

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA POLITÉCNICA

DANILO FERREIRA MARTINS

**FERRAMENTA PARA DIMENSIONAMENTO PRELIMINAR - PRÉ PROJETO DE
SISTEMA - DE REATORES QUÍMICOS CONSIDERANDO: ASPECTOS
CINÉTICOS E ASPECTOS TÉRMICOS**

São Paulo

2024

DANILO FERREIRA MARTINS

**FERRAMENTA PARA DIMENSIONAMENTO PRELIMINAR - PRÉ PROJETO DE
SISTEMA - DE REATORES QUÍMICOS CONSIDERANDO: ASPECTOS
CINÉTICOS E ASPECTOS TÉRMICOS**

Monografia de Conclusão de Curso
apresentado à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo, como
requisito para obtenção do diploma
de bacharelado em Engenharia
Química. Pr. Dr. Orientador: José Luís
de Paiva

São Paulo

2024

Resumo

Este trabalho apresenta uma ferramenta para o projeto preliminar de reatores químicos, integrando aspectos térmicos essenciais para otimizar o design e a operação de reatores químicos. A ferramenta, desenvolvida na plataforma amplamente acessível e familiar do Excel, oferece aos engenheiros e projetistas uma interface amigável para o dimensionamento de reatores, cobrindo um espectro de configurações de reatores e condições operacionais.

Partindo de uma revisão abrangente da literatura, este estudo estabelece uma base sólida para a concepção da ferramenta que visa auxiliar engenheiros durante as fases iniciais de um projeto para algum cliente, fornecendo informações de maneira rápida e simples sobre as dimensões básicas do reator, velocidade de agitação necessária, assim como a potência necessária para isso e aspectos de transferência de massa e transferência de calor.

A ferramenta desenvolvida aproveita modelos matemáticos e correlações selecionadas, fundamentados em princípios essenciais da engenharia química, visando precisão e aplicabilidade prática. Ela marca uma significativa partida das metodologias de design tradicionais ao oferecer uma análise integrada de sistemas de reação homogêneos e heterogêneos, adaptável a diversos regimes de fluxo e padrões de mistura.

A utilidade e inovação da ferramenta são demonstradas por meio de estudos de caso detalhados, validando sua capacidade de fornecer insights rápidos e confiáveis para o dimensionamento preliminar. Essas aplicações não apenas sublinham a flexibilidade e robustez da ferramenta, mas também oferecem perspectivas valiosas para seu aprimoramento contínuo. O trabalho conclui refletindo sobre as implicações mais amplas desta pesquisa, incluindo seu potencial para avançar em inovações tecnológicas e melhorar a sustentabilidade dos processos.

Palavras-chave: Reatores; pré-projeto; Aspectos térmicos

Abstract

This work presents a tool for the preliminary design of chemical reactors, integrating essential thermal aspects to optimize the design and operation of chemical reactors. The tool, developed on the widely accessible and familiar Excel platform, offers engineers and designers a user-friendly interface for reactor sizing, covering a spectrum of reactor configurations and operating conditions.

Based on a comprehensive literature review, this study lays a solid foundation for the design of the tool, which aims to help engineers during the early stages of a project for a client, by providing information quickly and easily on the basic dimensions of the reactor, the stirring speed required, as well as the power needed for this and aspects of mass transfer and heat transfer.

The tool developed takes advantage of selected mathematical models and correlations, based on essential chemical engineering principles, aiming for precision and practical applicability. It marks a significant departure from traditional design methodologies by offering an integrated analysis of homogeneous and heterogeneous reaction systems, adaptable to various flow regimes and mixing patterns.

The tool's usefulness and innovation are demonstrated through detailed case studies, validating its ability to provide quick and reliable insights for preliminary sizing. These applications not only underline the flexibility and robustness of the tool, but also offer valuable perspectives for its continuous improvement. The paper concludes by reflecting on the wider implications of this research, including its potential to advance technological innovations and improve process sustainability.

Keywords: Reactors; Pre-design; Thermal aspects

Agradecimentos

Em primeiro lugar, a Deus, pela minha vida, por me dar saúde e força para ultrapassar todas as dificuldades da graduação.

Aos meus pais e irmão, que me incentivaram nessa jornada , me deram todo amor, confiança e suporte financeiro necessário.

À minha namorada, por todo amor, apoio e conselhos passados durante minha graduação.

Quero agradecer ao meu chefe de estágio Renato Sano Coelho, engenheiro e Responsável de projeto, pela sua hospitalidade, disponibilidade e conselhos.

Agradeço também ao engenheiro Vittorio Petrazzuolo que tive a oportunidade de trabalhar junto e que me deu conhecimento e orientações Valiosas para o meu futuro como engenheiro.

A todos da Processium, pelo fornecimento de dados e materiais que foram fundamentais para o desenvolvimento da pesquisa que possibilitou a realização deste trabalho.

Agradeço a Benjamin Lalanne, meu tutor pedagógico da ENSIACET, por todas as sugestões, orientações e conhecimentos técnicos transmitidos.

Ao professor José Luis Paiva, pelas excelentes aulas ministradas e por me orientar neste trabalho.

Aos meus colegas de curso, com quem convivi intensamente durante os últimos anos, pelo companheirismo e pela troca de experiências que me permitiram crescer não só como pessoa, mas também como formando.

Por último, agradeço aos professores da Escola Politécnica da USP por todos os conhecimentos e experiências passadas.

Sumário

Resumo.....	3
Abstract.....	4
Agradecimentos.....	5
Sumário.....	6
Lista de figuras.....	7
Tabelas.....	7
Abreviações.....	7
1. Introdução.....	12
2. Atualização de trabalho anterior.....	13
2.1 Contexto.....	13
2.2 Reatores e sistemas estudados.....	14
2.3 Reatores Agitados.....	14
2.4 Agitadores.....	15
2.5 Número de potência.....	16
2.6 Cálculos para os sistemas homogêneos.....	18
2.7 Método de dimensionamento.....	19
2.7.1 Regime turbulento ou transicional.....	19
2.7.2 Regime laminar.....	20
2.8 Cálculos para os sistemas heterogêneas.....	22
2.8.1 Sistema Líquido-líquido.....	23
2.8.2 Sistema Gás-líquido.....	24
2.8.3 Sistema Sólido-líquido.....	25
3. Aspectos térmicos e cinéticos.....	26
3.1 Balanço de energia.....	26
3.2 Transferência de calor.....	30
3.2.1 Área de troca térmica.....	32
3.3 Metodologia utilizada na ferramenta de cálculo.....	33
3.4 Diferença de temperatura no interior do reator.....	33
3.5 CSTR com trocador de calor.....	34
4. Exemplo de aplicação.....	35
Exemplo 1 - Concepção de um reator agitado para a dissolução de um sal na água.....	35
5. Conclusão.....	39
6. Referências.....	41
7. Anexos.....	42

Lista de figuras

Figura 1. Representação de um reator agitado	14
Figura 2. Gráfico do número de potência do agitador em função do número de Reynolds.	16
Figura 3. Gráfico do tempo de mistura adimensional em função do número de Reynolds	19
Figura 4. Representação das entradas e saídas de energia em um reator agitado.	25
Figura 5. Representação de reatores agitados: a. Com uma serpentina interna; b. Com uma jaqueta externa	28
Figura 6. Dissolução de um sal em água num tanque agitado a $N = 500$ rpm. A mancha escura no canto inferior esquerdo indica a presença do sólido no fundo do tanque e, portanto, não em suspensão (velocidade mínima calculada para a suspensão: ~ 600 rpm).	34
Figura 7. Dissolução de um sal em água num tanque agitado com $N = 900$ rpm. Os sólidos estão em suspensão e uniformemente distribuídos.	35

Tabelas

Tabela 1. Exemplos de agitadores mecânicos	16
Tabela 2. Comparação entre Jaqueta externa e Serpentina interna	31

Abreviações

Letras latinas

A	Área de troca térmica	m^2
c	Folga da parede do agitador helicoidal	m
C_0	Concentração de entrada	mol/m^3
C_D	Coeficiente de arrasto	-
C_p	Calor específico	$J/(kg \cdot K)$
D	Diâmetro do agitador	m
d	Diâmetro de bolha	m

d_p	Diâmetro da partícula	m
e	Espessura	m
E_a	Energia de ativação	J/mol
E_o	Número de Eotvos	-
F_o	Número de Fourier	-
Fr	Número de Froude	-
g	Gravidade	m^2/s
h	Altura do agitador helicoidal	m
H	Altura útil do reator	m
h_i	Coeficiente de transferência térmica interno	$W/(m^2 \cdot K)$
k_g	Coeficiente de transferência de massa	m/s
k_l	Coeficiente de transferência de massa	m/s
K_p	Constante dos agitadores helicoidais	-
k_s	Coeficiente de transferência de massa	m/s
L	Comprimento do reator	m
N	Velocidade de rotação do agitador	s^{-1}
n_b	Número de pás do agitador helicoidal	-

