UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA ÁREA DE CONCENTRAÇÃO DEPARTAMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

METODOLOGIA DE OBTENÇÃO DE RESULTADOS EM FLUIDO-DINÂMICA COMPUTACIONAL: APLICAÇÃO A REATORES TANQUES AGITADOS

Aluna: Vanja Maria de França Bezerra Orientador: Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

Tese apresentada à comissão de Pós-Graduação em Engenharia Química como requisito exigido para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química, na área de concentração de Departamento de Processos Químicos

Campinas - São Paulo - Brasil

Março - 1997

30440 FPIL8C 281197 0 A. PHICO R. B. H. OQ. DAMA 28105197 N.* CPD

CM-00099365-2

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

 B469m Bezerra, Vanja Maria de França Metodologia de obtenção de resultados em fluidodinâmica computacional: aplicação a reatores tanques agitados / Vanja Maria de França Bezerra.--Campinas, SP: [s.n.], 1997.
 Orientador: Rubens Maciel Filho. Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.
 1. Dinâmica dos fluidos - Metodologia. 2. Reatores químicos - Simulação (Computadores). I. Maciel Filho, Rubens. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Tese defendida e aprovada, em 13 de Março de 1997, pela banca examinadora constituída pelos Professores Doutores:

ups

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho Orientador

dua Ulária

Prof^a Dr^a Márcia Maria Lima Duarte

Mien Lal Modif

Prof^a Dr^a Maria Isabel Rodrigues

recierce cere Prof. Dr. Milton Mori

OX

Prof. Dr. José Roberto Nunhez

Esta versão corresponde à redação final da Tese de Doutorado, definida pela Engenheira Vanja Maria de França Bezerra e aprovada pela Comissão Julgadora em 13 de março de 1997.

Kuber 110

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

Agradecimentos

À CAPES - Fundação Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - pelo suporte financeiro fornecido durante a elaboração do presente trabalho.

Ao meu orientador, o Prof. Dr. Rubens Maciel Filho, pela motivação, estímulo e confiança depositados durante a execução do trabalho de tese.

Ao Prof. Dr. José Roberto Nunhez, pelas sugestões, pelo tempo dedicado a discutir comigo pontos importantes do trabalho, bem como pela sua amizade e companhia agradáveis.

À minha família: meus pais, Francisco Bezerra e Irani França Bezerra, pelo desprendimento e generosidade em compartilhar as melhores e piores fases, com a finalidade de me verem em momentos felizes e saudáveis; às minhas irmãs Ceres (Teta), Maria das Graças e Lêda; a meus irmãos Assuero e Bezerra Jr..

À Teta, por ser minha grande companheira desde cedo, por sua força, humanidade, generosidade e otimismo.

Ao Dr. Dirceu de Santa Rosa, por sua competência profissional, seu humanismo e por nossa amizade (que independe de tempo e geografia) que muito tem me ensinado.

À Faculdade de Engenharia Química, com todos os seus integrantes, por me ter bem acolhido durante esse período.

À Faculdade de Engenharia Mecânica, em especial ao DEP (Departamento de Engenharia de Petróleo), por possibilitar o uso de infra-estrutura necessária para a realização de minhas simulações. Em particular ao Prof. Fernando de Almeida França, ao Prof. Denis Shiozer, ao Sílvio Gonçalves Dias, ao Carlos Eduardo Pereira, à Raquel (Sifem).

Aos colegas e amigos conquistados neste período, por me ensinarem tanto.

Ao Sifeq (Setor de Informática da Faculdade de Engenharia Química).

Ao Luciano de Moura e Souza e ao Cristiano, técnicos do Lopca, por seus profissionalismo e empenho durante a fase de digitação e organização da tese.

Resumo

Nesta tese, apresentam-se procedimentos de obtenção de campos vetoriais e escalares em reatores tanques agitados através da sistemática da fluido-dinâmica computacional.

A metodologia do trabalho é enfatizada por meio de casos estudos com um fluido Newtoniano, a água, e um sistema não-Newtoniano, o poliestireno. Ambos os fluidos estão contidos em um reator tanque agitado.

O sistema 'reator tanque agitado' é estudado com a variação da localização de agitador(es) tipo disco dentro do mesmo, bem como com a mudança em suas dimensões.

A partir daí, utilizando-se um pacote de fluido-dinâmica computacional, o PHOENICS versão 2.1, verifica-se a influência das variações geométricas do tanque agitado nos campos vetoriais e escalares.

Enfatizando-se a interação do estudo de reatores tanques agitados com a metodología "cfd" ("computational fluid dynamics"), obtém-se um novo método de resolução de antigos problemas relacionados aos tanques agitados.

Conclui-se que a apresentação de dados de modelos tridimensionais é mais informativa que os relacionados a modelos bidimensionais.

As saídas gráficas exibem, basicamente, perfis de velocidade, linhas de corrente e superfície.

Assim, a fluido-dinâmica computacional se apresenta como uma área interdiscíplinar que depende fundamentalmente de avanços na área computacional e que auxilia, estrategicamente na resolução de fluido-dinâmica em sistemas importantes dentro da Engenharia Química.

A teoria da mistura associada ao estudo de variações geométricas do impelidor (dentro do tanque), bem como a interação da "cfd" com outras áreas de conhecimento como : medicina, mecânica é sugerida.

Abstract

In this thesis, procedure for obtaintion of vector and scalar fields is shown and applied to stirred tank reactors. The methodology of the present work is emphasized through case studies with a Newtonian fluid, water, and a non-Newtonian system, polystyrene. Both fluids are contained inside a stirred tank reactor.

The system 'stirred tank reactors' is studied relating to variation of location of disk type impeller(s) inside it, as well as with changes in its dimensions. From this step on, using a computational fluid dynamics package PHOENICS version 2.1, it is verified the influence of geometric variations on vector and scalar fields.

Giving emphasis to the interaction of the study of chemical reaction engineering (stirred tank reactors) together with the "cfd" ("computational fluid dynamics") methodology, new methods of resolution of old problems are found.

It is concluded that presentation of tridimensional models becomes more understandable and realistic than bidimensional ones.

Graphical outputs display, basically, velocity profiles, streamlines and surfaces for the proposed case studies.

In this way, the computational fluid dynamics approach is considered an interdisciplinary area that fundamentally depends on advances in scientific computation Moreover, it helps strategically on the resolution of important systems inside chemical engineering.

Mixture theory associated with the study of geometric variations of the impeller (inside the stirred tank), as well as interaction of cfd with other areas of knowledge , as: medicine and mechanics are suggested.

Índice	—
Resumo	_ ii
Abstract	iii
Lista de figuras	viii
Lista de tabelas	xiv
Nomenclatura	xv
Capítulo 1 Introdução Geral	1
1.1 Introdução	1
1.2 Objetivos	2
1.3 Organização da tese	3
Referências bibliográficas	5
Capítulo 2 Revisão da literatura	6
2.1 Introdução	6
2.2 Classificação de problemas	6
<pre>2.3 A fluido dinâmica computacional (CFD - "computational fluid dynamics")</pre>	7 8
2.4 Reatores de polimerização & CFD	10 13
2.5 Formulação de um modelo matemático para um reator de polimerização	14
2.6 Métodos numéricos na fluido-dinâmica computacional-o método dos volumes finitos	17
2.7 Códigos computacionais em fluído dinâmica computacional.	22
2.8 Conclusão	23
Referências bibliográficas	24

	Capítulo 3 A fluido dinâmica computacional em sistemas poliméricos	27											
3.1 3.2	Introdução	27 27 28 28											
3.3	3 A fluido-dinâmica computacional e a engenharia de reatores químicos												
3.4	<pre>Influência de fatores geométricos e condições de mistura em reatores tanque agitado</pre>	30 30 31											
3.5	Procedimento prático no tratamento de reatores tanques agitados sob o ponto de vista da fluido-dinâmica computacional	32											
3.6	Ilustrações de alguns tipos de agitadores, com curvas de distribuições de velocidades características	32											
3.7	Conclusões	35											
Refe	erências bibliográficas	36											
(Capítulo 4 Abordagem simplificada do método de diferenças finitas - volumes finitos - solução utilizando o pacote comercial Excel - versão 5.0	37											
4.1	Introdução	37											
4.2	Formulação do problema	37											
4.3	Estabelecimento do problema	38 40											
4.4	Discretização das equações	40											
4.5	Resultados	42											
4.6	Conclusões	48											

Apêndice C4

49

AP.	C4.	А	Di	.screti	za	Çã	0	da	е	qua	açã	ăО	de	m	ome	ento	0 8	axi	[a]	Lε	3			
	mome	ent	0	radial	•	•	•		•	e	•	•	•	e	• •			•		•		•		49

	Capítulo 5 Estrutura da "cfd" - reatores de polimerização	52
5.1	Introdução	52
5.2	O pacote de fluido-dinâmica computacional PHOENICS v. 2.1	53
5.3	Escoamento bidimensional e tridimensional dentro de um reator tanque agitado	53
5.4	Reatores de polimerização com resfriamento externo	54
5.5	Condições de contorno para o sistema não-isotérmico	55
5.6	Tabelas explicativas da sequência das simulações	57
5.7	Resultados	57
5.8	Conclusões	68
Refe	erências bibliográficas	69
	Apêndice C5	70
AP-(C5-A Utilização do pós-processador PHOENICS v. 2.1 PHOTON v. 2.0	70
AP-(C5-A1 LISTAGEM DE ARQUIVOS TIPO "Q1" E "RESULTS", VINDOS DO PACOTE CFD PHOENICS VERSÃO 2.1	71
AP-(C5-B Apresentação de algumas telas de trabalho no UNIX .	100
C	Capítulo 6 Reatores agitados utilizando modelos bidimensionais e tridimensionais	114
6.1	Introdução	114
6.2	Impelidor tipo disco	115
6.3	Características das simulações	115
6.4	Reator tanque agitado com modelo tridimensional	115
6.5	Tabelas explicativas das simulações	117
6.6	Arquivos tipo "Q1"	119

6.7 Resultados	198
6.8 Conclusões	200
Referências bibliográficas	202
APÊNDICE C6	203
AP-C6-A Figuras ilustrativas da convalidação das simulações do presente trabalho	203
AP-C6-B ARQUIVOS TIPO "Q1" PARA OS PRINCIPAIS CASOS ESTUDOS	206
AP-C6-B1 Arquivo Q1 do caso estudo IA	206
Capítulo 7 Conclusões e sugestões para trabalhos futuros	219
7.1 Conclusões	219
7.2 Sugestões para trabalhos futuros	220

Lista de figuras

2.1	Exemplo da aplicação do método dos volumes finitos a um volume de controle
2.2	Visão geral de técnicas numéricas típicas em fluidodinâmica computacional e transferência de calor (Ma, 1995)20
3.1	A, B e C representam três tipos de impelidores utilizados em reatores tanques agitados. Representam, respectivamente, agitador tipo "turbine", "paddle", "helical ribbon" 33
3.2	Exemplo qualitativo da distribuição da velocidade tangencial dentro de um reator tanque agitado, com um impelidor tipo "paddle". Na figura acima, r equivale a raio do tanque (cm), z altura do tanque (cm), V_t velocidade tangencial (cm/s), N número de rotações por minuto (rpm). O fluido dentro do tanque é a água
4.1	Condições de contorno para um reator tanque agitado, com agitador (Pike, 1990) 40
4.2	Esquematização do problema simplificado 42
4.3	Planilha e gráfico de distribuição de velocidades nas direções radial e axial, respectivamente 46
4.4	Distribuição de temperatura nas direções axial e radial do reator tanque agitado já esquematizado anteriormente na figura 4.2
5.1	Condições de contorno para um reator tanque agitado, escoamento não-isotérmico
5.2	Variáveis analisadas nas célula (x,y,z), (5,5,1). Caso estudo tipo Al
5.3	Do canto inferior esquerdo ao inferior direito: U_r , U_z , P (pressão) e linhas de corrente ("full"). Caso estudo tipo A1
5.4	Do canto inferior esquerdo ao canto inferior direito, $U_{\rm r},$ $U_{\rm z},$ U_{θ} e P (pressão). Versão 3d. Caso estudo tipo A2 60
5.5	Do canto inferior esquerdo ao canto inferior direito, U_r , U_z , P (pressão e linhas de corrente ("full")). Caso estudo tipo A3
5.6	Perfil de temperatura para o caso estudo tipo A3 62
5.7	Esta equivale à Figura 5.4, apenas com modificações da opção "View" para "Isolines" 63

5.8 Caso estudo tipo A4, 3d, com valores das variáveis estudadas na localização (5, 5, 1)
5.9 Caso estudo tipo A4. Do canto inferior esquerdo ao canto inferior direito, U_r , U_q , U_θ , P. Versão 3d
5.10 Reator tanque agitado, base para as simulações do próximo capítulo
AP-C5-1 Tela de entrada no pacote PHOENICS v. 2.1 104
AP-C5-2 Tela de entrada para o pré-processador, "satellite" 105
AP-C5-3 Tela de visualização das opções (do menu) do "satellite"
AP-C5-4 Tela de construção dos casos estudos, MAIN 107
AP-C5-5 Opção "geometria", mostrando um tanque cilíndrico, malha 10x10x10
AP-C5-6 Tanque (opção "geometria") com vista de topo 109
AP-C5-7 Tanque, vista de topo
AP-C5-8 Opção "Library" do pré-processador "satellite" 111
AP-C5-9 Tela para entrada no pós-processador PHOTON 112
AP-C5-10 Tela principal do pós-processador PHOTON. A partir dela são construídas as saídas gráficas 113
6.1 Início da simulação do caso estudo tipo IA 119
6.2 Geometria característica do caso estudo IA 120
6.3 Final da simulação do caso estudo IA
6.4 Linhas de correntes para o caso estudo IA, Visão "full" .
6.5 Velocidade V1, visão "full" (canto inferior esquerdo), visão "isolines" (canto superior esquerdo). Caso estudo IA.
6.6 Velocidade W1, visão "full" (canto inferior esquerdo), visão "isolines" (canto superior esquerdo). Caso estudo IA.
6.7 Início da simulação do caso estudo tipo IB 125
6.8 Final da simulação do caso estudo tipo IB

ix

6.9 Velocidade Ul para o caso estufo tipo IB
6.10 Perfil de velocidade U1 para o caso estudo tipo IB, plano 7 de onservação
6.11 Perfil de velocidade V1 para caso estudo IB 129
6.12 Velocidade V1 para o caso estudo IB, plano 7 de observação
6.13 Velocidade W1 para caso estudo tipo IB
6.14 Velocidade W1 para caso estudo IB, plano 7 de observação .
6.15 Velocidades U1, V1, W1 para caso estudo tipo IB. Visão "full"
6.16 Velocidades Ul, Vl, Wl para caso estudo tipo IB. Visão "isolines"
6.17 Início da simulação do caso estudo tipo IC 135
6.18 Final da simulação do caso estudo tipo Ic
6.19 Velocidades, U, V, W para o caso estudo IC. Visão "full" .
6.20 Início da simulação do caso estudo tipo ID 138
6.21 Final da simulação do caso estudo ID
6.22 Velocidades U, V, W para o caso estudo ID 140
6.23 Início da simulação do caso estudo tipo IIA 141
6.24 Final da simulação do caso estudo tipo IIA 142
6.25 Linhas de corrente para o caso estudo IIA. Visão "full".
6.26 Linhas de corrente para o caso estudo IIA. Visão "isolines"
6.27 Velocidades U1, V1, W1 para o caso estudo IIA. Visão "full"
6.28 Início da simulação do caso estudo IIB
6.29 Final da simulação do caso estudo IIB
6.30 Velocidade Ul para o caso estudo IIB. Planos 4 e 13 de observação

6.31 Velocidade V1 para o caso estudo IIB. Planos 4 e 13 de observação
6.32 Velocidade W1 para o caso estudo IIB. Planos 4 e 13 de observação
6.33 Início da simulação do caso estudo tipo IIC 151
6.34 Final da simulação do caso estudo tipo IIC 152
6.35 Linhas de corrente para o caso estudo IIC. Visão "full".
6.36 Velocidades U, V, W o caso estudo IIC. Visão normal
6.37 Linhas de corrente para o caso estudo IIC. Visão "isolines
6.38 Início da simulação do caso estudo IID 156
6.39 Final da simulação do caso estudo IID
6.40 Velocidades U, V, W para o caso estudo IID 158
6.41 Início da simulação do caso estudo IIIA 159
6.42 Final da simulação do caso estudo tipo IIIA 160
6.43 velocidades U1, V1, W1 para o caso estudo IIIA. Visão "full"
6.44 Início da simulação do caso estudo tipo IIIB 162
6.45 Final da simulação do caso estudo IIIB 163
6.46 velocidades U, V, W para o caso estudo IIIB. Visão 3d. 164
6.47 Velocidade Ul para o caso estudo IIIB. Planos 4 e 13 de observação
6.48 Velocidade V1 para o caso estudo IIIB. Planos 4 e 13 de observação
6.49 Velocidade W1 para o caso estudo IIIB. Planos 4 e 13 de observação
6.50 Início da simulção do cso estudo tipo IIIC 168
6.51 Final da simulação do caso estudo tipo IIIC 169
6.52 Velocidades U, V, W para o caso estudo IIIC. Visão normal

xi

6.53 Linhas de corrente para o caso estudo IIIC. Visão "full"	
6.54 Linhas de corrente para o caso estudo IIIC. Visão "isolines"	2
6.55 Início da simulação do caso estudo tipo IIID 17	3
6.56 Final da simulação do caso estudo IIID	4
6.57 Velocidades U, V, W para o caso estudo IIID 17	5
6.58 Velocidade U para o caso estudo IIID. Visão normal 17	6
6.59 Velocidade V para o caso estudo IIID. Visão normal 17	7
6.60 Velocidade W para o caso estudo IIID. Visão normal 17	8
6.61 Início da simulação do caso estudo tipo IVA 17	9
6.62 Final da simulação do caso estudo tipo IVA 18	0
6.63 Velocidades U1, V1, W1 para o caso estudo IVA. Visão "full"	1
6.64 Início da simulação do caso estudo IVB	2
6.65 Final da simulação de um caso estudo tipo IVB 18	3
6.66 Velocidade Ul para o caso estudo IVB. Plano 4 e 13 de observação	4
6.67 Velocidade V1 para o caso estudo IVB. Plano 4 e 13 de observação	5
6.68 Velocidade W1 para o caso estudo IVB. Plano 4 e 13 de observação	6
6.69 Início da simulação de um caso estudo tipo IVC 18	7
6.70 Final da simulação do caso estudo IVC	8
6.71 Velocidades U, V, W para o caso estudo IVC, Visão normal	9
6.72 Linhas de corrente para o caso estudo IVC. Visão "full".	0
6.73 Linhas de corrente para o caso estudo IVC. Visão "isolines"	11
6.74 Início da simulação do caso estudo IVD 19) 2
6.75 Final da simulação de um caso estudo tipo TVD 19)3

xii

6.76	Velocidades	s U	, V,	W	para	o caso	estu	do IVD	5 C C	· •	•	194
6.77	Velocidade	U	para	0	caso	estudo	IVD.	Visão	normal	• •	, • • •	195
6.78	Velocidade	V	para	0	caso	estudo	IVD.	Visão	normal		• -	196
6.79	Velocidade	W	para	0	caso	estudo	IVD.	Visão	normal	• •	• -	197
AP-C6	5-Al Linhas tipo IIA, impelidor, agitado. V	de coi bi /is	cori m vai em cc ão "i	rer ia mc	nte co nção co da co plines	orrespor da veloc geometri s"	ndente idade la do	es a ca e de ro reato: 	aso esti otação c c tanque	ido lo	do . 2	203
AP-C6	5-A2 Linhas tipo IIA, impelidor, agitado. V	de co b	cori m vai em cc ão "f	rer ia mc iul	nte co nção co da ç 1".	orrespor la veloc geometri	ndente idade a do	es a ca e de ro reato: 	aso esti otação c tanque	ido lo	do . 2	204

Lista de tabelas

2.1	Classificação dos reatores de polimerização do estireno
2.2	Alguns tipos de códigos "cfd"
5.1	Características das simulações
5.2	Características dos casos estudos-denominações de suas saídas
6.1	Dimensões do reator e do impelidor
6.2	Tipos de casos estudos - Agitador tipo disco 117
6.3	Tipos de casos estudos/simulações
6.4	Casos estudos com respectivas Figuras

Nomenclatura

- Γ_{ϕ} : coeficiente de transporte difusivo para ϕ
- *π*: 3.1415...
- β : constante
- $\boldsymbol{\rho} \text{: densidade}$
- θ : direção tangencial
- abla, operador gradiente
- 1: tensão cisalhante
- ϕ : variável dependente, campo de escoamento
- μ : viscosidade
- η : viscosidade
- μ : viscosidade Newtoniana
- $\Delta_{\mathbf{E}}$: energia de ativação
- -: ausente
- •
- γ : taxa de deformação
- **2D:** bidimensional
- 3D: tridimensional
- D: diâmetro tanque
- H: altura tanque
- H₂O: água
- $\mathbf{h}_{\text{parede}}$: coeficiente de troca de calor
- k: condutividade térmica
- m: índice de consistência
- m_0 : denota o valor de m em T_0 e P_0
- n (superscrito): indice "power-law"
- N: velocidade rotacional do agitador
- **n**: vetor normal
- P: pressão

P₀: pressão inicial **PS:** poliestireno q: fluxo de calor r: raio $R_{\rm d}$: distância radial até à linha central do eixo do agitador \mathbf{r}_{p} : raio médio do volume de controle $\mathbf{s}^{\boldsymbol{\phi}}$: termo fonte para a geração da propriedade $\boldsymbol{\phi}$ SS: "steady-state" T: temperatura t: tempo \mathbf{T}_0 : temperatura inicial \mathbf{T}_{ext} : temperatura externa U velocidade radial, equivale a U_r ou Ul U0: velocidade tangencial velocidades radial, axial, tangencial, $\mathbf{U}_{\mathbf{r}}, \quad \mathbf{U}_{\mathbf{z}}, \quad \mathbf{U}^{\mathbf{\theta}}$: respectivamente U_r: velocidade radial Uz: velocidade axial V velocidade axial, equivale a U_z ou V1 w, e n, s: "west", "east", "north", "south" - nomenclatura característica da discretização pelo método dos volumes finitos z: direção axial

W velocidade tangencial, equivale a U ${\theta}$ ou W1

$$\left(\frac{r_{n}^{2}-r_{s}^{2}}{2}\right) = \frac{1}{2}\left[(r_{n}+r_{s})(r_{n}-r_{s})\right]$$

CAPÍTULO 1

Introdução geral

1.1 INTRODUÇÃO

Os reatores tanques agitados estão envolvidos em uma percentagem significativa de produção dentro da indústria química. Juntamente com a engenharia de reatores químicos, que dentre outras coisas, possui a finalidade de melhor projetar e inovar reatores, surge a tecnologia da informática. Esta, presente cada vez mais na engenharia, tende a aliar métodos computacionais com informações já conhecidas na engenharia de reatores. Surge, então, a fluido dinâmica computacional, que em termos práticos, pretende resolver problemas e elucidar comportamentos através de novas rotas, técnicas e perspectivas.

O entendimento de fenômenos fluido-dinâmicos dentro de reatores tanques agitados passa por um treinamento multidisciplinar. É necessário desenvolver o embasamento físico do sistema através de modelos determinísticos detalhados, bem como a aprendizagem e consequente conhecimentos de técnicas numéricas, análise numérica, informática, trabalho em ambientes computacionais diversos e a perceber perspectivas para futuras aspirações e necessidades dentro da área. Torna-se importante salientar que a teoria hoje existente não se supera e a ação é de se manterem procedimentos e se estar sempre atento a novas realidades.

Os problemas sempre presentes em reatores tanques agitados se relacionam aos fenômenos que ocorrem quando o fluido começa a escoar dentro do tanque. Se se tratar de fluido Newtoniano, as preocupações são em se entender da melhor maneira possível o comportamento dos campos de velocidade, temperatura, dentro do reator, de acordo com a geometria do projeto escolhido.

Em termos de fluidos não-Newtonianos, por exemplo, as reações de polimerização recebem há algum tempo e também atualmente, um grande interesse. Neste caso, além das preocupações já citadas para os fluidos Newtonianos, torna-se importante destacar que o primordial é: não parar a produção do produto de polimerização. Tal tarefa, superficialmente trivial, torna-se árdua, pois é nos sistemas de polimerização em que se encontram grandes desafios, como: alta exotermicidade da reação, os polímeros possuem características diversas dos materiais "comuns", por exemplo, eles não têm um peso molecular definido, mas uma distribuição de pesos moleculares, seu grau de pureza, sua dificuldade de recuperação ou técnicas de purificação, a presença de fenômenos como o "gel effect", dentre outros. Desse modo, a modelagem, operação e controle desses sistemas é tarefa que envolve uma grande quantidade de parâmetros para a tomada de decisões e para entendimento do processo.

Basicamente, pode-se ampliar o conhecimento dos fenômenos que ocorrem no reator, através do estudo de algumas variações geométricas, que aliado à fluido-dinâmica computacional, parece ser uma ferramenta adequada para ser utilizada e que tem como resultados benéficos: simulações de geometrias complexas, fluidos complexos e pouco seguros, condições de simulações desfavoráveis, dentre outros. Se se pode simular situações complicadas e desfavoráveis, provavelmente, a validação do trabalho de simulação por confirmações (ou não) experimentais ou até vindas de outros dados de simulações de outros autores, se torna mais simples.

Os materiais poliméricos, plásticos, têm sido considerados sinônimos de substitutos baratos para materiais naturais, graças à produção final mundial de mais de 85 Mt (Arlíe, 1990). Podem ser aplicados na eletrônica, bem como em processamento de informações, pois permitem miniaturização.

Um melhor entendimento dos fenômenos de mistura, dentro dos reatores de mistura, diversas geometrias de projeto para melhorar suas características de atuação, bem como a ligação da engenharia de reatores químicos com a fluido-dinâmica computacional são importantes para que se avance no entendimento e obtenção de melhores respostas dos reatores tangues agitados.

1.2 OBJETIVOS

O objetivo específico deste trabalho está em estudar a fluido dinâmica da água e do poliestireno através da utilização do pacote de fluido dinâmica computacional, PHOENICS Version 2.1, bem como uma planilha comercial em um sistema fluidodinâmico, com a finalidade de se estabelecer uma metodologia específica de obtenção de perfis termodinâmicos para os casos estudos simulados. A idéia está na utilização dos recursos computacionais disponíveis para se atingir uma metododologia de respostas gráficas em 'cfd', como: perfis de velocidades, de pressão, linhas de corrente, por exemplo.

Os recursos computacionais utilizados foram, basicamente: uma estação de trabalho Sun Sparc 5 e uma impressora HP Deskjet 550c, colorida.

A utilização máxima dos recursos disponíveis na estação de trabalho (sistema operacional Unix, ambiente OpenWindows, V. 3.0) permite a saída de "displays" gráficos, com um menor custo, em relação à disponíbilidade de material para a elaboração do trabalho. As simulações do processo de basearam (água e poliestireno), em sistemas sem agitador, inicialmente, e em outros com um agitador tipo disco, posteriormente. Algumas variações na localização geométrica do agitador foram experimentadas. O objetivo perseguido foi a metodologia de obtenção de todos esses resultados.

1.3 ORGANIZAÇÃO DA TESE

O capítulo 2 mostra a classificação de problemas emfluido-dinâmica computacional, enfatizando os seus fundamentos na solução numérica de reatores tanques agitados; a ligação entre a teoria "cfd" e os reatores de polimerização, bem como apresenta um modelo matemático para um reator agitado de polimerização. Esta se constitui numa oportunidade em se estabelecerem diversas saídas para se desenvolverem е resolverem problemas de fluido-dinâmica em função da sistemática computacional 'cfd'. Apresenta-se, suscintamente, o método de discretização numérica dos volumes finitos e são citados diversos códigos computacionais, com sua forma de discretização das equações dos problemas. Desse modo, 0 capítulo 2 fornece pontos importantes que estão sempre ligados à sistemática lógica de obtenção de resultados na fluidodinâmica computacional.

O capítulo 3 apresenta os sistemas reatores de polimerização, desde modelagens simples em sistemas abertos e fechados até os problemas intrínsecos a esses sistemas. São citados as influências geométricas, bem como as condições de mistura para os reatores tanques agitados. Segue-se à citação de um procedimento prático no tratamento desse tipo de reatores, sob as diretrizes da 'cfd' ("computational fluid dynamics"), ou seja, a fluido-dinâmica computacional.

O capítulo 4 oferece um procedimento simples de obtenção de resultados para um problema 'cfd', através de uma planilha comercial, Excel versão 5.0. O importante nesse procedimento é a apresentação de uma técnica simplificada de iterações, que fornece saídas gráficas satisfatórias para o caso estudo. Há o apêndice do capítulo 4 que fornece detalhes importantes para o completo entendimento do mesmo.

O capítulo 5 considera as primeiras simulações realizadas com o pacote de fluido-dinâmica computacional, PHOENICS versão 2.1, apresentando algumas possibilidades de sua utilização, bem como as saídas gráficas dos campos de escoamento para dois fluidos, a água e o sistema poliestireno. Explicam-se as diferenças no enfoque de um problema em função de sua dimensionalidade, bem como são descritas características básicas do PHOENICS 2.1. Existe um apêndice referente ao capítulo 5 que dá detalhes de procedimentos para a efetiva obtenção das saídas gráficas dos casos estudos, desde a tela de trabalho até o momento de obtenção material de um perfil, após sua impressão.Deve ser notado que os casos apresentados neste Capítulo não se referem a sistemas com agitação.

O capítulo 6 mostra resultados de simulações, dentro do PHOENICS 2.1, que visam a expor algumas possibilidades de variações das condições geométricas do reator tanque agitado, bem como das diferenças/semelhanças entre o estudo 2-d e 3-d de um mesmo tipo de problema. Este capítulo sintetiza todo um procedimento de obtenção de resultados práticos para casos estudos que aliam ao seu entendimento, a teoria de engenharia de reatores guímicos, a fluido-dinâmica computacional e as ferramentas de computação/informática que devem auxiliar o usuário.

O capítulo 7 sumariza os resultados e conclusões dos capítulos anteriores, bem como assinala a importância da sistemática desenvolvida ao longo de todo o trabalho, até à chegada do ponto de apresentação das saídas. Sugerem-se outros caminhos para se continuar, melhorar ou desenvolverem outras metodologias, além das aqui propostas.

4

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ARLIE, Jean-Pierre, Commodity Thermoplastics-Technical and Economic Characteristics, Editions Technip, Paris, 1990.

CAPÍTULO 2

Revisão da literatura

2.1 INTRODUÇÃO

O escoamento de fluidos se constitui num campo de estudo vasto e inovador, estando intimamente relacionado a problemas tecnológicos importantes e de interesse em engenharia, bem como a fenômenos da vida cotidiana. Escoamento de fluidos envolve o conhecimento de fenômenos presentes no respirar, beber, lavar, nadar, criar plásticos de petróleo, voar em aviões, queimar gasolina em um motor de automóvel e gerar potência e poluição do ar, fazer sopa, pular de pára-quedas, soldar, fazer aço, ventilar uma sala, estudar radiação, dentre muitos outros exemplos.

A fluido-dinâmica computacional tem como tarefa predizer quantitativamente o que ocorre quando fluidos escoam, geralmente com as complicações de : escoamento simultâneo de calor, transferência de massa (transpiração, dissolução), mudança de fase (congelamento, ebulição, "melting"), reações químicas (combustão, p. e.), movimento mecânico (de pistões, ventiladores, p. e.).

O presente capítulo visa a descrever de maneira suscinta e compreensível os seguintes tópicos: classificação de problemas, o escoamento de fluidos, "cfd" ("computational fluid dynamics" ou fluido-dinâmica computacional), reatores de polimerização, processamento de polímeros ligado ao enfoque "cfd", métodos numéricos para a resolução de problemas "cfd", códigos/pacotes computacionais de fluido-dinâmica computacional, resolução numérica de problemas de escoamento, formulação de um modelo de fluido-dinâmica computacional e resultados esperados neste tipo de teoria.

2.2 CLASSIFICAÇÃO DE PROBLEMAS

Problemas de transporte de massa e transferência de calor (convectiva) podem ser agrupados em duas grandes classes (Baliga, 1978): tipo "convecção-difusão" e "problemas de escoamento de fluido". O termo "convecção" denota o transporte de uma variável dependente devido ao movimento macroscópico do fluido, somente. O termo "difusão", no entanto, se utiliza de modo mais amplo. Ele evidencia todos os processos de transporte oriundos de fenômenos moleculares ou atômicos. Os problemas tipo "convecção-difusão" contêm uma importante subclasse de problemas que são referenciados como "de condução". Exemplos desses últimos podem ser: condução de calor em sólidos, difusão pura em misturas gasosas, percolação através de um meio poroso, casos de escoamento completamente desenvolvido e transporte de calor em dutos, escoamento irrotacional de um fluido incompressível com propriedades constantes.

problemas tipo "escoamento de fluido" incluem 0s а totalidade de problemas de transferência de massa e calor com interesse dentro da engenharia. Assim sendo, os "problemas de difusão-convecção" formam uma subclasse do presente. Α característica predominante dos problemas de "escoamento de fluidos" está na necessidade de se resolverem simultaneamente equações de momentum e da continuidade. Os "fluid flow problems" podem, ainda, ser divididos em três subgrupos. O primeiro subgrupo inclui problemas que envolvem apenas cálculos de escoamento de fluido, enfatizando um procedimento especial para a resolução de equações do momentum juntamente com a equação da continuidade. Exemplo desse tipo seria o escoamento de um fluido incompressível com propriedades físicas constantes.

O segundo subgrupo se constituí nos problemas de "convecção forçada". Estes envolvem propriedades do fluido constantes. A obtenção de solução de campos para um fluido com essas características é através da resolução simultânea de equações do momentum e da continuidade. A solução desse problema é utilizada na obtenção do problema tipo "convecçãodifusão".

Finalmente, o terceiro subgrupo envolve problemas complexos nos quais as equações que governam o escoamento do fluido são acoplados àquelas que decidem/solucionam outras variáveis dependentes. Exemplo de problemas dessa espécie envolvem problemas de convecção forçada incluindo fluidos com propriedades variáveis, problemas de convecção natural, escoamento de uma mistura quimicamente reativa de gases, dentre outros.

