

“Do conhecimento acadêmico à transformação sustentável: inovação com validação científica”

MODELAGEM E SIMULAÇÃO CFD DE REATORES DE LEITO FIXO: AVALIAÇÃO DE GEOMETRIAS DE RECHEIO

Vitória C. Pereira¹ (IC), Maximilian J. Hodapp (PQ)¹

¹Universidade Federal de Itajubá.

Palavras-chave: Dinâmica de fluidos computacional. Análises. Padrão de escoamento. Distribuição de tempos de residência.

Introdução

Os reatores de leito fixo são amplamente utilizados em processos químicos e bioquímicos, sobretudo em reações catalíticas, pela sua eficiência na conversão de reagentes em produtos. Nesses sistemas, um fluido escoar através de um meio poroso formado por partículas sólidas, geralmente catalisadores, possibilitando reações químicas ou operações de separação (MORAIS, 2004). Tais reatores têm grande relevância industrial, sendo empregados em etapas de síntese, purificação e tratamento de correntes fluidas. Entretanto, a heterogeneidade de velocidades, os efeitos de parede e a distribuição não uniforme do escoamento dificultam sua representação por modelos ideais (FOGLER, 2019). Desta forma, compreender a dinâmica do fluido e a distribuição das espécies no interior do leito é fundamental para aumentar a eficiência e a segurança do processo (MORAIS, 2004).

Nesse cenário, a modelagem e simulação por Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) consolidam-se como ferramentas essenciais para o estudo do comportamento de escoamentos, permitindo a resolução de sistemas complexos de equações, como as de Navier-Stokes, além da incorporação de modelos de reação química. Entre as principais vantagens do uso dessa abordagem destacam-se o maior controle das condições de operação, a redução de custos em comparação aos ensaios experimentais e a possibilidade de analisar, em pouco tempo computacional, o desempenho de sistemas ao longo de extensos períodos de operação. Dessa forma, a aplicação de CFD em reatores de leito fixo representa um avanço relevante no projeto e na otimização desses equipamentos, oferecendo previsões mais realistas do comportamento em diferentes condições operacionais (VIEIRA, 2006).

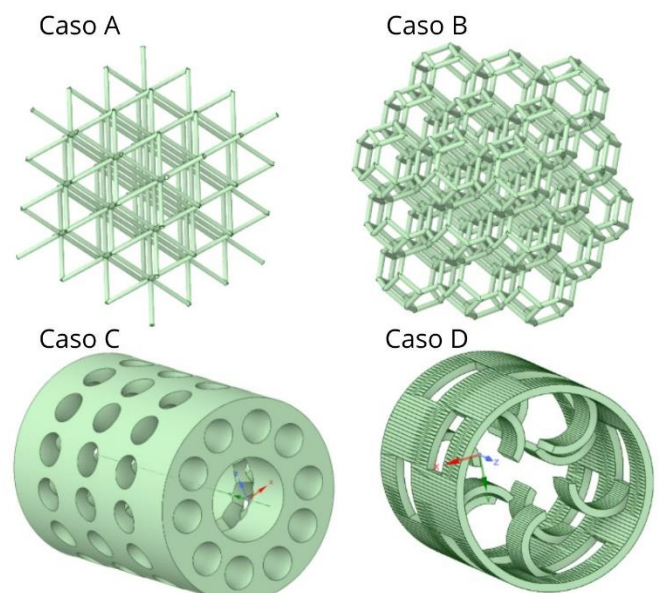
O presente trabalho busca avaliar quatro configurações geométricas utilizadas como recheio no interior de um reator de leito fixo, aplicado a um sistema catalítico heterogêneo para a produção contínua de frutoligossacarídeos. O objetivo central consiste em comparar e identificar quais geometrias favorecem maior

contato do fluido com os microrganismos, de modo a ter uma maior eficiência do processo. Para tal, fez-se uso da fluidodinâmica computacional, por meio de simulações no software Ansys CFX, possibilitando analisar o comportamento do escoamento e determinar a conformação estrutural mais adequada em termos de distribuição e aproveitamento do fluxo interno.

Metodologia

Como primeira etapa da modelagem e simulação, foram testadas quatro diferentes geometrias para o recheio do reator, denominadas como Caso A, Caso B, Caso C e Caso D, demonstrados na Figura 1, tais geometrias foram geradas a partir da ferramenta de desenho do software Ansys CFX.

