

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
ENGENHARIA QUÍMICA

SABRINA PEREIRA ISHIDA

ANÁLISE DA EFICIÊNCIA DE UM REATOR TUBULAR (PFR)
SUBMETIDO A DIFERENTES MODOS DE ALIMENTAÇÃO

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

PONTA GROSSA

2017

SABRINA PEREIRA ISHIDA

**ANÁLISE DA EFICIÊNCIA DE UM REATOR TUBULAR (PFR)
SUBMETIDO A DIFERENTES MODOS DE ALIMENTAÇÃO**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado como requisito parcial à obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química, do Departamento de Engenharia química, da Universidade Tecnológica Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Everton Moraes Matos

PONTA GROSSA



TERMO DE APROVAÇÃO

ANÁLISE DA EFICIÊNCIA DE UM REATOR TUBULAR (PFR) SUBMETIDO A DIFERENTES
MODOS DE ALIMENTAÇÃO

por

Sabrina Pereira Ishida

Monografia apresentada no dia 11 de setembro de 2017 ao Curso de Engenharia Química da Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Câmpus Ponta Grossa. O candidato foi arguido pela Banca Examinadora composta pelos professores abaixo assinados. Após deliberação, a Banca Examinadora considerou o trabalho aprovado.

Prof^a. Dr^a. Elis Regina Duarte

Prof^a. Dr^a. Juliana Martins Teixeira de Abreu Pietrobelli

Prof^o. Dr^o. Eveton Moraes Matos
Orientador

Profa. Dra. Juliana de Paula Martins
Responsável pelo TCC do Curso de Engenharia Química

“A Folha de Aprovação assinada encontra-se na Coordenação do Curso de
Engenharia Química”

Dedico este trabalho a todos aqueles que mediante às dificuldades da existência, não temem essa jornada hercúlea de que a vida é feita, e prosseguem firmes no constante aprendizado de existir.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente gostaria de agradecer a Deus e ao plano espiritual divino por permitir esta jornada e conceder força e discernimento para que fosse concluída. Aos meus pais, que viabilizaram esta formação, e sem os quais nada disso seria possível.

Agradeço ao querido Prof.^o Dr.^o Everton Moraes Matos por orientar este trabalho, pela paciência, pelas inúmeras conversas e, principalmente, pelos conhecimentos repassados para que este trabalho fosse concluído. Agradeço também ao Programa de Educação Tutorial de Engenharia Química e à Prof.^a Dr.^a Elis Regina Duarte pela colaboração, apoio e amizade nos momentos mais difíceis.

Por fim, a todos os professores desta graduação, aos meus amigos, colegas, e todos aqueles que direta ou indiretamente viabilizaram a conclusão deste trabalho, muito obrigada.

RESUMO

ISHIDA, Sabrina. **ANÁLISE DA EFICIÊNCIA DE UM REATOR TUBULAR (PFR) SUBMETIDO A DIFERENTES MODOS DE ALIMENTAÇÃO.** 2017. 62 folhas Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado Engenharia Química) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Ponta Grossa, 2017.

Os reatores de escoamento empistonado são amplamente utilizados na indústria química. As modificações da alimentação em reatores deste tipo constituem em uma alternativa que pode gerar aumento na conversão de reagentes devido à formação de zonas agitadas no interior do reator. O presente trabalho propõe a análise da influência da alimentação de reatores tubulares através de técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD). As simulações das geometrias e modos de operação para o estudo proposto foram realizadas no *software* comercial ANSYS CFX e comparadas à simulação de uma geometria de reator padrão operando em regime permanente a fim de observar os efeitos gerados pelas modificações propostas. O *design* de reator proposto, alimentado em corrente oblíqua e através de uma alça de refluxo mostra-se capaz de criar uma zona turbulenta no interior do reator, além de gerar uma zona de baixa pressão, ocasionando uma corrente de refluxo sem a necessidade de uma bomba específica para este fim.

Palavras-chave: Reator, escoamento empistonado, simulação, alimentação, CFD

ABSTRACT

ISHIDA, Sabrina. **ANALYSIS OF THE EFFICIENCY OF A TUBULAR REACTOR (PFR) SUBMITTED TO DIFFERENT FEEDING MODES.** 2017. 62 sheets. Final Project (Bachelor in Chemical Engineering) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Ponta Grossa, 2014.

Plug flow reactors are widely used in the chemical industry. Feed modifications are an alternative that can generate increase in the reaction rate due to the formation of mixture zones inside the reactor. The present work proposes an analysis of the influence of the feeding of tubular reactors through computational fluid dynamics (CFD) techniques. The simulations of the geometries and modes of operation for the proposed study were performed without commercial software ANSYS CFX 14.0 and compared to the simulation of a standard reactor geometry operating under a permanent flow in order to observe the effects generated by the proposed modifications. The proposed reactor design, fed in an oblique current and through a reflux loop, is able to create a turbulent zone inside the reactor, besides generating a zone of low pressure, causing a reflux current without a need of a specific pump for this purpose.

Key words: Reactor, plug flow, simulation, feed, CFD

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Reator Contínuo de Tanque Agitado.....	18
Figura 2 - Desenho esquemático de um reator de escoamento empistonado (PFR)	19
Figura 3 - Desvios da idealidade em reatores tipo CSTR e PFR	20
Figura 4 - Escoamento turbulento com pontos de vorticidade.....	22
Figura 5 - Desenho esquemático de um reator PFR com corrente de alimentação oblíqua	23
Figura 6 - Desenho esquemático de reator com reciclo	24
Figura 7 - Desenho esquemático de reator PFR com alimentação oblíqua e corrente de reciclo sem bomba	25
Figura 8 - Tipos de elementos de malha aplicados a geometria 3D.....	28
Figura 9 - Malha bidimensional.	31
Figura 10 - Malha tridimensional.	31
Figura 11 - Volume de controle para coordenadas cilíndricas	34
Figura 12 - Geometria do reator de escoamento empistonado padrão.....	43
Figura 13 - Reator com alimentação oblíqua e alça de refluxo.....	44
Figura 14 - Reator proposto, vista do plano xz.....	44
Figura 15 - Gráfico de teste de malha para o reator padrão.....	46
Figura 16 - Gráfico de teste de malha para o reator proposto.....	46
Figura 17 - Malha numérica para o Reator Padrão vista do Plano ZX.....	47
Figura 18 - Malha numérica do reator padrão vista do Plano YZ.....	47
Figura 19 - Malha numérica para o Reator Proposto vista do Plano ZX.....	47
Figura 20 - Malha numérica do reator proposto vista do Plano YZ.....	48
Figura 21- Fração mássica de N_2O_3 em função do comprimento do reator em gráfico dado pelo CFX.....	53
Figura 22 - Espectro de fração mássica de N_2O_3 em função do comprimento do reator obtido através de simulação.....	53
Figura 23 - Espectro de consumo de N_2O_3 em função do comprimento do reator em termos de fração mássica.....	54
Figura 24 - Espectro de geração de NO em função do comprimento do reator em termos de fração mássica.....	54
Figura 25 - Espectro de geração de NO_2 em função do comprimento do reator em termos de fração mássica.....	55
Figura 26 - Espectro de consumo de N_2O_3 em função do comprimento do reator proposto em termos de fração mássica.....	55

Figura 27 - Espectro de geração de NO em função do comprimento do reator proposto em termos de fração mássica.....	56
Figura 28 - Espectro de geração de NO ₂ em função do comprimento do reator proposto em termos de fração mássica.....	56
Figura 29 - Linhas de corrente no interior do reator padrão vista do plano XY.....	57
Figura 30 - Linhas de corrente no interior do reator padrão vista isometricamente.....	57
Figura 31 - Linhas de corrente no interior do reator padrão vista do plano XY.....	58
Figura 32 - Linhas de corrente no interior do reator padrão vista isometricamente.....	58
Figura 33 - Entrada do reator vista em detalhe.....	59
Figura 34 - Plano de velocidades para o reator proposto na posição x=2,5 metros...	60
Figura 35 - Gráfico de perda de carga gerado pelo CFX para o reator padrão.....	60
Figura 36 - Gráfico de perda de carga gerado pelo CFX para o reator proposto.....	61

LISTA DE TABELAS E QUADROS

Tabela 1 - Valores de constante k e ε	38
Tabela 2 - Descrição da malha para o reator padrão.....	45
Tabela 3 - Descrição da malha para o reator proposto.....	45
Tabela 4 - Condições de contorno aplicadas ao sistema.....	50
Tabela 5 - Condições de contorno para o reator padrão.....	51
Tabela 6 - Valores utilizados como propriedades das substâncias puras.....	51

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1 - Fração mássica de N_2O_3 em função do comprimento do reator obtida através do método analítico.....	50
---	----

LISTA DE SÍMBOLOS

ρ	- Densidade
u	- Velocidade de escoamento de um fluido
Γ^ϕ	- Difusividade de uma variável genérica
δt	- Passo de tempo da iteração
x_L	- Dimensão do volume de controle ao longo da direção de escoamento
S^ϕ	- Termo de acúmulo
C_j	- Concentração de uma espécie genérica j
D_j	- Difusividade de uma espécie genérica j
r_j	- Taxa de reação
\vec{F}	- Vetor força
\vec{a}	- Vetor aceleração
m	- Massa
\vec{v}	- Vetor velocidade
τ_T	- Tensão total
\vec{n}	- Vetor normal
S_m	- Somatório de forças
p'	- Pressão modificada
k	- Energia cinética turbulenta
ε	- Taxa de dissipação da turbulência
μ_{eff}	- Viscosidade efetiva
μ_t	- Viscosidade turbulenta
P_k	- Produção de turbulência em decorrência das forças viscosas
$P_{kb} P_{ka}$	- Influência das forças de flutuação
$C_{\varepsilon 1}$	- Constante do modelo de tensão de Reynolds
$C_{\varepsilon 2}$	- Constante do modelo de tensão de Reynolds
σ_k	- Constante do modelo de turbulência $k - \varepsilon$ para a equação de k
σ_ε	- Constante do modelo de turbulência $k - \varepsilon$
k_j	- Constante de velocidade para uma espécie genérica j
R	- Constante universal dos gases
C_j	- Concentração da espécie j
T	- Temperatura
E	- Energia de ativação
r_j	- Velocidade de reação para a espécie j
F_j	- Taxa molar para uma espécie j
G_j	- Taxa molar de geração para uma espécie j
k_j	- Constante de proporcionalidade
X_j	- Fração mássica para a espécie j
M_j	- Massa molar para a espécie j

LISTA DE SIGLAS

CFD	-	Computational Fluid Dynamics (Fluidodinâmica Computacional)
CSTR	-	<i>Continuous Stirred-Tank Reactor</i> (Reator de tanque agitado)
DNS	-	Direct Numerical Simulation (Simulação numérica direta)
EDPs	-	Equações Diferenciais Parciais
PBR	-	<i>Packed Bed Reactor</i> (Reator empacotado)
PFR	-	<i>Plug Flow Reactor</i> (Reator de escoamento empistonado)
RANS	-	Reynolds Averaged Navier-Stokes (Equação da média de Reynolds para Navier-Stokes)
MDF	-	Método das diferenças finitas
MEF	-	Método dos elementos finitos
MVF	-	Método dos volumes finitos

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1	
1. INTRODUÇÃO	14
1.1. PROBLEMA	15
1.2. OBJETIVOS	15
1.2.1. Objetivo geral	15
1.2.2. Objetivos específicos	16
1.3. JUSTIFICATIVA	16
1.4. ESTRUTURA DO TRABALHO	
CAPÍTULO 2	
2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	17
2.1. REATORES QUÍMICOS	17
2.2. REATORES IDEAIS	18
2.2.1. Reator contínuo de tanque agitado	18
2.2.2. Reator tubular de escoamento empistonado	19
2.3. DESVIOS DA IDEALIDADE	20
2.4. FATORES LIGADOS AO DESIGN DO REATOR QUE ALTERAM A CONVERSÃO DE UMA REAÇÃO	21
2.4.1. Turbulência	21
2.4.2. Formação de zonas de mistura em reatores de fluxo empistonado	22
2.4.3. Reatores com reciclo	23
2.5. FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL	25
2.6. MALHA COMPUTACIONAL	27
2.7. REFINO E TESTE DE MALHA	28
2.8. MÉTODO NUMÉRICO	29
2.8.1. Método dos Volumes Finitos	30
2.9. MODELAGEM MATEMÁTICA	30
2.9.1. Balanço de Massa	32
2.9.2. Balanço de Momentum	33
2.9.3. Turbulência	36
2.9.3.1. Modelo k-Epsilon	37
2.10. CINÉTICA QUÍMICA DA REAÇÃO	39
2.10.1. Velocidade da reação	39
CAPÍTULO 3	
3. SIMULAÇÕES E MÉTODOS	43
3.1. GEOMETRIAS E MALHA	43
3.1.1. Construção e teste de malha	44
3.2. REAÇÃO QUÍMICA	48
3.3. EQUACIONAMENTO PARA IMPLEMENTAÇÃO DA REAÇÃO	48

3.4.	CONDIÇÕES DE CONTORNO	50
3.5.	PROPRIEDADES DAS SUBSTÂNCIAS PURAS	51
3.6.	CONDIÇÕES INICIAIS E NUMÉRICAS DA SIMULAÇÃO	51
3.7.	VALIDAÇÃO	52
CAPÍTULO 4		
4.	RESULTADOS E DISCUSSÕES	54
4.1.	ANÁLISE FLUIDODINÂMICA	57
CAPÍTULO 5		
5.	CONCLUSÃO	62
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	63

Capítulo 1

1. INTRODUÇÃO

A globalização aliada ao crescimento do mercado tem aumentado a concorrência em todos os segmentos industriais. Os processos químicos dentro de uma indústria devem ser projetados de modo a serem economicamente viáveis, além de atender as necessidades deste processo.

Para poder atingir a plenitude da fabricação, os reatores de uma indústria tornam-se objetos de suma importância ao longo dos processos produtivos. No que diz respeito aos reatores, a otimização consiste – na maioria das vezes – em maximizar a geração de produtos desejados ou de maior valor agregado, gerando o melhor rendimento através dos menores custos.

Os reatores de escoamento empistonado são reatores contínuos muito utilizados pela indústria devido à sua aplicabilidade a processos de larga escala. Além disso, outros fatores que favorecem o uso deste tipo de reator são a manutenção relativamente fácil, advinda da ausência de partes móveis, e a obtenção de boas conversões por unidade de volume.

Reatores tubulares são considerados reatores de comportamento ideal quando o escoamento em seu interior é empistonado, apresentando no sentido radial uma mistura perfeita e no sentido axial ausência de mistura. Entretanto, normalmente um reator real opera com desvios do comportamento ideal devido a presença de zonas de turbulência, formação de regiões de *by-pass*, regiões mortas e caminhos preferenciais no interior do reator, onde tais desvios são responsáveis por alteração tanto na qualidade do produto quanto na sua conversão.

Há diversos fatores que têm influência sobre a conversão atingida ao final de uma reação. Quanto a fatores ligados mais intrinsecamente à reação, destacam-se temperatura, pressão, concentração de reagentes e produtos e presença de catalisadores ou inibidores. Além destes, há também fatores que estão relacionados à operação e *design* do reator, como o tempo de residência.

O modo de alimentação também é um fator que pode interferir no comportamento de um reator, modificando o escoamento em seu interior. Alimentações transientes, por exemplo apresentam potencial para aumentar a turbulência do escoamento, criando zonas de vorticidade que são responsáveis pelo aumento do transporte de massa e energia e também pela promoção de um melhor contato entre as moléculas de reagente.

É interessante saber se as modificações geradas pelas diferentes alimentações acarretam diferentes conversões ao final do processo. Fazer a análise de tais modificações experimentalmente, entretanto, tornar-se-ia uma tarefa de alto custo frente a necessidade de montagem dos sistemas a serem testados, e ao consumo de reagentes.

