



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

CÍCERO OBERLANDO DE PINHO FURTADO JÚNIOR

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE IMPELIDORES APLICADOS AO
PROCESSO DE PRODUÇÃO DE POLIURETANO

FORTALEZA

2023

CÍCERO OBERLANDO DE PINHO FURTADO JÚNIOR

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE IMPELIDORES APLICADOS AO PROCESSO
DE PRODUÇÃO DE POLIURETANO

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Curso de Graduação em Engenharia Química do Centro de Tecnologia da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. João José Hiluy Filho

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas

Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

F987s Furtado Júnior, Cícero Oberlando de Pinho.

Simulação computacional de impelidores aplicados ao processo de produção de poliuretano / Cícero Oberlando de Pinho Furtado Júnior. – 2023.

89 f. : il. color.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia, Curso de Engenharia Química, Fortaleza, 2023.

Orientação: Prof. Dr. João José Hiluy Filho.

1. Mistura. 2. Agitação. 3. Poliuretano. I. Título.

CDD 660

CÍCERO OBERLANDO DE PINHO FURTADO JÚNIOR

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE IMPELIDORES APLICADOS AO PROCESSO
DE PRODUÇÃO DE POLIURETANO

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Curso de Graduação em Engenharia Química do Centro de Tecnologia da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. João José Hiluy Filho

Aprovado em 03/07/2023

Prof. Dr. João José Hiluy Filho

Prof. Dr. Sebastião Mardônio Pereira de Lucena

Prof. Dr. Pedro Felipe Silvino Gadelha

AGRADECIMENTOS

A minha mãe e a minha irmã Kaline por quem eu minha estima não encontra palavras para descrever e mesmo incontáveis páginas de agradecimentos não seriam o suficiente para expressar minha gratidão por me guiarem e cuidarem de mim todos estes anos.

Ao meu cunhado Marcos por todo inestimável apoio ao longo desses anos.

Aos meus irmãos Kauan, Karen e Kaliane e aos meus cunhados Luís, Rebeca e Devid por sempre me receberem de braços abertos.

A minha namorada Larissa que tem sido meu porto seguro nesses mais de dois anos.

Ao meu primo Arthur que sempre foi um irmão para mim.

Aos meus amigos de primeiro ano, em especial ao Carlos, mas sem deixar de mencionar Ana Íris, Hermínia, Artur Cláudio, Amanda, Camilla e tantos outros por terem me acolhido no começo dessa jornada que vem sendo a Universidade.

Ao Alan Portal por ter me dado toda ajuda num dos momentos mais difíceis que passei.

Aos colegas de EPEQ, em especial ao Ítalo Ximenes e à Sarah Damasceno com quem pude aprender bastante sobre trabalho em equipe.

À Fernanda por ter me apresentado ao Laboratório de Combustão e Energias Renováveis onde pude conhecer tantas pessoas incríveis.

Aos amigos e colegas de laboratório Daniel, Bruna, Arthur, Lucas Ribeiro, Larah, Diego, Igor, Thiago, Poliana, Welbson, Laryssa, Louanne, João Victor, Gabryel, Luís, Carol e tantos outros que por lá passaram e deixaram sua marca, mas, em especial, ao Yuri por ter se tornado um valoroso amigo para todas as horas.

Aos colegas de anos subsequentes que tiver a alegria de conhecer como Lucas Férrer e Vitor.

Aos meus professores por todo conhecimento que me foi fornecido, em especial ao Professor João José Hiluy pela sua orientação não só neste trabalho, mas em diversos outros momentos do curso.

Ao Carlos Eduardo por ter sido a ponte para o meu primeiro estágio.

Aos meus supervisores e colegas de trabalho Carlos Alexandre, Guilherme e Leandro pela paciência e dedicação em me ensinar nesta minha primeira experiência na indústria.

E, finalmente, ao meu eu de 2017 que, apesar de tudo, não desistiu.

“Por que não?” – TOMÉ, A.

RESUMO

O processo de mistura/agitação apresenta grande importância na indústria pois uma boa mistura é um dos elementos que vai garantir a qualidade do produto final. Além disso, esse processo está presente nas mais variadas áreas, como de alimentos, petroquímica, de polímeros, entre outras. O objetivo deste estudo foi analisar e comparar de forma preliminar a mistura/agitação de um processo de produção de espumas de poliuretano de uma empresa têxtil através de simulação computacional com foco na influência do impelidor. Foram escolhidas 3 classes de espumas (D10, D30 e D40) para análise e foi analisado o segundo processo de mistura; polioli, aditivos e catalisador. Para os desenhos construtivos foi utilizado o software SolidWorks® e as medidas do tanque e do impelidor foram obtidas na própria empresa. O programa elencado para realizar a simulação foi o Ansys Fluent®, utilizando uma malha mista de elementos tetraédricos e hexaédricos com uma abordagem euleriana e utilizando elementos de volume finito. Para a descrição das fases e da viscosidade turbulenta utilizou-se dos métodos de Mistura e SST respectivamente. Os principais parâmetros dos componentes da mistura foram fração volumétrica, densidade e viscosidade. As variáveis a serem analisadas foram dimensões e tipo do impelidor e velocidade de rotação. Uma vez que o local oferece um bom controle da temperatura, o processo foi considerado isotérmico e efeitos de transferência de massa não foram levados em consideração, o que gerou apenas uma análise mecânica da mistura. Os resultados foram gerados de forma gráfica a fim de demonstrando o perfil de agitação e a distribuição do catalisador na mistura.

Palavras-chave: mistura; agitação; poliuretano; Ansys Fluent®; impelidor; simulação.

ABSTRACT

The mixing/agitation process is of great importance in the industry because a good mix is one of the elements that will guarantee the quality of the final product. In addition, this process is present in the most varied areas, such as food, petrochemicals, polymers, among others. The objective of this study was to analyze and compare in a preliminary way the mixing/agitation of a polyurethane foam production process in a textile company through computer simulation focusing on the influence of the impeller. 3 classes of foams (D10, D30 and D40) were chosen for analysis and the second mixing process of the process was analyzed; polyol, additives and catalyst. For the construction drawings, SolidWorks® software was used and the measurements of the tank and impeller were obtained at the company itself. The program chosen to carry out the simulation was Ansys Fluent®, using a mixed mesh of tetrahedral and hexahedral elements with an Eulerian approach and using finite volume elements. For the description of the phases and the turbulent viscosity, the Mixture and SST methods were used respectively. The main parameters of the mixture components were volumetric fraction, density and viscosity. The analyzed variables were dimensions and type of impeller and speed of rotation. Since the location offers good temperature control, so the process is considered isothermal and mass transfer effects were not taken into account, which generated only a mechanical analysis of the mixture. The results were graphically generated in order to demonstrate the agitation profile and the distribution of the catalyst in the mixture.

Keywords: mixture; agitation; poliurethane; Ansys Fluent®; impeller; simulation.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Determinação da distância do impelidor ao fundo do tanque.....	21
Tabela 2 – Composições das espumas de poliuretano.....	40
Tabela 3 – Valores de densidade e viscosidade para os componentes da mistura.....	40
Tabela 4 – Composições das misturas de componente mais abundante e catalisador.....	44
Tabela 5 – Velocidades para simulações intermediárias.....	44
Tabela 6 – Velocidades para simulações definitivas.....	45
Tabela 7 – Densidade e viscosidade estimadas.....	46
Tabela 8 – números de Reynolds dos impelidores propostos.....	47

LISTA DE SÍMBOLOS

G_b : geração de energia turbulenta devido a efeitos de flutuação

G_k : geração de energia cinética turbulenta

G_ω : geração do termo de dissipação de energia turbulenta

Y_M : contribuição para os efeitos de compressibilidade para grandes valores de Mach

Y_κ : termo de dissipação de κ

Y_ω : termo de dissipação de ω

D_i : diâmetro do impelidor

D_T : diâmetro do tanque

W : largura da chicana

A : altura da pá da turbina

L : largura da pá da turbina

Re : número de Reynolds

N_p : número de potência

N_q : número de escoamento

N : velocidade angular

u : velocidade

LISTA DE SÍMBOLOS GREGOS

μ : viscosidade

μ_t : viscosidade turbilhonar

κ : energia cinética turbilhonar

ω, ε : termo de dissipação de energia cinética turbilhonar

ρ : densidade

ϕ : termo para a função do modelo SST

σ_κ : número de Prandtl associado a κ

σ_ω : número de Prandtl associado a ω

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	13
1.1 Relevância do estudo	13
1.2 Objetivo geral	14
1.1.1 Objetivos específicos	14
2 MISTURA E AGITAÇÃO	15
2.1 Conceitos Iniciais	15
2.1.1 Turbulência	15
2.1.2 Número adimensionais	15
2.1.2.1 Número de Reynolds	16
2.1.2.2 Número de Potência (Número de Newton)	16
2.1.2.3 NÚMERO DE AGITAÇÃO (FLOW NUMBER)	17
2.2 Definição de agitação/mistura	18
2.3 Elementos de um misturador	18
2.3.1 Impelidor	18
2.3.1.1 Tipos de impelidores	18
2.3.1.1.1 Propulsor	19
2.3.1.1.2 Turbina	20
2.3.1.1.3 Âncora	20
2.3.1.1.4 Outros tipos de impelidores	21
2.3.1.2 Distância do impelidor ao fundo do tanque	21
2.3.1.3 Dimensões de impelidores	22
2.3.2 Vórtex e chicanas	23
2.3.3 Tanque	23
2.4 Tempo ideal de agitação	24
2.5 Perfis de agitação	24
3 ESPUMAS	26
3.1 Isocianatos	26
3.2 Polióis	27
3.3 Catalisadores	27
3.4 Agentes de expansão	28
3.5 Surfactantes	28
4 SIMULAÇÃO	29
4.1 Ambiente de simulação ANSYS Fluent	29
4.2 Geometria	29

4.3 Modelos.....	29
4.3.1 Modelos de escoamento	29
4.3.1.1 Modelo k- ϵ	30
4.3.1.2 Modelo k- ω	31
4.3.1.3 Modelo SST.....	33
4.3.2 Métodos multifásicos	34
4.3.2.1 Modelo de mistura	35
4.3.2.2 Modelo Euleriano	36
4.4 Solver.....	37
4.4.1 Pressure-Based Solver	37
4.4.2 Density-Based Solver.....	38
5 METODOLOGIA.....	39
5.1 Considerações gerais.....	39
5.2 Dados do processo atual	39
5.2.1 Impelidor atual	40
5.3 Determinação do regime de escoamento	41
5.4 Escolha dos impelidores propostos	41
5.4.1 Posição dos impelidores propostos.....	41
5.4.2 Dimensionamento dos impelidores propostos.....	42
5.4.2.1 Propulsor.....	42
5.4.2.2 Turbina rushton	42
5.4.3 Geometria dos impelidores	42
5.4.4 Regime de escoamento	43
5.5 Ambiente de simulação	43
5.5.1 Simulações iniciais.....	44
5.5.2 Simulações intermediárias	44
5.5.3 Simulações definitivas	45
6 RESULTADOS E DISCUSSÕES	46
6.1 Regime processo atual.....	46
6.2 Dimensionamento dos impelidores.....	46
6.2.1 Propulsor	46
6.2.2 Turbina rushton.....	46
6.3 Regime para os impelidores propostos	47
6.4 Simulações iniciais	48
6.5 Simulações intermediárias e finais	49
6.5.1 Simulações intermediárias	49

6.5.1.1 Espuma D10.....	49
6.5.1.1.1 Perfis de agitação	49
6.5.1.1.2 Perfis de distribuição do catalisador.....	50
6.5.1.2 Espuma D30.....	53
6.5.1.2.2 Perfil de distribuição do catalisador.....	54
6.5.1.3 Espuma D40.....	59
6.5.1.3.1 Perfis de agitação	59
6.5.1.3.2 Perfil de distribuição do catalisador.....	60
6.5.2 Análises simulações intermediárias	64
6.5.3 Simulações finais	65
6.5.3.1 Espuma D10.....	65
6.5.3.1.1 Perfis de agitação	65
6.5.3.1.2 Perfil de distribuição do catalisador.....	66
6.5.3.2 Espuma D30.....	72
6.5.3.2.1 Perfis de agitação	72
6.5.3.2.2 Perfis de distribuição do catalisador.....	73
6.5.3.3 Espuma D40.....	79
6.5.3.3.1 Perfis de agitação	79
6.5.3.3.2 Perfil de distribuição do catalisador.....	80
6.5.4 Análise simulações definitivas.....	86
7 CONCLUSÃO.....	87
REFERÊNCIAS	89

1 INTRODUÇÃO

Apesar de serem termos normalmente confundidos, agitação e mistura não são necessariamente sinônimos. A agitação se refere a induzir movimento a um material, sendo esse movimento, geralmente, circular; enquanto que a mistura se refere à distribuição randômica de fases, previamente separadas, interpenetradas entre si (MCCABE, 2004).

Couper (2010) ainda traz que a mistura é o movimento de fluidos e sólidos a fim de se melhorar o resultado de um processo e, essa mistura, é obtida através da agitação.

Em geral, o processo de mistura pode ocorrer com quase qualquer combinação de fases como gases em líquidos, gases com sólidos granulares e líquidos em líquidos (COUPER, 2010).

Um desses processos que depende de uma boa mistura é o de produção de espumas de poliuretano através da reação de adição entre um polioli e um isocianato (VILLAR, 2002). Esse produto tem uma série de aplicações como estofados, colchões, automóveis, indústria têxtil, isolamento e calçados (CANAUD, 2007).

Os processos de dimensionar um misturador geralmente envolvem testes em escala reduzida e, posteriormente, um scale-up é realizado. Além disso, a análise de fatores como o tempo, perfil e homogeneidade da mistura se dá através da adição de um traçador e uma posterior análise da concentração em diferentes pontos nesse misturador (KARL-JORDAN et al, 2007).

Com o advento do desenvolvimento de *softwares* de simulação, é possível realizar análises de forma mais prática. Entre esses programas, podemos citar o ANSYS Fluent, desenvolvido pela ANSYS para analisar, em geral, fluidos. Essa ferramenta permite análise de escoamentos, turbulência, transferência de massa e transferência de energia, entre outros (ANSYS, 2023).

Dito isso, simulações computacionais podem ser utilizadas como ferramentas relevantes na análise da mistura para a produção de poliuretano, análises essas que podem não só indicar a qualidade atual do processo, como também serem utilizadas como base para a proposição de melhorias.

1.1 Relevância do estudo

Problemas no processo de mistura causam incrementos significativos não só no tempo como nos custos de produção, assim como, até, a falha completa do

processo. A exemplo, a indústria química americana teve gastos de até 10 bilhões de dólares em 1989 devido a misturas mal realizadas e, em 1993, foi estimada uma perda de 100 milhões de dólares devido a problemas com misturas. Já a indústria americana de papel teve uma diminuição de gastos de 10 a 15% nos anos 1980s devido ao investimento em tecnologia de mistura (PAUL et al, 2004).

Ainda é importante citar que o mercado de espumas de poliuretano, produto afetado intensamente pelo seu processo de mistura, foi avaliado em 74,26 bilhões de dólares em 2022, com uma expectativa de crescimento para 104,99 bilhões de dólares em 2028 (MORDOR INTELLIGENCE), valores que mostram a relevância desse mercado.

Observando o exposto acima, é de extremo interesse que análises computacionais possam ser realizadas para evitar-se o surgimento de problemas no processo de forma menos onerosa, sem a necessidade constante de realização de testes *in loco*.

1.2 Objetivo geral

Realizar a análise preliminar do processo de mistura para a fabricação de espumas de poliuretano em uma fábrica têxtil presente na cidade de Maracanaú através de simulação computacional.

1.1.1 Objetivos específicos

- Propor um modelo de simulação simplificado para analisar o processo de mistura;
- Simular os instantes iniciais do processo e analisar os resultados;
- Dimensionar e propor outras montagens para o processo;
- Simular essas montagens e comparar com os resultados obtidos.

2 MISTURA E AGITAÇÃO

2.1 Conceitos Iniciais

2.1.1 Turbulência

Segundo Fox et al (2011), pode-se entender o escoamento turbulento como aquele em que “as partículas fluidas rapidamente se misturam enquanto se movimentam ao longo do escoamento devido a flutuações aleatórias no campo tridimensional de velocidades”. Ainda é citado por ele a impossibilidade de se basear em equações analíticas simples para descrever esse movimento aleatório sendo necessário o forte apoio de teoria semiempíricas e dados experimentais.

Karl-Jordan *et al* (2007) também elenca diversos aspectos que caracterizam um processo turbulento e que auxiliam no entendimento da complexidade desses processos:

- a) Irregularidade - fluxos turbulentos são aleatórios e regulares, o que gera a necessidade de se utilizar de ferramentas estatísticas para descrevê-los;
- b) Difusividade – causam grandes variações nas taxas de momentum, calor e massa;
- c) Grandes números de Reynolds – ocorrem a grandes números de Reynolds;
- d) Tridimensional – Na grande maioria dos casos os fluxos são tridimensionais;
- e) Energia - demandam uma alimentação constante de energia para o fluxo ocorrer;
- f) Propriedade do fluxo - é interessante lembrar que a turbulência é propriedade do fluxo e não do fluido.
- g) Apesar da sua complexidade, esse efeito é muito importante para casos em que se necessita de grandes difusões de massa e energia, como é o caso dos processos que envolvem mistura.

Os equacionamentos e modelos que descrevem processos turbulentos serão mais explanados na seção SIMULAÇÃO.

2.1.2 Número adimensionais

Existem uma série de números adimensionais que ocorrem com tanta frequência e são tão ‘poderosos’ na descrição de processos que receberam nomes significativos (FOX et al, 2011). Abaixo, são apresentados alguns desses números.

2.1.2.1 Número de Reynolds

O número de Reynolds foi desenvolvido por Osbourne Reynolds nos anos 1800 nos seus estudos sobre escoamento laminar e turbulento (FOX et al, 2011). Nesse estudo, foi analisado a forma que se comportava um traçador (corante) em um escoamento de água em um tubo, onde percebeu-se que, a baixas velocidades e diâmetros, era formada basicamente uma lâmina colorida, enquanto para velocidades e diâmetros maiores era possível perceber um movimento turbulento desse corante (REYNOLDS, 1883). Essa análise gerou a Equação 1:

$$Re = \frac{\rho v L}{\mu} \quad (1)$$

Onde:

ρ : densidade;

v : velocidade do escoamento;

L : comprimento característico;

μ : viscosidade dinâmica.

Para o estudo de agitadores, essa equação pode ser reescrita como apresentada em Karl-Jordan *et al* (2007) pela Equação 2:

$$Re = \frac{\rho N D_i^2}{\mu} \quad (2)$$

Onde:

D_i : diâmetro do impelidor;

N : velocidade angular.

O sistema pode ser considerado laminar para $Re < 10$ e turbulento para $Re > 10000$, sendo o intervalo entre esses valores conhecido como regime de transição (MCCABE, 2004).

2.1.2.2 Número de Potência (Número de Newton)

O número de potência (N_p) ou número de Newton é um adimensional de extrema importância para processos de *scale-up* (KARL-JORDAN *et al*, 2007) e está relacionado com a energia empregada ao misturador (PAUL et al, 2004). Ele pode ser obtido através do teorema do Pi de Buckingham como mostrador em Fox et al (2011). Para casos envolvendo rotação, ele pode ser escrito como mostrado na Equação 3:

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

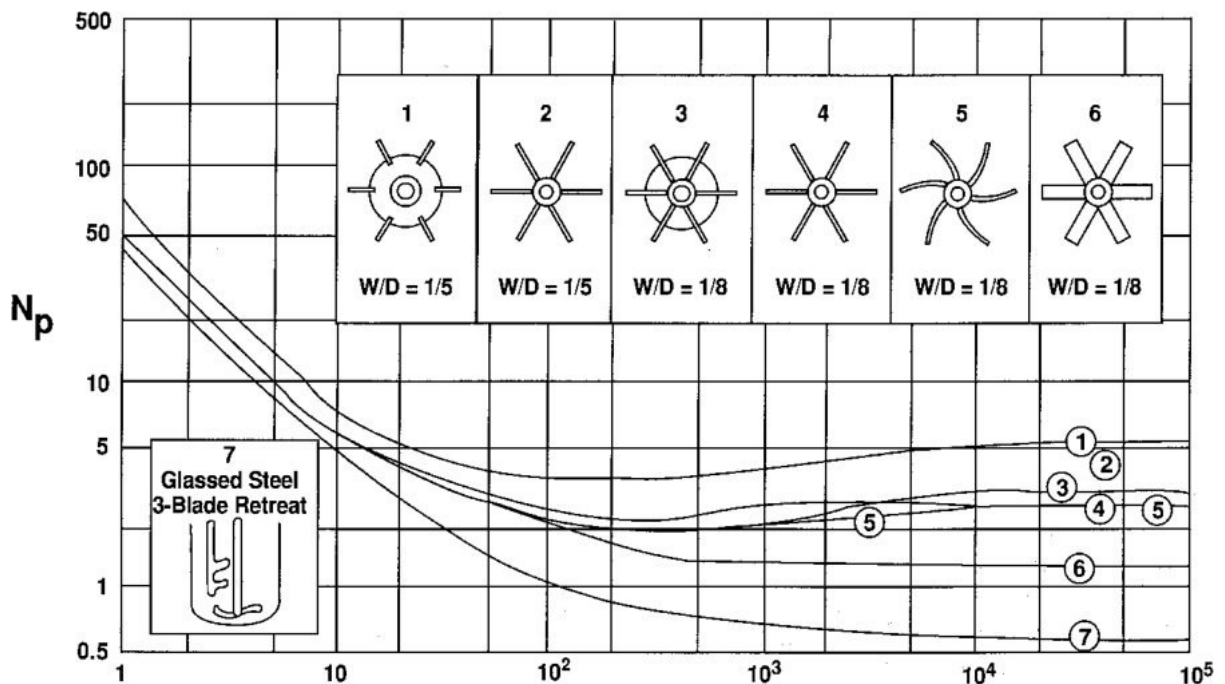
Onde:

N_p : número de potência;

P : potência fornecida.

Ainda é possível relacionar o tipo de impelidor e o número de Reynolds ao número de potência obtendo-se gráficos como o apresentado na Figura 1:

Figura 1 - Número de potência versus número de Reynolds para alguns impelidores tipo turbina.



Fonte: Bates et al. (1963)

É interessante notar que para regiões de regime turbulento, o valor do número de potência se mantém praticamente constante, enquanto regiões de regime laminar observa-se uma relação inversamente proporcional (PAUL et al, 2004).

2.1.2.3 NÚMERO DE AGITAÇÃO (FLOW NUMBER)

Segundo Paul et al. (2004), esse número reflete a capacidade de bombeamento de um impelidor e é dado pela Equação 4.

$$N_q = \frac{Q_l}{ND_i^3} \quad (4)$$

Onde:

Q_i : taxa de escoamento produzida pelo impelidor para a mistura de líquidos.

2.2 Definição de agitação/mistura

Segundo Couper *et al* (2010), a agitação permite a mistura de fases, além de melhorar a transferência de massa e de calor. As fases podem ser praticamente qualquer uma, por exemplo: gás com gás, gás em líquidos (e.g. dispersão), gás com sólidos granulares (e.g. fluidização), líquidos em gases (e.g. atomização), líquidos com líquidos (e.g. dissolução), líquidos com sólidos granulares (e.g. suspensão), sólido com sólido (e.g. mistura de pós).

Paul *et al* (2004) ratifica dizendo que a mistura é o conceito de diminuir a não homogeneidade, seja de fase, concentração ou temperatura e Karl-Jordan *et al* (2007) cita como exemplos a indústria de petróleo, produção de manufaturados químicos, indústria do papel e tantas outras. Ainda é possível adicionar a esses exemplos a indústria de polímeros, em especial, a de produção de espumas de poliuretano.

2.3 Elementos de um misturador

Em Joshi *et al* (2012), COUPER (2010) e KARL-JORDAN *et al* (2007) são apresentados diferentes componentes dos misturadores com destaque para impelidor, tanque, rotor, entre outros.

2.3.1 Impelidor

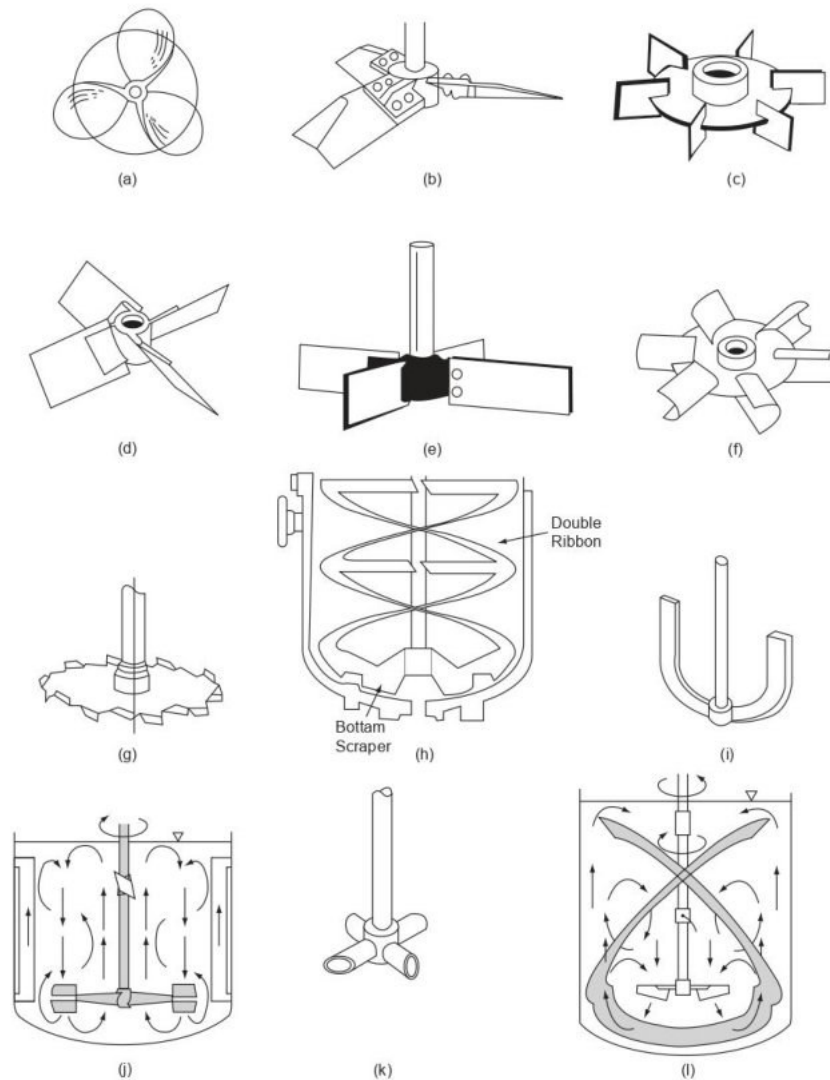
Joshi *et al* (2012) descreve o impelidor como um componente que gera um cisalhamento numa porção do fluido que o transfere ao seguinte gerando um fluxo. Esse fluxo pode ser majoritariamente axial ou radial, mas, geralmente, há uma combinação dos dois tipos.

Um fato sobre o tipo de impelidor a ser escolhido é que essa escolha depende mais de julgamento do processo do que uma forma quantitativa definitiva.

2.3.1.1 Tipos de impelidores

A escolha do impelidor dependerá de fatores como viscosidade do fluido a ser misturado e rotação. A Figura 2 resume alguns exemplos de diferentes tipos de impelidores empregados na indústria (COUPER, 2010).

Figura 2 - Diferentes tipos de impelidores



Fonte: Couper (2010).

2.3.1.1.1 Propulsor

Segundo Couper (2010), o impelidor de 3 lâminas inspirado em propulsores marinhos é recomendado para rotações de até 1800 rpm e líquidos com viscosidade baixa (até 5000 cp), e pode apresentar um anel de estabilização. Karl-Jordan *et al* (2007) também recomenda esse tipo para 95% dos casos que contenham partículas, além de ser um impelidor que consegue gerar grandes fluxos mesmo com diâmetros

pequenos. No seu catálogo, a empresa TOHKEMY CORPORATION sugere esse impelidor por ser um dos mais econômicos, principalmente se tratando de líquidos com baixa viscosidade.

Nas Figuras 2.a podemos ver um exemplo de propulsor.

2.3.1.1.2 Turbina

O modelo turbina pode se apresentar em vários tipos como os apresentados por Couper (2010), sendo eles:

- a) As turbinas com pás planas (Figura 2.b) podem ser utilizadas em líquidos até 10000 cP e altos bombeamentos e seu design simples permitiu extensivos testes.
- b) Na Figura 2.c, tem-se um modelo similar ao anterior, mas o disco plano fornece uma estabilização. Esse tipo de turbina é conhecido como turbina Rushton e tem aplicação em processos de líquidos de baixa densidade e com alta rotação.
- c) Ainda na família das turbinas, temos a de pás inclinadas (Figura 2.d), na qual a angulação de 45° permite uma combinação dos fluxos radial e axial, melhorando, especialmente, os processos de troca térmica. Elas geralmente se apresentam com 6 pás, mas esse número pode variar de 4 a 8 pás.
- d) Na Figura 2.e vê-se a de pás curvadas que demanda um menor torque e são indicadas para sistemas pastosos e fibrosos.
- e) Na Figura 2.f tem-se uma turbina coberta por um estator, o que gera um fluxo predominantemente radial e é recomendado para dispersões e emulsificações.

2.3.1.1.3 Âncora

Impelidores tipo âncora (Figura 2.i) são interessantes para processos de baixíssima turbulência ($Re < 10$) (COUPER, 2010).

Joshi *et al* (2012) ainda estipula o intervalo de velocidade sendo de 5-300 rpm e que o tamanho do impelidor deve ser o suficiente para quase tocar a parede do tanque. Por esse motivo, não deve ser aplicado em processos com sólidos ou que gerem incrustação.

2.3.1.1.4 Outros tipos de impelidores

- a) Impelidores de placa plana (Figura 2.g) com dentes de serra na extremidade são bem recomendados para dispersões e emulsificações. Devido ao cisalhamento adicional proporcionado, esses impelidores dispensam o uso de chicanas.
- b) Batedores de gaiola (Figura 2.h) geram uma ação de bater e quebrar. Geralmente são atrelados a um impelidor mais comum.
- c) Pás do tipo “portão” (Figura 2.j) são mais utilizadas em tanques largos e profundos, onde é necessário um baixo cisalhamento.
- d) E impelidores “ocos” (Figura 2.k) são utilizados quando se busca introduzir gás na mistura de forma centrífuga.

2.3.1.2 Distância do impelidor ao fundo do tanque

Como bem citado por Joshi *et al* (2012), há algumas divergências sobre a posição do impelidor em relação ao fundo do tanque, sendo uma boa aproximação o valor de $1/6$ da altura de líquido. Já Dickey (1984) propõe uma metodologia que leva em consideração a viscosidade da mistura, assim como a relação entre a altura de líquido e diâmetro do tanque, como podemos ver na Tabela 1:

Tabela 1 – Determinação da distância do impelidor ao fundo do tanque

Viscosidade (cP)	Razão altura de líquido e diâmetro do tanque (Z/D _T)	Número de impelidores	Distância ao fundo do tanque	
			Inferior	Superior
<25000	1,4	1	Z/3	-
<25000	2,1	2	T/3	2Z/3
>25000	0,8	1	Z/3	-
>25000	1,6	2	T/3	2Z/3

Fonte: Dickey (1984).

2.3.1.3 Dimensões de impelidores

Em GRAY (1966) é possível encontrar as seguintes relações para impelidores do tipo turbina (Figura 3) em que W se refere ao valor da largura da lâmina e D ao diâmetro do impelidor:

Figura 3 – Determinação da distância ao fundo do tanque

W/D = 1/5	W/D = 1/5	W/D = 1/6	W/D = 1/6	W/D = 1/5
Pitched-blade (P-4) $N_p = 1.37$	Pitched-blade (P-6) $N_p = 1.70$	Straight-blade (S-4) $N_p = 2.96$	Straight-blade (S-6) $N_p = 3.86$	Disc-type (D-6) $N_p = 5.46$

Fonte: GRAY (1966)

Karl-jordan *et al* (2007) ainda propõe as dimensões para turbinas tipo Rushton como sendo:

$$D_i = \frac{D_T}{5} \quad (5)$$

$$D_d = \frac{2}{3} D_i \quad (6)$$

$$A = L = \frac{D_i}{5} \quad (7)$$

Onde:

D_i = diâmetro do impelidor;

D_T = diâmetro do tanque;

D_d = diâmetro do disco;

A = Altura da pá;

L = Largura da pá.

Já para os propulsores, Joshi *et al* (2012) cita que o diâmetro do impelidor deve corresponder de 15% a 30% do diâmetro do tanque. Outro ponto a se analisar é o ângulo que a pá forma em relação ao eixo pois isso pode influenciar na eficiência da pá. O ângulo de 45° é o que mantém uma eficiência mais constante como é dito em Karl-jordan *et al* (2007).

2.3.2 Vórtex e chicanas

Um dos grandes problemas dos processos de misturas em tanques agitados é a formação de vórtex por motivos como os elencados por KARL et al (2007) e COUPER (2010) pois:

- a) Ar é aspirado para dentro da mistura, o que pode afetar drasticamente as características do processo;
- b) Os componentes da mistura movem-se a mesma velocidade e no mesmo sentido, o que afeta a qualidade da mistura;
- c) O movimento topo-fundo do tanque é bastante reduzido;
- d) A turbulência da mistura também é diminuída.

