

Análise da hidrodinâmica e da distribuição do tempo de residência em um reator de placas com chicanas utilizando Fluidodinâmica Computacional

Kayky Augusto da Silva^{1*}, Beatriz da Silva Saraiva Xavier¹, Mayara de Oliveira Lessa¹, André Luis Lopes Moriyama¹

¹Universidade Federal do Rio Grande do Norte, centro de tecnologia, departamento de engenharia química, Natal-RN, Brasil

*Autor correspondente: (Kayky.augusto.134@ufrn.edu.br)

Resumo: A caracterização hidrodinâmica de reatores contínuos é essencial para compreender comportamentos que se afastam da idealidade e seus impactos sobre o desempenho dos processos. Neste trabalho, a Distribuição do Tempo de Residência (DTR) em um reator de placas com chicanas foi investigada por Fluidodinâmica Computacional (CFD). Os resultados evidenciaram que o aumento do número de Reynolds reduz a dispersão do traçador e favorece a aproximação do sistema ao comportamento de fluxo pistonado.

Palavras-chave: Fluidodinâmica Computacional; Distribuição de Tempo de Residência; reator com chicanas; Escoamento Pistonado; OpenFOAM.

INTRODUÇÃO

A Fluidodinâmica desempenha um papel fundamental na eficácia operacional e no desempenho de reatores químicos, uma vez que desvios em relação ao comportamento ideal, como regiões estagnadas, recirculação, dispersão axial e canalização do fluxo, influenciam diretamente o tempo de residência dos fluidos, e consequentemente a conversão reacional (Levenspiel, 1999; Fogler, 2006). Em reatores contínuos, a fluidodinâmica torna-se particularmente relevante devido à influência dos padrões de escoamento nos fenômenos de transferência de massa, calor e quantidade de movimento (Ranade, 2002).

Dessa forma, a Distribuição do Tempo de Residência (DTR) destaca-se como uma importante ferramenta na caracterização fluidodinâmica, sendo definida como uma medida estatística que descreve o tempo de permanência de diferentes componentes fluidos, sólidos ou em solução no interior do reator (Danckwerts, 1953).

Nos últimos anos, a Fluidodinâmica Computacional (CFD) tem se destacado como uma importante ferramenta na análise e compreensão de diversos equipamentos, permitindo a investigação detalhada dos fenômenos de transporte em geometrias complexas (Versteeg; Malalasekera, 2007). Fundamentada na solução numérica das equações de conservação, a CFD possibilita a obtenção de informações locais de velocidade, pressão e concentração de espécies químicas, contribuindo para a caracterização hidrodinâmica de reatores contínuos

(Ferziger; Perić, 2002). Em reatores com chicanas, as sucessivas mudanças de direção promovem alterações significativas nos perfis de fluxo, favorecendo a formação de recirculações, vórtices secundários e demais fenômenos associados à não idealidade do sistema. Além disso, a influência do regime de escoamento pode modificar significativamente os mecanismos de mistura e dispersão presentes no reator, afetando diretamente os padrões de distribuição do tempo de residência e o desempenho operacional do sistema.

Assim, a investigação da influência do número de Reynolds sobre o comportamento fluidodinâmico desses reatores torna-se relevante para compreender os efeitos da geometria e das condições operacionais sobre a não idealidade do escoamento.

Diante disso, o presente trabalho tem como objetivo analisar a hidrodinâmica e a distribuição do tempo de residência em um reator de placas com chicanas por meio de Fluidodinâmica Computacional (CFD), investigando a influência do número de Reynolds, na faixa de escoamento laminar, sobre os padrões de mistura, a dispersão axial e a não idealidade do sistema.

MATERIAL E MÉTODOS

O reator de fluxo contínuo desenvolvido neste trabalho possui formato retangular, com dimensões de 185 mm de comprimento, 92 mm de largura e 20 mm de altura. Internamente, o equipamento é composto por três canais de 154 mm de comprimento,

distribuídos de forma a promover o escoamento do fluido ao longo do reator. As Figuras 1 e 2 apresentam, respectivamente, os modelos bidimensionais (2D) e tridimensional (3D) utilizados para a definição da geometria e das dimensões do equipamento.



Figura 1. Modelo bidimensional do reator com suas principais dimensões.

