

08 a 11 de Outubro de 2018
Instituto Federal Fluminense
Búzios - RJ

DETERMINAÇÃO DA CONVERSÃO NÃO IDEAL DE UM REATOR CSTR EM DIFERENTES AGITAÇÕES USANDO O MODELO DE DESVIO E VOLUME MORTO

Mayara Mendes Costa¹ – mayaramendescosta19@gmail.com

Thalles de Assis¹ – thalles.ifnmg@gmail.com

Mariana Oliveira Marques¹ – marianamarques809@yahoo.com.br

Robson Antônio de Vasconcelos¹ – robson.vasconcelos@ifnmg.edu.br

¹ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Norte de Minas Gerais *Campus* Montes Claros – Montes Claros, MG, Brasil

Resumo. O reator contínuo de tanque agitado (CSTR) é comumente utilizado nas indústrias. Teoricamente, ele é caracterizado por proporcionar uma mistura perfeita do fluido, entretanto, na realidade, podem ocorrer fenômenos que corrompem essa característica ideal de mistura. Desse modo, é necessário estudar o quanto seu comportamento se desvia do ideal; para isso, deve ser determinada a curva de distribuição de tempo de residência (DTR), que mostra o tempo que diferentes frações do fluido permanecem no reator. Associando a DTR a algum modelo de mistura, pode-se prever a conversão real do reator. O presente trabalho teve como objetivo analisar, em diferentes níveis de agitação, a não-idealidade de um reator modular CSTR. Para isso, foi obtida a DTR, que associada ao modelo de desvio e zona morta, foi determinada a conversão não-ideal. Foi observado que, para uma maior agitação do reator CSTR, obteve-se uma curva da DTR mais próxima da ideal; entretanto, para a menor agitação, de acordo com o modelo de desvio e volume morto, alcançou-se uma maior conversão não-ideal.

Palavras-chave: Reator, Agitação, Distribuição do tempo de residência, Modelo, Conversão .

1. INTRODUÇÃO

Os reatores químicos são vasos onde ocorrem as transformações químicas de um dado processo. Eles, normalmente, encontram-se rodeados de outras unidades destinadas a tratamentos físicos da matéria-prima e dos produtos da reação. Dessa forma, uma boa eficiência na etapa de transformação química acarretará profundas melhorias no processo como um todo (OLIVEIRA,2016).

Segundo Levenspiel (2000), para projetar apropriadamente um reator, é necessário, antes de tudo, conhecer bem a cinética reacional, as equações de projeto e o modo de contato ou escoamento – que pode ser pistonado ou de mistura perfeita.

No escoamento considerando mistura perfeita, as variáveis como a temperatura, concentração e velocidade de reação são constantes em relação ao tempo e ao espaço. Entretanto, na prática, há um desvio da idealidade; fatores como geometria do reator, regiões estagnadas ou desvio do reagente, que entra e sai do reator sem se misturar com o material contido no interior desse, corrompem a característica de mistura perfeita do fluido reacional (PEGORARO et al., 2012).

De acordo com Teixeira (2017), em um projeto de *scale-up* de um reator, não se tem controle da não-idealidade, tornando-se necessário o estudo da mistura no interior desse de forma a se obter uma mistura mais próxima da ideal, e uma maior conversão.

Segundo Morais (2015), a agitação é um fator importante na conversão de um reator, já que proporciona uma maior aproximação da mistura ideal. Para caracterizar o quanto a agitação interfere na não-idealidade, deve ser analisada a curva distribuição do tempo de residência (DTR) que mostra o tempo de permanência de diferentes frações do fluido no interior do reator (SCHMAL, 2013)..

2. REFERENCIAL

As conversões alcançadas em reatores reais, muitas vezes se aproximam da ideal; a maioria das moléculas podem residir no reator em um tempo próximo ao tempo espacial. Entretanto, o comportamento do reator pode desviar de forma significativa do ideal devido a fatores como: vórtice, presença de zona morta ou curto-circuito, o que resulta em um contato menos efetivo entre as moléculas e, conseqüentemente, conversões muito mais baixas do que o previsto.