Para se evitar esse tipo de problema é recomendado a adição de chicanas que têm a função de 'quebrar' esse vórtice (KARL-JORDAN et al, 2007). Joshi *et al* (2012) cita que tamanhos comuns para chicanas são de 1/12 a 1/10 do diâmetro do tanque.

Outra estratégia é a descentralização do impelidor que não elimina totalmente a geração de vórtices, mas pode ser útil em processos que não permitem a utilização de chicanas (COUPER, 2010). Ainda outra forma de diminuir a formação de vórtices seria a montagem angulada do impelidor, sendo importante analisar as forças que agirão sobre ele (KARL-JORDAN et al, 2007).

2.3.3 Tanque

Outro aspecto a ser levado em conta é a geometria do tanque a ser aplicada. A geometria cilíndrica é a mais interessante para processos menores e tem a vantagem de não possuir zonas de depósito de material; já a retangular é mais aplicada em processos de grande escala por ser mais barato de construir, no entanto, as arestas se tornam de locais propícios a estagnação e depósito de material (KARL-JORDAN *et al*, 2007).

Um valor comum na literatura de razão entre a altura de líquido e o diâmetro do tanque para se obter uma boa mistura com a menor quantidade de energia despendida é 1, mas algumas pesquisas indicam o valor 0,8 como mais correto (KARL-JORDAN *et al*, 2007).

2.4 Tempo ideal de agitação

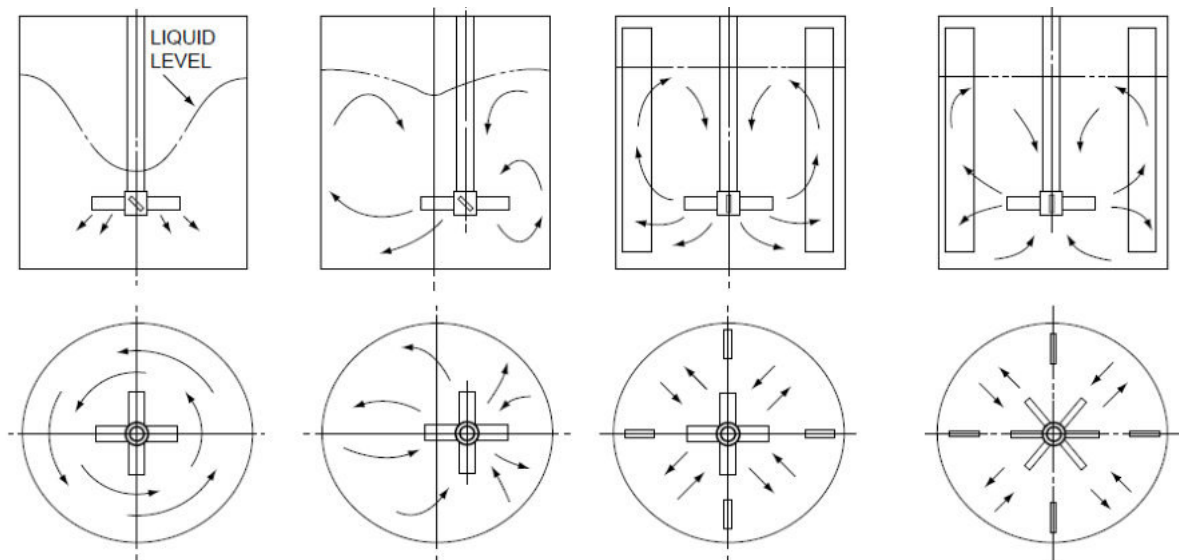
O tempo ideal de agitação pode ser obtido através da inserção de um 'traçador' no meio e, posteriormente, pode ser tomada a concentração em diferentes pontos a fim de se determinar o quão bem homogeneizada está a mistura (KARL-JORDAN et al, 2007).

PAUL et al (2004) também cita a utilização de *softwares* de simulação que, através de CFD, podem fornecer resultados para sistemas que ainda não foram estabelecidas correlações de cálculo.

2.5 Perfis de agitação

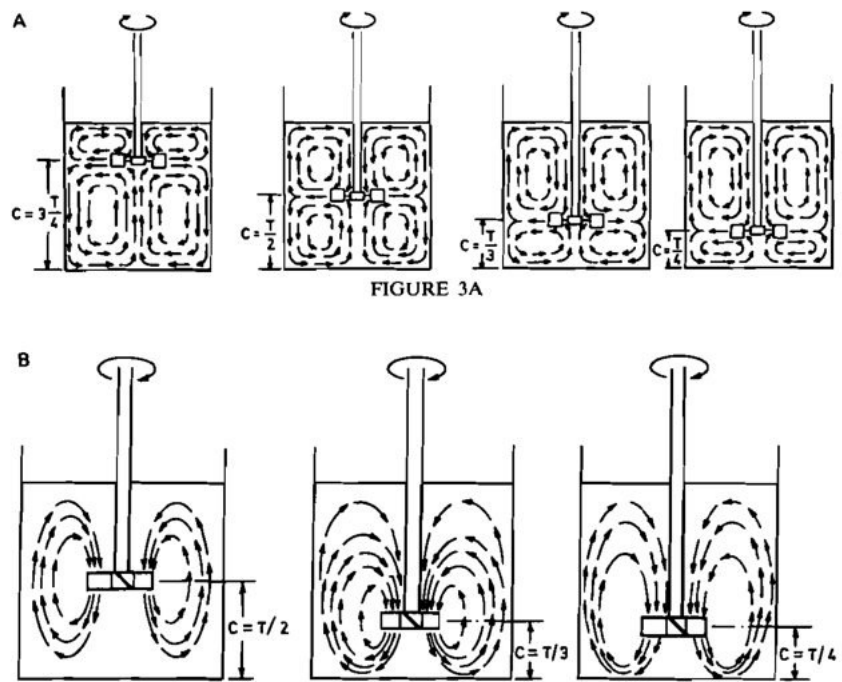
Segundo PAUL et al (2004), a mistura é bastante influenciada pelo perfil de agitação que pode ser afetado pela posição e diâmetro do impelidor, viscosidade do líquido e até o uso de múltiplos impelidores. Couper (2010) e Rewatkar (1991) apresentam alguns exemplos desses perfis que podem ser vistos na Figura 4 e Figura 5 respectivamente:

Figura 4 – Perfis de agitação para misturador sem chicana, com impelidor deslocado, de 4 pás com chicanas e de 6 pás com chicanas



Fonte: Couper (2010).

Figura 5 – Perfis de agitação para agitador em diferentes distâncias ao fundo do tanque



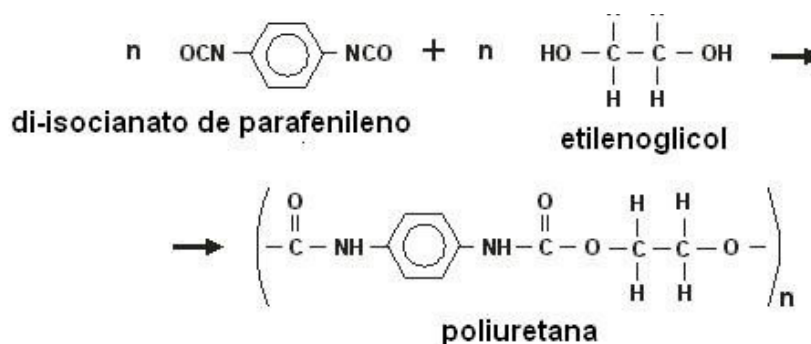
Fonte: Rewatkar (1991).

3 ESPUMAS

Os poliuretanos foram descobertos por Otto Bayer em 1937 e, durante os anos seguintes, encontraram grande espaço no mercado mundial (VILLAR, 2002).

Eles são obtidos a partir da reação de poliadição de isocianatos com um poliol (Figura 6), na qual o isocianato pode ser di ou polifuncional, enquanto o poliol pode ser poliéter, poliéster ou possuir estrutura hidrocarbônica (CANAUD, 2007). Outros reagentes também podem ser aplicados como agentes de cura, agentes de expansão, surfactantes, cargas, agentes antienvelhecimento, corantes, retardantes de chamas, entre outros; sendo a escolha de quais substâncias serão aplicadas depende das características do produto final almejado. (VILLAR, 2002).

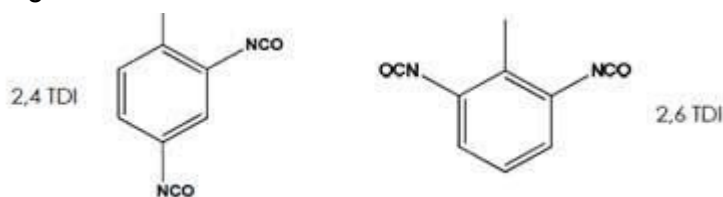
Figura 6 – Reação de formação do poliuretano



3.1 Isocianatos

Como mostrado em Villar (2002), os isocianatos possuem o grupo NCO que reagem com compostos que possuem hidrogênios ativos como poliéters, poliéster e água. A maioria dos utilizados comercialmente são aromáticos, como os a base de diisocianato de tolueno (TDI) (Figura 7):

Figura 7 – Para e meta diisocianatos de tolueno



Fonte: química.com.br (2018)

Além do TDI, podem ser citados o HDI (hexametileno diisocianato), IPDI (isoforona diisocianato), PDI (1.4-fenilenodiiisocianato). Com algumas exceções, os isocianatos na forma de monômeros apresentam uma elevada pressão de vapor, ou seja, são bem voláteis. Além disso, o contato com olhos e mucosas causam extrema irritação. Por essa razão, é comum que sejam transformados em pré-polímeros, a fim de aumentar seu peso molecular e, conseqüentemente, reduzir sua volatilidade (CANAUD, 2007).

3.2 Polióis

Os polióis correspondem a um grande grupo de compostos que possuem grupos hidroxilas que reagem com os isocianatos e formam os poliuretanos.

Em geral, os mais utilizados são os poliéteres, especialmente os provenientes do poli (óxido de propileno) glicol e copolímeros de poli (óxido de propileno/etileno) glicóis (VILLAR, 2002). Villar (2002) ainda explica que a rigidez da espuma está atrelada ao tamanho da sua cadeia, onde polióis com cadeias de 250 a 1000 gera espumas mais rígidas, e de 1000 a 3000 geram espumas flexíveis. Isso se dá porque polióis com cadeias curtas tendem a formar ligações mais rígidas formadas por grupos uretanos provenientes da polimerização; enquanto os de cadeia longa formam ligações mais flexíveis derivadas das cadeias carbônicas (SZYCHER, 2012).

3.3 Catalisadores

Os catalisadores são responsáveis por incrementar a velocidade de reação e aumentar a seletividade. Dois tipos que podem ser citados são (VILLAR, 2002):

- a) Organometálicos: Essa classe de catalisadores é empregada com foco na reação de polimerização, sendo os mais comuns os compostos de estanho.
- b) Aminas terciárias: Esses catalisadores apresentam seletividade tanto para reação de polimerização, como a de expansão que ocorre entre isocianato e água, gerando dióxido de carbono.

Villar (2002) ainda chama atenção para o fato de que a aplicação desses dois tipos de catalisadores juntos acarreta um aumento de quase 5 vezes nas suas atividades.

3.4 Agentes de expansão

O agente de expansão mais comumente utilizado é a água e a sua reação com o isocianato gera dióxido de carbono que atuará na expansão da espuma (VILLAR, 2002).

3.5 Surfactantes

Os componentes que geram a espuma apresentam estruturas polares e apolares que dificultam a sua mistura. A fim de promover a homogeneização e emulsão da mistura, são utilizados surfactantes (silicones) que, além dessa função, também são responsáveis por promover a nucleação das bolhas de ar e por estabilizar a espuma em crescimento (VILLAR, 2002).

4 SIMULAÇÃO

4.1 Ambiente de simulação ANSYS Fluent

O ANSYS Fluent é um “*software* de simulação conhecido pela sua capacidade de modelar físicas avançadas e pela sua acurácia na indústria”(ANSYS).

Segundo a empresa ANSYS, o ANSYS Fluent é um poderoso *software* de simulação para fluidos que apresenta novos potenciais para análises CFD e entre suas aplicações estão: modelagem de turbulência, fluxos multifásicos, acústica, combustão, transferência de calor, entre outros.

4.2 Geometria

Para o desenvolvimento de peças 3D, diversas opções de softwares se encontram no mercado como AutoCAD, Soliedge e Solidworks. Este último é um dos melhores uma vez que possui um ambiente intuitivo, um vasto acervo de tutoriais e apresenta bastante robustez. Além disso, ele permite a simulação de alguns aspectos como resistência mecânica e aquecimento.

Além disso, essas geometrias geradas podem ser alteradas e melhoradas com ferramentas presentes no próprio *software* em que será gerada a simulação.

4.3 Modelos

Para a realização das simulações é necessária a determinação dos modelos que descrevam o processo a serem trabalhados levando em consideração suas características.

4.3.1 Modelos de escoamento

As equações de NAVIER (1822) - STOKES (1845) permitem a descrição de movimentos tridimensionais de sistemas independente do regime em que ele se apresenta e podem ser apresentadas na forma da Equação 8:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \rho \vec{g} + \mu \nabla^2 \vec{V} \quad (8)$$

A grande desvantagem desses equacionamentos está no fato de só possuírem solução analítica para casos simplificados (FOX, 2011).

Reynolds foi responsável por introduzir um conceito de velocidade instantânea formada pela velocidade média somada a variações como mostrado na Equação 9.

$$u'_i = U_i + u_i \quad (9)$$

Onde:

u'_i : velocidade instantânea;

U_i : velocidade média;

u_i : variação da velocidade.

No entanto, apesar da simplificação do trato da velocidade que essa abordagem gera, mais variáveis, como o tensor tensão de Reynolds ($-\rho u_i u_j$), são introduzidas sem a introdução de novas equações.

Com isso, foram desenvolvidos modelos que permitam descrever esses casos, entre eles o modelo k- ϵ (LANDERS, 1972) e o modelo k- ω (WILCOX, 1988) onde o termo k representa a energia cinética turbulenta e os termos ϵ, ω representam a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta. Outro modelo a ser citado é o SST (Shear Stress Transport) (MENTER, 1994) que utiliza uma combinação “da robustez e acurácia do modelo k- ω e a independência do modelo k- ϵ nas camadas mais externas da camada limite” (MENTER, 1994); além de realizar uma modificação no modelo k- ϵ .

Abaixo são apresentados os equacionamentos que descrevem esses modelos como apresentado no ANSYS'S FLUENT THEORY GUIDE:

4.3.1.1 Modelo k- ϵ

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\kappa u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] + G_\kappa + G_b - \rho\epsilon - Y_M + S_\kappa \quad (10)$$

$$\frac{\partial(\rho\epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\epsilon u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{\kappa} (G_\kappa + C_{3\epsilon} G_b) - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{\kappa} + S_\epsilon \quad (11)$$

$$G_\kappa = -\overline{\rho \mu'_i \mu'_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (12)$$

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (13)$$

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \quad (14)$$

Onde:

G_k : geração de energia cinética turbulenta devido aos gradientes de velocidade média;

G_b : geração de energia cinética turbulenta devido aos efeitos de flutuação;

Y_M : contribuição de efeitos de compressibilidade para fluxos com altos números de Mach;

$C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, C_μ : constantes iguais a 1.44, 1.92, 0.09 respectivamente;

σ_k , σ_ε : Números de Prandtl associados a k e ε respectivamente com valores 1 e 1.3 respectivamente;

S_k , S_ε : Termos que podem ser adicionados pelos usuários;

β : coeficiente de expansividade térmica.

4.3.1.2 Modelo $k-\omega$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - Y_k + S_k \quad (15)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \omega u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + G_\omega - Y_\omega + S_\omega \quad (16)$$

$$\mu_t = \alpha^* \rho \frac{k}{\omega} \quad (17)$$

Correção para baixos números de Reynolds:

$$\alpha^* = \alpha_\infty^* \left(\frac{\alpha_0^* + \frac{Re_t}{R_k}}{1 + \frac{Re_t}{R_k}} \right) \quad (18)$$

$$\alpha_\infty^* = 1 \quad (19)$$

$$Re_t = \frac{\rho k}{\mu \omega} \quad (20)$$

$$R_k = 6 \quad (21)$$

$$\alpha_0^* = \frac{\beta_i}{3} \quad (22)$$

$$\beta_i = 0.072 \quad (23)$$

Modelo de geração de turbulência:

$$G_k = -\rho \overline{\mu'_i \mu'_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (24)$$

$$G_\omega = \frac{\alpha\omega}{\kappa} G_\kappa \quad (25)$$

$$\alpha = \frac{\alpha_\infty}{\alpha^*} \left(\frac{\alpha_0^* + \frac{Re_t}{R_\omega}}{1 + \frac{Re_t}{R_\omega}} \right) \quad (26)$$

$$\alpha_\infty = 0.52 \quad (27)$$

$$R_\omega = 2.95 \quad (28)$$

Modelagem da dissipação dos termos κ - ω :

Para κ :

$$Y_\kappa = \rho\beta^* f_\beta^* \kappa \omega \quad (29)$$

$$f_\beta^* = \begin{cases} 1, & x \leq 0 \quad (30) \\ \frac{1 + 680\chi_\kappa^2}{1 + 400\chi_\kappa^2}, & x > 0 \quad (31) \end{cases}$$

$$\chi_\kappa = \frac{1}{\omega^3} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (32)$$

$$\beta^* = \beta_i^* [1 + \zeta^* F(M_t)] \quad (33)$$

$$\beta_i^* = \beta_\infty^* \left(\frac{4/15 + (Re_t/R_\beta)^4}{1 + (Re_t/R_\beta)^4} \right) \quad (34)$$

$$\zeta^* = 1.5 \quad (35)$$

$$R_\beta = 8 \quad (36)$$

$$\beta_\infty^* = 0.09 \quad (37)$$

Para ω :

$$Y_\omega = \rho\beta f_\beta \omega^2 \quad (38)$$

$$f_\beta = \frac{1 + 70\chi_\omega}{1 + 80\chi_\omega} \quad (39)$$

$$\chi_\omega = \left| \frac{\Omega_{ij}\Omega_{jk}S_{ki}}{(\beta_\infty^*\omega)^3} \right| \quad (40)$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (41)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (42)$$

$$\beta = \beta_i \left[1 - \left(\frac{\beta_i^*}{\beta_i} \right) \zeta^* F(M_t) \right] \quad (43)$$

$$\beta_i = 0.072 \quad (44)$$

Correção de compressibilidade:

$$F(M_t) = \begin{cases} 0, & M_t \leq M_{t0} \quad (45) \\ M_t^2 - M_{t0}^2, & M_t > M_{t0} \quad (46) \end{cases}$$

$$M_t^2 = \frac{2\kappa}{a^2} \quad (47)$$

$$M_{t0} = 0.25 \quad (48)$$

$$a = \sqrt{\gamma RT} \quad (49)$$

Onde:

G_κ, G_ω : representam a geração dos termos κ e ω ;

Y_κ, Y_ω : representam a dissipação dos termos κ e ω ;

α^*, β^* : coeficientes associados ao equacionamento propostos por WILCOX(1988).

4.3.1.3 Modelo SST

Como dito em MENTER (1994), o modelo SST converte o modelo k- ϵ para uma formulação similar ao κ - ω e os une através de uma função que ‘ativa’ o modelo k- ϵ em regiões de escoamento livre e ‘ativa’ o modelo κ - ω para regiões próximas a paredes. Com isso, essa conversão gera um termo de difusão cruzada. Além disso, a tensão de cisalhamento turbilhonar é levada em mais consideração.

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\kappa u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] + \widetilde{G}_\kappa - Y_\kappa + S_\kappa \quad (50)$$

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\kappa u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] + G_\omega - Y_\omega + D_\omega + S_\epsilon \quad (51)$$

$$\mu_t = \frac{\rho\kappa}{\epsilon} \frac{1}{\max \left[\frac{1}{\alpha^*}, \frac{SF_2}{a_1\omega} \right]} \quad (52)$$

$$\sigma_\kappa = \frac{1}{\frac{F_1}{\sigma_{\kappa,1}} + \frac{1-F_1}{\sigma_{\kappa,2}}} \quad (53)$$

$$\sigma_\omega = \frac{1}{\frac{F_1}{\sigma_{\omega,1}} + \frac{1-F_1}{\sigma_{\omega,2}}} \quad (54)$$

$$F_1 = \tanh(\phi_1^4)$$

$$\phi_1 = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{\kappa}}{0.09\omega y}, \frac{500\mu}{\rho\omega y^2} \right), \frac{4\rho\kappa}{\sigma_{\omega,2} D_{\omega}^+ y^2} \right] \quad (55)$$

$$F_2 = \tanh(\phi_2^2) \quad (56)$$

$$\phi_2 = \max \left(2 \frac{\sqrt{\kappa}}{0.09\omega y}, \frac{500\mu}{\rho\omega y^2} \right) \quad (57)$$

Onde:

y: Distância até a próxima superfície;

D_{ω}^+ : porção positiva do termo de difusão cruzada.

Modelagem da geração de turbulência

$$\widetilde{G}_{\kappa} = \min(G_{\kappa}, 10\rho\beta^*\kappa\omega) \quad (58)$$

$$G_{\omega} = \frac{\alpha}{\nu_t} \widetilde{G}_{\kappa} \quad (59)$$

Sendo que α_{∞} deixa de ser uma constante e é calculado na forma:

$$\alpha_{\infty} = F_1\alpha_{\infty,1} + (1 - F_1)\alpha_{\infty,2} \quad (60)$$

$$\alpha_{\infty,1} = \frac{\beta_{i,1}}{\beta_{\infty}^*} - \frac{\kappa^2}{\sigma_{\omega,1}\sqrt{\beta_{\infty}^*}} \quad (61)$$

$$\alpha_{\infty,2} = \frac{\beta_{i,2}}{\beta_{\infty}^*} - \frac{\kappa^2}{\sigma_{\omega,2}\sqrt{\beta_{\infty}^*}} \quad (62)$$

Modelagem da dissipação da turbulência

$$Y_{\kappa} = \rho\beta^*\kappa\omega \quad (63)$$

$$Y_{\kappa} = \rho\beta\omega^2 \quad (64)$$

$$\beta_i = F_1\beta_{i,1} + (1 - F_1)\beta_{i,2} \quad (65)$$

Termo de difusão cruzada

$$D_{\omega} = 2(1 - F_1)\rho\sigma_{\omega,2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (66)$$

4.3.2 Métodos multifásicos

Dentro do ANSYS Fluent, como dito no ANSYS Fluent Theory Guide(2012), uma fase pode ser entendida além dos conceitos básicos de sólido, líquido e gás, podendo ter-se um sistema composto, por exemplo, de líquidos com diferentes características, mas expostos ao mesmo campo de fluido.

Os modelos que descrevem esses movimentos multifásicos utilizam a abordagem Euler-Euler em que trata as fases como contínuas e interpenetrantes. Abaixo, são destacados os modelos de mistura e o euleriano.

4.3.2.1 Modelo de mistura

Como descrito no ANSYS Fluent Theory Guide (2012), o modelo de mistura é um modelo mais simplificado que pode ser usado para fluxos em diferentes velocidades assumindo equilíbrio em pequenas extensões.

Ainda no guia é dito que é possível modelar 'n' fases resolvendo as equações de movimento e continuidade para a mistura, e aplicando equações de frações molares para as fases secundárias. Entre suas aplicações, é citado a modelagem de ciclones.

Também é dito que ele é uma boa opção para substituir uma modelagem completamente euleriana desde que o número de variáveis não seja grande.

Entre as limitações, é citado que se deve usar o *solver pressure-based* e deve-se evitar fluidos com viscosidades muito baixas (não é citado um intervalo).

As equações que ele utiliza como a da continuidade, como pode ser vista em Fox *et al* (2014), e a de momento, derivada das equações de Navier(1822)-Stokes(1845), e podem ser vistas abaixo nas Equações 67 a 73:

Fração volumétrica (θ_k):

$$\sum_{k=1}^n \theta_k = 1 \quad (67)$$

Equação da continuidade:

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \vec{v}_m) = 0 \quad (68)$$

$$\vec{v}_m = \frac{\sum_{k=1}^n \theta_k \rho_k \vec{v}_k}{\rho_m} \quad (69)$$

$$\rho_m = \sum_{k=1}^n \theta_k \rho_k \quad (70)$$

Equação do momento:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_m \vec{v}_m) + \nabla \cdot (\rho_m \vec{v}_m \vec{v}_m) \\ & = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu_m (\nabla \vec{v}_m + \nabla \vec{v}_m^T)] + \rho_m \vec{g} + \vec{F} + \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^n \theta_k \rho_k \vec{v}_{dr,k} \vec{v}_{dr,k} \right) \quad (71) \end{aligned}$$

$$\mu_m = \sum_{k=1}^n \theta_k \mu_k \quad (72)$$

$$\vec{v}_{dr,k} = \vec{v}_k - \vec{v}_m \quad (73)$$

4.3.2.2 Modelo Euleriano

É dito pelo guia ser o método mais robusto em que as equações serão aplicadas tanto para a mistura, como para cada fase, sendo possível aplicá-lo para um grande número de sistemas. Além disso, o número de fases a serem modeladas só é limitada pela capacidade computacional. Um revés é que a modelagem pode apresentar problemas de convergência.

Abaixo são apresentadas as equações aplicadas por esse método (Equações 74 a 79):

Equação Fração Volumétrica:

$$V_k = \int_V \theta_k dV \quad (74)$$

$$\sum_{k=1}^n \theta_k = 1 \quad (75)$$

$$\hat{\rho}_k = \theta_k \rho_k \quad (76)$$

Onde:

V_k : volume da fase k;

$\hat{\rho}_k$: densidade efetiva da fase k.

Equação da conservação da massa:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\theta_k \rho_k) + \nabla \cdot (\theta_k \rho_k \vec{v}_k) = \sum_{k=1}^n (\dot{m}_{lk} - \dot{m}_{lk}) + S_q \quad (77)$$

Onde:

\vec{v}_k : velocidade da fase k;

$\dot{m}_{lk}, \dot{m}_{lk}$: caracteriza os mecanismos de transferência de massa entre as fases l-ésima e k-ésima;

S_q : termo que pode ser adicionado pelo usuário.

Conservação do momento:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\theta_k \rho_k \vec{v}_k) + \nabla \cdot (\theta_k \rho_k \vec{v}_k \vec{v}_k) \\ & = -\theta_k \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}_k + \theta_k \rho_k \vec{g} + \sum_{l=1}^n (\vec{R}_{lk} + \dot{m}_{lk} \vec{v}_{lk} - \dot{m}_{kl} \vec{v}_{kl}) \\ & + (\vec{F}_k + \vec{F}_{lift,k} + \vec{F}_{vm,k}) \quad (78) \end{aligned}$$

Onde:

$\bar{\tau}_k$: tensor tensão da fase k;

\vec{F}_k : força externa sobre a fase k;

$\vec{F}_{lift,k}$: força de 'flutuação' da fase k em uma fase l;

$\vec{F}_{vm,k}$: força mássica virtual;

\vec{R}_{lk} : força de interação entre as fases.

4.4 Solver

Para o desenvolvimento da simulação, o ANSYS Fluent segue os seguintes passos como descrito no ANSYS Fluent Theory Guide (2012):

- a) Os domínios são divididos em volumes de controle;
- b) A equações que governam o processo são integradas ao longo desses volumes de controle, gerando equações algébricas discretizadas para as diferentes variáveis como a velocidade;
- c) Essas equações geradas são linearizadas e o sistema de equações formado é resolvido.

Ainda são apresentados dois métodos numéricos (*solvers*) a serem utilizados a depender do problema apresentado. Ambos utilizam o método do volume-finito desenvolvido por McDONALD et al (1970), mas se diferenciam na abordagem.

4.4.1 Pressure-Based Solver

Esse método está incluído numa classe conhecido como métodos de projeção (CHORIN, 1968) utilizados para 'resolver' a equação de Navier(1822)-Stokes(1845).

Nessa classe, a equação da continuidade é satisfeita pela solução de uma equação de pressão ou de correção da pressão (ANSYS Fluent Theoy Guide,2012).

Ainda é possível escolher entre dois tipos de algoritmos para esse método: o segregado, onde as equações são resolvidas uma após a outra, o que retarda a convergência, mas demanda menos memória; e o acoplado, onde a solução converge mais rápido, mas a demanda de memória pode até dobrar.

O ANSYS Fluent User's Guide também recomenda a utilização desse *solver* para casos que abordem fluidos incompressíveis e pouco compressíveis.

4.4.2 Density-Based Solver

Esse método soluciona as equações de continuidade e momento de forma simultânea agrupando essas equações em vetores. Variáveis adicionais são calculadas posteriormente.

O ANSYS Fluent User's Guide recomenda a utilização desse método para casos que abordem fluidos compressíveis a altas-velocidades.

5 METODOLOGIA

5.1 Considerações gerais

O processo de mistura selecionado para este estudo ocorre em uma empresa têxtil da cidade de Maracanaú e visa a produção de blocos cilíndricos de espumas de poliuretano.

A análise será feita principalmente sobre o impacto do tipo de impelidor. Junto a isso, focou-se no aspecto mecânico da mistura, sem levar especificamente em consideração os efeitos de troca térmica e transferência de massa. O primeiro porque o ambiente real de operação é climatizado e possui temperatura controlada; o segundo para simplificar o processo de simulação uma vez que o estudo da transferência de massa em processos de agitação e mistura líquido-líquido é extremamente complexo (COUPER, 2010).

Junto a isso, 3 tipos de espumas de poliuretano foram elencados para serem analisados: D10, D30 e D40. Essas escolhas se deram porque as espumas D10 e D30 são espumas mais simples, enquanto a espuma D40 é uma das mais produzidas.

Outra informação relevante é que o processo de mistura é realizado em etapas conhecidas como 'batidas'. A batida a ser observada aqui será a que envolve a mistura do catalisador organometálico, uma vez que é de extrema importância que ele esteja bem 'espalhado' para garantir homogeneidade.

Um aspecto importante a se atentar é que algumas informações são consideradas segredo industrial e não puderam ser diretamente expostas neste trabalho. Abaixo, são elencadas essas informações junto à forma que foi permitido expressá-las:

- a) Nome técnico das substâncias. Por essa razão, serão tratadas por nomes gerais como 'Poliol', 'Copolímero', 'Catalisador', 'Polióis Secundários', 'Aditivos'. A publicação das fichas técnicas e os nomes dos fornecedores também não foi permitida.
- b) Diâmetro do impelidor atual. Através de pesquisa e tentativa e erro é que foi obtido o impelidor atualmente utilizado, tornando-o específico do processo e considerado, assim, segredo industrial. Tanto o valor desse diâmetro como dados que poderiam levar à obtenção dele, como o número de Reynolds, serão apresentados como uma faixa de valores.
- c) Valores das composições das espumas. As composições das misturas que formam a espuma serão apresentadas em termos das frações volumétricas.

5.2 Dados do processo atual

O diâmetro do tanque de mistura é de 0,536 m e é o mesmo para todas as espumas. A velocidade de rotação utilizada na 'batida' analisada é de 500 rpm em todas as misturas. Na Tabela 2 estão apresentados os valores de fração volumétrica das composições das espumas no geral:

Tabela 2.a – Composições das espumas de poliuretano

ESPUMA	POLIOL	COPOLÍMERO	CATALISADOR ORGANOMETÁLICO
D10	0,8742	0	0,0033
D30	0,8549	0,0516	0,0017
D40	0,1272	0,7110	0,0008

Tabela 2.b – Composições das espumas de poliuretano

ESPUMA	POLIOL SECUNDÁRIO	ÁGUA	SILICONE	AMINA
D10	0	0,0426	0,0777	0,0022
D30	0,0436	0,0345	0,0121	0,0016
D40	0,1249	0,0247	0,0100	0,0014

Fonte: próprio autor.

Na Tabela 3 abaixo, estão apresentados os valores de densidade e viscosidade dos componentes obtidos através das fichas técnicas dos compostos.

Tabela 3 – Valores de densidade e viscosidade para os componentes da mistura

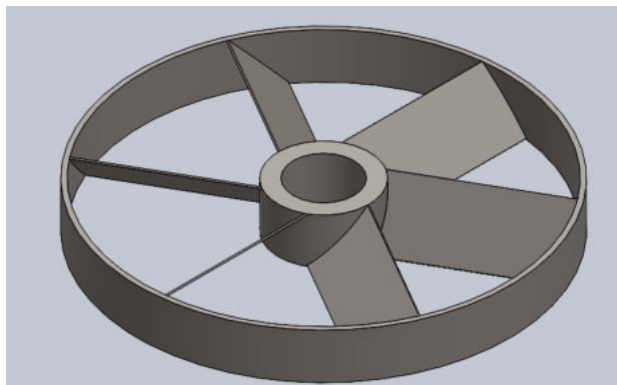
COMPOSTO	DENSIDADE (kg/m ³)	VISCOSIDADE (kg/m*s)
POLIOL	1020	0,58
COPOLÍMERO	1043	6,79
CATALISADOR	1250	0,26
POLIÓL SECUNDÁRIO	1030	3,84
ÁGUA	998	0,001
AMINA	1040	0,305
SILICONE	1036	0,65

Fonte: próprio autor.

5.2.1 Impelidor atual

O impelidor atualmente utilizado é similar ao tipo turbina com pás inclinadas, com a diferença de possuir um anel unindo as pontas das pás similar ao apresentado na Figura 8 gerada no *software SolidWorks*. Seu diâmetro é superior a 200 mm e é montado centralizado a uma distância de, aproximadamente, 0,02 m da região inferior do tanque. Ele é acoplado através de uma porca na extremidade da haste de rotação a fim de facilitar sua retirada para a realização de limpezas.

Figura 8 – Impelidor atual



Fonte: próprio autor.