N_{js}	Velocidade mínima de rotação para colocar os sólidos em suspensão	s^{-1}
N_p	Número de potência	-
Nu	Número de Nusselt	-
P	Potência necessária para agitação	W
p	pá do agitador helicoidal	-
Pr	Número de Prandtl	-
Q_c	Taxa de transferência de calor	W
Q	Vazão de entrada total	m^3/s
R	Constante dos gases ideais	$J/(mol. K)$
Re	Número de Reynolds	-
Re_p	Número de Reynolds da partícula	-
S	Função numérica sem dimensão que depende do tipo de agitador	-
Sc	Número de Schmidt	-
Sh	Número de Sherwood	-
T	Diâmetro do reator	m
t	tempo característico	s
T_T	Temperatura	$^{\circ}C$

u	velocidade superficial de gás	m/s
U	Coefficiente global de transferência de calor	$W/(m^2 \cdot K)$
V	Volume do reator	m^3
V_t	Velocidade terminal	m/s
w	Largura das lâminas da roda de fita helicoidal	m
We	Número de Weber	-
X	Conversão	-
X_{S-L}	Taxa de carregamento de sólido	-
Y	Distância do atirador ao fundo do vaso	m

Letras Gregas

ΔrH	Entalpia de reação	J/mol
ΔT	Diferença de temperatura	K
ε	Potência específica dissipada na presença de gás	W/kg
θ	Tempo de mistura	s
θ_z	Tempo de mistura para uma homogeneidade z%	s
λ_i	Condutividade térmica interna do reator	$W/(m \cdot K)$

μ	Viscosidade do fluido	$Pa \cdot s$
μ_R	Razão das viscosidades	-
ν	Viscosidade cinemática	m^2/s
ρ	Densidade do fluido	kg/m^3
σ	Tensão interfacial	N/m
φ	Fração de volume da fase dispersa	-

1. Introdução

Uma etapa fundamental de um processo químico consiste no projeto e dimensionamento de reatores químicos. Além disso, obter informações sobre a eficácia, viabilidade e custo de um projeto de maneira rápida pode influenciar nas tomadas de decisão, tanto sobre a decisão de seguir uma rota de produção quanto na escolha de equipamentos.

Este trabalho representa uma continuação direta de um trabalho anterior que será explicado na seção 2 como plano de fundo para o trabalho atual, onde foram abordados aspectos geométricos e de transferência de massa em reatores agitados e de leito fixo, além de estimativas do CAPEX e OPEX.

Dessa maneira, para complementar essa análise é importante incorporar as considerações cinéticas e térmicas, enriquecendo assim a ferramenta de dimensionamento.

A análise cinética é fundamental para entender a velocidade das reações químicas envolvidas no processo. Compreender como as variáveis de processo afetam as taxas de reação é essencial para otimizar a eficiência do reator e garantir a conversão adequada dos reagentes em produtos desejados.

Além disso, os aspectos térmicos desempenham um papel crucial na operação segura e eficaz dos reatores químicos. A distribuição e o controle adequados da temperatura ao longo do reator são essenciais para evitar reações indesejadas, minimizar o consumo de energia e garantir a integridade dos materiais envolvidos.

Portanto, este trabalho visa integrar todas essas considerações em uma ferramenta para o dimensionamento preliminar de sistemas de reatores químicos. Espera-se que essa ferramenta forneça aos engenheiros uma base sólida para tomada de decisões durante as fases iniciais do projeto, contribuindo assim para resultados eficientes.

2. Atualização de trabalho anterior

2.1 Contexto

O presente trabalho foi desenvolvido a partir de estudo preliminar de uma atividade realizada durante o estágio em uma empresa francesa de consultoria em engenharia química, que tem como principais atividades modelização, concepção e otimização de processos químicos. Nesse sentido, para obter de maneira rápida e eficaz informações preliminares sobre o dimensionamento e escolha de diferentes tecnologias de reatores durante um projeto para um cliente, foi iniciada a ideia da criação de uma ferramenta para obter essas informações.

Os dados de entrada necessários para inicialização dos cálculos foram definidas de acordo com os dados que são mais comumente fornecidos pelos clientes e são eles: Tempo de residência, conversão do reator, vazão de entrada e condições operacionais como temperatura e pressão.

Dessa forma, o foco da ferramenta está em fornecer estimativas durante as fases iniciais de um projeto, onde ainda existem muitas suposições e incertezas para ajudar na tomada de decisões e futuramente refinar os cálculos e dimensionamentos com programas mais complexos.

A ferramenta calcula informações básicas como volume e dimensões do reator e informações sobre limites das transferências de calor e massa. Além disso, também fornece uma estimativa inicial de CAPEX e OPEX, além da potência necessária para agitação em reatores agitados.

A plataforma escolhida para a criação da ferramenta de cálculo foi o EXCEL, devido ao fato de ser um programa já largamente utilizado por engenheiros e ter uma interface que permite um entendimento simples das informações que devem ser inseridas e daquelas que são calculadas.

2.2 Reatores e sistemas estudados

Dois tipos de reatores foram estudados, os reatores Agitados e os reatores de leito fixo. Sendo os reatores com agitação divididos em:

- Sistemas homogêneos:
 - Regime laminar

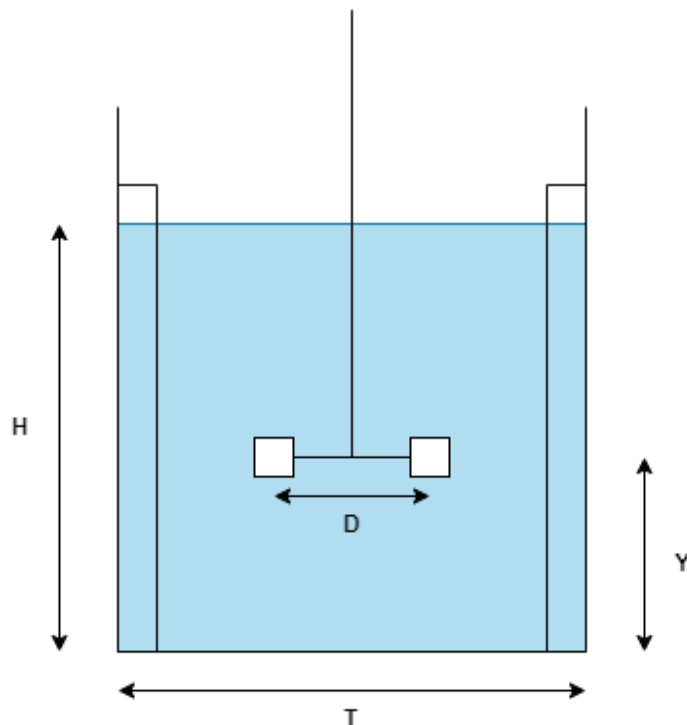
- Regime transicional ou turbulento
- Sistemas heterogêneos:
 - Líquido-líquido
 - Gás-líquido
 - Sólido-líquido

2.3 Reatores Agitados

Os reatores com agitação são amplamente utilizados na indústria química para conduzir diferentes tipos de processos, como dissolução, reações homogêneas ou heterogêneas.

Os parâmetros determinantes para o dimensionamento desse tipo de reator são a geometria (chicanas, fundo do tanque, tubos de entrada, motor/caixa de câmbio, entradas/saídas, superfícies de transferência de calor), a escolha dos agitadores e as características do agitador (número de pás e potência). [1]

Figura 1. Representação de um reator agitado



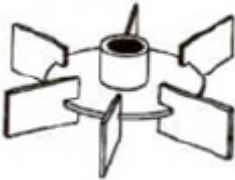


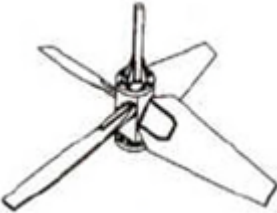
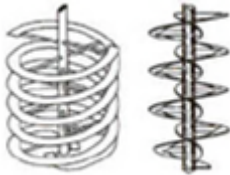
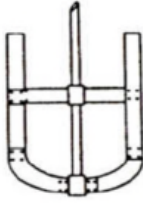
Fonte: Autor, 2024

2.4 Agitadores

A escolha do tipo de agitador em função do processo em questão é um passo importante na concepção de um reator agitado. Existem misturadores que são mais eficientes em relação à potência necessária para a agitação, da vazão e da viscosidade do sistema.