A simulação numérica consiste em uma ferramenta de otimização de processos estratégica, uma vez que pode prever o comportamento de sistemas sem a necessidade da montagem de uma estrutura física de processo, o que também reduz consideravelmente os gastos com a pesquisa. A fluidodinâmica computacional realiza a simulação numérica dos processos físicos e químicos envolvidos no escoamento reativo através da implementação de modelos matemáticos que sejam representativos para o sistema.

1.1. PROBLEMA

Como o *design* de alimentação de um Reator Tubular (PFR) influencia no grau de avanço da reação?

1.2. OBJETIVOS

1.2.1. Objetivo geral

Avaliar a eficiência de um Reator Tubular (PFR) mediante variação em seu modo de alimentação.

1.2.2. Objetivos específicos

- Montar a malha para duas diferentes geometrias do reator;

- Desenvolver um modelo matemático que se adapte as condições de operação do reator;
- Implementar o modelo matemático desenvolvido
- Simular diferentes condições de alimentação utilizando o *software* ANSYS CFX;
- Avaliar as possibilidades da alteração no *design* de alimentação do reator e suas consequências na conversão da reação.

1.3. JUSTIFICATIVA

Os reatores de escoamento empistonado são amplamente utilizados na indústria. Apesar da existência de vários estudos sobre o comportamento deste tipo de reator as informações sobre como as condições de alimentação afetam o processo ainda são incipientes.

Um maior conhecimento a respeito do comportamento de um reator proporciona a possibilidade de propor mudanças que levem a otimizações que são desejáveis, afim de operar os sistemas industriais de modo a gerar maiores rendimentos, levando em conta o aumento de custo que as mudanças podem causar.

1.4. ESTRUTURA DO TRABALHO

Este trabalho de conclusão de curso é dividido em capítulos, que estão organizados conforme a estrutura a seguir:

- Capítulo 1 – Introdução
- Capítulo 2 – Referencial Teórico
- Capítulo 3 – Modelagem Matemática e Método Numérico
- Capítulo 4 – Simulação e Métodos
- Capítulo 5 – Resultados e Discussão
- Capítulo 6 – Conclusões

Capítulo 2

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1. REATORES QUÍMICOS

Os processos químicos industriais são projetados para transformar matérias primas em produtos que possuem um alto valor comercial. Reatores químicos, por sua vez, consistem em equipamentos que processam reações em escala industrial obtendo produtos comercializáveis a partir de matérias primas.

Um reator tem uma série de funções às quais deve cumprir com eficiência para que a reação tenha um melhor rendimento. Para Ranade (2001) os reatores devem promover o contato íntimo entre os reagentes afim de que a reação ocorra, além de fornecer um ambiente apropriado em termos de pressão, temperatura, concentração de reagentes, agitação e presença de catalisador durante o tempo necessário para que os reagentes se convertam em produtos.

Segundo Schmal (2010), há uma grande variedade de tipos de reatores dentro da indústria química. Convencionalmente divididos em descontínuos e semicontínuos, ou contínuos.

Destaca que os reatores descontínuos, também chamados de reatores batelada, operam em processo de pequena escala e, durante o tempo em que a reação química está se processando, não admitem entrada ou saída de reagentes ou produtos. Os reatores batelada possuem a vantagem de alcançar altas conversões, obtidas deixando os reagentes no reator por um grande período de tempo. As desvantagens deste tipo de reator estão relacionadas ao alto custo envolvido e à dificuldade de aplicação a processo de larga escala.

Já em relação aos reatores semicontínuos ou contínuos, aponta que são aplicados a processos em grande escala de produção, normalmente operando em regime estacionário e em condições mais amplas, o que exige controle contínuo de variáveis como vazão, temperatura e concentração, além do regime de escoamento.

Fogler (2002) destaca três tipos principais de reatores ideais de escoamento contínuo, o Reator Contínuo de Tanque agitado (Continuous Stirred-Tank Reactor –

CSTR), o Reator de Leito Fixo (Packed Bed Reactor – PBR) e o Reator com escoamento empistonado (Plug-Flow Reactor – PFR). Em vista da necessidade de manter produções em fluxo contínuo, que favorecem a larga escala, esses tipos reatores são largamente utilizados pela indústria.

Um reator pode ter dois tipos de escoamentos ideais em seu interior. Segundo Levenspiel (1972), a maioria dos projetos de equipamentos utilizam o escoamento empistonado ou o escoamento de mistura perfeita, uma vez que esses escoamentos ideais são de simples tratamento matemático.

2.2. REATORES IDEAIS

2.2.1. Reator contínuo de tanque agitado

Um tanque agitado é composto por uma estrutura vertical cilíndrica com um ou mais impelidores e que, com frequência, faz uso de chicanas para evitar a formação de zonas de estagnação (VERGEL, 2013). A Figura 1 - Reator Contínuo de Tanque Agitado, representa o desenho esquemático de um reator do tipo CSTR.

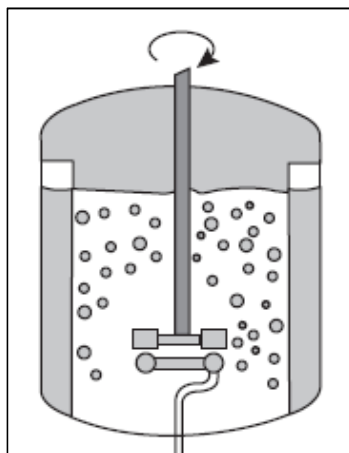


Figura 1 - Reator Contínuo de Tanque Agitado

Fonte: RANADE, 2001, p. 7

O reator CSTR pode também receber a denominação de reator de retromistura, onde o fluido dentro do reator é considerado como sendo perfeitamente misturado. Os reatores de tanque agitado operam normalmente em regime permanente. Para este

tipo de reator, temperatura, concentração ou velocidade de reação são independentes do tempo e da posição (FOGLER, 2002).

O uso de impelidores tem a finalidade de criar um fluxo misturado em seu interior, havendo flexibilidade e controle sobre os transportes que ocorrem dentro de reatores de retromistura. A agitação diminui a heterogeneidade, além de promover um contato mais efetivo entre as moléculas de reagente (RANADE, 2001).

Para reações de fase líquida o uso de tanques agitados é útil, pois em grande parte dos casos a intensa agitação é necessária à reação. Para um CSTR ideal a probabilidade de uma determinada concentração e temperatura deve ser a mesma em todos os pontos no interior do reator e na corrente de saída (MUSHTAQ, 2014).

2.2.2. Reator tubular de escoamento empistonado

Reatores tubulares são reatores de amplo uso industrial comumente aplicados a reações que se processam em fase gasosa, mas podendo também ser utilizados para reações em fase líquida. Normalmente consistindo em tubos cilíndricos que operam em estado estacionário, no interior dos quais circula o meio reacional (FOGLER, 2002).

Segundo Froment et. all. (1990), um reator tubular de escoamento contínuo é uma imagem simplificada e idealizada do movimento de um fluido, em que todos os elementos de fluidos movem-se com uma velocidade uniforme ao longo de linhas de fluxo paralelas.

A Figura 2 apresenta o desenho esquemático de um reator de fluxo contínuo.

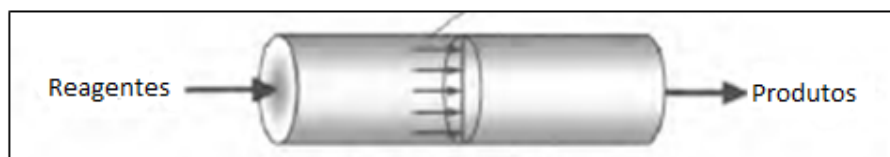


Figura 2 - Desenho esquemático de um reator de escoamento empistonado (PFR)

Fonte: FOGLER, 2002, p. 15 (Adaptado)

Operando em condições ideais, um elemento de fluido que entra em um reator PFR move-se através dele como um pistão do material, preenchendo a seção transversal do tubo por completo.

O reator PFR clássico assume um reator de corpo cilíndrico em que o fluido escoar ao longo do comprimento desenvolvendo um perfil de velocidade plano. O comportamento de um reator tubular ideal prevê que não existem misturas axiais e nem gradientes radiais de temperatura ou concentração (MUSHTAQ, 2014).

Para Schmal (2010, p. 42), em reatores tubulares:

O tempo de contato é igual para todas as moléculas ou elementos de fluido ao longo do reator quando a velocidade for uniforme na seção transversal do tubo, satisfazendo assim o escoamento empistonado. Todas as moléculas têm a mesma velocidade. Logo, a concentração é uniforme numa seção transversal do tubo e varia somente ao longo do reator. [...] Este reator será denominado PFR ideal.

Para a modelagem de reatores tubulares, uma vez que os reagentes são consumidos à medida em que escoam ao longo do reator, considera-se que há variação da concentração somente ao longo do reator. A velocidade da reação, portanto, torna-se – para reações de ordem diferente de zero – uma função do comprimento do reator (FOGLER, 2013).

2.3. DESVIOS DA IDEALIDADE

O comportamento de um reator real pode divergir das suposições feitas para reatores ideais. Há determinados desvios de idealidade que devem ser observados. A Figura 3 apresenta alguns desvios de idealidade para os dois tipos de reatores ideais apresentados.

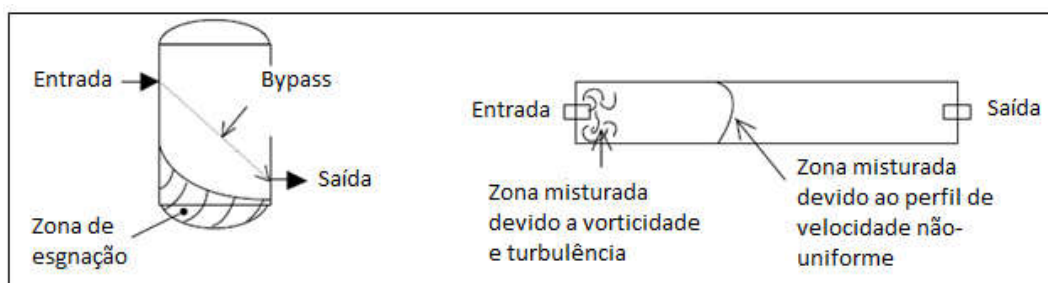


Figura 3 - Desvios da idealidade em reatores tipo CSTR e PFR

Fonte: RANADE, 2001, p. 12 (Adaptado)

Ranade (2001), ao falar de um reator de retromistura, enfatiza que podem existir zonas de reciclo, fazendo com que parcelas do fluido sejam recirculadas para o interior do reator. Outro desvio comum da idealidade para este tipo de reator é a formação de zonas de estagnação, nessas áreas formam-se bolsões de fluido onde a

conversão aproxima-se do limite superior, mas o fluido contido nas zonas estagnadas não sai do reator, criando um volume morto. Deste modo, os reagentes alimentados fluem apenas no volume restante, diminuindo sua conversão média. O mesmo pode acontecer devido a formação de áreas de *by-pass*, onde a corrente de reagente passa através do reator percorrendo um caminho mais curto sem se misturar com o restante do fluido ali contido.

Cita ainda, que para um reator de escoamento empistonado os desvios da idealidade mais comuns são devido a formação zonas de mistura na direção do escoamento do fluido, ou então na formação de zonas de mistura incompleta na direção radial.

2.4. FATORES LIGADOS AO DESIGN DO REATOR QUE ALTERAM A CONVERSÃO DE UMA REAÇÃO

A taxa de reação, além de ser uma função dos próprios parâmetros cinéticos, pode estar relacionada a parâmetros do reator. Quanto a influência do reator, Ranade (2001) fala que a taxa de produção e composição dos produtos envolvidos em uma reação pode ser relacionada ao volume do reator, suas configurações e seu modo de operação. No caso do reator tubular, o aumento da conversão do reator está também intimamente ligado com o seu comprimento, fator que interfere no tempo em que os reagentes irão permanecer no interior do reator.

Uma vez que nem sempre é possível modificar o volume e o comprimento de um reator afim de aumentar sua conversão - principalmente nos casos em que o reator já está operando em uma planta industrial - a principal abordagem dessa revisão está nos fatores relacionados às configurações possíveis e ao modo de operação.

Os tópicos a seguir são um compilado de alguns fatores relacionados ao reator PFR e à sua fluidodinâmica que podem ser explorados na tentativa de otimizar seu funcionamento.

2.4.1. Turbulência

O escoamento em dutos dificilmente é laminar. Na prática, a maioria dos escoamentos existentes é turbulento, ou seja, caracterizado por flutuações de velocidade e pelo movimento altamente desordenado. A turbulência ocorre quando as

forças inerciais no fluido se tornam significantes quando comparadas às forças viscosas. O fenômeno da turbulência é caracterizado por altos valores do número de Reynolds (Re) (ÇENGEL, 2015).

O movimento de um fluxo turbulento é instável e tridimensional, possuindo como característica a presença de estruturas de fluxo de rotação, denominadas vórtices. A presença desses vórtices oferece um mecanismo adicional para a transferência de energia e para a quantidade de movimento, fazendo com que haja um transporte de massa momento e energia a uma taxa superior àquela alcançada pela difusão molecular (ÇENGEL, 2015). A Figura 4 traz a representação de um escoamento turbulento com pontos de vorticidade.

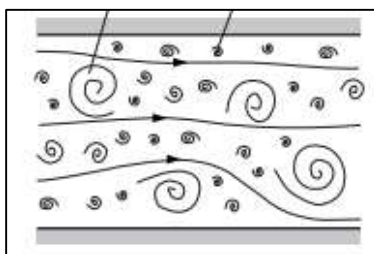


Figura 4 - Escoamento turbulento com pontos de vorticidade

Fonte: RANADE, 2001, p. 65 (Adaptado)

Os fluxos turbulentos também estão associados a uma maior força de arraste e queda de pressão em tubulações, mas as altas taxas de transferência de massa, momento e de transporte de calor geradas pelo escoamento turbulento faz com que ele seja frequentemente empregado a reatores químicos para melhorar o seu desempenho (RANADE, 2001).

2.4.2. Formação de zonas de mistura em reatores de fluxo empistonado

A formação de zonas de mistura em reatores de escoamento empistonado pode ser considerada como um desvio da idealidade do reator, uma vez que a mistura se dá tanto no sentido axial quanto no sentido radial.

A respeito da mistura em processos reativos, Karoui et al. *apud* Fernandes (2005) fala que: “A mistura é um processo necessário na maioria das reações

químicas. A taxa e a seletividade da reação dependem de sua qualidade, especialmente quando o tempo de reação é menor do que o tempo de difusão”.

Um recurso usual para promover a mistura em reatores PFR é o uso de misturadores estáticos, os misturadores estáticos são dispositivos de mistura inseridos em um trecho de tubulação. Diferentemente dos misturadores dinâmicos, a energia para a mistura do fluido vem da perda de carga que decorre da passagem do fluido pelo misturador (FERNANDES, 2005).

Uma alternativa aos misturadores estáticos é fazer com que o modo de alimentação proporcione uma zona de misturada na região de alimentação. A Figura 5 mostra uma proposta de reator com alimentação oblíqua.

