

ESTIMAÇÃO DAS FRAÇÕES DE DESVIO E ZONAS MORTAS A PARTIR DAS CURVAS DE DISTRIBUIÇÃO DE TEMPOS DE RESIDÊNCIA EM REATOR CONTÍNUO DO TIPO TANQUE AGITADO (CSTR)

B. R. BOTINHA¹, H. V. de MIRANDA¹ e F. T. VIEIRA¹

¹ Universidade Federal do Espírito Santo, Campus de Alegre
E-mail para contato: hiago_vm@hotmail.com

RESUMO – O presente trabalho apresenta a metodologia para a estimação da fração de desvio e zonas mortas a partir das curvas de distribuição de tempos de residência (DTR) em um reator CSTR, construídas a partir de dados experimentais, obtidos pela técnica estímulo-resposta de injeção do traçador. Utilizou-se um reator em escala de bancada e o fluxo contínuo de fluido foi mantido por bombas peristálticas. Avaliou-se a influência da velocidade de rotação e o efeito da presença de chicanas nas paredes internas do reator. A concentração de traçador foi determinada pela técnica colorimétrica, utilizando um espectrofotômetro. Obtiveram-se as curvas de distribuição de tempos de residência, de distribuição cumulativa e o tempo médio de residência. Com os dados experimentais, estimaram-se as frações de zonas mortas e caminhos preferenciais no interior do reator, utilizando o software Matlab. Observou-se um bom ajuste, com as curvas de DTR e distribuição cumulativa próximas das curvas teóricas para o reator ideal, podendo concluir que nas condições analisadas, o reator estudado atua próximo do comportamento ideal.

1. INTRODUÇÃO

O reator contínuo de tanque agitado (CSTR) é utilizado em reações que ocorrem em fase líquida quando é necessária a agitação intensa em processos de fluxo contínuo. O seu uso é muito difundido em escala industrial e laboratorial. Reatores CSTR são geralmente operados em estado estacionário e se considera que composição, temperatura e velocidade de reação são uniformes em todo seu interior. Dessa forma, a concentração de saída destes reatores é considerada como sendo igual à concentração dentro do tanque de reação (Fogler, 2009; Levenspiel, 2000).

Entretanto, nas condições reais de operação, o comportamento nos reatores CSTR se desvia do ideal, podendo resultar em contato não-efetivo e conversões mais baixas. Esses desvios podem ser causados pela formação de canais preferenciais ou pela criação de zonas mortas no tanque (Fogler, 2009; Levenspiel, 2000).

Um importante método de diagnosticar problemas relacionados ao perfil de escoamento e descrever o comportamento fluidodinâmico nos reatores reais é a partir da função distribuição de tempo de residência (DTR), que descreve o tempo que cada fração do reagente

alimentado permanece dentro do reator. A DTR pode ser obtida, experimentalmente, a partir da injeção de um traçador (substância química inerte) no interior do reator e a subsequente medição da sua concentração na corrente de saída em função do tempo (Fogler, 2009).

O presente trabalho teve por objetivo operar um sistema composto por um reator CSTR com a injeção de traçador, para obtenção de curvas de distribuição de tempos de residência e curvas de distribuição cumulativa; comparar os comportamentos obtidos com simulações para o reator ideal com mistura perfeita; descrever o comportamento do reator a partir da avaliação da velocidade de rotação do impelidor e do efeito de chicana sobre o comportamento fluidodinâmico; e, a partir disso, estimar frações de desvio e zonas mortas para cada condição operacional.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Para descrever a DTR é utilizada a função $E(t)$, pela qual é possível caracterizar o tempo que diferentes frações de fluido permanecem no reator. Por meio da curva da função, é possível identificar problemas relacionados ao escoamento, tais como zonas mortas e caminhos preferenciais. Para uma perturbação de traçador do tipo pulso, que consiste na injeção repentina de todo o traçador na corrente de alimentação do reator, a função de distribuição de tempo de residência é descrita pela Equação 1 (Fogler, 2009; Levenspiel, 2000).

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) dt} \quad (1)$$

A DTR normalizada, Equação 2, é obtida pela substituição da variável tempo pelo tempo adimensionalizado (θ). O termo θ é calculado pela Equação 3.

$$E(\theta) = \tau E(t) \quad (2)$$

$$\theta = t/\tau \quad (3)$$

Em que τ é o tempo de residência teórico do reator.