Desta forma, foram apresentados 8 tipos de agitadores mais adequados, segundo a literatura, para o regime transicional ou turbulento e 2 agitadores mais adequados para o regime laminar.

Tabela 1. Exemplos de agitadores mecânicos

Turbina Rushton com pás retas	Hélice marinha
	
Hélice dupla	Hélice HPM 40
	
Agitador helicoidal	Âncora marinha
	

2.5 Número de potência

O número de potência é uma variável adimensional que relaciona a potência do agitador (P) às variáveis de operação. Ele depende do número de Reynolds e da geometria do agitador.

$$N_p = \frac{P}{\rho N^3 D^5} \quad (1)$$

Onde N_p é o número de potência do agitador.

ρ é a massa volumétrica do fluido.

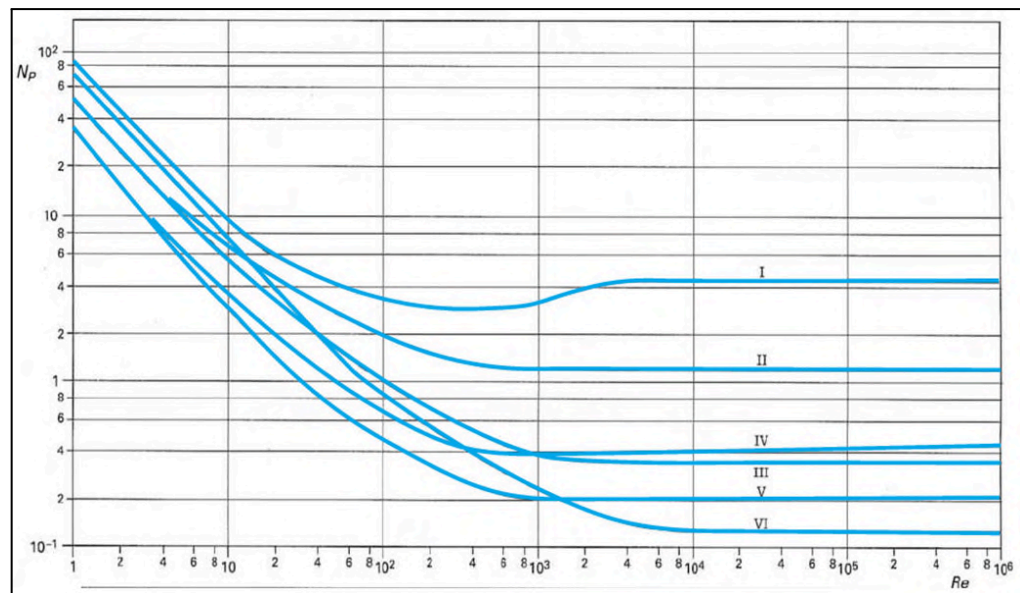
N é a velocidade de rotação do agitador.

D é o diâmetro do agitador.

Para obter o número de potência em função do agitador escolhido, utiliza-se o gráfico fornecido no artigo de referência [2].

Figura 2. Gráfico do número de potência do agitador em função do número de Reynolds.

I - Turbina de disco tipo Rushton com pás retas. II - Hélice com pás inclinadas. III - Hélice marinha. IV - Hélice com pás de perfil fino tipo HPM 20. V - Hélice com pás de perfil fino tipo HPM 40. VI - Hélice de fluxo duplo.



Fonte: Techniques de l'ingénieur [2]

2.6 Cálculos para os sistemas homogêneos

As dimensões do reator são calculadas da mesma forma em qualquer um dos casos estudados:

$$Volume = \frac{Tempo\ de\ residência * Vazão\ de\ entrada}{0,8} \quad (2)$$

O fator 0,8 no denominador da expressão destina-se a levar em conta uma taxa de enchimento do reator de 80%.

Com a hipótese de um reator cilíndrico com razão Altura/diâmetro = 1:

$$T = \left(\frac{4V}{\pi}\right)^{1/3} \quad (3)$$

Onde T é o diâmetro do reator.

Outra informação importante é o tempo de reação característico, que é calculado utilizando a hipótese de uma reação de primeira ordem:

$$t = \frac{(1-X)}{X} * Tempo\ de\ residência \quad (4)$$

Foi estabelecido que o tempo de mistura deve ser pelo menos dez vezes inferior ao tempo de reação característico, de modo a obter uma qualidade de mistura que nos impeça de sermos limitados pela mistura na reação.

É importante definir claramente o que são esses conceitos, o tempo de mistura refere-se ao período necessário para que o sistema alcance a homogeneidade desejada. Por outro lado, o tempo de reação refere-se ao tempo necessário para que uma reação química atinja seu estado de equilíbrio ou uma determinada conversão de reagentes em produtos.

2.7 Método de dimensionamento

Assim, o método de dimensionamento funciona da seguinte forma: Primeiro o usuário deve escolher se utilizará a planilha de cálculo para sistemas homogêneos ou heterogêneos baseado nos conhecimentos preliminares e inferências sobre o sistema e fluidos presentes na reação.

Dessa forma, para o dimensionamento de um reator agitado e um sistema homogêneo após os cálculos iniciais sobre o volume explicados anteriormente, calcula-se a velocidade de rotação e a potência necessária para a realizar. Os

cálculos em todos os casos são baseados em correlações encontradas na literatura. Contudo, essas correlações são definidas dependendo do tipo de regime de escoamento, definido pelo número de Reynolds.

2.7.1 Regime turbulento ou transicional

Segundo a referência [1], para $Re > 200$ o sistema está no regime transicional e para $Re > 10000$ o sistema está no regime turbulento.

As correlações encontradas na referência [1] são:

Para o regime turbulento:

$$N_p^{1/3} Re = \frac{\theta_z}{Fo} \quad (4)$$

Para o regime transicional:

$$N_p^{1/3} Re = \frac{\theta_z}{\sqrt{Fo}} \quad (5)$$

O Fo é o número de Fourier.

A correlação do *design* é baseada em experimentos nos quais o tempo de mistura necessário para alcançar uma homogeneidade de 95% foi medido. O tempo de mistura necessário para alcançar outro grau de homogeneidade pode ser calculado porque o processo de mistura é de primeira ordem.

$$\theta_z = \theta_{95} \frac{\ln\left[\frac{100 - \%homogeneidade}{100}\right]}{\ln 0,05} \quad (6)$$

Essas correlações permitem, portanto, calcular o número de Reynolds do agitador e obter uma estimativa da velocidade de rotação do agitador.

$$N = \frac{\mu Re}{\rho D^2} \quad (7)$$

Por fim, pode-se calcular a potência necessária para a agitação.

$$P = N_p \rho N^3 D^5 \quad (8)$$

2.7.2 Regime laminar

Para fluidos viscosos, que fluem normalmente em regime laminar, o livro de referência [1] indica o uso de agitadores helicoidais.

O primeiro método de cálculo utilizado abaixo é feito para esse tipo de agitador.

Uma constante K_p que depende da geometria do agitador precisa ser calculada. Várias correlações estão disponíveis na literatura para estimar esse valor. No livro de referência [1], três correlações são propostas:

$$1) K_p = 150 \frac{h}{D} \left(\frac{p}{D}\right)^{-0,5} \left(\frac{p}{D}\right)^{0,33} n_b^{0,5} \quad (9)$$

$$2) K_p = 173,1 \left(\frac{p}{D}\right)^{-0,72} \left(\frac{w}{D}\right)^{0,14} \quad (10)$$

$$1) K_p = 82,8 \frac{h}{D} \left(\frac{c}{D}\right)^{-0,38} \left(\frac{w}{D}\right)^{0,20} n_b^{0,78} \quad (11)$$

Para este trabalho foi escolhida a correlação 3, em razão de ser indicada na literatura que ela fornece uma boa estimação e funciona para uma grande variedade de geometrias.