5.3 Determinação do regime de escoamento

Primeiramente, foram estimados valores de densidade e viscosidade média levando em conta as proporções apresentadas na Tabela 3 utilizando as Equações 78 e 79:

$$\rho_m = \sum \theta_i \rho_i \quad (78)$$

$$\mu_m = \sum \theta_i \mu_i \quad (79)$$

Onde:

ρ_m : densidade média;

μ_m : viscosidade média;

θ_i : fração volumétrica do composto i;

μ_i : viscosidade do composto i;

ρ_i : densidade do composto i.

De posse desses valores, foi possível estimar a faixa do valor de Reynolds no processo atual. A Equação 2 foi utilizada como é apresentada no tópico NÚMEROS ADIMENSIONAIS e é rerepresentada abaixo:

$$Re = \frac{\rho N d_i^2}{\mu} \quad (2)$$

5.4 Escolha dos impelidores propostos

A partir da teoria exposta por Karl-Jordan *et al* (2007) e Joshi *et al* (2012), foram elencados os impelidores do tipo propulsor de 3 pás e do tipo turbina Rushton de 6 pás com 4 chicanas para se analisar o efeito que o tipo de impelidor poderia trazer.

5.4.1 Posição dos impelidores propostos

Seguindo a metodologia de Dickey (1984), estipulou-se que a distância ao fundo deveria ser 1/3 da altura de líquido. Para esse cálculo, levou-se em

consideração que a montagem é mesma para todas as espumas assim como ocorre no processo real. Dito isso, tomou-se por base a altura de líquido da espuma D10 por ser a menor altura e corresponde a 0,138 m.

Quanto à distância às paredes do tanque, a turbina Rushton foi montada centralizada, enquanto o propulsor é deslocado do centro para compensar a não presença de chicanas (COUPER, 2010). Na literatura consultada, não se observou um valor exato para essa distância ao centro, sendo dito em Karl-Jordan *et al* (2007) que deve se observar que o impelidor muito próximo à parede do tanque pode gerar regiões de fluxo limitado. Sabendo disso, foi adotado o valor de 50% do diâmetro do impelidor.

5.4.2 Dimensionamento dos impelidores propostos

5.4.2.1 Propulsor

Para o dimensionamento do propulsor, tomou-se a informação apresentada por Joshi *et al* (2012) e estipulou-se que o diâmetro do impelidor deveria ser de 30% do diâmetro do tanque. Já seu formato foi baseado nos produtos do catálogo da empresa TOHKEMY CORPORATION.

Figura 9 – Propulsor industrial



Fonte: TOHKEMY CORPORATION

5.4.2.2 Turbina rushton

A turbina Rushton com chicanas foi dimensionada utilizando as Equações 80 a 83, apresentadas por KARL-JORDAN *et al* (2007) e V. W. UHL *et al* (1966).

$$D_i = \frac{D_T}{5} \quad (80)$$

$$D_a = \frac{2}{3} D_i \quad (81)$$

$$A = L = \frac{D_i}{5} \quad (82)$$

$$W = \frac{D_T}{12} \quad (83)$$

5.4.3 Geometria dos impelidores

Os esboços 3D dos impelidores foram gerados através do *software SolidWorks*.

Para a geração da geometria do impelidor tipo turbina, utilizou-se de processos de extrusão, filetagem e padrão de preenchimento. Para o propulsor, além dos processos já citados, aplicou-se operações de superfície como geração por *loft* e corte por perfil de curva.

5.4.4 Regime de escoamento

Foram calculados os números de Reynolds para cada impelidor. Para esse cálculo, foi levado em consideração as propriedades estimadas das misturas na produção das espumas (viscosidade média e densidade média). A equação utilizada é a mesma apresentada no tópico NÚMEROS ADIMENSIONAIS e é reapresentada abaixo:

$$Re = \frac{\rho N d_i^2}{\mu} \quad (2)$$

5.5 Ambiente de simulação

Todas as simulações foram realizadas através do ANSYS Fluent tendo como aspectos gerais:

- a) Os domínios que continham a mistura consistiam em basicamente 2: um interno, menor, diâmetro de 0,3 m (maior que o impelidor, menor que o do tanque) mais próximo ao impelidor, ao qual seria atribuído uma velocidade de rotação; um externo, maior, mesmo diâmetro do tanque e estático;
- b) As malhas continham de 300000 a 500000 células, a depender da espuma analisada, com formatos hexaédricos nas regiões mais distantes do impelidor e tetraédricos nas regiões mais próximas. Essa malha mista se deu porque o *software* não permitia gerar uma malha hexaédrica próxima ao impelidor;
- c) Utilizou-se o *solver pressure-based* uma vez que havia apenas líquidos incompressíveis;
- d) Foi-se adotado um sistema de estado transiente com 1000 passos e cada passo de 0,01s com 15 iterações. Passos maiores não geravam dados consistentes, passos menores estavam tornando a simulação muito mais lenta e a escolha de 15 iterações se deu por recomendação do ANSYS User's Guide;
- e) A inicialização se deu através dos valores de frações volumétricas dos respectivos processos sendo inicializados no domínio mais interno;
- f) Algumas das informações utilizadas deu-se pelo uso de dados padrões do próprio ambiente de simulação. Uma vez que esses dados foram mantidos os mesmo para as diferentes montagens de impelidores, a comparação, em um primeiro momento, não deve ser comprometida.

- g) Utilizou-se uma licença de estudante o que acarretou algumas limitações como o número de células que compunham as malhas e os métodos de inicialização disponíveis.

5.5.1 Simulações iniciais

Em um primeiro momento, buscou-se realizar simulações com todos os elementos que compunham a mistura. Para isso, optou-se pelo método Euleriano que, como mostrado no ANSYS THEORY'S GUIDE, é bem mais robusto, mas consome bem mais memória. Além disso, para os cálculos envolvendo o 'escoamento' da mistura, optou-se pelo método k- ϵ padrão.

5.5.2 Simulações intermediárias

Foi percebido que a presença de todas as substâncias, aliada ao método Euleriano, estava tornando o processo de cálculo muito oneroso, além dos resultados instáveis não permitirem uma interpretação mais concreta.

Por isso, foram realizadas simulações intermediárias mais simplificadas com apenas duas substâncias sendo utilizadas: a com maior fração volumétrica e o catalisador organometálico. Assim, seria possível perceber a distribuição do catalisador na fase mais abundante. As frações volumétricas para esse caso estão apresentadas na Tabela 4:

Tabela 4 – Composições das misturas de componente mais abundante e catalisador

ESPUMA	POLIOL	COPOLÍMERO	CATALISADOR
D10	0,9962	0	0,0038
D30	0,9980	0	0,0020
D40	0	0,9989	0,0011

Fonte: próprio autor.

O método utilizado para os componentes foi o de Mistura, pois ele não apresenta uma demanda computacional tão alta como o Euleriano. Esse método, o de Mistura, é utilizado por Madhania *et al* (2017) para uma análise de dois componentes líquidos em um agitador. Além disso, um estudo feito em ciclones por Saha *et al* (2020) mostrou que a utilização de um ou o outro método não apresentou diferenças significativas para sistemas de poucos componentes.

O método para descrever a viscosidade turbulenta foi o k- ω -SST com correção para números de Reynolds mais baixos. Essa escolha se deu baseada nos trabalhos de Haque *et al.* (2006) e Ameer *et al*(2015) que realizaram simulações utilizando a plataforma ANSYS para a análise de agitações em tanques e obtiveram resultados bem embasados, com destaque para o último que realizou estudos no regime de transição.

Para compensar o efeito de turbulência ‘perdido’ ao se reduzir o diâmetro dos impelidores, foram propostas as seguintes velocidades de rotação: para o impelidor atual utilizou-se a velocidade 500 rpm, para o propulsor foram realizadas simulações de 500 rpm (a mesma velocidade do processo atual) e 1100 rpm (velocidade corrigida devido à mudança de diâmetro), e para a turbina Rushton foi adotada a velocidade de 2500 rpm (velocidade corrigida devido à mudança de diâmetro) como resumido na Tabela 5.

Tabela 5 – Velocidades para simulações intermediárias

IMPELIDOR	VELOCIDADE (RPM)
IMPELIDOR ATUAL	500
PROPULSOR	500,1100
TURBINA	2500

Fonte: próprio autor.

5.5.3 Simulações definitivas

Essas simulações foram realizadas utilizando os modelos descritos anteriormente e também utilizando apenas duas substâncias.

No entanto, para se obter resultados mais representativos com a realidade, em vez da substância mais abundante, foi descrita uma fase nomeada “mistura” caracterizada pela viscosidade e densidade médias estimadas.

Além disso, as alturas de líquido utilizadas foram as do processo real, e também foram propostas as velocidades corrigidas de 1700 rpm para o propulsor e 5600 rpm para a turbina levando em consideração o volume ‘impulsionado’ pelos impelidores como falado por Paul *et al* (2004). Esses valores estão resumidos na Tabela 6.

Tabela 6 – Velocidades para simulações definitivas

IMPELIDOR	VELOCIDADE (RPM)
IMPELIDOR ATUAL	500
PROPULSOR	500,1100,1700
TURBINA	2500,5600

Fonte: próprio autor.

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

6.1 Regime processo atual

As densidades e as viscosidades médias obtidas para o processo atual estão apresentadas na Tabela 7.

Tabela 7 – Densidade e viscosidade estimadas

ESPUMA	$\rho_m(\text{kg/m}^3)$	$\mu_m(\text{kg/ms})$
D10	1021,4	0,533
D30	1021,5	1,02
D40	1037,7	5,43

Fonte: próprio autor.

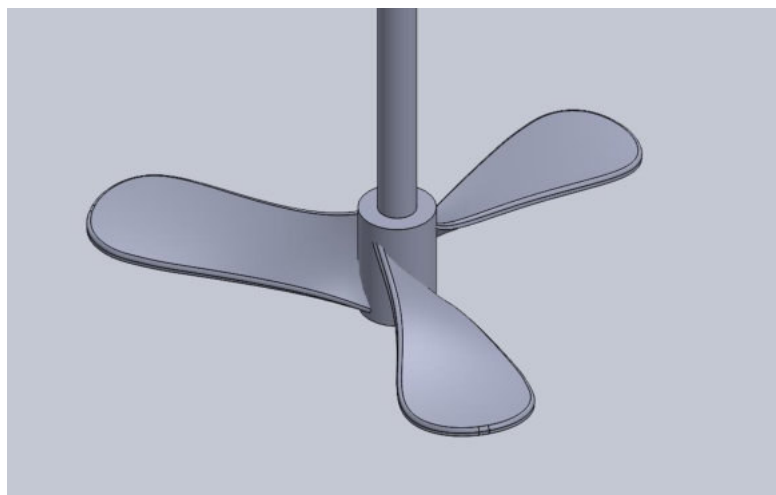
Os números de Reynolds que foram obtidos para cada espuma se encontram em uma faixa de 50 a 1000, o que compreende um regime de transição.

6.2 Dimensionamento dos impelidores

6.2.1 Propulsor

O diâmetro obtido foi de 161 mm e a distância ao centro para montagem foi de 80 mm. A angulação aplicada à pá foi de 45° e ele foi montado a uma distância de 40 mm da região inferior do tanque nas simulações intermediárias e a 46 mm nas simulações definitivas. Na Figura 10, temos o esboço construtivo 3D desse propulsor gerado no *SolidWorks*.

Figura 10 – Propulsor



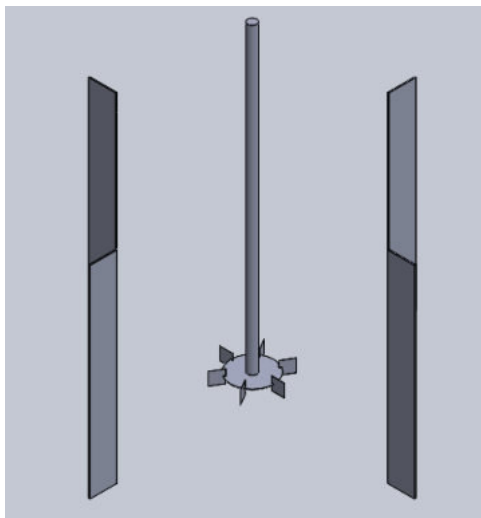
Fonte: próprio autor.

6.2.2 Turbina rushton

Para a turbina Rushton, obteve-se um diâmetro de 107 mm para o impelidor, 72 mm para o diâmetro do disco, 21 mm para as dimensões das pás e ele foi montado a 40 mm da região inferior do tanque nas simulações intermediárias e a 46 mm nas

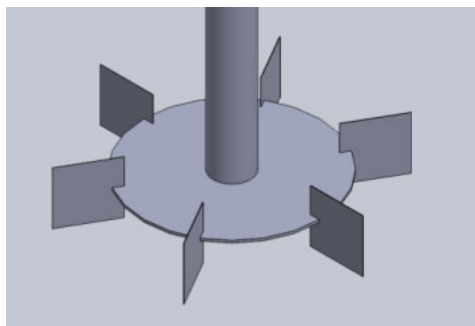
simulações definitivas. Já para as chicanas, foi-se obtido o valor de 45 mm para a sua largura. As Figura 11 e 12 mostram um esboço construtivo desse impelidor.

Figura 11 – Turbina proposta e chicanas



Fonte: próprio autor.

Figura 12 – Turbina



Fonte: próprio autor.

6.3 Regime para os impelidores propostos

Na tabela 8, estão dispostos os números de Reynolds aproximados calculados para cada caso de velocidade:

Tabela 8 – números de Reynolds dos impelidores propostos

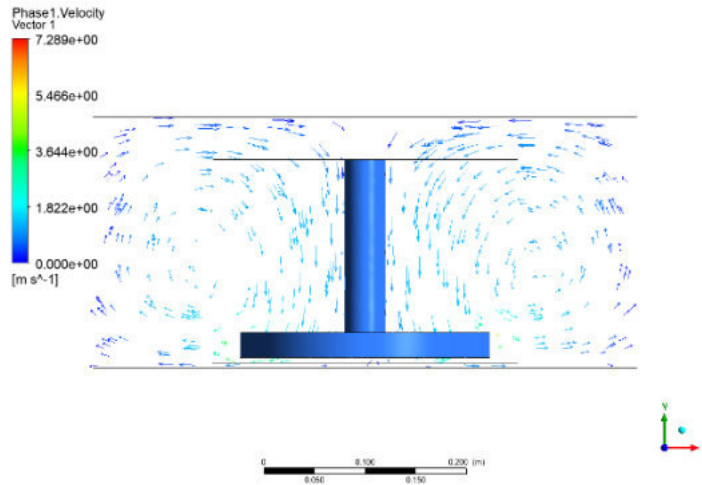
ESPUMA	PROPULSOR (500 rpm)	PROPULSOR (1100 rpm)	PROPULSOR (1700 rpm)	TURBINA (2500 rpm)	TURBINA (5600 rpm)
D10	380	850	1300	850	1950
D30	200	480	750	480	1080
D40	40	100	150	100	210

Fonte: próprio autor.

6.4 Simulações iniciais

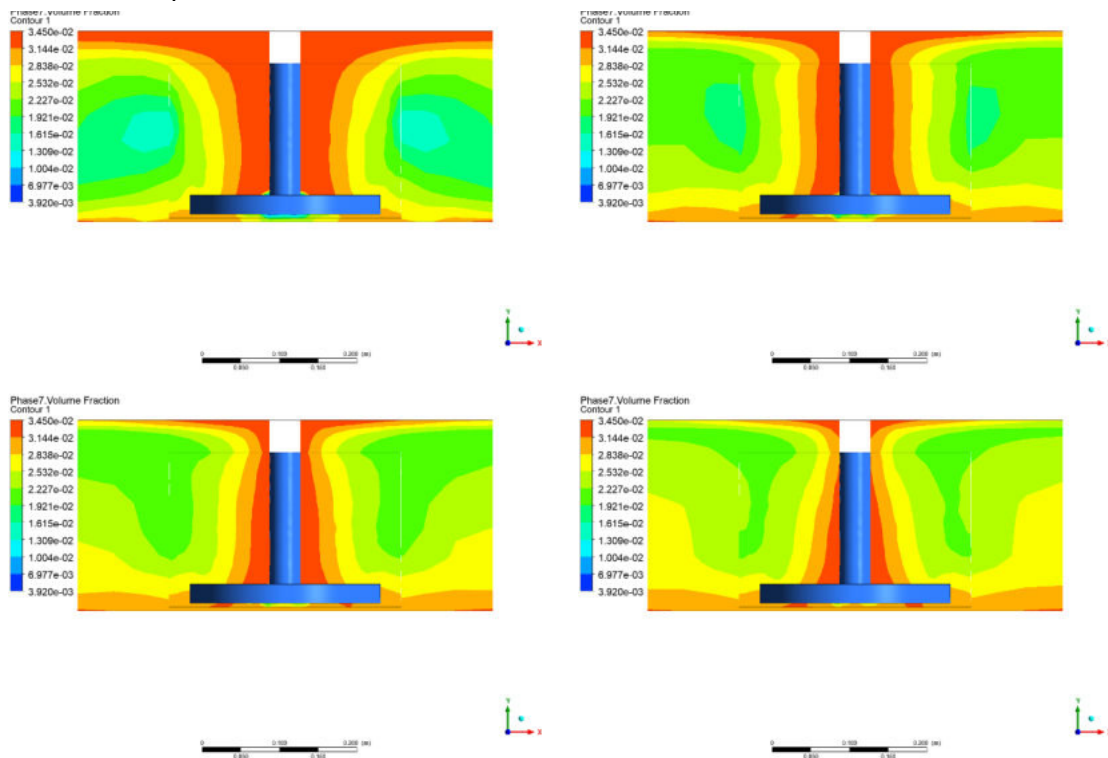
Do modelo proposto no primeiro momento, ainda se conseguiu um resultado interpretável para a espuma D30, com o qual obteve-se um perfil de agitação e de distribuição da fração volumétrica como podemos ver nas Figuras 13 e 14.

Figura 13 – Perfil de agitação espuma D30
simulação inicial



Fonte: próprio autor.

Figura 14 – Perfis de distribuição de fração volumétrica da amina na espuma D30 simulação inicial



Fonte: próprio autor.

No entanto, os outros casos não geraram resultados que pudessem ser bem analisados, o que levou à proposição de um modelo mais simples.

6.5 Simulações intermediárias e finais

Os resultados das simulações foram obtidos de forma gráfica, para facilitar a observação, e foram gerados os perfis de agitação de cada caso para observar se o comportamento do movimento do fluido se assemelha ao proposto na literatura. Para isso, comparou-se esses perfis aos padrões apresentados na seção “2.5 Perfis de agitação”.

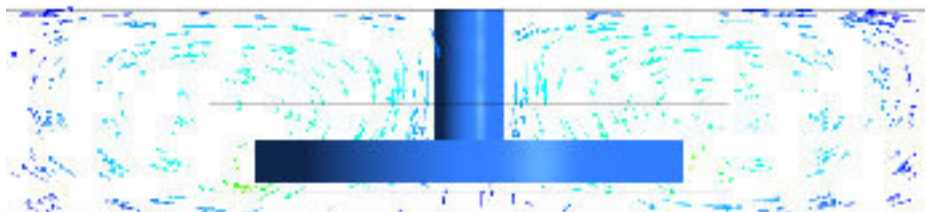
Também foram gerados os perfis de distribuição da concentração catalisador organometálico no meio na forma de fração volumétrica com o intuito de analisar a homogeneidade da mistura. As imagens foram tomadas nos instantes $t=0,5s; 1s; 1,5s; 2s; 5,5s; 6s; 9,5s$ e $10s$; e podem ser observadas a seguir, onde cores próximas ao azul representam concentrações mais baixas e as próximas ao vermelho concentrações mais altas.

6.5.1 Simulações intermediárias

6.5.1.1 Espuma D10

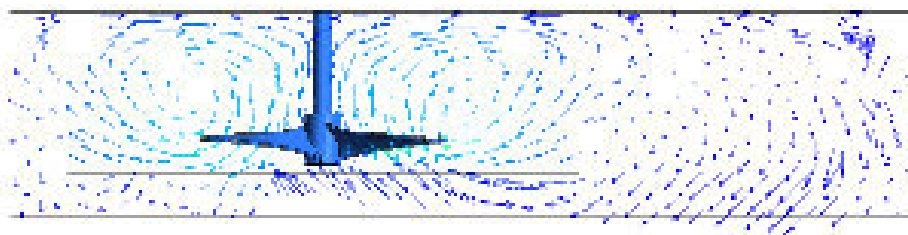
6.5.1.1.1 Perfis de agitação

Figura 15 – Perfil de agitação impelidor atual



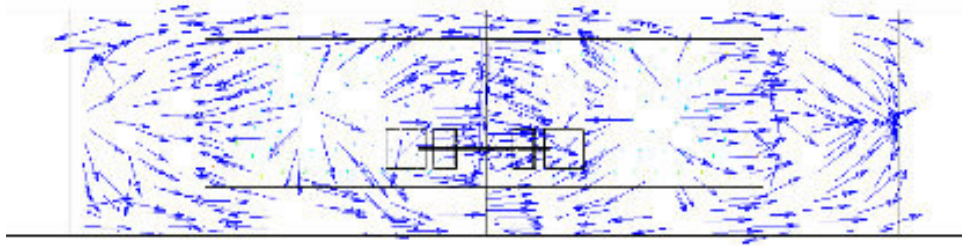
Fonte: próprio autor.

Figura 16 – Perfil de agitação propulsor



Fonte: próprio autor.

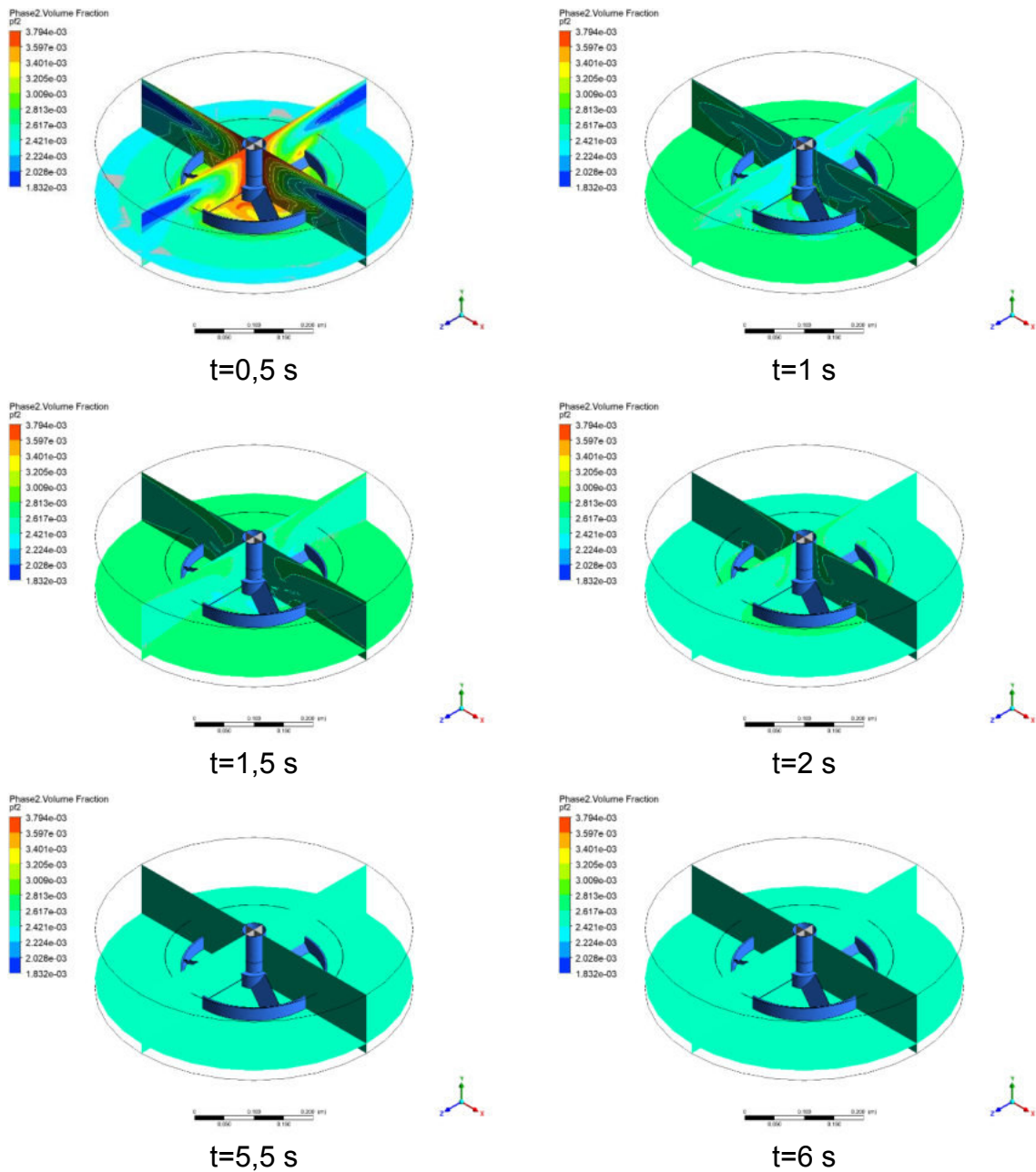
Figura 17 – Perfil de agitação turbina Rushton

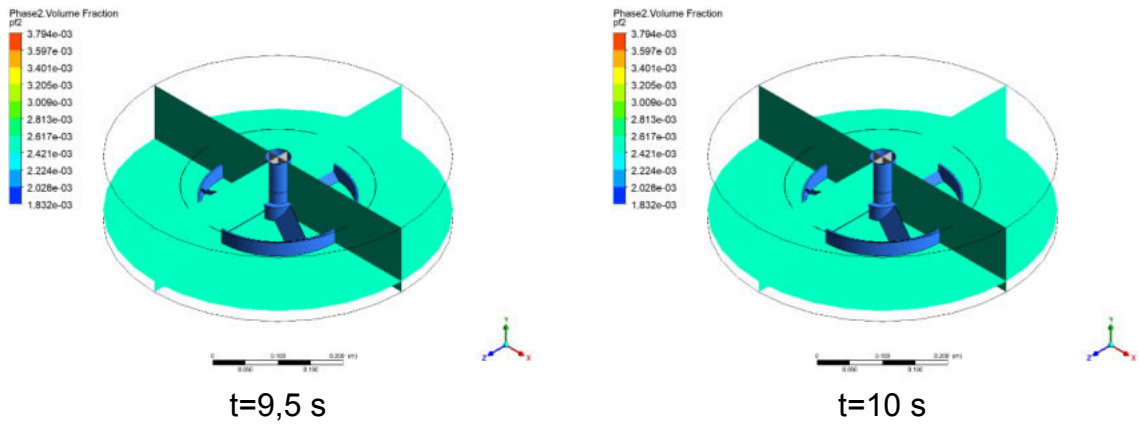


Fonte: próprio autor.

6.5.1.1.2 Perfis de distribuição do catalisador

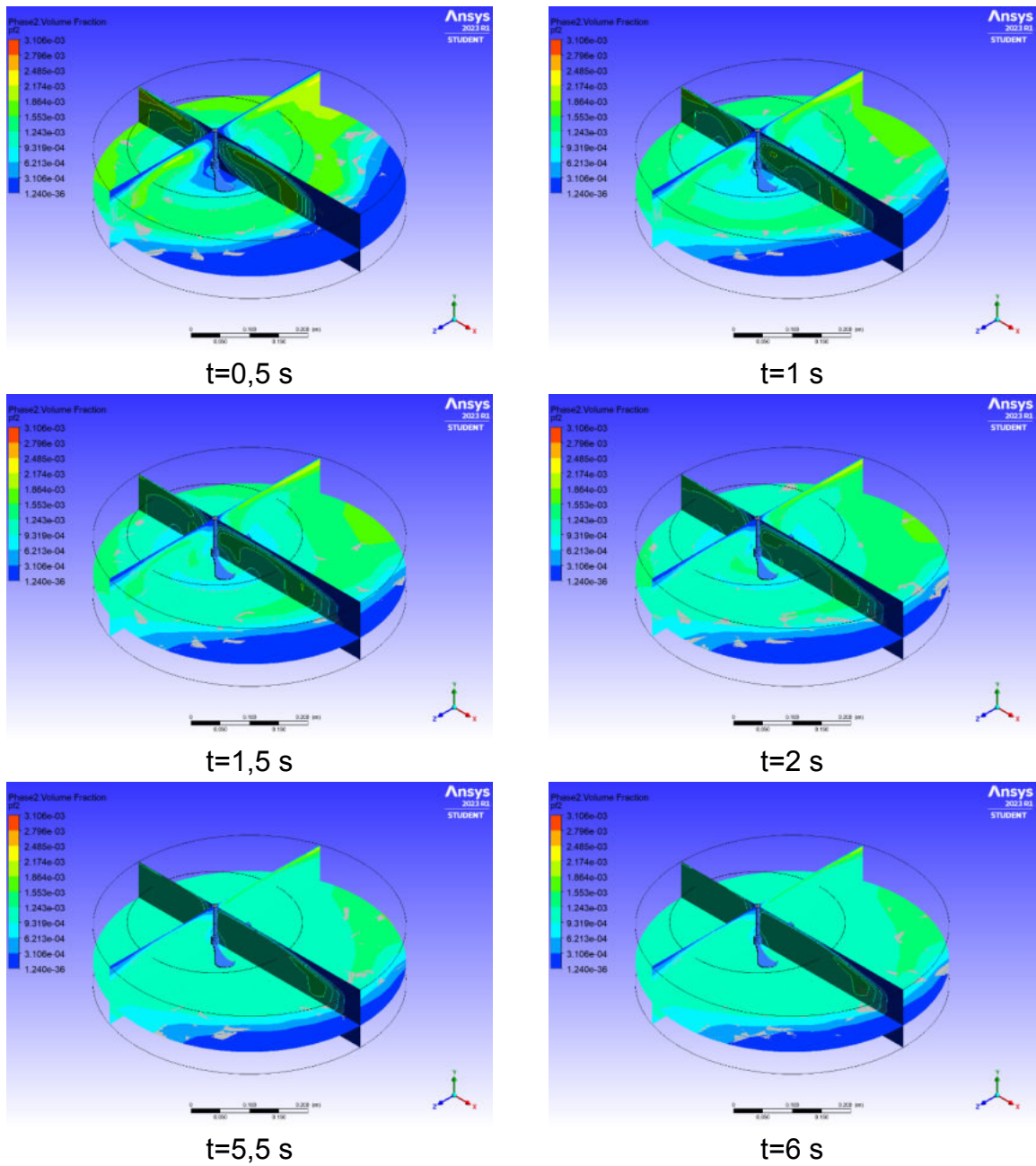
Figura 17 – Perfis de distribuição impelidor atual

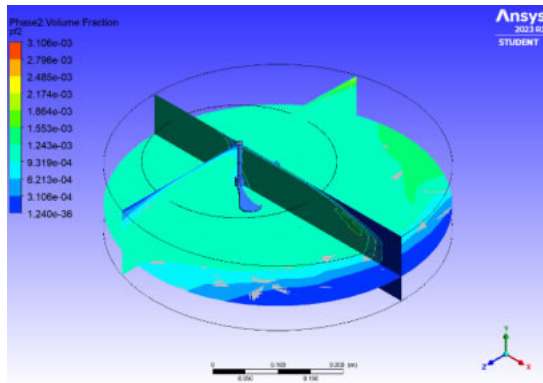




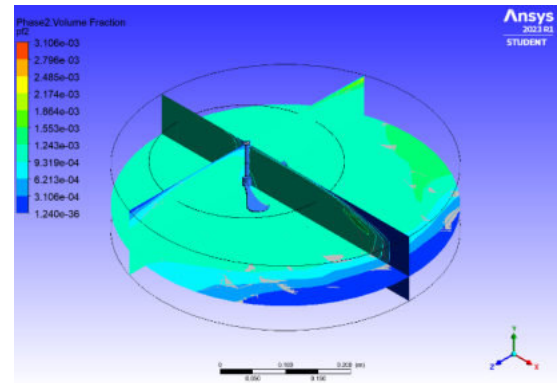
Fonte: próprio autor.

Figura 18 – Perfis de distribuição propulsor a 500rpm





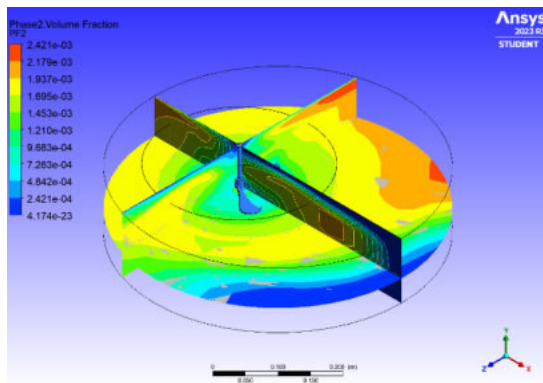
t=9,5 s



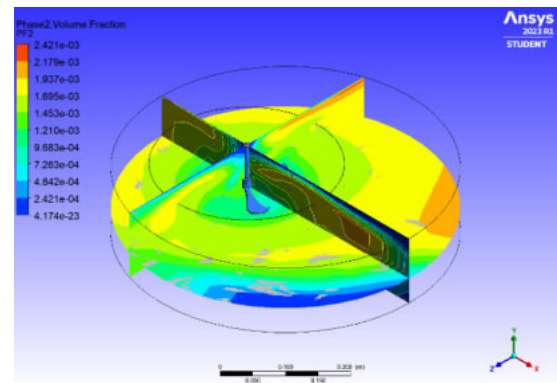
t=10 s

Fonte: próprio autor.

