troca de calor a partir dos tubos da serpentina axial. Os resultados levam à conclusão de que o sistema de agitação possui um papel apenas secundário no desempenho térmico do reator, frente o papel preponderante dos discos separadores de fluxo.

Palavras-chave: CFD, esterificação, reatores químicos, escoamento turbulento, agitação

Abstract

The work analysed the impact of operating conditions and geometric changes in the thermal performance of a esterification industrial reactor of the company M&G. The analyses used a numerical model created with the aid of the software FLUENT. The simplifying hypothesis of considering only one liquid phase instead of the real system three phases was capable of showing the main characteristics of the flow and the heat transfer inside the reactor, like stagnation zones and impellers influence zones, and the heat transfer from the axial coil. The results lead to the conclusion that the agitation system have only a secondary role in the reactor thermal performance, while the role of the flow separation discs is dominant.

Sumário

Agradecimentos	iv
Resumo	vi
Abstract	vii
Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xii
Lista de Símbolos e Abreviações	xiii
1 Introdução	1
1.1 Objetivo do Trabalho	1
2 Revisão Bibliográfica	3
2.1 Projeto de Reatores	3
2.2 O Processo de Produção de PET	6
2.3 Química da Esterificação Direta	7
3 Desenvolvimento do Projeto	9
3.1 Apresentação do Problema	9
3.2 Equações do Modelo	10
3.2.1 Equação de Conservação de Massa	10
3.2.2 Equação de Conservação da Quantidade de Movimento	13
3.2.3 Equação de Conservação de Energia	22
3.2.4 Modelagem da Turbulência	29
3.2.5 Modelo de Turbulência $k-\epsilon$	31
3.3 Método dos Volumes Finitos	33

SUMÁRIO

3.4	Modelagem do Fluido	36
3.4.1	Influência da Reação	36
3.5	Desenvolvimento da Malha Computacional	37
3.5.1	Restrições	38
3.5.2	Aplicação das Condições de Contorno	40
3.6	Obtenção da Solução	42
3.7	Independência da Malha	43
4	Resultados	50
4.1	Comparação com Dados Experimentais	50
4.2	Influência da Velocidade de Rotação	52
4.3	Influência dos discos divisores de fluxo	61
5	Conclusão	76
A	Comparação com Modelo da Literatura	79
	Referências Bibliográficas	81

Lista de Figuras

2.1	As "três dimensões" da fluido dinâmica	4
2.2	Diferentes estágios na produção de PET	6
2.3	Reações principais da produção de PET por esterificação direta	8
3.1	Esquema do reator de esterificação da M&G	10
3.2	Elemento de fluido móvel infinitesimal - continuidade	12
3.3	Elemento de fluido móvel infinitesimal - quantidade de movimento	14
3.4	Tensão de cisalhamento e tensão normal	15
3.5	Elemento de fluido móvel infinitesimal - fluxos de energia	23
3.6	Volume elementar para os balanços de conservação.	34
3.7	Tipos de elementos tridimensionais	38
3.8	Domínio computacional usado na simulação.	39
3.9	Detalhe da malha do impelidor axial.	40
3.10	Detalhe da malha do impelidor radial.	41
3.11	Console típico do programa FLUENT com as variáveis controladas.	43
3.12	Domínio usado na primeira parte do estudo de independência de malha	44
3.13	Variação do torque em relação ao número de elementos da malha.	45
3.14	Variação do torque em relação ao número de elementos da malha, sem refino na parede.	46
3.15	Domínio usado na segunda parte do estudo de independência de malha	47
3.16	Detalhe da malha dos ensaios M1 até M3 no plano xy	48
3.17	Detalhe da malha dos ensaios M4 e M5 no plano xy	48
3.18	Detalhe da malha do ensaio M6 no plano xy	49

LISTA DE FIGURAS

4.1	Contornos de temperatura em um plano vertical do reator ($^{\circ}\text{C}$).	53
4.2	Contornos de temperatura em diferentes planos horizontais do reator ($^{\circ}\text{C}$).	54
4.3	Contornos de velocidade em um plano vertical do reator (m/s).	55
4.4	Contornos de velocidade em diferentes planos horizontais do reator (m/s).	56
4.5	Iso-superfície de valor de velocidade constante de 0,1 m/s.	57
4.6	Contornos de fluxo de calor ao redor dos tubos da serpentina, em perspectiva (W/m^2).	58
4.7	Detalhe dos contornos de fluxo de calor ao redor de cada fileira de tubos da serpentina (W/m^2).	59
4.8	Contornos de temperatura em um plano vertical do reator sem agitação ($^{\circ}\text{C}$).	62
4.9	Contornos de velocidade em um plano vertical do reator sem agitação (m/s).	63
4.10	Iso-superfícies de valor de velocidade constante de 0,01 m/s do reator sem agitação.	64
4.11	Contornos de fluxo de calor ao redor dos tubos da serpentina do reator sem agitação, em perspectiva (W/m^2).	65
4.12	Detalhe dos contornos de fluxo de calor ao redor de cada fileira de tubos da serpentina do reator sem agitação (W/m^2).	66
4.13	Contornos de temperatura em um plano vertical do reator sem os discos divisores ($^{\circ}\text{C}$).	69
4.14	Contornos de temperatura em diferentes planos horizontais do reator sem os discos divisores ($^{\circ}\text{C}$).	70
4.15	Contornos de velocidade em um plano vertical do reator sem os discos divisores (m/s).	71
4.16	Contornos de velocidade em diferentes planos horizontais do reator sem os discos divisores (m/s).	72
4.17	Iso-superfície de valor de velocidade constante de 0,1 m/s do reator sem os discos divisores.	73
4.18	Contornos de fluxo de calor ao redor dos tubos da serpentina do reator sem os discos divisores, em perspectiva (W/m^2).	74
4.19	Detalhe dos contornos de fluxo de calor ao redor de cada fileira de tubos da serpentina do reator sem os discos divisores (W/m^2).	75

Lista de Tabelas

3.1	Dados do fluido modelado.	37
3.2	Condições de contorno para as diversas fronteiras do domínio.	42
3.3	Variação do calor transferido em relação aos diferentes ensaios realizados.	48
4.1	Temperatura da corrente de saída.	51
4.2	Resultados principais do estudo paramétrico.	60
4.3	Resultados principais do estudo geométrico.	61
A.1	Comparação dos coeficientes de troca térmica médios.	80

Lista de Símbolos e Abreviações

Letras Romanas

\vec{a}	vetor aceleração	m/s^2
C_P	capacidade térmica a pressão constante	$J/kg.K$
$0 C_{\epsilon 1}, C_{\epsilon 2}$ e C_{μ}	constantes usadas no modelo de turbulência k- ϵ	
E	constante empírica da função de parede (=9,793)	
e	energia interna específica	J/kg
\vec{F}	vetor força total ou resultante	N
\vec{f}	vetor força de campo	N
h	entalpia específica	J/kg
\bar{h}	coeficiente de troca térmica médio	$W/m^2.K$
k	condutividade térmica, energia cinética turbulenta	$W/m.K,$ m^2/s^2
k_P	energia cinética turbulenta no ponto P	
ℓ	escala da turbulência, tamanho característico dos vórtices	
m	massa	kg
n	coordenada normal à superfície	m
N	velocidade de rotação	rad/s
Nu	número de Nusselt	
P	potência	W
\dot{q}	taxa de variação de calor volumétrico por unidade de massa	$W/m^3.kg$
t	tempo	s
T	temperatura	K
U_P	velocidade média do fluido no ponto P	m/s

Lista de Símbolos e Abreviações

u, v, w	componetes da velocidade no sistema de coordenadas cartesiano	m/s
V	vetor velocidade	m/s
x, y, z	componentes do sistema de coordenadas cartesiano	m
y^+	distância adimensional à parede	
y^*	distância adimensional à parede, equivalente ao y^+ em condições de turbulência em equilíbrio	
y_P	distância do ponto P até a parede	m

Letras Gregas

ϵ	dissipação da energia cinética turbulenta	m^2/s^3
λ	segundo coeficiente de viscosidade	$Pa.s$
κ	constante de von Kármán (=0,4187)	
μ	coeficiente de viscosidade molecular	$Pa.s$
μ_t	coeficiente de viscosidade turbulenta	$Pa.s$
ω	taxa de dissipação específica	$1/s$
ρ	densidade	kg/m^3
σ_k e σ_ϵ	constantes do modelo de turbulência k- ϵ	
τ_{ij}	tensão na direção j exercida no plano perpendicular à i	N/m^2
∇	operador gradiente $(\vec{i} \partial/\partial x + \vec{j} \partial/\partial y + \vec{k} \partial/\partial z)$	

Abreviações

BHET	bis(hidroxi)etil)tereftalato
CFD	Computational Fluid Dynamics
DMT	dimetil tereftalato
DNS	Direct Numerical Simulation, simulação numérica direta
EG	etilenoglicol
LES	Large Eddy Simulation, simulação de grandes vórtices
MDF	método das diferenças finitas
MEF	método dos elementos finitos
MVF	método dos volumes finitos
PET	polietileno tereftalato
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes

Lista de Símbolos e Abreviações

TPA ácido tereftálico

Capítulo 1

Introdução

O projeto atual de reatores químicos depende de relações empíricas, uma vez que as leis físicas que regem os fenômenos envolvidos nos processos químicos são expressões integrais e diferenciais cujas soluções analíticas não são conhecidas. Os estudos dos processos de mistura e troca de calor em reatores químicos têm se concentrado em estudos experimentais. Uma outra forma de abordar o problema ganhou força nas últimas décadas, quando os computadores começaram a se popularizar. Esta abordagem é conhecida como fluido dinâmica computacional (CFD, do inglês *Computational Fluid Dynamics*).

O trabalho visa indicar, através de simulações numéricas utilizando a fluido dinâmica computacional, melhores configurações geométricas e condições de operação de um reator de esterificação direta da unidade de produção de PET da empresa M&G. O reator é de grande porte e utiliza, atualmente, dois impelidores radiais tipo turbina e dois impelidores axiais de pás inclinadas, que possuem a mesma velocidade de rotação. O sistema também possui discos divisores de fluxo. O reator opera atualmente em condições críticas de troca de calor e mudanças operacionais se fazem necessárias. A etapa final do projeto criou um modelo tridimensional validado com os dados provenientes da M&G e analisou o impacto que alterações nas condições operacionais e na geometria possuem no desempenho térmico do reator.

1.1 Objetivo do Trabalho

O objetivo do trabalho é estudar os efeitos sobre o desempenho térmico do sistema de alterações nas condições operacionais e na geometria de um reator

1.1 Objetivo do Trabalho

de porte industrial.

Para atingir esse objetivo foi criado um modelo tridimensional utilizando-se a fluido dinâmica computacional, onde foram avaliados os efeitos das alterações propostas. Apesar do sistema reacional real ser trifásico, a modelagem será feita considerando-se somente uma fase líquida, com as propriedades médias do sistema reacional. Esse modelo oferece informações importantes do processo, como zonas de estagnação e área de atuação dos impelidores, além da troca de calor a partir das serpentinas.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Projeto de Reatores

Reatores agitados tem sido o objeto de estudo de muitos pesquisadores não somente sob o aspecto reacional, mas também considerando os processos de mistura. A grande maioria dos estudos possui um caráter basicamente experimental. Porém, com o advento dos computadores digitais e com o desenvolvimento de algoritmos numéricos confiáveis para resolver problemas físicos nesses computadores, ocorreu uma revolução no estudo e na prática da fluido dinâmica, a fluido dinâmica computacional (CFD, do inglês Computational Fluid Dynamics). O emprego da fluido dinâmica computacional em estudos de reatores de mistura vêm crescendo desde o início da década de 80.

Em geral, o procedimento computacional na fluido dinâmica é usado em parceria com investigações experimentais, tornando-as mais eficientes e possibilitando um entendimento mais profundo dos processos de escoamento. Deve ficar claro que a fluido dinâmica computacional não tem o objetivo de substituir a fluido dinâmica experimental. Os dois estudos, em conjunto, proporcionam um entendimento mais profundo do processo como um todo. Como pode ser visto na Figura 2.1, a fluido dinâmica computacional é hoje uma parceira da fluido dinâmica experimental e da teórica.

Como não é possível até o momento solucionar analiticamente as equações de transporte de quantidade de movimento e de energia em reatores de mistura, mesmo para as geometrias mais simples operando em regime laminar, o projeto de reatores se limita a utilizar relações empíricas. A aplicação

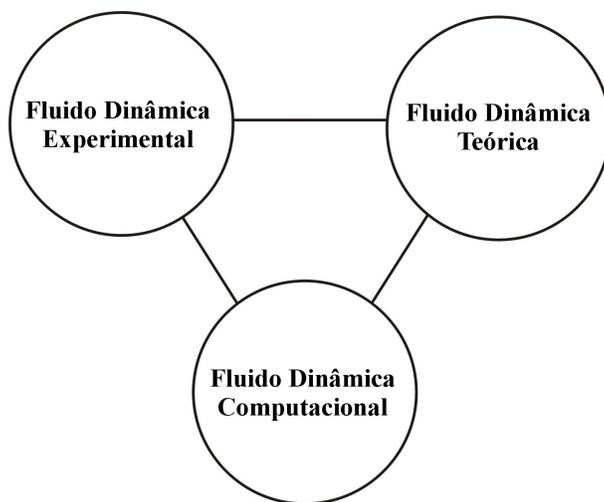


Figura 2.1: As "três dimensões" da fluido dinâmica.

dessas relações empíricas, no entanto, é limitada, pois sua extrapolação para condições geométricas e operacionais diferentes das usadas nos experimentos originais é fortemente limitada. Assim, o projeto convencional de reatores * se baseia em estudos de séries homólogas, com geometria e condições de operação semelhantes.

Em quaisquer projetos convencionais, principalmente aqueles que apresentam múltiplos impelidores e barreiras internas de fluxo, não existem parâmetros para indicar de uma maneira clara e quantitativa como o fluxo pode ser melhorado através de mudanças geométricas e operacionais. Qualquer melhoria de processo nesse caso depende do conhecimento adquirido do projetista que, entretanto, não consegue levar em conta todas as variáveis que podem otimizar tanto geometricamente como operacionalmente um determinado sistema reacional.

Os estudos sobre o escoamento dentro de reatores de mistura concentra-se no regime turbulento, muito embora reações químicas com reatores operando em regime laminar são usadas extensivamente pela indústria química (Dyster et al., 1993; Nunhez, 1994). Na prática, existe uma lacuna na literatura

*Por projeto convencional de reatores deve-se entender a formulação do cálculo de potência de impelidores que utilizam consagradas curvas de potência e correlações para a transferência de calor baseado em números adimensionais como os números de Reynolds, Prandtl e outros.

2.1 Projeto de Reatores

de trabalhos computacionais que estudem a troca de calor em escoamentos turbulentos.

Street (1991) e Street and McGreavy (1991) publicaram o primeiro trabalho computacional estudando os fenômenos de transferência de calor através de um programa utilizando o método dos elementos finitos que foi desenvolvido pelos autores na Universidade de Leeds, Inglaterra. Eles utilizaram um modelo assimétrico bidimensional que gera soluções para as três componentes de velocidade. Fluidos Newtonianos e não-Newtonianos foram investigados utilizando-se arranjos simples de impelidores. Inovações foram apresentadas como, por exemplo, a sugestão de uma configuração utilizando serpentinas para a troca de calor. Neste caso, o estudo analisou o resfriamento do meio reacional utilizando-se serpentinas helicoidais. Este primeiro estudo apontou que o arranjo de serpentinas sugerido por Oldshue and Gretton (1954) e, posteriormente, Uhl and Gray (1966), limita consideravelmente o escoamento interno em tanques de mistura. Deve-se ressaltar que este tipo de reator ainda é projetado hoje em dia reproduzindo-se esta geometria citada. Uma contribuição importante no trabalho de Street e McGreavy foi indicar arranjos mecânicos que melhoram significativamente o escoamento para estas geometrias. Nunhez and McGreavy (1995, 1994b); McGreavy and Nunhez (1993a,b); Nunhez and McGreavy (1994a) e Nunhez (1994) estenderam o estudo para três dimensões, utilizando um agitador tipo turbina Rushton. Os trabalhos também utilizaram o método dos elementos finitos na variante Galerkin com pesos residuais, e os dados foram obtidos utilizando o software FIDAP (Fluid Dynamics Analysis Package).

Posteriormente Peixoto (1998); Pedrosa and Nunhez (2003); Peixoto and Nunhez (1999) e Pedrosa and Nunhez (2000) compararam, através de uma análise computacional, as diferenças em termos de troca de calor e fluxo entre a geometria proposta por Oldshue and Gretton (1954) e uma geometria otimizada, inicialmente proposta por Street (1991) e Street and McGreavy (1991). Este estudo indicou que a transferência de calor em sistemas reacionais utilizando serpentinas helicoidais pode ser melhorada sensivelmente se pequenos ajustes no arranjo da serpentina forem conduzidos. A melhora ocorre devido ao arranjo proposto não restringir o fluxo radial gerado pelo impelidor tipo turbina na sua região de descarga, fato que ocorre na geometria do trabalho experimental de Oldshue and Gretton (1954).

Os dois maiores pacotes comerciais de fluido dinâmica computacional em número de usuários, FLUENT e CFX, possuem módulos específicos, gerados a partir do código fonte original, para o estudo de tanques de mistura. Estes

2.2 O Processo de Produção de PET

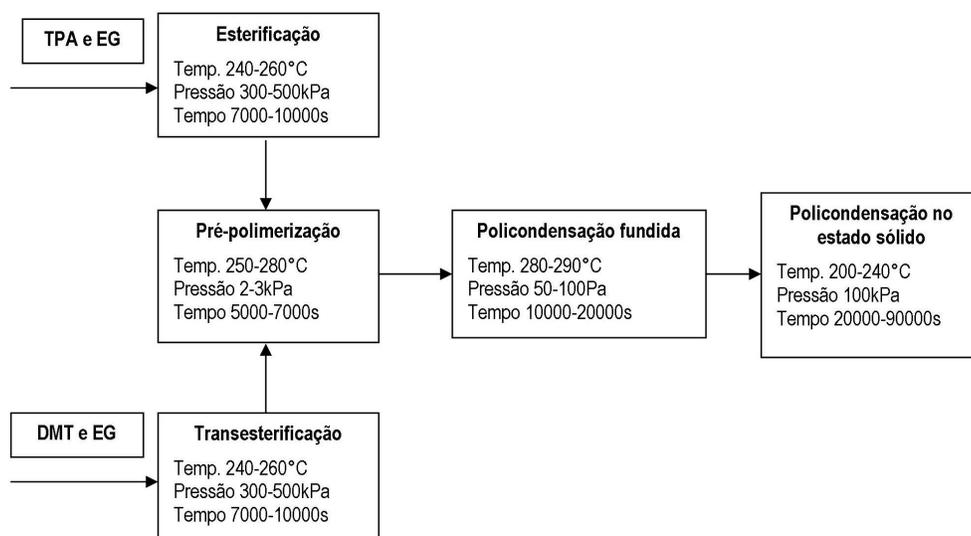


Figura 2.2: Diferentes estágios na produção de PET

módulos foram gerados devido ao grande número de companhias interessadas no desenvolvimento computacional de modelos de tanques de mistura. Muitos dos resultados gerados, entretanto, não estão disponíveis na literatura devido ao interesse comercial envolvido.

2.2 O Processo de Produção de PET

O reator a ser estudado faz parte da planta de produção do polímero polietileno tereftalato, conhecido pela sigla PET.

O PET é classificado quimicamente como um polímero poliéster termoplástico. Seus usos principais são na forma de fibras, filmes e como material moldável (Ravindranath and Mashelkar, 1986).

A produção de PET envolve basicamente quatro estágios:

1. transesterificação ou esterificação direta,
2. pré-polimerização,
3. policondensação fundida e

2.3 Química da Esterificação Direta

4. policondensação no estado sólido.

O diagrama mostrado na Figura 2.2 mostra os diferentes estágios, com as condições típicas de cada processo.

No primeiro estágio, bis(hidroxiethyl)tereftalato (BHET) é produzido por transesterificação ou por esterificação direta. No processo de transesterificação, dimetil tereftalato (DMT) reage com etileno glicol (EG) e metanol é continuamente removido. No processo de esterificação direta, ácido tereftálico (TPA) reage com EG produzindo água como subproduto, que é removida. O reator em estudo é um reator de esterificação direta.

Após o desenvolvimento de TPA de alto grau de pureza, a maioria das plantas de produção no mundo passaram a utilizar TPA como matéria-prima, pois ele parece oferecer uma vantagem considerável (Arunpal (1978) citado por Ravindranath and Mashelkar (1986)).

No segundo estágio, o BHET produzido no primeiro estágio é polimerizado num reator de pré-polimerização até um grau de polimerização (GP) de aproximadamente 30. A viscosidade do efluente do pré-polimerizador é de aproximadamente 5 Pa.s. O produto passa então para os estágios finais (os estágios de policondensação) onde ele é polimerizado até um GP de aproximadamente 100 no reator de policondensação líquida sob vácuo e sistemas especiais de agitação. A viscosidade do polímero aumenta muito, e limitações de transferência de massa passam a ser importantes, o que leva a considerações especiais no projeto do reator. Em processos contínuos usualmente utiliza-se reatores com uma unidade mecânica geradora de área interfacial nesse estágio.

