

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

**ESCOLHA DE ARRANJOS PREFERENCIAIS DE
SERPENTINAS INTERNAS EM TANQUES DE MISTURA
UTILIZANDO A FLUIDO-DINÂMICA COMPUTACIONAL**

Simone Maria Coimbra Peixoto

Orientador: José Roberto Nunhez

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

Campinas – Setembro/1998

1325066



UNIDADE	BC
N.º CHAMADA:	UNICAMP
	P359e
V.	Es.
TOMBO BC/	37410
PROD.	229/99
C	☐
D	☒
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	28/04/99
N.º CPD	

CM-00122692-2

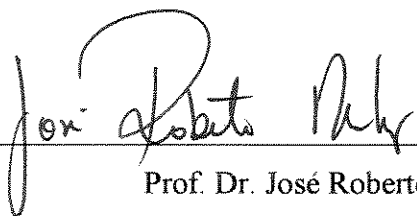
FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

P359e Peixoto, Simone Maria Coimbra
Escolha de arranjos preferenciais de serpentinas
internas em tanques de mistura utilizando a fluido-
dinâmica computacional. / Simone Maria
Coimbra Peixoto.--Campinas, SP: [s.n.], 1998.

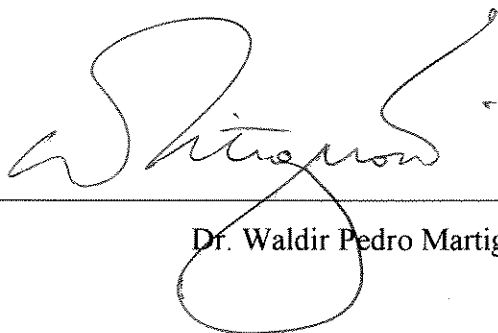
Orientador: José Roberto Nunhez
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Calor - Transmissão. 2. Dinâmica dos fluidos. 3.
Reatores químicos - Projetos. 4. Fluxo laminar. I.
Nunhez, José Roberto. II. Universidade Estadual de
Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III.
Título.

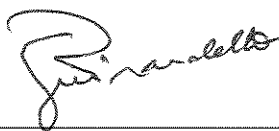
ssertação de Mestrado defendida e aprovada em 29 de setembro de 1998 pela banca
aminadora constituída pelos professores doutores:



Prof. Dr. José Roberto Nunhez
(Orientador)

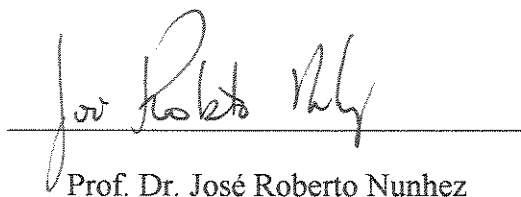


Dr. Waldir Pedro Martignoni



Prof. Dr. Reginaldo Guirardello

Esta versão corresponde à redação final da dissertação de mestrado defendida pela Engenheira Química Simone Maria Coimbra Peixoto e aprovada pela comissão julgadora em 29 de setembro de 1998.



Handwritten signature of Prof. Dr. José Roberto Nunhez, written in black ink over a horizontal line.

Prof. Dr. José Roberto Nunhez

A meus pais Olga e Edson, e a meu noivo
Luciano Pedrosa pelo apoio constante.

AGRADECIMENTOS

A meus pais Olga e Edson pelo incentivo.

A meus irmãos Edson Filho, Roberto, Eliana e Silvana por me ajudarem a vencer mais esta etapa de minha vida.

Ao meu noivo Luciano pelo carinho, paciência e compreensão.

Ao prof. Dr. José Roberto Nunhez pela orientação e amizade.

Ao Eng. Waldir Pedro Martignoni pelo apoio no uso do pacote computacional CFX.

A CAPES e FAPESP pelo auxílio financeiro que permitiu a realização deste trabalho.

SUMÁRIO

Lista de figuras	i
Lista de tabelas	vi
Nomenclatura	vii
Resumo	x
Abstract	xi
Capítulo 1 – INTRODUÇÃO	1
1 Introdução	2
1.1 Motivação do projeto	2
1.2 Objetivo	4
1.3 Organização da dissertação	5
Capítulo 2 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	6
2 Revisão Bibliográfica	7
2.1 Introdução	7
2.2 Literatura revista	8
2.3 Trabalhos que influenciaram a realização desta dissertação	14
2.4 Considerações finais	15
Capítulo 3 – FORMULAÇÃO DO MODELO	16
3 Formulação do Modelo	17
3.1. Introdução	17
3.2. Equações fundamentais	17
3.2.1. Equação de conservação de momento	17
3.2.2. Equação de conservação de massa	19
3.2.3. Equação de conservação de energia	20
3.3. Propriedades físicas	20
3.4. Aspectos geométricos	21
3.5. Características do modelo	25
3.5.1. Jaquetas externas	26
3.5.2. Serpentinhas internas	26
3.6. Condições de contorno	26

3.7.	Coeficiente global de transferência de calor	33
3.8.	Comentários gerais	33
Capítulo 4 – MÉTODOS NUMÉRICOS		34
4	Métodos Numéricos	35
4.1	Introdução	35
4.2	Técnicas Básicas	35
4.3	Métodos dos Volumes Finitos	36
4.4	Discretização da Equação Geral	38
4.5	Método UPWIND	40
4.6	Método SIMPLEC	41
4.7	Sub-Relaxação	41
4.8	Independência da Malha	42
4.9	Considerações Finais	50
Capítulo 5 – TANQUES REATORES DE MISTURA USANDO SUPERFÍCIES DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR		51
5	Tanques Reatores de Mistura usando Superfícies de Transferência de Calor	52
5.1	Introdução	52
5.2	Jaquetas externas aos tanques reatores de mistura	52
5.2.1	Propriedades do fluido	53
5.2.2	Modo de agitação	55
5.2.3	Localização do agitador	57
5.2.4	Geometria do tanque	58
5.3	Serpentinas internas aos tanques reatores de mistura	83
5.3.1	Aparato experimental (Oldshue e Gretton, 1954)	84
5.3.2	Geometria proposta	95
5.3.2.1	Diâmetro do feixe de serpentinas	96
5.3.2.2	Diâmetro dos tubos	98
5.4	Resultados	99
5.4.1	Arranjo experimental/arranjo proposto de serpentinas	99
5.4.2	Geometria jaqueta/serpentina (arranjo experimental [Oldshue e Gretton, 1954] e proposto)	100

5.5	Considerações finais	121
Capítulo 6 –	CONCLUSÕES E SUGESTÕES FINAIS	122
6	Conclusões e Sugestões Finais	123
6.1	Conclusões	123
6.2	Sugestões para trabalhos futuros	125
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	127

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 Tanque agitado montado com um agitador turbina Rushton com seis lâminas	22
Figura 3.2 Geometria Experimental de Oldshue e Gretton(1954)	23
Figura 3.3 Domínio bidimensional do tanque com jaqueta e respectiva malha: (a) tanque agitado com jaqueta externa; (b) malha do tanque com jaqueta	27
Figura 3.4 Representação bidimensional do arranjo experimental de Oldshue e Gretton(1954) e malha correspondente: (a) tanque agitado com o arranjo experimental de serpentinas; (b) malha bidimensional para a geometria experimental	28
Figura 3.5 Representação bidimensional da geometria proposta neste trabalho e malha correspondente: (a) tanque agitado com o arranjo de serpentinas proposto; (b) malha bidimensional para a geometria proposta	29
Figura 3.6 Condições de contorno para o tanque de mistura	32
Figura 4.1 Malha bidimensional de volumes finitos	36
Figura 4.2 Representação de um volume de controle genérico	40
Figura 4.3A Distribuição de temperatura no eixo Y para fluido pseudoplástico (n=0,5)	44
Figura 4.3B Distribuição de temperatura no eixo X para fluido pseudoplástico (n=0,5)	45
Figura 4.4A Distribuição de temperatura no eixo Y para fluido Newtoniano(n=1,0)	46
Figura 4.4B Distribuição de temperatura no eixo X para fluido Newtoniano(n=1,0)	47
Figura 4.5A Distribuição de temperatura no eixo Y para fluido dilatante (n=1,5)	48
Figura 4.5B Distribuição de temperatura no eixo X para fluido dilatante (n=1,5)	49
Figura 5.1 Perfil de fluxo num tanque de mistura com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano(n=1,0)	59
Figura 5.2a Componente axial de velocidade. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano(n=1,0)	60

Figura 5.2b Componente radial de velocidade. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$)	61
Figura 5.2c Componente angular de velocidade. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	62
Figura 5.3 Distribuição de temperatura num tanque com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($1,0$).	63
Figura 5.4a Vetores de velocidade num tanque com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido pseudoplástico ($n=0,5$).	64
Figura 5.4b Vetores de velocidade num tanque com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm . Fluido Newtoniano ($n=1,0$).	65
Figura 5.4c Vetores de velocidade para num tanque com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm . Fluido dilatante ($n=1,5$).	66
Figura 5.5a Distribuição de viscosidade num tanque com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm . Fluido pseudoplástico($n=0,5$).	67
Figura 5.5b Distribuição de temperatura num tanque com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido pseudoplástico($n=0,5$).	68
Figura 5.6a Distribuição de viscosidade num tanque com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm . Fluido dilatante($n=1,5$).	69
Figura 5.6b Distribuição de temperatura num tanque com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm . Fluido dilatante($n=1,5$).	70
Figura 5.7a Vetores de velocidade para o tanque com jaqueta. Velocidade de rotação de 15 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	71
Figura 5.7b Vetores de velocidade para o tanque com jaqueta. Velocidade de rotação de 30 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	72
Figura 5.7c Vetores de velocidade para o tanque com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	73
Figura 5.8a Distribuição de temperatura para o tanque com jaqueta. Velocidade de rotação de 15 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	74
Figura 5.8b Distribuição de temperatura para o tanque com jaqueta. Velocidade de rotação de 30 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	75
Figura 5.8c Distribuição de temperatura para o tanque com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	76

Figura 5.9a Vetores de velocidade para o tanque com jaqueta no qual o agitador está posicionado no meio. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	77
Figura 5.9b Distribuição de temperatura para o tanque com jaqueta no qual o agitador está posicionado no meio. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	78
Figura 5.10a Vetores de velocidade para o tanque com jaqueta e com o fundo curvo. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	79
Figura 5.10b Vetores de velocidade para o tanque com jaqueta e com o fundo plano. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	80
Figura 5.11a Distribuição de viscosidade para o tanque com jaqueta e com o fundo curvo. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido pseudoplástico($n=0,5$).	81
Figura 5.11b Distribuição de viscosidade para o tanque com jaqueta e com o fundo plano. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido pseudoplástico($n=0,5$).	82
Figura 5.12 Vetores de velocidade para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	86
Figura 5.13 Distribuição de temperatura para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	87
Figura 5.14a Distribuição de viscosidade para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido pseudoplástico($n=0,5$).	88
Figura 5.14b Distribuição de temperatura para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido pseudoplástico($n=0,5$).	89
Figura 5.15a Distribuição de viscosidade para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido dilatante($n=1,5$).	90

Figura 5.15b Distribuição de temperatura para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido dilatante($n=1,5$).	91
Figura 5.16a Vetores de velocidade para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 15 rpm. Fluxo não-isotérmico. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	92
Figura 5.16b Vetores de velocidade para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 30 rpm. Fluxo não-isotérmico. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	93
Figura 5.16c Vetores de velocidade para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 60 rpm. Fluxo não-isotérmico. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	94
Figura 5.17a Vetores de velocidade para o arranjo proposto de serpentinas. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluxo não-isotérmico. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	103
Figura 5.17b Vetores de velocidade para o arranjo proposto de serpentinas. Velocidade de rotação de 30 rpm. Fluxo não-isotérmico. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	104
Figura 5.17a Vetores de velocidade para o arranjo proposto de serpentinas. Velocidade de rotação de 15 rpm. Fluxo não-isotérmico. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	105
Figura 5.18 Distribuição de temperatura para o arranjo proposto de serpentinas. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$).	106
Figura 5.19a Distribuição de viscosidade para o arranjo proposto de serpentinas. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido pseudoplástico($n=0,5$).	107
Figura 5.19b Distribuição de temperatura para o arranjo proposto de serpentinas. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido pseudoplástico($n=0,5$).	108
Figura 5.20a Distribuição de viscosidade para o arranjo proposto de serpentinas. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido dilatante($n=1,5$).	109
Figura 5.20b Distribuição de temperatura para o arranjo proposto de serpentinas. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido dilatante($n=1,5$).	110

- Figura 5.21a Vetores de velocidade para a geometria proposta de serpentinas localizadas no centro. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$). 111
- Figura 5.21b Distribuição de temperatura para a geometria proposta com as serpentinas localizadas no centro. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$). 112
- Figura 5.22a Vetores de velocidade para a geometria proposta usando um diâmetro de 0,04 m para os tubos da serpentina. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$). 113
- Figura 5.22b Distribuição de temperatura para a geometria proposta usando um diâmetro de 0,04 m para os tubos da serpentina. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$). 114
- Figura 5.23a Vetores de velocidade para a geometria proposta usando um diâmetro de 0,07 m para os tubos da serpentina. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$). 115
- Figura 5.23b Distribuição de temperatura para a geometria proposta usando um diâmetro de 0,07 m para os tubos da serpentina. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$). 116
- Figura 5.24a Vetores de velocidade para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) combinado com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$). 117
- Figura 5.24b Distribuição de temperatura para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) combinado com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$). 118
- Figura 5.25a Vetores de velocidade para o arranjo proposto de serpentinas com diâmetro dos tubos de 0,04 m combinado com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$). 119
- Figura 5.25b Distribuição de temperatura para o arranjo proposto de serpentinas com diâmetro dos tubos de 0,04 m combinado com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano($n=1,0$). 120

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1	Propriedades do fluido e parâmetros do modelo Power Law	21
Tabela 3.2	Dimensões do tanque e arranjo de serpentinas no trabalho de Oldshue e Gretton (1954)	24
Tabela 4.1	Comparação da distribuição de temperatura entre malhas grossa (5264 volumes de controle) e fina (10604 volumes de controle)	43
Tabela 5.1	Dimensões do tanque reator de mistura	53
Tabela 5.2	A influência da velocidade de rotação na distribuição de temperatura	56
Tabela 5.3	A influência da posição do agitador na distribuição de temperatura	57
Tabela 5.4	A influência da forma do fundo do tanque	58
Tabela 5.5	A influência do modo de operação do agitador na distribuição de temperatura em tanques de mistura com o arranjo experimental de serpentinas	85
Tabela 5.6	A influência do modo de operação do agitador na distribuição de temperatura em tanques de mistura com o arranjo proposto de serpentinas	96
Tabela 5.7	A influência do diâmetro do feixe de serpentinas	97
Tabela 5.8	A influência do diâmetro dos tubos das serpentinas	98
Tabela 5.9	Comparação entre as distribuições de temperatura para os arranjos experimental (Oldshue e Gretton, 1954) e o proposto de serpentinas	100
Tabela 5.10	Comparação entre as configurações de jaqueta, de serpentinas e da combinação de jaqueta/serpentina	102

NOMENCLATURA

a	coeficiente das equações discretizadas de volume finito
A_J	área de transferência de calor da jaqueta, m^2
A_S	área de transferência de calor da serpentina, m^2
A_{SL}	área de transferência de calor da superfície livre do líquido, m^2
b	coeficiente das equações discretizadas de volume finito
C	altura do agitador, m
C_p	calor específico a pressão constante, J/m.K
C_w	coeficiente convectivo na face oeste do volume de controle
d	diâmetro dos tubos das serpentinas, m
D	diâmetro do agitador, m
D_b	comprimento da lâmina, m
D_C	diâmetro do feixe de serpentinas, m
D_T	diâmetro do tanque, m
D_w	coeficiente de difusão na face oeste do volume de controle
E	número de voltas helicoidais do arranjo de serpentinas
h_w	coeficiente de transferência de calor nas paredes do tanque, W/m^2K
h_{SL}	coeficiente de transferência de calor na superfície livre, W/m^2K
k_l	condutividade térmica do líquido, W/m.K
n	atributo de viscosidade não-Newtoniana do modelo Power Law
n_p	número de lâminas do agitador
N	velocidade de rotação do agitador, rpm
p	pressão, N/m^2
R	distância radial da linha central do eixo, m
R_s	raio do eixo do agitador, m
R_T	raio do tanque, m
s	espessura do disco do agitador, m
S	termo fonte, W/m^3
S_C	espaçamento entre tubos, m
$\mathcal{S}_C$	parte constante do termo fonte linearizado
$\mathcal{S}_P$	coeficiente de ϕ no termo fonte linearizado

T	temperatura, °C
T_M	temperatura média no tanque, °C
T_{SL}	temperatura na superfície livre, °C
T_W	temperatura nas paredes e fundo do tanque, e nas paredes dos tubos da serpentina, °C
u_r	componente radial de velocidade, m/s
u_z	componente axial de velocidade, m/s
u_θ	componente angular de velocidade, m/s
U_m	coeficiente global médio de transferência de calor no tanque, $W/m^2\text{°C}$
V_T	volume de líquido no tanque, m^3
Z	nível do líquido no tanque, m

LETRAS GREGAS

ϕ	variável genérica (velocidade, pressão temperatura)
γ	taxa de cisalhamento
μ_0	viscosidade Newtoniana, kg/m.s
μ	viscosidade, kg/m.s
π	3,1415...
ρ	densidade, kg/m^3
σ_{ij}	tensores tensão na superfície ij
ΔH	calor gerado pela reação química, W/m^3
ΔV	volume do volume de controle

SUBSCRITOS

e	interface leste do volume de controle
E	ponto leste do volume de controle

n	interface norte do volume de controle
N	ponto norte do volume de controle
P	ponto central do volume de controle
s	interface sul do volume de controle
S	ponto sul do volume de controle
w	interface oeste do volume de controle
W	ponto oeste do volume de controle

RESUMO

PEIXOTO, Simone Maria Coimbra. Escolha de Arranjos Preferenciais de Serpentinhas Internas em Tanques de Mistura utilizando a Fluido-Dinâmica Computacional (CFD). Campinas: UNICAMP, 1998. (Dissertação, mestrado em Engenharia Química)

Os tanques de mistura são muito utilizados nas indústrias químicas para processar produtos de alto valor agregado. No entanto, apesar da sua grande importância nas indústrias químicas, poucas informações estão disponíveis sobre como o desempenho desses equipamentos é influenciado pela configuração mecânica do agitador, pelo tipo de superfície de troca térmica e pelo modo de operação. Um entendimento mais profundo destes fenômenos pode proporcionar meios de se otimizar projetos de reatores que sejam condizentes com uma melhor circulação interna do fluido e uma troca de calor mais eficiente. Este estudo tem o objetivo de estudar o arranjo geométrico de um tanque de mistura com um agitador tipo turbina Rushton e com serpentinas helicoidais para resfriamento conforme o trabalho sugerido por Oldshue e Gretton (1954), visto que até hoje este arranjo é utilizado por muitas indústrias nos projetos desses tanques. Trabalhos anteriores criticaram esta geometria porque este arranjo apresenta serpentinas posicionadas na altura da descarga do fluxo proveniente do agitador. Com as simulações realizadas neste estudo constatou-se que o arranjo do tanque com serpentinas pode sofrer modificações quanto à forma do tanque e ao arranjo do feixe de serpentinas, possibilitando a proposição de geometrias que proporcionam melhor mistura e controle de temperatura. Este trabalho utiliza o pacote computacional CFX-F3D para a realização das simulações. O modelo é bidimensional e o tanque opera em regime laminar. O pacote utiliza o método dos volumes finitos com variáveis colocadas e sistema de coordenadas “body-fitted” para resolver as equações do modelo. A comparação dos resultados obtidos, através de várias simulações de arranjos de serpentinas, permitiu a obtenção de um arranjo otimizado de serpentinas que apresenta um controle de temperatura mais eficiente e um melhor coeficiente de transferência de calor com minimização dos gastos de energia.

Palavras chave: Transferência de calor, tanques de mistura, fluido-dinâmica computacional, serpentinas helicoidais, projeto de reatores.

ABSTRACT

PEIXOTO, Simone Maria Coimbra. Escolha de Arranjos Preferenciais de Serpentinhas Internas em Tanques de Mistura utilizando a Fluido-Dinâmica Computacional (CFD). Campinas: UNICAMP, 1998. (Dissertação, mestrado em Engenharia Química)

Stirred tank reactors are extensively used in chemical industries to process low volume products of high value. Despite its importance, little is known about the performance of such systems. The mechanical configuration of the internals, in particular the impeller and the heat transfer surfaces, as well as mode of operation, have a deep effect in the flow. A deeper knowledge of the behaviour of such systems may provide ways to improve the mechanical design. The aim of this study is to analyse the experimental geometry of a stirred tank reactor with a Rushton turbine impeller and helical coils according to the work of Oldshue and Gretton (1954), since this kind of configuration is still employed in reactor design in our days. Previous work criticised the experimental apparatus because it employs coils at the same height of the impeller blades. The simulated results showed that it is possible to modify vessel shape and coil helix which lead to designs consistent with better mixing and heat transfer. This work uses the CFX 4.1 fluid dynamics package for the calculations. The model calculates the three velocities in a two dimensional mesh for laminar flow. The software uses finite volumes with colocalized variables and body fitted coordinates. Simulation results with varying vessel shapes and coil positions led to the determination of optimized designs with more efficient temperature control and better heat transfer coefficient, which allows reduced energy operating costs.

Keywords: Heat transfer, stirred tanks, computational fluid dynamics, helical coils, reactor design.

CAPÍTULO 1:

INTRODUÇÃO

1 INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO DO PROJETO

Tanques de mistura são muito usados nas indústrias químicas. Calcula-se que 50% da produção química do mundo utiliza esses tanques para processar pouco volume de produtos de alto valor agregado na indústria de química fina e, por isso, existe a necessidade de se pensar em um ótimo projeto destes equipamentos para se garantir alta produtividade (Nunhez, 1994). Entretanto, apesar da grande importância desses tanques na indústria química, poucas informações estão disponíveis na literatura sobre a influência da configuração mecânica do agitador, das superfícies de transferência de calor e do modo de agitação no desempenho destes equipamentos.

O uso de correlações empíricas baseadas em análises adimensionais para otimização do projeto de tanques de mistura apresenta limitações significativas. Essas limitações devem-se ao fato de que as relações empíricas não levam em consideração importantes fatores de projeto que evidentemente influenciam a eficiência dos tanques de mistura. As hipóteses de mistura perfeita e temperatura uniforme são muitas vezes altamente restritivas, de modo que um projeto mais elaborado necessita de informações que vão além das que são normalmente fornecidas pela maioria das investigações experimentais. Algumas das variáveis que interferem na determinação do coeficiente de transferência de calor em tanques de mistura e que não são previstas pela maioria das equações empíricas, são: a forma geométrica do fundo do tanque (plana ou curva), a presença ou não de chicanas (número de chicanas), o espaçamento entre os tubos da serpentina (para reatores com serpentinas), o número de lâminas do agitador, a geometria das lâminas (altura, comprimento, posição). Os efeitos dessas variáveis não são normalmente investigadas em detalhe por estudos experimentais. Melhorias no projeto requerem o conhecimento do campo de fluxo, da distribuição de temperatura e das variações de concentração no tanque. Este melhor desempenho é agora requerido pelos processos industriais que objetivam especificações de alta qualidade do produto e

minimização dos gastos e efluentes. Por isso, os novos projetos necessitam de um projeto de alto padrão e controle rígido sobre as condições do processo.

Na década de 80, com o objetivo de se obter um maior conhecimento destes sistemas reacionais, as investigações computacionais tiveram impulso pela utilização da fluido-dinâmica computacional (CFD), graças ao significativo aumento do poder computacional e a sofisticação dos pacotes gráficos. A aplicação das técnicas fluido dinâmicas vem proporcionando análises de fenômenos que, com as técnicas empíricas, não eram viáveis. Dentre os estudos que tiveram grande impulso destacam-se: estudo de reatores químicos, fornos, separadores (ex: ciclones), etc.

Para misturas reacionais líquidas em tanques, a taxa de reação depende da temperatura e da concentração do meio reacional e estas variam consideravelmente com o tipo de agitação. Condições uniformes são obtidas quando se tem boa mistura, que está diretamente relacionada à agitação vigorosa. Entretanto, em algumas reações de polimerização onde o líquido é não-newtoniano e a densidade e a viscosidade variam com o tempo, pode existir uma restrição quanto ao grau de agitação premissível. Serão mostrados mais a frente o efeito que a agitação vigorosa causa em fluidos não-Newtonianos.

Para o caso considerado aqui, em que a reação é exotérmica, jaquetas ou serpentinas são empregadas para remover o calor. Em geral, ambos os arranjos são bons para o controle da temperatura. As jaquetas tem a vantagem de não interferir diretamente no fluxo, exceto no fundo do tanque e paredes, devido à diferença de temperatura alterar a viscosidade próxima a jaqueta. Dependendo da reação e especialmente quando elas ocorrem em fluxo laminar, existe uma grande diferença de temperatura entre as paredes do tanque e as zonas de recirculação formados no fluxo secundário, que são típicas de tanques de mistura com agitadores radiais. Isto pode ser crítico para alguns sistemas de polimerização onde o tamanho do polímero depende muito da temperatura. As serpentinas afetam mais diretamente o fluxo interno porque os seus tubos oferecem resistência à circulação do meio reacional. No entanto, este estudo tem por objetivo demonstrar que é possível determinar uma quantidade “ótima” de serpentinas que, quando posicionadas corretamente, possibilitam uma área de transferência de calor efetiva que não altera significativamente a circulação interna no tanque.

O arranjo experimental sugerido por Oldshue e Gretton (1954) de tanques de mistura com serpentinas internas, é até hoje difundido nas indústrias para projetos de

tanques com serpentinas. Estudos recentes realizados por Street, Street e McGreavy (1991) e Nunhez e McGreavy (1994, 1995) indicaram que este arranjo prejudica a circulação interna no tanque. Os autores indicam que isso ocorre em função da presença de serpentinas posicionadas na altura das lâminas do agitador. Eles comentam que estas serpentinas na altura do agitador restringem o fluxo, reduzindo a transferência global de calor, embora a transferência de calor local na região do agitador seja excelente. Eles comentam também que este arranjo restringe muito o fluxo interno.

A proposta deste estudo consiste em investigar modificações relativas ao aspecto geométrico destes tanques com agitador tipo Rushton e serpentinas sugerida por Oldshue e Gretton (1954), para que se proporcione melhor circulação do fluido e uma distribuição de temperatura mais uniforme. Assim, pretende-se apresentar uma geometria otimizada de um tanque com serpentinas consistente com boa mistura e transferência de calor e, conseqüentemente, com minimização de gastos. Essas investigações serão realizadas através da técnica da fluido-dinâmica computacional. Os resultados numéricos da modelagem proposta serão obtidos através do pacote computacional CFX 4.1, da AEA Technology, que está consolidado a 10 anos aproximadamente, e tem provado ser de muita ajuda para a solução e entendimento de diversos problemas de escoamento. Este pacote utiliza o método dos volumes finitos para a solução das equações que governam o modelo e tem a vantagem de requerer pouca memória computacional com relação aos outros métodos numéricos existentes.

1.2 OBJETIVO

O objetivo desse trabalho é determinar arranjos otimizados de tanques de mistura com serpentinas que sejam eficientes quanto à circulação do fluido e transferência de calor. O trabalho estudará o arranjo experimental sugerido por Oldshue e Gretton (1954), que atualmente é ainda utilizado em projetos de tanques de mistura com serpentinas, o qual será comparado com algumas geometrias propostas neste estudo.

1.3 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Após a introdução deste capítulo, o capítulo 2 traz uma revisão bibliográfica sobre o assunto da dissertação. Ênfase é dada aos trabalhos computacionais publicados nos últimos 5 anos sobre tanques de mistura.

O capítulo 3 refere-se à formulação do modelo matemático bidimensional de tanques agitados com agitador tipo Rushton. Nele são apresentadas as equações de conservação de massa, momento e energia que governam o modelo e a equação constitutiva que descreve o comportamento de fluidos não-Newtonianos.

O capítulo 4 enfoca o método numérico aplicado neste trabalho para resolução do problema, mostrando a maneira pela qual o método é implementado no pacote computacional CFX-F3D versão 4.1.

O capítulo 5 traz os resultados obtidos de simulações do tanque utilizando serpentinas como superfície de troca térmica. São propostos melhoramentos no projeto em relação ao arranjo experimental de Oldshue e Gretton (1954) de tanques de mistura com serpentinas internas, utilizadas para manter a temperatura de reação uniforme. Por fim, é apresentado um arranjo otimizado do tanque com serpentinas que proporciona uma melhor circulação interna do fluido e um melhor coeficiente de transferência de calor em relação ao aparato experimental de Oldshue e Gretton.

O capítulo 6 apresenta as conclusões sobre o estudo desenvolvido e traz sugestões para trabalhos futuros sobre tanques de mistura que utilizam serpentinas para resfriamento.

CAPÍTULO 2:

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 INTRODUÇÃO

Os tanques de mistura tem sido objeto de estudo não somente sob o aspecto reacional, mas também para processos de mistura. Quase todos os trabalhos tem um caráter basicamente experimental. Entretanto, a partir dos anos 80, muita ênfase tem sido dada a investigações computacionais utilizando a fluido-dinâmica computacional, do inglês Computational Fluid Dynamics – CFD. Isto têm sido possível graças ao significativo aumento do poder computacional e a sofisticação dos pacotes gráficos. Em geral, a técnica de fluido-dinâmica computacional tem o intuito de tornar as investigações experimentais mais eficientes, possibilitando um entendimento muito mais profundo dos processos de escoamento. Deste modo, a fluido-dinâmica computacional não surgiu com a intenção de substituir a fluido-dinâmica experimental, mas sim de ambas trabalharem juntas para proporcionarem um entendimento muito mais amplo do processo como um todo.

A grande maioria dos estudos sobre escoamentos dentro de tanques de mistura concentram-se no regime turbulento, muito embora reações químicas com reatores operando em regime laminar sejam usadas extensivamente pelas indústrias químicas. Como consequência dos poucos trabalhos realizados em regime laminar, poucas são, também, as investigações computacionais que analisam a troca térmica em sistemas reacionais em escoamento laminar. Apesar disso, nos últimos anos foram publicados alguns trabalhos em regime laminar que proporcionaram informações importantes quanto ao aspecto geométrico desses tanques o qual tem influência direta na obtenção de melhor mistura e transferência de calor.

2.2 LITERATURA REVISTA

Os perfis de fluxo em tanques reatores de mistura têm sido investigados em vários trabalhos experimentais, tais como: Sachs e Rushton (1954), Reed et al (1977), Nouri et al (1987).

Hockey et al (1989) revelaram que o perfil de fluxo varia com o número de Reynolds e com a atribuição não-Newtoniana do fluido. Além disso observaram que a direção de rotação dos principais vórtices gerada por um agitador de lâminas "pitch" era invertida em relação ao fluido Newtoniano. Greene et al (1982) também observaram variações no ângulo de descarga do fluxo e atribuíram isto à efeitos viscoelásticos.

Investigando a eficiência de vários tipos de agitadores em condições turbulentas, para duas posições diferentes do agitador, Bertrand et al (1980) mostraram que a energia requerida pelo agitador aumenta quando ele está posicionado a 1/3 da altura de líquido. Com isso, eles constataram que a determinação da posição do agitador é um fator importantíssimo para a obtenção de um bom desempenho do tanque.

Yanneskis et al (1987) apresentaram dados detalhados do fluxo e caminho dos vórtices entre duas lâminas consecutivas de um agitador do tipo turbina Rushton, além de examinarem o efeito da posição do agitador.

Já o trabalho de Ranade e Joshi (1990a, 1990b) mostrou a influência que o tamanho do agitador, a espessura do disco e das lâminas têm sobre o perfil de fluxo em tanques de mistura com agitador Rushton. Eles também proporcionaram uma coleção de dados sobre a maior parte do tanque.

Nouri e Whitelaw (1990) apresentaram dados experimentais sobre o fluxo de fluido não-Newtoniano gerado por um agitador Rushton. Nesse trabalho eles concluíram que o fluxo gerado por este agitador não muda significativamente com o aumento do número de Reynolds.

Recentemente, Dyster et al (1993) realizaram medidas do perfil de velocidade utilizando LDA (Laser Doppler Anemometry) para fluidos altamente viscosos agitados por uma turbina Rushton e apresentaram as características gerais desse agitador, para $Re \geq 5$, $Re = \rho D^2 N / \mu$, onde D é o diâmetro do agitador e μ é a viscosidade constante. Este é um dos poucos trabalhos que mediram o perfil de fluxo experimentalmente em regime laminar. Para regime turbulento, Yianneskis e Whitelaw (1993) e Stoots e Calabrese

(1995) proporcionaram dados mais completos de perfil de fluxo para o agitador turbina Rushton.

Mishra e Joshi (1993) investigaram sob condições turbulentas os efeitos que o diâmetro e a posição do agitador do tipo turbina de disco tem sobre o fluxo e compararam com outros tipos de agitadores turbina com fluxo radial em um tanque com chicanas. Eles também mostraram que diferentes agitadores de fluxo radial desenvolvem perfis de fluxo consideravelmente diferentes na região do agitador e nas demais regiões do tanque.

Kresta e Wood (1993) mostraram que os fatores geométricos do agitador turbina de lâminas "pitch" com ângulo de 45° tem grande influência no desempenho do tanque. Neste trabalho experimental verificou-se que o perfil de fluxo muda em função da distância que o agitador está do fundo do tanque.

Mais recentemente, Moore et al (1995) estudaram a distribuição de velocidade próxima aos diversos agitadores do tipo turbina em tanques de mistura, entre eles o Rushton. Eles verificaram que estes agitadores tipo turbina, sob a mesma velocidade de rotação e com o mesmo diâmetro apresentam iguais perfis de fluxo com um grande fluxo tangencial e duas zonas de recirculação radial-axial acima e abaixo das lâminas, sendo o fluxo nas zonas de recirculação laminar.

Ibrahim et al (1995) investigaram o fluxo para fluido Newtoniano gerado por um agitador tipo Rushton em tanques de mistura. Eles estenderam seu estudo para analisar, também, como o perfil de fluxo e a energia requerida dependem do tipo do agitador, da relação geométrica entre o agitador e o tanque e do regime de fluxo. E, deste modo, mostraram que para $Re < 300$ não há diferença no perfil de fluxo gerado e na energia requerida pelo agitador Rushton para qualquer relação geométrica agitador/tanque.

As investigações experimentais têm contribuído significativamente para a melhor compreensão da hidrodinâmica complexa dos tanques de mistura. Entretanto, tais estudos têm óbvias limitações considerando o extenso número de parâmetros que tem grande impacto no fluxo gerado pelos agitadores. Diante disso, a análise numérica surgiu para proporcionar uma melhor compreensão sobre o fluxo em tanques de mistura.

O primeiro trabalho que realizou a descrição analítica do perfil de fluxo foi desenvolvido por deSouza e Pike (1972) e está baseado em observações determinadas experimentalmente. Eles mostraram um perfil de fluxo em tanques com forma geométrica simples, cujo fluxo de descarga do agitador era representado por uma

simples aproximação. Já Platzer (1988) apresentou descrições mais detalhadas do perfil de fluxo; entretanto ainda utilizou uma aproximação na região do agitador.

Harvey e Greaves (1982) apresentaram a primeira descrição detalhada do fluxo em um tanque agitado. Eles estudaram um fluxo turbulento sobre condições isotérmicas através de um modelo bidimensional. O modelo k- ϵ de turbulência foi usado para estimar a viscosidade turbulenta assumindo-se que a turbulência no agitador é insignificante. No entanto, Ranade e Joshi (1990b) mostraram que esta hipótese não é verdadeira, pois a turbulência gerada pelo agitador é um fator dominante na determinação de seu desempenho.

Pericleus e Patel (1987) descreveram um modelo matemático bidimensional em condições turbulentas cujos perfis de velocidade para diversos tipos de agitadores puderam ser descritos, entre os quais o agitador Rushton. E, em seguida, estenderam seu estudo para demonstrar como o fluxo é gerado na região do agitador.

Middleton et al (1986) apresentaram resultados que descrevem a velocidade turbulenta em tanque de mistura com chicanas. Eles utilizaram um modelo tridimensional para prever o perfil de fluxo gerado por reações complexas nesses tanques e constataram que os perfis de velocidade obtidos apresentavam boa concordância com dados experimentais.

Mais recentemente, Ju et al (1990) realizaram avanços na descrição do perfil de fluxo tridimensional em condições turbulentas para tanques de mistura com chicanas verticais. Eles investigaram como o perfil de fluxo muda dependendo de que seção vertical é tomada dentro do tanque e, desse modo, verificaram o efeito causado pelas chicanas. Além disso, eles usaram uma descrição mais sofisticada para o fluxo gerado pelo agitador, que é de grande utilidade para explicar a turbulência.

Ranade e Joshi (1990a, 1990b) predisseram o perfil de fluxo para um tanque de mistura com agitador Rushton e chicanas usando um modelo tridimensional para fluxo turbulento. Para isso, eles usaram o modelo de turbulência k- ϵ e trataram o agitador como uma "caixa preta", ou seja, prescreveram valores empíricos de velocidade e quantidades turbulentas nos seus limites.

Entretanto, Fokema et al (1994) apontaram a importância e a dificuldade de descrever o agitador corretamente nesse tipo de simulação. Eles também mostraram que mudanças nas condições de contorno da velocidade nas direções axial, radial e tangencial de 50%, 80% e 25% , respectivamente, não tem efeito na distribuição da turbulência.

Estudos numéricos sobre tanques de mistura em regime laminar também são encontrados na literatura. Hiraoka et al (1978) publicaram o primeiro trabalho para os agitadores do tipo "paddle" e âncora. Em 1979, eles estudaram o fluxo não-Newtoniano em um tanque com agitador tipo "paddle" através de análises numéricas obtidas com um modelo de fluxo bidimensional. E, deste modo, mostraram que o perfil de velocidade próximo às paredes do tanque só pode ser correlacionado com as características da velocidade do agitador, uma vez que o perfil de fluxo depende do efeito da viscosidade não-Newtoniana na região do fluxo. Em 1988, eles apresentaram um modelo tridimensional no estudo do fluxo gerado por um agitador "paddle" para um fluido Newtoniano e observaram que, embora o perfil de fluxo próximo ao agitador tenha sido afetado pela energia requerida, o perfil de velocidade na região entre o agitador e o fundo do tanque concordaram bem com o trabalho de Yamamoto (1961).

Kaminoyama et al (1990) descreveram o fluxo tridimensional em um tanque cilíndrico com chicanas. Este trabalho explicou como a geometria detalhada do agitador afeta o perfil de fluxo para uma variedade de configurações incluindo agitadores do tipo "paddle", turbina e âncora. Posteriormente, o trabalho de Kaminoyama et al (1994a) revelou o fluxo de um fluido pseudoplástico em tanques sem a presença de chicanas usando um agitador tipo âncora. Mais recentemente Kaminoyama et al (1994b) apresentaram um método para estimar a energia requerida para um fluido pseudoplástico nesses tanques usando vários tipos de agitadores, tais como "paddle", turbina e âncora.

Abid et al (1992) apresentaram resultados sobre o fluxo gerado por agitadores do tipo âncora e do tipo "gate" para fluidos altamente viscosos através de um modelo tridimensional. Eles observaram que este trabalho poderia ser aplicado também aos agitadores tipo turbina. Diante disso, em Abid et al (1994), estenderam este estudo para agitadores com duas lâminas.

Todas as aplicações apresentadas até agora sobre simulações de fluxo para tanques de mistura estão baseadas em análises sobre estado estacionário e tratam o agitador girando como uma "caixa preta". Essas aproximações requerem condições de contorno iniciais para o agitador que necessitam ser determinadas experimentalmente. Sendo assim, embora estas aproximações representem com sucesso as características do fluxo no tanque, sua aplicação é limitada pelas seguintes razões:

1. Indisponibilidade de dados;

2. Falta de condições de contorno precisas (experimental) para o agitador no caso de fluxos multifásicos;
3. Além disso, não captura com detalhe o fluxo entre as lâminas do agitador, visto que o conhecimento desses detalhes é essencial para o realismo da simulação de mistura reativa e de fluxo multifásicos em tanques reatores de mistura.

Para eliminar algumas das limitações descritas acima, Perng e Murthy (1992, 1993) descreveram um modelo de aproximação do movimento da malha para simulação de fluxo não-estacionário em tanques de mistura para condições laminar e turbulenta. Este modelo utiliza uma malha simples que cobre ambas as partes estacionária e em movimento do tanque. Neste caso, as paredes do tanque com chicanas correspondem à parte estacionária, enquanto o agitador e o volume por ele deslocado com a aplicação da velocidade de rotação se encontram em movimento. A vantagem dessa aproximação é que ela não necessita de dados experimentais para descrever a turbulência no tanque, além de se tratar de uma poderosa ferramenta para o estudo do fluxo em tanques de mistura uma vez que fornece perfis de fluxo mais coerentes com o fenômeno físico.

Luo et al (1993) seguiram a mesma linha do trabalho anterior utilizando o método dos volumes finitos para resolver as equações de transporte, e mostraram a importância da utilização de uma malha refinada na direção radial do agitador, o que é um caso raro nos trabalhos anteriores. Além disso, eles observaram que o fluxo é não estacionário principalmente nas vizinhanças do agitador, fenômeno significativo em tanques de mistura, e que o cálculo do perfil de fluxo através de análise com o tempo variando consegue fornecer dados precisos nessa região.

Mais recentemente, Takeda et al (1993) estudaram o perfil de fluxo nesses tanques com agitador "paddle" e chicanas. Eles utilizaram a mesma idéia de Perng e Murthy (1993) e Luo et al (1993), com a ajuda do pacote computacional "RFLOW" para a análise de fluxos incompressíveis. A principal característica desse pacote é a introdução do método de multi-blocos. Com este método a malha para cada bloco pôde então ser gerada independentemente da malha dos outros blocos. Este método computacional foi aplicado a agitadores mais complexos. Em ambos os casos, o modelo computacional com o método de multi-blocos representaram bem o fenômeno de mistura. Portanto, podendo ser efetivamente usado para investigar o fenômeno de mistura em tanques agitados.

Ranade (1997) mostrou que apesar dos métodos de Perng e Murthy (1992, 1993) e de Luo et al (1993) não necessitarem de dados experimentais para descrever as condições de contorno para o agitador, eles não podem ser usados como uma ferramenta para projetos devido às seguintes considerações:

1. Nessas aproximações a solução total do fluxo varia com o tempo no tanque de mistura; isto exige um poder computacional muito maior do que o requerido pela simulação em estado estacionário, tornando difícil o uso desses métodos para uma grande variedade de configurações;
2. Devido ao excessivo poder computacional necessário o número de células computacionais usadas para as simulações é restrito;
3. Por outro lado, os resultados obtidos com essas aproximações não são suficientemente validados (Harris et al 1996). Em função disso Ranade (1997) desenvolveu uma aproximação chamada "snapshot" que captura o fluxo gerado pelo agitador sem requerer dados experimentais e as condições de contorno do agitador são desenvolvidas. Esta aproximação precisa de pouco esforço computacional para simular o fluxo entre as lâminas e consegue capturar adequadamente o fluxo próximo ao agitador. A aproximação "snapshot" apresentou resultados que concordaram qualitativamente e quantitativamente bem com dados experimentais publicados.

Com o desenvolvimento desses métodos computacionais e o grande poder dos computadores atuais, os pacotes computacionais disponíveis para a fluido-dinâmica computacional estão aumentando em poder e flexibilidade enquanto a coleção de dados e técnicas de medidas são propriamente mais robustas e exatas. Com isso, eles podem ser utilizados para resolver qualquer problema de fluido dinâmica. Vários pacotes computacionais estão disponíveis no mercado, como por exemplo : FLUENT, PHOENIX, FIDAP e CFX-F3D (anteriormente chamado de CFDS-FLOW3D).

Hamill et al (1995) apresentaram um estudo sobre o uso do pacote computacional CFDS-FLOW3D através de simulações de aplicações reais de tanques de mistura. Eles mostraram como a aproximação "sliding-grid" pode ser aplicada para determinar o fluxo de movimento e os perfis de turbulência gerados por um agitador, o que caracteriza precisamente a ação do agitador.

Ciofato et al (1996) desenvolveram um modelo tridimensional do fluxo turbulento em tanques de mistura sem chicanas gerado por um agitador tipo Rushton, através do pacote computacional CFDS-FLOW3D. Eles utilizaram para a simulação numérica o

método dos volumes finitos com o sistema de coordenadas "body-fitted" e uma malha co-localizada. Além disso, não eram necessários dados empíricos para descrever as características do agitador. Os perfis de velocidade e de turbulência no tanque foram obtidos e a energia requerida pelo agitador foi determinada pelos modelos de turbulência $k-\epsilon$ e second-order differential stress (DS), sendo os resultados obtidos satisfatórios apenas para o último modelo.