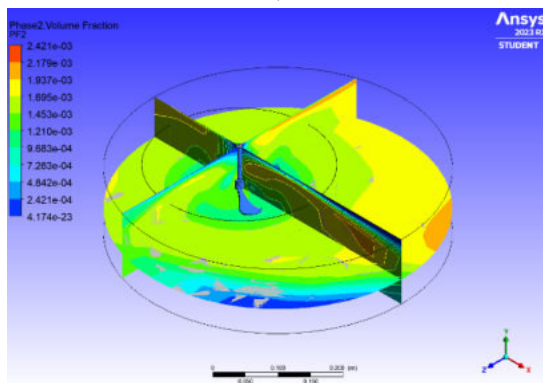
Figura 19 – Perfis de distribuição propulsor a 1100rpm



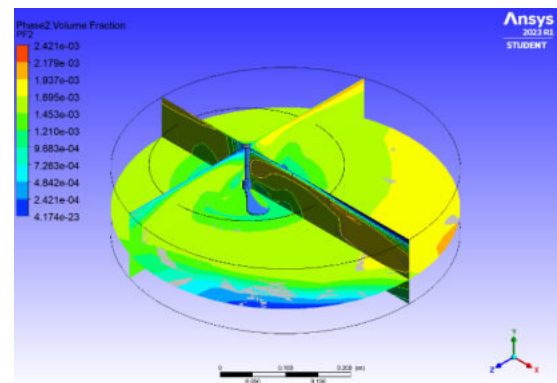
t=0,5 s



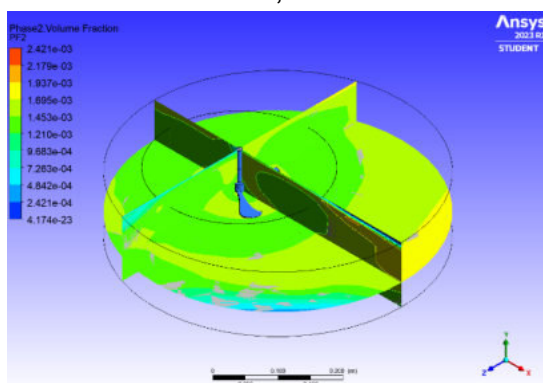
t=1 s



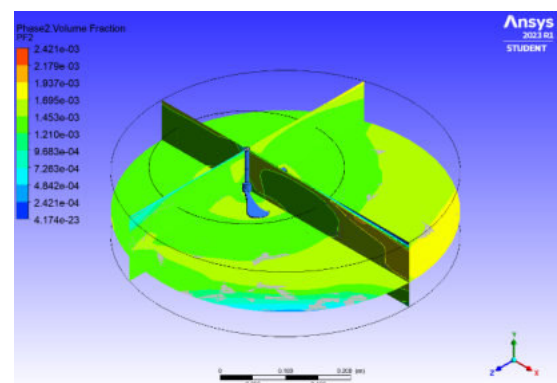
t=1,5 s



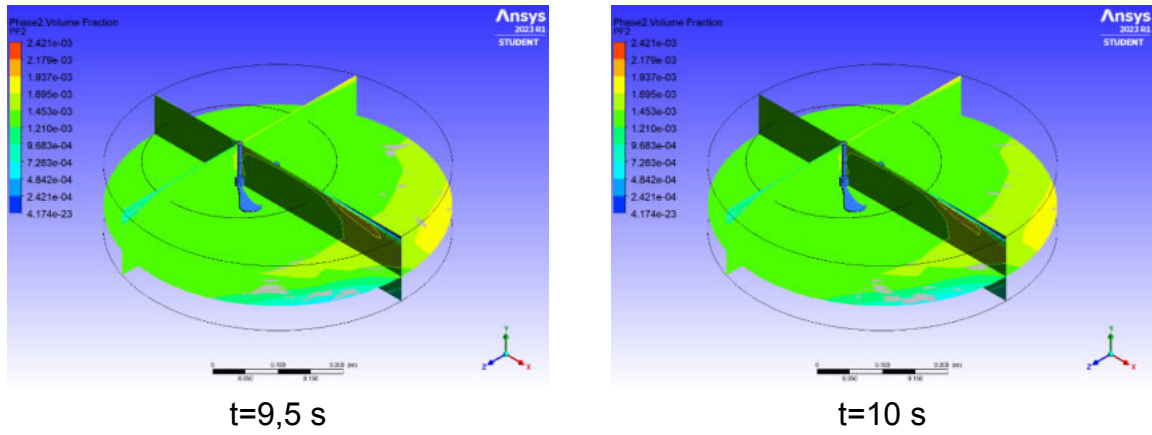
t=2 s



t=5,5 s



t=6 s

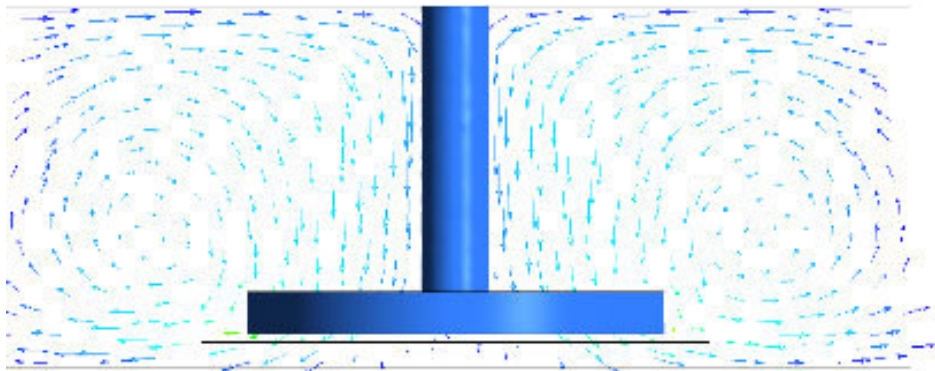


Fonte: próprio autor.

6.5.1.2 Espuma D30

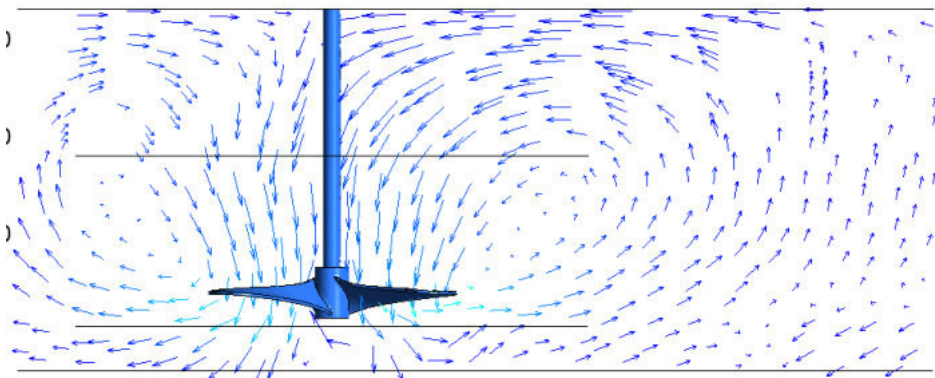
6.5.1.2.1 Perfis de agitação

Figura 20 – Perfil de agitação impelidor atual



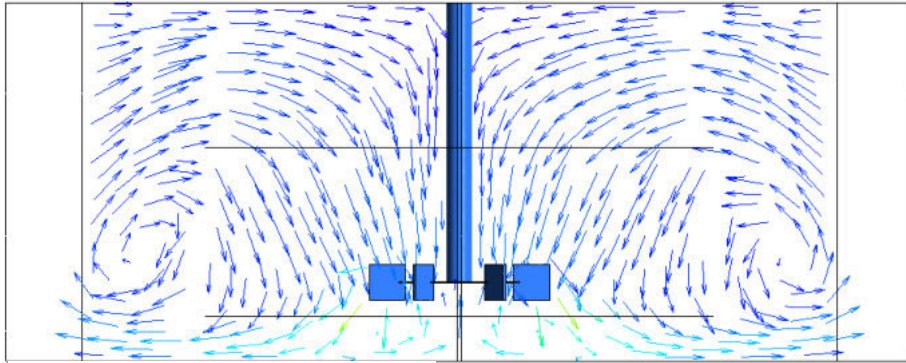
Fonte: próprio autor.

Figura 21 – Perfil de agitação propulsor



Fonte: próprio autor.

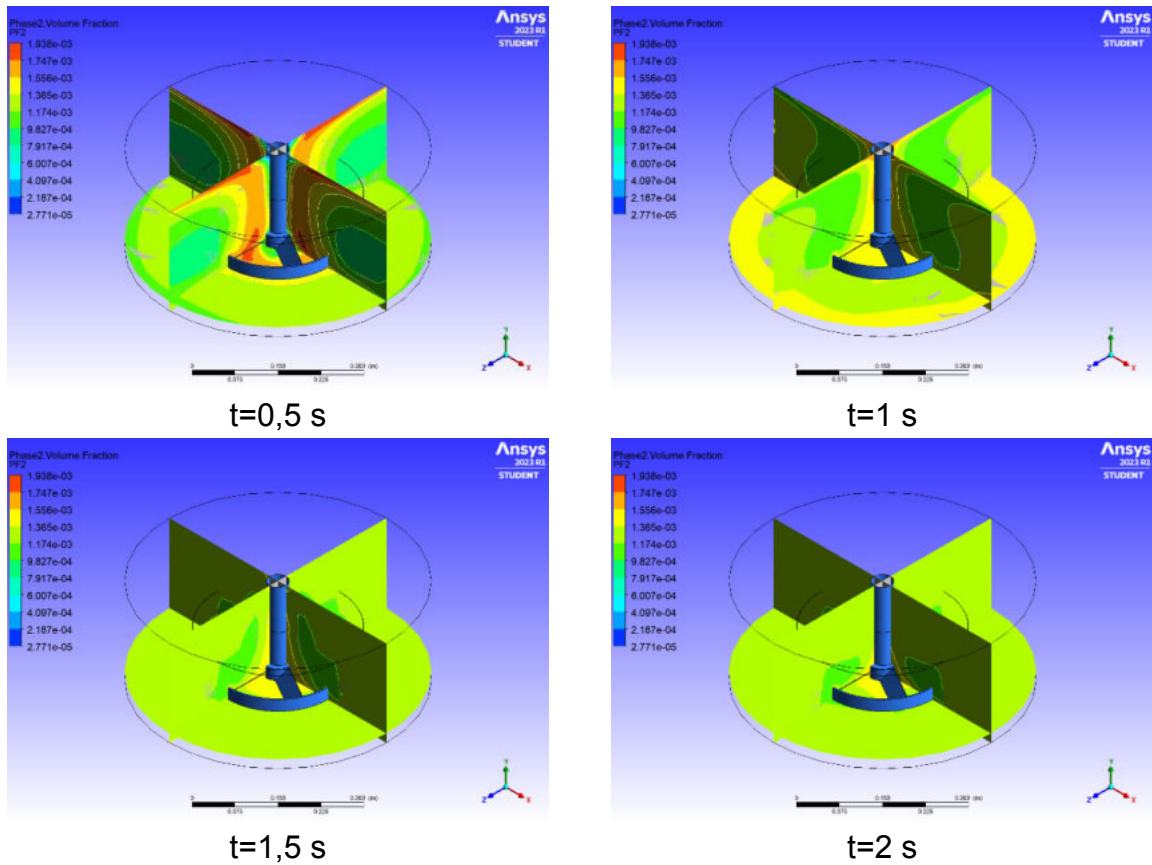
Figura 22 – Perfil de agitação turbina Rushton

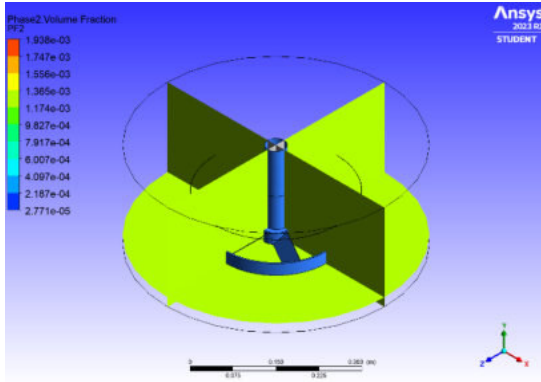


Fonte: próprio autor.

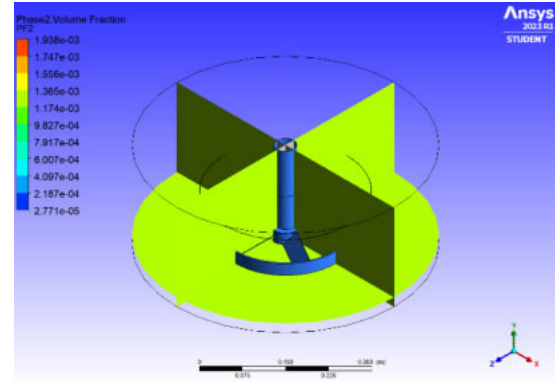
6.5.1.2.2 Perfil de distribuição do catalisador

Figura 23 – Perfil de distribuição impelidor atual a 500 rpm

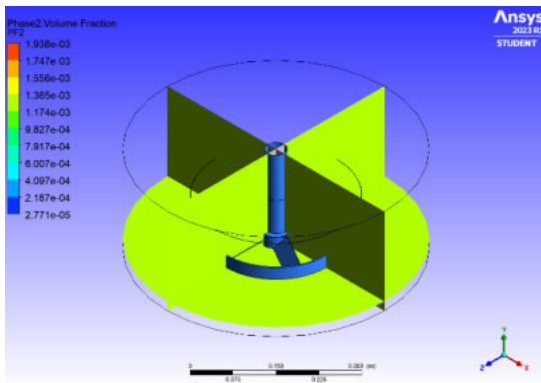




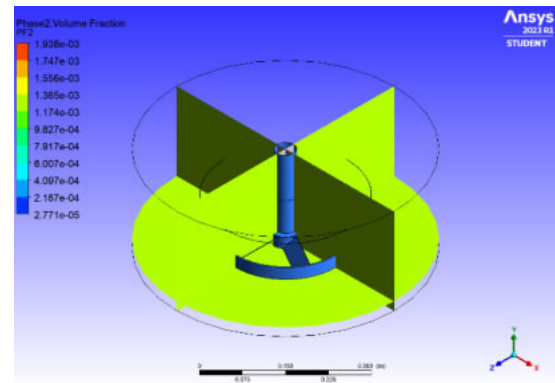
t=5,5 s



t=6 s



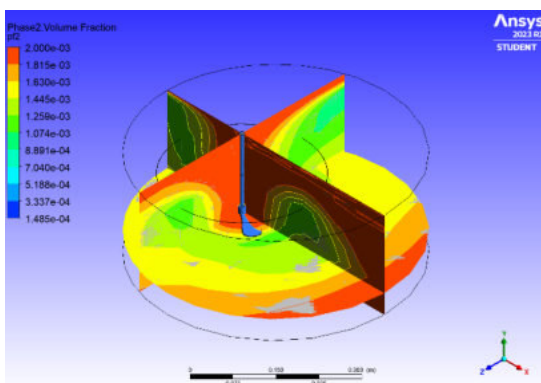
t=9,5 s



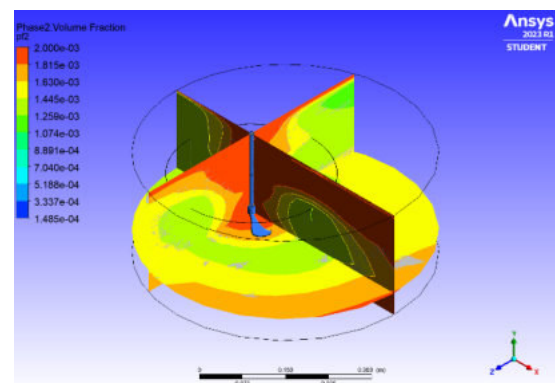
t=10 s

Fonte: próprio autor.

Figura 24 – Perfis de distribuição propulsor a 500 rpm



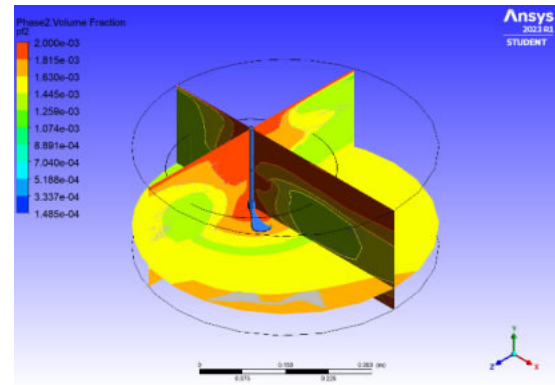
t=0,5 s



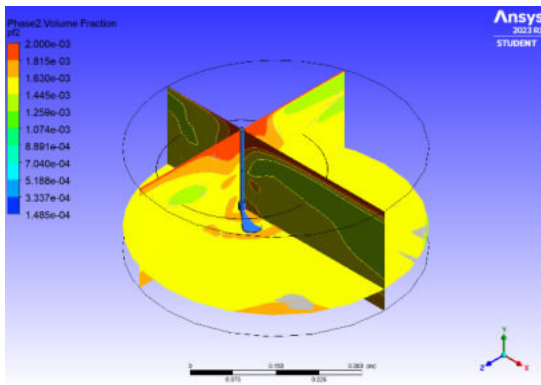
t=1 s



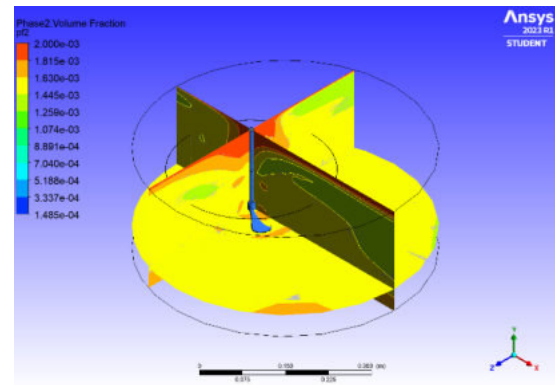
t=1,5 s



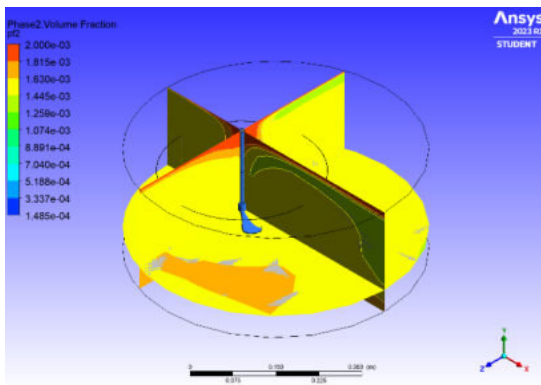
t=2 s



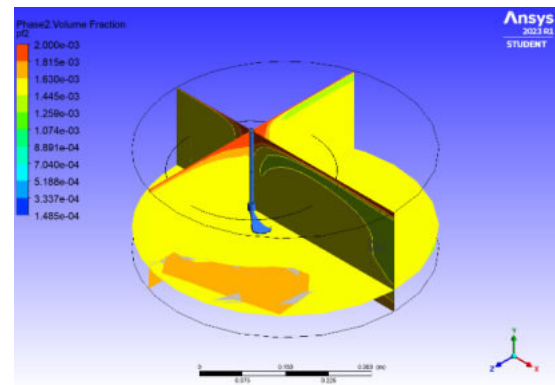
t=5,5 s



t=6 s



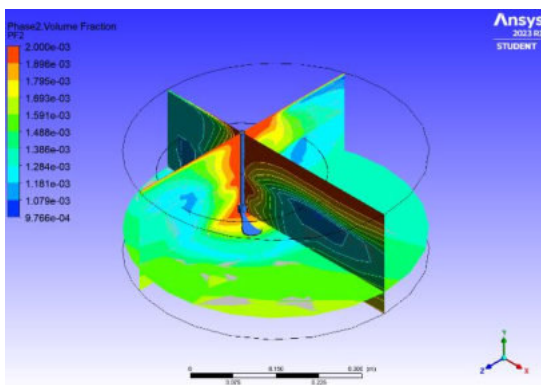
t=9,5 s



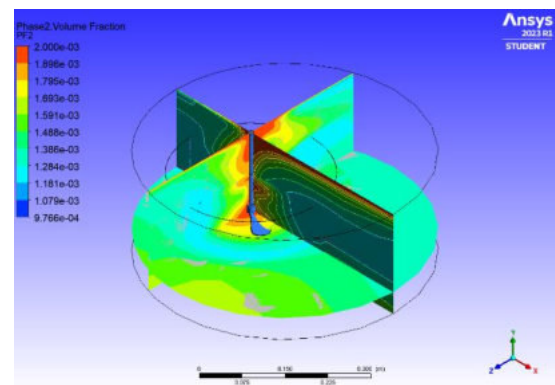
t=10 s

Fonte: próprio autor.

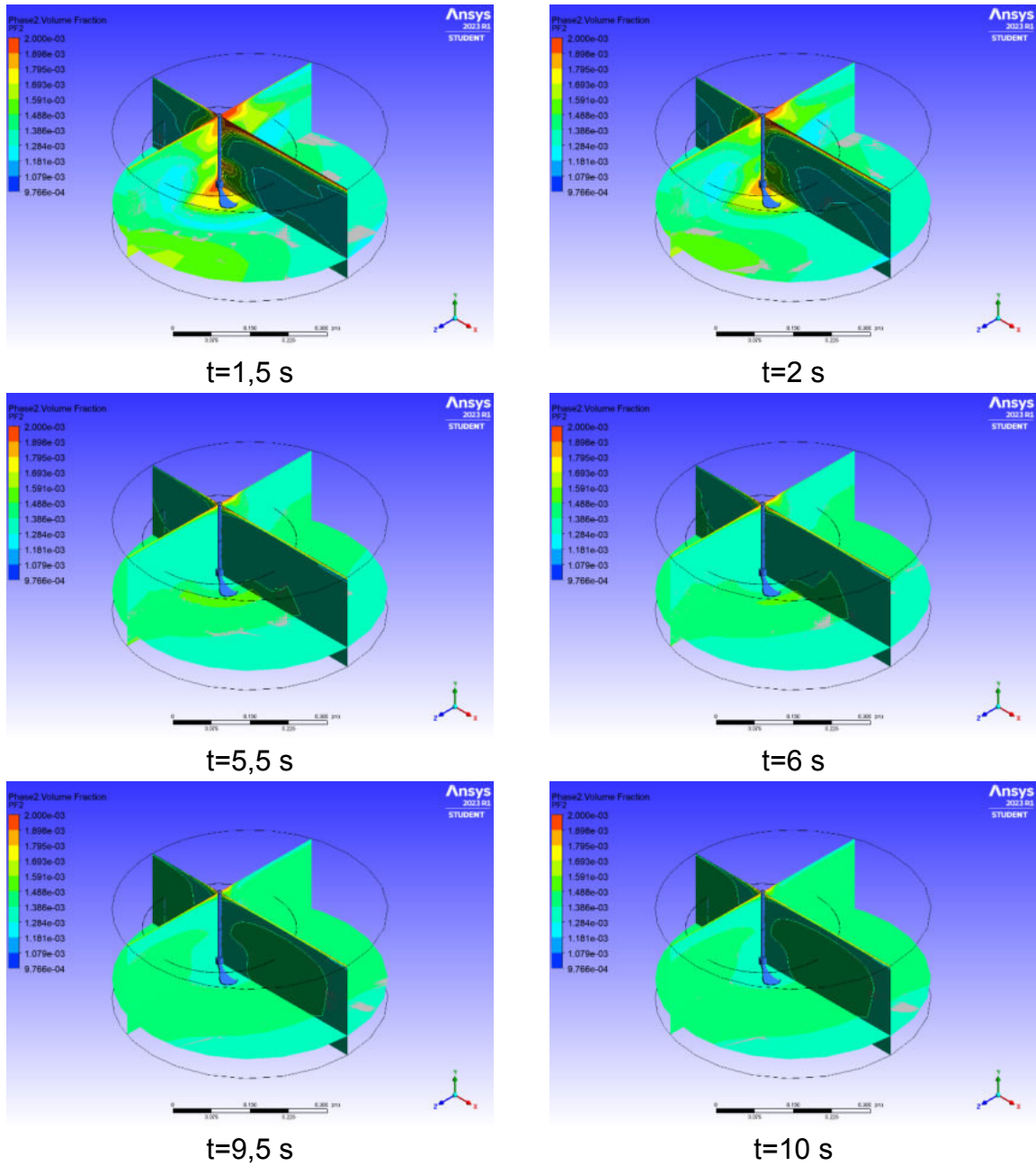
Figura 25 – Perfis de distribuição propulsor a 1100 rpm



t=0,5 s

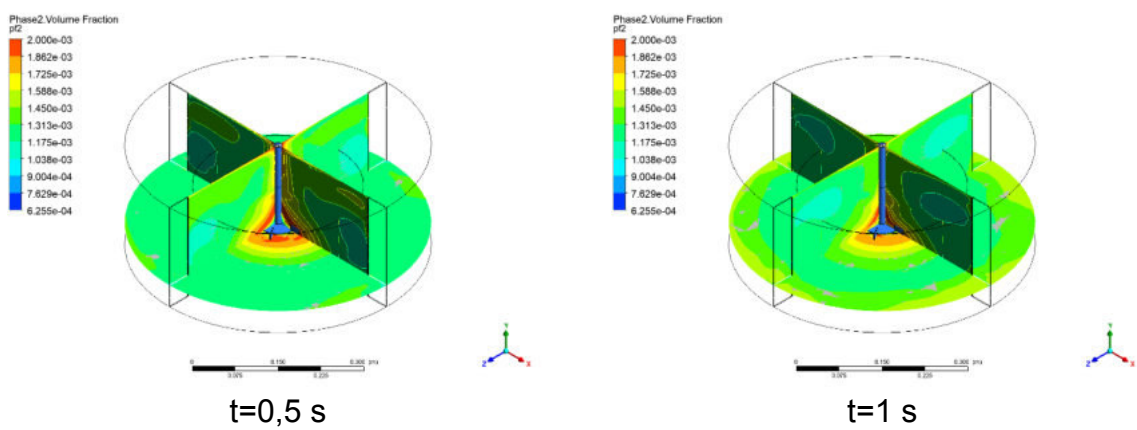


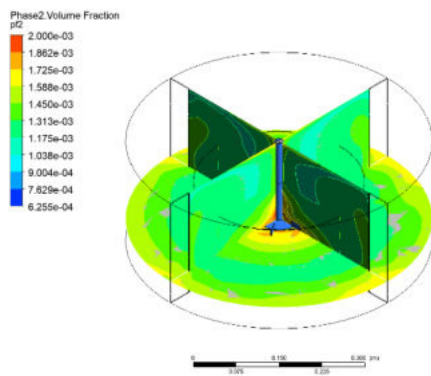
t=1 s



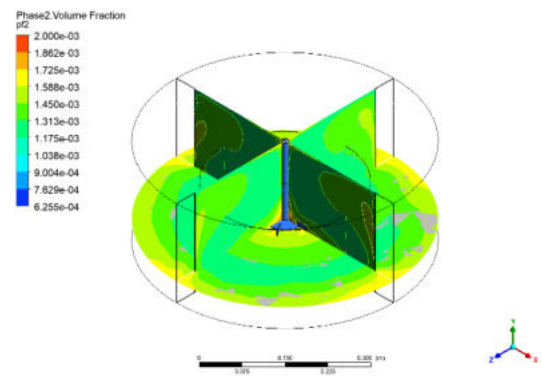
Fonte: próprio autor.

Figura 26 – Perfis de distribuição turbina Rushton a 2500 rpm

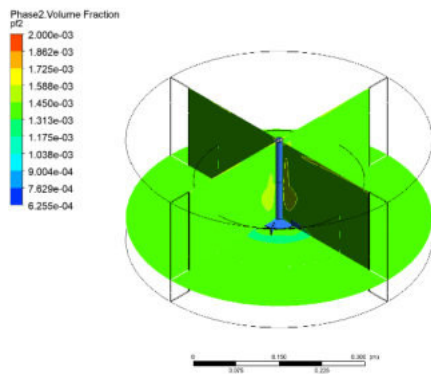




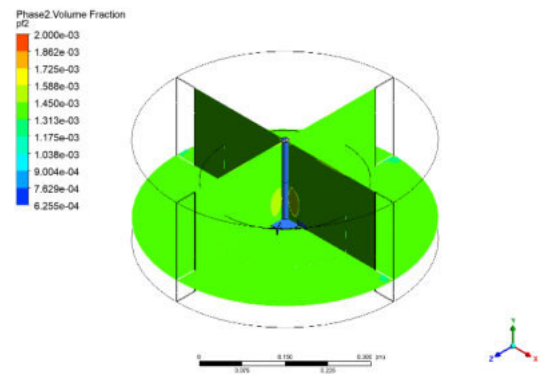
t=1,5 s



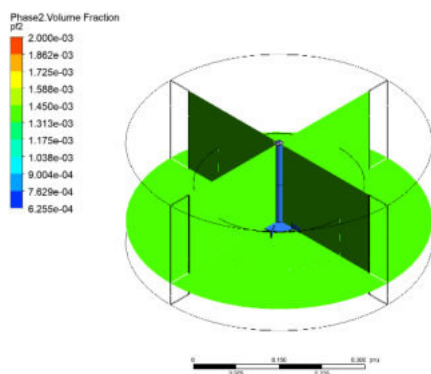
t=2 s



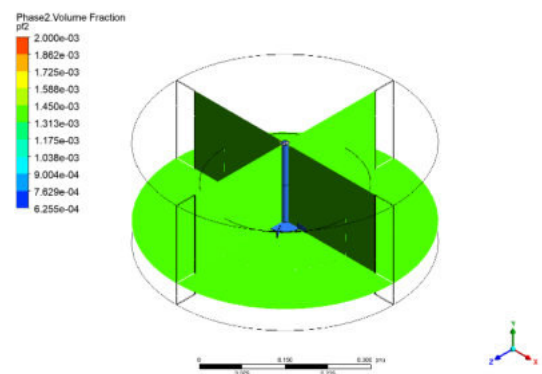
t=5,5 s



t=6 s



t=9,5 s



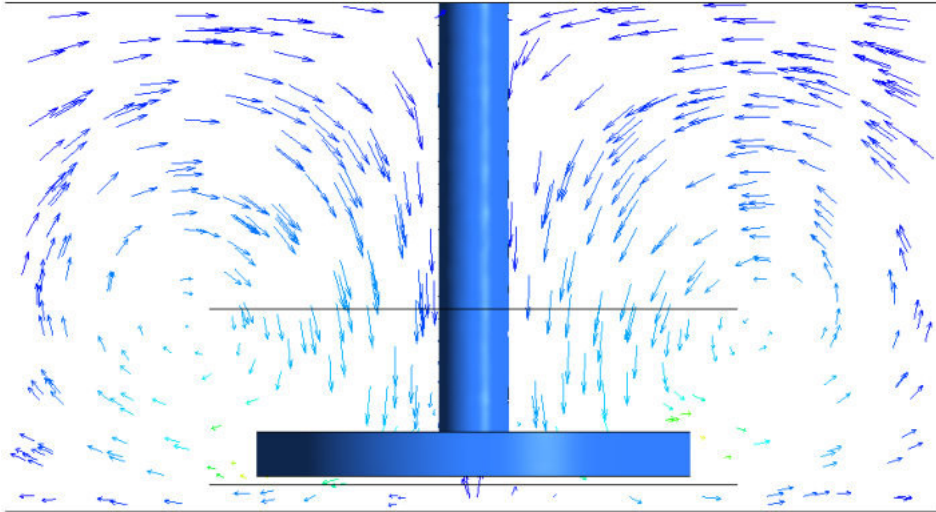
t=10 s

Fonte: próprio autor.

6.5.1.3 Espuma D40

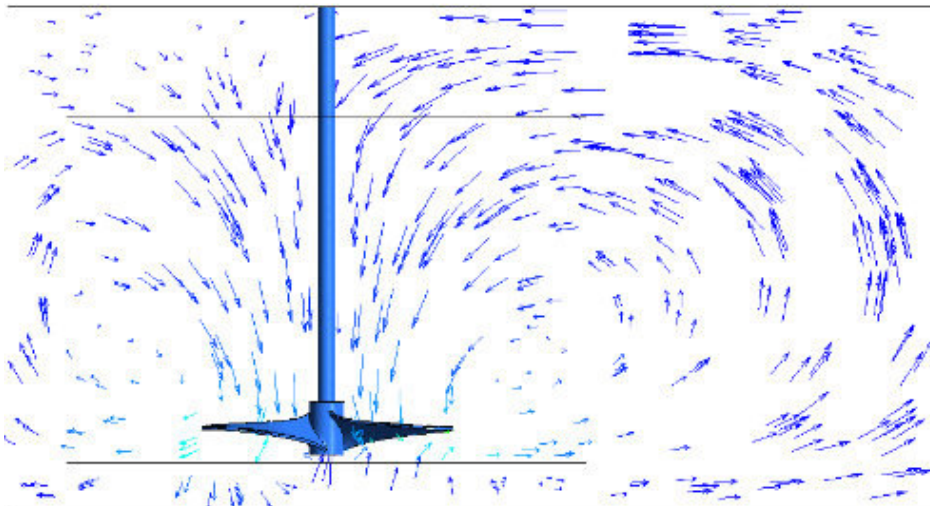
6.5.1.3.1 Perfis de agitação

Figura 27 – Perfil de agitação impelidor atual



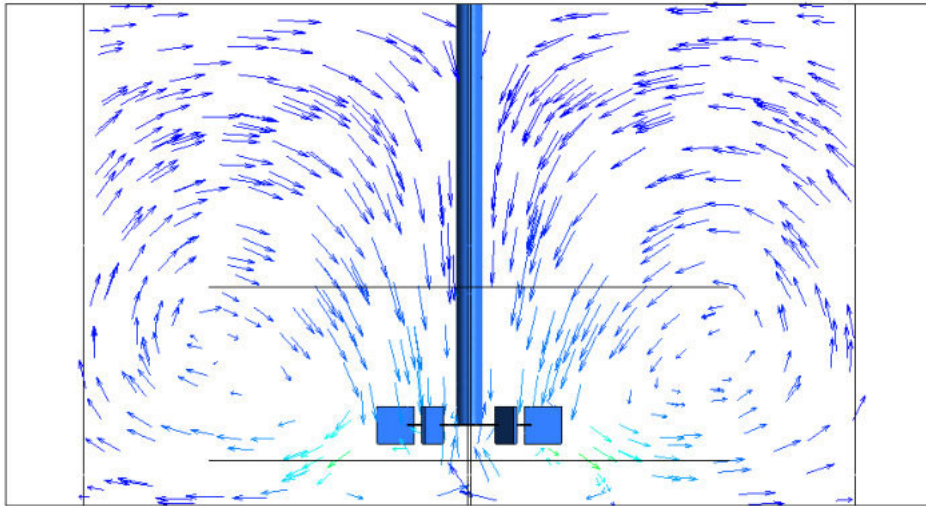
Fonte: próprio autor.