O estágio de policondensação no estado sólido é utilizado para se obter PET para moldagem com um GP maior que 150. Nesse estágio PET do estágio de policondensação fundida é solidificado e passa por um processo de policondensação no estado sólido, com uma temperatura acima da transição vítrea mas abaixo da temperatura de fusão do polímero.

2.3 Química da Esterificação Direta

Reações de condensação se notabilizam pela eliminação de uma pequena molécula (geralmente água) durante o processamento da reação. Uma reação de condensação típica é a de esterificação, onde um álcool reage com um ácido orgânico, gerando um éster conjuntamente com a eliminação de uma molécula de água. Na esterificação do PET, os grupos químicos responsáveis

2.3 Química da Esterificação Direta

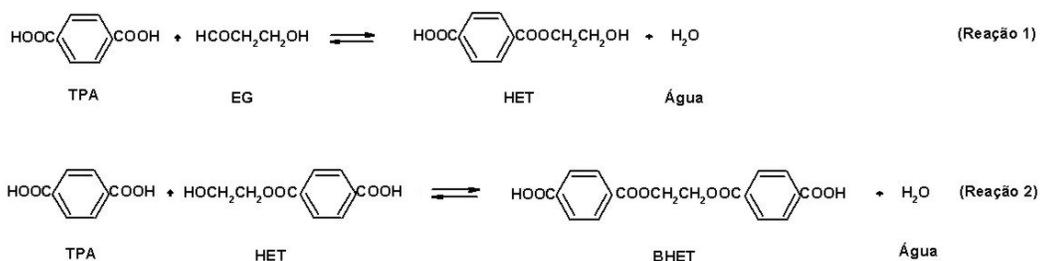


Figura 2.3: Reações principais da produção de PET por esterificação direta. Reações 1 e 2: reações de esterificação.

pela reação são o grupo hidroxila (OH) presentes no EG e o grupo ácido carboxílico (HO-C=O), presente no TPA.

No processo de esterificação direta, as reações reversíveis principais são as reações de esterificação (1) e (2) (ver Figura 2.3).

Uma certa quantidade de reações secundárias ocorre durante a produção de PET junto com as reações principais. É importante controlar essas reações, pois a qualidade do produto depende fortemente da quantidade de subprodutos gerados.

Capítulo 3

Desenvolvimento do Projeto

3.1 Apresentação do Problema

Este trabalho visa estudar a influência de alterações nas condições operacionais e na geometria de um reator de porte industrial no desempenho térmico do sistema. O reator em estudo possui uma capacidade da ordem de dezenas de metros cúbicos e é usado na etapa de esterificação da produção de PET em uma planta da empresa M&G. O reator possui um conjunto de 270 serpentinas axiais dispostas em seis anéis concêntricos em relação ao eixo árvore. A Figura 3.1 mostra um esquema do reator em questão.

Líder no mercado sul-americano, a M&G - empresa que integra desde 2002 o Gruppo Mossi & Ghisolfi (M&G) - desenvolve resinas para embalagens PET e fibras de poliéster para a indústria têxtil, dois importantes setores da economia. A M&G nasceu em 2 de maio de 1994, a partir da associação dos negócios de poliéster da Rhodia e da Celbrás (Grupo Sinasa).

O projeto visa propor uma geometria otimizada capaz de aumentar o desempenho térmico deste equipamento analisando ponto a ponto o comportamento do sistema frente a diferentes condições geométricas e operacionais, através da fluido dinâmica computacional. Entretanto, não serão contemplados todos os pontos neste projeto de mestrado.

Em vista da geometria complexa do problema, não existe simetria radial nem axial. Assim, deve-se resolver o problema tridimensionalmente.

A malha computacional será resolvida segundo o método dos volumes finitos (MVF). A vantagem desse método frente aos outros dois disponíveis, o método das diferenças finitas (MDF) e o método dos elementos finitos

3.2 Equações do Modelo

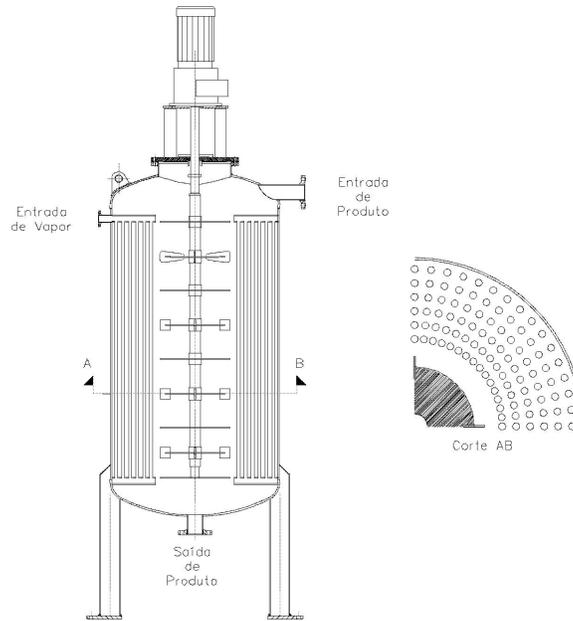


Figura 3.1: Esquema do reator de esterificação da M&G

(MEF), é a sua robustez, devido às características conservativas do MVF (Maliska, 2004).

3.2 Equações do Modelo

Para a simulação das variáveis de interesse do problema, isto é, o campo de velocidades e de temperatura, utiliza-se modelos matemáticos que representam os conceitos de conservação de massa, quantidade de movimento e energia. Como além disso o escoamento dentro do reator é turbulento, além desses modelos utiliza-se também um modelo de turbulência.

Uma derivação mais detalhada das equações de conservação em suas formas mais adequadas para sua aplicação em CFD pode ser obtida em Anderson (1995).

3.2.1 Equação de Conservação de Massa

Seja um elemento infinitesimal fixo no espaço, com o fluido se movendo através dele, como visto na Figura 3.2. O sistema adotado será o sistema de co-

3.2 Equações do Modelo

ordenadas cartesiano, onde a velocidade e a densidade são funções do espaço (x, y, z) e do tempo t . Por convenção, as velocidades u, v e w são positivas nas direções positivas de x, y e z , respectivamente. O elemento infinitesimal está fixo no espaço (x, y, z) e tem lados dx, dy e dz (Figura 3.2). Existe um fluxo de massa através desse elemento, como mostrado na Figura 3.2. Considere que as faces direita e esquerda do elemento são perpendiculares ao eixo x . A área dessas faces é igual a $dydz$. O fluxo de massa é então $(\rho u)dydz$. Como a densidade e a velocidade são funções do espaço, o valor da vazão mássica através da face direita será diferente do valor na face esquerda. A diferença entre a vazão mássica das faces é $[\partial(\rho u)/\partial x]dx$. Assim o fluxo de massa através da face direita pode ser expresso como $(\rho u + [\partial(\rho u)/\partial x]dx)dydz$. O fluxo mássico através das faces direita e esquerda pode ser visto na Figura 3.2. Analogamente, os fluxos de massa através das faces de fundo e topo, que são perpendiculares ao eixo y , são respectivamente $(\rho v)dxdz$ e $(\rho v + [\partial(\rho v)/\partial y]dy)dxdz$. Os fluxos de massa através das faces frontal e traseira, que são perpendiculares ao eixo z , são respectivamente $(\rho w)dxdy$ e $(\rho w + [\partial(\rho w)/\partial z]dz)dxdy$. Assim, as setas na Figura 3.2 mostram a contribuição para o fluxo mássico entrando e saindo através das faces do elemento. Considerando o fluxo de massa de saída resultante do elemento como positivo, obtém-se:

Fluxo resultante de saída na direção x :

$$\left[\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} dx \right] dydz - (\rho u)dydz = \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} dxdydz \quad (3.1)$$

Fluxo resultante de saída na direção y :

$$\left[\rho v + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} dy \right] dxdz - (\rho v)dxdz = \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} dxdydz \quad (3.2)$$

Fluxo resultante de saída na direção z :

$$\left[\rho w + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} dz \right] dxdy - (\rho w)dxdy = \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} dxdydz \quad (3.3)$$

Assim, o fluxo resultante de saída do elemento é

$$\text{Fluxo de massa resultante} = \left[\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \right] dxdydz \quad (3.4)$$

3.2 Equações do Modelo

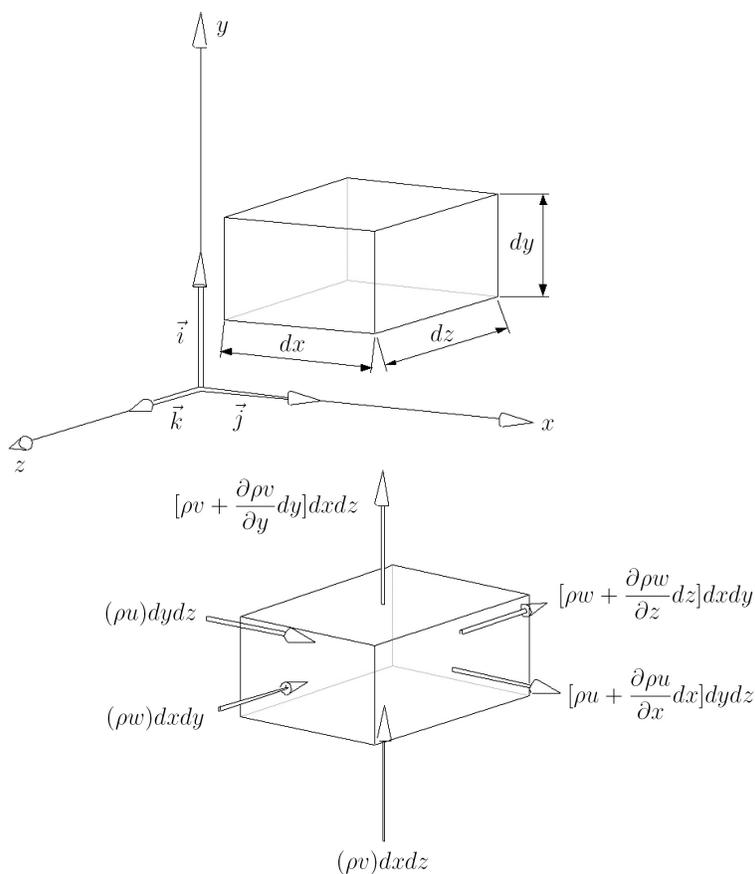


Figura 3.2: Modelo do elemento de fluido infinitesimal fixo no espaço e um diagrama dos fluxos mássicos através das varias faces do elemento

A massa total de fluido no elemento infinitesimal é $\rho(dx dy dz)$, assim a taxa de aumento de massa dentro do elemento é dada por

$$\text{Taxa de aumento de massa} = \frac{\partial \rho}{\partial t} (dx dy dz) \quad (3.5)$$

3.2 Equações do Modelo

O princípio físico de que a massa é conservada, quando aplicado ao elemento da Figura 3.2, pode ser expresso em palavras como: o fluxo de massa resultante que sai do elemento deve ser igual à taxa de diminuição de massa dentro do elemento. Denotando a diminuição da massa como uma quantidade negativa, esta afirmação pode ser expressa pelas equações (3.4) e (3.5) como

$$\left[\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \right] dx dy dz = -\frac{\partial \rho}{\partial t} (dx dy dz) \quad (3.6)$$

Ou

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left[\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \right] = 0 \quad (3.7)$$

Na equação (3.7) o termo entre colchetes é simplesmente $\nabla(\rho \vec{V})$. Assim, a equação (3.7) se torna

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{V}) = 0 \quad (3.8)$$

A equação (3.8) é a forma diferencial da equação de conservação de massa, ou equação da continuidade.

3.2.2 Equação de Conservação da Quantidade de Movimento

Nesta seção será aplicado outro princípio fundamental da física em um modelo de escoamento, que é a segunda lei de Newton:

$$\vec{F} = m \cdot \vec{a} \quad (3.9)$$

Que pode ser expressa em palavras como: força é igual à massa multiplicada pela aceleração. A equação de conservação resultante é chamada de equação de conservação de quantidade de movimento. Será utilizado um modelo de elemento infinitesimal que se move com o fluido, uma imagem deste elemento pode ser vista na Figura 3.3.

A segunda lei de Newton quando aplicada ao elemento de fluido da Figura 3.3 diz que a força resultante no elemento de fluido é igual à sua massa multiplicada pela aceleração do elemento. Esta é uma relação vetorial, e assim

3.2 Equações do Modelo

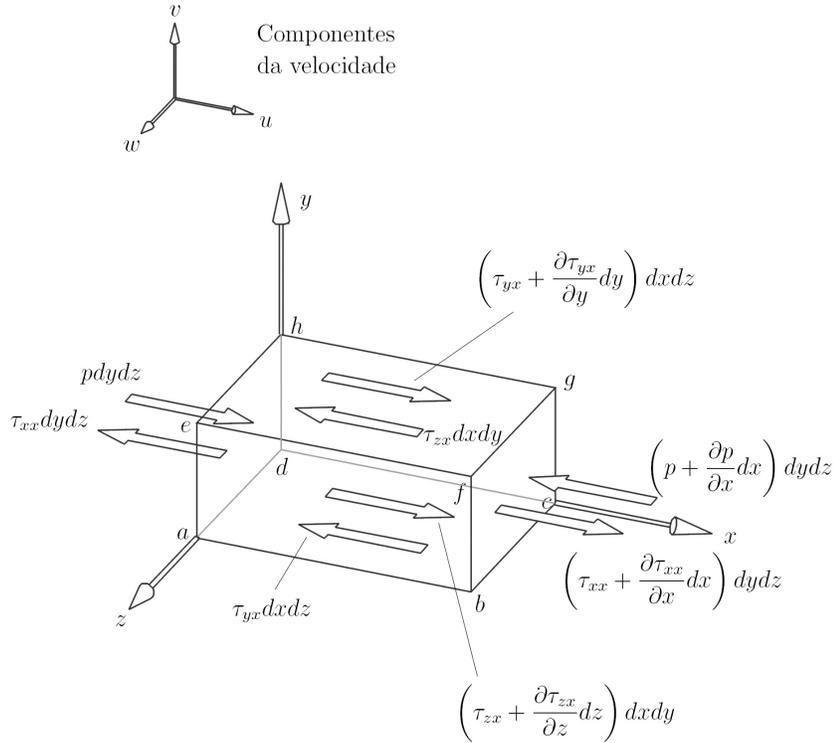


Figura 3.3: Elemento de fluido móvel infinitesimal. Somente as forças na direção x estão representadas. Este modelo é usado na derivação da componente x da equação de transporte de quantidade de movimento.

pode ser dividida em três relações escalares nos eixos x, y e z . Considerando apenas a componente no eixo x da segunda lei de Newton, temos:

$$F_x = m a_x \quad (3.10)$$

Onde F_x e a_x são as componentes escalares no eixo x da força e da aceleração, respectivamente.

Considerando o lado esquerdo da equação (3.10), pode-se dizer que o elemento de fluido sofre a ação de uma força na direção x . Qual é a fonte dessa força? Existem duas fontes:

1. *Forças de campo*, que agem diretamente em todo o volume do elemento

3.2 Equações do Modelo

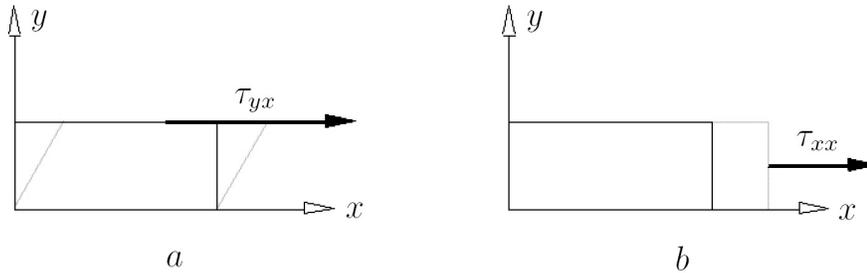


Figura 3.4: Ilustração da (a) tensão de cisalhamento (relacionada à variação temporal da deformação cisalhante) e (b) tensão normal (relacionada à variação temporal do volume)

de fluido. Essas forças agem a distância. Forças gravitacionais, elétricas e magnéticas fazem parte desse grupo.

2. *Forças de contato*, que agem diretamente na superfície do elemento de fluido. Elas podem ter duas fontes: (a) a distribuição de pressão agindo na superfície, imposta pela massa de fluido na vizinhança do elemento de fluido, e (b) a distribuição de tensão de cisalhamento e de tensão normal agindo na superfície, também imposta pelo fluido na vizinhança puxando ou empurrando a superfície através do atrito.

Considerando que a força de campo por unidade de massa atuando no elemento de fluido seja \vec{f} , com f_x como sua componente no eixo x . O volume do elemento de fluido é $(dxdydz)$, então:

$$\begin{aligned} \text{Forças de campo no} \\ \text{elemento de fluido} &= \rho f_x(dxdydz) \\ \text{atuando na direção } x \end{aligned} \quad (3.11)$$

As tensões de cisalhamento e normal em um fluido estão relacionadas à variação temporal da deformação do elemento de fluido, como mostrado na Figura 3.4 para o plano xy . A tensão de cisalhamento, denominada τ_{yx} na Figura 3.4a, está relacionada à variação temporal da deformação cisalhante do elemento de fluido, enquanto que a tensão normal, denominada τ_{xx} na Figura 3.4b, está relacionada com a variação temporal do volume do elemento

3.2 Equações do Modelo

de fluido. O resultado é que tanto a tensão de cisalhamento quanto a tensão normal dependem dos gradientes de velocidade no escoamento, que serão designados a seguir. Na maioria dos escoamentos viscosos, as tensões normais (como a τ_{xx}) são muito menores que as tensões de cisalhamento e muitas vezes não são levadas em conta. As tensões normais (como a τ_{xx} na direção x) se tornam importantes na medida que os gradientes da velocidade normal (como $\partial u/\partial x$) se tornam muito grandes, como no interior de ondas de choque.

As forças de superfície na direção x exercidas sobre o elemento de fluido podem ser vistas na Figura 3.3. A convenção usada será que τ_{ij} denota a tensão na direção j exercida no plano perpendicular ao eixo i . Na face $abcd$, a única força na direção x é devida à tensão de cisalhamento, $\tau_{yx}dx dz$. A face $efgh$ está a uma distância dy acima da face $abcd$; a tensão de cisalhamento nessa face é então $[\tau_{yx} + (\partial\tau_{yx}/\partial y)dy]dx dz$. Note a direção da força de cisalhamento nas faces $abcd$ e $efgh$; na face de baixo, τ_{yx} é para a esquerda (a direção negativa de x), enquanto que na face de cima, $\tau_{yx} + (\partial\tau_{yx}/\partial y)dy$ é para a direita (a direção positiva de x). Essas direções são consistentes com a convenção que incrementos positivos em todas as três componentes da velocidade, u, v e w , ocorrem na direção positiva dos eixos. Por exemplo, na Figura 3.3, u cresce na direção positiva de y . Assim, na face $efgh$, u é maior logo acima da face do que na face em si. Isto causa um efeito que tenta puxar o elemento de fluido na direção positiva de x (para a direita) como mostrado na Figura 3.3. Por outro lado, concentrando na face $abcd$, u é menor logo abaixo da face do que na face em si, isto causa um efeito de arrasto no elemento de fluido que age na direção negativa de x (para a esquerda) como mostrado na Figura 3.3. As direções de todas as outras tensões na Figura 3.3, incluindo τ_{xx} , podem ser justificadas da mesma forma. Especificamente na face $dcgh$, τ_{zx} age na direção negativa de x , enquanto na face $abfe$, $\tau_{zx} + (\partial\tau_{zx}/\partial z)dz$ age na direção positiva de x . Na face $adhe$, que é perpendicular ao eixo x , as únicas forças na direção x são a força de pressão $pdy dz$, que sempre age na direção *para dentro* do elemento de fluido, e $\tau_{xx}dy dz$, que é na direção negativa de x . Na Figura 3.3, a razão porque τ_{xx} na face $adhe$ é para a esquerda se baseia na convenção mencionada anteriormente para a direção da velocidade crescente. Aqui, por convenção, um incremento positivo em u se dá na direção positiva de x . Assim, o valor de u logo à esquerda da face $adhe$ é menor do que o valor na face em si. O resultado é que a ação viscosa da tensão normal age como uma "sucção" na face $adhe$, isto é, existe uma ação de arrasto para a esquerda que quer frear o movimento do elemento de fluido. Em contraste, na face $bcgf$, a força de

3.2 Equações do Modelo

pressão $[p + (\partial p/\partial x)dx]dydz$ pressiona para dentro do elemento de fluido (na direção negativa de x), e por causa do valor de u logo à direita da face $bcfg$ ser maior que o valor na face em si, há um efeito de "sucção" devido à tensão normal viscosa que tenta puxar o elemento para a direita (na direção positiva de x) com uma força igual à $[\tau_{xx} + (\partial\tau_{xx}/\partial x)dx]dydz$.

Com os fatos acima em mente, podemos escrever para o elemento de fluido:

$$\begin{aligned} \text{Força de superfície resultante na direção } x = & \left[p - \left(p + \frac{\partial p}{\partial x} dx \right) \right] dydz \\ & + \left[\left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx \right) - \tau_{xx} \right] dydz + \left[\left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dy \right) - \tau_{yx} \right] dx dz \\ & + \left[\left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dz \right) - \tau_{zx} \right] dx dy \end{aligned} \quad (3.12)$$

A força total na direção x , F_x , é dada pela soma das Equações (3.11) e (3.12). Somando, e cancelando alguns termos temos

$$F_x = \left[-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right] dx dy dz + p f_x dx dy dz \quad (3.13)$$

A Equação (3.13) representa o lado esquerdo da Equação (3.10).

