

**UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANA  
CAMPUS PONTA GROSSA  
ENGENHARIA QUÍMICA**

EDERLAN FIM DIAS

**ESTUDO DE OTIMIZAÇÃO GEOMÉTRICA DE PÁS DE UM REATOR CSTR EM  
SEU PROCESSO DE AGITAÇÃO MECÂNICA DA MISTURA REACIONAL**

PONTA GROSSA

2018

EDERLAN FIM DIAS

**ESTUDO DE OTIMIZAÇÃO GEOMÉTRICA DE PÁS DE UM REATOR CSTR EM  
SEU PROCESSO DE AGITAÇÃO MECÂNICA DA MISTURA REACIONAL**

Trabalho de Conclusão de Curso  
apresentado a Universidade Tecnológica  
Federal do Paraná para fins de obtenção  
do título de Bacharel em Engenharia  
Química.

Prof<sup>o</sup> Orientador: Dr. Everton Moraes  
Matos

PONTA GROSSA

2018



---

## TERMO DE APROVAÇÃO

ESTUDO DE OTIMIZAÇÃO GEOMÉTRICA DE PÁS DE UM REATOR CSTR EM SEU PROCESSO DE AGITAÇÃO MECÂNICA DA MISTURA REACIONAL

por

EDERLAN FIM DIAS

Monografia apresentada no dia 15 de Junho de 2018 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. Dra. Giane Gonçalves Lenzi  
(UTFPR)

---

Prof. Dra. Juliana Martins Teixeira de Abreu Pietrobelli  
(UTFPR)

---

Profa. Dr. Everton Moraes Matos  
(UTFPR)  
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**

Dedico este trabalho de conclusão de curso, primeiramente a Deus que guiou minha jornada até o presente momento, a minha família pelo amor e suporte durante os anos de graduação, aos grandes amigos que tive a oportunidade de conhecer, e aos mestres que dedicaram seu tempo na arte do ensino

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a Deus pelo dom da vida e por ter iluminado nossos caminhos.

À minha família por todo o apoio, carinho e suporte, especialmente aos meus pais que suportaram a partida de um filho estar longe dos seus braços e por sempre confiarem em mim nas decisões mais difíceis que até hoje fiz.

Ao Professor Everton Moraes Matos por sua disponibilidade, confiança e prontidão em me orientar.

Aos demais docentes do curso de engenharia de química e funcionários da UTFPR que, direta ou indiretamente, contribuíram para o alcance dos meus objetivos.

Aos amigos pelas conversas intelectuais, paralelas ou até jogadas fora, longas risadas, festas, diversão, horas de estudos e angústias compartilhadas. Por terem transformado os tempos difíceis da graduação nos melhores anos da minha vida, tempos que ficarão pra sempre em minhas profundas memórias.

Agradeço em fim a todos que de alguma maneira contribuíram para a realização deste trabalho e para a conclusão deste curso.

*“Sou um pouco de todos que conheci, um pouco dos lugares que fui,  
um pouco das saudades que deixei, sou muito das coisas que gostei.  
Entre umas e outras errei, entre muitas e outras conquistei”.*

**Ramon Hasman**

## RESUMO

Os reatores químicos referidos como reatores tanques agitados contínuos, também conhecidos como reatores CSTR são equipamentos de grande importância na indústria de transformação química que consiste, em propiciar condições necessárias para a conversão de uma mistura de reagentes químicos em um produto de valor agregado. Um reator CSTR é composto por um tanque físico onde são inseridos um ou mais reagentes sob a agitação. Essa agitação é realizada por um agitador ou misturador de fluidos inserido dentro do tanque com o objetivo de proporcionar uma maior conversão dos reagentes em produtos propiciando uma maior interatividade entre os fluidos reacionais, consequentemente aumento a eficiência de conversão final. No mercado há diversos tipos de misturadores que utilizam impelidores que se diferem basicamente em sua geometria dimensional. Cada geometria de impelidor é indicado dependendo das propriedades físico-químicas do meio reacional que lhe é exposto. O presente trabalho visou a otimização geométrica do impelidor tipo hélice inclinada com torção transversal obtendo ao final uma geometria ótima que com as mesmas condições operacionais proporcionasse um maior grau de mistura no interior do reator tanque, obtendo assim um processo de reação com maior eficiência utilizando a mesma potência de mistura do agitador mecânico. O estudo consistiu em realizar uma variação paramétrica de uma geometria padrão escolhida e por meio das técnicas de simulação computacional. Utilizando as teorias de fluidodinâmica computacional foi possível realizar a análise e comparação entre as geometrias geradas utilizando como variável de decisão a homogeneização da temperatura de dois fluidos, além da comparação da eficiência de mistura tendo como referência a mistura com ausência do agitador: em uma primeira análise com 25 geometrias geradas via variação paramétrica, dos quais 3 com maior desempenho de mistura foi realizado uma análise avaliando a conversão final da reação de ácido-base. A reação utilizada para estudo foi de ácido sulfúrico e hidróxido de sódio, formando sulfeto de sódio e água. A melhor configuração geométrica dos impelidores foi com inclinação e torção 80 e 60° respectivamente.

**Palavras-chaves:** Reator CSTR, CFD, Misturador Mecânico, Otimização

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Volume de controle de um sistema .....	14
Figura 2: Reator contínuo de tanque agitado .....	16
Figura 3: Esquema de um Agitador mecânico.....	19
Figura 4: Representação dos tipos de fluxo em um tanque agitado.....	20
Figura 5: Tanque agitado com eixo central deslocado .....	20
Figura 6: Tanque agitado com agitador na horizontal. ....	21
Figura 7: Representação do efeito da utilização de chicanas em um tanque agitado .....	21
Figura 8: Tipos de impelidores .....	22
Figura 9: Representação das principais variáveis de projeto de um tanque agitado.	24
Figura 10: Gráfico utilizado no projeto de tanques agitados e misturadores .....	25
Figura 11: Comportamento da velocidade unidimensional em um dado ponto do sistema.....	30
Figura 12: Malhas computacionais. (a) Malha não-estruturada, (b) Malha estruturada .....	34
Figura 13: Reator proposto com visão isométrica .....	35
Figura 14: Reator proposto com visão superior.....	36
Figura 15: Reator proposto com visão lateral.....	37
Figura 16: Geometria do impelidor inicial do estudo em visão isométrica .....	37
Figura 17: Eixo da geometria do impelidor que representa o ângulo de torção em cada lâmina. ....	37
Figura 18: Eixo da geometria do impelidor que representa o ângulo de inclinação em cada lâmina em relação a sua base. ....	38
Figura 19: Geometrias geradas analisando as variações de ângulos de inclinação (horizontal) e ângulos de torção (vertical) .....	39
Figura 20: Malha computacional inicial .....	44
Figura 21: Malha computacional com refinamentos .....	45
Figura 22: Gráfico das simulações dos testes de independência de malha .....	46
Figura 23: Geometria tida como uma das três melhores configurações geométricas que apresentarem melhor desempenho de mistura ( $A_i = 60^\circ$ e $A_t = 60^\circ$ )...48	
Figura 24: Geometria tida como uma das três melhores configurações geométricas que apresentarem melhor desempenho de mistura ( $A_i = 80^\circ$ e $A_t = 60^\circ$ )...48	

Figura 25: Geometria tida como uma das três melhores configurações geométricas que apresentarem melhor desempenho de mistura ( $A_i = 40^\circ$ e $A_t = 20$ ) ....	48
Figura 26: Plotagem da velocidade em plano central no interior do misturador .....	49
Figura 27: Plotagem dos vetores de velocidade no interior do misturador .....	49
Figura 28: Plotagem da fração mássica do ácido sulfúrico no interior do reator .....	51
Figura 29: Plotagem multi-planar da concentração do ácido sulfúrico no interior do reator .....	51

## LISTAS DE TABELAS

TABELA 1: Vantagens e Desvantagens dos principais impelidores .....	23
TABELA 2: Reação das equações da conservação do movimento tridimensional..	29
TABELA 3: Valores das constantes utilizadas nas equações de cálculo dos parâmetros $k$ (energia cinética) e $\epsilon$ (taca de dissipação). .....	32
TABELA 4: Valores de ângulo de inclinação e torção utilizados no estudo para a geração das 25 geometrias. ....	38
TABELA 5: Propriedades Físicas do ácido sulfúrico. ....	41
TABELA 6: Propriedades Físicas do hidróxido de Sódio.....	41
TABELA 7: Propriedade físicas do sulfeto de sódio .....	43
TABELA 8: Resultado final das simulações CFD de todas as 25 geometrias geradas. ....	46
TABELA 9: Condições de operação do Reator .....	50
TABELA 10: Resultado da conversão final do ácido sulfúrico na saída do reator CSTR. ....	50

# SUMÁRIO

<b>INTRODUÇÃO .....</b>	<b>11</b>
<b>1. OBJETIVOS .....</b>	<b>12</b>
<b>2. REVISÃO DA LITERATURA .....</b>	<b>13</b>
2.1 REATORES QUÍMICOS .....	13
2.1.1 Balanço Molar .....	13
2.1.2 Reatores com escoamento contínuo .....	15
2.1.3 Reator Contínuo de Tanque Agitado (CSTR) .....	15
2.2 AGITAÇÃO E MISTURA .....	18
2.3 FLUIDODINAMICA COMPUTACIONAL (CFD) .....	26
<b>3. METODOLOGIA .....</b>	<b>35</b>
3.1 PROPOSTA DE REATOR CSTR.....	35
3.2 ESTUDO DE OTIMIZAÇÃO .....	37
3.2.1 Parâmetros de otimização dos impelidores.....	37
3.2.2 Parâmetro de decisão do melhor misturador .....	39
3.2.3 Análise dos misturadores aplicado a uma reação química .....	40
3.3 ESTUDO DE OTIMIZAÇÃO VIA CFD.....	42
<b>4. RESULTADOS E DISCUSSÃO .....</b>	<b>44</b>
4.1 ESTUDO CFD.....	44
4.2 SIMULAÇÕES DO MISTURADOR .....	46
4.3 ANÁLISES CFD EM CSTR .....	50
<b>5. CONCLUSAO .....</b>	<b>52</b>
<b>REFERENCIAS.....</b>	<b>53</b>

## INTRODUÇÃO

Os reatores CSTR são amplamente aplicados das indústrias químicas, alimentícias, farmacêuticas e entre muitas outras, devido a capacidade de proporcionar uma boa mistura, excelente eficiência na transferência de calor e de massa e uma escala considerável para a indústria.

O processo de mistura em CSTR tem sido objeto de muitos estudos ao longo dos anos, buscando principalmente a melhoria da eficiência da mistura com menos gasto energético em um menor tempo, sendo capaz assim de aumentar a produtividade nas indústrias com um custo de produção menor, evitando desperdícios energéticos e de matéria-prima nesse processo. E nesse aspecto as características dos agitadores e misturadores exercem grande influência na eficiência final de uma mistura.

Um misturador ou agitador basicamente é composto de um rotor o qual fornece energia em forma de potência para o processo de mistura; impelidor que são lâminas acopladas à um eixo rotacional cuja geometria em movimento circulatório propicia agitação no meio que está inserido.

Em um CSTR a agitação do fluido reacional é de grande importância por prover um aumento na taxa de transferência de calor e de massa entre reagente, promovendo um aumento subsequente na conversão final.

Para investigação, o presente estudo utilizou as técnicas de fluidodinâmica computacional, que é capaz de resolver numericamente equações de fenômenos de transporte e de energia.

O progresso da fluidodinâmica computacional (CFD – *Computer Fluid Dynamics*) nos últimos 20 anos proporcionou a engenharia uma importante ferramenta no entendimento no escoamento em tanques agitados, devido principalmente ao avanço das tecnologias e computadores que foram capazes se aprimorou a velocidade de processamento e resolução dos cálculos, o que antes representava um grande obstáculo no uso de CFD em investigações do gênero na engenharia.

O presente trabalho consiste em utilizar as ferramentas de CFD no estudo de otimização de impelidores em seu processo de mistura fluídica por meio de simulações dos fenômenos envolvidos utilizando a metodologia de volumes finitos.

## 1. OBJETIVOS

### 1.1 Geral

O objetivo geral deste trabalho visa a otimização, via fluidodinâmica computacional, de pás de um misturador do tipo tanque agitado de escoamento contínuo aplicado em um reator do tipo CSTR.

### 1.2 Específicos

Os objetivos específicos são:

1. Projetar um misturador tanque otimizado como mecanismo chave do projeto;
2. Propor diferentes tipos de impelidores para implementar no processo de mistura fluídica no misturador projetado;
3. Avaliar o processo de mistura para cada geometria de impelidor proposto por meio de uma mistura de escoamentos que apresentam diferentes temperaturas;
4. Analisar as 3 (três) melhores geometrias de impelidores propostos em um reator CSTR utilizando a conversão de uma reação ácido-base como parâmetro de decisão.

## 2. REVISÃO DA LITERATURA

Nesta seção é explorada de modo conceitual toda a base teórica para entendimento do estudo. Primeiramente, apresenta-se os conceitos de reatores químicos e dá-se a introdução as equações que dão origem a todo o equacionamento de projetos de reatores. Uma segunda parte é apresentado os conceitos de agitadores e misturadores, os quais são componentes de suma importância no presente estudo. E uma ultima parte, uma breve introdução as técnicas CFD e seus principais conceitos e equações de governança.