2.3 A FLUIDO DINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD - "computational fluid dynamics")

A fluido-dinâmica computacional é uma subdivisão da computação científica que tem, nos últimos tempos, apresentado um crescimento explosivo (Rizzi, 1987). Ela reúne elementos de disciplinas correlatas, como: dinâmica dos fluidos, análise numérica, teoria de equações diferenciais parciais, ciência da computação e geometria computacional. "Cfd", então, torna-se a ciência de produzir soluções numéricas para um sistema de equações diferenciais parciais, que descrevem o escoamento de um fluido. Ela é feita através de métodos discretos (resolução numérica) e visa a melhor entender fenômenos físicos quantitativa e qualitativamente, no escoamento, e tem sido sempre utilizada para melhorar projetos de engenharia, embora tenha grande potencial como ferramenta para o desenvolvimento de políticas operacionais. Na verdade, a "cfd" se constitui numa vertente da computação científica que vem alternando os papéis entre dois aspectos da mecânica clássica ("continuum"):

análise matemática e experimentos no laboratório. Embora bastante eficazes quando aplicadas a problemas líneares e alguns fenômenos especiais, essas duas disciplinas tradicionais sozinhas não têm sido suficientes para adequadamente enfocar os problemas não-lineares. Sobre esses problemas, a "cfd" reúne de modo sinergístico ambos análise e experimento e permite um entendimento em fenômenos não-lineares, na sua estrutura principal, e ainda, sugere previamente novas maneiras de construção de uma determinada característica em um modelo analítico melhorado. As origens e abrangências da "cfd" são de peculiar interesse (Rizzi, 1987). O período que vai desde a descoberta de equações básicas por Euler e por Navier e Stokes até o início do século XX pode ser chamado de clássico, considerando-se que soluções fundamentais e analíticas estavam sendo procuradas. Pode-se talvez marcar o início da era "cfd" em 1917, quando L. F. Richardson (Richardson, 1922) tentou integrar as equações meteorológicas numericamente, a mão, a fim de formular a primeira previsão meteorológica, numericamente. Embora a "cfd" tenha realmente iniciado nos anos 40, o trabalho de Richardson se torna significativo por incorporar o espírito da "cfd", isto é: a necessidade de se obter uma resposta para um problema prático.

Durante a década de 30, uma forte necessidade prática direcionou a "cfd" a problemas com modelos lineares. A indústria de aviões necessitava de uma maneira de introduzir a teoria do vôo em seu entendimento e no projeto de aviões. Naqueles dias, com vôos a baixas velocidades; a viscosidade e vorticidade eram negligenciadas, e o modelo de escoamento era Laplaciano.

A viscosidade passou a ter um papel preponderante através da solução de equações da camada limite da teoria de Prandtl, a qual utilizava métodos de diferenças finitas e máquinas de cálculo mecânicas (Schlichting, 1968).

Durante a década de 40, dois grupos, os teóricos e os práticos começaram a confluir idéias.

2.3.1 "Cfd" - FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS PARA SOLUÇÕES NUMÉRICAS

- Teoria Pré-cfd: A maioria dos modelos matemáticos utilizados hoje na fluido-dinâmica computacional foram derivados antes da "cfd". Exemplos são: equações de Navier-Stokes, equações de Euler em suas formas compressível e incompressível, dentre outras. equações As propriedades básicas dessas foram conhecidas antes do início da "cfd". O projeto de métodos computacionais para o escoamento de fluidos veio em grande parte dessa já conhecida teoria. O conceito de "equações bempostas" foi estabelecido. Tornou-se essencial, em simulação numérica, que a solução dependesse continuamente dos dados. As equações foram classificadas em hiperbólicas, parabólicas e elípticas por suas propriedades individuais.

O modelo mais geral para problemas tipo "fluid flow" se contitui nas equações de Navier-Stokes:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = 0 \tag{2.1}$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\rho \mathbf{v} \mathbf{v} + p\mathbf{I} \right) = \rho g + \operatorname{div} \mu \tau$$
(2.2)

$$\frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\mathbf{e} + \mathbf{p}\right)\mathbf{v} = \rho \mathbf{g}.\mathbf{v} + \operatorname{div}\left(\mathrm{kgrad}T + \mu \mathbf{v}.\tau\right)$$
(2.3)

que representam a conservação da massa, momentum e energia total por unidade de volume; onde $\tau = -\frac{2}{3}I \operatorname{div} v + \operatorname{grad} v + \operatorname{grad}^T v$ é o tensor densidade de fluxo do momentum, devido à fricção. Os símbolos ρ , p, T e v se referem a densidade, pressão, temperatura e velocidade de fluido, enquanto μ representa o coeficiente de viscosidade molecular, k é a condutividade térmica molecular, g é a força de campo por unidade de massa e I é o tensor identidade. Equações adicionais devem ser acrescentadas a fim de relacionar variáveis termodinâmicas e coeficientes para se fechar o sistema. A análise matemática do sistema formado pelas equações (2.1) -> (2.3) não tem sido, ainda, satisfatória.

O comportamento dessas equações é parabólico nas regiões onde a viscosidade tem um efeito marcante, ou seja, próximo a paredes e à formação de rastros deixados pela passagem de um objeto em determinado meio ("wakes"), porém, é hiperbólico nas demais regiões. Como um sistema, essas equações se denominam incompletamente parabólicas e não se conhecem condições de contorno simples, antecipadamente, que as leve ao nível de um problema bem posto, em geral, para as equações diferenciais. Considerando-se uma resolução com um método discreto (problema discreto), a solução numérica exige que condições de contorno adicionais sejam especificadas. Pressão e temperatura em uma parede sólida devem ser consideradas e algumas condições devem ser estabelecidas em fronteiras/contornos artificiais, no espaço do campo onde o fluido entra ou deixa o domínio. Ainda não existe concordância em como essas condições deveriam ser estabelecidas. Nem mesmo a condição de estabilidade para a integração no tempo do sistema formado pelas equações (2.1) -> (2.3) está inteiramente entendida. Consideram-se, por isso, subsistemas mais simples.

- Teoria Interagindo com "Cfd": Uma área onde cfd - outras teorias interagiram se observa pelas leis de conservação em sistemas não-lineares.

O objetivo geral da "cfd" seria, então: dado um problema de escoamento especificado por condições de contorno particulares, e algumas vezes por condições iniciais, deve-se descrever a solução do problema como conjunto finito de números distribuídos através do domínio do escoamento e que obedeçam a algumas relações funcionais que estejam baseadas em aproximações derivadas das equações do continuum, escolhidas para governar o problema em consideração.

Esse objetivo se atinge pela projeção do problema do continuum das equações diferenciais a algum espaço finito e dimensional para as variáveis dependentes e independentes, e assim pela resolução dessas equações que resultam em equações discretas para o conjunto final de números. Na resolução das equações diferenciais parciais sob uma formulação Euleriana, com referência a algum sistema de coordenadas, o primeiro passo no processo de projeção é a discretização do domínio do escoamento através do estabelecimento de uma rede de pontos situados em um número finito de localizações diferentes das variáveis independentes, isto é, gera-se uma malha. Obtêm-se soluções discretas nos campos investigados, nos pontos da malha construída.

2.4 REATORES DE POLIMERIZAÇÃO & "CFD"

Os reatores químicos variam em tamanho e forma, bem como no método de operação. Um tanque no qual as propriedades são uniformes se denomina "tanque perfeitamente agitado". O projeto agitador, bem como sua velocidade de agitação podem do influenciar nas condições de mistura. Projeta-se um reator tanque agitado com a finalidade de se obterem perfis de temperatura, campos de velocidades e composições uniformes ao longo do mesmo. Existem, dentro do reator, zonas com altas taxas de recirculação, onde ocorre difusão molecular e térmica entre as porções de fluido (recirculado). As difusividades térmicas são adequadamente altas, o que propicia temperaturas satisfatoriamente uniformes. Difusividades moleculares são bem menores, o que faz com que grandes diferenças de composição possam existir. O caso extremo ocorre quando se encontra um tanque agitado completamente segregado. Um exemplo de segregação completa ocorre na chamada polimerização em suspensão, conduzida em um reator tipo contínuo tanque agitado. No entanto, a segregação é mais especulada do que observada em reatores tanques agitados de polimerização em uma única fase (Atiqullah, 1990). Como em muitos outros tipos de reações exotérmicas em tanque agitados, três estágios estacionários são possíveis para polimerizações começando com monômero: um baixo, onde existe essencialmente conversão zero; um intermediário (condição metaestável) e um superior, condição de "thermal runaway", onde a conversão polimérica é aproximadamente completa. É desejado que se opere a condições intermediárias, metaestáveis.

Os processos de polimerização são de enorme importância para que se tenha um maior discernimento na modelagem de reatores de polimerização e de uma maneira mais ampla, na engenharia de reatores químicos aliada à teoria de fluidodinâmica computacional ("cfd").

Para cada produto examinado, deve-se sempre ter em vista os principais problemas que surgem com os processos de polimerização (Arlie, 1990):

- grau variável de pureza dos reagentes, de acordo com o modo de iniciação (radical ou iônico);
- monitoramento da temperatura de reação, o que é difícil de se controlar, dada a alta exotermicidade da polimerização; este fator preponderante lidera o nível de pesos moleculares e sua distribuição no polímero; a nível do processo, o controle de temperatura depende da escolha do reator, bem como do meio reacional;
- escolha do tipo de operação, contínuo ou batelada, de acordo com as propriedades desejadas do produto;
- recuperação do polímero e possível reciclo do monômero e do solvente;
- operações de purificação, em alguns casos, remoção de resíduos de catalisador.

Existem 4 (quatro) técnicas de polimerização as quais são utilizadas na maioria dos processos de polimerização, a saber: "bulk" (massa), suspensão, emulsão e solução. As principais características delas se resumem abaixo:

- Polimerização em massa: o monômero é polimerizado nos estados líquido ou gasoso, geralmente em presença de um catalisador (ou iniciador). Vários problemas são inerentes a esse modo de polimerização: a massa reacional se torna altamente viscosa à medida em que a reação avança, sendo difícil de se fazer o controle de temperatura através de uma agitação efetiva;
- Polimerização em suspensão: o monômero, em concentrações em peso variando entre 10 e 50%, é disperso em um diluente, sob agitação. Formam-se pequenas esferas, com diâmetros entre 0.1 e 3 mm. O mecanismo é similar ao da polimerização em massa, à parte do fato de que o calor de reação é facilmente dissipado por meio do diluente. Estabilizadores em suspensão são adicionados ao diluente, com a finalidade de prevenir o "cozimento" das esferas, pela formação de um filme protetor.

O diluente pode ser a água (para o poli-cloreto de vinila, PVC) ou um solvente de hidrocarbonetos (ex.: polimerização a baixas pressões do etileno).

- Polimerização por emulsão: tal processo difere da polimerização por suspensão pelo fato de que as partículas dispersas são bem menores. Seu menor tamanho é obtido pela adição de vários surfactantes à água, produzindo-se um tipo de emulsão óleo-em-água. Os iniciadores são solúveis em água, ao contrário daqueles usados em polimerização em suspensão; - Polimerização em solução: toma lugar na presença de um solvente de ambos o monômero e o polímero. Encontra-se, neste caso, melhor controle de temperatura, pelo alcance de melhor agitação. As desvantagens surgem do custo do solvente, da limitação do peso molecular, bem como das dificuldades de secagem do polímero.

Além dos 4(quatro) tipos de processo de polimerização acima citados, outros 4(quatro) devem ser mencionados (Kiparissides, 1996):

- Polimerização por precipitação: quando o polímero é insolúvel seu monômero ou na solução monômero-solvente, em uma polimerização que começa em uma fase homogênea se torna rapidamente heterogênea à medida em que o polímero precipita como uma segunda fase. Na polimerização por precipitação, assume-se que a cinética global se constitui na soma de reações independentes nas duas fases, ou seja, a fase rica em monômero e a fase rica em polímero. No primeiro caso, а cinética de solução é seguida. No segundo caso (material misturado com monômero), todas as reações (terminação, propagação) podem se tornar controladas por difusão.
- Polimerizações catalisadas por sólidos: polietileno de alta densidade, polietileno linear de baixa densidade e polipropileno isotáctico são produzidos em reatores a baixa pressão, em presença de catalisadores tipo Ziegler-Natta. Embora alguns catalisadores sejam usados em forma líquida, a maioria é heterogênea, ou seja, catalisadores sólidos que podem ser suportados ou não. O monômero em contato com o catalisador poderá ser gasoso (processo em fase gasosa), um líquido puro (o processo em solução líquida) ou dissolvido em um diluente ("slurry process"). Em todos os casos, as fraturas e fragmentos do catalisador poroso são dispersas no polímero e se tornam o local de polímerização. O processo de polimerização "liquid slurry" consegue obter um excelente controle de temperatura.
- Polimerização interfacial: este tipo de processo exige duas fases; a polimerização ocorre, basicamente na interface entre duas fases líquidas imísciveis. A taxa de polimerização é rápida e produz-se um polímero de alto peso molecular a temperatura ambiente. A taxa de polimerização é controlada pelas taxas de difusão dos monômeros até à interface de polimerização.
- Polimerização no estado sólido: pode produzir cristais de polímero macroscópico e, em alguns casos, cristais de alta qualidade ótica. A reação de propagação é controlada pela estrutura do cristal e a simetria do monômero.

A metodologia para modelagem de um reator de polimerização é utilizada para que se entenda de modo mais acessível o meio complexo dos reatores de polimerização. Vários tópicos que podem estar nessa metodologia seriam:

- Seleção da configuração do reator;
- Derivação de equações de projeto do reator, para a mistura reacional, bem como para fluidos refrigerantes/aquecedores;
- Modelos adequados para processos de tranferência de calor, energia, massa, momentum;
- Identificação de correlações que produzem a viscosidade, a densidade da mistura reacional, coeficientes de transferência de calor, de massa;
- Para processos particulados, derivação de um balanço de população para a distribuição de tamanho de partícula (p. e.: número de partícula polimérica, diâmetro, área superficial);
- Inclusão de todas as equações necessárias para descrição da "performance" de diferentes "loops" de controle (temperatura, pressão, escoamento);
- Escolha de um método numérico para resolução das equações do modelo. Estimação de parâmetros desconhecidos ao modelo. Estudo de sensibilidade, comportamento do modelo dinâmico.

2.4.1 A FLUIDO-DINÂMICA COMPUTACIONAL PARA REATORES TIPO TANQUE-AGITADO

A aplicação da "cfd" aos reatores tanque agitado data da época de 70 (Rosendal et al., 1996); no entanto, apenas nos últimos anos esse tipo de reator se tornou um caso estudo propício ao desenvolvimento da tecnologia de simulação "cfd".

Com a finalidade de se estudarem os principais fenômenos de fluido-dinâmica dentro de um reator tanque agitado, vários tipos de aproximações podem ser feitas para se resolver um mesmo problema:

- Simulações utilizando condições de contorno no impelidor (agitador, "impeller"), as condições de contorno são estáveis, e negligenciam estruturas transientes, tais como as "eddies" geradas pelas lâminas do impelidor, à medida em que ele se move através do fluido. Existe necessidade de informações de entrada experimentais;
- Método "inner-outer": define uma condição de contorno fictícia com um raio intermediário entre aquele das pontas das lâminas do impelidor e as extremidades das chicanas (quando presentes), longe da parede, resolvendo a solução do escoamento (azimultalmente) sobre esta superfície e utilizando os valores resultantes como uma condição de contorno externa para uma segunda simulação em um referencial móvel. A repetição desse processo iterativo por um determinado número de vezes resulta em uma solução no estado estacionário e que converge;
- Método do "sliding mesh", onde a simulação se faz de um modo dependente do tempo, com movimento relativo dos "meshes" (das malhas) e consequências para tranferência de dados através de suas fronteiras comuns.

2.5 FORMULAÇÃO DE UM MODELO MATEMÁTICO PARA UM REATOR DE POLIMERIZAÇÃO

O controle e entendimento hidrodinâmico de reatores de polimerização se constitui num vasto domínio de pesquisas, conhecido como "polymerization reaction engineering". Como o domínio da polimerização é vasto, torna-se necessário fazer-se uma escolha do tipo de sistema a se estudar (van Dootingh, 1992). A classificação de um sistema de polimerização pelo tipo de reação resulta nas reações de adição em cadeia, adições essas do tipo: por radicais, aniônicas e catiônicas, por catalisador Ziegler-Natta.

A polimerização por radicais consiste na adição de uma unidade de monômero a uma cadeia de polímeros em crescimento, sob as principais etapas: decomposição do iniciador, iniciação, propagação, terminação por recombinação, terminação por "dismutation", tranferência ao monômero, transferência ao solvente.

Para a polimerização do estireno, múltiplos processos foram desenvolvidos, passando por um reator perfeitamente agitado, o qual pode operar continuamente (van Dootingh, 1992). Um resumo dos diversos tipos de processos pode ser encontrado em Simon & Chappelear, 1979.

Tabela 2.1 - Classificação dos reatores de polimerização do estireno

Função do Reator	Tipo de Processo
	Contínuo
Polimerização em massa ou em	CSTR ("Continuos Stirred Tank
solução	Reactor") com agitador
< 20% de polímero	Turbina
20-50% de polímero	Âncora, Hélice ou Turbina
30-80% de polímero	Âncora ou Hélice,
	Concepções Especiais
>80% de polímero	
Polímerização	Sem Aplicações
em Suspensão	Comerciais

Para a obtenção das principais equações de balanço para um reator perfeitamente agitado, tem-se a forma geral:

Acúmulo = Entrada - Saída + Produção

O modelo físico-químico completo para a polimerização do estireno é composto pelas seguintes equações (van Dootingh, 1992):

- balanço de massa global;
- balanço de massa parcial do iniciador, do monômero e do solvente;

- equações para a distribuição de massas molares sob a forma de momentos;
- balanços térmicos para o reator e para a "jaqueta" de resfriamento

Em adição ao sistema de 9 equações diferenciais existe uma equação algébrica:

$$w_P = 1 - w_M - w_S = M_M \lambda_1$$
$$\lambda_1 = \frac{w_P}{M_M} = \frac{1 - w_M - w_S}{M_M}$$

Balanço de massa global:

 $\frac{dm}{dt} = \frac{m}{\rho} \frac{d\rho}{dt}$, para um reator a volume constante

Para um reator contínuo, a volume constante não é necessário se calcular m independentemente, m = v ρ .

Balanços de massa parciais:

$$\frac{dw_{I}}{dt} = \frac{Q_{mF}}{m} (w_{IF} - w_{I}) - k_{d} w_{I}$$

$$\frac{dw_{M}}{dt} = \frac{Q_{mF}}{m} (w_{MF} - w_{M}) - (k_{p} + k_{ttM}) w_{M} C_{p^{\bullet}}$$

$$- 2fk_{d} w_{I} \frac{M_{M}}{M_{I}}$$

$$\frac{dw_{S}}{dt} = \frac{Q_{mF}}{m} (w_{SF} - w_{S}) - k_{ttS} w_{S} C_{p^{\bullet}}$$

Balanços térmicos:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q_{mF}}{m} \left(\frac{c_{pF}}{c_p} T_F - T \right) + \frac{UA}{mc_p} (T_f - T)$$
$$- \frac{k_p C_{p^{\bullet}} w_M \Delta H_p}{M_M c_p}$$
$$\frac{dT_f}{dt} = \frac{Q_{fF}}{V_f} (T_{fF} - T_f) + \frac{UA}{m_f c_{pf}} (T - T_f)$$

Equações para os momentos da distribuição de massas molares:

$$\frac{d\lambda_0}{dt} = \frac{Q_{mF}}{m} (\lambda_{0F} - \lambda_0) + \frac{\Phi_0}{\rho}$$
$$\frac{d\lambda_2}{dt} = \frac{Q_{mF}}{m} (\lambda_{2F} - \lambda_2) + \frac{\Phi_2}{\rho}$$

Lei de Arrhenius para as constantes k_i:

$$k_i = A_i \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right)$$

As somas:

$$\Phi_0 = \sum_{x} R_{P_x} = K_1 + K_2$$

$$\Phi_2 = \sum_{x} x R_{P_x} = \frac{(4+2p)K_1 + (1+p)K_2}{(1-p)^2}$$

com:

$$\begin{split} & K_1 = k_{tc} C_{p^{\bullet}}^2 \\ & K_2 = \left(2k_{td} C_{p^{\bullet}} + k_{ttM} C_M + k_{ttS} C_S\right) C_{p^{\bullet}} \\ & \text{E as relações:} \\ & C_{p^{\bullet}} = \sqrt{\frac{fk_d C_1}{k_{tc} + k_{td}}} \\ & p = \frac{k_p C_M}{k_p C_M + 2(k_{tc} + k_{td}) C_{p^{\bullet}} + k_{ttM} C_M + k_{ttS} C_S} \\ & w_p = 1 + (w_M + w_S) \\ & \rho = \left(\frac{w_M}{\rho_M} + \frac{w_p}{\rho_p} + \frac{w_S}{\rho_S}\right)^{-1}, \text{ com } \rho_j = A_{jl} + A_{j2} T \\ & c_p = w_M c_{pM} + w_S c_{pS} + w_P c_{pP}, \text{ com } c_{pj} = B_{jl} + B_{j2} T \end{split}$$

Para melhor compreensão das expressões acima, vale a seguinte notação:
Índices: d decomposição, f fluido, F alimentação, i reação geral, j componente, m massa, p propagação, t_c , t_d terminação por combinação, por "dismutation", tt_j terminação por transferência ao componente j, w parede, P polímero, S solvente, I iniciador, M monômero.

Símbolos diversos:

• espécie radical

Letras gregas e outros: λ_i momentos da distribuição das massas volumétrica (kg/m³), molares de ordem i, ρ massa C_{5} de espécie j (mol/m³), c_p capacidade concentração uma calorífica (J/Kg/K), C_{P}^{\bullet} concentração total em radical (mol/m³), f fator de eficiência do iniciador, Δ H calor de reação (J/mol), k_i constante da velocidade da reação i, m massa (kg), M_i massa molar da espécie j (kg/mol), Q_{mF} vazão mássica de alimentação (kg/s), t tempo (s), T temperatura (K), U coeficiente global de troca de calor $(W/m^2/K)$, V volume (m^3) , A área de troca de calor (m^2) , w_i razão mássica da espécie j, A, B coeficientes.

O poliestireno pode ser utilizado em processamento de polímeros, como nas extrusões e moldagem por injeção (Arlie, 1990). Às técnicas de processamento de polímeros pode-se aplicar a teoria "cfd" (Rosendal et al., 1996), como simulação numérica de escoamento de polímero em geometrias complexas, como os extrusores. As quantidades computadas ao final desses fenômenos são as linhas de corrente ("streamlines"), distribuição de temperatura e tempos de residência.

A fluido dinâmica computacional também resulta em melhor entendimento da moldagem por injeção. Esta se constitui numa das técnicas de processamento de polímeros, a qual consiste de três estágios: preenchimento, empacotamento e resfriamento (Cheng, 1995). Os últimos dois estágios são conhecidos como de processos de pós-preenchimento. Porém, é o processo de preenchimento de cavidades com geometrias que vão desde as mais simples até as mais complexas que se estudou mais intensamente (Cheng, 1995).

2.6 MÉTODOS NUMÉRICOS NA FLUIDO-DINÂMICA COMPUTACIONAL - O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

A análise numérica, isto é, uma mistura de matemática com ciência da computação se constitui numa poderosa ferramenta para se resolverem problemas físicos intratáveis (Ma, 1995). Ao longo das últimas duas décadas, as técnicas numéricas associadas com escoamento de fluidos computacional, transporte de massa e calor têm passado por um grande processo de desenvolvimento e refinamento. A análise computacional é atualmente reconhecida como um meio conveniente de se obterem soluções detalhadas de situações complexas. As técnicas numéricas se dividem, basicamente, em duas categorias: a primeira está primariamente relacionada com o desenvolvimento e melhoramento de novos e/ou existentes métodos numéricos. A segunda, às aplicações de modos numéricos de solução de vários problemas físicos.

Os métodos numéricos estão, em geral, relacionados com as formulações, algoritmos e implementações computacionais para a obtenção de soluções aproximadas de equações matemáticas, vindas desde um polinômio de uma variável não-linear, f(x) = 0 até um conjunto acoplado, não-linear e multidimensional de equações diferenciais parciais.

A tarefa do método numérico consiste em transformar a equação diferencial em um sistema de equações algébricas. Os métodos fundamentais de discretização que permitem esta tarefa podem ser: diferenças finitas, volumes finitos, elementos finitos, elementos de contorno, dentre outros (Ma, 1995).

Os tipos de problemas mais comumente encontrados são elípticos, parabólicos e hiperbólicos (Maliska, 1995).

Nos problemas elípticos, as informações físicas se transmitem nos dois sentidos da coordenada, nos parabólicos e hiperbólicos, estas informações físicas se transmitem em apenas um sentido da coordenada (problemas de marcha).

O método dos volumes finitos (Patankar, 1980; Maliska, 1995) parte do estabelecimento de balanços no volume de controle estudado e integração da equação resultante em sua forma conservativa, em diversas direções, dependendo da dimensionalidade do problema.



 $x + \Delta x = x$

Figura 2.1 - Exemplo da aplicação do método dos volumes finitos a um volume de controle.

Considerando-se um balanço de massa no volume de controle da Figura 2.1, tem-se:

$$\rho U_{x} \Delta y \Big|_{e} - \rho U_{x} \Delta y \Big|_{w} + \rho U_{y} \Delta x \Big|_{n} - \rho U_{y} \Delta x \Big|_{s} = 0$$

Dividindo por $\Delta x \Delta y$ e aplicando-se o limite, encontra-se:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\rho \mathbf{U}_{\mathbf{x}}) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} (\rho \mathbf{U}_{\mathbf{y}}) = 0$$

Integrando-se a equação em sua forma conservativa, tem-se:

$$\int_{s}^{n} \left[\rho U_{x} \Big|_{e} - \rho U_{x} \Big|_{w} \right] dy + \int_{w}^{e} \left[\rho U_{y} \Big|_{n} - \rho U_{y} \Big|_{s} \right] dx = 0$$

$$\rho U_{x} \Delta y \Big|_{e} - \rho U_{x} \Delta y \Big|_{w} + \rho U_{y} \Delta x \Big|_{n} - \rho U_{y} \Delta x \Big|_{s} = 0$$

É necessário que se estabeleçam funções de interpolação no espaço e no tempo. No tempo, as diversas formulações podem ser: explícita, totalmente implícita e implícita.

Para a resolução efetiva de um problema "cfd", utilizandose o método dos volumes finitos como ferramenta de discretização, são possíveis dois caminhos de obtenção de resultados: elaboração de um algoritmo de resolução e/ou uso de pacotes comerciais, tendo como base o método dos volumes finitos.

Detalhes do tipo de algoritmo a ser empregado, bem como a que tipo de problema ele pode resolver podem ser encontrados em (Camarero, 1986), (Ren, 1984), (Majumdar, 1988), (Thiart, 1990), (Maliska 1994), (Peric, 1995), (Scheuerer, 1988), (Zedan, 1981), (Biswas, 1993). A Figura 2.2 apresenta uma visão geral das técnicas numéricas que são tipicamente aplicadas em "cfd".



Figura 2.2 - Visão geral de técnicas numéricas típicas em fluidodinâmica computacional e transferência de calor (Ma, 1995)



2.7 CÓDIGOS COMPUTACIONAIS EM FLUIDO DINÂMICA COMPUTACIONAL

As vantagens de análise tipo CFD estão no diagnóstico de problemas de escoamento, rápida resolução de novas rotas de processos, utilização eficiente de energia e baixo custo de projeto (Mathews, 1996).

O conhecimento de diversos tipos de códigos computacionais em CFD permite que se façam acertadas escolhas na resolução desses tipos de problemas de escoamento.

Os códigos computacionais disponíveis, basicamente, utilizam os métodos numéricos dos volumes finitos e dos elementos finitos, como técnicas de discretização (Foumeny, 1993; Szekely, 1989).Na Tabela 2.2 são citados alguns tipos de códigos computacionais.

Nome	Aplicação	Notas
PHOENICS	Fluido dinâmica, tranforência do	Volumes Finitos
	calor, leação	
דעודועב	Fluido dinâmica.	Volumes Finitos
	transferência de	
	calor, reação	
	guímica	
CFX-F3D	Fluido dinâmica,	Volumes Finitos
	transferência de	
	calor, reação	
	química	
ASTEC	Geometrias complexas	Volumes Finitos
FIDAP	Fluido dinâmica,	Elementos Finitos
	transferência de	
	calor, reação química	
PATRAN	Modelagem de	Elementos Finitos
	sólidos, pré e pós-	
	processador	·
NISA	Fluido dinâmica,	Diferenças Finitas
	transferência de	
	calor	
NEKTON	Fluido dinâmica,	Elementos Finitos
	transferência de	
·····	calor	

Tabela 2.2 - Alguns tipos de códigos "cfd"

2.8 CONCLUSÃO

Neste capítulo foram apresentados os pontos de maior interesse para o entendimento do que se trata a fluido dinâmica computacional. Além das principais classificações dos problemas de escoamento, mostrou-se o fundamento matemático para a resolução numérica de problemas CFD. Apresentou-se a atual interação da área de reatores químicos com a CFD, resultando na apresentação dos principais tipos de processos de polimerização, um modelo matemático para reatores desse tipo, bem como o método de discretização de equações de modelos, o método dos volumes finitos. Além disso, foram citados vários tipos de pacotes computacionais CFD que têm como finalidade partir de equações discretizadas por um determinado método de discretização e fornecer resultados para campos de escoamento. Em suma, partiu-se desde a teoria básica de problemas de escoamento, passando-se por modelagem e alternativas de simulação desses modelos por códigos computacionais existentes.

No presente trabalho será adotada a polimerização em solução, por suas características de melhor controle de temperatura e alcance de melhor agitação.O sistema a ser utilizado se constitui em casos estudos com o poliestireno em um reator tanque agitado, sob a metodologia de obtenção de resultados fluido-dinâmicos do mesmo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ARLIE, Jean-Pierre, Commodity Thermoplastics-Technical and Economic Characteristcs, Editions Technip, Paris, 1990.
- ATIQULLAH, M. & Nauman, E. B., A model and measurement technique for micromixing in copolymerization reactors, Chem. Eng. Sci., 45, 1267-1280, 1990.
- BALIGA, Bantwal Rabindran, A Control-Volume Based Finite-Element Method for Convective Heat & Mass Transfer, University of Minnesota, PhD thesis, 1978.
- BISWAS, G. et al, An Explicit Transient Algorithm for Predicting Incompressible Viscous Flows in Arbitrary Geometry, International Journal for Numerical Methods in Fluids, v. 17, 975-993, 1993.
- CAMARERO, Ricardo & Reggio, Marcelo, Numerical Solution Procedure for Viscous Incompressible Flows, Numerical Heat Transfer, v. 10, 131-146, 1986.
- CHENG, N. T., Chen, Y. C. & Chen, S. C., Experimental Investigation of the Polymer Melt Flow During Injection Post-Filling Process, AIChE Journal, v 41, nº 12, 2661-2663, 1995.
- FOUMENY, E. A. & Riza, A., Know the CFD Codes, Chemical Engineering Progress, 46-48, 1993.
- KIPARISSIDES, C., Polymerization Reactor Modeling: A Review of Recent Developments and Future Directions, Chemical Engineering Science, v. 51, n² 10, 1637-1659, 1996.
- MA, J., Numerical Techniques in Computational Fluid Flow & Heat Transfer, Chemical Engineer Department, Leeds University, Internal report, 1995.
- MAJUMDAR, S., Role of Underrelaxation in Momentum Interpolation for Calculation of Flow with Nonstaggered Grids, Numerical Heat Tranfer, v. 13, 125-132, 1988.
- MALISKA, C. R., & Marchi, C. H., A Nonorthogonal Finite-Volume Method for the Solution of All Speed Flows Using Co-located Variables, Numerical Heat Transfer, Parte B, v. 26, 293-311, 1994.
- MALISKA, Clovis R., Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional-Fundamentos, Coordenadas Generalizadas, LTC Rio de Janeiro, 1995.
- MATHEWS, A. D., Wen, J. X. et al, CFD Modelling of Fluid Flow & Heat Transfer in a Shell and Tube Heat Exchanger, The

PHOENICS Journal of Computational Fluid Dynamics & its applications, v. 9, n° 2, 1996.

- PATANKAR, Suhas V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere Publishing Corporation, Washington DC, 1980.
- PERIC', Milovan & Lilek, Zeljko, A Fourth-Order Finite Volume Method with Colocated Variable Arrangement, Computers & Fluids, v. 24, n² 3, 239-252, 1995.
- REN, A. L & Shin, T. M., Primitive-Variable Formulations using Nonstaggered Grids, Numerical Heat Transfer, v. 7, 413-428, 1984.
- RICHARDSON, L. F., Weather Prediction by Numerical Process, Cambridge Univ. Press, London, 1922.
- RIZZI, A. & Engquist, B., Review Article-Selected Topics in the Theory and Practice of Computational Fluid Dynamics, Journal of Computational Physics, v. 72, nº 1, 1-69, 1987.
- ROSENDAL, F. J. J., Roekaerts, D., Harris, C. K., Buitendijk, F. G. J., Daskopoulos, Ph., Vreenegoor, A. J. N. and Wang, H., Computational Fluid Dynamics for Chemical Reactors Engineering, Chemical Engineering Science, v. 51, n² 10, 1569-1594, 1996.
- SCHEUERER, G., Kessler, R. & Peric', M., Comparison of Finite-Volume Numerical Methods with Staggered and Colocated Grids, Computers & Fluids, v. 16, n^2 4, 389-403, 1988.
- SCHLICHTING, H., Boundary Layer Theory, 6th ed. McGraw-Hill, New York, 1968.
- SIMON, R. H. M. & Chappelear, D. C., Technology os Styrenic Polymerization Reactors & Processes, ACS Symp. Ser., 104, 71-112, 1979.
- SZEKELY, J., Some perspectives on mathematical modelling of metals processing operations, Ironmaking and Steelmaking, v. 16, n^2 3, 183-192, 1989.
- THIART, G. D., Finite Difference Scheme for the Numerical Solution of Fluid Flow & Heat Transfer Problems on Nonstaggered Grids, Numerical Heat Transfer, Part B, v. 17, 43-62, 1990.
- van DOOTINGH, Marjoleine, Polymérisation Radicalaire: Commande Geómetrique et Observation D'État À L'Aide D'Outils Non-Lineaires. Thèse Doctorat Nouveau Régime, Rouen, France, 1992.

ZEDAN, M. & Schneider, G. E., A Modified Strongly Implicit Procedure for the Numerical Solution of Field Problems, Numerical Heat Transfer, v. 4, 1-19, 1981.

A fluido dinâmica computacional em sistemas poliméricos

3.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo, enfocam-se vários aspectos de fluidodinâmica computacional aplicada a reatores do tipo tanques agitados. Considerando-se que o estudo experimental desses sistemas não se completa, partindo-se para simulações computacionais que envolvam variações de aspectos geométricos do reator, pode-se chegar a entender a sistemática de resolução de problema "cfd" para reatores tanques agitados.