A função $F(t)$, Equação 4, descreve a fração de traçador na corrente de saída que permaneceu no reator por um período de tempo menor que t (Fogler, 2009).

$$F(t) = \int_0^t E(t) dt \quad (4)$$

O tempo médio (t_m), dado pela Equação 5, é um importante parâmetro para caracterização do tempo de residência. Para um CSTR de mistura perfeita (ideal), o tempo médio da distribuição de tempo de residência é igual ao tempo de residência (Fogler, 2009).

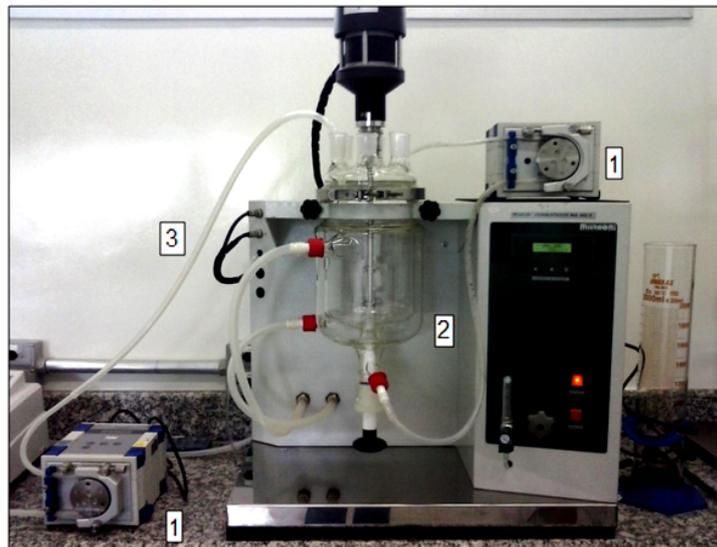
$$t_m = \int_0^{\infty} tE(t)dt \quad (5)$$

3. METODOLOGIA

3.1. Procedimento Experimental

A Figura 1 apresenta o aparato experimental utilizado durante os ensaios experimentais. Para proporcionar o fluxo contínuo no reator, foram utilizadas duas bombas peristálticas Logen Scientific modelo LS 2400 (1), as quais estavam acopladas ao reator de 3 litros (2) por meio de duas mangueiras de silicone (3) na entrada superior e na saída inferior do mesmo.

Figura 1 - Reator e bombas peristálticas utilizados nos ensaios experimentais.



Os ensaios experimentais foram realizados com agitação contínua e vazão constante de 600 mL/min. A vazão foi mantida neste valor para que o tempo de realização dos experimentos não fosse muito longo. O reator/fermentador Marconi MA 502/3 estudado possui controle de agitação, também sendo possível a utilização de chicanas em suas paredes internas. Foram analisadas as influências da velocidade de rotação e da presença de chicanas sobre o comportamento da mistura dentro do reator.

No reator, a entrada do traçador permanganato de potássio foi do tipo pulso, sendo injetado rapidamente na entrada do mesmo, a fim de minimizar a dispersão deste, utilizando uma seringa preenchida com 5 mL da solução de traçador com concentração de 30 mg/mL. As amostras do efluente com traçador foram coletadas com a utilização de tubos tipo Falcon de 15 mL na corrente de saída do reator em tempos pré-determinados, de 5 s a 26 min. As concentrações dessas amostras foram obtidas por meio da medição de suas respectivas absorvâncias utilizando um espectrofotômetro Kazuaki modelo IL-227, previamente calibrado no intervalo de concentrações de 0 a 50 mg/L.

As velocidades de rotação do impelidor utilizadas foram de 200, 400, 500, 600 e 800 rpm. O erro experimental foi analisado no ponto central (500 rpm), por meio da realização do experimento em triplicata, para avaliar o erro experimental. Embora não seja necessariamente verdade absoluta, esse nível de erro foi considerado o mesmo em toda faixa de rotação, a fim de reduzir o esforço experimental.

3.2. Modelagem da Concentração de Traçador no Reator

Para realizar a modelagem da concentração de traçador no efluente do reator foram considerados dois parâmetros: fração de zonas mortas (α) e de desvios (β). Considerou-se o volume ocupado pelas zonas mortas como uma região separada do volume útil e que a vazão de desvio era uma corrente que não percorria o volume do reator. Os parâmetros α e β foram, então, definidos pelas Equações 6 e 7, respectivamente.

$$\alpha = \frac{\text{Volume de zonas mortas}}{\text{Volume do reator}} \quad (6)$$

$$\beta = \frac{\text{Vazão de desvio}}{\text{Vazão total}} \quad (7)$$

A partir do balanço material para o traçador no reator CSTR e após manipulações algébricas, foi obtida a Equação 8. Esta foi utilizada para realizar as estimativas de frações de zonas mortas (α) e desvios de fluido no reator (β) com base nos dados experimentais, bem como realizar a simulação da concentração de traçador no reator em função do tempo. Para isto, foi utilizada a rotina de integração numérica *ode45* e a rotina de otimização *fminsearch* do software MATLAB.