### 2.1 Reatores Químicos

Um reator químico conceitualmente é um recipiente que proporcione as condições mínimas necessárias para que uma reação química ocorra de forma efetiva. Industrialmente, um reator é definido como um equipamento ao qual substâncias reagentes se convertem em um produto de interesse de valor agregado para o setor industrial, e neste sentido, existem uma gama de reatores específicos para cada necessidade, ramo industrial, substâncias utilizadas e entre outras especificações. Assim, o projeto de reatores é de muita importância pois é por meio desse que reatores são construídos, aperfeiçoados e otimizados.

E dentre os principais parâmetros de projetos de reatores está o balanço molar.

#### 2.1.1 *Balanço Molar*

Para realizar um balanço molar em um sistema é necessário especificar suas fronteiras. O que está envolvido por essas fronteiras chamamos de volume de controle e é nesse volume que os balanços molares são aplicados para quaisquer substancia de interesse.

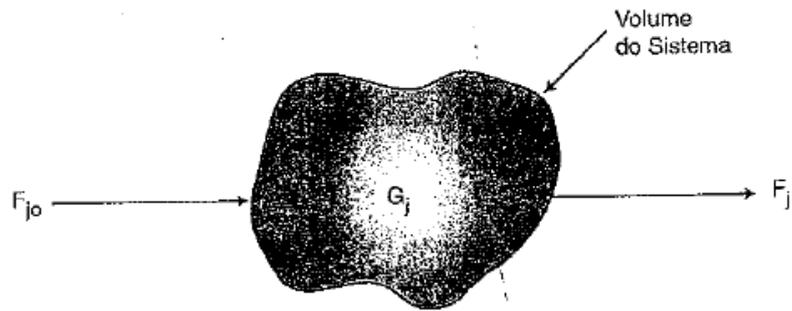


Figura 1. Volume de controle de um sistema

FONTE: Fogler (2009)

Realizando um balanço em um volume de controle quaisquer (Figura 1) para uma espécie  $j$ , temos a equação 1.

$$\begin{aligned}
 & [Entrada] - [Saída] + [Geração] = [Acumulo] \\
 F_{j0} - F_j + G_j &= \frac{dN_j}{dt}
 \end{aligned} \tag{1}$$

Onde,  $N_j$  representa o número de mols de  $j$  no sistema em um tempo  $t$ . Uma vez considerando que todas as variáveis do sistema são espacialmente uniformes em todo o volume de controle, a velocidade de geração  $G_j$  será:

$$G_j = r_j \cdot V \tag{2}$$

Considerando agora que  $G_j$  varie com a posição dentro do volume de controle  $i$ , temos a Equação 3.

$$\Delta G_{ji} = r_{ji} \Delta V_{ji} \tag{3}$$

Equações similares são escritas para um sistema composto por  $n$  volumes de controle, assim podemos obter a velocidade de geração total.

$$G_j = \sum_{i=1}^N \Delta G_{ji} = \sum_{i=1}^N r_{ji} \Delta V_i \tag{4}$$

Agora, usando a Equação 4, e tomando um limite  $N$  tendendo ao infinito e a variação de volume a zero, podemos assim usar a definição de integral e reescrevê-la da seguinte forma.

$$G_j = \int^V r_j dV \quad (5)$$

Substituindo a Equação 5 na Equação 1, tem-se a equação geral do balanço molar, a qual podemos desenvolver as principais equações de projetos para os mais variados tipos de reatores químicos, representado na Equação 6.

$$F_{jo} - F_j + \int^V r_j dV = \frac{dN_j}{dt} \quad (6)$$

### 1.1.2 Reatores com escoamento contínuo

Fogler (2009) descreve os reatores de escoamento contínuo como sendo reatores que operam majoritariamente em regime estacionário, existindo 3 (três) derivações:

- Reator contínuo de tanque agitado, o qual é foco deste trabalho.
- Reator com escoamento empistonado.
- Reator de leito fixo.

### 2.1.3 Reator Contínuo de Tanque Agitado (CSTR)

O Reator Contínuo de Tanque Agitado, também conhecido pela sigla CSTR, é bastante utilizado em processamentos industriais para reações químicas em fase líquida. Esse tipo de reator, Fogler (2009) menciona, que pode ser considerado perfeitamente misturado em regime permanente. Isto quer dizer que, as variáveis como temperatura, velocidade de reação e concentração não variam com a posição dentro do reator e tão pouco com o tempo. Assim a Equação 6 se transforma na Equação 7.

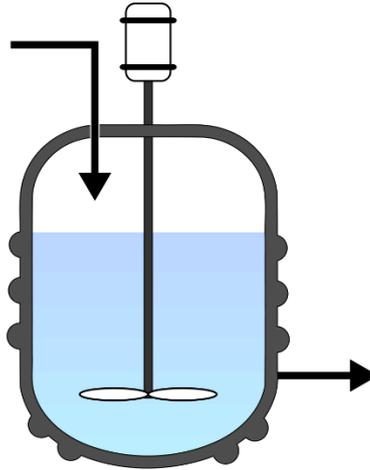


Figura 2. Reator contínuo de tanque agitado

FONTE: Virtual Labs

$$V = \frac{F_{j0} - F_j}{-r_j} \quad (7)$$

Ou em termo de concentração e vazão volumétrica (Equação 8)

$$V = \frac{v_0 C_{j0} - v C_j}{-r_j} \quad (8)$$

Podemos assim obter a taxa de reação de uma espécie pela Equação 9.

$$-r_j = \frac{v_0 C_{j0} - v C_j}{V} \quad (9)$$

A avaliação de um reator CSTR se dá também por meio de a conversão, variável que representa o quanto em concentração um reagente se converteu em produtos, a exemplo (FOGLER, 2009).

Para entender melhor o conceito de conversão baseou-se como modelo de cálculo uma reação envolvendo dois reagentes, A e B quaisquer. Considerando a espécie A como reagente limitante da reação. A equação reacional geral é apresentada na Equação 10.



Onde  $a$ ,  $b$ ,  $c$  e  $d$  representam os coeficientes estequiométricos da reação e A, B, C e D as espécies envolvidas.

Tomando A como base, pois é o que consideramos reagente limitante, reescrevemos a reação (Equação 10) na seguinte forma (Equação 11).



Assim cada grandeza é expressa em mols por reagente de A.

A conversão, como dita anteriormente pode ser representado pela Equação 12.

$$X_A = \frac{\text{Mols reagidos de A}}{\text{Mols alimentados de A}} \quad (12)$$

Para reatores com escoamento contínuo,  $X$  é dependente do volume do reator. Considerando uma vazão molar de A constante em regime estacionário temos que A está reagindo no interior do reator seguindo a Equação 13.

$$[F_{Ao}] \cdot [X] = \frac{\text{Mols alimentados de A}}{\text{tempo}} \cdot \frac{\text{Mols reagido de A}}{\text{Mols alimentados de A}} \quad (13)$$

Assim,

$$[F_{Ao}] \cdot [X] = \frac{\text{Mols reagido de A}}{\text{tempo}} \quad (14)$$

Considerando o balanço de entrada, consumo e saída de A, tem-se:

$$\left[ \begin{array}{l} \text{Taxa molar de A} \\ \text{que é alimentado} \\ \text{no sistema} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{l} \text{Taxa molar de} \\ \text{consumo de A} \\ \text{dentro do sistema} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{l} \text{Taxa molar de A} \\ \text{que sai do sistema} \end{array} \right] \quad (15)$$

$$[F_{Ao}] - [F_{AO}X] = [F_A] \quad (16)$$

Rearranjando os termos da Equação 17, tem-se:

$$F_A = F_{AO}(1 - X) \quad (17)$$

Para sistemas reacionais que se encontram na forma líquida, pode-se considerar uma vazão volumétrica constante, chega-se na Equação 18.

$$F_j = C_j v \quad (18)$$

Onde,  $C_j$  é a concentração molar e  $v$  a vazão volumétrica da espécie  $j$ .

Substituindo a Equação 18 na Equação 17, tem-se:

$$X = 1 - \frac{C_A}{C_{A0}} \quad (19)$$

E foi pela equação 19 que foi definida como parâmetro para determinar a melhor configuração de impelidores em um reator CSTR considerando sua capacidade de conversão final.

## 2.2 Agitação E Mistura

Conceitualmente, o processo de agitação refere-se ao movimento induzido de um material em forma determinada, geralmente circulatório, dentro de um recipiente; essa matéria se caracteriza por se encontrar somente da forma homogênea.

O que difere do processo de mistura do processo de agitação, é que o processo de mistura é conceituado como um movimento aleatório de duas ou mais fases inicialmente separadas; é uma operação unitária empregada na indústria química, bioquímica, farmacêutica, petroquímica e alimentícia (FERNANDES, 2005). As substâncias a serem misturadas podem ser do tipo homogênea, que são substâncias miscíveis, ou heterogênea, não-miscíveis.

Entre as principais aplicações destes processos estão (JOAQUIM, 2008):

- Mistura de líquidos miscíveis
- Dispersão de gases em líquidos
- Produção de emulsões de sólidos em líquidos
- Mistura de dois ou mais sólidos
- Auxílio na transferência de calor e massa
- Aceleração de reações químicas
- Modificação de certas propriedades de alimentos

É importante salientar que o processo de mistura não possui nenhum efeito de conservação possuindo como função única auxiliar algum processo ou fenômeno.

Para Fernandes (2005) o processo de mistura é altamente influenciado e dependente das propriedades das substâncias que há a intenção de misturar. Dentre elas estão a viscosidade, massa específica e miscibilidade em líquidos e granulometria, massa específica, forma, aderência e molhabilidade em sólidos.

Em relação ao processo de agitação, é realizado por equipamento conhecido como agitador que possui um sistema acoplado geralmente a um tanque que possui um conjunto cilíndrico de lâminas acopladas posicionadas verticalmente que é responsável pela ação de agitação em seu interior, conforme mostrado na Figura 3.

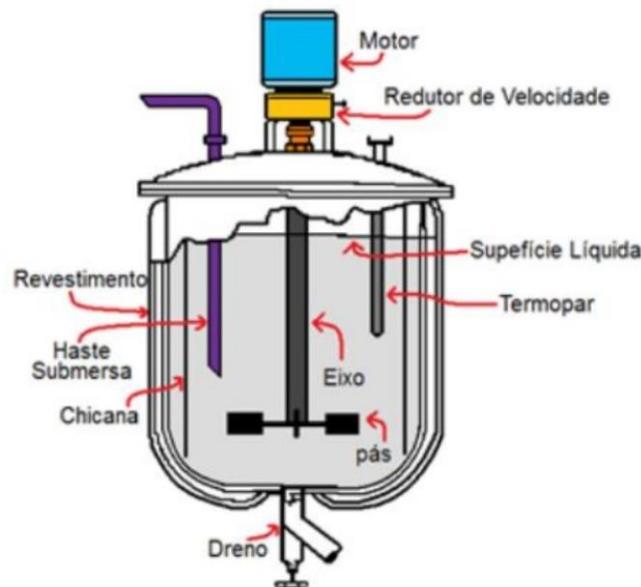


Figura 3. Esquema de um Agitador mecânico

FONTE: IFBA

Em relação ao fluxo de escoamento que ocorre no interior do tanque devido a ação dos impelidores podem ser observados na Figura 3, caracterizados como:

- Longitudinal: paralela ao eixo do agitador
- Rotacional: tangencial ao eixo do agitador
- Radial: perpendicular ao eixo do agitador

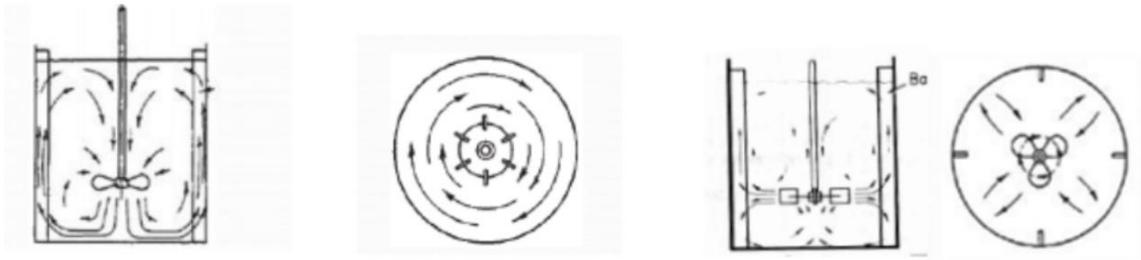


Figura 4. Representação dos tipos de fluxo em um tanque agitado

FONTE: IFBA

A ação de agitação se caracteriza pela produção de turbulência no interior do tanque que proporciona uma movimentação do fluido a ser agitado. Essa turbulência produz o que chama-se de vórtice, produzido pela ação da força centrífuga que age em um líquido em rotação devido a componente tangencial da velocidade do fluido. A geração desses vórtices é tida como um fenômeno indesejado nesse processo. Isso deve-se porque ocasiona uma região de alta vibração no eixo do rotor do agitador, além de, ocasionar uma região de pobre mistura no interior do tanque (MANSHOOR, 2016).