Para resumir e reforçar o significado físico da força em um elemento de fluido, pode-se montar um diagrama da segunda lei de Newton da seguinte forma:

$$\begin{array}{ccccccc} & & & \overbrace{\vec{F} = m \cdot \vec{a}} & & & \\ & & & \underbrace{\hspace{10em}} & & & \\ & \text{Forças de campo} & & \text{Forças de superfície} & & & \\ \underbrace{\hspace{10em}} & & & \underbrace{\hspace{10em}} & & & \\ \text{Gravidade} & \text{Eletromagnética} & \text{Pressão} & & \text{Viscosas} & & \\ & & & & \underbrace{\hspace{10em}} & & \\ & & & & \text{Normal} & \text{Cisalhamento} & \\ & & & & (\tau_{xx}, \dots) & (\tau_{xy}, \dots) & \end{array}$$

3.2 Equações do Modelo

Considerando a parte direita da Equação (3.10), a massa do elemento de fluido é fixa e é igual a:

$$m = \rho dx dy dz \quad (3.14)$$

é notável também que a aceleração do fluido é a variação temporal da sua velocidade. Assim, a componente da aceleração na direção x , a_x , é simplesmente a variação temporal de u . Como estamos seguindo um elemento de fluido, essa variação temporal é dada pela derivada substantiva. Assim

$$a_x = \frac{Du}{Dt} \quad (3.15)$$

Combinando as Equações (3.10) e (3.13) até (3.15), temos

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x \quad (3.16a)$$

que é a componente x da equação de transporte de quantidade de movimento para escoamento viscoso. Do mesmo modo as componentes y e z podem ser obtidas:

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho f_y \quad (3.16b)$$

e

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho f_z \quad (3.16c)$$

As Equações (3.16a) até (3.16c) são respectivamente as componentes x , y e z da equação de conservação de quantidade de movimento. Elas são equações diferenciais parciais obtidas *diretamente* da aplicação de princípios físicos a um elemento de fluido infinitesimal. Como o elemento de fluido está se movendo com o escoamento, as Equações (3.16a) até (3.16c) estão na forma *não-conservativa*, pois mantém a derivada substantiva na sua forma final.

As equações de conservação de quantidade de movimento podem ser obtidas na forma conservativa, como será visto a seguir. Escrevendo a parte esquerda da Equação (3.16a) em termos da definição da derivada substantiva, obtém-se:

3.2 Equações do Modelo

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \nabla u \quad (3.17)$$

Expandindo a derivada temos

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} = \rho \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

rearranjando obtemos

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial \rho u}{\partial t} - u \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (3.18)$$

Lembrando a identidade vetorial para o divergente do produto de um escalar por um vetor, temos

$$\nabla \cdot (\rho u \vec{V}) = u \nabla \cdot (\rho \vec{V}) + (\rho \vec{V}) \cdot \nabla u$$

ou

$$\rho \vec{V} \cdot \nabla u = \nabla \cdot (\rho u \vec{V}) - u \nabla \cdot (\rho \vec{V}) \quad (3.19)$$

Substituindo as Equações (3.18) e (3.19) em (3.17).

$$\begin{aligned} \rho \frac{Du}{Dt} &= \rho \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} - u \frac{\partial \rho}{\partial t} - u \nabla \cdot (\rho \vec{V}) + \nabla \cdot (\rho u \vec{V}) \\ &= \rho \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} - u \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) \right] + \nabla \cdot (\rho u \vec{V}) \end{aligned} \quad (3.20)$$

O termo entre colchetes na Equação (3.20) é simplesmente a parte esquerda da equação da continuidade, a Equação (3.8), então o termo entre colchetes é zero. Assim a Equação (3.20) se reduz a

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \rho \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \vec{V}) \quad (3.21)$$

Substituindo a Equação (3.21) na (3.16a), temos

3.2 Equações do Modelo

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \vec{V}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x \quad (3.22a)$$

Da mesma forma as Equações (3.16b) e (3.16c) podem ser expressas como

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \vec{V}) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho f_y \quad (3.22b)$$

e

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho w \vec{V}) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho f_z \quad (3.22c)$$

As Equações (3.22a) até (3.22c) são as equações de conservação de quantidade de movimento na forma *conservativa*.

No século XVII, Isaac Newton postulou que tensões de cisalhamento em um fluido são proporcionais aos gradientes de velocidade. Fluidos que seguem essa lei são chamados *fluidos newtonianos*. (Fluidos nos quais τ não é proporcional ao gradiente de velocidade são chamadas não-newtonianos; o sangue é um exemplo). Para os fluidos newtonianos, Stokes obteve em 1845:

3.2 Equações do Modelo

$$\tau_{xx} = \lambda(\nabla \cdot \vec{V}) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \quad (3.23a)$$

$$\tau_{yy} = \lambda(\nabla \cdot \vec{V}) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \quad (3.23b)$$

$$\tau_{zz} = \lambda(\nabla \cdot \vec{V}) + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \quad (3.23c)$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left[\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right] \quad (3.23d)$$

$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \left[\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right] \quad (3.23e)$$

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left[\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right] \quad (3.23f)$$

onde μ é coeficiente de viscosidade molecular e λ é o segundo coeficiente de viscosidade. Stokes fez a hipótese que

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu \quad (3.24)$$

que é frequentemente utilizada mas ainda não foi definitivamente confirmada até o momento. Essa hipótese despreza a influência do rotacional na formação de λ .

Substituindo as Equações (3.23) em (3.22), obtém-se as equações de Navier-Stokes completas na forma conservativa:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial z} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \nabla \cdot \vec{V} + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + \rho f_x \end{aligned} \quad (3.25a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial z} &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \nabla \cdot \vec{V} + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right] + \rho f_y \end{aligned} \quad (3.25b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w^2)}{\partial z} &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \nabla \cdot \vec{V} + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \rho f_z \end{aligned} \quad (3.25c)$$

Elas são chamadas de *equações de Navier-Stokes* em homenagem a dois homens - o francês M. Navier e o inglês G. Stokes - que obtiveram independentemente a equação na primeira metade do século XIX.

3.2.3 Equação de Conservação de Energia

Nesta seção, se aplicará o seguinte princípio:

- *Princípio físico*: Energia é conservada

Será usado o mesmo modelo de elemento de fluido infinitesimal movendo-se com o fluido (Figura 3.3) usado na derivação na equação de conservação de quantidade de movimento (Equação 3.25). O princípio físico apresentado acima é nada mais que a primeira lei da termodinâmica. Quando aplicada ao modelo de escoamento de um elemento de fluido movendo-se com o escoamento, a primeira lei diz que:

Taxa de variação da energia dentro do elemento de fluido	=	Fluxo resultante de calor para dentro + do elemento	Taxa de trabalho feito no elemento pelas forças de campo e de superfície
--	---	---	--

3.2 Equações do Modelo

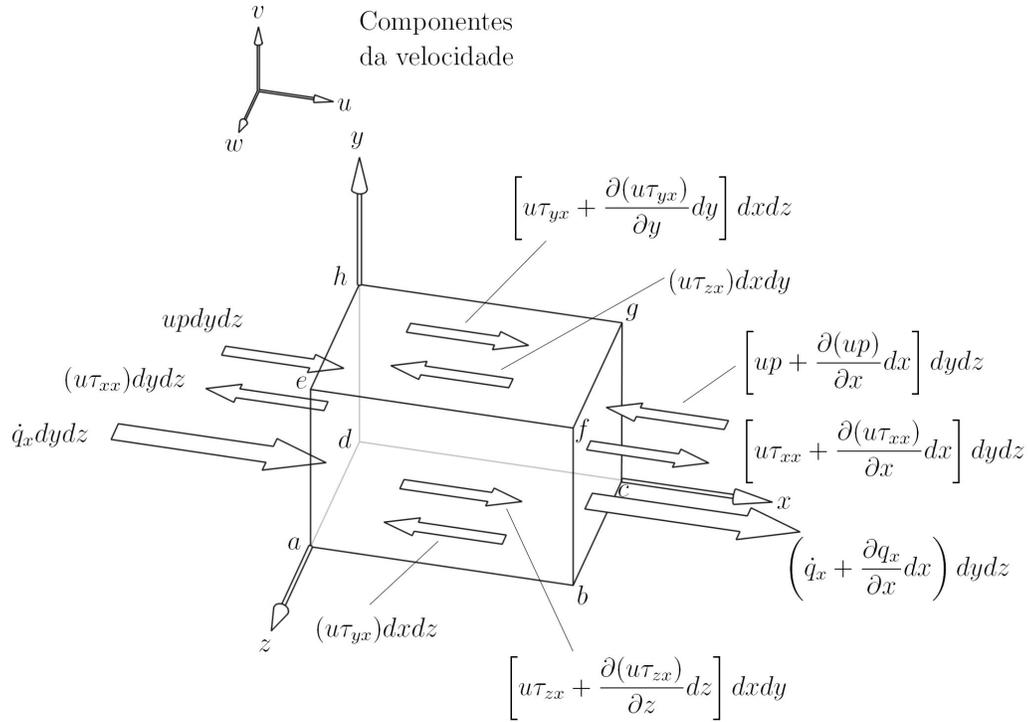


Figura 3.5: Fluxos de energia associados a um elemento de fluido infinitesimal e móvel. Somente os fluxos na direção x podem ser vistos. Este modelo é usado na derivação da equação de conservação da energia.

ou

$$A = B + C \quad (3.26)$$

onde A, B e C denotam os respectivos termos.

O primeiro termo que receberá atenção será o termo C . Uma equação para a taxa de trabalho feito no elemento de fluido pelas forças de campo e de superfície. A taxa de trabalho feita sobre um corpo móvel por uma força é igual ao produto da força e da componente da velocidade na direção da força. De modo que a taxa de trabalho feito pelas forças de campo atuando em um elemento de fluido se movendo a uma velocidade \vec{V} é

3.2 Equações do Modelo

$$\rho \vec{f} \cdot \vec{V}(dxdydz)$$

Durante a análise das forças de superfície (pressão mais tensões normal e de cisalhamento), forças na direção x serão usadas, como pode ser visto na Figura 3.3. A taxa de trabalho feita sobre o elemento de fluido móvel pela pressão e pelas forças de cisalhamento na direção x na Figura 3.3 é simplesmente a componente na direção x da velocidade, u , multiplicada pelas forças. Por exemplo, na face $abcd$ a taxa de trabalho feita por $\tau_{yx}dxdz$ é $u\tau_{yx}dxdz$, com expressões similares nas outras faces. Para enfatizar essas considerações energéticas, o elemento de fluido foi redesenhado na Figura 3.5, onde as taxas de trabalho feito em cada face por forças de superfície podem ser vistas explicitamente. Para a obtenção do valor *resultante* da taxa de trabalho feito sobre o elemento de fluido pelas forças de superfície, deve-se observar que forças na direção de x positivo produzem trabalho positivo e que forças na direção de x negativo produzem trabalho negativo. Assim, comparando as forças de superfície na face $adhe$ e $bcgf$ na Figura 3.5, a taxa de trabalho feito pela pressão resultante na direção x é

$$\left[up - \left(up + \frac{\partial(up)}{\partial x} dx \right) \right] dydz = -\frac{\partial(up)}{\partial x} dxdydz$$

Do mesmo modo, a taxa de trabalho feito pelas tensões de cisalhamento na direção x nas faces $abcd$ e $efgh$ é

$$\left[\left(u\tau_{yx} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} dy \right) - u\tau_{yx} \right] dxdz = \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} dxdydz$$

Considerando todas as forças de superfície da Figura 3.5, a taxa de trabalho no elemento de fluido por essas forças é simplesmente

$$\left[-\frac{\partial(up)}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \right] dxdydz$$

A expressão acima considera apenas as forças de superfície na direção x . Quando as forças nas direções y e z são incluídas, expressões similares são obtidas. A taxa de trabalho feito no elemento de fluido é a soma das contribuições nas direções x , y e z , assim como a contribuição das forças de campo. Este é o termo C da Equação (3.26) e é dado por

3.2 Equações do Modelo

$$C = \left[- \left(\frac{\partial(up)}{\partial x} + \frac{\partial(vp)}{\partial y} + \frac{\partial(wp)}{\partial z} \right) + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} \right. \\ \left. + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} \right. \\ \left. + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \right] dx dy dz + \rho \vec{f} \cdot \vec{V} dx dy dz \quad (3.27)$$

Note que na Equação (3.27) os primeiros três termos do lado esquerdo são simplesmente $\nabla \cdot (p\vec{V})$.

Atenção será dada agora ao item *B* da Equação (3.26), isto é, ao fluxo resultante de calor para dentro do elemento. Este fluxo de calor é devido a dois fatores: (*a*) ao aquecimento volumétrico, como o provocado por absorção ou emissão de radiação e (*b*) transferência de calor através da superfície devido à gradientes de temperatura, isto é, condução térmica. Define-se \dot{q} como a taxa variação de calor volumétrica por unidade de massa. Notando que a massa do elemento de fluido da Figura 3.5 é $\rho dx dy dz$, obtém-se

$$\text{Aquecimento volumétrico do elemento} = \rho \dot{q} dx dy dz \quad (3.28)$$

na Figura 3.5, o calor transferido por condução térmica para dentro do elemento de fluido através da face *adhe* é $\dot{q}_x dy dz$, onde \dot{q}_x é o calor transferido na direção *x* por unidade de tempo e por unidade de área por condução térmica, isto é, \dot{q}_x é o *fluxo térmico* na direção *x* que atravessa a face *adhe*. O calor transferido através da face *bcgf* é $[\dot{q}_x + (\partial\dot{q}_x/\partial x)dx] dy dz$. Assim, o calor transferido resultante na direção *x* para dentro do elemento por condução térmica é

$$\left[\dot{q}_x - \left(\dot{q}_x + \frac{\partial\dot{q}_x}{\partial x} dx \right) \right] dy dz = - \frac{\partial\dot{q}_x}{\partial x} dx dy dz$$

Levando em conta a transferência de calor na direções *y* e *z* através das outras faces na Figura 3.5, obtém-se

$$\begin{array}{l} \text{Aquecimento do} \\ \text{elemento de fluido por} \\ \text{condução térmica} \end{array} = - \left(\frac{\partial\dot{q}_x}{\partial x} + \frac{\partial\dot{q}_y}{\partial y} + \frac{\partial\dot{q}_z}{\partial z} \right) dx dy dz \quad (3.29)$$

3.2 Equações do Modelo

O termo B na Equação (3.26) é a soma das Equações (3.28) e (3.29).

$$B = \left[\rho \dot{q} - \left(\frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} + \frac{\partial \dot{q}_y}{\partial y} + \frac{\partial \dot{q}_z}{\partial z} \right) \right] dx dy dz \quad (3.30)$$

O fluxo de calor causado por condução térmica, descrito na equação de Fourier de condução de calor, é proporcional ao gradiente local de temperatura:

$$\dot{q}_x = -k \frac{\partial T}{\partial x} \quad \dot{q}_y = -k \frac{\partial T}{\partial y} \quad \dot{q}_z = -k \frac{\partial T}{\partial z}$$

onde k é a condutividade térmica. A Equação (3.30) pode ser escrita como

$$B = \left[\rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right] dx dy dz \quad (3.31)$$

Finalmente, o termo A na Equação (3.26) denota a taxa de variação temporal da energia no interior do elemento de fluido. A energia da qual trata a primeira lei da termodinâmica, nesse caso, é a *energia interna*. A energia interna é simplesmente a soma da energia de cada molécula ou átomo do sistema. Um exame mais profundo do termo A da Equação (3.26) considera um meio que está se *movendo*, isto é, o termo A trata de um elemento de fluido móvel. Assim, existem duas contribuições para a energia do elemento de fluido:

1. A energia interna originada do movimento randômico das moléculas, e (por unidade de massa). Esta é a energia descrita acima.
2. A energia cinética devido ao movimento de translação do elemento de fluido. A energia cinética por unidade de massa é simplesmente $V^2/2$.

Conseqüentemente, o elemento de fluido móvel possui tanto energia *interna* quanto *cinética*, a soma dessas duas é a energia "total". Na Equação (3.26), a energia no termo A é a energia total, isto é, $e + V^2/2$. Como estamos seguindo um elemento de fluido móvel, a taxa de variação temporal da energia total por unidade de massa é dada pela derivada substancial. Como a massa do elemento de fluido é $\rho dx dy dz$, têm-se

$$A = \rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{V^2}{2} \right) dx dy dz \quad (3.32)$$

3.2 Equações do Modelo

A forma final da equação de conservação de energia é obtida substituindo-se as Equações (3.27), (3.30) e (3.32) em (3.26):

$$\begin{aligned} \rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{V^2}{2} \right) = & \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\ & - \frac{\partial(uv)}{\partial x} - \frac{\partial(vp)}{\partial y} - \frac{\partial(wp)}{\partial z} + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} \\ & + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} + \rho \vec{f} \cdot \vec{V} \end{aligned} \quad (3.33)$$

Esta é a forma *não-conservativa* da equação de conservação de energia, pois está em termos da derivada substancial da energia total, $e + V^2/2$. A forma não-conservativa resulta do uso de um modelo de elemento de fluido *móvel*.

O lado esquerdo da Equação (3.33) envolve a derivada substancial da energia total, $D(e + V^2/2)/Dt$. Está é somente uma das muitas formas da equação de conservação de energia, ela é obtida através da aplicação direta do princípio da conservação da energia a um elemento de fluido móvel. Esta equação pode facilmente ser modificada em dois aspectos:

1. O lado esquerdo da equação pode ser expresso em termos somente da energia interna e , ou somente da entalpia estática h , ou somente da entalpia total $h_0 = h + V^2/2$. Para cada caso, o lado direito da equação também sofre mudanças.
2. Para cada umas das diferentes formas da equação de conservação de energia citadas acima, existe a forma conservativa e a não-conservativa.

O processo de se obter a Equação (3.33) na forma conservativa é demonstrado a seguir. Para facilitar a visualização do processo, será usada somente a energia interna e na obtenção do termo não-conservativo. Da definição de derivada substancial,

$$\rho \frac{De}{Dt} = \rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \nabla e \quad (3.34)$$

3.2 Equações do Modelo

No entanto

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} = \rho \frac{\partial e}{\partial t} + e \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

ou

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} = \frac{\partial(\rho e)}{\partial t} - e \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (3.35)$$

Da identidade vetorial a respeito do divergente do produto de um escalar multiplicado por um vetor,

$$\nabla \cdot (\rho e \vec{V}) = e \nabla \cdot (\rho \vec{V}) + \rho \vec{V} \cdot \nabla e$$

ou

$$\rho \vec{V} \cdot \nabla e = \nabla \cdot (\rho e \vec{V}) - e \nabla \cdot (\rho \vec{V}) \quad (3.36)$$

Substituindo as Equações (3.35) e (3.36) na (3.34), temos

$$\rho \frac{De}{Dt} = \frac{\partial(\rho e)}{\partial t} - e \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) \right] + \nabla \cdot (\rho e \vec{V}) \quad (3.37)$$

O termo entre colchetes é a equação da continuidade, Equação (3.8), cujo valor é zero. Assim a Equação (3.37) torna-se

$$\rho \frac{De}{Dt} = \frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \vec{V}) \quad (3.38)$$

Repetindo os passos da Equação (3.34) até (3.38) substituindo a energia interna e pela energia total $e + V^2/2$, obtém-se

$$\rho \frac{D(e + V^2/2)}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \right] \quad (3.39)$$

Substituindo a Equação (3.39) na (3.33), temos

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \right] &= \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \\
 + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \frac{\partial (up)}{\partial x} - \frac{\partial (vp)}{\partial y} - \frac{\partial (wp)}{\partial z} \\
 + \frac{\partial (u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial (u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial (u\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial (v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial (v\tau_{yy})}{\partial y} \\
 + \frac{\partial (v\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial (w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial (w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial (w\tau_{zz})}{\partial z} + \rho \vec{f} \cdot \vec{V} \quad (3.40)
 \end{aligned}$$

A Equação (3.40) é a forma *conservativa* da equação de conservação de energia, em termos da energia total $e + V^2/2$. As manipulações para transformar a Equação (3.33) (não conservativa) na Equação (3.40) (conservativa), não afetam o termo do lado direito da equação, somente o termo do lado esquerdo.

3.2.4 Modelagem da Turbulência

"O problema da turbulência está longe de ser resolvido, tanto em relação ao entendimento matemático e intuitivo quanto a obtenção de resultados precisos para aplicações que dependem de escoamentos viscosos" (Spalart, 2000).

Escoamentos turbulentos são caracterizados por campos de velocidade com valores flutuantes. Essas flutuações afetam quantidades transportadas como quantidade de movimento, energia e concentração de espécies químicas. A solução direta do escoamento em todas suas escalas e frequências é conhecida como simulação numérica direta (Direct Numerical Simulation, DNS). Como as flutuações podem ser de pequena escala e alta frequência, demandam um esforço computacional muito grande para serem resolvidas diretamente em problemas práticos de engenharia. Assim, ao invés de se resolver as equações de transporte instantâneas, elas podem sofrer manipulações e serem tomadas como uma média temporal ou no espaço, ou ainda de outra forma que permita se resolver as pequenas escalas, resultando em um novo grupo de equações que demandem menos poder computacional para serem resolvidas. Essas equações são conhecidas como RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes). Contudo, as equações modificadas acrescentam novas variáveis ao problema, e modelos de turbulência são necessários para se determinar essas novas variáveis a partir das variáveis conhecidas. Uma solução

3.2 Equações do Modelo

intermediária entre essas duas é a simulação de grandes vórtices (Large Eddy Simulation, LES), em que os grandes vórtices são resolvidos diretamente e os vórtices pequenos, que passam por uma espécie de filtro, são modelados usando uma abordagem semelhante às equações do tipo RANS. Existem também os modelos algébricos, que são os mais simples mas possuem aplicação limitada em geometrias complexas.