Figura 28 – Perfil de agitação propulsor



Fonte: próprio autor.

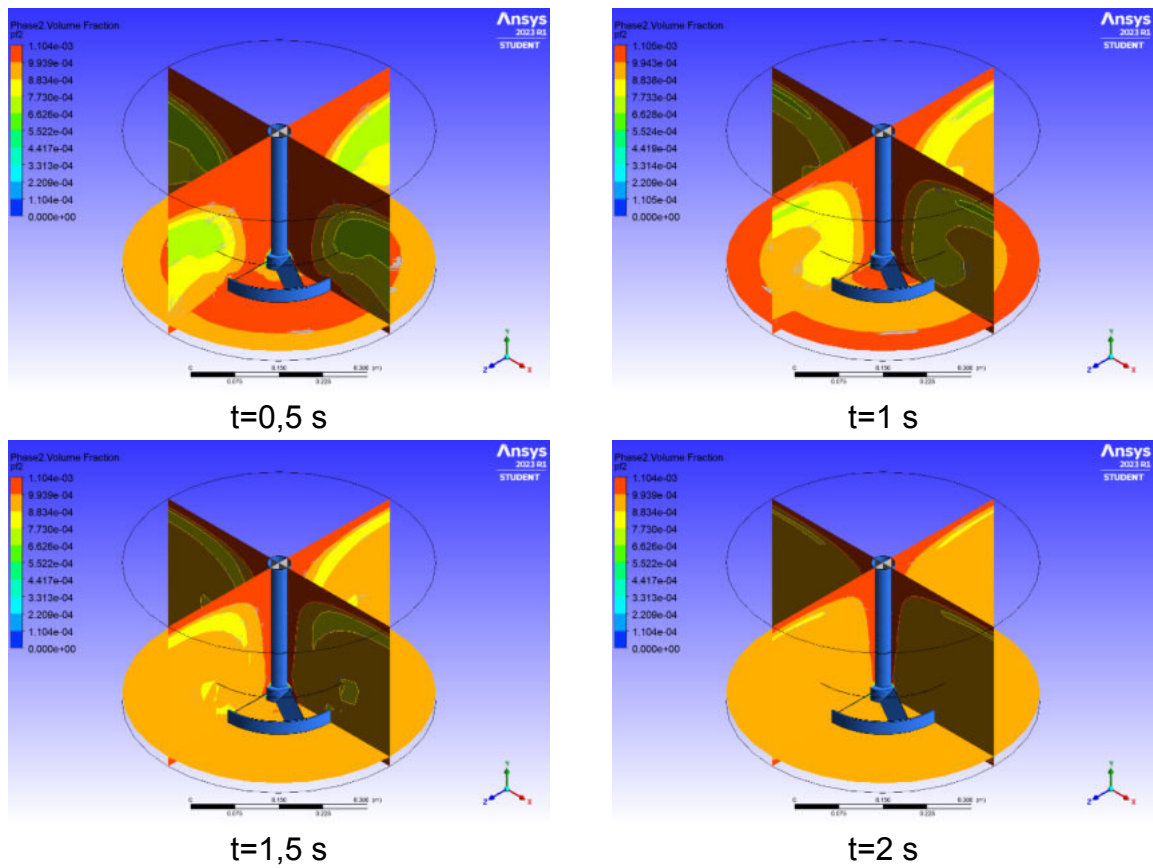
Figura 29 – Perfil de agitação Turbina Rushton

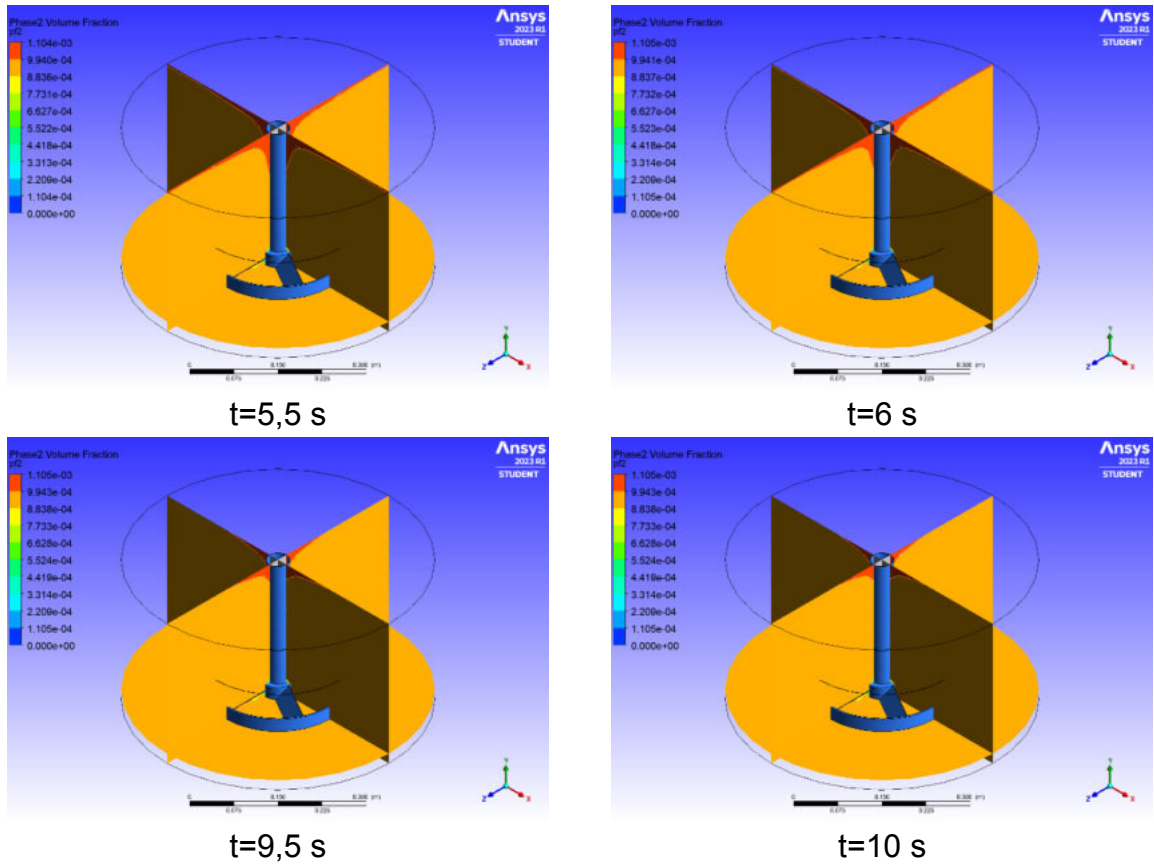


Fonte: próprio autor.

6.5.1.3.2 Perfil de distribuição do catalisador

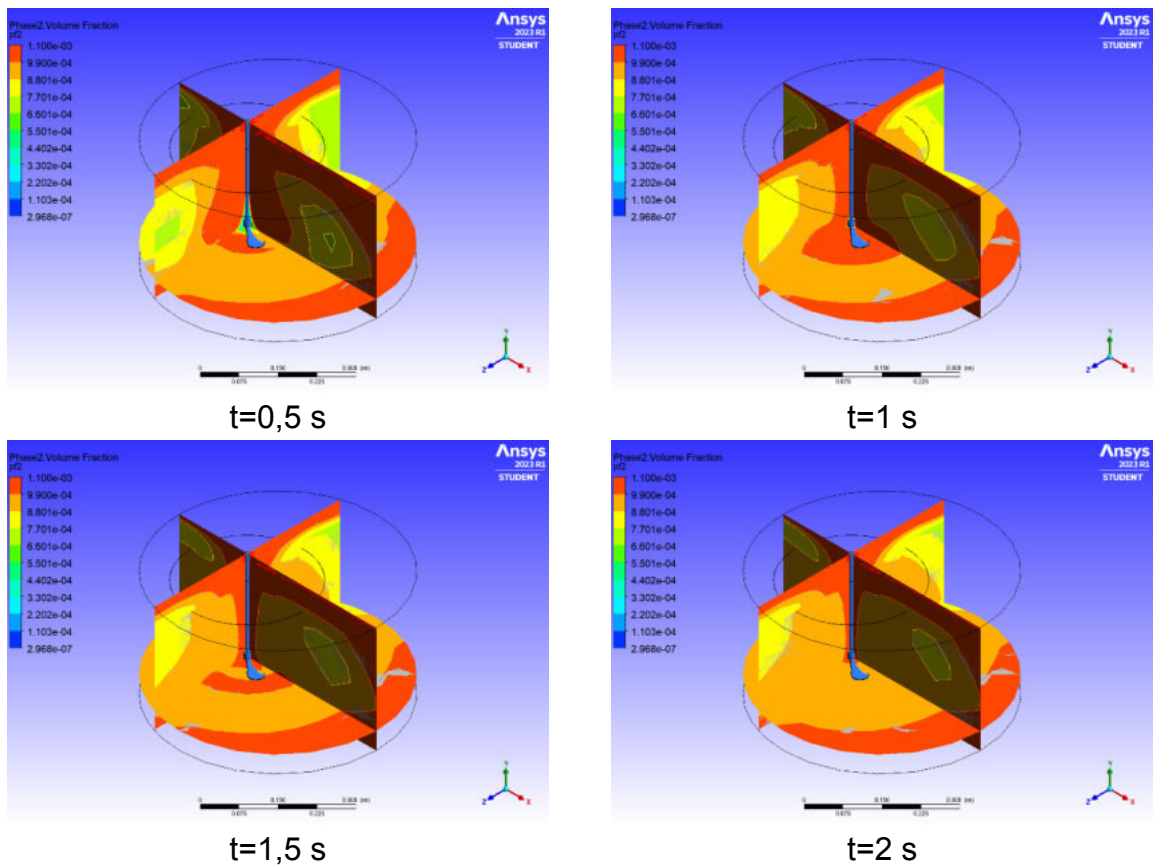
Figura 30 – Perfil de distribuição impelidor atual a 500 rpm

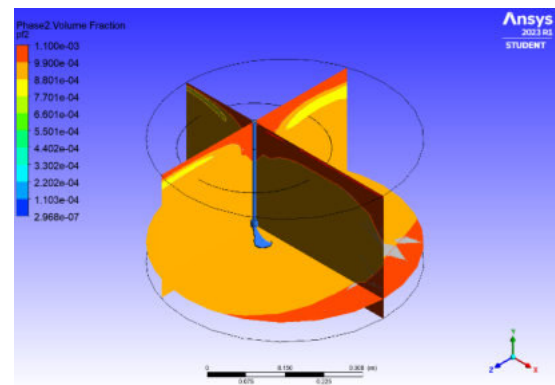
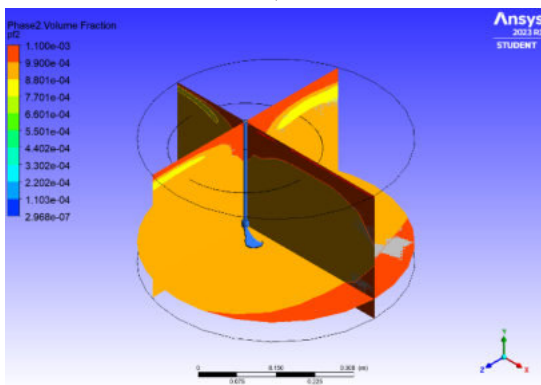
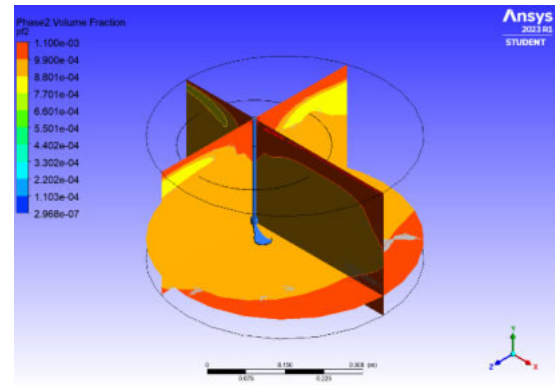
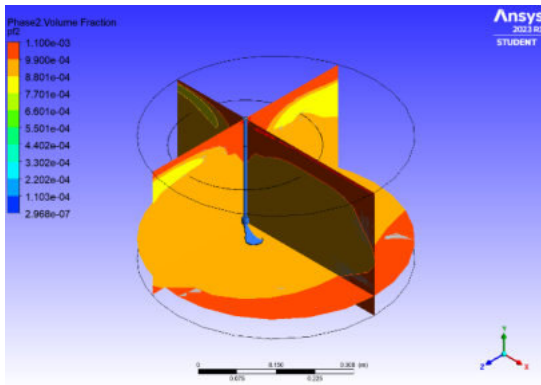




Fonte: próprio autor.

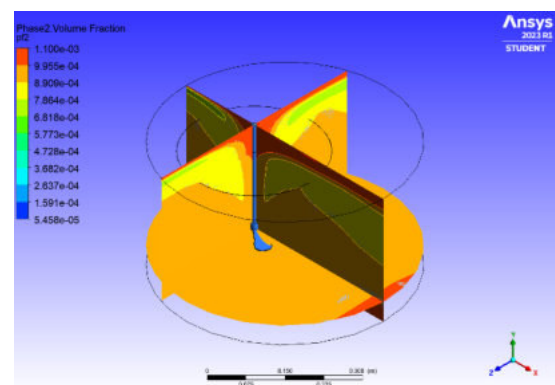
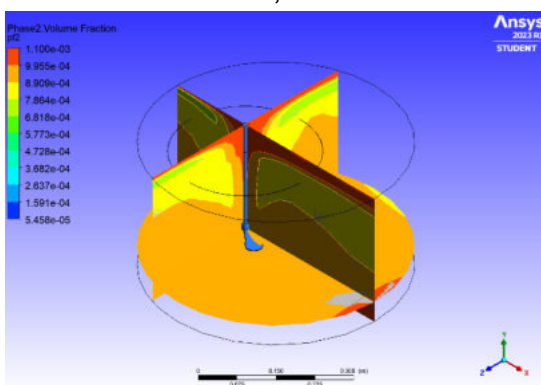
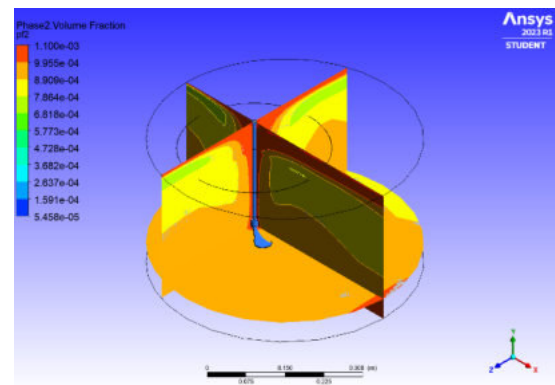
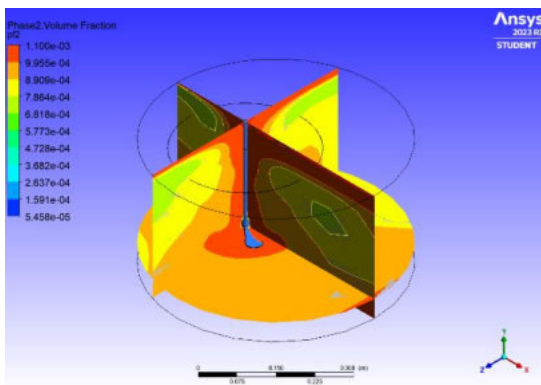
Figura 31 – Perfil de distribuição propulsor a 500 rpm

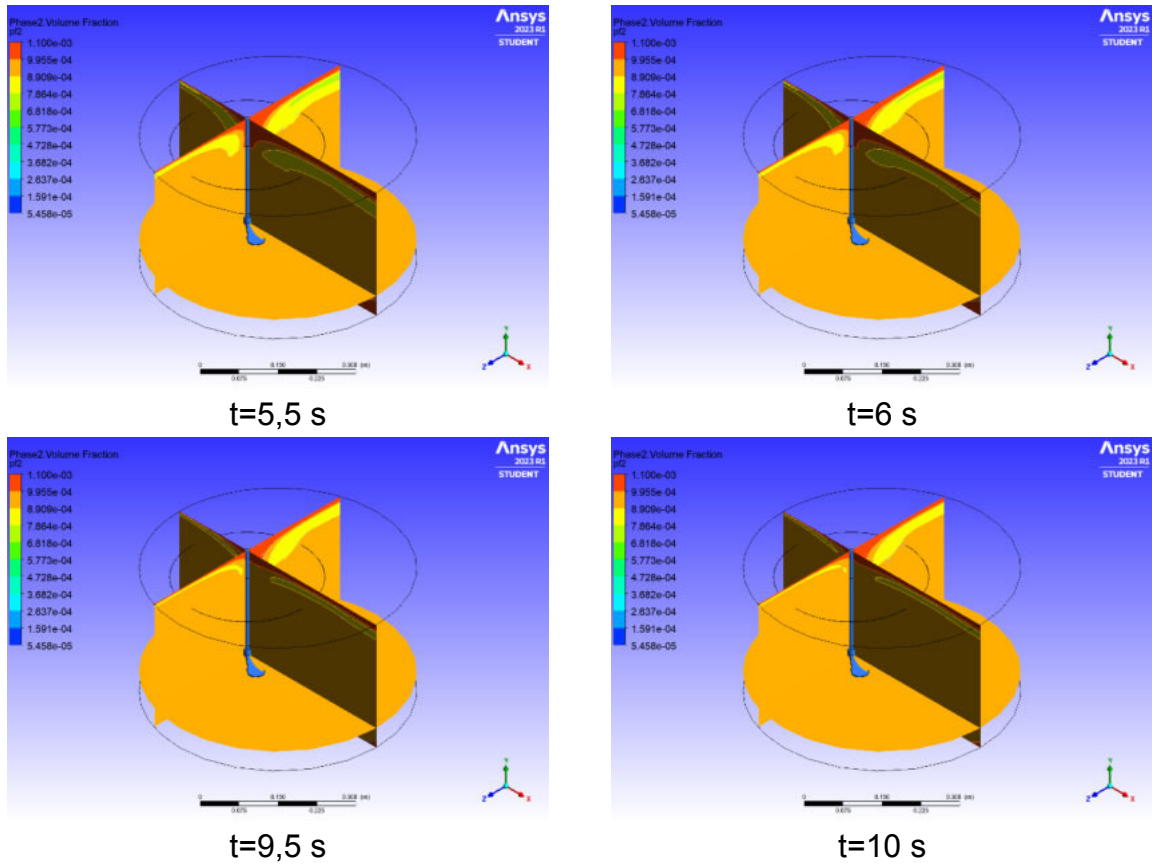




Fonte: próprio autor.

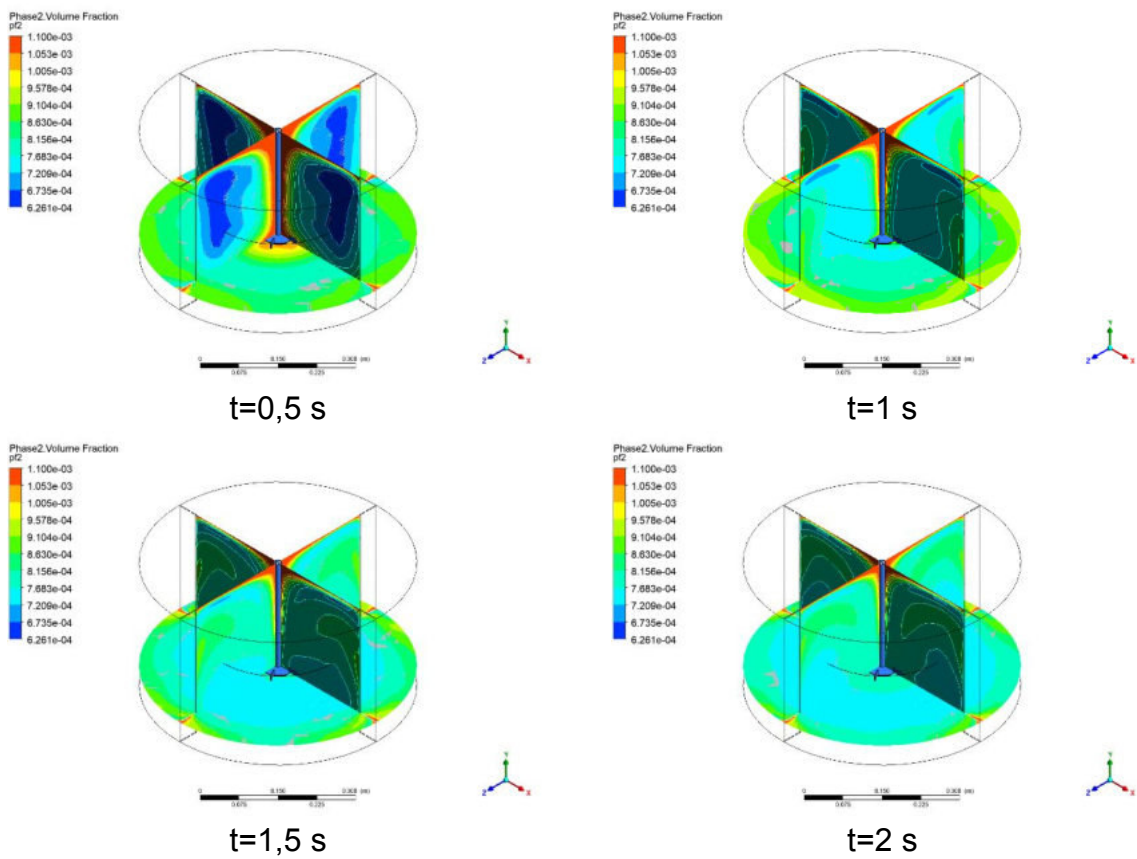
Figura 32 – Perfil de distribuição propulsor a 1100 rpm

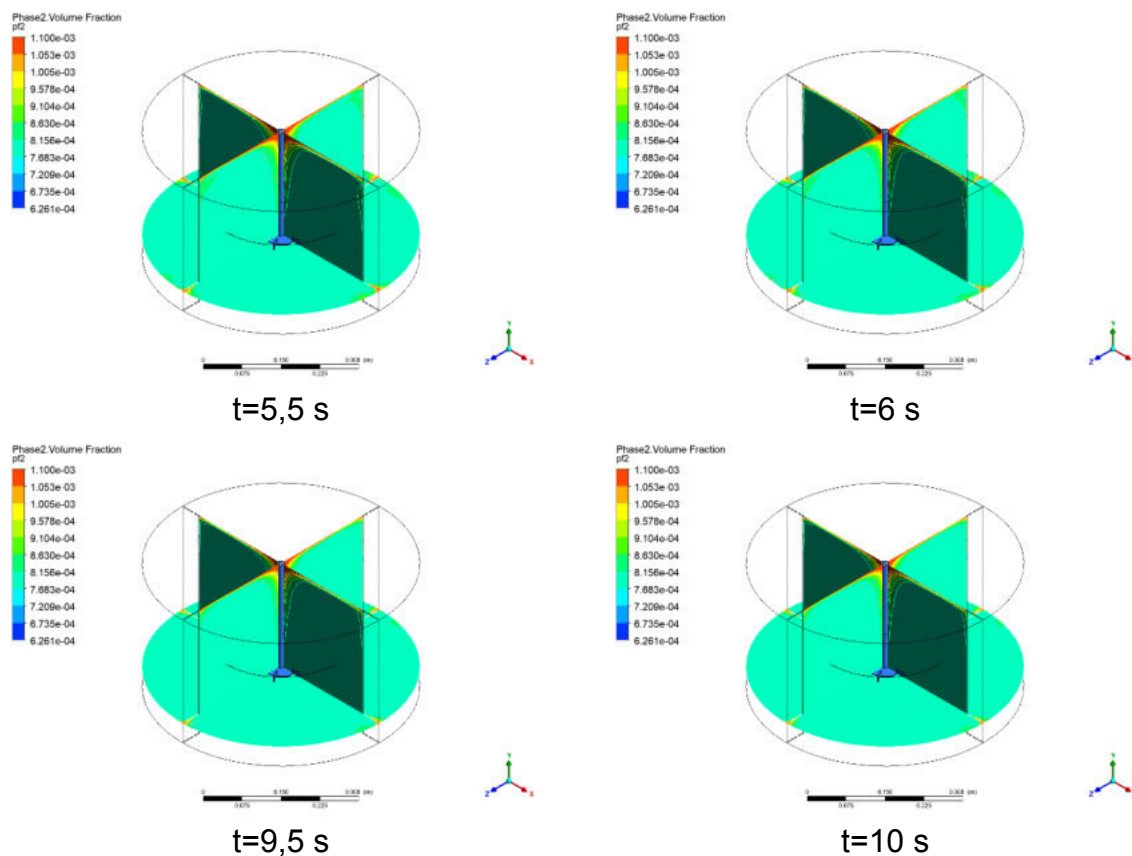




Fonte: próprio autor.

Figura 33 – Perfil de distribuição turbina Rushton a 2500 rpm





Fonte: próprio autor.

6.5.2 Análises simulações intermediárias

Os perfis de agitação para o impelidor atual e o propulsor se assemelham bastante aos vistos na literatura. Porém, para o caso da turbina com a espuma D10, obteve-se um comportamento que se afasta bastante do esperado e, por essa razão, não se gerou os perfis de distribuição de catalisador para esse caso.

Quanto aos perfis de distribuição, é interessante notar como o impelidor atual obteve uma homogeneização mais rápida, seguido da turbina Rushton, enquanto tem-se uma distribuição mais heterogênea para o propulsor.

Outro fato a se chamar atenção se dá quando as duas velocidades para o propulsor são comparadas, pois, assim como era esperado, o caso de maior velocidade gerou uma melhor homogeneização, enquanto o de menor velocidade apresenta áreas de concentração desprezível.

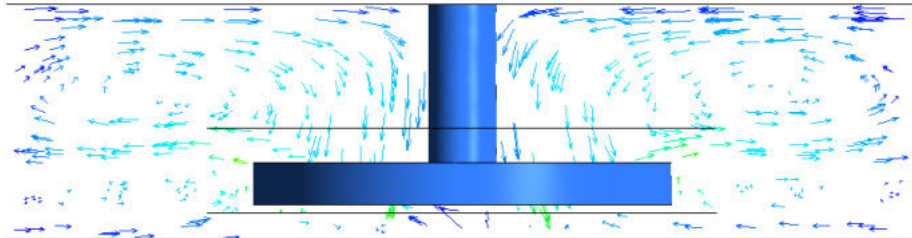
Nos perfis referentes a turbina Rushton, é possível notar pontos de concentração maior nas chicanas, um fato já esperado e que limita o seu uso em processos onde haja muito depósito de material.

6.5.3 Simulações finais

6.5.3.1 Espuma D10

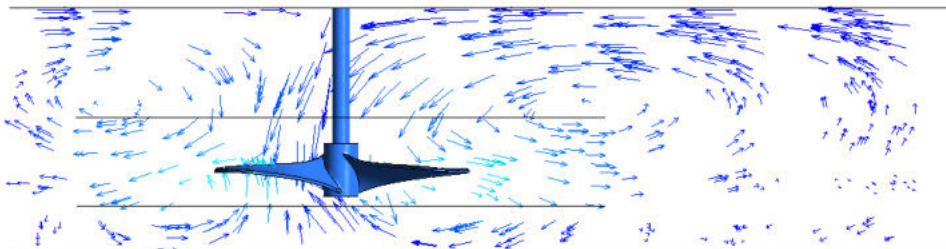
6.5.3.1.1 Perfis de agitação

Figura 34 – Perfil de agitação impelidor atual



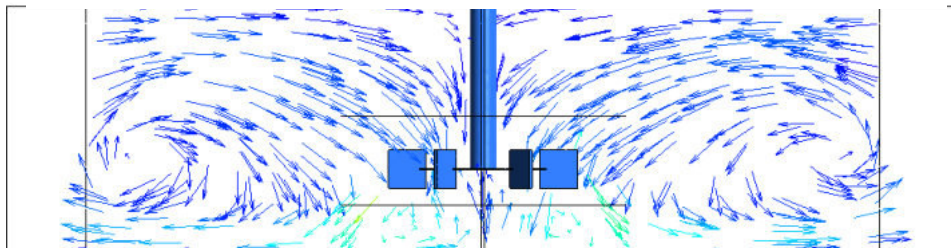
Fonte: próprio autor.

Figura 35 – Perfil de agitação propulsor



Fonte: próprio autor.

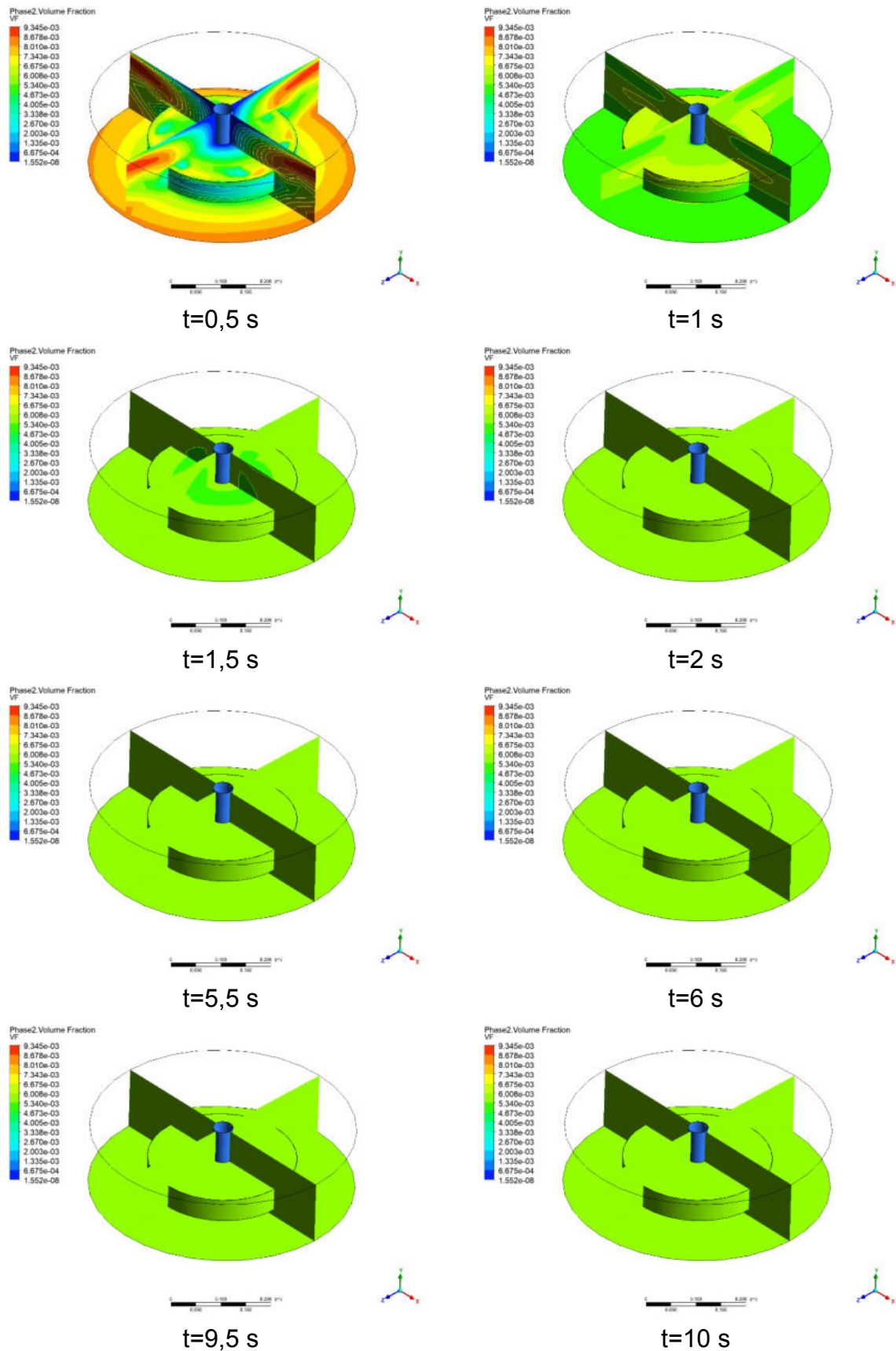
Figura 36 – Perfil de agitação turbina Rushton



Fonte: próprio autor.