3.2 REATORES DE POLIMERIZAÇÃO EM SISTEMAS ABERTOS E EM SISTEMAS FECHADOS

A forma do reator na qual os reagentes escoam continuamente, desde a alimentação até à emergência dos produtos, bem como o modo pelo qual os componentes se misturam, constituem-se num trabalho contínuo da análise de reatores sob o ponto de vista teórico, bem como prático (Aris, 1986). A qualidade da mistura se constitui num problema de fluido mecânica. Esse aspecto aliado a reatores de mistura, poliméricos, levam a se considerarem modelos de reações de polimerização nesses sistemas.

Reações de polimerização em sistemas abertos e fechados podem ser cineticamente modeladas a partir de modelos simples, os quais não se limitam à química polimérica, mas se estendem ao estudo de taxas de nucleação, distribuição do tamanho de asteróides, bem como à teoria de jogos coletivos (Bak, 1986). Um modelo simples parte de moléculas de tamanhos x e y que se combinam para formar uma molécula de tamanho x+y, onde essa molécula maior pode ser quebrada a fim de formar duas moléculas menores. Esquematicamente:

$$(\mathbf{x}) + (\mathbf{y}) \xrightarrow[\mathbf{k}_{1}]{\mathbf{k}_{2}} (\mathbf{x} + \mathbf{y})$$
(3.1)

onde as constantes de reação k_1 e k_2 para os dois processos, de primeira e segunda ordem, são indicadas.

Se os polímeros desaparecem à medida em que atingem determinado tamanho e essa perda de massa é compensada por moléculas menores que são bombeadas para dentro do sistema, tem-se uma situação que pode levar a um estado estacionário de não-equilíbrio.

3.2.1 UM MODELO DE POLIMERIZAÇÃO SIMPLES

Este descreve as reações reversíveis entre polímeros lineares de comprimento variável. Cada unidade do polímero possui dois sítios reativos. Para ser precisa, as unidades são A-B, onde A pode reagir com B, isto é, os polímeros se assemelham a: A-B - A-B..., mas não A-B - B-A.

Sejam $C_n(t)$ a concentração de um n-mero, que contém n-1 ligações químicas de interesse, k_1 a constante de reação para a quebra de uma dessas ligações e k_2 a constante de reação para estabilizar esta ligação particular.

Essas contantes de reação são independentes do tamanho da molécula. Assumindo-se uma cinética comum e lembrando-se de fatores geométricos de 2, quando as moléculas podem reagir em ambas as terminações e quebrar em dois lugares, tem-se (Aris,1986):

$$\overset{\bullet}{\mathbf{C}}_{n}(t) = 2k_{1} \sum_{m=n+1}^{\infty} C_{m} - k_{1}(n-1)C_{n} + k_{2} \sum_{m=1}^{n-1} C_{n-m}C_{m} - 2k_{2}C_{n} \sum_{m=1}^{\infty} C_{m}$$
(3.2)

Considerando-se a concentração de moléculas de comprimento x, no tempo t, tem-se:

$$\frac{\partial \mathbf{c}(\mathbf{x},t)}{\partial t} = 2\int_{\mathbf{x}}^{\infty} \mathbf{c}(\mathbf{y},t) d\mathbf{y} - \mathbf{x}\mathbf{c}(\mathbf{x},t) + \int_{0}^{\mathbf{x}} \mathbf{c}(\mathbf{x}-\mathbf{y},t) \mathbf{c}(\mathbf{y},t) - 2\mathbf{c}(\mathbf{x},t) \int_{0}^{\infty} \mathbf{c}(\mathbf{y},t) d\mathbf{y} = \mathbf{A}[\mathbf{c}]$$
(3.3)

Essa equação pode ser resolvida em um sistema fisicamente fechado, com $0 \le x \le L$, com c(L,t) = 0, correspondendo a uma situação onde polímeros de comprimento L desaparecem do sistema.

3.2.2 REAÇÕES EM UM SISTEMA ABERTO

Considere-se uma reação de polimerização para a qual moléculas de tamanho x>L deixam o sistema. Tem-se, então, que c(L,t) = 0 para todo t e que a parte do operador no lado direito da Eq. (3.3), que expressa o decréscimo em c(x,t)devido a esse escoamento irreversível de matéria para fora do sistema é dado por:

$$2c(\mathbf{x},t)\int_{\mathbf{L}-\mathbf{x}}^{\mathbf{L}}c(\mathbf{y},t)d\mathbf{y}$$
(3.4)

A massa total perdida por unidade de tempo é dada por:

$$J(t) = 2\int_0^L c(x,t) dx \int_{L-x}^L (x+y) dy c(y,t)$$
(3.5)

Para estimar o valor acima em um estado estacionário, estabelece-se que:

$$c(y) = (e^{-y} - e^{-L})/(1 - e^{-L})$$
 (3.6)

ou seja, a distribuição de equilíbrio ($0 \le x < \infty$) modificada para lidar com c(L) = 0. Obtém-se, assim:

$$\mathbf{J} = 2\mathbf{L}^2 \exp(-\mathbf{L}) \left[1 + o\left(\frac{1}{\mathbf{L}}\right) \right]$$
(3.7)

Considerando-se que se mantém um fluxo de massa dentro do sistema que contrabalança isso, c(0) é constante e igual a 1, pode-se estabelecer um estado estacionário.

Uma maneira mais realista de se observar o mesmo problema é imaginar que existe um escoamento J constante para dentro do sistema e calcular:

$$\mathbf{M}(\mathbf{J}) = \int_0^{\mathbf{L}} \mathbf{c}^{\mathbf{ss}}(\mathbf{x}) \mathbf{d}\mathbf{x}$$
(3.8)

isto é, a capacidade do sistema, quando submetido a um fluxo de massa que entra. Utilizando-se uma "função tentativa", obtémse:

$$M = \sqrt{J} \frac{\sqrt{3}}{2L} \exp(L/2) \left(1 + o\left(\frac{1}{L}\right)\right)$$
(3.9)

$$c^{ss}(x) = J \frac{\sqrt{3}}{2L^2} \exp(L/2 - x)(L - x)$$
(3.10)

onde c^{ss} equivale à concentração no estado estacionário (ss-"steady-state").

O resultado $M\sim \sqrt{J}$ se constitui numa consequência do fato de que as reações que levam matéria para fora do sistema são de segunda ordem.

3.3 A FLUIDO-DINÂMICA COMPUTACIONAL E A ENGENHARIA DE REATORES QUÍMICOS

O desenvolvimento da "cfd" está ligado ao desenvolvimento dos recursos computacionais. Nos reatores tanque agitados, a aplicação da teoria "cfd" não é ilimitada. Existem limitações durante as simulações dos fenômenos que ocorrem dentro de um reator tanque agitado (Rosendal, 1996).

A geração de malhas para cálculos de temperaturas, velocidades, concentrações, ou outras propriedades pode se tornar bastante complexa. No entanto, em certos casos, apenas a utilização prática de malhas consideradas pouco refinadas permite que se obtenham resultados para predição das propriedades do sistema.

Porém, é certo se afirmar que da presente década (1990) em diante, os problemas envolvendo implicações físicas geométricas e interpretativas complexos, só poderão ser melhor entendidos com a utilização de códigos computacionais CFD. A interação do próprio pacote CFD com outros ambientes poderá levar a saídas gráficas sofisticadas e ao acoplamento desse sistemas com a realidade virtual.

De um modo mais restrito, a engenharia de sistemas poliméricos se constitui num grande desafio dentro da utilização da CFD. Vale salientar que esta é uma área multidisciplinar (Kiparissides, 1996) que combina a química e a física de polímeros, fenômenos coloidais e interfaciais, termodinâmica, métodos avançados de caracterização analítica, engenharia de reações, análise numérica, controle e otimização.

Problemas comuns aos sistemas poliméricos, como alta exotermicidade das reações, bem como sistemas reacionais viscosos estão sempre presentes.

3.4 INFLUÊNCIA DE FATORES GEOMÉTRICOS E CONDIÇÕES DE MISTURA EM REATORES TANQUE AGITADO

Operações de mistura são encontradas largamente em todos os níveis de processos, em indústrias químicas, alimentícias, farmacêuticas, nucleares (Bertrand, 1996). Vários problemas na engenharia de reações são dependentes de fenômenos hidrodinâmicos. No caso de reações químicas rápidas, envolvendo aspectos de micromisturas, parâmetros como velocidades quadradas médias ("root-mean squared velocities", RMS) e dissipação de energia se tornam parâmetros fundamentais no estudo dessas reações. Porém, para os casos de reações químicas lentas, os parâmetros mais importantes se tornam as velocidades médias, suficientes para assegurar homogeneidade dentro do reator, bem como prevenir a formação de zonas mortas dentro do mesmo.

O projeto de reatores tanques agitados envolve análise de geometria e localização de agitadores, tipos de agitadores, tipo de propriedades físicas do material dentro dos mesmos, bem como o comportamento hidrodinâmico desse sistema. A fluidodinâmica computacional está presente nas elucidações e decisões com respeito aos reatores tanques agítados.

3.4.1 - O NÚMERO DE REYNOLDS DO AGITADOR

Muitos trabalhos publicados em termodinâmica de calor e massa em reatores agitados fazem uso do número de Reynolds do agitador como parâmetro de correlação (Uhl, 1967).

O número de Reynolds do agitador é dado por:

$$(N_{R_e})_I = \frac{ND^2\rho}{\mu}$$
, onde:

$$\begin{split} & \mathsf{N} = \mathsf{rpm} \text{ ou } \mathsf{rps} \ (\mathsf{rota} \varsigma \widetilde{\mathsf{o}} \mathsf{es} \ \mathsf{por} \ \mathsf{minuto} \ \mathsf{ou} \ \mathsf{rota} \varsigma \widetilde{\mathsf{o}} \mathsf{es} \\ & \mathsf{por} \ \mathsf{segundo}) \ \mathsf{do} \ \mathsf{impelidor} \\ & \mathsf{D} = \mathsf{di} \widetilde{\mathsf{a}} \mathsf{metro} \ \mathsf{do} \ \mathsf{agitador} \\ & \mathsf{\rho} = \mathsf{densidade} \ \mathsf{do} \ \mathsf{fluido} \\ & \mathsf{\mu} = \mathsf{viscosidade} \ \mathsf{do} \ \mathsf{fluido} \\ & \left(\mathsf{N}_{\mathsf{R}_{\mathsf{e}}}\right)_{\mathsf{I}} = \mathsf{n} \mathsf{u} \mathsf{mero} \ \mathsf{de} \ \mathsf{Reynolds} \ \mathsf{do} \ \mathsf{impelidor} \\ & \mathsf{(agitador)} \end{split}$$

Tal expressão está relacionada com os coeficientes de troca de calor para sístemas de tanques agitados. Porém, ao procurarem valores invés de se específicos para esses coeficientes, uma nova rota de entendimento desses sistemas é através das variações geométricas que podem ser feitas nos reatores. Estas podem implicar em agitadores de diversos diâmetros, altura dos agitadores variável, em relação ao fundo dos tanques, utilização de sistemas reacionais não-Newtonianos, seja, procura de análise de novos parâmetros para a ou resolução de antigos problemas.

3.4.2 ESCOAMENTO INDUZIDO POR DIVERSAS GEOMETRIAS DENTRO DOS TANQUES AGITADOS

O estudo do escoamento gerado por um agitador em um tanque pode ser feito experimentalmente ou por técnicas de "cfd", fluido dinâmica computacional. É na fase de análise numérica que a "cfd" pode fornecer detalhes no entendimento do escoamento, fornecendo possíveis saídas para projetos desses reatores (Engh, 1994).

Aspectos como perfis de velocidade, temperatura, viscosidade são obtidos como respostas finais desses estudos. A formação de vórtices também pode ser um fenômeno de interesse nos reatores agitados (Markopoulos, 1995). Os vórtices não são desejáveis (são produzidos por forças centrífugas); por esse motivo, condições de processo, bem como diversas geometrias dentro dos tanques agitados são fornecidas com finalidade de se minimizarem seus efeitos. A análise teórica da formação dos vórtices é baseada na equações do momento (Navier-Stokes), transformada em coordenadas cilíndricas.

Existem inúmeras correlações para a predição de formação de vórtices, bem como para a análise geométrica do papel dos agitadores em reatores tipo tanque agitados (Markopoulos, 1993; Smit, 1991).

3.5 PROCEDIMENTO PRÁTICO NO TRATAMENTO DE REATORES TANQUES AGITADOS SOB O PONTO DE VISTA DA FLUIDO-DINÂMICA COMPUTACIONAL

O campo da fluido dinâmica computacional consiste numa coleção de técnicas numéricas que são computacionalmente projetadas para modelar o comportamento do escoamento de um fluido (Rangitsch, 1994). A utilização de um pacote computacional de fluido dinâmica exige um procedimento sistemático, até as últimas saídas gráficas, que dão as respostas desejadas aos sistemas estudados.

A validação do trabalho em "cfd" se dá em equipamentos (experimentalmente) menores ou simplificados, bem como com a utilização de fluidos mais seguros do que os que podem ser computacionalmente simulados.

As etapas geralmente perseguidas na utilização dos códigos/pacotes computacionais estão relacionadas a:

- Definição do problema;
- Escolha do sistema de coordenadas a se trabalhar;
- Geração das malhas computacionais;
- Entendimento (mesmo básico) das características intrínsecas a cada pacote;
- Geometria do problema;
- Modelos físicos e propriedades do fluido estudado;
- Entendimento (sob aspecto básico ou mais aprofundado) dos algoritmos de solução presentes no pacote;
- Saber lidar com os mecanismos de pré-processamento, processamento e pós-processamento existentes no pacote;
- Interpretar adequadamente os resultados obtidos e validá-los, seja experimentalmente, seja através de dados vindos de outros códigos/pacotes, através de padrões de escoamento fisico-quimicamente coerentes.

3.6 ILUSTRAÇÕES DE ALGUNS TIPOS DE AGITADORES, COM CURVAS DE DISTRIBUIÇÕES DE VELOCIDADES CARACTERÍSTICAS

A forma dos perfis de velocidade em reatores tanques agitados tem sido observada por muitos pesquisadores, porém sua distribuição tridimensional é bastante difícil de se medir, (Nagata, 1975). Em líquidos altamente viscosos, a mistura homogênea dos componentes se torna importante tanto para a uniformidade da reação, quanto para o controle do calor de reação. Impelidores tipo "paddles" e "turbines" não são aconselháveis. Os de tipo "âncora" algumas vezes se utilizam, porém, ainda se observa não uniformidade dentro do tanque. Os chamados impelidores tipo "helical ribbon" são os mais recomendados para misturas de líquidos altamente viscosos. Curvas características de impelidores dentro de reatores tanques agitados algumas vezes são encontradas (Nagata,1975). Verifica-se que o escoamento dentro desses tanques é complicado e geralmente existe turbulência próxima às lâminas do impelidor. De um modo geral podem-se encontrar diversas regiões dentro do tanque, caracterizadas como: região completamente laminar, região parcialmente laminar, região de transição e região completamente turbulenta.

As figuras 3.1 e 3.2 ilustram alguns tipos de agitadores com curvas de distribuição de velocidades características.



A





В

С



D

Figura 3.1 Impelidores utilizados em reatores tanques agitados. A, B, C e D representam, respectivamente, agitador tipo "turbine", turbina; "paddle",pás; "helical ribbon",helicoidal, "disk", (disco).

Na figura 3.2, abaixo, a seguir, r equivale a raio do tanque (cm), z altura do tanque (cm), V_t velocidade tangencial

(cm/s), N número de rotações por minuto (rpm). O fluido dentro do tanque é a água.A figura 3.2 equivale a uma ilustração de uma curva de velocidade tangencial de um fluido, a água, escoando em um reator tanque agitado.



-> r (cm)

Figura 3.2 Exemplo qualitativo da distribuição da velocidade tangencial dentro de um reator tanque agitado, com um impelidor tipo "paddle".

3.7 CONCLUSÕES

O capítulo 3 inicia um refinamento do que foi tratado no capítulo anterior. Mostra-se um modelo de polimerização simples, tanto para sistemas abertos como fechados. Observa-se, novamente, a interação entre a engenharia de reatores químicos com a teoria CFD.

Os fatores geométricos, como tamanho do agitador e sua localização dentro de reatores tangues agitados parecem influenciar as condições de escoamento de fluidos dentro desses Evidenciam-se alguns tópicos que reatores. são bastante de importantes para se tratarem problemas escoamento em reatores agitados.

Desse modo, apresentaram-se formas de ação para se produzirem resultados de campos de escoamento para reatores agitados (sob o enfoque da teoria CFD), bem como foram mostrados dois modelos simples para reatores de polimerização, com a finalidade de explicitar as inúmeras possibilidades de formação de um problema dessa natureza.

A variação da localização e da dimensão de um agitador tipo disco dentro de um reator tanque agitado, com dois sistemas: água e poliestireno será abordada nos próximos capítulos.Serão evidenciados todos os procedimentos de obtenção de resultados fluido-dinâmicos para os diversos casos estudos,levando-se em conta a utilização de uma planílha comercial, bem como de um pacote comercial de fluido-dinâmica computacional.

O objetivo primordial do presente capítulo foi introduzir os principais problemas e possibilidades para reatores tanques agitados (estudados sob o ponto de vista da fluido-dinâmica computacional), que serão desenvolvidos por meio de simulações computacionais nos próximos três capítulos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ARIS, R., Reacting Flows: Combustion and Chemical Reactors, Part I, American Mathematical Society, Editor: G.S.S. Ludford, Rhode Island, 1986.
- BAK, Thor A. & Binglin, L., Polymerization Reactions in Closed and Open Systems, Lectures in Applied Mathematics, v. 24, 63-79, 1986.
- BERTRAND, J. & Xnereb, C., 3D Hydrodynamics in a tank stirred by a double propeller system and filled with a liquid having evolving rheological properties, Chemical Engineering Science, v. 51, nº 10, 1725-1734, 1996.
- ENGH, T. A., Johansen, S. T. & Dong L., Flow Induced by an Impeller in an Unbaffled Tank - II Numerical Modelling, Chemical Engineering Science, v. 49, n² 20, 3511-3518, 1994.
- KIPARISSIDES, C., Polymerization Reactor Modeling: A Review of Recent Developments and Future Directions, Chemical Engineering Science, v. 51. nº 10, 1637-1659, 1996.
- MARKOPOULOS, J. & Kontogeorgaki, E., Chem. Ing. Tech, 65, n^2 7, 839-841, 1993.
- MARKOPOULOS, J. & Kontogeorgaki, E., Vortex Depth in Unbaffled Single and Multiple Impeller Agitated Vessels, Chemical Engineering Technol. 18, 68-74, 1995.
- NAGATA, S. MIXING Principles and applications, John Wiley & Sons, New York, 1975.
- RANGITSCH, M., Computational & Experimental Stirred Tank Flow Comparisons, Second CFDS International User Conference, 1994.
- ROSENDAL, F. J. J., Roekaerts, D., Harris, C. K., Buitendijk, F. G. J., Daskopoulos, Ph., Vreenegoor. A. J. and Wang, H., *Computational Fluid Dynamics for Chemical Reactor Engineering*, Chemical Engineering Science, v. 51, n² 10, 1569-1594, 1996.
- SMIT, L., During, J., Vortex Geometry in Stirred Vessel, in: Proc. 7th European Congress on Mixing, Part II, 633-639, Royal Flemish Society of Engineers, Brugge, Belgium, 1991.
- UHL, Vicent W., Gray, J. B., *Mixing-Theory & Practice-* Volume II, Academic Press, New York, 1967.

CAPÍTULO 4

Abordagem simplificada do método de diferenças finitas - volumes finitos - solução utilizando o pacote comercial excel - versão 5.0.

4.1 INTRODUÇÃO

proposta neste Capítulo a solução numérica de É um conjunto de equações algébricas, implementada com a utilização da planilha comercial Excel versão 5.0, visando a apresentar alternativa uma para a modelagem e simulação de reatores/sistemas de agitação.De fato, a literatura apresenta vastíssimo emprego da teoria da mistura perfeita para tanques agitados, o que em muitos casos é uma aproximação não adequada.Por outro lado, o emprego de técnicas de CFD através softwares e hardwares normalmente requeridos tem-se dos mostrado positivo, tanto que pouca utilização industrial desta técnica tem sido reportada.Assim sendo, neste Capítulo é apresentada uma alternativa bastante viável para aplicações industriais, visto que a planilha Excel é suficientemente difundida.A grande contribuição da metodologia apresentada está na proposta do procedimento que permite o emprego de um método potente e sofisticado de cálculo com uma ferramenta usual na indústria.

A preferência inicial por este procedimento deve-se a algumas propriedades da planilha, como: apresentação de gráficos de superfícies 3D (tridimensional) e a possibilidade de obtenção de valores de determinado campo de velocidade e campo de temperatura em determinadas direções do escoamento de um fluido. Trata-se também de uma ferramenta de fácil acesso, reduzido custo e bastante difundido, sendo portanto de grande interesse sua utilização na solução dos problemas de "cfd".

O presente capítulo tem como objetivo principal estudar o escoamento de um fluido no interior de um reator tanque agitado. Mostram-se, inicialmente, as equações diferenciais parciais para o sistema. A seguir, simplificações para o modelo são realizadas com a finalidade de se obterem resultados dentro do Excel V. 5.0. São, finalmente, mostradas as saídas gráficas para o caso estudo considerado.

4.2 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

Considerando-se que a resolução de um modelo rigoroso e complexo em fluido-dinâmica pode se tornar impraticável, devem ser encontradas alternativas para a solução desses casos estudos, com a utilização de ferramentas disponíveis e de acesso amigável ao usuário.

O caso estudo a se considerar aqui é o escoamento de água em um reator tanque agitado. Apesar de este ser um caso estudo, sistemas poliméricos com alta diluição e/ou baixo peso molecular terão propriedades semelhantes.

Considerando-se que a água é um fluido ideal (fluido com baixa viscosidade), seu escoamento num reator tanque agitado com vários agitadores é estudado. As simplificações consideradas têm como base atingir soluções para o escoamento com menor tempo e como objetivo aplicações em tempo real.

Ou seja, a simplificação de um modelo, em termos matemáticos, visa a reduzir um dos seguintes itens abaixo (Tucker, 1989):

- número de equações;
- número de termos nas equações;
- grau de não-linearidade;
- grau de acoplamento entre as equações.

Os aspectos qualitativos para a aceitação do modelo matemático para o presente caso estudo são:

- O fluido na entrada do tanque está em regime turbulento, passando a preencher todo o volume do reator até o fundo, chegando a se tornar completamente desenvolvido.

- A possibilidade de modelagem do caso-estudo se dá pelas seguintes características:

- Reator tipo "CSTR" (Continuous Stirred Tank Reactor), preenchido com um fluido Newtoniano ideal (água), com um conjunto de agitadores que formam, do ponto de vista prático, um cilindro interno, pelo seu próprio movimento de agitação

- Considera-se o escoamento bidimensional, desprezando- se as variações de propriedades na direção tangencial, θ (teta).

4.3 ESTABELECIMENTO DO PROBLEMA

Observando-se que um reator tanque agitado é um cilindro, trabalha-se com coordenadas cilíndricas. As equações pertinentes ao estudo são (Bird, 1960):

Equação da continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r U_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (\rho U_\theta) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho U_Z) = 0$$
(4.1)

Simplificações:

$$\frac{\partial}{\partial \Theta} = 0 \tag{4.2},$$

isto é, desprezando-se as variações das propriedades na direção $\boldsymbol{\theta}.$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \tag{4.3},$$

ou seja, a densidade não varia com o tempo, sendo o fluido, portanto, incompressível.

A Eq. (4.1) passará a ter seguinte forma:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho r U_r) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho U_z) = 0$$
(4.4)

Equações do movimento, coordenadas cilíndricas:

Componente - r:

4.1%

$$\rho \left(\frac{\partial U_{r}}{\partial t} + U_{r} \frac{\partial U_{r}}{\partial r} + \frac{U_{\theta}}{r} \frac{\partial U_{r}}{\partial \theta} - \frac{U_{\theta}^{2}}{r} + U_{z} \frac{\partial U_{r}}{\partial z} \right) =$$

$$- \frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rU_{r}) \right) + \frac{1}{r^{2}} \frac{\partial^{2} U_{r}}{\partial \theta^{2}} - \frac{2}{r^{2}} \frac{\partial U_{\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial^{2} U_{r}}{\partial z^{2}} \right]$$

$$(4.5)$$

Desprezando-se as variações da velocidade radial com a posição angular θ e considerando-se a velocidade de escoamento do fluido como desprezível na direção tangencial, tem-se:

$$\rho\left(\frac{\partial U_{r}}{\partial t} + U_{r}\frac{\partial U_{r}}{\partial r} + U_{z}\frac{\partial U_{z}}{\partial z}\right) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rU_{r})\right) + \frac{\partial^{2}U_{r}}{\partial z^{2}}\right]$$
(4.6)

Componente - z:

$$\rho\left(\frac{\partial U_z}{\partial t} + U_r \frac{\partial U_z}{\partial r} + \frac{U_{\theta}}{r} \frac{\partial U_z}{\partial \theta} + U_z \frac{\partial U_z}{\partial z}\right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial U_z}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 U_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 U_z}{\partial z^2}\right]$$
(4.7)

Considerando-se as mesmas simplificações expostas para a eq. (4.6), obtém-se:

$$\rho\left(\frac{\partial U_z}{\partial t} + U_r \frac{\partial U_z}{\partial r} + U_z \frac{\partial U_z}{\partial z}\right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial U_z}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 U_z}{\partial z^2}\right]$$
(4.8)

4.3.1 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Analisando um agitador, dentro do reator tanque agitado,



agitado, com agitador (Pike, 1990)

As equações da conservação para um campo de escoamento possuem a forma geral abaixo:

$$P\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(rU_{r}\phi\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(U_{\theta}\phi\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(U_{z}\phi\right)\right] = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}$$

$$\left(r\Gamma_{\phi}\frac{\partial\phi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \left(\frac{\Gamma_{\theta}}{r}\frac{\partial\phi}{\partial \theta}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma_{\theta}\frac{\partial\phi}{\partial z}\right) + S^{\phi}$$

$$(4.9)$$

4.4 DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES

A discretização das equações (4.4), (4.6) e (4.8) segue o método dos volumes finitos (Patankar, 1980). As equações do movimento, para serem devidamente discretizadas, dependem da escolha de um método de interpolação para os termos convectivo e difusivo.

A sequência de discretização vem a seguir:

Tomando-se a eq. (4.4) e a multiplicando por r, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} (\rho \mathbf{r} \mathbf{U}_{\mathbf{r}}) + \mathbf{r} \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} (\rho \mathbf{U}_{\mathbf{z}}) = 0$$
(4.10)

Utilizando-se a técnica dos volumes finitos (Patankar, 1980) no problema bidimensional, tem-se:

Da eq. (4.10):

$$\int_{ws}^{en} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r U_r) dr dz = \left[(\rho r U_r)_n - (\rho r U_r)_s \right] (z_e - z_w)$$
(4.11)

е

$$\int_{sw}^{n} \frac{\partial}{\partial r} (\rho U_z) dz dr = \left[\left(\rho U_z \right)_e - \left(\rho U_z \right)_w \right] \left(\frac{r_n^2 - r_s^2}{2} \right)$$
(4.12)

ou, a integração da eq. (4.10) pode ser similarmente feita da seguinte maneira:

$$\int_{sw}^{ne} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r U_r) dr dz = \left[(\rho r U_r)_e - (\rho r U_r)_w \right] (z_n - z_s)$$
(4.11)*

$$\int_{WS}^{en} r \frac{\partial}{\partial z} (\rho U_z) dz dr = \left[\left(\rho U_z \right)_n - \left(\rho U_z \right)_s \right] \left(\frac{r_e^2 - r_W^2}{2} \right)$$
(4.12)*

$$\frac{\mathbf{r}_{e}^{2} - \mathbf{r}_{w}^{2}}{2} = (\mathbf{r}_{e} - \mathbf{r}_{w}) \left(\frac{\mathbf{r}_{e} + \mathbf{r}_{w}}{2}\right) = (\mathbf{r}_{e} - \mathbf{r}_{w}) \mathbf{r}_{p}$$
(4.13)

onde r_o é o raio médio do volume de controle.

Somando-se as equações (4.11)* e (4.12)*, obtém-se:

$$(\rho r U_{r})_{e} (z_{n} - z_{s}) - (\rho r U_{r})_{w} (z_{n} - z_{s}) + (\rho U_{z})_{n} (r_{e} - r_{w}) r_{p} - (\rho U_{z})_{s} (r_{e} - r_{w}) r_{p} = 0$$
(4.14)

onde a eq. (4.14) representa a discretização da equação da continuidade. Analogamente, as equações do momentum em r e do momentum em z são discretizadas (ver Apêndice - C4).

As equações em sua forma discretizada representam equações algébricas. Sob esta forma elas são utilizadas dentro da planilha Excel.



Figura 4.2 - Esquematização do problema simplificado

4.5 RESULTADOS

ELABORAÇÃO DO ALGORITMO

A planilha apresentada corresponde ao cálculo de velocidades nas direções axial e radial do tanque cilíndrico com um conjunto de agitadores internos. O raio interno do agitador equivale a 1 unidade; o raio do tanque, a 5 unidades. A velocidade inicial foi fixada no valor 100. Após 39 iterações, a velocidade na parede (raio igual a 5 unidades) equivale a zero. Nos gráficos gerados, equivalentes às figuras 4.3 e 4.4, pode-se observar o comportamento da velocidade, em suas direções axial e radial.

EXECUÇÃO NA PLANILHA EXCEL V. 5.0

A execução do caso estudo na planilha do Excel versão 5.0 passa pelas seguintes etapas:

- 1)Elaboração de uma pasta de trabalho com os dados essenciais para a simulação do caso estudo.
- 2)Utilização das opções "GoalSeek" e "Solver" para o caso estudo, até convergência. O Solver do Microsoft Excel utiliza o "Generalized Reduced Gradient (GRG2) Nonlinear Optimization Code". Problemas lineares e inteiros utilizam o método simplex.

As opções de "Solver" estão relacionadas a números de iterações, precisão, tolerância, modelos lineares, estimativas e estabelecimento de critérios matemáticos de resolução do caso estudo.

Os resultados obtidos a partir da planilha Excel V. 5.0 são mostrados abaixo:

Velocity	100					<u> </u>			[I							
begin r	1,00		1,00	1,2	1,4	1,6	1,8	2,1	2,3	2,5	2,7	3,0	3,2	3,4	3,6	3,8	4,1	4,3	4,5	4,7	5,0	5,00
-	-		•	2	4	7	. 9	1	['] 3	6	8	. 0	2	4	7	9	. 1	3	6	. 8	0	
end r	5		100	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
			100	46	25	16	11	8,4	6,5	5,1	4,1	3,3	2,7	2,2	1,8	1,4	1,1	0,8	0,6	0,4	0,2	0
number of		30	100	63	42	29	21	16	13	10	8,1	6,5	5,3	4,3	3,5	2,8	2,2	1,6	1,2	0,8	0,4	0
iterations		53																				
1		1,49	100	72	52	39	29	23	18	15	12	9,6	7,8	б,4	5,2	4,1	3,2	2,4	1,8	1,1	0,6	0
			100	77	59	45	36	28	23	19	15	12	10	8,3	6,7	5,4	4,2	3,2	2,3	1,5	0,7	0
			100	79	63	50	41	33	27	22	18	15	12	10	8,2	6,6	5,2	3,9	2,8	1,8	0,9	0
			100	81	66	54	44	36	30	25	21	17	14	12	9,6	7,7	6,1	4,6	3,3	2,1	1	0
			100	83	68	57	47	39	33	28	23	19	16	13	11	8,7	6,9	5,2	3,8	2,4	1,2	0
			100	84	70	59	50	42	35	30	25	21	18	15	12	9,6	7,6	5,8	4,2	2,7	1,3	0
			100	84	71	61	51	44	37	32	27	22	19	16	13	10	8,2	6,3	4,5	2,9	1,4	0
			100	85	72	62	53	45	39	33	28	24	20	17	14	11	8,8	6,7	4,9	3,1	1,5	0
			100	85	73	63	54	47	40	34	29	25	21	18	14	12	9,3	7,1	5,1	3,3	1,6	0
			100	86	74	64	55	48	41	35	30	26	22	18	15	12	9,7	7,5	5,4	3,5	1,7	0
			100	86	74	64	56	48	42	36	31	26	22	19	16	13	10	7,7	5,6	3,6	1,8	0
			100	86	75	65	56	49	43	37	32	27	23	19	16	13	10	8	5,8	3,7	1,8	0
			100	86	75	65	57	50	43	37	32	28	23	20	16	13	11	8,2	5,9	3,8	1,9	0
			100	86	75	66	57	50	43	38	33	28	24	20	17	14	11	8,4	6,1	3,9	1,9	0
			100	87	75	66	58	50	44	38	33	28	24	20	17	14	11	8,5	6,2	4	2	0
			100	87	75	66	58	50	44	38	33	28	24	21	17	14	11	8,6	6,2	4	2	0
			100	87	76	66	58	51	44	38	33	29	24	21	17	14	11	8,7	6,3	4,1	. 2	0
			100	87	76	66	58	51	44	39	33	29	25	21	17	14	11	8,7	6,3	4,1	2	0
		0							Ī													
		r			1	1			1				[Ι		
				[ľ	1												
			· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·		1			1	1		1		1						1	I	1	
·					1			 	1		1								1			
				0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	C	0	
				0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	C	0	
			······································	0	Ō	0	0	Ō	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	·····
				0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	C	0	[

2

0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ó	-0	

Tabela 4.1 Resultados obtidos a partir da planilha Excel V. 5.0 para caso estudo esquematizado na Figura 4.2.

- 100 - 90 -80 -70 Velocidade 60 50 40 -30 0 20 1,00 1,67 10 2,33 n 3,00 S21 3,67 Direção Radial 4,33 5,00 Direção Axial 🖈 S1

Distribuição de Velocidade

Figura 4.3 - Planilha e gráfico de distribuição de velocidades nas direções radial e axial, respectivamente, do reator tanque agitado, esquematizado na Figura 4.2 * Assume-se que a dependência nas velocidades vizinhas é medida pela componente radial.