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{(1-\beta)^2}{\tau(1-\alpha)} \left(C_{A0} - \frac{C_A - \beta C_{A0}}{1-\beta} \right) \quad (8)$$

Em que C_{A0} é a concentração de traçador na entrada do reator e C_A é a concentração de traçador no efluente do reator.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para exemplificação das curvas obtidas, na Figura 2 estão apresentadas as curvas de distribuição de tempos de residência normalizada ($E(\theta)$), distribuição cumulativa ($F(t)$) e dos valores de concentrações experimentais e simulados após a estimativa dos parâmetros α e β , para a velocidade de rotação do impelidor de 500 rpm na ausência de chicanas.

Em todas as condições operacionais avaliadas, observou-se que os pontos experimentais ficaram muito próximos do resultado teórico para o reator ideal, como é possível observar na Figura 2-(a) para a rotação de 500 rpm no reator sem chicanas. As curvas teóricas de distribuição cumulativa também ficaram bastante próximas das curvas experimentais, como se observa na Figura 2-(b). Por meio desses resultados, foi possível afirmar que o reator CSTR é capaz de manter seu comportamento fluidodinâmico muito próximo do ideal em operações que envolvam fluidos com viscosidades similares a da água, em toda a faixa de velocidades testadas, com ou sem chicanas nas paredes de seu reservatório.

Na Tabela 1, estão contidos os valores do tempo de residência teórico (τ), tempo médio de residência experimental (t_m) e as frações de zonas mortas (α) e desvios (β) estimadas para cada velocidade de rotação do impelidor para o reator com ausência de chicanas nas paredes internas.

Figura 2 – (a) DTR normalizada; (b) curva de distribuição cumulativa; (c) concentrações experimental e simulada de KMnO_4 para rotação de 500 rpm sem chicanas.