2.3 TRABALHOS QUE INFLUENCIARAM A REALIZAÇÃO DESTA DISSERTAÇÃO

Oldshue e Gretton (1954) sugeriram uma geometria de tanques de mistura com serpentinas internas a qual ainda hoje é extensivamente difundida nas indústrias químicas em seus projetos de reatores. O trabalho deles foi experimental e estudou o fluxo turbulento, muito embora algumas condições em regime laminar tenham sido investigadas.

Street (1991), Street e McGreavy (1991) publicaram o primeiro trabalho computacional estudando os fenômenos de transferência de calor através da fluido-dinâmica computacional. O sistema por eles investigado constitui-se de um tanque de mistura sem a presença de chicanas com o fluxo gerado por um agitador simples montado axialmente. Usando um modelo axi-simétrico bidimensional, eles investigaram o comportamento de fluido Newtoniano e não-Newtoniano. Além disso, Street e McGreavy (1991) e Street (1991) apresentaram inovações com relação à configuração do tanque agitado, como por exemplo, a sugestão de uma configuração utilizando serpentinas para troca térmica. Este trabalho foi o primeiro a apontar falhas no arranjo de serpentinas sugerido por Oldshue e Gretton (1954), o qual apresenta limitação considerável com respeito ao escoamento interno a tanques de mistura devido à presença de serpentinas na altura das pás do agitador.

O segundo trabalho nessa linha de pesquisa, realizado por Nunhez e McGreavy (1994, 1995), é uma extensão do estudo de Street e McGreavy (1991) em 3-dimensões, usando agitador tipo Rushton com 06 pás. Esses autores, utilizando a fluido-dinâmica computacional através do pacote comercial FIDAP (Fluid Dynamic Analysis Package)

para obter os resultados, sugeriram que cuidados na geometria do tanque e no modo de operação do mesmo podem evitar ocorrência de zonas mortas típicas de cantos de tanques reacionais, bem como promover uma melhor circulação interna.

Street (1991), Street e McGreavy (1991), Nunhez e McGreavy (1994, 1995) não compararam o arranjo de serpentinas que sugeriram com o arranjo experimental de Oldshue e Gretton (1954). Logo, a realização dessa comparação ocasionará um entendimento mais profundo dos processos de troca de calor e escoamento em tanques de mistura, utilizando serpentinas para resfriamento, operando em regime laminar.

2.4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este capítulo apresentou um resumo dos trabalhos experimentais e computacionais existentes na literatura sobre o fluxo desenvolvido em tanques de mistura, dando ênfase aos estudos que influenciaram a busca de novos arranjos de serpentinas para o controle da temperatura reacional.

O próximo capítulo descreverá o modelo bidimensional usado nesse trabalho.

CAPÍTULO 3:

FORMULAÇÃO DO MODELO

3 FORMULAÇÃO DO MODELO

3.1 INTRODUÇÃO

O modelo matemático que descreve o fluxo e a transferência de massa e calor em tanques de mistura é apresentado a seguir, bem como as propriedades físicas do fluido e aspectos geométricos para a idealização do modelo bidimensional axi-simétrico.

3.2 EQUAÇÕES FUNDAMENTAIS

As equações de conservação de massa, momento e energia que governam o modelo axi-simétrico são especificadas em termos de uma referência Euleriana, cujo dedução é apresentada em livros que abordam a mecânica dos fluidos tais como Bird et al (1960) e Welty et al (1976). As equações são descritas a seguir:

3.2.1 Equação de Conservação de Momento

A aplicação dos princípios de conservação de momento linear para um elemento de fluido incompressível, em estado estacionário, resulta nas três equações abaixo em coordenadas cilíndricas:

Momento Radial:

$$\rho \left(u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{u_\theta^2}{r} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \sigma_{rr}) - \frac{1}{r} \sigma_{\theta\theta} + \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial z} \quad (3.1)$$

Momento Angular:

$$\rho \left(u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_r u_\theta}{r} + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \sigma_{r\theta}) + \frac{\partial \sigma_{z\theta}}{\partial z} \quad (3.2)$$

Momento Axial:

$$\rho \left(u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \sigma_{rz}) + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \quad (3.3)$$

onde:

ρ = densidade (kg/m³);

μ = viscosidade (kg/m.s);

p = pressão (N/m² ou Pa);

u = velocidade (m/s).

Os tensores são definidos como:

$$\sigma_{rr} = -p + 2\mu \frac{\partial u_r}{\partial r} \quad (3.4)$$

$$\sigma_{\theta\theta} = -p + 2\mu \frac{u_r}{r} \quad (3.5)$$

$$\sigma_{zz} = -p + 2\mu \frac{\partial u_z}{\partial z} \quad (3.6)$$

$$\sigma_{r\theta} = \mu r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{u_\theta}{r} \right) \quad (3.7)$$

$$\sigma_{z\theta} = \mu \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \quad (3.8)$$

$$\sigma_{rz} = \mu \left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \quad (3.9)$$

onde σ_{ij} = fluxo de j-momentum através da face perpendicular ao eixo i.

As equações acima são conhecidas como equações de Navier-Stokes para regime estacionário, com escoamento axi-simétrico, para fluidos Newtonianos escoando em regime laminar.

Como existe um interesse em estudar fluidos típicos de reações poliméricas, são investigados fluidos Newtonianos e não-Newtonianos altamente viscosos. Para fluidos não-Newtonianos é conveniente utilizar relações empíricas para descrever sua viscosidade. Este trabalho utiliza o modelo de “Power Law” por ser bem conhecido e ser simples de se implementar computacionalmente:

$$\mu = \mu_0 \gamma^{n-1} \quad (3.10)$$

onde:

μ_0 = viscosidade Newtoniana (kg/m.s);

n = número adimensional que descreve os atributos não-Newtonianos;

γ = taxa de cisalhamento.

A função é conhecida como função dissipação e é dependente das tensões de cisalhamento. Para o modelo axi-simétrico a função dissipação em coordenadas cilíndricas é dada por:

$$\gamma = 2 \left[\left(\frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{u_r}{r} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 \right] + \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{u_\theta}{r} \right) \right]^2 + \left[\frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right]^2 + \left[\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right]^2 \quad (3.11)$$

3.2.2 Equação de Conservação de Massa

Para densidade constante em estado estacionário, a conservação de massa na sua forma axi-simétrica é dada por:

$$\frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0 \quad (3.12)$$

3.2.3 Equação de Conservação de Energia

A conservação de energia na sua forma axi-simétrica para fluidos incompressíveis em regime estacionário é dada em coordenadas cilíndricas por:

$$\rho C_p \left(u_r \frac{\partial T}{\partial r} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(k_l r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_l \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \Delta H \quad (3.13)$$

onde :

C_p = calor específico a pressão constante (J/m.K);

k_l = condutividade térmica do líquido (W/m.K);

ΔH = calor gerado pela reação química (W/m³).

A dissipação de energia viscosa ($\mu\phi$) foi negligenciada pois, segundo a literatura (Street, 1991), este termo não tem efeito significativo em comparação aos demais termos presentes na equação de conservação de energia.

3.3 PROPRIEDADES FÍSICAS

As propriedades físicas do fluido têm grande influência na operação de reatores poliméricos já que sua composição muda com o tempo devido à reação química. Neste trabalho, as propriedades físicas do fluido não estão variando com o tempo e o calor gerado pela reação química é aproximado por uma fonte de calor que gera calor igualmente no meio reacional. Estes aspectos de modelagem podem ser detalhados em uma etapa complementar deste estudo.

A viscosidade para fluidos não-Newtonianos será determinada pela equação de Power Law, conforme já mencionado. A condutividade térmica, densidade e calor específico são assumidas constantes. As propriedades físicas, bem como os parâmetros usados na equação Power Law estão descriminados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Propriedades do fluido e parâmetros do modelo Power Law.

Condutividade Térmica	k_l	0,1 W/m. K
Calor Específico	C_p	100 J/ kg. K
Densidade	ρ	800 kg/m ³
Viscosidade Newtoniana	μ_0	1,0 kg/m. s
Atributo de viscosidade do modelo Power Law	n	0,5 ; 1,0 ou 1, 5

O calor gerado pela reação química de polimerização é aproximado por uma fonte de calor fixo (ΔH) de 1200 W/ m³. Esta aproximação é considerada adequada para o intervalo de temperatura no qual este estudo de transferência de calor está sendo realizado, o que está de acordo com o trabalho de Nunhez (1994). O calor proveniente da reação de polimerização é dissipado na superfície livre do líquido, nas paredes do tanque e nas serpentinas internas. A água de resfriamento utilizada nas serpentinas está a uma temperatura T_w de 10 °C e isto é assegurado pois se assume que a taxa de fluxo de fluido de refrigerante (água) é bastante elevada para não causar significativo aumento de temperatura. Essas mesmas condições são aplicadas quando jaquetas de resfriamento são utilizadas. Os coeficientes de transferência de calor para as paredes e superfície livre do tanque são $h_w = 500$ W/ m² K e $h_s = 5$ W / m² K, respectivamente.

3.4 ASPECTOS GEOMÉTRICOS

Os tanques agitados estudados neste trabalho são cilíndricos e são movidos por um agitador turbina Rushton com seis lâminas, que está montado no centro do eixo de rotação, como apresentado na Figura 3.1.

As dimensões são dadas na Tabela 3.2 e correspondem às utilizadas por Oldshue e Gretton (1954) como mostra a Figura 3.2.

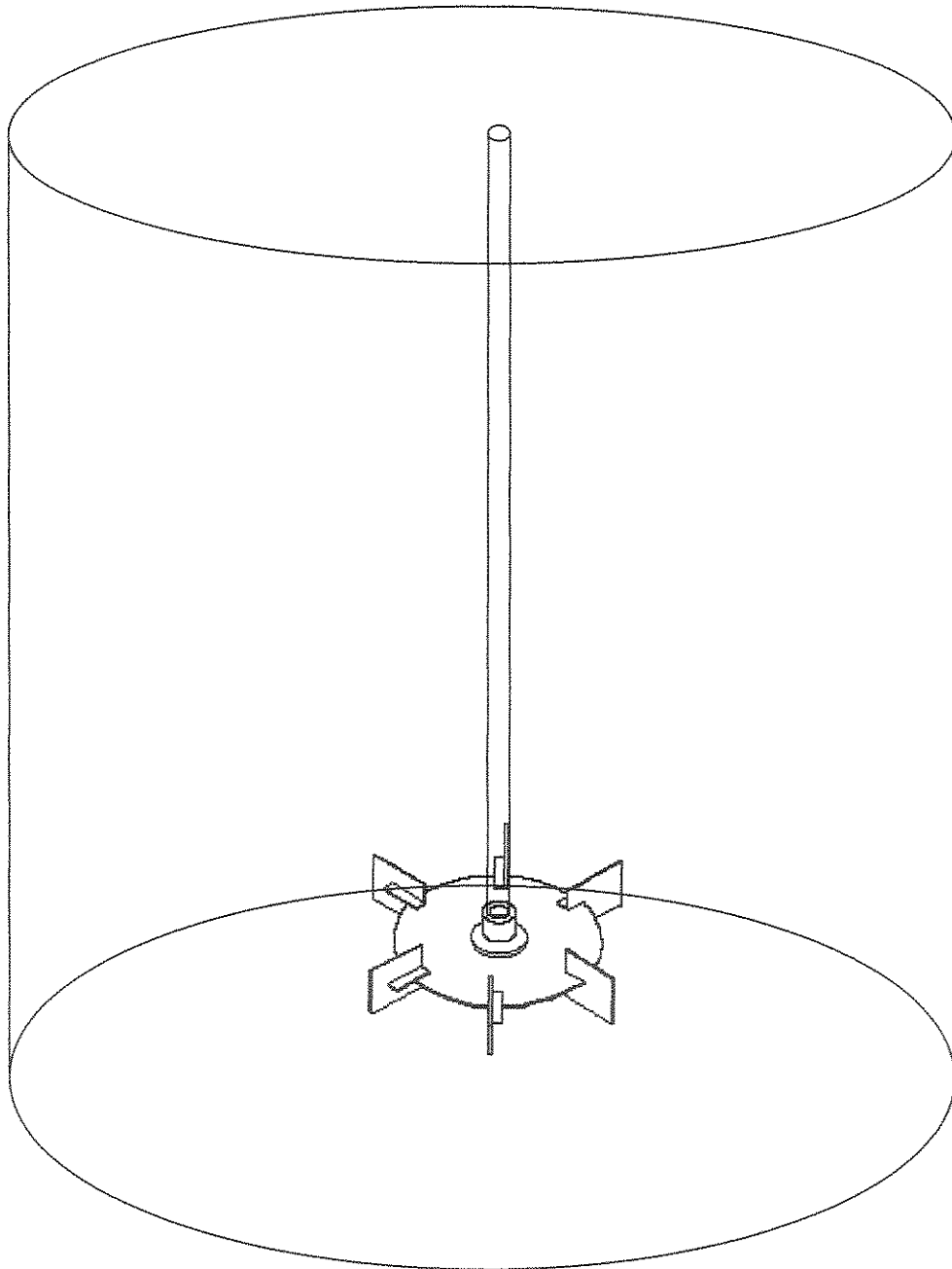


Figura 3.1: Tanque agitado montado com um agitador turbina Rushton com seis lâminas.

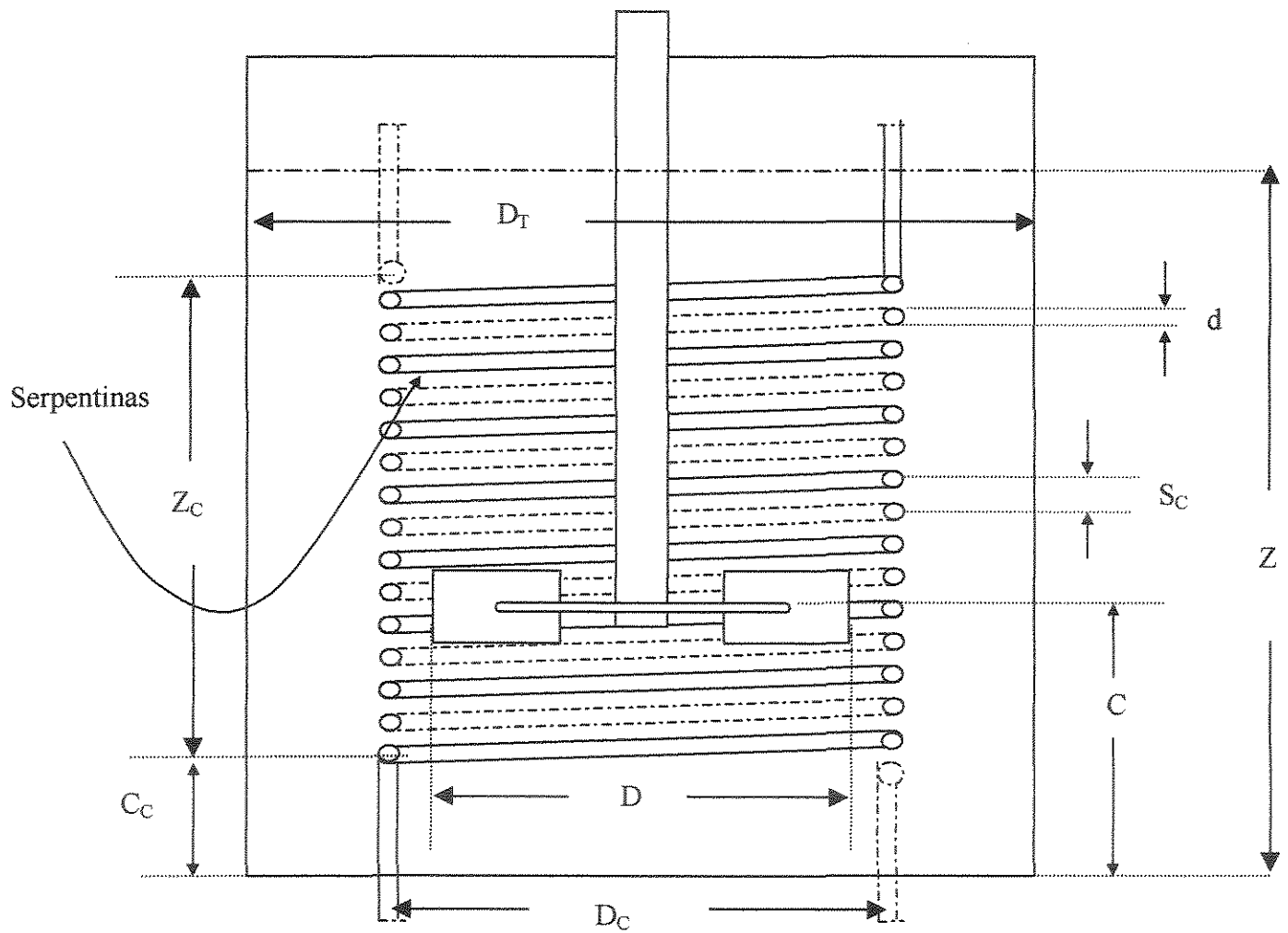


Figura 3.2 : Geometria Experimental de Oldshue e Gretton (1954).

Tabela 3.2: Dimensões do tanque e arranjo de serpentinas no trabalho de Oldshue e Gretton (1954).

Diâmetro do Tanque	D_T	1,22 m
Nível de Líquido no Tanque	Z	1,22 m
Altura do Agitador	C	0,41 m
Diâmetro do Agitador	D	0,41 m
Espessura do Disco do Agitador	s	0,02 m
Raio do Eixo do Agitador	R_s	0,03 m
Comprimento da Lâmina	D_b	0,10 m
Altura da Lâmina	D_w	0,08 m
Diâmetro do Feixe de Serpentinhas	D_c	0,87 m
Diâmetro dos Tubos das Serpentinhas	d	0,05 m
Espaçamento entre Tubos	S_c	0,09 m

Para se capturar um nível apropriado de detalhes do reator, seria necessário considerar um modelo tridimensional. Como trata-se de um estudo simplificado, um modelo bidimensional axi-simétrico que descreve as três velocidades em um plano axial do tanque foi utilizado, uma vez que o mesmo requer um menor esforço computacional e, conforme indicado por Nunhez (1994), Nunhez e McGreavy (1994, 1995), o modelo bidimensional fornece dados significativos do comportamento do tanque.

O fluxo gerado por um agitador tipo Rushton pode ser descrito como periódico entre as lâminas, o que em primeira análise indica a necessidade de um modelo tridimensional. Isto significa que a solução bidimensional conterá apenas informações de um fluxo médio. Esta é a principal limitação do modelo, porque o agitador é o principal responsável pelo fluxo e transferência de calor dentro do tanque. O modelo proposto por Kunczewicz (1992) é utilizado para aproximar o fluxo em tanques de mistura através de um modelo bidimensional. Este modelo assume que a lâmina do agitador atua sobre o volume de líquido no tanque todo o tempo, o que não é verdade, pois a lâmina está localizada em seis pontos fixos ao redor do disco do agitador.

Kuncewicz (1992) compensou isto ao introduzir um parâmetro (variando entre [0-1]) que é dependente do número de lâminas. Este fator é multiplicado pela velocidade angular do agitador e considera-se que esta velocidade atua em toda a região das lâminas do agitador. Idealiza-se também que existe fluxo axial através da região das lâminas, o que indica que este parâmetro sugerido por Kuncewicz é como um coeficiente de arraste que leva em conta o efeito das lâminas. Neste estudo a mesma aproximação é utilizada para descrever a ação das lâminas. Para isto, aplica-se um momento angular através do uso da subrotina USRBF nos cinco (05) blocos da geometria bidimensional do tanque que formam as lâminas. Um valor diferente do momento para cada tipo de fluido investigado foi usado para que a velocidade angular obtida nas simulações tivesse o mesmo valor o qual corresponde à velocidade de rotação do agitador.

3.5 CARACTERÍSTICAS DO MODELO

O modelo bidimensional axi-simétrico proporciona dados qualitativos quanto ao fluxo interno e transferência de calor para tanques agitados. A solução das equações do modelo (3.1 a 3.13) é obtida pelo método dos volumes finitos. A geração da malha do modelo, bem como a solução das equações é feita pelo sofisticado pacote computacional CFX 4.1. O mesmo vem sendo utilizado com sucesso a 10 anos para descrever o escoamento em diversos sistemas reacionais e está consolidado como um dos melhores softwares para cálculos de escoamentos utilizando a fluido-dinâmica computacional.

As geometrias bidimensionais para se analisar o arranjo experimental de Oldshue e Gretton (1954), bem como a geometria proposta neste trabalho, são dadas nas Figuras 3.4(a) e 3.5(a).

A temperatura é frequentemente a variável crítica no projeto de tanques reatores. Isto porque ela tem um efeito nas propriedades do fluido, tais como densidade e viscosidade, que influenciam o escoamento no tanque. Como neste estudo existe um calor gerado por uma reação química, a transferência de calor é importante. No caso de reações de polimerização, para obtenção de polímeros de alta qualidade exige-se um

bom controle de temperatura de forma a garantir uma taxa de reação controlada em todo o tanque. Este controle de temperatura é feito através do uso de superfícies de troca térmica, tais como: jaquetas externas de resfriamento e/ou serpentinas internas.

3.5.1 Jaquetas Externas

É estudado neste trabalho um tanque sem serpentinas para resfriamento e que utiliza jaquetas de resfriamento. As dimensões do tanque são as mesmas do tanque que utiliza serpentinas, porém o fundo é diferente e está mostrada na Figura 3.3(a). A Figura 3.3(b) mostra a malha discretizada que contém 4160 volumes de controle.

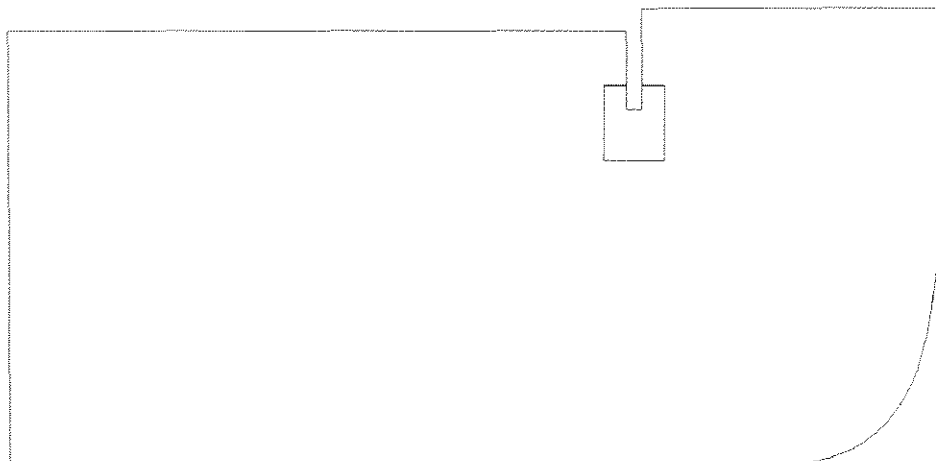
3.5.2 Serpentinas Internas

A geometria sugerida experimentalmente por Oldshue e Gretton (1954) apresenta um arranjo de serpentinas que possui dez (10) voltas helicoidais e o fundo do tanque plano. A Figura 3.4(b) mostra a malha discretizada do arranjo experimental de serpentinas que contém 5692 volumes de controle.

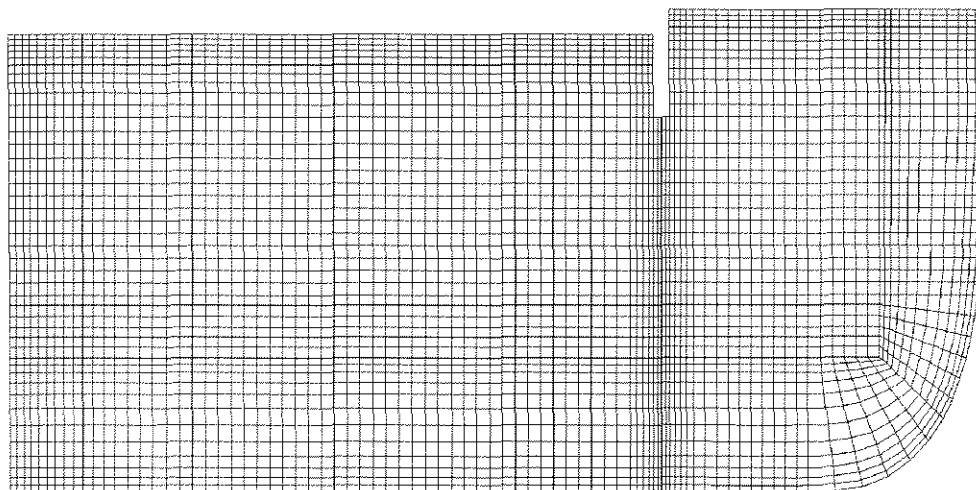
O arranjo geométrico proposto possui uma serpentina com oito (08) voltas e o fundo do tanque curvo. A malha discretizada associada ao arranjo proposto de serpentinas é mostrada na Figura 3.5(b) e contém 5120 volumes de controle.

3.6 CONDIÇÕES DE CONTORNO

As condições de contorno para o modelo de fluxo não-isotérmico, em regime laminar e axi-simétrico em estado estacionário (regime permanente) estão discriminadas abaixo para cada região do tanque de mistura. Estas condições são as mesmas utilizadas por Street (1991), Street e McGreavy (1991), Nunhez (1994) e Nunhez e McGreavy (1994, 1995).

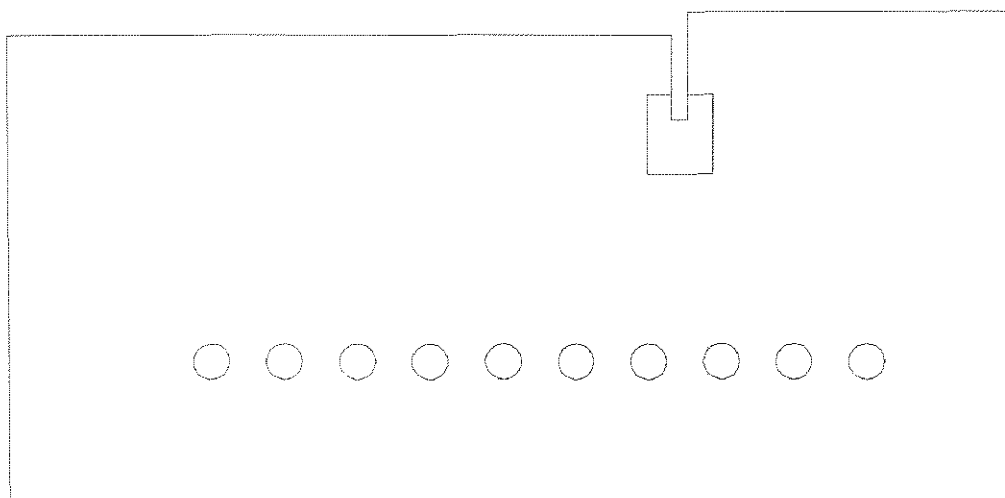


(a): Tanque agitado com jaqueta externa.

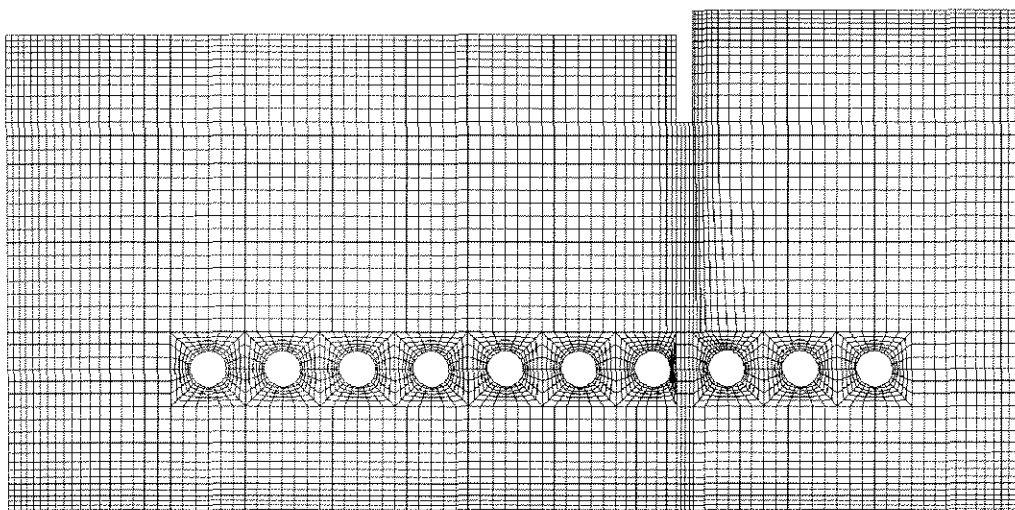


(b): Malha do tanque com jaqueta

Figura 3.3: Domínio bidimensional do tanque com jaqueta e respectiva malha.

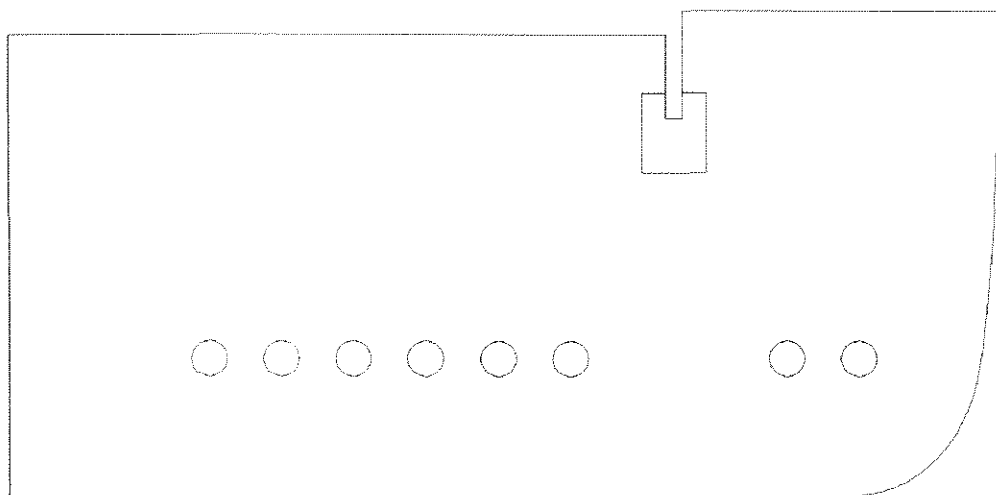


(a): Tanque agitado com o arranjo experimental de serpentinas.



(b): Malha bidimensional para a geometria experimental.

Figura 3.4: Representação bidimensional do arranjo experimental de Oldshue e Gretton (1954) e malha correspondente.



(a): Tanque agitado com o arranjo de serpentinas proposto.

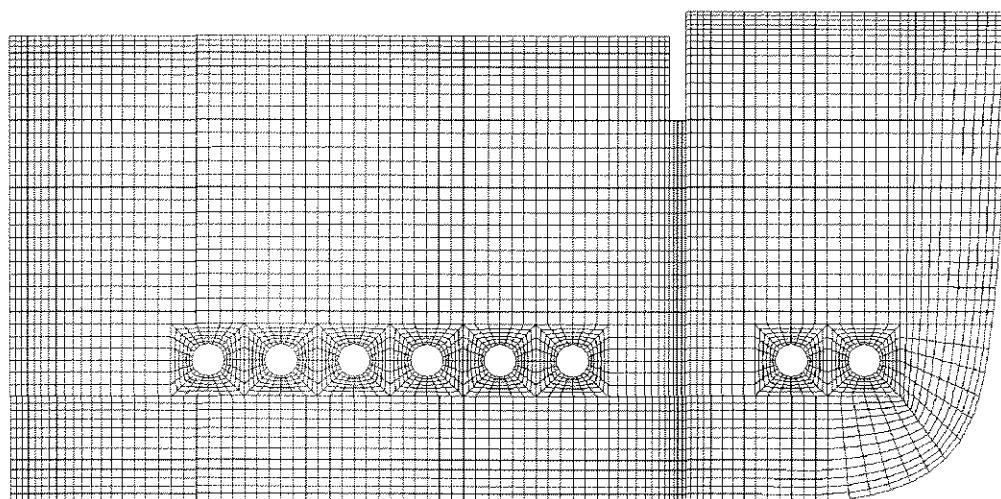


Figura 3.5(b): Malha bidimensional para a geometria proposta.

Figura 3.5: Representação bidimensional da geometria proposta neste trabalho e malha correspondente.

a) Condições de contorno para as componentes de velocidade:

- **Paredes e Fundo do Tanque** – não existe deslizamento de líquido, logo a velocidade do fluido é nula:

$$u_r = u_\theta = u_z = 0 \quad (3.14)$$

- **Eixo, Disco do Agitador:**

$$u_r = u_z = 0 \quad (3.15a)$$

$$u_\theta = 2\pi NR \quad (3.15b)$$

Onde:

$\pi = 3.1415 \dots$;

N = número de rotação do agitador (rps);

R = distância radial da linha central do eixo (m).

- **Lâminas do Agitador** - No cálculo da velocidade angular nas lâminas do agitador foi aplicado o fator de Kuncewicz (1992) que leva em conta o número de lâminas usadas, conforme a expressão:

$$\bar{u}_\theta = u_\theta \left[1 - \exp\left(\frac{-n_p}{4}\right) \right] \quad (3.16)$$

Onde:

n_p =número de lâminas do agitador.

- **Superfície Livre** - Na superfície livre do líquido as tensões de cisalhamento são nulas e uma superfície plana é assumida, o que de acordo com o trabalho experimental de Edwards e Wilkinson (1972) é aceitável para números de Reynolds menores que 300 e em fluxo laminar. Dessa forma:

$$\frac{\partial u_r}{\partial z} = \frac{\partial u_\theta}{\partial z} = u_z = 0 \quad (3.17)$$

- **Linha Central ($r = 0$)** (abaixo do agitador) - As componentes de velocidade radial e angular são nulas e a razão de mudança do componente axial da velocidade é zero, isto é:

$$u_r = u_\theta = \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0 \quad (3.18)$$

- **Tubos da Serpentina** – Não existe deslizamento.

$$u_r = u_\theta = u_z = 0 \quad (3.19)$$

b) Condições de contorno referentes à transferência de calor no tanque:

- **Tubos das Serpentinhas Internas** - é assumido que a temperatura na parede da serpentina é mantida a 10°C (T_w); esta mesma condição é usada em jaquetas de resfriamento quando presentes. É idealizado que esta temperatura é assegurada por se utilizar um enorme fluxo de líquido de resfriamento interno nos tubos da serpentina e/ou jaquetas.

- Nas paredes, fundo do tanque e serpentinhas as condições de contorno são :

$$q_w = \left(-k_l \frac{\partial T}{\partial n} \right) = h_w (T - T_w) \quad (3.20)$$

Onde, $h_w = 500 \text{ W/m}^2\text{K}$.

- Na superfície livre :

$$q_{sl} = \left(-k_l \frac{\partial T}{\partial n} \right) = h_{sl} (T - T_{sl}) \quad (3.21)$$

Onde, $T_{sl} = 15^\circ\text{C}$ e $h_{sl} = 5 \text{ W/m}^2\text{K}$.

- **Eixo do Agitador ($r=R_{\text{eixo}}$) e Eixo de Simetria ($r=0$)** - Não há dissipação de calor, logo: $\nabla T = 0$.

Todas estas condições de contorno estão esquematizadas na Figura 3.6.

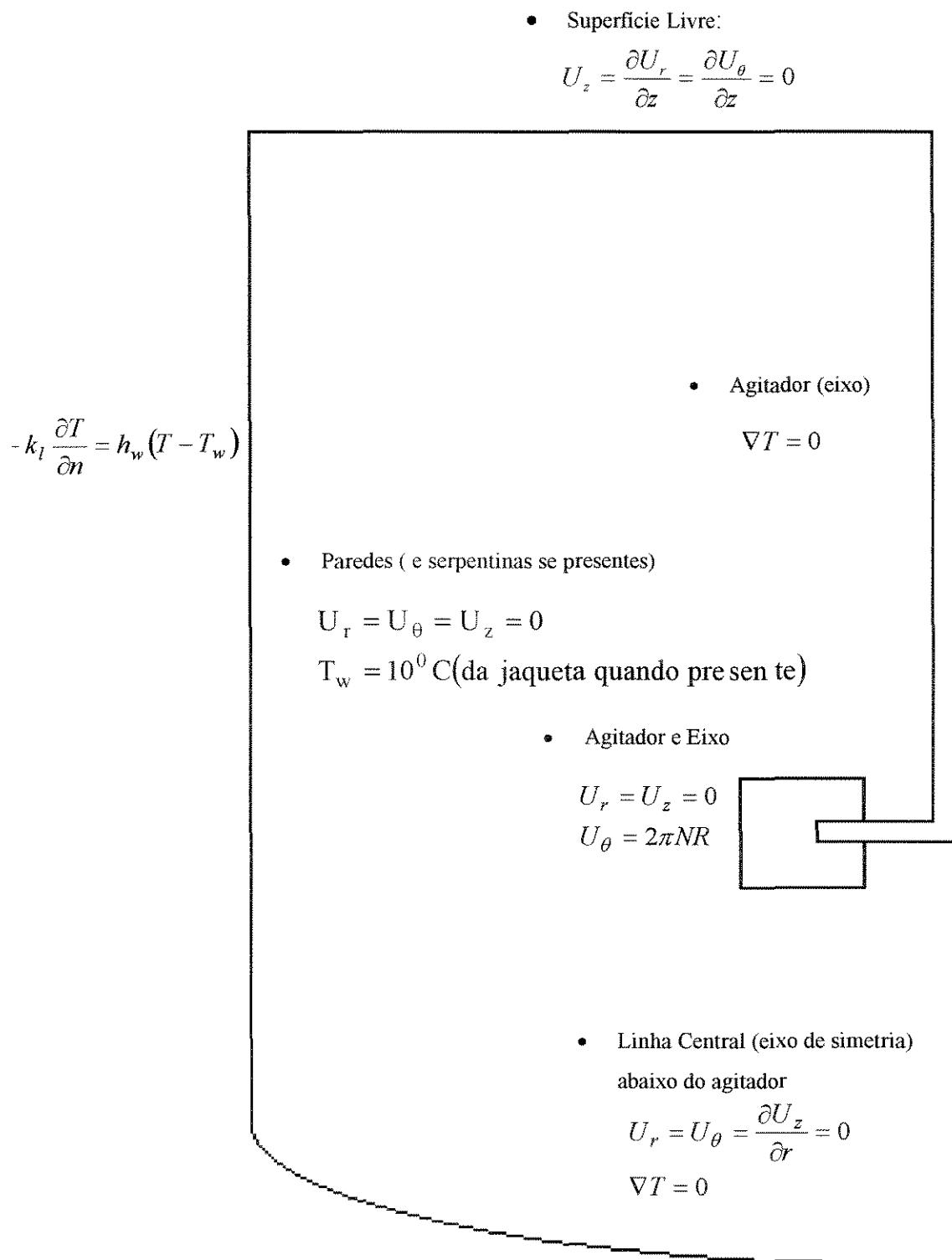


Figura 3.6: Condições de contorno para o tanque de mistura.

3.7 COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR

Uma estimativa do coeficiente global de transferência de calor (U_m) no tanque pode ser obtido através de uma equação na qual o calor gerado pela reação (ΔH) é igual à taxa de transferência de calor fornecido pelas área de troca térmica, tais como: serpentinas internas, jaquetas externas e a área correspondente à superfície livre do líquido quando presentes na geometria do tanque simulada. Esta expressão é dada por:

$$V_T \cdot \Delta H = U_m A_S (T_m - T_w) + U_m A_{sl} (T_m - T_{sl}) + U_m A_J (T_m - T_w) \quad (3.22)$$

Onde, V_T = volume do fluido no tanque (m^3);

ΔH = calor gerado pela reação química (W/m^3);

$A_S = E \pi d \pi D_c$, área de transferência de calor da serpentina (m^2), onde E corresponde ao número de voltas helicoidais do arranjo de serpentinas;

T_M = temperatura média no tanque ($^{\circ}C$);

T_w = temperatura na parede dos tubos da serpentina ($^{\circ}C$);

$A_{SL} = \pi D_T^2 / 4$, área de transferência de calor da superfície livre do líquido (m^2);

T_{SL} = temperatura do ar ($^{\circ}C$);

$A_J = \pi D_T Z$, área de transferência de calor da jaqueta (m^2).

A Equação 3.22 fornece um valor médio de U , pois rigorosamente o coeficiente de transferência de calor pode variar de ponto a ponto dentro do tanque.

3.8 COMENTÁRIOS GERAIS

Este capítulo apresentou as equações do modelo que governam o fluxo e a transferência de calor em tanques agitados para os casos em estudo neste trabalho, bem como o modelo axi-simétrico idealizado para o tanque de mistura que utiliza jaquetas e/ou serpentinas para resfriamento. Foram apresentadas também as características gerais das geometrias que são investigadas.

No próximo capítulo serão consideradas as aproximações numéricas das equações, bem como o método de solução utilizado.

CAPÍTULO 4:

MÉTODOS NUMÉRICOS

4 MÉTODOS NUMÉRICOS

4.1 INTRODUÇÃO

As equações de conservação de massa, momento e energia para o modelo axi-simétrico do tanque de mistura foram descritas no capítulo anterior. Essas equações são discretizadas através da utilização de métodos numéricos.

Na literatura existe uma grande variedade de métodos numéricos, no entanto os que são amplamente empregados na modelagem de problemas que envolvam escoamento de fluidos com ou sem transferência de calor são: diferenças finitas, elementos finitos, volumes finitos e combinações destes.

O objetivo principal desse capítulo é descrever o método de discretização utilizado pelo pacote computacional CFX-F3D 4.1, além das técnicas usadas para o tratamento do transporte convectivo e difusivo, para o acoplamento pressão-velocidade.

4.2 TÉCNICAS BÁSICAS

A solução de problemas de escoamento de fluidos que envolvem transferência de calor é expressa geralmente em termos de equações diferenciais que não possuem uma solução analítica. Essas equações normalmente são solucionadas numericamente pelos métodos dos elementos finitos (MEF) e dos volumes finitos (MVF).

Até o início da década de 70, havia grande discussão quanto à eficiência do método de diferenças finitas (MDF) e dos elementos finitos (MEF), já que o MDF era empregado no estudo de escoamento de fluidos que são descritos por equações não-lineares (equações de Navier-Stokes), mas sem habilidade no tratamento de geometrias complexas. O método dos elementos finitos tem a vantagem de se adaptar a qualquer

fitted coordinate” tem sido aplicado a problemas de escoamento com geometrias complexas.

O método dos volumes finitos (MVF) atualmente vem sendo empregado no estudo da fluido dinâmica computacional (CFD) utilizando malhas não-estruturadas, o que já era usado pelo MEF.

Neste trabalho é utilizado o método dos volumes finitos através do pacote computacional CFX-F3D versão 4.1 da AEA Technology para a discretização e solução do sistema de equações diferenciais. O pacote CFX-F3D usa o sistema “boundary fitted coordinate” para obtenção dos resultados das variáveis analisadas na complexa geometria bidimensional do tanque de mistura com agitador tipo turbina Rushton.

4.3 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

O método dos volumes finitos implementado pelo pacote CFX-4.1 consiste de um conjunto de equações discretizadas que calculam as variáveis de interesse no centro de cada volume de controle.

Para obter a solução dessas equações, é necessário primeiramente dividir o domínio em um número finito de volumes de controle (VC), como ilustrado na Figura 4.1.

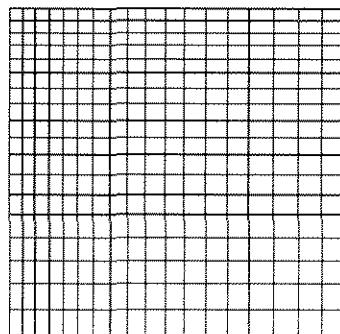


Figura 4.1: Malha bidimensional de volumes finitos.

