UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Nicole Pan Tavares

Metodologia de Automação para Simulação em CFD: aplicação na degradação de tricloroetileno via fotocatálise heterogênea

Florianópolis - SC
2025

Nicole Pan Tavares

Metodologia de Automação para Simulação em CFD: aplicação na degradação de tricloroetileno via fotocatálise heterogênea

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do título de mestre em Engenharia Química.
Orientadora: Prof.^{a} Dr.^{a} Cíntia Soares
Coorientador: Prof. Dr. Natan Padoin

Florianópolis - SC
2025

Ficha catalográfica gerada por meio de sistema automatizado gerenciado pela BU/UFSC.
Dados inseridos pelo próprio autor.

Tavares, Nicole Pan
Metodologia de Automação para Simulação em CFD : aplicação na degradação de tricloroetileno via fotocatálise heterogênea / Nicole Pan Tavares ; orientador, Cíntia Soares, coorientador, Natan Padoin, 2025.
174 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Florianópolis, 2025.

Inclui referências.

1. Engenharia Química. 2. Fluidodinâmica computacional. 3. Automação. 4. Reator NETmix. 5. Fotocatálise. I. Soares, Cíntia. II. Padoin, Natan. III. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. IV. Título.

Nicole Pan Tavares

Metodologia de Automação para Simulação em CFD: aplicação na degradação de tricloroetileno via fotocatálise heterogênea

O presente trabalho em nível de mestrado foi avaliado e aprovado por banca examinadora composta pelos seguintes membros:

Prof. Rafael F. L. de Cerqueira, Dr.
Instituição Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC)

Karolline Ropelato, Dr(a).
Instituição ESSS

Certificamos que esta é a **versão original e final** do trabalho de conclusão que foi julgado adequado para obtenção do título de mestre em Engenharia Química.

Documento assinado digitalmente
Agenor Furigo Junior
Data: 07/10/2025 13:39:58-0300
CPF: ***.789.438-**
Verifique as assinaturas em https://v.ufsc.br

Coordenação do Programa de Pós-Graduação: Prof. Dr. Agenor Furigo Junior

Documento assinado digitalmente
Cintia Soares
Data: 07/10/2025 07:31:24-0300
CPF: ***.401.629-**
Verifique as assinaturas em https://v.ufsc.br

Prof.^{a} Dr.^{a} Cíntia Soares
Orientadora

Florianópolis - SC, 2025.

Dedico este trabalho a todos que se dedicam à ciência e ao conhecimento, iluminando o mundo com a luz da sabedoria e guiando a humanidade rumo ao progresso.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de expressar minha profunda gratidão à minha família, por todo o incentivo e apoio ao longo da vida, especialmente por me encorajar a seguir o caminho da ciência.

Agradeço, de coração, à minha esposa, por estar sempre ao meu lado durante essa jornada, oferecendo apoio, paciência e incentivo incondicional.

Aos meus amigos, que tornaram essa caminhada muito mais leve e significativa, meu muito obrigada por cada momento compartilhado.

Minha sincera gratidão aos meus orientadores, Drª. Cíntia Soares e Dr. Natan Padoin (UFSC), pela valiosa orientação, apoio constante e encorajamento ao longo deste projeto. Aos colegas e amigos do LabMAC (Laboratório de Materiais e Computação Científica), agradeço pela parceria, colaboração e amizade ao longo do percurso.

Estendo meus agradecimentos a todos os professores e colaboradores do Departamento de Engenharia Química e de Alimentos da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC) pelo conhecimento compartilhado e suporte ao longo da minha formação.

Agradeço especialmente à Ansys Inc. e à ESSS, bem como às suas equipes, pelo apoio técnico e pela disponibilização das licenças de software que viabilizaram este trabalho.

Por fim, sou grata à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo apoio essencial ao desenvolvimento desta pesquisa.

"Todo grande progresso da ciência resultou de uma nova audácia da imaginação"

(John Dewey)