As classes de modelos de turbulência podem ser divididas, em ordem crescente de custo computacional:

- Modelos algébricos
- Modelos tipo RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes)
 - Modelos de duas equações
 - * $k-\epsilon$ e $k-\omega$ e suas variantes
 - Modelos de sete equações
 - * Modelo de Tensão de Reynolds (Reynolds-Stress Model, RSM)
- Simulação de grandes vórtices (Large Eddy Simulation, LES)
- Simulação numérica direta (Direct Numerical Simulation, DNS)

Os modelos algébricos são os mais simples, porém inadequados para tratar escoamentos internos com geometrias complexas, como o reator a ser simulado.

Os modelos tipo RANS de duas equações, como o $k-\epsilon$, o $k-\omega$ e suas variantes, proporcionam um bom custo/benefício para a modelagem de turbulência em reatores com partes móveis. O modelo de tensões de Reynolds proporcionam geralmente um melhor resultado que os modelos de duas equações em situações em que a turbulência não é isotrópica, porém são muito mais sensíveis e de difícil convergência.

Os modelos LES e DNS são impraticáveis para o problema em questão, tanto por necessitarem de malhas muito mais refinadas que os modelos anteriores quanto pelo extremo esforço computacional para resolver todas as escalas de turbulência.

Assim, será utilizado o modelo $k-\epsilon$ para a modelagem da turbulência, pela melhor relação custo computacional/resultado que ele proporciona.

3.2.5 Modelo de Turbulência k- ϵ

O modelo de turbulência k- ϵ é o modelo tipo RANS mais usado em problemas de engenharia desde sua introdução por Jones and Launder (1972). O modelo é robusto, econômico e possui resultados razoavelmente exatos para uma grande variedade de escoamentos turbulentos, o que explica a sua popularidade em simulações de escoamentos industriais e transferência de calor.

As equações do modelo, em notação tensorial, são:

Viscosidade turbulenta

$$\mu_T = \rho C_\mu k^2 / \epsilon \quad (3.41)$$

Energia Cinética Turbulenta

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \rho \epsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_T / \sigma_k) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (3.42)$$

Taxa de dissipação

$$\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} = C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - C_{\epsilon 2} \rho + \frac{\partial \epsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_T / \sigma_\epsilon) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] \quad (3.43)$$

Constantes empíricas, como em Wilcox (1994)

$$C_{\epsilon 1} = 1,44 \quad C_{\epsilon 2} = 1,92 \quad C_\mu = 0,09 \quad \sigma_k = 1,0 \quad \sigma_\epsilon = 1,3 \quad (3.44)$$

Relações auxiliares

$$\omega = \epsilon / (C_\mu k) \quad \text{e} \quad \ell = C_\mu k^{3/2} / \epsilon \quad (3.45)$$

A derivação do modelo com mais detalhes pode ser vista em Jones and Launder (1972) e em Wilcox (1994).

Tratamento da região próxima à parede

A presente seção foi extraída do manual do software FLUENT (FLUENT 6.2 User's Guide).

Escoamentos turbulentos são significativamente afetados pela presença de paredes. O campo de velocidades médio é claramente afetado pela condição de não-escorregamento que deve ser aplicada nas paredes.

Os modelos de turbulência $k-\epsilon$, RSM e LES são válidos a princípio apenas no núcleo turbulento do escoamento (isto é, na região mais afastada das paredes). Deve-se então tomar cuidados adicionais para que esses modelos sejam válidos para escoamentos próximos às paredes.

Existem duas abordagens para se modelar a região próxima à parede. Em uma abordagem, a sub-camada laminar e a região de transição não são resolvidas. Ao invés disso, utiliza-se formulações semi-empíricas chamadas de *funções de parede* que atuam como uma espécie de ponte entre a região próxima à parede e o núcleo turbulento. O uso de funções de parede elimina a necessidade de modificar os modelos de turbulência para se levar em conta a presença de paredes.

Uma outra abordagem é modificar os modelos de turbulência para que eles sejam capazes de resolver totalmente a região próxima à parede, incluindo a sub-camada laminar.

Na maioria dos escoamentos com alto número de Reynolds, a abordagem usando funções de parede economiza recursos computacionais, pois a região próxima à parede, onde as variáveis mudam mais rapidamente, não precisa ser resolvida. A abordagem usando funções de parede é muito usada para simulações de escoamentos industriais pois é robusta, econômica e razoavelmente precisa.

É a abordagem usando funções de parede que será utilizada nas simulações deste trabalho, pois ela gera bons resultados, poupando os limitados recursos computacionais disponíveis.

A função de parede implementada no código FLUENT é descrita por:

$$U^* = \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^*) \quad (3.46)$$

onde

$$U^* \equiv \frac{U_P C_\mu^{1/4} \kappa_P^{1/2}}{\mu} \quad (3.47)$$

$$y^* \equiv \frac{\rho C_\mu^{1/4} \kappa_P^{1/2} y_P}{\mu} \quad (3.48)$$

A lei logarítmica da velocidade média é válida no intervalo $30 < y^* < 300$. No FLUENT, a lei logarítmica é aplicada quando $y^* > 11,225$.

Quando a malha é tal que o valor de y^* é menor que 11,225, será aplicada uma correlação laminar entre tensões que pode ser escrita como

$$U^* = y^* \quad (3.49)$$

3.3 Método dos Volumes Finitos

As seções anteriores foram dedicadas à apresentação das equações diferenciais que regem os fenômenos físicos que se deseja estudar. Esses fenômenos são basicamente o escoamento (descrito pelas equações da continuidade, de conservação de quantidade de movimento e pelo modelo de turbulência) e a troca de calor (descrita pela equação de conservação da energia).

A tarefa de um método numérico é resolver uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes por expressões algébricas que envolvem a função incógnita (Maliska, 2004).

O método de volumes finitos é por vezes confundido com o método das diferenças finitas pelo fato de que, em vários casos, as equações discretizadas obtidas por ambos os métodos são iguais. Entretanto, os dois métodos têm bases de formulação bastante diferentes. Enquanto o método de diferenças finitas tem uma dedução puramente matemática, a partir das aproximações de derivadas usando séries de Taylor, a formulação do método de volumes finitos tem base física.

Segundo Maliska (2004), todo método que, para obter as equações aproximadas, satisfaz a conservação da propriedade em nível de volumes elementares é um método de volumes finitos. Existem duas maneiras de se obter as equações aproximadas no método dos volumes finitos. A primeira é a realização de balanços da propriedade em questão nos volumes elementares, ou volumes finitos, e a segunda é integrar sobre o volume elementar, no espaço e no tempo, as equações na forma conservativa. Forma conservativa é

3.3 Método dos Volumes Finitos

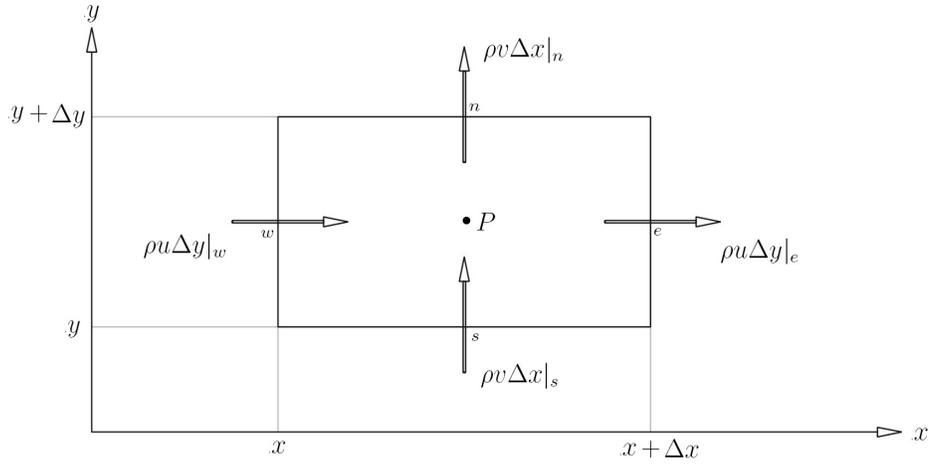


Figura 3.6: Volume elementar para os balanços de conservação.

aquela em que na equação diferencial os fluxos estão dentro do sinal da derivada e, na primeira integração, aparecem os fluxos na fronteiras do volume elementar, equivalente, portanto, ao balanço.

É fácil reconhecer que os processos são equivalentes, pois basta lembrar que, para deduzir as equações diferenciais que representam os fenômenos físicos, é necessário primeiro realizar um balanço em volume finito, fazendo-se, em seguida, o processo de limites para obter a equação diferencial. Para ilustrar a conexão entre as equações aproximadas usadas no método dos volumes finitos e as equações diferenciais na forma conservativa, considere o volume elementar bidimensional mostrado na Figura 3.6. O interesse, nesse momento, é deduzir a equação diferencial que representa a conservação da massa em regime permanente. O balanço de massa no volume elementar mostrado na figura é dado por:

$$\dot{m}_e - \dot{m}_w + \dot{m}_n - \dot{m}_s = 0 \quad (3.50)$$

3.3 Método dos Volumes Finitos

que é exatamente a conservação de massa para regime permanente. Em termos das velocidades, para o volume elementar no sistema de coordenadas cartesianas, temos

$$\rho u \Delta y|_e - \rho u \Delta y|_w + \rho v \Delta x|_n - \rho v \Delta x|_s = 0 \quad (3.51)$$

onde as letras minúsculas e, w, n e s na Figura 3.6 representam, respectivamente, os pontos cardeais leste, oeste, norte e sul e são a nomenclatura usada para identificar as faces do volume de controle na discretização numérica. Dividindo a equação 3.51 pelo produto $\Delta x \Delta y$, encontramos

$$\frac{\rho u|_e - \rho u|_w}{\Delta x} + \frac{\rho v|_n - \rho v|_s}{\Delta y} = 0 \quad (3.52)$$

que, após a aplicação do limite, resulta na forma diferencial conservativa da equação de conservação da massa

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0 \quad (3.53)$$

A Equação 3.53 está na forma conservativa, pois os produtos ρu e ρv estão dentro dos sinais de derivada. A equação de conservação para um volume finito é um passo intermediário para se obter a equação de conservação em nível infinitesimal.

A obtenção de uma aproximação numérica da equação da conservação da massa infinitesimal através da sua integração no volume elementar é a prática corrente do método dos volumes finitos. Realizando a integração da Equação 3.53 sobre o volume mostrado na Figura 3.6, obtém-se

$$\int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) \right] dx dy = 0 \quad (3.54)$$

$$\int_s^n [\rho u|_e + \rho u|_w] dy + \int_w^e [\rho v|_n + \rho v|_s] dx = 0 \quad (3.55)$$

Considerando que o fluxo de massa avaliado no meio da face do volume de controle representa a média da variação na face, podemos escrever

$$\rho u \Delta y|_e - \rho u \Delta y|_w + \rho v \Delta x|_n - \rho v \Delta x|_s = 0 \quad (3.56)$$

que é exatamente a Equação 3.51, obtida através do balanço. Essa equação pode ser também escrita como

$$\dot{m}_e - \dot{m}_w + \dot{m}_n - \dot{m}_s = 0 \quad (3.57)$$

Essa equação, ou a Equação 3.50, é a equação aproximada que vale para o volume P . Portanto, realizar a integração da forma conservativa da equação diferencial ou fazer o balanço são procedimentos equivalentes. Realizando a integração para todos os volumes elementares obtém-se um sistema de equações algébricas, cuja solução é a solução numérica procurada para o problema.

3.4 Modelagem do Fluido

Tendo em vista o objetivo do trabalho (ver seção 1.1), que busca apenas uma avaliação térmica do reator, não se incluiu todas as características do sistema reacional no modelo.

O sistema reacional real é trifásico, com uma fase sólida composta de grãos de TPA, um meio líquido formado pelo EG e pelos produtos da solubilização do TPA e da reação de esterificação, e finalmente um meio gasoso formado pelos vapores da água formada na reação de esterificação e por uma parcela do EG que evapora devido à alta temperatura.

A proposta desse trabalho é modelar esse sistema reacional com somente uma fase, líquida, com as características reológicas e térmicas médias do meio reacional.

As características do fluido modelado podem ser vistas na Tabela 3.4.

3.4.1 Influência da Reação

Dois processos físicos afetam diretamente o perfil térmico do reator: o calor da reação de esterificação (ver seção 2.3) e o processo de evaporação da água de reação e do excesso de EG.

3.5 Desenvolvimento da Malha Computacional

Propriedade	Unidade	Valor
ρ	kg/m^3	1100
μ	$Pa.s$	0,003
K	$W/m.K$	0,15
C_P	$J/kg.K$	$711,16 + 2,3640.T$

Tabela 3.1: Dados do fluido modelado.

Segundo dados fornecidos pela empresa M&G, o calor liberado pela reação de esterificação é desprezível frente ao calor latente de vaporização da água e do EG.

Como o modelo do sistema reacional utilizou apenas uma fase líquida, o processo de evaporação não fez parte das simulações.

Como o calor de reação é desprezível e a evaporação não foi simulada, fará parte do modelo apenas o efeito do aquecimento do meio líquido pela serpentina.

3.5 Desenvolvimento da Malha Computacional

Os modernos pacotes de fluido dinâmica computacional utilizam malhas não-estruturadas (ver FLUENT 6.2 User's Guide). As maiores diferenças entre malhas não-estruturadas e estruturadas é que os elementos não precisam ser posicionados exatamente em linhas e colunas, tornando o processo de construção da malha mais simples e possibilitando o uso de outros tipos de elementos que não os hexaédricos. Na construção da malha computacional, existem quatro tipos de volumes de controle em três dimensões: o hexaedro (com quadriláteros nas seis faces) e o tetraedro (com triângulos nas quatro faces) são os principais, o prisma (dois triângulos conectados por três quadriláteros) e a pirâmide (quatro triângulos ligados aos lados de um quadrilátero) são usados com menor frequência (ver Figura 3.7). Maliska (2004) argumenta que os elementos tetraédricos possuem maior versatilidade que os hexaédricos para representar geometrias complexas, com a desvantagem de que esse tipo de elemento gera dificuldades em problemas de camada limite, onde o refino na parede é importante, e principalmente na aplicação das funções de parede em escoamentos turbulentos. Pode-se utilizar alguns artifícios para

melhorar a resolução perto das paredes com os elementos tetraédricos, mas como o escoamento a ser estudado é turbulento, em especial ao redor dos impelidores, se fará uso somente de elementos hexaédricos.

A Figura 3.8 mostra as fronteiras do domínio computacional usado na simulação. O modelo compreende uma fatia de um sexto do reator, com condições de contorno periódicas nos planos de corte. O eixo e os impelidores estão em vermelho e os discos separadores em azul. Os impelidores numerados 1 e 4 são impelidores do tipo axial e os impelidores numerados 2 e 3 são do tipo radial. As Figuras 3.9 e 3.10 mostram detalhes das malhas dos impelidores axiais e radiais, respectivamente.

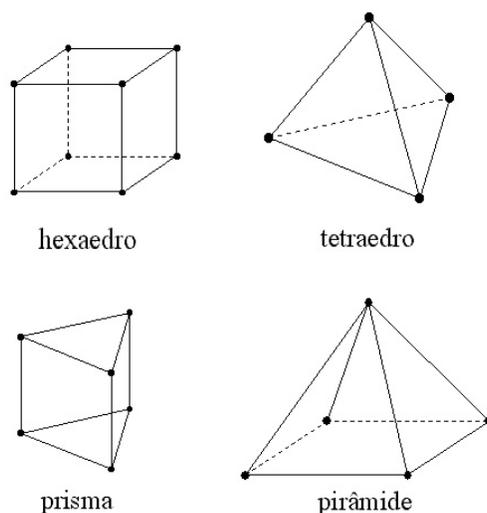


Figura 3.7: Tipos de elementos tridimensionais.

3.5.1 Restrições

A maior restrição à construção da malha computacional é a quantidade de memória disponível nos computadores. Usando o esquema de solução segregado, e resolvendo as variáveis: pressão, três componentes da velocidade, modelo de turbulência $k - \epsilon$ e energia, cada elemento da malha usa por volta de um megabyte de memória RAM. Por uma limitação do ambiente Windows de 32 bits, o maior processo alocável na memória teve ter 3 gigabytes,

3.5 Desenvolvimento da Malha Computacional

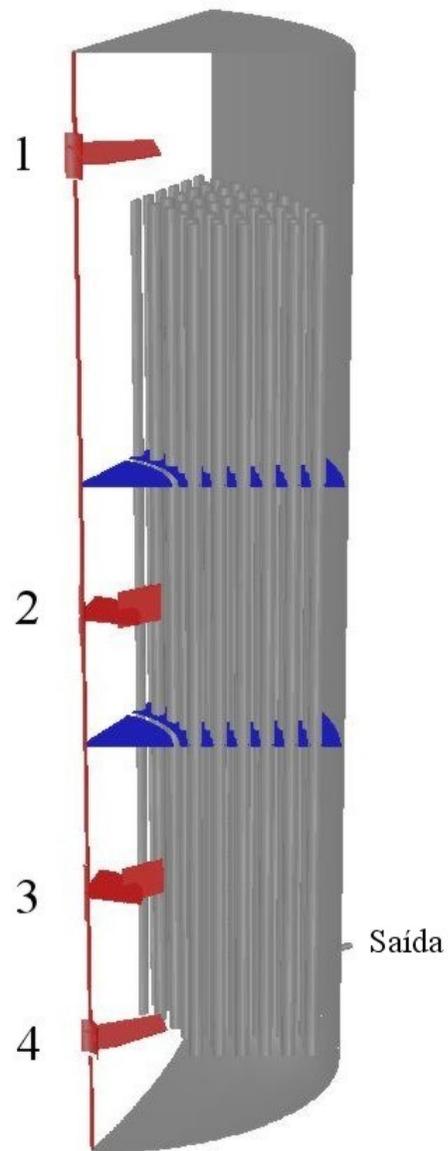


Figura 3.8: Domínio computacional usado na simulação. O eixo e os impelidores estão em vermelho e os discos separadores em azul.

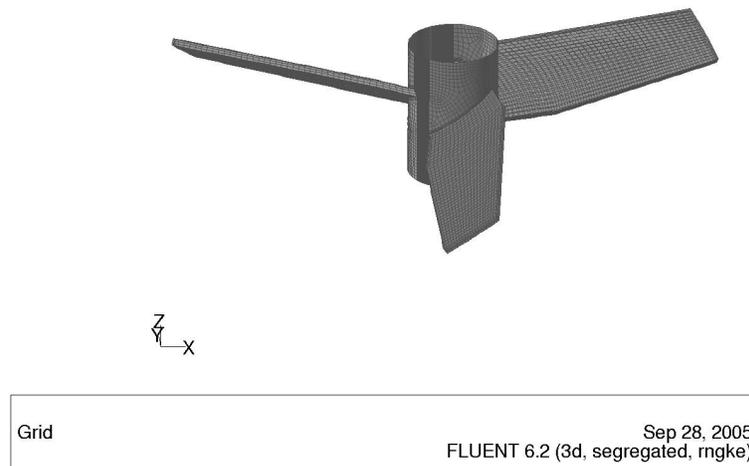


Figura 3.9: Detalhe da malha do impelidor axial.

o que limita o tamanho máximo da malha em aproximadamente 3 milhões de elementos.

3.5.2 Aplicação das Condições de Contorno

As condições de contorno impostas nas fronteiras do domínio computacional podem ser vistas na Tabela 3.2.

Uma importante etapa do projeto é a correta aplicação das condições de contorno nos impelidores, pelo fato destes se moverem em relação ao resto do reator. De maneira geral, pode-se escolher entre três diferentes maneiras de se especificar as condições de contorno em malhas móveis rotativas (ver FLUENT 6.2 User's Guide):

- **Técnica de sistema de referência múltiplo** (*Multiple Reference Frame*, MRF) consiste na divisão do domínio computacional em dois blocos separados por uma interface, onde o bloco contendo o impelidor gira com a velocidade angular do eixo e o volume contendo as paredes do reator e demais partes fixas permanecem em repouso. Nessa técnica,

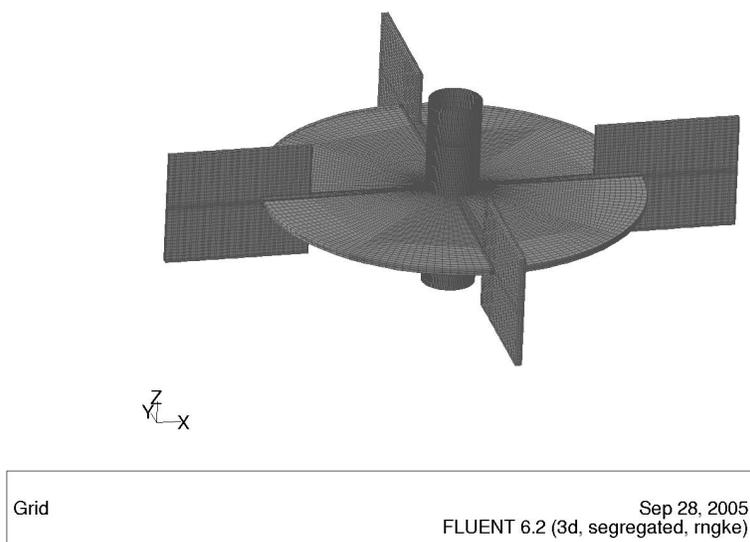


Figura 3.10: Detalhe da malha do impelidor radial.

a malha permanece estática e a solução obtida é em estado estacionário, o que restringe sua utilização em sistemas com pequena interação entre o impelidor e os outros componentes do sistema. O ganho em termos de esforço computacional justifica o uso deste modelo, principalmente porque o problema tridimensional exige uma malha muito refinada.