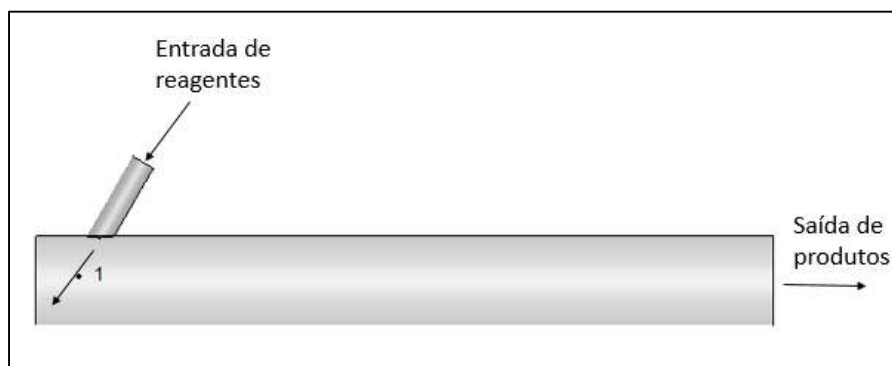


Figura 5 - Desenho esquemático de um reator PFR com corrente de alimentação oblíqua

Fonte: Elaborada pelo autor

Este tipo de alimentação faz com que se forme uma zona de alta pressão na região 1, decorrente do fluxo de reagentes que é bombeado através da entrada. Ao entrar de maneira oblíqua a corrente de alimentação cria uma zona de turbulência, e uma vez que se choca com a parede do reator cria uma zona de escoamento misturado, que pode ser considerada uma zona CSTR em um reator PFR.

A turbulência gerada pela alimentação também é uma fonte de perda de carga, gerando um maior custo energético devido à maior exigência da bomba para promover o escoamento. Entretanto, uma vez que a formação de zonas de mistura se mostre eficiente ao aumento da conversão da reação, e a depender do valor comercial do produto formando, o aumento da perda de carga na tubulação pode, mesmo assim, mostrar-se lucrativo.

2.4.3. Reatores com reciclo

Em algumas circunstâncias é desejável que uma fração da corrente de saída retorne à corrente de entrada do reator. A associação de reatores ou a utilização de reatores com correntes de reciclo são recorrentes em processos em reatores PFR onde a conversão obtida ao final do reator não é suficientemente alta.

A principal característica da presença de reciclo em reatores tubulares é, portanto, aumentar sua produtividade por meio do retorno de reagente não convertidos para a entrada do reator. Com esse processo, aumenta-se a conversão dos reagentes e, como consequência, a produtividade com relação aos produtos desejados (SCHMAL, 2010).

A Figura 6 representa um reator PFR com vazão de reciclo.

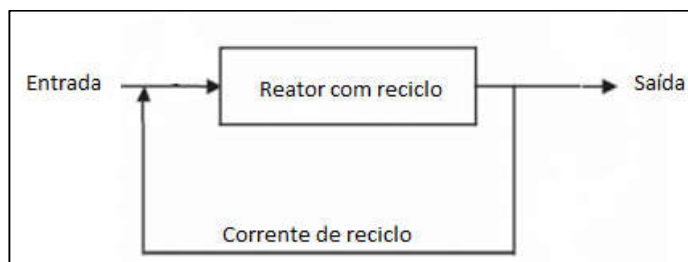


Figura 6 - Desenho esquemático de reator com reciclo

Fonte: Elaborado pelo autor

Uma vez que a conversão nos reatores tubulares está intimamente ligada ao seu comprimento, a presença do reciclo – além de retornar reagentes não convertidos – aumenta também o volume útil do reator e o tempo de residência.

A implantação de uma corrente de reciclo em um reator, entretanto, na maioria das vezes também implica em um aumento no custo energético da produção devido à necessidade de que uma bomba realize o transporte do fluido desta corrente de volta à entrada do reator.

O objeto de estudo para esse problema é a criação de uma zona de baixa pressão dentro do reator, fazendo com que o fluxo da corrente de reciclo aconteça com uma menor exigência de potência da bomba de reciclo, ou ainda, que ela não seja necessária ao reciclo.

A partir da figura 7 observa-se que a alimentação oblíqua passando através da corrente de reciclo gera uma zona de alta pressão nos pontos 1 e 3, consequentemente, ocasionando uma zona de baixa pressão no ponto 2.

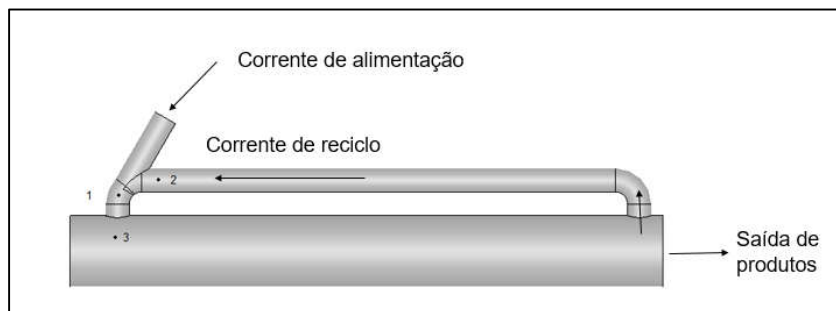


Figura 7 - Desenho esquemático de reator PFR com alimentação oblíqua e corrente de reciclo sem bomba

Fonte: Elaborado pelo autor

Essa diferença de pressão ocasionada pela alimentação pode fazer com que uma parcela da corrente de saída de produtos seja reciclada para a alimentação do processo. Além disso, a alça de reciclo torna-se também um volume reativo, aumentando o volume total do reator.

2.5. FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Fluido dinâmica computacional (CFD) é designação para um conjunto de técnicas de abrangência numérica, computacional e matemática, utilizada afim de obter soluções computacionais para equações em que a solução analítica é limitada. Este conjunto de técnicas é usualmente aplicado à solução de equações de conservação de grandezas físicas, como massa, energia e momento, afim de estudar um dado escoamento.

O escoamento de fluidos em dutos é um fenômeno de larga aplicabilidade dentro do ramo da engenharia química, sendo o tipo de escoamento mais comum quando se trata do âmbito industrial. A importância deste tipo de fenômeno faz com que ele seja alvo de estudos afim de promover sua melhor compreensão. As investigações fluidodinâmicas podem ser realizadas experimentalmente, entretanto, o

alto custo para a realização deste tipo de estudo tem levado os pesquisadores a recorrerem ao uso de simulações computacionais.

Segundo Ranade (2001), a simulação fluidodinâmica serve como ponte entre teoria e realidade, tendo a vantagem de permitir a realização de uma “sondagem” em possíveis modificações de determinados processos que já ocorrem em uma planta industrial sem que a operação normal do sistema seja afetada.

Problemas que envolvem escoamentos de fluido são frequentemente modelados por equações diferenciais parciais (EDPs) não lineares. Não há viabilidade na resolução analítica de tais equações, havendo necessidade de que elas sejam resolvidas por meio de métodos numéricos. A fluidodinâmica computacional (CFD) faz uso de métodos numéricos e algoritmos afim de solucionar e analisar problemas que envolvem o escoamento de fluidos dentro da área da mecânica dos fluidos (LOPES, 2008).

As equações que governam os fluidos são a equação da continuidade, a equação de Navier-Stokes e a equação da energia, formando um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares acopladas que regem a conservação de massa, de momento e de energia, respectivamente (DIONÍSIO, 2008).

Ainda, para Lopes (2008, p. 6)

Com o uso de técnicas de CFD parâmetros relevantes de um problema podem ser avaliados numericamente e alterados facilmente até que o resultado da simulação atenda as exigências do projeto. Em geral, o procedimento computacional na fluidodinâmica tem o intuito de fazer as investigações experimentais mais eficientes, a custos e tempos menores do que apenas utilizando técnicas empíricas.

Quando se trata de reatores químicos, entretanto, há fatores que vão além do próprio escoamento que devem ser levados em conta, uma vez que ele é acompanhado de mudanças que envolvem, na grande maioria das vezes, a transferência de calor, massa, e a cinética química da reação.

Escoamento de fluidos com transferência de calor e massa, turbulentos e multifásicos têm feito uso dos avanços dos métodos numéricos e da capacidade computacional para serem solucionados de maneira facilitada. Diversas áreas de aplicação fazem uso desta ferramenta, integrando-a aos procedimentos de projeto e análise de escoamento e aos fenômenos de transferência (MALISKA, 2004).

Quando se trata de escoamento em reatores, segundo Kolhapure (2001), há uma tendência atual dentro da indústria de processos químicos quanto a aplicação da fluidodinâmica computacional afim de melhor compreender os eventos físicos que

ocorrem em processos que contém reações químicas. Tais eventos relacionam-se à ocorrência e interação de fenômenos como a convecção, difusão, dissipação, a química envolvida na reação e a turbulência. A fluidodinâmica computacional em conjunto com o entendimento dos fenômenos e sua modelagem matemática tem grande potencial para gerar melhorias no *design* de uma ampla gama de processos que grande relevância.

Sobre a relevância das técnicas de CFD, Dionísio (2008) enfatiza que as técnicas de CFD têm um grande potencial nas áreas de processos químicos devido à drástica redução no tempo necessário e no custo envolvido no projeto e na previsão de desempenho de equipamentos. Além disso, permitem a visualização dos campos de velocidade, de concentração, de pressão, e de vários outros parâmetros do escoamento, possibilitando uma melhor compreensão dos fenômenos envolvidos e também uma pronta intervenção nas variáveis operacionais ou de projeto dos equipamentos de forma a melhorar o seu desempenho.

2.6. MALHA COMPUTACIONAL

A solução numérica de equações diferenciais parciais, utilizadas para modelagem matemática de problemas de engenharia requer uma discretização do domínio da solução em pontos ou volumes elementares. A geração de malhas surge da necessidade de dividir o domínio da solução em elementos menores (triângulos, quadriláteros, polígonos, tetraedros ou paralelepípedos) denominados células. A geração de malha é essencial a todos os métodos numéricos que empregam diferenças finitas, volumes finitos, ou elementos finitos (JUSTO, 2001).

Segundo Gonçalves (2008), uma malha computacional consiste em uma representação, ou discretização do plano físico utilizado na simulação numérica, sendo constituída por linhas e pontos, onde os pontos são considerados na intersecção das linhas e servem como orientação para o cálculo de propriedades físicas baseado em um determinado modelo matemático. As malhas numéricas irão definir os pontos em que as variáveis são calculadas, dividindo o domínio da solução em um número finitos de subdomínios denominados volumes de controle. As equações sob as quais a malha se submete são calculadas a cada volume de controle para gerar a resposta.

Ao tratar de malhas, destaca que há uma classificação usual das malhas em malhas estruturadas e malhas não estruturadas, baseada na disposição relativa dos volumes de controle. Uma malha é estruturada quando cada volume de controle tem sempre o mesmo número de vizinhos, sendo que a numeração dos vizinhos segue uma sequência natural, já em uma malha não estruturada o número de vizinhos de cada volume de controle é variável, e não é possível estabelecer uma regra para a sua ordenação.

Malhas estruturadas, por possuírem volumes de controle ordenados, geram matrizes diagonais que são resolvidas com mais facilidade pelos *solvers*, entretanto não são aplicáveis a geometrias complexas. As malhas não estruturadas dispõem de mais versatilidade, sendo adaptadas mais facilmente à discretização de geometrias irregulares e de maior complexidade, contudo, a dificuldade na ordenação de seus volumes de controle dá origem a matrizes mais complexas, impossibilitando a aplicação de muitos métodos numéricos para sua resolução (MALISKA, 2004).

O elemento de uma malha é um ente geométrico que cobre o domínio computacional, sem superposição e sem que partes deste elemento atravessem a fronteira do sistema (VERGEL, 2013).

A Figura 8 apresenta elementos utilizados na geração de malhas tridimensionais.

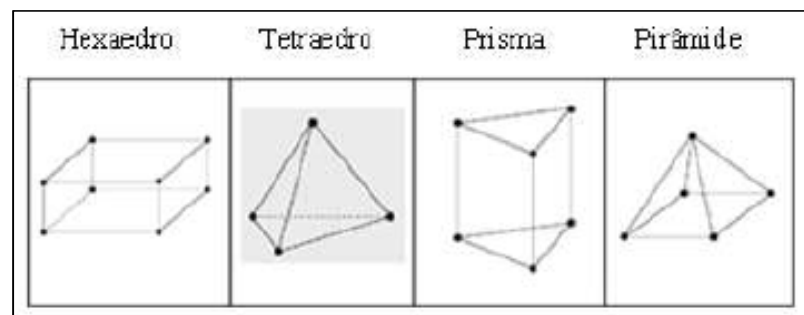


Figura 8 - Tipos de elementos de malha aplicados a geometria 3D

Fonte: VERGEL, 2013 p. 9

A maioria dos modelos físicos nos programas de simulação usam a geometria tetraédrica como forma de discretização padrão. As geometrias e a malha do reator foram construídas utilizando o *software* SALOME 7.6, gerando a discretização para o reator por meio de uma malha tetraédrica.

2.7.REFINO E TESTE DE MALHA

A densidade da malha é um fator que influencia na simulação CFD, estando relacionada não só com a validade dos resultados, mas também com o aporte computacional para realizar a simulação. Com relação ao refino da malha, o maior problema é o aumento do custo computacional agregado (VERGEL, 2013).

Como o cálculo para as propriedades do fluido em escoamento no reator é realizado pelo *software* a cada volume de controle, a malha a ser usada para a simulação deve passar por um teste de malha, afim de obter uma solução que seja numericamente independente.

O teste consiste em realizar simulações refinando a malha até não encontrar diferenças significativas nos valores fornecidos pelo *software* para as variáveis observadas. A partir do momento em que o refino na malha empregada deixa de representar mudanças significativas nos resultados, isso significa que o aumento do número de volumes de controle apenas leva o aumento do aporte computacional, sem mais interferir na acurácia dos resultados (VERGEL, 2013).

2.8.MÉTODO NUMÉRICO

O método numérico tem a tarefa de resolver as equações diferenciais, substituindo as derivadas por expressões algébricas envolvidas com a função incógnita. Mediante a impossibilidade da solução analítica faz-se uma aproximação numérica da equação, aceitando ter a solução para um número discreto de pontos e com um determinado erro (MALISKA, 2004).

Os métodos mais empregados na discretização de um domínio são o método das diferenças finitas (MDF), o método dos volumes finitos (MVF) e o método dos elementos finitos (MEF) (DIONÍSIO, 2008).

Ao falar de métodos numéricos para solução de problemas de engenharia, Dionísio (2008) considera que o método dos volumes finitos é a técnica CFD mais utilizada para propósitos gerais, sendo o método mais aplicado industrialmente por ser um modelo robusto que garante a conservação das propriedades nas fronteiras do domínio.

O *software* comercial ANSYS CFX 14.0, onde serão conduzidas as simulações para este trabalho, faz uso do método dos volumes finitos (FVM) para a discretização do domínio da solução.

2.8.1. Método dos Volumes Finitos

O método de volumes finitos resolve sistema de Equações diferenciais parciais a partir da solução de balanços de massa, energia e quantidade de movimento para um volume de controle.

Pode-se obter soluções aproximadas de duas maneiras ao utilizar o método dos volumes finitos. A primeira delas é realizando balanços da propriedade com a qual se trabalha nos volumes elementares, enquanto a segunda consiste em integrar sobre o volume elementar no espaço e no tempo as equações na forma conservativa (MALISKA, 2004).

A técnica de volumes finitos, para Dionísio (2008, p. 42):

[...] Parte da integração formal das equações de transporte que regem o escoamento do fluido em todos os volumes de controle obtidos pela discretização do domínio. Nesta integração, a forma conservativa de cada equação é usada para que seja possível transformar as integrais em volume dos divergentes dos fluxos advectivos e difusivos em 43 integrais em área dos fluxos normais à superfície dos volumes de controle, através da aplicação do teorema da divergência.

Depreende-se então que o método dos volumes finitos é um método conservativo, uma vez que os fluxos convectivos e difusivos representados por integrais de superfície possuem as mesmas integrais para volumes de controle que compartilham uma face. Este método adapta-se a geometrias complexas e pode ser aplicado a qualquer tipo de malha (ROSA, 2008).

2.9. MODELAGEM MATEMÁTICA

A modelagem matemática tem por finalidade representar a realidade física dos fenômenos. A obtenção de uma solução numérica para um problema físico está intimamente ligada à capacidade de criar um modelo matemático que represente este problema.