RESUMO

A simulação fluidodinâmica computacional (CFD) tem se consolidado como uma ferramenta essencial para a otimização de processos químicos e ambientais, permitindo modelar e analisar fenômenos complexos de forma controlada e eficiente. No contexto da degradação de poluentes gasosos, a fotocatálise surge como uma tecnologia promissora, sendo aplicada na remoção de compostos tóxicos, como o tricloroetileno (TCE), utilizando catalisadores como o dióxido de titânio (TiO_2). No entanto, a otimização dos reatores fotocatalíticos ainda representa um desafio, exigindo metodologias avançadas para análise e aprimoramento dos sistemas. Este trabalho propõe uma metodologia automatizada para simulações CFD, focada na otimização paramétrica do reator fotocatalítico NETmix aplicado à degradação do tricloroetileno. A abordagem automatizada possibilitou a geração de geometrias diversas, além de malha numérica e configuração do solver de maneira eficiente, reduzindo significativamente o tempo de processamento e minimizando erros humanos. Foram avaliadas variações geométricas do reator, considerando parâmetros como número de linhas, raio das câmaras e diâmetro dos canais, com o objetivo de identificar a configuração mais eficiente para a conversão do poluente. Os resultados evidenciaram que a distribuição da irradiância e a degradação do tricloroetileno são diretamente influenciadas pelos parâmetros geométricos. Modelos com menor número de linhas apresentaram maior irradiância média, enquanto configurações com 29 linhas demonstraram melhor eficiência na conversão do poluente devido ao tempo de residência adequado. Além disso, modelos com canais horizontais (CH) apresentaram maior eficiência global e distribuição de luz de forma mais homogênea, favorecendo o processo fotocatalítico. A degradação do TCE mostrou-se mais sensível ao raio das câmaras do que ao diâmetro dos canais, reforçando a importância do equilíbrio entre irradiância e tempo de residência na otimização da geometria do reator. A metodologia desenvolvida aprimora o processo de modelagem e simulação e também fornece diretrizes valiosas para o desenvolvimento de reatores fotocatalíticos mais eficientes. Os achados deste estudo podem ser aplicados em investigações futuras, contribuindo para a inovação em processos fotocatalíticos e para o avanço de soluções sustentáveis na mitigação da poluição ambiental.

Palavras-chave: fluidodinâmica computacional, reator NETmix, reatores fotocatalíticos, automação, parametrização.

ABSTRACT

Computational fluid dynamics (CFD) simulation has become an essential tool for optimizing chemical and environmental processes, enabling the controlled and efficient modeling and analysis of complex phenomena. In the context of gaseous pollutant degradation, photocatalysis emerges as a promising technology, applied to the removal of toxic compounds such as trichloroethylene (TCE) using catalysts like titanium dioxide (TiO_2). However, optimizing photocatalytic reactors remains a challenge, requiring advanced methodologies for system analysis and improvement. This study proposes an automated methodology for CFD simulations, focusing on the parametric optimization of the NETmix photocatalytic reactor applied to trichloroethylene degradation. The automated approach enabled the efficient generation of geometries, numerical meshing, and solver configuration, significantly reducing processing time and minimizing human errors. Geometric variations of the reactor were evaluated, considering parameters such as the number of lines, chamber radius, and channel diameter to identify the most efficient configuration for pollutant conversion. The results showed that irradiance distribution and trichloroethylene degradation are directly influenced by geometric parameters. Models with fewer lines exhibited higher average irradiance, while configurations with 29 lines demonstrated better pollutant conversion efficiency due to the appropriate residence time. Additionally, models with horizontal channels (CH) presented higher overall efficiency and more homogeneous light distribution, favoring the photocatalytic process. TCE degradation was more sensitive to chamber radius than to channel diameter, reinforcing the importance of balancing irradiance and residence time when optimizing reactor geometry. The developed methodology enhances the modeling and simulation process and also provides valuable guidelines for developing more efficient photocatalytic reactors. The findings of this study can be applied in future research, contributing to innovation in photocatalytic processes and advancing sustainable solutions for environmental pollution mitigation.

Keywords: computational fluid dynamics, NETmix reactor, photocatalytic reactors, automation, parametrization.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Linguagens de programação mais utilizadas em 2024 29
Figura 2 – Diferentes dimensões e geometrias das células de malha numérica . . . 35
Figura 3 – Mecanismo da fotocatálise heterogênea 42
Figura 4 – Faixas de onda UV, luz visível e infravermelho 43
Figura 5 – Componentes de um reator de placa 45
Figura 6 – Componentes de um reator de disco giratório *spinning disk*) 46
Figura 7 – Estrutura das câmaras e canais do reator NETmix 50
Figura 8 – Representação esquemática das três etapas metodológicas desenvolvidas neste trabalho 61
Figura 9 – Representação tridimensional de uma célula unitária do reator NETmix, composta câmaras de mistura interconectadas e canais de fluxo arranjados à 45º em relação ao eixo X 63
Figura 10 – Representação da distribuição de linhas e colunas nos submodelos do reator NETmix desenvolvidos neste trabalho. Onde as linhas são paralelas ao escoamento, definindo o comprimento do reator e interferindo no tempo de residência, enquanto as colunas determinam a quantidade de entradas e saídas, afetando a distribuição do fluxo 63
Figura 11 – Representação esquemática da disposição estruturada de câmaras paralelas e diagonais em um plano cartesiano bidimensional. 64
Figura 12 – Principais parâmetros considerados na parametrização: (a) parâmetros de distância e abertura dos canais de conexão, onde "e"representa a largura dos canais; (b) diâmetros das câmaras de mistura, onde D1 representa o diâmetro das câmaras paralelas e D2 representa o diâmetro das câmaras diagonais 65
Figura 13 – Representação dos canais de fluxo que interligam as câmaras de mistura, onde os canais diagonais são dispostos à 45º do eixo X e os canais horizontais ficam à 0 graus do eixo X 66
Figura 14 – Representação esquemática do comprimento dos canais no modelo NETmix. O comprimento do canal (p) e a distância de deslocamento (d) são parâmetros geométricos-chave que definem a extensão dos canais de conexão entre as câmaras. 67