De modo a prever a natureza do escoamento de um reator, é necessário obter o tempo que diferentes frações do fluido permanecem nesse, ou seja, é preciso determinar a distribuição do tempo de residência (DTR). E para prever a conversão, é preciso associar a DTR a determinados modelos. Em se tratando do reator CSTR *Continuous Stirred Tank Reactor*, pode ser usado o modelo considerando desvio e volume morto

2.1 Distribuição do tempo de residência

A DTR pode ser obtida, experimentalmente, com a injeção em pulso ou em degrau de determinado corante na corrente de alimentação. Esse corante deve ter propriedades semelhantes às dos reagentes, ser completamente solúvel, facilmente detectável e não ser reativo (SASSAKI, 2000).

A perturbação em pulso consiste na injeção do traçador na alimentação em um intervalo de tempo tão pequeno quanto possível, e a concentração de saída é medida em vários tempos, até a saída total desse. Relacionando os dados de concentração em função do tempo, tem-se como resultado a curva da DTR. Na Figura 1, está representada esse tipo de perturbação e a curva típica da distribuição:



Figura 1 – Experimento com perturbação em pulso
Fonte: LEVENSPIEL,2000.

A equação da distribuição de tempo de residência resultante dessa perturbação é dada por:

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) dt} \quad (5)$$

Nesse tipo de perturbação, o traçador é injetado continuamente na corrente de alimentação até que a concentração de saída seja a mesma da entrada. A função de distribuição de tempo de residência para esse caso é dada por:

$$E(t) = \frac{d}{dt} \left[\frac{C(t)}{C_0} \right]_{\text{degrau}} \quad (6)$$

O experimento com traçador em degrau é mais vantajoso do que o experimento em pulso, devido à maior facilidade da sua execução e por não necessitar ter o conhecimento da quantidade total de traçador alimentado no sistema. Mas é desvantajoso por apresentar dificuldade em manter uma concentração constante de traçador na alimentação, envolver diferenciação de dados que pode conduzir a grandes erros e por necessitar de uma grande quantidade de traçador. De modo a minimizar o custo usa-se a perturbação em pulso, na maioria das vezes (FOGLER,2009).

2.2 Momentos da DTR

Para efeito de comparação de DTRs, é comum utilizar os seus momentos. Normalmente, utilizam-se o tempo de residência médio e a variância.

Em um sistema contínuo, o tempo espacial (τ) pode ou não ser igual ao tempo de contato, pois a distribuição das moléculas ou as propriedades do fluido no interior do reator podem não ser uniformes (SCHMAL,2013). Ou seja, na ausência de dispersão, o tempo espacial (τ) é igual ao tempo de residência médio das moléculas t_m que pode ser calculado pela equação abaixo:

$$t_m = \int_0^{\infty} tE(t)dt \quad (7)$$

A variância ou quadrado do desvio padrão, que é dada pela Equação 31, é definida como uma dispersão do tempo de residência das partículas em torno do tempo médio t_m , e para uma mistura ideal $\sigma^2 = t_m^2$ (SCHMAL, 2013). O valor da variância é refletido na largura da curva de $E(t)x(t)$; quanto mais largo for o pico maior a σ^2 , maior o desvio do comportamento ideal.

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - t_m)^2 E(t)dt \quad (8)$$

2.3 Modelo de CSTR com volume morto e desvio

A ocorrência de volume morto e desvio (curto-circuito), conforme mostrado na Figura 2 é comum em reatores CSTR.

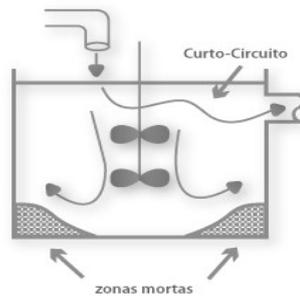


Figura 2 – CSTR não-ideal com desvio e volume morto
 Fonte: BATISTA, 2017.

Sendo assim, a modelagem do reator considerando tais fenômenos, como mostrado da Figura 3, pode fornecer boas previsões do seu comportamento real.

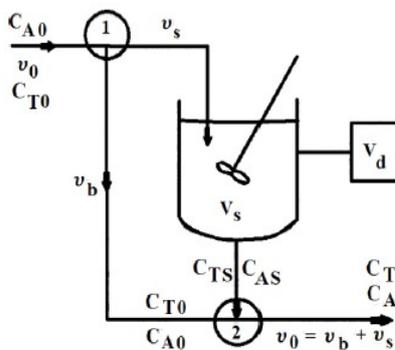


Figura 3 – Sistema modelado com desvio e volume morto
 Fonte: FOGLER, 2009.