- **Técnica de plano de mistura** (*Mixing Plane*). Esta técnica é intermediária entre a solução em estado estacionário da MRF e a solução totalmente transiente da malha deslizante que será descrita a seguir. O domínio computacional é tratado da mesma forma do que na técnica MRF, porém os resultados de cada malha adjacente são transferidos como uma média, "misturados", pela interface. Essa técnica permite a solução de problemas com um grau maior de interação entre o impelidor e os outros componentes estáticos do sistema.
- **Técnica de malha deslizante** (*Sliding Mesh*). Assim como na técnica MRF, a malha tridimensional é dividida em dois blocos separados por uma interface sendo que o bloco contendo o agitador gira com a velocidade angular do eixo e o bloco contendo a parede e outros internos

3.6 Obtenção da Solução

Fronteira do domínio	Velocidade	Temperatura
Paredes externas	$V = 0$	$\partial T / \partial n = 0$
Paredes internas	$V = 0$	$T = T_{fluido}$
Serpentinas	$V = 0$	$T = 297^{\circ}\text{C}$
Impelidores	Velocidade rotacional	$\partial T / \partial n = 0$
Superfície livre do líquido	Velocidade prescrita	$T = 40^{\circ}\text{C}$
Saída (localmente parabólica)	$\partial V / \partial n = 0$	$\partial T / \partial n = 0$

Tabela 3.2: Condições de contorno para as diversas fronteiras do domínio.

do reator permanecem estáticos. A principal diferença é que nesta técnica a malha realmente se deforma, acompanhando a rotação imposta. Esta análise é transiente, assim como o caso real. Os resultados obtidos são mais precisos, porém exigem um maior esforço computacional para atingir a convergência.

Devido às restrições na construção da malha computacional (ver seção 3.5.1 e 3.7), fez-se o uso de condições de periodicidade para diminuir o domínio e conseqüentemente o número de elementos da malha. A periodicidade dos domínio que contém as serpentinas, os impelidores radiais e os impelidores axiais são respectivamente 60° , 90° e 120° . Ocorre que a técnica de malha deslizante e a técnica de plano de mistura só podem ser utilizadas quando existe apenas uma condição de periodicidade. Como o modelo criado possui três diferentes periodicidades, utilizou-se a técnica MRF para se aplicar as condições de contorno nos impelidores, mesmo sendo a técnica de malha deslizante a condição de contorno ideal para o modelo. Apesar disso, os resultados não foram comprometidos, como pode ser visto no Capítulo 4.

3.6 Obtenção da Solução

As equações e as condições de contorno associadas ao modelo foram resolvidas usando o método dos volumes finitos, com a ajuda do pacote de fluidodinâmica computacional FLUENT 6.2.16 fornecido pela Fluent Inc..

A Figura 3.11 mostra o console do FLUENT, com as variáveis controladas. No canto superior esquerdo os resíduos das equações sendo resolvidas, no canto superior direito o histórico da velocidade média na saída do reator, e

3.7 Independência da Malha

no canto inferior direito o histórico da temperatura média na saída do reator. A simulação só é considerada convergida se os valores de velocidade média na saída e da temperatura média na saída se mantiverem constantes por pelo menos 100 iterações.

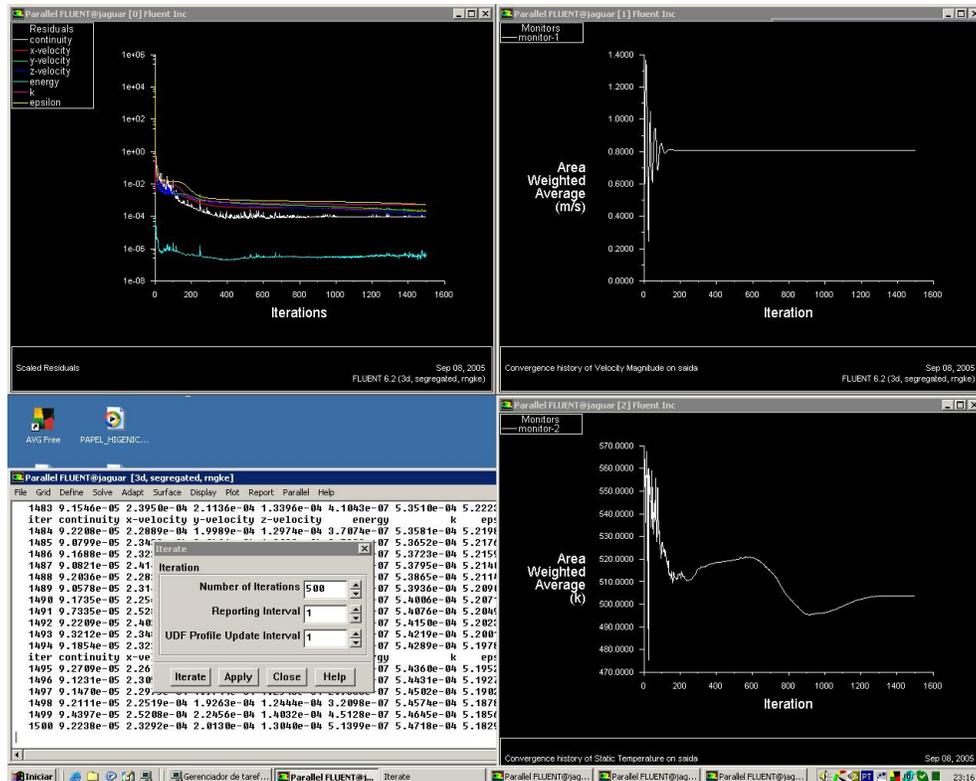


Figura 3.11: Console típico do programa FLUENT com as variáveis controladas.

3.7 Independência da Malha

Um estudo de independência do resultado numérico em relação à malha computacional empregada foi realizado. Esse estudo tem por objetivo determinar qual a densidade de malha mínima que proporciona um resultado numérico que não depende do refinamento da malha empregada.

O estudo foi dividido em duas partes. Na primeira parte se avaliou a independência da malha da região do impelidor em relação ao valor do torque

3.7 Independência da Malha

aplicado pelo impelidor no fluido. Na segunda parte foi avaliado o valor do calor transferido ao líquido pelas serpentinas.

Na primeira parte desse estudo foi empregado uma fatia horizontal do reator, que contém um impelidor tipo turbina e uma parte das serpentinas axiais, que podem ser vistos na Figura 3.12. A fração do reator estudada corresponde a 5% do volume total do reator.

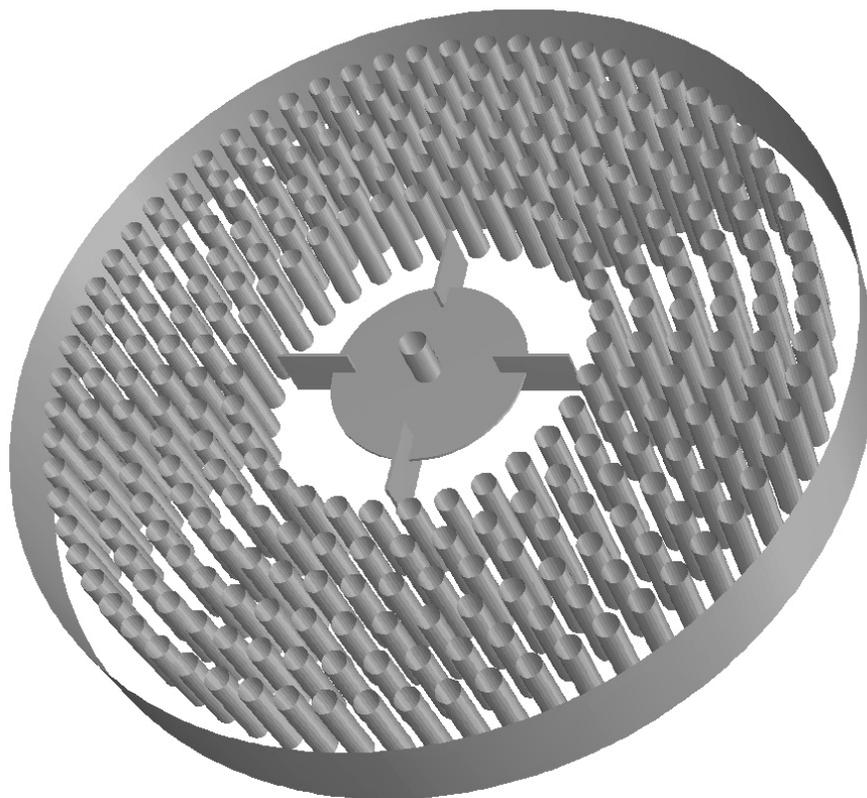


Figura 3.12: Domínio usado na primeira parte do estudo de independência de malha.

Todas as malhas usadas nos dois estudos tiveram um refino nas regiões próximas às paredes, de modo que os requisitos da lei de parede utilizada pelo modelo de turbulência $k - \epsilon$ foram satisfeitos. Isso implica que o valor de y^+ para os elementos com fronteira nas paredes ficou entre 11 e 100.

Os resultados da Figura 3.13 mostram que o valor do torque ficou praticamente constante nas malhas com 115000, 200000 e 400000. Assim, o tamanho

3.7 Independência da Malha

mínimo de malha do impelidor, para que ele seja considerado independente, é de 115000 elementos hexaédricos.

Para ilustrar a importância do refino da malha na parede, pode-se observar os resultados da Figura 3.14. Esses resultados foram obtidos sem se respeitar os requisitos do modelo de turbulência. Mesmo com tamanhos de malha muito maiores, de até 900000 elementos, os valores de torque variaram mais que os obtidos com as malhas da Figura 3.13, e não estabilizaram até o número limite de elementos utilizado.

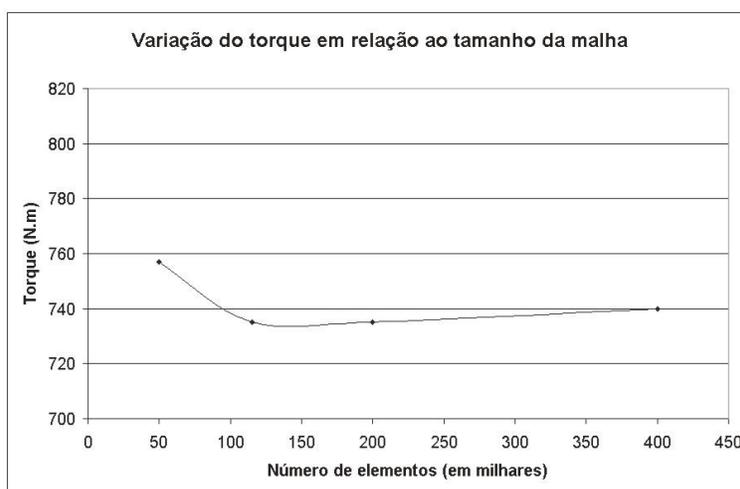


Figura 3.13: Variação do torque em relação ao número de elementos da malha.

A segunda parte do estudo avaliou o calor transferido ao líquido pelas serpentinas axiais. Nessa segunda parte do estudo foi empregado um domínio computacional correspondente à um quarto do banco de tubos, que contém uma parte das serpentinas axiais, que podem ser vista nas Figuras 3.15. A fração do reator estudada corresponde a 1% do volume total do reator.

Neste caso também foram respeitados requisitos do modelo de turbulência, e o valor de y^+ médio ficou ao redor de 40. A Tabela 3.7 mostra a variação do calor transferido em relação aos diferentes ensaios realizados.

Nos ensaios M1 até M3 (ver Figura 3.16), manteve-se a mesma malha no plano xy , e modificou-se apenas o tamanho dos elementos na direção z . O tamanho de 8 mm para os elementos no plano xy é o tamanho mínimo que permite que se obtenha ao menos 6 elementos de malha entre os tubos da serpentina, que é o mínimo necessário para a convergência da solução.

3.7 Independência da Malha



Figura 3.14: Variação do torque em relação ao número de elementos da malha, sem refino na parede.

Podemos observar que o calor transferido nos tubos da serpentina variou pouco (menos de 6%), não justificando o uso de uma malha mais refinada no eixo z .

Os ensaios M4 e M5 (ver Figura 3.17) usaram uma malha no plano xy que proporciona um valor de $y+$ semelhante aos ensaios M1 até M3, mas com um número menor de elementos. O ensaio M4 usou um tamanho de elemento de malha no eixo z de 30 mm, e obteve um valor de transferência de calor semelhante ao valor do ensaio M5, com elementos de 20 mm.

O ensaio M6 (ver Figura 3.18) usou um tamanho de elemento no plano xy de 4 mm, gerando uma malha com um total de 600.000 elementos, três vezes maior que a malha M5, que possui a mesma resolução no eixo z (20 mm). O ensaio M6 apresentou um aumento de 8% da potência transferida em relação ao ensaio M5, o que mostrou que o valor de calor transferido ainda é dependente da malha.

O teste de independência de malha foi então terminado sem se chegar em uma malha ideal, onde o resultado é independente da densidade da malha. Isso se deve ao fato de ter-se chegado ao limite computacional do tamanho da malha do problema a ser resolvido.

Para exemplificar esse fato, podemos estimar o número de elementos da malha do modelo completo multiplicando-se o valor do número de elementos de cada malha de teste por 100, pois o modelo representa aproximadamente

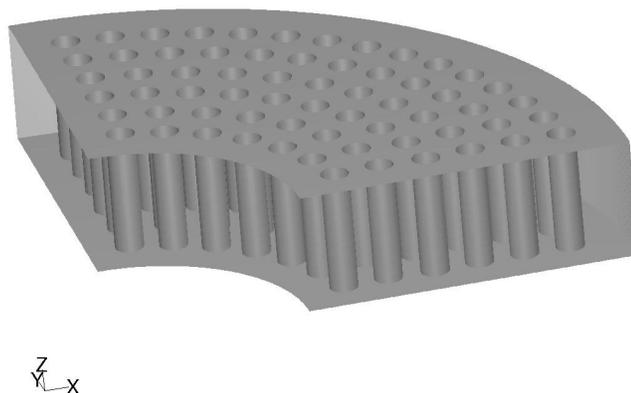


Figura 3.15: Domínio usado na segunda parte do estudo de independência de malha.

1% do volume total do reator. Assim, o modelo com a densidade da malha do ensaio M1 teria 19 milhões de elementos, e com a densidade do modelo M2, 38 milhões de elementos, e assim por diante. Porém, a capacidade computacional disponível é limitada, e permite a solução de um problema de aproximadamente 3 milhões de elementos, portanto a decisão recaiu sobre a malha do ensaio M4, pois é o ensaio com menor número de elementos. Mesmo sendo o seu valor de calor transferido um pouco abaixo do valor do ensaio M6, ainda assim produziu resultados úteis, que podem servir de base para os estudos paramétrico e geométrico.

Mesmo utilizando-se a densidade de malha do ensaio M4, o número de elementos da malha do modelo completo seria de 13 milhões de elementos, que supera o limite da capacidade computacional do laboratório, que é de uma malha com aproximadamente 3 milhões de elementos. Optou-se então por modelar apenas uma fatia correspondente a um sexto do reator, o que gerará uma malha de aproximadamente 2,2 milhões de elementos.

3.7 Independência da Malha

Ensaio	Tamanho da malha (milhares)	$y+$ médio	Tamanho de elemento no eixo z (mm)	Tamanho do elemento no plano xy (mm)	Calor transferido nos tubos (W)
M1	190	40	20	8	4359
M2	380	40	10	8	4117
M3	780	40	5	8	4348
M4	130	41	30	8	4327
M5	200	42	20	8	4476
M6	600	44	20	4	4852

Tabela 3.3: Variação do calor transferido em relação aos diferentes ensaios realizados.

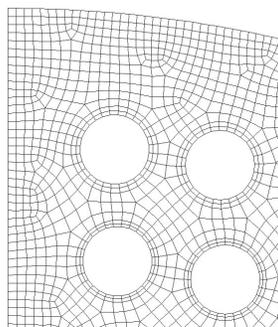


Figura 3.16: Detalhe da malha dos ensaios M1 até M3 no plano xy .

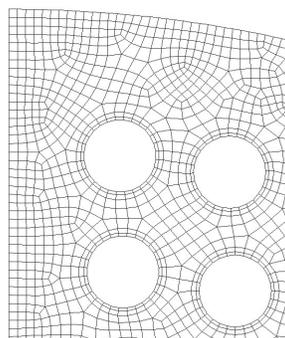


Figura 3.17: Detalhe da malha dos ensaios M4 e M5 no plano xy .

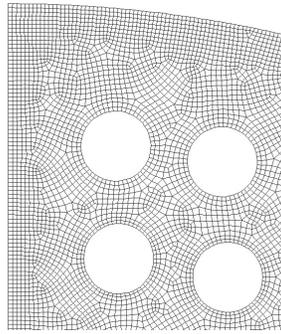


Figura 3.18: Detalhe da malha do ensaio M6 no plano xy .

Capítulo 4

Resultados

Este capítulo está dividido em três partes. A primeira parte trata da comparação do modelo simulado com os dados experimentais. A segunda parte investiga a influência sobre o desempenho térmico do reator de variações na velocidade de rotação dos impelidores. A influência dos discos divisores sobre o escoamento no reator e seu desempenho térmico é o assunto da terceira parte do capítulo.

4.1 Comparação com Dados Experimentais

A comparação dos valores obtidos com a simulação e os valores experimentais é parte importante da confecção de modelos usando a fluido dinâmica computacional.

O objetivo do trabalho (ver seção 1.1) é melhorar o desempenho térmico do processo. A variável escolhida para avaliar esse desempenho térmico é a temperatura da corrente de saída do reator, pois ela é o resultado final do processo como um todo e é um dos dados experimentais disponíveis para comparação. O resultado pode ser visto na Tabela 4.1. A diferença entre o valor simulado e o valor real é de $7,8^{\circ}\text{C}$, que é pequena levando-se em conta as hipóteses feitas durante a modelagem (ver seções 3.4 até 3.5.2). O valor simulado corroborou com o valor real.

A Figura 4.1 mostra os contornos de temperatura em um plano vertical do reator. As duas setas maiores apontam a posição dos discos divisores, que resultam na separação do reator em três compartimentos distintos, facilmente identificáveis pela diferença da temperatura do fluido entre elas. Esse é um

4.1 Comparação com Dados Experimentais

	Simulação	Experimental
Temperatura na saída (°C)	274,8	267,0

Tabela 4.1: Temperatura da corrente de saída.

resultado importante da simulação, pois não se esperava um nível tão alto de diferença de temperatura entre os compartimentos separados pelos discos. A seta menor aponta uma região onde se observa uma estratificação do valor da temperatura, em função do perfil hidrodinâmico gerado pelo impelidor radial.

Pode-se ver na Figura 4.2 os contornos de temperatura em diferentes planos horizontais do reator. A distribuição de temperaturas varia pouco nos planos superiores, ficando praticamente homogênea nos últimos três planos.

Os contornos de velocidade em um plano vertical do reator podem ser vistos na Figura 4.3. As duas setas apontam a posição dos discos divisores. As regiões de maior velocidade são as regiões próximas dos impelidores, como era esperado. Pode-se observar a sinergia que existe entre os dois impelidores do fundo do reator. A Figura 4.4 mostra os contornos de velocidade em diferentes planos horizontais do reator.

A Figura 4.5 mostra uma iso-superfície de valor de velocidade constante de 0,1 m/s, com o objetivo de mostrar as regiões de estagnação que existem no reator, apontadas pelas setas. Pode-se observar que a região de estagnação do compartimento superior do reator é maior que a dos outros compartimentos, indicando um nível baixo de agitação. Apesar disso, como pode ser visto nas Figuras 4.6 e 4.7, é o compartimento superior que troca a maior parte do calor do reator, principalmente devido à maior diferença de temperatura entre os tubos e o fluido. A Figura 4.6 mostra os contornos de fluxo de calor ao redor dos tubos da serpentina, enquanto a Figura 4.7 mostra esses contornos em detalhe para cada fileira de tubos da serpentina, numeradas do centro do reator para fora. É notável que a primeira fileira de tubos do segundo compartimento possui a troca de calor mais intensa, devido ao fluxo gerado pelo impelidor radial que está localizado nesse compartimento, mas o valor de transferência de calor cai rapidamente, devido à diminuição do fluxo, e fica baixo nas últimas camadas de tubos (ver Figura 4.7). O último compartimento é o que troca menos calor, principalmente devido à baixa diferença de temperatura entre o fluido e os tubos.