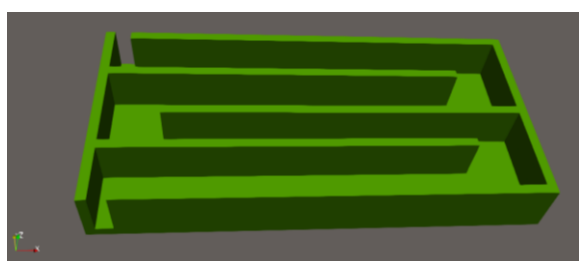


Figura 2. Modelo tridimensional do reator.

A discretização espacial do domínio fluido foi realizada por meio da geração de uma malha tridimensional predominantemente hexaédrica no ambiente OpenFOAM, utilizando a ferramenta snappyHexMesh. A Figura 3 apresenta uma vista superior da malha gerada, enquanto as principais características e os parâmetros de qualidade da malha computacional obtida estão sintetizados na Tabela 1.

Tabela 1. Características da malha.

Parâmetro	Valor
Número de células	862.306
Número de nós	1.047.993
Células Hexaédricas	816.144
Células Poliédricas	46.162
Razão de aspecto máxima	1,45
Não ortogonalidade máxima	27,69°
Não ortogonalidade média	7,01°
Skewness máxima	0,35
Volume do domínio	253,82 mL

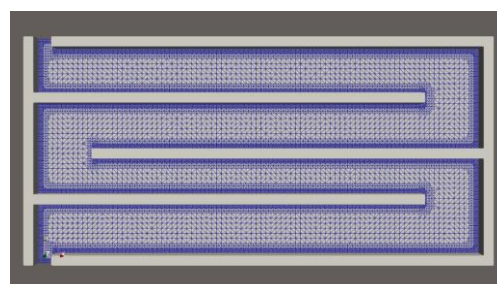


Figura 3. Vista superior da malha.

Como condições de contorno, adotou-se perfil de velocidade uniforme na entrada baseado nos números de Reynolds estudado, com pressão atmosférica na saída e paredes sob condição de não-deslizamento. A modelagem considerou escoamento isotérmico e incompressível de um fluido Newtoniano com as propriedades padrão da água (densidade de 1000 kg/m³ e viscosidade cinemática de 1x10⁻⁶ m²/s). Para simular a turbulência, foi adotada a abordagem RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) com o modelo clássico k-ε. O solver utilizado foi o simpleFoam da biblioteca padrão do OpenFOAM, que calcula escoamento estacionário, solucionando de forma acoplada às equações da continuidade representadas pela equação 1, e de conservação de momento linear, descrita pela equação 2, onde u representa o vetor velocidade, p denota a pressão cinemática, R é o tensor de tensões que engloba efeitos viscosos moleculares e os termos de Reynolds associados ao modelo de turbulência k-ε, e S_u corresponde aos termos fonte de impulso.

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (u \otimes u) - \nabla \cdot R = -\nabla p + S_u \quad (2)$$

Após atingir o estado estacionário, injetou-se um pulso de traçador com difusividade molecular de 10⁻⁹ m²/s por meio do solver transiente scalarTransportFoam da biblioteca padrão do OpenFOAM, que é governado pela equação de advecção-difusão (Equação 3), onde T denota a concentração do traçador, u representa o vetor velocidade obtido na etapa anterior, DT corresponde ao coeficiente de difusividade molecular e ST o termo fonte.

$$\frac{\partial}{\partial t} (T) + \nabla \cdot (uT) - \nabla \cdot (D_T \nabla T) = S_T \quad (3)$$

A análise da concentração de traçador na saída do reator ao longo do tempo permite calcular a distribuição tempo de residência $E(t)$ e a distribuição



cumulativa do traçador $F(t)$. Os cálculos das funções foram realizados conforme as Equações 4 e 5. A partir da distribuição foi possível determinar o tempo médio de residência conforme a Equação 6.

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^\infty C(t) dt} \quad (4)$$

$$F(t) = \int_0^t E(t) dt \quad (5)$$

$$t_m = \int_0^\infty E(t) dt \quad (6)$$

A partir da distribuição normalizada e do tempo médio real, o grau de dispersão temporal do traçador foi quantificado pela variância da curva (σ^2) (Equação 7), sendo o desvio padrão (σ) definido como a raiz da variância (Equação 8), enquanto a assimetria da distribuição foi avaliada pelo seu fator de distorção (s^3) (Equação 9). Adicionalmente, o tempo espacial teórico (τ) foi definido pela razão entre o volume do reator e a vazão volumétrica do escoamento (Equação 10), estabelecendo a base de referência necessária para a posterior quantificação de volumes mortos e desvios de idealidade do sistema hidrodinâmico.