Maliska (2004), ressalta que o modelo matemático deve ser passível de ser resolvido com tempos de computação não proibitivos, e seus resultados devem representar adequadamente o fenômeno físico que se modela.

A modelagem do processo consiste no conjunto de equações que são representativas para o mesmo. Os modelos podem ser de ordem fenomenológica quando buscam descrever os fenômenos principais envolvidos no processo, ou de ordem empírica quando o processo é tratado como uma caixa preta e são desconsiderados os mecanismos de causa e efeito entre suas variáveis dependentes e independentes.

No caso da simulação fluidodinâmica, a modelagem deve ser e ordem fenomenológica, descrevendo os princípios de conservação de massa, energia, momento e as condições de contorno que regem o sistema proposto. No caso de fluxo reativo as condições cinéticas da reação que ocorre no interior do reator também devem ser modeladas.

A Figura 9 e a Figura 10 representam um volume de controle denominado volume de controle P. Os pontos vizinhos a P são nomeados W, E, S e N no caso de uma malha bidimensional (Figura 9). Os pontos B e T são acrescentados no caso da malha tridimensional (Figura 10).

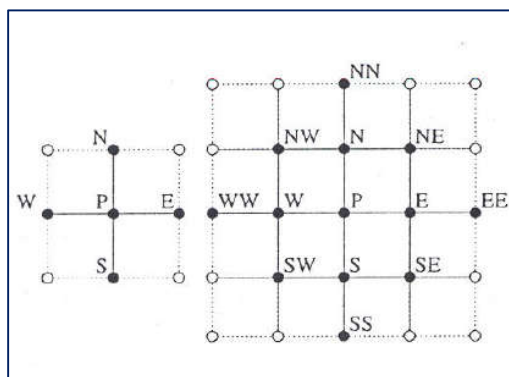


Figura 9 - Malha bidimensional.

Fonte: ROSA (2008, p. 45)

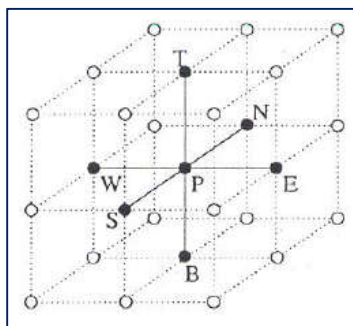


Figura 10 - Malha tridimensional.

Fonte: ROSA (2008, p. 45)

Considera-se para o volume de controle apresentado na Figura 10 uma equação de conservação genérica, onde assume-se que são conhecidos o campo de velocidades e as propriedades do fluido. O método subdivide o domínio da solução em uma malha de volumes de controle e parte da forma integral da equação de conservação, assim, temos uma equação genérica para as equações de transporte, onde ϕ é a variável para a qual a equação é aplicada:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\phi u - \Gamma\phi\nabla\phi) = S^\phi \quad (1)$$

$\Gamma\phi$ é a difusividade da variável genérica transportada. A variável deve ser conservada em cada um dos volumes de controle da geometria discretizada, portanto, discretizando a equação (1) para o volume de controle:

$$\frac{\delta}{\delta t}(\rho\phi) + \frac{\delta}{\delta x_L} \cdot \left(\rho\phi u_L - \Gamma\phi \frac{\delta\phi}{\delta x_L} \right) = S^\phi \quad (2)$$

Neste caso, x_L representa as dimensões do volume de controle e δt é o passo de tempo da iteração para um problema transiente.

Para a equação (2):

- $\frac{\delta}{\delta x_L} \cdot \rho\phi u_L$ é o termo convectivo
- $\frac{\delta}{\delta x_L} \cdot \Gamma\phi \frac{\delta\phi}{\delta x_L}$ é o termo difusivo
- S^ϕ é o termo de acúmulo

O sistema foi modelado com as equações de balanço de massa e de momento. O balanço de energia foi negligenciado, uma vez que se assumiu para efeitos de modelagem que o reator é um reator isotérmico.

2.9.1. Balanço de Massa

Para o balanço de massa aplica-se o modelo de difusão e convecção para descrever a transferência de massa. A componente difusiva baseia-se na lei de Fick.

A partir da equação (2), considerando que a densidade do fluido escoando pelo reator é constante, o balanço de massa com reação química pode ser expresso por:

$$\frac{\delta C_j}{\delta t} + \frac{\delta}{\delta x_L} \cdot \left(-D_j \frac{\delta C_j}{\delta x_L} \right) = r_j - \frac{\delta}{\delta x_L} (u \cdot C_j) \quad (3)$$

Onde:

- C_j é a concentração da espécie j ;
- D_j é a difusividade da espécie j no comprimento L ;
- r_j é a taxa de reação para a espécie j ;
- u é o vetor velocidade.

A equação 3 expressa o balanço de massa para o estado transiente, no caso de estar operando em estado estacionário o termo $\frac{\delta C_j}{\delta t}$ torna-se nulo:

$$\frac{\delta}{\delta x_L} \cdot \left(-D_j \frac{\delta C_j}{\delta x_L} \right) = r_j - \frac{\delta}{\delta x_L} (u \cdot C_j) \quad (4)$$

Para a taxa de reação de j , considera-se um reator tubular de fluxo empistonado operando com fluido homogêneo e newtoniano. A variável independente é a distância axial z ao longo da qual são integradas as equações de balanço.

2.9.2. Balanço de Momentum

Pela segunda lei de Newton, temos que a taxa de variação temporal do momento de uma partícula é igual a somatória de forças que age sobre esta partícula. Portanto:

$$\vec{F} = m \cdot \vec{a} \quad (5)$$

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} \quad (6)$$

Substituindo (5) em (6):

$$\vec{F} = m \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} \quad (7)$$

Multiplicando a eq. (7) por dt :

$$\vec{F}.dt = m.d\vec{v} \quad (8)$$

Reescrevendo para um somatório de forças, obtemos o balanço de momentum:

$$\sum \vec{F} = \frac{d(m.\vec{v})}{dt} \quad (9)$$

Onde a força \vec{F} pode ser substituída por uma tensão total τ_T que multiplica sua área de atuação A :

$$\sum \tau_T.A = \frac{d(m.\vec{v})}{dt} \quad (10)$$

Dividindo a equação (10) por um volume diferencial dV :

$$\frac{1}{dV} \cdot \sum \tau_T.A = \frac{1}{dV} \cdot \frac{d(m.\vec{v})}{dt} \quad (11)$$

Aplicando um limite onde $dV \rightarrow \infty$:

$$\lim_{dV \rightarrow \infty} \frac{1}{dV} \cdot \sum \tau_T.A = \lim_{dV \rightarrow \infty} \frac{1}{dV} \cdot \frac{d(m.\vec{v})}{dt} \quad (12)$$

Pela definição de divergente, a equação (12) torna-se:

$$\nabla \tau_T = \lim_{dV \rightarrow \infty} \frac{1}{dV} \cdot \int_A (\tau_T.\vec{n}).dA \quad (13)$$

O vetor \vec{n} é ortogonal a área A , apontando para fora do volume de controle. Considerando a geometria do reator tubular, temos que o volume de controle deve ser descrito em coordenadas cilíndricas, segundo a Figura 11.

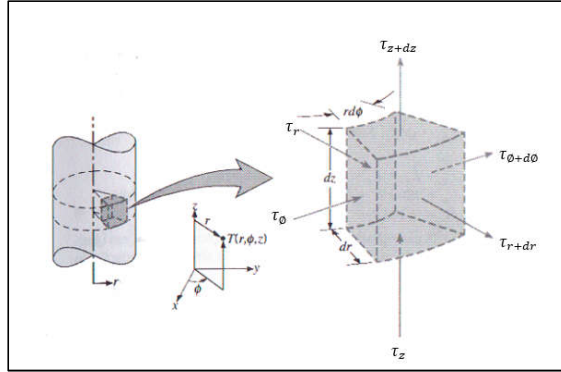


Figura 11 - Volume de controle para coordenadas cilíndricas

Fonte: Incropera & De Witt, 1999, p. 31 (Adaptado)

Para coordenadas cilíndricas, expressa-se o gradiente como:

$$\nabla(m) = \frac{\partial(m)}{\partial r} \cdot \vec{l}_r + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial(m)}{\partial \theta} \cdot \vec{l}_\theta + \frac{\partial(m)}{\partial z} \cdot \vec{l}_z \quad (14)$$

Então, para um escoamento turbulento e monofásico de um fluido reativo, relacionando os termos calculados aos vetores, obtém-se a equação de Navier-Stokes

Componente r:

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} - \frac{u_\theta^2}{r} \right) \\ = -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_r}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} - \frac{u_r}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right] + \rho g_r \end{aligned} \quad (15.a)$$

Componente θ :

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} - \frac{u_r u_\theta}{r} \right) \\ = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta}{r^2} \right] + \rho g_\theta \end{aligned} \quad (15.b)$$

Componente z:

$$\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right] + \rho g_z \quad (15.c)$$

Para coordenadas generalizadas, realiza-se uma transformação que parte da equação de Navier-Stokes em coordenadas Cartesianas.

A equação de Navier-Stokes em coordenadas Cartesianas tem a forma:

Para a componente x :

$$\rho \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) = \mu \left[\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right] - \frac{\partial p}{\partial x} + \rho g_x \quad (16.a)$$

Para a componente y :

$$\rho \left(\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) = \mu \left[\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right] - \frac{\partial p}{\partial y} + \rho g_y \quad (16.b)$$

Para a componente z :

$$\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = \mu \left[\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right] - \frac{\partial p}{\partial z} + \rho g_z \quad (16.c)$$

2.9.3. Turbulência

A turbulência consiste em flutuações de velocidade no campo de fluxo ao longo do tempo e do espaço e em todas as direções, sendo um processo complexo uma vez que é tridimensional, instável e possui inúmeros graus de liberdade, além de ter grande influência nas características do escoamento (ANSYS, 2010).

Resolver as equações de Navier-Stokes para fluxo turbulento torna-se impossível, uma vez que as equações são elípticas, não lineares e acopladas. O número infinito de graus de liberdade das equações faz com que a sua completa resolução para o escoamento exija a construção de uma malha com número de nós proporcional ao número de Reynolds segundo a expressão $Re^{\frac{5}{4}}$ (SAAD, 2011).

Afim de reduzir o número de graus de liberdade de infinito a um ou dois usa-se a decomposição de Reynolds. Para uma propriedade qualquer, sendo ela um escalar ou um vetor, pode-se escrever uma função onde a propriedade é a soma de uma média a uma flutuação (SAAD, 2011).

A equação (17) apresenta uma propriedade decomposta em média e flutuação.

$$\tilde{\phi} = \phi + \phi' \quad (17)$$

Onde ϕ representa a média da propriedade e ϕ' a sua variação. A decomposição da propriedade produz um conjunto de equações que regem o campo de fluxo médio, onde qualquer propriedade se torna constante ao longo do tempo.

Aplicando a decomposição de Reynolds às equações de Navier-Stokes obtém-se um modelo RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*), um modelo frequentemente utilizado para prever a turbulência de sistemas em simulações CFD, uma vez que exige um esforço computacional de ordens de magnitude muito menores do que o método de simulação numérica direta (DNS – *Direct Numerical Simulation*) (ANSYS, 2010).

As equações RANS mais comuns são os modelos com uma equação – não muito empregados por serem considerados incompletos e necessitarem de uma informação experimental para a constituição da viscosidade turbulenta – e os modelos com duas equações.

O modelo de duas equações tem larga aplicação devido a sua boa acurácia quando levado em conta o esforço computacional envolvido. Para os modelos de duas equações a velocidade e a escala de comprimento são resolvidos utilizando equações separadas de transporte. Há dois modelos de duas equações amplamente disseminados, são eles o modelo $k - \varepsilon$ e o modelo $k - \omega$. Para as análises a serem realizadas neste trabalho optou-se pelo uso do modelo $k - \varepsilon$.

2.9.3.1. Modelo k-Epsilon

No modelo de turbulência $k - \varepsilon$ (k-Epsilon) k representa a energia cinética turbulenta, representando as flutuações de velocidade, enquanto ε representa a taxa na qual as flutuações se dissipam (dissipação dos redemoinhos de turbulência) (ANSYS, 2010).

A equação da continuidade para o modelo $k - \varepsilon$ após a inserção das duas novas variáveis torna-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j) = 0 \quad (18)$$

E a equação do momento, então, torna-se:

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_i U_j) = \frac{\partial p'}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \rho U_j}{\partial x_i} \right) \right] + S_m \quad (19)$$

Onde:

- S_m é a soma das forças atuantes;
- p' é a pressão modificada, definida por:

$$p' = p + \frac{2}{3} \rho k + \frac{2}{3} \mu_{eff} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \quad (20)$$

- μ_{eff} é a viscosidade efetiva à turbulência dada por:

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_{turbulência} \quad (21)$$

$$\mu_{turbulência} = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (22)$$

E C_μ é uma constante que tem valor 0,09 segundo o guia teórico ANSYS CFX 13.0 (2010).

Os valores de k e ε vêm diretamente das equações diferenciais de transporte para taxa de dissipação turbulenta e energia cinética de turbulência.

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \rho \varepsilon + P_{kb} \quad (23)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_{\varepsilon 1} P_{\varepsilon b}) \quad (24)$$

Onde P_k é a produção de turbulência decorrente das forças viscosas e P_{kb} e $P_{\varepsilon a}$ representam a influência das forças de flutuação. A equação (26) representa a obtenção do parâmetro P_k .

$$P_k = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \left(3 \mu_t \frac{\partial U_k}{\partial x_k} + \rho k \right) \quad (25)$$

As constantes $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_k e σ_ε são constantes cujos valores retirados do manual teórico ANSYS CFX 13.0 (2010) podem ser observados na Tabela 1.

Tabela 1 - Valores de constante para as equações de obtenção dos parâmetros k e ϵ

Constante	Descrição	Valor
$C_{\epsilon 1}$	Reynolds stress model constant	1,45
$C_{\epsilon 2}$	Reynolds stress model constant	1,9
σ_k	Turbulence model constant for the k equation	1,0
σ_ϵ	$k - \epsilon$ Tubulence model constant	1,3

2.10. CINÉTICA QUÍMICA PARA REAÇÃO EM REATORES TUBULARES

2.10.1. Velocidade da reação

A velocidade de uma reação está relacionada ao quão rápido reagentes podem ser consumidos ou convertidos afim de tornarem-se produtos. O cálculo da velocidade para uma reação pode ser expresso pela Lei de velocidades de Guldberg e Waage, que enuncia que a velocidade de uma reação para cada temperatura mantém proporcionalidade ao produto das concentrações molares de seus reagentes.

Para este trabalho, a reação a ser implementada é uma reação não reversível e de primeira ordem, que pode ser generalizada por um modelo onde uma espécie B é gerada a partir da espécie A. Têm-se:



Para a equação (26) a lei de velocidade pelo enunciado de Guldberg e Waage torna-se:

$$-r_A = k_A \cdot C_A \quad (27)$$

Onde $(-r_A)$ é a velocidade para reação dada, k_A é uma constante chamada constante de proporcionalidade e C_A é a concentração da espécie A. Generalizando a equação (27):

$$-r_j = k_j \cdot C_j \quad (28)$$

Para um reator PFR ideal, é possível escrever uma equação de balanço molar que obedece às leis de conservação de massa, onde:

$$\text{Entrada} - \text{Saída} + \text{Geração} = \text{Acúmulo} \quad (29)$$

Que pode ser escrita em função das taxas molares de uma espécie genérica j , como na equação (30):

$$F_{j0} - F_j + G_j = \frac{dN_j}{dt} \quad (30)$$

Onde:

- F_{j0} é a taxa molar de entrada da espécie j no reator;
- F_j é a taxa molar de saída da espécie j do reator;
- G_j é a taxa molar de geração da espécie j ;
- $\frac{dN_j}{dt}$ representa a taxa molar de acúmulo dentro do reator, que é considerada nula para este caso.