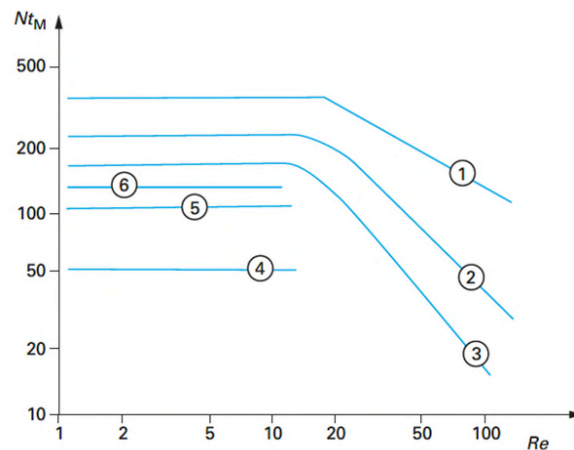
Dessa forma, para o cálculo da velocidade de rotação do agitador, é utilizada a seguinte correlação, também presente na referência [1]:

$$N\theta = 896 \cdot 10^3 K_p^{-1,69} \quad (12)$$

Há um segundo método de cálculo apresentado no artigo "Techniques de l'ingénieur" [2], que permite o uso do agitador helicoidal ou do agitador de âncora. Neste artigo, um gráfico do tempo de mistura é fornecido em uma forma adimensional, ou seja, a velocidade de rotação multiplicada pelo tempo de mistura em função do número de Reynolds.

Figura 3. Gráfico do tempo de mistura adimensional em função do número de Reynolds

1 - Âncora ($d/D = 0,98$). 4 - Agitador helicoidal



Fonte: *Techniques de l'ingénieur* [2]

Então, foi feita a extração dos pontos do gráfico a fim de obter as equações. Para a curva 1 do agitador âncora:

$$\text{Para } Re < 20: N\theta = \text{constante} = 351,7 \quad (13)$$

$$\text{Para } Re > 20: N\theta = e^{(-0,5829 \ln(Re) + 7,5402)} \quad (14)$$

Para o agitador helicoidal, temos um valor constante igual a 50,88.

O método 2 não funciona para o agitador helicoidal para valores de Reynolds superiores a 20. Para valores acima de 20, é recomendado usar o método de cálculo 1. No entanto, se optarmos por trabalhar com o agitador de âncora, devemos realizar um cálculo iterativo, de forma semelhante àquela usada no regime turbulento.

2.8 Cálculos para os sistemas heterogêneos

Em um sistema heterogêneo com duas fases ou mais, o principal desafio no projeto do reator é favorecer a transferência de massa entre as fases. Assim, estimamos a velocidade de rotação necessária para obter um coeficiente de transferência de massa calculado a partir do tempo de transferência de massa, definido como 10% do tempo de reação característico.

As combinações de fases estudadas são as seguintes:

- a) Líquido-líquido: Onde as fases líquidas são imiscíveis.
- b) Líquido-sólido: Com uma fase líquida em contato com um sólido.
- c) Gás-líquido: Com uma fase líquida em contato com um gás.

Para cada combinação de fases, a velocidade de rotação necessária será determinada para facilitar uma transferência de massa eficaz entre as fases envolvidas.

2.8.1 Sistema Líquido-líquido

Nesse caso, a primeira etapa é calcular o diâmetro de bolha (d) com as correlações seguintes [5]:

$$We = \frac{\rho N^2 D^3}{\sigma} \quad (15)$$

Onde We é o número de Weber. σ é a tensão interfacial.

$$\frac{d}{D} = 0,047(1 + 2,5\varphi)We^{-0,6} \quad (16)$$

φ é a fração de volumétrica da fase dispersa.

É calculado também a área interfacial:

$$a = \frac{6\varphi}{d} \quad (17)$$

E uma estimativa do coeficiente de transferência de massa:

$$k_L a = \frac{1}{t} \rightarrow k_L = \frac{1}{at} \quad (18)$$

Após isso, são calculados os números adimensionais necessários para a utilização da correlação:

$$Re = \frac{N\rho D^2}{\mu} \quad (19)$$

$$Fr = \frac{N^2 D}{g} \quad (20)$$

$$Sh = \frac{k_L d}{D_m} \quad (21)$$

$$Eo = \frac{\rho_d d^2 g}{\sigma} \quad (22)$$

$$Sc = \frac{\mu_c}{\rho_c D} \quad (23)$$

A correlação de acordo com a referência [1] é:

$$Sh = \frac{k_L d}{D_m} = 1,237 \cdot 10^{-5} Sc^{1/3} Fr^{5/12} Eo^{5/4} \varphi^{-0,5} Re^{2/3} \left(\frac{D}{d}\right)^2 \left(\frac{d}{T}\right)^{0,5} \quad (24)$$

Onde D_m é a difusividade molecular. g é a gravidade. k_L é o coeficiente de transferência de massa.

O objetivo é calcular a velocidade de rotação que atenda às condições de transferência de massa exigidas pelo problema proposto. Nossa variável desejada é N , que está presente nesta correlação no número de Reynolds (Re) e também no número de Froude (Fr). Como ela está elevada à potência um no Reynolds e elevada ao quadrado no Fr , usamos um solver no excel para encontrar o valor de N .

2.8.2 Sistema Gás-líquido

Para esse tipo de sistema é calculado o $K_L a$ como anteriormente, porém aqui precisamos calcular a velocidade superficial do gás (u), da seguinte forma [1]:

$$u = \frac{4Q_G}{\pi T^2} \quad (25)$$

Sendo Q_G a vazão de gás. A correlação escolhida para este sistema foi [1]:

$$k_L a = 1,2 \varepsilon^{0,7} u^{0,6} \quad (26)$$

Com isso, é calculado ε , a potência específica dissipada na presença de gás e, então, a Potência (P):

$$P = \varepsilon \rho V \quad (27)$$

E por fim, N com a fórmula da potência:

$$N = \left(\frac{P}{N_p \rho D^5} \right)^{1/3} \quad (28)$$

2.8.3 Sistema Sólido-líquido

Primeiro calculamos o número de Schmidt com a equação 23.

Depois, é calculada a velocidade terminal da partícula [1]:

$$V_t = \sqrt{\frac{4gd_p(\rho_d - \rho_c)}{3C_D \rho_c}} \quad (29)$$

Sendo C_d o coeficiente de arrasto.

Em seguida, o número de Reynolds da partícula:

$$Re_p = \frac{\rho_c V_t d_p}{\mu_c} \quad (30)$$

E com a correlação seguinte, tem-se o número de Sherwood [1]:

$$Sh = 2 + 0,44 Re_p^{1/2} Sc^{0,38} \quad (31)$$

E, dessa forma, pode-se estimar o coeficiente de transferência de massa.

$$Sh = \frac{k_s d_p}{D_m} \quad (32)$$

É importante notar que, para esse tipo de sistema, há uma diferença em relação aos dois outros explicados acima. Conforme mostrado na correlação 31, no caso sólido-líquido, o coeficiente k_s não depende da velocidade de agitação e, portanto, não pode ser usado como critério para calcular essa velocidade. Assim, calculamos a velocidade mínima para suspender os sólidos e, a partir disso, estimamos a velocidade de rotação do agitador.

A velocidade mínima é calculada da seguinte forma [1]:

$$N_{js} = S v^{0,1} \left[\frac{g(\rho_s - \rho_l)}{\rho_l} \right]^{0,45} X_{S-L}^{0,13} d_p^{0,2} D^{-0,85} \quad (33)$$

Onde S é uma função numérica sem dimensão do tipo de agitador.

X é o parâmetro de carga sólida.

ν é a viscosidade cinemática.

A velocidade de rotação é calculada portanto como:

$$N = 1,5 N_{js} \quad (34)$$

O fator de 1,5 é usado para garantir a dispersão dos sólidos no líquido [1].

Ainda assim, calculamos k_s para depois verificar se temos um tempo característico de transferência de massa aceitável ($< 0,1 \cdot$ tempo característico de

reação). Se não for o caso, é necessário mudar algumas suposições, como o tamanho das partículas.

3. Aspectos térmicos e cinéticos

É fundamental no projeto de um reator químico real realizar a análise térmica, sendo por exemplo, a variação de temperatura ao longo de um reator PFR ou a maneira que o calor é removido em um reator agitado. Dessa forma, essa seção tem como objetivo complementar o trabalho anterior, que era focado nos aspectos geométricos e na transferência de massa nos reatores.