$$\sigma^2 = \int_0^\infty (t - t_m)^2 E(t) dt \quad (7)$$

$$\sigma = \sqrt{\sigma^2} \quad (8)$$

$$s^3 = \frac{1}{\sigma^{3/2}} \int_0^\infty (t - t_m)^3 E(t) dt \quad (9)$$

$$\tau = \frac{V}{Q} \quad (10)$$

Para caracterizar os desvios de idealidade do escoamento, a fração de volume morto do reator foi estimada relacionando o tempo médio de residência experimental com o tempo espacial teórico ($\%V_d$) (Equação 11). O comportamento global de mistura foi modelado pela aproximação de tanques ideais em série, em que o número equivalente de reatores (N) foi determinado pela relação direta entre o tempo médio ao quadrado e a variância da curva (Equação 12). Por fim, a magnitude da dispersão axial foi avaliada de forma adimensional pelo número de Péclet (Pe), obtido através da resolução numérica do modelo de dispersão para reatores com fronteiras fechadas (Equação 13).

$$\%V_d = \left(1 - \frac{t_m}{\tau}\right) \cdot 100 \quad (11)$$

$$N = \frac{t_m^2}{\sigma^2} \quad (12)$$

$$\frac{\sigma^2}{t_m^2} = \frac{2}{Pe} - \frac{2}{Pe^2} (1 - e^{-Pe}) \quad (13)$$

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A análise hidrodinâmica foi realizada utilizando o número de Reynolds como parâmetro de classificação. A Tabela 2 apresenta as velocidades adotadas em cada simulação, os respectivos números de Reynolds e os regimes de escoamento correspondentes.

Tabela 2. Número de Reynolds e regime de escoamento para as velocidades simuladas.

	Velocidade (m/s)	Reynolds	Regime
1	0,0088	166	Laminar
4	0,013	249	Laminar
8	0,021	398	Laminar
9	0,026	497	Laminar
10	0,037	696	Laminar
11	0,044	829	Laminar

A partir da análise da concentração do traçador na saída do reator em função do tempo, $C(t)$, foram determinadas, por meio das Equações 4 e 5, a função distribuição do tempo de residência, $E(t)$, e a função distribuição acumulada, $F(t)$, para cada condição de escoamento simulada. Os resultados obtidos são apresentados na Figura 4(a-f). Além disso, com o objetivo de facilitar a comparação entre as diferentes velocidades avaliadas, as curvas correspondentes foram reunidas e apresentadas conjuntamente na Figura 5.

Figura 4. Gráficos $E(t)$ e $F(t)$ para as diferentes velocidades e alimentação: (a) 0,008 m/s; (b) 0,013 m/s; (c) 0,021 m/s; (d) 0,026 m/s; (e) 0,037 m/s; (f) 0,044 m/s.

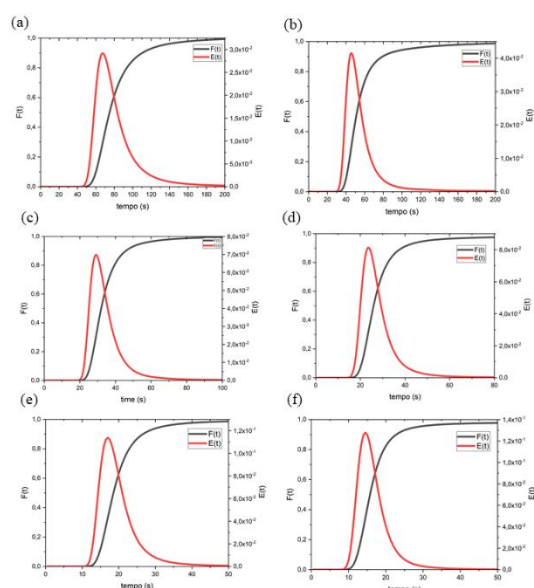
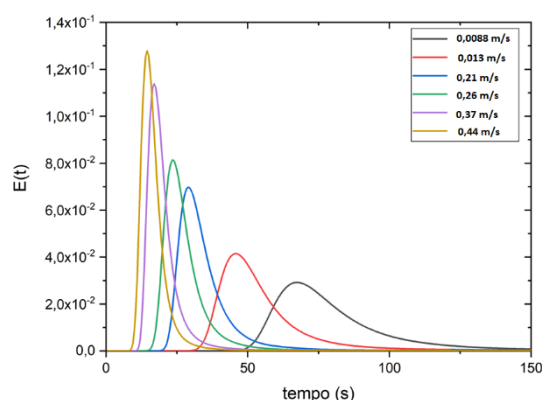


Figura 5. Curvas de Distribuição de Tempo de Residência, $E(t)$, sobrepostas para as diferentes velocidades de escoamento simuladas.