O pacote computacional CFX-F3D 4.1 utiliza as seguintes ferramentas para determinar a solução das equações discretizadas:

- Arranjo de variáveis co-localizadas;
- Sistema "boundary-fitted coordinate";
- Técnicas de multi-malhas ("Multigrid")

1. **O arranjo de variáveis co-localizadas** obtém a solução de todas as variáveis dependentes (velocidade, pressão, temperatura) no centro de cada volume de controle. Este arranjo é particularmente importante quando malhas não-ortogonais e/ou tridimensionais são utilizadas. O trabalho de Perić et al (1988) apresenta um estudo sobre a superioridade no emprego desse arranjo co-localizado em detrimento ao arranjo desencontrado proposto por Patankar (1980), no qual as variáveis do modelo são calculadas em posições diferentes do volume de controle. Entretanto, Meier e Mori (1997a, 1997b) mostraram que para algumas situações malhas deslocadas produzem melhores resultados, devido este arranjo minimizar problemas de oscilações numéricas decorrentes de altos gradientes de pressão segundo a discussão feita por Patankar (1980).
2. **O sistema " boundary-fitted coordinate"**, ou coordenadas coincidentes com a fronteira, possibilita a investigação de geometrias complexas. A idéia geral desse método é transformar o domínio de fluxo complexo no espaço físico em um domínio retangular no espaço computacional usando uma transformação de coordenadas curvilineares. Detalhes sob este método são encontrados no trabalho de Thompson et al (1982,1985).
3. **A técnica de "multigrid"**, ou multi-malhas, consiste em utilizar vários tipos de malhas (malhas não uniformes) para cada região do domínio. Com esta técnica o tempo computacional é significativamente reduzido para malhas finas, e mais facilmente aplicada para arranjos co-localizados das variáveis.

Com todas as ferramentas citadas, o pacote CFX-4.1 torna simples o tratamento das condições de contorno e a implementação de esquemas de interpolação para a solução das equações diferenciais que governam o modelo.

4.4 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO GERAL

O pacote computacional CFX-4.1 expressa as equações diferenciais de conservação de momento, massa e energia em um sistema bidimensional em regime permanente através de uma equação genérica escalar de convecção-difusão:

$$\nabla \cdot (\rho U \phi - \Gamma \nabla \phi) = S \quad (4.1)$$

onde Γ é difusividade efetiva, e S é um termo fonte representando a criação e destruição da variável genérica ϕ (variáveis dependentes, como: velocidades, pressão, temperatura). Patankar (1980, 1981) discute cada termo em cada uma das equações, bem com a aplicação das condições de contorno.

Para resolver as equações relevantes pelo método dos volumes finitos, uma malha é primeiramente gerada, discretizando o domínio de interesse. Um volume de controle genérico dentro de uma malha corresponde a área hachurada na Figura 4.2, onde $\mathbf{P}$ é um ponto da malha cuja posição coordenada é (x, y) , e N, S, W, E seus vizinhos ortogonais nas direções norte (posição $(x, y + (\Delta y)_n)$), sul (posição $(x, y - (\Delta y)_s)$), oeste (posição $(x - (\Delta x)_w, y)$) e leste (posição $(x + (\Delta x)_e, y)$), respectivamente. As faces do volume nas respectivas direções são denotadas por n, s, w e e .

A Equação 4.1 é integrada sobre o volume de controle considerado, e cada termo no balanço resultante da integral é aproximado em termos dos valores discretos de ϕ no ponto $\mathbf{P}$. O valor médio do termo fonte sobre o volume $\bar{S}$ é aproximado por uma relação linear:

$$\bar{S} = S_c + S_p \phi_p \quad (4.2)$$

onde, S_C é a parte constante do termo fonte linearizado e S_P é o coeficiente de ϕ no termo fonte linearizado. A aproximação algébrica (equação de discretização geral) do balanço integral para o volume de controle **P** na Figura 4.2 é :

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (4.3 \text{ a})$$

ou simplesmente:

$$a_P \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (4.3 \text{ b})$$

onde o somatório é sobre os pontos vizinhos apropriados. O coeficiente a_P é dado por:

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S - S_P \Delta V \quad (4.4)$$

onde, a_j , b são os coeficientes das equações de volume finito;

ΔV o volume do volume de controle, $\Delta V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot 1$, onde a variação em z foi considerada unitária devido à formulação bidimensional do modelo sob estudo.

Uma equação similar é aplicada para cada volume de controle na malha. Detalhes sobre a derivação, a aplicação das condições de contorno, e o tratamento de não-linearidades se encontram em livros textos como Patankar (1980, 1981) e Maliska (1995).

O pacote computacional utilizado, CFX-F3D versão 4.1, implementa as equações 4.2, 4.3 e 4.4 no sistema de coordenadas escolhido conforme o problema a ser resolvido. Sendo assim, neste trabalho o sistema de coordenadas cilíndricas foi usado uma vez que se trata de um modelo bidimensional axi-simétrico de um tanque de mistura. Neste sistema as três velocidades são calculadas (axial, radial e angular), mas a variação das variáveis dependentes na direção angular é nula.

As não linearidades e os acoplamentos entre as variáveis pressão-velocidade são descritas gradativamente nas próximas seções.

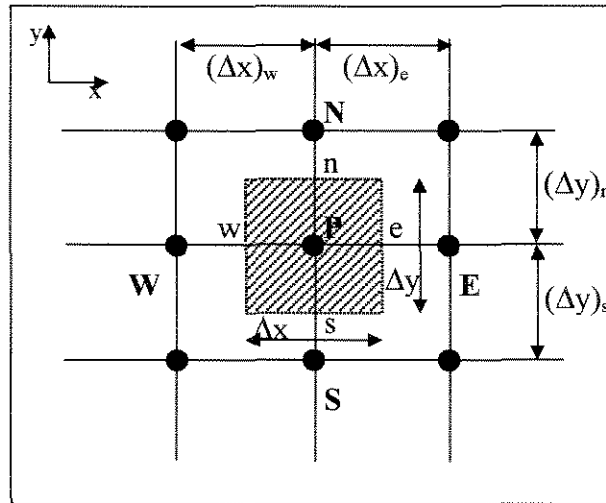


Figura 4.2: Representação de um volume de controle genérico.

4.5 MÉTODO UPWIND

O fluxo interno à tanques de mistura se trata de um problema altamente convectivo, por isto o uso do método “upwind differencing” é necessário para garantir a estabilidade da solução e garante que os coeficientes a_p e a_{nb} são positivos, regra básica a ser satisfeita pelo método dos volumes finitos (Patankar (1980)).

No esquema upwind, a discretização do termo de convecção (advectivo) pelo CFX-4.1 para a face oeste do volume é dada por:

$$\begin{aligned} \int \rho \phi U \cdot n dA &= \rho U_w a_w \phi_w \\ &= C_w \phi_w \end{aligned} \quad (4.5)$$

onde C_w é o coeficiente convectivo na face oeste. Isto fornece a matriz de coeficientes para o ponto oeste :

$$a_w = \text{MAX}(C_w, 0) + D_w \quad (4.6)$$

Os valores de a_e, a_n, a_s são definidos similarmente. D_w é o coeficiente de difusão.

Os coeficientes de convecção (C_w) são determinados através de um método de interpolação chamado Rhie-Chow (Manual do CFX –F3D 4.1, 1995).

Uma descrição mais detalhada sobre o método upwind é dada por Patankar (1980) e Maliska (1989).

4.6 MÉTODO SIMPLEC

O método SIMPLEC é uma variação do método SIMPLE de Patankar e Spalding (1972) para obter uma solução numérica estável em problemas envolvendo escoamentos incompressíveis. O SIMPLEC trata do acoplamento pressão-velocidade através da introdução de um parâmetro de relaxação na equação de conservação do momento para a velocidade. O método SIMPLE relaxa a velocidade e a pressão em sua equação de correção.

Devido não ser necessário a relaxação da pressão no método SIMPLEC, torna-se simples sua implementação e o tempo de solução é reduzido. A descrição completa do método SIMPLEC é dada por van Doormaal e Raithby (1984) e Maliska (1995).

4.7 SUB-RELAXAÇÃO

A sub-relaxação reduz a variação das variáveis de iteração para iteração, nos valores da variável dependente. Deste modo o raio de convergência das diversas variáveis é aumentada. O método é frequentemente aplicado para evitar divergência na solução iterativa de equações extremamente não lineares. Todas as equações de transporte são implementadas por escolher um coeficiente de atualização da variável no volume de controle corrente por um fator de sub-relaxação (URF) no intervalo entre 0 e 1. Quando o menor valor desse fator é escolhido uma maior sub-relaxação é empregada.

Essa relaxação pode ser aplicada a todas as variáveis dependentes, mas dependendo do método de acoplamento entre a velocidade e a pressão selecionado (SIMPLE ou SIMPLEC) os valores padrões ("default"), adotados pelo pacote, para cada

variável podem variar. No método SIMPLEC a pressão não é relaxada, ou seja, o valor de URF para pressão é igual a 1. Se um UFR escolhido é muito grande pode resultar em instabilidade. Se um URF é pequeno demais, o tempo gasto em resolver o problema é maior do que o necessário.

Portanto, os valores URF considerados para uma ou mais variáveis nesse trabalho foram avaliados no decorrer da execução do programa determinando, assim, valores de URF que forneceram soluções estáveis convergidas com um menor esforço computacional.

4.8 INDEPENDÊNCIA DA MALHA

Os perfis numéricos obtidos para as variáveis dependentes devem ser independentes do tipo de malha utilizado. No entanto, na maioria das vezes, isto não é apresentado nos trabalhos computacionais. Uma forma simples de averiguar a adequação da malha é através da utilização da aproximação usada por Foumeny et al. (1993) e Nunhez e McGreavy (1995). Este procedimento consiste em analisar algumas seções verticais e horizontais do tanque, comparando os resultados para dois tipos de malhas. As Figuras 4.3 (A e B), 4.4 (A e B) e 4.5 (A e B) apresentam análises realizadas sobre a distribuição de temperatura em algumas seções verticais e horizontais para cada um dos tipos de fluido investigado ($n = 0,5 ; 1,0 ; 1,5$, respectivamente). A Tabela 4.1 apresenta os resultados para a temperatura em duas malhas diferentes com densidades de 5264 e 10604 volumes de controle. A diferença entre as duas malhas dá um valor máximo de aproximadamente $1,67\text{ }^{\circ}\text{C}$ (5,64%) para a temperatura máxima, e todos os outros resultados fornecem uma diferença menor. Isto indica que os resultados dados pela malha com densidade menor são satisfatórios para esta investigação.

O estudo de adequação da malha foi feito com a geometria do tanque proposta para as serpentinas. Nesse arranjo há grande variação de temperatura na proximidade das serpentinas, de forma que as oscilações presentes nas Figuras 4.3A, 4.3B, 4.4A, 4.4B, 4.5A e 4.5B não correspondem a instabilidade numérica.

O tempo de execução para as simulações utilizando a malha grossa (5264 volumes de controle) foi em média de 3,5 horas e as simulações com a malha fina (10604 volumes de controle) levaram em média um dia e meio.

Em todos os cálculos numéricos realizados neste trabalho foi utilizado o método de acoplamento do tipo SIMPLEC com esquema de interpolação “upwind”. O critério de convergência usado foi de 10^{-10} para a fonte de massa, o que garantiu que todas as variáveis do modelo atinjissem um estado estacionário.

Tabela 4.1 : Comparação da distribuição de temperatura entre malhas grossa (5264 volumes de controle) e fina (10604 volumes de controle).

Atribuição não-newtoniana (n)	Densidade da Malha	Temperatura Máxima °C	Temperatura Média °C
0,5	Grossa	27,46	21,04
	Fina	28,08	21,84
1,0	Grossa	27,26	21,33
	Fina	28,43	22,52
1,5	Grossa	27,92	22,01
	Fina	29,59	23,64

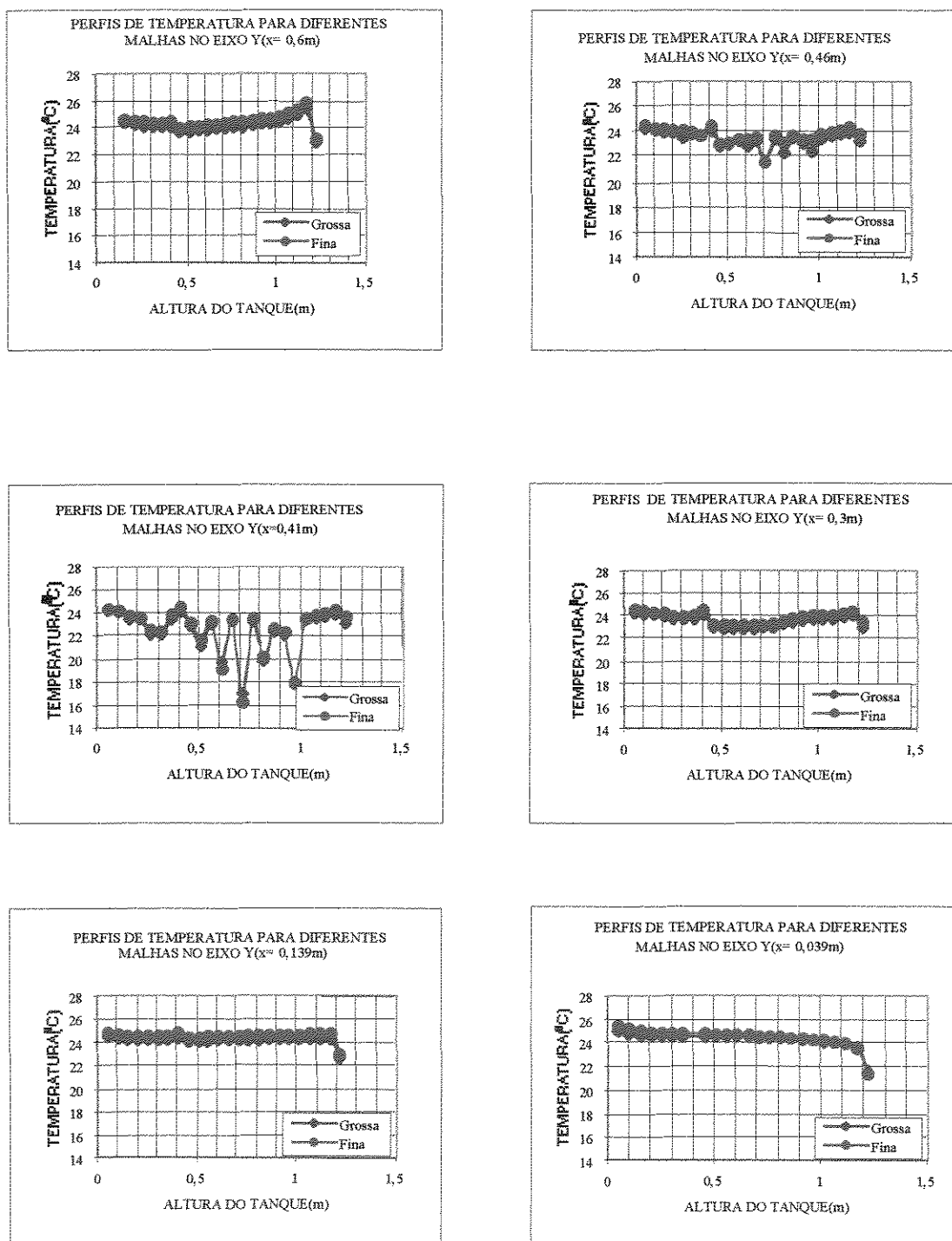


Figura 4.3 A: Distribuição de temperatura no eixo Y para fluido pseudoplástico ($n=0,5$).

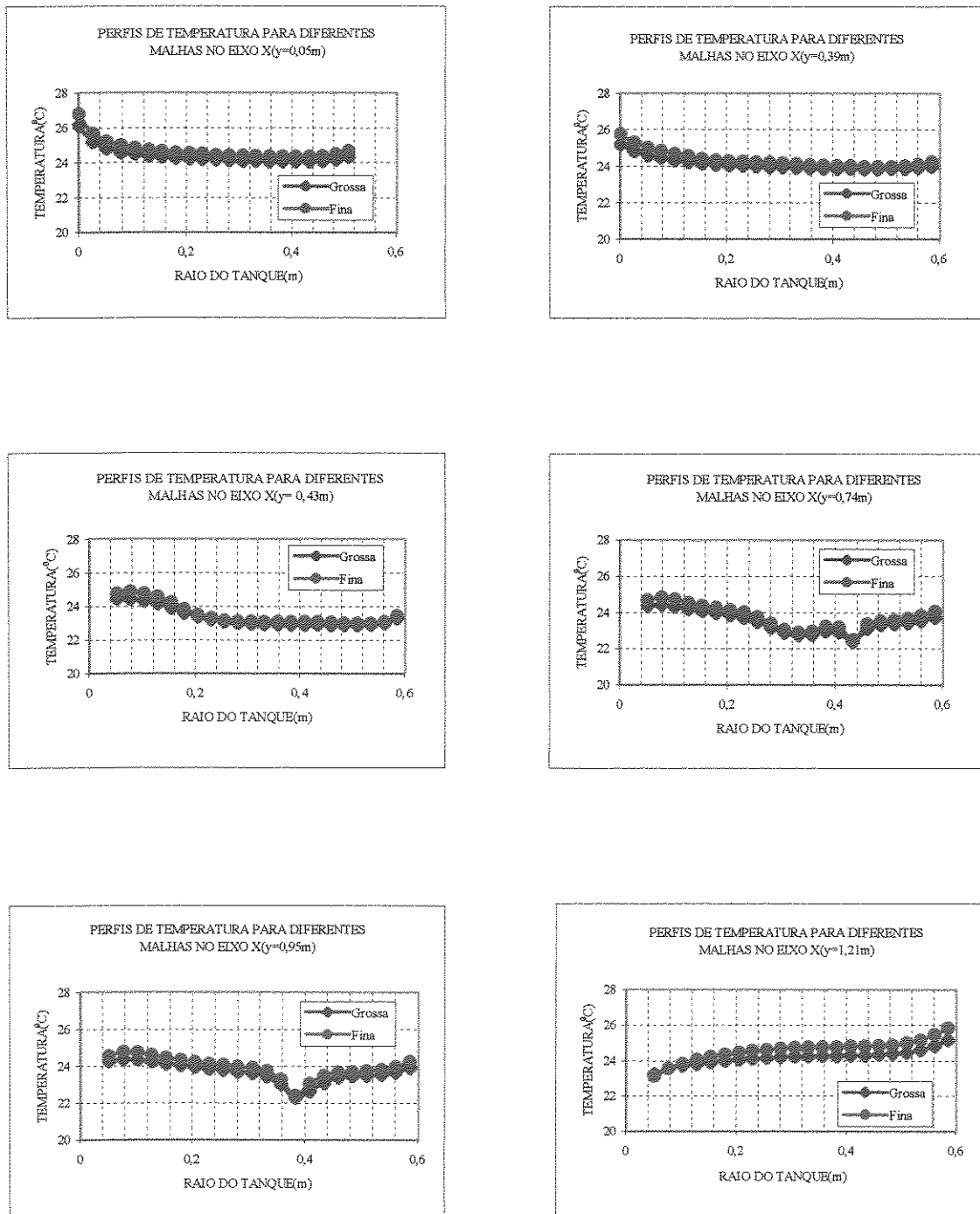


Figura 4.3 B: Distribuição de temperatura no eixo X para fluido pseudoplástico ($n = 0,5$).

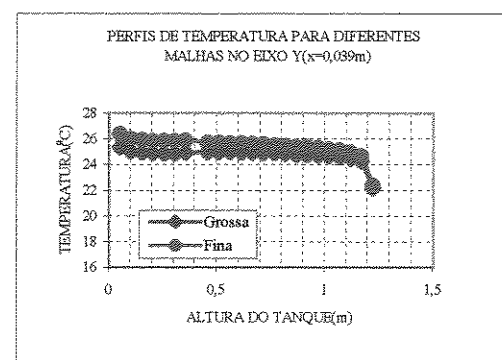
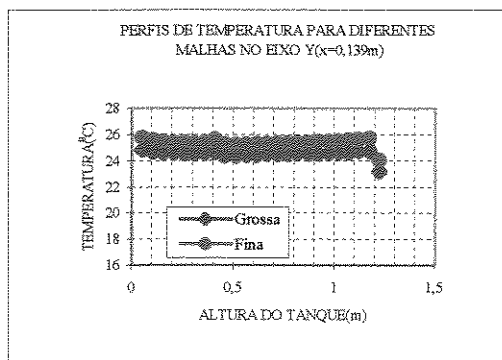
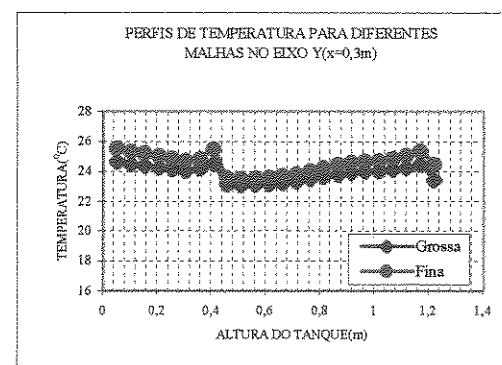
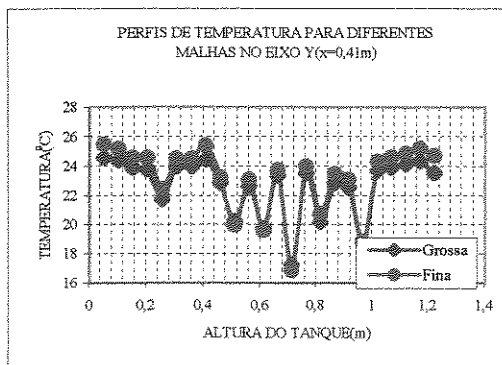
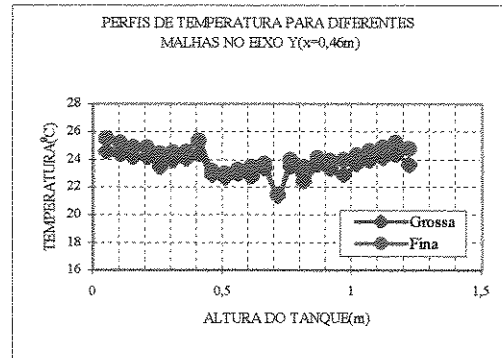
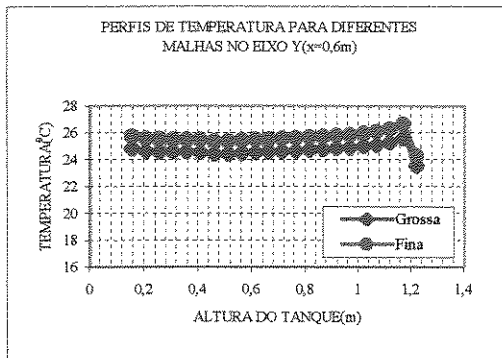


Figura 4.4 A: Distribuição de temperatura no eixo Y para fluido Newtoniano ($n = 1,0$).

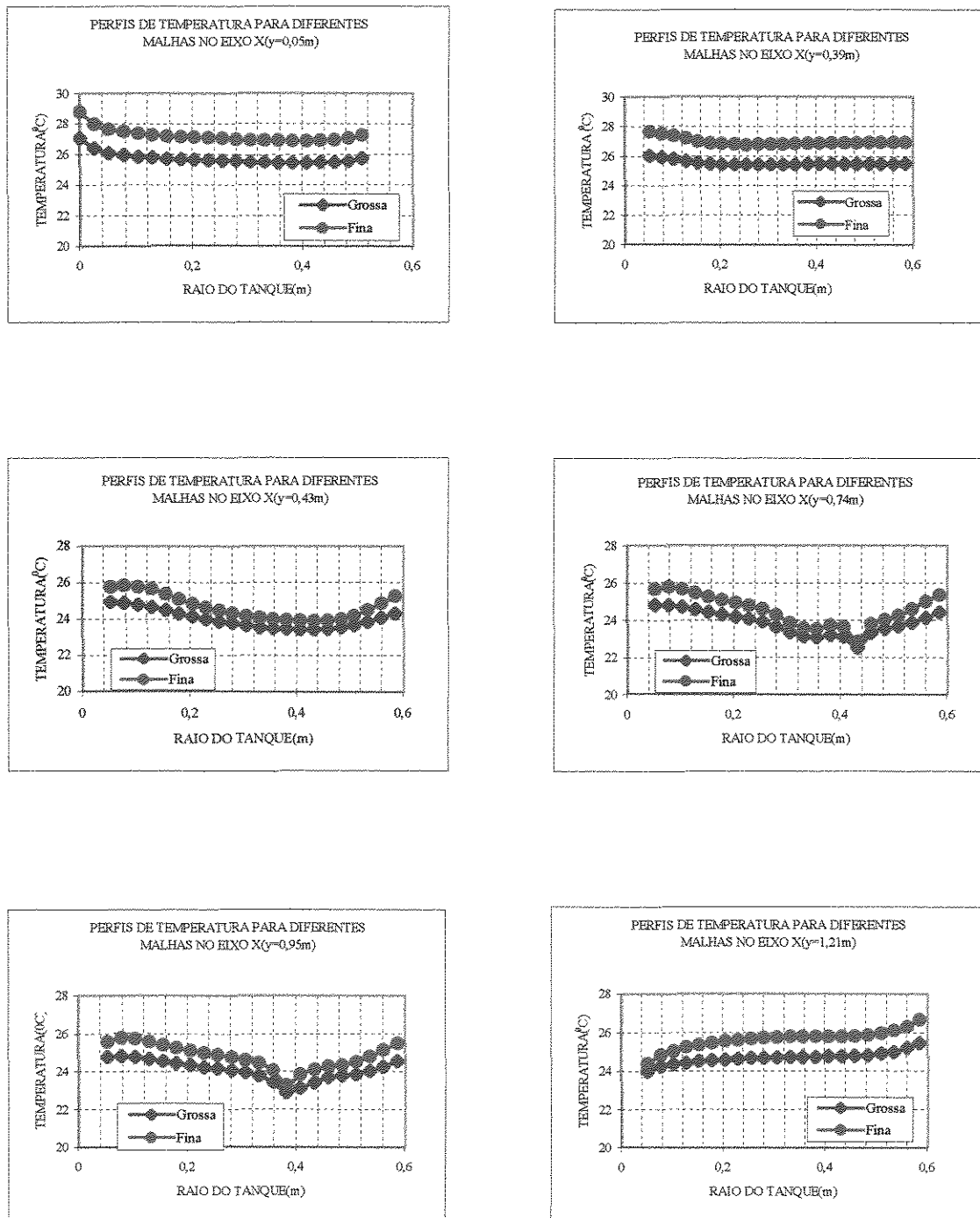


Figura 4.4 B: Distribuição de temperatura no eixo X para fluido Newtoniano ($n = 1,0$).

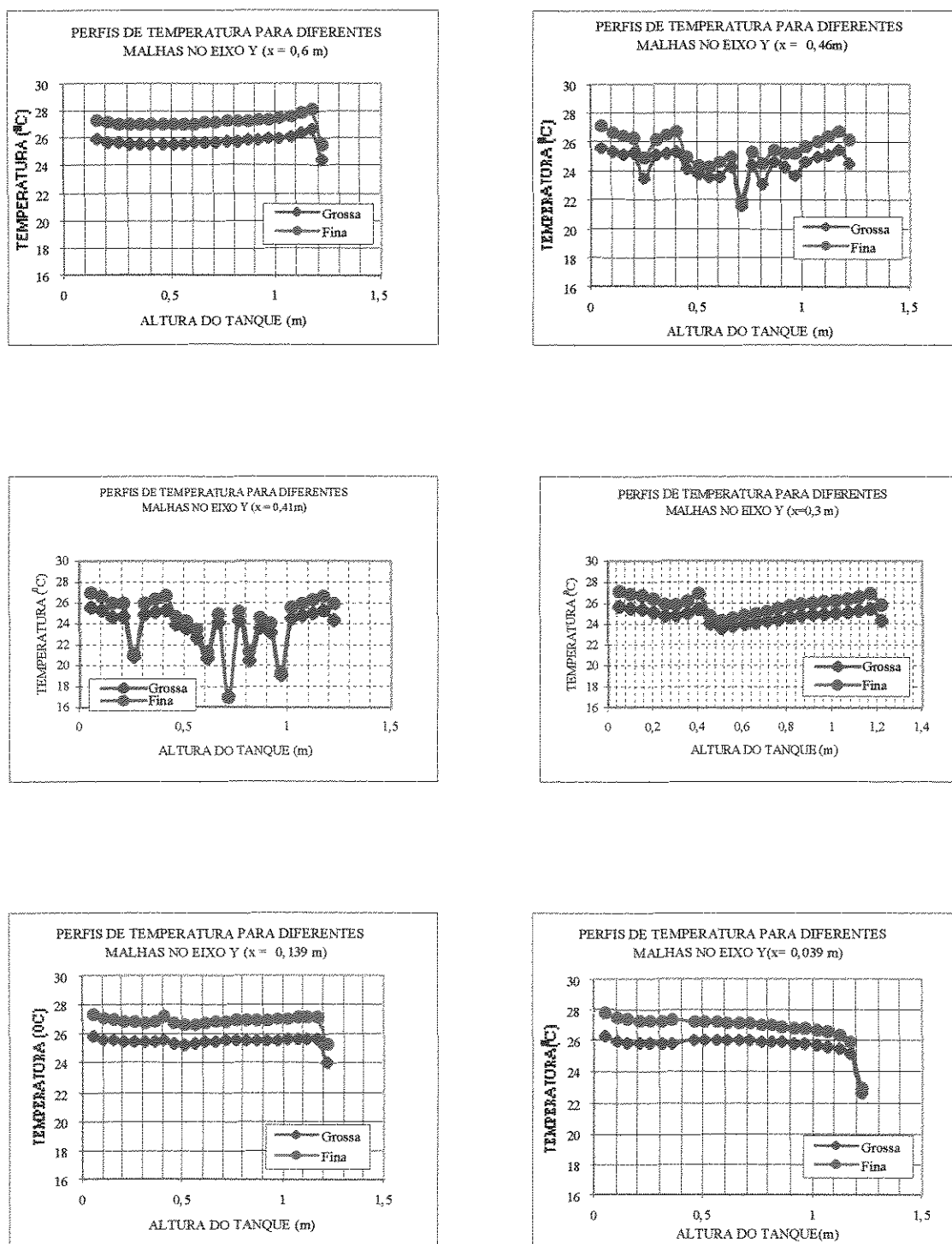


Figura 4.5 A: Distribuição da temperatura no eixo Y para fluido dilatante ($n = 1,5$).

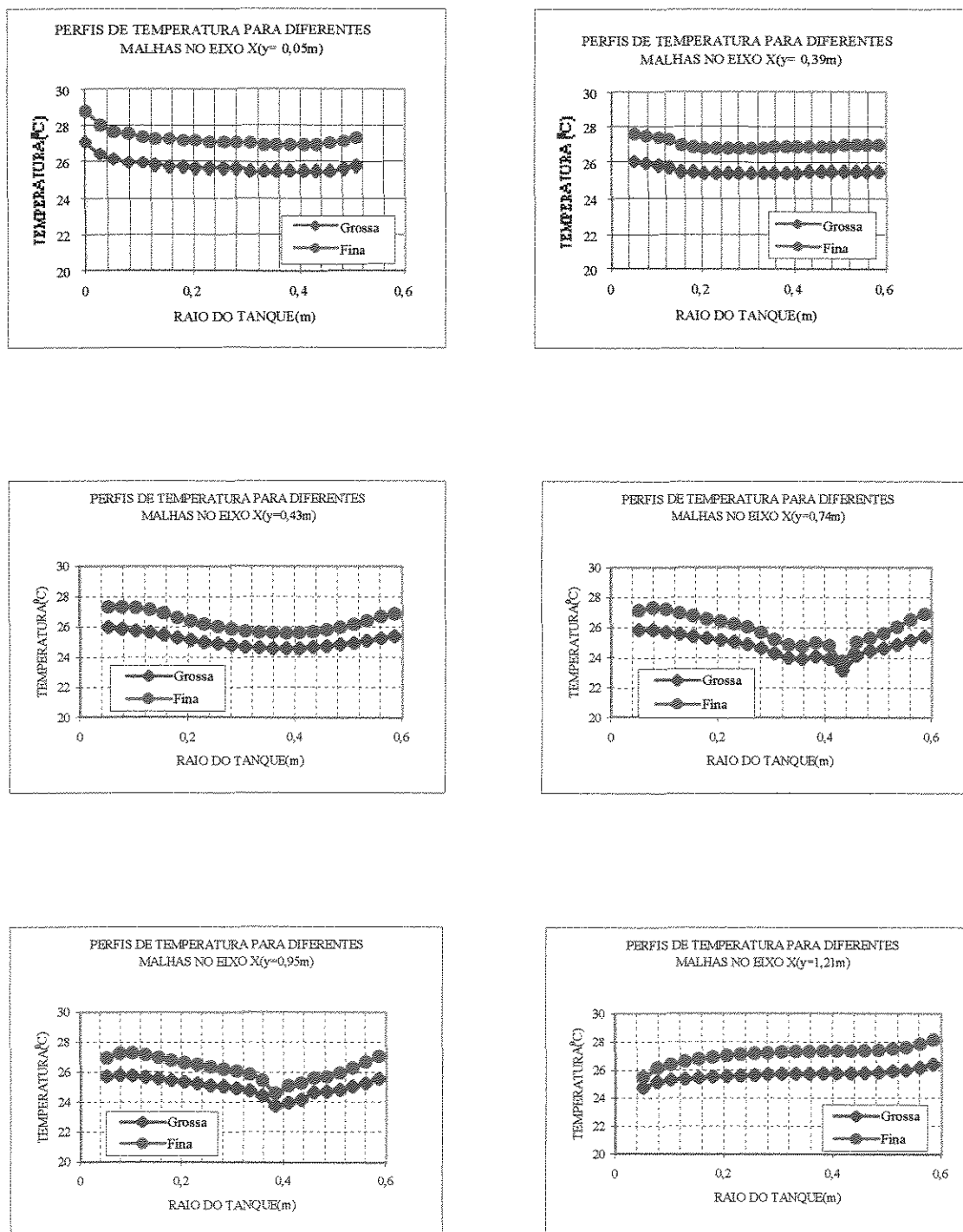


Figura 4.5 B: Distribuição de temperatura no eixo X para fluido dilatante ($n = 1,5$).

4.9 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A descrição do método numérico utilizado pelo pacote computacional CFX-F3D 4.1 para a solução numérica das equações do modelo foi apresentada neste capítulo. Foram analisados os métodos de interpolação, de acoplamento pressão-velocidade e a determinação do tamanho da malha utilizada neste estudo para as simulações realizadas.

Nos capítulos seguintes serão considerados os fatores geométricos para o projeto de tanques agitados, utilizando modelos bidimensionais que utilizam jaquetas e serpentinas para o controle da temperatura do meio reacional.

CAPÍTULO 5:

TANQUES REACTORES DE MISTURA USANDO SUPERFÍCIES DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR

5 TANQUES DE REATORES MISTURA USANDO SUPERFÍCIES DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR

5.1 INTRODUÇÃO

A temperatura é frequentemente uma variável crítica no projeto de reatores de mistura. Portanto, é importante assegurar a existência de distribuição de temperatura controlada. No caso particular de sistemas poliméricos, a alta qualidade do polímero está relacionada com uma pequena distribuição do peso molecular, o que requer um bom controle da temperatura. Para isso, a taxa de reação no tanque deve ser uniforme e isso requer uma boa transferência de calor.

A agitação vigorosa promove uma eficiente remoção de calor. Entretanto, excessiva agitação leva a um alto consumo de energia e em alguns casos pode prejudicar a qualidade do polímero (Nunhez, 1994). Sendo assim, é necessário uma relação ótima entre a agitação e a remoção de calor para obter um menor consumo de energia e um produto de boa qualidade. Portanto, um estudo cuidadoso deve ser realizado para determinar a melhor localização das superfícies de transferência de calor que serão usadas para controlar a temperatura e proporcionar uma melhor mistura.

Este capítulo apresenta os resultados do estudo da escolha de superfícies de transferência de calor em tanques de mistura, buscando a otimização da geometria desses sistemas.

5.2 JAQUETAS EXTERNAS AOS TANQUES REATORES DE MISTURA

Tanques de mistura com jaquetas de resfriamento são extensivamente usados em indústrias químicas. Em reações altamente exotérmicas, as jaquetas são utilizadas para fazer o controle de temperatura através da remoção do calor gerado pela reação. As jaquetas tem a vantagem de não afetar diretamente o fluxo, exceto nas paredes e no fundo do tanque, devido à diferença de temperatura alterar a viscosidade próxima as

jaquetas. Quando aplicadas para reações sobre fluxo laminar, ocorre um pico de temperatura interna ao tanque no centro das zonas de recirculação do fluxo secundário (fluxo radial e axial gerado pela agitação do fluido conforme mostrado na Figura 5.1), já que a transferência de calor em tanques de mistura nessas circunstâncias é dominada pelo fluxo secundário.

A Tabela 5.1 apresenta as dimensões do tanque cilíndrico sem chicanas com agitador tipo turbina Rushton montado axialmente, referente à Figura 3.3a, que será simulado.

Tabela 5.1: Dimensões do tanque reator de mistura.

Diâmetro do tanque	D_T	1,22 m
Nível de líquido	Z	1,22 m
Altura do agitador	C	0,41 m
Diâmetro do agitador	D	0,41 m
Espessura do disco do agitador	s	0,02 m
Raio do eixo do agitador	R_s	0,03 m
Comprimento da lâmina	D_b	0,10 m
Altura da lâmina	D_w	0,08 m

5.2.1 PROPRIEDADES DO FLUIDO

Fluidos poliméricos tendem a ser não-Newtonianos, o que torna mais complexo o controle do fluxo e da distribuição de temperatura interna no tanque. Neste caso a viscosidade do fluido depende da taxa de cisalhamento local e, conseqüentemente, varia sobre todo o campo de fluxo.

Neste estudo, a atribuição do caráter não-Newtoniano do fluido é representado pela relação constitutiva de Power-law, mostrada no capítulo 3. A forma básica da equação é dada por:

$$\mu = \mu_0 \gamma^{n-1} \quad (5.1)$$

Na Equação 5.1, n é o número adimensional que descreve os atributos não-Newtonianos e define a dependência da viscosidade com a taxa de cisalhamento : quando $n=1$ o fluido é Newtoniano. Para $n<1$, o fluido é pseudoplástico e para $n>1$ o fluido é dilatante. Os três valores de n que serão considerados no decorrer do capítulo são: $n=0,5$; $n=1,0$ e $n=1,5$.

A Figura 5.1 mostra os vetores de velocidade do fluxo secundário para a geometria descrita na seção 3.5.1.1 para velocidade de rotação de 60 rpm. O volume do fluido é de $1,382 \text{ m}^3$ (1382 litros) para o tanque com as dimensões listadas na Tabela 5.1. As propriedades físicas do fluido Newtoniano são as mesmas apresentadas na Tabela 3.1.

Como se pode observar na Figura 5.1, duas zonas de recirculação distintas acima e abaixo do agitador são facilmente identificadas. A velocidade angular imposta ao agitador é a responsável pela geração do fluxo radial e axial no plano vertical devido à força de inércia produzir um grande fluxo radial em direção às paredes do tanque.

As Figuras 5.2(a)-(c) referem-se às componentes axial, radial e angular de velocidade, u_z , u_r e u_θ respectivamente, para o agitador com rotação de 60 rpm. A Figura 5.2(c) corresponde à velocidade angular, gerada pela rotação do agitador. A componente angular de velocidade (u_θ) apresenta um valor absoluto maior que as componentes de velocidade radial e axial, tendo seu máximo valor localizado nas proximidades do agitador e diminuindo gradativamente em direção às paredes do tanque.

A distribuição da temperatura para fluido Newtoniano é apresentada na Figura 5.3 e revela a existência do fluxo secundário como já era previsto pelo que foi acima exposto. A máxima temperatura ocorre no centro das zonas de recirculação do fluxo secundário onde a transferência de calor é controlada por condução. Como a viscosidade efetiva é governada pela equação de Power-law e não varia com a temperatura, a viscosidade do fluido Newtoniano é constante em toda parte do tanque.

Para fluidos não-Newtonianos, o campo de fluxo para tanque de mistura é muito influenciado pela viscosidade não-Newtoniana. Para fluidos pseudoplásticos a viscosidade efetiva diminui com o aumento da taxa de cisalhamento, logo a redução da viscosidade próxima ao agitador aumenta o fluxo comparado com o fluido Newtoniano.

Em fluidos dilatantes a viscosidade efetiva aumenta com o aumento da taxa de cisalhamento, logo o fluxo diminui devido à viscosidade reduzir a eficiência do agitador.

As Figuras 5.4(a)–(c) mostram o fluxo secundário para um fluido pseudoplástico ($n=0,5$), um fluido Newtoniano ($n=1,0$) e para um fluido dilatante ($n=1,5$) referentes à velocidade de rotação de 60 rpm. Fazendo uma rápida comparação nota-se que as zonas de recirculação se movem ligeiramente em direção às paredes do tanque com a diminuição do valor de n .

As Figuras 5.5(a)–(b) mostram a distribuição de viscosidade e temperatura para o fluido pseudoplástico, respectivamente, referido na Figura 5.4(a). Nos cantos do tanque o fluido estagna devido à viscosidade efetiva ser alta e isto reduzir significativamente a transferência de calor nessa região. Portanto, a forma dos cantos que reduz o fluxo tende a produzir transferência de calor pobre, em especial para fluido pseudoplástico.

As Figuras 5.6(a)–(b) apresentam respectivamente a distribuição de viscosidade e temperatura para o fluido dilatante correspondente à Figura 5.4(c). Na região próxima ao agitador a viscosidade efetiva é alta e isto causa redução da circulação do fluido que tem efeito direto na mistura e transferência de calor.

5.2.2 MODO DE AGITAÇÃO

O processo de mistura dentro do reator depende da agitação. No problema sendo estudado, as condições para uma reação de polimerização exotérmica em regime laminar são descritas por um termo fonte de calor, gerado pela reação, de 1200 W/m^3 . O calor da reação é removido através de uma jaqueta externa ao tanque de mistura. Na jaqueta é assumido que existe um grande fluxo de líquido interno para manter a temperatura de resfriamento constante à 10°C .

A Figura 5.7(a) mostra os vetores de velocidade para o fluxo secundário à velocidade de rotação do agitador de 15 rpm, com as dimensões do tanque apresentado na capítulo 3 e listados na Tabela 5.1. A distribuição de temperatura correspondente é mostrada na Figura 5.8(a). Nota-se que esta velocidade de rotação não apresenta uma boa circulação dentro do tanque.

Quando a velocidade de rotação do agitador é elevada para 30 rpm, existe evidentemente um aumento da circulação no fluxo secundário. As Figuras 5.7(b) e 5.8(b) mostram, respectivamente, os vetores velocidade para o fluxo secundário e a distribuição de temperatura para a velocidade de 30 rpm. Neste caso, as zonas de recirculação (localizadas acima e abaixo do agitador) se movem em direção as paredes do tanque em função do aumento da velocidade de rotação. Quando a velocidade é de 60 rpm, a circulação do fluido é ainda melhor conforme mostram as Figuras 5.7(c) e 5.8(c).

A Tabela 5.2 apresenta uma comparação entre o comportamento da temperatura para as velocidades de rotação de 15, 30 e 60 rpm, e as Figuras 5.8(a)-(c) mostram que a distribuição de temperatura interna ao tanque é melhor com o aumento da velocidade de rotação.

Tabela 5.2: A influência da velocidade de rotação na distribuição de temperatura.

Velocidade de rotação (rpm)	Atribuição não-Newtoniana (n)	Temperatura máxima (°C)	Temperatura média (°C)
15	0,5	94,46	65,39
	1,0	70,16	50,91
	1,5	61,28	45,61
30	0,5	42,34	33,03
	1,0	42,64	33,70
	1,5	45,51	35,87
60	0,5	26,97	23,41
	1,0	32,04	26,27
	1,5	34,02	28,26

Ao analisar a Tabela 5.2, observa-se que a velocidade de 30 rpm apresenta uma distribuição de temperatura mais uniforme para diferentes valores de n , mas as temperaturas máxima e média são significativamente menores para velocidade de 60 rpm.

A escolha sobre a velocidade de rotação depende dos fatores geométricos e das características do fluido sob investigação.

5.2.3 LOCALIZAÇÃO DO AGITADOR

A localização padrão do agitador é a 1/3 da altura de líquido a partir do fundo do tanque, Kuncewicz (1992) mostrou que a configuração padrão é satisfatória para muitos tipos de fluxo porque resulta em igual fluxo volumétrico acima e abaixo do agitador. Quando o agitador está posicionado no meio do tanque o perfil de fluxo e a distribuição de temperatura estão mostrados nas Figuras 5.9(a)-(b) para a velocidade de rotação de 60 rpm.

A Tabela 5.3 mostra que em termos de transferência de calor, as posições a 1/3 ou 1/2 da altura de líquido tem distribuições semelhantes, portanto a altura de 1/3 é satisfatória.

Tabela 5.3: A influência da posição do agitador na distribuição de temperatura.