Assim, é importante começar essa seção falando sobre o balanço de energia. Ele pode ser considerado a principal ferramenta durante o projeto de um reator, pois resolve problemas de projeto e relaciona temperatura e conversão ou velocidade de reação para os principais tipos de reatores. [15]

3.1 Balanço de energia

Para falarmos do balanço de energia, é importante lembrar a primeira lei da termodinâmica, que basicamente diz que para um sistema fechado a variação de energia do sistema é igual a taxa de calor para o sistema menos o trabalho feito pelo sistema sobre as vizinhanças.

$$d\hat{E} = \delta Q - \delta W \quad (35)$$

Entretanto, normalmente os reatores são sistemas abertos com escoamento contínuo, onde existe massa cruzando a fronteira do sistema. Dessa maneira, para o caso onde consideramos apenas uma espécie entrando e saindo, temos:

$$\frac{d\hat{E}_{sist}}{dt} = Q - W + F_e E_e - F_s E_s \quad (36)$$

$\frac{d\hat{E}_{sist}}{dt}$ é a taxa de acúmulo de energia dentro do sistema.

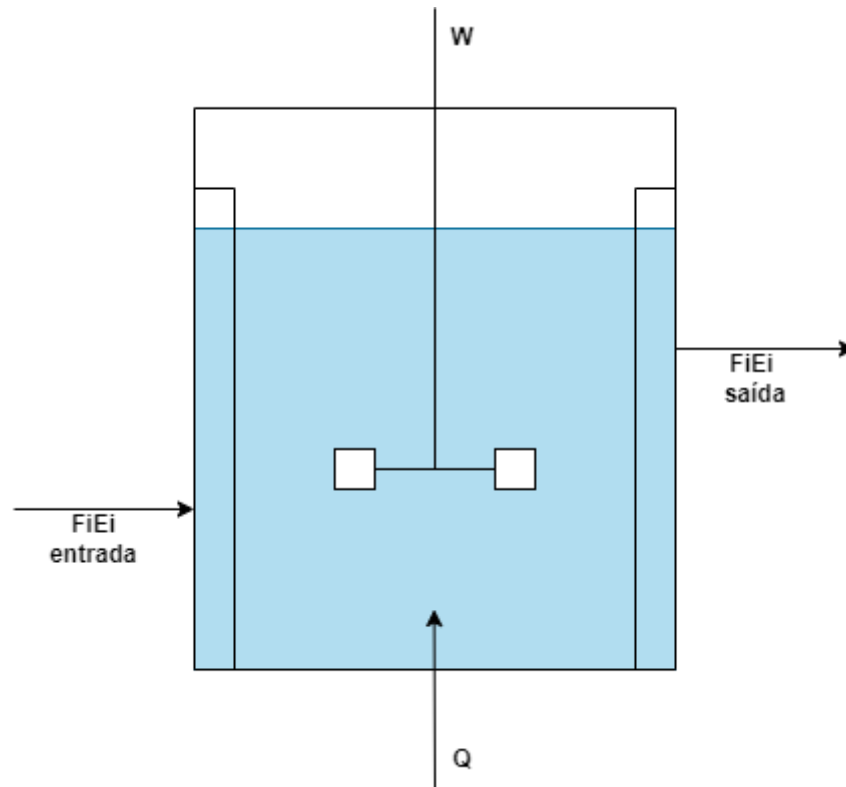
Q é a taxa de energia transferida para o sistema a partir da vizinhança.

W é a taxa de trabalho feito pelo sistema sobre a vizinhança.

$F_e E_e$ é a taxa de energia adicionada ao sistema pela massa que escoar para dentro do sistema.

$F_s E_s$ é a taxa de energia que sai do sistema devido ao escoamento da massa para fora do sistema.

Figura 4. Representação das entradas e saídas de energia em um reator agitado.



Fonte: Autor, 2024

Pode-se dizer que o balanço de energia em regime transiente para um sistema aberto bem misturado e que tenha n espécies, cada uma entrando e saindo do sistema com suas respectivas vazões molares F_i e entalpias E_i como:

$$\frac{d\hat{E}_{sist}}{dt} = Q - W + \sum_{i=1}^n F_{ie} E_{ie} - \sum_{i=1}^n F_{is} E_{is} \quad (37)$$

O termo W é a soma do trabalho de escoamento mais um trabalho de eixo (W_s). O trabalho de escoamento é o trabalho para conseguir que a massa entre e saia do sistema, enquanto o trabalho de eixo é produzido pelo agitador no caso dos reatores agitados ou uma turbina em um PFR.

Dessa forma, pode-se reescrever essa equação acima unindo os termos de trabalho de escoamento com as entalpias das massas que entram e saem do sistema, chegando em uma equação que depende da entalpia das espécies:

$$\frac{dE_{sist}^{\wedge}}{dt} = Q - W_s + \sum_{i=1}^n F_{ie} H_{ie} - \sum_{i=1}^n F_{is} H_{is} \quad (38)$$

A partir dessa equação podemos chegar em expressões que relacionam temperatura, conversão, vazões molares e a parâmetros do sistema como coeficiente global de transferência de calor, temperatura ambiente e entalpia de reação.

Para inserir a conversão na equação, pode-se escrever as vazões molares das espécies i em termos de conversão:

Por exemplo, para uma reação do tipo $A + \frac{b}{a}B \rightarrow \frac{c}{a}C + \frac{d}{a}D$

Define-se a variável $\theta_i = \frac{F_{i0}}{F_{A0}}$ (39). Assim, escreve-se para cada espécie no estado estacionário:

$$F_B = F_{A0}(\theta_B - \frac{b}{a}X) \quad (40)$$

$$F_C = F_{A0}(\theta_C + \frac{c}{a}X) \quad (41)$$

$$F_D = F_{A0}(\theta_D + \frac{d}{a}X) \quad (42)$$

Dessa forma podemos realizar a substituição de F na equação:

$$\sum_{i=1}^n F_{ie} H_{ie} - \sum_{i=1}^n F_{is} H_{is} = F_{A0}[(H_{A0} - H_A) + (H_{B0} - H_B)\theta_B + (H_{C0} - H_C)\theta_C + (H_{D0} - H_D)\theta_D + (\frac{d}{a}H_D + \frac{c}{a}H_C + \frac{b}{a}H_B + H_A)F_{A0}X] \quad (43)$$

O termo $(\frac{d}{a}H_D + \frac{c}{a}H_C + \frac{b}{a}H_B + H_A)$ é entalpia de reação na temperatura T, chamaremos de $\Delta H_r(T)$.

Logo, temos a seguinte equação para o regime estacionário:

$$0 = Q - W_s + F_{A0} \sum_{i=1}^n \theta_i (H_{i0} - H_i) - \Delta H_r(T) F_{A0} X \quad (44)$$

Além disso, para certos casos pode-se escrever a entalpia em função do calor específico:

$$H_{i0} - H_i = C_{pi} (T - T_{i0}) \quad (45)$$

Resultando em:

$$0 = Q - W_s + F_{A0} \sum_{i=1}^n \theta_i C_{pi} (T - T_{i0}) - \Delta H_r(T) F_{A0} X \quad (46)$$

A equação 46 é uma equação fundamental para a análise térmica nos reatores, pois a partir dela podemos dimensionar a maneira como será controlada a temperatura no reator. Por exemplo, a partir de uma conversão X desejada e da vazão de entrada no reator, considerando uma potência W_s necessária para a agitação, é possível calcular o U necessário seja para um trocador de calor ou para uma jaqueta externa ou serpentina.

3.2 Transferência de calor

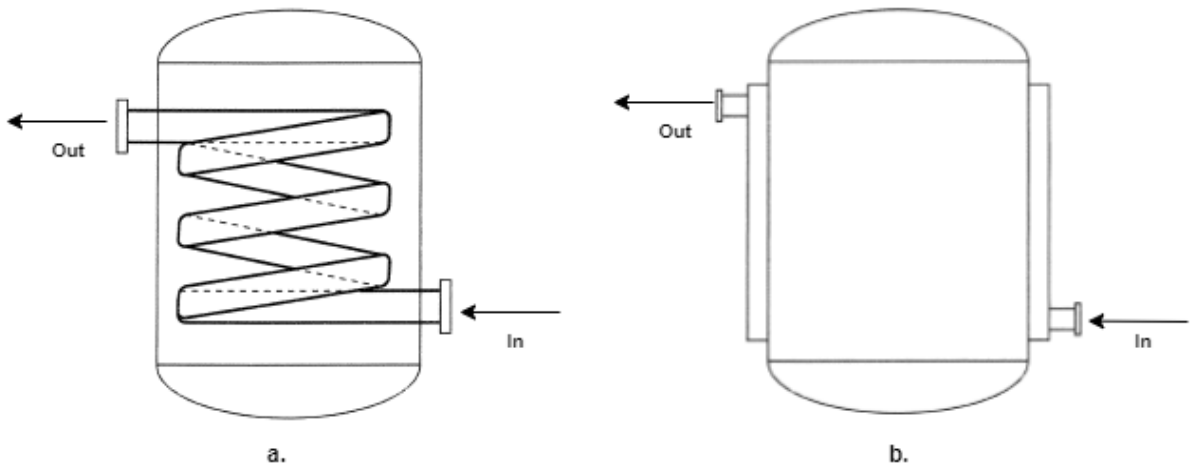
É importante mencionar a taxa de transferência de calor, Q_c , que pode ser expressa pela lei de Newton sobre transferência de calor da seguinte forma:

$$Q_c = UA\Delta T \quad (47)$$

U depende das propriedades do fluido, dos parâmetros de operação do agitador e da configuração do sistema.