4.2 Influência da Velocidade de Rotação

Uma observação importante é que a condição de contorno da temperatura da entrada do reator (ver Seção 3.5.2) é de temperatura prescrita, assim como os tubos da serpentina. Essa condição permite a geração de um fluxo de calor, que no caso da entrada do reator é no sentido de retirar calor do sistema, pois sua temperatura é menor que a temperatura do líquido das proximidades. Poderia-se utilizar outros tipos de condição de contorno na entrada, como fluxo de calor prescrito ou um coeficiente de troca térmica, porém a falta de informação sobre o regime de escoamento na região não permite uma escolha segura desses fatores. Assim, o calor transferido nas serpentinas possui dois destinos: sair na forma de calor sensível junto com a corrente de saída do reator e sair na forma de fluxo de calor na entrada do reator.

4.2 Influência da Velocidade de Rotação

Um estudo paramétrico sobre o desempenho térmico do reator foi realizado, utilizando-se como parâmetro a velocidade de rotação dos impelidores.

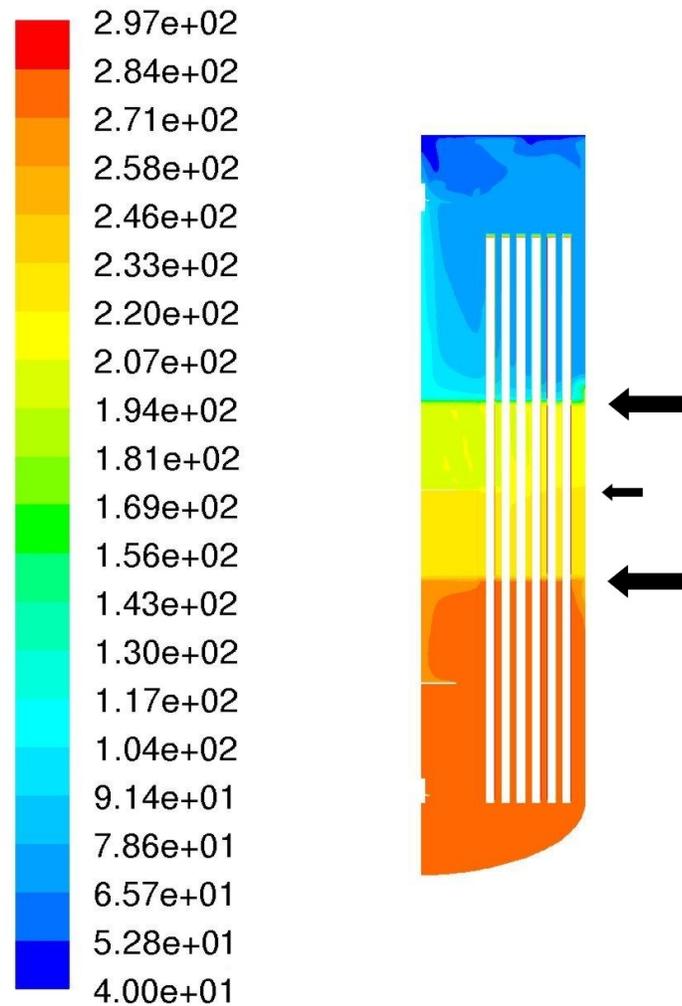
A velocidade de rotação dos impelidores variou desde zero (impelidores parados) até uma velocidade de 150 rpm, que equivale a uma potência consumida praticamente três vezes maior do que com os impelidores à 105 rpm. Os valores de potência relativa foram obtidos através da relação expressa na Equação 4.1. Os resultados principais podem ser vistos na Tabela 4.2.

$$P \propto N^3 \quad (4.1)$$

Como pode ser visto na Tabela 4.2, tanto a temperatura da corrente de saída do reator quanto a temperatura média do reator variaram pouco nas simulações com velocidade de rotação entre 83 e 150 rpm, apesar do calor transferido ter aumentado com o aumento da velocidade de rotação. Uma diminuição da taxa de recirculação do fluido no interior do reator, com consequente formação de caminhos preferenciais, pode ser uma explicação para o fato da diminuição da temperatura de saída.

Na simulação com velocidade de rotação de 40 rpm, houve uma queda tanto nas temperaturas de saída e média quanto no calor transferido nos tubos da serpentina, indicando que essa velocidade de rotação não é suficiente para manter o mesmo padrão de escoamento que as velocidades maiores.

A simulação com o reator sem agitação (velocidade de rotação nula) foi a que obteve os menores valores de calor transferido nos tubos da serpentina



Contours of Static Temperature (°C) Sep 29, 2005
FLUENT 6.2 (3d, segregated, rngke)

Figura 4.1: Contornos de temperatura em um plano vertical do reator (°C). As duas setas maiores apontam a posição dos discos divisores. A seta menor aponta uma região onde se observa uma estratificação do valor da temperatura.

4.2 Influência da Velocidade de Rotação

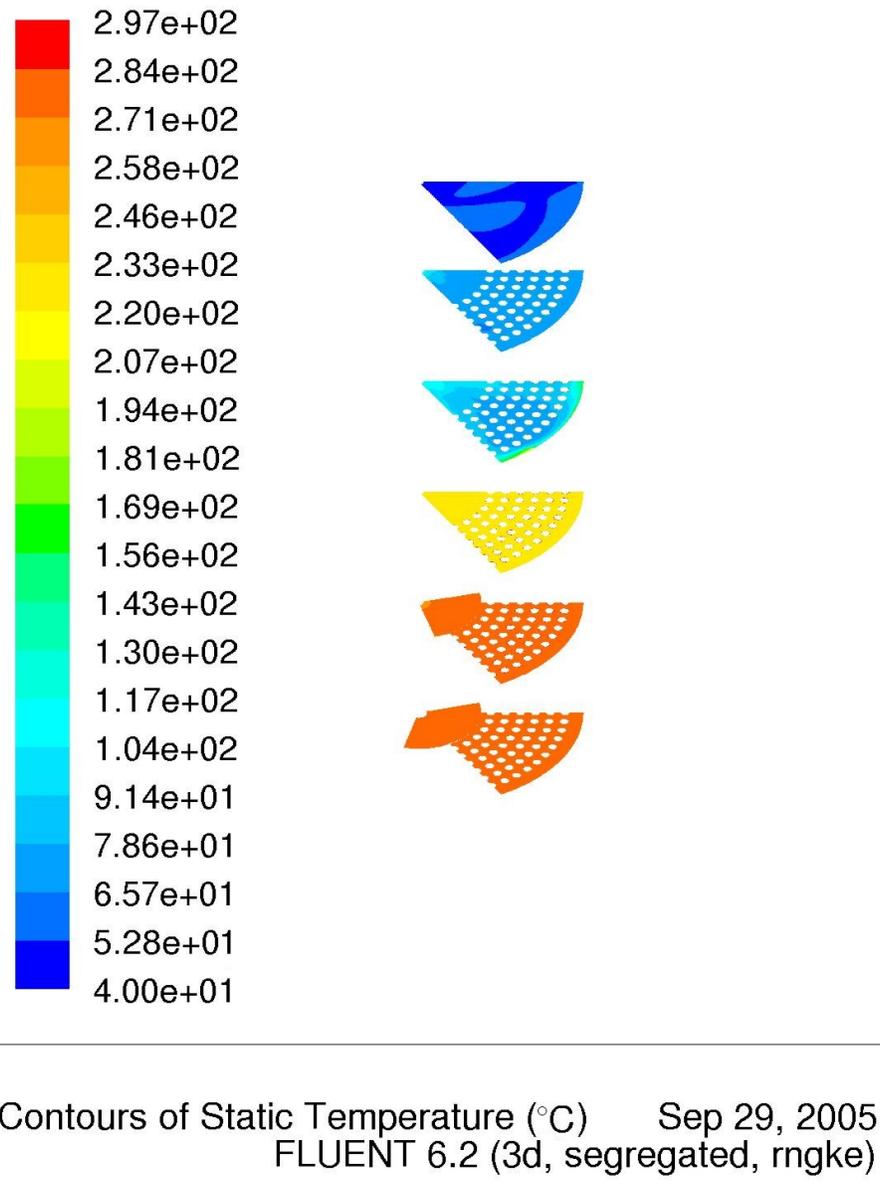
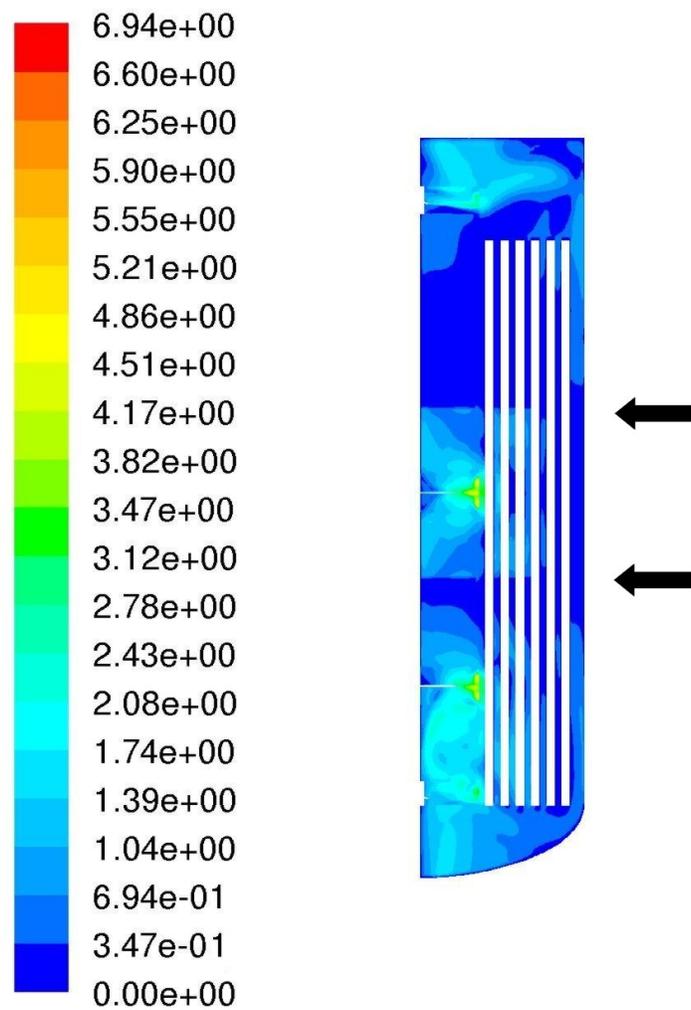


Figura 4.2: Contornos de temperatura em diferentes planos horizontais do reator (°C).

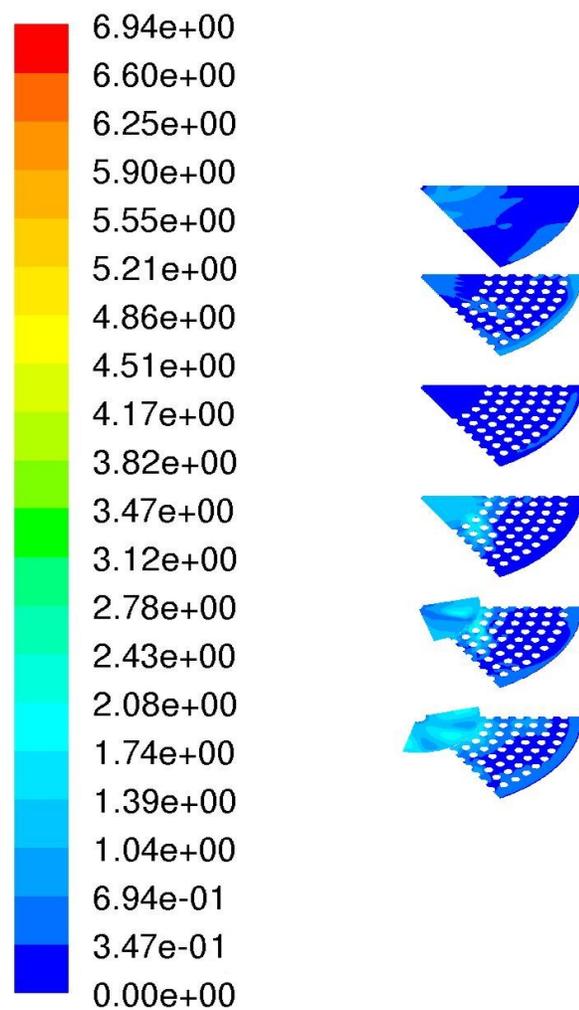
4.2 Influência da Velocidade de Rotação



Contours of Velocity Magnitude (m/s) Sep 29, 2005
FLUENT 6.2 (3d, segregated, rngke)

Figura 4.3: Contornos de velocidade em um plano vertical do reator (m/s).
As duas setas apontam a posição dos discos divisores.

4.2 Influência da Velocidade de Rotação



Contours of Velocity Magnitude (m/s) Sep 29, 2005
FLUENT 6.2 (3d, segregated, rngke)

Figura 4.4: Contornos de velocidade em diferentes planos horizontais do reator (m/s).

4.2 Influência da Velocidade de Rotação

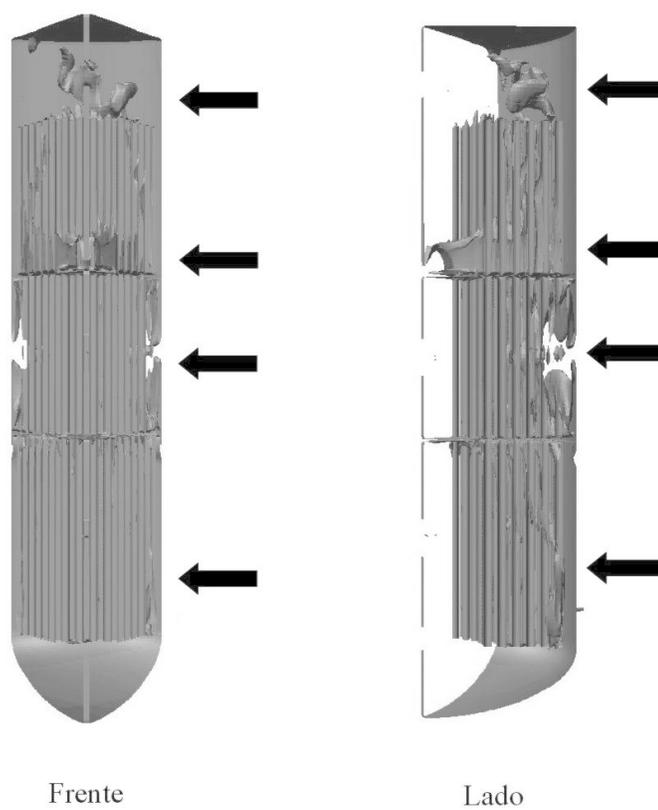


Figura 4.5: Iso-superfície de valor de velocidade constante de 0,1 m/s. As setas indicam as regiões de estagnação.

4.2 Influência da Velocidade de Rotação

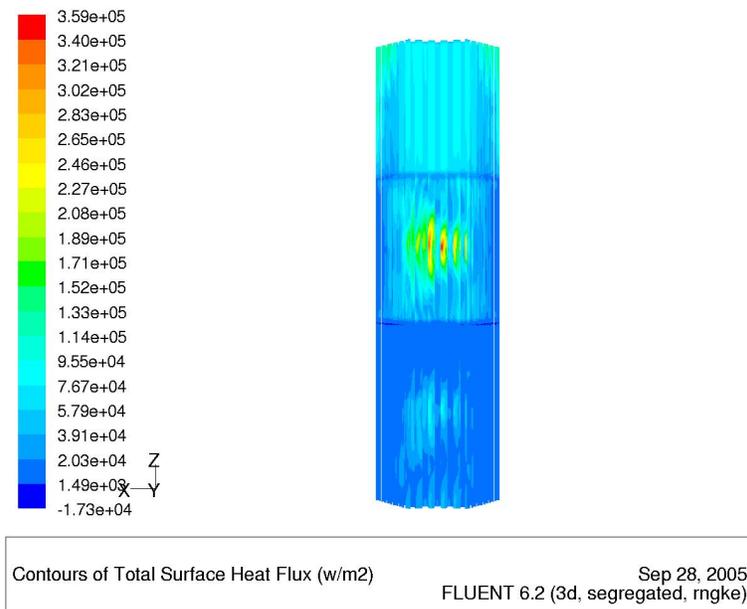


Figura 4.6: Contornos de fluxo de calor ao redor dos tubos da serpentina, em perspectiva (W/m^2).

4.2 Influência da Velocidade de Rotação

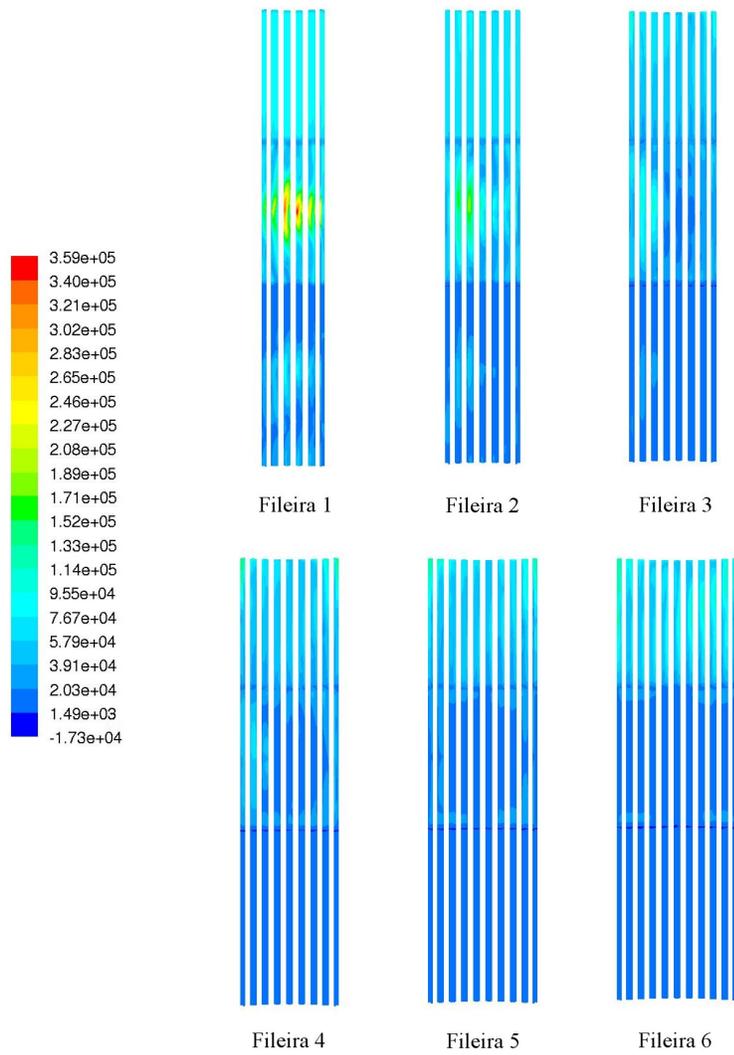


Figura 4.7: Detalhe dos contornos de fluxo de calor ao redor de cada fileira de tubos da serpentina (W/m^2).

4.2 Influência da Velocidade de Rotação

Velocidade de rotação (rpm)	Temperatura na saída (°C)	Temperatura média (°C)	Calor transferido (kW)	Potência Relativa
0	246,8	177,5	297	0,00
40	268,5	175,0	750	0,06
83	278,8	179,2	1150	0,49
105	274,8	183,3	1232	1,00
108	276,8	185,8	1253	1,09
120	275,9	184,0	1329	1,49
132	275,4	182,9	1453	1,99
150	274,5	184,3	1560	2,92

Tabela 4.2: Resultados principais do estudo paramétrico. Os valores em negrito se referem à condição atual de operação do reator.

axial e de temperatura da corrente de saída, que ficou 28 °C menor que a temperatura simulada para a situação atual (105 rpm). Interessante é o fato de que a temperatura média no reator ficou maior que a da simulação com velocidade de rotação de 40 rpm, e muito próxima da com velocidade de 83 rpm.

Por se tratar de uma situação limite, a condição do reator sem agitação será estudada mais profundamente. Na Figura 4.8 pode-se ver os contornos de temperatura em um plano vertical do reator. As duas setas apontam a posição dos discos divisores. É notável a formação de zonas quentes ao redor dos tubos, principalmente nos dois compartimentos próximos do fundo. Apesar disso, a distribuição de temperaturas ficou bem próxima da distribuição do reator com as condições atuais (ver Figura 4.1).

A Figura 4.9 mostra os contornos de velocidade em um plano vertical do reator sem agitação (m/s). As setas apontam as pequenas aberturas entre os discos divisores onde o fluxo é mais intenso. Note que a escala de valores de velocidade é bem menor que a escala dos sistemas com agitação.

Iso-superfícies de valor de velocidade constante de 0,01 m/s do reator sem agitação podem ser vistas na Figura 4.10. As setas maiores indicam as regiões de alta velocidade, apesar do valor de 0,01 m/s ser baixo em comparação às velocidades dos sistemas agitados. Essas regiões se encontram nas pequenas aberturas entre os discos divisores. As setas menores apontam para a tubulação de saída do reator e as linhas mostram a posição dos tubos da serpentina.

4.3 Influência dos discos divisores de fluxo

Na Figura 4.11 pode-se observar os contornos de fluxo de calor ao redor dos tubos da serpentina do reator sem agitação, em perspectiva. Deve-se lembrar que o calor transferido nas serpentinas possui dois destinos: sair na forma de calor sensível junto com a corrente de saída do reator e sair na forma de fluxo de calor na entrada do reator. Os detalhes podem ser vistos na Figura 4.12, onde as fileiras estão numeradas do centro do reator para fora. Assim como no reator com as condições atuais (ver Figuras 4.6 e 4.7) o compartimento superior é o que contribui mais para a transferência de calor. Porém, diferentemente dos casos agitados, são os tubos das fileiras mais externas que possuem um desempenho melhor, nos três compartimentos, com o reator sem agitação. Esse é um resultado esperado, pois sem a agitação provocada pelos impelidores, o escoamento se concentra onde há menor perda de carga, que nesse caso é o espaço entre a serpentina e o casco externo do reator.