Figura 1- Representação tridimensional das diferentes geometrias de recheio avaliadas no reator de leito fixo.



Fonte: Autores, 2025.

A geometria referente ao Caso A foi composta por um recheio formado por 27 peças, cada uma com 2,5 mm de aresta, resultando em um conjunto com 11 mm na

“Do conhecimento acadêmico à transformação sustentável: inovação com validação científica”

diagonal e 7,5 mm de aresta total. O Caso B apresenta as mesmas dimensões e número de peças, porém com uma geometria diferente. Já os recheios referentes aos Casos C e D foram constituídos por apenas uma peça cada, com diâmetro de 10 mm.

Para todos os casos, utilizou-se um reator com comprimento de 10 mm e diâmetro de 12 mm, além disso as paredes do reator são consideradas lisas e com velocidade nula. As condições de entrada foram definidas por uma vazão mássica de $1,65 \times 10^{-5}$ kg/s e pressão absoluta de 1 bar, enquanto a saída opera à pressão relativa de 0 bar.

As simulações foram conduzidas no Ansys CFX em regime permanente, considerando a operação do reator. Adotou-se a água como fluido de trabalho, em fase líquida e sob condições isotérmicas a 50 °C. É importante destacar que nesta etapa do trabalho, não houve o uso de reações químicas, nem participação dos microrganismos.

Com o objetivo de determinar a configuração que poderia ser mais eficiente para o proposto, realizou-se, primeiramente, a análise da distribuição da idade do fluido, ou dos tempos de residência (DTR), ou seja, analisar o tempo que cada fração de fluido leva para percorrer o reator da entrada até a saída deste. Essa análise consiste em uma técnica utilizada para o estudo da fluidodinâmica em sistemas e escoamentos como reatores, permitindo identificar a qualidade da mistura que ocorre no equipamento (Levenspiel, 1999). Além disso, neste estudo, observa-se também quanto tempo o fluido permanece em contato com o suporte do microrganismo.

Para tal análise foi adicionada uma nova equação de transporte para uma variável escalar na simulação, denominada idade, que se trata de contador, refletindo o tempo que cada porção do fluido permanece no reator, chamado de tempo de residência. Ademais, foram obtidos os valores de tempos médios na saída dos reatores, através do software do Ansys.

Analisou-se, também a perda de carga de cada caso, nesta análise foram coletados os valores de pressão correspondentes à entrada, tais valores foram obtidos no próprio software do Ansys e considerou-se a saída com valor de 0 Pa. A partir destes foram realizados a subtração da pressão da entrada pela da saída, obtendo valores de perda de carga para cada caso realizado.

Ademais, no presente estudo também foi realizada a análise por padrão de escoamento, sendo esta de extrema importância, já que permite observar a influência das diferentes conformações de recheios e

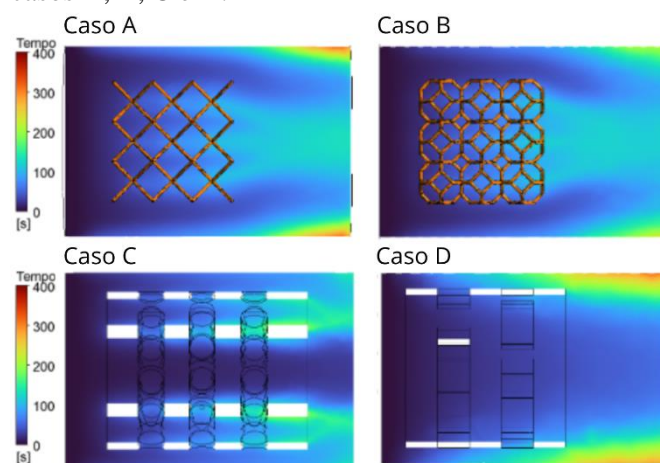
avaliar a eficiência da utilização do leito, avaliando características como zonas de recirculação, escoamento laminar ou turbulento, a eficiência da mistura e a proporção de fluido que passa no interior dos recheios.

Para esta análise realizou-se a medição das frações de fluido que escoam pelo interior dos recheios em relação ao que passa por fora destes, tais dados foram coletados, a partir do software. A coleta destes dados ocorreu no meio de cada um dos recheios, sendo uma média da vazão interna. Com os dados coletados, foi calculada a fração de fluido que atravessou o interior dos recheios, obtida pela razão entre a vazão interna e a vazão de entrada do sistema.