Nesse modelo, por meio da curva de DTR obtida com um traçador a uma concentração C_{T0} e com o reator trabalhando a uma vazão v_0 , são determinados os parâmetros α e β , sendo o primeiro relativo à fração correspondente ao volume operacional $\alpha = \frac{V_s}{V}$ e o segundo correspondente ao desvio $\beta = \frac{v_0}{v_s}$.

Por meio dos parâmetros, obtém-se, vazão de entrada v_s , o volume operacional do reator V_s , o tempo espacial τ_s , a concentração C_{As} , a concentração na saída do reator C_A e a conversão X que são calculados pelas Equações 9, 10, 11, 12, 13 e 14, respectivamente.

$$v_s = (1 - \beta)v_0 \quad (9)$$

$$V_s = (\alpha\tau)v_0 \quad (10)$$

$$\tau_s = \frac{V_s}{v_s} \quad (11)$$

$$C_{As} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\tau_s k C_{A0}}}{2\tau_s k} \quad (12)$$

$$C_A = \frac{v_0 - v_s}{v_0} C_{A0} + \frac{v_s}{v_0} C_{As} \quad (13)$$

$$X = 1 - \frac{C_A}{C_{A0}} \quad (14)$$

3. METODOLOGIA

Os experimentos foram realizados no reator CSTR, que é integrante no módulo didático mostrado na Figura 4. Os ensaios foram realizados a uma temperatura de aproximadamente 298 K, com um tempo espacial (τ) de 60 segundos e o volume do reator foi de 0,0004 m³. As agitações foram de 59 rad/s, 111 rad/s e 199 rad/s.



Figura 4 – Módulo didático dos reatores PFR e CSTR

Fonte: Próprio autor

Foi injetada em pulso uma solução de azul de metileno (0,1% em peso) e foi utilizada água como fluido de transporte. Na saída do reator, foram coletas amostras do fluido até a completa saída do traçador.

A fim de determinar a concentração do traçador, foram analisadas a absorvância das amostras através de um espectrofotômetro BEL PHOTONICS modelo 1105.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com os dados de concentração foram obtidas as DTRs para as três agitações que estão apresentadas na Figura 5:

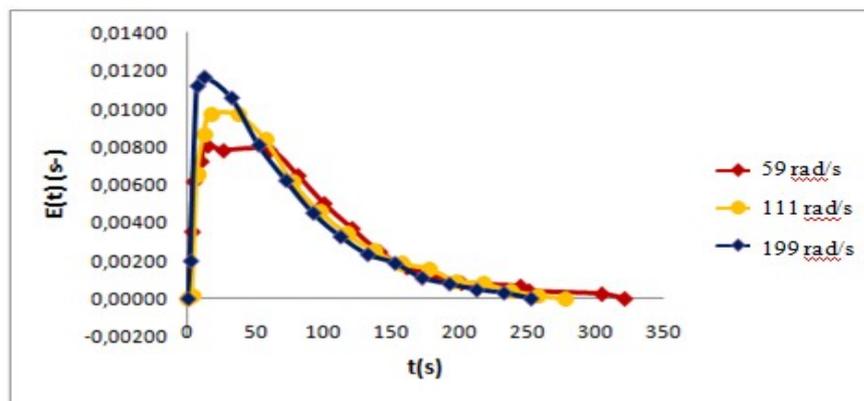


Figura 5 – Curvas da distribuição do tempo de residência nas 3 agitações

Para caracterização das curvas, foram calculados os momentos, tempo de residência médio t_m e a variância σ^2 . Os resultados estão dispostos na Tabela 1:

Tabela 1 – Valores para o tempo médio de residência e variância das DTRs

Agitação (rad/s)	τ (s)	t_m (s)	t_m^2 (s ²)	σ^2 (s ²)	$t_m^2 - \sigma^2$ (s ²)
59	60	80,4	6464,16	3672	2792,16
111	60	73,2	5358,24	2844	2514,24
199	60	64,2	4121,64	2448	1673,64

Observando as curvas, percebe-se que houve reposta imediata à perturbação em pulso, não existindo tempo morto. Percebe-se também que antes de alcançar o pico, há saída de pequenas frações do traçador, o que indica a ocorrência do fenômeno de curto-circuito ou desvio, em que uma parte do material entra no reator e sai quase que imediatamente, sem se misturar com o fluido. Verifica-se também que na agitação de 59 rad/s, houve a formação de uma longa cauda; a concentração de azul de metileno permaneceu constante por um tempo apreciável. Fogler (2009) afirma que esse fenômeno indica a difusão lenta do traçador para dentro e para fora do reator.