O termo de geração, G_j , pode ser escrito em função da velocidade de reação, conforme a equação (31):

$$\Delta G_j = \int^{\Delta V} r_j dV \quad (31)$$

Em que ΔV é um volume diferencial suficientemente pequeno, de modo que não há variações na velocidade de reação no interior desse volume. Deste modo, a equação (30) pode ser reescrita como:

$$F_{j0} - F_j + \int^{\Delta V} r_j dV = 0 \quad (32)$$

Assim, resolvendo a integral, rearranjando e tomando o limite quando ΔV tende a 0, tem-se:

$$F_j|_V - F_j|_{V+\Delta V} + r_j \Delta V = 0 \quad (33)$$

$$r_j = \frac{F_j|_{V+\Delta V} - F_j|_V}{\Delta V} \quad (34)$$

Onde:

- $F_j|_V$ é o termo que representa a entrada da espécie j em um volume de controle;
- $F_j|_{V+\Delta V}$ é o termo que representa a saída da espécie j do volume de controle após um diferencial de volume ΔV .

O que permite obter uma forma diferencial do balanço molar, representado pela equação (35):

$$\frac{dF_j}{dV} = r_j \quad (35)$$

Para uma reação de primeira ordem proposta, baseando-se na equação (35), podemos escrever um balanço de massa para um reagente A em função do comprimento do reator, assim, tem-se:

$$\frac{dC_A}{dx} = -\frac{AkC_A}{\dot{Q}} \quad (36)$$

Onde:

- dC_A é a diferencial com relação à concentração;
- dx é a diferencial com relação ao comprimento do reator;
- C_A é a concentração da espécie A ;
- k é a constante de proporcionalidade;
- \dot{Q} é o fluxo volumétrico de entrada da espécie A no reator;
- A é a área da seção transversal do reator.

Pode-se então rearranjar e integrar a equação (36) afim de obter uma expressão em termos da concentração do reagente e do comprimento do reator:

$$\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A} = -\frac{Ak}{\dot{Q}} \int_0^x dx \quad (37)$$

$$\ln \left[\frac{C_A}{C_{A0}} \right] = -\frac{Akx}{\dot{Q}}$$

(38)

$$C_A = C_{A0} e^{-\left[\frac{Ak}{Q}\right]x}$$

(39)

É possível, ainda, reescrever a equação (39) em função da fração mássica da espécie A:

$$X_A = X_{A0} e^{-\left[\frac{Ak}{Q}\right]x}$$

(40)

Onde:

- X_A é fração mássica da espécie A no comprimento x do reator;
- X_{A0} é fração mássica da espécie A na entrada do reator.

Deste modo a equação (40) se constitui em uma modelagem analítica com a qual poder-se-á comparar os resultados obtidos com a simulação do reator padrão, afim de validar os dados obtidos através da modelagem computacional.

Capítulo 3

3. SIMULAÇÕES E MÉTODOS

3.1. GEOMETRIAS E MALHA

A primeira etapa necessária à simulação consiste na criação de uma geometria que represente o equipamento proposto para o estudo. Posteriormente, é necessário que uma malha numérica seja gerada a partir desta geometria, de modo que seja possível resolver o problema mediante um esforço computacional razoável.

As geometrias e malhas utilizadas para as simulações deste trabalho foram construídas utilizando o *software* Salome Platform 7.3.0.

Para representar um reator de escoamento empistonado padrão, que será utilizado para efeito de comparação dos resultados obtidos com o reator proposto, foi adotada a geometria apresentada na Figura 12.

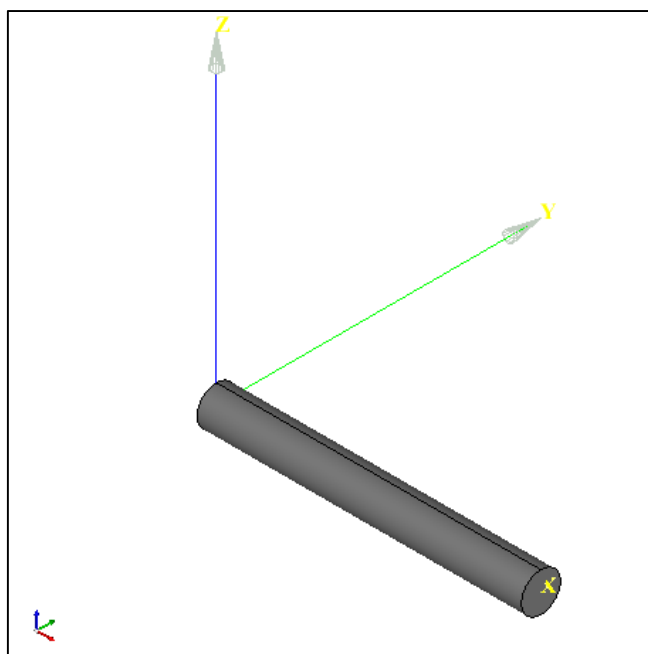


Figura 12 - Geometria do reator de escoamento empistonado padrão

O reator proposto para este trabalho, que será comparado ao reator padrão, possui uma alimentação oblíqua através de uma alça de refluxo, cuja geometria está representada nas Figuras 13 e 14.

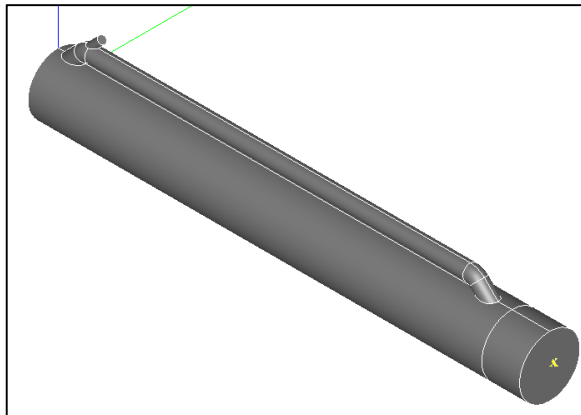


Figura 13 - Reator com alimentação oblíqua e alça de refluxo

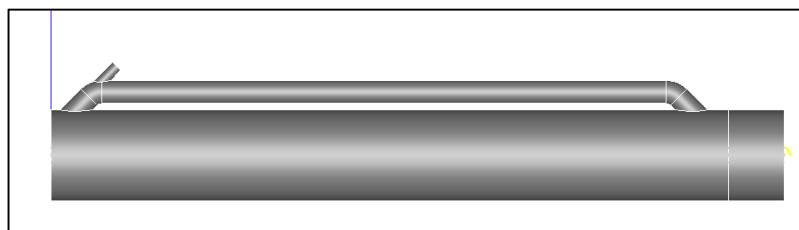


Figura 14 - Reator proposto, vista do plano xz

A alimentação é oblíqua a um ângulo de 45° , de modo que ao ser bombeado através da entrada o fluxo de reagente se choca contra parede, propondo um aumento das zonas de mistura dentro do reator. Ao alimentar os reagentes através de uma alça de reciclo, busca-se criar uma zona de baixa pressão na linha de reciclo, diminuindo a potência necessária da bomba de reciclo, ou ainda, fazendo com que ela seja desnecessária.

Para efeitos de comparação, ambas as geometrias dos reatores possuem 3,2 metros de comprimento e 40 centímetros de diâmetro. Para o reator proposto O diâmetro da tubulação de alimentação é de 5 centímetros. A alça de refluxo possui 2,55 metros e 10 centímetros de diâmetro.

3.1.1. Construção e teste de malha

Uma vez determinada a geometria dos reatores a serem utilizados para a simulação, as mesmas foram discretizadas por meio de malhas tetraédricas. O

algoritmo utilizado para esta discretização foi o Algoritmo de *Netgen 1D-2D-3D*, que é uma boa opção para a discretização de geometrias com mais detalhes, uma vez que é possível aumentar e ajustar a densidade da malha nos locais onde a geometria é mais complexa. Além disso, volumes de controle tetraédricos permitem uma maior adaptação a geometrias de superfícies curvas, como é o caso.

Uma vez escolhido o algoritmo a ser utilizado para a construção da malha, é necessário determinar o número de volumes de controle ao longo do reator, suficientes para garantir a veracidade do resultado gerado pela simulação, através do refinamento. Para que este processo de refinamento da malha seja efetivo, observam-se alguns parâmetros, como os ângulos formados entre as faces dos volumes de controle, que são tão melhores quanto mais próximos de 60° para efeito de convergência, e a proporção da malha (*aspect ratio*), que é tão melhor quanto mais próximo de 1 o valor obtido. Considerando esses aspectos foram escolhidas 3 malhas para realizar o teste de independência de malha.

As Tabelas 2 e 3, apresentam respectivamente o número de volumes de controle para o reator padrão e para o reator proposto.

Tabela 2 - Descrição da malha para o reator padrão

Malha	Nº de nós	Nº de volumes de controle
Malha A	6768	29985
Malha B	20048	103370
Malha C	48089	238437

Tabela 3 - Descrição da malha para o reator proposto

Malha	Nº de nós	Nº de volumes de controle
Malha A	45841	223815
Malha B	86631	454411
Malha C	113225	593636

O parâmetro local avaliado para o teste de independência de malha para o reator padrão é a queda de pressão ao longo do reator, na posição central considerando $z=y=0$ m. A Figura 15 apresenta o teste de malha para o reator padrão.

O parâmetro local avaliado para o teste de independência de malha para o reator proposto é a pressão total ao longo do reator, na posição central, considerando $z=y=0$ m. A Figura 16 representa o gráfico obtido no teste de malha para o reator proposto, ambos os gráficos foram obtidos a partir do próprio ANSYS CFX.

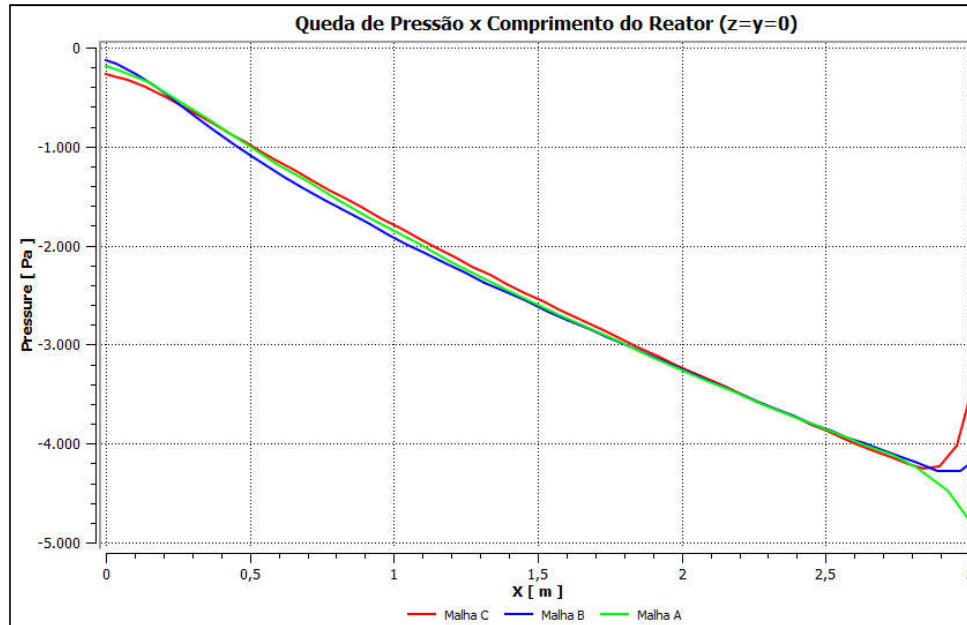


Figura 15 - Gráfico de teste de malha para o reator padrão

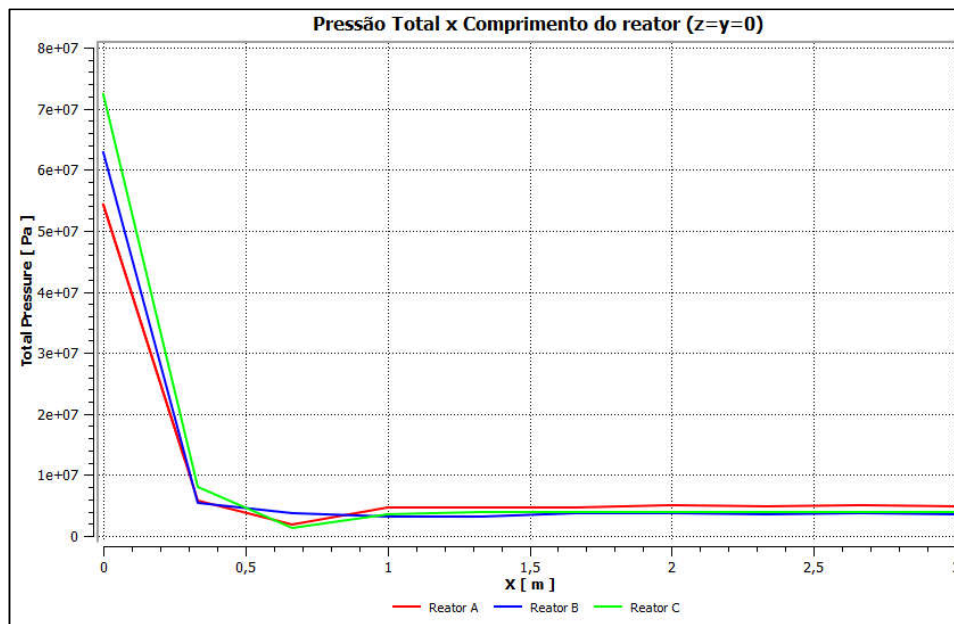


Figura 16 - Gráfico de teste de malha para o reator proposto

Em ambos os casos é possível observar que há semelhança entre os resultados encontrados para as malhas, quando comparadas entre si. Optou-se por

utilizar a Malha C, para ambos os reatores, pois convergiu com menor números de iteração durante os testes de malha.

Para efeitos a ilustração, as Figuras 17 e 18 representam a malha do reator padrão, enquanto as Figuras 19 e 20 representam a malha do reator proposto.