Resultados e discussão

A partir da análise da Figura 2, referente a distribuição do tempo do transporte de fluido no reator para cada um dos casos analisados, observa-se que a geometria escolhida para o recheio do equipamento influencia diretamente no tempo que as frações do fluido levam para serem transportadas, dependendo, principalmente, da dificuldade oferecida pelos obstáculos e da forma que esses encontram-se empacotados.

Figura 2 – Distribuição de tempo de residência para os casos A, B, C e D.



Fonte: Autores, 2025.

Primeiramente, o Caso A promoveu uma dispersão do fluido que resultou em regiões com tempos de residência distintos, devido à maior retenção próxima às estruturas e ao escoamento mais rápido nas áreas próximas a parede do reator. Para esta geometria, obteve-se um tempo médio da saída elevado de 156,09 s e com uma queda de pressão maior entre os demais, de 0,00191 Pa. Isso sugere um equilíbrio entre retenção do fluido e

“Do conhecimento acadêmico à transformação sustentável: inovação com validação científica”

resistência hidráulica, o que o torna uma alternativa intermediária entre eficiência de contato e estabilidade operacional.

O Caso B, por sua vez, apresentou o comportamento mais uniforme, com menor variação entre o interior e o exterior do recheio, com uma menor variação do tempo de residência a maioria das partículas fluidas percorre trajetórias semelhantes e com idades próximas. Este caso apresentou valores intermediários para tempo médio de saída, igual a 143,28 s e queda de pressão de 0,00248 Pa. Como esta configuração foi a que resultou em um perfil mais uniforme de distribuição de tempos de residência. Isso indica que o escoamento no interior do recheio é mais homogêneo, reduzindo a dispersão axial e tornando o sistema mais previsível em termos de desempenho reacional, característica importante em processos catalíticos e bioquímicos que exigem regularidade no contato fluido-sólido.

No Caso C, observa-se a formação de canais preferenciais de escoamento no centro da geometria, permitindo que parte do fluido atravesse o recheio de forma mais rápida, com tempos de residência menores que os observados nas demais regiões. Surgem, também, zonas de recirculação ao redor desses canais, responsáveis por reter o fluido por mais tempo e gerar uma DTR bastante heterogênea, marcada por grande dispersão. Além disso, os canais axiais secundários localizados na região frontal (dez canais visíveis na projeção) provocam uma desaceleração do fluido, aumentando o tempo de permanência no interior do leito, esse comportamento pode ser identificado pela presença de regiões com tonalidade verde na Figura 2.

Este apresentou o menor tempo de residência médio (116,10 s) e a maior queda de pressão entre todos os casos (0,00797 Pa). Esse resultado ocorre pelo fato de a geometria promover canalização, permitindo que parte do fluido atravesse rapidamente os canais centrais, enquanto regiões adjacentes apresentam maior resistência e recirculação. Assim, embora essa configuração favoreça maior velocidade de passagem, ela implica em maior custo energético para bombeamento e reduz o tempo de contato do fluido com os sólidos, o que pode comprometer a eficiência global do processo.

Por fim, o Caso D apresentou o escoamento concentrado nos grandes canais livres entre os blocos, gerando uma rápida passagem do fluido pelo interior do reator, tal comportamento não causa obstruções pelo interior do recheio, pois este tem uma configuração bem aberta. Este caso apresentou o maior tempo de saída médio (158,47 s) aliado à menor queda de pressão (0,00164 Pa). Esse comportamento indica que a

geometria favorece um escoamento com velocidades moderadas e baixo consumo energético, o que pode ser interessante se o objetivo for reduzir entupimento por crescimento biológico ou reduzir perda de carga.

Ao examinar a Tabela 1 que detalha as frações de escoamento que percorrem a parte interna dos recheios, observa-se, de forma clara, diferenças significativas entre as geometrias, visto que as frações de escoamento no interior variam bastante. Tais dados evidenciam que a geometria escolhida exerce uma influência significativa sobre o comportamento do fluido no interior do sistema. Essa escolha geométrica determina a quantidade de fluido que consegue circular dentro dos espaços internos dos recheios, afetando, conseqüentemente, o grau de contato do fluido com os microrganismos presentes nesse ambiente.