Atribuição não-Newtoniana (n)	Posição do agitador (m)	Temperatura máxima (°C)	Temperatura média (°C)
0,5	0,41	26,97	23,41
	0,61	27,16	23,64
1,0	0,41	32,04	26,27
	0,61	30,29	25,93
1,5	0,41	34,02	28,26
	0,61	33,33	28,12

5.2.4 GEOMETRIA DO TANQUE

O fluxo interno e a transferência de calor são influenciadas pela forma geométrica do tanque. Muitas vezes o simples arredondamento do fundo do tanque melhora sensivelmente o fluxo interno ao reator. As Figuras 5.10(a)-(b) correspondentes aos vetores velocidade mostram isso. Pode-se notar a formação de uma zona morta no tanque com fundo reto, a qual é praticamente eliminada por se arredondar o fundo do tanque. O interessante é que para fluidos pseudoplásticos ocorre uma sensível melhora na distribuição da viscosidade, conforme as Figuras 5.11(a)-(b). A Tabela 5.4 traz uma comparação entre as temperaturas máxima e média internas ao tanque para as duas formas do fundo do tanque, plana e curva. Embora não haja grande variação de temperatura, a circulação do fluido é melhor para o tanque de fundo curvo.

Tabela 5.4: A influência da forma do fundo do tanque.

Atribuição não-Newtoniana (n)	Geometria do fundo do tanque	Temperatura máxima (°C)	Temperatura média (°C)
0,5	Curvo	26,97	23,41
	Plano	25,80	22,67
1,0	Curvo	32,04	26,27
	Plano	32,48	27,09
1,5	Curvo	34,02	28,26
	Plano	36,43	30,36

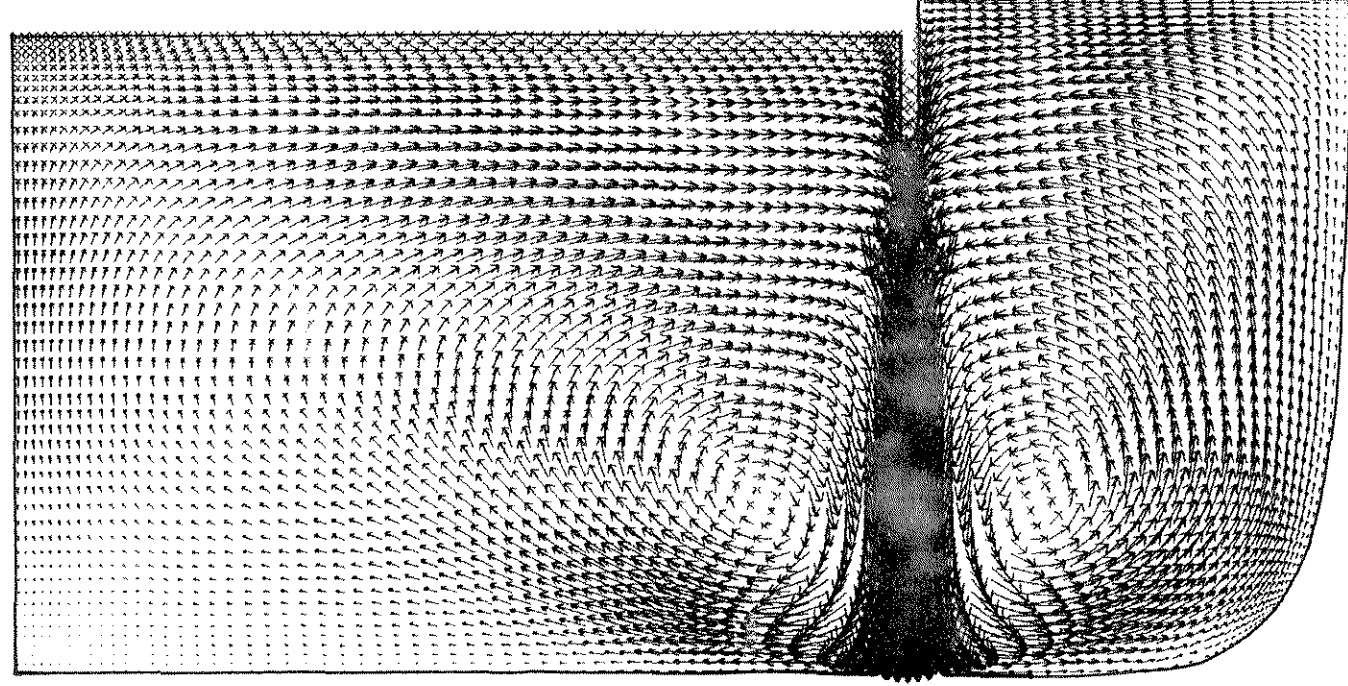


Figura 5.1: Perfil de fluxo num tanque de mistura com jaqueta.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

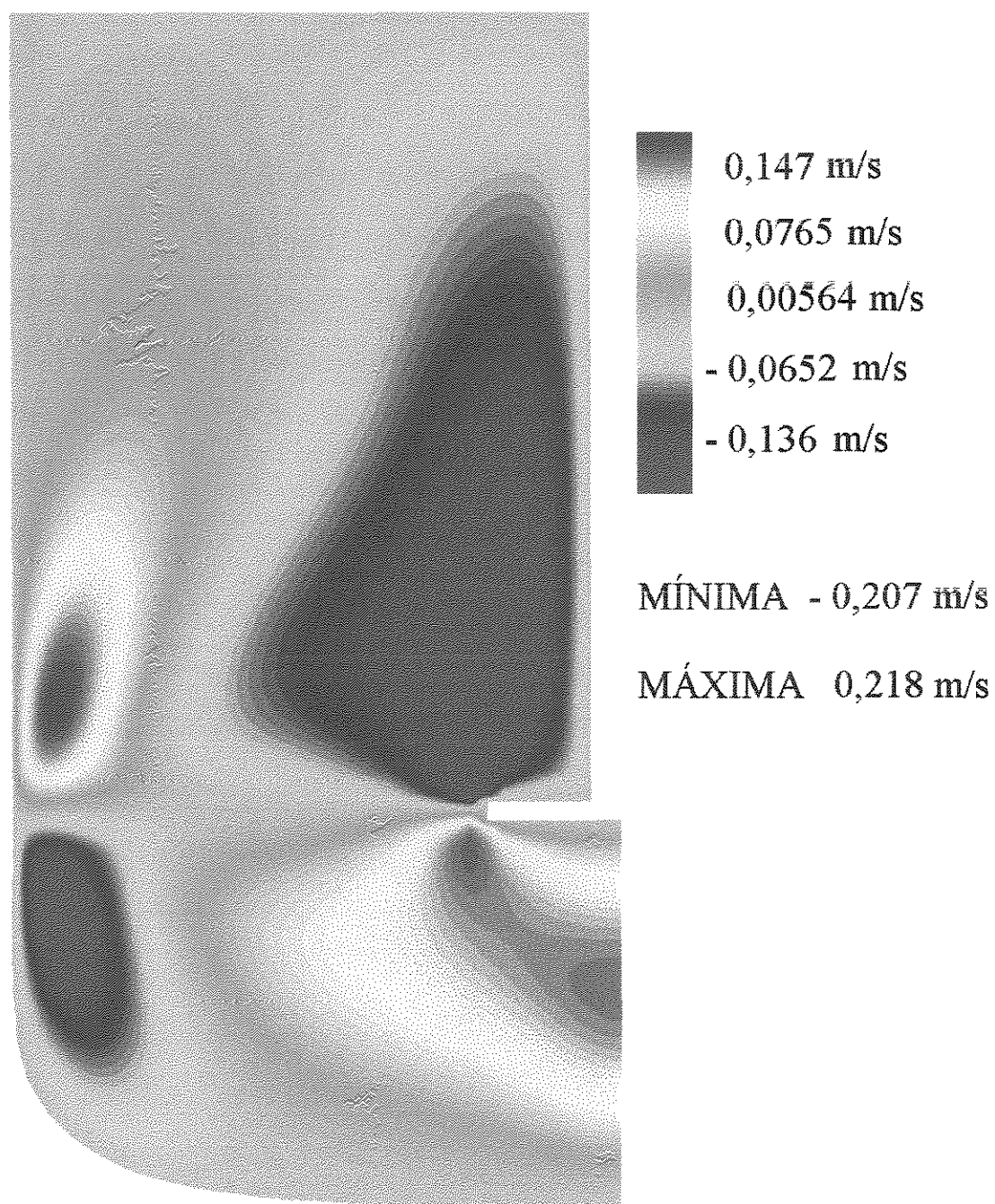


Figura 5.2(a): Componente axial de velocidade.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

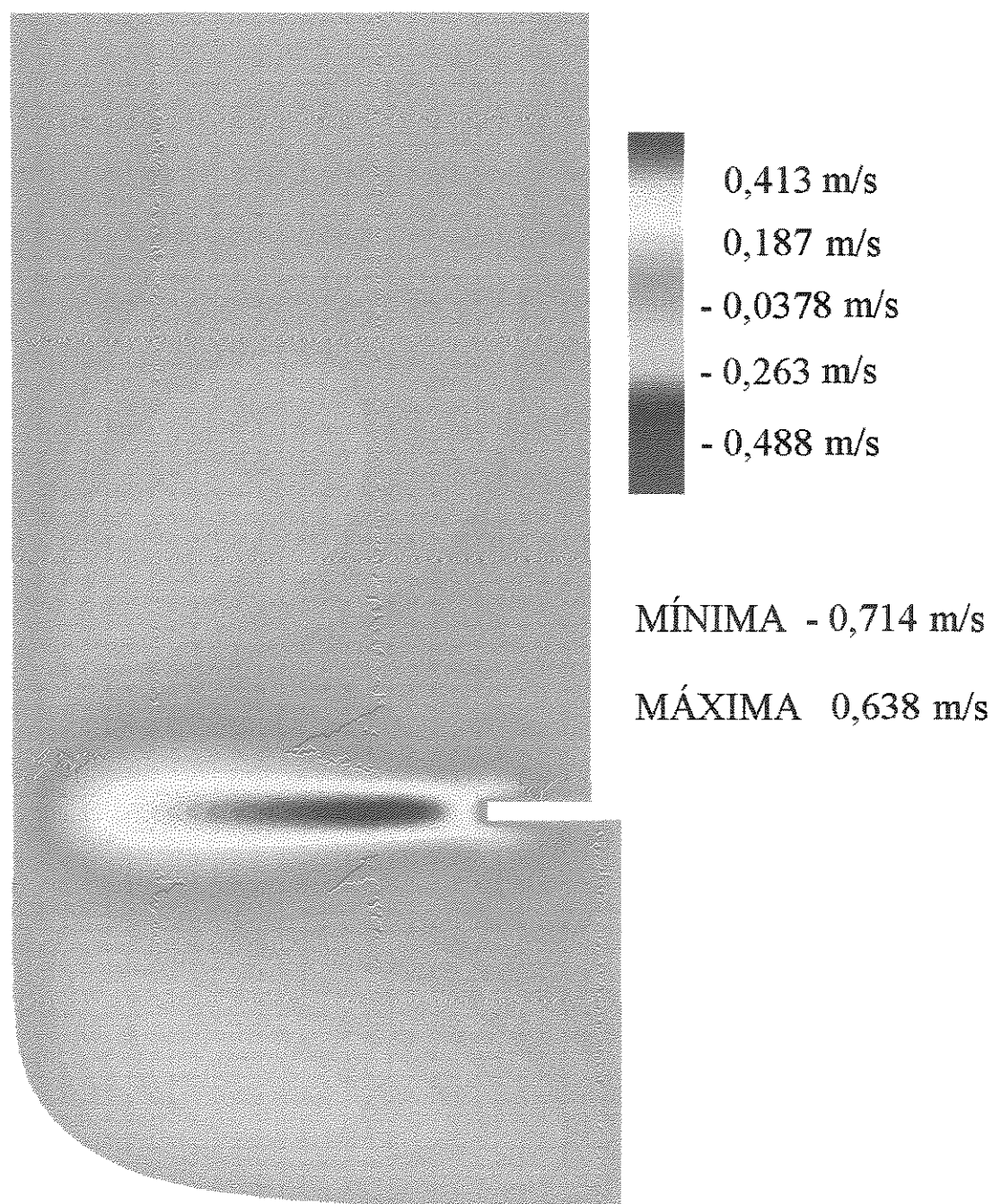


Figura 5.2(b): Componente radial de velocidade.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

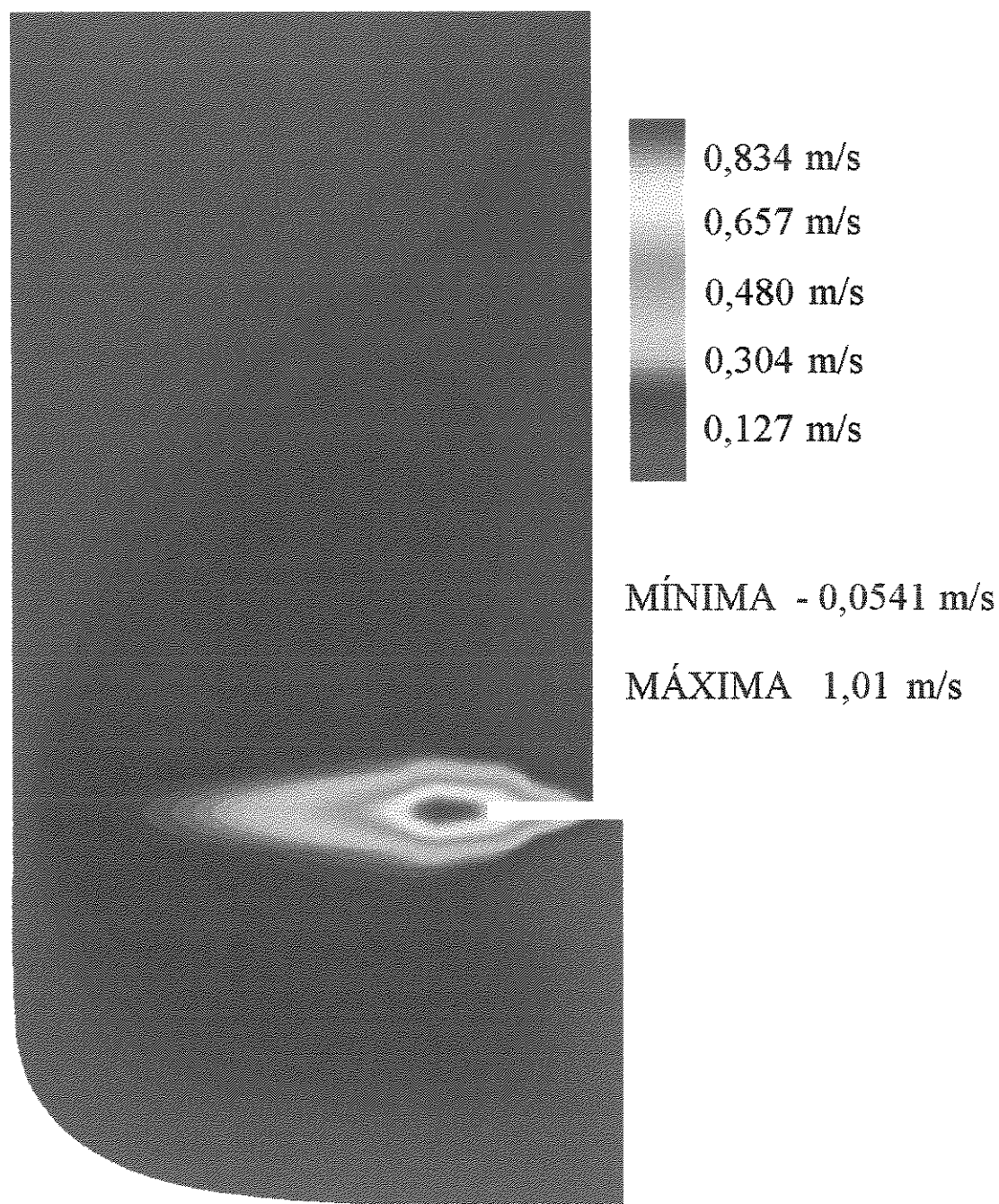


Figura 5.2(c): Componente angular de velocidade.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

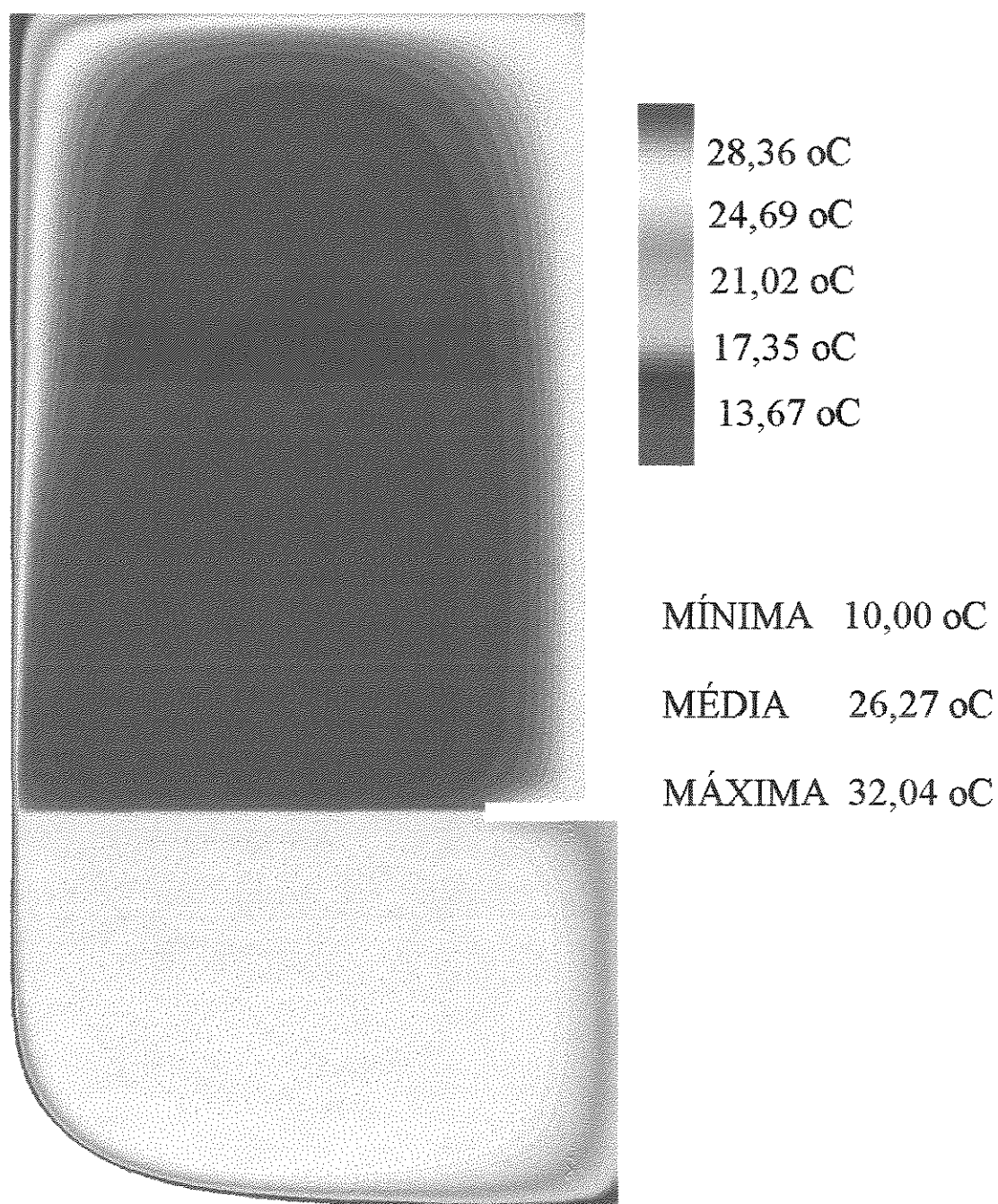


Figura 5.3: Distribuição de temperatura num tanque com jaqueta.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

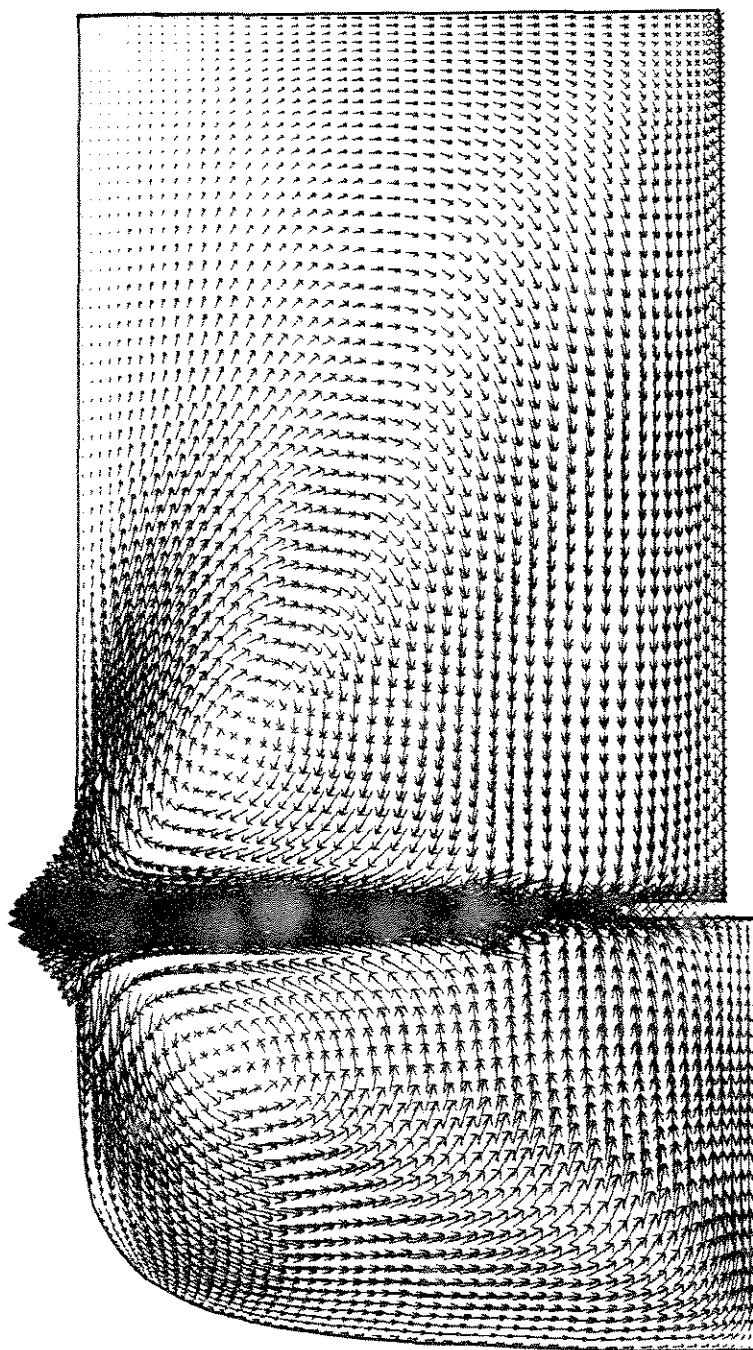


Figura 5.4(a): Vetores de velocidade num tanque com jaqueta.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido pseudoplástico ($n=0,5$).

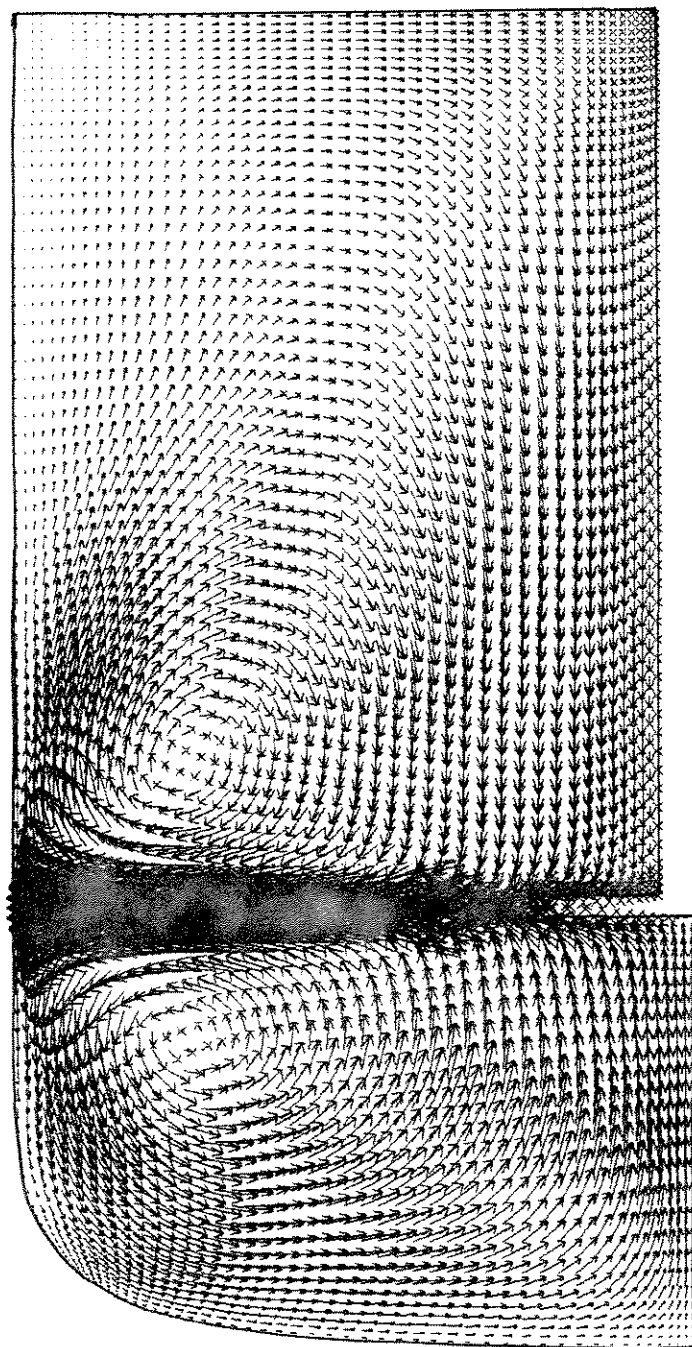


Figura 5.4(b): Vetores de velocidade num tanque com jaqueta.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

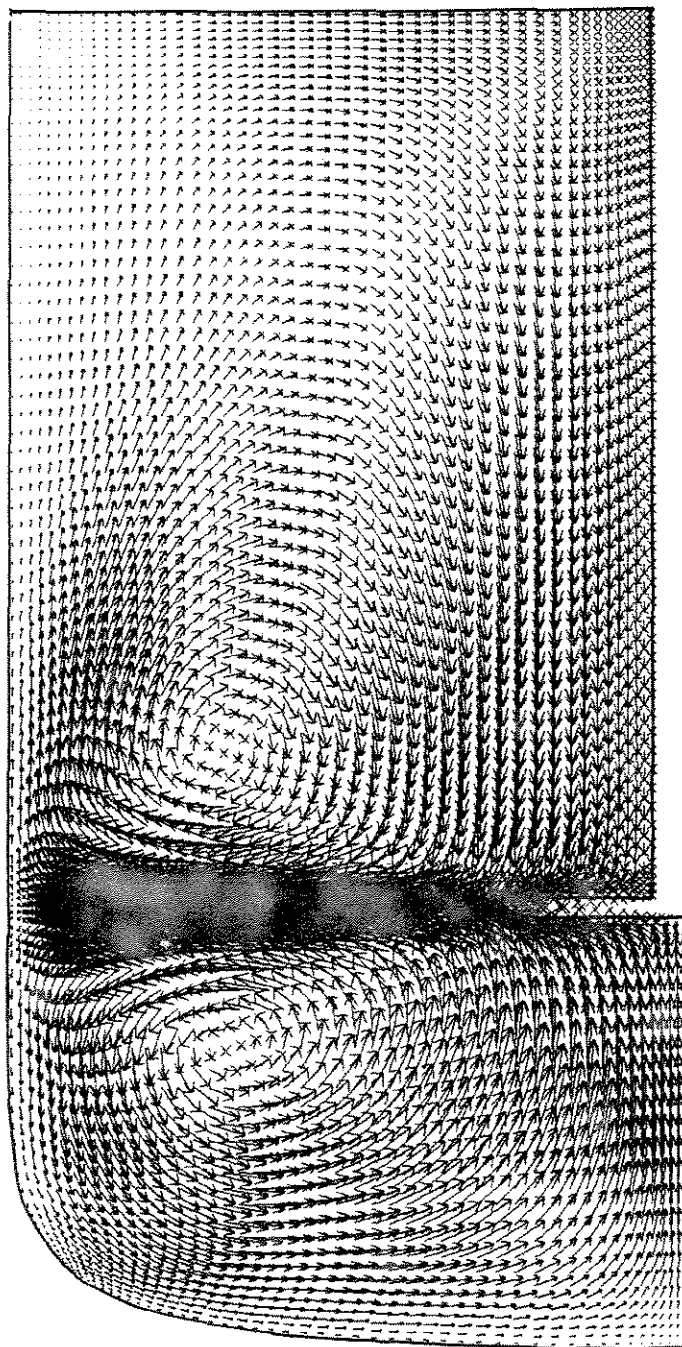


Figura 5.4(c): Vetores de velocidade num tanque com jaqueta.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido dilatante ($n=1,5$).

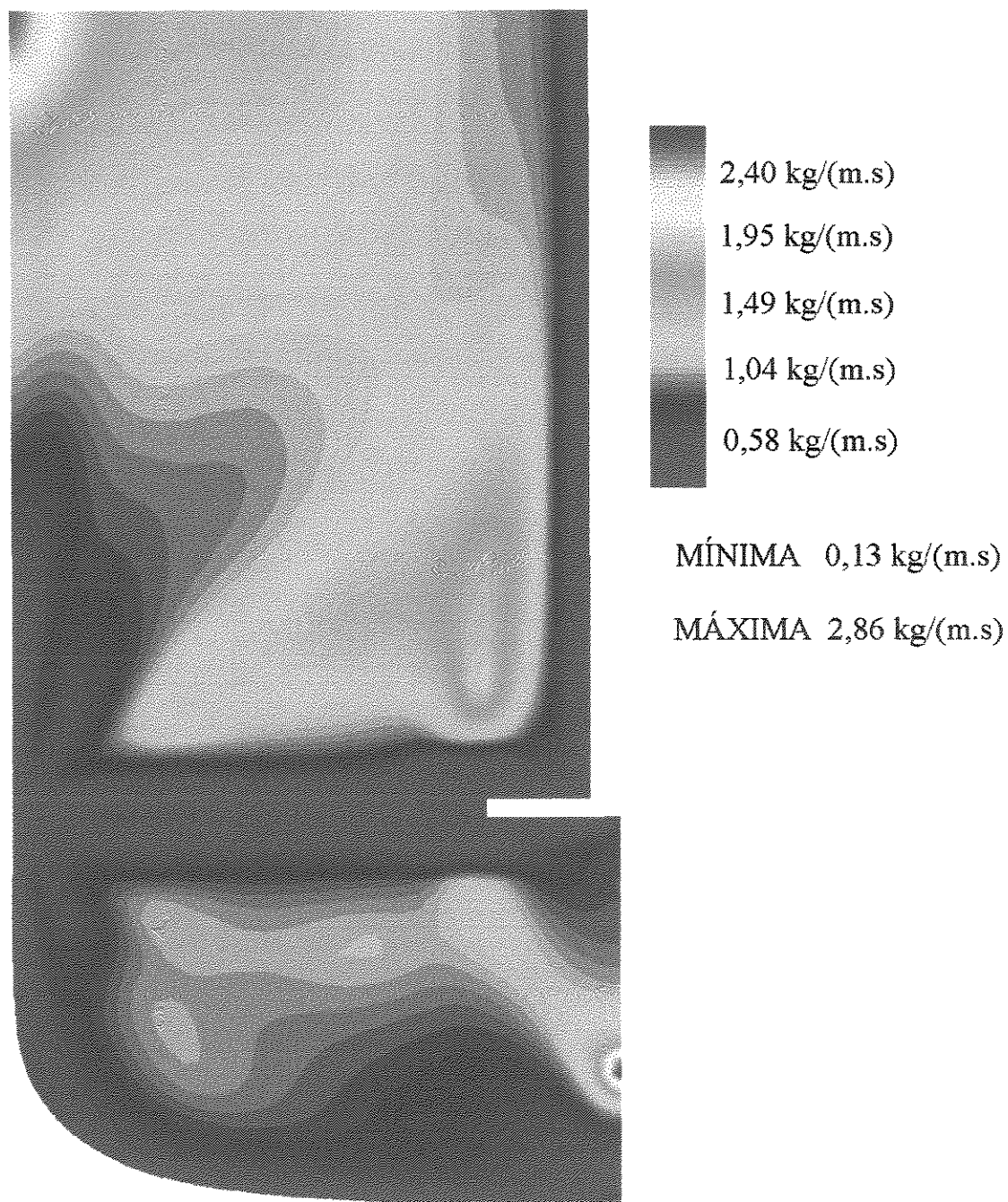


Figura 5.5(a): Distribuição de viscosidade num tanque com jaqueta.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido pseudoplástico ($n=0,5$).

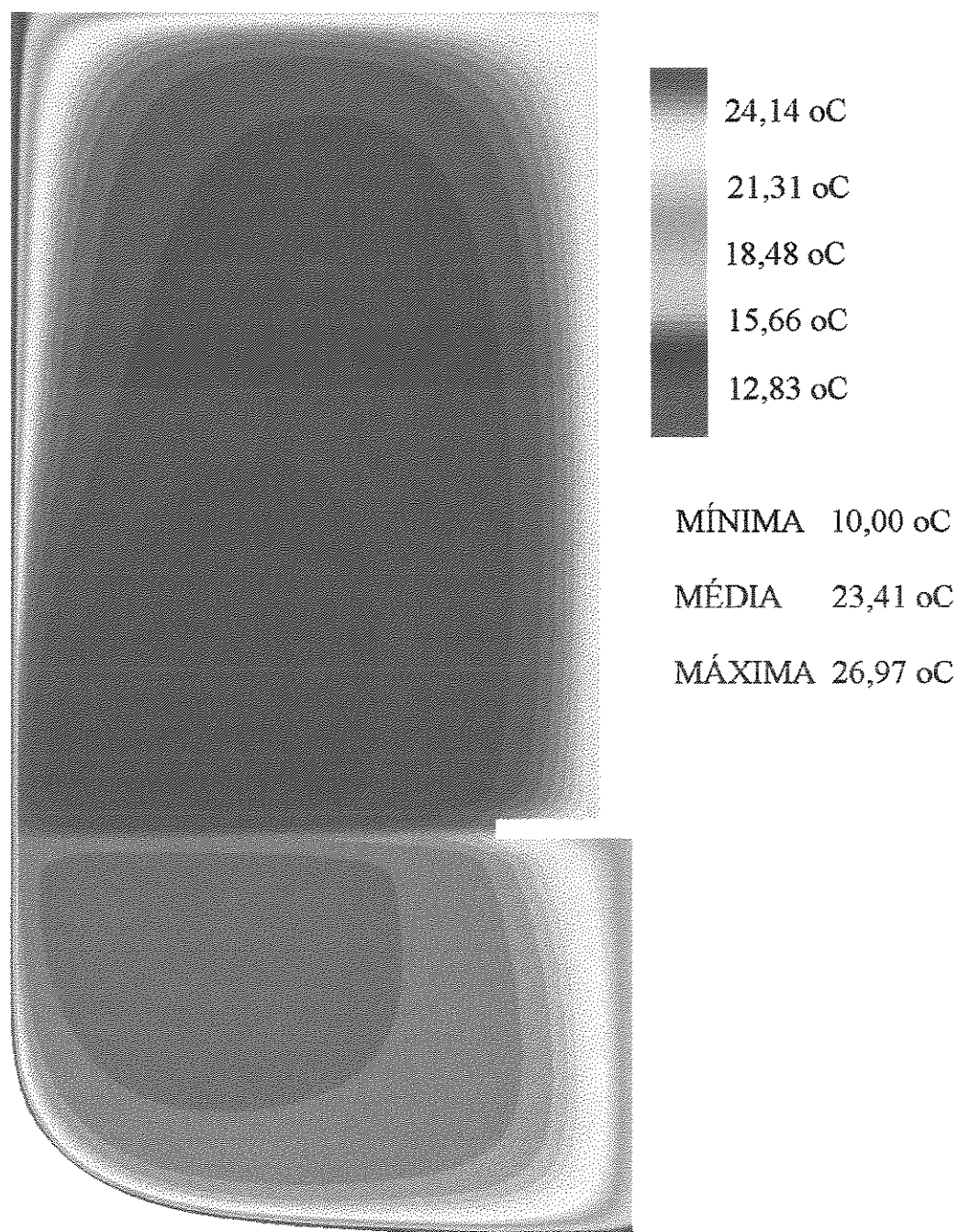


Figura 5.5(b): Distribuição de temperatura num tanque com jaqueta.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido pseudoplástico ($n=0,5$).

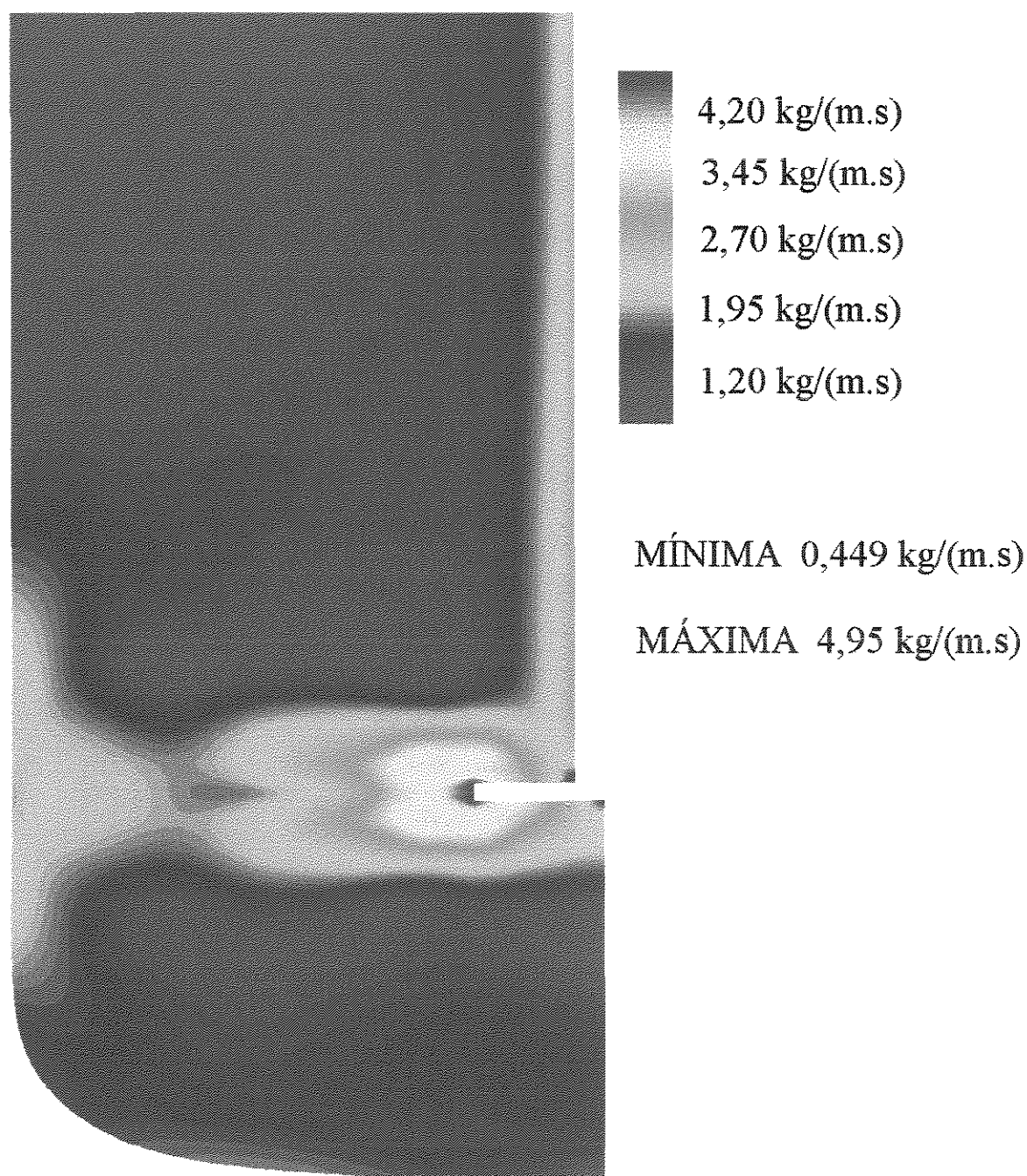


Figura 5.6(a): Distribuição de viscosidade num tanque com jaqueta.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido dilatante ($n=1,5$).

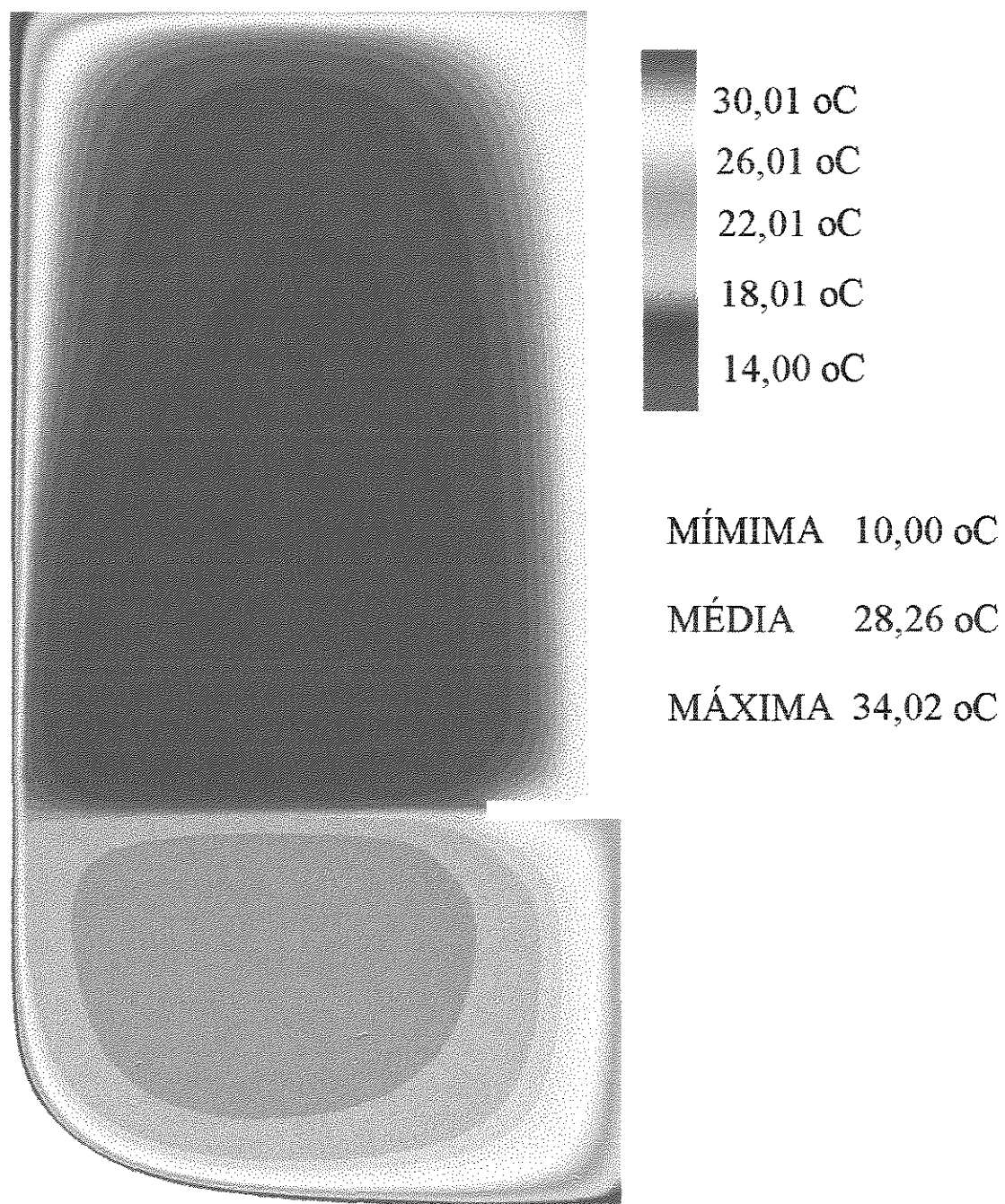


Figura 5.6(b): Distribuição de temperatura num tanque com jaqueta.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido dilatante ($n=1,5$).

