



SIMULAÇÃO DE UM REATOR EM BATELADA PARA REAÇÕES ÁCIDO-BASE VIA COMSOL MULTIPHYSICS

André Fernando Tozzi¹
Erickson de lima²

Resumo: Quando um projeto é desenvolvido, sua fase de testes normalmente demanda recursos significativos, que podem ser desperdiçados caso os resultados obtidos não sejam satisfatórios. Nesse contexto, a simulação assume um papel fundamental, pois permite reduzir custos e otimizar o uso de recursos antes da execução prática. Este estudo apresenta a simulação de um reator químico em batelada utilizando o software COMSOL Multiphysics®. O processo investigado consiste em uma reação de neutralização ácido-base, modelada por meio das equações de transporte de massa (difusão e convecção), cinética química e balanço de energia. A geometria do reator foi definida como um vaso cilíndrico com base cônica, aquecido por uma camisa externa de vapor. Na etapa inicial, a água foi utilizada como fluido de trabalho para avaliar a dinâmica da transferência de calor. Os resultados demonstraram uma propagação uniforme de temperatura das paredes do reator até o fluido por convecção natural, confirmando a confiabilidade do modelo computacional. A metodologia evidencia as vantagens do COMSOL ao acoplar múltiplos fenômenos físicos em um único ambiente, reduzindo custos experimentais e oferecendo subsídios para a otimização de processos. Trabalhos futuros incluirão a substituição da água pelos reagentes reais (bagaço da cana e álcali), possibilitando simular a reação ácido-base em conjunto com a análise térmica. Essa abordagem busca validar o modelo e ampliar sua aplicabilidade em processos químicos reais.

Palavras-chave: COMSOL Multiphysics; Reator em batelada; Reação ácido-base.

Abstract: When a project is developed, its testing phase usually demands significant resources, which can be wasted if the results obtained are not satisfactory. This study presents the simulation of a batch chemical reactor using COMSOL Multiphysics®. The investigated process consists of an acid-base neutralization reaction, modeled through mass transport equations (diffusion and convection), reaction kinetics, and energy balance. The reactor geometry was designed as a cylindrical vessel with a conical base, heated by an external steam jacket. In the initial stage, water was used as the working fluid to evaluate heat transfer dynamics. The results demonstrated uniform temperature propagation from the reactor walls to the fluid by natural convection, confirming the reliability of the computational model. The methodology highlights the advantages of COMSOL in coupling multiple physical phenomena within a single environment, reducing experimental costs and providing insights into process

¹ Professor do curso de engenharia química, pela UNIFATEB, campus Telêmaco Borba – e-mail: erickson.lima@unifateb.edu.br.

² Graduando do curso de engenharia química da UNIFATEB, campus Telêmaco Borba – e-mail: andreft4277@ga.



optimization. Future work will replace water with actual reactants (sugarcane bagasse and alkali), enabling the simulation of the acid-base reaction alongside thermal analysis. This approach aims to validate the model and enhance its applicability to real chemical processes.

Key-words: COMSOL Multiphysics; Batch reactor; Acid-base reaction.

1. INTRODUÇÃO

A modelagem e a simulação de reatores químicos são ferramentas fundamentais para o projeto e a otimização de processos na indústria química, permitindo reduzir custos experimentais e aumentar a eficiência operacional (FOGLER, 2009; LEVENSPIEL, 2000).

Neste estudo, foi realizada a simulação de um reator em batelada utilizando o software COMSOL Multiphysics®, amplamente reconhecido por sua capacidade de acoplar fenômenos físicos como transferência de calor, transporte de massa e reações químicas (COMSOL, 2023a; SHARMA; KHANDELWAL; MISHRA, 2018). O objetivo foi analisar o comportamento térmico de um sistema aquecido por camisa de vapor, com foco na propagação de temperatura no interior do reator

2. DESENVOLVIMENTO

Na engenharia química, a simulação computacional tornou-se uma ferramenta essencial, possibilitando a análise e otimização de processos complexos sem a necessidade de criar protótipos físicos caros. Já a modelagem de reatores é essencial nas reações químicas para assegurar a eficácia, segurança e rentabilidade de uma planta industrial. Este estudo trata da simulação de um reator em batelada, um sistema que funciona em regime descontínuo, sendo ideal para produções de pequena escala e processos que demandam um controle rigoroso das condições reacionais.

A modelagem e a simulação de processos químicos são ferramentas essenciais na engenharia, pois permitem compreender o comportamento de sistemas complexos sem a necessidade de experimentos contínuos e de alto custo. Reatores



químicos, em especial, podem ser analisados de forma detalhada por meio de simulações computacionais, possibilitando prever a evolução temporal de variáveis como concentração, temperatura e pressão. Esse tipo de abordagem contribui para otimizar a eficiência operacional e reduzir riscos em escala industrial (FOGLER, 2009; LEVENSPIEL, 2000).