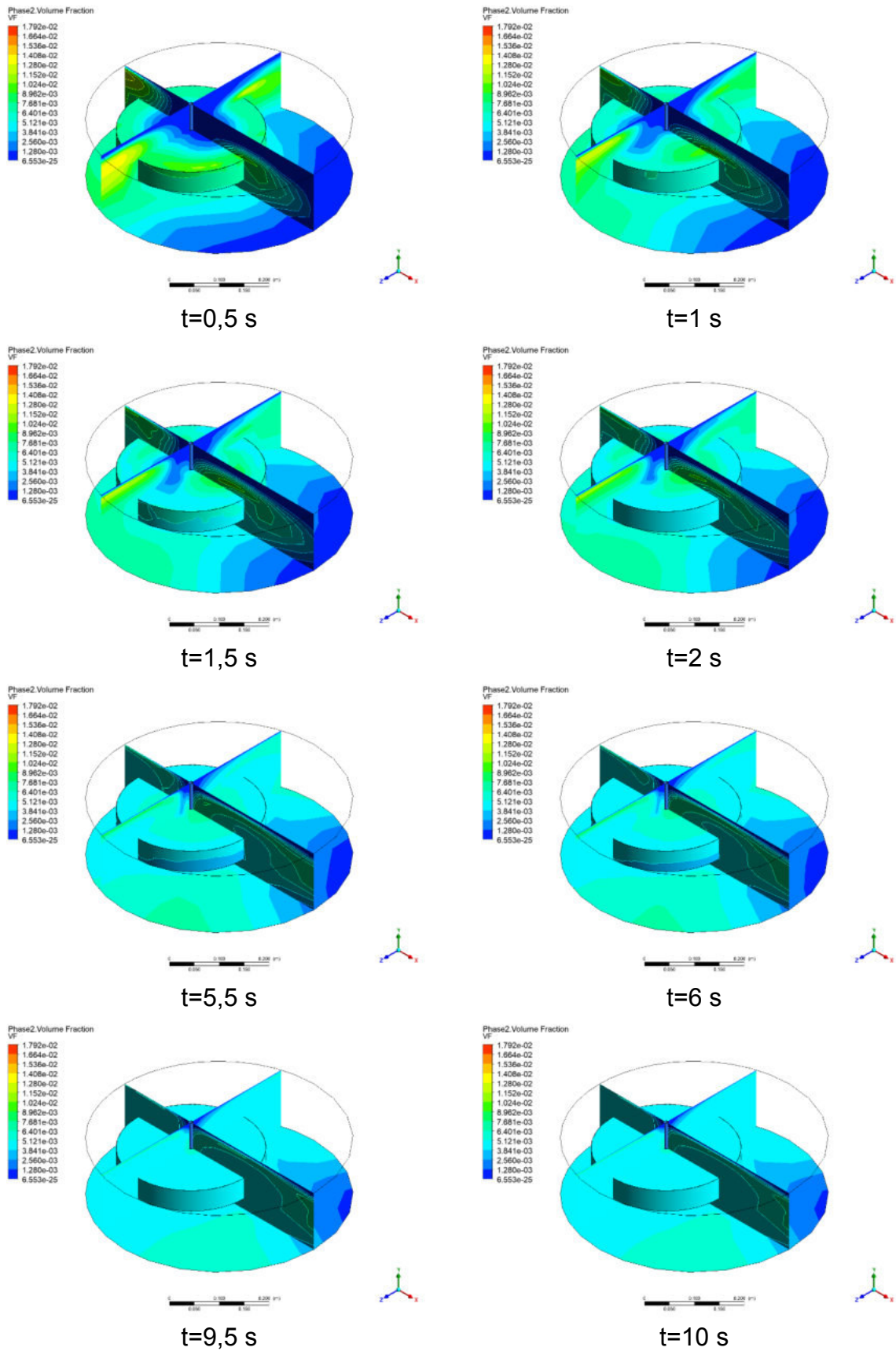
6.5.3.1.2 Perfil de distribuição do catalisador

Figura 37 – Perfil de distribuição impelidor atual a 500 rpm



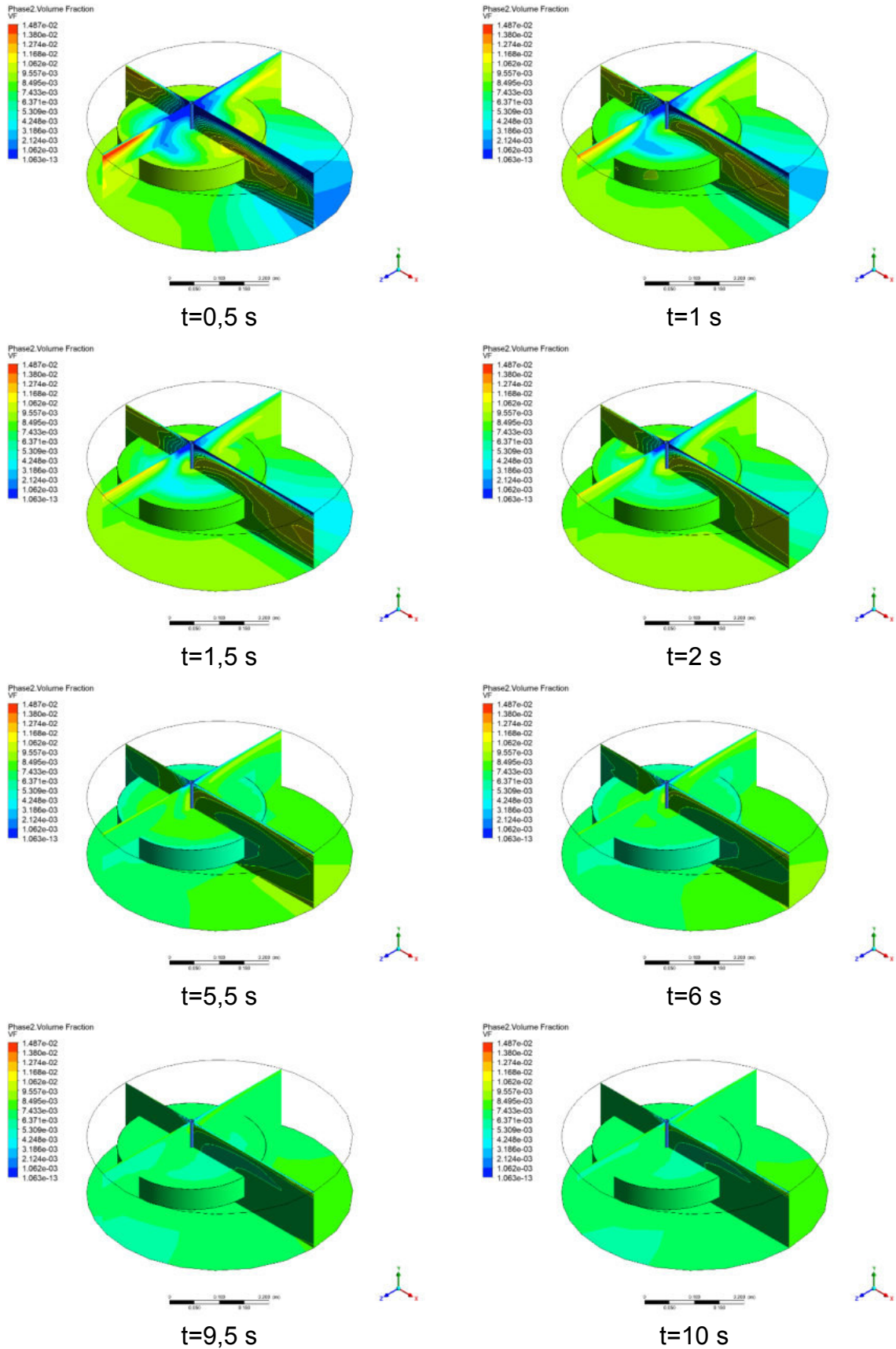
Fonte: próprio autor.

Figura 38 – Perfil de distribuição propulsor a 500 rpm



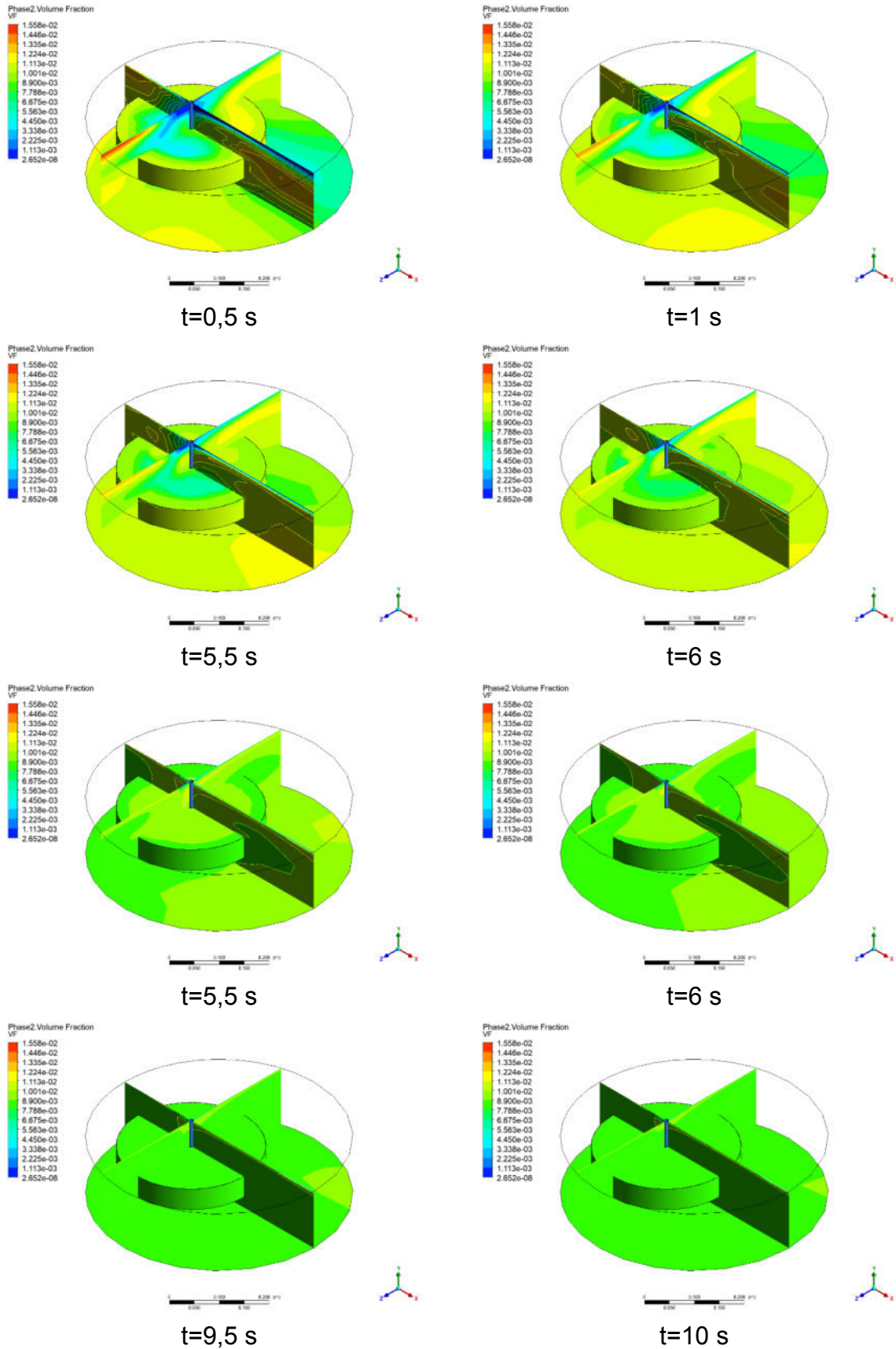
Fonte: próprio autor.

Figura 39 – Perfil de distribuição propulsor a 1100 rpm



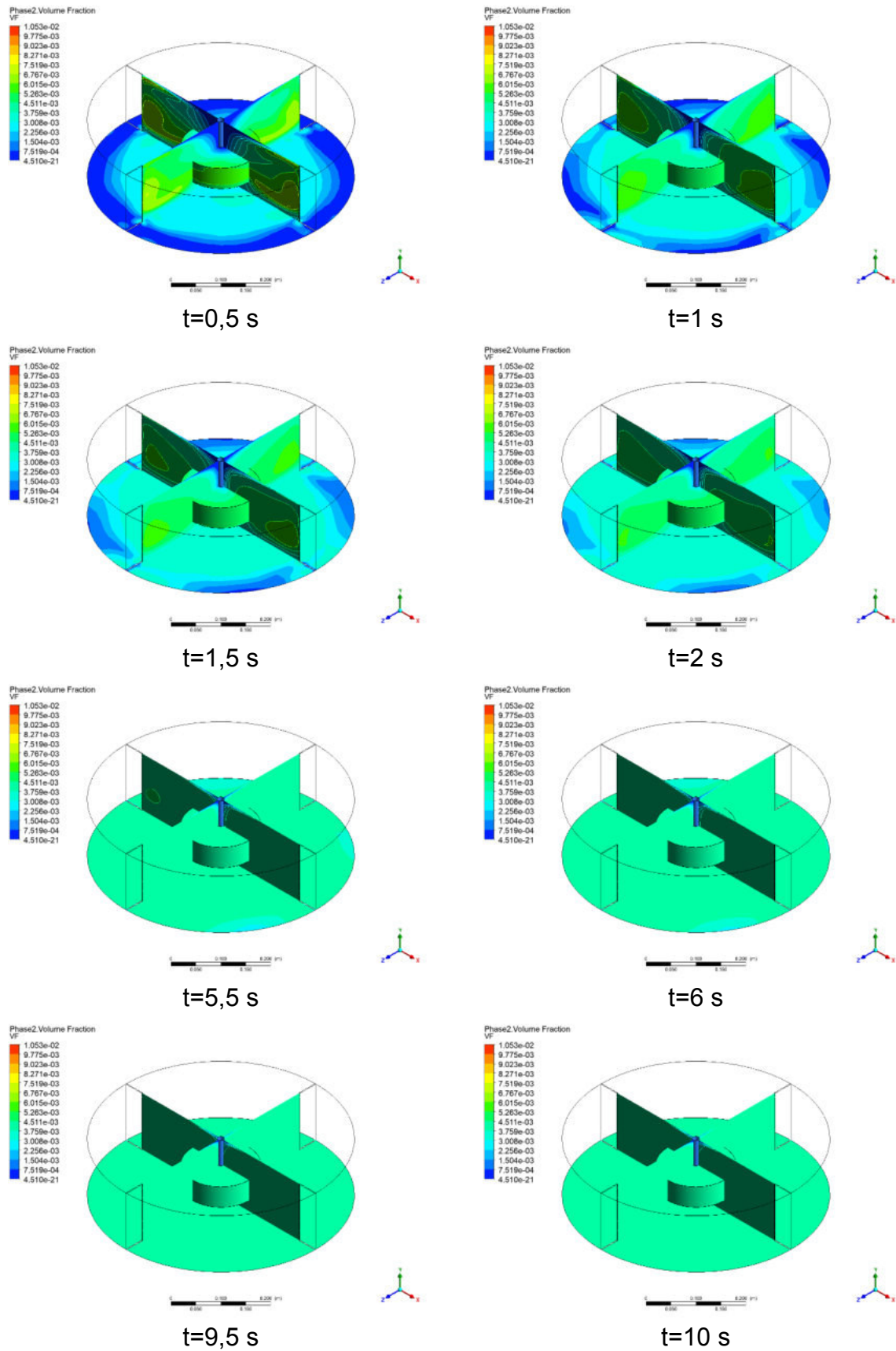
Fonte: próprio autor.

Figura 40 – Perfil de distribuição propulsor a 1700 rpm



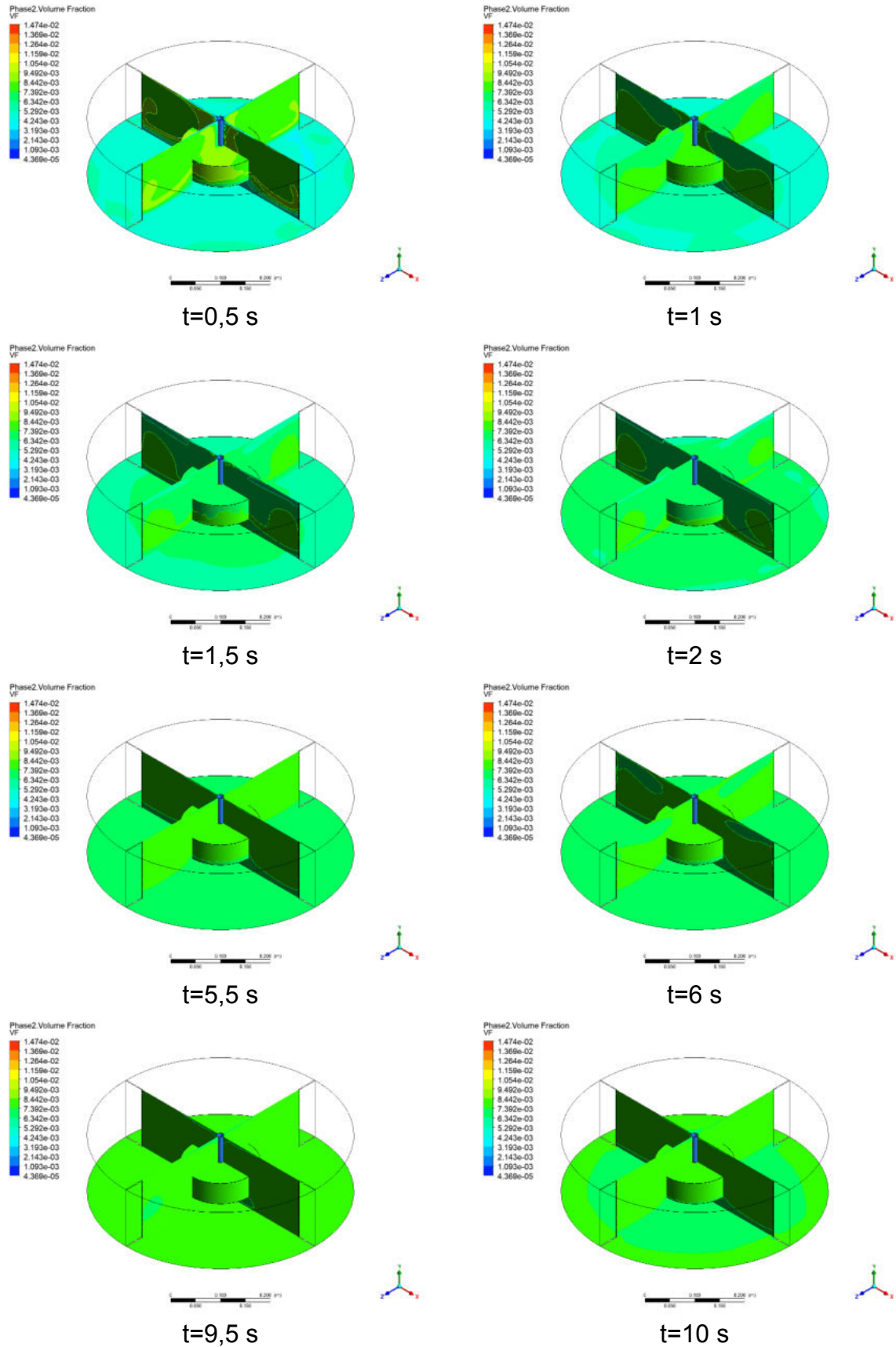
Fonte: próprio autor.

Figura 41 – Perfil de distribuição turbina Rushton a 2500 rpm



Fonte: próprio autor.

Figura 42 – Perfil de distribuição turbina Rushton a 5600 rpm

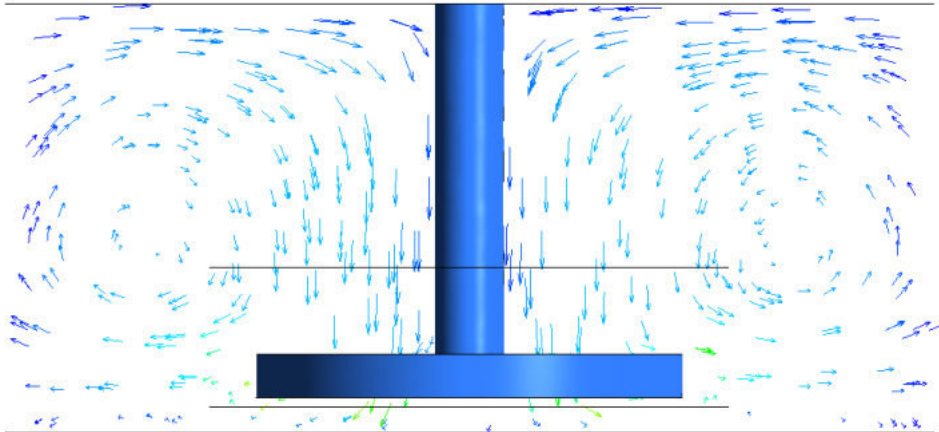


Fonte: próprio autor.

6.5.3.2 Espuma D30

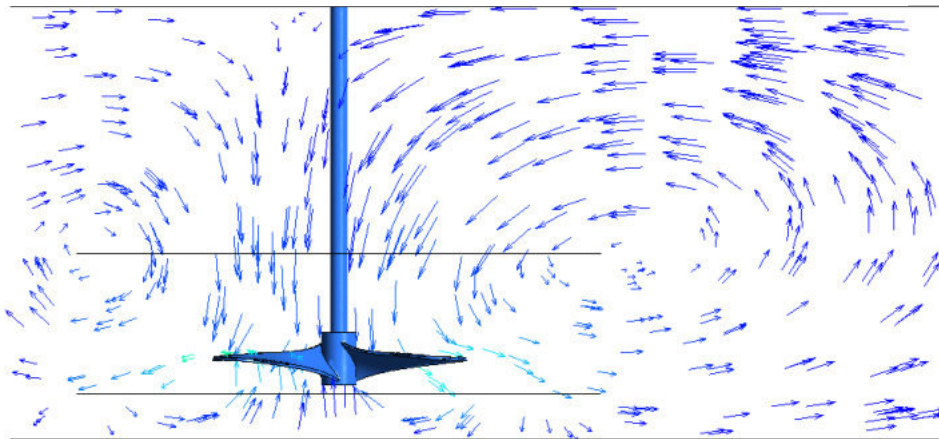
6.5.3.2.1 Perfis de agitação

Figura 43 – Perfil de agitação impelidor atual



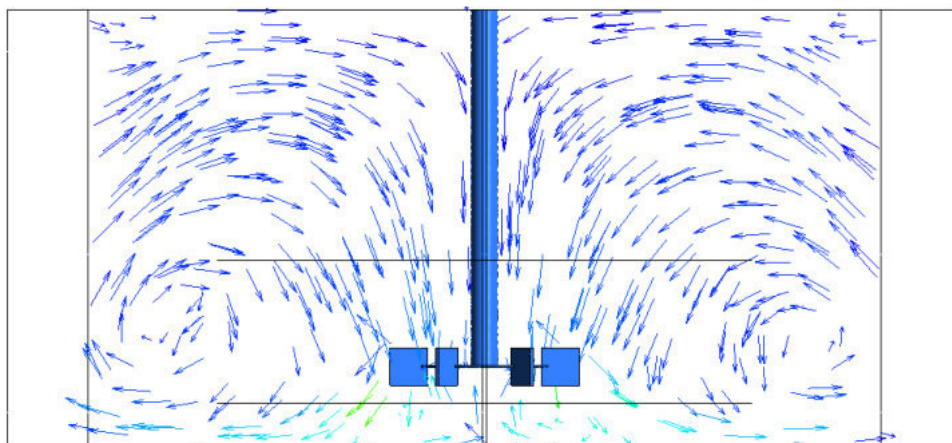
Fonte: próprio autor.

Figura 44 – Perfil de agitação propulsor



Fonte: próprio autor.

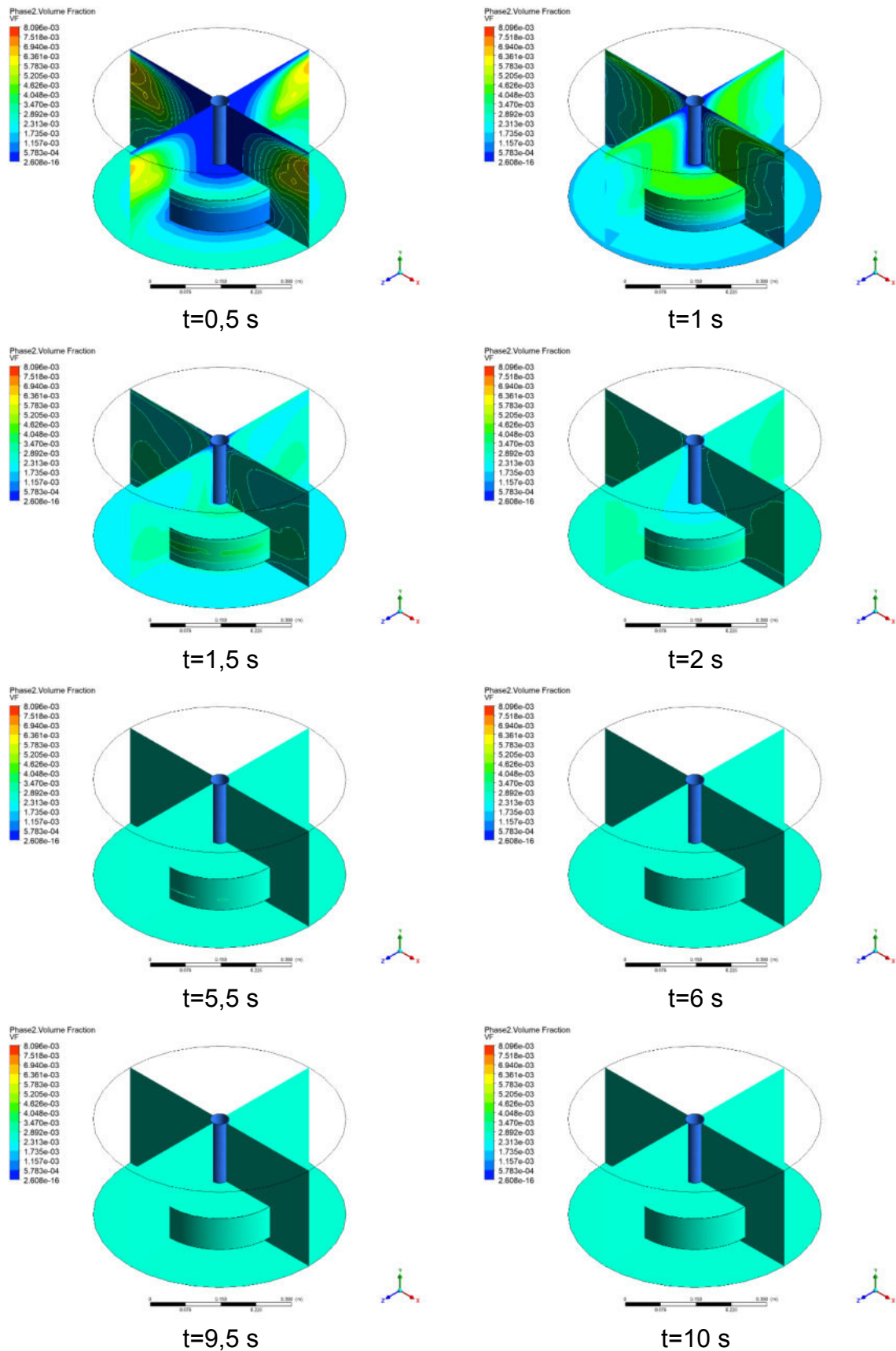
Figura 45 – Perfil de agitação turbina Rushton



Fonte: próprio autor.

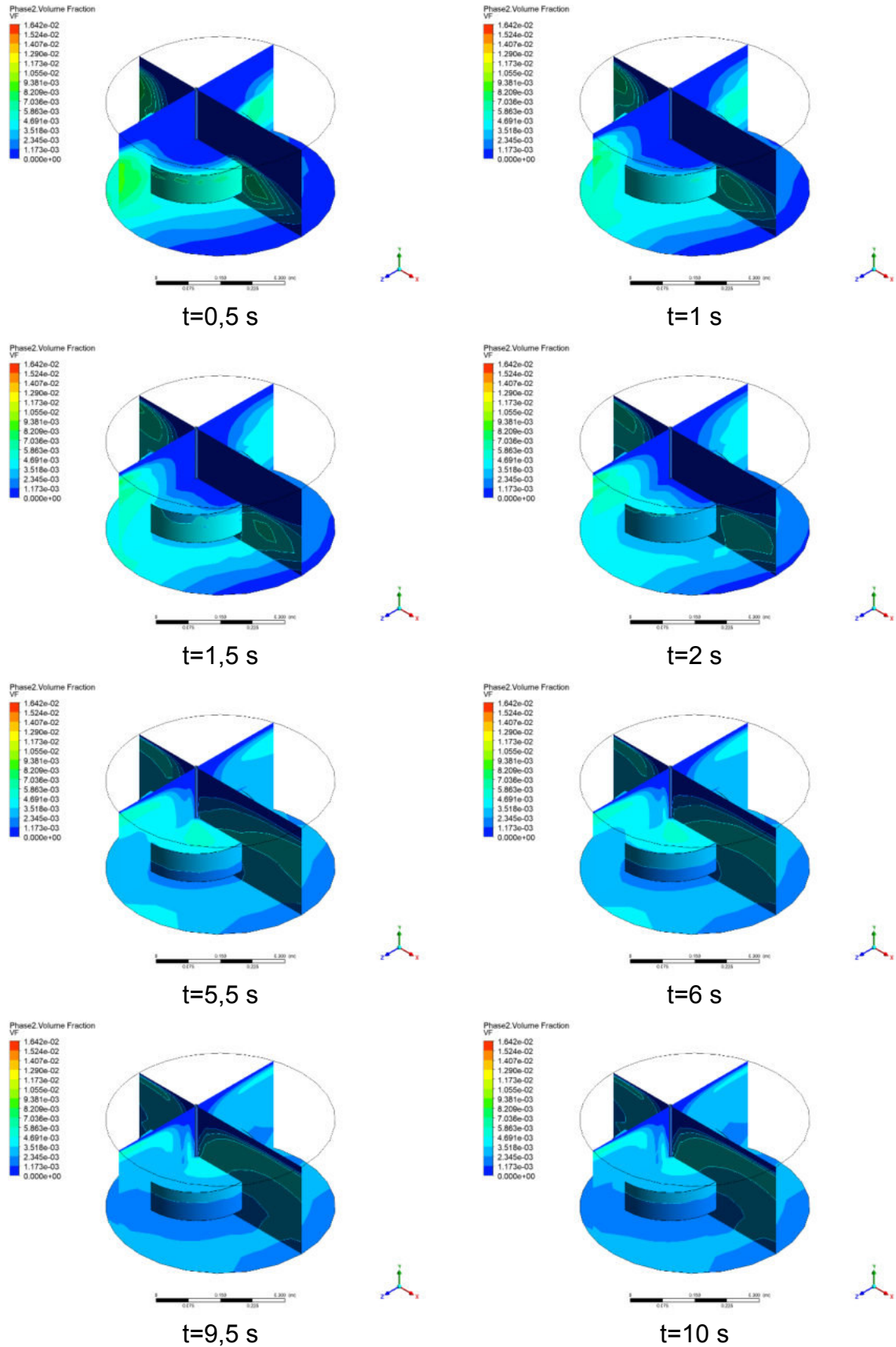
6.5.3.2.2 Perfis de distribuição do catalisador

Figura 46 – Perfil de distribuição impelidor atual a 500 rpm



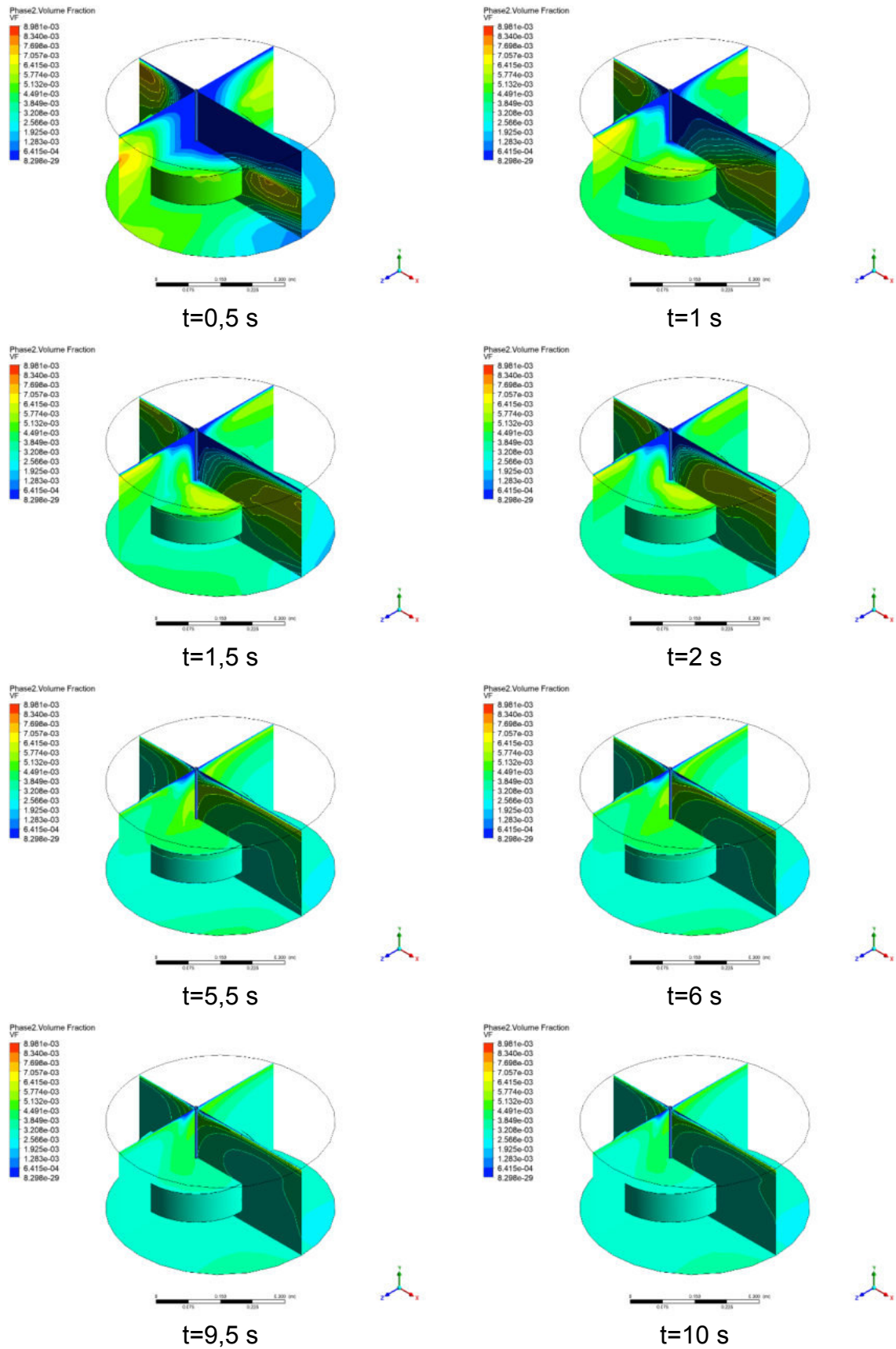
Fonte: próprio autor.