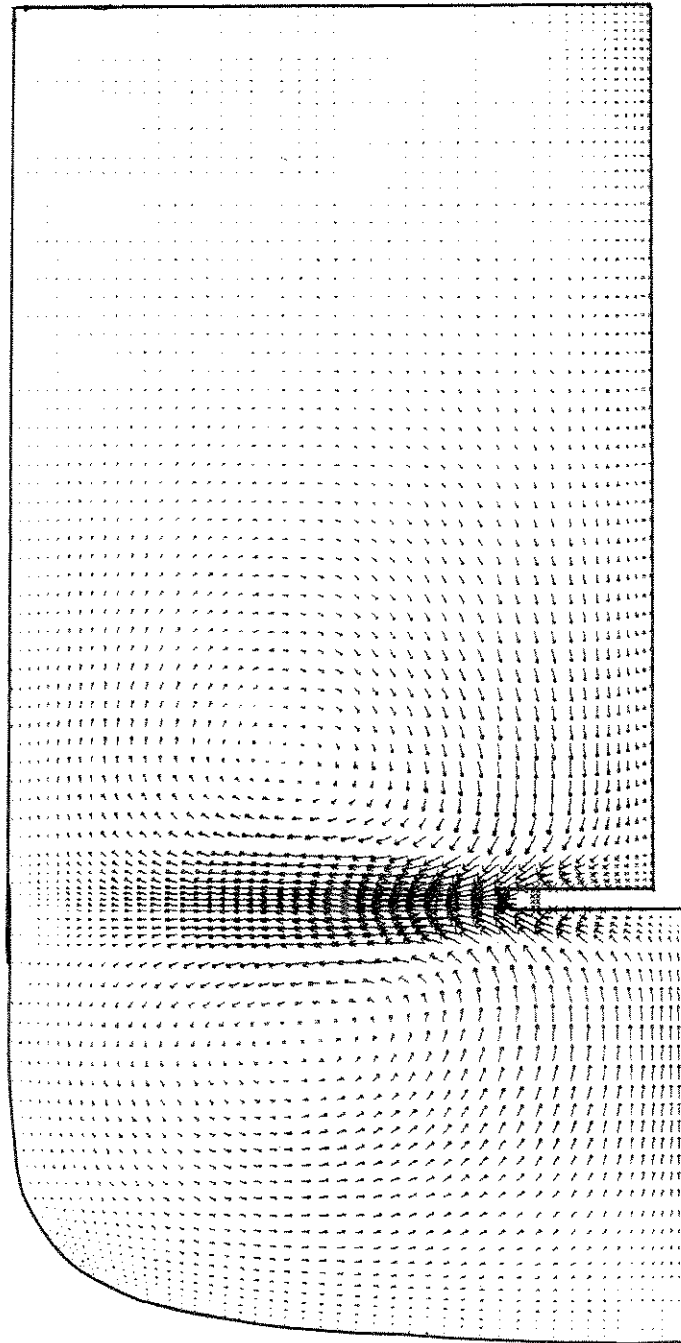


Figura 5.7(a): Vetores de velocidade para o tanque com jaqueta.
Velocidade de rotação de 15 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

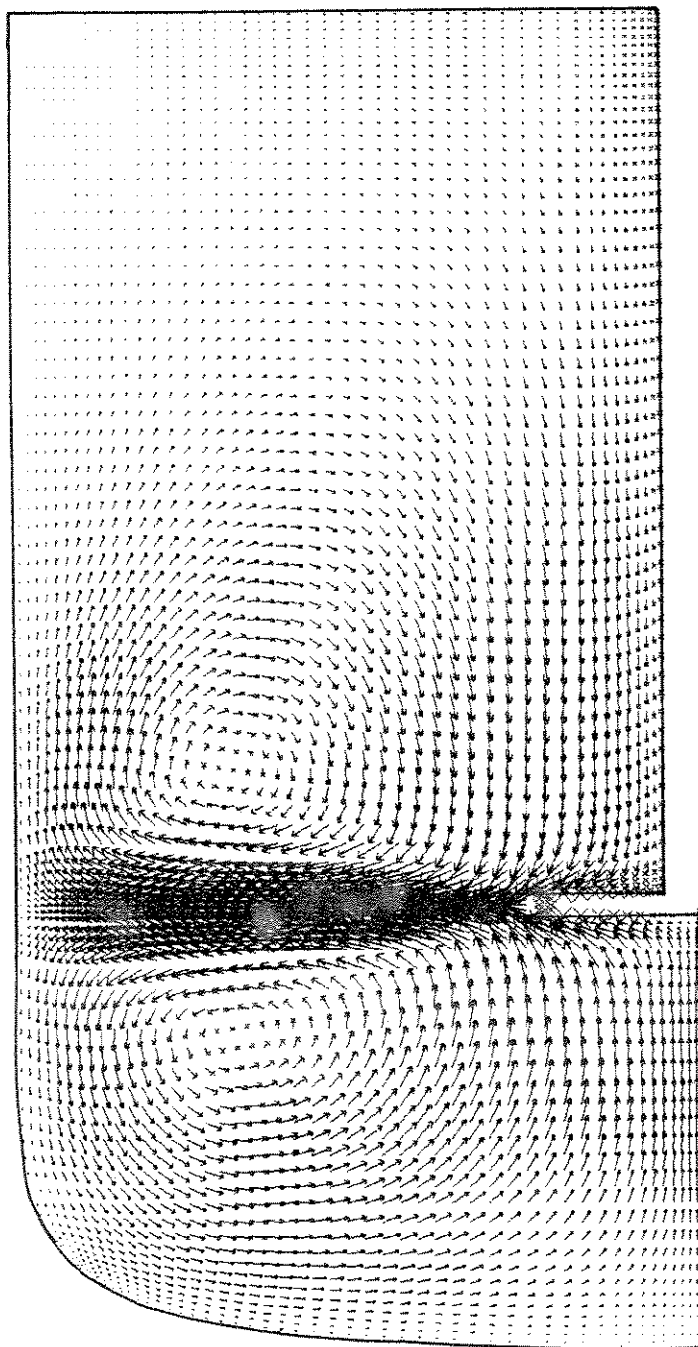


Figura 5.7(b): Vetores de velocidade para o tanque com jaqueta.
Velocidade de rotação de 30 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

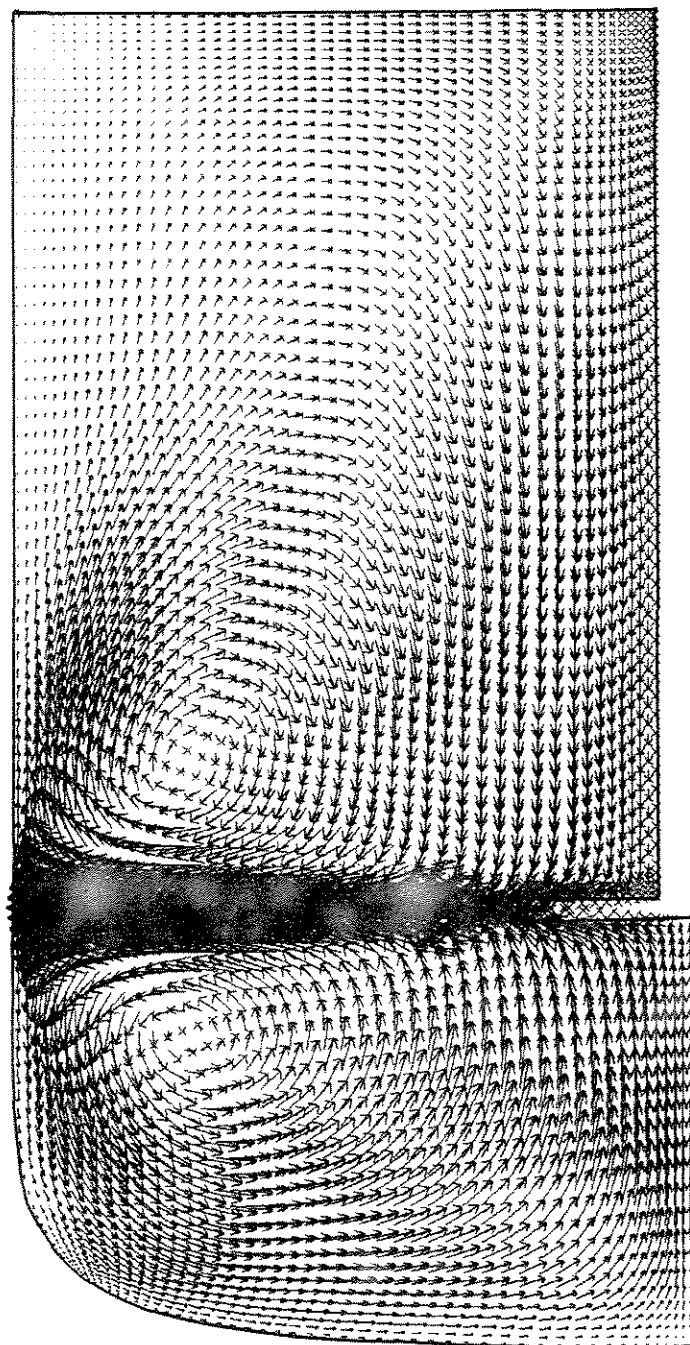


Figura 5.7(c): Vetores de velocidade para o tanque com jaqueta.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

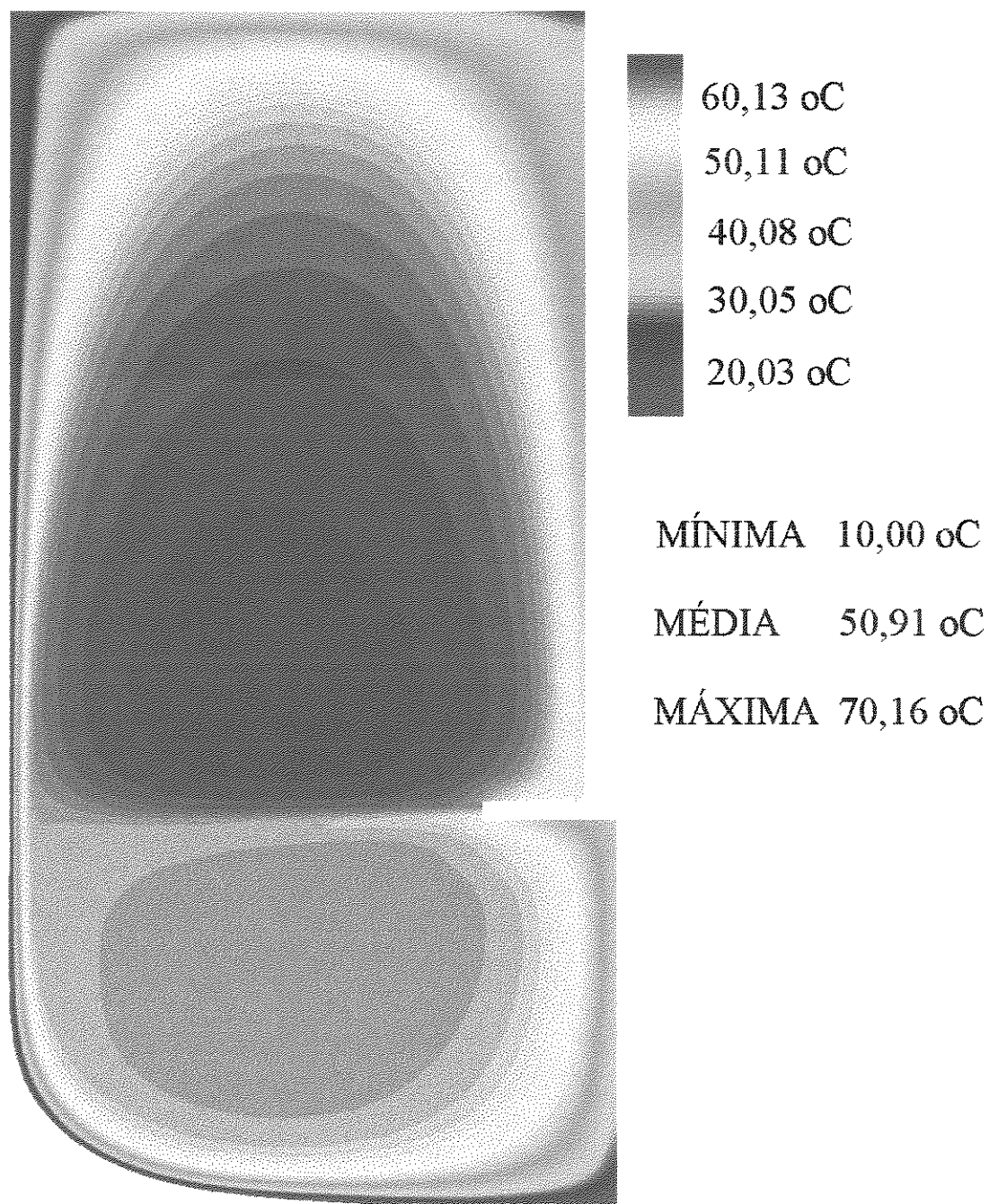


Figura 5.8(a): Distribuição de temperatura para o tanque com jaqueta.
Velocidade de rotação de 15 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

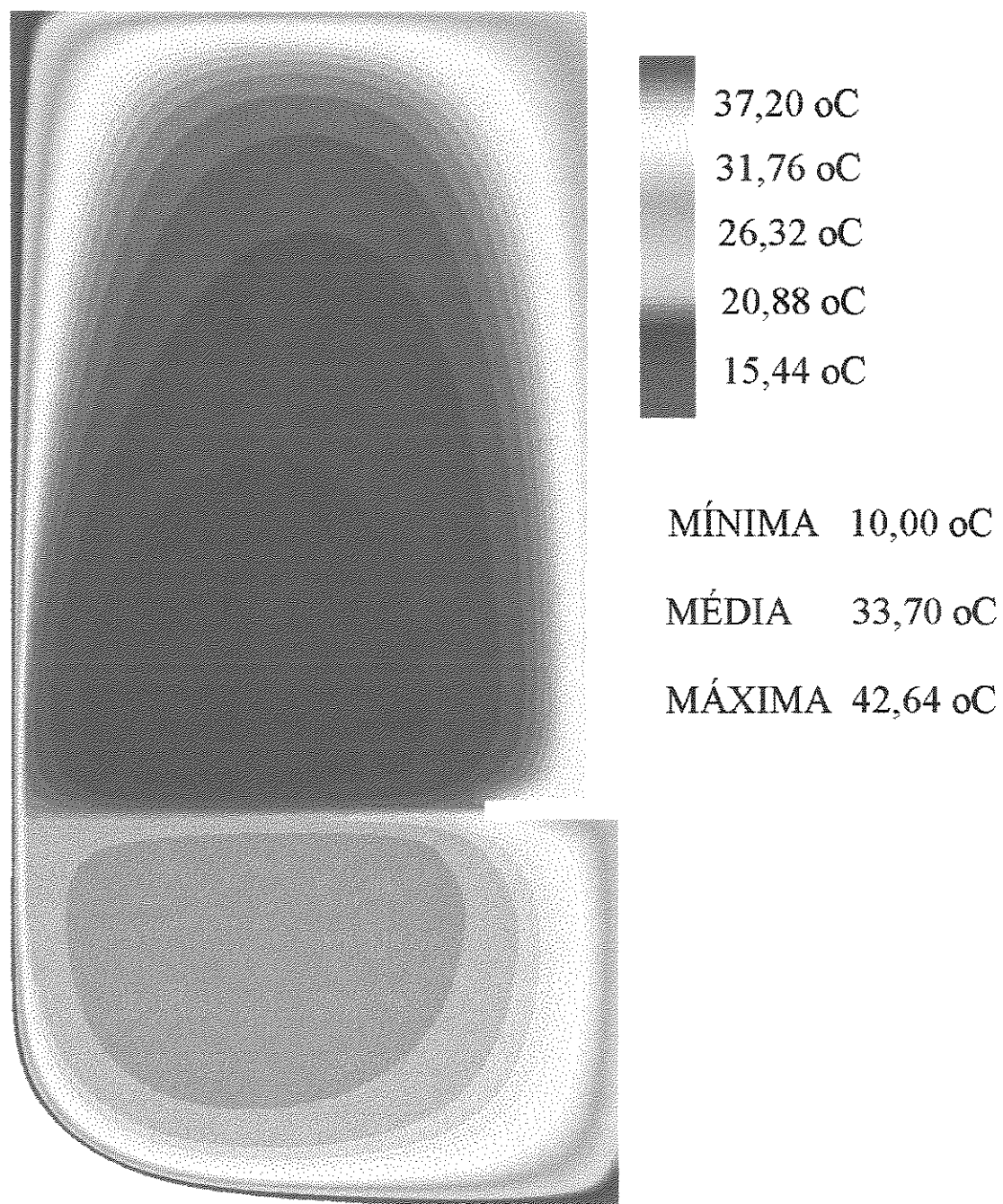


Figura 5.8(b): Distribuição de temperatura para o tanque com jaqueta.
Velocidade de rotação de 30 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

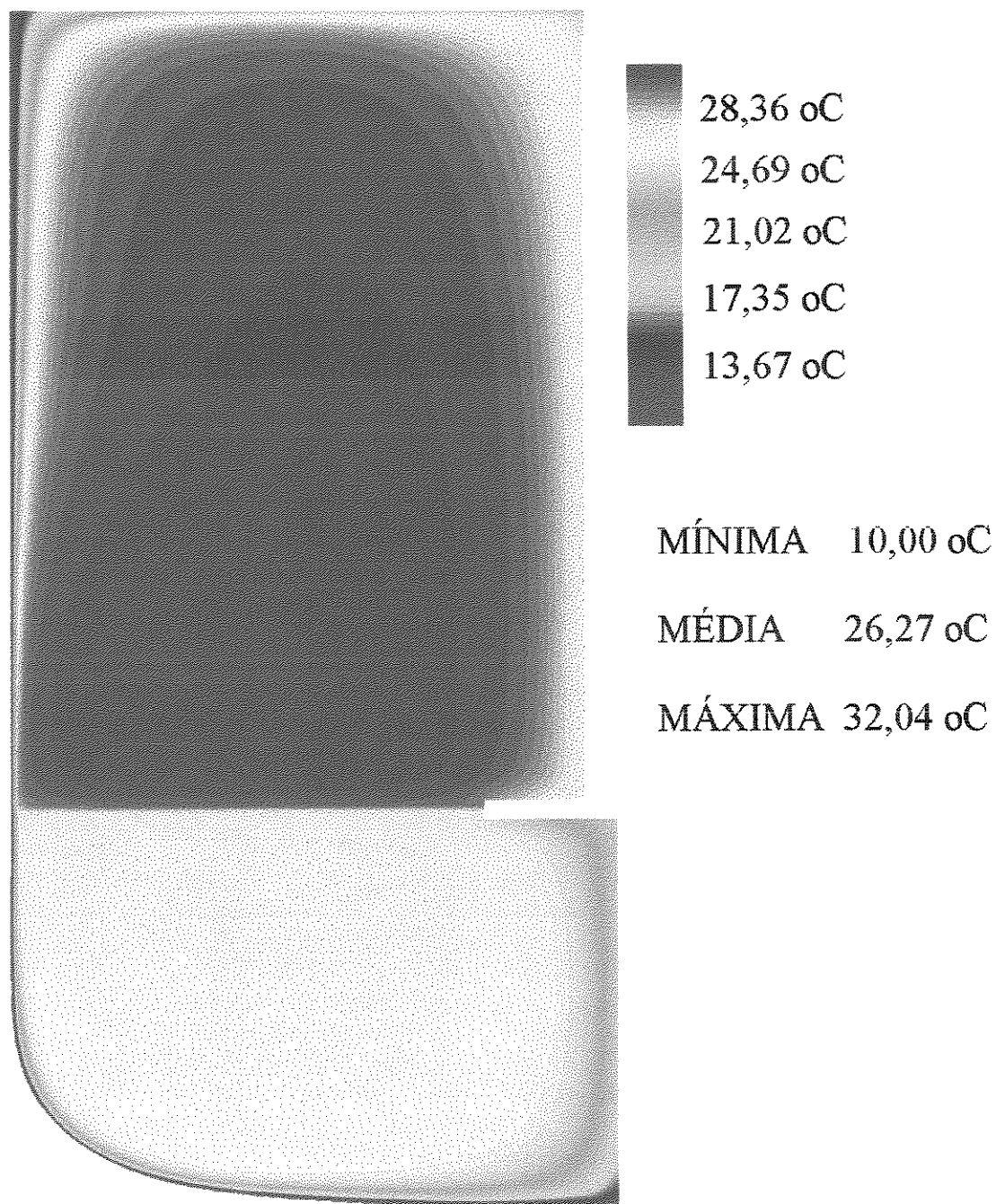


Figura 5.8(c): Distribuição de temperatura para o tanque com jaqueta.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

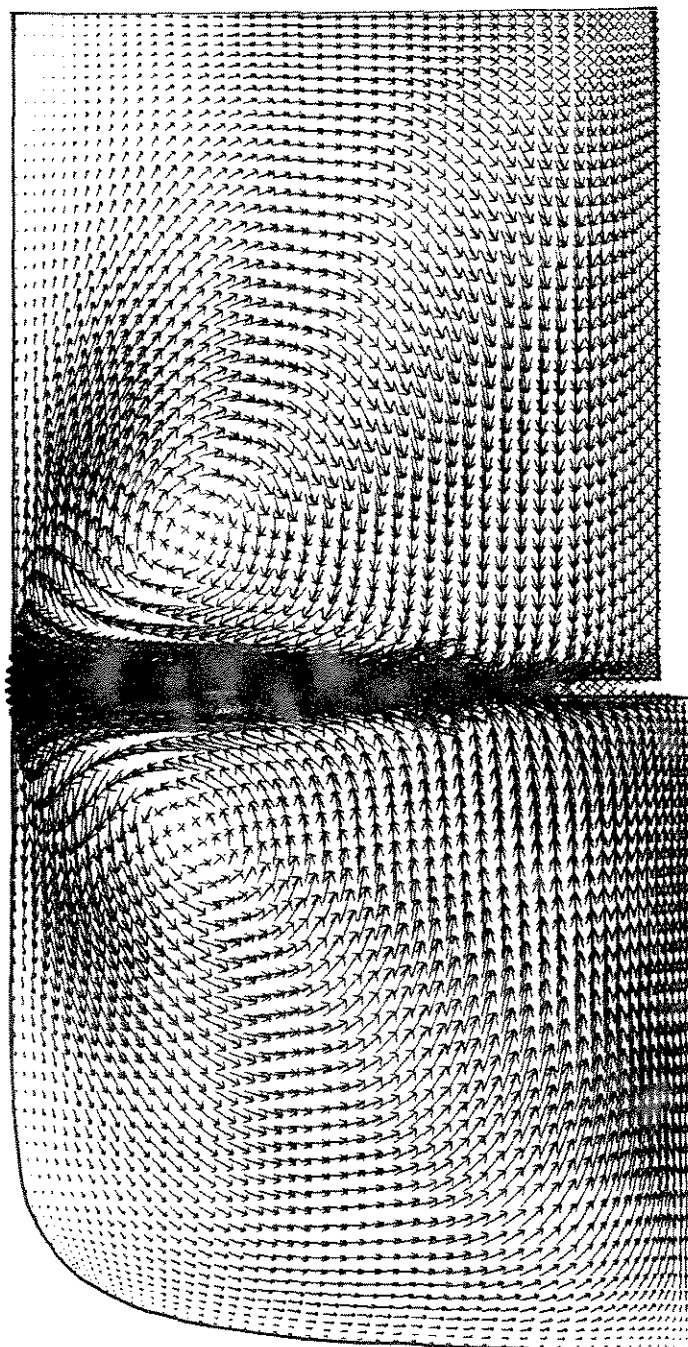


Figura 5.9(a): Vetores de velocidade para o tanque com jaqueta no qual o agitador está posicionado no meio. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

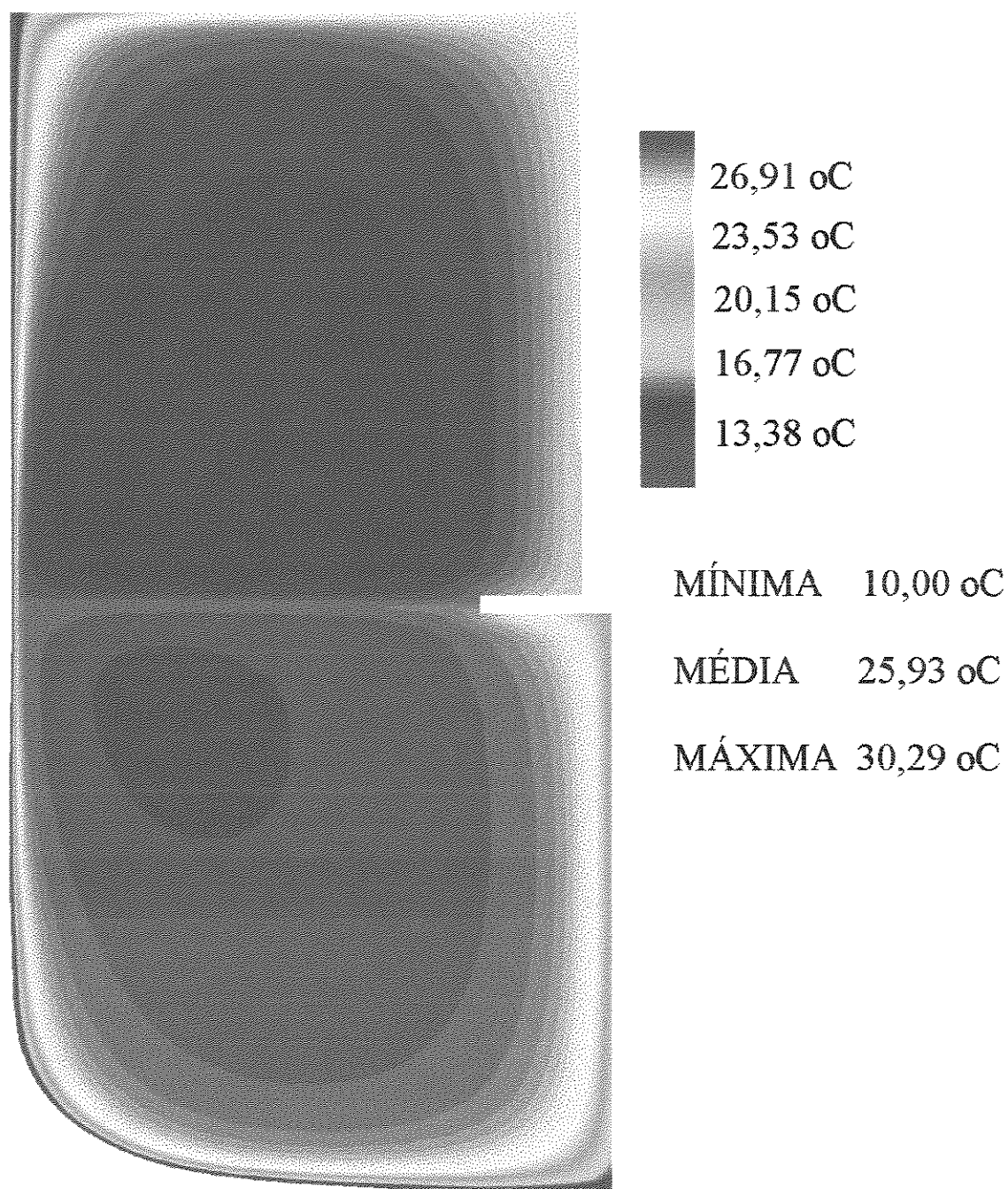


Figura 5.9(b): Distribuição de temperatura para o tanque com jaqueta no qual o agitador está posicionado no meio. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

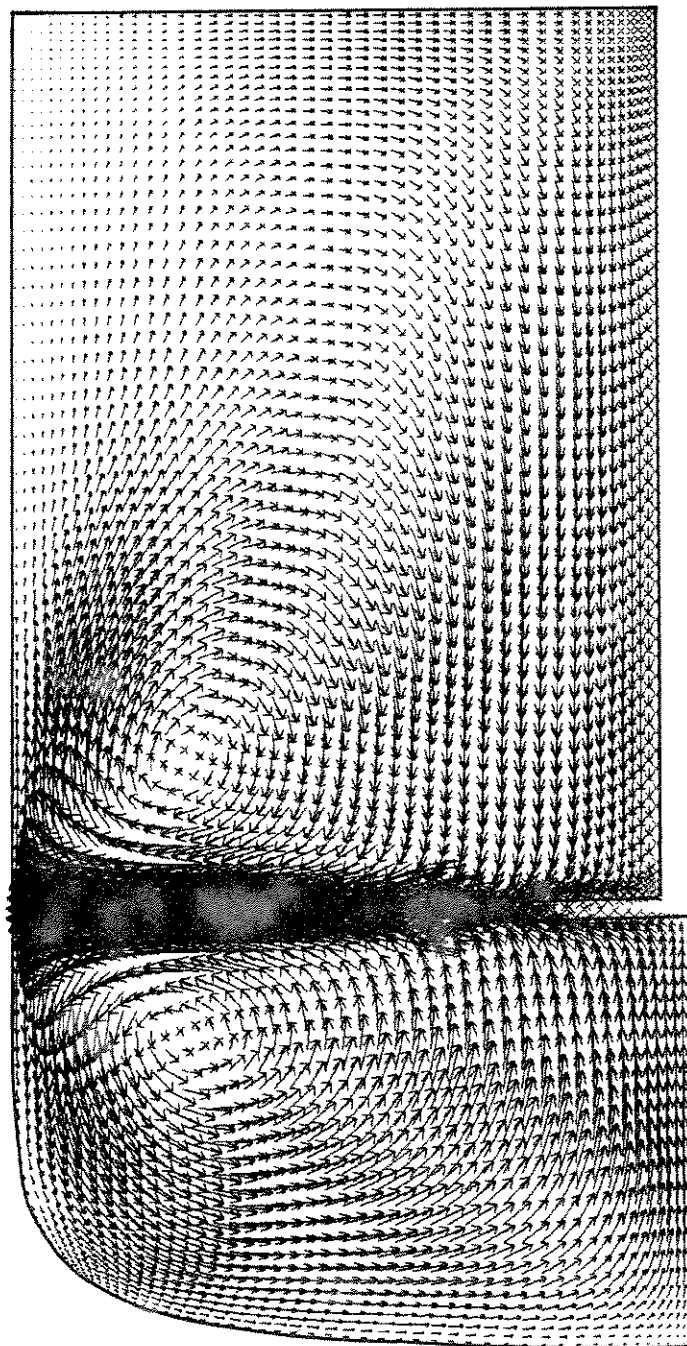


Figura 5.10(a): Vetores de velocidade para o tanque com jaqueta e com o fundo curvo. Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

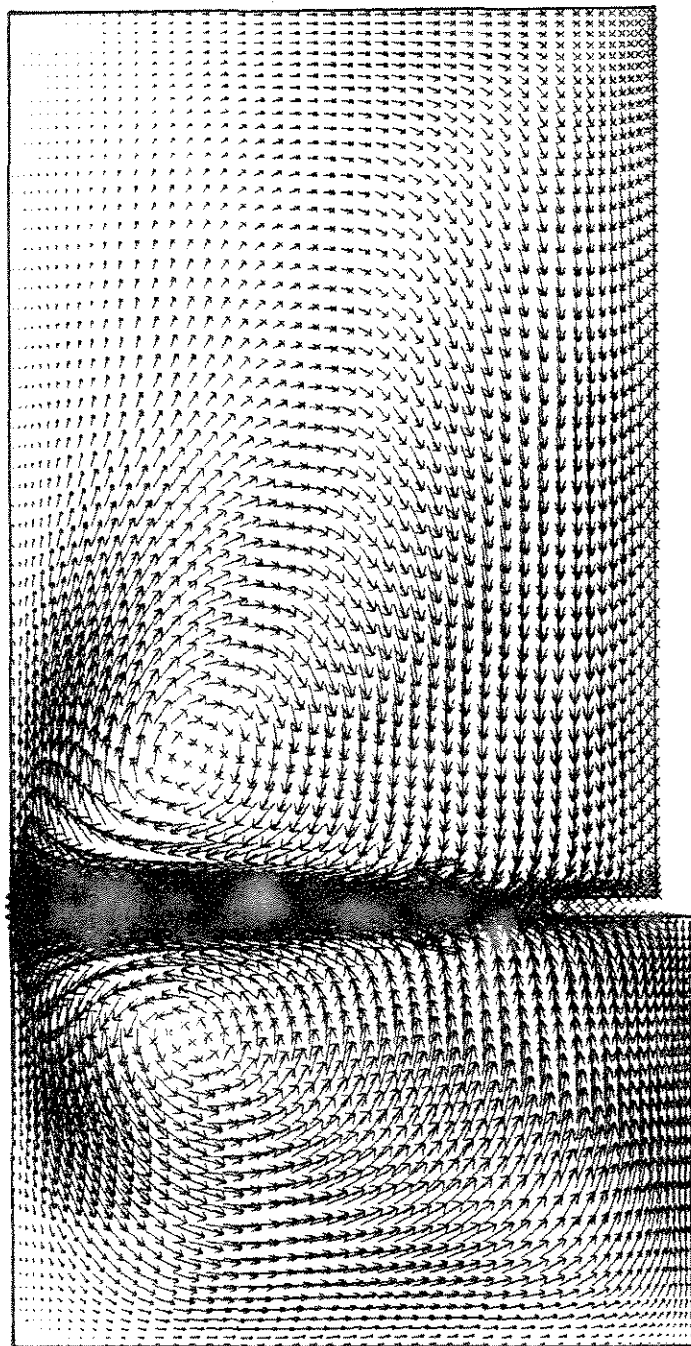


Figura 5.10(b): Vetores de velocidade para o tanque com jaqueta e com o fundo plano. Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

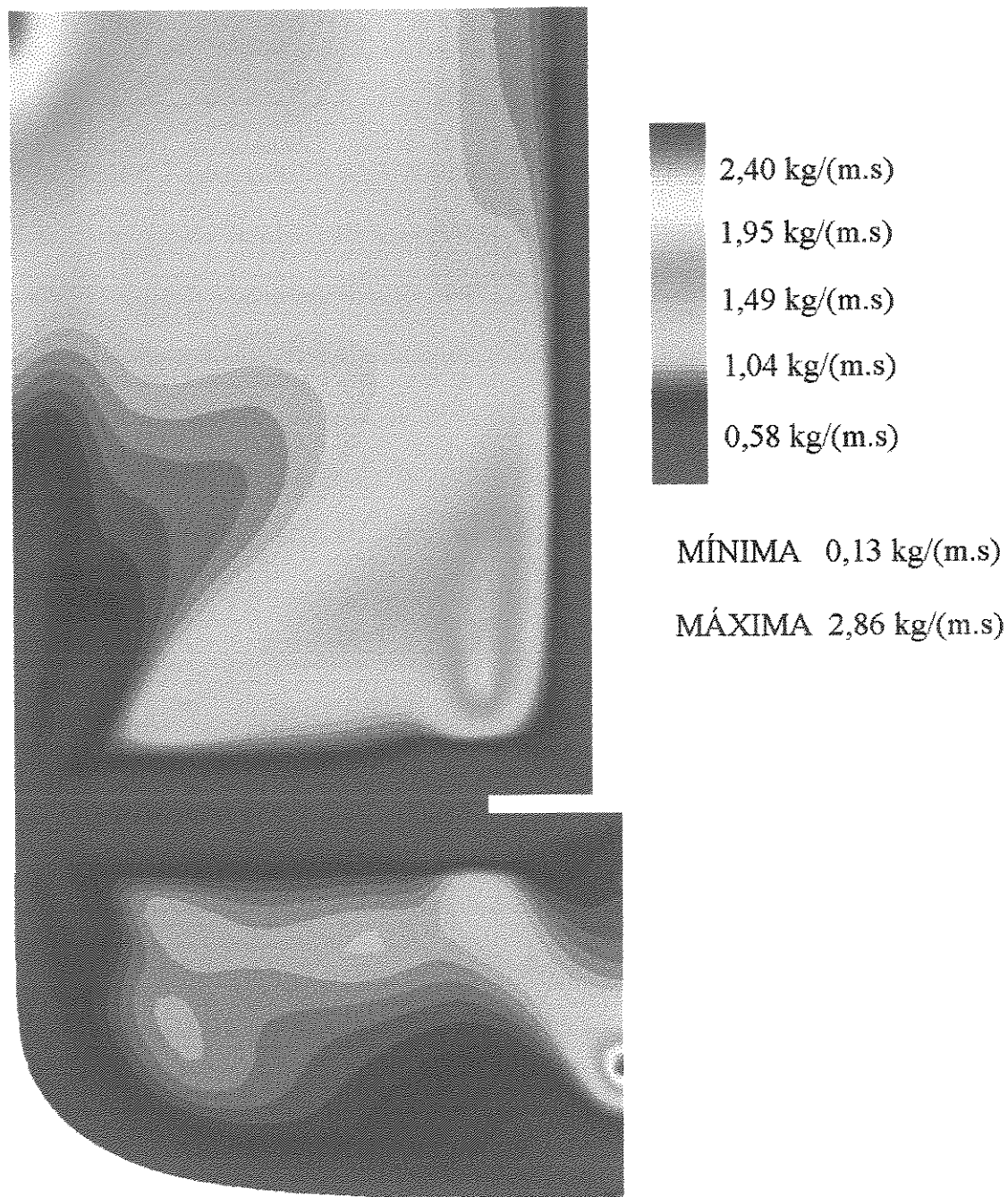


Figura 5.11(a): Distribuição de viscosidade para o tanque com jaqueta e com o fundo curvo. Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido pseudoplástico ($n=0,5$).

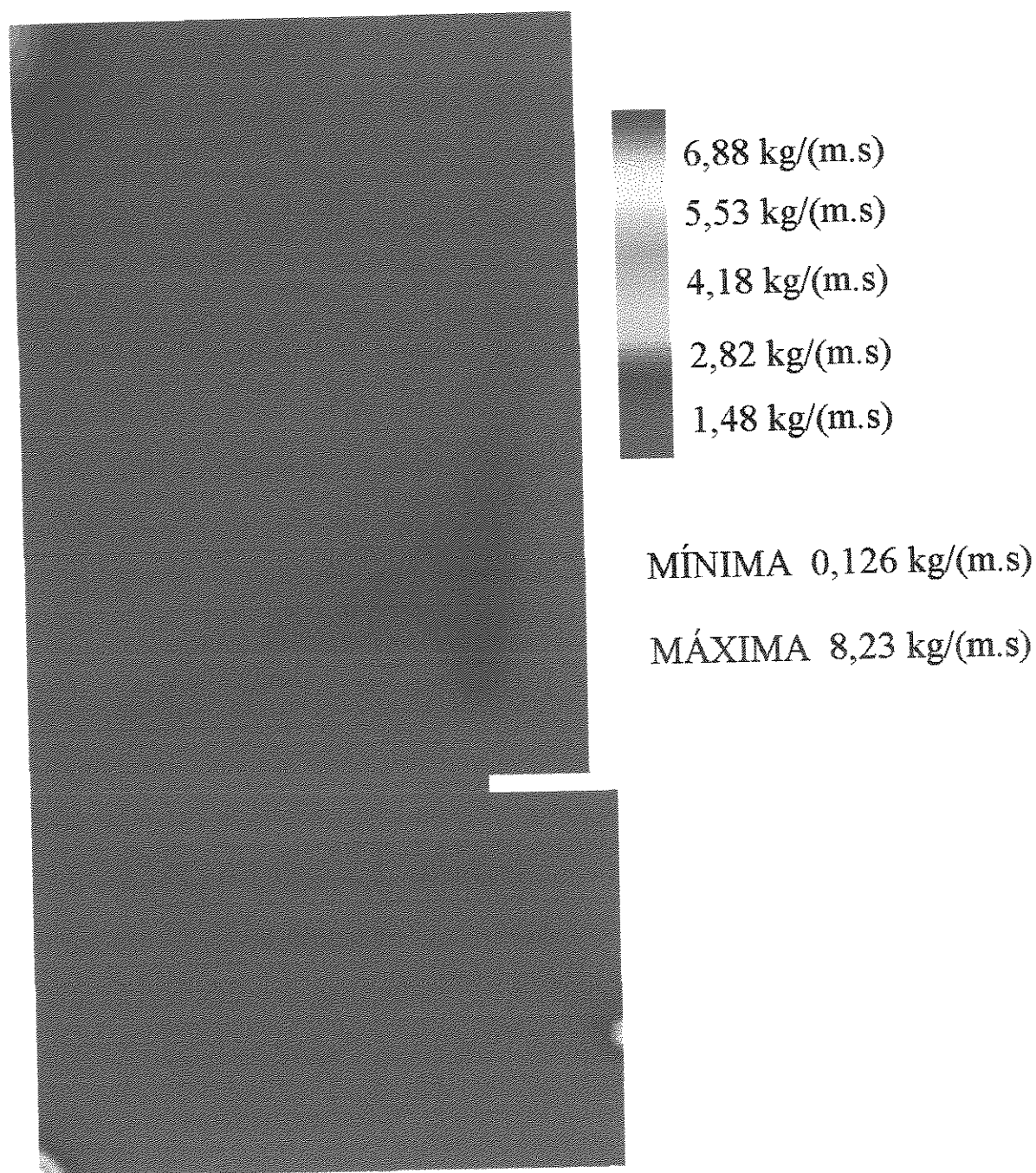


Figura 5.11(b): Distribuição de viscosidade para o tanque com jaqueta e com o fundo plano. Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido pseudoplástico ($n=0,5$).

5.3 SERPENTINAS INTERNAS AOS TANQUES REATORES DE MISTURA

A seção 5.2 descreveu como os processos de mistura e a transferência de calor internas aos tanques de mistura que utilizam jaquetas podem ser melhorados de forma a proporcionar uma melhor troca térmica. Para isso, foram analisados o modo de operação, a posição do agitador e a geometria do tanque. Nesse estudo, foi observado que o campo de fluxo gerado pelo agitador tipo turbina Rushton em escoamentos laminares proporciona uma pobre transferência de calor no centro das zonas de recirculação localizadas acima e abaixo do agitador. Isto se deve à presença de pobre mistura nessa região provocando uma transferência de calor predominantemente por condução. Uma alternativa para melhorar a troca de calor é utilizar superfícies de troca térmica internas aos tanques para se remover o calor dessas zonas de recirculação e assim estabelecer temperaturas mais uniformes. Isto sugere o uso de serpentinas internas.

O arranjo experimental de serpentinas sugerida por Oldshue e Gretton (1954), que corresponde à Figura 3.2 é até hoje utilizado em projetos de tanques de mistura nas indústrias químicas. Este tipo de arranjo também é considerado no livro texto de Uhl e Gray (1966) que é uma referência para projetos de tanques reatores de mistura. No entanto, os trabalhos realizados por Street (1991), Street e McGreavy (1991), Nunhez (1994) e Nunhez e McGreavy (1994, 1995) indicaram que a presença de serpentinas na altura das lâminas do agitador restringe a circulação do fluido e, como consequência, a transferência de calor é pobre, embora exista uma excelente transferência de calor local na região do agitador. Entretanto, este aspecto não foi mostrado nos trabalhos citados anteriormente por comparação com o arranjo experimental. Este é o objetivo principal deste trabalho.

Nessa seção será investigada como a mistura e a transferência de calor para reações exotérmicas podem ser melhoradas pelo uso de serpentinas internas. Isto será feito através de simulações do fluxo para o aparato experimental citado acima e para algumas geometrias propostas. Além do agitador, vários outros fatores influenciam o desempenho do tanque quando serpentinas estão presentes, entre eles: número de serpentinas, diâmetro dos tubos, raio do feixe de serpentinas e a posição dos tubos com relação ao agitador.

As considerações sobre a influência que a posição e o modo de operação do agitador exercem na mistura e na transferência de calor para tanques de mistura com jaquetas apresentadas na seção 5.2 continuam válidas, mas algumas modificações e considerações são necessárias quando se tem a presença das serpentinas.

Uma atenção especial será dada à influência que o diâmetro dos tubos e o raio do feixe de serpentinas tem sobre a circulação do fluido e a transferência de calor.

5.3.1 APARATO EXPERIMENTAL (OLDSHUE E GRETTON, 1954)

Oldshue e Gretton (1954) sugeriram um arranjo de serpentinas internas a um tanque de mistura. Nesse trabalho experimental foram investigadas condições laminar e turbulenta.

A geometria proposta por eles foi descrita na seção 3.5.2. A posição e as dimensões das serpentinas são mostradas na Figura 3.2 e estão listadas na tabela 3.1. O número total de dez (10) serpentinas foi usado. O agitador está posicionado à 1/3 da altura de líquido e nas serpentinas foi assumido que o fluxo do fluido refrigerante é suficiente para manter a temperatura do tubo a 10 °C. O coeficiente de transferência de calor nos tubos das serpentinas é igual a 500 W/m² K.