Normalmente, a transferência de calor em reatores agitados pode ser realizada tanto através de uma jaqueta externa no vaso quanto por meio de serpentinas internas.

Figura 5. Representação de reatores agitados: a. Com uma serpentina interna; b. Com uma jaqueta externa



Fonte: Autor, 2024

Na tabela abaixo, tem-se uma comparação entre as duas estratégias e suas vantagens e desvantagens para auxiliar na escolha de quando utilizá-las.

Tabela 2. Comparação entre Jaqueta externa e Serpentina interna

Jaqueta externa	
Vantagens	Desvantagens
Menor risco de contaminação para a fabricação de produtos sensíveis	Menor desempenho de transferência de calor em comparação com serpentinas
Adequado para materiais com reologia complicada	Maior espessura de parede e menor área de superfície resultam em menor eficiência térmica
Menor probabilidade de contato entre o fluido de resfriamento e a massa reativa	Diminuição da relação área/volume com o aumento da escala, especialmente para reações exotérmicas
Serpentina interna	
Vantagens	Desvantagens

<p>Maior área de superfície disponível para transferência de calor, o que pode ser útil para reações exotérmicas intensas</p>	<p>Maior risco de contaminação devido a superfícies adicionais que exigem limpeza.</p>
<p>Possibilidade de instalação de uma grande área de superfície em um espaço restrito</p>	<p>Mais propenso a formação de uma "parede falsa" se as bobinas forem compactadas muito firmemente</p>
	<p>Limitações na seleção de designs de agitadores devido à presença de bobinas no interior do vaso</p>

Para o caso da jaqueta externa, a transferência de calor entre o fluido na jaqueta e o conteúdo do tanque ocorre por condução e convecção forçada. A resistência à transferência de calor é uma combinação das resistências através das diferentes seções. Utilizando a teoria clássica do filme e a condução de calor através de camadas compostas, o coeficiente global de transferência de calor pode ser expresso como segue:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_i} + \frac{e_i}{\lambda_i} + \frac{1}{\lambda_e} + \frac{e_e}{h_e} \quad (48)$$

3.2.1 Área de troca térmica

Para esse cálculo, é feita a hipótese de uma geometria cilíndrica para o reator. Dessa maneira, tem-se:

$$A = A_{base} + A_{lateral} \quad (49)$$

Com a hipótese de que $H/T = 1$, ou seja, $H = T$:

$$A = \frac{\pi}{4}T^2 + \pi TH = \frac{\pi}{4}T^2 + \pi T^2 \quad (50)$$

$$A = \frac{5\pi}{4}T^2 \quad (51)$$

3.3 Metodologia utilizada na ferramenta de cálculo

Para a ferramenta de cálculo foi decidido utilizar a seguinte abordagem:

Inicialmente, são realizados os cálculos a partir dos dados de entrada e então é verificada a variação de temperatura dentro do reator, utilizando os conceitos de

tempo característico de transferência de calor. Dessa forma, é verificado se o valor encontrado está de acordo com o especificado ou se é possível controlar essa temperatura somente com a velocidade de rotação N. Caso contrário, utiliza-se uma segunda abordagem, a utilização de uma jaqueta externa, serpentina interna ou trocador de calor.

3.4 Diferença de temperatura no interior do reator

Também são realizados cálculos para verificar se as diferenças de temperatura no interior do reator estão de acordo com as especificações desejadas.

Dessa forma, a partir do valor de N encontrado na seção sobre transferência de massa, calculamos o número de Reynolds e o número de Prandtl, e usamos a correlação abaixo para encontrar o valor de h.

De acordo com [1], as correlações para o cálculo do coeficiente de transferência de calor do lado do processo químico são todas da seguinte forma:

$$Nu = K * Re^a * Pr^b * \mu_r^c * G_c \quad (51)$$

Onde Gc representa uma correção geométrica. Assim:

$$Re > 400: Nu = \frac{h_i T}{\lambda_i} = 0,74 * Re^{0,67} * Pr^{0,33} * \mu_r^{0,14} \quad (52)$$

$$Re < 400: Nu = \frac{h_i T}{\lambda_i} = 0,54 * Re^{0,67} * Pr^{0,33} * \mu_r^{0,14} \quad (53)$$

Então, calcula-se o valor de U usando a equação da resistência térmica (48). Os cálculos dos coeficientes externos são negligenciados para simplificar, então assume-se que a resistência à transferência do lado do fluido é negligenciável.

E dessa maneira, calcula-se o tempo característico de transferência de calor com a seguinte fórmula [5]:

$$t_{reac} = \frac{\rho C_p V}{UA} \quad (54)$$

por fim, calcula-se o valor do $\Delta T_{adiabático}$ e do ΔT :

$$\Delta T_{adiab} = \frac{-\Delta H_r C_0}{\rho C_p} \quad (55)$$

$$\Delta T = \Delta T_{adiab} \left(\frac{t_{reac}}{t_{calor}} \right)^{\frac{t_{reac}}{t_{calor} - t_{reac}}} \quad (56)$$

t_{reac} é o tempo de reação e refere-se ao tempo necessário para que uma reação química atinja seu estado de equilíbrio ou uma determinada conversão de reagentes em produtos.

t_{calor} é o tempo característico de transferência de calor que é uma medida do tempo que um sistema leva para alcançar um determinado estado térmico após uma mudança nas condições de temperatura.

E então é verificado se o valor encontrado está de acordo com a variação máxima especificada.

3.5 CSTR com Serpentina interna

Também existem casos em que as reações são altamente exotérmicas ou endotérmicas e então, para essas situações a utilização de trocadores de calor na forma de uma serpentina interna é a melhor alternativa. Dessa forma, pode-se utilizar a equação 46 para se chegar ao valor de U necessário para alcançar a conversão desejada.

Portanto, para um trocador com alta vazão de fluido refrigerante. Sendo X a conversão do reator, temos a partir da equação 46 :

Sendo o calor transferido pelo trocador de calor : $Q = UA(T - T_a)$.

T_a é a temperatura ambiente.

$$X = \frac{\left(\frac{UA(T - T_a)}{F_{A0}} \right) - Ws + \sum \theta_i C_{pi}(T - T_0)}{-\Delta H_r} \quad (47)$$

4. Exemplo de aplicação

Exemplo 1 - Concepção de um reator agitado para a dissolução de um sal na água

Para mostrar a utilização da ferramenta de dimensionamento, foram realizados os cálculos para a estimativa da velocidade de agitação de um tanque agitado.

Esses cálculos foram solicitados no contexto de um projeto de cliente destinado a dissolver um sal na água. Por questões de confidencialidade, não é possível indicar o sal nem o nome da empresa para a qual foi realizado o projeto.

Os seguintes dados foram utilizados para inicializar a ferramenta de cálculo:

Vazão total de entrada	$1,74 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$
Densidade do líquido	997 kg/m^3
Densidade do sólido	2710 kg/m^3
Tamanho das partículas	$2,0 \text{ mm}$
Viscosidade do líquido	1 cP
Tempo de residência	1 h
Entalpia de reação (dissolução)	-15 kJ/mol
Difusividade do sólido no líquido	$10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
Taxa de carregamento do sólido (X_{S-L})	$5,26$

Trata-se de um sistema heterogêneo do tipo S-L, então estamos usando a planilha correspondente.

Uma captura de tela dos dados inseridos na ferramenta está no Anexo 1.