A análise comparativa das curvas de distribuição do tempo de residência apresentadas na Figura 5 evidencia a influência da velocidade de escoamento sobre o comportamento hidrodinâmico do sistema. À medida que a velocidade aumenta de 0,0088 m/s para 0,44 m/s, observa-se uma tendência consistente de estreitamento das curvas $E(t)$, acompanhada pelo aumento da altura dos picos e pelo deslocamento destes para menores tempos. Esse comportamento indica uma redução da dispersão axial do traçador, sugerindo que o aumento das forças inerciais minimiza os efeitos de difusão e de recirculação promovidos pela geometria do labirinto (Levenspiel, 1999).

Por outro lado, para as menores velocidades avaliadas (0,0088 m/s e 0,013 m/s), as curvas apresentam picos

menos pronunciados e caudas mais extensas, características associadas a uma maior dispersão axial e à permanência de parcelas do fluido por períodos mais longos no interior do reator. Tal comportamento pode estar relacionado à formação de zonas de baixa velocidade e recirculação induzidas pelas chicanas (Levenspiel, 1999).

Com o intuito de quantificar as tendências observadas nas curvas de distribuição do tempo de residência, foram calculados os parâmetros estatísticos da DTR e os parâmetros hidrodinâmicos associados ao modelo de dispersão axial, utilizando as Equações 6 a 13. O tempo médio de residência obtido a partir da distribuição experimental foi inicialmente comparado ao valor teórico calculado para cada condição de escoamento, sendo os resultados apresentados na Tabela 3. Posteriormente, foram determinados parâmetros complementares, tais como variância, desvio padrão, assimetria, volume morto, número equivalente de CSTRs, número de Péclet e coeficiente de dispersão axial, cujos valores são apresentados na Tabela 4. Esses parâmetros permitem uma avaliação quantitativa do grau de mistura, da dispersão axial e do desvio em relação ao comportamento ideal de escoamento, amplamente empregados na caracterização hidrodinâmica de reatores (Levenspiel, 1999; Fogler, 2016).

Tabela 3. tempos médios de residência obtidos para diferentes velocidades

Velocidade (m/s)	τ (s)	t (s)	$t - \tau$ (s)
0,0088	80,58	81,58	1
0,013	53,72	56,06	2,34
0,021	33,57	34,32	0,75
0,026	26,25	27,5	1,25
0,037	19,19	19,74	0,55
0,044	16,12	16,54	0,42

Observa-se na Tabela 3 uma boa concordância entre os tempos espaciais (τ) e os tempos médios de residência (t_m) para todas as condições avaliadas. As diferenças observadas correspondem a desvios relativos inferiores a 5%, indicando consistência entre os valores teóricos e aqueles obtidos a partir das distribuições do tempo de residência. De modo geral, as diferenças entre t_m e τ permanecem reduzidas em toda a faixa de velocidades investigada, variando de 0,42 a 2,34 s. Esses resultados sugerem que o comportamento hidrodinâmico do sistema se aproxima de um escoamento ideal, com baixa ocorrência de zonas mortas ou caminhos preferenciais,



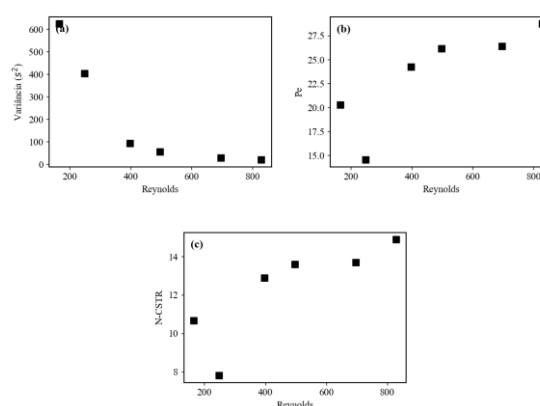
corroborando a adequação do modelo empregado (Levenspiel, 1999; Fogler, 2016).