Figura 15 – Distribuição das linhas e colunas do reator em relação ao fluxo, a variação do número de linhas define o comprimento do reator e interfere no tempo de residência do poluente, sendo um dos parâmetros geométricos principais na variação paramétrica dos modelos 68
Figura 16 – Mecanismos de iluminação no reator NETmix. (a) iluminação de lado posterior (BSI), onde o catalisador é depositado na superfície superior do reator e iluminado de cima. (b) iluminação de lado frontal (FSI), onde o catalisador é colocado na superfície inferior do reator, com a luz penetrando através do reagente em escoamento. 70
Figura 17 – Representação detalhada do reator NETmix, incluindo sua estrutura metálica, vidro superior e conjunto de LEDs. 71
Figura 18 – Representação esquemática do fluxo de automação por meio de Softwares da plataforma Ansys, incluindo geração geométrica, malha numérica e *solver* numérico 73
Figura 19 – Diagrama da da geração de *scripts* e geometrias através da escolha de parâmetros físicos, com verificação das restrições de construção de cada modelo. 75
Figura 20 – Representação esquemática do fluxo de trabalho automatizado para a geração de geometrias do reator NETmix. O algoritmo itera sobre um conjunto de parâmetros predefinidos, criando e salvando sistematicamente *scripts* de geometria para agilizar o processo de projeto. Essa abordagem permite a geração eficiente de múltiplas configurações, minimizando a intervenção manual. 84
Figura 21 – Adição de materiais para simulação no *software Ansys Fluent*: (a) adição de materiais via GUI, (b) adição de materiais no código desenvolvido com uso de biblioteca *PyFluent* 87
Figura 22 – Representação visual das condições de contorno aplicadas aos submodelos do reator NETmix no estudo de caso da degradação de tricloroetileno via fotocatálise heterogênea 89
Figura 23 – Distribuição do conjunto de LED's para cada uma das dimensões dos submodelos do reator NETmix gerados: (a) modelos de 19 linhas, (b) modelos de 29 linhas, (c) modelos de 39 linhas 94

Figura 24 – Geometria do submodelo 39C - CH do reator NETmix: (a) vista isométrica, (b) vista superior 99
Figura 25 – Parâmetro de qualidade skewness para 3 submodelos do reator NETMIX: (a) modelo 29C – CH, (b) modelo 39C – CH, (c) modelo 19A – CH 103
Figura 26 – Parâmetro de qualidade ortogonal para 3 submodelos do reator NETMIX: (a) modelo 39C – CH, (b) modelo 29C – CH, (c) modelo 19A – CH 104
Figura 27 – Mapa de correlação entre parâmetros geométricos e resultados simulados: valores positivos representam correlação diretamente proporcional enquanto valores negativos são correlações inversamente proporcionais, valores próximos de zero representam baixa correlação, onde o parâmetro não afeta o resultado 107
Figura 28 – Irradiância média em função do modelo e quantidade de linhas dos submodelos 110
Figura 29 – Resultado do contorno do perfil de irradiância em submodelos sem canais horizontais (SH): (a) no modelo de 19 linhas 19A - SH, (a) no modelo de 29 linhas 29A - SH e (c) no modelo de 39 linhas 39A - SH . 111
Figura 30 – Resultado do contorno do perfil de irradiância em submodelos com canais horizontais (CH): (a) no modelo de 19 linhas 19A - CH, (a) no modelo de 29 linhas 29A - CH e (c) no modelo de 39 linhas 39A - CH . 112
Figura 31 – Resultado do contorno do perfil de irradiância nos submodelos de 19 linhas, ampliação da imagem nos canais horizontais dos submodelos evidenciando a baixa absorção de fótons nessa região: (a) submodelo 19A - CH, (b) submodelo 19B - CH e (c) submodelo 19C - CH 112
Figura 32 – Eficiência de absorção de fótons, homogeneidade da luz e eficiência Global para os modelos estudados 113
Figura 33 – Conversão do poluente em razão da irradiância média 117
Figura 34 – Conversão do poluente em relação à quantidade de linhas de cada um dos submodelos 118
Figura 35 – Conversão de tricloroetileno em relação aos parâmetros: raio das câmaras e diâmetro dos canais 119
Figura 36 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 29C - CH 120