4.3 Influência dos discos divisores de fluxo

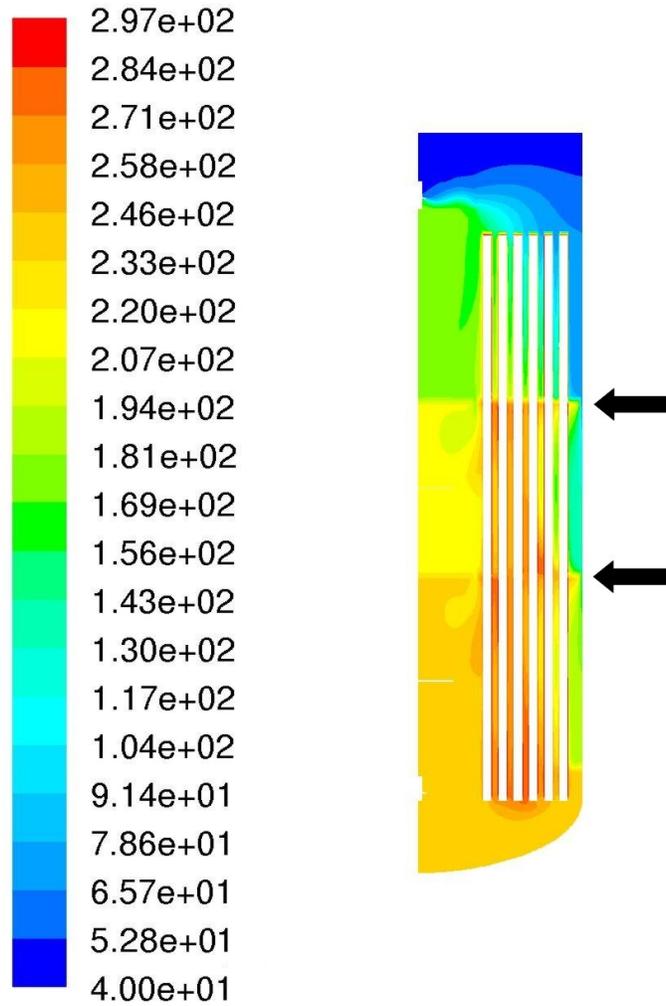
Para avaliar a influência dos discos divisores de fluxo no desempenho térmico do reator, foi realizada uma alteração geométrica no reator. A alteração consistiu da retirada dos discos divisores que limitavam o fluxo na direção vertical do reator, e que efetivamente separavam o reator em três compartimentos. Os resultados foram comparados com os resultados da simulação com as condições geométricas atuais do reator, e podem ser vistas na Tabela 4.3.

	Temperatura na saída (°C)	Temperatura média (°C)	Calor transferido (kW)
Com discos divisores	274,8	183,3	1232
Sem discos divisores	155,1	135,3	2318

Tabela 4.3: Resultados principais do estudo geométrico.

Como pode ser visto na Tabela 4.3, a temperatura da corrente de saída do reator sem os discos divisores sofreu uma queda significativa, de quase 120°C. A queda da temperatura média foi de 48 °C, menor que a queda da temperatura da saída, mas mesmo assim significativa, ainda mais considerando o fato que o calor transferido aumentou 88% (de 1232 para 2318 kW).

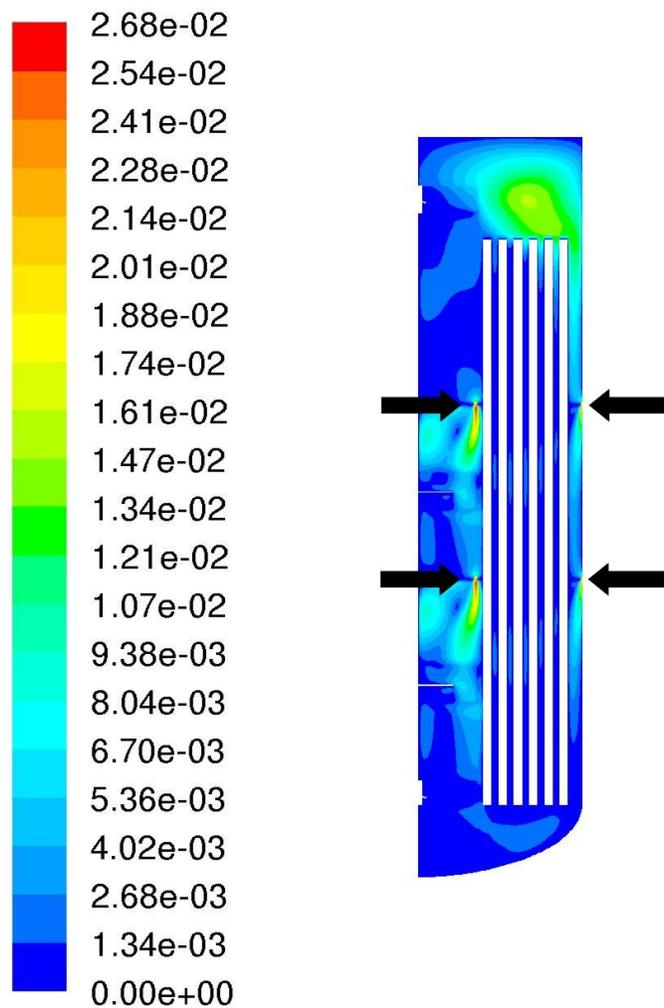
4.3 Influência dos discos divisores de fluxo



Contours of Static Temperature (°C) Sep 29, 2005
FLUENT 6.2 (3d, segregated, rngke)

Figura 4.8: Contornos de temperatura em um plano vertical do reator sem agitação (°C). As duas setas apontam a posição dos discos divisores.

4.3 Influência dos discos divisores de fluxo



Contours of Velocity Magnitude (m/s) Sep 29, 2005
FLUENT 6.2 (3d, segregated, rngke)

Figura 4.9: Contornos de velocidade em um plano vertical do reator sem agitação (m/s). As setas apontam as pequenas aberturas entre os discos divisores onde o fluxo é mais intenso. Note que a escala de valores de velocidade é bem menor que a escala dos sistemas com agitação.

4.3 Influência dos discos divisores de fluxo

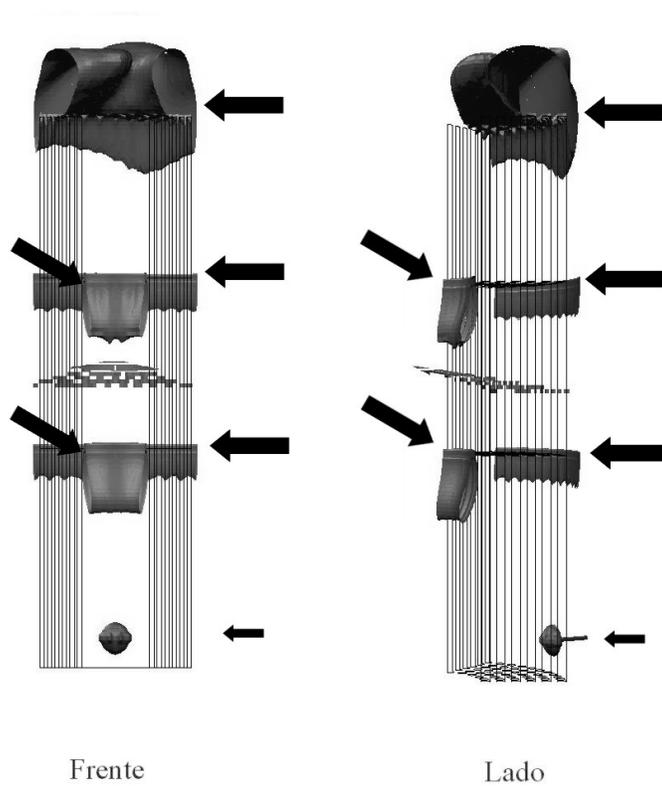


Figura 4.10: Iso-superfícies de valor de velocidade constante de 0,01 m/s do reator sem agitação. As setas maiores indicam as regiões de alta velocidade. As setas menores apontam para a tubulação de saída do reator. As linhas mostram a posição dos tubos da serpentina.

4.3 Influência dos discos divisores de fluxo

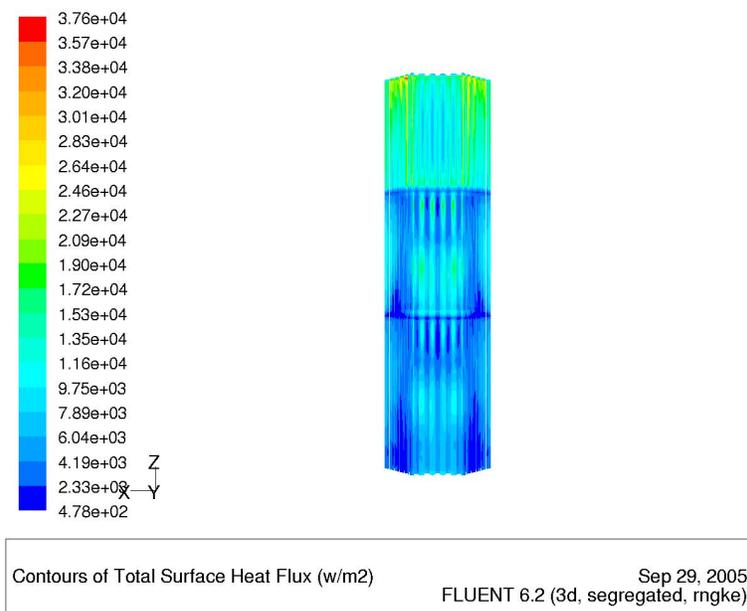


Figura 4.11: Contornos de fluxo de calor ao redor dos tubos da serpentina do reator sem agitação, em perspectiva (W/m^2).

4.3 Influência dos discos divisores de fluxo

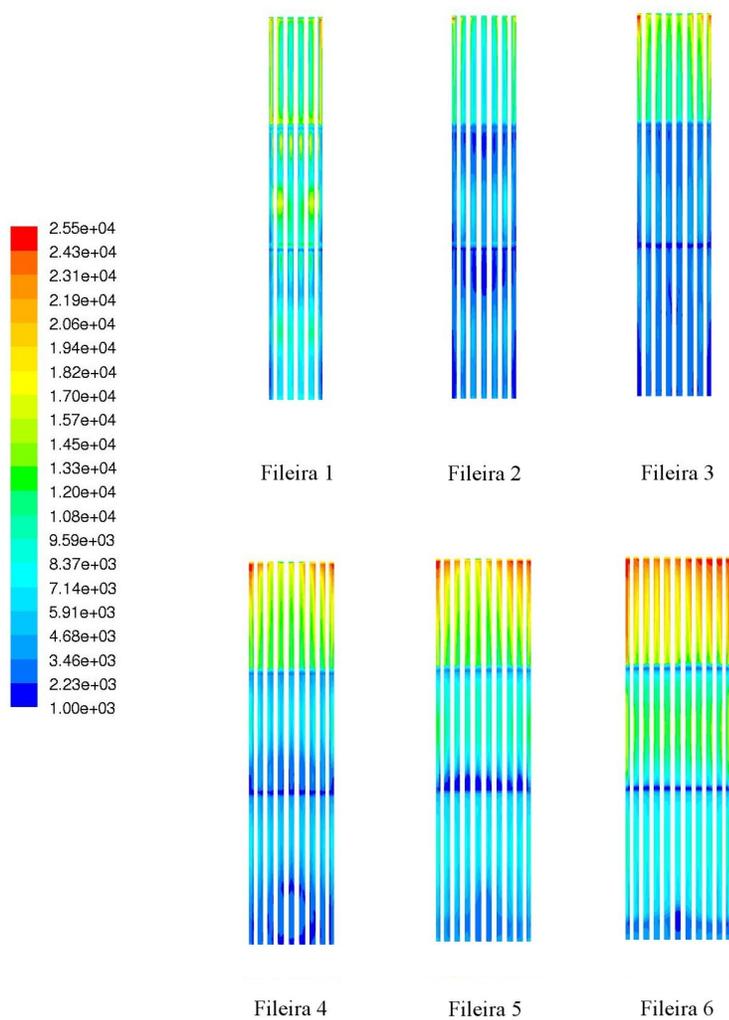


Figura 4.12: Detalhe dos contornos de fluxo de calor ao redor de cada fileira de tubos da serpentina do reator sem agitação (W/m^2).

4.3 Influência dos discos divisores de fluxo

Uma das prováveis causas para a diminuição da temperatura da saída é uma diminuição da taxa de recirculação do fluido no interior do reator, com conseqüente formação de caminhos preferenciais, causada pela retirada dos discos divisores.

Outra causa decore do fato que o calor transferido nas serpentinas possui dois destinos: sair na forma de calor sensível junto com a corrente de saída do reator e sair na forma de fluxo de calor na entrada do reator. Como a temperatura do fluido próximo à entrada é maior na simulação do reator sem discos separadores de fluxo que na do reator original, o fluxo de calor que sai pela entrada também é maior. Assim, uma grande parte do calor transferido pelas serpentinas não sai junto à corrente de saída do reator, o que diminui a sua temperatura.

Na Figura 4.13 pode-se observar os contornos de temperatura em um plano vertical do reator sem os discos divisores. A seta aponta uma região onde se observa uma estratificação do valor da temperatura, causada pelo fluxo do impelidor radial. Não se observa mais a separação do reator em compartimentos, como no reator com as condições geométricas atuais (ver Figura 4.1), o que era esperado. A temperatura está mais homogênea no reator sem os discos divisores do que no reator com os discos, um fato que também era esperado, pelo maior grau de mistura permitido pela nova condição geométrica.

A Figura 4.14 mostra os contornos de temperatura em diferentes planos horizontais do reator sem os discos divisores. A temperatura é bastante homogênea em todos planos, menos no plano mais perto do topo.

Os contornos de velocidade em um plano vertical do reator sem os discos divisores podem ser vistos na Figura 4.15. Pode-se observar que neste caso os três impelidores mais próximos do fundo estão atuando em sinergia, devido à ausência do disco separador. A velocidade média também aumentou em comparação com o reator com as condições geométricas atuais (ver Figura 4.3).

A Figura 4.16 mostra os contornos de velocidade em diferentes planos horizontais do reator sem os discos divisores. É notável que nesse caso a velocidade está longe de ser homogênea nos planos da Figura 4.16. Esse é um indicativo de que existem caminhos preferenciais.

As iso-superfícies de valor de velocidade constante de 0,1 m/s do reator sem os discos divisores podem ser vistas na Figura 4.17. As setas indicam as regiões de estagnação, que são menores em comparação com as da Figura 4.5, o que é uma conseqüência da retirada dos discos divisores.

4.3 Influência dos discos divisores de fluxo

Na Figura 4.18 pode-se observar os contornos de fluxo de calor ao redor dos tubos da serpentina axial do reator sem os discos divisores, em perspectiva, e os detalhes em cada fileira de tubos da serpentina na Figura 4.19, onde as fileiras estão numeradas do centro do reator para fora. A transferência de calor é mais intensa nas fileiras mais internas de tubos da serpentina, devido à maior velocidade do fluxo nessa região devido ao movimento dos impelidores. No entanto, o fluxo de calor é mais homogeneamente distribuído na direção vertical, como resultado da retirada dos discos divisores.

4.3 Influência dos discos divisores de fluxo

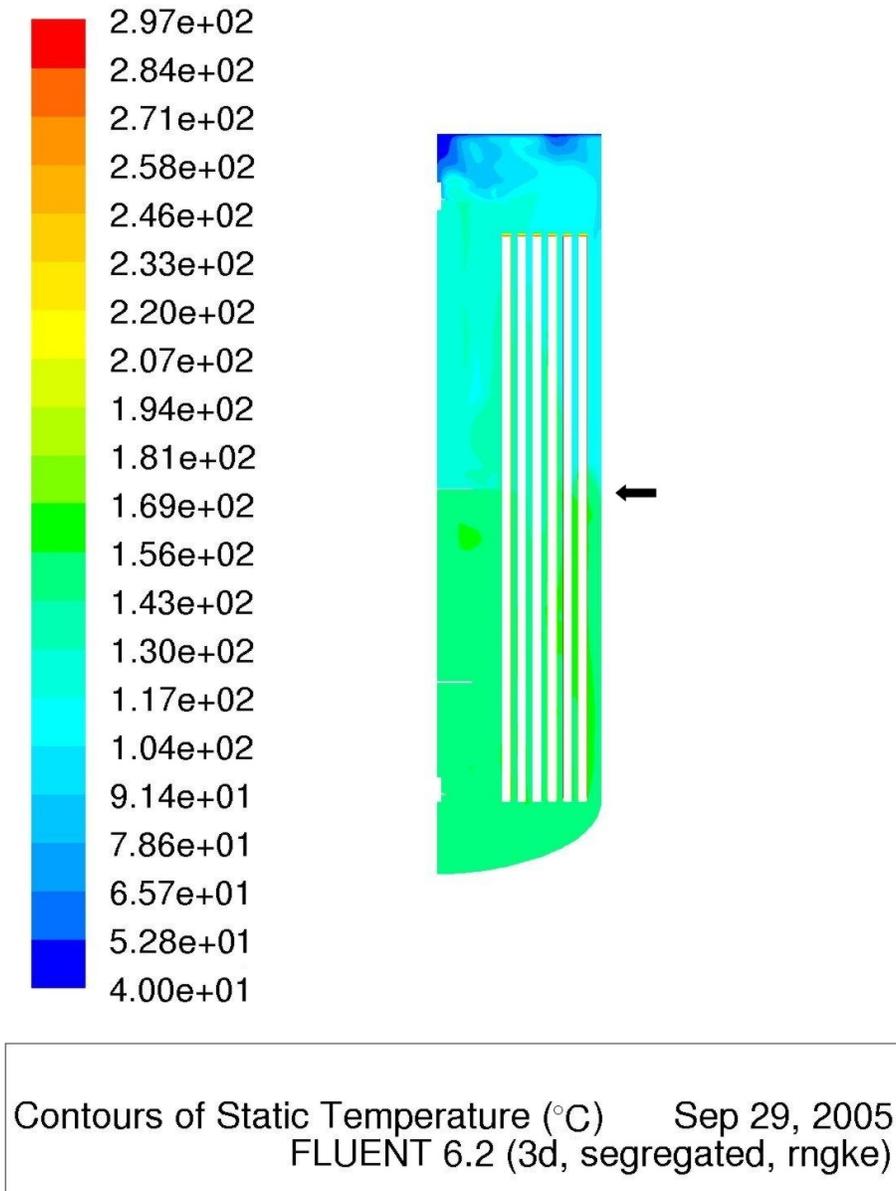


Figura 4.13: Contornos de temperatura em um plano vertical do reator sem os discos divisores (°C). A seta aponta uma região onde se observa uma estratificação do valor da temperatura.