Tabela 4. Parâmetros estatísticos da DTR e parâmetros hidrodinâmicos do modelo de dispersão axial obtidos.

v (m/s)	VOLUME morto (%)	σ^2	N	Pe
0,0088	1,25	624,67	10,65	20,26
0,013	4,35	403,3	7,79	14,51
0,021	2,21	91,41	12,88	24,215
0,026	2,38	55,63	13,59	26,14
0,037	2,9	28,46	13,69	26,35
0,044	2,62	18,37	14,89	28,74

Os parâmetros apresentados na Tabela 4 corroboram as tendências observadas nas curvas de distribuição do tempo de residência. O aumento da velocidade de escoamento promove uma redução expressiva da variância da DTR, indicando menor dispersão temporal das partículas e aproximação ao comportamento de fluxo pistonado. Os valores de assimetria permaneceram positivos para todas as condições avaliadas, evidenciando a presença de caudas à direita; entretanto, sua redução com o aumento da velocidade sugere menor retenção de fluido em regiões de baixa velocidade. Embora apresente oscilações nas menores velocidades, o número equivalente de CSTRs tende a aumentar para as maiores velocidades, enquanto o número de Péclet cresce de 20,26 para 28,74, indicando predominância dos mecanismos convectivos sobre os difusivos. Adicionalmente, os baixos percentuais de volume morto (< 5%) demonstram que praticamente todo o volume do reator participa do escoamento. Em conjunto, os resultados evidenciam que o aumento da velocidade melhora a eficiência hidrodinâmica do sistema, reduzindo os efeitos da dispersão axial e favorecendo um comportamento mais próximo ao de um reator tubular ideal.

Figura 6. Influência do número de Reynolds sobre os parâmetros hidrodinâmicos: (a) variância da distribuição do tempo de residência; (b) número de Péclet; e (c) número equivalente de reatores contínuos de mistura perfeita em série (N-CSTR).



A Figura 6 complementa a análise dos parâmetros apresentados na Tabela 4. Conforme observado na Figura 6(a), a variância da distribuição do tempo de residência diminui significativamente com o aumento do número de Reynolds, indicando uma redução da dispersão temporal das partículas e corroborando o estreitamento das curvas $E(t)$ apresentado na Figura 5. Essa tendência evidencia a diminuição dos efeitos de mistura axial à medida que a velocidade de escoamento é elevada.

De forma semelhante, a Figura 6(b) mostra uma tendência geral de aumento do número de Péclet com o incremento do número de Reynolds, indicando a predominância crescente dos mecanismos convectivos em relação aos difusivos no transporte de massa ao longo do reator. Embora seja observada uma redução pontual para $Re = 400$, os maiores valores de Reynolds apresentam os maiores números de Péclet, caracterizando um regime com menor dispersão axial.

Por sua vez, a Figura 6(c) evidencia o aumento do número equivalente de reatores CSTR em série com o crescimento do número de Reynolds. Segundo o modelo de tanques em série, valores mais elevados de N representam distribuições de tempo de residência mais estreitas e comportamento mais próximo ao de um reator tubular ideal. Em conjunto, os resultados apresentados na Figura 6 confirmam que o aumento da velocidade de escoamento promove uma melhoria da eficiência hidrodinâmica do sistema (Levenspiel, 1999; Fogler, 2016).

CONCLUSÃO

As curvas de distribuição do tempo de residência evidenciaram o estreitamento da distribuição e a redução da dispersão do traçador com o aumento do número de Reynolds, resultado corroborado pela diminuição da variância da DTR e pelo aumento dos números de Péclet e de CSTRs equivalentes. Além disso, os baixos percentuais de



volume morto observados indicaram uma utilização eficiente do volume do reator em todas as condições avaliadas. Dessa forma, os resultados demonstram que o aumento da velocidade de escoamento favorece condições hidrodinâmicas mais próximas ao escoamento pistonado ideal.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao CNPq e à CAPES pelo apoio financeiro por meio da concessão de bolsas de pesquisa, fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho. Agradecem ainda ao Departamento de Engenharia Química da UFRN pela infraestrutura laboratorial, suporte computacional e ambiente acadêmico que possibilitaram a execução desta pesquisa.

REFERÊNCIAS

- [1] DANCKWERTS, P. V. Continuous flow systems: distribution of residence times. *Chemical Engineering Science*, v. 2, n. 1, p. 1–13, 1953.
- [2] FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. 3. ed. Berlin: Springer, 2002.
- [3] FOGLER, H. S. *Elementos de Engenharia das Reações Químicas*. 4. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2009.
- [4] LEVENSPIEL, O. *Chemical Reaction Engineering*. 3. ed. New York: John Wiley & Sons, 1999.
- [5] RANADE, V. V. *Computational Flow Modeling for Chemical Reactor Engineering*. San Diego: Academic Press, 2002.
- [6] VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. 2. ed. Harlow: Pearson Education, 2007.