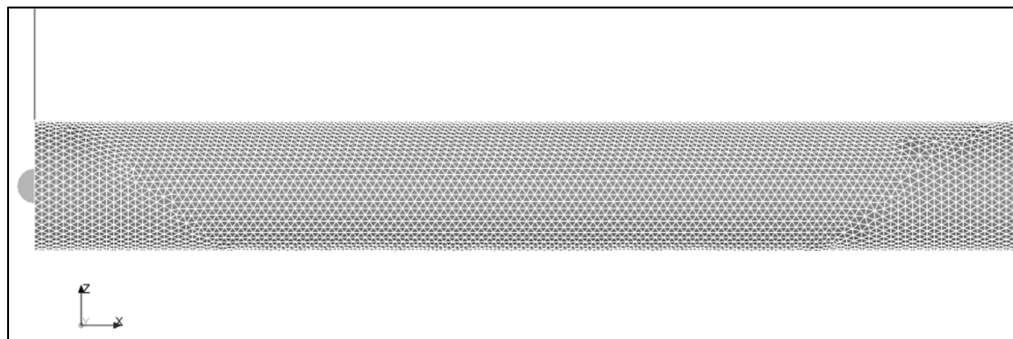


Figura 17 - Malha numérica para o Reator Padrão vista do Plano ZX

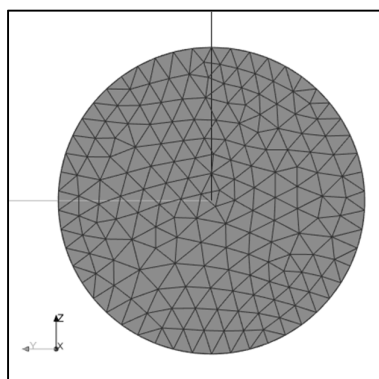


Figura 18 - Malha numérica do reator padrão vista do Plano YZ

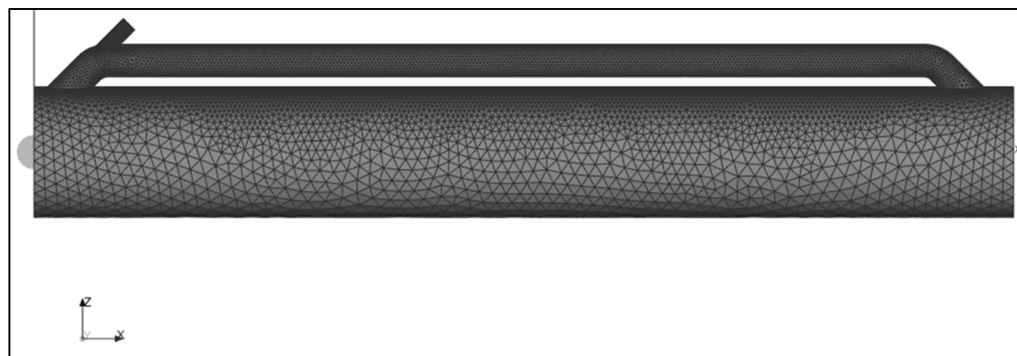


Figura 19 - Malha numérica para o Reator Proposto vista do Plano ZX

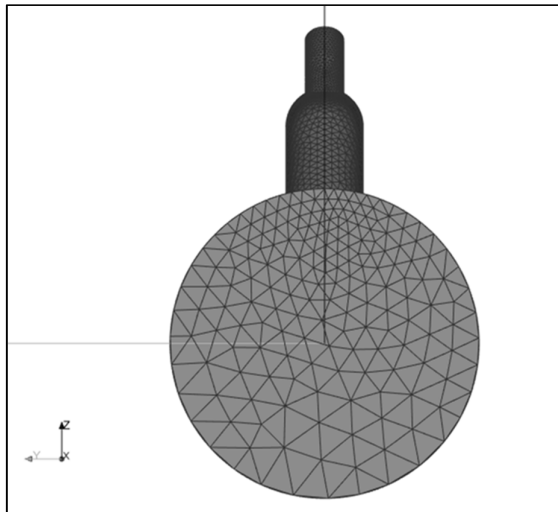


Figura 20 - Malha numérica do reator proposto vista do Plano YZ

3.2. REAÇÃO QUÍMICA

Uma vez determinadas as geometrias e malhas dos reatores a serem utilizados para as simulações, torna-se necessário estabelecer uma reação química usual, a qual fornecerá parâmetros de reação que serão utilizados no *setup* do programa.

A reação química escolhida para ser implementada afim de avaliar o reator proposto é a reação de decomposição isotérmica do Trióxido de Dinitrogênio (N_2O_3) em Óxido Nítrico (NO) e Dióxido de Nitrogênio (NO_2), que é uma reação de primeira ordem expressa conforme a equação (41).



Em que a constante de proporcionalidade k é assumida como sendo igual a $3,2 \cdot 10^{-4} \left[\frac{1}{s} \right]$.

3.3. EQUACIONAMENTO PARA IMPLEMENTAÇÃO DA REAÇÃO QUÍMICA

Na entrada, o Trióxido de Dinitrogênio é alimentado como substância pura juntamente com um componente inerte. Entretanto, ao longo do reator o fluido em

escoamento passa a ser uma mistura de composição variável. Deste modo, o *software* resolve $N - 1$ equações de transporte, relativo à fração mássica dos N componentes da mistura, na forma genérica apresentada na equação (42).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g X_{i,g}) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g U_g X_{i,g}) = \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g D_{C,g} U_g \nabla X_{i,g}) + S_g^{X_i} \quad (42)$$

Onde i é a espécie química.

A reação proposta pode ser generalizada como:



Onde A representa o Trióxido de Dinitrogênio, B Óxido Nítrico e C o Dióxido de Nitrogênio. As equações de Transporte de Massa das espécies para esta reação serão, portanto:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g X_{A,g}) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g U_l X_{A,g}) = \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g D_{A,g} U_g \nabla X_{A,g}) + S_g^{X_A} \quad (44)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g X_{B,g}) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g U_g X_{B,g}) = \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g D_{B,g} U_g \nabla X_{B,g}) + S_g^{X_B} \quad (45)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g X_{C,g}) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g U_g X_{C,g}) = \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g D_{C,g} U_g \nabla X_{C,g}) + S_g^{X_C} \quad (46)$$

Da revisão bibliográfica apresentada no Capítulo 2, tem-se que a taxa reação pode ser descrita, conforme a equação (48).

$$\frac{dC}{dt} = r_1 = k_1 C_A \quad (48)$$

Onde:

- k_1 é a constante de proporcionalidade da reação em $\left[\frac{1}{s}\right]$
- C_A é a concentração do componente A na mistura em $\left[\frac{Kg}{m^3}\right]$

A geração e o consumo das espécies serão, portanto, como apresentados nas equações (49), (50) e (51).

$$S_A = M_A(-r_1) \quad (49)$$

$$S_B = M_B(r_1) \quad (50)$$

$$S_C = M_C(r_1) \quad (51)$$

Onde:

- S é o termo de geração ou consumo a ser implementado;
- M é a Massa Molar das substâncias em $\left[\frac{Kg}{mol}\right]$.

Deste modo, as equações apresentadas nessa seção foram implementadas no programa para que ao final pudessem ser obtidos valores de conversão dos reagentes em produtos.

3.4. CONDIÇÕES DE CONTORNO

A Tabela 4 representa o conjunto de condições de contorno utilizados para dar início à simulação.

Tabela 4 - Condições de contorno aplicadas ao sistema

Característica	Condição aplicada
Tipo de simulação	Estado estacionário
Tipo de fluido	Mistura de composição variável
Modelo de turbulência	k-Epsilon
Transferência de calor	Isothermal (285K)

As condições de entrada, saída e parede, para o reator padrão e o reator proposto encontram-se discriminadas abaixo, na Tabela 5.

Tabela 5 – Condições de contorno para o reator padrão

Condições de entrada	
Vazão volumétrica da entrada [$\frac{m^3}{s}$]	0,001
Fração mássica de entrada de N_2O_3	0,8
Condições de saída	
Regime de escoamento	Subsônico
Pressão estática média	0 Pa
Condições na parede	
Condição de deslizamento na parede	Sem parede deslizante
Rugosidade na parede	Parede lisa

3.5. PROPRIEDADES DAS SUBSTÂNCIAS PURAS

As propriedades do N_2O_3 como substância pura encontram-se discriminadas na Tabela 6. Para as propriedades dos demais componentes da reação foram utilizados os dados da própria data base do *software*.

Tabela 6 – Valores utilizados como propriedades das substâncias puras

Propriedade	N2O3
Massa Molar [$\frac{kg}{Kmol}$]	76,01
Densidade [$\frac{kg}{m^3}$]	1400
Capacidade calorífica [$\frac{J}{kg.K}$]	859,21
Viscosidade dinâmica [$\frac{kg}{m.s}$]	0,001

3.6. CONDIÇÕES INICIAIS E NUMÉRICAS DA SIMULAÇÃO

Inicialmente, para o tempo zero, o reator encontra-se preenchido com uma mistura de 80% de Trióxido de Dinitrogênio e 20% de inerte. A condições numéricas para a simulação são:

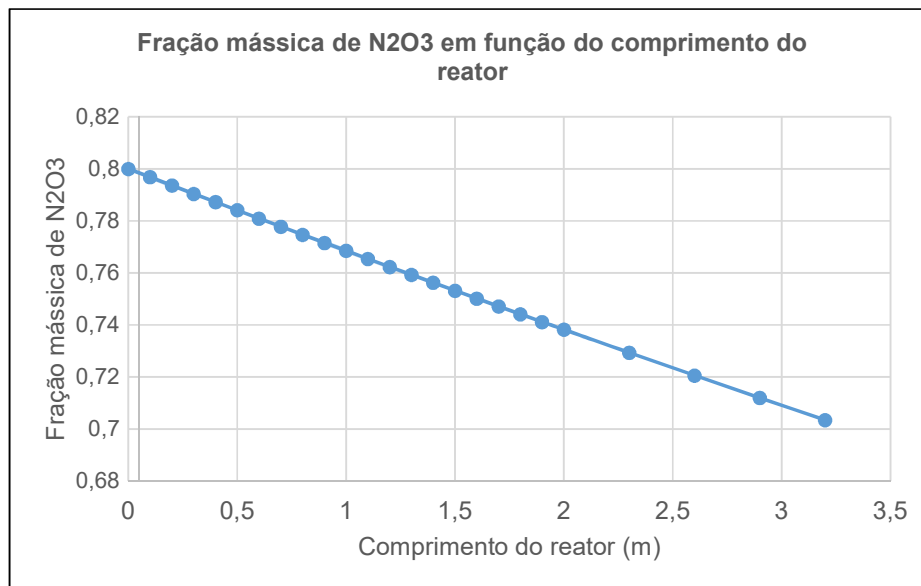
- Controle da escala de tempo: Auto Timescale;
- Critério de convergência: RMS 1×10^{-4} ;
- Número de iterações máximo: 1200;
- Interpolação do termo adjectivo: *High Resolution*.

3.7. VALIDAÇÃO

Para fins de demonstrar a correta implementação da reação no *software*, levando em consideração um reator PFR padrão, os resultados obtidos com as simulações foram comparados ao método analítico apresentado na equação (40), seção 2.10.2. do Capítulo 2.

O reator de 40 centímetros de diâmetro é alimentado por um fluxo volumétrico de $10^{-3} \left[\frac{m^3}{s} \right]$ que contém 80% de N_2O_3 , a constante de proporcionalidade k é igual a $3,2 \cdot 10^{-4} \left[\frac{1}{s} \right]$. Tendo em vista estas condições, o método analítico permite que um gráfico de fração mássica em função do comprimento do reator seja plotado, mostrando a curva de consumo de N_2O_3 , que pode ser observada no Gráfico 1.

Gráfico 1 – Fração mássica de N_2O_3 em função do comprimento do reator obtida através do método analítico



Essa curva pode ser comparada com o espectro de resultado para fração mássica de N_2O_3 obtido utilizando o *CFX*, apresentado na Figura 22, bem como com o gráfico da fração mássica em função do comprimento do reator retornado pelo *software*, apresentado na Figura 21, mostrando que os resultados obtidos através da simulação computacional são confiáveis quando comparados ao método analítico.

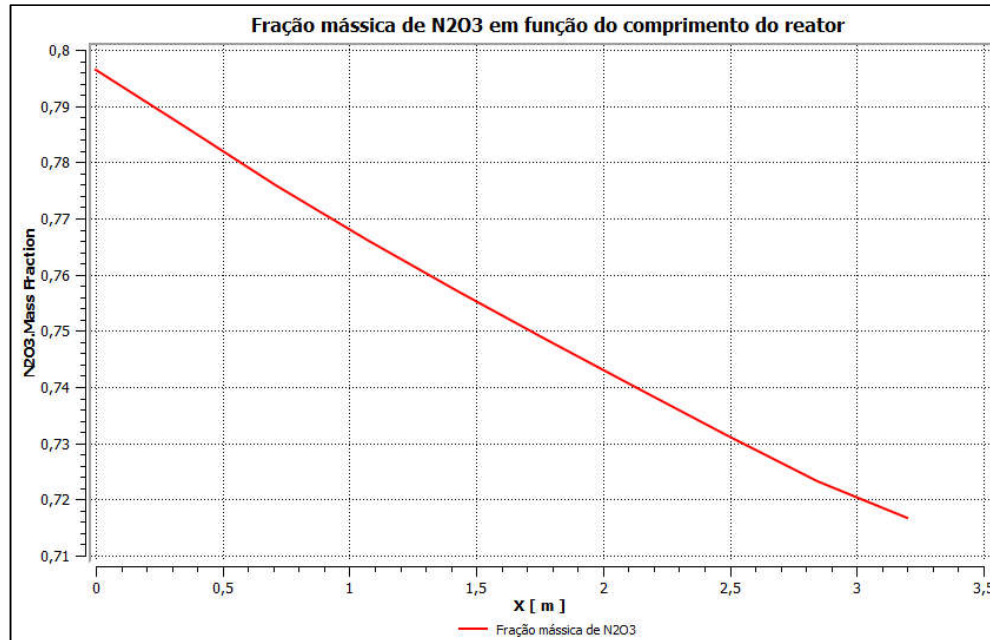


Figura 21 - Fração mássica de N_2O_3 em função do comprimento do reator em gráfico dado pelo CFX

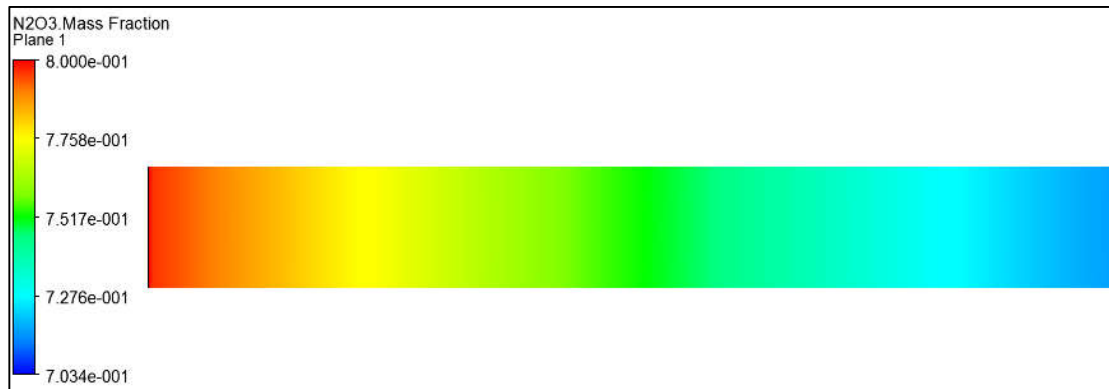


Figura 22 – Espectro de fração mássica de N_2O_3 em função do comprimento do reator obtido através de simulação

Capítulo 4

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Para esta etapa da análise de resultados foi realizada uma comparação entre a conversão obtida para um reator PFR padrão com relação a conversão obtida para o reator proposto, mantidos os mesmos critérios de tamanho, alimentação e operação descritos no Capítulo 3.

Os Espectros da fração mássica para o reator padrão, como relação ao reagente e aos produtos podem ser observados nas Figuras 23, 24 e 25.