Figura 4.4 Distribuição de temperatura nas direções axial e radial do reator tanque agitado esquematizado na Figura 4.2

4.6 CONCLUSÕES

O procedimento para obtenção dos perfis de temperatura e velocidades através da utilização da planilha Excel versão 5.0 mostra-se viável. O perfil de temperatura apresentado na Figura 4.4 indica maiores gradientes próximos ao centro do reator. Quanto às curvas de velocidades radial e axial, observa-se um decréscimo da velocidade radial a partir do raio interno até o externo, constatação oposta à relacionada à velocidade do fluido na direção axial. Apesar das simplificações adotadas no desenvolvimento de cálculo apresentadas neste Capítulo, deve ser notado o seu potencial para a tomada de decisões em definição políticas operacionais e de projeto de reatores de de polimerização. É possível, com a abordagem proposta, obter informações úteis que são desprezadas quando da utilização de utilizados modelos de mistura perfeita, tão na literatura.Adicionalmente pode ser dito que o procedimento proposto também é atraente por exigir plataforma de cálculo usualmente disponível, tanto a nível de "software" quanto de "hardware".

No próximo Capítulo é apresentado um procedimento mais elaborado na construção da solução de um problema CFD para reatores de polimerização.

APÊNDICE - C4

AP. C4. A- DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE MOMENTO AXIAL E MOMENTO RADIAL:

Momento Axial:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\rho r U_{z} U_{r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\rho r U_{r} U_{r}\right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial U_{r}}{\partial r}\right) + \frac{\partial^{2} U_{r}}{\partial z^{2}}\right]$$
(A1)

Multiplicando-se os dois lados da eq. (Al) por r e integrando-se sobre o volume de controle, cada termo da equação passa a ter a forma:

$$\iint_{WS} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r U_z U_r) dr dz = \left[(\rho r U_z U_r)_n - (\rho r U_z U_r)_s (z_e - z_w) \right]$$
(A2)

$$\int_{sw}^{n} \frac{\partial}{\partial z} (\rho U_r U_r) dr dz = \left[\left(\rho U_r U_r \right)_e - \left(\rho U_r U_r \right)_w \left(\frac{r_n^2 - r_s^2}{2} \right) \right]$$
(A3)

$$\int_{sw}^{n} \frac{\partial p}{\partial z} dr dz = \frac{(p_e - p_w)}{\Delta z} (z_e - z_w) \left(\frac{r_n^2 - r_s^2}{2} \right)$$
(A4)

$$\int_{ws}^{en} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial U_r}{\partial r} \right) dr dz = \left[\left(r \mu \frac{\partial U_r}{\partial r} \right)_n - \left(r \mu \frac{\partial U_r}{\partial r} \right)_s \right] \left(z_e - z_w \right)$$
(A5)

$$\int_{sw}^{ne} r\mu \left(\frac{\partial^2 U_r}{\partial z^2}\right) dr dz = \left[\left(\mu \frac{\partial U_r}{\partial z}\right)_e - \left(\mu \frac{\partial U_r}{\partial z}\right)_w\right] \left(\frac{r_n^2 - r_s^2}{2}\right)$$
(A6)

Combinando-se as equações de (A1) \rightarrow (A6), obtém-se:

$$(\rho U_{r}U_{r})_{e}r_{p}(r_{n}-r_{s}) - (\rho U_{r}U_{r})_{w}r_{p}(r_{n}-r_{s}) + (\rho r U_{z}U_{r})_{n}(z_{e}-z_{w}) - (\rho r U_{z}U_{r})_{s}(z_{e}-z_{w}) = \left(\frac{p_{w}-p_{e}}{\Delta z}\right)(z_{e}-z_{w})(r_{n}-r_{s})r_{p} + \left(r\mu\frac{\partial U_{r}}{\partial r}\right)_{n}(z_{e}-z_{w}) - (A7) \left(r\mu\frac{\partial U_{r}}{\partial r}\right)_{s}(z_{e}-z_{w}) + \left(\mu\frac{\partial U_{r}}{\partial z}\right)_{e}(r_{n}-r_{s})r_{p} - \left(\mu\frac{\partial U_{r}}{\partial z}\right)_{w}(r_{n}-r_{s})r_{p}$$

Momento Radial:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho r U_z U_z) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho U_r U_z) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r U_z)\right) + \frac{\partial^2 U_z}{\partial z^2}\right]$$
(A8)

Analogamente ao procedimento anterior, a equação do momento radial discretizada possui a seguinte forma:

$$(\rho r U_{z} U_{z})(z_{e} - z_{w}) - (\rho r U_{z} U_{z})(z_{e} - z_{w}) + (\rho U_{z} U_{r})_{e} r_{p}(r_{n} - r_{s}) = (\rho U_{z} U_{z})_{w} r_{p}(r_{n} - r_{s})$$

$$= \left(\frac{p_{n} - p_{s}}{\Delta r}\right) r_{p}(r_{n} - r_{s})(z_{e} - z_{w}) + \left(r\mu \frac{\partial U_{z}}{\partial r}\right)_{n}(z_{e} - z_{w})$$

$$- \left(r\mu \frac{\partial U_{z}}{\partial r}\right)_{s}(z_{e} - z_{w}) + \left(\mu \frac{\partial U_{z}}{\partial z}\right)_{e} r_{p}(r_{n} - r_{s}) - \left(\mu \frac{\partial U_{z}}{U_{z}}\right)_{w} r_{p}(r_{n} - r_{s})$$
(A9)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BIRD, R. Byron et al., "Transport Phenomena", John Wiley & Sons, New York, 1960.
- Excel Microsoft Excel Versão 5.0
- PATANKAR, S. V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere, Washington DC, 1980.
- PIKE, R.W., 1980, Ju, S.Y., Mulvahill, T.M., "Tridimensional Turbulent Flow in Agitated Vessels with a Nonisotropic Viscosity Turbulence Model", The Canadian Journal of Chemical Engineering, vol. 68, 3-16, 1990.
- TUCKER, Charles L. Fundamentals of Computer Modeling for Polymer Processing, Hanser Publishers, New York, 1989.

CAPÍTULO 5

Estrutura da "cfd" - reatores de polimerização

5.1 INTRODUÇÃO

O campo da fluido-dinâmica computacional (CFD -Computational Fluid Dynamics) consiste em uma coleção de técnicas numéricas as quais são designadas a modelar computacionalmente o comportamento do escoamento de um fluido.

O desenvolvimento de procedimentos de cálculo usando CFD pode necessitar de etapas que fazem uso de versões simplificadas de equipamentos e que envolvem um fluido menos problemático do que os que são possíveis de simular com a utilização de um simulador comercial.

Os reatores de polimerização consistem num caso estudo complexo que envolve o desenvolvimento de mudanças marcantes do comportamento reológico do fluido dentro do tanque agitado.

A formulação do problema genérico, dentro da fluidodinâmica computacional, para reatores de polimerização, parte da tomada do modelo matemático para o sistema, do estabelecimento das condições de contorno para o mesmo. A partir daí, utilizando-se um método numérico, parte-se para a discretização das equações do modelo e sua resolução, a qual resulta em vários tipos de saídas gráficas.

O presente Capítulo tem por objetivo desenvolver simulações de um fluido Newtoniano e outro não-Newtoniano, dentro de um reator tanque cilíndrico, utilizando como ferramenta básica o pacote de fluido-dinâmica computacional, PHOENICS, versão 2.1, 1994 [CHAM].

0sdiversos tipos de simulações envolvem modelo bidimensional e modelo tridimensional para o sistema.Nos quatro casos estudos propostos existe apenas o movimento dos fluidos, não havendo, ainda, a presença de um agitador dentro do tanque .A finalidade básica das simulações é oferecer uma introdução à sistemática de obtenção de respostas do pós-processador, podendo-se observar saídas do tipo : final de simulação de determinado caso estudo, apresentação de linhas de corrente (STRM, streamlines), visão tridimensional dos resultados, perfil de temperatura para caso estudo, opcão de um visualização (" View") para " isolines", bem como uma construção esquemática do reator tanque agitado, utilizado como base para as simulações do Capítulo 6.0s planos de observação das figuras estão sempre explicitados no canto inferior direito da tela apresentada.
Portanto, oferecem-se várias telas de saída gráfica do pacote de fluido-dinâmica computacional, Phoenics v. 2.1, apresentando-se respostas gráficas para os quatro casos estudos propostos no presente capítulo, enfatizando-se a ausência de um agitador dentro do reator.

5.2 O PACOTE DE FLUIDO-DINÂMICA COMPUTACIONAL PHOENICS V. 2.1

"Phoenics" está relacionado com as inicial de 'Parabolic', 'Hiperbolic', 'Or', 'Elliptic', Numerical', 'Integration', 'Code', 'Series'.

O pacote é composto de alguns módulos principais que são: 'Satellite', 'Earth', 'Photon' e 'Autoplot'. Basicamente, as funções são de pré-processador, onde o estabelecimento de problemas de escoamento reside; processador, onde ocorre a resolução numérica do problema posto dentro do pré-processador e o pós-processador, onde são obtidas saídas gráficas para os problemas propostos.

Os quatro módulos principais do pacote exercem, então, as seguintes funções:

- SATELLITE: lê um arquivo de entrada, Q1 e dá acesso ao Polis ('Phoenics On-Line Information Service');
- EARTH; realiza as computações do problema, com os dados contidos no arquivo Q1 (vindo do 'Satellite');
- PHOTON: consiste no módulo de saída gráfica de campos bidimensionais e tridimensionais;
- AUTOPLOT: usado para saída gráfica ou gráficos do tipo "y versus x".

O método numérico para aproximar soluções às equações acopladas e não-lineares (que constituem um exemplo típico nos reatores de polimerização) é a aproximação pelos Volumes Finitos (Patankar, 1980; Maliska, 1995).

5.3 ESCOAMENTO BIDIMENSIONAL E TRIDIMENSIONAL DENTRO DE UM REATOR TANQUE AGITADO

Historicamente, os modelos de zonas de recirculação dentro de um reator tanque agitado têm sido representados como escoamentos estacionários e bidimensionais (Kresta, 1994).

Na realidade, porém, o escoamento em um reator tanque agitado é tridimensional, sendo os detalhes das zonas de recirculação instáveis e variáveis de um instante a outro no tempo (Tatterson et al., 1980; Winardi and Nagase, 1991; Winardi et al., 1988).

Portanto, torna-se importante simular as situações bidimensional e tridimensional sob o ponto de vista da 'CFD'.

Os impelidores (agitadores) tipo disco podem ser aproximados de maneira satisfatória a um modelo axissimétrico bidimensional, considerando-se que o escoamento axial é invariável sobre qualquer seção vertical e adequadamente descrito pelos três componentes de velocidade em qualquer ponto (Street, 1991).

5.4 REATORES DE POLIMERIZAÇÃO COM RESFRIAMENTO EXTERNO

Polímeros invariavelmente exibem comportamento não-Newtoniano (Nunhez, 1994). Quando uma tensão é aplicada a um fluido puramente viscoso, este deforma continuamente com o tempo até que a tensão aplicada seja removida (Tucker, 1989). Um fluido Newtoniano se define como aquele material no qual a tensão é diretamente proporcional à taxa de deformação.

Se um fluido Newtoniano for submetido e um escoamento cisalhante simples e estacionário, vale a expressão abaixo:

$$\tau = \mu \gamma \tag{5.1}$$

Para a maioria dos polímeros, a equação (5.1) é insatisfatória. Os materiais que se desviam do comportamento Newtoniano são os não-Newtonianos. A viscosidade, neste caso, será uma função da taxa de cisalhamento, isto é:

$$\tau = \mu \begin{pmatrix} \bullet \\ \gamma \end{pmatrix} \stackrel{\bullet}{\gamma} \tag{5.2}$$

Foi observado em muitas misturas poliméricas, que o logaritmo da viscosidade em função do logaritmo da taxa de deformação exibe comportamento linear sobre um limite de taxas de deformação tipicamente encontrados em operações de processamento de polímeros. Tal observação sugeriu o uso e uma expressão "power-law", lei da potência, entre a tensão e a taxa de deformação:

 $\tau = m\mu\gamma$ (5.3)

O índice de consistência, m, e o índice de comportamento, "power-law", n, dependem do fluido particular e de sua temperatura, mas não da taxa de deformação. Para um sistema pseudoplástico ("shear-thinning"), n < 1, para um fluido Newtoniano, n = 1, e para um fluido dilatante ("shearthickening"), n > 1. Desse modo, a viscosidade é dada por:

$$\eta = m\gamma \tag{5.4}$$

O índice de consistência, m, por sua vez depende da temperatura. O mesmo segue uma expressão tipo Arrhenius e a dependência com a pressão é considerada como seguindo uma relação exponencial, isto é:

$$\mathbf{m} = \mathbf{m}_0 \exp\left(\frac{\Delta \mathbf{E}}{\mathbf{R}} \left[\frac{\mathbf{T}_0 - \mathbf{T}}{\mathbf{T}_0 \mathbf{T}}\right]\right) \exp(\beta(\mathbf{P} - \mathbf{P}_0)$$
(5.5)

A eq. (5.5) deve ser substituída em (5.4). Assim, surge a equação básica para se verificar a relação constitutiva utilizada para expressar o comportamento não-Newtoniano de um sistema.

A temperatura surge como um fator crítico no estudo dos reatores de polimerização. Isto significa que o balanço de energia faz parte das equações descritivas do sistema. Tal constatação se torna importante no estabelecimento das condições de contorno para o reator tanque agitado com escoamento não-isotérmico.

Nas simulações do presente capítulo, considera-se que uma parede externa do tanque funciona como uma superfície de troca de calor para o sistema. Isto é consistente com reatores industriais que possuem camisas para as operações de arrefecimento.

5.5 CONDIÇÕES DE CONTORNO PARA O SISTEMA NÃO-ISOTÉRMICO

As condições de contorno para um escoamento laminar, nãoisotérmico, são dadas pela Figura 5.1. Paredes: $U_r = U_z = U_\theta = 0$

Agitador: $U_r = U_z = 0$

$$\mathbf{U}_{\boldsymbol{\theta}} = \mathbf{f} \big(\mathbf{N}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{R}_{\mathbf{d}} \big)$$

Superfície Livre: assume-se que aqui não há cisalhamento. Então:

$$U_{z} = 0$$
$$\frac{\partial U_{r}}{\partial z} = \frac{\partial U_{\theta}}{\partial z} = 0$$

Linha central, abaixo do agitador:

$$U_{\rm r} = U_{\rm \theta} = \frac{\partial U_z}{\partial r} = 0$$
,

ou seja, esta é uma condição de simetria.

Ao longo da linha central do eixo do agitador: não há dissipação de calor, isto é:

$$\nabla T = 0$$

Temperatura na superfície de troca de calor: expressa em termos de fluxo.

$$q = -k \frac{\partial T}{\partial n} = h_{parede} (T - Text)$$



Figura 5.1 - Condições de contorno para um reator tanque agitado, escoamento não-isotérmico.

5.6 Tabelas explicativas da sequência das simulações

As Tabelas 5.1 e 5.2 apresentam algumas informações sobre as simulações apresentadas.

Tabela 5.1 - Características das simulações

Caso Est	udo Tipo	Material	Dimensão	Agitador disco
	1	H ₂ O	2D	
	2	H ₂ O	3D	
	3	PS	2D	
SS	4	PS	3D -	-

SS: "steady-state"

Tabela 5.2 Características dos Casos Estudos. Denominações de Suas Saídas

Caso Estudo n ²	1	2	3	4
H = 4m	A1	A2	A3	A4
D = 2, 8m				

5.7 RESULTADOS

A seguir são mostradas quatro saídas gráficas obtidas com o pós-processador, PHOTON versão 2.0, pertencente ao pacote computacional PHOENICS v. 2.1.

As figuras semelhantes à Figura 5.2, a seguir, representam a tela de final de simulação para um dos casos estudos propostos no presente trabalho. Invariavelmente, o gráfico do lado esquerdo da página identifica a variação da propriedade (velocidades, pressão, temperatura, p. numa calculada e.) determinada célula de cálculo (escolhe-se um chamado "spot value", que consta de coordenadas (x, y, z), onde é obtido o valor final da propriedade, após convergência da simulação referente a dado caso estudo). Existe uma relação entre as cores das curvas e a propriedade calculada. Pl representa valor de pressão para um problema onde a fase única é representada por 1. U1, V1, W1 e TEM1 representam velocidade radial, axial, tangencial e temperatura, respectivamente, emcaso um monofásico. O lado direito da tela representa o erro referente ao cálculo de cada propriedade já citada anteriormente. A abreviação STRM, na Figura 5.3 (e figuras semelhantes à mesma) significa "streamlines" e cada cor presente na legenda que acompanha o resultado da saída gráfica mostra o valor correspondente à propriedade calculada.













- reatores de polimerização "cfd" Estrutura da Ю Capítulo







- reatores de polimerização

Estrutura da "cfd"

Capítulo 5











Ś.







Figura 5.10 - Reator tanque agitado, base para as simulações do próximo capítulo.

- A Figura 5.2 e também a 5.8 representam tela de final de simulação de um caso estudo bidimensional. As cores presentes nos gráficos estão explicadas abaixo dos mesmos representando perfis de velocidade radial е axial, pressão e temperatura. No presente caso, os vetoriais são estudados numa campos célula de localização (5, 5, 1), dentro do tanque agitado. Tal procedimento é pertinente ao método numérico dos volumes finitos, o qual embasa a resolução numérica das simulações dentro do pacote PHOENICS v. 2.1.
- A Figura 5.3 mostra num plano bidimensional x y perfis de velocidade radial, axial, pressão e linhas de corrente para o caso estudo tipo A1. A aparência das figuras de forma cheia é uma opção de representação presente no pós-processador PHOTON.
- Figura 5.4 A avaliação dos perfis de velocidade nas direções radial, axial e tangencial, bem como a pressão, para um caso estudo tipo A2 é mostrada na Figura 5.4. Trata-se de uma visão tridimensional com opção de observação "perspective" presente no menu do pósprocessador PHOTON.
- Na Figura 5.6 é possível observar o perfil de temperatura do caso estudo tipo A3. Verificam-se maiores temperaturas próximas ao centro do reator; visão em perspectiva, estilo cheio ("full").
- A Figura 5.7 é equivalente à Figura 5.4, ou seja, avalia perfis de velocidade para um caso tridimensional, variando a opção "view" para "isolines", presente no menu do pós-processador PHOTON.Esta opção pode melhorar a visão particular de algumas características importantes na tomada de decisão sobre o processo.
- A estrutura da Figura 5.8 equivale à da Figura 5.2, isto é, representa o final de uma simulação. A diferença neste caso está na dimensionalidade do problema, agora tridimensional, ou seja, a velocidade tangencial passa a ser avaliada. Como na Figura 5.2, as propriedades foram estudadas na localização (5, 5, 1), ou seja, o chamado "spot value" de cálculo das propriedades.
- A saída gráfica de perfis de velocidade nas direções radial, axial e tangencial, bem como do campo de pressão para o presente caso estudo são apresentados na Figura 5.9. Portanto, saída tridimensional.
- A configuração base para as simulações do próximo capítulo é mostrada na Figura 5.10. Trata-se de um reator tanque agitado, com um eixo central ("shaft"), um impelidor tipo disco, parede do tanque em contato com uma jaqueta de resfriamento, superfície inferior do tanque ("floor") e uma superfície livre.

5.8 CONCLUSÕES

Preliminarmente, pelas saídas gráficas apresentadas acima, pode-se chegar às seguintes conclusões:

- As saídas tridimensionais resultam num cenário mais completo de interpretação do escoamento da água ou do poliestireno.
- Não existem agitadores nos quatro casos estudos propostos, o que equivale a dízer que o fluido se movimenta sem influência de geometria interna ao tanque.
- Observa-se que nos casos 2D, (para a água e para o poliestireno), os limites de velocidades radiais e axiais são diferentes, sendo, um pouco maiores para o caso da água. Isso vem a indicar que, provavelmente, a água se movimenta "mais livremente" em comparação com o poliestireno.
- No caso 3D, a mesma tendência da encontrada para o 2D se repete. No entanto, conclui-se que a velocidade tangencial possui um papel importante para ambos os fluidos e, portanto, é uma informação necessária.
- O escoamento dos dois fluidos por seus próprios movimentos mostra que o caso 3D tem importância no entendimento do fenômeno de escoamento e que a formação de vórtices ou zonas mortas ainda não pode ser qualitativamente deduzida.
- A última parte do presente capítulo é composta de um Apêndice C5, onde são fornecidas informações/procedimentos para a obtenção de figuras vindas do pós-processador, Photon v.2.0.Listam-se arquivos tipo Q1, vindos do pré-processador, Satellite, exemplificando-se a composição de um caso estudo de escoamento em um impelidor MIZUKI.Todos os Grupos (até o Grupo 24) de estabelecimento do problema são mostrados.A sequir, faz-se a listagem de um arquivo tipo RESULT, obtido após compilação de um arquivo tipo Q1.Sua finalidade é exemplificar alguns passos de lógica utilizados pelo pacote de fluido-dinâmica computacional, o Phoenics, v 2.1, aqui utilizado.A seguir, apresentam-se, através do AP-C5-B, algumas telas de trabalho no sistema operacional Unix, com comandos imprescindíveis para o carregamento do Phoenics v. 2.1 na área de trabalho de um usuário que não possua o pacote instalado em seu "cluster".No caso específico do presente traz-se o pacote de uma faculdade a outra, trabalho, necessitando, desse modo, o usuário de ter outra área de trabalho na outra faculdade.Finalmente, o AP-C5-C apresenta as principais telas de trabalho no PHOENICS V 2.1, as quais têm o fim de familiarizar o usuário com o trabalho dentro de um pacote de fluido-dinâmica computacional.

No próximo Capítulo, pretende-se simular o escoamento, tanto da água quanto do poliestireno, porém, com a presença de um agitador, localizado em diversas alturas em relação ao fundo do tanque, bem como variando seu diâmetro em relação ao diâmetro do tanque.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- KRESTA, Suzane & Chapple, Dallas. The effect of Geometry on the Stability of Flow Patterns in Stirred Tanks. Chemical Engineering Science, vol. 49, No. 21, 3651-3660, 1994
- MALISKA, Clovis R., Transferência de Calor e Fluido Dinâmica Computacional, Fundamentos-Coordenadas Generalizadas, LTC, Rio de Janeiro, 1995.
- NUNHEZ, J. R. The Influence of Geometric Factors on the Optimum Design of Stirred Tank Reactions, PhD Thesis, The University of Leeds, 1994.
- PATANKAR, S. V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere, Washington DC, 1980.
- PHOENICS, Versão 2.1, 1994 [CHAM, Concentration Heat and Momentum Ltd]
- STREET, D. A. Computational Modelling of Stirred Reaction Vessels, PhD Thesis, The University of Leeds, 1991.
- TATTERSON, G. B., Yuan, H. S. and Brodkey, R. S. Stereoscopic Visualization of the Flows for Pitched Blade Turbines, Chem. Engng. Sci., 35, 1369-1375, 1980.
- TUCKER, Charles B. Fundamentals of Computer Modeling for Polymer Processing, Hanser Publishers, New York, 1989
- WINARDI, S. & Nagase, Y. Unstable Phenomenon of Flow in a Mixing Vessel with a Propeller. Chem Engng. Japan 24, 243-249, 1991.
- WINARDI, S., Nakao, S, & Nagase, Y., Pattern recognition in flow visualization around paddle impeller, J. Chem. Engng Japan 21, 503-508, 1988.

APÊNDICE - C 5

AP-C5-A UTILIZAÇÃO DO PÓS-PROCESSADOR PHOENICS V. 2.1,

PHOTON V. 2.0

Os casos bidimensionais mostram em suas janelas, do canto esquerdo inferior, até o direito inferior, campos de U_r , U_z , P (pressão) e linhas de corrente para o plano no 'spot value' (5,5).

Os casos tridimensionais revelam, do canto inferior esquerdo até o canto inferior direito, as velocidades radial, U_r , axial, U_z e tangencial, U_{θ} , e o campo de pressão para o 'spot value', (5,5,5).

A obtenção das figuras do capítulo 5 segue a seguinte rota:

- 1)Com os dados já gravados de cada caso estudo nos arquivos "Q1" e "result", portanto após compilação do pré-processador "satellite", pelo processador "earth", chama-se o "photon". Este, automaticamente, carrega o arquivo "Q1" em operação e o usuário inicia as suas saídas gráficas.
- 2) Após se "desenharem" os perfis de campos para o referido caso-estudo, na tela da estação de trabalho Sun-Sparc 5, na janela correspondente ao "cmdtool", digita-se xv. A partir daí, é carregado um "visualizador de telas". "Clicando-se" com o mouse a sequência: Grab (dentro do "xv"), "clica-se" no botão do meio do mouse o "grab" para "pegar" a tela que se deseja. Esperam-se alguns segundos e obtém-se já outra tela a partir do "xv", onde se "clicou' o "grab'. Volta-se ao menu do xv e salva-se ("save") a tela já "apanhada" ("grab") em seu diretório de trabalho. Instantaneamente, gera-se um arquivo vindo do xv.
- 3) A partir daí, grava-se o arquivo (gráfico) vindo do xv, em disquete comum (extensão .gif).
- 4) Leva-se o arquivo .gif a um computador IBM, com Word for Windows versão 7.0 e "Power Point" Versão 5.0. Abre-se o arquivo .gif e realizam-se as necessárias modificações e operações de tamanho e "recolorização" do fundo da tela (que no pacote PHOENICS 2.1 é preto). Faz-se o "Recolor" para fundo branco, o que representa economia de tinta e tempo.
- 5)Para alguma alteração desejada nas vizinhanças da figura impressa, pode-se fazer uso do Paint Shop Pro-Psp.exe, versão 7.0, dentro do Windows95, presente no computador IBM utilizado para a manipulação das figuras, da estação de trabalho, para o microcomputador e, posterior impressão.
- 6) Imprime-se o resultado gráfico em uma impressora tipo HP jato de tinta colorida.

A seguir serão apresentadas listagens de arquivos tipo Q1 e RESULT, obtidos a partir do trabalho de simulação dentro do pacote de fluido-dinâmica computacional PHOENICS v. 2.1. Adicionalmente, serão apresentados alguns comandos do sistema operacional UNIX, os quais permitem o carregamento do pacote para a tela do usuário. Finalmente serão apresentadas as principais telas de trabalho do pacote "cfd".

AP-C5-A1 LISTAGEM DE ARQUIVOS TIPO "Q1" E "RESULT", VINDOS DO PACOTE CFD PHOENICS VERSÃO 2.1.

```
- UM EXEMPLO DE UM ARQUIVO 01:
  1
     IRUNN
          =
                1;LIBREF =
                             0
  2
3
  Group 1. Run Title
  TEXT( Flow in MIZUKI impeller passage :N660)
4
5
  6
  Group 2. Transience
7
  STEADY =
           Τ
  ************
8
9
  Groups 3, 4, 5 Grid Information
     * Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)
10
  RSET (M, 5, 5, 12)
11
     * Set overall domain extent:
12
13
     *
           xulast yvlast zwlast
                             name
  XSI= 1.000E+00;YSI= 1.000E+00;ZSI= 1.000E+00;RSET(D,CHAM
14
           15
Group 6. Body-Fitted coordinates
16
17
  BFC=T
18
  READCO(GRID1)
    ******
19
20
  NONORT =
            Т
21
     * X-cyclic boundaries switched
22
23
   Group 7. Variables: STOREd, SOLVEd, NAMEd
24
  ONEPHS =
            ሞ
     * Non-default variable names
25
26
  NAME (45) = WC1 ; NAME (46) = VC1
  NAME (47) = UC1 ; NAME (48) = WCRT
27
28
  NAME(49) =VCRT ; NAME(50) =UCRT
29
     * Solved variables list
  SOLVE(P1 , U1 , V1 , W1 , WC1 , VC1 , UC1 )
30
31
     * Stored variables list
32
  STORE (UCRT, VCRT, WCRT)
33
     * Additional solver options
34
  SOLUTN(P1,Y,Y,Y,N,N,N)
35
36
   Group 8. Terms & Devices
37
*****
   Group 9. Properties
38
```

```
39
   RH01
          = 1.240E+00
40
   ENUL
          = 1.032E - 03; ENUT =
                               .000E+00
41
42
    Group 10.Inter-Phase Transfer Processes
43
44
    Group 11. Initialise Var/Porosity Fields
   FIINIT(W1) = 1.000E+00; FIINIT(WC1) = 1.000E+00
45
46
     No PATCHes used for this Group
47
48
   RSTGRD =
               F
49
50
   INIADD =
               Τ
51
52
    Group 12. Convection and diffusion adjustments
53
54
    Group 13. Boundary & Special Sources
55
56
   INLET (BFCI
                 , LOW
                       ,1,5,1,5,1,1,1,1)
57
                 ,P1 , 1.240E+00)
   VALUE (BFCI
                     , GRND1
58
                 , U1
   VALUE (BFCI
                               )
                    , GRND1
59
   VALUE (BFCI
                 , V1
                               )
                    , GRND1
   VALUE (BFCI
60
                 ,W1
                               )
61
   VALUE (BFCI
                 ,WC1 , 1.000E+00)
                 ,WCRT, 1.000E+00)
62
   VALUE (BFCI
63
64
   PATCH (OUTLET
                ,HIGH ,1,5,1,5,12,12,1,1)
                ,P1 , 1.000E+02, .000E+00)
65
   COVAL (OUTLET
66
                 ,SWALL ,1,5,1,1,1,12,1,1)
67
   PATCH (WFUN1
                ,U1 , 1.000E+00, .000E+00)
68
   COVAL (WFUN1
                ,W1 , 1.000E+00, .000E+00)
69
   COVAL (WFUN1
70
   COVAL (WFUN1
                 ,WC1 , 1.000E+00, GRND
                                         )
                ,VC1 , 1.000E+00, GRND
                                         )
71
   COVAL (WFUN1
72
   COVAL (WFUN1
                 ,UC1 , 1.000E+00, GRND
                                         )
73
74
                 NWALL ,1,5,5,5,1,12,1,1)
   PATCH (WFUN2
75
                ,U1 , 1.000E+00, .000E+00)
   COVAL (WFUN2
76
   COVAL (WFUN2
                 ,W1 , 1.000E+00, .000E+00)
77
   COVAL (WFUN2
                 ,WC1 , 1.000E+00, GRND
                                        )
78
   COVAL (WFUN2
                 ,VC1 , 1.000E+00, GRND
                                         )
79
   COVAL (WFUN2
                 ,UC1 , 1.000E+00, GRND
                                         )
80
81
   PATCH (WFUN3
                 ,WWALL ,1,1,1,5,1,12,1,1)
                 ,V1 , 1.000E+00, .000E+00)
82
   COVAL (WFUN3
83
   COVAL (WFUN3
                 ,W1 , 1.000E+00, .000E+00)
                 ,WC1 , 1.000E+00, GRND
                                         )
84
   COVAL (WFUN3
                 ,VC1 , 1.000E+00, GRND
                                         )
85
   COVAL (WFUN3
                 ,UC1 , 1.000E+00, GRND
                                         )
86
   COVAL (WFUN3
87
                 ,EWALL ,5,5,1,5,1,12,1,1)
88
   PATCH (WFUN4
                 ,V1 , 1.000E+00, .000E+00)
89
   COVAL (WFUN4
```

```
Capítulo 5 Estrutura da "cfd" - reatores de polimerização
```

```
90
   COVAL (WFUN4
              ,W1 , 1.000E+00, .000E+00)
91
   COVAL (WFUN4
              ,WC1 , 1.000E+00, GRND
                                   )
92
              ,VC1 , 1.000E+00, GRND
   COVAL (WFUN4
                                   )
93
   COVAL (WFUN4
              ,UC1 , 1.000E+00, GRND
                                   )
94
95
   PATCH (DPDC
              , CELL
                   ,1,5,1,5,1,12,1,1)
                         , GRND10
96
   COVAL (DPDC
              ,WCl , FIXFLU
                                   )
                          , GRND10
97
   COVAL (DPDC
              ,VC1 , FIXFLU
                                   )
                          , GRND10
98
   COVAL (DPDC
              ,UC1 , FIXFLU
                                   )
99
         = 1.240E+00
100 BFCA
101
**************
102
    Group 14. Downstream Pressure For PARAB
103
104
    Group 15. Terminate Sweeps
105
   LSWEEP =
               50
106
   SELREF =
             Т
107
   RESFAC = 1.000E - 03
108
Group 16. Terminate Iterations
109
110
   LITER (P1) = 10; LITER (WC1) =
                                 1
                                 1
111
   LITER (VC1 ) = (
                 1 ;LITER (UC1 ) =
   ENDIT (P1 ) = 1.000E-03 ;ENDIT (U1 ) =
112
                                    1.000E-03
   ENDIT (V1 ) = 1.000E-03 ;ENDIT (W1 ) = 1.000E-03
113
   ENDIT (WC1) = 1.000E-03; ENDIT (VC1) = 1.000E-03
114
   ENDIT (UC1) = 1.000E-03
115
116
Group 17. Relaxation
117
   RELAX (P1 , LINRLX, 4.000E-01)
118
   RELAX (U1 , FALSDT, 5.000E-04)
119
          ,FALSDT, 5.000E-04)
120
   RELAX (V1
   RELAX (W1
           ,FALSDT, 5.000E-04)
121
   RELAX(WC1, FALSDT, 5.000E-02)
122
   RELAX (VC1, FALSDT, 5.000E-02)
123
   RELAX(UC1, FALSDT, 5.000E-02)
124
125
Group 18. Limits
126
127
Group 19. EARTH Calls To GROUND Station
128
129
   CCV
         =
             Т
130
131
   Group 20. Preliminary Printout
132
   ECHO
         -----
             F
133
*****
    Group 21. Print-out of Variables
134
            , Y, N, N, N, N, N)
135
   OUTPUT (U1
136
   OUTPUT (V1
            , Y, N, N, N, N, N)
```

```
137
   OUTPUT (W1
            (\mathbf{Y}, \mathbf{N}, \mathbf{N}, \mathbf{N}, \mathbf{N}, \mathbf{N})
138
******
139
    Group 22. Monitor Print-Out
140
   IXMON
         = 2 ; IYMON =
                              2 ; IZMON =
                                            6
   TSTSWP
141
               -1
          142
143
    Group 23. Field Print-Out & Plot Control
144
   ITABL
         ===
                1
145
     No PATCHes used for this Group
146
***********
147
    Group 24. Dumps For Restarts
148
MENSAV(S, RELX, DEF, 8.3333E-02, 1.0000E-05, 0)
149
150
   MENSAV(S, PHSPROP, DEF, 200, 0, 1.2400E+00, 1.0323E-03)
151
   MENSAV(S, FLPRP, DEF, LAMINAR, CONSTANT)
```