Uma maneira de evitar esse fenômeno é deslocar o agitador, deixando-o fora do centro do tanque (Figura 5) em tanques de pequeno porte, ou posicioná-lo na horizontal (Figura 6) em tanques largos. Outra maneira eficaz de evitar vórtices no processo é a inserção de chicanas ou defletores nas paredes internas do tanque; na Figura 7 pode-se ver o efeito ocasionado ao adicionar chicanas, que criam obstruções ao escoamento rotacional do fluido dificultando a formação de um vórtice central sem a necessidade de deslocamento do eixo do agitador e impelidores.

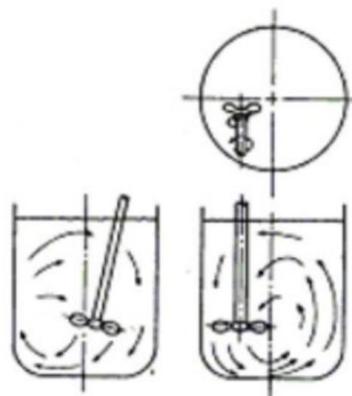


Figura 5. Tanque agitado com eixo central deslocado.

FONTE: IFBA

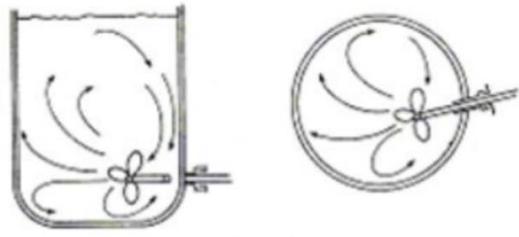


Figura 6. Tanque agitado com agitador na horizontal.

FONTE: IFBA

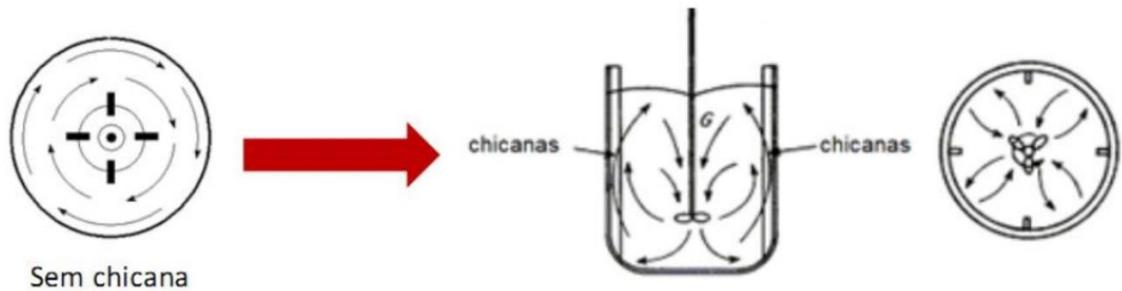


Figura 7. Representação do efeito da utilização de chicanas em um tanque agitado.

FONTE: IFBA

Quando refere-se a um misturador, não se distancia muito do conceito de um agitador. A diferença está nas substâncias envolvidas, onde o agitador trabalha com uma fase já misturada ou homogênea inicialmente, e o misturador trabalha com substâncias diferentes inicialmente separadas.

Misturadores de líquidos geralmente são utilizados tanques como equipamento recipiente assim como nos agitadores. A diferença está que há a entrada de dois ou mais substâncias, que pode ocorrer de forma contínua ou em batelada.

A seleção do tipo de misturador nas indústrias dependem intrinsecamente do tipo e qualidade do material a ser misturado e da velocidade de operação necessária para atingir as especificações da mistura final desejada, visando sempre o menor consumo de energia possível.

Os agitadores de líquidos, como citado anteriormente, utiliza-se um tanque como recipiente e assim com um agitador para a mesma fase, há um acoplamento de um eixo vertical com impelidores. Esses possuem características geométricas que auxiliam o desenvolvimento de fluxo turbulento no tanque que é o principal fenômeno responsável pelo processo eficaz de mistura, principalmente quando se refere a líquidos miscíveis.

No mercado há uma grande variedade de impelidores desenvolvidos ao longo dos anos em estudos de otimização visando uma mistura mais eficiente com o menor

consumo de energia possível. E dentre os principais tipos, estão os impelidores do tipo turbina aberta, pás radiais, ancora, ribbon, pitch blade, hélice naval e disco de cowles, representados na Figura 8.

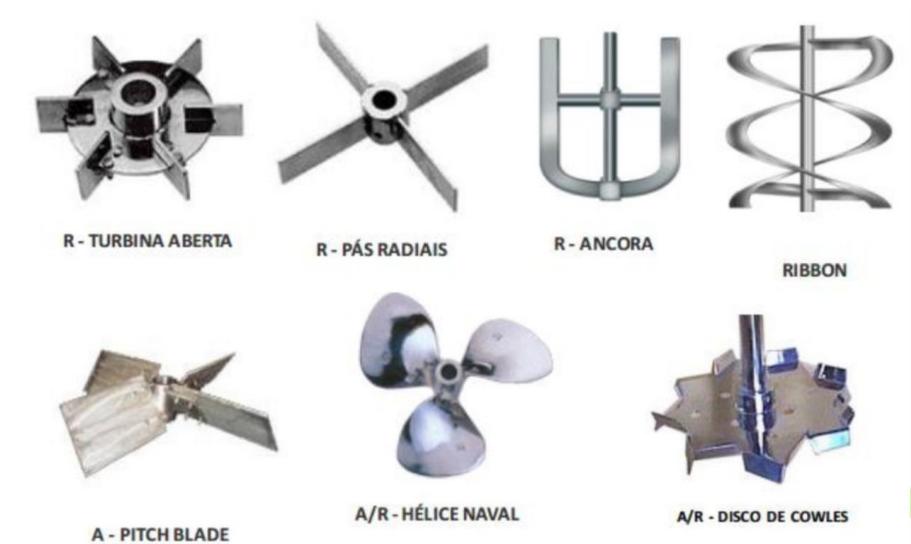


Figura 8. Tipos de impelidores

FONTE: QUALITAT INDUSTRIAL

Os impelidores do tipo pás radiais são laminas chatas e largas que medem cerca de 50 a 75% do diâmetro do tanque e giram em torno de 20 a 150 rpm, como a velocidade de rotação é relativamente baixa não há necessidade de uso de chicanas para amenização de vórtices centrais. É recomendado para uso em misturadores de líquidos de baixa e média viscosidade (OLUFEMI, 2016).

Impelidores turbinas apresentam uma diversidade de lâminas, podendo ser retas, curvadas, inclinadas e ainda verticais, como mostrado na Figura 8. Se caracterizam por atender à um amplo intervalo de valor de viscosidade, e proporcionam altas forças de cisalhamento desenvolvendo escoamento completamente turbulento e também utilizado em misturadores de líquidos de baixa e média viscosidade.

O disco de cowles, tem uma velocidade de rotação na faixa de 1750 a 3500 rpm, muito utilizado em mistura de líquidos de baixa viscosidade na dispersão e dissolução de sólidos (OLUFEMI, 2016).

O agitador de Hélice opera a velocidade de rotação de 400 a 1500 rpm, utilizados na indústria para mistura de líquidos miscíveis na diluição de soluções

concentradas e de sólidos, e para aumentar a taxa de transferência de calor. Possui de 1 a 5 laminas em sua composição.

Na Tabela 1, vê-se um resumo das principais vantagens e desvantagens dos impelidores já citados.

TABELA 1. Vantagens e Desvantagens dos principais impelidores.

<b>Tipo de Misturador</b>	<b>Vantagens</b>	<b>Limitações</b>
Agitador de pás	Ocasiona um bom fluxo radial, barato e de fácil construção	Fluxo perpendicular fraco, alto risco de formação de vórtice
Agitador de múltiplas pás	Fluxo em três direções	Mais caro e requer maior gasto energético
Agitador de Hélices	Fluxo em três direções	Mais caro se comparado ao agitador de pás
Agitador tipo turbina	Excelente mistura	É mais caro e possui riscos de entupimento

As dimensões típicas de um misturador são mostradas na Figura 9, possui cerca de 4 chicanas igualmente espaçadas, e respeitando as seguintes relações:

$$\frac{w}{D_a} = \frac{1}{8} \quad (20)$$

Distância entre as chicanas e as paredes: 0,10 a 0,15J.

$$\frac{J}{D_t} = \frac{1}{10} \text{ a } \frac{1}{12} \quad (21)$$

$$\frac{D_a}{D_r} = 0.3 \text{ a } 0.5 \quad (22)$$

$$\frac{H}{D_t} = 1 \quad (23)$$

$$\frac{C}{D_t} = \frac{1}{3} \quad (24)$$

$$\frac{W}{D_a} = \frac{1}{5} \quad (25)$$

$$\frac{D_d}{D_a} = \frac{2}{3} \quad (26)$$

$$\frac{L}{D_a} = \frac{1}{4} \quad (27)$$

$$\frac{J}{D_t} = \frac{1}{12} \quad (28)$$

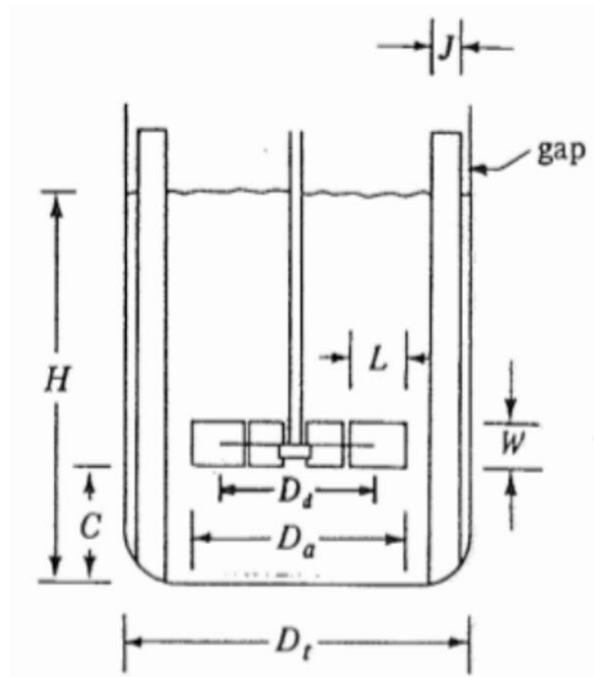


Figura 9. Representação das principais variáveis de projeto de um tanque agitado.

FONTE: IFBA

Para exercer ação sobre uma mistura o agitador ou misturador precisa de uma determinada quantidade de energia. É possível calcular a potência necessária consumida em um agitador utilizando a Equação 29 e 30.

$$N'_{Re} = \frac{D_a^2 N \rho}{\mu} \quad (29)$$

Onde,

N're: Numero de Reynolds do agitador

Da: diâmetro do agitador

N: Velocidade de rotação em rev/s

P: massa específica do fluido em kg/m<sup>3</sup>

u: viscosidade do fluido em kg/m.s

$$N_p = \frac{P}{\rho N^3 D_a^5} \quad (30)$$

Onde,

$N_p$ : Número de potência

$P$ : Potência em J/s ou W

Com esses dois números adimensionais,  $N_{re}$  e  $N_p$ , utilizamos o diagrama (Figura 9) para encontrar por exemplo, qual o melhor tipo de agitador, ou ainda, com um tipo de agitador encontrar com a potência necessária ou qualquer uma das variáveis relacionadas anteriormente, como Diâmetro do agitador.

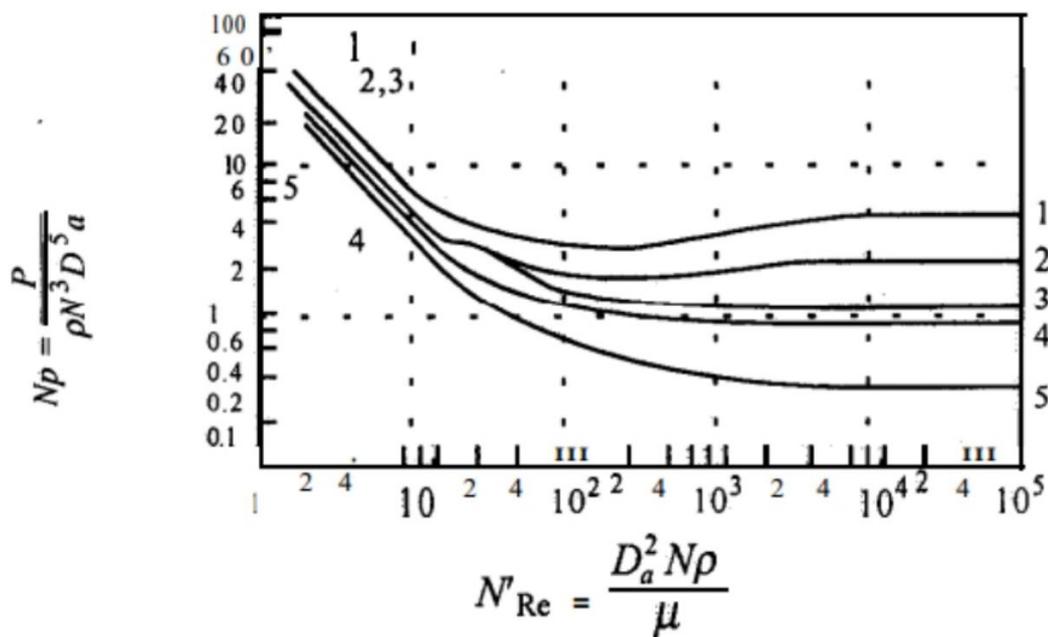


Figura 10. Gráfico utilizado no projeto de tanques agitados e misturadores

FONTES: IFBA

As curvas da Figura 10 representam o tipo de agitador e suas características. São elas:

- **Curva 1:** Turbina de 6 lâminas planas;  $Da/W = 5$ ; com 4 defletores cada um com  $Dt/J = 12$ ;
- **Curva 2:** Turbina aberta com 6 lamina planas;  $Da/W = 8$ ; com 4 defletores cada um com  $Dt/J = 12$ ;

- **Curva 3:** Turbina aberta com 6 laminas a 45°;  $Da/W = 8$ ; COM 4 defletores cada um com  $Dt/J = 12$ ;
- **Curva 4:** Propulsor; inclinação  $2Da$  com 4 defletores com  $Dt/J = 10$ ;
- **Curva 5:** Propulsor; Inclinação  $Da$ , com 4 defletores com  $Dt/J = 10$ ;

O cálculo do tempo de mistura necessária para líquidos miscíveis é possível obtê-lo pela Equação 31.

$$f_t = t_T \frac{(ND_a^2)^{2/3} g^{1/6} D_a^{1/2}}{H^{1/2} D_t^{3/2}} \quad (31)$$

Onde,

$t_T$  é o tempo de mistura em segundos.