De acordo com a Tabela 1, o aumento da agitação no CSTR operando com $\tau = 60$ s levou a uma diminuição do tempo de residência. Além disso, a agitação de 59 rad/s foi a que apresentou maior variância, seguida das agitações de 111 e, posteriormente, 199 rad/s. De acordo com Levenspiel (2010), maiores valores de variância indicam um maior grau de

espalhamento da mistura; e, segundo Schmal (2013), o CSTR ideal obtém $t_m^2 = \sigma^2$. Na mesma tabela, é mostrado que houve uma menor divergência dessas duas variáveis com o aumento da agitação, ou seja, houve uma maior aproximação do escoamento ideal.

Usando o modelo considerando desvio e volume morto, foram determinados valores α e β , estando os mesmos dispostos na Tabela 2:

Tabela 2 – Valores obtidos para os parâmetros relativos ao volume útil (α) e desvio (β)

Agitação (rpm)	α	β
560	0,86	0,06
1060	0,68	0,13
1900	0,78	0,05

Com os parâmetros calculados, foram obtidos a vazão de entrada v_s , o volume operacional do reator V_s , o tempo espacial τ_s , a concentração C_{AS} , a concentração na saída do reator C_A e a conversão X. Todos os resultados obtidos estão dispostos na Tabela 3:

Tabela 3 – Resultados obtidos considerando o modelo de CSTR com desvio e volume morto

Agitação (rad/s)	$v_s \left(\frac{m^3}{s}\right)$	$V_s (m^3)$	$\tau_s (s)$	$C_{AS} \left(\frac{kg}{m^3}\right)$	$C_A \left(\frac{kg}{m^3}\right)$	X(%)
59	$6,24 \cdot 10^{-6}$	$3,46 \cdot 10^{-4}$	55,56	0,036	0,037	26,2
111	$5,75 \cdot 10^{-6}$	$2,74 \cdot 10^{-4}$	47,62	0,037	0,039	22,12
199	$6,30 \cdot 10^{-6}$	$3,14 \cdot 10^{-4}$	50,00	0,037	0,037	24,92

Observando os dados representados na Tabela 2, percebe-se que, na agitação de 59 rad/s, foi obtido um maior valor para α , seguido do valor obtido em 111 rad/s e, posteriormente, 199 rad/s. Ou seja, nesse sentido, houve uma diminuição do volume operacional ou um aumento do volume morto. Na Tabela 3, é confirmada a diminuição do volume operacional V_s .

Também é verificado na Tabela 3 que, na agitação de 111 rad/s, foi apresentado um maior valor para o desvio β , seguido da agitação de 59 rad/s e, posteriormente, 199 rad/s. A diminuição de β indica um menor desvio do fluido, o que implica em um aumento da vazão v_s , sendo isso verificado nos resultados apresentados na Tabela 3; nas agitações que foi proporcionado um menor valor para β , acabaram apresentando uma maior vazão v_s .

Como o volume operacional do reator e a vazão foram modificados, o tempo espacial que era 60s passou a ser de 55,56 s, 50 s e 47,62 s nas agitações de 59 rad/s, 199 rad/s e 111 rad/s, respectivamente. As agitações que levaram a maiores valores para τ_s , mostraram maior conversão, o que era previsto, pois um maior tempo espacial relaciona-se com maiores conversões.

Na agitação que resultou em uma menor conversão pelo modelo de desvio e volume morto (111 rad/s), de acordo com a Tabela 1, houve uma diferença relativamente grande entre t_m^2 e σ^2 . E na agitação de 199 rad/s, que apresentou uma conversão mais alta em relação a de 111 rad/s rpm, foi obtida uma DTR com comportamento mais próximo ao ideal. O que era esperado, pois a não-idealidade relaciona-se com menores conversões e vice-versa.

Entretanto, na agitação de 59 rad/s, foi obtida uma maior discrepância entre t_m^2 e σ^2 , e uma maior conversão, já que os parâmetros calculados apresentaram valores baixos, indicando pequenas frações para desvio e zona morta.