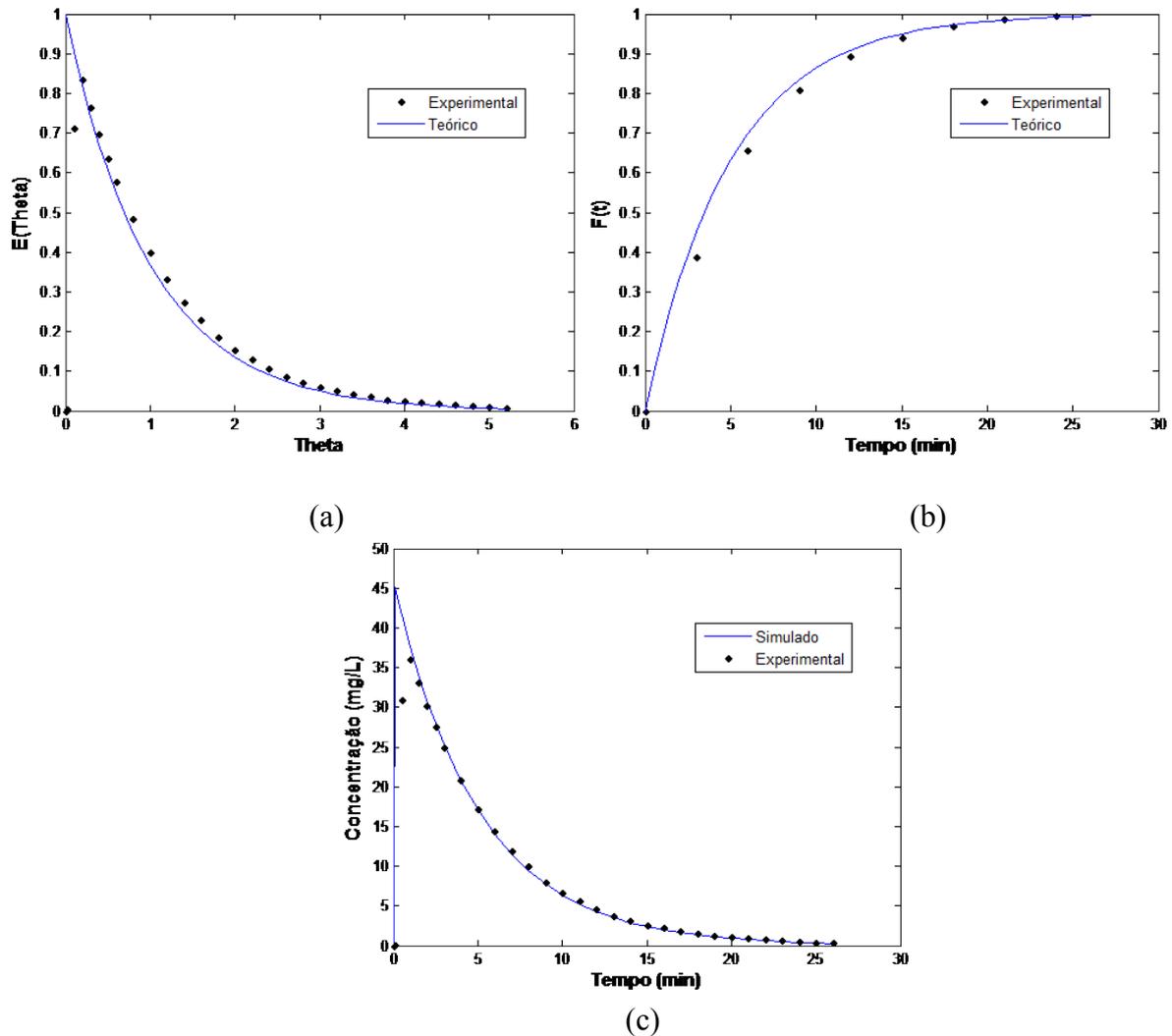


Tabela 1 – Resultados obtidos para o reator na ausência de chicanas.

Rotação (rpm)	τ (min)	t_m (min)	α (%)	β (%)
200	5,00	5,73	0,94	10,58
400	5,00	5,34	4,71	7,05
500	5,00	5,52	5,33	6,71
600	5,00	5,09	6,10	6,03
800	5,00	5,18	5,95	6,13

Os dados para o reator com presença de chicanas nas paredes internas estão apresentados na Tabela 2.

Tabela 2 – Resultados obtidos para o reator com presença de chicanas.

Rotação (rpm)	τ (min)	t_m (min)	α (%)	β (%)
200	5,00	5,49	5,00	6,92
400	5,00	5,30	6,48	6,54
500	5,00	5,64	3,84	7,75
600	5,00	5,73	4,53	7,44
800	5,00	5,75	3,16	8,63

Para as curvas de concentração obtidas pelo modelo proposto e com os parâmetros estimados contidos nas Tabelas 1 e 2, observou-se que, para todas as condições operacionais, os valores estimados estão muito próximos dos pontos experimentais, de forma que se pode considerar que o modelo possui boa adequabilidade ao comportamento do reator e que a estimação dos parâmetros foi eficaz. Como se observa para uma das condições operacionais na Figura 2-(c), a curva de concentração de traçador obtida pela simulação do modelo foi capaz de prever os valores de quase todas as concentrações obtidas experimentalmente.

O tempo médio de residência experimental foi de $(5,52 \pm 0,06)$ min para a velocidade de 500 rpm na ausência de chicanas, condição na qual os experimentos foram realizados em triplicata. Na hipótese dos desvios para as outras velocidades de rotação serem equivalentes a do ponto central (500 rpm), é possível afirmar que o tempo médio nessa rotação possui valores distintos dos obtidos para as outras velocidades de rotação. O mesmo pode ser concluído para o processo a 500 rpm na presença de chicanas, em que o tempo médio foi $(5,64 \pm 0,04)$ min.

Foram realizados o teste F e o teste t de Student para avaliar se havia equivalência entre os valores de tempo médio de residência para os experimentos na ausência e na presença de chicanas, na rotação de 500 rpm. Pelos resultados dos testes, foi possível concluir que não houve diferença estatística entre os valores obtidos. Logo, a influência das chicanas nas paredes do reator para experimentos com água, ou fluidos com viscosidades semelhantes, a 500 rpm, não é significativa.

5. CONCLUSÃO

O reator CSTR estudado apresentou, em todas as condições operacionais avaliadas, comportamento fluidodinâmico muito próximo do esperado para o reator ideal, com pouca ocorrência de desvios e zonas mortas. Pode-se concluir que a estimação dos parâmetros frações de zonas mortas e desvios foi eficaz e que o modelo obtido foi capaz de prever satisfatoriamente os valores das concentrações experimentais nas condições analisadas.

6. REFERÊNCIAS

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

LEVENSPIEL, O. *Engenharia das reações químicas*. 3. ed. São Paulo: Editora Edgard Blucher, 2000.