Para  $N_{re} > 1000$ ,  $f_t$  é aproximadamente constante, então  $t_T N^{2/3}$  é constante.

Para este trabalho, escolheu-se para o estudo de otimização os impelidores do tipo **pás radiais e pitch blade** pela facilidade de construção e como finalidade de utilizar um misturador em reator do tipo CSTR que utiliza fluidos de baixa e média viscosidades. O estudo visou encontrar um impelidor misto entre esses dois tipos de geometria.

### 2.3 Fluidodinâmica Computacional (CFD)

Os aspectos físicos de um escoamento, e as suas propriedades, são regidas por 3 (três) princípios: conservação de massa, conservação de movimento e a conservação de energia (WENDT, 2009). Segundo o autor, esses princípios são expressos em expressões matemáticas que são basicamente equações diferenciais parciais. A fluidodinâmica computacional (CFD – *Computational Fluid Dynamics*) é uma ferramenta que resolve numericamente essas equações, utilizando avanço de tempo e espaço resultando de uma descrição qualitativa e quantitativa do escoamento fluídico de interesse.

O estudo de CFD vem sendo aplicado em diversas áreas da engenharia, como exemplo, o estudo de projeto de tubos submarinos e *risers* para prever os esforços

hidrodinâmicos devido as condições externas, correnteza marítima e ondas do mar (SAITO, 2014).

Em resumo, CFD é uma análise de sistemas de equações diferenciais parciais que envolvem problemas de escoamentos de fluidos, transferência de calor e outros processos com a finalidade de obter soluções para a determinação de pressões, velocidades e temperatura com o auxílio de métodos computacionais (JOAQUIM Jr.,2008).

Na literatura, Maitelli (2010) relaciona os 3 (três) principais métodos numéricos que são utilizados pela técnica CFD, são eles:

- Método das Diferenças Finitas é o método mais antigo utilizado;
- Método de Elementos Finitos: permite o tratamento de geometrias complexas, utilizado na resolução de problemas de elasticidade e deformação de estruturas mecânicas;
- Método dos Volumes Finitos: trata-se de soluções aproximadas por meio dos balanços de conservação em um volume elementar, que ao contrário dos demais métodos que trabalham com pontos elementares.

Independentemente do método utilizado, o estudo de CFD se divide em três principais etapas: pré-processamento, resolução e o pós-processamento.

O pré-processamento é a definição das entradas da solução: geometria da região de interesse (domínio computacional) que representa os limites físicos da análise; Malha computacional, divisão da região de análise em subdomínios (volumes elementares); definição dos fenômenos a serem considerados; as propriedades dos fluidos e materiais inclusos na análise; e as condições de contorno apropriadas. Também nesta etapa são definidos os parâmetros de simulação: precisão, tempo de execução máximo, número de interações e entre outros (MAITELLI, 2010).

A solução, também chamada de *solver*, depende das escolhas do usuário durante a etapa anterior. Em softwares comerciais essa etapa é automatizada e extremamente interativa. Basicamente, a precisão do solver depende intrinsecamente da malha de volumes elementares utilizado, quando maior o número de elementos dessa malha, maior a precisão; porém quanto maior o número de elementos maior será o esforço computacional aumentando consideravelmente o tempo de processamento (MAITELLI, 2010). Estudos precisam ser realizados para encontrar um equilíbrio entre a precisão requeridos dos resultados com a malha a ser considerada e o tempo disponível de processamento.

Segundo Maitelli (2010) a solução é a etapa onde ocorre a integração da resolução obtida pelo solver em cada elemento da malha. Essas integrações são convertidas em equações algébricas e resolvidas em modo iterativo.

O pós-processamento é a etapa que os resultados são apresentados ao usuário através de uma interface gráfica e caracterizando todo o domínio de análise baseado nas respostas numéricas. Essa apresentação é realizada por meio do desenho vetorial de linhas de corrente, linhas de contorno, vetores e a plotagem de gráficos referente as variáveis de interesse (MAITELLI, 2010).

Para análises fluidodinâmicas, em especial neste trabalho, o método de resolução aplicado pelo *software Ansys* (CFX) é o método dos volumes finitos.

O método de volumes finitos é descrito por Patankar (1980), elaborado para a resolução numérica de uma equação diferencial geral de transporte de uma propriedade  $\phi$  que segue a forma apresentada na Equação (32).

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi v) - \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) - S = 0 \quad (32)$$

Onde  $\phi$  é a grandeza conservada,  $\Gamma$  é o coeficiente de difusidade desta grandeza e  $S$  é o termo de geração.

No caso simplificado em que  $\phi$  é igual a 1 e  $S$  igual a zero, tem-se a equação da conservação de massa (equação da continuidade) mostrada na Equação (33) em coordenadas cartesianas.

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (33)$$

Para as equações da conservação do movimento,  $\phi$  é igual a velocidade e o  $S$  representa o gradiente de pressão e as forças de corpo. Maliska (2004) pela Tabela 2 fornece os valores das três componentes de velocidades em coordenadas cartesianas e seus valores de  $S$ , onde  $\Gamma$  reinterpreta a viscosidade dinâmica.

TABELA 2. Reação das equações da conservação do movimento tridimensional

Equação de conservação de movimento em	Propriedade $\phi$	Difusidade $\Gamma$	Termo fonte S
X	U	$\mu$	$B_x + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{v} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial P}{\partial x}$
Y	V	$\mu$	$B_y + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{v} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\partial P}{\partial y}$
Z	W	$\mu$	$B_z + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{v} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \frac{\partial P}{\partial z}$

.FONTE:

Onde  $\rho$  é a densidade do fluido,  $t$  é o tempo,  $(x,y,z)$  são as coordenadas cartesianas e  $(u, v, w)$  são os componentes do vetor velocidade correspondente as suas coordenadas direcionais,  $x, y$  e  $z$ , respectivamente.

As condições de contorno no estudo em CFD são de grande importância para que a solução numérica se aproxima da solução real física. Essas condições implicam nas interações tanto com eventos internos de escoamento, quanto suas interações com o meio externo e suas vizinhanças. Na prática CFD, essas condições são determinadas pela argumentação física ou por simulações anteriores (JOAQUIM Jr.,2008).

Os escoamentos podem ser classificados em relação ao tipo de movimento e velocidade de suas partículas. Quando esse movimento é descrito por partículas que se movimentam de forma ordenada em camadas de trajetórias distintas, é dito que se trata de um escoamento laminar. O escoamento turbulento, é aquele onde as partículas se misturam sem dificuldade e rapidamente de forma aleatória (FOX; McDONALD; PRICHARD, 2006). O tipo de escoamento está relacionado pelo número adimensional Reynolds, que representa a relação entre as forças inerciais e as forças viscosas em determinado volume de controle (Equação 34). Para valores baixos em tubulações (menores que 2000) o escoamento é classificado como laminar; e para números elevados (maiores que 4000) o escoamento passa a ser turbulento.

$$Re = \frac{\rho VL}{\mu} \quad (34)$$

Escoamentos laminares são perfeitamente descritos pela equação da conservação de massa, e pelas equações de quantidade de movimento. A Figura 11 ilustra o comportamento da velocidade unidimensional em um ponto do sistema.



Figura 11. Comportamento da velocidade unidimensional em um dado ponto do sistema.

Escoamentos turbulentos, grande parte dos problemas de engenharia, devido a sua natureza aleatória caracteriza um estado transiente (variante com o tempo), o que impossibilita simulações baseadas nas simples equações de conservação de massa e de movimento. Para esse tipo de análise, os vetores de velocidade tridimensional ( $u$ ,  $v$  e  $w$ ) são decomposta em valores estacionários médios ( $\bar{u}$ ,  $\bar{v}$ ,  $\bar{w}$ ), denominados de médias temporais, de modo que:

$$u = u' + \bar{u} \quad (35)$$

$$v = v' + \bar{v} \quad (36)$$

$$w = w' + \bar{w} \quad (37)$$

Onde as flutuações  $u'$ ,  $v'$  e  $w'$  são relacionadas com o tempo ( $t$ ). Para isto se tornar possível, o escoamento é caracterizado por meio de suas propriedades médias. Assim, em fluxo turbulento, a equação da continuidade para um fluido incompressível será (VERSTEEG; MALALASEKER, 1995):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{V}) = 0 \quad (38)$$

Onde,  $\bar{V}$  representa o vetor resultante das velocidades médias temporais.

Bird, Stewart e Lighrfoot (2004) descrevem pela Equação (39) o transporte de movimento associados as flutuações turbulentas considerando um fluido incompressível e newtoniano.

$$\frac{\partial(\rho \bar{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{V} \bar{V}) = -\nabla \bar{p} - [\nabla \cdot (\bar{\tau}^V + \bar{\tau}^t)] + S_M \quad (39)$$

O tensor  $\bar{\tau}^V$  representa o fluxo viscoso do momento e é descrito pela Equação (40).

$$\bar{\tau}_{ij}^V = -\mu \left( \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) \quad (40)$$

Onde i e j são índices que representam os vetores unitários das direções x,y e z.

Um modelo de turbulência é um procedimento computacional que objetiva aproximar as equações de escoamento. Segundo Vesteeg e Malalasekera (1995), os modelos de turbulência a serem utilizados precisam ter aplicabilidade, precisão, fácil aplicação e econômicos aos procedimentos de simulação.

Os modelos de turbulências são divididos em duas categorias: os clássicos e as equações de espaço filtrado (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995). Dos modelos clássicos, existem dois que serviram de base para a resolução de problemas fluidodinâmicos em CFD: o modelo de comprimento de *Prandtl* e o  $k - \varepsilon$ .

Os modelos  $k - \varepsilon$  são conhecidos pela confiabilidade as aplicações que envolvem domínios fechados, por envolverem soluções da energia cinética turbulenta (k) e a taxa de dissipação ( $\varepsilon$ ). Este modelo prediz que há uma analogia entre a ação das tensões viscosas e as tensões de Reynolds, e a existência de um termo denominado viscosidade turbulenta ( $\mu_t$ ) calculada por uma função com o parâmetro k e  $\varepsilon$ , expressa pela Equação (41).

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (41)$$

Para calcular o parâmetro  $k$  (cinética turbulenta) e o  $\varepsilon$  (taxa de dissipação) usa-se as Equações (42) e (43). Ao lado esquerdo dessas equações estão a variação temporal e o transporte convectivo. Ao lado direito, os termos difusivos.

$$\left[ \frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{V} k) \right] = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \nabla k \right) \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (42)$$

$$\left[ \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{V} \varepsilon) \right] = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (43)$$

$P_k$  representa a taxa de geração de energia cinética e é calculada pela Equação (44).

$$P_k = \mu_t \nabla \bar{V} \cdot (\nabla \bar{V} + \nabla \bar{V}^T) - \frac{2}{3} \nabla \bar{V} (3\mu_t \nabla \cdot \bar{V} + \rho k) \quad (44)$$

As constantes que são mostradas nas Equações (42), (43) e (44) são características do modelo e são mostradas na Tabela 3 (MAITELLI, 2010).

TABELA 3. Valores das constantes utilizadas nas equações de cálculo dos parâmetros  $k$  (energia cinética) e  $\varepsilon$  (taxa de dissipação).

Constante	Valor
$C_\mu$	0,09
$C_{\varepsilon 1}$	1,44
$C_{\varepsilon 2}$	1,92
$\sigma_k$	1,0
$\sigma_\varepsilon$	1,3

FONTE: Maliska (2004)

Para este trabalho foi escolhido o modelo de turbulência  $k - \varepsilon$  pelas vantagens que ele apresenta ao desenvolvimento das simulações.