Figura 47 – Perfil de distribuição propulsor a 500 rpm



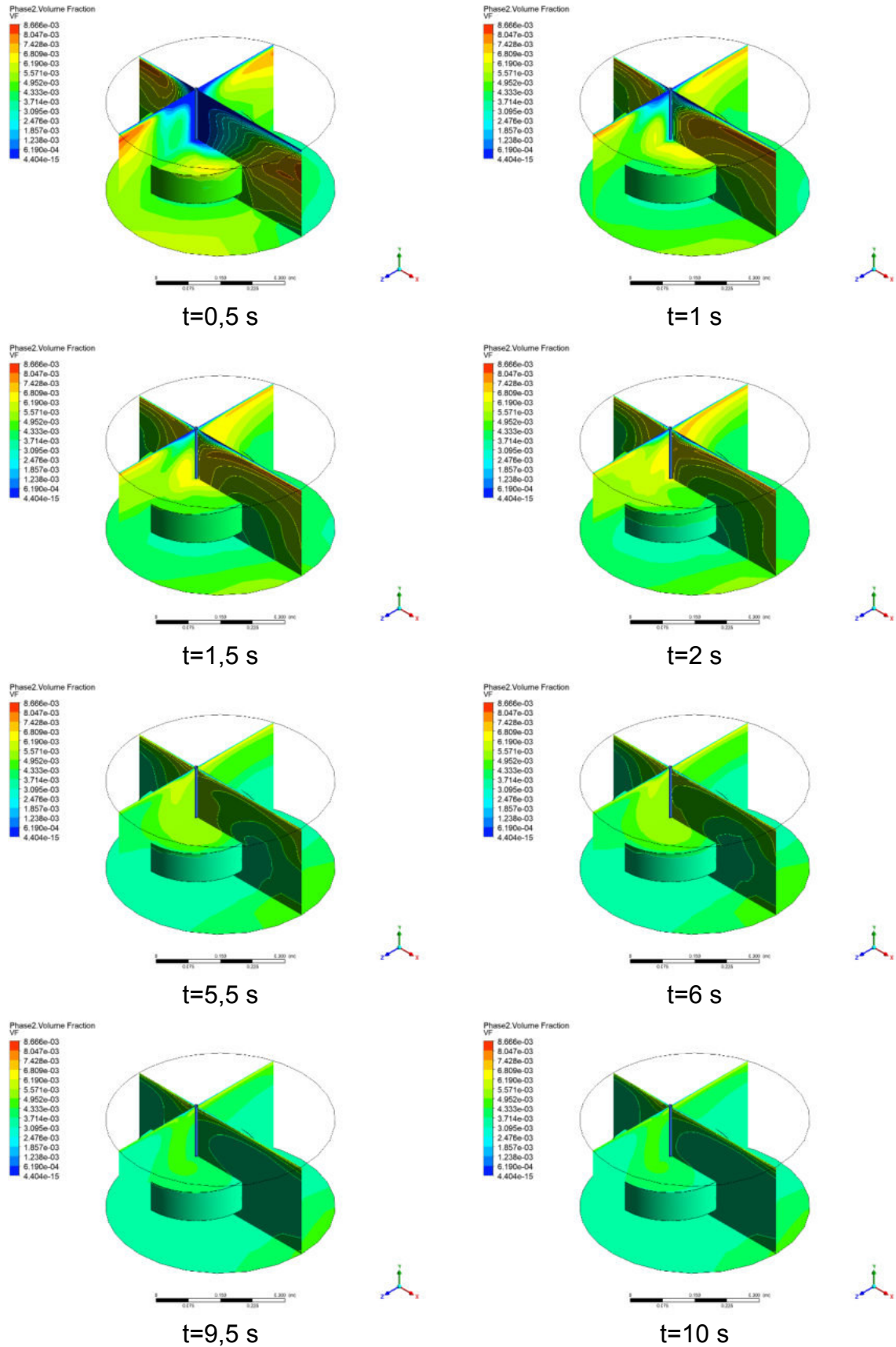
Fonte: próprio autor.

Figura 48 – Perfil de distribuição propulsor a 1100 rpm



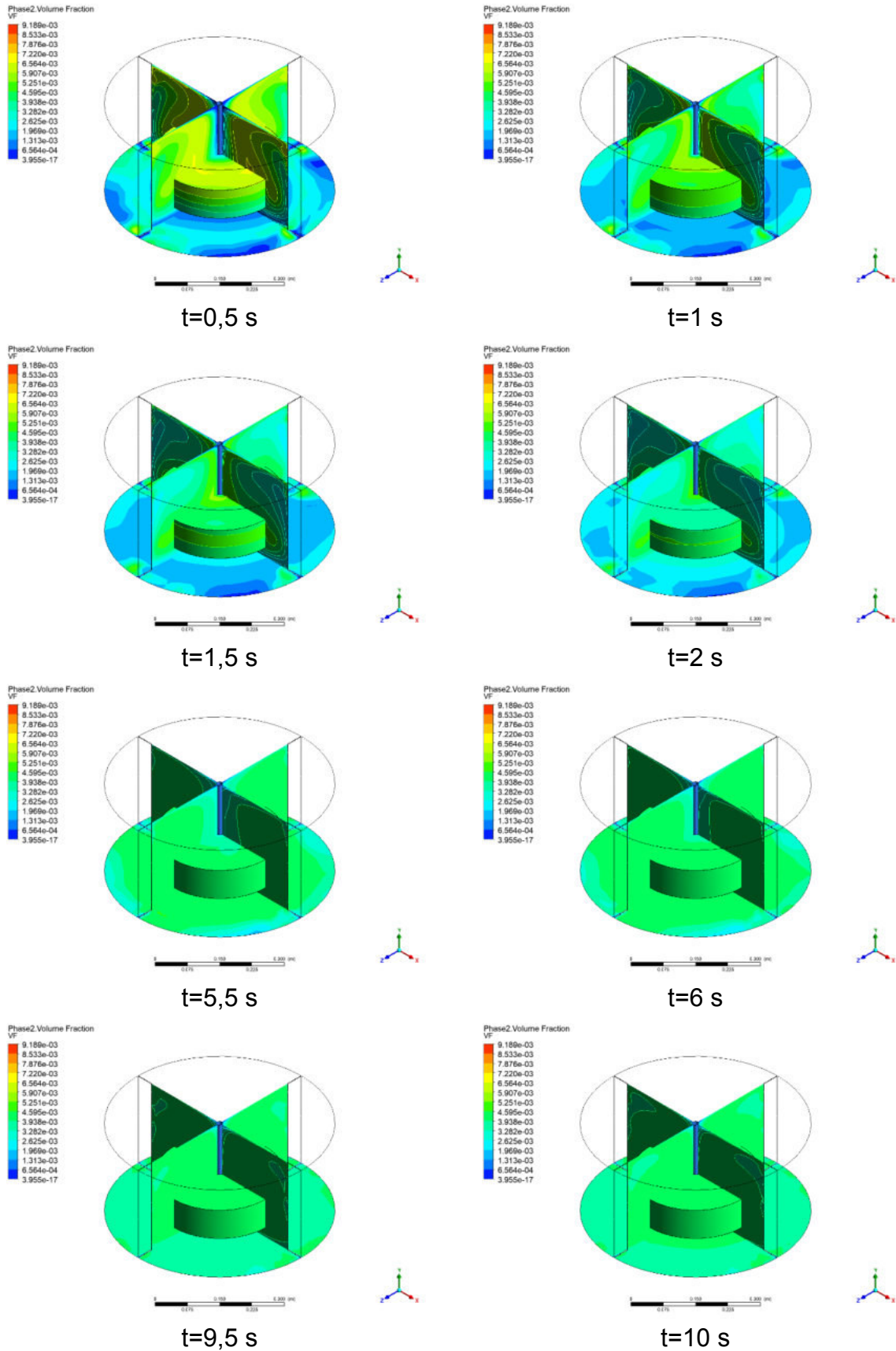
Fonte: próprio autor.

Figura 49 – Perfil de distribuição propulsor a 1700 rpm



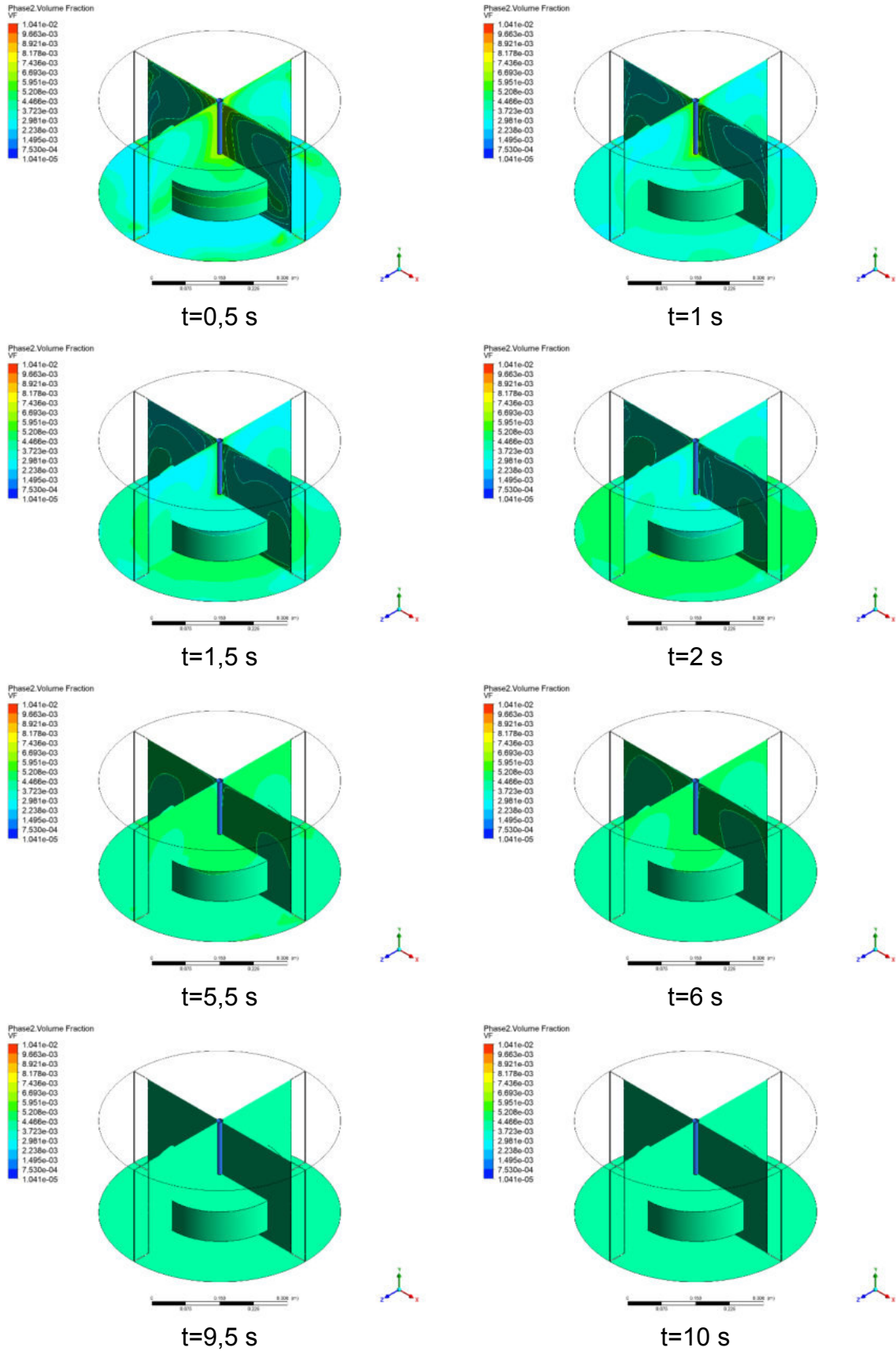
Fonte: próprio autor.

Figura 50 – Perfil de distribuição turbina Rushton a 2500 rpm



Fonte: próprio autor.

Figura 51 – Perfil de distribuição turbina Rushton a 5600 rpm

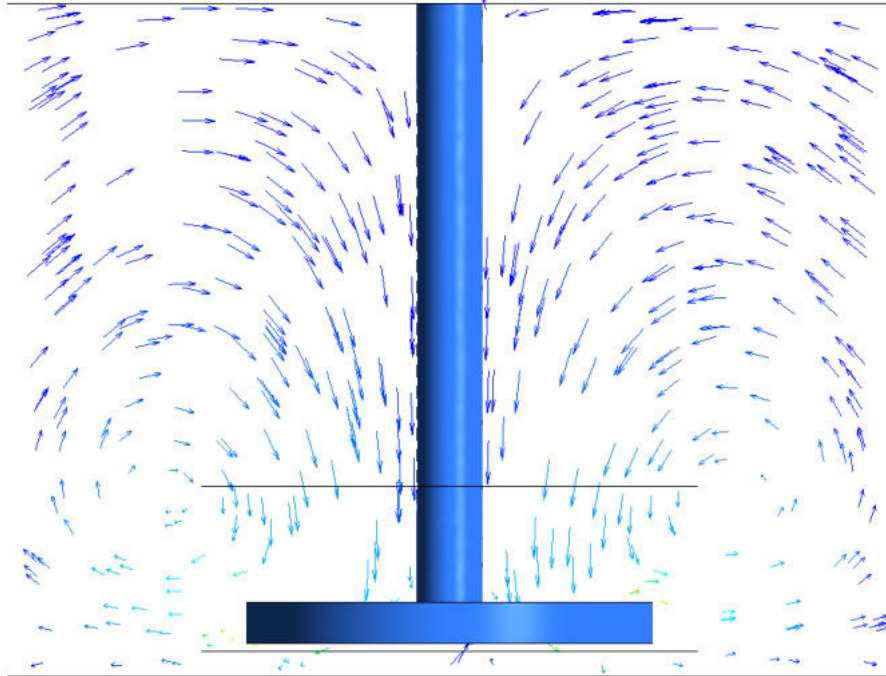


Fonte: próprio autor.

6.5.3.3 Espuma D40

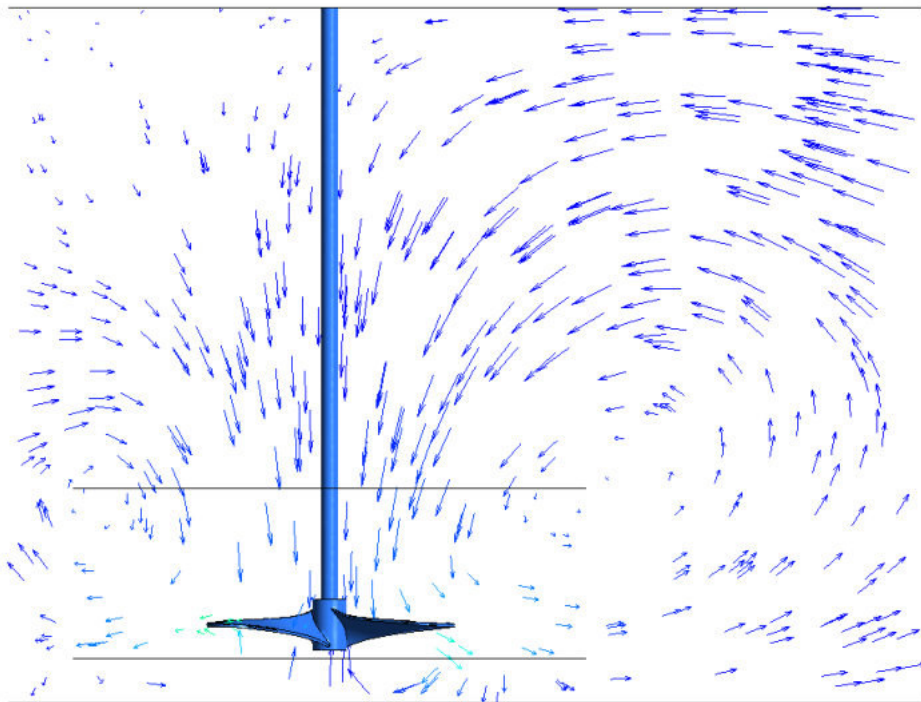
6.5.3.3.1 Perfis de agitação

Figura 52 – Perfil de agitação impelidor atual



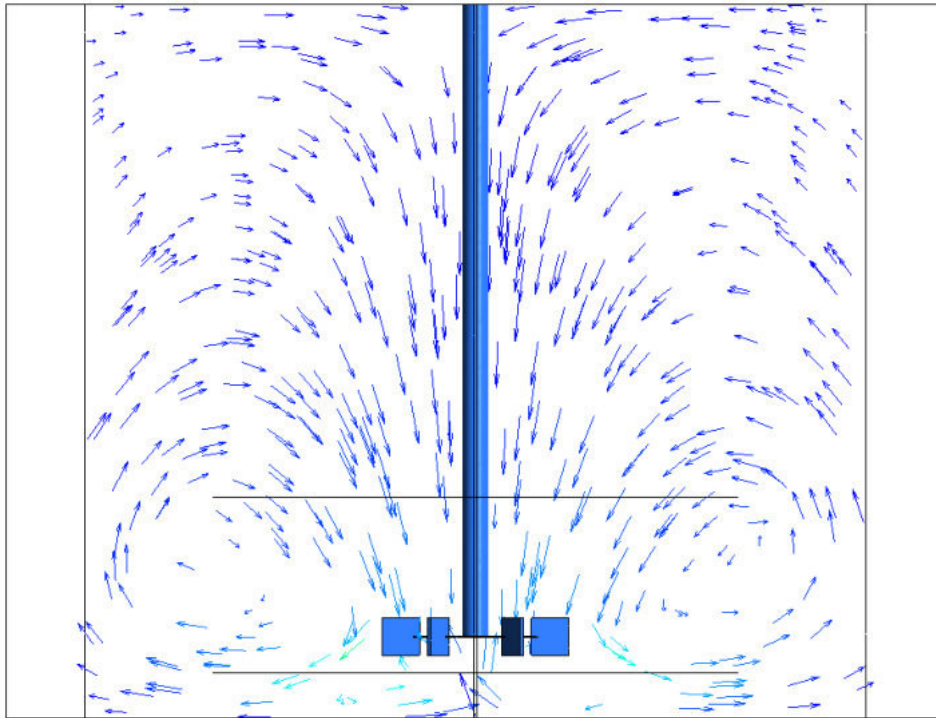
Fonte: próprio autor.

Figura 53 – Perfil de agitação propulsor



Fonte: próprio autor.

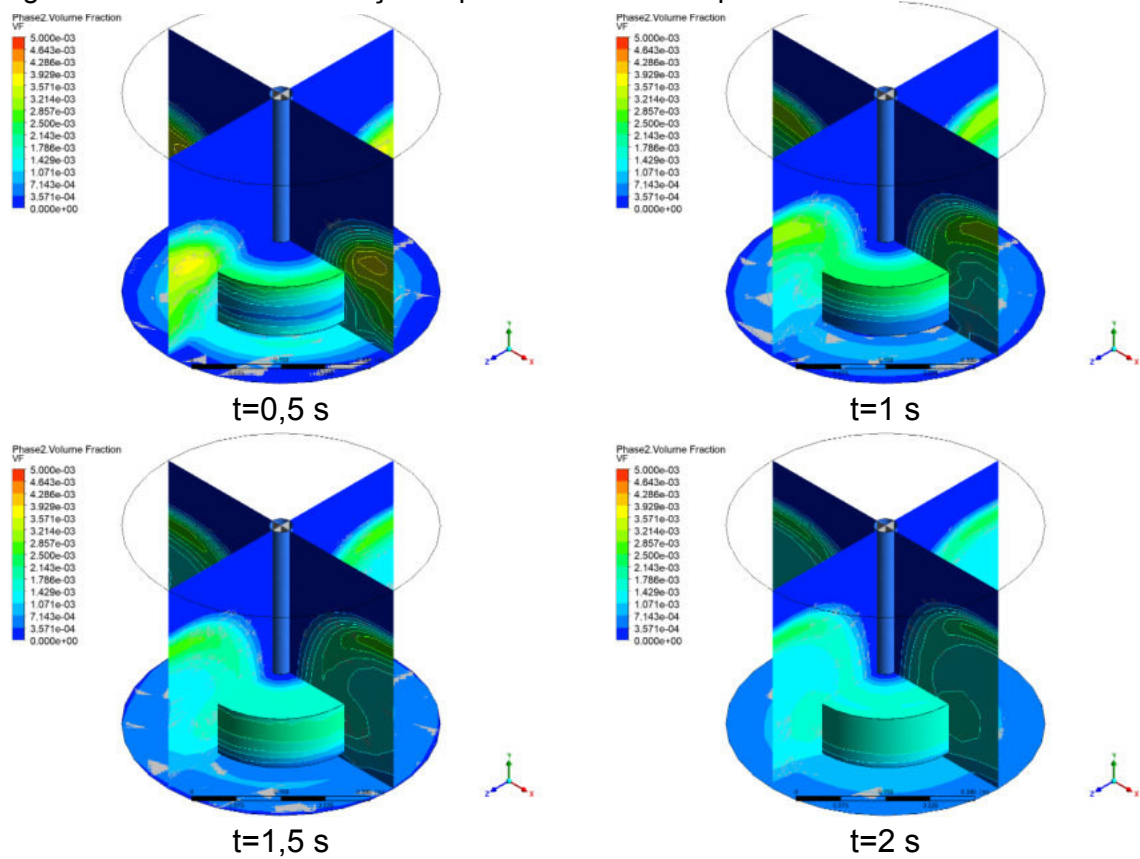
Figura 54 – Perfil de agitação turbina Rushton

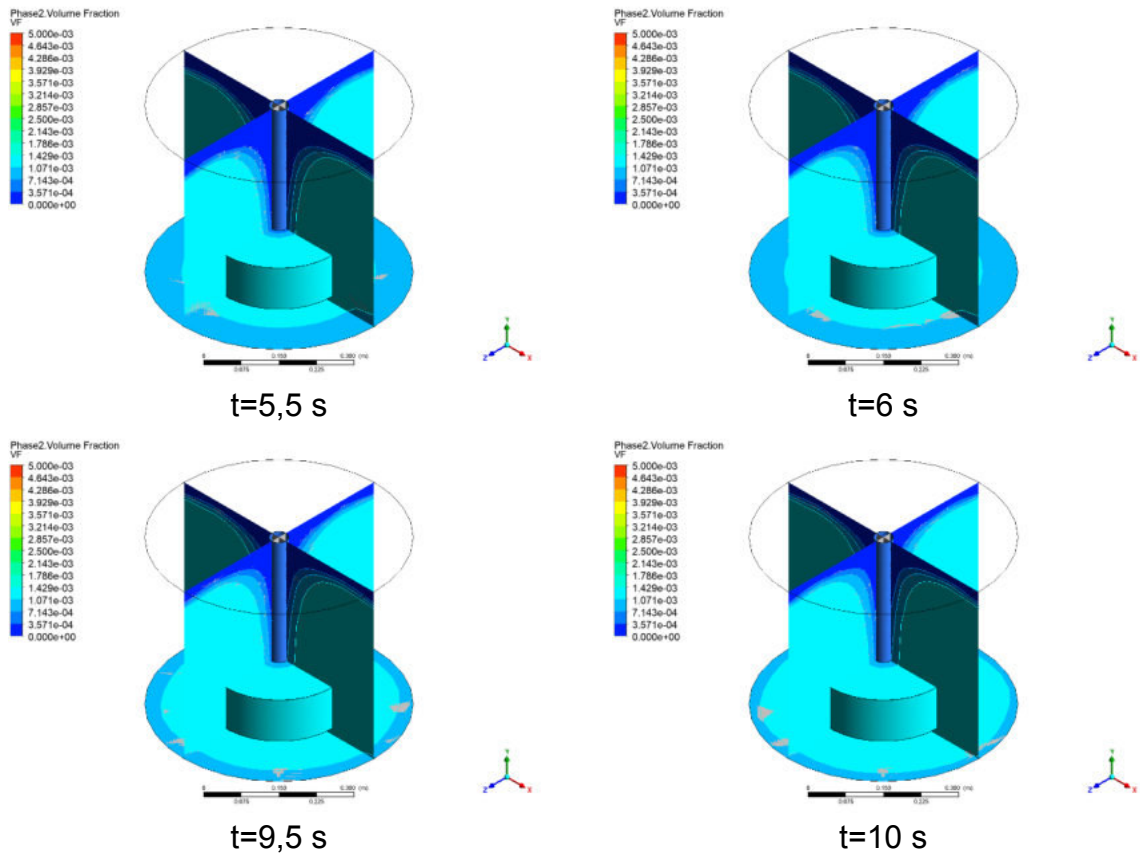


Fonte: próprio autor.

6.5.3.3.2 Perfil de distribuição do catalisador

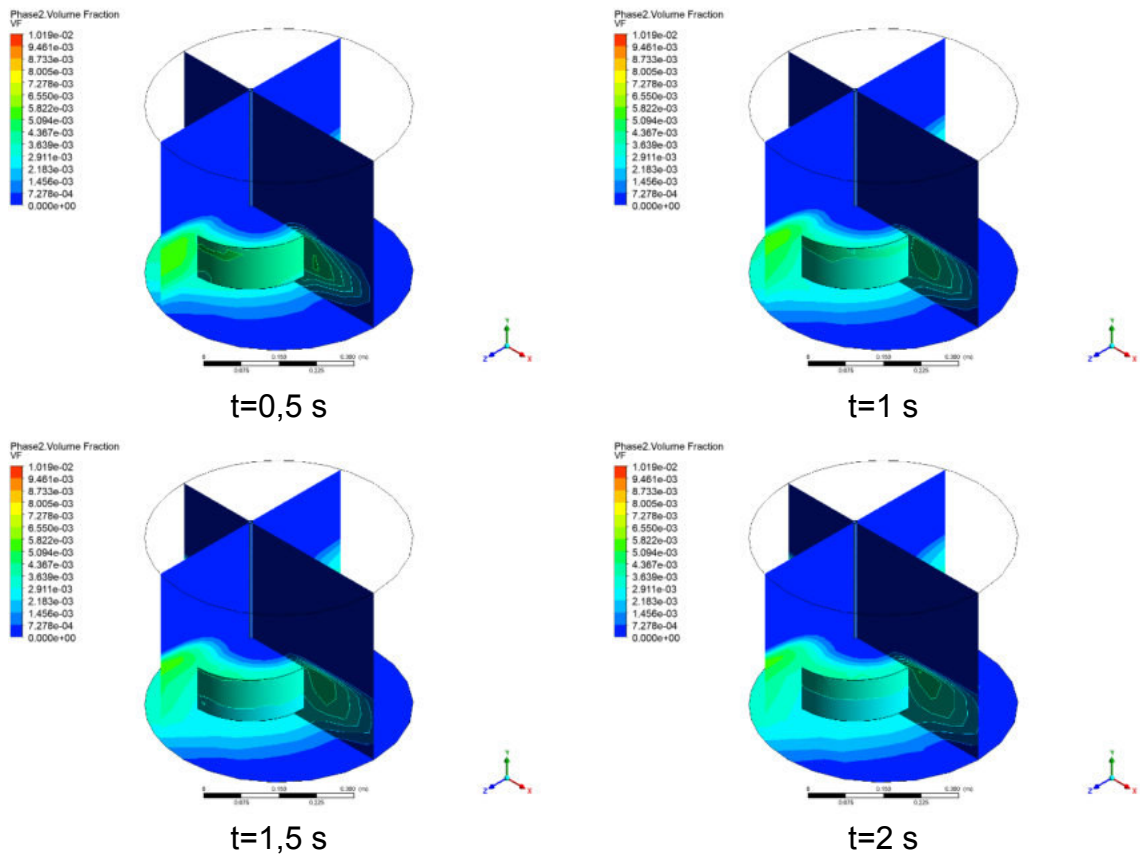
Figura 55 – Perfil de distribuição impelidor atual a 500 rpm

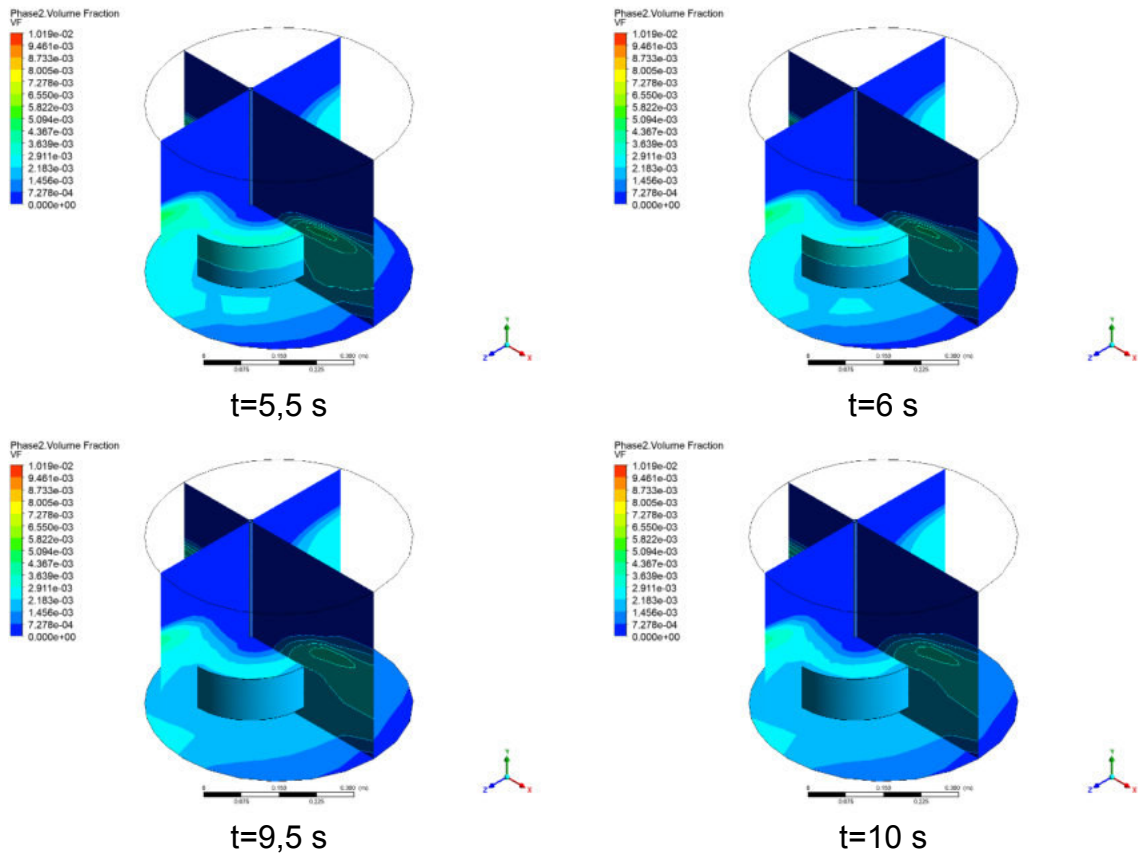




Fonte: próprio autor.