A Figura 3.4(b) mostra a malha usada para esta geometria que contém 5692 volumes de controle. A malha é mais densa nas vizinhanças dos tubos das serpentinas para capturar o elevado gradiente de temperatura.

A Figura 5.12 mostra os vetores velocidade desse arranjo para uma velocidade angular de rotação do agitador de 60 rpm. Como é possível observar, o modelo de fluxo gerado por esse arranjo experimental é similar ao do tanque com jaqueta mostrado na Figura 5.1. Nota-se que o fluxo interno ao tanque diminui porque os tubos das serpentinas oferecem resistência à circulação do fluido.

O benefício quanto à transferência de calor obtido com o uso de serpentinas pode ser visto na distribuição de temperatura apresentada pela Figura 5.13.

As Figuras 5.14(a)-(b) e as Figuras 5.15(a)-(b) mostram os perfis de viscosidade e de temperatura para os fluidos pseudoplástico ($n=0,5$) e dilatante ($n=1,5$), respectivamente.

O fluxo interno e a transferência de calor são afetados sensivelmente pelo modo de agitação. A Tabela 5.5 mostra como a distribuição de temperatura é afetada pelo modo de agitação para três diferentes velocidades de rotação: 15, 30 e 60 rpm. Os valores mais baixos da temperatura máxima e média foram obtidos com a velocidade de rotação de 60 rpm que representa o escoamento mais desenvolvido. As Figuras 5.16(a)-(c) mostram que a circulação do fluxo é muito ineficiente independente do aumento da velocidade de rotação. Isto ocorre devido à presença de serpentinas na altura das lâminas do agitador que restringem a circulação do fluido e, conseqüentemente, promovem uma pobre mistura e transferência de calor nesses tanques.

Tabela 5.5: A influência do modo de operação do agitador na distribuição de temperatura em tanques de mistura com o arranjo experimental de serpentinas.

Velocidade de rotação (rpm)	Atribuição não-Newtoniana (n)	Temperatura máxima (oC)	Temperatura média (oC)
15	0,5	81,67	40,29
	1,0	55,19	32,89
	1,5	49,43	30,91
30	0,5	34,27	23,58
	1,0	35,10	24,30
	1,5	38,47	26,02
60	0,5	25,52	19,42
	1,0	27,44	20,73
	1,5	28,98	22,12

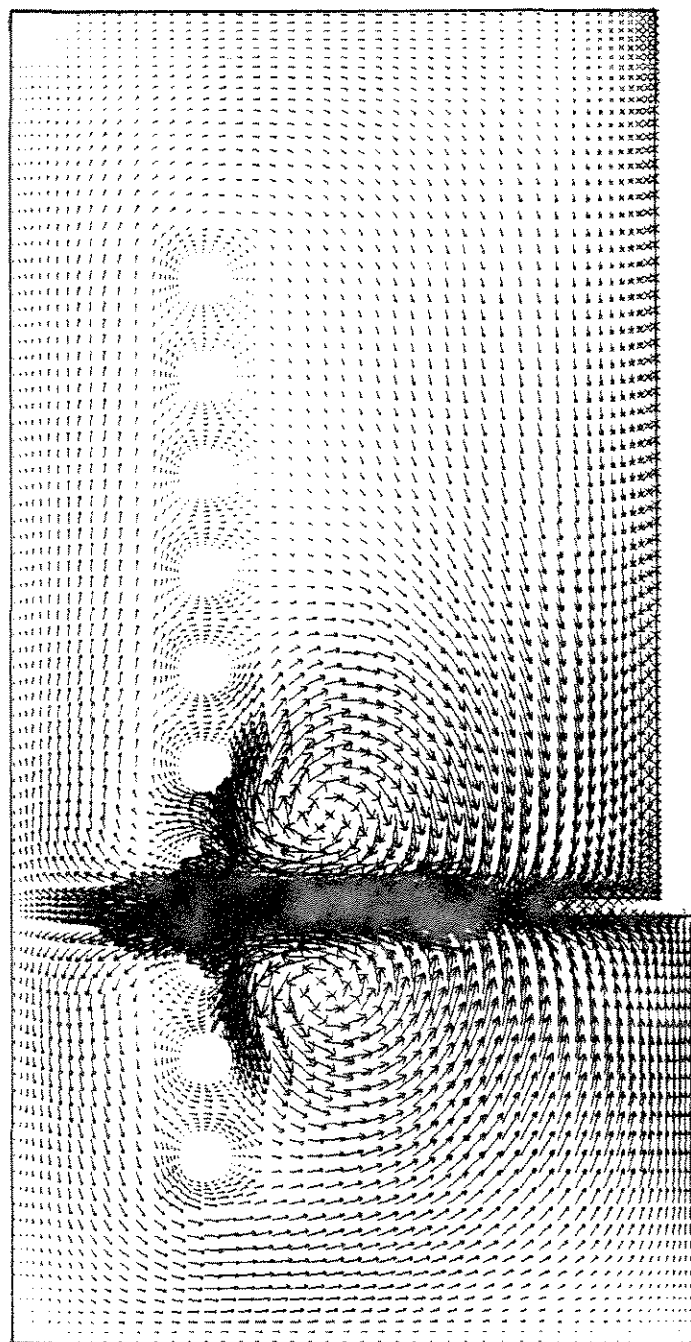


Figura 5.12: Vetores de velocidade para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

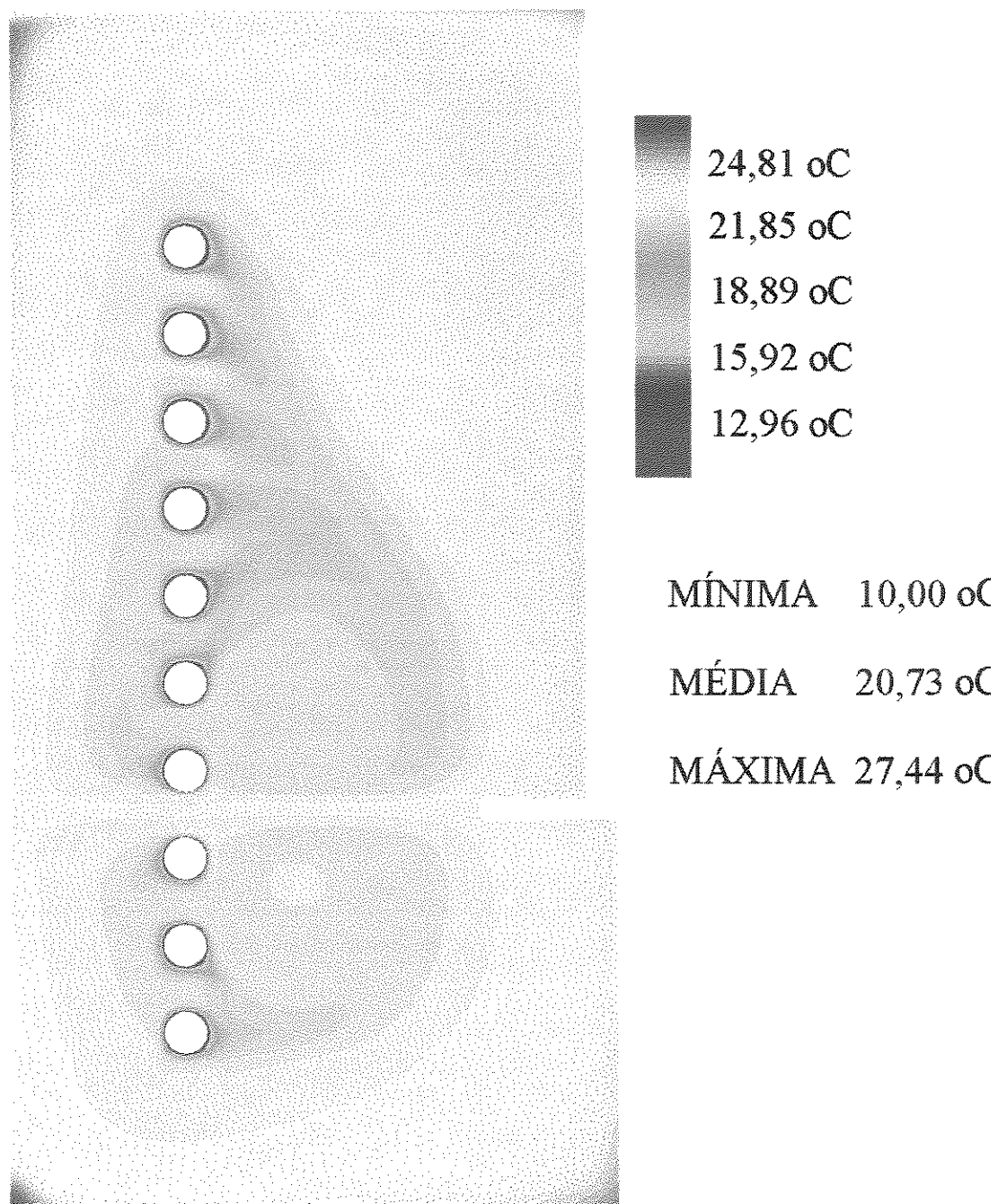


Figura 5.13: Distribuição de temperatura para o arranjo experimental de serpentina (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

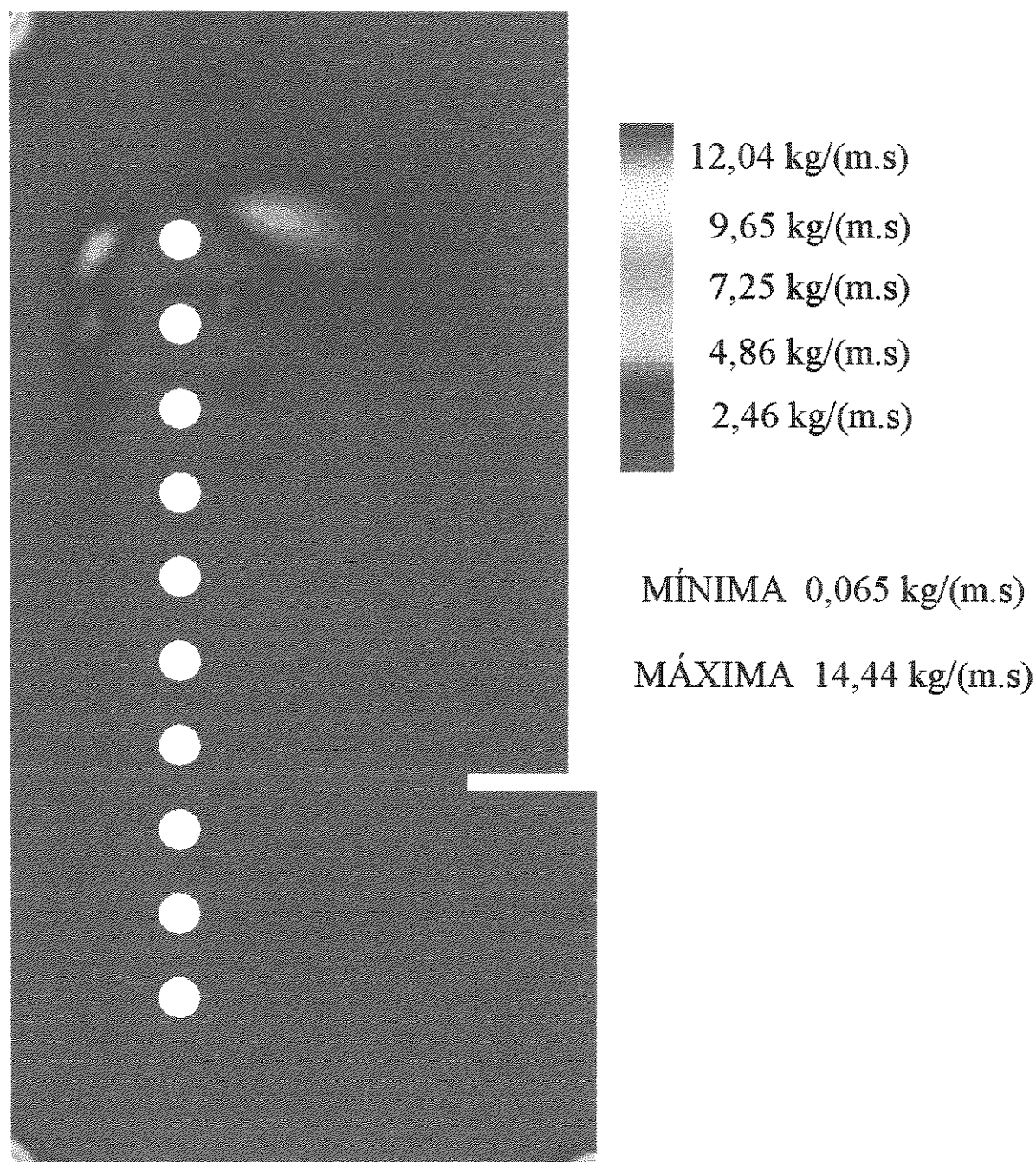


Figura 5.14(a): Distribuição de viscosidade para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido pseudoplástico ($n=0,5$).

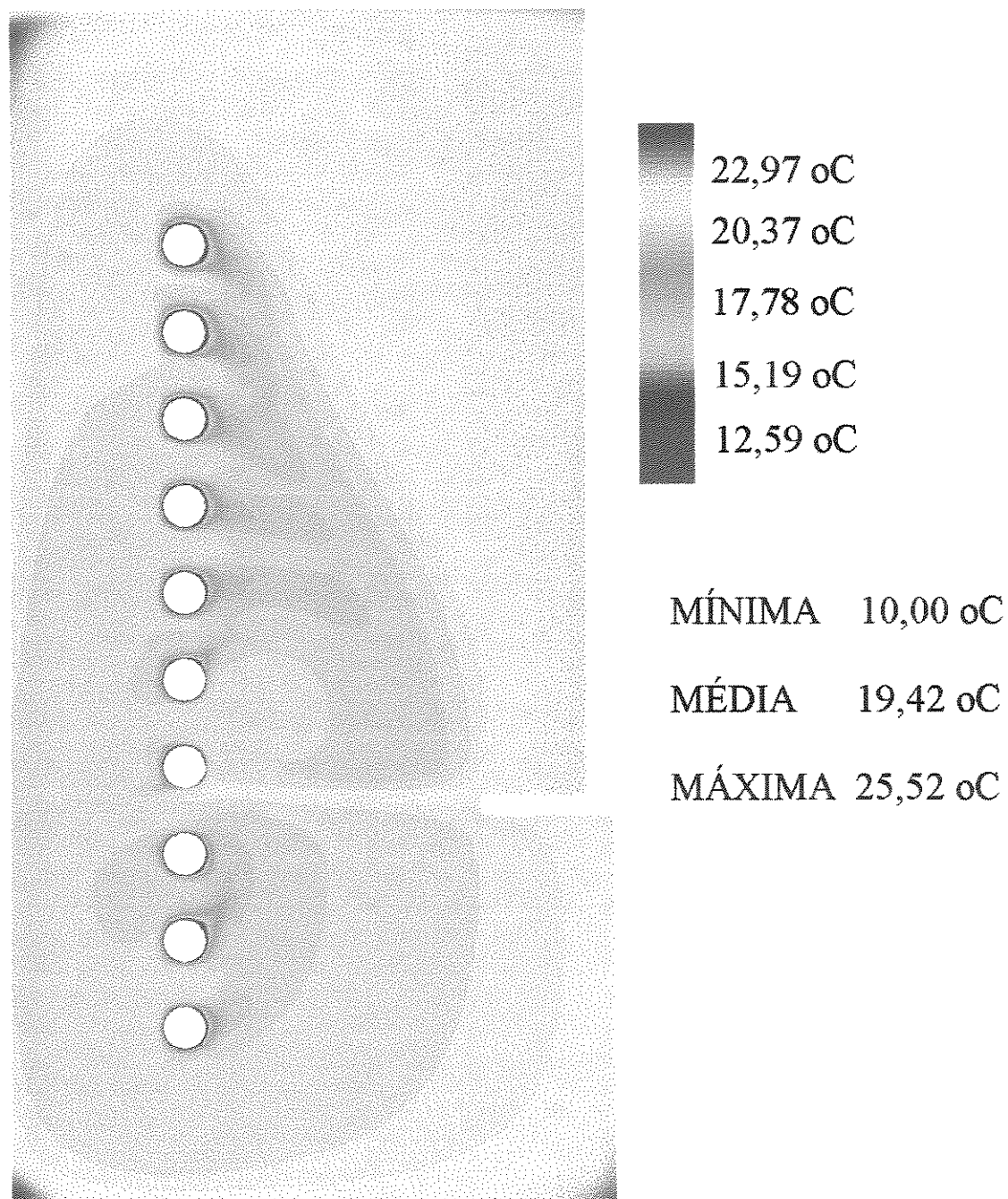


Figura 5.14(b): Distribuição de temperatura para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido pseudoplástico ($n=0,5$).

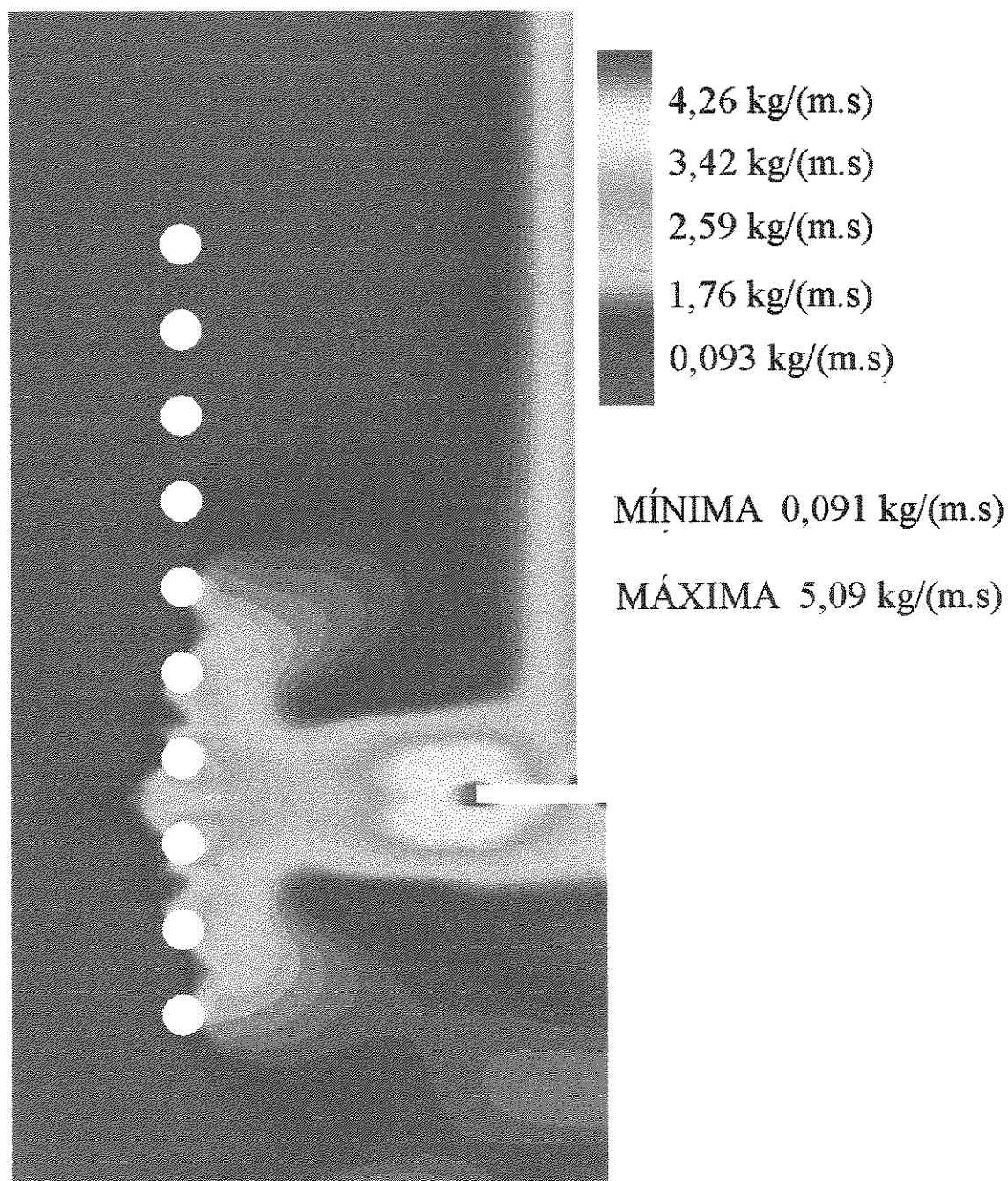


Figura 5.15(a): Distribuição de viscosidade para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido dilatante ($n=1,5$).

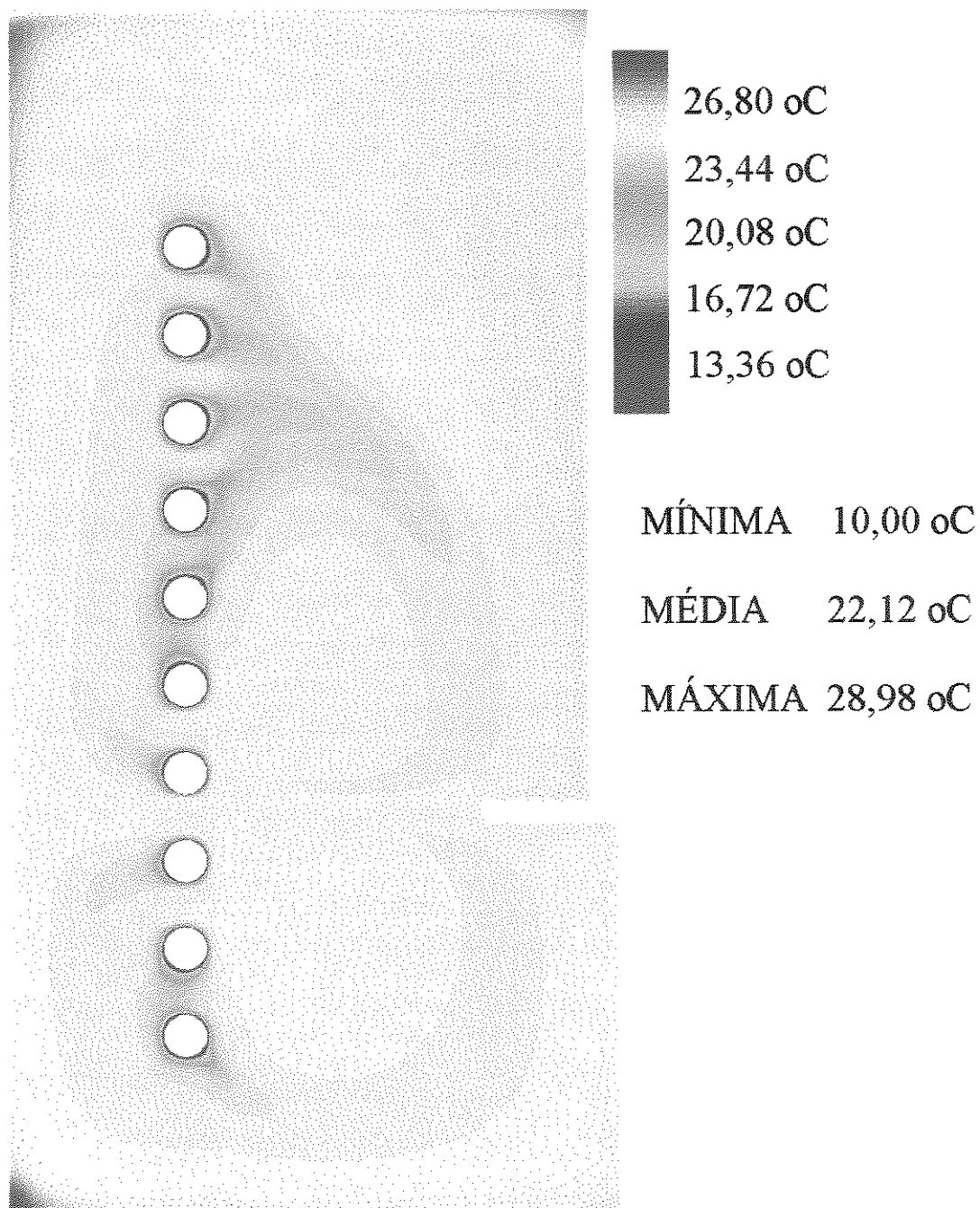


Figura 5.15(b): Distribuição de temperatura para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido dilatante ($n=1,5$).

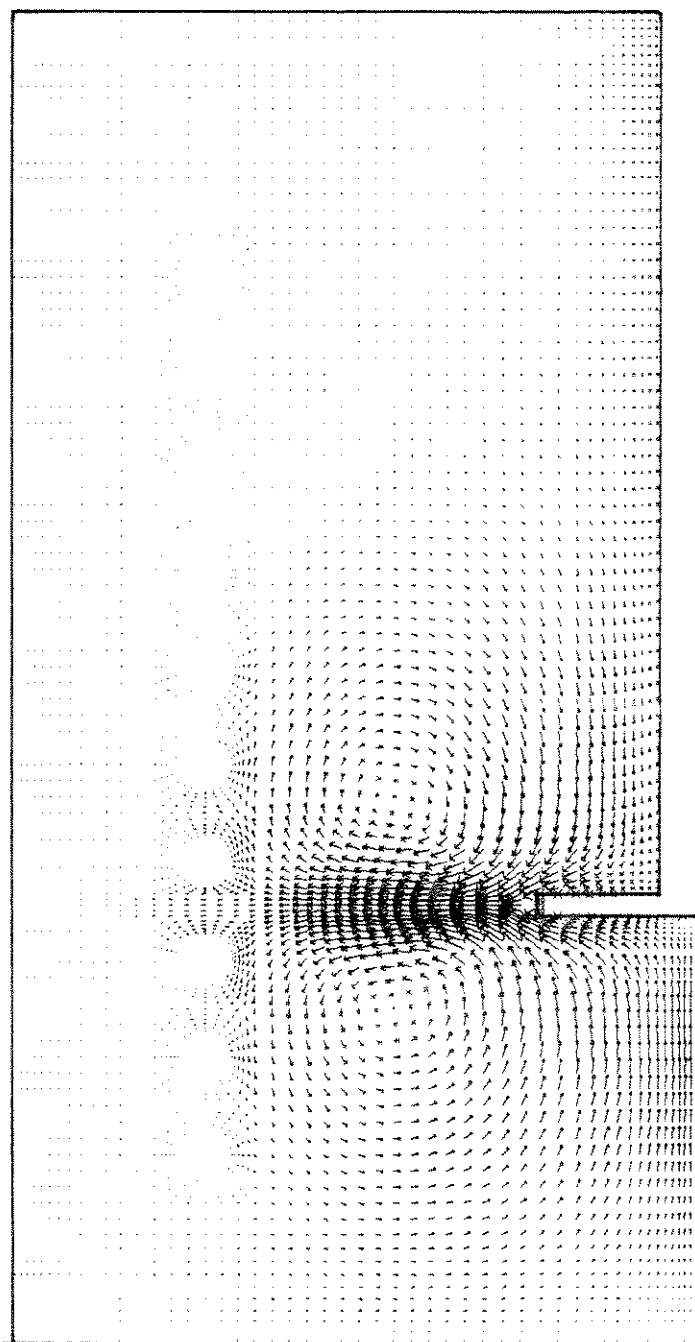


Figura 5.16(a): Vetores de velocidade para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 15 rpm. Fluxo não-isotérmico. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

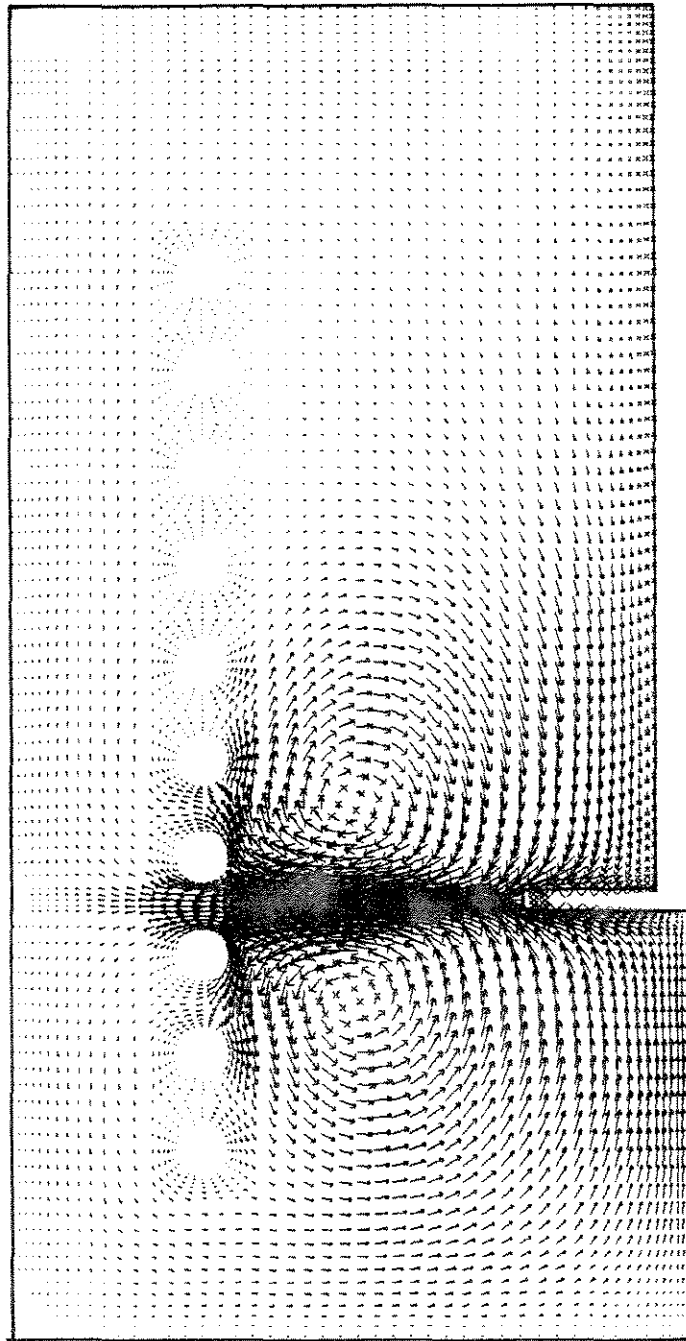


Figura 5.16(b): Vetores de velocidade para o arranjo experimental de serpenti (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 30 rpm. Fluxo não-isotérmico. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

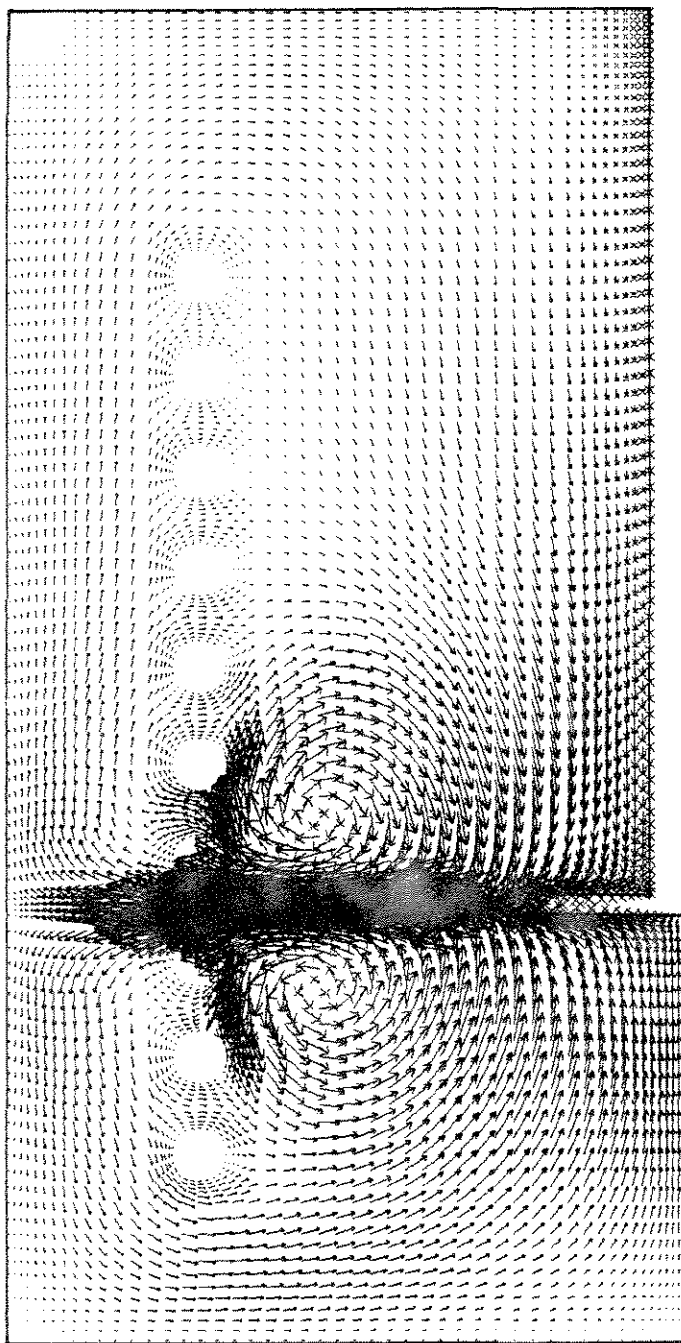


Figura 5.16(c): Vetores de velocidade para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) para a velocidade de rotação de 60 rpm. Fluxo não-isotérmico. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

5.3.2 GEOMETRIA PROPOSTA

Em função do arranjo experimental de serpentinas apresentar limitações mecânicas quanto à circulação do fluxo e à transferência de calor, uma nova geometria é proposta sem a presença de serpentinas na altura da descarga do fluxo radial proveniente do agitador, conforme os trabalhos de Street (1991), Street e McGreavy (1991), Nunhez (1994) e Nunhez e McGreavy (1994, 1995).

A geometria proposta foi descrita na seção 3.5.2. As dimensões dos tanques são iguais às que foram listadas na Tabela 3.1. O número total de serpentinas usadas são: seis (06) acima e duas (02) abaixo do agitador. Isto leva em conta o arraste exercido pelo fundo do tanque.

A Figura 3.5(b) mostra a malha usada para os cálculos para essa geometria que contém 5120 volumes de controle.

A Figura 5.17(a) mostra os vetores de velocidade para essa geometria com o agitador a uma velocidade de rotação de 60 rpm. Nota-se que neste arranjo a circulação interna no tanque não é excessivamente afetada devido a dois fatores: (1) Não existe serpentinas na altura das lâminas do agitador, e (2) A velocidade do agitador é suficientemente alta para vencer a resistência oferecida pelas serpentinas.

As Figuras 5.17(b) e (c) mostram os vetores de velocidade para as velocidades de rotação de 30 e 15 rpm. Em todos os casos o arranjo proposto apresenta uma circulação interna sensivelmente superior. Nota-se que as zonas de recirculação se movem em direção às paredes do tanque com o aumento da velocidade de rotação. As zonas de recirculação ocorrem entre as serpentinas e o eixo do agitador para as velocidades de 15 e 30 rpm, mas para a velocidade de 60 rpm elas se encontram entre as serpentinas e as paredes do tanque. No arranjo experimental de Oldshue e Gretton (1954), as zonas de recirculação estão sempre entre o agitador e o feixe de serpentinas.

A Figura 5.18 mostra a distribuição de temperatura para um fluido Newtoniano e sendo agitado a 60 rpm. As Figuras 5.19(a)-(b) e as Figuras 5.20(a)-(b) mostram a distribuição de viscosidade e de temperatura, respectivamente, para o fluido pseudoplástico ($n=0,5$) e dilatante ($n=1,5$) girando na mesma rotação.

A Tabela 5.6 mostra como a distribuição de temperatura é afetada pelo modo de agitação.

Tabela 5.6: A influência do modo de operação do agitador na distribuição de temperatura em tanques de mistura com o arranjo proposto de serpentinas.

Velocidade de rotação (rpm)	Atribuição não-Newtoniana (n)	Temperatura máxima (°C)	Temperatura média (°C)
15	0,5	60,81	37,01
	1,0	46,35	31,87
	1,5	43,72	30,70
30	0,5	35,85	24,26
	1,0	33,81	24,68
	1,5	34,56	25,74
60	0,5	27,47	21,08
	1,0	27,11	21,37
	1,5	27,87	22,08

A melhor distribuição de temperatura foi obtida para a velocidade de rotação de 60 rpm (ver tabela 5.6), onde é apenas considerada a obtenção de um perfil de temperatura uniforme em função da configuração geométrica do tanque.

A seguir será analisado a influência do diâmetro do feixe de serpentinas sobre os processos de mistura e sobre a transferência de calor no tanque.

5.3.2.1 Diâmetro do Feixe de Serpentinhas

A melhor localização do feixe de serpentinas depende das propriedades do fluido e da geometria do tanque. Isto porque o diâmetro do feixe tem influência direta na circulação e na transferência de calor em tanques de mistura.

Street (1991), Street e McGreavy (1991), Nunhez (1994) e Nunhez e McGreavy (1994, 1995) indicaram que o feixe de serpentinas deve ser posicionado não muito próximo das paredes do tanque porque assim se evita circulação ineficiente do fluido entre as serpentinas e as paredes. Entretanto, as serpentinas devem estar relativamente próximas às zonas de recirculação para assegurar que a troca térmica é efetiva.

Normalmente, as serpentinas devem estar localizadas o mais distante possível do eixo central do agitador porque isto aumenta a área de transferência de calor. Pelo descrito acima nota-se que a posição do feixe deve ser otimizada levando-se em conta os fatores acima mencionados.

As Figuras 5.15 – 5.17 mostraram a distribuição de temperatura para a velocidade de rotação de 60 rpm estudada nesse trabalho e que correspondem ao feixe de serpentinas com $R_S/R_T = 0,71$. Para comparação, as Figuras 5.21(a)-(b) mostram o fluxo e a distribuição de temperatura para um fluido Newtoniano a 60 rpm e com $R_S/R_T = 0,55$.

A Tabela 5.7 mostra a distribuição de temperatura para ambas posições do feixe de serpentinas.

Tabela 5.7: A influência do diâmetro do feixe de serpentinas.

Atribuição não-Newtoniana (n)	R_S/R_T	Temperatura máxima (°C)	Temperatura média (°C)
0,5	0,55	32,21	24,30
	0,71	27,46	21,04
1,0	0,55	30,92	23,98
	0,71	27,26	21,33
1,5	0,55	31,88	24,74
	0,71	27,92	22,01

Verifica-se que a melhor distribuição é obtida com as serpentinas localizadas mais próximas às paredes do tanque, e isto se deve à maior área disponível para troca térmica. Além disso, as serpentinas nessa posição ficam próximas ao centro das zonas de recirculação o que reduz a temperatura no centro.

O diâmetro dos tubos também é de grande importância para a determinação de um arranjo otimizado de serpentinas e é investigado a seguir.

5.3.2.2 Diâmetro dos Tubos

Um diâmetro grande de tubos de serpentinas tem a vantagem de aumentar a área de transferência de calor, mas prejudica a circulação do fluxo. A escolha do diâmetro dos tubos depende do modo de operação, das propriedades físicas do fluido e do tipo de agitador. Os resultados mostrados até o momento foram calculados com um diâmetro de tubo de 0,05 m, o qual corresponde ao utilizado por Oldshue e Gretton (1954).

Dois diâmetros de tubos, $d = 0,04$ m e $d = 0,07$ m, foram investigados para um fluido Newtoniano com o agitador a uma velocidade de rotação de 60 rpm. As Figuras 5.22(a)-(b) e as Figuras 5.23(a)-(b) mostram os vetores de velocidade e a distribuição de temperatura para os tubos da serpentina com $d=0,04$ m e $d=0,07$ m, respectivamente. A Tabela 5.8 compara os valores de temperatura para essas configurações com aquelas mostradas nas Figuras 5.15 – 5.17.

Tabela 5.8: A influência do diâmetro dos tubos das serpentinas.

Atribuição não-Newtoniana (n)	Diâmetro dos tubos (m)	Temperatura máxima (°C)	Temperatura média (°C)	Coef. de Transferência de calor médio (W/m ² °C)
0,5	0,07	25,58	19,52	32,48
	0,05	27,46	21,04	36,87
	0,04	28,32	21,79	41,12
1,0	0,07	25,52	19,85	31,27
	0,05	27,26	21,33	35,81
	0,04	28,01	22,04	40,14
1,5	0,07	25,50	20,27	29,86
	0,05	27,92	22,01	33,54
	0,04	28,75	22,72	37,71

Como esperado, o arranjo com maior diâmetro dos tubos proporcionou uma melhor transferência de calor com as temperaturas máxima e média reduzidas por aproximadamente 2 °C. No entanto, a circulação do fluido é ineficiente devido ao grande diâmetro dos tubos, o que pode ser visto pelo o coeficiente de transferência de calor médio. As temperaturas máxima e média para os diâmetros dos tubos de 0,05m e 0,04m

são praticamente as mesmas, entretanto o arranjo de serpentinas com diâmetro de tubos de 0,04 m proporcionou um melhor coeficiente de transferência de calor no tanque com uma menor área de troca térmica.

Portanto, apesar de serpentinas com grandes diâmetros de tubos proporcionarem melhor transferência de calor a geometria com serpentinas de diâmetros de tubos de 0,04 m é preferível porque a resistência oferecida à circulação do fluido é menor e, portanto, a circulação é melhor. O arranjo se torna eficiente porque uma melhor circulação resulta em uma melhor troca térmica.

5.4 RESULTADOS

5.4.1 ARRANJO EXPERIMENTAL / ARRANJO PROPOSTO DE SERPENTINAS

As Figuras 5.16(a)-(c) e as Figuras 5.17(a)-(c) mostraram os vetores de velocidade para o arranjo experimental e para o arranjo proposto de serpentinas, respectivamente, nas velocidades de rotação de 15, 30 e 60 rpm. Notou-se que o arranjo experimental dificulta a circulação do fluido devido à presença de serpentinas na altura das lâminas do agitador, e isto tem consequência direta na circulação do fluido. No arranjo proposto, devido à não existência de serpentinas nessa região a circulação interna do fluido é muito superior.

A melhor circulação do fluido tem influência na obtenção de uma melhor mistura e uma transferência de calor mais uniforme dentro do tanque. A Tabela 5.9 mostra a diferença entre as temperaturas calculadas para as duas geometrias de serpentinas e destaca a superioridade do arranjo proposto, que pode ser analisado pelo melhor valor do coeficiente global de transferência de calor.

As temperaturas máxima e média para ambas geometrias são muito similares, mas a distribuição de temperatura para a geometria proposta é muito mais uniforme. O ponto mais importante é que a geometria proposta tem uma área de transferência de calor consideravelmente menor, porque além de ter duas serpentinas à menos que o arranjo experimental, o diâmetro dos tubos para a geometria proposta é 0,04m e o usado pelo

arranjo experimental é de 0,05 m. Isto significa que o arranjo proposto necessita de menor gasto com utilidades.

Tabela 5.9: Comparação entre as distribuições de temperatura para os arranjos experimental (Oldshue e Gretton, 1954) e o proposto de serpentinas.

Atribuição não-Newtoniana (n)	Geometria	Temperatura máxima (°C)	Temperatura média (°C)	Coef. de transferência de calor médio (W/m ² °C)
0,5	Experimental (Oldshue e Gretton)	25,52	19,42	36,36
	Este trabalho	28,32	21,79	41,12
1,0	Experimental (Oldshue e Gretton)	27,44	20,73	31,43
	Este trabalho	28,01	22,04	40,14
1,5	Experimental (Oldshue e Gretton)	28,98	22,12	27,48
	Este trabalho	28,75	22,72	37,71

5.4.2 GEOMETRIA JAQUETA / SERPENTINA (ARRANJO EXPERIMENTAL [OLDSHUE E GRETTON, 1954] E PROPOSTO)

O benefício em usar ambos os arranjos de serpentinas internas, experimental e proposto, para o controle de temperatura foi mostrado nas Figuras 5.11 e 5.16 para um fluido Newtoniano. A temperatura variou de 10 – 27,44 °C para o arranjo experimental e de 10 – 28,01 °C para a geometria proposta que podem ser comparadas com a distribuição para o tanque com jaqueta sob a mesma velocidade de rotação em que a temperatura variou de 10 – 32,04 °C (ver Figura 5.2).

A Tabela 5.10 compara as superfícies de transferência de calor para os três tipos de fluidos investigados. Ambos os arranjos de serpentinas apresentaram melhor controle da temperatura. Isto se deve às serpentinas estarem localizadas onde a temperatura será alta, isto é, no centro das zonas de recirculação. No entanto, a geometria otimizada de

serpentina proposta apresentou uma distribuição de temperatura mais uniforme e uma melhor transferência de calor, de acordo com o valor do coeficiente global de transferência de calor no tanque.