4.3 Influência dos discos divisores de fluxo

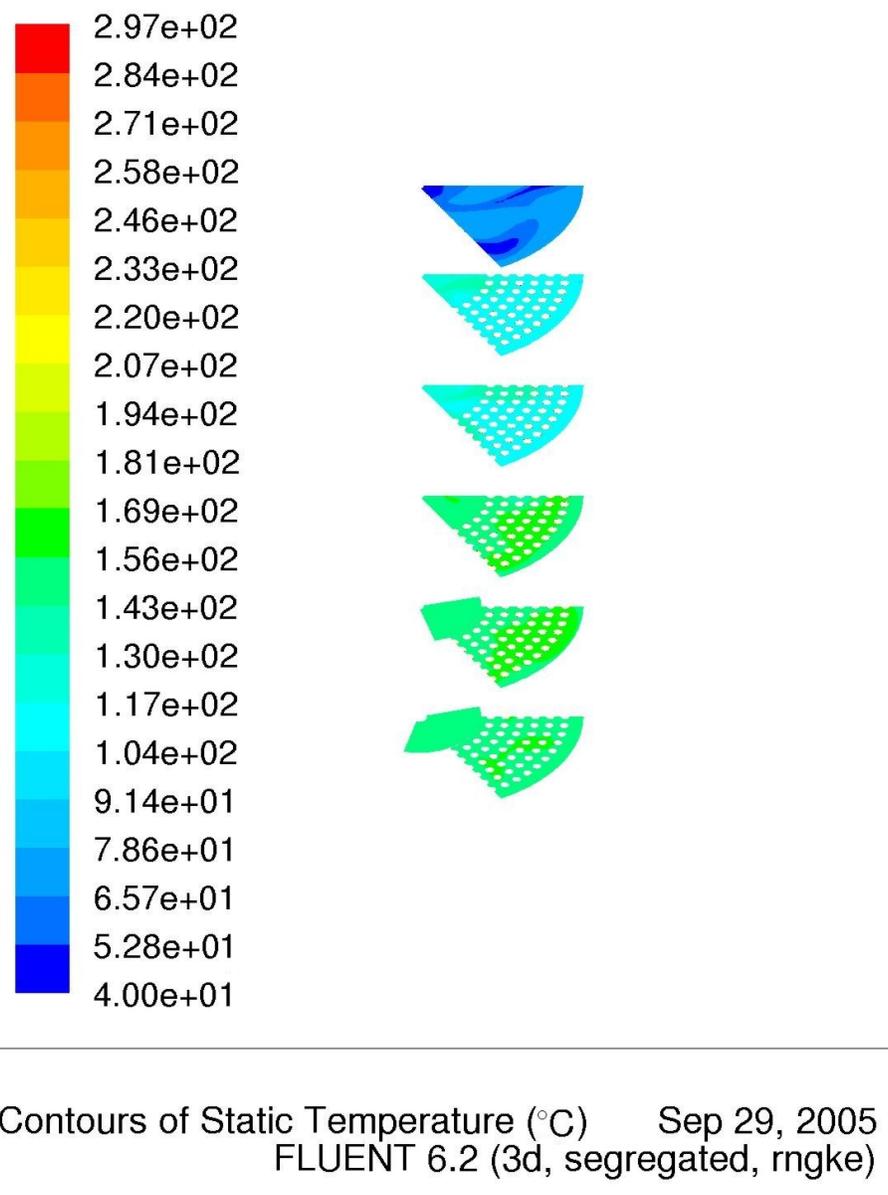
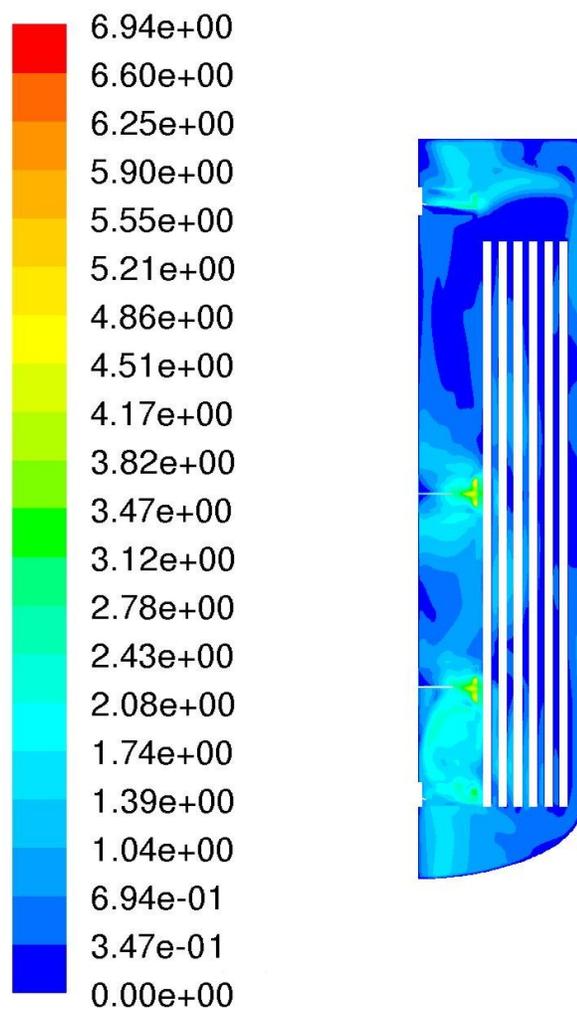


Figura 4.14: Contornos de temperatura em diferentes planos horizontais do reator sem os discos divisores (°C).

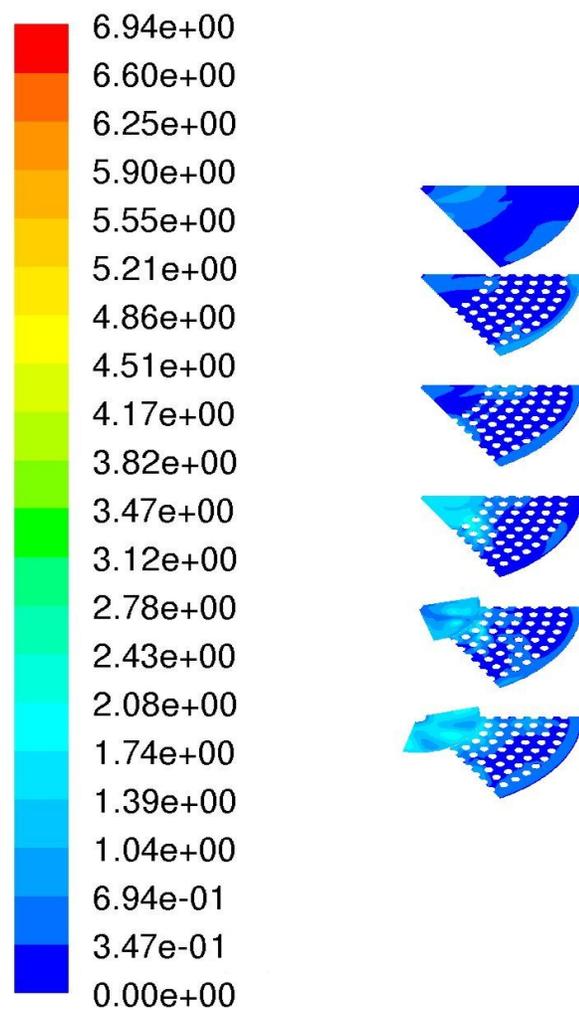
4.3 Influência dos discos divisores de fluxo



Contours of Velocity Magnitude (m/s) Sep 29, 2005
FLUENT 6.2 (3d, segregated, rngke)

Figura 4.15: Contornos de velocidade em um plano vertical do reator sem os discos divisores (m/s).

4.3 Influência dos discos divisores de fluxo



Contours of Velocity Magnitude (m/s) Sep 29, 2005
FLUENT 6.2 (3d, segregated, rngke)

Figura 4.16: Contornos de velocidade em diferentes planos horizontais do reator sem os discos divisores (m/s).

4.3 Influência dos discos divisores de fluxo

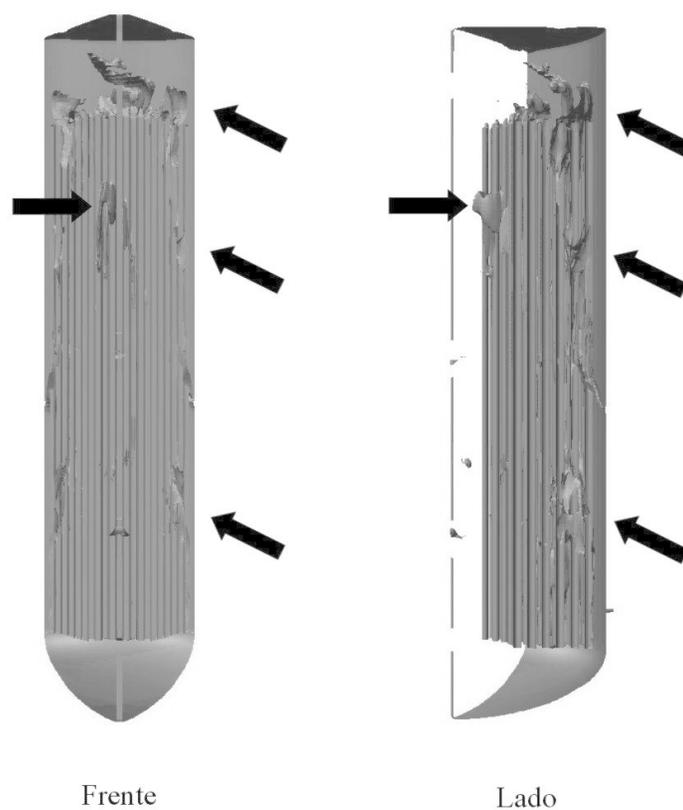


Figura 4.17: Iso-superfície de valor de velocidade constante de 0,1 m/s do reator sem os discos divisores. As setas indicam as regiões de estagnação.

4.3 Influência dos discos divisores de fluxo

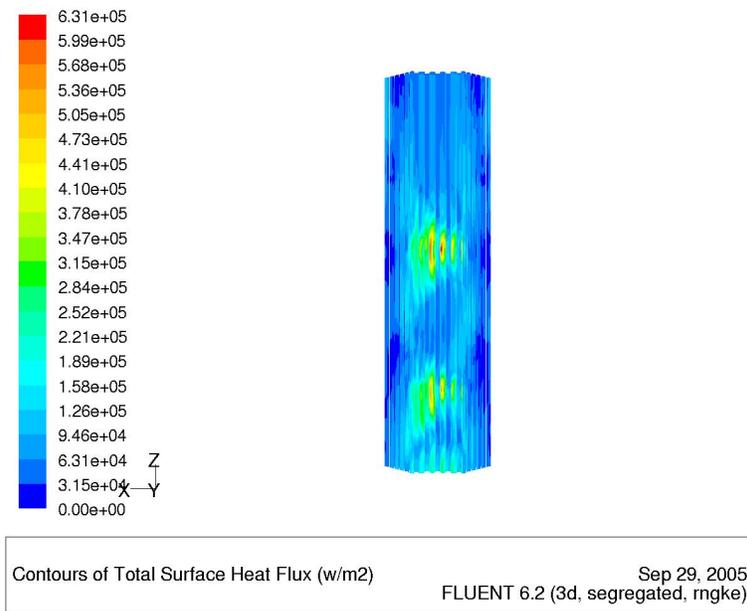


Figura 4.18: Contornos de fluxo de calor ao redor dos tubos da serpentina do reator sem os discos divisores, em perspectiva (W/m^2).

4.3 Influência dos discos divisores de fluxo

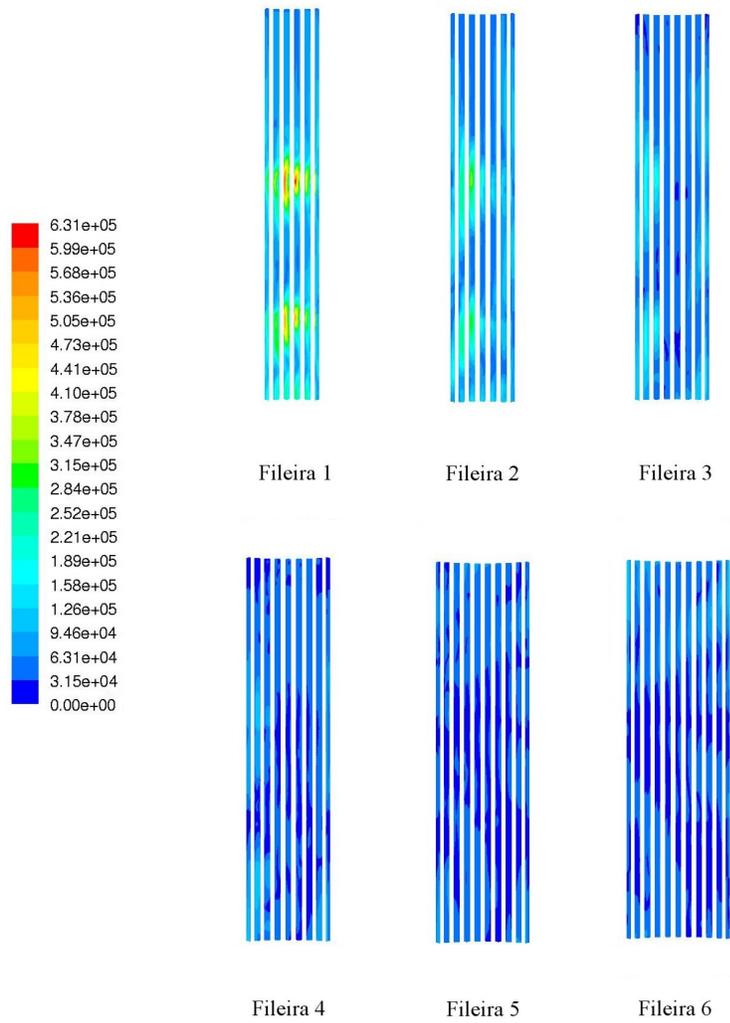


Figura 4.19: Detalhe dos contornos de fluxo de calor ao redor de cada fileira de tubos da serpentina do reator sem os discos divisores (W/m^2).

Capítulo 5

Conclusão

Um modelo numérico tridimensional de um reator de esterificação direta de porte industrial foi desenvolvido utilizando-se a fluido dinâmica computacional. Os resultados da simulação foram comparados com dados experimentais provenientes da empresa M&G e foram utilizados para a análise do impacto sobre o desempenho térmico de alterações nas condições operacionais e na geometria do reator.

O reator de esterificação direta da unidade de produção de PET da empresa M&G é de grande porte e utiliza atualmente dois impelidores radiais tipo turbina e dois impelidores axiais de pás inclinadas, os quais possuem a mesma velocidade de rotação de 105 rpm.

Hipóteses simplificadoras foram adotadas durante a modelagem, como se considerar somente uma fase líquida, apesar do sistema reacional real ser trifásico, assim como a modelagem de apenas uma fração do reator e a utilização da técnica MRF para se aplicar as condições de contorno nos impelidores. Somando-se a essas hipóteses deve-se observar também os erros implícitos na discretização e na solução numérica das equações do modelo. Tendo em vista as hipóteses adotadas e os erros implícitos, o modelo se mostrou competente em mostrar as principais características do escoamento e da transferência de calor no interior do reator, como zonas de estagnação e área de atuação dos impelidores, além da troca de calor a partir dos tubos da serpentina axial.

A comparação do valor simulado da temperatura média na corrente de saída do reator com o valor experimental mostrou uma variação de 7,8 °C frente a um valor experimental de 274,8 °C.

Os resultados mostraram uma clara separação do reator em três com-

partimentos distintos, provocada pelos discos divisores de fluxo. Esse é um resultado importante da simulação, pois não se esperava um nível tão alto de diferença de temperatura entre os compartimentos como o observado.

No estudo paramétrico, em que se variou a velocidade de rotação dos impelidores, foram simuladas desde uma condição sem agitação até uma condição de velocidade de rotação de 150 rpm, que consome uma potência aproximadamente três vezes maior que a condição atual. No entanto, nenhuma das condições estudadas mostrou-se capaz de aumentar a temperatura da corrente de saída do reator. Um fato interessante é que o desempenho do reator sem agitação não foi tão inferior ao desempenho das condições agitadas como era esperado. Essa é uma indicação de que são os discos divisores de fluxo que detêm a capacidade de geração do fluxo desejável dentro do reator, e não o sistema de agitação.

Uma outra condição proposta foi uma alteração geométrica, em que foram retirados os discos divisores de fluxo do interior do reator. Nessa condição, a temperatura da corrente de saída do reator sofreu uma queda de quase 120°C, mesmo considerando o fato de que o calor transferido nos tubos da serpentina aumentou 88% (de 1232 para 2318 kW). Uma das prováveis causas dessa diminuição da temperatura da saída é uma diminuição da taxa de recirculação do fluido no interior do reator, com conseqüente formação de caminhos preferenciais, causada pela retirada dos discos divisores, o que é mais uma indicação de que esses discos possuem um papel muito importante na promoção do fluxo desejável no interior do reator. Outra causa decore do fato que o calor transferido nas serpentinas possui dois destinos: sair na forma de calor sensível junto com a corrente de saída do reator e sair na forma de fluxo de calor na entrada do reator. Como a temperatura do fluido próximo à entrada é maior na simulação do reator sem discos separadores de fluxo que na do reator original, o fluxo de calor que sai pela entrada também é maior. Assim, uma grande parte do calor transferido pelas serpentinas não sai junto à corrente de saída do reator, o que diminui a sua temperatura.

Os resultados levam à conclusão de que o sistema de agitação possui um papel apenas secundário no desempenho térmico do reator, frente ao papel preponderante dos discos divisores de fluxo. Porém, foram desconsiderados dois importantes fenômenos, a dissolução do TPA sólido na entrada do reator (ver seção 3.4 e a evaporação da água de reação e uma parcela do EG (ver seção 3.4.1). Os efeitos da agitação e da retirada dos discos divisores de fluxo sobre esses dois fenômenos é um tópico a ser tratado em estudos posteriores.

Outro tópico sujeito a estudos posteriores é a modificação do arranjo dos

5 Conclusão

tubos da serpentina, com o objetivo de melhorar o fluxo de fluido ao redor dos tubos e melhorar conseqüentemente a troca térmica convectiva.

Apêndice A

Comparação com Modelo da Literatura

Considerando a sua construção geométrica, as serpentinas axiais do reator de esterificação modelado possuem um formato de banco de tubos. Levando esse fato em consideração, será realizada uma comparação dos coeficientes de troca térmica médios simulados nos modelos com e sem os discos separadores com o modelo proposto no capítulo 11 do livro Fundamentos de Transferência de Calor e Massa (Incropera and de Witt, 2003).

A equação para o número de Nusselt para o escoamento transversal a um banco de tubos onde o número de fileiras é menor que 10 é a seguinte:

$$\overline{Nu_D} = 1,13C_1C_2Re_{D,max}^m Pr^{1/3} \quad (A.1)$$

Onde C_1 , C_2 e m são constantes que dependem da configuração geométrica do banco de tubos

Para o arranjo desencontrado, que é o que mais se aproxima do arranjo real, temos:

$$V_{max} = \frac{S_T}{2(S_D - D)}V \quad (A.2)$$

e

$$Re_{D,max} = \frac{\rho V_{max} D}{\mu} \quad (A.3)$$

Substituindo as constantes pelos valores encontrados nas tabelas do livro e as variáveis pelos valores médios obtidos pela simulação, obtém-se $\overline{Nu_D}$.

Usando a definição de número de Nusselt ($\overline{Nu_D} = \overline{h}D/k$), obtém-se o valor do coeficiente de troca térmica médio. Os valores intermediários não foram publicados por motivo de sigilo.

Como pode ser visto na Tabela A, os valores simulados do coeficiente de troca térmica médio e o valor do modelo proposto na literatura ficam na mesma ordem de grandeza.

Modelo	\overline{h}
Simulação com discos divisores	118
Simulação sem discos divisores	229
Correlação da literatura	163

Tabela A.1: Comparação dos coeficientes de troca térmica médios.

Referências Bibliográficas

- J. D. Anderson. *Computational Fluid Dynamics - The Basics with Applications*. McGraw-Hill International Editions, 1995.
- K. N. Dyster, E. Koustsakos, J. Jaworki, and A. W. Nienow. An study of the radial discharge velocities generated by a rushton turbine: Newtonian fluids, reynolds lesser than 5. *Trans IChemE*, 71(part A):11–23, jan 1993.
- FLUENT 6.2 User’s Guide. Fluent Inc., jan 2005.
- Frank P. Incropera and David P. de Witt. *Fundamentos de Transferência de Calor e Massa*. LTC, 5 edition, 2003.
- W. P. Jones and B. E. Launder. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15:301–314, 1972.
- C. R. Maliska. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. LTC, 2 edition, 2004.
- C. McGreavy and J. R. Nunhez. Heat transfer in jacketed stirred tank reactors. In *VII International Conference on Finite Elements in Fluids*, pages 1290–1299. Penegride Press, sep 1993a.
- C. McGreavy and J. R. Nunhez. The influence of geometric factors on the optimum design of stirred tank reactors. In *1993 AIChE Annual Meeting*, pages 1–21. AIChE, nov 1993b.
- J. R. Nunhez. *The influence of geometric factors on the optimum design of stirred tank reactors*. PhD thesis, The University of Leeds, 1994.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- J. R. Nunhez and C. McGreavy. A comparison of the heat transfer in helical coils and jacketed stirred tank reactors. In *10th International Heat Transfer Conference*, pages 345–350. IChmE, aug 1994a.
- J. R. Nunhez and C. McGreavy. The influence of geometric factors on the optimum design of stirred tank reactors. In G. Tatterson, editor, *Industrial Mixing Technology: Chemical and Biological Applications*. AIChE, 1994b.
- J. R. Nunhez and C. McGreavy. A comparison of the heat transfer in helical coils and jacketed stirred tank reactors. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 12(1), 1995.
- J. Y. Oldshue and A. T. Gretton. Helical coil heat transfer in mixing vessels. *Chem. Eng. Progress*, 50(12):615–621, 1954.
- S. M. C. P. Pedrosa and J. R. Nunhez. The behavior of stirred vessels with anchor type impellers. *Comp. Chem. Eng.*, 24:1745–1751, 2000.
- S. M. C. P. Pedrosa and J. R. Nunhez. Improving heat transfer in stirred tanks cooled by helical coils. *Braz. J. Chem. Eng.*, 20(02):111–120, 2003.
- S. M. C. Peixoto. Escolha de arranjos preferenciais de serpentinhas internas em tanques de mistura utilizando a fluido dinâmica computacional. Master's thesis, Unicamp–Brasil, 1998.
- S. M. C. Peixoto and J. R. Nunhez. Improving internal flow of coiled stirred tanks. In *Computacional Fluid Dynamics in the Minerals and Process Industries*. CSIRO, dec 1999.
- K. Ravindranath and R. A. Mashelkar. Polyethylene terephthalate–i. chemistry, thermodynamics and transport properties. *Chemical Engineering Science*, 41(9):2179–2214, 1986.
- P.R. Spalart. Strategies for turbulence modelling and simulations. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 21:252–263, 2000.
- D. A. Street. *Computacional Modelling of Stirred Reaction Vessels*. PhD thesis, The University of Leeds, 1991.
- D. A. Street and C. McGreavy. A model of the heat transfer in internally cooled reaction vessels. *Heat Exchange Engineering*, 2:279–302, 1991.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- V. Uhl and Gray. *Mixing: theory and practice*, volume 1. Academic Press, London, 1966.
- D. C. Wilcox. *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries, Inc. La Cañada, California, 1 edition, 1994.