- UM EXEMPLO DE ARQUIVO "RESULT"

```
PHOENICS Version 2.1.1 - EARTH
     CCCC HHH
   СССССССС ННННН
                (C) Copyright 1995
                               18.04.1995
                Concentration Heat and Momentum Ltd
  ССССССС ННННННННН
 ССССССС ННННННННННН
                All rights reserved.
                Address: Bakery House, 40 High St
 СССССС ННННННННННН
 ССССССС ННННННННННН
                Wimbledon, London, SW19 5AU
                       0181-947-7651
  ССССССС ННННННННН
                Tel:
   СССССССС ННННН
                Facsimile: 0181-879-3497
     CCCC HHH
                E-mail: phoenics@cham.demon.co.uk
 This program forms part of the PHOENICS installation for:
            CHAM
The code expiry date is the end of : Aug 1995
   Number of F-array location available is
                              900000
Number used before BFC allowance (if any) is 34184
NO SOLIDS FOUND, SO SOLPRP SET TO 1.0E10
Group 1. Run Title and Number
```

)

TEXT (A2

```
IRUNN
            1 ;LIBREF =
                           0
Group 2. Transience
STEADY
      -----
          Τ
Group 3. X-Direction Grid Spacing
CARTES
     -----
          F
NX
      =
            10
      = 6.283E+00
XULAST
XFRAC (
      1) =
            1.000E-01 ;XFRAC (
                          2) =
                                2.000E-01
       3) =
            3.000E-01 ;XFRAC (
                           4) = 4.000E - 01
XFRAC (
                            6) =
                                6.000E-01
XFRAC (
       5) ==
            5.000E-01 ;XFRAC (
       7) =
           7.000E-01 ;XFRAC (
                           8) = 8.000E - 01
XFRAC (
            9.000E-01; XFRAC (10) =
                                1.000E+00
XFRAC (
       9) =
Group 4. Y-Direction Grid Spacing
NY
            10
      -----
YVLAST = 2.800E+00
            1.000E-01 ;YFRAC (
                           2) =
                                2.000E-01
YFRAC (1) =
                           4) =
                                4.000E-01
YFRAC (3) =
            3.000E-01 ;YFRAC (
YFRAC (
      5) =
            5.000E-01 ;YFRAC (
                            6) =
                                 6.000E-01
                            8) =
                                8.000E-01
YFRAC (
       7) =
            7.000E-01 ;YFRAC (
YFRAC (9) =
            9.000E-01; YFRAC (10) =
                                1.000E+00
Group 5. Z-Direction Grid Spacing
         F
PARAB
     =
            10
ΝZ
      -----
      = 4.000E+00
ZWLAST
            1.000E-01 ;ZFRAC (
                           2) =
                                2.000E-01
ZFRAC (1) =
                           4) = 4.000E - 01
       3) =
            3.000E-01 ;ZFRAC (
ZFRAC (
            5.000E-01 ;ZFRAC (
                            6) =
                                 6.000E-01
ZFRAC (
       5) =
                                 8.000E-01
       7) =
            7.000E-01 ;ZFRAC
                            8) =
                         (
ZFRAC (
                                 1.000E+00
ZFRAC (
       9) =
            9.000E-01; ZFRAC (10) =
Group 6. Body-Fitted Coordinates
Group 7. Variables: STOREd, SOLVEd, NAMEd
ONEPHS
     Т
NAME (1) = P1
            ;NAME(3) =U1
NAME (5) = V1
            ;NAME(7) =W1
NAME (47) = BLOK ; NAME (48) = TEM1
NAME (49) = DEN1; NAME (50) = PRPS
  * Y in SOLUTN argument list denotes:
  * 1-stored 2-solved 3-whole-field
  * 4-point-by-point 5-explicit 6-harmonic averaging
SOLUTN (P1
        , Y, Y, Y, N, N, Y
         , Y, Y, N, Y, N, Y)
SOLUTN (U1
SOLUTN (V1
         , Y, Y, N, Y, N, Y)
SOLUTN (W1
         , Y, Y, N, Y, N, Y)
SOLUTN (BLOK, Y, N, N, N, N, Y)
SOLUTN (TEM1, Y, Y, Y, N, N, Y)
SOLUTN(DEN1,Y,N,N,N,N,Y)
```

```
SOLUTN (PRPS, Y, N, N, N, N, Y)
DEN1
              49
       _
IVARBK
              -1; ISOLBK =
                               1
       ____
              50
PRPS
       -
Group 8. Terms & Devices
   * Y in TERMS argument list denotes:
   * 1-built-in source 2-convection 3-diffusion 4-transient
   * 5-first phase variable 6-interphase transport
TERMS (P1
          , Y, Y, Y, N, Y, N \rangle
TERMS (U1
          , Y, Y, Y, N, Y, N
TERMS (V1
         , Y, Y, Y, N, Y, N \rangle
TERMS (W1
         , Y, Y, Y, N, Y, N \rangle
TERMS (TEM1, N, Y, Y, N, Y, N)
       = 5.000E-01; ZDIFAC = 1.000E+00
DIFCUT
            F ; ADDDIF = F ; BLOCKZ =
                                          Τ
GALA
       -
            Τ
NEWRH1
       =
NEWENL
       =
            Τ
ISOLX
               0 ; ISOLY =
                               0 ; ISOLZ
                                                0
       =
                                         -----
Group 9. Properties
                                            = .000E+00
                             .000E+00 ;EL1
RHO1
      = GRND10
                  ;TMP1
                          =
TSURR
         .000E+00
       -----
                                               .000E+00
RHO1A
          .000E+00 ;RH01B =
                             .000E+00 ;RH01C =
       -----
PRESSO
       -
          .000E+00
DRH1DP
          .000E+00
       ===
ENUL
       = GRND10
                  ;ENUT
                         =
                            .000E+00
       = .000E+00 ;ENULB = .000E+00 ;ENULC = .000E+00
ENULA
PRNDTL (U1
          ) =
               1.000E+00 ; PRNDTL(V1 ) =
                                        1.000E+00
PRNDTL(W1) =
              1.000E+00; PRNDTL(TEM1) = -GRND10
              1.000E+00 ;PRT
                              (V1) =
                                        1.000E+00
PRT
     (U1
          ) =
                              (TEM1) = 1.000E+00
              1.000E+00 ;PRT
PRT
     (W1
         ) =
Group 10. Inter-Phase Transfer Processes
Group 11. Initialise Var/Porosity Fields
FIINIT(P1) =
              1.000E-10 ;FIINIT(U1 ) =
                                        1.000E-10
              1.000E-10; FIINIT(W1) =
                                        1.000E - 10
FIINIT(V1
         ) ==
              1.000E+00; FIINIT(TEM1) =
                                        2.500E+01
FIINIT (BLOK) =
FIINIT(DEN1) = 1.000E-10; FIINIT(PRPS) = 6.700E+01
                                                   1,
                                                        1)
PATCH (U1
            ,INIVAL,
                       1,
                           10,
                                1,
                                    10,
                                          1,
                                             10,
            ,TEM1, .000E+00, 2.500E+01)
INIT (U1
                                                        1)
                           10,
                                    10,
                                          1,
                                             10,
                                                   1,
PATCH (V1
            , INIVAL,
                       1,
                                1,
                           10,
                                1,
                                    10,
                                          1,
                                             10,
                                                   1,
                                                        1)
PATCH (W1
                       1,
             , INIVAL,
PATCH (P1
                           10,
                                1,
                                    10,
                                          1,
                                             10,
                                                   1,
                                                        1)
             , INIVAL,
                       1,
                                             10,
                                                   1,
                                                        1)
                           10,
                                1,
                                    10,
                                          1,
             , INIVAL,
                       1,
PATCH (TEM1
            F
INIADD
       -----
            F
RSTGRD
       -----
FSWEEP
               1
       ____
       =CHAM
NAMFI
```

Group 12. Patchwise adjustment of terms Patches for this group are printed with those for Group 13. Their names begin either with GP12 or & Group 13. Boundary & Special Sources PATCH (KESOURCE, PHASEM, 1, 10, 1, 10, 1, 10, 1) 1, 1, 1, 1, 10, 1) PATCH (FREESA2, WEST, 1, 10, 1, COVAL(FREESA2,P1, FIXFLU, 1.001E+03) COVAL(FREESA2,U1, .000E+00, 1.000E+00) COVAL(FREESA2,V1, .000E+00, 1.000E+00) COVAL(FREESA2,W1, .000E+00, .000E+00) COVAL(FREESA2,TEM1, .000E+00, 2.500E+01) ,WEST , 1) PATCH (OUTA2 1, 1, 10, 1, 10, 1, 1, COVAL (OUTA2 ,P1 , FIXVAL , .000E+00) ,U1 , .000E+00, .000E+00) COVAL (OUTA2 ,V1 , .000E+00, .000E+00) COVAL (OUTA2 COVAL (OUTA2 ,W1 , .000E+00, .000E+00) COVAL (OUTA2 ,TEM1, .000E+00, SAME) 1, 10, 1, 1) PATCH (WALL2 ,WWALL, 1, 1, 1, 10, COVAL (WALL2 ,V1 , 1.000E+00, .000E+00) ,W1 , 1.000E+00, .000E+00) COVAL (WALL2 COVAL (WALL2 ,TEM1, GRND2 , 2.830E+02) F XCYCLE === F EGWF -----Group 14. Downstream Pressure For PARAB Group 15. Terminate Sweeps ____ 1 LSWEEP 125 ;ISWC1 = LITHYD = 1 ;LITFLX = 1 ;LITC = 1 ;ITHC1 = 1 SELREF = Τ RESFAC = 1.000E-03RESREF(P1) = 1.000E-08; RESREF(U1) = 1.000E-08RESREF(V1) =1.000E-08; RESREF(W1) = 1.000E-08RESREF(TEM1) = 1.000E-08Group 16. Terminate Iterations 20 ;LITER (U1 LITER (P1) =) === 1 1 ;LITER (W1) = 1 LITER (V1) =LITER (TEM1) =20 ENDIT (P1) = 1.000E-03 ;ENDIT (U1) = 1.000E-03 ENDIT (V1) = 1.000E-03; ENDIT (W1) = 1.000E-03ENDIT (TEM1) = 1.000E-03Group 17. Relaxation RELAX (P1 , LINRLX, 1.000E+00) RELAX(U1 , FALSDT, 7.840E-03) ,FALSDT, 7.840E-03) RELAX (V1

```
,FALSDT, 7.840E-03)
RELAX (W1
RELAX (BLOK, LINRLX, 1.000E+00)
RELAX (TEM1, FALSDT, 7.840E+01)
RELAX (DEN1, LINRLX, 1.000E+00)
RELAX (PRPS, LINRLX, 1.000E+00)
OVRRLX
       =
          .000E+00
EXPERT
        ____
            F
               ;NNORSL =
                           ਜ
Group 18. Limits
VARMAX(P1) = 1.000E+10 ; VARMIN(P1) = -1.000E+10
VARMAX(U1) = 1.000E+10; VARMIN(U1) = -1.000E+10
VARMAX(V1) = 1.000E+10; VARMIN(V1) = -1.000E+10
VARMAX(W1) = 1.000E+10; VARMIN(W1)
                                 ) = -1.000E + 10
VARMAX (BLOK) = 1.000E+10 ; VARMIN (BLOK) =-1.000E+10
VARMAX(TEM1) = 1.000E+10 ; VARMIN(TEM1) =-1.000E+10
VARMAX(DEN1) = 1.000E+10; VARMIN(DEN1) = -1.000E+10
VARMAX (PRPS) = 1.000E+10 ; VARMIN (PRPS) =-1.000E+10
Group 19. EARTH Calls To GROUND Station
USEGRD
       ===
           Т
              ;USEGRX =
                           Т
NAMGRD =NONE
GENK
       -----
Group 20. Preliminary Printout
ECHO
        322
            Ť
Group 21. Print-out of Variables
INIFLD
      =
            T ; SUBWGR =
                           F
   * Y in OUTPUT argument list denotes:
   * 1-field 2-correction-eq. monitor 3-selective dumping
   * 4-whole-field residual 5-spot-value table 6-residual
table
OUTPUT (P1
          , Y, Y, N, Y, Y, Y
OUTPUT (U1
          , Y, Y, N, Y, Y, Y)
OUTPUT (V1
          , Y, Y, N, Y, Y, Y
OUTPUT (W1
          , Y, Y, N, Y, Y, Y)
OUTPUT (BLOK, Y, N, N, N, N, N)
OUTPUT (TEM1, Y, Y, N, Y, Y, Y)
OUTPUT (DEN1, Y, N, N, N, N, N)
OUTPUT (PRPS, Y, N, N, N, N, N)
Group 22. Monitor Print-Out
                                                5
IXMON
        =
               5; IYMON =
                               5 ;IZMON
                                        -----
                            10000 ; TSTSWP =
                                            10001
           10000; NPRMNT =
NPRMON
       =
UWATCH
            F
               ; USTEER =
                           F
        -----
HIGHLO
       =
            F
Group 23. Field Print-Out & Plot Control
NPRINT
       =
             125 ;NUMCLS =
                               5
                                               10
                               1 ;IXPRL
               2 ;IXPRF
                                        ......
NXPRIN
        -----
                        -----
                                               10
                               1 :IYPRL
                                        ......
               2 ; IYPRF
                        =
NYPRIN
        =
                                            10000
               2 ;IZPRF
                               1 ;IZPRL
                                        _____
NZPRIN
        <u>.....</u>
                        XZPR
        ____
            F
              ;YZPR
                      =
                           F
                                        =
                                                6
                              125 ;NPLT
IPLTF
        ===
               1 ; IPLTL
                        -----
               1 ;ISWPRL =
                            10000
 ISWPRF
        -----
```

ITABL 3 ; IPROF = = 1 ABSIZ = 5.000E-01 ; ORSIZ = 4.000E-01NTZPRF 1 ;NCOLPF = = 50 ICHR 2 ;NCOLCO = 45 ; NROWCO = 20 -----No PATCHes yet used for this Group Group 24. Dumps For Restarts SAVE = T; AUTOPS = F; NOWIPE = FNSAVE =CHAM *** grid-geometry information *** X-coordinates of the cell centres 3.141E-01 9.424E-01 1.571E+00 2.199E+00 2.827E+00 3.456E+00 4.084E+00 4.712E+00 5.341E+00 5.969E+00 Y-coordinates of the cell centres 1.400E-014.200E-017.000E-019.800E-011.540E+001.820E+002.100E+002.380E+00 9.800E-01 1.260E+00 2.660E+00 Z-coordinates of the cell centres 2.000E-01 6.000E-01 1.000E+00 1.400E+00 1.800E+00 2.200E+00 2.600E+00 3.000E+00 3.400E+00 3.800E+00

--- INTEGRATION OF EQUATIONS BEGINS ---

* * * * * * * *	INITIAL FI	ELDS ****	* * * *		
FLOW FIEL	D AT ITHYD=	1, IZ=	2, ISWEEP=	1, ISTEP=	1
FIELD VAL	1 000F-10	1 0005-10	1 0000-10	1 0008-10	
$1 0 0 0 \overline{r} - 1 0$	T.000E-I0	1.000E-10	1.0006-10	T.0001 TO	
IY= 8	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 6	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY = 4	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 2	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF Ul				
IY= 10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 8	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 6	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 4	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 2	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					~
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF V1				
IY= 9	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 7	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					

LY = 5 1 000F = 10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY= 3	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 1	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	_	-	_	_	_
IX=		3	5	7	9
TV- 10	1 000F-10	1 0005-10	1 0005-10	1 0005-10	
1.000E-10	T.OOOD TO	T.OOOE TO	T.OOOT TO	1.0001 10	
IY= 8	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 6	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	1 0000 10	1 0000 10	1 0000 10	1 0000 10	
11 = 4	1.000E-10	1.0008-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY = 2	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF BLOK				
IY= 10	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00	1 0005400	1 0000+00	1 00000+00	1 0005+00	
1 0 0 0 E + 0 0	T.000E+00	1.0006400	I.UUUE+UU	T.000E+00	
IY= 6	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00					
IY = 4	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00	1 0007.00	1 00000.00	1 00000.00	1 0007.00	
IY = 2	1.000E+00	1.000E+00	T.000E+00	T.000E+00	
TX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF TEM1	0	~		
IY= 10	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01					
IY = 8	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500£+01	2 5006+01	2 5006+01	2 5005+01	2 5008+01	
2.500E+01	2.5001101	2.0001101	2.0000101	2.0001101	
IY = 4	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01					
IY= 2	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01	1	2	a	7	Q
TYTELD VAI	LUFS OF DENI	3	5	1	9
IY = 10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 8	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 6	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	1 0000 10	1 0000 10	1 0000.10	1 0005-10	
1 000F-10	1 1111111	T.OOOP_TO	T.0008-T0	T.OOOR-TO	
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	T.0000 T0				
IY = 2	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY= 2 1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	

FIELD VALU	JES OF PRPS				
IY= 10	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01					
1Y = 8	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
TY = 6	6 700F+01	6 700F+01	6 700E+01	6 700F+01	
6.700E+01	0./000.01	0./000101	0./000/01	0.,000.01	
IY= 4	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01					
IY= 2	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6./00E+01	1	ĥ	L.	7	0
14	Ŧ	2	5	1	9
******	INITIAL FI	ELDS ****	***		
FLOW FIELI	O AT ITHYD=	1, IZ= 4	, ISWEEP=	1, ISTEP=	1
FIELD VALU	JES OF P1				
IY = 10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
I.000E-I0	1 0005-10	1 0008-10	1 0005-10	1 0008-10	
1.000E - 10	T.000H IO	T*000H IO	T.0001 TO	T.000H TO	
IY = 6	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY = 4	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	1 0005 10	1 0000 10	1 0000 10	1 0005 10	
11 = 2 1 000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.0006-10	
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF U1				
IY= 10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10				1 000-	
IY = 8	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10 TY= 6	1 000F-10	1 000F-10	1 0.00 = 10	1.000E-10	
1.000E-10	1.0001 10	1.0001 10	1.0000 10		
IY= 4	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY = 2	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	1	З	ς	7	a
FIELD VAL	UES OF V1	J	5	1	2
IY= 9	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY = 7	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	1 0000-10	1 000 E - 10	1 0008-10	1 0008-10	
1.000E-10	1.000E-10	1.0006-10	1.0006-10	1.000E-10	
IY= 3	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 1	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10		2	_		~
IX=	l upc op H1	3	5	/	9
TV= 10	1 000F-10	1 0005-10	1.000E - 10	1.000E-10	
1.000E-10				·····	

ł

I

ł

I

ł

.

,

ł

IY= 8	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
I.000E-10 IY= 6	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10 IY= 4	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	1 0000 10	1 0005 10	1 0000 10	1 0000 10	
1Y= 2 1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VALU	JES OF BLOK 1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
IY = 8	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
I = 6 I = 6	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
IY = 4	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
IY = 2	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF TEM1				
IY= 10 2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
IY = 8 2 500F+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
IY = 6	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
IY = 4	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01 IY= 2	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF DEN1	5	5	,	~
IY = 10 1 000F = 10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY = 8	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY= 6	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10 IY= 4	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10 IY= 2	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	1	2	۲.	eng	a
TA-	TIES OF DEDS	5	5	1	م.
IY = 10	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
IY= 8	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01 IY= 6	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01			~ ~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~		
IY= 4 6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6./UUE+01	

ł

•

IY = 2	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
IX=	1	3	5	7	9
* * * * * * * *	INITIAL FI	ELDS ****	* * *		
FLOW FIELI	D AT ITHYD=	1, IZ= 6	, ISWEEP=	1, ISTEP=	1
FIELD VALU	UES OF P1				
IY= 10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 8	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 6	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY = 4	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 2	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10		<u> </u>	_	 ,	~
IX=	1	3	5	/	9
FIELD VAL	UES OF UI	1 0000 10	1 0000 10	1 0000 10	
IY = 10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	1 0000 10	1 0000 10	1 0000 10	1 0000 10	
IY = 8	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	1 0000 10	1 0000 10	1 000- 10	1 0000 10	
LY = 6	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	I.000E-I0	
1.000E-10	1 0000 10	1 0000 10	1 0000 10	1 0000 10	
$\perp Y = 4$	1.000E-10	T.000E-10	1.0008-10	1.0006-10	
1.000E-10	1 0000 10	1 0000 10	1 0000-10	1 0008-10	
II = 2	1.000E-10	1.0006-10	T.000E-10	1.0008-10	
T.000E-I0	1	3	Ę	7	9
FTELD VAL	UES OF V1	5	5	2	~
TY = 9	1.000E - 10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY = 7	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 5	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 3	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 1	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					-
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	JUES OF W1			1 000m 10	
1Y = 10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	1 0000 10	1 0000 10	1 0000 10	1 0000 10	
1 0 0 0 0 0 0 0 0 0	1.000E-10	1.000E-10	1.0006-10	1.0006-10	
1.000E-10	1 0000-10	1 0000-10	1 000 E - 10	1 0000-10	
$\perp I = 0$	1.0006-10	1.0006-10	1.000E-10	1.0008-10	
1.000E-10	1 0000 10	1 0000 10	1 0000 10	1 0000 10	
$\perp Y = 4$	T.000E-I0	T.000E-I0	T.OOOF-IO	T.000E-I0	
T.000E-I0	1 ೧೧೧೯ 10	1 0000 10	1 000-0-10	1 0000-10	
LI = 2	1.0008-10	T.000E-10	I.UUUE-IU	T*0000-T0	
1.000E-10 TV-	1	2	۲ ۲	7	q
FTELD VAI	UES OF BLOK	5	\sim	,	2

IY = 10	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
IY= 8	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
I.000E+00 IY= 6	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00 IY= 4	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00 IY= 2	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00 IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF TEM1				
IY = 10 2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
IY = 8 2 500F+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
IY = 6	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
IY = 4	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01 IY= 2	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01 IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF DEN1				
IY= 10 1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY= 8 1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY= 6 1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY = 4 1 000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY = 2 1 000F-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF PRPS				
IY= 10 6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
IY= 8 6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
IY= 6 6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
IY = 4 6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
IY = 2 6 700F+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
IX=	1	3	5	7	9
* * * * * * * *	INTTIAL FI	[ELDS ****	* * * *		
FLOW FIEL	D AT ITHYD=	1, IZ=	8, ISWEEP=	1, ISTEP=	1
IY = 10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY= 8	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	

1.000E - 10

\$

ł

.

ł

IY= 6	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
I = 4	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
I = 2	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IX=		3	5	7	9
$\begin{array}{rcl} \text{FIELD} & \text{VAL}(\\ \text{IY} = & 10\\ 1 & \text{OODE} & 10 \end{array}$	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY = 8	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY = 6 1 000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY = 4	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY = 2 1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VALU	1 000F-10	1 0008-10	1 0005-10	1 0008-10	
1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.0001.10	I.OOOL TO	
IY= 7	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	1 0000-10	1 0005-10	1 0000-10	1 0008-10	
11 = 5 1 000F = 10	1.0008-10	1.0006-10	1.0006-10	I.000E-10	
IY = 3	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 1	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	-	2	ŕ	-	0
$\perp X =$		3	5	/	9
EIELD VAL	UES OF WI	1 0000-10	1 0000-10	1 0005-10	
1 = 10	1.000E-10	T.000E-10	1.0006-10	1.000E-10	
TY = 8	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10		and and a set of the same set of			
IY= 6	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY = 4	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
I.000E-10 IY= 2	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.0006-10	1	3	5	7	q
IA- ETEID VAI	ITES OF BLOK	5	J	1)
TY = 10	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00	T • 0 0 0 m · 0 0	T * 0 0 0 m · 0 0			
IY= 8	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00					
IY= 6	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00					
IY = 4	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00	1 0000 000	1 000	1 00000.00	1 0005.00	
IY = 2	T.000E+00	1.000E+00	T.000E+00	T.000E+00	
T.000E+00	1	3	5	7	9
	-	-	~	·	<u> </u>

FIELD VAL	UES OF TEM1				
IY= 10	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01			o = o o = o d		
IY = 8	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01	2 5000+01	2 5005101	2 5000101	2 5005101	
2500E+01	2.3006+01	2.5006+01	2.3006+01	2.3006+01	
TY = 4	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01		2.0002.02			
IY= 2	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01					
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF DEN1	1 0000 10	1 000- 10	1 000- 10	
II = IU	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
T.000E-10	1 0005-10	1 0008-10	1 0000-10	1 0000-10	
1 0 0 F = 10	1.000E-10	1.0006-10	I.UUUE-IU	1.0006-10	
TV = 6	1 000E - 10	1 0005-10	1 000F-10	1 000E - 10	
1.000E - 10	1.0000 10	1.0001 10	1.0000 10	1.0001 10	
TY = 4	1.000E - 10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E - 10	
1.000E-10			T * * * *		
IY= 2	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF PRPS				
IY = 10	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01		C 700m 01	C 7007 01		
LY = 8	6./UUE+UI	6./UUE+UI	6./UUE+UI	6.700E+01	
U.700E+01	6 7008+01	6 7005+01	6 7005+01	6 700E+01	
6 700E+01	0.700101	0.7000,01	0.7000.01	0.7001.01	
IY = 4	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01					
IY= 2	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01					
IX=	1	3	5	7	9
	INITIAL FI	$\begin{array}{ccc} \text{ELDS} & & & & \\ & 1 & & & \\ & 1 & & & \\ \end{array}$		1 TOBED-	1
FLOW FIEL	JU AT ITHID=	1, 12= 1	J, ISWEEP=	1, ISIMP=	T
TY = 10	1 000E-10	1 000E-10	1 000E - 10	1.000E - 10	
1.000E - 10	T.0001 TO	T.OOOD IO	T*0001 TO	T * 0 0 0 m n 0	
IY= 8	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 6	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY = 4	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 2	1.000E - 10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	-	~	-	~7	~
		3	5	1	9
TV= 10	LUES OF UL 1 000F-10	1 0005-10	1 0005-10	1 0008-10	
1,000E-10	7°0000-10	T.0000-10	T.000m TO	7.0000 70	

L					
IY= 8	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY= 6	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	1 0005 10	1 0005 10	1 0005 10	1 0007 10	
1.000E-10	1.0006-10	I.000E-10	I.000E-10	I.000E-10	
IY = 2	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF V1				
IY= 9 1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY = 7	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
I.000E-10 IY= 5	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10	1 0000 10	1 00000 10	1 0000 10	1 0000 10	
1.000E-10	1.000E-10	1.0008-10	T.000E-10	1.000E-10	
IY= 1	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
I.000E-10 IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF W1				
FIELD VAL	UES OF BLOK				
IY = 10	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
IY= 8	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00	1 0002+00	1 00000+00	1 00000+00	1 0005+00	
1.000E+00	1.0002+00	1.0005+00	1.0002100	1.000100	
IY= 4 1 000F+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
IY= 2	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00 TX=	1	r	Ē.	7	9
	דדר הדי ידיאו	0	Ŭ	*	
IY = 10	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01	2 500E+01	2 500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01					
IY= 6 2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
IY = 4	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01 IY= 2	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01	4	2	c	7	0
		3	5	1	9
FIELD VAL IY= 10	LUES OF DEN1 1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					
IY= 8 1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
IY= 6	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10 IY= 4	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	1.000E-10	
1.000E-10					

IY= 2 1.000E-10 1.000E-10 1.000E-10 1.000E-10 1.000E-10 7 IX= 1 3 5 9 FIELD VALUES OF PRPS IY = 106.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 IY= 8 6.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 IY= 6.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 6 6.700E+01 IY= 4 6.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 6.700E+01 IY= 2 6.700E+01 IX= 1 3 5 7 9 TIME STP= 1 SWEEP NO= 125 ZSLAB NO= 5 ITERN NO= 1 TIME STP= 1 SWEEP NO= 125 ZSLAB NO= 2 ITERN NO= 1 FLOW FIELD AT ITHYD= 1, IZ= 2, ISWEEP= 125, ISTEP= 1 FIELD VALUES OF P1 1.871E-07 1.001E+03 1.001E+03 1.001E+03 IY = 101.001E+03IY= 8 4.707E-08 1.001E+03 1.001E+03 1.001E+03 1.001E+03 1.001E+03 IY= 6 4.376E-08 1.001E+03 1.001E+03 1.001E+032.926E-08 1.001E+03 1.001E+03 1.001E+03 IY = 41.001E+031.001E+03 1.001E+03 1.001E+03 IY== 1.983E-08 2 1.001E+037 5 9 3 IX= 1 FIELD VALUES OF U1 1.086E-05 4.297E-06 1,668E-06 IY = 102.482E-05 4.406E-07 IY= 1.324E-05 5.328E-06 2.071E-06 8 2.503E-05 5.478E-07 2.626E-06 IY= 6 2.221E-05 1.616E-05 6.740E-06 6.981E-07 3.329E-06 4 -6.667E-07 1.994E-05 8.519E-06 IY= 9.014E-07 IY= 2 -5.224E-05 2.618E-05 7.089E-06 3.310E-06 1.128E-06 IX= 3 5 7 9 1 FIELD VALUES OF V1 -1.492E-06 -4.472E-07 IY= 4.927E-01 -1.875E-07 9 9.407E-08 -5.753E-06 -1.919E-06 -8.075E-07 -IY =7 6.072E-01 4.056E-07
IY= 5	7.860E-01	-1.312E-05	-5.019E-06	-2.127E-06	400A
I.069E-06 IY= 3	9.524E-01	-2.782E-05	-1.326E-05	-5.635E-06	_
2.843E-06					
IY = 1 1.204E-05	9.960E-01	-1.673E-04	-5.703E-05	-2.263E-05	-
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAI	LUES OF W1				
IY = 10	3.467E-11	-1.523E-09	-2.532E-09	-1.507E-09	-
IY= 8	.000E+00	2.568E-09	-1.677E-09	-1.058E-09	_
8.272E-10 IY= 6	-4.946E-11	1.368E-08	1.590E-09	6.034E-10	
2.096E-10	E CCOP 11	2 2025 00	1 2625 00	7 2418-00	
4.343E-09	-2.000E-II	3.3036-08	1.303E-00	/.241E=09	
IY= 2	1.930E-11	9.896E-08	6.505E-08	3.633E-08	
2.262E-08	4	2	-	~~~,	0
LX=		3	5	/	9
IY = 10	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00					
IY= 8	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00	1 0005+00	1 00000+00	1 0005+00	1 00000+00	
1.000E+00	I.OUCTOU	1.0005-00	T.00017+00	I.OOULIUU	
IY = 4	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00	1 0007.00	1 000000000	1 000000000	1 00000000	
1 = 2 1.000E+00	1.0006+00	1.0008+00	1.0008+00	1.0005+00	
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VA	LUES OF TEM1				
IY = 10	2.515E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01	2 518F+01	2 5008+01	2 500F+01	2 500E+01	
2.500E+01		2.0000.01	2.0000.01		
IY= 6	2.522E+01	2.501E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01	2 5258+01	2 50317+01	2 501〒+01	2 501F+01	
2.502E+01		2.0000101	2.0011.01	2:0011,01	
IY= 2	2.529E+01	2.505E+01	2.503E+01	2.505E+01	
2.504E+01	1	<u>^</u>		7	0
LX= FIFID VA	LUIFS OF DENI	3	5	/	9
IY = 10	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03					
IY= 8	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
I.UUIE+03	1 001〒⊥03	1 0016103	1 0015+03	1 0018+03	
1.001E+03	T.OOTULOO	T. OUTETOS	T.OOTETOS	T.OOTELOO	
IY = 4	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03			4 ~~~ ~~	1	
LY= 2 1 001 F±03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	T.001E+03	
IX=	, 1	3	5	7	9

89

FIELD VAL	UES OF PRPS				
IY= 10	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
IY= 8	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01 IY= 6	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01 IY= 4	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01 IY= 2	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01					
IX=	1	3	5	7	9
* * * * * * * * *	*****	* * * * * * * * * * *	*****	*******	***
TIME STP= 1	= 1 SWEEP	NO= 125	ZSLAB NO=	4 ITERN NO=	
FLOW FIEI	D AT ITHYD=	1, IZ=	4, ISWEEP= 12	25, ISTEP=	1
FIELD VAL	JUES OF P1		1 00170.00	1 0017.00	
1Y = 10 1 001 E + 03	1.8/1E-07	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
IY= 8	4.707E-08	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03					
$IY = 6$ $1 0.01 F \neq 0.3$	4.376E-08	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
IY = 4	2.926E-08	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03 IY= 2	1.983E-08	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03			_	~	
IX=		3	5	/	9
IY = 10	2.479E-05	1.086E-05	4.298E-06	1.668E-06	
4.407E-07					
IY= 8	2.498E-05	1.324E-05	5.329E-06	2.071E-06	
5.4/8E-0/ IY= 6	2.209E-05	1.615E-05	6.740E-06	2.625E-06	
6.979E-07 TY= 4	-9.534E-07	1.993E-05	8.515E-06	3.326E-06	
9.009E-07					
IY = 2	-5.265E-05	2.615E-05	7.056E-06	3.293E-06	
1.123E-06 TX=	1	З	5	7	9
FIELD VAL	LUES OF V1	5	\sim	,	~
IY= 9	4.927E-01	-1.495E-06	-4.478E-07	-1.877E-07	
9.424E-08	6 0728-01	-5 7645-06	-1 9228-06	-8 0888-07	_
4.065E-07	0.0726-01	-0.104E-00	-1.9226-00	-0.0000-07	
IY = 5	7.860E-01	-1.314E-05	-5.029E-06	-2.132E-06	1000
IY = 3	9.524E-01	-2.786E-05	-1.330E-05	-5.656E-06	
IY = 1	9.960E-01	-1.677E-04	-5.721E-05	-2.273E-05	-
I.ZIIE-US	1	3	5	7	q

I.