Outro aspecto de grande importância e discussão na literatura é a discretização dos modelos, isto é, a geração das malhas computacionais. Uma malha computacional é definida por Maitelli (2010) como um conjunto finito de elementos, formados por nós, pelos quais as informações são transmitidas. O autor acrescenta que, quanto maior o número desses pontos maior será a aproximação com a realidade. Neste aspecto, volumes de controle consiste em nós, arestas e planos que definem a sua forma e fronteiras onde as variáveis da solução são armazenadas.

O método de volumes finitos recorre a integração da Equação (34). Esta é a principal característica do método e a diferenciação das demais técnicas de CFD. A integração resultará, tridimensionalmente, na Equação (45). Ao lado esquerdo, os termos convectivos, e a direita, os termos difusivos.

$$\int_{VC} \frac{\partial \rho k}{\partial t} dV + \int_{VC} \nabla \cdot (\rho \phi V) dV = \int_{VC} \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV + \int_{VC} S_{\phi} dV \quad (45)$$

Após realizada a integração em todos os elementos do volume de controle, os resultados são dispostos em um sistema acoplado de equações algébricas linearizadas. Esse sistema interliga todas os pontos da malha computacional e é responsável pela passagem de informação entre si (MALISKA, 2004). Este sistema segue a Equação (46).

$$[A]\{\phi\} = \{b\} \quad (46)$$

Onde  $\{\phi\}$  é o vetor da variável a ser calculada,  $\{b\}$  é o vetor dos termos fontes associadas e, os elementos da matriz  $[A]$  serão os coeficientes da equação, função da geometria, da convecção e de outros processos como difusão, condução térmica e turbulência (MAITELLI, 2010). Essa equação pode ser resolvida iterativamente, iniciando com uma solução aproximada ou previamente imposta.

As malhas computacionais possuem duas principais classes: estruturadas (hexaédricas) e as não estruturadas (tetraédricas).

As malhas estruturadas apresentam uma distribuição espacial regular de seus nós. Normalmente utilizados em geometrias simples. Nesse tipo de malha, os elementos possuem o mesmo número de vizinhos. Segundo Maliska (2004), este tipo

de discretização se torna muito vantajosa devido a regra de ordenação dos elementos simplifica as rotinas computacionais.

As malhas não estruturadas não exibem uma regularidade na distribuição de seus nós. Com elas é possível tornar mais fácil a discretização de geometrias mais complexas. Segundo Maliska (2004) esse tipo de malha é mais versátil, pois cria-se facilmente adaptações de contorno e curvaturas, refino em regiões específicas do domínio. Porém, os algoritmos de resolução são mais complexos, o que requer um tempo maior de solução.

É possível comparar as duas classes de discretização na Figuras 12a e 12b. Nelas pode-se observar claramente a diferença de sua estruturação.

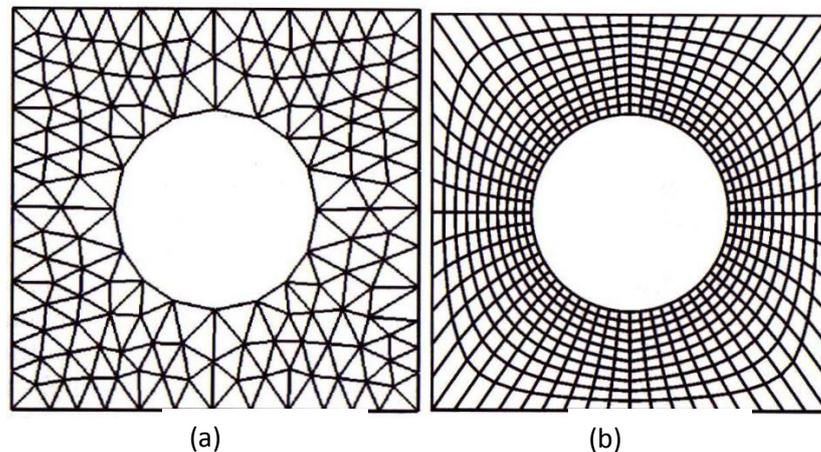


Figura 12. Malhas computacionais. (a) Malha não-estruturada, (b) Malha estruturada  
FONTE: Maliska (2004)

Como descrito anteriormente, a aplicação de CFD é de uma grande variedade em muitos problemas de engenharia. A aplicação dessa ferramenta neste trabalho se deu em 2 (dois) momentos no desenvolvimento proposto:

- i. Simulação do processo de mistura do misturador em si, analisando a capacidade de mistura de um fluido com temperaturas distintas, variando apenas a geometria dos impelidores.
- ii. Na escolha dos 3 (três) modelos de impelidores que apresentaram maior desempenho na etapa anterior para simulação da reação química em termo de conversão, obteve-se assim um modelo único ideal objetivado por esse estudo.

### 3. METODOLOGIA

Este trabalho consiste em um estudo de caráter exploratório da otimização do processo de mistura de um reator de escoamento contínuo de tanque agitado, CSTR por meio da otimização paramétrica da geometria dos impelidores do agitador interno. Para tal finalidade, seguiu-se uma metodologia de simples execução avaliando os principais parâmetros operacionais do reator e dos fenômenos que ali ocorrem. Tal metodologia é apresentada a seguir.

#### 3.1 PROPOSTA DE REATOR CSTR

O ponto chave do mecanismo de mistura, além do agitador interno, é o tanque reator que deve proporcionar volume e espaço suficiente para que ocorra a reação com conversão máxima possível. O reator CSTR que foi proposto é mostrado na Figura 13, 14 e 15 desenhado computacionalmente em um software CAD chamado *Design Modeler*®.

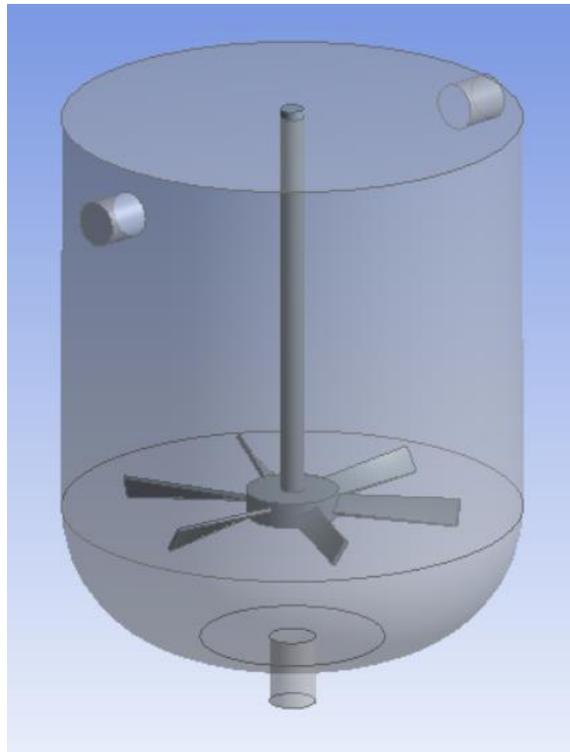


Figura 13. Reator proposto com visão isométrica.

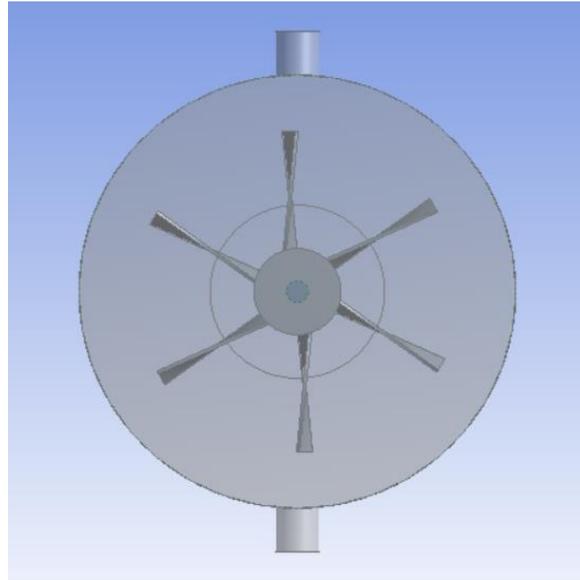


Figura 14. Reator proposto com visão superior

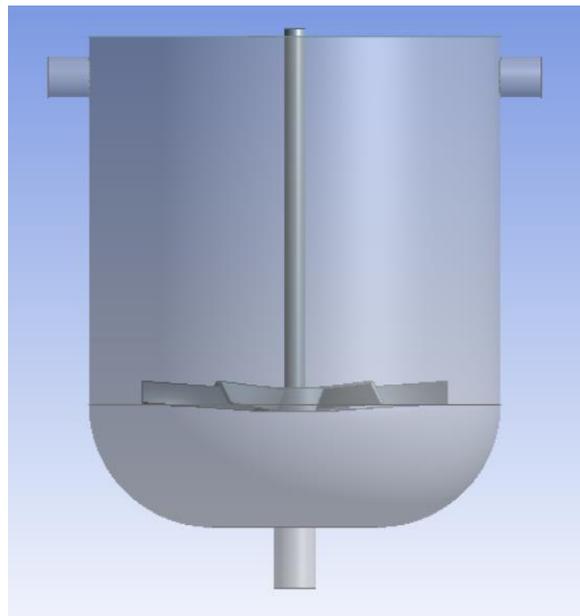


Figura 15. Reator proposto com visão lateral

O Reator proposto possui um diâmetro de 1m, altura de 1,2m, a base é arredondada com um raio 0,3m para evitar regiões de estagnação posteriormente. Possui também duas entradas superiores localizadas uma oposta a outra possuindo diâmetro de 0,1m. Ao centro é localizado o rotor juntamente com o conjunto de impelidores, estes que são o foco do estudo de otimização.

## 3.2 ESTUDO DE OTIMIZAÇÃO PARAMÉTRICA

Uma vez com o reator tanque proposto, realizou-se então o estudo de otimização dos impelidores de mistura com o objetivo de encontrar uma geometria que seja a mais eficiente em termos de agitação e mistura.

### 3.2.1 Parâmetros de otimização dos impelidores

Partindo de um modelo inicial de impelidor (Figura 16) definiu-se dois principais parâmetros de otimização: Ângulo de inclinação ( $A_i$ ) e Ângulo de torção ( $A_t$ ) (Figura 17 e 18).

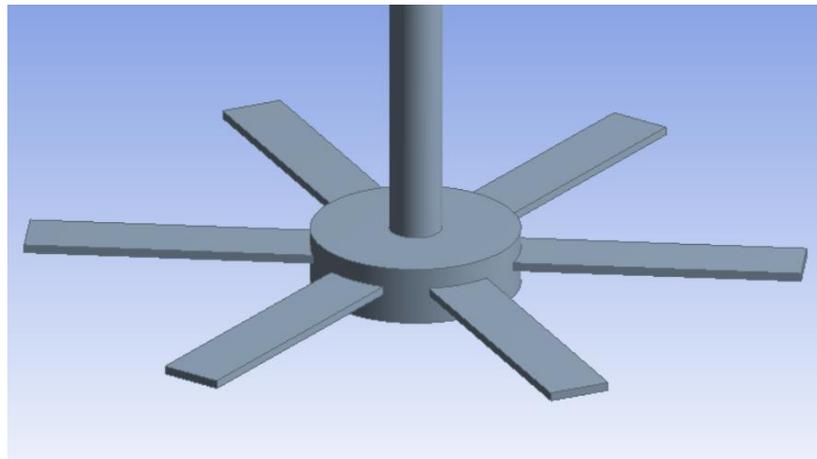


Figura 16. Geometria do impelidor inicial do estudo em visão isométrica.

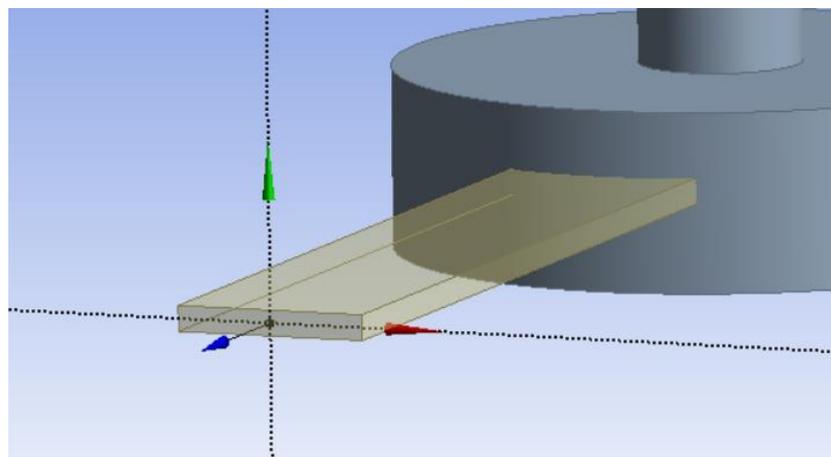


Figura 17. Eixo da geometria do impelidor que representa o ângulo de torção em cada lâmina.