A ferramenta calcula diretamente as informações sobre as dimensões do reator com as equações 2 e 3 explicadas anteriormente:

Volume	$0,000785 \text{ m}^3$
Diâmetro do reator	$0,1 \text{ m}$

No laboratório da Processium foi utilizado uma hélice com pás inclinadas com diâmetro indicado abaixo:

Diâmetro do agitador	$0,056 \text{ m}$
----------------------	-------------------

O anexo 2 contém a parte da planilha de cálculo referente aos cálculos sobre a geometria.

A potência necessária para a agitação e a velocidade de rotação calculada são:

Potência necessária para agitação	$0,37 \text{ W}$
Potência por volume	$0,47 \text{ kW/m}^3$
Velocidade mínima para colocar os sólidos em suspensão	$607,58 \text{ rpm}$
Velocidade de rotação do agitador	$911,37 \text{ rpm}$

Esses valores foram calculados conforme indicado nas equações e correlações 29 a 34 apresentadas anteriormente. No Anexo 4, há a tabela que se refere a esses cálculos.

O Anexo 6 é uma tabela de concepção que resume as principais informações dimensionadas para o reator.

Foram realizados testes no laboratório com um tanque agitado das mesmas dimensões para verificar qual velocidade de rotação é necessária para manter os sólidos em suspensão e distribuídos uniformemente na fase líquida. O valor de 900 rpm também foi encontrado experimentalmente para obter um meio onde os sólidos estão em suspensão e distribuídos uniformemente no sistema.

Em seguida, encontram-se as imagens da experiência realizada a uma velocidade de 500 rpm e a uma velocidade de 900 rpm.

Figura 6. Dissolução de um sal em água num tanque agitado a $N = 500$ rpm. A mancha escura no canto inferior esquerdo indica a presença do sólido no fundo do tanque e, portanto, não em suspensão (velocidade mínima calculada para a suspensão: ~ 600 rpm).



Fonte: Autor, 2023

Na imagem acima, podemos ver que os sólidos estão concentrados no fundo do recipiente e ainda não estão em suspensão, o que está de acordo com os cálculos efetuados, uma vez que a velocidade mínima calculada para suspender os sólidos foi de 600 rpm.

Figura 7. Dissolução de um sal em água num tanque agitado com $N = 900$ rpm. Os sólidos estão em suspensão e uniformemente distribuídos.



Fonte: Autor, 2023

A figura 13 mostra que os sólidos estão suspensos e presentes de forma homogênea na fase líquida.

Podemos, portanto, concluir que a ferramenta forneceu uma boa estimativa de dimensionamento inicial para este tanque agitado.

Pode-se encontrar no anexo 5 a tabela de cálculo referente à análise térmica. Foi encontrado um Delta de temperatura de $0,01\text{ }^{\circ}\text{C}$ no reator, o que está de acordo com o máximo especificado para um bom desempenho da reação. Dessa forma não foi necessário a utilização de um trocador de calor ou jaqueta externa.

5. Conclusão

Este trabalho se propôs a enfrentar o desafio de obter informações preliminares sobre o dimensionamento de reatores com o objetivo de adquirir respostas rápidas e eficazes durante um projeto. Através da análise aprofundada dos fundamentos teóricos que regem o comportamento e o desempenho dos reatores químicos, foi possível desenvolver uma ferramenta acessível e com

resultados sólidos que incorpora aspectos críticos como transferência de massa e de calor, representando um avanço no projeto de processos químicos.

O estudo começou com uma extensa revisão bibliográfica, que solidificou o embasamento teórico necessário para o dimensionamento de reatores que considerem simultaneamente os aspectos cinético e térmico. A ferramenta apresentada foi projetada para ser utilizada em uma plataforma amplamente conhecida e acessível, como o Excel, facilitando sua adoção por profissionais e acadêmicos da área.

A metodologia adotada para o desenvolvimento da ferramenta envolveu a seleção cuidadosa de correlações e modelos matemáticos, baseados em princípios fundamentais da engenharia química e validados por dados experimentais e literatura científica. Essa abordagem garantiu a precisão e a confiabilidade das estimativas geradas pela ferramenta.

A aplicabilidade da ferramenta foi demonstrada por meio de estudos de caso detalhados, onde foi possível observar sua flexibilidade e robustez em diversos cenários de dimensionamento. Esses estudos não só validaram a ferramenta mas também proporcionaram insights valiosos para seu aprimoramento contínuo.

Além disso, a ferramenta tem o potencial de acelerar o processo de design de reatores, promovendo inovações tecnológicas e melhorias na sustentabilidade dos processos químicos industriais.

Apesar dos resultados promissores, reconhece-se a existência de desafios e limitações que devem ser endereçados em futuros trabalhos. A expansão da ferramenta para incluir uma gama ainda maior de tipos de reatores e condições operacionais, bem como a integração com outras plataformas de modelagem e simulação mais avançadas, são algumas das direções sugeridas para pesquisa futura. Além disso, a realização de estudos experimentais para validar as previsões da ferramenta em escala piloto seria um passo importante para reforçar sua credibilidade.

Espera-se que as contribuições aqui apresentadas inspirem futuras pesquisas e inovações, contribuindo para o desenvolvimento de processos químicos mais eficientes, econômicos e sustentáveis.

6. Referências

- [1] Paul Edward L., Atiemo-Obeng Victor A., Kresta Suzanne M. **Handbook of Industrial Mixing**: Science and Practice. 2004.
- [2] ROUSTAN, Michel. **Agitation. Mélange - Caractéristiques des mobiles d'agitation**: j3802. Techniques de l'ingénieur, [S. l.], p. 1-16, 10 mar. 2005.
- [3] BAKKER, André; GATES, Lewis E. Chemical Engineering Progress: Viscous Mixing. [S. l.: s.n.], 1995. v. 91.
- [4] CHAUVEL, Alain; FOURNIER, Gilles; RAIMBAULT, Claude. Manuel d'évaluation économique des procédés. 2e édition. ed. [S. l.: s. n.], 2001.
- [5] Projet PROCIP – méthodologie détaillée
- [6] FROMENT, Gilbert; BISCHOFF, Kenneth; DE WILDE, Juray. Chemical Reactor Analysis and Design. 3rd. ed. [S. l.: s. n.], 2011.
- [7] Wakao N.; Kaguei S.; Funazkri, T.; Effect of fluid dispersion coefficients on particle to fluid heat transfer coefficient in packed beds – Correlation of Nusselt numbers. Chem. Eng. Sci. 34 (1979) 325-336.
- [8] Mears D.E., Role of axial dispersion in trickle-flow laboratory reactors, Chem. Eng. Sci. 26, (1971) 1361-1366.
- [9] Gierman, H., Design of laboratory hydrotreating reactors – Scaling down of trickle-flow reactors, Appl. Catal., 43 (1988) 277-286.
- [10] Ergun S., Fluid flow through packed columns, Chem. Eng. Progr. 48 (1952) 89-92.
- [11] Chu, C.F., K.M. Ng, Flow in packed tubes with a small tube to particle diameter ratio, AIChE. J. 35 (1989) 148-158.
- [12] A. KOUTINAS, Apostolis; CHATZIFRAGKOU, Afrodifi; KOPSAHELIS, Nikolaos; PAPANIKOLAOU, Seraphim; K. KOOKOS, Ioannis. Design and techno-economic evaluation of microbial oil production as a renewable resource for biodiesel and oleochemical production. Fuel, [S. l.], p. 566-577, 2014.
- [13] TRAMBOUZE Pierre; EUZEN Jean-Paul. Les Réacteurs chimiques de la conception à la mise en œuvre. Editions TECHNIP, 2002.

[14] THE CHEMICAL Engineering Plant Cost Index. [S. l.], 25 ago. 2023. Disponível em: <https://www.chemengonline.com/pci-home>. Acesso em: 25 ago. 2023.

[15] FOGLER, H. SCOTT. Elementos de Engenharia das Reações Químicas. Quarta edição. ed. [S. l.: s. n.], 2009.