O reator em batelada é um dos tipos mais utilizados em escala laboratorial e em processos de pequena produção. Sua principal característica é o funcionamento em regime descontínuo, no qual os reagentes são adicionados no início da operação e o sistema evolui até que a reação esteja concluída. A flexibilidade desse tipo de reator o torna adequado para processos que demandam controle rigoroso das condições de operação e para reações em que o tempo de residência é um fator determinante (LEVENSPIEL, 2000).

No caso específico das reações ácido-base, como a neutralização, há uma transferência de prótons de um ácido para uma base, resultando na formação de água e sal. Essa reação, considerada fundamental na química, é exotérmica e apresenta forte dependência da cinética e das condições térmicas do meio. Por esse motivo, a análise do balanço de energia e de massa é fundamental para a compreensão do processo em um reator (FOGLER, 2009).

Com o avanço das ferramentas computacionais, softwares baseados no método dos elementos finitos, como o COMSOL Multiphysics®, têm se destacado pela capacidade de acoplar múltiplos fenômenos físicos em um único modelo. Esse recurso permite a integração de transporte de calor, escoamento de fluidos, difusão e cinética de reações químicas, fornecendo um panorama mais realista do comportamento do sistema (COMSOL, 2023a; COMSOL, 2023b).

Estudos recentes evidenciam a eficácia do COMSOL em simulações de processos químicos. Sharma, Khandelwal e Mishra (2018) demonstraram a aplicabilidade do software na modelagem de reatores em batelada, destacando sua precisão na previsão de perfis de concentração e temperatura. Outros trabalhos também reforçam a confiabilidade do programa para análises termoquímicas, como o de Sundaram e Deb (2022), que ressaltam sua versatilidade para simular diferentes processos industriais.



Além disso, Kumar e Singh (2020) reforçam que o COMSOL é especialmente eficaz para análises acopladas de transferência de calor e massa em reatores, permitindo validar modelos matemáticos e otimizar condições operacionais antes da realização de experimentos práticos. Essa capacidade de prever o comportamento dinâmico de sistemas químicos contribui diretamente para a segurança e a eficiência de plantas industriais, justificando sua escolha como ferramenta metodológica neste trabalho.

O processo simulado envolve uma reação de neutralização ácido-base, uma reação fundamental que ocorre com a transferência de prótons de um ácido para uma base, resultando na formação de sal e água. Para o controle do processo, é fundamental entender a cinética e a termodinâmica dessas reações em detalhes. A plataforma de simulação por elementos finitos COMSOL *Multiphysics* foi empregada para estudar este sistema, sendo reconhecida por sua habilidade de acoplar diversos fenômenos físicos.

O uso do COMSOL *Multiphysics* como ferramenta de simulação permite integrar simultaneamente diferentes fenômenos físicos em um mesmo modelo, garantindo maior precisão na análise de sistemas reacionais. Diversos estudos destacam sua aplicação em processos químicos, desde a modelagem de trocadores de calor até a simulação detalhada de reatores em batelada, evidenciando sua capacidade de prever perfis de temperatura, concentração e cinética em condições variadas de operação (SHARMA *et al.*, 2018) (SUNDARAM; DEB, 2022)

2.1 SIMULAÇÃO

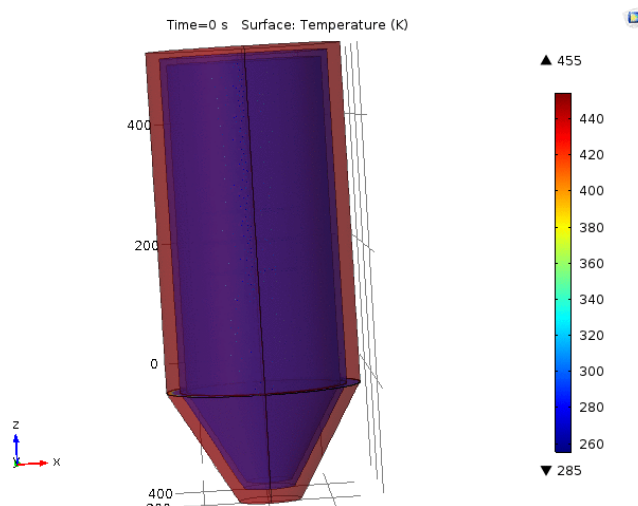
Nesta etapa inicial, a simulação apresenta a troca de calor realizada dentro do reator. A estrutura é de aço AISI 4340, contendo um tanque interno e uma camisa onde o vapor entra para aquecer o sistema. Os tanques interno e externo foram modelados com duas peças: um cilindro e um cone na base, cada uma das paredes com 10 mm de espessura. Nesta simulação, o produto utilizado é a água, e a camisa aquece o sistema a 453.15 K por 100 segundos.