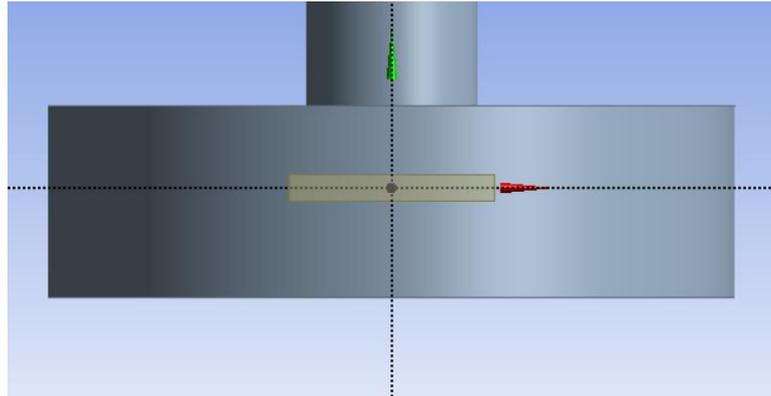


Figura 18. Eixo da geometria do impelidor que representa o ângulo de inclinação em cada lâmina em relação a sua base.

Ambos os ângulos, tanto de inclinação quanto o de torção foram variados em intervalos de  $20^\circ$ . Assim obtém-se um número de 25 geometrias distintas. As combinações desses valores são mostradas na Tabela 4.

TABELA 4. Valores de ângulo de inclinação e torção utilizados no estudo para a geração das 25 geometrias.

# Geometria	Ângulo de Inclinação $A_i$ ( $^\circ$ )	Ângulo de torção $A_t$ ( $^\circ$ )
1	0	0
2	0	20
3	0	40
4	0	60
5	0	80
6	20	0
7	20	20
8	20	40
9	20	60
10	20	80
11	40	0
12	40	20
13	40	40
14	40	60
15	40	80
16	60	0

<b>17</b>	60	20
<b>18</b>	60	40
<b>19</b>	60	60
<b>20</b>	60	80
<b>21</b>	80	0
<b>22</b>	80	20
<b>23</b>	80	40
<b>24</b>	80	60
<b>25</b>	80	80

As geometrias representadas na Tabela 3 podem ser visualizadas espacialmente na Figura 19 a seguir.

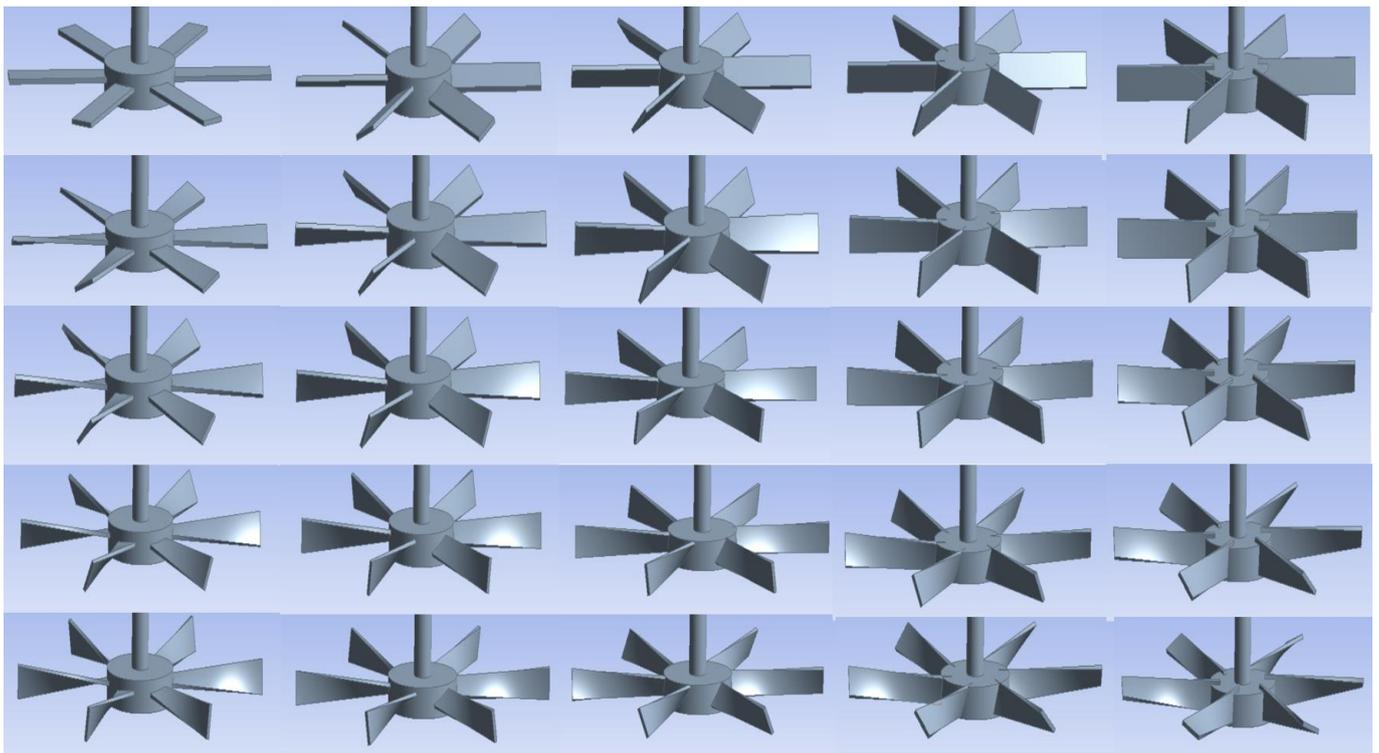


Figura 19. Geometrias geradas analisando as variações de ângulos de inclinação (horizontal) e ângulos de torção (vertical)

### 3.2.2 Parâmetro de decisão do melhor misturador

Para seleccionar as três geometrias que propiciasse a melhor mistura, realizou-se simulações utilizando técnicas de fluidodinâmica computacional misturando um

mesmo fluido com temperaturas diferentes. Ao final, quem apresentasse a temperatura mais próxima da temperatura de mistura perfeita seriam os melhores misturadores.

Por meio do balanço de massa e energia chegou-se a equação 47.

$$\dot{m}_{saida}T_{saida} = +\dot{m}_{entrada1}T_1 + \dot{m}_{entrada2}T_2 \quad (47)$$

Nas simulações foi utilizado água como fluido, com vazão mássica de 1kh/s em cada entrada e saída com 2kg/s. Assim a Equação 48 se simplifica na seguinte equação.

$$T_{saida} = \frac{T_1 + T_2}{2} \quad (48)$$

Para a entrada 1, a temperatura utilizada foi 300K e a entrada 2 foi de 250K. Assim pela equação 48, a temperatura ideal de mistura é de 275K. Os três misturadores que se aproximarem desta temperatura, são os que apresentaram melhor capacidade de mistura se aproximando do modelo ideal.

### 3.2.3 Análise dos misturadores aplicado a uma reação química

A geometria do reator segue o mesmo apresentado para as análises dos misturadores: duas entradas contendo dois reagentes e uma saída, sob agitação das 3 (três) melhores geometrias de impelidores provindo do estudo anterior.

A reação foco do estudo é mostrada na Equação 49. É uma reação de ácido-base que tem como produto um sal em diluição. Usando como reagente ácido o ácido sulfúrico e a base hidróxido de sódio, e como produto sulfeto de sódio em solução aquosa.



Esta reação se caracteriza por ser exotérmica, ou seja, há geração de calor durante o processo reacional. O calor de reação, segundo Atkins (2011) é de 460Kj/kg do ácido em diluição.

Assumiu-se para este estudo, escoamento completamente turbulento para obter um significativo efeito sobre a taxa de reação.

Simplificando a equação 49 em termos de variáveis, tem-se a Equação 50.



Em resumo, reagente A e B são injetados no reator por duas entradas. Cada uma com um fluxo mássico de 4kg/s separadamente na entrada 1 e na entrada 2 do reator tanque. Ao longo do reator A e B são convertidos em um produto C, que juntamente sai do reator com A e B que não reagiram.

Também através de um estudo de CFD com modelo reacional, obteve-se para os três modelos a conversão final da reação e assim a melhor geometria de impelidor para estas condições.

As propriedades do ácido sulfúrico, hidróxido de sódio e do sulfeto de sódio são mostradas nas Tabelas 5, 6 e 7 respectivamente.

TABELA 5. Propriedades Físicas do ácido sulfúrico.

<b>Propriedade</b>	<b>Valor</b>
Massa molar	19,517 kg kmol <sup>-1</sup>
Densidade	1078 kg m <sup>-3</sup>
Calor específico	4190 J kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>
Viscosidade Dinâmica	0,001 kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>
Condutividade térmica	0,6 W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>

TABELA 6. Propriedades Físicas do hidróxido de sódio.

<b>Propriedade</b>	<b>Valor</b>
Massa molar	18,292 kg kmol <sup>-1</sup>
Densidade	1029 kg m <sup>-3</sup>
Calor específico	4190 J kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>
Viscosidade Dinâmica	0,001 kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>
Condutividade térmica	0,6 W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>

TABELA 7. Propriedade físicas do sulfeto de sódio.

<b>Propriedade</b>	<b>Valor</b>
Massa molar	18,600 kg kmol <sup>-1</sup>
Densidade	1031 kg m <sup>-3</sup>
Calor específico	4190 J kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>
Viscosidade Dinâmica	0,001 kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>
Condutividade térmica	0,6 W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>

### 3.3 ESTUDO DE OTIMIZAÇÃO VIA CFD

O estudo de fluidodinâmica computacional foi inteiramente desenvolvido no software Ansys® com a sua ferramenta CFX. As geometrias do modelo serão criadas e projetas pelo CAD (Computational Aided Design) Design Modeler. A malha computacional, bem como suas análises em qualidade, foram criadas pelo gerador de malha no próprio CFX, técnicas de refino e tamanho de elementos foram aplicados.

Em tempo de solução, foi realizado alguns testes de convergência para garantir a qualidade e confiabilidade dos resultados, são eles:

- **Teste de convergência numérico:** Foi imposto uma tolerância de erro residual numérico das equações resolvidas pelo simulador de  $10^{-4}$ .
- **Teste de conservação de massa:** deve-se criar uma expressão em tempo de execução que plote em um gráfico a diferença de fluxo mássico das entradas e saídas. A simulação é considerada convergida quando esse valor atinge zero e assim permanece.
- **Teste de convergência da física:** Foi inserido em algum ponto do domínio do fluido um ponto de monitoramento de alguma variável de interesse. Em tempo de solução, esse ponto será plotado em relação ao número de interações. O modelo foi considerado convergido quando esse valor se manter constante.
- **Teste de independência de malha:** É extremamente recomendável que, os resultados não tenham dependência dos tamanhos de seus elementos, obtendo maio similaridade com a realidade. São realizados diversas simulações, e cada uma é realizado um refinamento da malha diminuindo os tamanhos dos elementos. Ao final de cada simulação é observado algum resultado em alguma área do domínio. É dito que o modelo é independente da

malha quando esse resultado não varia significativamente com o número de elementos. É possível observar essa independência de malha por meio de um gráfico relacionando o resultado observado e o número de elementos.

Ainda com o *Ansys*, serão realizadas as técnicas de pós processamento, se utilizando do modelo tridimensional para gerar as linhas de corrente, as superfícies de contorno em vários planos aplicados na geometria e a plotagem de vetores. Todos os casos as variáveis de interesse serão a velocidade, a pressão, e principalmente temperatura. É possível também analisar as regiões de turbulência do escoamento.

O modelo de turbulência escolhido para as análises foi o modelo  $k-\epsilon$ , que é o modelo mais indicado para simulações com escoamento turbulento que apresenta gradientes de pressão e temperatura (MALISKA, 2004)

## 4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 4.1 ESTUDO CFD

Após terminado o processo de parametrização das geometrias dos impelidores foram geradas as geometrias aqui já mostradas (Figura 49). Seguiu-se então com os estudos em CFD.

Como parte da garantia da confiabilidade dos resultados, um estudo de convergência de malha computacional se fez necessária. Este estudo consistiu em iniciar as análises com uma malha bem simplificada com uma pobre qualidade, realizando a simulação de interesse e em seguida realizando diversos refinamentos e melhorias até que, os resultados provindos da simulação CFD não variem com o número total de volumes de controle.

Partiu-se então da malha mostrada na Figura 20. Nota-se a pobre qualidade dos elementos, bem distorcidos e irregulares. Tais características dificultam a convergência numérica das equações de transporte resolvidas pelo software, em outras palavras, colocam a prova os resultados finais.

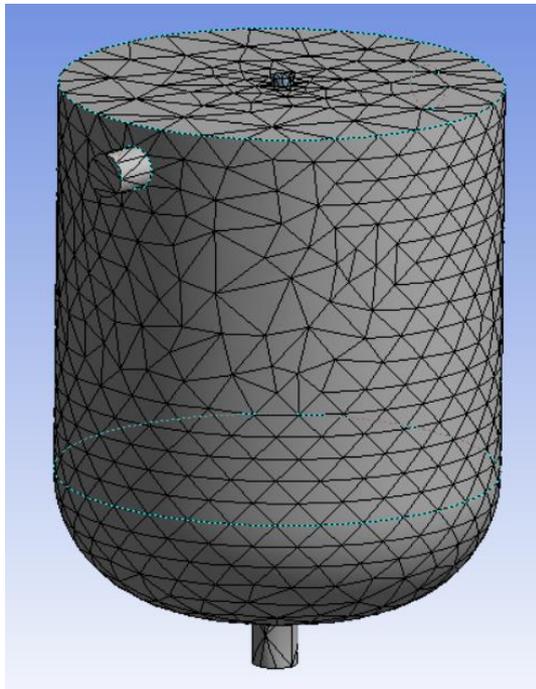


Figura 20. Malha computacional inicial

Realizando refinamentos estratégicos nas paredes e imputando tamanhos de elementos menores ao processador de malha, obtém-se uma malha com superior qualidade em elementos, Figura 21.