FIELD VAL	UES OF W1				
IY= 10	5.787E-11	-1.658E-08	-5.914E-09	-3.134E-09	
2.216E-09					
IY = 8	4.650E-11	-1.597E-08	-6.249E-09	-3.397E-09	
2.465E-09	0 000 11	1 2027 00			
11= 0	2.003E-11	-1.383E-08	-6.590E-09	-3.862E-09	-
Z.004E-09	000F+00	-9 177F-09	-5 6/8F-09	-3 8268-09	_
$3_142E-09$.0001100	J. 4776 0J		0.0200	
IY = 2	.000E+00	7.150E-10	-7.443E-10	-1.481E-09	_
2.142E-09					
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF BLOK				
IY = 10	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00	1 0000.00	1 0000.00	1 00000.00	1 00000.00	
II = 8	I.000E+00	T.000E+00	1,000E+00	1.0008+00	
I.UUUE+UU	1 000〒上〇〇	1 0005+00	1 00000400	1 0005+00	
1 000E+00	T.000FL00	T.000E(00	T*000E+00	1.0001.00	
TY = 4	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00	T.000m.00	1.0001.00	T*0001,00		
IY= 2	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00					
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF TEM1				
IY = 10	2.515E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01	0 E100101	2 5000+01	ጋ ⊑∩ሰ⊽⊥∩1	2 5008+01	
⊥I 0 2 500F+01	Z.JIOE-UI	2.JUUETUI	Z.JUULTUI	2.0000101	
TY= 6	2.522E+01	2.501E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01					
IY= 4	2.525E+01	2.503E+01	2.501E+01	2.501E+01	
2.502E+01					
IY= 2	2.529E+01	2.505E+01	2.503E+01	2.505E+01	
2.504E+01	-	0		-	0
		3	5	1	9
TV- 10	JUES OF DENI 1 OOIFIOS	1 0016403	1 0018+03	1 001E+03	
1.001E+03	1.0012+05	T.OOTE102	1.0010100	T.0011.00	
IY= 8	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03					
IY= 6	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03					
IY = 4	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03	1 0015+02	1 001〒+02	1 0018+03	1 0010+03	
1 001E+03	1.0016+03	T.OOTE+03	1.0016+03	1.0011.00	
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAI	UES OF PRPS	5			
IY = 10	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01					
IY= 8	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01				~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~	
IY = 6	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6./UUE+0]					

		······································			
				6 7 6 6 7	
IY= 4 6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
IY= 2	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
IX=	1	3	5	7	9
* * * * * * * * *	* * * * * * * * * * * *	* * * * * * * * * * *	* * * * * * * * * * * * *	****	* * *
TIME STP= 1	1 SWEEP	NO= 125	ZSLAB NO=	5 ITERN NO=	
*****	* * * * * * * * * * * * *	* * * * * * * * * * *	* * * * * * * * * * * * *	****	* * *
TIME STP=	1 SWEEP	NO= 125	ZSLAB NO=	6 ITERN NO=	
FLOW FIEL	D AT ITHYD=	1, IZ=	6, ISWEEP= 12	25, ISTEP=	1
FIELD VAL TY= 10	UES OF P1 1.871E-07	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03			1.0012.00		
IY = 8	4.707E-08	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
IY = 6	4.376E-08	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03	2 9265-08	1 001〒+03	1 001F+03	1 001E+03	
1.001E+03	2.J20E 00	1.0012:00	1.0011.00	T.0011.00	
IY = 2	1.983E-08	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF U1		4 2005 06	$1 \in COE = 0.6$	
1Y = 10 4.408E-07	2.481E-05	1.086E-05	4.299E-00	1.009E-00	
IY= 8	2.501E-05	1.325E-05	5.330E-06	2.072E-06	
5.479E-07 IY= 6	2.213E-05	1.616E-05	6.742E-06	2.626E-06	
6.981E-07					
IY = 4 9.012E-07	-9.055E-07	1.994E-05	8.519E-06	3.328E-06	
IY= 2	-5.259E-05	2.616E-05	7.065E-06	3.296E-06	
1.123E-06	1	З	۲.	7	9
FIELD VAI	LUES OF V1	5	~	,	2
IY= 9	4.927E-01	-1.495E-06	-4.472E-07	-1.874E-07	
9.395E-08 IY= 7	6.072E-01	-5.763E-06	-1.920E-06	-8.076E-07	87 7
4.055E-07	7 9605-01	_1 21/ 5_05	-5 0268-06	-2 1295-06	574
1.071E-06	7.000E-01	-T.JTAD OO	-0.020E 00	2.127000	
IY = 3	9.524E-01	-2.786E-05	-1.329E-05	-5.650E-06	#2003
2.053E-06 IY= 1	9.960E-01	-1.676E-04	-5.718E-05	-2.271E-05	-11070
1.210E-05	1	3	ج ج	7	a
FIELD VAL	LUES OF W1	J	5	1	ש

Capítulo 5 Estrutura da "cfd" - reatores de polimerização

ŀ

IY= 10	8.213E-11	-3.158E-08	-8.233E-09	-4.127E-09	
2.846E-09				uk Wi unter Annal ∕ Annadi ur ur	
IY= 8 3 806E-09	8.352E-11	-3.585E-08	-1.034E-08	-5.417E-09	
IY = 6	8.178E-11	-4.593E-08	-1.605E-08	-8.924E-09	-
1Y = 4	4.576E-11	-6.208E-08	-2.990E-08	-1.780E-08	
1.298E-08 IY= 2 -	-1.546E-11	-1.064E-07	-6.963E-08	-4.391E-08	*****
3.227E-08					
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF BLOK	1 000-	1 0007.00	1 0007.00	
1Y= 10 1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
IY = 8	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
T.000E+00		1 00000000	1 00000000	1 0000000	
1Y= 6 1.000E+00	1.000E+00	1.0002+00	1.000±+00	1.000E+00	
IY = 4	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00 TY= 2	1.000E+00	1.0005+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00	T .000 T ,00	T.00001.00			
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF TEM1				
IY = 10	2.515E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
IY= 8	2.518E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01					
IY = 6	2.522E+01	2.501E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01 IY= 4	2.525E+01	2.503E+01	2.501E+01	2.501E+01	
2.502E+01					
IY = 2	2.529E+01	2.505E+01	2.503E+01	2.505E+01	
2.504E+01 IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF DEN1				
IY = 10	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03 TY = 8	1 001E+03	1 001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03	**********				
IY= 6	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
I = 4	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03					
IY = 2 1 001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF PRPS		~		-
IY= 10	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01	6 700F±01	6 700F±01	6 7005101	6 700F±01	
6.700E+01	0./UUETUI	0./UUE+UI	0./UULTUI	U./UVETUI	
IY= 6	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01					

Capítulo 5	Estrutura da	"cfd" - reat	ores de polim	erização	
IY = 4	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
IY = 2	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
IX=	1	3	5	7	9
*****	* * * * * * * * * * * *	****	*****	* * * * * * * * * * * * *	* * *
TIME STP=	1 SWEEF	NO= 125 2	SLAB NO=	8 ITERN NO=	-
FLOW FIEL	D AT ITHYD=	1, IZ= 8	3, ISWEEP= 12	25, ISTEP=	1
IY = 10 1 001F+03	1.871E-07	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
IY = 8	4.707E-08	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
I.001E+03 IY= 6	4.376E-08	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
I.001E+03 IY= 4	2.926E-08	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03 IY= 2	1.983E-08	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03 IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF U1				
IY= 10 4.408E-07	2.489E-05	1.087E-05	4.300E-06	1.669E-06	
IY= 8 5.481E-07	2.511E-05	1.326E-05	5.332E-06	2.072E-06	
IY= 6 6.984E-07	2.228E-05	1.618E-05	6.745E-06	2.627E-06	
IY = 4 9 024E = 07	-6.142E-07	1.997E-05	8.529E-06	3.332E-06	
IY = 2 1 128F-06	-5.220E-05	2.621E-05	7.107E-06	3,315E-06	
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF V1				
IY= 9 9.329E-08	4.927E-01	-1.491E-06	-4.456E-07	-1.865E-07	
IY= 7 4.029E-07	6.072E-01	-5.750E-06	-1.914E-06	-8.039E-07	_
IY= 5 1.064E-06	7.860E-01	-1.312E-05	-5.010E-06	-2.120E-06	****
IY= 3 2.832E-06	9.524E-01	-2.781E-05	-1.325E-05	-5.623E-06	Maana
IY= 1 1.202E-05	9.960E-01	-1.672E-04	-5.702E-05	-2.261E-05	##000 [#]
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAI	LUES OF W1				
IY= 10 1.811E-09	1.083E-10	-2.750E-08	-5.959E-09	-2.785E-09	-
IY = 8 2 803E-09	1.189E-10	-3.289E-08	-8.146E-09	-4.135E-09	
IY = 6 5.467E-09	1.263E-10	-4.560E-08	-1.446E-08	-7.832E-09	4085-

IY = 4	7.841E-11	-6.613E-08	-3.089E-08	-1.807E-08	
IY = 2 3 632F-08	-1.913E-11	-1.288E-07	-8.504E-08	-5.165E-08	
TX=	-t	З	5	7	9
FIELD VAI	LUES OF BLOK	0			~
IY = 10	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
IY= 8	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00 IY= 6	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00 TY= 4	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00					
IY= 2	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00	1	2	P ¹⁰⁰	1	0
		3	5	/	9
FIELD VAL	LUES OF TEMI	0 5000.01	0	0 5007.01	
1Y = 10	2.515E+01	2.500E+01	2.5008+01	2.500E+01	
2.500E+01	2 518F±01	2 5008+01	2 5008+01	2 5000+01	
2500E+01	Z.JIOGTUI	2.3006-01	2.0006101	2.0000101	
IY = 6	2.522E+01	2.501E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01			······································		
IY = 4	2.525E+01	2.503E+01	2.501E+01	2.501E+01	
2.502E+01					
IY= 2	2.529E+01	2.505E+01	2.503E+01	2.505E+01	
2.504E+01			_		
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VA	LUES OF DEN1			1 0015.00	
IY = 10	1.001E+03	1.001E+03	1.0016+03	1.001E+03	
1.001E+03	1 0010000	1 001 100	1 0010+03	1 0015403	
1 001E+03	1.0016+03	T.0016+03	T.OOIE+03	T.0017-03	
TV = 6	1 0018+03	1 001E+03	1 001E+03	1.001E+03	
1.001E+03	T.00111.00	1.001D.00	1.0011.00		
IY = 4	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03					
IY= 2	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03		_	_	-	
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VA	LUES OF PRPS		C	C 7000.01	
$\pm Y = \pm U$	6./00E+01	6./UUE+U1	6./UUE+UI	6./UUE+UI	
0.700E+01	6 7000101	6 7008401	6 700F±01	6 7005+01	
11 = 0 6 700 $\pi \pm 01$	6./UUE+UI	6./UUE+UI	0./UUE+UI	0.7006+01	
TV= 6	6 7005+01	6 700E+01	6 700E+01	6 700E+01	
6.700E+01	0.7001.01	0.7000101	0.7001.01	0.7000.01	
$TY = \Lambda$	6 7008+01	6 7በበፑ+በ1	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01	0.1000107	0.100m10T	0 , ,00 <u>,</u> ,0 <u>,</u>	~ · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
IY= 2	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01	ina ar i na narananar i na anto.			· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
IX=	1	3	5	7	9

1

I

I.

TIME STP= 1	1 SWEEP	NO= 125 2	ZSLAB NO=	10 ITERN NO=	
FLOW FIEL	D AT ITHYD=	1, IZ= 10	0, ISWEEP= 12	25, ISTEP=	1
IY= 10	1.871E-07	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03 IY= 8	4.707E-08	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03		1 0015102	1 0015:02	1 0015102	
1.001E+03	4.5706-00	1.0016+03	T.OOIE+00	1.0016+05	
IY = 4 1.001E+03	2.926E-08	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
IY = 2	1.983E-08	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
I.001E+03 IX=	1	3	5	7	9
FIELD VAL	UES OF Ul				
IY = 10	2.504E-05	1.088E-05	4.301E-06	1.669E-06	
IY= 8	2.531E-05	1.327E-05	5.333E-06	2.072E-06	
5.481E-07 IY= 6	2.252E-05	1.620E-05	6.748E-06	2.628E-06	
6.985E-07 TY= 4	-2.266E-07	1_999E-05	8.536E-06	3.334E-06	
9.028E-07					
IY = 2	-5.171E-05	2.625E-05	/.146E-06	3.330E-06	
1.130E-06	1	2	E	7	Q
LA=		2	J	1	9
FIELD VAL	JUES OF VI	1 1078-06	-1 1195-07	-1 8628-07	
9.317E-08	4.927E-01	-1.48/E-00	-4.440 <u>c</u> -07	-1.002E-07	
IY= 7 4 019E-07	6.072E-01	-5.739E-06	-1.910E-06	-8.021E-07	NNEO-
IY = 5	7.860E-01	-1.310E-05	-4.998E-06	-2.113E-06	-
I.060E-06 IY= 3	9.524E-01	-2.778E-05	-1.321E-05	-5.603E-06	
2.819E-06 TY= 1	9.960E-01	-1.668E-04	-5.684E-05	-2.251E-05	400.50
1.195E-05	~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~	2	5		0
IX =		3	3	1	2
FIELD VAL	JUES OF WI				
FIELD VAL	TOFR OF RTOK	1 000000000	1 00000000	1 00000000	
1Y = 10 1.000E+00	1.000E+00	1.0008+00	I.000E+00	1.0006+00	
IY= 8	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
IY= 6	1.000E+00	1.000E+00	1,000E+00	1.000E+00	
1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
1.000E+00	1.00001000	1.000	1 000	1 0005:00	
IY= 2 1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	
IX=	1	3	5	7	9

FIELD VALUES OF TEM1

9

Ł

.

IY= 10 2 500F+01	2.515E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
IY= 8 2.500E+01	2.518E+01	2.500E+01	2.500E+01	2.500E+01	
IY = 6	2.522E+01	2.501E+01	2.500E+01	2.500E+01	
2.500E+01 IY= 4	2.525E+01	2.503E+01	2.501E+01	2.501E+01	
2.502E+01	2 529E+01	2 505E+01	2 503E+01	2 505E+01	
2.504E+01		2.0000000	2.00000.01	2.00001.01	
IX=	1	3	5	7	9
TY = 10	1 001E+03	1 001E+03	1 001E+03	1 001E+03	
1.001E+03		1.0011.00	T*00mm,00	T.0011,00	
IY= 8 1 001F+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
IY = 6	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
1.001E+03 TY = 4	1 0018+03	1 001F+03	1 001F+03	1 001E+03	
1.001E+03	T.0011100	1.0016100	T.0011103	1.0011.00	
IY = 2	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	1.001E+03	
IX=	1	3	5	7	9
FIELD VALU	JES OF PRPS				
IY = 10	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
IY= 8	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01 IY= 6	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01		<i>a</i>		C 7007.01	
IY = 4 6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6./UUE+UI	6./UUE+UI	
IY = 2	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	6.700E+01	
6.700E+01 TX=	1	3	5	7	9
± 4 2	***	`	~	·	
******** TIME STP=	**************************************	NO= 125	************* ZSLAB NO=	1 ITERN NO=	
Ţ					
Whole-fie	ld residual	sum(s) befo	re solution		
Resref va	lues determi	ned by EART	H		
variable	resref	(res sum)/re	sref		
P1	7.217E-02	5.580E-01			
U1	3.362E-02	1.504E+01			
W 1	4.950E=02 1.405E=09	1 030E+06			
TEM1	7.815E+03	1.021E+00			
Net sourc	e of U1 at	z patch name	d: FREESA2	= 1.121E+04	
Net sourc	e of Ul at	t patch name	d: OUTA2	=-1.560E-01	
Net sourc Net sourc	e of V1 a e of V1 a	t patch name t patch name	d: FREESA2 d: OUTA2	= 1.092E+04 =-7.255E+03	

Net source of V1 at patch named: WALL2 = -8.802E - 02= .000E+00 Net source of W1 at patch named: FREESA2 Net source of W1 at patch named: OUTA2 =-4.682E-07Net source of W1 at patch named: WALL2 =-6.754E-13Net source of R1 at patch named: FREESA2 = 1.121E+04Net source of R1 at patch named: OUTA2 =-1.121E+04Net source of TEM1 at patch named: FREESA2 = 3.638E+09 Net source of TEM1 at patch named: OUTA2 =-3.640E+09 Net source of TEM1 at patch named: WALL2 = 2.194E+06spot values vs sweep or iteration number 5 IZMON= 5 TIMESTEP= IXMON= IYMON= 5 1 Tabulation of abscissa and ordinates... ISWP P1 U1 V1 W1 TEM1 1.000E-10 8.258E-04 6.680E-04 -1.668E-05 2.500E+01 1 1.385E+03 -2.302E-04 -9.629E-05 1.643E-06 7 2.501E+01 8.166E+02 -2.372E-05 -2.035E-05 2.427E-07 2.500E+01 13 1.083E+03 1.015E-04 2.001E-05 -6.980E-07 2.501E+01 19 25 9.655E+02 -5.783E-05 -3.311E-05 4.979E-07 2.501E+01 31 1.015E+03 5.854E-05 7.418E-06 -3.803E-07 2.501E+01 37 9.955E+02 -1.411E-05 -1.706E-05 1.642E-07 2.501E+01 43 1.002E+03 2.542E-05 -2.812E-06 -1.357E-07 2.501E+01 1.000E+03 4.080E-06 -9.745E-06 2.306E-08 49 2.500E+01 2.500E+01 55 1.001E+03 1.386E-05 -5.890E-06 -5.232E-08 2.500E+01 61 1.001E+03 8.669E-06 -7.304E-06 -1.478E-08 1.000E+03 1.043E-05 -6.323E-06 -2.933E-08 2.500E+01 67 1.001E+03 9.204E-06 -6.420E-06 -2.127E-08 2.500E+01 73 79 1.001E+03 9.256E-06 -6.098E-06 -2.272E-08 2.500E+01 85 1.001E+03 8.862E-06 -5.959E-06 -2.064E-08 2.500E+01 1.001E+03 8.654E-06 -5.776E-06 -1.990E-08 2.500E+01 91 2.500E+01 1.001E+03 8.424E-06 -5.623E-06 -1.889E-08 97 103 1.001E+03 8.219E-06 -5.479E-06 -1.791E-08 2.500E+01 1.001E+03 8.036E-06 -5.343E-06 -1.704E-08 109 2.500E+01 115 1.001E+03 7.864E-06 -5.219E-06 -1.620E-08 2.500E+01 7.709E-06 -5.102E-06 -1.544E-08 2.500E+01 121 1.001E+03 ' V1 W1 VARIABLE P1 U1 TEM1 MINVAL= 1.000E-10 -2.302E-04 -9.629E-05 -1.668E-05 2.500E+01 MAXVAL= 1.385E+03 8.258E-04 6.680E-04 1.643E-06 2.501E+01 CELLAV= 9.652E+02 3.804E-05 2.122E-05 -7.425E-07 2.500E+01 1.00 V.W.+..T.+..T.+...+...+...+...+...+...+ Τ Т ТΤ Т.Т Τ Т WΤ ΤT ТТ ТТ ТТ WW WW WW .90 + W W .80 + Ρ +

. T P

ł

,

.90 +

W

.70 +		Ρ	Ρ	Р	P P	P	Ρ	Ρ	Р	Ρ	₽	Ρ	Р	Ρ	Ρ	Р	
<u> </u>	Ð															•	
.60 +	£															-	
.50 +																-	
																•	
.40 +																+	
٠																٠	
.30 +		U		* *				~ •		* *	* *	* *			**	+	
20	ΤŦ		U	U	U TT	I U	U	Ų	U	U	U	U	U	Ų	U	Ų	
.20 +	U	V II	U V		U											+	
.10 +	V	v	v	V	v v	vv	V	V	V	V	V	V	V	V	V	v	
•																٠	
.00 T	V.+	+	• • + •		+	.+.	• •	•+•	• •	.+.	••	. + .	e o	•+		•+	
0	• 1	. 2	.3_	•	4	.5	-	.6		.7		.8	4	.9	1	.0	
the ab:	scissa	15	I	SWP	• n	nin=	=]	.00)上十1	00	ma:	<u> </u>	1.	211	<u>+</u> +0	2	
*****	*****	****	****	***	****	***	**	***	***	***	**	* * *	**	**:	* * *	* * * *	**
*****	******	****	****	* * *	* * * *	***	**	***	· * *	* * *	**	* * *	**	**	* * *	****	* * *
residu	als vs	sweep	or	ite	rati	Lon	nu	mbe	er								
		1															
Tabula	tion of	absc	issa	ar	d or	cdir	nat	es.	• • •								
ISWP		P1			U1			Ţ	/1	_			W1				TEM1
1	9.561E	+02	1.00	9E+	12	9.0)77	E+1	11	5.	55	9E+	-04		7.7	19E-	-12
7	3.697E	+00	1.63	7E+	05	3.2	268	E+()5	1.	11	6E+	-06		6.3	87EH	-00
13	3.032E	2+00	9.48	1E+	04	3.6	548	E+()5 55	1.	.35	0E+	-06		5.3	26E4	F00
19	2.510E	2+00	3.53	115+	04	3.0)24. 7 c f		15 55	1.	. 76	111-	-06		4.5	55E-	FUU
25	1,9705		1.30	10日† 14日日	·04 02	2.	100 106	出土(J D n E) う	11	861 750	-06 -06		4.0 ၁ ნ	305- 005-	FUU
) L 27	1.//ZE	1+00 1+00	2.95	가이뜨ㅋ \도땁그	-03	2.5	400 254	ロナ(下十()) 15	<u>د</u> د ج	44 37	/ይግ በፑገ	-00 -05		ン・J マーク	025- 215-	⊢00 ⊢∩∩
Δ3	1 3515	1+00 1+00	1 47	'8E4	-02	2.0	204 170	丘(王+(00 05	3	16	7E4	+05		2.2	211 124E-	+00
49	1.203F	1+00 1+00	3.62	,3E4	-02	1.0	901	日: (王+ (05	5	.06	4E-	+05		2.6	69E-	+00
55	1.102E	2+00	2.30)6E+	-02	1.	755	E+(05	6	.21	9E-	+05	i i	2.4	38E-	+00
61	1.010E	E+00	1.92	24E+	-02	1.	620	E+(05	7	.17	7E-	+05	,	2.2	233E-	+00
67	9.356E	E-01	6.96	56E+	-01	1.	501	E+(05	7	.84	2E-	+05)	2.0)54E·	+00
73	8.709E	E-01	7.27	74E+	-01	1.	392	E+	05	8	.63	4E-	+05)	1.8	93E-	+00
79	8.157E	E-01	2.02	24E+	-01	1.2	294	E+(05	9	.29	1E-	+05)	1.7	48E-	+00
85	7.6728	E-01	3.36	59E-	-01	1.2	205	E+1	05	9	.95	6E-	+05)	1.6	523E	+00
91	7.247E	E-01	1.88	34E-	-01	1.	124	E++	05	1	.11	6E-	+06		1.5	522E	+00
97	6.870E	E-01	2.20	55E-	+01	1.	050	E+	05	1	.07	1E-	+06		1.4	129E	+00
103	6.536H	5-01	1.86	58E-	-01	9.	814	E+1	04	9	.18	1E-	+05)	1.2	196E	+00
109	6.23/h	5-01 7 01	1.83	30円- 7日で	FUL	9.	186 606)比十 [[]	04	1 7	د⊥. حم	UE-	+06 105	> :	1.2	123世 ⁻ 155世	+00
121	5.969E		1.0	/ つ比- 7 つむ.		ð. o	000 060)上十)で⊥	04 07	1	.97 00	OE-	+03 +06) ;	1.1	100E	+00 +00
VART	D. 7201 ART.F	7-01	т.J. р1	/ JE-	rUI	о. тт1	005	<u>ה</u> ד	04	T V	・0 ゴ 1	0E.	τυc	,	1.C	1095	+00
TEM1	النبة فساد مساسف عد		<u>ь</u> т			ΟT				¥	- J				**		
 МТ	NVAL= -	-5.57	3E-01		2.75	5E+	00	1	.13	30E	+01		1.(93	E+()1	
6.697E-	.02	~ • • • •		- •													
MA	XVAL=	6.86	3E+0(0	2.76	4E+	01	2	.75	53E	+01		1.5	514	E+(01	
2.967E+	-01																
1.00 T	+.	W.	+		.+	+	• • •	+		. +	e 5 0	•+		+	•••	• • +	
•																٠	

+

* .80 + W +W .70 + W W WW W W WW W Ŵ Ŵ .60 + W + W W .50 + W +.40 + W +υυ .30 + U + Р U .20 + Ρ Ρ U ╋ Р ΡU U .10 +VV V V UΡ υυ VV Т Т Τ ТТ ТТ ТΥ Vυ Ρ Т .00 W....+. +....T..T.T..T.T..T.T..T..T..T. .+...+ .7 0 .1 .2 .3 .4 .5 .6 .8 .9 1.0 ISWP. min = 1.00E + 00 max = 1.21E + 02the abscissa is 1 ; LIBRARY REF.= 0 SATLIT RUN NUMBER = RUN COMPLETED AT 10:15:52 ON WEDNESDAY, 18 DECEMBER 1996 MACHINE-CLOCK TIME OF RUN = 53 SECONDS. TIME/(VARIABLES*CELLS*TSTEPS*SWEEPS*ITS) = 8.480E-05**AP - C5 - B :** Apresentação de algumas telas de trabalho no unix ou o procedimento de chamada do pacote PHOENICS 2.1 da FEM (Faculdade de Engenharia Mecânica) para a FEQ (Faculdade de Engenharia Química). /home/dpg/vf/bin/xneko: [1] 4203 Command not found. [1] Exit 1 /home/dpg/vf/bin/xneko -geometry $165 \times 80 + 460 + 0$ louco.feg.unicamp.br - vf[1]: ypcat hosts 143.106.38.21 anjinho.feq.unicamp.br anjinho # pc sifeq lopca.feq.unicamp.br lopca # Rubens 143.106.38.17 143.106.38.10 magali.feq.unicamp.br magali 143.106.38.9 papa-capim.feq.unicamp.br papa-capim bidu.feq.unicamp.br bidu 143.106.38.6 143.106.38.1 monica.feq.unicamp.br monica loghost mailhost 143.106.1.23 feq.unicamp.br feq 127.0.0.1 localhost 143.106.38.18 dtf.feg.unicamp.br dtf 143.106.38.14 xaveco.feg.unicamp.br xaveco # pc sifeq 143.106.38.13 dtp.feq.unicamp.br dtp 143.106.38.11 zelele.feq.unicamp.br zelele chico-bento.feq.unicamp.br chico-bento 143.106.38.8 143.106.38.7 ze-vampir.feg.unicamp.br ze-vampir

)

I

143.106.38.5 piteco.feq.unicamp.br piteco 143.106.38.4 penadinho.feg.unicamp.br penadinho 143.106.38.3 louco.feq.unicamp.br louco 143.106.39.20 lpt.feq.unicamp.br lpt # Maria Alvina 143.106.38.22 nt.feq.unicamp.br nt # sub-rede NT - Graduacao 143.106.38.19 lopo.feq.unicamp.br lopo # Reginaldo 143.106.38.16 lmspq.feq.unicamp.br lmspg # Milton 143.106.38.15 bla.feq.unicam.br bla # sub-rede do Bloco A 19.129 -- 19.190 143.106.38.12 desq.feq.unicamp.br desq horacio # sub-rede DESQ 19.1 -- 19.62 143.106.38.2 cebolinha.feg.unicamp.br cebolinha louco.feq.unicamp.br - vf[2]: nslookup louco Server: feq.unicamp.br Address: 143.106.38.1 louco.feq.unicamp.br Name: Address: 143.106.38.3 louco.feq.unicamp.br - vf[3]: xhost + all hosts being allowed (access control disabled) louco.feq.unicamp.br - vf[4]: telnet 143.106.9.72 Trying 143.106.9.72 ... Connected to 143.106.9.72. Escape character is '^]'. HP-UX ncc1701 A.09.01 A 9000/735 (ttys3) login: atlantic Password: Please wait...checking for disk quotas (c)Copyright 1983-1992 Hewlett-Packard Co., All Rights Reserved. (c)Copyright 1979, 1980, 1983, 1985-1990 The Regents of the Univ. of California (c)Copyright 1980, 1984, 1986 Unix System Laboratories, Inc. (c)Copyright 1986-1992 Sun Microsystems, Inc. (c)Copyright 1985, 1986, 1988 Massachusetts Institute of Technology (c)Copyright 1986 Digital Equipment Corp. (c)Copyright 1990 Motorola, Inc. (c)Copyright 1990, 1991, 1992 Cornell University (c)Copyright 1988 Carnegie Mellon RESTRICTED RIGHTS LEGEND Use, duplication, or disclosure by the U.S. Government is subject to restrictions as set forth in sub-paragraph (c)(1)(ii) of the Rights in Technical Data and Computer Software clause in DFARS 252.227-7013.

> Hewlett-Packard Company 3000 Hanover Street

ł

ł

ł

ŧ

ł

ŧ

ŀ

Palo Alto, CA 94304 U.S.A.

Rights for non-DOD U.S. Government Departments and Agencies are as set forth in FAR 52.227-19(c)(1,2).

UNICAMP

FACULDADE DE ENGENHARIA MECANICA

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE PETROLEO

BENVINDO A HP S P O C K

ATENCAO: O uso das areas e' de responsabilidade do usuario, altere sua password periodicamente e a mantenha de seu conhecimento exclusivo.

You have mail. Usando HP Disk quotas for atlantic (uid 11495): Filesystem usage quota limit timeleft files quota limit timeleft /tmp mnt/homes/lotus 47 0 263 20000 21000 0 biff: Command not found. atlantic.ncc1701{1}:setenv DISPLAY 143.106.38.3:0.0 atlantic.ncc1701{2}:pc atlantic.ncc1701{3}:atlantic.ncc1701{3}:ypcat hosts 143.106.36.133 coorde.cepetro.unicamp.br coorde 143.106.36.129 dollar.cepetro.unicamp.br dollar F40.sifem.fem.unicamp.br F40 f40 uxfem01 143.106.21.193 lotus.dep.fem.unicamp.br lotus 143.106.9.89 143.106.9.69 scott.dep.fem.unicamp.br scott scott.dep 143.106.9.68 uhura.dep.fem.unicamp.br uhura uhura.dep 143,106.9,13 dep dep.fem.unicamp.br loghost 143.106.9.8 calibra calibra.fem.unicamp.br 143.106.9.4 spirit.fem.unicamp.br spirit uxfem04 143.106.9.3 corvette.fem.unicamp.br corvette uxfem03 143.106.1.5 obelix obelix.unicamp.br ccsun ccsun.unicamp.br 127.0.0.1 localhost 143.106.9.73 columbia.dep.fem.unicamp.br columbia.dep columbia 143.106.9.72 ncc1701.dep.fem.unicamp.br ncc1701 ncc1701.dep 143.106.9.70 mccoy.dep.fem.unicamp.br mccoy mccoy.dep 143.106.9.66 jaguar jaguar.dep.fem.unicamp.br uxfem66 143.106.9.20 landau.fem.unicamp.br landau uxfem20 143.106.9.17 F1000.fem.unicamp.br F1000 uxfem17 143.106.9.12 chaparral.fem.unicamp.br chaparral uxfem12 143.106.9.11 dpm.fem.unicamp.br dpm countach uxfem11 143.106.41.2 depadilson.dep.fem.unicamp.br depadilson 143.106.1.57 cepetro.unicamp.br cepetro 143.106.9.7 rx7.fem.unicamp.br rx7 uxfem07

I

ł

i

.

celica.fem.unicamp.br celica uxfem06
mustang.fem.unicamp.br mustang uxfem05
de23.fem.unicamp.br de23
<pre>spock.dep.fem.unicamp.br spock spock.dep</pre>
kirk.dep.fem.unicamp.br kirk uxfem31
saab saab.dep.fem.unicamp.br uxfem65
uxfem19.fem.unicamp.br uxfem19
gol.fem.unicamp.br gol uxfem18
fusca.fem.unicamp.br fusca uxfem16
dodge.fem.unicamp.br dodge uxfem15
dmc dmc.fem.unicamp.br prefet uxfem14
fee.unicamp.br fee diamante
carrera carrera.fem.unicamp.br
diablo.fem.unicamp.br diablo uxfem02
sifem.fem.unicamp.br sifem
D1{4}:

- reatores de polimerização capítulo 5 Estrutura da "cfd'

ł

i





----* ~ entrada no pacote PHOENICS v. - Tela de Figura AP-C5-1

100 March 100 Ma

	1 10	1	8
For the exact date of expiring see the line below the CHAM logo which contains the text "The code expiry date is the end of : ". To continue to use PHDENICS after that	date, send a completed Unlocking Request Form (including the node ID shown above) to CHAM. CCCCC HHHHHHHH COPUTICS Version 2.1.1 - SATELLITE CCCCCC HHHHHHHHH (C) Copyright 1995 18,04,1995 CCCCCCC HHHHHHHHH COncentration Heat and Momentum Lt. CCCCCCC HHHHHHHHH All rights reserved. CCCCCCC HHHHHHHHH All rights reserved.	CCCCCCC HHHHHH le1: 0181-34/-/651 CCCCCCCC HHHH Facsimile: 0181-879-3497 CCCCCCC HHH E-mail: phoenics@cham.demon.co.uk This program forms part of the PHOENICS installation for: CHAM	Next instruction, please; else M for menu, or END to end

"satellite". Figura AP-C5-2 - Tela de entrada para o pré-processador,



de visualização das opções (do menu) do "satellite". Figura AP-C5-3 - Tela



Figura AP-C5-4 - Tela de construção dos casos estudos, MAIN.









109





(F) Multi-Elock and FEEN	Gentra Library	(D) enter bibrary	furtà-e library	Hethour (libract	fielt Illusty	(%) tat Lihrary	(r) PISA HACOV	(J) coch thtacy		
	Lord tase	che libray	Body-fitted coordinates	ttvo plate flav	Numerical algorithm (*)	advaned witt-Phase flow	stanned mahalene undelt	Chemical reaction	W) authorities and years	

Figura AP-C5-8 - Opção "Library" do pré-processador "satellite".

runpha					
The ID of this node is 09622C49					
This code is valid for a limited period For the exact date of expiring see the line below the CHAM logo which contains the text "The code expiry date is the end of : ".					
To continue to use PHOENICS after that date, send a completed Unlocking Request Form (including the node ID shown above) to CHAM.					
CCCC HHHPHOENICS Version 2.1- PHOTONCCCCCCCC HHHHH(C) Copyright 199518.04.1995CCCCCCC HHHHHHHHHH(C) Copyright 199518.04.1995CCCCCCC HHHHHHHHHHHConcentration Heat and Momentum LtdCCCCCCC HHHHHHHHHHHAll rights reserved.CCCCCCC HHHHHHHHHHHAddress: Bakery House, 40 High StCCCCCCC HHHHHHHHHHHHWimbledon, London, SW19 5AUCCCCCCC HHHHHHHHHHHTel:0181-947-7651CCCCCCC HHHHFacsimile:0181-879-3497CCCC CCC HHHE-mail:phoenics@cham.demon.co.uk					
This program forms part of the PHOENICS installation for: CHAM The code expiry date is the end of : Aug 1995					
Press M for menu mode or RETURN for command mode					

Figura AP-C5-9 - Tela para entrada no pós-processador PHOTON.



Figura AP-C5-10 - Tela principal do pós-processador PHOTON, da qual são construídas as saídas gráficas.

Reatores tanques agitados utilizando modelos bidimensionais e tridimensionais

6.1 INTRODUÇÃO

Alguns requisitos se tornam importantes para que se tenha um reator agitado operando satisfatoriamente: distribuição uniforme de temperatura e de concentração ao longo do reator. Em sistemas poliméricos, o controle de temperatura se torna fundamental, pois a partir deste poderão ser formados polímeros com desejadas distribuições de seus pesos moleculares. Ou seja, a produção de polímeros de alta qualidade vai depender de um controle satisfatório de temperatura, o que resulta em uma distribuição de peso molecular estreita.