Tabela 1: Frações de escoamento no interior das geometrias escolhidas como recheio do reator.

| Geometrias | Fração interior |
|------------|-----------------|
| A | 39% |
| B | 35% |
| C | 58% |
| D | 86% |

Fonte: Autores,2025.

Com base nos dados, percebe-se que as configurações C e D apresentam maior eficiência, pois permitem que uma parcela mais significativa, mais da metade, do fluido percorra o volume de controle pelos canais internos. O Caso C, favorece a formação de canais de passagem mais diretos, reduzindo a perda de carga, resultando em uma alta fração de escoamento no interior da geometria. Já no Caso D, foi obtida a maior fração, isso é reflexo de uma maximização da passagem do fluido. Tais comportamentos aumentam o fluxo interno podendo potencializar o contato do fluido com os microrganismos presentes nos recheios.

Em contrapartida as configurações A e B apresentaram menores frações de escoamento interno, o que indica que grande parte do fluido contorna os recheios, reduzindo o contato com os microrganismos. No Caso A, com recheio formado por diversas peças gerou-se múltiplas barreiras internas, o que deixou o caminho do fluido mais complicado, restringindo a sua passagem. Já no Caso B, apesar de manter o mesmo número e dimensões de peças, o uso de uma geometria mais compacta, resultou em ainda maior dificuldade para a passagem de fluido, o que reflete na menor fração de escoamento entre todos os casos avaliados.

“Do conhecimento acadêmico à transformação sustentável: inovação com validação científica”

Por fim, é importante mencionar que o volume do recheio ocupado no reator é diferente para cada caso, o que também tem impacto sobre os resultados obtidos. Geometrias mais compactas, restringem o fluxo, o que diminui a fração de escoamento interno, já geometrias com maiores canais favorecem a passagem do fluido através do recheio. Assim, a diferença de volume entre as estruturas deve ser considerada na comparação dos desempenhos, já que influencia na intensidade da mistura e no contato do fluido com o suporte.

Conclusões

A partir das simulações realizadas é possível compreender que os resultados foram positivos aos objetivos iniciais, já que as utilizações de diferentes recheios impactaram a distribuição do fluido no reator. A análise da DTR revelou que as geometrias influenciaram no tempo de permanência do fluido no interior do reator, com tal análise foi possível identificar que a geometria B apresentou o comportamento mais uniforme, o que é desejável quando se busca maior homogeneidade no contato fluido-sólido. Em contraste, a geometria do caso D exibiu a DTR mais dispersa, marcada por tempos de residência muito curtos em parte do escoamento e retenções prolongadas em regiões estagnadas, o que compromete a eficiência global do processo. Quanto à fração de escoamento interno, verificou-se que a geometria D proporcionou a maior parcela de fluido atravessando os canais internos do recheio, enquanto a geometria B apresentou o menor valor para esse indicador.

Esses resultados reforçam que não existe um único parâmetro determinante para a escolha da geometria. O presente estudo demonstra como a simulação comparativa por CFD pode fornecer subsídios valiosos para a equipe que atua com o reator real selecionar o recheio mais adequado ao processo. Em etapas futuras, pretende-se incluir a ação dos microrganismos nas simulações, de modo a aproximar ainda mais o modelo computacional das condições operacionais reais.

Agradecimentos

Os autores agradecem a Universidade Federal de Itajubá pelo suporte oferecido para a realização do trabalho, ao CNPq/MCTI processo n°408302/2023-2 e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais – FAPEMIG pelo apoio financeiro.

Referências

- FOGLER, H. S. *Elementos de engenharia das reações químicas*. 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2019.
- LEVENSPIEL, O. *Chemical reaction engineering*. 3. ed. New York: John Wiley & Sons, 1999.
- MORAIS, E. R. *Modelagem e simulação de reatores catalíticos de leito fixo: avaliação de diferentes configurações para o fluido refrigerante*. 2004. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2004.
- VIEIRA, G. E. *Uma revisão sobre a aplicação de simulação computacional em processos industriais*. In: SIMPÓSIO DE ENGENHARIA DE PRODUÇÃO (SIMPEP), 13., 2006, Bauru. Anais [...]. Bauru: UNESP, 2006.