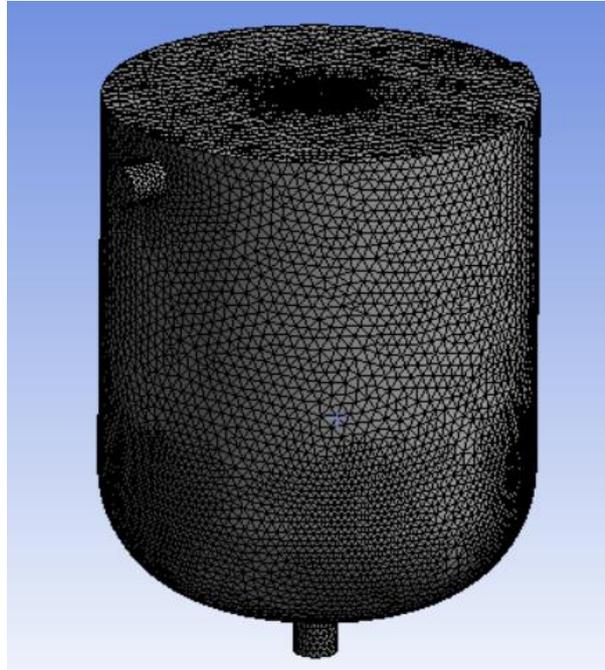


Figura 21. Malha computacional com refinamentos

Optou-se por permanecer com as malhas tetraédricas, apesar das desvantagens em relação as tetraédricas, devido a facilidade de geração, e, uma vez com o estudo de independência de malha junto com o acompanhamento da convergência numérica e física garantem resultados satisfatórios.

Na Figura 22 é mostrado o estudo de independência de malha. É possível concluir que para malhas acima de 1.500.000 os resultados (temperatura de saída) deixa de variar e torna-se constante, garantindo assim que os resultados são independentes do tamanho do volume de controle, evitando assim o uso de malhas excessivamente refinadas que requerem esforço computacional desnecessário e otimiza o tempo de processamento das simulações.

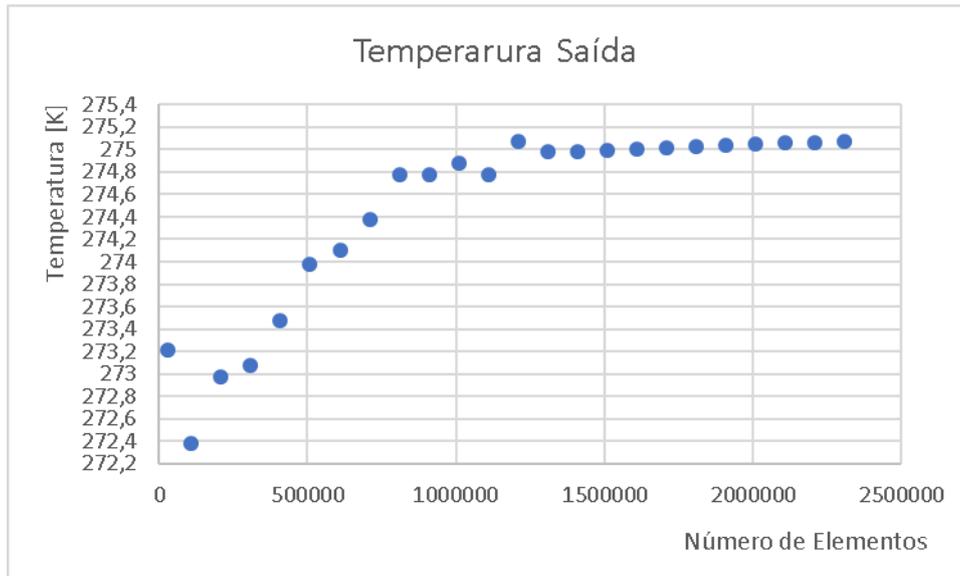


Figura 22. Gráfico das simulações dos testes de independência de malha.

#### 4.2 SIMULAÇÕES DO MISTURADOR

Prosseguiu-se então com a metodologia. Com as geometrias CAD prontas e as malhas computacionais devidamente geradas, passou-se a execução das simulações.

Para cada geometria gerada foi realizada uma simulação com uma velocidade de rotação 20 rpm, e ao final obtido a temperatura de saída da mistura. Os resultados são mostrados na Tabela 8 com as configurações e os resultados obtidos pelo CFX na saída do misturador.

TABELA 8. Resultado final das simulações CFD de todas as 25 geometrias geradas.

# Geometria	Ângulo de Inclinação $A_i$ (°)	Ângulo de torção $A_t$ (°)	Temperatura Saída (K)
1	0	0	275,070
2	0	20	275,058
3	0	40	275,037
4	0	60	275,066
5	0	80	275,052
6	20	0	275,078
7	20	20	275,064

<b>8</b>	20	40	275,047
<b>9</b>	20	60	275,030
<b>10</b>	20	80	275,064
<b>11</b>	40	0	275,038
<b>12</b>	40	20	275,034
<b>13</b>	40	40	275,040
<b>14</b>	40	60	275,052
<b>15</b>	40	80	275,052
<b>16</b>	60	0	275,038
<b>17</b>	60	20	275,064
<b>18</b>	60	40	275,036
<b>19</b>	60	60	275,019
<b>20</b>	60	80	275,012
<b>21</b>	80	0	275,056
<b>22</b>	80	20	275,058
<b>23</b>	80	40	275,043
<b>24</b>	80	60	275,050
<b>25</b>	80	80	275,037

Com os resultados mostrados na Tabela 8, selecionou-se as 3 (três) geometrias que apresentaram os melhores resultados, que foram as geometrias 19,24 e 12.

Então, as geometrias 9, 19 e 20 (Figuras 23, 24 e 25) foram analisadas com mais aprofundamento não mais em termos de um misturador simples agitado, mas sim em termos de um reator CSTR, que ve-se na próxima sessão.

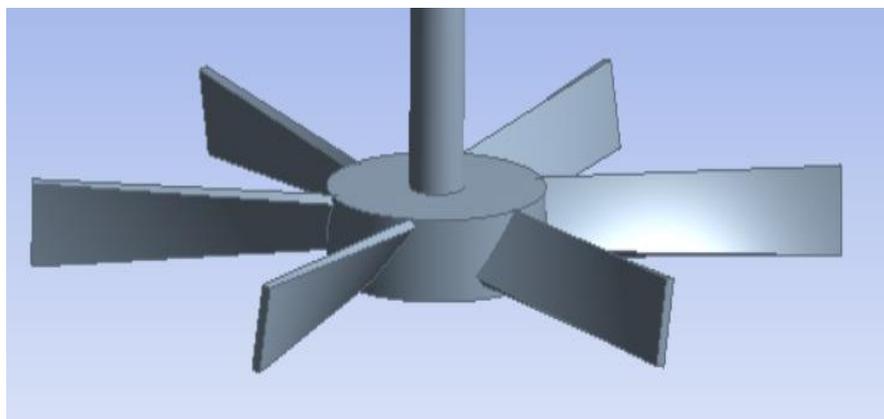


Figura 23. Geometria tida como uma das três melhores configurações geométricas que apresentarem melhor desempenho de mistura ( $A_i = 60^\circ$  e  $A_t = 60^\circ$ )

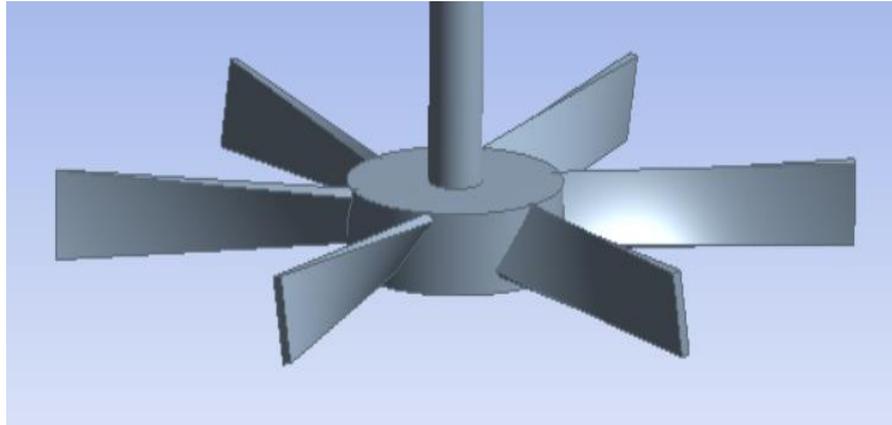


Figura 24. Geometria tida como uma das três melhores configurações geométricas que apresentarem melhor desempenho de mistura ( $A_i = 80^\circ$  e  $A_t = 60^\circ$ )

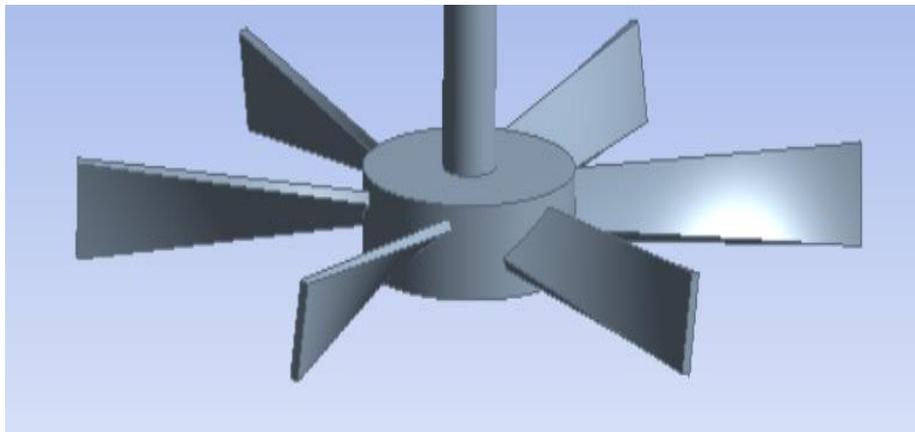


Figura 25. Geometria tida como uma das três melhores configurações geométricas que apresentarem melhor desempenho de mistura ( $A_i = 40^\circ$  e  $A_t = 20^\circ$ )

Para fins de validação com um modelo sem agitação, foi simulado também a mistura no tanque sem o agitador. Obteve-se como temperatura final o valor de 272,69 K. Isto demonstra que a inclusão de um agitador sim, e de forma eficiente, auxilia no processo de mistura. Pode-se perceber pela Figura 26 e 27 a velocidade no interior do misturados há regiões de estagnação apesar da agitação. Pode-se ver também, regiões de alta recirculação de fluido pela plotagem dos vetores de velocidade. E afirma-se a importância dos estudos de CFD nestes tipos de análise, uma vez que pode-se investigar o escoamento de forma detalhada em cada ponto do equipamento de mistura,

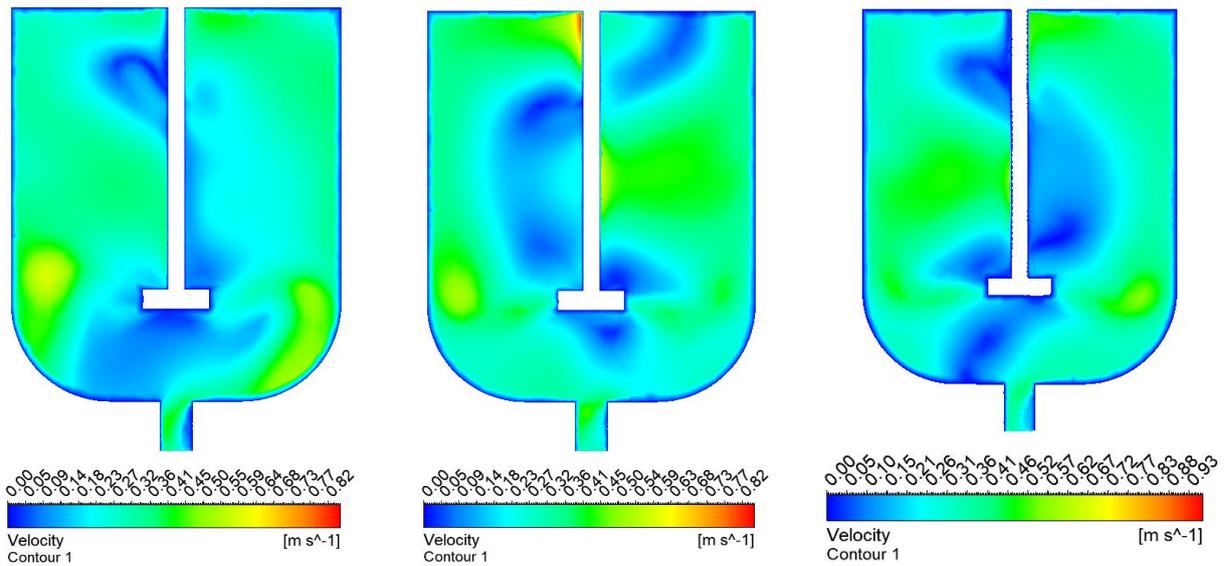


Figura 26. Plotagem da velocidade em plano central no interior do misturador.