A fim de se atingirem esses objetivos, vale salientar que uma cinética de reação uniforme ao longo do tanque significa uma melhor transferência de calor para o sistema.

A variação da geometria ou localização de agitadores dentro do reator se constitui numa estratégia de se analisarem fluido-dinâmicos, como: zonas de recirculação, fenômenos características, quando vórtices, zonas mortas. Essas encontradas no sistema reacional, fornecem informações de como o fluido está se comportando dentro do reator e qual (quais) é (são) o(s) mecanismo(s) dominante(s) de troca térmica.

No presente capítulo, o estudo da fluido-dinâmica do poliestireno e da água será realizado. São utilizados modelos bidimensionais e tridimensionais durante as simulações. Algumas variações na localização do agitador , bem como em suas dimensões são feitas. As saídas gráficas das simulações através computacional PHOENICS versão 2.1 mostram do pacote 0 comportamento fluido-dinâmico dos casos estudos propostos. Vale a pena ressaltar que estes fenômenos podem ser analisados adequadamente em termos do impacto que causam na performance operacional do reator através das técnicas de CFD. De fato, tanto em sistemas de polimerização assim como em alguns processos biotecnológicos que sofrem significantes alterações viscosidade, por exemplo, na síntese de penicilina de (Rodrigues e Maciel Filho, 1996), a utilização de modelos simplificados do ponto de vista de escoamento pode prejudicar a tomada de decisões tanto em projeto quanto na definição de políticas operacionais.

6.2 IMPELIDOR TIPO DISCO

Os impelidores tipo disco podem ser aproximados por um modelo axissimétrico bidimensional (Nunhez, 1994). Considerase, neste caso, que o escoamento axial é invariável sobre qualquer seção vertical e adequadamente descrito pelos três componentes da velocidades em qualquer ponto.

6.3 CARACTERÍSTICAS DAS SIMULAÇÕES

As simulações no decorrer do capítulo terão como características principais de análise:

- Dimensionalidade do caso estudo;
- Agitador tipo disco;
- Variação do diâmetro do agitador;
- Variação da localização do impelidor, em relação ao fundo do tanque.

Para validar a metodologia aqui proposta são comparadas graficamente as linhas de corrente obtidas neste trabalho, tendo um disco como agitador, com os resultados de Street (Street, 1991), (Apêndice C6, AP-C6-A3).Notar que Street (Street, 1991) utilizou um agitador tipo turbina, porém, pode ser observada uma similaridade no tipo de formação de linhas de corrente.De fato, pode ser vista a formação de vórtices acima e abaixo do impelidor (tipo disco) do presente trabalho (Apêndice C6, AP-C6-A1, AP-C6-A2). Tal configuração é obtida quando se aumenta a velocidade de agitação do sistema, bem como guando se variam as dimensões do reator tanque agitado.As Figuras AP-C6-A1 e AP-C6-A2 vêm confirmar que existe significado físico nos simulados no presente capítulo.Descartam-se, resultados portanto, fenômenos fisicamente sem significado, como: passagem irregular de fluido através do agitador tipo disco (já que não existem perfurações em sua superfície).

O plano de observação das Figuras AP-C6-A1 e AP-C6-A2 é o z-y, correspondendo a uma visão lateral média do sistema.

Considerando-se que todas as simulações foram realizadas em um regime de escoamento laminar, a formação de vórtices está presente, porém, suas características não se assemelham aos conhecidos vórtices de Kármán (Sheridan, 1996), o que implicaria num regime de escoamento turbulento, diverso do que foi proposto e realizado no presente estudo.

As características de estabelecimento dos diversos casos estudos aqui propostos são mostradas e confirmadas pelas saídas gráficas obtidas através do pós-processador, Photon v. 2.0.

6.4 REATOR TANQUE AGITADO COM MODELO TRIDIMENSIONAL

A importância do modelo tridimensional em relação ao bidimensional está na qualidade de informação adicional que se obtém. Neste caso, a variação de campos na direção angular passa a ser estudada. Pode-se apresentar a equação do modelo tridimensional sob várias formas de representação das equações de Navier-Stokes. As equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia podem ser escritas sob a forma geral (Maliska, 1995):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho U_{r}\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho U_{z}\phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho U_{\theta}\phi) =$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma^{\phi}\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma^{\phi}\frac{\partial\phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma^{\phi}\frac{\partial\phi}{\partial z}\right) + S^{\phi}$$
(6.1)

onde t é o tempo, ρ densidade, ϕ campo escalar geral, Γ^{ϕ} representa o produto da difusividade pela massa específica da propriedade transportada em consideração (para as equações de Navier-Stokes $\Gamma^{\phi} = \mu$, viscosidade), U_r , U_z , U_{θ} velocidades radial, axial e tangencial, respectivamente, x, y, z coordenadas cartesianas e S^{ϕ} termo fonte.

Outra forma de representação do mesmo modelo tridimensional pode ser escrita de forma completa como (Tani, 1996):

$$\begin{split} \frac{Dv}{Dt} &= \nabla_{x} \cdot P + f - g_{0}e, \quad \nabla_{x} \cdot v = 0 \quad (x \in \Omega(t), t > 0), \\ v\big|_{t=0} &= v_{0}(x) \quad (x \in \Omega \equiv \Omega(0)), \\ Pn &= -p_{e}n + \sigma Hn \quad (x \in S_{F}(t), t > 0), \\ v &= 0 \ (x \in S_{B}, t > 0). \end{split}$$
(6.2)

Na verdade, a equação 6.2 representa um problema tridimensional onde é dado um domínio inicial $\Omega \subseteq \mathsf{R}^3$ (espaço tridimensional) com x₃ (coordenada na direção vertical) sendo o componente vertical e um campo de velocidade inicial, v₀ em Ω , existindo um domínio ocupado por um fluido que está "contornado" por um fundo fixo S_B (fundo do reator) e uma superfície livre S_F(t), com um vetor velocidade v=v(x,t) = (v₁, v₂, v₃) e a pressão p=p(x,t).

Aqui tem-se que f=f(x,t) é um campo vetorial de forças externas e uma pressão atmosférica $P_e=p_e(x,t)$ e eles são dados para x \in R^3 , t ≥ 0 (t é o tempo); $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \nabla_x$ é uma derivada material,

$$\nabla_{\mathbf{x}} = \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{1}}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{2}}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{3}}\right); \quad \mathbf{P} = \mathbf{P}(\mathbf{v}, \mathbf{p}) = -\mathbf{p}\mathbf{I} + 2\mathbf{v}\mathbf{D} \quad \text{é o tensor tensão,}$$

$$\begin{split} D=D\left(\nu\right) & \text{\'e} \text{ o tensor deformação de velocidade com elementos} \\ D_{jk} &= \frac{1}{2} \Bigg(\frac{\partial}{\partial x_k} v_j + \frac{\partial}{\partial x_j} v_k \Bigg) \left(j,k=1,2,3\right), \quad \text{I} \text{ \'e a matriz identidade de } \\ \text{grau 3; n na equação de } S_{\text{F}}(\text{t}) \text{ \'e o vetor unitário da normal à} \end{split}$$

 $S_{\rm F}(t)$; v é o coeficiente constante de viscosidade (a densidade do fluido é assumida como sendo igual a 1); σ (>0) é o coeficiente constante de tensão superficial; g_0 é a constante gravitacional; ${\rm H}/2$ = ${\rm H}(x,t)/2$ é a curvatura média da superfície livre $S_{\rm F}(t)$, assumida como negativa quando Ω é convexo em uma vizinhança de x; e=^t(0,0,1). Assume-se que p_e=0, já que se pode chegar a esse caso pela substituição de (p,f) na equação 6.2 por (p+p_e,f+\nabla p_e). À parte da condição dinâmica em $S_{\rm F}$ impõe-se uma condição cinemática :

$$\frac{\mathrm{DF}}{\mathrm{Dt}} = 0 \ \mathrm{em} \, \mathrm{S}_{\mathrm{F}}(\mathrm{t}) \tag{6.3}$$

se $S_F(t)$ for representada pela equação $F \equiv F(x, t) = 0$. R^3 representa um espaço vetorial de ordem 3.

Portanto,o modelo tridimensional se resume às equações de Navier-Stokes. Adicionalmente, outras formas de representação das mesmas equações acima podem ser encontradas em (Bird, 1960).

6.5 TABELAS EXPLICATIVAS DAS SIMULAÇÕES

Altura do Tanque	Н	4,0 m
Diâmetro do tanque	D	2,8 m
Alturas do Impelidor		
H_{i}	H/2	2,0 m
	H/3	1,33 m
Diâmetros do Impelidor		
D_i	D/2	1,4 m
	D/3	0,93 m
Diâmetro do eixo do impelidor		
("shaft"), D_s	Ds	0,22 m

Tabela 6.1 - Dimensões do reator e do impelidor

Tabela 6.2 - Tipos de casos estudos - Agitador tipo disco

Caso Estudo Tipo	T	II	III	IV
Hi	H/3	H/2	H/3	H/2
Di	D/3	D/2	D/2	D/3

Tipos de Casos Estudos	Material	Dimensão
IA	H ₂ O*	$2d^{\Delta}$
IB	H ₂ O	3d ^{AA}
IC	PS**	2d
ID	PS	3d
IIA	H ₂ O	2d
IIB	H ₂ O	3d
IIC	PS	2d
IID	PS	3d
IIIA	H ₂ O	2d
IIIB	H ₂ O	3d
IIIC	PS	2d
IIID	PS	3d
IVA	H ₂ O	2d
IVB	H ₂ O	3d
IVC	PS	2d
IVD	PS	3d

Tabela 6.3 - Tipos de casos estudos/simulações

* H₂O água

^A bidimensional

ΔΔ tridimensional

** PS poliestireno

[#] As figuras com a seguinte denominação: "Velocidades U, V, W, para o caso estudo tipo " significam velocidade U no canto inferior esquerdo, velocidade V no canto superior esquerdo e velocidade W no canto superior direito da tela, respectivamente.

Recurso computacional utilizado para a obtenção dos presentes resultados:

- Pacote de fluido-dinâmica computacional PHOENICS v. 2.1, CHAM - Concentration, Heat & Momentum LTDA. Copyright 1995.
- Estação de trabalho Sun Sparc 5 Sistema operacional UNIX, Ambiente OpenWindows versão 3.0.
- Microcomputador IBM, 16 MB de memória RAM, 100 MHz, 1.2 GB de disco rígido.
 - Editor de texto Microsoft Word for Windows95, versão 7.0.
 - Microsoft Power Point for Windows95, versão 7.0.
 - Microsoft Paint ShopPro for Windows95, versão 7.0.
- Impressoras Hewlett Packard Deskjet 660C, 550C.



6.6 SAÍDAS GRÁFICAS DAS SIMULAÇÕES (PÓS-PROCESSADOR)

Figura 6.1 Início da simulação do caso estudo tipo IA.









Figura 6.3 Final da simulação do caso estudo IA.



Figura 6.4 Velocidade U1, visão "full" (canto inferior esquerdo), visão "isolines" (canto superior esquerdo).Caso estudo IA.



Figura 6.5 Velocidade V1, visão "full" (canto inferior esquerdo), visão "isolines" (canto superior esquerdo).Caso estudo IA.

124 -3.58-3 -1.78-3 1.28-6 1.38-6 1.58-6 1.78-6 1.98-6 2.18-7 3.18-6 5.98-7 2.2E-B 2.38-6 4.08-7 7.78-3 9.6E-7 CHAM 2-3 ~ IM PHOTOH **MARKE** Summis. 13.1 **Each** and THUE Merchan Time letter Tep-file N organization of the second Var 2 Х **~~**-{ ø action 1 Plotting region The full Menu ; 25 4 Contour Plane:

(canto "isolines" visão "full" (canto inferior esquerdo), visão superior esquerdo).Caso estudo IA. 6.6 Velocidade Wl,

Figura

42

ന ന Ø Capítulo 6 Reatores tanques agitados utilizando modelos 2d






Figura 6.8 Final da simulação do caso estudo tipo IB.



caso estudo tipo IB. 0 para Velocidade Ul о. О Figura

-1.16-10 4.7.0 -5.68-10 PHOTON jų. Quat Dash () 🗸 Do gound liel State -5:6 FULL setuP chean Redrá $\overline{x} \in \mathbb{R}$, $\overline{x} \in \mathbb{R}$, $|\overline{x}| = |\overline{x}| = |\overline{x}| = |\overline{x}| = |\overline{x}| = |\overline{x}|$, $|\overline{x}| = |\overline{x}|$, LELAST Var Contour Nem WEIV TURE A Wile

7 de observação. IB, plano estudo tipo 0 Caso para de velocidade Ul Perti. 6.10 Figura

Continue

Stop

2 0E-00

F111

untline.

Plane X T Z PLANO

120

Ю М Ð 0 0 Reatores tanques agitados utilizando modelos w Capítulo

0 to t Do 0111 S 00-08 Shade Dash 0 Bohned Del (init) Set setur cheau Redin melline **TERISET** Ver burtair Ann CMR14 Willew Plane X Z Z Braw

Figura 6.11 Perfil de velocidade V1 para caso estudo IB.

129

თ Ø Reatores tanques agitados utilizando modelos 2d Capítulo 6

ന ന (į) Reatores tangues agitados utilizando modelos 2d G Capítulo



plano 7 de observação. 6.12 Velocidade V1 para caso estudo IB, Figura

. 130

1 - 1 28-7 1 58-7 1 18-7 2.4E-7 -1-68-4 MEHD Ю. व विश्वी DO 2, 08-03 Daah () Grand Del Et II Wiew setup clear Redrw RULL Set Shede WI Outline I BLAST Var Content Nerv Plane X Y Z Plano Fils Draw

Figura 6.13 Velocidade W1 para caso estudo tipo IB.

. ບ ຕ Ð 2 Q Reatores tangues agitados utilizando modelos Ś Capítulo



plano 7 de observação. estudo tipo IB, 0980 0980 bara Dara Velocidade W1 0.4 2 4 2 0 Figura



o caso estudo IB.Visão "full" Figura 6.15 Velocidades Ul, Vl, Wl para

استر (بری) (پی)



Figura 6.16 Velocidades U1, V1, W1 para o caso estudo IB; visão "isolines".



Figura 6.17 Início da simulação do caso estudo tipo IC.



Figura 6.18 Final da simulação do caso estudo tipo IC.



o caso estudo IC.Visão "full" para V_{r} W Figura 6.19 Velocidades U,

Ф Ф 6 Reatores tanques agitados utilizando modelos 2d Capítulo



Capítulo 6 Reatores tanques agitados utilizando modelos 2d e 3d

Figura 6.20 Início da simulação do caso estudo ID.



Figura 6.21 Final da simulação do caso estudo ID.



para o caso estudo ID. 2 Figura 6.22 Velocidades U, V,



Figura 6.23 Início da simulação do caso estudo tipo IIA.



Figura 6.24 Final da simulação do caso estudo tipo IIA.

Ν





Figura 6,25 Linhas de corrente para o caso estudo IIA. Visão "full".



Figura 6.26 Linhas de corrente para o caso estudo IIA. Visão "isolines".



Capítulo 6 Reatores tanques agitados utilizando modelos 2d e 3d

Figura 6.27 Velocidades U1, V1, W1 para o caso estudo IIA.Visão "full".



Capítulo 6 Reatores tanques agitados utilizando modelos 2d e 3d

Figura 6.28 Início da simulação do caso estudo IIB.



Figura 6.29 Final da simulação do caso estudo IIB.

T ta sha da da sa sana m-2.UE-1U 1.5E 10 ¥−1.18+1Ω -1.0E-10 IIBLAST File Draw View. setuP Reduw Conad . Qual t Contoer Menu-Set Del Do Platting region Style WF 1 MI 15 ZE 13 ZL 13 Dash 0 XI. 15 Shade ΧF. Plane Z 7 Z Pirno 13 2 05-03 Outline <u>Fill</u>

Capítulo 6 Reatores tanques agitados utilizando modelos 2d e 3d

Figura 6.30 Velocidade U1 para o caso estudo IIB. Planos 4 e 13 de observação.



3d Ð ъ С Reatores tanques agitados utilizando modelos 10 Capítulo

4 E - F THOTOM Πŋ Brish W DEL Shede scient cherte Reday full 101-Hel Set ALE 1. 115 N. 1. ALE 28: 1.3 ALE 1.5 mutine. TON I HI AS I bontour Nexu Plane 1: Witten Plane X X Z Illyrow 51 E 17

observação. 0 V (^^) r---i Φ 5.14 Planos caso estudo IIB. 0 bara d 6.32 Velocidade W1 erupta



Figura 6.33 Início da simulação do caso estudo tipo IIC.



Figura 6.34 Final da simulação do caso estudo tipo IIC.



Figura 6.35 Linhas de correntes para o caso estudo IIC. Visão "full".



Visão normal caso estudo IIC. O баra d ß 1 Ď 6.36 Velocidades Figura

1/ 11.11 -1.03-10 -1.08-10 CLEM PHOTOM funt. DO Int 14 DESH D concul Del Isolines full Set shade Reduw 27 1 | A. I. W. I. | A. I. | A. I. | A. I. oucline STRM setiP clear Var X 7 2 PINNO I Wlew Draw Plane File З.,

უ ო

ø

20. 20.

Reatores tangues agitados utilizando modelos

Q

Capítulo

o caso estudo IIC. Visão "isolines" 6.37 Linhas de corrente para Figura

₹) ₹) ;----(



Figura 6.38 Início da simulação do caso estudo IID.



Figura 6.39 Final da simulação do caso estudo IID.



caso estudo IID. para o Ń 2 6.40 Velocidades U, Figura



Figura 6.41 Início da simulação do caso estudo tipo IIIA.



Figura 6.42 Final da simulação do caso estudo tipo IIIA.


Figura 6.43 Velocidades Ul, V1, W1 para o caso estudo IIIA.Visão "full".



Figura 6.44 Início da simulação do caso estudo IIIB.



Figura 6.45 Final da simulação do caso estudo IIIB.



 \mathcal{A} estudo IIIB.Visão 0000 0 N.N.N. ر ۲ 6.46 Velocidades Figura

5.68 10 -1.1E-10D. 1011 Concol (011) PerspWU TEN UNI MOLTH 5 60-01 setup diese Rediv TITELART Move Depth -4 4B-61 -7 3E-01 **V**uelo File Disw Rotate Spin 35

de observação. (^^) ----i \oplus -Tr caso estudo IIIB. Planos 6.47 Velocidade Ul para o Figura

[eone]

00+30

1 05+00

10-30

202

(C) (C) Φ т N 6 Reatores tangues agitados utilizando modelos Capítulo



observação. 0 Ge (^) ~~{ Ø <1× Planos estudo Caso 0 para 6.48 Velocidade V1 Figura

1.04-7 5.48-7 Ξ 0 5 THÌ o A Domud Del Imi Set setup dress Nedaw AL 1: WE I TL IS THE I AL 15 LIPLART eloting tequi Wiew Canton: News Pile 17

observação. မီ с С d) <. Tr estudo IIIB. Planos Caso 0 para 6.49 Velocidade Wl Figura

C 00-002 Dash U

F111

milme

Plews 13

Plane ж 1.3 Ж

Shade

167

Ф സ് പ 6 Reatores tangues agitados utilizando modelos Capítulo

က



Figura 6.50 Início da simulação do caso estudo tipo IIIC.



Figura 6.51 Final da simulação do caso estudo tipo IIIC.



Figura 6.52 Velocidades U, V, W para o caso estudo IIIC. Visão normal.

27 1.0E-10 1.0E-10 1.up. fur 015-10 CHEIN jų. 2, 012-013 00 Bash 0 Bonned -**HILE** Set Sheile 6011 setup clear Reduc 27 1 AL 16 Maris Outline JIIC -91 D. 2 7 2 Phate 1 ii aii **Unan** Endone News an i Plane. NF 1

caso estudo IIIC. Visão "full" O 6.53 Linhas de corrente para Figura

, , , , ,



Figura 6.54 Linhas de corrente para o caso estudo IIIC. Visão "isolines".



Figura 6.55 Início da simulação do caso estudo IIID.



Figura 6.56 Final da simulação do caso estudo IIID.



Figura 6.57 Velocidades U, V, W para o caso estudo IIID.



o caso estudo IIID. Visão normal. para 6.58 Velocidade U Figura



Figura 6.59 Velocidade V para o caso estudo IIID. Visão normal.

ന ന Ð Capítulo 6 Reatores tanques agitados utilizando modelos 2d



o caso estudo ILID. Visão normal. 6.60 Velocidade W para Figura



Figura 6.61 Início da simulação do caso estudo tipo IVA.



Figura 6.62 Final da simulação do caso estudo tipo IVA.



caso estudo IVA.Visão "full". 0 6.63 Velocidades Ul, V1, W1 para Figura

181

Υ.



Figura 6.64 Início da simulação do caso estudo IVB.



Figura 6.65 Final da simulação do caso estudo IVB.





para 0 caso estudo IVB. Planos s, Ð ω de observação.

-5° 5 8° 8 CH MM PHOTON <u>m</u> व फ़ांगे Д 2 UE-U3 Dash D full emad Del Style Filler Set Shade setuP cLear Fedry 3L 15 **Outline** 4 HLAN SP 1-W. <u>15</u> PLAND 13 Plante and second an Dantaine Nerth. View Vig. 1 TURED! S IS IN 13 SF 1.5 File . 14

observação. g (~) [-] $^{(0)}$ <u></u> Planos caso estudo IVB. 0 oara Q 6.67 Velocidade V1 Figura

\$ \$ \$

2 03 13 03 14 03 14 14 14 PHOTON 00 0.5 11 10 FIL 21 IV 1.5 ant lane 31 W de la co Punta 13 1.1

observação. 0 O \mathbb{C} Ø 7 para o caso estudo IVB. Planos 6.68 Velocidade W1 Figura

186

д Ю Ф С С Reatores tanques agitados utilizando modelos Capítulo 6



Figura 6.69 Início da simulação de um caso estudo tipo IVC.





ന ന Ø 29 29 tanques agitados utilizando modelos Reatores Q Capítulo



caso estudo IVC. Visão normal. O bara Q 5 ∇_{ρ} 6.71 Velocidades U, Figura

1. 0E-10 1. 0E-10 11 **115** 111 11 111 111 1 05 10 m-1.05-10 4 Cal ĝ 1 mired Should F0.01 Press white create he days Dimite 1 1.2

caso estudo IVC. Visão "full" 0 para d 6.72 Linhas de corrente Figura

-1.06-10 1.06-10 1 0E-11 1 06 10 1 03 10 -1.06-10 1.08-10 -1.08-10 -1.08-10 PHOTON CHAM å Lat. 14 Hards U PHOLON (25 - 211 Shade STEM GL 15 satup clear 51. TL 1 51

caso estudo IVC. Visão "isolines". Linhas de corrente para o 6,73 Figura

Ę,

ന ന Ф 20 70 Reatores tanques agitados utilizando modelos Q capítulo







Figura 6.75 Final da símulação do caso estudo IVD.



estudo IVD. Caso 0 para 1 1 6.76 Velocidades U, Figura



caso estudo IVD. Visão normal. O para 6.77 Velocidade U Figura

Ф ¢ С С Capítulo 6 Reatores tanques agitados utilizando modelos



o caso estudo IVD. Visão normal. 6.78 Velocidade V para Figura
-1.05-10 -1.06-10 -1.0E.10 -1.08-10 -1,08-10 -1.0E-10 -1. DE-10 -1.0E-10 -1.08-10 -1.08-10 -1.01-10 -1.0E-10 1.0E 10 -1.08-10 [ef]CHAM ĨŴ NOTONO - 664 2 (B. -0.3 I. I. W. II PHOENICS - XII 1. Thirty Style 42.27 FULL Fibric ALC: LE W 0.1 Var. Plotting region the front AND 2 FING Contaur Nem. 51 TE Elans: 1111

Figura 6.79 Velocidade W para o caso estudo IVD. Visão normal.

61

უ ო Ø 2 0' Reatores tangues agitados utilizando modelos Ø Capítulo

6.7 RESULTADOS

Para facilitar a exposição dos resultados foram formados grupos, levando-se em consideração alterações físicas feitas no projeto mecânico do reator.

Tipos de Casos Estudos	Figura de número
τ τλ	
1.A	0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.0
IB	6.7,6.8,6.9, 6.10, 6.11, 6.12, 6.13,
	6.14, 6.15, 6.16
IC	6.17, 6.18, 6.19
ID	6.20, 6.21, 6.22
IIA	6.23, 6.24, 6.25, 6.26, 6.27
IIB	6.28,6.29,6.30, 6.31, 6.32
IIC	6.33,6.34,6.35, 6.36, 6.37
IID	6.38,6.39,6.40
IIIA	6.41,6.42,6.43
IIIB	6.44,6.45,6.46,6.47,6.48, 6.49
IIIC	6.50, 6.51, 6.52, 6.53, 6.54
IIID	6.55,6.56,6.57,6.58,6.59, 6.60
IVA	6.61,6.62,6.63
IVB	6.64,6.65,6.66,6.67,6.68
IVC	6.69,6.70,6.71,6.72,6.73
IVD	6.74,6.75,6.76,6.77,6.78,6.79

Tabela 6.4 - Casos estudos com respectivas Figuras

• Grupo I

O Grupo I (A,B,C,D) apresenta as seguintes características marcantes: a dimensionalidade dos sistemas estudados torna-se realmente importante ao se verificar que a velocidade tangencial (caso tridimensional) participa dos perfis de apresentados. Verifica-se pelos velocidade (W1) perfis apresentados para o Grupo I, que, pelo regime de escoamento estar situado na laminaridade (número de Reynolds do impelidor entre 10 e 20), as curvas das linhas de corrente apresentadas para os casos bidimensionais, bem como tridimensionais são suaves, não indicando por exemplo, presença de vórtices. Porém, pelo próprio movimento do fluido próximo à região do impelidor, segue-se a presença de recirculação do fluido. Tal aspecto visual pode ser comparado com os obtidos no trabalho de Thoroddsen (Thoroddsen, 1996). Os perfis para a água, são bem mais "suaves" do que os apresentados para o poliestireno. Neste último, as figuras se mostram com perfis mais fragmentados, escoamento instável е COM dissipação de seguindo um propriedades dos campos mais difícil do que para a água.

• Grupo II

O grupo II (A,B,C,D) oferece uma geometria diferente do tanque do Grupo I. Modificaram-se a altura e o diâmetro do impelidor, em relação ao fundo do tanque. Verifica-se que na região próxima da zona de separação formada pela existência do as linhas de corrente estão impelidor, sequindo uma visualização típica para reatores tanques agitados; porém, novamente o poliestireno apresenta linhas de corrente mais heterogêneas do que a água. Fontes de comparação com as figuras do presente grupo podem ser encontradas no trabalho de Lin (Lin, 1996). As linhas de corrente para o poliestireno têm um aspecto semelhante a uma formação de vórtice fechado ("lockedin vortex formation").

• Grupo III

O Grupo III (A,B,C,D) simula o escoamento da água e do poliestireno fazendo uso de um diâmetro igual à metade do diâmetro do tanque, semelhante ao Grupo II. Pelos planos de observação conseguidos durante as simulações, percebe-se que os perfis da água são demonstrativos de um regime laminar de escoamento, com velocidades baixas em todas as dimensões (casos bidimensionais e tridimensionais). Os sistemas de poliestireno apresentam formação de vórtices na região próxima ao impelidor, bem como acima e abaixo dessa região.

• Grupo IV

O Grupo IV (A,B,C,D) demonstra características visuais semelhantes ao Grupo II. No entanto, as linhas de corrente (casos bidimensionais) sugerem escoamento típico de um sistema reator tanque agitado. Entre o Grupo II e o Grupo IV, porém, o aumento do diâmetro do impelidor sugere visualizações com dupla recirculação de fluido.

6.8 CONCLUSÕES

Nas tabelas 6.1, 6.2 e 6.3 forneceram-se informações pertinentes às dimensões do reator e do impelidor, assim como nos tipos de casos estudos considerados. Fez-se uma análise do impacto de variações da altura e do diâmetro do agitador nas característcas operacionais do sistema.

Analisando-se as figuras do item 6.6, chega-se às seguintes conclusões:

- Considerando-se, inicialmente, os casos bidimensionais, as velocidades axiais são mais elevadas do que as tangenciais. Os casos tridimensionais mostram uma distribuição de velocidades radial, axial e tangencial com predomínio inicial da velocidade axial, seguida da tangencial. Ou seja, o movimento de fluido conseguido através do agitador é avaliado pela importância das três velocidades. Tal fato vem confirmar a necessidade de se fazer o estudo fluido dinâmico do sistema com ferramentas para simulação tridimensional, ao invés de bidimensional.
- Os perfis de velocidade para a água e o poliestireno apresentam as seguintes tendências: a água mostra regiões "comportadas" de distribuições de velocidades, em comparação com o poliestireno.
- Figuras com as características das Figuras 6.4, 6.5 e 6.6 são apresentadas com a finalidade de mostrar dois tipos de visão das velocidades radial, axial e tangencial, respectivamente, para os casos estudos considerados.As duas opções de "View" são a "full", a qual mostra todo o plano y-z de comportamento do fluido; a visão "isolines" equivale à "full", mostrando as regiões já apresentadas pela "full", com a característica de mostrar contornos e não visão preenchida do escoamento.Observa-se, então, pelas figuras já citadas acima, bem como por figuras de mesmo estilo, que sua principal função é apresentar uma visão geral ("full") e outra detalhada ("isolines") das características do escoamento pertinente a cada caso explicado em sua respectiva descrição, abaixo de cada figura apresentada.
- A Figura 6.25 apresenta as linhas de corrente para um caso estudo tipo II, podendo ser vista em " full" e em " isolines".O eixo de rotação do sistema está localizado do lado esquerdo dessa figura e o impelidor se localiza exatamente na região de início de separação do escoamento (centro).Neste caso, ainda não ocorre a separação do escoamento, devido à baixa velocidade de rotação do sistema.
- Na Figura 6.30 tem-se o perfil de velocidade radial para um caso estudo do tipo IIB.A visão do escoamento é feita em dois planos distintos, o 4 e o 13.Considerando-se que a malha de simulação utilizada para um caso genérico 3D foi 15x15x15, tem-se a perfeita compreensão da localização dos referidos planos.O plano 13 é o superior, o 4, inferior.Já nas Figuras 6.35, 6.37, 6.72, 6.73, p.e., tem-se o aparecimento de

formação de vórtices nos respectivos escoamentos, enfatizando-se que são característicos de regime laminar.Pela verificação do tipo de caso estudo mostrado, localiza-se o eixo de rotação do sistema, bem como o impelidor.O plano de observação dessas figuras está sempre assinalado no canto inferior direito da tela de saída da figura, abaixo da legenda de valores de propriedades calculadas para cada tipo de simulação.

- Considera-se que as explanações expostas até aqui são inteiramente suficientes para se observar e entender casos estudos análogos que surjam ao longo de todo o Capítulo, aliando-se às observações toda a teoria exposta e demonstrada dentro do trabalho como um todo.
- Para todos os 4 grupos reafirma-se que a dimensionalidade dos casos estudos é importante, ou seja, há necessidade de se simularem movimentos de fluidos em casos tridimensionais, sistemas mais complexos, que envolvem maior tempo computacional, porém, que permitem uma melhor compreensão fenomenológica dos escoamentos e de toda a metodologia necessária para a justificativa da existência da CFD, ou, fluido-dinâmica computacional.
- Pelas observações das figuras, os resultados parecem sugerir que a utilização de geometria/localização do impelidor do tipo dos casos estudos dos grupos I e IV, ou seja, altura do impelidor equivalente a um terço da altura total do tanque e diâmetro do mesmo igual a um terço do diâmetro do tanque e localização do agitador à metade da altura do tanque e diâmetro do mesmo igual a um terço do diâmetro do tanque, respectivamente, é mais adequada.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BIRD, R. B. et al., *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, New York, pp. 83-91, 1960.
- LIN, J. -C., Sheridan, J. & Rockwell, D., Near-Wake of a Perturbed, Horizontal Cylinder at a Free-surface, Phys. Fluids, 8(8), 2107-2116, August 1996.
- MACIEL FILHO, R., Rodrigues, J. A. Optimal Feed Rates Strategies with Operating Constraints for the Penicillin Process, Chemical Engineering Science, v. 51, n^o 11, 2859-2864, 1996.
- NUNHEZ, J. R., The influence of geometric factors on the optimum design of stirred tank reactors, PhD Thesis, The University of Leeds, 1994.
- SHERIDAN, J.-C. Lin, Rockwell, D., Near-wake of a perturbed, horizontal cylinder at a free surface, Phys. Fluids, v.8,-n² 8, 2107-2116, August 1996.
- STREET, D. A., Computational Modelling of Stirred Reactions Vessels, PhD Thesis., The University of Leeds, September, 1991.
- TANI, Atusi, Small-Time Existence for the Three-Dimensional Navier-Stokes Equations for an Incompressible Fluid with a Free Surface, Archive for Rational Mechanics and Analysis, 133, 299-331, 1996.
- THORODDSEN, S. T., Mahadevan, L., Shark-Teeth Pattern in Coating Flow Inside a Horizontally Rotating Cylinder, Phys. Fluids, v. 8, n^2 9, S10, September 1996.





Figura AP-C6-A2 Linhas de corrente correspondentes a caso estudo do tipo IIA, com variação da velocidade de rotação do impelidor, bem como da geometria do reator tanque agitado. Visão "full".



۶

Figura AP-C6-A3 Lnhas de corrente e campo de velocidade em um vaso cilíndrico (Street, 1991).

AP-C6-B ARQUIVOS TIPO "Q1" PARA OS PRINCIPAIS CASOS ESTUDOS

Os arquivos listados abaixo permitem entender as características do tipo de simulação realizada.