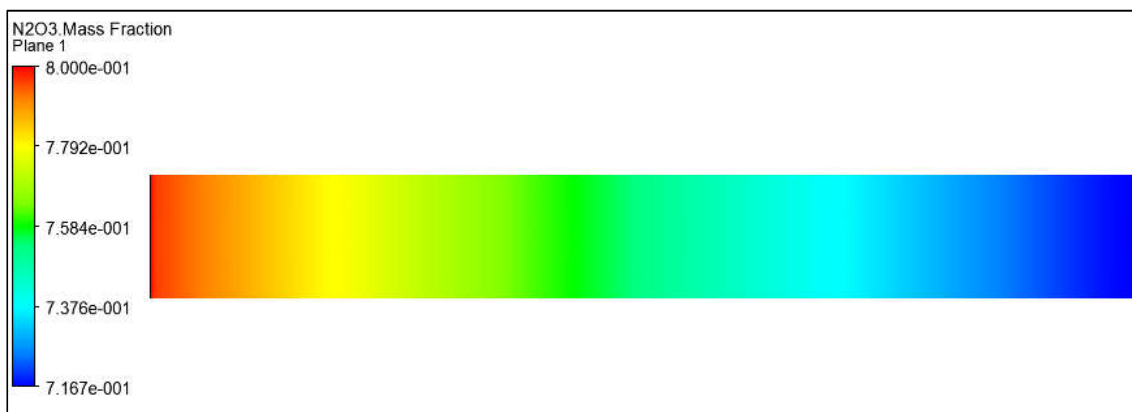


Figura 23 - Espectro de consumo de N_2O_3 em função do comprimento do reator em termos de fração mássica

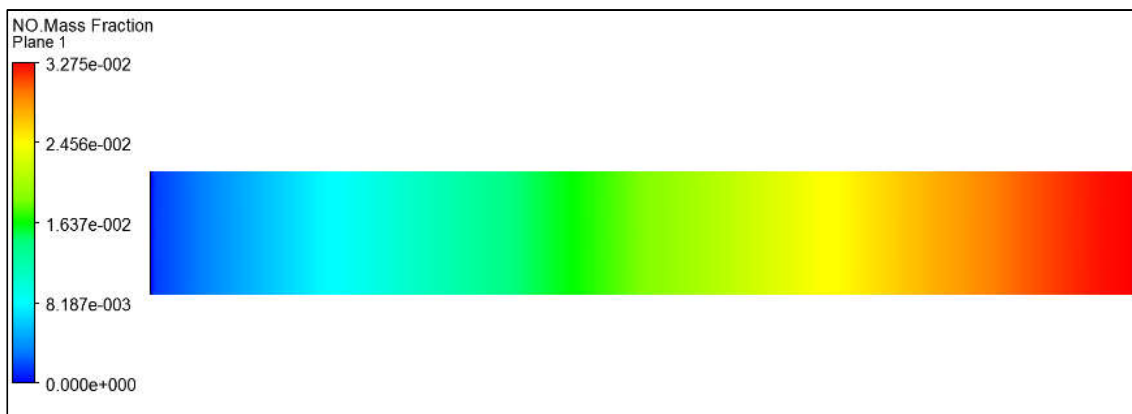


Figura 24 - Espectro de geração de NO em função do comprimento do reator em termos de fração mássica

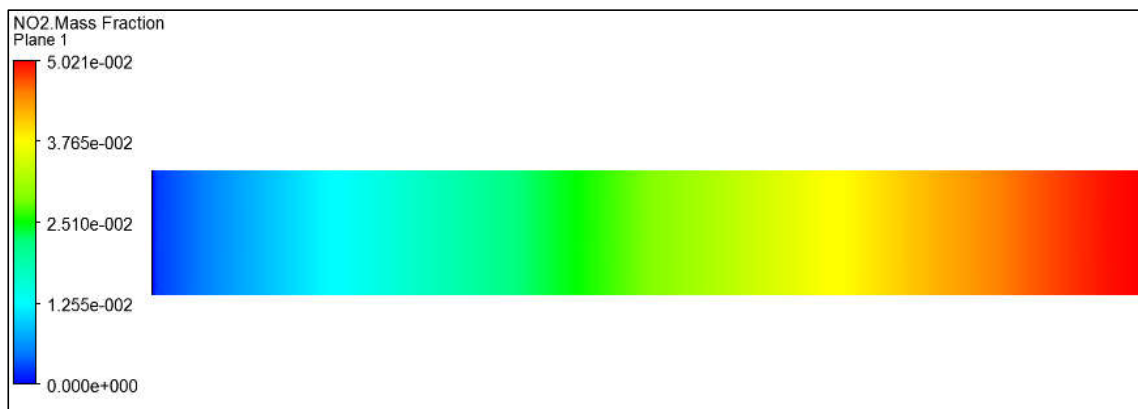


Figura 25 - Espectro de geração de NO_2 em função do comprimento do reator em termos de fração mássica

Analisando os dados apresentados, no comprimento do reator igual a 3,2 metros, onde a conversão do reagente é máxima para os parâmetros de operação escolhidos, é possível calcular a conversão de N_2O_3 para este reator. Levando em conta que o reator é alimentado com uma fração mássica de 0,8 e na saída do reator essa fração se reduz a 0,7167 estabelece-se uma conversão de 10,41% do reagente alimentado em produtos.

Comparativamente, os espectros da fração mássica para o reator proposto, como relação ao reagente e aos produtos podem ser observados nas Figuras 26, 27 e 28.

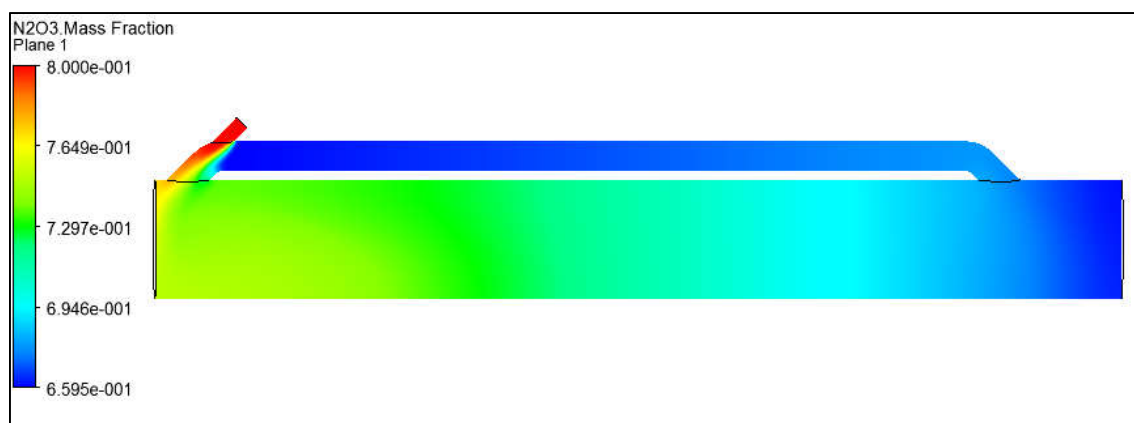


Figura 26 - Espectro de consumo de N_2O_3 em função do comprimento do reator proposto em termos de fração mássica

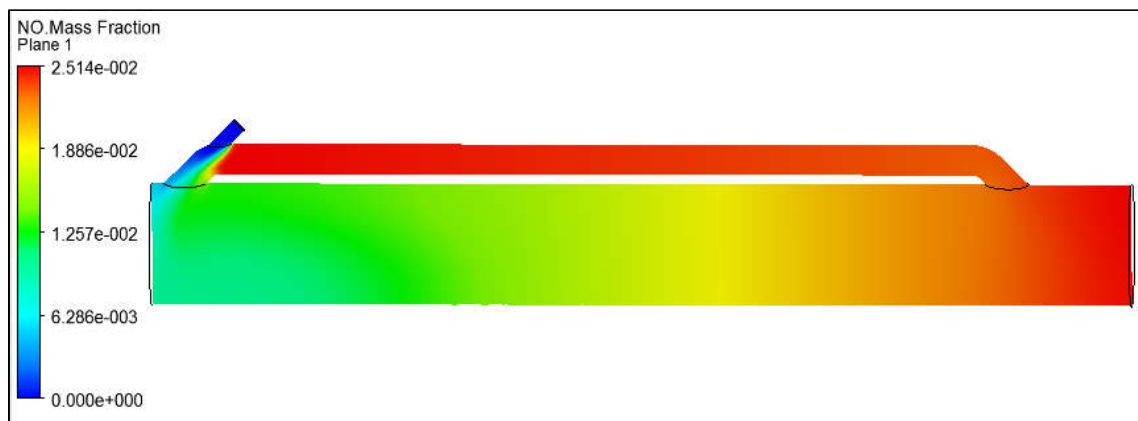


Figura 27 - Espectro de geração de NO em função do comprimento do reator proposto em termos de fração mássica

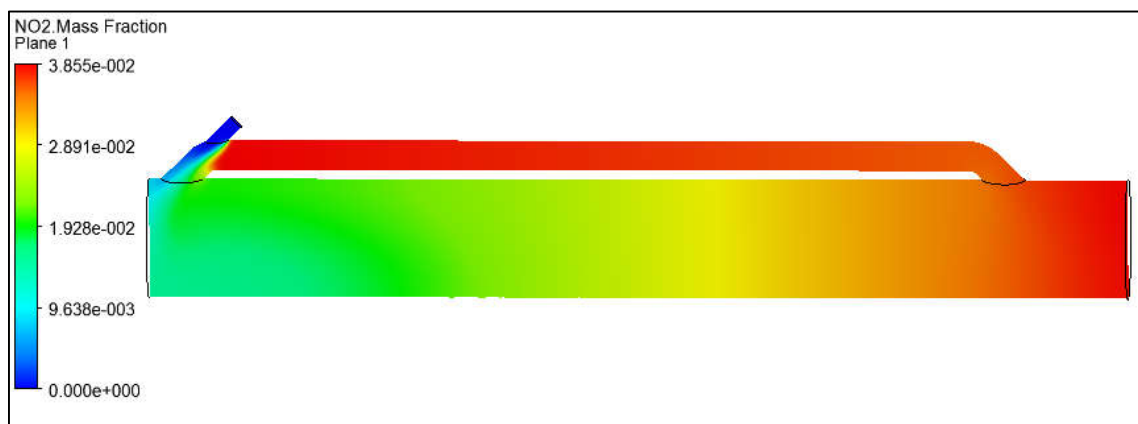


Figura 28 - Espectro de geração de NO₂ em função do comprimento do reator proposto em termos de fração mássica

Neste caso, para o comprimento do reator igual a 3,2 metros, a conversão de N_2O_3 para este reator, levando em conta que ele é alimentado com uma fração mássica de 0,8 e na saída do reator essa fração se reduz a 0,6595 estabelece-se uma conversão de 17,56% do reagente alimentado em produtos.

Isso demonstra que para o mesmo comprimento do reator foi possível aumentar conversão em aproximadamente 7% ao utilizar a geometria proposta. O aumento da conversão pode estar relacionado ao aumento da vorticidade no interior do reator a também à presença da alça de refluxo que aumenta a volume útil do reator. Tais aspectos serão discutidos na comparação fluidodinâmica, na seção seguinte.

4.1. ANÁLISE FLUIDODINÂMICA

Nesta etapa da análise, ambos os reatores foram avaliados levando em conta o escoamento fluidodinâmico em seu interior. Para mesmas condições de alimentação e de operação é possível observar os resultados das linhas de corrente e planos de pressão no interior dos reatores nas imagens que seguem.

As figuras 29 e 30 apresentam as linhas de corrente para o reator padrão, demonstrando que seguem a idealidade de um reator PFR mediante a apresentação de linhas retas ao longo do escoamento, ausentando-se qualquer mistura axial ao longo do comprimento do reator.

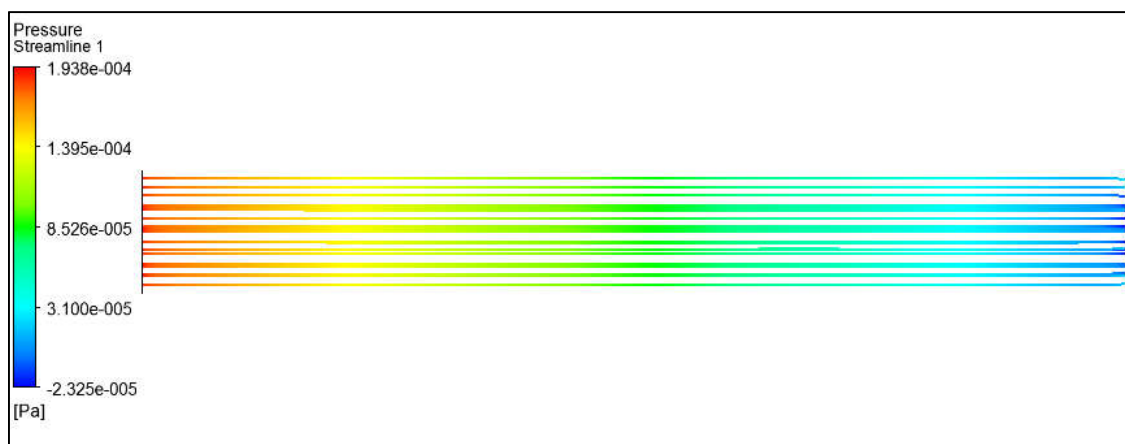


Figura 29 – Linhas de corrente no interior do reator padrão vista do plano XY

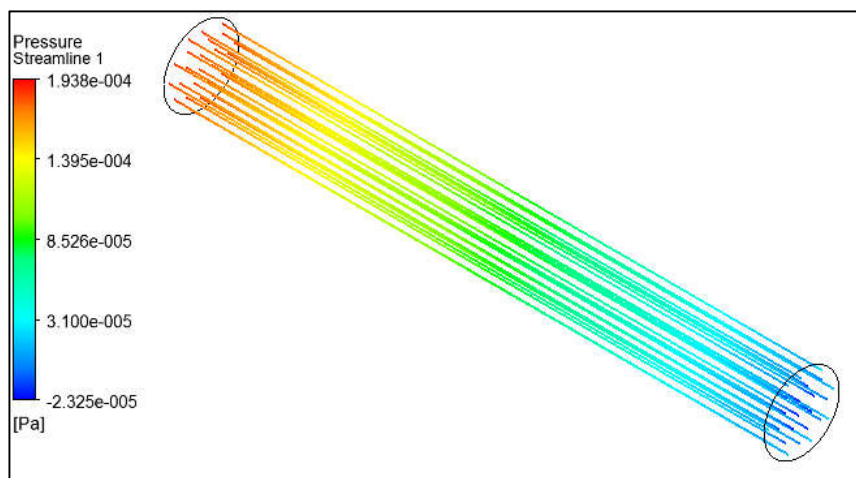


Figura 30 - Linhas de corrente no interior do reator padrão vista isometricamente

Por sua vez, as figuras 31 e 32 apresentam as linhas de corrente para o reator proposto. Avaliando os resultados, é possível observar o alongamento das linhas de corrente geradas pela zona de vorticidade, ocasionando uma área de mistura que cria o efeito semelhante ao de um reator CSTR dentro do reator tubular, efeito este, gerado pela alimentação oblíqua em detrimento à alimentação axial convencional, que faz com que o fluxo de reagente se choque contra a parede do reator assim que é alimentado, ocasionando a turbulência e recirculação.