A combinação do uso de ambos jaqueta e serpentina pode promover uma distribuição de temperatura muito mais uniforme como pode ser vista na Tabela 5.10. Nessa tabela são comparados os arranjos usando somente serpentina (experimental e proposto) ou jaqueta para transferência de calor contra o arranjo de jaqueta / serpentina para ambas as geometrias experimental e proposta.

As Figuras 5.24(b) e 5.25(b) mostram a distribuição de temperatura para o arranjo experimental e para o arranjo proposto com jaqueta / serpentina, respectivamente. O arranjo proposto de jaqueta/serpentina proporcionou uma distribuição de temperatura mais uniforme segundo a Figura 5.25(b) e a Tabela 5.10. Isto se deve principalmente à ausência de serpentina na altura das lâminas, porque a circulação do fluido não é restringida e assim não existe estagnação do fluido entre as serpentina e as paredes do tanque. No caso do arranjo experimental o efeito é oposto. As Figuras 5.24(a) e 5.25(a) apresentam os vetores velocidade para ambos os arranjos e, por comparação, nota-se a limitação do arranjo experimental com referência à circulação interna do fluido.

Deve-se ressaltar que a decisão de utilizar um arranjo geométrico combinado deve ser feita com cautela, principalmente quando a viscosidade varia com a temperatura e a tensão de cisalhamento (fluidos não-Newtonianos) . Nesse caso, a localização das serpentina é um fator muito importante, pois elas devem estar a uma distância adequada das paredes do tanque para se evitar que a circulação do fluido seja restringida pelo aumento da viscosidade próxima às paredes de resfriamento.

Tabela 5.10: Comparação entre as configurações de jaqueta, de serpentinas e da combinação de jaqueta/serpentina.

Atribuição não-Newtoniana (n)	Geometria	Temperatura máxima (°C)	Temperatura média (°C)	Coef. de transferência de calor médio (W/m ² °C)
0,5	Jaqueta	26,97	23,41	22,86
	Serpentina experimental (Oldshue e Gretton)	25,52	19,42	36,36
	Serpentina proposta	28,32	21,79	41,12
	Serpentina e jaqueta experimental (Oldshue e Gretton)	17,96	16,42	27,99
	Serpentina e jaqueta proposta	18,65	17,04	30,35
1,0	Jaqueta	32,04	26,27	18,58
	Serpentina experimental (Oldshue e Gretton)	27,44	20,73	31,43
	Serpentina proposta	28,01	22,04	40,14
	Serpentina e jaqueta experimental (Oldshue e Gretton)	19,67	17,56	23,42
	Serpentina e jaqueta proposta	18,80	17,20	29,47
1,5	Jaqueta	34,02	28,26	16,44
	Serpentina experimental (Oldshue e Gretton)	28,98	22,12	27,48
	Serpentina proposta	28,75	22,72	37,71
	Serpentina e jaqueta experimental (Oldshue e Gretton)	21,19	18,57	20,46
	Serpentina e jaqueta proposta	19,59	17,80	27,11

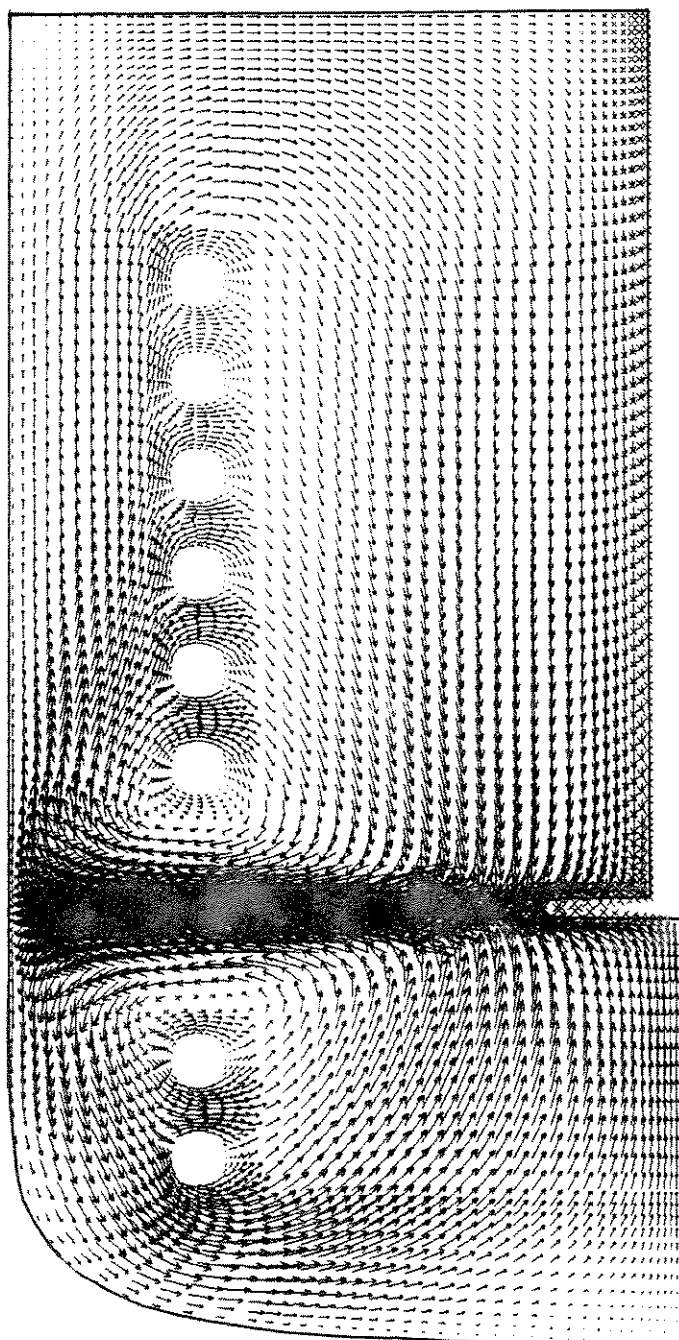


Figura 5.17(a): Vetores de velocidade para o arranjo proposto de serpentinas.
Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluxo não-isotérmico.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

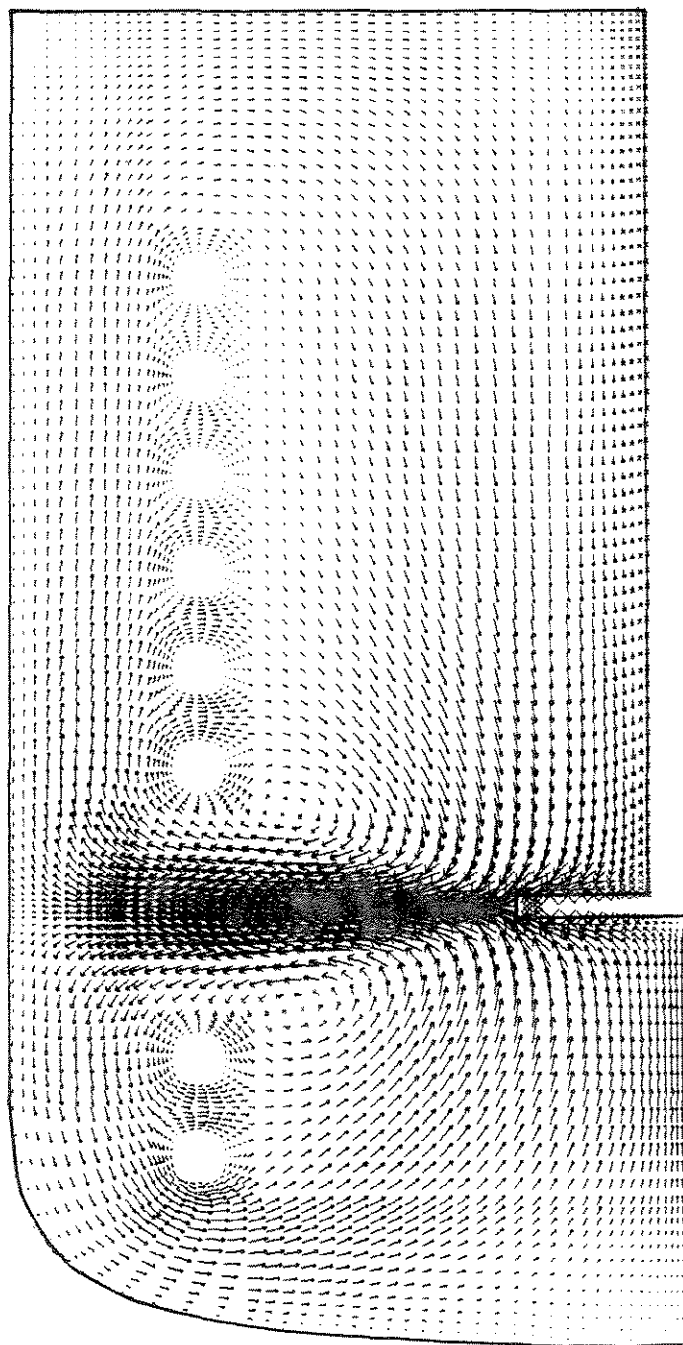


Figura 5.17(b): Vetores de velocidade para o arranjo proposto de serpentinas.
Velocidade de rotação de 30 rpm. Fluxo não-isotérmico.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

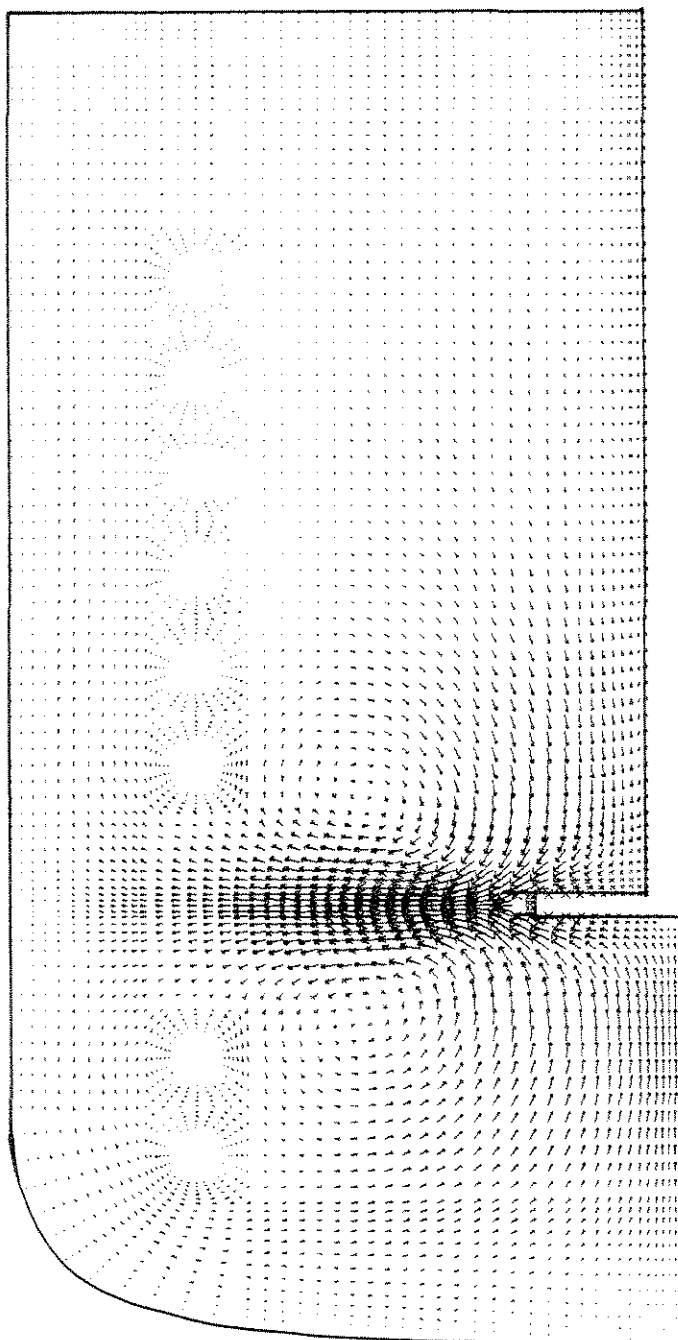


Figura 5.17(c): Vetores de velocidade para o arranjo proposto de serpentinas.
Velocidade de rotação de 15 rpm. Fluxo não-isotérmico.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

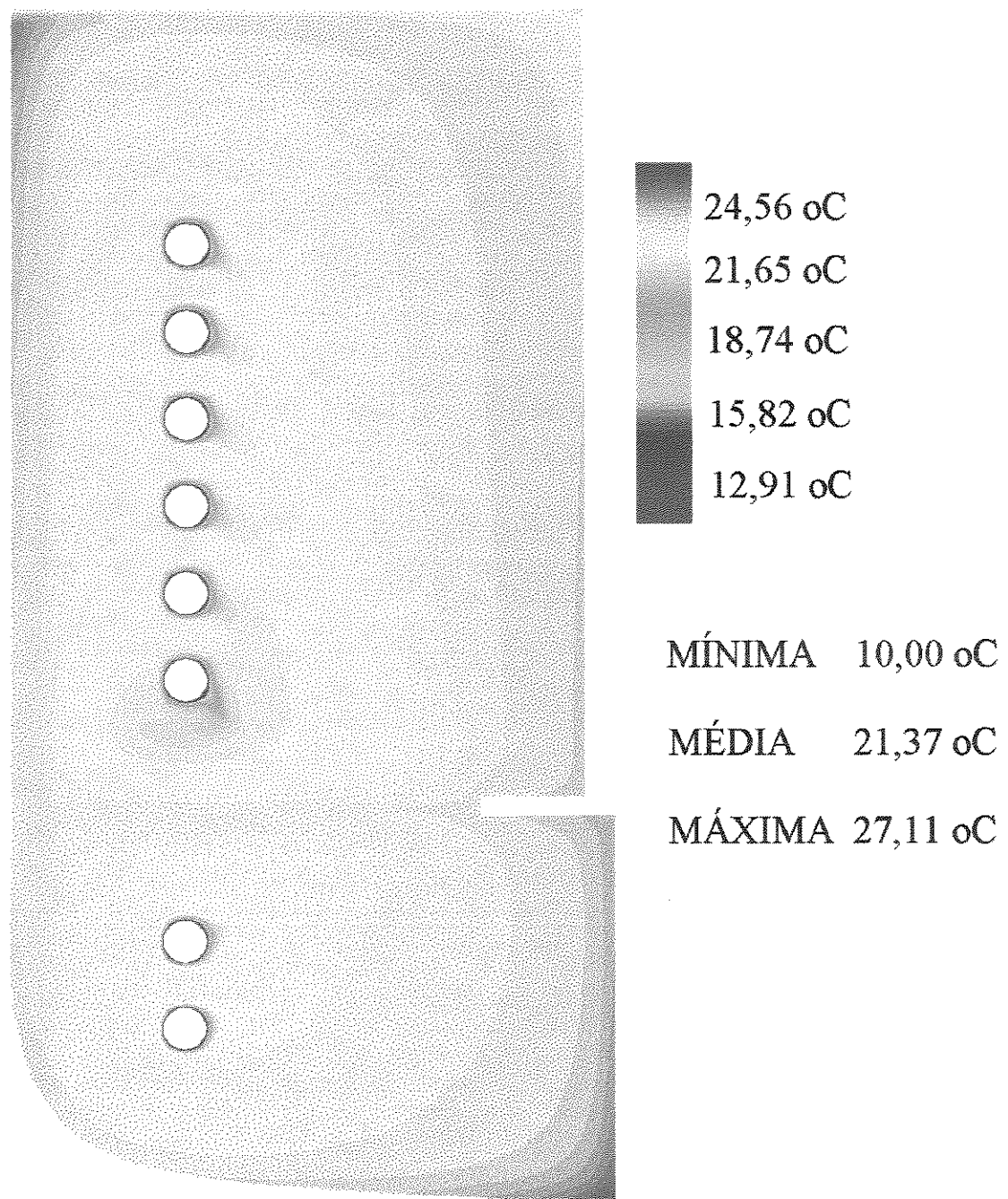


Figura 5.18: Distribuição de temperatura para o arranjo proposto de serpentinas
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

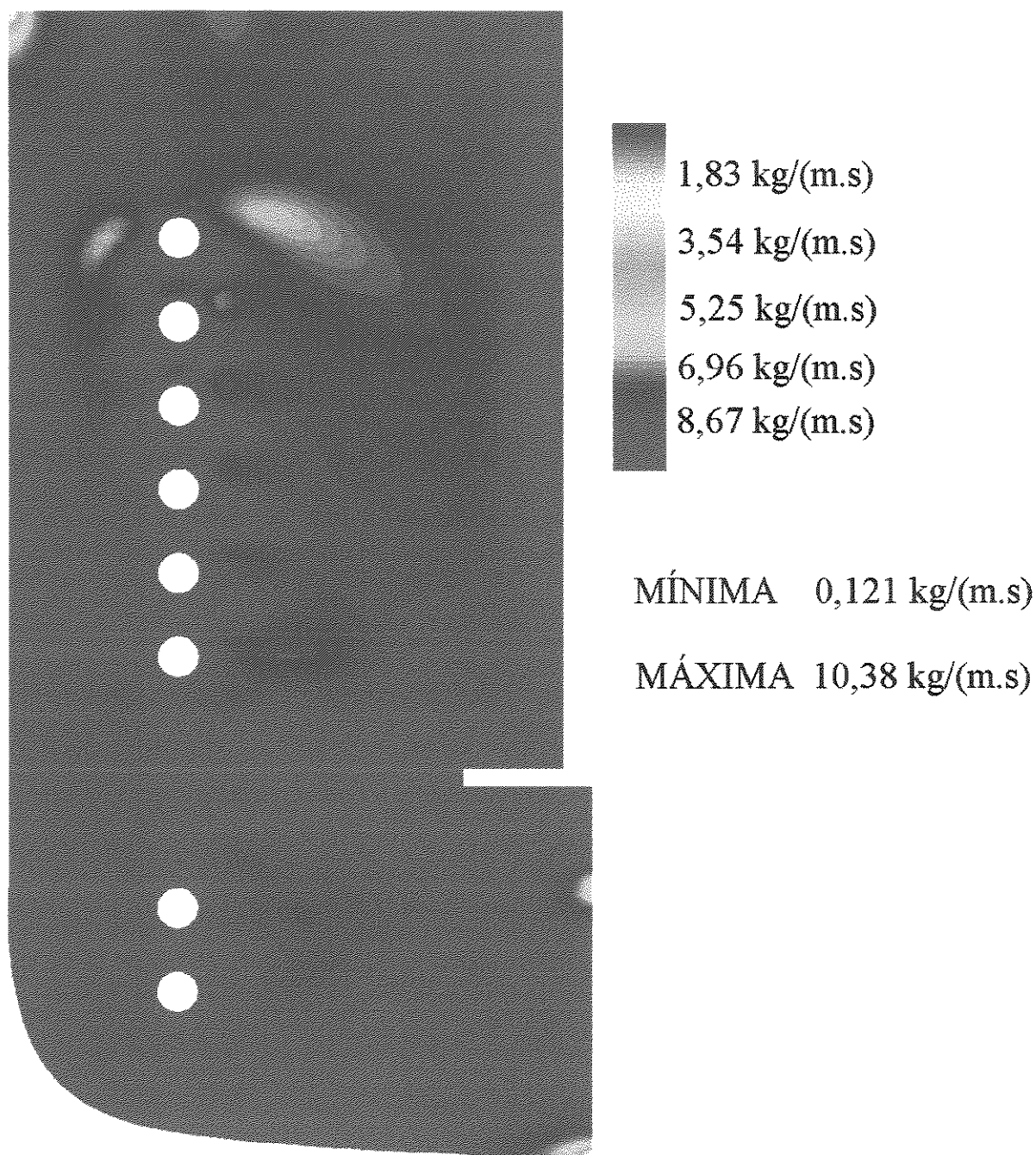


Figura 5.19(a): Distribuição de viscosidade para o arranjo proposto de serpentina
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido pseudoplástico ($n=0,5$).

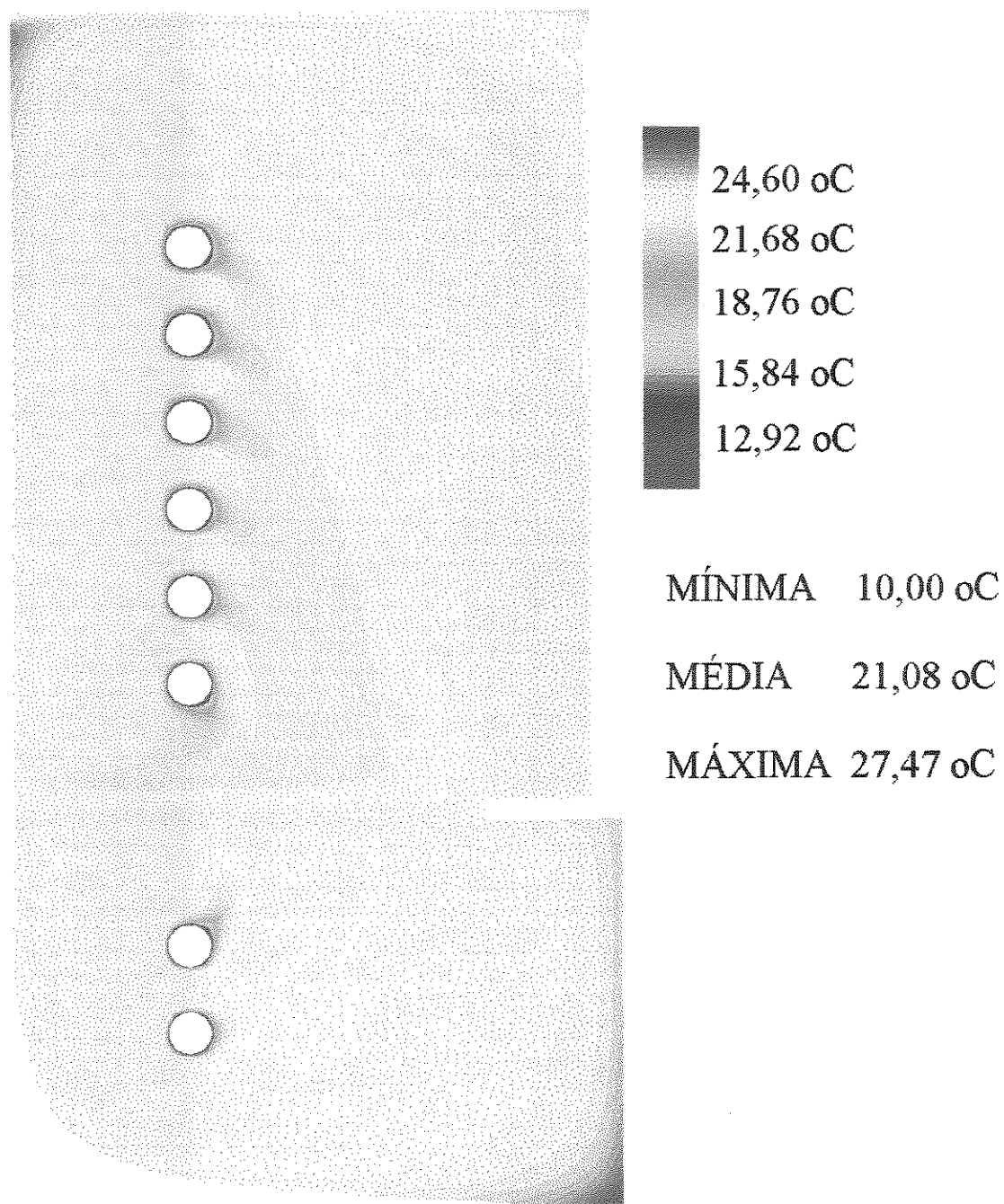


Figura 5.19(b): Distribuição de temperatura para o arranjo proposto de serpentinas.
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido pseudoplástico ($n=0,5$).

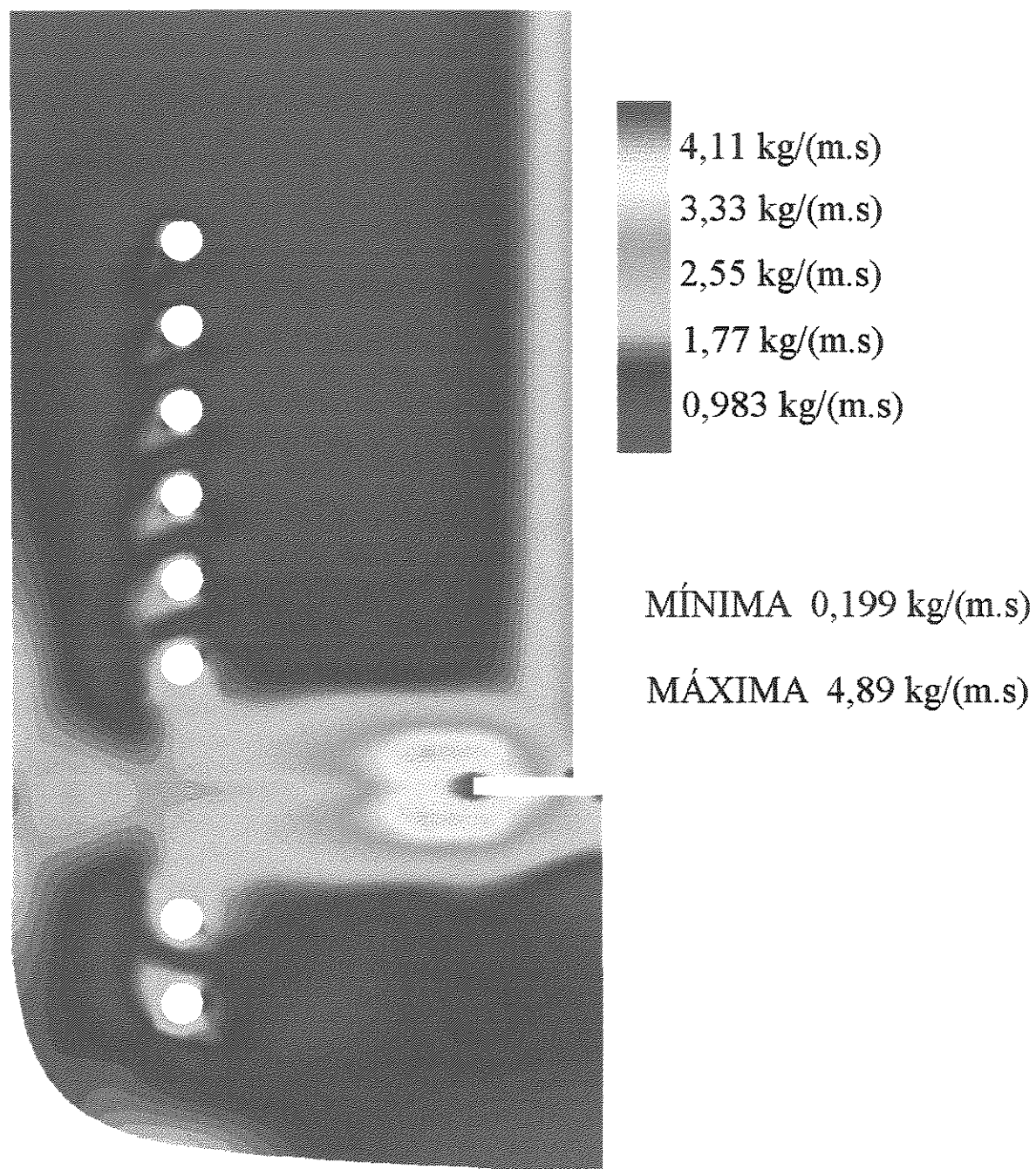


Figura 5.20(a): Distribuição de viscosidade para o arranjo proposto de serpentinas
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido dilatante ($n=1,5$).

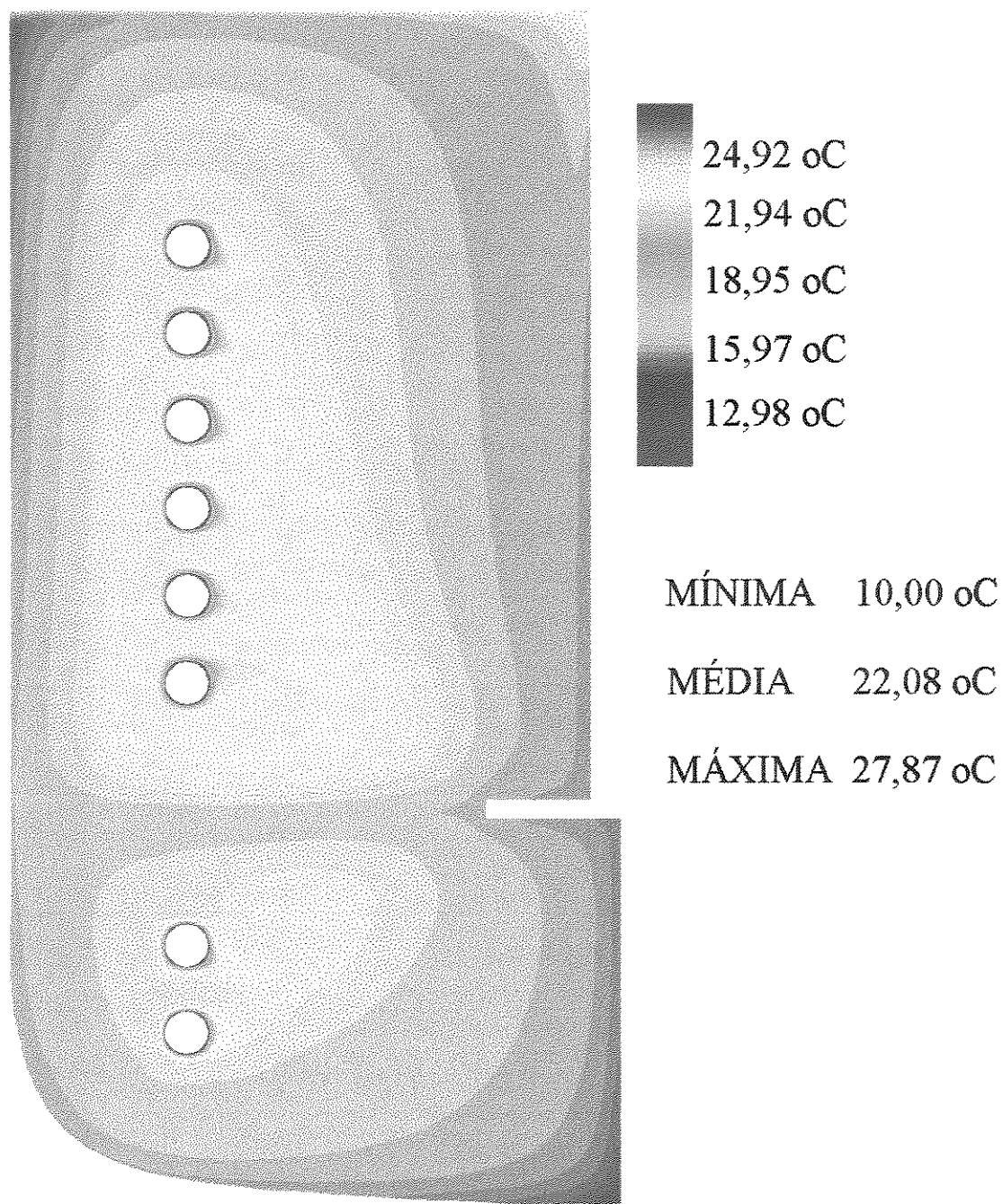


Figura 5.20(b): Distribuição de temperatura para o arranjo proposto de serpentinas
Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido dilatante ($n=1,5$).

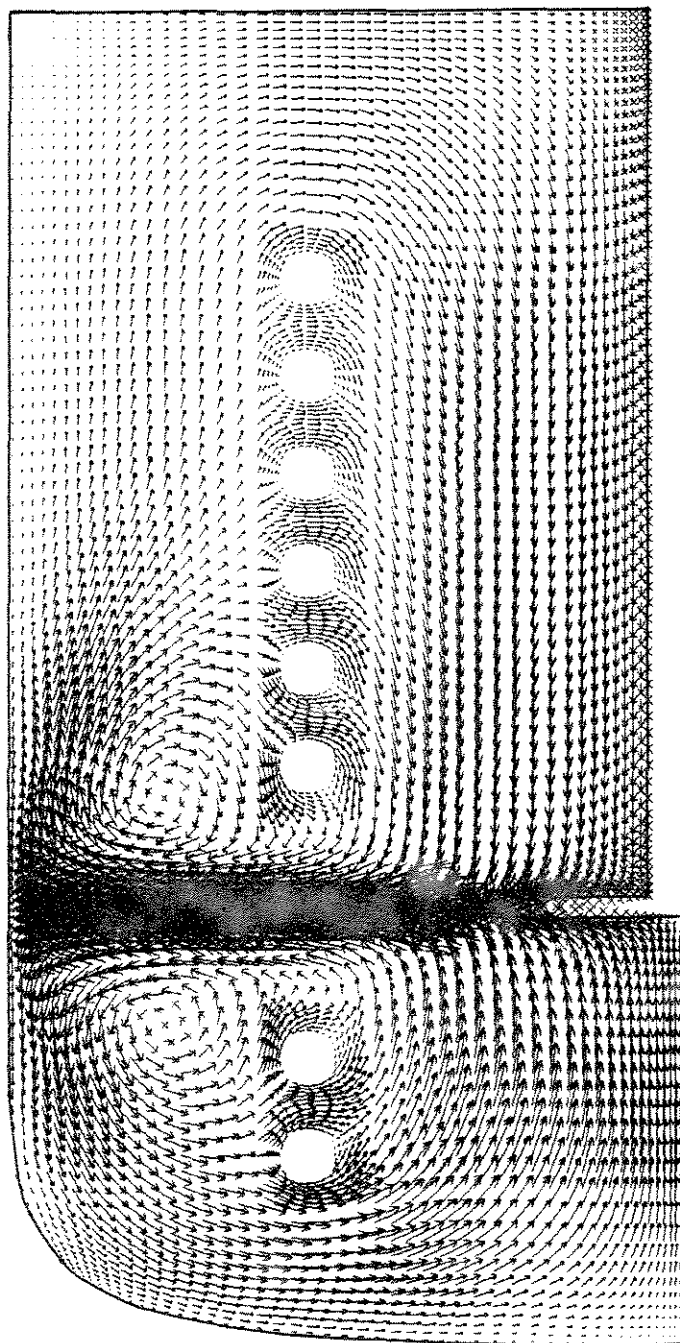


Figura 5.21(a): Vetores de velocidade para a geometria proposta de serpentinas localizadas no centro. Velocidade de rotação de 60 rpm.
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

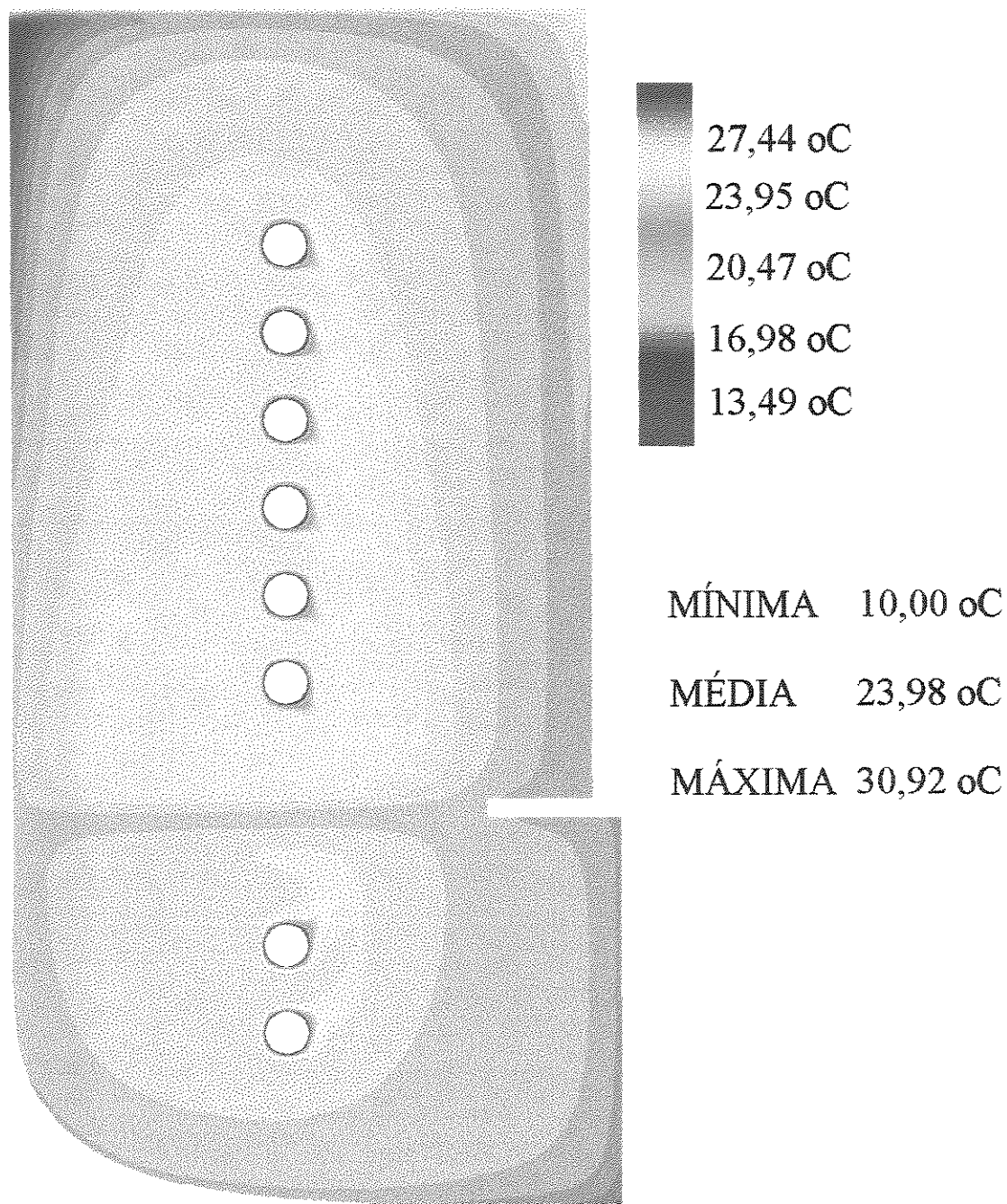


Figura 5.21(b): Distribuição de temperatura para a geometria proposta com as serpentinas localizadas no centro. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

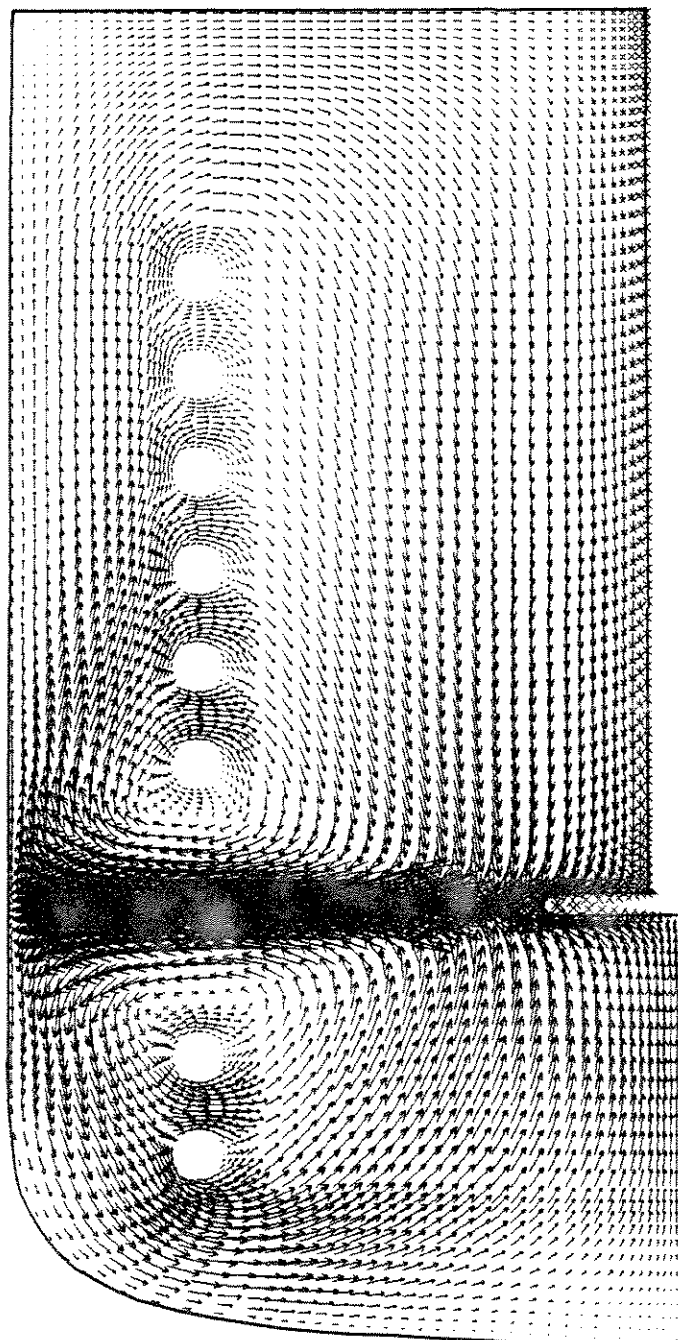


Figura 5.22(a): Vetores de velocidade para a geometria proposta usando um diâmetro de 0,04 m para os tubos da serpentina. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

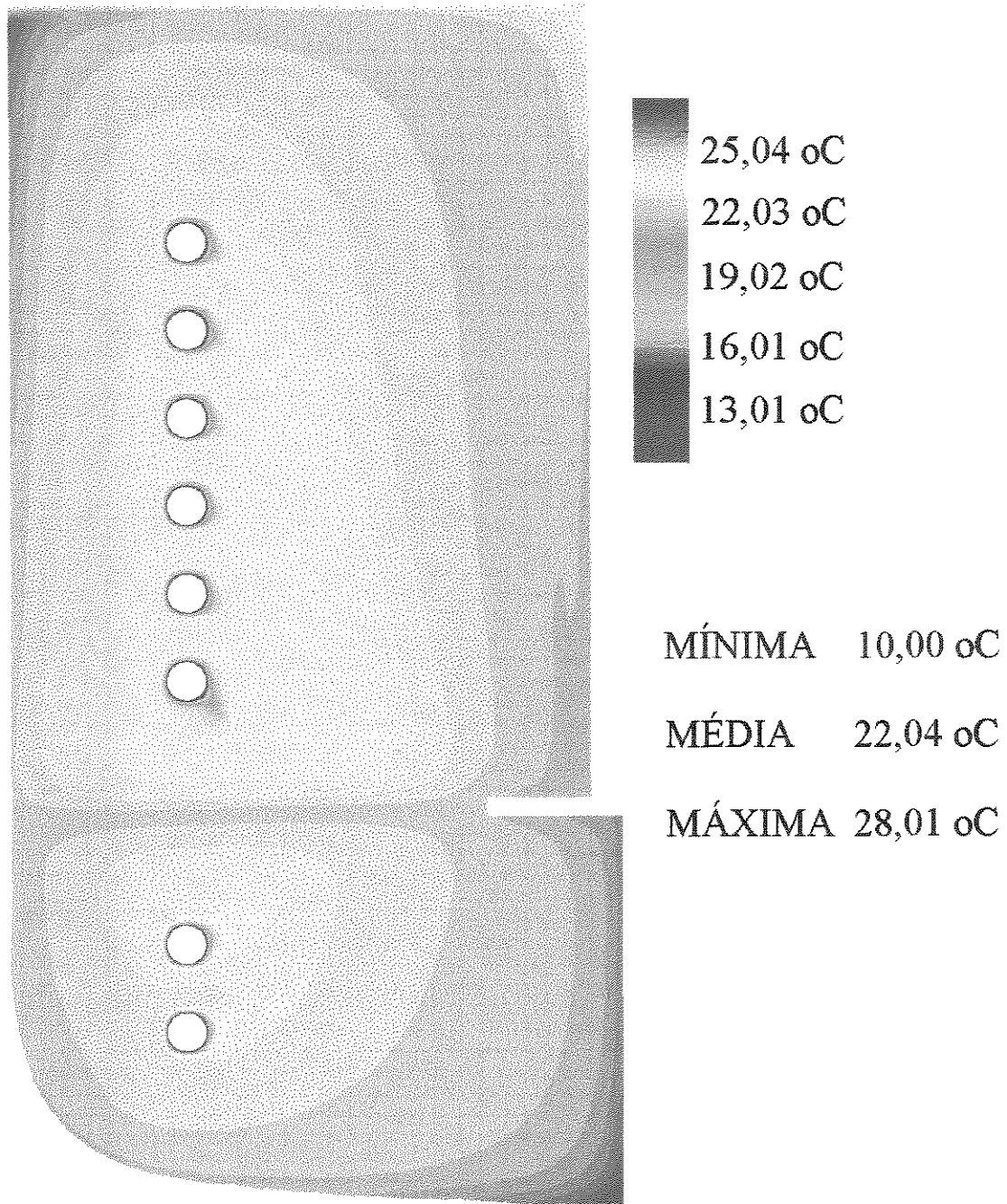


Figura 5.22(b): Distribuição de temperatura para a geometria proposta usando um diâmetro de 0,04 m para os tubos da serpentina. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