Os valores usados no tanque são: Diâmetro do cilindro = 250 mm; Altura do cilindro = 500 mm; Ângulo da base menor do cone = 30°; Ângulo da base Maior do cone = 125°; Altura do cone = 150mm; Temperatura da camisa = 453.15 K

Após obter o volume da parte inferior e da superior devemos somá-los, chegando assim ao volume total de 24.628.620,33 mm³, na Figura 1, é apresentado a simulação em batelada.

Figura 1 – Simulação de um reator em batelada



Fonte: Elaborado pelos autores, (2025)

No presente estudo, o COMSOL mostrou-se eficiente ao representar o aquecimento do fluido por meio da camisa térmica, permitindo observar a propagação da temperatura das paredes externas até a água no interior do reator. Esse resultado está em consonância com outros trabalhos que apontam o software como ferramenta robusta para compreender e otimizar processos químicos, especialmente no acoplamento entre transporte de massa, calor e reações químicas (Kumar & Singh, 2020)

Além disso, a plataforma fornece um ambiente adequado para etapas futuras, nas quais os reagentes específicos serão substituídos pela água e a reação ácido-base será simulada em conjunto com a análise térmica.

Inicialmente nesta etapa a simulação estará apenas apresentando a troca de calor realizada dentro do reator.



3. RESULTADOS E CONCLUSÕES

A simulação do reator demonstra que a temperatura se propaga das camadas externas, onde a camisa com vapor está localizada, até a água, que é aquecida por convecção até chegar a temperatura de 400, isso demora em torno de 100 segundos.

A simulação evidenciou que a propagação térmica ocorreu de maneira coerente, partindo das paredes externas em contato com a camisa de vapor até atingir o líquido interno por convecção. O aquecimento apresentou comportamento uniforme, confirmando a adequação do modelo computacional.

Resultados semelhantes já foram reportados em estudos de simulação de reatores com COMSOL, reforçando a confiabilidade do software para análise de sistemas térmicos e reacionais (SHARMA; KHANDELWAL; MISHRA, 2018; SUNDARAM; DEB, 2022; KUMAR; SINGH, 2020).

A principal limitação desta etapa foi a utilização da água como fluido simplificado. Em trabalhos futuros, pretende-se substituir a água pelos reagentes reais (bagaço da cana e álcali), simulando simultaneamente a reação ácido-base e a transferência de calor. Esse aprimoramento permitirá validação experimental e maior aplicabilidade industrial.

Conclui-se que a simulação via COMSOL Multiphysics® é uma ferramenta eficiente para compreender e otimizar o comportamento térmico de reatores em batelada, além de reduzir custos experimentais e aumentar a segurança operacional.

Os resultados da simulação demonstraram um aquecimento uniforme proveniente da camisa, que se espalhou por convecção até a água, conforme o esperado. Esta etapa inicial do trabalho alcançou um resultado satisfatório, modelando o reator e simulando seu funcionamento de acordo com as expectativas. Os próximos passos incluem a substituição da água pelos reagentes selecionados (bagaço da cana e álcali) e a simulação da reação em conjunto com a análise da temperatura. Posteriormente, os resultados serão avaliados e comparados com dados experimentais, se aplicável à simulação.



4. AGRADECIMENTOS

Agradecemos sinceramente a todos que participaram da elaboração deste resumo expandido. Agradecemos também à instituição Unifateb pelo suporte e recursos fornecidos para a realização deste estudo. Por fim, agradecemos a todos os colegas e colaboradores que contribuíram, direta ou indiretamente, com discussões e insights essenciais para a realização deste estudo.

5. REFERÊNCIAS

COMSOL. Chemical Reaction Engineering Module User's Guide. Estocolmo: COMSOL AB, 2023a.

COMSOL. Introduction to COMSOL Multiphysics®. Estocolmo: COMSOL AB, 2023b. Disponível em: <https://www.comsol.com>. Acesso em: 20 set. 2025.

FOGLER, H. S. Elementos de engenharia das reações químicas. 4. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2009.

KUMAR, R.; SINGH, R. Heat and mass transfer analysis in chemical reactors using COMSOL Multiphysics. *Journal of Thermal Engineering*, v. 6, n. 5, p. 45–53, 2020.

LEVENSPIEL, O. Engenharia das reações químicas. 3. ed. São Paulo: Edgard Blücher, 2000.

SHARMA, A.; KHANDELWAL, A.; MISHRA, S. Modeling and simulation of batch reactor using COMSOL Multiphysics. *International Journal of Chemical Engineering and Applications*, v. 9, n. 3, p. 97-102, 2018.

SUNDARAM, S.; DEB, D. Application of COMSOL Multiphysics for simulation of chemical processes. *Materials Today: Proceedings*, v. 52, p. 2148–2153, 2022.