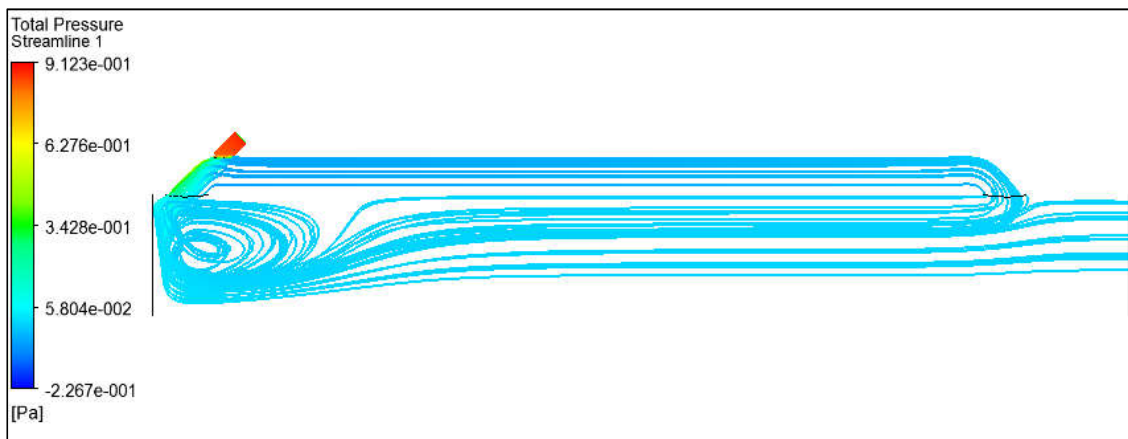


Figura 31 - Linhas de corrente no interior do reator padrão vista do plano XY

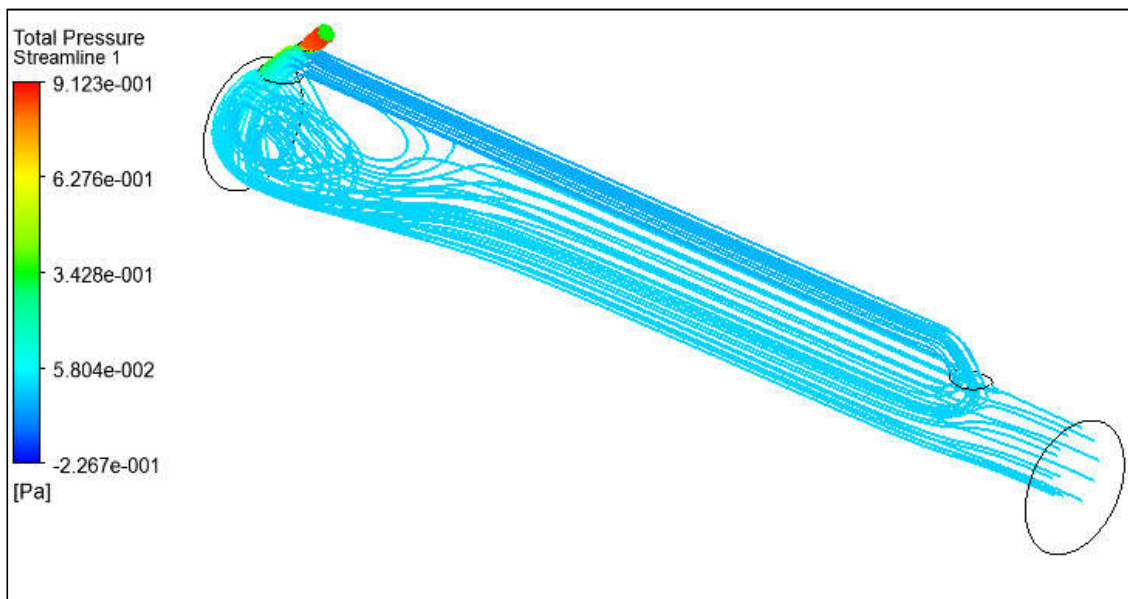


Figura 32 - Linhas de corrente no interior do reator padrão vista isometricamente

A zona turbulenta dentro para a fase gasosa, dentro da vazão volumétrica da alimentação proposta, vai do comprimento $x = 0$ metros até $x = 0,7$ metros, gerando um volume de $8,79 \cdot 10^{-2} [m^3]$ de zona agitada em um reator cujo volume é de $4,29 \cdot 10^{-1} [m^3]$, o que representa cerca de 20,5% do volume total do reator.

A imagem 33 mostra a região de entrada, onde há a zona de mistura, vista em detalhe, à esquerda linhas de corrente e à direita um plano de vetores plotados no centro do reator.

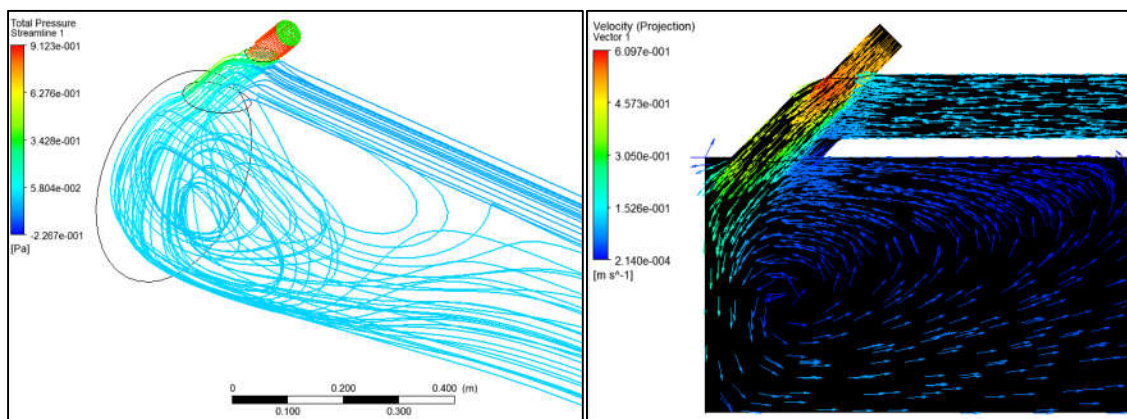


Figura 33 – Entrada do reator vista em detalhe

Além da formação de zonas de mistura, nota-se nas Figuras 31 e 32 que a alimentação através da alça de reciclo gera uma zona de baixa pressão, fazendo com que o fluxo da corrente de reciclo aconteça sem a necessidade de uma bomba, ou ainda, diminuindo a exigência de potência de uma eventual bomba de reciclo.

É possível plotar um plano de velocidades como o observado na Figura 34, de onde pode-se determinar a razão de refluxo à qual o sistema está submetido. Considerando que a alça de refluxo possui um raio de $5 \cdot 10^{-2} [m]$ e que a velocidade do refluxo pode ser considerada como sendo $9,634 \cdot 10^{-2} \left[\frac{m}{s} \right]$, a vazão volumétrica de refluxo é de $7,57 \cdot 10^{-4} \left[\frac{m^3}{s} \right]$, assim, considerando que a vazão volumétrica na saída é de $3,12903 \cdot 10^{-3} \left[\frac{m^3}{s} \right]$, a razão de refluxo é de 0,23.

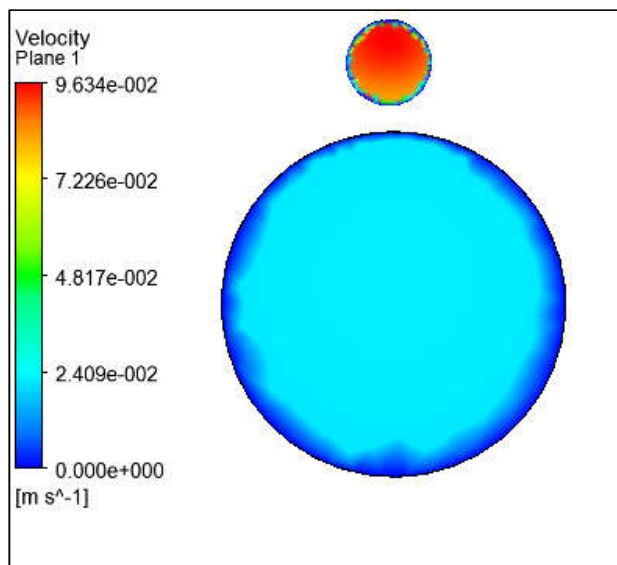


Figura 34 – Plano de velocidades para o reator proposto na posição $x=2,5$ metros

Naturalmente, tanto a criação de zonas de mistura quanto a geração da linha de refluxo aumentam a perda de carga do sistema, entretanto, levando em conta o aumento da conversão é possível que esse aumento de gasto energético advindo da perda de carga se pague ao levar em conta o valor econômico do que se está sendo produzido. As Figuras 35 e 36 apresentam um comparativo de perda de carga entre os reatores, que demonstram o aumento desta perda de carga para o sistema proposto.

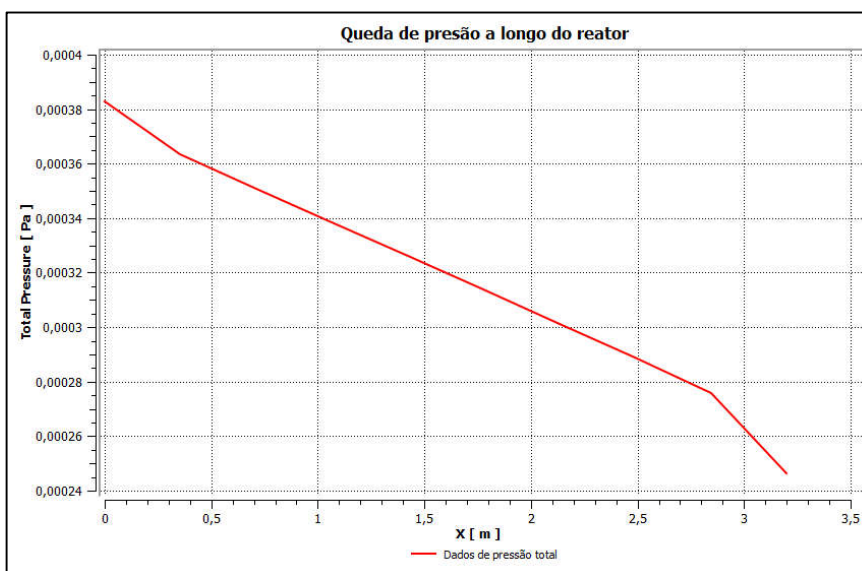


Figura 35 – Gráfico de perda de carga gerado pelo CFX para o reator padrão

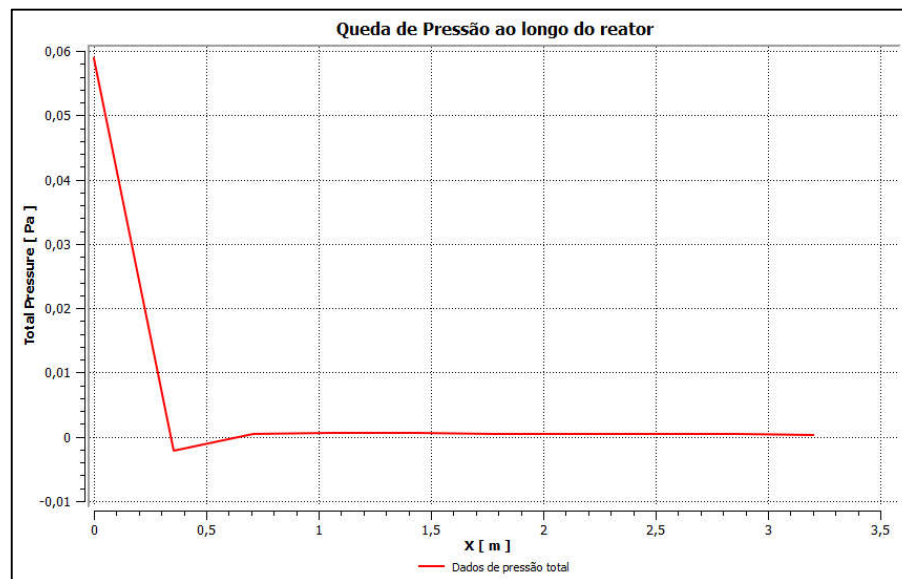


Figura 36 – Gráfico de perda de carga gerado pelo CFX para o reator proposto

Capítulo 5

5. CONCLUSÕES

A simulação computacional consiste de uma ferramenta viável para a previsão dos resultados propostos por esse trabalho, permitindo uma abordagem referente a influência do *design* do reator, bem como de seu modo de alimentação, sob as variáveis de conversão de reatores tubulares. Mediante validação dos dados obtidos com dados analíticos, os resultados demonstraram confiabilidade e consistência com a realidade.

O novo *design* de reator testado mostrou-se eficiente aos objetivos propostos por este trabalho, sendo capaz de gerar em um reator tubular, tanto uma zona de mistura, quanto o ganho de uma corrente de reciclo sem a necessidade de uma bomba adicional. Além disso, para um mesmo tamanho de reator (diâmetro e comprimento), quando comparado ao reator convencional, o reator proposto apresentou melhoras na conversão dos reagentes, mostrando-se como uma alternativa de incremento relativamente fácil de ser realizada em um reator já operante sem necessidade de alterar suas dimensões.

Apesar do aumento na Queda de Pressão quando comparado ao reator convencional, é possível que o maior gasto energético seja suplantado pelo aumento da taxa de conversão da reação química, e a depender das condições de mercado e do valor econômico dos produtos gerados é possível que a operação se torne economicamente lucrativa.

O ganho da corrente de refluxo torna-se um ponto forte no design apresentado, podendo atingir resultados interessantes também para reações em fase líquida, a levar em consideração a maior viscosidade dinâmica apresentada por estes sistemas. Ainda que a razão de refluxo não tenha sido altamente expressiva para as condições de operação apresentadas, há uma possibilidade de torna-la mais relevante para o sistema, ao trabalhar, por exemplo, maiores vazões de entrada.

Pode-se concluir que o modelo de geometria apresentado consiste em uma possibilidade interessante a ser aprofundada em estudos futuros, tendo apresentado neste trabalho, bons resultados para o aumento da taxa de conversão para a reação proposta.

Referências Bibliográficas

CENGEL, Y. A.; CIMBALA, J. M. **Mecânica dos fluidos: Fundamentos e aplicações**. McGraw Hill Brasil, 2015.

DIONÍSIO, R. P. **Simulação tridimensional de uma coluna de bolhas – Diferentes abordagens geométricas e modelagem**. 2008. Dissertação de Mestrado – Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, Campinas, 2008.

FERNANDES, L. A. G. **Ensaio Experimentais com Misturadores Estáticos** **Dissertação de Mestrado**. 2005. Dissertação de mestrado – Faculdade de Engenharia química, UNICAMP, Campinas, 2005.

FOGLER, H. Scott. **Elementos de engenharia das reações químicas**. Rio de Janeiro, Brasil: 4ª Edição; LTC Editora, 2002.

FROMENT, Gilbert F. et al. **Chemical reactor analysis and design**. New York: Wiley, 1990

GIL, Antônio Carlos. **Como elaborar projetos de pesquisa**. São Paulo, Brasil: 4ª Edição; Editora Atlas, 2002.

GONÇALVES, N. D. F. **Método dos Volumes Finitos em Malhas não estruturadas**. 2007. Dissertação de mestrado – Faculdade de Ciências da Universidade do Porto. Portugal, 2007.

HEUERT, Jenifer; KHATCHATOURIAN, Oleg. **Interação entre Jatos Transversais e Fluxo Principal: Simulação e Análise Comparativa de Modelos de Turbulência**. Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, Florianópolis. 2007.

INCROPERA, Frank P.; DEWITT, David P. **Fundamentos de transferência de calor**. Pearson Educación, 1999

JUSTO, D. A. R. **Geração de malhas, condições de contorno e discretização de operadores para dinâmica de fluidos computacional**. 2001. Dissertação de mestrado – Universidade Federal do Rio grande do Sul, UFRGS, Porto Alegre, 2001.

KOLHAPURE, N. H. **Computational fluid dynamics for design and optimization of tubular low-density polyethylene reactors**. 2001. Phd Dissertation - Iowa State University, Iowa, 2008.

LEVENSPIEL, O. **Engenharia das Reações Químicas-Cálculo de Reatores**. São Paulo, Brasil: Edgard Blucher. 1972

LOPES, G. C. **Desenvolvimento de Modelo Numérico Tridimensional e Elíptico para o Estudo de Escoamentos no Interior de Dutos Cilíndricos**. 2008. Dissertação de Mestrado – Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, Campinas, 2008.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. Rio de Janeiro, Brasil: 2a Edição; LTC Editora, 2004.

MUSHTAQ, F. **Analysis and Validation of Chemical Reactors performance models developed in a commercial software platform**. 2014. Master of Science Thesis - KTH School of Industrial Engineering and Management, 2013.

PRODANOV, Cleber Cristiano; DE FREITAS, Ernani Cesar. **Metodologia do Trabalho Científico: Métodos e Técnicas da Pesquisa e do Trabalho Acadêmico**. Novo Hamburgo, Brasil: Editora Feevale, 2013.

RANADE, V. V. **Computational flow modeling for chemical reactor engineering**. London, England: Academic press, 2001.

ROBERTS, G. W. **Chemical reactions and chemical reactors**. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2009.

SAAD, Tony. **Turbulence modeling for beginners**. University of Tennessee space institute, 2011.

SCHMAL, Martin. **Cinética e reatores: aplicação na engenharia química: teoria e exercícios**. Rio de Janeiro, Brasil; Synergia, 2010.

VERGEL, J.L.G. **Estudo da influência da malha computacional, modelo de turbulência e aspectos numéricos da modelagem CFD em impelidores PBT usando malhas não estruturadas**. 2013. Dissertação de mestrado – Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, Campinas, 2013.