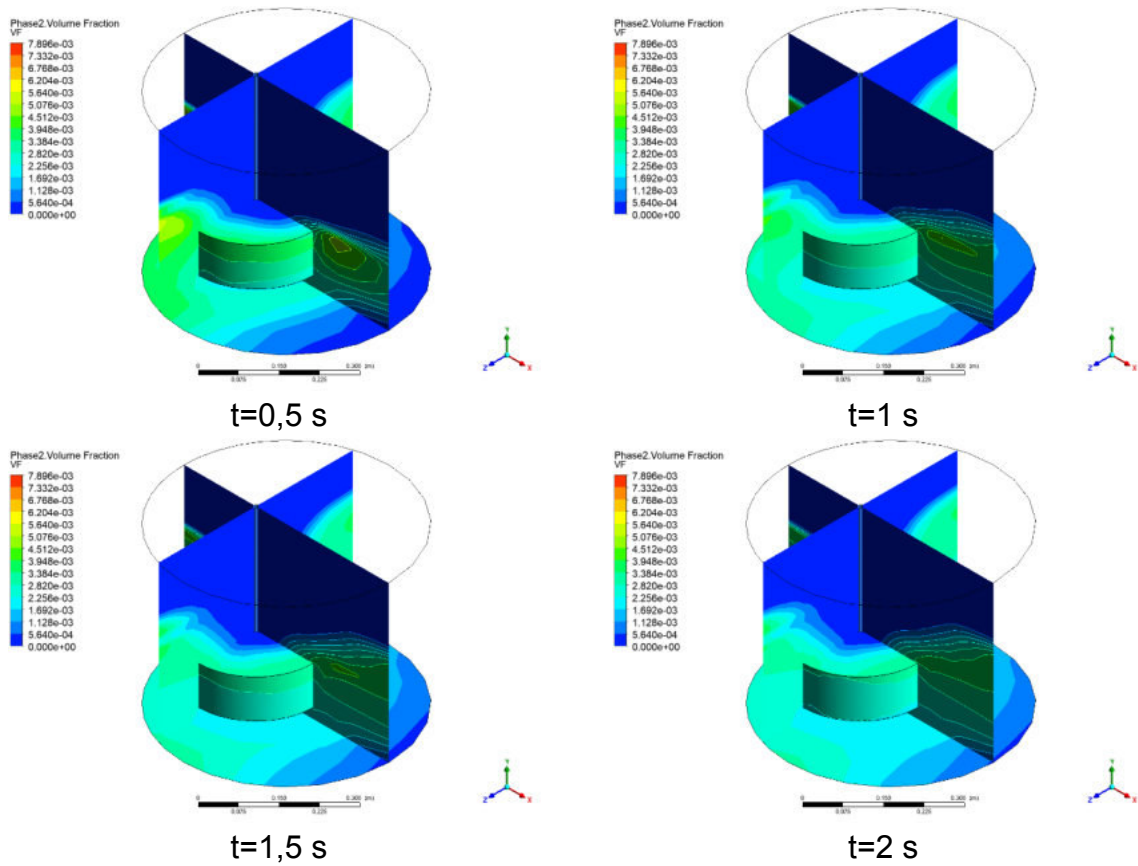
Figura 56 – Perfil de distribuição propulsor a 500 rpm

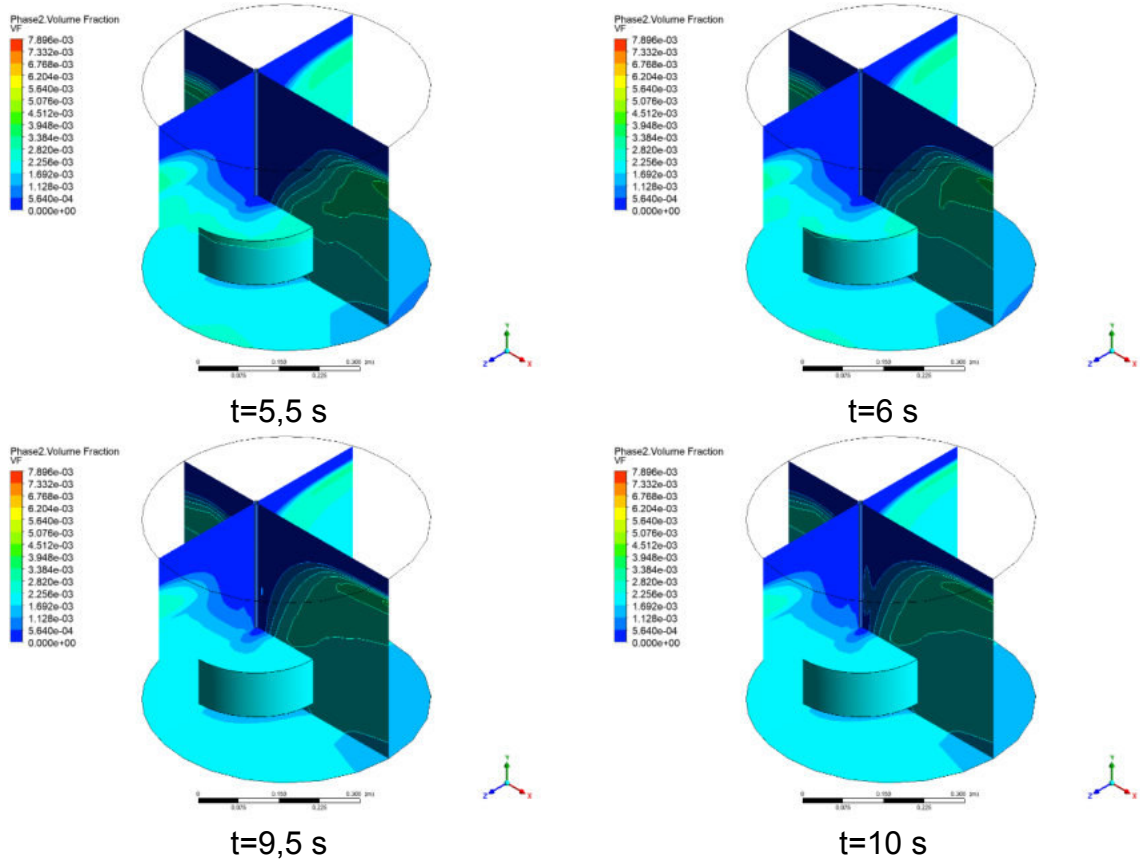




Fonte: próprio autor.

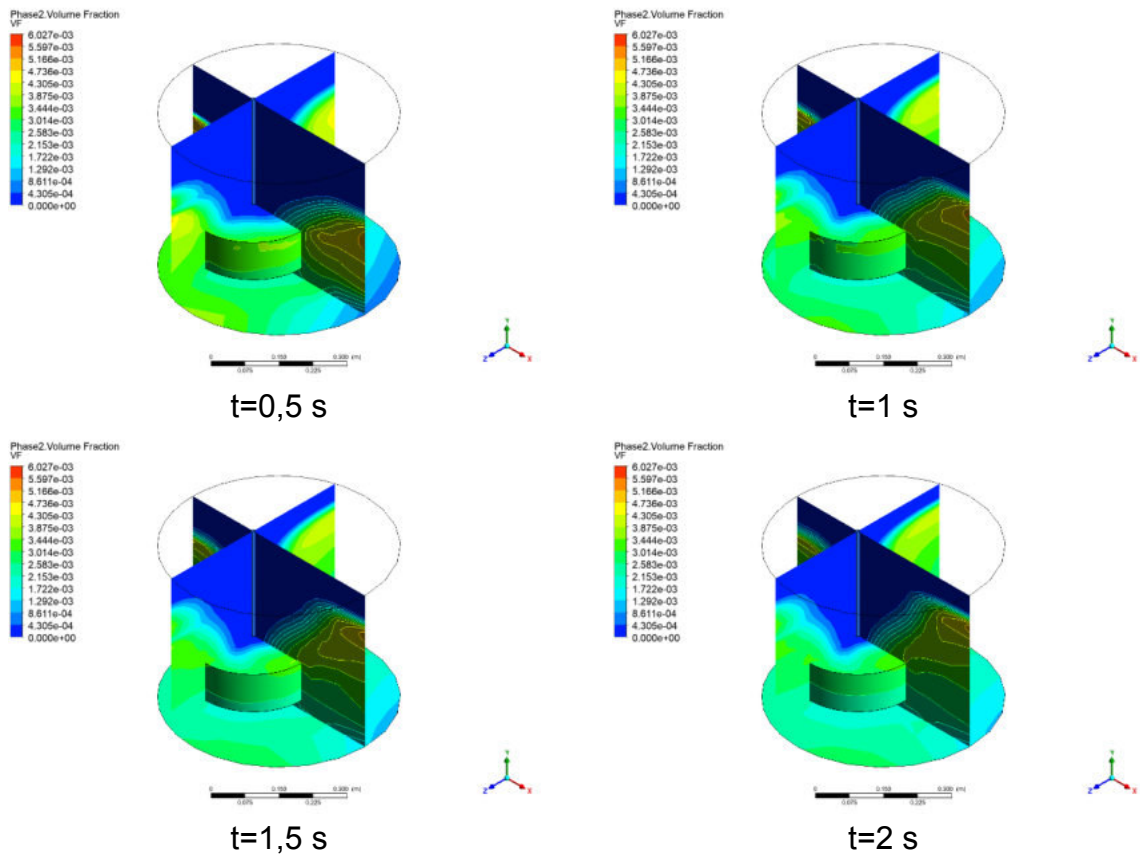
Figura 57 – Perfil de distribuição propulsor a 1100 rpm

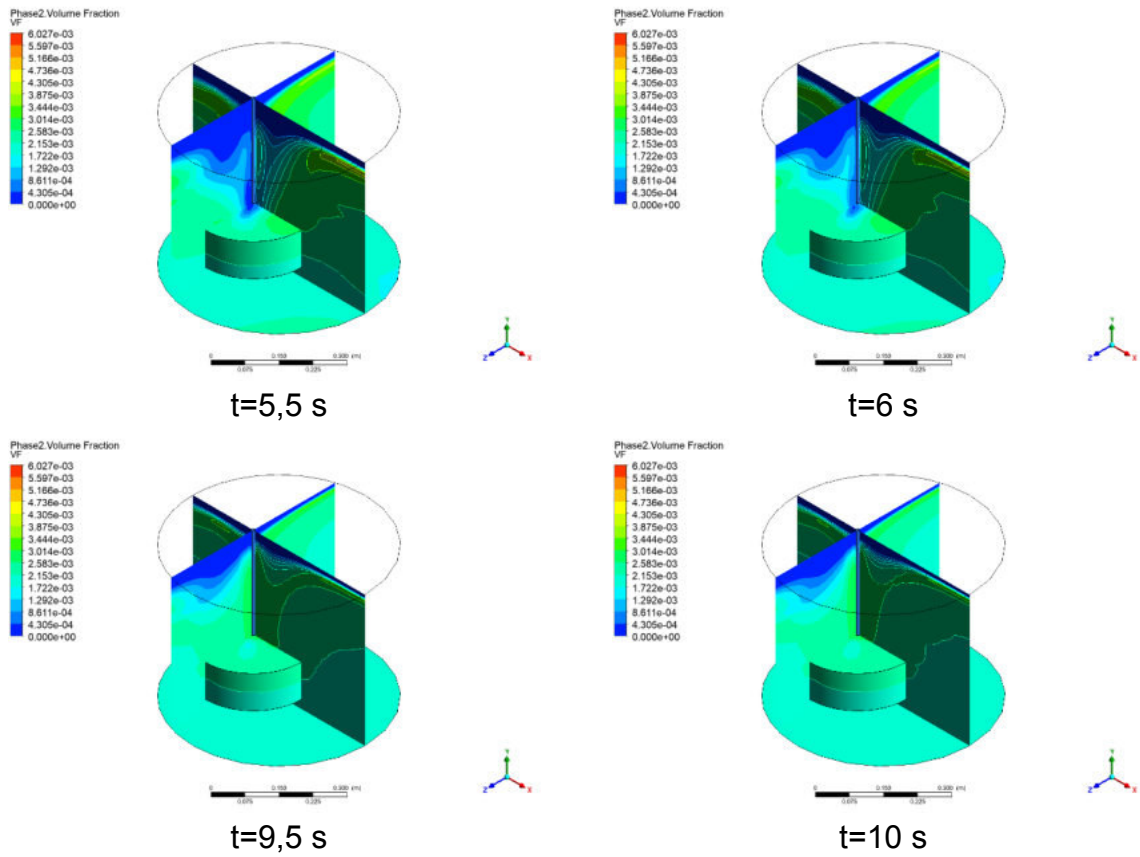




Fonte: próprio autor.

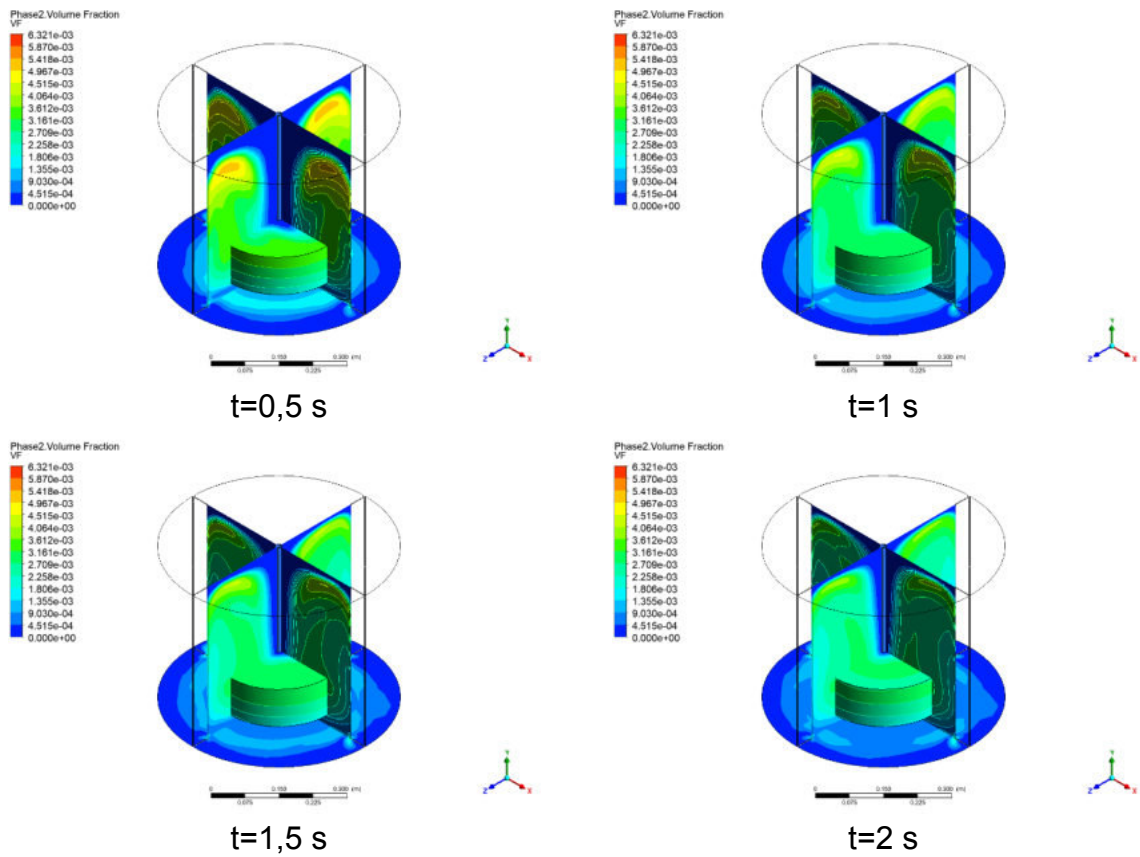
Figura 58 – Perfil de distribuição propulsor a 1700 rpm

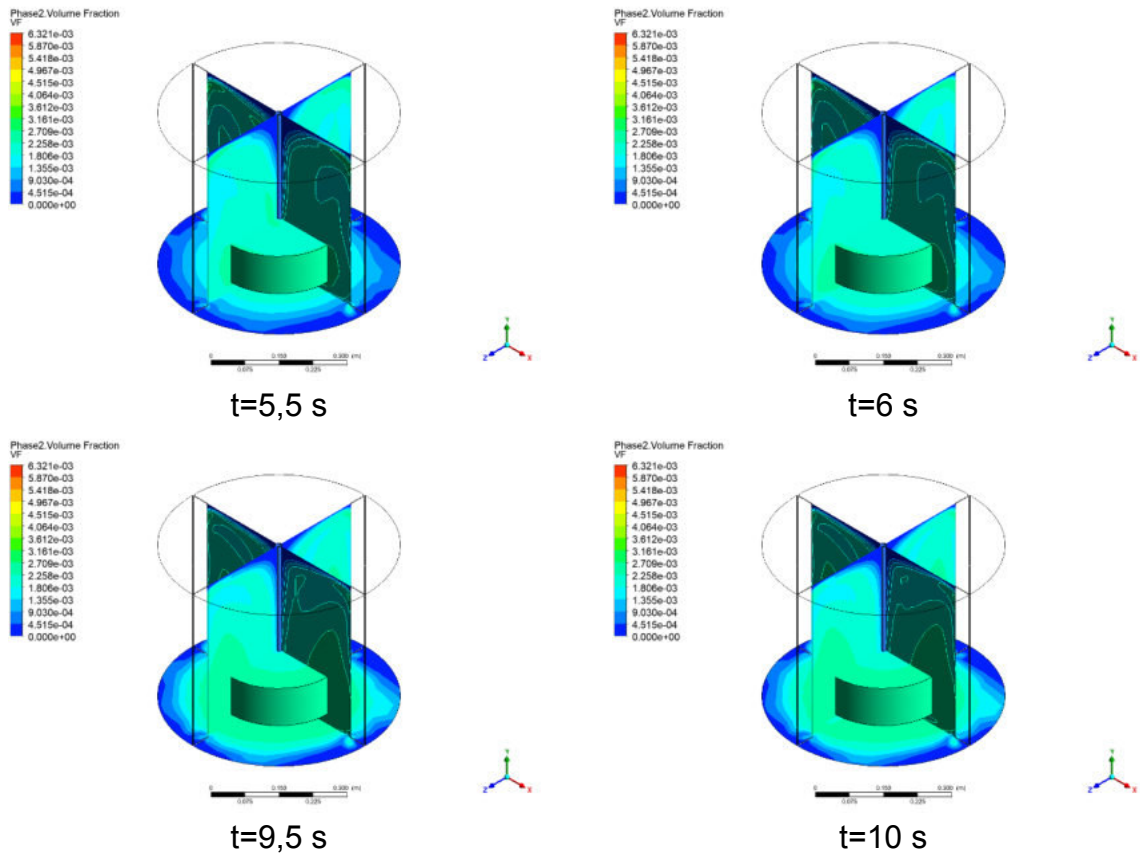




Fonte: próprio autor.

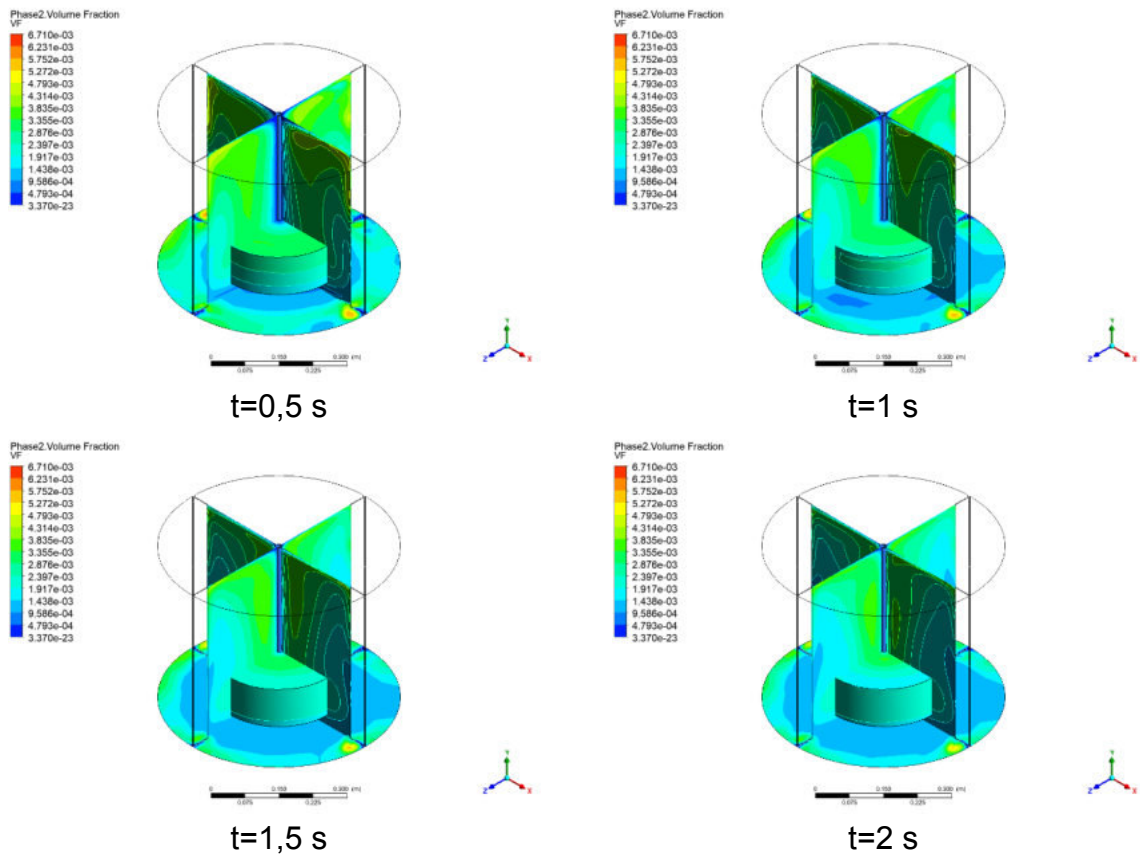
Figura 59 – Perfil de distribuição turbina Rushton a 2500 rpm

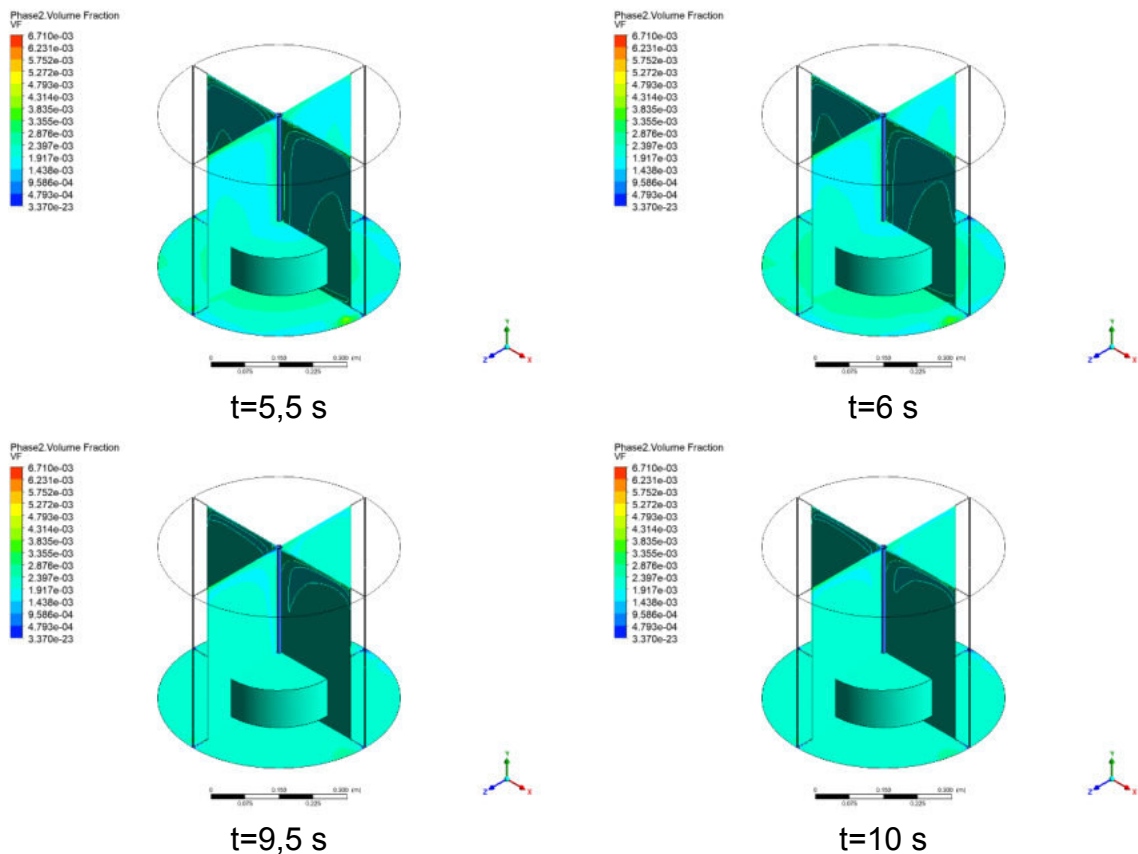




Fonte: próprio autor.

Figura 60 – Perfil de distribuição turbina Rushton a 5600 rpm





Fonte: próprio autor.

6.5.4 Análise simulações definitivas

Assim como nas simulações intermediárias, os perfis de agitação para os impelidores se assemelham bastante aos vistos na literatura. Um fato interessante é o perfil desenvolvido pelo impelidor atual na espuma D10, que se assemelha muito ao de um tipo turbina com chicanas.

Quanto aos perfis de distribuição, o impelidor atual apresentou uma homogeneização mais rápida para os casos das espumas D10 e D30, mas apresenta uma zona de baixa concentração bem definida no caso da espuma D40. Também se observou que o impelidor deslocado gera uma distribuição bem heterogênea com a região mais afastada do impelidor demandando mais tempo para homogeneizar.

Mais uma vez também se observa como o incremento da velocidade acelera a distribuição do catalisador no meio ao se observar os perfis do propulsor a 1700 rpm e turbina Rushton a 5600 em relação as de velocidade menor, com destaque para esta última que gerou uma boa homogeneização em todos os casos.

7 CONCLUSÃO

Foi possível atingir o objetivo geral de realizar uma análise preliminar do processo de mistura em questão. Nela conseguiu-se estimar a densidade e a viscosidade média, medidas necessárias para se gerar um valor de Reynolds que mostrou que o sistema está em um estado de transição, onde aspectos laminares e turbulentos ocorrem concomitantemente, além de comparar o processo atual a processos propostos baseados na literatura.

Também conseguiu-se alcançar o objetivo de gerar um modelo que, em um primeiro momento, descreveu o comportamento dos instantes iniciais do processo. Esse modelo foi gerado no ANSYS Fluent, utilizando o *solver pressure-based*, e os modelos de mistura para as fases, e modelo SST para a viscosidade turbulenta. Outros modelos foram propostos, mas, como exposto anteriormente, eles não produziram resultados consistentes para as diferentes espumas.

Quanto ao objetivo de simular os instantes iniciais, a simulação do processo atual mostrou que o perfil de agitação é condizente com o exposto na literatura e percebeu-se que, apesar de o modelo não se propor a analisar o tempo de mistura, há uma boa e rápida distribuição do catalisador organometálico no meio.

No que diz respeito ao objetivo de propor outras montagens para o processo, foi realizada a proposição de outras duas montagens que poderiam afetar positivamente o processo: um impelidor do tipo propulsor e descentralizado, e um impelidor tipo turbina Rushton com chicanas. As geometrias desses impelidores, assim como a do impelidor atual, foram geradas através do *software SolidWorks* e eles possuíam 161mm e 106mm de diâmetro respectivamente. Além disso, foram propostas velocidades para esses impelidores a fim de compensar a perda de turbulência advinda dos seus diâmetros serem menores que o impelidor atual obtendo-se 1100 rpm para o propulsor e 2500 rpm para a turbina. Também foram propostas velocidades corrigidas baseadas nas taxas volumétricas dos impelidores, obtendo-se as velocidades de 1700 rpm para o propulsor e 5600 rpm para a turbina Rushton. Os resultados das simulações para os perfis de agitação desses impelidores mostraram que os fluxos seguem perfis esperados pela literatura e tem-se uma melhora na distribuição do catalisador no meio com o aumento da velocidade de rotação.

No entanto, no tocante ao objetivo da comparação dos resultados dos perfis de distribuição do impelidor atual e dos impelidores propostos, percebeu-se que, no geral,

o desempenho do impelidor atual não difere o suficiente da maioria dos casos dos dimensionados a partir da literatura consultada, apresentando até um desempenho melhor em alguns momentos; com exceção da espuma D40 nas simulações finais, onde a turbina a 5600 rpm apresentou melhor performance. Com isso, não é interessante, e nem recomendado, uma possível substituição da montagem atual pelas montagens propostas, uma vez que não haveria melhorias expressivas para o processo.

É importante ressaltar que o modelo utilizado foi bem simplificado e, apesar de sua proposição encontrar embasamento na literatura, é importante que ele seja corroborado por dados reais que possam ser obtidos através de experimentos, por exemplo. Além disso, é interessante o desenvolvimento de um modelo que leve em consideração todos os componentes e fases, além das trocas térmicas e mássicas.

Uma vez proposto um modelo mais completo, é interessante analisar a mistura de outras espumas, além da influência de outras variáveis como o diâmetro do tanque, influência da temperatura e outros tipos de impelidores, como o impelidor de disco com dentes de serra. Ainda, na condição de análise preliminar, este estudo não analisou aspectos importantes como o tempo ideal de mistura, a potência aplicada e a mistura durante a reação, sendo também deixado aqui como indicação para estudos futuros.

REFERÊNCIAS

- AMEUR, H.; BOUZIT, M.; GHENAIM, A. **Numerical study of the performance of multistage Scaba 6SRGT impellers for the agitation of yield stress fluids in cylindrical tanks.** *Journal of Hydrodynamics*. v. 27, n. 3, p. 436-442, 2015.
- ANSYS. **ANSYS FLUENT Theory Guide.** Disponível em: https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/th/main_pre.htm. Acesso em: 25/04/2023.
- ANSYS. **ANSYS FLUENT User Guide.** Disponível em: https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/ug/main_pre.htm. Acesso em: 25/04/2023.
- BATES R. L.; FONDY, P. L.; CORPSTEIN, R. R. **Examination of Some Geometric Parameters of Impeller Power.** *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*. v. 2, n.4, p. 311, out. 1963.
- CANAUD, C. **Tecnologia do Poliuretano.** Rede de Tecnologia do Rio de Janeiro, 2007.
- CHORIN, A. J. **Numerical Solution of the Navier-Stokes Equations.** *Mathematics of Computation*. Chicago, v.22, n. 104, p. 745-762, 1968.
- COUPER, J. R.; PENNEY, W. R.; FAIR, J. R.; WALAS, S. M. **Chemical Process Equipment.** Massachusetts, Elsevier Inc., 2010.
- FOX, W. R.; MCDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J. **Introduction to fluid mechanics.** John Wiley & Sons, 2011.
- GRAY, J. B.; UHL, V. W. **Theory and Practice, Vol. 1.** Academic Press, 1966.
- HANJALIC, K.; LAUNDER, B. E. **A Reynolds stress model of turbulence and its application to thin shear flows.** *Journal of Fluid Mechanics*. Londres, v. 52, n. 4, p. 609-638, 1972.
- HAQUE, J. N.; MAHMUD, T.; ROBERTS, K. J. **Modeling Turbulent Flows with Free-Surface in Unbaffled Agitated Vessels.** *Industrial & Engineering Chemistry Research*. Leeds, v. 45, p. 2881-2891, 2006.
- JOSHI, P. A.; SHAH, H. R.; VYAS, D. J.; DHANWANI, A. P.; SHAH, M. P. **Process Engineering: Agitation and Mixing.** India, Anchor Institute, 2012.
- KARL-JORDAN, F.; PETRI, H. **AGITATION HANDBOOK.** Estocolmo, KTH Industrial Engineering and Management, 2007.
- MADHANIA, S.; NURTONO, T.; CAHYANI, A. B.; CAROLINA; MUHARAM, Y.; WINARDI, S.; PURWANTO, W. W. **Mixing Behaviour of Miscible Liquid-Liquid Multiphase Flow in Stirred Tank with Different Marine Propeller Installment by Computational Fluid Dynamics Method.** *Italian Association of Chemical Engineering*. v. 56, p. 1057-1062, 2017.
- MCCABE, W. L.; SMITH, J. C.; HARRIOTT, P. **Unit operations of chemical engineering.** Nova Iorque, McGraw-Hill Education, 2004.

MENTER, F. R. **Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications**. AIAA Journal. California, v. 32, n. 8, p. 1598-1605, ago. 1994.

MORDOR INTELLIGENCE. **Polyurethane market size and share analysis – growth trends and forecasts (2023-2028)**. India. Disponível em: <https://www.mordorintelligence.com/industry-reports/polyurethane-market>. Acesso em: 25/05/2023.

NAVIER, M. **Memoire sur les lois du movement des fluids**. Academia Real de Ciências. Mar. 1822.

PAUL, E. L.; ATIEMO-OBENG, V. A.; KRESTA, S. M. **Handbook of industrial mixing: science and practice**. Nova Jersey, John Wiley & Sons, 2004.

REWATKAR, V. B.; JOSHI, J. B. **Effect of impeller design on liquid phase mixing in mechanically agitated reactors**. *Chemical Engineering Communications*. Bombay, v. 102, n. 1, p. 1-33, 1991.

REYNOLDS, O. **An Experimental Investigation of the Circumstances which determine whether the Motion of Water shall be Direct or Sinuous, and of the Law of Resistance in Parallel Channels**. Royal Society Publishing. p. 935-982, mar. 1883.

SAHA, I.; MUKHERJEE, T.; PANDEY, R. **Comparative Study of Mixture Model and Eulerian Model used in Hydrocyclone with help of CFD simulation**. SSRN Electronic Journal. jan. 2020.

STOKES, G. G. **On the Theories of the Internal Friction of Fluids in Motion, and of the Equilibrium and Motion of Elastic Solids**. abr. 1845.

SZYCHER, M. **Szycher's Handbook of Polyurethanes**. CRC Press, 2012, v. 2.

TOHKEMY CORPORATION. **Agitator General Catalog**. Tohkemy Corporation.

VILAR, W. **Química e Tecnologia dos Poliuretanos**. Vilar Consultoria, 2002.

WILCOX, D. C. **Reassessment of the Scale-Determining Equation for Advanced Turbulence Models**. AIAA Journal. California, v. 26, n. 11, p. 1299-1310, nov. 1988.