5. CONCLUSÃO

Por meio do experimento de estímulo-resposta, foram obtidas as curvas de distribuição de tempo de residência nas agitações de 59, 111 e 199 rad/s. Todas as curvas apresentaram comportamento não-ideal com $t_m^2 \neq \sigma^2$, sendo que, na agitação mais alta (199 rad/s), houve uma maior aproximação do escoamento ideal; o que pode ser confirmado por Schmal (2013), ao afirmar que quanto maior a agitação do reator mais uniforme se torna o perfil de velocidade, o que leva a uma maior aproximação do escoamento ideal.

Usando o modelo de desvio e volume morto foi apresentada uma maior conversão na agitação de 59 rad/s, seguida da agitação de 199 rad/s e, posteriormente, 1060; isso ocorreu devido ao aumento das frações de desvio e zona morta. Não houve uma relação direta entre a agitação do sistema e a conversão obtida pelo modelo.

Comparando as conversões obtidas pelo modelo com a não-idealidade prevista pelas curvas da DTR, foi apresentada uma incoerência na agitação de 560 rpm, em que, mesmo apresentando a maior divergência entre t_m^2 e σ^2 , foi obtida a maior conversão. Sendo assim, para estudos futuros, recomenda-se realizar o experimento reacional nas três agitações, a fim de obter a conversão real do sistema, e verificar a coerência do modelo utilizado com o comportamento real do reator.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Instituto Federal do Norte de Minas Gerais – Campus Montes Claros pelo apoio.

REFERÊNCIAS

- BATISTA, C. G. *Processos Químicos: Reação Química*, 2017. Disponível em: <labvirtual.eq.uc.pt/siteJoomla/index.php?option=com_content&task=view&id=163&Itemid=165>. Acesso em: Jun.2018.
- FOGLER, S. *Elementos de Engenharia das Reações Químicas*. 4 ed. Rio Janeiro: LTC,2009.
- LEVENSPIEL, O. *Engenharia das Reações Químicas*. 3 ed. São Paulo: Blucher, 2000.
- MORAIS, G. R. *Estudo teórico sobre o afastamento da idealidade de reatores ideais: Reação de Saponificação do Acetato de Etila*. 2015. Trabalho de Conclusão de Curso (Monografia) – Curso de Engenharia Química, Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo, Lorena, 2015.
- OLIVEIRA, R. C. *Estudo da não-idealidade de reatores tubulares a partir da determinação de suas distribuições de tempo de residência e validação dos resultados*. 2016. Trabalho de Conclusão de Curso (Monografia) - Curso de Engenharia Química, Instituto Federal do Norte de Minas Gerais, Montes Claros, 2016.
- PEGORARO, P. R. et al. *Distribuição do tempo de residência e letalidade no processamento térmico contínuo de líquidos com escoamento laminar não ideal em trocadores bitubulares*. 2012. 138 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Química, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012.
- SCHMAL, M. *Cinética e Reatores-Aplicação na Engenharia Química*. 2.ed. Rio de Janeiro: Synergia, 2013.
- SASSAKI, R. A. *Distribuição de tempos de residência em sistemas alimentados com vazão variável*. 2005.89 f. Tese (Doutorado) – Curso de Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2005.

DETERMINATION OF THE NON IDEAL CONVERSION OF A CSTR REACTOR IN DIFFERENT SHOCKS USING THE DEVIATION AND DEAD VOLUME MODEL

Abstract. The continuous stirred tank reactor (CSTR) is commonly used in industries. Theoretically, it is characterized by providing a perfect blend of the fluid, however, in fact, phenomena that corrupt this ideal mixing characteristic may occur. In this way, it is necessary to study how much their behavior deviates from the ideal; for this, the residence time distribution (DTR) curve, which shows the time that different fractions of the fluid remains in the reactor, must be determined. By associating the DTR to some mixing model, one can predict the actual conversion of the reactor. The present work had as objective to analyze, in different levels of agitation, the non-ideality of a CSTR modular reactor. For this, the DTR was obtained, which associated to the deviation and dead zone model, the non-ideal conversion was determined. It was observed that, for a greater agitation of the CSTR reactor, a DTR curve closer to the ideal was obtained; however, for the lower agitation, according to the model of deviation and dead volume, a greater non-ideal conversion was achieved.

Keywords: *Reactor, Agitation, Distribution of residence time, Model, Conversion.*