7. Anexos

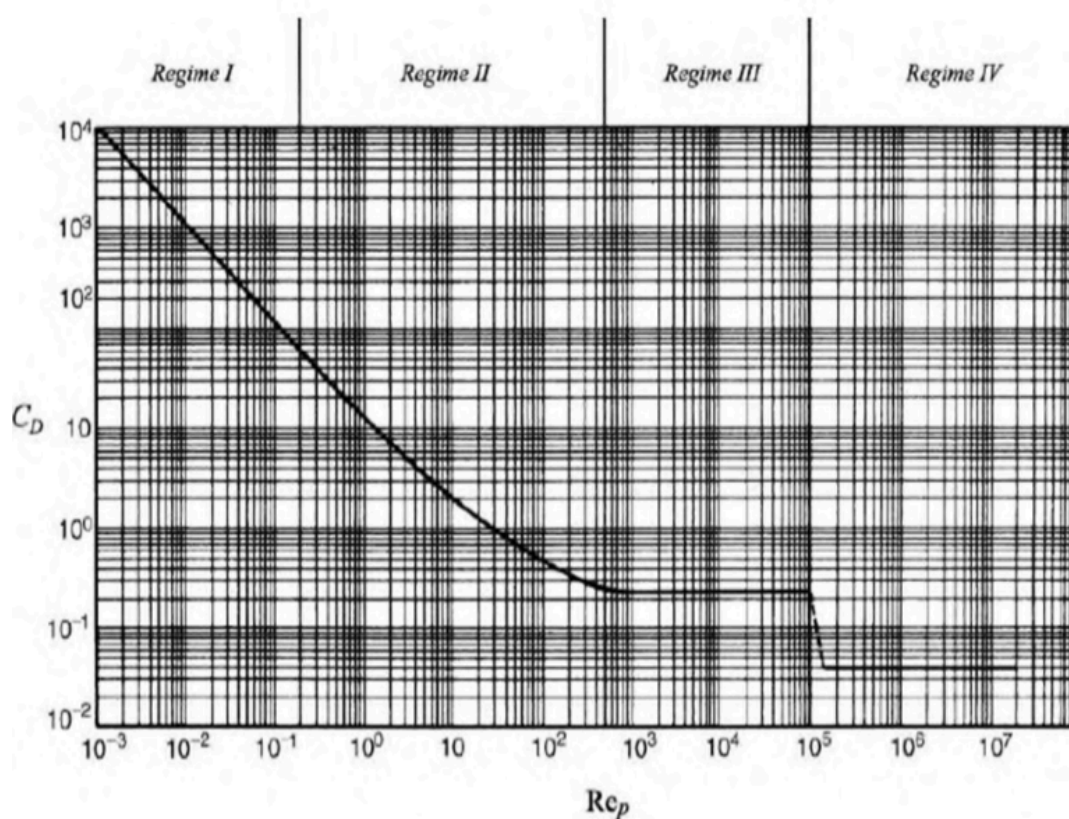
- Anexo 1 - Dados de entrada do exemplo de cálculo sistema S-L (exemplo 1)

Operating conditions			
g	Gravity (m/s ²)	9,81	
	Temperature (°C)	25,00	
	Pressure (Pa)	100000,00	
	Total flow rate (m ³ /s)	1,74E-07	
Reaction parameters			
	Residence time (s)	3600,00	
	Conversion	0,80	
ΔH_{reac}	Enthalpy reaction (kJ/mol)	-15,00	
	ΔT_{max} accepted (°C)	10,00	
C_D	Inlet concentration (mol/m ³)	100,00	
Fluid 1 - Continuous phase			
ρ_c	Density 1 (kg/m ³)	997,00	
μ_c	Viscosity 1 (Pa.s)	1,00E-03	
Fluid 2 - Dispersed phase			
ρ_d	Density 2 (kg/m ³)	2710,00	
D_m	Molecular diffusivity 2 (m ² /s)	1,00E-09	
	Bulk concentration (g/g solution)	0,01	
ϕ	Volum fraction of dispersed phase	3,68E-03	
d	Particle diameter (m)	2,00E-03	
Solveur			
Rep0	Initial estimated Rep	702,12	
	(Rep0-Rep)^2	0,00	
C_D	Drag coefficient	0,36	
Fixed parameters of geometry			
H/T	Ratio between height and tank diameter	1,00	
D/T	Ratio between the stirrer diameter and tank diameter	0,56	0,3 < D/T < 0,7
b/T	Ratio between the baffle width and the tank diameter	0,10	0,1
Y/T	Ratio between distance from agitator to tank bottom and tank diameter	0,40	0,3 < Y/T < 0,7

- Anexo 2 - Cálculos da geometria do reator do exemplo de cálculo sistema S-L (exemplo 1)

Reactor dimensions		
V	Volume (m ³)	0,000785
T	Diameter (m)	0,10
t	Characteristic reaction time (s)	900,00
θ	Mixing time (s)	90,00
Y	Distance agitator/grill bottom (m)	0,04
H	Useful height of the reactor (m)	0,10
Stirrer dimensions		
D	Stirrer diameter (m)	0,056
Type of Agitator	Propeller with thin profile blades type HPM 40	
Np	Nombre de puissance	0,19

- Anexo 3 - Cálculo do Coeficiente de arrasto (exemplo1)



Rep	Cd
<0,3	0,034182422
0,3<Rep<1000	0,362515583
1000<Rep<350000	0,445
Handbook of Industrial Mixing: Science and Practice, 2004. (p552)	

- Anexo 4 – Cálculo dos limites de transferência de massa, da potência necessária para o agitador e da velocidade de rotação no sistema S-L (exemplo 1)

Stirrer dimensions			
D	Stirrer diameter (m)	0,056	
Type of Agitator	Propeller with thin profile blades type HPM 40		
Np	Nombre de puissance	0,19	
Mass Transfer			
t_{trans}	Transfer time	90,00	
	$k_s a_{LS}$	0,01	
a_{LS}	Interfacial air (m^{-1})	11,04	
k_s	Transfer mass coefficient (Calculated)	1,01E-03	
Sc_c	Schmidt number	1003,01	
V_t	Terminal velocity (m/s)	0,35	
Re_p	The particle Reynolds number	702,12	
Sh	Sherwood number	163,12	
k_s	Transfer mass coefficient (Correlation)	8,16E-05	
X	Solid loading parameter	5,26	
S	Dimensionless number function of impellers type	2,72	
N_{js}	Just suspended impeller speed (s-1)	10,13	
N	The impeller speed (s^{-1})	15,19	$N = 1,5 \cdot N_{js}$
N	The impeller speed (rpm)	911,37	
The correlation is not applicable to solid-liquid systems where the terminal velocity is small $\ll 0,0005$ m/s.			
P	Power input by the impeller (W)	0,37	
P	Power input by the impeller (kW)	3,65E-04	
P/V	Power input by the impeller per volume (kW/m^3)	0,47	

- Anexo 5 - Cálculo dos limites de transferência de calor para o sistema S-L (exemplo 1)

Heat Transfer			
Re	Reynolds number	47475,35	
Pr	Prandtl number	21,00	
λ_L	Thermal conductivity of liquid (W/(m.K))	0,20	
λ	Thermal conductivity (W/(m.K))	45,00	Steel value
e_i	Thickness of the grille (m)	0,01	
h_i	Heat transfer coefficient (W/m^2K)	1236185,63	
U	Global heat transfer coefficient $W/(K.m^2)$	5599,52	
A	Exchange area (m^2)	0,04	
Cp	Specific heat ($J/(kg.K)$)	4200,00	
tchaleur	Heat transfer time (s)	14,95	
	$t_{chaleur}/t$	0,02	
	ΔT_{adiab} ($^{\circ}C$)	0,36	
	ΔT ($^{\circ}C$)	0,01	

- Anexo 6 - Aba de Design para o sistema S-L (Exemplo 1)

Regime/System		Reactor dimensions	
SL		V	Volume (m ³)
Reaction parameters		T	Diameter (m)
Residence time (s)	3500,00	H	(m)
Conversion	0,80	Y	(m)
Operating conditions		b	Width of the baffles (m)
Temperature (°C)	25,00	θ	Mixing time (s)
Pressure (Pa)	100000,00	Operating conditions	
Total flow rate (m ³ /s)	1,74E-07	N	Stirrer rotation speed (s ⁻¹)
Fluid physical properties		N	Stirrer rotation speed (rpm)
Density of continuous phase (kg/m ³)	997,00	P	Power input by the impeller (W)
Viscosity (Pa.s)	1,00E-03	P	Power input by the impeller (kW)
Type of Agitator		ΔT (°C)	0,01
Propeller with thin profile blades type HPM 40		Stirrer dimensions	
Fixed parameters		D	Stirrer diameter (m)
H/T	1,00	CAPEX	
D/T	0,56	Total price of reactor (xk)	
b/T	0,10	GPEX	
Y/T	0,40	Total price (€/t)	
Legend			
To input			