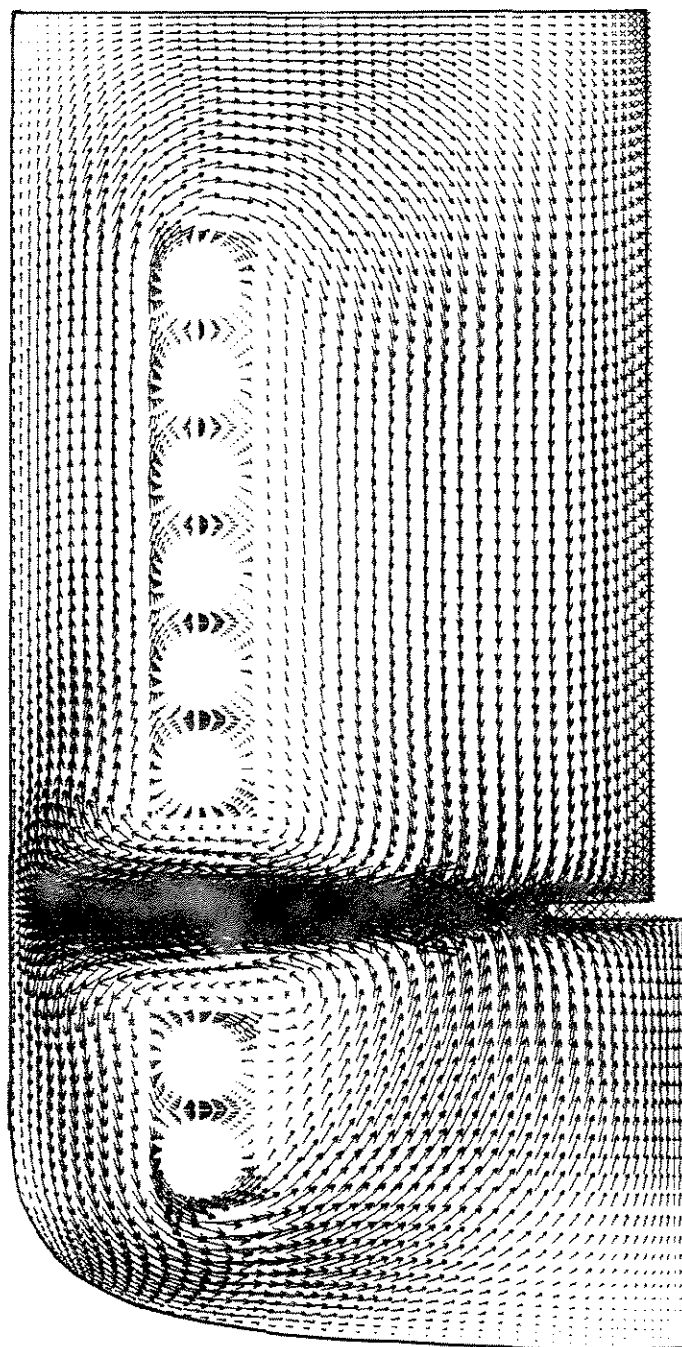


Figura 5.23(a): Vetores de velocidade para a geometria proposta usando um diâmetro de 0,07m para os tubos da serpentina. Velocidade de rotação de 60 rpm
Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

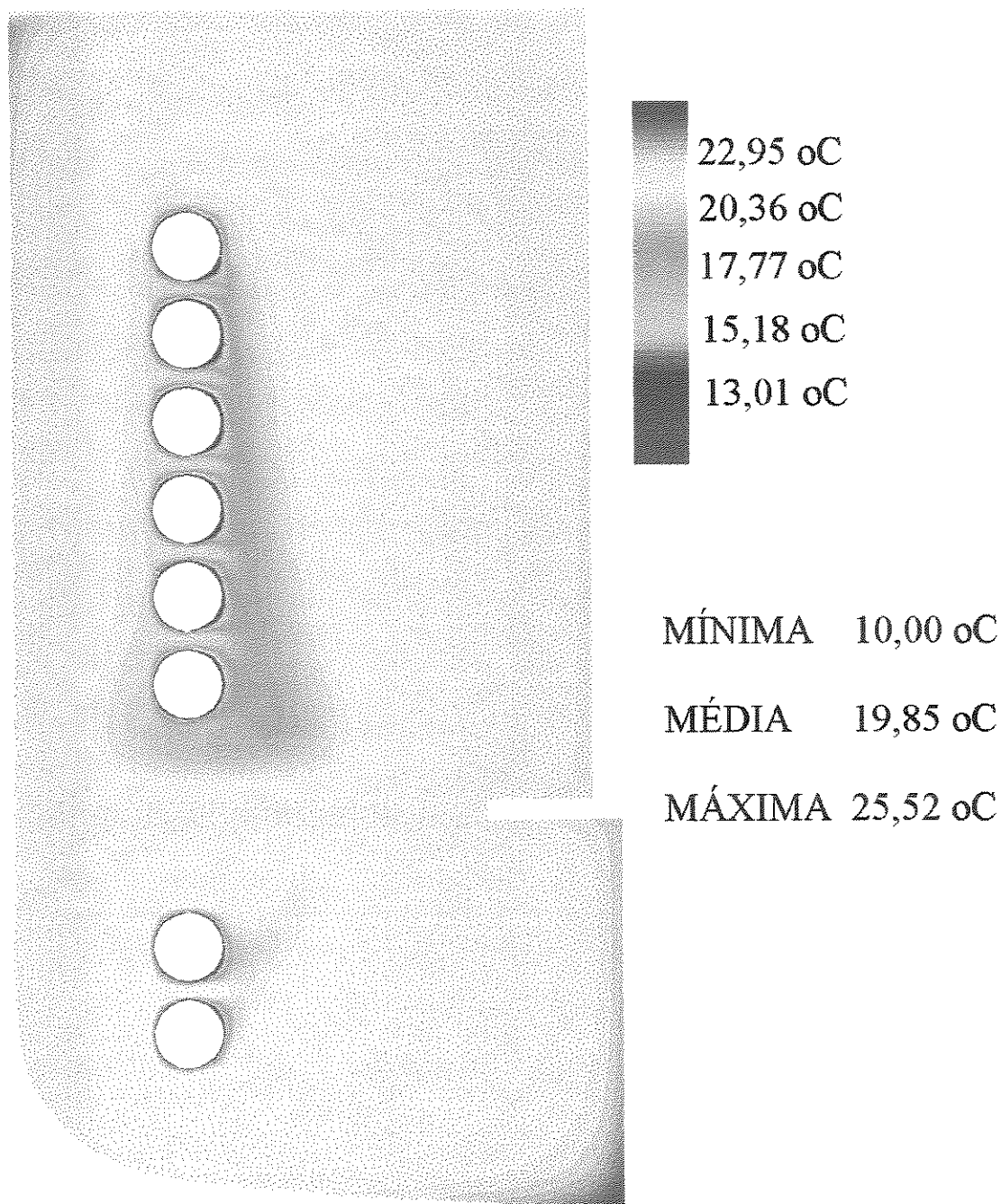


Figura 5.23(b): Distribuição de temperatura para a geometria proposta usando um diâmetro de 0,07 m para os tubos da serpentina. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

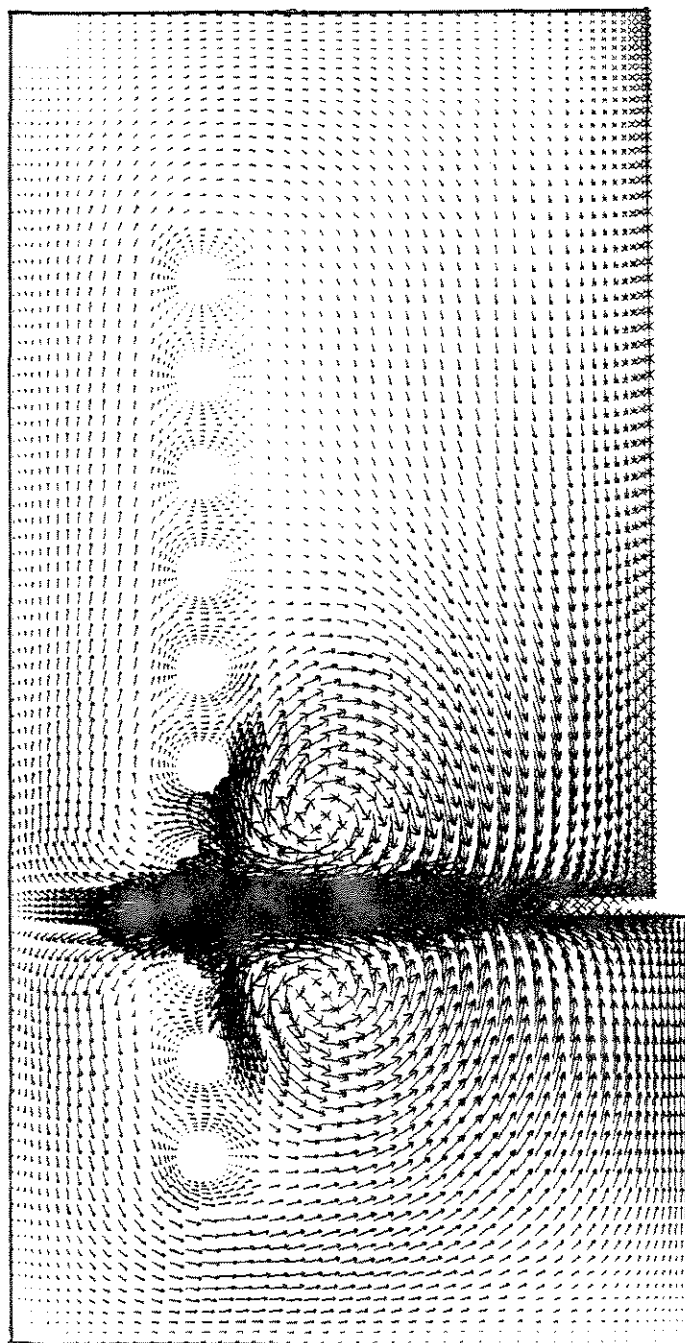


Figura 5.24(a): Vetores de velocidade para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) combinado com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

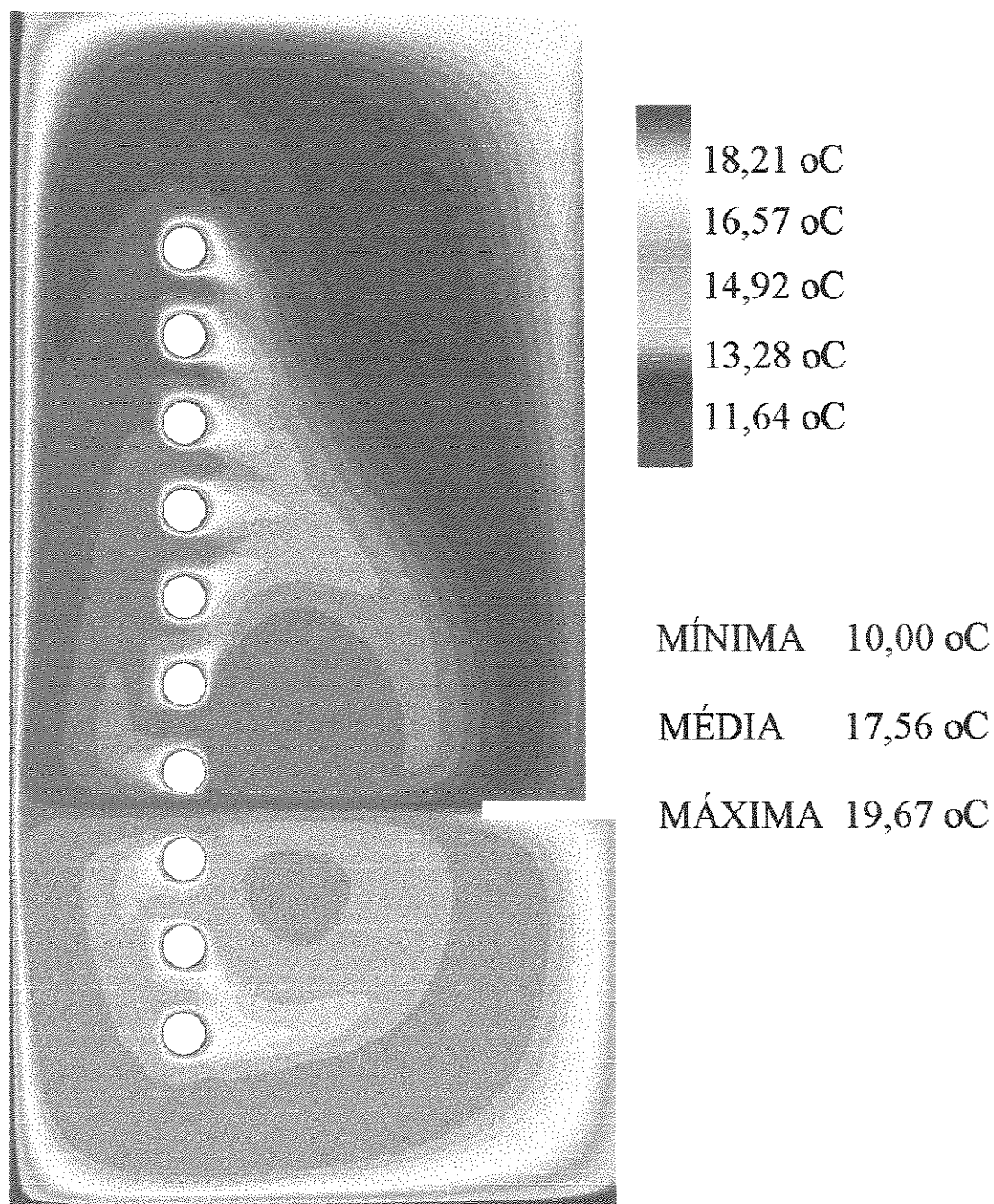


Figura 5.24(b): Distribuição de temperatura para o arranjo experimental de serpentinas (Oldshue e Gretton, 1954) combinado com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

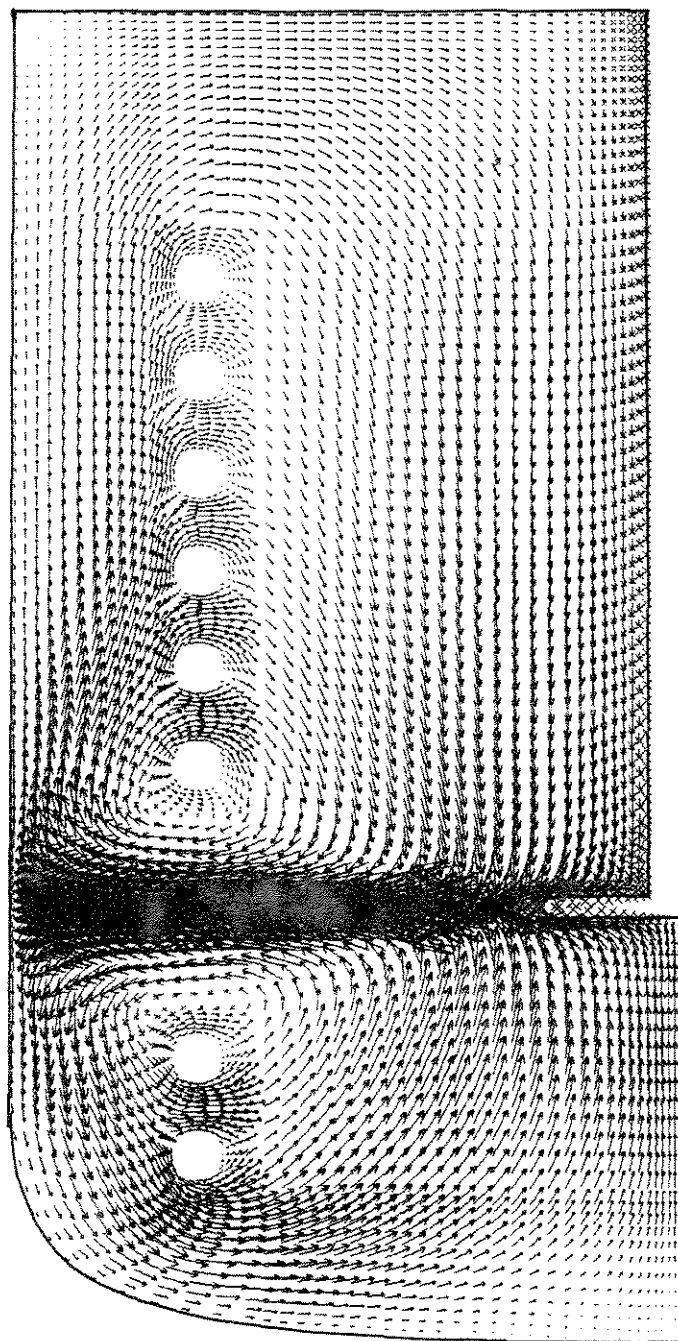


Figura 5.25(a): Vetores de velocidade para o arranjo proposto de serpentinas com diâmetro dos tubos de 0,04m combinado com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

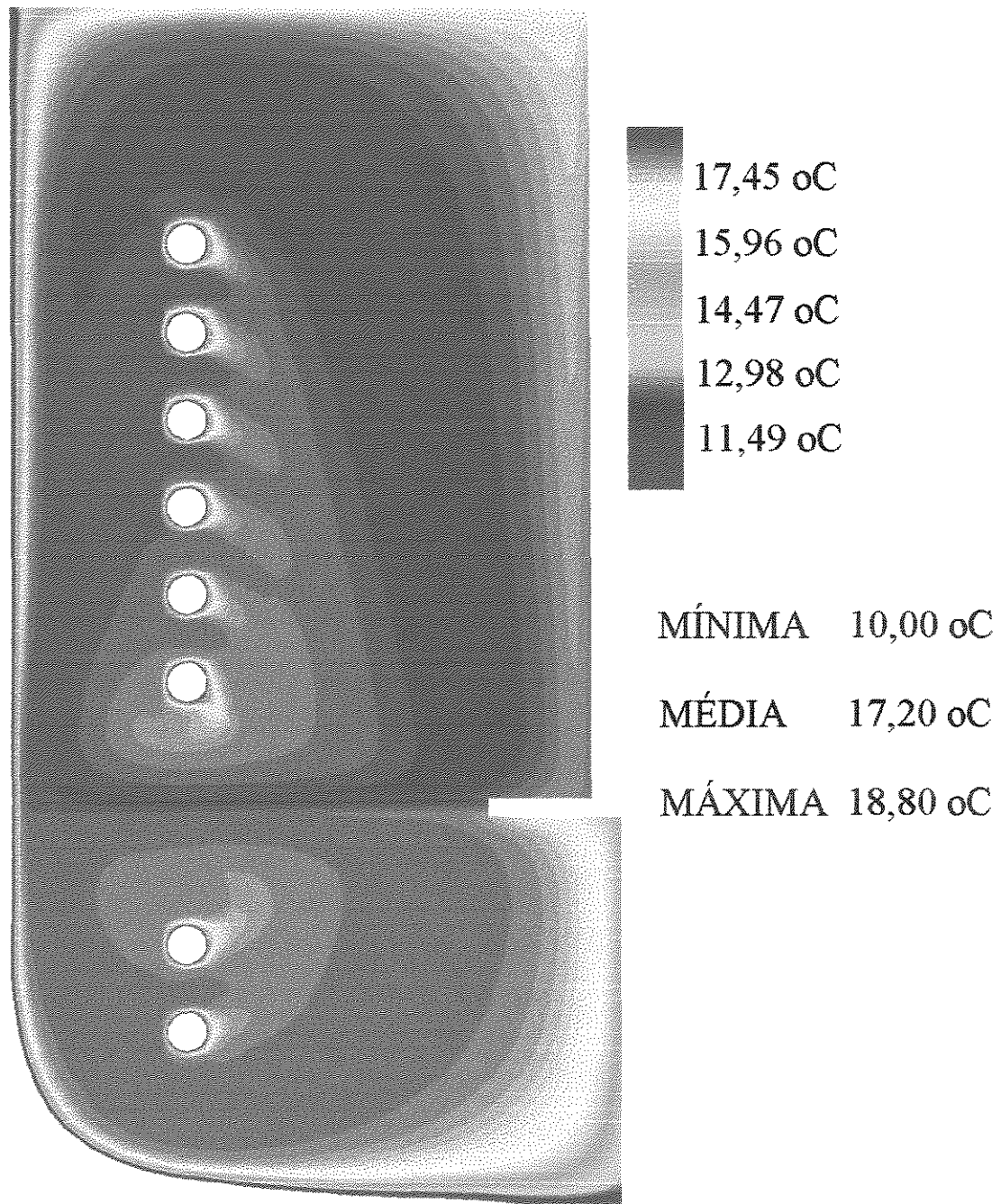


Figura 5.25(b): Distribuição de temperatura para o arranjo proposto de serpentinas com diâmetro dos tubos de 0,04 m combinado com jaqueta. Velocidade de rotação de 60 rpm. Fluido Newtoniano ($n=1,0$).

5.5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este capítulo avaliou a eficiência do uso de jaqueta e de serpentinas como superfície de transferência de calor para o controle de temperatura em tanques de mistura.

A jaqueta mostrou ser menos eficiente no controle de temperatura devido a apresentar altas temperaturas no centro das zonas de recirculação, embora a circulação do fluido não seja muito afetada.

Os arranjos de serpentinas, experimental e proposto, foram eficientes com relação à transferência de calor devido às serpentinas se localizarem próximas às zonas de recirculação. No entanto, o arranjo experimental de serpentinas apresentou limitações quanto à circulação do fluido em função de sua configuração geométrica afetar o desempenho do tanque. Isto foi constatado através de análises do perfil de fluxo e da transferência de calor para ambas as geometrias.

Todos os resultados mostraram que o tanque de mistura com serpentinas ou combinação de jaqueta/serpentina têm melhor circulação do fluido se nenhuma serpentina estiver posicionada na altura das lâminas do agitador e, como uma consequência, a transferência de calor dentro do tanque é melhorada.

O arranjo proposto com apenas oito (08) serpentinas e diâmetro dos tubos de 0,04m e também com o fundo do tanque arredondado é uma geometria otimizada em relação ao arranjo experimental de Oldshue e Gretton (1954) para as mesmas condições de trabalho. Este arranjo otimizado de serpentinas possibilitou mostrar que a configuração geométrica do arranjo experimental de serpentinas pode ser melhorada para se obter um melhor desempenho do tanque de mistura.

CAPÍTULO 6:

CONCLUSÕES E SUGESTÕES FINAIS

6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES FINAIS

6.1 CONCLUSÕES

Tanques de mistura com jaquetas de resfriamento são bastante empregados nas indústrias químicas para remoção do calor gerado por reações exotérmicas. As jaquetas, como superfície de troca térmica para reações em regime laminar, não permitem um controle de temperatura uniforme devido à existência de uma grande diferença de temperatura entre as paredes do tanque e o centro das zonas de recirculação do fluxo secundário, que é típica de tanques de mistura. No entanto, as jaquetas tem a vantagem de não interferir diretamente na circulação do fluxo, com exceção das paredes e fundo do tanque, onde a viscosidade e a circulação são alteradas devido à diferença de temperatura.

Com o estudo sobre jaquetas investigou-se como a posição do agitador, o modo de operação e a forma geométrica do fundo do tanque interferem no seu desempenho. Ênfase foi dada para mostrar a necessidade destes fatores serem levados em consideração nos projetos de tanques de mistura, o que não pode ser previsto pelas correlações empíricas apresentadas na literatura. Observou-se que a posição do agitador a $1/3$ ou a $1/2$ da altura de líquido têm pequena influência nas distribuições de temperatura, resultando em valores semelhantes. A altura do agitador a $1/3$ do fundo do tanque é satisfatória porque representa praticamente a mesma circulação volumétrica acima e abaixo do agitador. Quanto à forma do fundo do tanque, o simples arredondamento proporcionou melhor fluxo interno ao tanque, pois se evitou a formação de zonas mortas, comuns em tanques de fundo reto, que causam estagnação do fluido nessa região. A escolha do modo de agitação depende do estudo em questão, já que esta decisão deve ser feita em função das propriedades e da qualidade final do produto que se deseja obter.

A forma de se obter uma distribuição de temperatura mais uniforme e de se evitar temperaturas elevadas nos centros das zonas de recirculação de tanques de mistura é

utilizar superfícies de transferência de calor internas. Isto é usualmente conseguido com serpentinas helicoidais.

Oldshue e Gretton (1954) apresentaram um arranjo experimental de serpentinas helicoidais internas a estes tanques que fornece um melhor controle da temperatura. Isto ocorre porque as serpentinas se localizam próximas às zonas de recirculação. Contudo, verificou-se que a circulação do fluxo foi reduzida em função das serpentinas estarem posicionadas na altura das lâminas do agitador. Um estudo sobre o modo de operação do agitador para este arranjo de serpentinas mostrou que a circulação do fluxo é reduzida independentemente da velocidade de rotação imposta ao agitador, visto que as serpentinas tornam-se uma resistência ao fluxo, causando estagnação do fluido na região entre as serpentinas e as paredes do tanque, o que prejudica a mistura e, conseqüentemente, a obtenção de uma transferência de calor mais uniforme.

Modificações quanto à forma do tanque e ao arranjo experimental de serpentinas possibilitaram a obtenção de geometrias que fornecem melhor eficiência na mistura e no controle da temperatura. A principal modificação imposta à geometria do tanque foi a retirada das serpentinas localizadas na altura das lâminas do agitador, visto que isso proporciona uma melhor circulação interna do fluido e uma distribuição de temperatura mais uniforme.

Outros fatores como modo de operação, a otimização do raio do feixe de serpentinas e diâmetro dos tubos das serpentinas, bem como o arredondamento do fundo do tanque, foram analisados para a obtenção de um arranjo otimizado de serpentinas que proporciona um desempenho mais eficiente do tanque. Com relação ao modo de operação, onde se variou a velocidade de rotação do agitador, verificou-se que no arranjo proposto o fluxo radial gerado pelo agitador do tipo Rushton não é reduzido quando comparado ao arranjo experimental. Além disso, zonas de recirculação na velocidade de 60 rpm chegam a se formar entre as paredes do tanque e as serpentinas, o que não ocorre com o arranjo de Oldshue e Gretton (1954). Deste modo a circulação do fluido não é tão restringida. Já o estudo sobre o raio do feixe de serpentinas mostrou que elas devem estar posicionadas razoavelmente próximas às zonas de recirculação para melhor controle da temperatura, e ao mesmo tempo a uma distância correta das paredes do tanque para se evitar estagnação do fluido entre a parede e o feixe de serpentinas. Por fim, a investigação sobre o diâmetro dos tubos das serpentinas foi realizada e constatou-se que é possível um arranjo de serpentinas otimizado com diâmetros de tubos menores,

proporcionando uma melhor circulação do fluido e uma transferência de calor mais uniforme. Esses fatores foram evidenciados por um maior coeficiente de transferência de calor médio no tanque e, conseqüentemente, uma melhor mistura e um melhor controle da temperatura condizentes com um menor gasto de energia, devido a utilização de uma área de troca térmica menor.

Arranjos combinados de jaquetas e serpentinas foram também analisados para ambos arranjos geométricos experimental e otimizado de serpentinas. Neste caso, a geometria otimizada apresentou uma distribuição mais uniforme da temperatura, além da circulação entre o feixe de serpentinas e as paredes do tanque não ser significativamente reduzida. Contudo, a utilização desse arranjo otimizado de serpentinas combinada com jaquetas dependerá do processo no qual o projeto do tanque de mistura será empregado.

O pacote computacional CFX-F3D utilizando o método dos volumes finitos com malha co-localizada, algoritmo de acoplamento pressão-velocidade do tipo SIMPLEC, e sistema de interpolação upwind differencing com relaxação das variáveis para a solução das equações que governam o modelo, mostrou que os perfis de fluxo gerados são coerentes com os fenômenos físicos encontrados em tanques de mistura.

A maior contribuição deste trabalho foi indicar, através da fluido-dinâmica computacional, que existe uma deficiência na geometria dos reatores que utilizam arranjos baseados na proposta de Oldshue e Gretton (1954) e que é possível utilizar um arranjo muito mais eficiente, conforme a geometria proposta. Vale ressaltar que embora este trabalho tenha sido realizado em condições de regime laminar, as considerações quanto ao projeto mecânico são válidas para o regime turbulento, visto que a mesma restrição é presente tanto no regime laminar como no turbulento, e o arranjo proposto é mais eficiente tanto no regime laminar como no turbulento.

6.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

O modelo bidimensional utilizado proporciona uma boa representação dos perfis de fluxo e de temperatura para o agitador do tipo turbina Rushton. Entretanto, maiores detalhes serão captados apenas por um modelo tridimensional para condições laminares e turbulentas, possibilitando a obtenção de informações importantes sobre o fluxo interno

e transferência de calor. Este tipo de modelo se faz necessário para examinar o fluxo e variações de temperatura na direção angular, variável que não foi considerada na aproximação bidimensional descrita neste trabalho, devido à simetria em θ .

Tendo em vista que a viscosidade é uma variável importante para a reologia do fluido e que nessa investigação ela foi calculada apenas em função da taxa de cisalhamento, sugere-se que um modelo não-Newtoniano generalizado seja empregado para obter os dados de viscosidade também em função da temperatura. Com isso, a viscosidade seria mais convenientemente descrita para o caso particular do fluido ser um polímero não-Newtoniano, bem como para o estudo de fluido Newtoniano quando sua viscosidade varia com a temperatura $[\mu_0(T)]$ onde o perfil de viscosidade deve ser bem representado para se obter um produto final de boa qualidade.

Muito embora todos os estudos computacionais realizados assumam uma taxa de geração de calor uniforme, o qual é independente da temperatura local, uma forma mais apropriada do termo de geração de calor deve ser incluída considerando-se uma taxa de reação que seja dependente da temperatura. Um estudo de uma reação química, com a presença no tanque de reagentes que vão se transformando em produtos, também consiste em um trabalho futuro que pode ser investigado.

Simular um arranjo igual ao de Oldshue e Gretton(1954) sem 02(duas) serpentinas de cima para comparar com o arranjo proposto neste trabalho, pois essa novo arranjo apresenta mesma área porém com barreira à circulação. Além disso, pode-se mudar o espaçamento entre as serpentinas mantendo a mesma área porém melhorando a circulação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABID, M.; XUERE, C.; BERTRAND, J. **Hydrodynamics in vessels stirred with anchors and gate agitators: Necessity of a 3-d modelling.** Trans. IChemE, v. 70 (Part A), p. 377-384, July 1992.
- ABID, M.; XUERE, C.; BERTRAND, J. **Modelling of the 3d hydrodynamics of 2-blade impeller in stirred tanks filled with a highly viscous fluid.** The Canadian Journal of Chemical Engineering, v. 72, p. 184-193, 1994.
- BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. **Transport Phenomena.** New York, John Wiley & Sons, Inc., 1960.
- BERTRAND, J.; COURDEC, J. P.; ANGELINO, H. **Power consumption, pumping capacity and turbulence intensity in baffled stirred tanks: comparison between several turbines.** Chem. Eng. Sci., v. 35, p. 2157, 1980.
- CFX-F3D, Version 4.1: User Manual, 1995.
- CIOFALO, M.; BRUCATO, A.; GRISAFI, F.; TORRACA, N. **Turbulent flow in closed and free-surface unbaffled tanks stirred by radial impellers.** Chemical Engineering Science, v. 51, n. 14, p. 3557-3573, 1996.
- DeSOUZA, A.; PIKE, R. W. **Fluid dynamics and flow patterns in stirred tanks with a turbine impeller.** Can. J. Chem. Eng., v. 50, p. 15-23, 1972.
- DYSTER, K. N.; KOUSTSAKOS, J.; JAWORSKI, J.; NIENOW, W. **An Ida study of the radial discharge velocities generated by a rushton turbine: Newtonian fluids,** Trans. IChemE, v. 71 (Part A), p. 11-23, January 1993.
- EDWARDS, M. F.; WILKINSON, W. L. **Heat transfer in agitated vessels – Part I.** The Chemical Engineer, p. 310-319, August 1972.

- FOUMENY, E. A.; HOLIDAY, S. O.; SANDHU, K. S. **Prediction of flow patterns in polymerisation systems using cfd**. Proc. 8th International Conference on Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow, p. 517-528, 1993.
- Fluid Dynamics International, Inc. *FIDAP 7.0 Theory Manual*, 1993.
- FOKEMA, M. D.; KRESTA, S. M.; WOOD, P. E. **Importance of using the correct impeller boundary conditions for cfd simulations of stirred tanks**. Can. J. Chem. Eng., v. 72, p. 177-183, April 1994.
- GREENE, H. L.; CARPENTER, C.; CASTO, L. **Mixing characteristics of an axial impeller with Newtonian and non-Newtonian fluids**. Proc. Euro. Conf. on Mixing, p. D1, 1982.
- HIRAOKA, S.; YAMADA, I.; MIZOGUCHI, K. **Numerical analysis of flow behaviour of highly viscous fluid in agitated vessel**. Journal of Chemical Engineering of Japan, v. 11, n. 6, p. 487-493, 1978.
- HIRAOKA, S.; YAMADA, I.; MIZOGUCHI, K. **Two dimensional model analysis of flow behaviour of highly viscous non-Newtonian fluid in agitated vessel with paddle impeller**. Journal of Chemical Engineering of Japan, v. 12, n. 1, p. 56-62, 1979.
- HARVEY, P. S.; GREAVES, M. **Turbulent flow in an agitated vessel Part I-predictive model**. Trans. IChemE, v. 60, p. 195-200, 1982.
- HIRAOKA, S.; YAMADA, I.; ARAGAKI, T.; NISHIKI, H.; SATO, A.; TAKAGI, T. **Numerical analysis of three dimensional velocity profile of highly viscous Newtonian fluid in an agitated vessel with paddle impeller**. Journal of Chemical Engineering of Japan, v. 21, n. 1, p. 79-86, 1988.

- HOCKEY, R. M.; NOURI, J. M.; PINHO, F. **Flow visualization of Newtonian and non-Newtonian fluids in stirred reactor.** Int. Symp. of Flow Visualization, Prague, 1989.
- HAMILL, I. S.; HAWKINS, I. R.; JONES, I. P.; LO, S. M.; SPLAWSKI, B. A., FONTENOT, K. **The application of CFDS-FLOW3D to single and multi-phase flows in mixing vessels.** AIChE SYMPOSIUM SERIES, v. 91, n. 305, p. 150-160, 1995.
- HARRIS, C. K.; ROEKAERTS, D.; ROSENDAL, F. J. J.; BUITENDIJK, F. G. J.; DASKOPOULOS, Ph., VREENEGoor, A. J. N.; WANG, H. **Computational fluid dynamics for chemical reactor engineering.** Pre-print of the paper to be presented at ISCRE-14, Bruggs, May 1996.
- IBRAHIM, S.; NIENOW, A. W. **Power curves and flow patterns for a range of impellers in Newtonian fluids: $40 < Re < 5 \times 10^5$.** Trans IChemE, v. 73 (Part A), p. 485-491, 1995.
- JU, S. Y.; MULVAHILL, T. M.; PIKE, R. W. **Three-dimensional turbulent flow in agitated vessels with a nonisotropic viscosity turbulence model.** The Can. Journal of Chemical Engineering, v. 68, p. 3-15, 1990.
- KAMINOYAMA, M.; AKABANE, K.; ARAI, K.;SAITO, F.; KAMIWANO, M. **Numerical analysis of three dimensional flow of a pseudo-plastic liquid in a stirred vessel with a turbine impeller,** Int. Chem. Eng., v. 30, n. 4, p. 720-728, 1990.
- KUNCEWICZ, C. **Three-dimensional model of laminar liquid flow for paddle impellers and flat-blade turbines.** Chemical Engineering Science, v. 47, n. 15/16 p. 3959-3967, 1992.

- KRESTA, S. M.; WOOD, P. E. **The mean flow field produced by a 45° pitched blade turbine: Changes in the circulation pattern due to off bottom clearance.** Can. J. Chem. Eng., v. 71, p. 42-53, February 1993.
- KAMINOYAMA, M.; SAITO, F.; KAMIWANO, M. **Numerical analysis of flow of a bingham fluid in an anchor impeller.** Int. Chem. Eng., v. 34, n. 1, p. 263-269, 1994a.
- KAMINOYAMA, M.; ARAI, K.; KAMIWANO, M. **Numerical analysis of power consumption and mixing time for a pseudoplastic liquid in geometrically similar stirred vessels with several kinds of plate-type impellers.** Journal of Chemical Engineering of Japan, v. 27, n. 1, p. 17-24, 1994b.
- LUO, J. Y.; GOSMAN, A. D.; ISSA, R. I.; MIDDLETON, J. C.; FITZGERALD, M. K. **Full flow field computation of mixing in baffled stirred vessels.** The 1993 ICHME Research Event, p. 657-659, 1993.
- MIDDLETON, J. C.; PIERCE, F.; LYNCH, P.M. **Computations of flow fields and complex reaction yield in turbulent stirred reactors, and comparison with experimental data.** Chem. Eng. Res. Des., v. 64, p. 18-22, 1986.
- MISHRA, V. P.; JOSHI, J. B. **Flow generated by a disc turbine: Part III effect of impeller diameter, impeller location and comparison with other radial flow turbines.** Trans. IChemE, v. 71 (Part A), p. 562-573, September 1993.
- MOORE, I. P. T.; COSSOR, G.; BAKER, M. R. **Velocity distributions in a stirred tank containing a yield stress fluid.** Chemical Engineering Science, v. 50, n. 15, p. 2467-2481, 1995.
- MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional: Fundamentos e Coordenadas Generalizadas.** Ed. LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S. A., Rio de Janeiro, 1995.

- MEIER, H. F.; ALVES, J. J. N.; MORI, M. **Comparison between Staggered and Colocated Grids in the FVM for Multiphase Flows**. Presented and published in the proceedings of the Forth CFX International Users Conference, Chicago-USA, 1997a.
- MEIER, H. F.; ALVES, J. J. N.; MORI, M. **Comparison of finite-volume numerical method with staggered and colocated grids for multiphase flows**. Anais do XVIII CILAMCE – Congresso Íbero Latino-Americano de Métodos Computacionais para Engenharia, Brasília-DF, Brasil, p. 957-964, 1997b.
- NOURI, J. M.; WHITELOW, J. H.; YIANNESKIS, M. **The scaling of the flow field with impeller size and rotational speed in a stirred reactor**. Proc. Int. Conf. on Laser Anemometry-Advances and Applications, Glasgow, 1987.
- NOURI, J. M.; WHITELOW, J. H. **Flow characteristics of stirred reactors with Newtonian and non-Newtonian fluids**. AIChE Journal, v. 36, n. 4, p. 627-629, April 1990.
- NUNHEZ, J. R. **The influence of geometric on the optimum design of stirred tank reactors**. Ph.D. Thesis, The University of Leeds, 1994.
- NUNHEZ, J. R.; MCGREAVY, C. **The influence of geometric factors on the optimum design of stirred tank reactors**. Chap in Industrial Mixing Technology: Chemical and Biological Applications AIChE Symposium Series, v. 90, p. 55-70, 1994.
- NUNHEZ, J. R.; MCGREAVY, C. **A comparison of the heat transfer in helical coils and jacketed stirred tank reactors**. Brazilian Journal of Chemical Engineering, v. 12, n. 01, p. 65-73, 1995.
- OLDSHUE, J. Y.; GRETTON, A. T. **Helical coil heat transfer in in mixing vessels**. Chem. Eng. Progress, v. 50, p. 615-621, 1954.

- PATANKAR, S. V.; SPALDING, D. B. **A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three dimensional parabolic flows.** Int. J. Heat Mass Transfer, v. 15, p. 1787, 1972.
- PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow.** Ed. Hemisphere Pub. Co., New York, 1980.
- PATANKAR, S. V. **A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations.** Numerical heat Transfer, v. 4, p. 409-425, 1981.
- PERICLEOUS, K. A.; PATEL, M. K. **The modelling of tangential and axial agitators in chemical reactors.** Physico Chemical Hydrodynamics, v. 8, n. 2 p. 105-123, 1987.
- PLATZER, P.; NOLL, G. **Modelling of the local distributions of velocity components and turbulence parameters in agitated vessels-methods and results.** Chem. Eng. Progress, v. 23, p. 13-31, 1988.
- PERIC', M.; KESSLER, R.; SCHEUERER, G. **Comparison of finite-volume numerical methods with staggered and colocated grids.** Computers & Fluids, v. 16, n. 4, p. 389-403, 1988.
- PERNG, C. Y.; MURTHY, J. Y. **A moving-mesh technique for simulation of flow in mixing tanks.** In 1992 AIChE Annual Meeting, Florida – USA, AIChE, 1992.
- PERNG, C. Y.; MURTHY, J. Y. **A sliding-mesh technique for simulation of flow in mixing tanks.** In Mixing 13, p. 1-9, 1993.
- REED, N. B.; PRINCZ, M.; HARTLAND, S. **Laser-doppler measurement of turbulence in a standard stirred tank.** Proc. European Conference on Mixing, p. B1-B26, 1977.

- RANADE, V. V.; JOSHI, J. B. **Flow generated by a disc turbine: Part II matemactical modelling and comparison with experimental data.** Trans. IChemE., v. 68(Part A), p. 34-50, January 1990a.
- RANADE, V. V.; JOSHI, J. B. **Flow generated by a disc turbine: Part I experimental.** Trans. IChemE., v. 68(Part A), p. 19-33, January 1990b.
- RANADE, V. V. **An efficient computational model for simulating flow in stirred vessels: a case of Rushton turbine.** Chemical Engineering Science, v. 52, n. 24, p. 4473-4484, 1997.
- SACHS, J. P.; RUSHTON, J. H. **Discharge flow from turbine type mixing impellers.** Chem. Eng. Prog., v. 50, n. 12, p. 597, 1954.
- STREET, D. A. **Computational modelling of stirred reaction vessels.** Ph.D. Thesis, The University of Leeds, 1991.
- STREET, D. A.; MCGREAVY, C. **A model of the heat transfer in internally cooled reaction vessels.** Heat Exchange Engineering, v. 2, p. 279-302, 1991.
- STOOTS, C. M.; CALABRESE, R. V. **Mean velocity field relative to a Rushton turbine blade.** AIChE Journal, v. 41, p. 1, 1995.
- THOMPSON, J. F.; WARSI, Z. U.; MASTIN, C. W. **Boundary-fitted coordinate systems for numerical solution of partial defferential equations.** J. Comp. Phys., v. 47, p. 1-108, 1982.
- THOMPSON, J. F.; WARSI, Z. U.; MASTIN, C. W. **Numerical grid generation.** Elsevier Science Publishing, 1985.

- TAKEDA, H.; NARASAKI, K.; KITAJIMA, H.; SUDOH, S.; ONOFUSA, M.; IGUCHI, S. **Numerical simulation of mixing flows in agitated vessels with impellers and baffles.** Computers Fluids, v. 22, n. 2/3, p. 223-228, 1993.
- UHL, V.; GRAY **Mixing : theory and pratice.** Academic Press, London, v. I, chapter 5, 1966.
- VAN DOORMAAL, J. P.; RATHBY, G. D. **Enhancements of the simple method for predicting incompressible fluid flows.** Numerical Heat Transfer, v. 7, p. 147-163, 1984.
- YAMAMOTO, K.: Ph.D. Thesis, Kyoto University, 1961.
- YANNESKIS, M.; POPILEK, Z.; WHITELOW, J. H. **An experimental study of the steady and unsteady flow characteristics of stirred reactors.** J. Fluid Mech., p. 175, 1987.
- YIANNESKIS, M.; WHITELOW, J. H. **On the struture of the trailing vortices around Rushton turbine blades.** Chem. Engng. Res. Des., v. 71, p. 543-550, 1993.
- WELTY, J. R.; WICKS, C. E.; WILSON, R. E. **Fundamentals of Momentum, Heat & Mass Transfer.** New York, John Wiley & Sons, 1976.