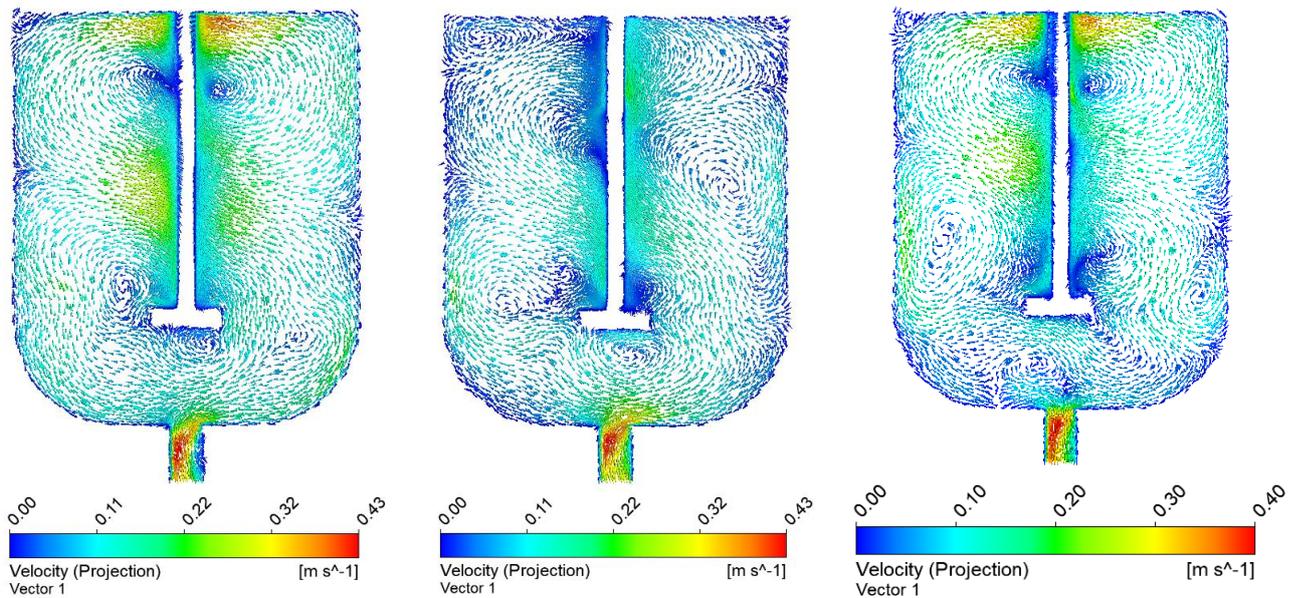


Figura 27. Plotagem dos vetores de velocidade no interior do misturador.

#### 4.3 ANÁLISES CFD EM CSTR

Utilizou-se a mesma geometria de tanque do estudo interior, e com os impelidores 9, 19 e 20, aplicado na reação de interesse já descrito anteriormente. As condições de operação estão descritas na Tabela 9. Implementando no software CFX a equação da conversão, obtemos os resultados mostrados na Tabela 10.

TABELA 9. Condições de operação do Reator

Componente	Valor
Reator	CSTR, adiabático
Entrada 1	Ácido Sulfúrico
	Concentração Inicial: 0,155 [mol m <sup>-3</sup> ] Vazão mássica: 4kg/s
Entrada 2	Hidróxido de Sódio
	Concentração Inicial: 0,167 [mol m <sup>-3</sup> ] Vazão mássica: 4kg/s
Saída	Pressão Atmosférica

TABELA 10. Resultado da conversão final do ácido sulfúrico na saída do reator CSTR.

# Geometria	Conversão do Ácido Sulfúrico
19	96,69%
24	96,76%
12	96,43%

Como conclusão, chegou-se que a geometria 24 apresentou um grau de conversão maior que as outras geometrias em estudo. Em resumo, sua configuração geométrica é a que melhor auxilia no processo de mistura e aumenta a conversão no reator quando comparado as demais geometrias.

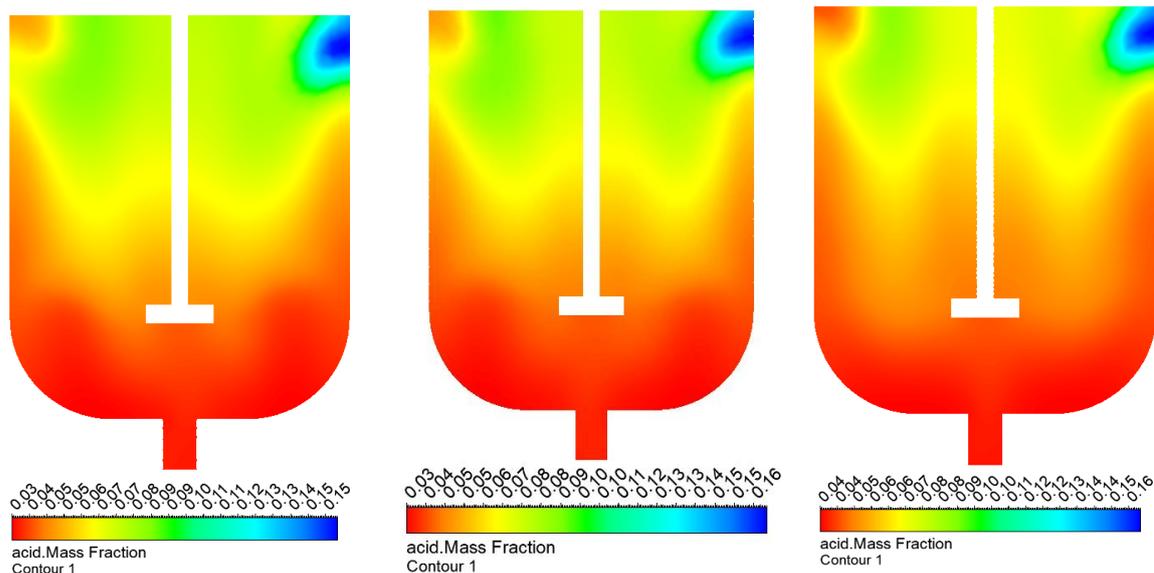


Figura 28. Plotagem da fração mássica do ácido sulfúrico no interior do reator.

Simulou-se também para fins de validação da ação do misturador na conversão dos reagentes em produtos o reator CSTR sem agitação. Assim chegou-se em uma conversão de 79,87%. Assim conclui-se também, como esperado, que a ação de agitação em um reator CSTR aumenta o grau de conversão.

Pela Figura 28, vê-se como se dá a conversão do ácido sulfúrico no interior do reator. Na Figura 29 pode-se ver plotagem da concentração do ácido sulfúricos em vários planos, e nota-se que a maior conversão do ácido sulfúrico se dá nas regiões próximo às paredes do reator.

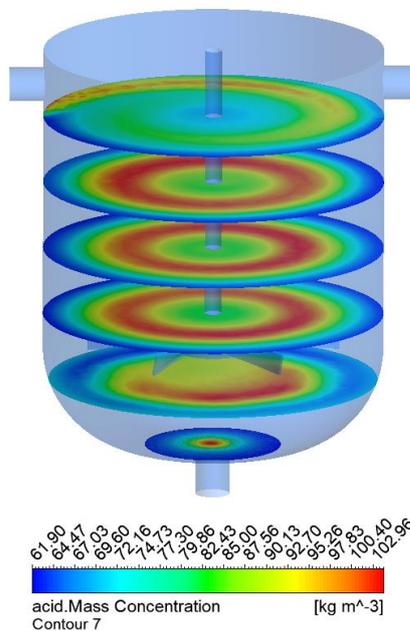


Figura 29. Plotagem multi-planar da concentração do ácido sulfúrico no interior do reator.

## 5. CONCLUSÃO

Como resultado do estudo aqui apresentado, chegou-se em uma geometria ideal de mistura, das 25 geradas via software de desenho em computador, o qual foi realizado um estudo de fluidodinâmica utilizando a metodologia dos volumes finitos.

A metodologia de estudo se mostrou muito eficaz na escolha das melhores geometrias com as condições analisadas, utilizando de variáveis de saída do processo de mistura e reacional de fácil obtenção via software CFD em seu pós-processamento.

Os estudos de confiabilidade numérica apresentados garantiram ao estudo uma maior garantia da acuracidade dos resultados finais. Entre eles, o estudo de convergência numérica com um erro residual global de  $10^{-4}$ , estudo de conservação de massa do sistema, de convergência física monitorando a temperatura de saída do misturador e os testes de independência de malha computacional.

Os reatores químicos são equipamentos de inquestionável importância no setor industrial e representam uma ampla variedade de aplicações, e conseqüentemente, uma variedade de tipos de reatores em características de operação se faz necessária. O projeto de reatores se baseia nos balanços de energia, massa e movimento para dimensionar o reator de forma que atenda as especificações requeridas.

Reatores do tipo CSTR são ideais para misturas reacionais em fase líquida, e por esta característica, agitadores mecânicos são inseridos em seu interior para promover uma maior taxa de transferência de calor e de massa aumentando a conversão final dos reagentes em produtos.

Em suma, CFD para o presente trabalho representou uma importante ferramenta, pode-se analisar geometrias de configurações dimensionais distintas objetivando encontrar a geometria com maior desempenho, podendo ser aplicado nos mais diversos ramos da ciência das engenharias.

## REFERÊNCIAS

BARRUÉ, H., KAROUI, A., LE SAUZE, N., COSTES, J., ILLY, F., Comparison of aerodynamics and mixing mechanisms of three mixers: Oxynator trade gas-gas mixer, KMA and SMS static mixers, **Chemical Engineering Journal**, vol 3, 84, 2002.

BIRD, R. B.; LIGHTFOOT, E. N.; STEWART, W. E. **Fenômenos de transporte**. Segunda Edição. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos – LTC, 2004.

BOULET, W.P. Waste fuel drying and the energy, **The Sugar Journal**, v.10, pp. 40-47, 1975.

D'INVERNO, M., LUCK, M. **Understanding agente systems**. Springer-Verlag, Berlin, Alemanha. 2004.

FERNANDES, Luís Antônio Gadelho. **Ensaio Experimentais com Misturadores Estáticos. Dissertação de Mestrado** – Universidade Estadual de Campinas. Campinas – SP, 2005.

FOGLER, Scott H. **Elementos de Engenharia das Reações Químicas**. Quarta Edição. Rio de Janeiro: LTC 2009.

FOX, R. W.; McDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J. **Introdução à Mecânica dos fluidos**. Sexta Edição. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, LTC, 2006.

GENEROSO, Daniel João. **Máquinas Térmicas**, Instituto Federal de Educação e Tecnologia - Campus Araranguá. 2011.

GODFREY, J.C., **Static mixers**, cap. 13, pp 226 a 249, 1985.

HOBBS, D. M., SWANSON, P. D., MUZZIO, F. J., Numerical characterization of low Reynolds number flow in the Kenics static mixer, **Chemical Engineering Science**, vol. 53, no. 8, pp1565-1584, 1998.

JOAQUIM Jr, Celso Fernandes. **Desenvolvimento e otimização de misturador estático com o uso da fluidodinâmica computacional (CFD)**. Tese de doutorado. Universidade Estadual de Campinas. Campinas – SP, 2008.

MAITELLI, Carla Wilza Souza de Paula. **Simulação do escoamento monofásico em um estágio de uma bomba centrífuga utilizando técnicas de fluidodinâmica computacional.** Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Norte. Natal – RN. 2010.

MALISKA, C. R., **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional.** Segunda Edição. Rio de Janeiro: LTC, 2004. 420p.

MANSHOOR, Bukhari, MDSAUFU, Muhammad Faiq, ZAMAN Izzidom. CFD Analysis od Industrial Multi-Satge Impeller in Stirred Tank with Factal pattern Baffed and Impeller. Artigo científico. **Centre for Energy and Industrial Environment Studies**, 2012.

OLEFEMI, Ademola S e et al. **CFD Simulation od Mixing Effecr on a Continuous Stirred Tank Reactor.** **Journal of Multidisciplinary Engineering Science Studies.** Vol2. 2016.

PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow.** Washington: Hemisphere, 1980. 179p.

RAULINE, D., TANGUY, P. A., LE BLÉVEC, J. M. E BOUSQUET, J., Numerical investigation of the performance of several tank mixers, **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, vol 76, pp 527-535, 1998.

SAITO, Julia Satie. **Simulação bidimensional de escoamento de um fluido incompressível ao redor de uma seção circular, utilizando CFD.** Trabalho de conclusão de Curso, Universidade Estadual de Campina, 2014.

VERSTEEG, H. K; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics the finite method.** Harlow: Longman Scientific ant Technical, 1995.

WENDT, J. F. **Computational Fluid Dynamics: An introduction.** Terceira Edição. Springer-Verlag, Berlin, 2009.

WYLEN, Gordon J. Van; SONNTAG, Richard E.; BORGNAKKE, Claus. **Fundamentos da Termodinâmica Clássica.** Euryale de Jesus Zerbini (Trad.). 4 ed. São Paulo: Edgard Blucher, 1995. 585 p.