AP-C6-B1 Arquivo Q1 do caso estudo IA

```
TALK=T;RUN(1, 1);VDU=X11-TERM
             1 ;LIBREF =
                            0
IRUNN
     =
Group 1. Run Title
TEXT (IALAST
                                     )
Group 2. Transience
STEADY=F
  * Set overall time and no. of steps
RSET(U, .000E+00, 1.000E-03, 1)
  * Modify regions
RSET(T,1,1,1.000E+00)
Groups 3, 4, 5 Grid Information
  * Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)
RSET (M, 1, 15, 15, 1.000E-06)
  * Set overall domain extent:
          xulast yvlast
                       zwlast
                               name
XSI= 6.283E+00;YSI= 2.800E+00;ZSI= 4.000E+00;RSET(D,IA
                                                  )
  * Set objects: x0
                    ΨQ.
                          z0
               dx
                    dy
                          dz
                               name
XPO= .000E+00;YPO= .000E+00;ZPO= 1.333E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= 9.333E-01;ZSI= 1.500E-03;RSET(B,IMPEL)
                                                  )
XPO= .000E+00;YPO= .000E+00;ZPO= .000E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= 2.800E+00;ZSI= .000E+00;RSET(B,FLOOR
                                                  )
XPO= .000E+00;YPO= 2.800E+00;ZPO= .000E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= .000E+00;ZSI= 4.000E+00;RSET(B,BWALL
                                                  )
XPO= .000E+00;YPO= .000E+00;ZPO= .000E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= 2.200E-01;ZSI= 4.000E+00;RSET(B,SHAFT)
                                                  )
  * Cylindrical-polar grid
CARTES=F
Group 6. Body-Fitted coordinates
Group 7. Variables: STOREd, SOLVEd, NAMEd
ONEPHS
      ----
           Τ
  * Non-default variable names
NAME(45) = BLOK ; NAME(46) = MI
NAME (47) = RO ; NAME (48) = TEM1
NAME(49) = DEN1; NAME(50) = PRPS
   * Solved variables list
SOLVE(P1,U1,V1,W1,MI,RO,TEM1)
   * Stored variables list
STORE (PRPS, DEN1, BLOK)
   * Additional solver options
SOLUTN(P1,Y,Y,Y,N,N,N)
```

```
SOLUTN (U1
         , Y, Y, Y, N, N, N)
         , Y, Y, Y, N, N, N
SOLUTN (V1
SOLUTN (W1
         (Y, Y, Y, N, N, N)
         , Y, Y, Y, N, N, Y)
SOLUTN (MI
SOLUTN (RO
         (Y, Y, Y, N, N, Y)
SOLUTN (TEM1, Y, Y, Y, N, N, Y)
IVARBK
      -----
             -1 ; ISOLBK =
                             1
Group 8. Terms & Devices
TERMS (P1
         (Y, Y, Y, Y, Y, N)
TERMS (U1
        , Y, Y, Y, Y, Y, N
TERMS (V1
         , Y, Y, Y, Y, Y, N)
TERMS
     (W1
         , Y, Y, Y, Y, Y, N)
         , Y, Y, Y, Y, Y, N)
TERMS (MI
TERMS (RO
         , Y, Y, Y, Y, N, N)
TERMS (TEM1, Y, Y, Y, Y, Y, N)
NEWRH1
      -----
           Т
           Τ
NEWENL
      ____
                             0 ; ISOLZ
                                             0
ISOLX
      =
              0 ; ISOLY
                     -----
                                     Group 9. Properties
      = GRND10
RHO1
       = 2.980E+02
TEMP0
ENUL
      = GRND10
                 ;ENUT
                           .000E+00
                       -----
PRNDTL(TEM1) = -GRND10
Group 10.Inter-Phase Transfer Processes
Group 11.Initialise Var/Porosity Fields
FIINIT(BLOK) = 1.000E+00 ; FIINIT(TEM1) =
                                     2.500E+01
FIINIT(PRPS) =
              6.700E+01
 No PATCHes used for this Group
RSTGRD =
           F
INIADD =
           F
Group 12. Convection and diffusion adjustments
Group 13. Boundary & Special Sources
PATCH (KESOURCE, PHASEM, 1, 1, 1, 15, 1, 15, 1, 1)
     (SURFREE , SOUTH , #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1)
INLET
     (SURFREE , P1
VALUE
                   .000E+00)
VALUE
     (SURFREE , MI
                  , 1.000E+00)
                  , 1.000E+03)
VALUE (SURFREE, RO
VALUE (SURFREE, TEM1, 2.500E+01)
             ,SOUTH ,#1,#1,#1,#1,#1,#1,#1,#1,#1)
PATCH (OUTANK
COVAL (OUTANK
             ,P1
                 , FIXVAL , .000E+00)
                  , .000E+00, 1.000E+00)
COVAL (OUTANK
             ,MI
             ,RO ,
                   .000E+00, 1.000E+03)
COVAL (OUTANK
                   .000E+00, 2.500E+01)
COVAL (OUTANK
             , TEM1,
```

PATCH (BWALL ,NWALL , #1, #1, #3, #3, #1, #3, #1, #1) COVAL (BWALL ,U1 , GRND2 , .000E+00) , GRND2 , .000E+00) COVAL (BWALL ,W1 , 1.000E+01) COVAL (BWALL ,TEM1, GRND2 PATCH (HOTBWALL, SOUTH , #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1) COVAL (HOTBWALL, TEM1, FIXFLU , 1.200E+03) PATCH (DOWNSHAF, VOLUME, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1) COVAL (DOWNSHAF, U1 , 1.000E+00, .000E+00) COVAL (DOWNSHAF, W1 , 1.000E+00, .000E+00) COVAL (DOWNSHAF,MI , 1.000E+00, 1.000E+00) COVAL (DOWNSHAF, RO , 1.000E+00, 1.000E+03) PATCH (SHAFT , VOLUME, #1, #1, #1, #1, #1, #3, #1, #1) COVAL (SHAFT ,U1 , 1.000E+00, .000E+00) , 1.000E+00, .000E+00) ,V1 COVAL (SHAFT , 1.000E+00, 6.290E-02) COVAL (SHAFT ,W1 , 1.000E+00, 1.000E+00) COVAL (SHAFT ,MI ,RO , 1.000E+00, 1.000E+03) COVAL (SHAFT PATCH (UPSHAFTT, VOLUME, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1) COVAL (UPSHAFTT, MI , 1.000E+00, 1.000E+00) COVAL (UPSHAFTT, RO , 1.000E+00, 1.000E+03) COVAL (UPSHAFTT, TEM1, .000E+00, 1.800E+01) EGWF ==== T Group 14. Downstream Pressure For PARAB ************************* Group 15. Terminate Sweeps LSWEEP = 300 Ψ SELREF = RESFAC = 1.000E - 03Group 16. Terminate Iterations ENDIT (P1) = 1.000E-03; ENDIT (U1)) = 1.000E-03 1.000E-03) == 1.000E-03 ;ENDIT (W1) = ENDIT (V1) = 1.000E-03 ;ENDIT (RO) = 1.000E-03 ENDIT (MI ENDIT (TEM1) = 1.000E - 03Group 17. Relaxation RELAX(P1 ,LINRLX, 1.000E+00) ,FALSDT, 6.222E-04) RELAX (U1 RELAX (V1 , FALSDT, 6.222E-04) ,FALSDT, 6.222E-04) RELAX (W1 ,FALSDT, 6.222E+00) RELAX (MI ,FALSDT, 6.222E+00) RELAX (RO RELAX (TEM1, FALSDT, 6.222E+00) Group 18. Limits Group 19. EARTH Calls To GROUND Station Т GENK ==

Group 20. Preliminary Printout Τ ECHO _ Group 21. Print-out of Variables Group 22. Monitor Print-Out IXMON _____ 1 ; IYMON -----6 ; IZMON -----6 TSTSWP = -1 Group 23. Field Print-Out & Plot Control NTPRIN ----1; ISTPRF = 1 ;ISTPRL = 10000 No PATCHes used for this Group Group 24. Dumps For Restarts CSG1 =MMENSAV(S, RELX, DEF, 1.8667E-01, 30, 1.0000E-01) MENSAV(S, PHSPROP, DEF, 200, 298, 1000, 1) MENSAV (S, FLPRP, DEF, LAMINAR, NOTSET, WATER) STOP

AP-C6-A2 Arquivo Q1 do caso estudo IIA

```
TALK=T;RUN(1, 1);VDU=X11-TERM
IRUNN
             1 ;LIBREF =
                             0
Group 1. Run Title
TEXT (IIALAST
Group 2. Transience
STEADY=F
  * Set overall time and no. of steps
RSET (U, .000E+00, 1.000E-03, 1)
  * Modify regions
RSET(T,1,1,1.000E+00)
Groups 3, 4, 5 Grid Information
  * Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)
RSET (M, 1, 15, 15, 1.000E-06)
  * Set overall domain extent:
          xulast yvlast
                       zwlast
                                name
XSI= 6.283E+00;YSI= 2.800E+00;ZSI= 4.000E+00;RSET(D,IIB
                                                   )
  * Set objects: x0
                     y0
                           z0
  +
               dx
                     dy
                           dz
                                name
XPO= .000E+00;YPO=
                 .000E+00;ZPO= 2.000E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= 1.400E+00;ZSI= 1.500E-02;RSET(B,IMPEL)
                                                   )
XPO=
    .000E+00;YPO= .000E+00;ZPO= .000E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= 2.800E+00;ZSI= .000E+00;RSET(B,FLOOR
                                                   )
XPO= .000E+00;YPO= 2.800E+00;ZPO=
                              .000E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= .000E+00;ZSI= 4.000E+00;RSET(B,BWALL
                                                    )
XPO= .000E+00;YPO= .000E+00;ZPO= .000E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= 2.200E-01;ZSI= 4.000E+00;RSET(B,SHAFT
                                                    )
   * Cylindrical-polar grid
CARTES=F
```

```
Group 6. Body-Fitted coordinates
Group 7. Variables: STOREd, SOLVEd, NAMEd
ONEPHS =
          Τ
  * Non-default variable names
NAME (45) = BLOK; NAME (46) = MI
NAME (47) = RO ; NAME (48) = TEM1
NAME (49) = DEN1; NAME (50) = PRPS
  * Solved variables list
                            , TEM1)
SOLVE(P1,U1,V1,W1,MI,RO
  * Stored variables list
STORE (PRPS, DEN1, BLOK)
  * Additional solver options
SOLUTN (P1
       ,Y,Y,Y,N,N,N)
        , Y, Y, Y, N, N, N)
SOLUTN (U1
        , Y, Y, Y, N, N, N)
SOLUTN (V1
SOLUTN (W1
        , Y, Y, Y, N, N, N)
SOLUTN (MI
        , Y, Y, Y, N, N, Y
        , Y, Y, Y, N, N, Y)
SOLUTN (RO
SOLUTN (TEM1, Y, Y, Y, N, N, Y)
IVARBK
            -1 ; ISOLBK =
                           1
     -----
Group 8. Terms & Devices
       , Y, Y, Y, Y, Y, N)
TERMS (P1
TERMS (U1
        (Y, Y, Y, Y, Y, N)
TERMS (V1
        , Y, Y, Y, Y, Y, N
        , Y, Y, Y, Y, Y, N)
TERMS (W1
        , Y, Y, Y, Y, Y, N
TERMS (MI
        , Y, Y, Y, Y, N, N)
TERMS (RO
TERMS (TEM1, Y, Y, Y, Y, Y, N)
          Τ
NEWRH1 =
NEWENL
          T
     ****
             0 ;ISOLY =
                           0 ; ISOLZ
                                          Ω
ISOLX
      -----
                                  -----
Group 9. Properties
      = GRND10
RHO1
TEMP0
      = 2.980E+02
ENUL
      = GRND10
                         .000E+00
                :ENUT
                      .....
PRNDTL(TEM1) = -GRND10
Group 10.Inter-Phase Transfer Processes
***********************
 Group 11. Initialise Var/Porosity Fields
FIINIT(BLOK) = 1.000E+00; FIINIT(TEM1) = 2.500E+01
FIINIT(PRPS) = 6.700E+01
  No PATCHes used for this Group
RSTGRD =
          F
INIADD
           F
      Group 12. Convection and diffusion adjustments
Group 13. Boundary & Special Sources
```

PATCH (KESOURCE, PHASEM, 1, 1, 1, 15, 1, 15, 1, 1) INLET (SURFREE , SOUTH , #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1) VALUE (SURFREE, P1, .000E+00) VALUE (SURFREE, MI , 1.000E+00) , 1.000E+03) VALUE (SURFREE, RO VALUE (SURFREE, TEM1, 2.500E+01) PATCH (OUTANK ,SOUTH , #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1) COVAL (OUTANK ,P1 , FIXVAL , .000E+00) COVAL (OUTANK ,MI , .000E+00, 1.000E+00) ,RO , .000E+00, 1.000E+03) COVAL (OUTANK ,TEM1, .000E+00, 2.500E+01) COVAL (OUTANK PATCH (BWALL ,NWALL , #1, #1, #3, #3, #1, #3, 1, 1) COVAL (BWALL ,U1 , GRND2 , .000E+00) COVAL (BWALL ,W1 , GRND2 .000E+00) 1 ,TEM1, GRND2 , 1.000E+01) COVAL (BWALL PATCH (HOTBWALL, NORTH , #1, #1, #3, #3, #1, #3, #1, #1) COVAL (HOTBWALL, TEM1, FIXFLU , 1.200E+03) PATCH (DOWNSHAF, VOLUME, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1) COVAL (DOWNSHAF, U1 , 1.000E+00, .000E+00) COVAL (DOWNSHAF, W1 , 1.000E+00, .000E+00) COVAL (DOWNSHAF, MI , 1.000E+00, 1.000E+00) COVAL (DOWNSHAF, RO , 1.000E+00, 1.000E+03), VOLUME, #1, #1, #1, #1, #1, #3, #1, #1) PATCH (SHAFT ,U1 , 1.000E+00, .000E+00) COVAL (SHAFT ,V1 , 1.000E+00, .000E+00) COVAL (SHAFT ,W1 , 1.000E+00, 6.290E-02) COVAL (SHAFT ,MI , 1.000E+00, 1.000E+00) COVAL (SHAFT ,RO , 1.000E+00, 1.000E+03) COVAL (SHAFT PATCH (UPSHAFTT, VOLUME, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1) COVAL (UPSHAFTT, MI , 1.000E+00, 1.000E+00) COVAL (UPSHAFTT, RO , 1.000E+00, 1.000E+03) COVAL (UPSHAFTT, TEM1, .000E+00, 1.800E+01) EGWF -----T Group 14. Downstream Pressure For PARAB Group 15. Terminate Sweeps LSWEEP = 300 Τ SELREF = RESFAC = 1.000E-03Group 16. Terminate Iterations) = 1.000E-03 ENDIT (P1) = 1.000E-03; ENDIT (U1)) = 1.000E-03; ENDIT (W1) = 1.000E-03 ENDIT (V1) = 1.000E-03; ENDIT (RO) = 1.000E-03 (MI ENDIT ENDIT (TEM1) = 1.000E-03

```
Group 17. Relaxation
RELAX(P1 ,LINRLX, 1.000E+00)
RELAX (U1
      , FALSDT, 6.222E-04)
RELAX (V1
     ,FALSDT, 6.222E-04)
RELAX (W1 , FALSDT, 6.222E-04)
RELAX (MI
      ,FALSDT, 6.222E+00)
RELAX(RO, FALSDT, 6.222E+00)
RELAX (TEM1, FALSDT, 6.222E+00)
Group 18. Limits
Group 19. EARTH Calls To GROUND Station
GENK
     =
        Π
Group 20. Preliminary Printout
ECHO
    =
        Τ
Group 21. Print-out of Variables
*****
 Group 22. Monitor Print-Out
IXMON
          1 ; IYMON
                     6 ;IZMON
                                6
               -----
TSTSWP
     ==
         -1
Group 23. Field Print-Out & Plot Control
          1 ;ISTPRF =
NTPRIN
                     1 :ISTPRL =
                             10000
    -----
 No PATCHes used for this Group
Group 24. Dumps For Restarts
CSG1
    =M
MENSAV(S, RELX, DEF, 1.8667E-01, 30, 1.0000E-01)
MENSAV(S, PHSPROP, DEF, 200, 298, 1000, 1)
MENSAV (S, FLPRP, DEF, LAMINAR, NOTSET, WATER)
STOP
```

AP-C6-A3 Arquivo Q1 do caso estudo IC

TALK=T; RUN(1,1) IRUNN 1;LIBREF = 0 Group 1. Run Title TEXT(IC Group 2. Transience STEADY=F * Set overall time and no. of steps RSET(U, .000E+00, 1.000E-01, 1) * Modify regions RSET(T, 1, 1, 1, 000E+00)Groups 3, 4, 5 Grid Information * Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance) RSET (M, 1, 15, 15, 1.000E-06)

```
* Set overall domain extent:
  *
          xulast yvlast zwlast name
XSI= 6.283E+00;YSI= 2.800E+00;ZSI= 4.000E+00;RSET(D,IC
                                                    )
  * Set objects: x0
                     y0
                           z0
  *
               dx
                     dy
                           dz
                                name
XPO= .000E+00;YPO= .000E+00;ZPO= 1.333E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= 9.333E-01;ZSI= .000E+00;RSET(B,IMPEL
                                                    )
XPO= .000E+00;YPO= .000E+00;ZPO= .000E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= 2.800E+00;ZSI= .000E+00;RSET(B,FLOOR
                                                    )
XPO= .000E+00;YPO= 2.800E+00;ZPO= .000E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= .000E+00;ZSI= 4.000E+00;RSET(B,BWALL
                                                    )
XPO= .000E+00;YPO= .000E+00;ZPO= .000E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= 2.200E-01;ZSI= 4.000E+00;RSET(B,SHAFT
                                                    )
  * Cylindrical-polar grid
CARTES=F
Group 6. Body-Fitted coordinates
Group 7. Variables: STOREd, SOLVEd, NAMEd
ONEPHS = T
  * Non-default variable names
NAME(45) =BLOK ; NAME(46) =MI
NAME (47) =RO ; NAME (48) =TEM1
NAME (49) = DEN1; NAME (50) = PRPS
   * Solved variables list
SOLVE(P1,U1,V1,W1,MI,RO,TEM1)
   * Stored variables list
STORE (PRPS, DEN1, BLOK)
SOLUTN(P1,Y,Y,Y,N,N,N)
SOLUTN(U1,Y,Y,Y,N,N,N)
SOLUTN(V1,Y,Y,Y,N,N,N)
SOLUTN(W1 ,Y,Y,Y,N,N,N)
        , Y, Y, Y, N, N, Y)
SOLUTN (MI
SOLUTN(RO,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN (TEM1, Y, Y, Y, N, N, Y)
IVARBK = -1; ISOLBK =
                              1
Group 8. Terms & Devices
TERMS (P1 ,Y,Y,Y,Y,N)
TERMS (U1, Y, Y, Y, Y, Y, N)
TERMS (V1, Y, Y, Y, Y, Y, N)
TERMS (W1
        , Y, Y, Y, Y, Y, N)
TERMS (MI
         , Y, Y, Y, Y, Y, N)
         , Y, Y, Y, Y, N, N)
TERMS (RO
           Τ
NEWRH1 =
           Τ
NEWENL =
              0 ; ISOLY = 0 ; ISOLZ
                                              0
ISOLX
      -----
                                      _____
Group 9. Properties
RHO1
      = GRND10
TEMP0
       = 3.480E+02
                ;ENUT = .000E+00
ENUL
       = GRND10
PRNDTL(TEM1) = -GRND10
  * List of user-defined materials to be read by EARTH
   MATFLG=T; IMAT=1
```

* Name *Ind. Dens. Viscos. Spec.heat Conduct. Expans. Compr. * <POLYS> 90 1.0572E+03 1 1344 1.5000E-01 0.0 0.0 Group 10. Inter-Phase Transfer Processes Group 11. Initialise Var/Porosity Fields FIINIT(BLOK) = 1.000E+00 ; FIINIT(TEM1) = 2.500E+01 FIINIT(PRPS) = 9.000E+01No PATCHes used for this Group RSTGRD = F INIADD = F Group 12. Convection and diffusion adjustments Group 13. Boundary & Special Sources PATCH (KESOURCE, PHASEM, 1, 1, 1, 15, 1, 15, 1, 1) (SURFREE , SOUTH , #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1) INLET VALUE (SURFREE , P1 , 1.000E+03) , 1.000E+00)VALUE (SURFREE, MI VALUE (SURFREE, TEM1, 2.500E+01) PATCH (OUTANK ,SOUTH ,#1,#1,#1,#1,#1,#1,#1,#1,#1,#1) ,P1 , FIXVAL , .000E+00) COVAL (OUTANK , .000E+00, SAME COVAL (OUTANK ,MI) ,RO , .000E+00, SAME COVAL (OUTANK } ,TEM1, .000E+00, 2.500E+01) COVAL (OUTANK PATCH (BWALL NWALL , #1, #1, #3, #3, #1, #2, 1, 1) COVAL (BWALL ,Ul , GRND2 , .000E+00) , GRND2 .000E+00) COVAL (BWALL ,W1 1 COVAL (BWALL ,TEM1, GRND2 , 1.000E+01) PATCH (HOTBWALL, NORTH , #1, #1, #3, #3, #1, #2, #1, #1) COVAL (HOTBWALL, TEM1, FIXFLU , 1.200E+03) ,VOLUME, #1, #1, #1, #1, #1, #2, #1, #1) PATCH (SHAFT COVAL (SHAFT ,MI , .000E+00, 1.000E+00) ,RO COVAL (SHAFT .000E+00, 7.800E+03) ,TEM1, .000E+00, 3.000E+02) COVAL (SHAFT PATCH (UPSHAFT , VOLUME, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1) PATCH (DOWNSHAF, VOLUME, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1) EGWF -----****** Group 14. Downstream Pressure For PARAB Group 15. Terminate Sweeps

```
LSWEEP
     -----
         200
         Ψ
SELREF
     ____
     = 1.000E - 03
RESFAC
Group 16. Terminate Iterations
ENDIT (P1
       ) =
           1.000E-03 ;ENDIT (U1
                          ) =
                             1.000E-03
ENDIT
    (V1
        )
         -----
           1.000E-03 ;ENDIT
                      (W1
                          ) ==
                             1.000E-03
           1.000E-03 ;ENDIT (RO
ENDIT
    (MI
        ) =
                          ) ===
                             1.000E-03
ENDIT
    (TEM1) =
           1.000E-03
Group 17. Relaxation
RELAX (P1 , LINRLX, 1.000E-01)
       ,LINRLX, 1.000E-01)
RELAX (U1
RELAX (V1
       ,LINRLX, 1.000E-01)
RELAX (W1
       ,LINRLX, 1.000E+00)
RELAX (MI
       ,FALSDT, 6.222E+00)
RELAX (RO
       , FALSDT, 6.222E+00)
RELAX (TEM1, LINRLX, 1.000E+00)
Group 18. Limits
Group 19. EARTH Calls To GROUND Station
         Т
GENK
     ==
CSG10
     =01
Group 20. Preliminary Printout
ECHO
         T
Group 21. Print-out of Variables
Group 22. Monitor Print-Out
                       6 ;IZMON
                                    б
IXMON
           1 :IYMON
                              ......
      .....
                 ......
TSTSWP
          -1
      -----
Group 23. Field Print-Out & Plot Control
NTPRIN
           1 ; ISTPRF =
                       1 ;ISTPRL =
                                 10000
     ____
 No PATCHes used for this Group
Group 24. Dumps For Restarts
CSG1
      ==M
MENSAV(S, RELX, DEF, 1.8667E-01, 30, 1.0000E-01)
MENSAV(S, PHSPROP, DEF, 200, 348, 1.0572E+03, 1)
MENSAV (S, FLPRP, DEF, LAMINAR, NOTSET, POLYS)
STOP
```

AP-C6-B4 Arquivo Q1 do caso estudo IIC

```
Group 2. Transience
STEADY=F
  * Set overall time and no. of steps
RSET(U,.000E+00,1.000E-01,1)
  * Modify regions
RSET(T,1,1,1.000E+00)
Groups 3, 4, 5 Grid Information
  * Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)
RSET (M, 1, 15, 15, 1.000E-06)
  * Set overall domain extent:
  *
          xulast yvlast zwlast
                                  name
XSI= 6.283E+00;YSI= 2.800E+00;ZSI= 4.000E+00;RSET(D,IIC
                                                      )
  * Set objects: x0
                      v0
                             z0
  *
                dx
                      dy
                             dz
                                  name
XPO= .000E+00;YPO= .000E+00;ZPO= 2.000E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= 1.400E+00;ZSI= .000E+00;RSET(B,IMPEL
                                                      )
XPO= .000E+00;YPO= .000E+00;ZPO= .000E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= 2.800E+00;ZSI= .000E+00;RSET(B,FLOOR
                                                       )
XPO= .000E+00; YPO= 2.800E+00; ZPO= .000E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= .000E+00;ZSI= 4.000E+00;RSET(B,BWALL)
                                                       }
XPO= .000E+00;YPO= .000E+00;ZPO= .000E+00
XSI= 6.283E+00;YSI= 2.200E-01;ZSI= 4.000E+00;RSET(B,SHAFT
                                                       )
  * Cylindrical-polar grid
CARTES=F
Group 6. Body-Fitted coordinates
Group 7. Variables: STOREd, SOLVEd, NAMEd
ONEPHS
      =
            Т
   * Non-default variable names
NAME(45) =BLOK ; NAME(46) =MI
NAME (47) = RO ; NAME (48) = TEM1
NAME(49) = DEN1; NAME(50) = PRPS
   * Solved variables list
SOLVE(P1,U1,V1,W1,MI,RO
                                ,TEM1)
   * Stored variables list
STORE (PRPS, DEN1, BLOK)
   * Additional solver options
SOLUTN(P1,Y,Y,Y,N,N,N)
         ,Y,Y,Y,N,N,N)
SOLUTN (U1
         ,Y,Y,Y,N,N,N)
SOLUTN (V1
         , Y, Y, Y, N, N, N)
SOLUTN (W1
SOLUTN (MI
          , Y, Y, Y, N, N, Y
         , Y, Y, Y, N, N, Y)
SOLUTN (RO
SOLUTN (TEM1, Y, Y, Y, N, N, Y)
             -1; ISOLBK =
                               1
IVARBK
      ____
Group 8. Terms & Devices
TERMS (P1, Y, Y, Y, Y, Y, N)
         , Y, Y, Y, Y, Y, N)
TERMS (U1
TERMS (V1
         , Y, Y, Y, Y, Y, N)
         ,Y,Y,Y,Y,Y,N)
TERMS (W1
TERMS (MI
         , Y, Y, Y, Y, Y, N)
TERMS (RO ,Y,Y,Y,Y,N,N)
```

```
T
NEWRH1
     ------
           Т
NEWENL
      -----
ISOLX
      -----
             0; ISOLY = 0; ISOLZ =
                                             0
Group 9. Properties
RHO1
      = GRND10
      = 3.480E+02
TEMP0
      = GRND10
                 ENUT
ENUL
                      = .000E+00
PRNDTL(TEM1) = -GRND10
  ★
    List of user-defined materials to be read by EARTH
  MATFLG=T; IMAT=1
  * Name
  *Ind. Dens.
            Viscos. Spec.heat Conduct. Expans.
                                              Compr.
  * <POLYS>
  90 1.0572E+03 1 1344 1.5000E-01 0.0 0.0
Group 10.Inter-Phase Transfer Processes
Group 11.Initialise Var/Porosity Fields
FIINIT(BLOK) = 1.000E+00 ; FIINIT(TEM1) = 2.500E+01
FIINIT(PRPS) =
              9.000E+01
  No PATCHes used for this Group
RSTGRD =
           F
INIADD =
           F
Group 12. Convection and diffusion adjustments
Group 13. Boundary & Special Sources
PATCH (KESOURCE, PHASEM, 1, 1, 1, 15, 1, 15, 1, 1)
INLET (SURFREE , SOUTH , #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1, #1)
VALUE (SURFREE, P1
                , 1.000E+03)
VALUE (SURFREE ,MI , 1.000E+00)
VALUE (SURFREE, TEM1, 2.500E+01)
             ,SOUTH ,#1,#1,#1,#1,#1,#1,#1,#1,#1)
PATCH (OUTANK
                , FIXVAL , .000E+00)
COVAL (OUTANK
             ,P1
                                    )
COVAL (OUTANK
             ,MI
                 , .000E+00, SAME
                   .000E+00, SAME
COVAL (OUTANK
             ,RO
                                    )
                 ,
COVAL (OUTANK
             ,TEM1, .000E+00, 2.500E+01)
             ,NWALL , #1, #1, #3, #3, #1, #2, 1, 1)
PATCH (BWALL
COVAL (BWALL
             ,U1
                , GRND2 , .000E+00)
             ,W1
                  , GRND2
COVAL (BWALL
                              .000E+00)
                           ,
COVAL (BWALL
             ,TEM1, GRND2 , 1.000E+01)
PATCH (HOTBWALL, NORTH , #1, #1, #3, #3, #1, #2, #1, #1)
COVAL (HOTBWALL, TEM1, FIXFLU , 1.200E+03)
             ,VOLUME, #1, #1, #1, #1, #1, #2, #1, #1)
PATCH (SHAFT
             ,MI
                  .000E+00, 1.000E+00)
COVAL (SHAFT
                    .000E+00, 7.800E+03)
COVAL (SHAFT
             ,RO ,
```

COVAL (SHAFT ,TEM1, .000E+00, 3.000E+02)EGWF Τ Group 14. Downstream Pressure For PARAB Group 15. Terminate Sweeps LSWEEP ____ 300 SELREF Τ -----RESFAC = 1.000E-03*********************** Group 16. Terminate Iterations) = ENDIT (P1 1.000E-03 ;ENDIT (U1) = 1.000E-03 ENDIT (V1) == 1.000E-03 ;ENDIT (W1) === 1.000E-03 ENDIT (MI 1.000E-03 ;ENDIT) = (RO) = 1.000E - 03(TEM1) =ENDIT 1.000E-03 Group 17. Relaxation RELAX(P1 ,LINRLX, 1.000E-01) RELAX (U1 ,LINRLX, 1.000E-01) RELAX (V1 ,LINRLX, 1.000E-01) RELAX (W1 ,LINRLX, 1.000E+00) RELAX (MI ,FALSDT, 6.222E+00) RELAX (RO ,FALSDT, 6.222E+00) RELAX (TEM1, LINRLX, 1.000E+00) Group 18. Limits Group 19. EARTH Calls To GROUND Station GENK = Τ CSG10 =01Group 20. Preliminary Printout ECHO -----Т Group 21. Print-out of Variables Group 22. Monitor Print-Out 1; IYMON = IXMON 6 ;IZMON 6 ____ ------TSTSWP -1 = Group 23. Field Print-Out & Plot Control NTPRIN = 1; ISTPRF = 1 ;ISTPRL = 10000 No PATCHes used for this Group Group 24. Dumps For Restarts CSG1 ==M MENSAV(S, RELX, DEF, 1.8667E-01, 30, 1.0000E-01) MENSAV(S, PHSPROP, DEF, 200, 348, 1.0572E+03, 1) MENSAV(S, FLPRP, DEF, LAMINAR, NOTSET, POLYS)-STOP

Conclusões e sugestões para trabalhos futuros

7.1 CONCLUSÕES

presente trabalho teve como objetivos principais desenvolvimento de técnicas de CFD para o estudo da fluido dinâmica de dois tipos de fluidos (um Newtoniano, outro nãoutilização Newtoniano) através da ferramentas de computacionais, como o pacote CFD PHOENICS, versão 2.1. Ao longo dos capítulos 5 e 6 foram apresentadas algumas maneiras de utilização do referido pacote, utilizando-se conceitos "cfd" (computational de básicos fluid dynamics). 0 procedimento para utilização do pacote CFD foi apresentado, evidenciando-se os conceitos de pré-processador, processador e pós-processador. As alternativas para saídas gráficas no pacote são inúmeras, como se pode avaliar pelos resultados.

Essencialmente, realizaram-se casos estudos para reatores tanques agitados, fazendo-se modificações na geometria dos mesmos (basicamente, variações no diâmetro do agitador e em sua altura em relação ao fundo do tanque). O tipo de agitador (disco) escolhido mostrou-se satisfatório para a análise dos casos estudos, ja que geometrias mais complexas do que o agitador tipo disco trazem grandes complicações de colocação de condições de contorno para o problema numérico (condições de contorno periódicas), bem como de construção da adequada geometria do caso estudo dentro do pacote CFD. Este fato mostra uma das possíveis dificuldades no estabelecimento do problema via CFD.

Observou-se que a dimensionalidade (2d, 3d) dos casos estudos é importante para compreensão mais satisfatória dos perfis de velocidade para os sistemas estudados. As análises tridimensionais do sistema oferecem mais informações dos fenômenos em estudo.

A maneira (metodologia) de obtenção de perfis de campos para os fluidos dentro do reator tanque agitado foi bastante enfatizada, já que essa se constitui na base para construção de um problema CFD (desde o pré-processador até as saídas gráficas).

Espera-se que os perfis de campos obtidos sejam utilizados para uma maior compreensão da ocorrência e localização de zonas de recirculação e zonas mortas dentro do reator. Esse conhecimento leva a se projetarem reatores com maior eficiência (evitando-se, portanto, recirculações/zonas mortas) e a se conhecerem processos de transporte de calor e massa para sistemas complexos, que lidam não apenas com fluidos Newtonianos, mas também com os não-Newtonianos, que até agora não possuem a área de conhecimento completa.

Quanto aos resultados pertinentes ao Capítulo 4, concluise que a utilização da planilha comercial Excel v. 5.0 se mostrou satisfatória por sua viabilidade econômica e amostragem dos resultados finais com compreensíveis saídas gráficas.

7.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Em trabalhos futuros, sugerem-se as seguintes alternativas:

- Explicar ainda mais as possibilidades do pacote CFD PHOENICS versão 2.1. Isto equivale a se experimentarem casos estudos com outros tipos de geometrias (utilização, por exemplo, dos potenciais da opção "Bfc", isto é, "body fitted coordinates"); ampliar outras possibilidades da opção "Library", do "Satellite";
- Realização de simulações dos casos estudos já propostos no presente trabalho, variando-se, porém, a geometria do impelidor;
- Inclusão do enfoque da teoria de mistura dentro do presente estudo;
- Associação da teoria CFD com fenômenos práticos do cotidiano, entrando-se, por exemplo, em áreas diversas de conhecimento, como medicina, mecânica, computação e engenharia química juntas;
- Dentro da medicina, propõe-se estudar a enxaqueca, já que se trata (de modo superficial) da dilatação de vasos sanguíneos. Na verdade, ela se constitui num típico problema de CFD, já que envolve o escoamento de um fluido dentro de um reator (vaso sanguíneo);
- Simular caso(s) estudo(s) já desenvolvido(s) por métodos numéricos convencionais e comparar resultados obtídos através de pacotes de fluido-dinâmica computacional;
- Utilizar outros módulos disponíveis dentro de um pacote de "cfd" voltados, por exemplo, para problemas que envolvam radiação (o que implica em aproveitamento energético); associar a teoria "cfd" disponível no pacote a problemas dentro da Biomecânica, a qual se constitui numa área que envolve fenômenos cotidianos ligados a medicina/saúde/esportes.

Portanto, as possibilidades para futuros trabalhos são inúmeras e inesgotáveis. Porém, tentar aliar todo esse conhecimento da CFD a fenômenos do dia-a-dia que ainda não estão completamente esclarecidos, parece ser propósito útil e de uma realização prática possível.