Figura 37 – Modelo 29A - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 146
Figura 38 – Modelo 29A - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 146
Figura 39 – Modelo 29B - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 146
Figura 40 – Modelo 29B - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 146
Figura 41 – Modelo 29C - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 147
Figura 42 – Modelo 29C - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 147
Figura 43 – Modelo 39A - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 147
Figura 44 – Modelo 39A - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 147
Figura 45 – Modelo 39B - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 147
Figura 46 – Modelo 39B - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 147
Figura 47 – Modelo 39C - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 147
Figura 48 – Modelo 39C - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 147
Figura 49 – Modelo 19A - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 147
Figura 50 – Modelo 19A - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 147
Figura 51 – Modelo 19B - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 148
Figura 52 – Modelo 19B - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 148

Figura 53 – Modelo 19C - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 148
Figura 54 – Modelo 19C - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior 148
Figura 55 – Índice de convergência de malha para os modelos 39A - SH e 39C - CH: (a), (b) e (c) são os resultados para eficiência de absorção global, pressão e conversão de poluente do modelo 39A - SH, respectivamente; (d), (e) e (f) são os resultados para eficiência de absorção global, pressão e conversão de poluente do modelo 39C - CH, respectivamente. 150
Figura 56 – Perfil de irradiância média no modelo 29A - SH 151
Figura 57 – Perfil de irradiância média no modelo 29A - CH 151
Figura 58 – Perfil de irradiância média no modelo 29B - SH 151
Figura 59 – Perfil de irradiância média no modelo 29B - CH 151
Figura 60 – Perfil de irradiância média no modelo 29C - SH 152
Figura 61 – Perfil de irradiância média no modelo 29C - CH 152
Figura 62 – Perfil de irradiância média no modelo 39A - SH 152
Figura 63 – Perfil de irradiância média no modelo 39A - CH 152
Figura 64 – Perfil de irradiância média no modelo 39B - SH 152
Figura 65 – Perfil de irradiância média no modelo 39B - CH 152
Figura 66 – Perfil de irradiância média no modelo 39C - SH 152
Figura 67 – Perfil de irradiância média no modelo 39C - CH 152
Figura 68 – Perfil de irradiância média no modelo 19A - SH 152
Figura 69 – Perfil de irradiância média no modelo 19A - CH 152
Figura 70 – Perfil de irradiância média no modelo 19B - SH 152
Figura 71 – Perfil de irradiância média no modelo 19B - CH 152
Figura 72 – Perfil de irradiância média no modelo 19C - SH 152
Figura 73 – Perfil de irradiância média no modelo 19C - CH 152
Figura 74 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 29A - SH 153
Figura 75 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 29A - CH 153
Figura 76 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 29B - SH 153
Figura 77 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 29B - CH 153
Figura 78 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 29C - SH 154
Figura 79 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 29C - CH 154

Figura 80 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 39A - SH 154
Figura 81 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 39A - CH 154
Figura 82 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 39B - SH 154
Figura 83 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 39B - CH 154
Figura 84 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 39C - SH 154
Figura 85 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 39C - CH 154
Figura 86 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 19A - SH 154
Figura 87 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 19A - CH 154
Figura 88 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 19B - SH 154
Figura 89 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 19B - CH 154
Figura 90 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 19C - SH 154
Figura 91 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 19C - CH 154
Figura 92 – Conjuntos de dez geometrias geradas automaticamente com diferentes arranjos de pilares internos. As variações incluem alterações no espaçamento, número de fileiras e colunas de pilares. Além da variação da estrutura do reator, como altura, largura e comprimento do reator. . . 156

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Valores da variação dos parâmetros de importância para escolha dos modelos 81

Tabela 2 – Parâmetros geométricos do reator NETmix mantidos fixos para a geração das geometrias. 82

Tabela 3 – *Parâmetros geométricos obtidos através da variação dos parâmetros de interesse para geração dos submodelos do reator NETmix* 83

Tabela 4 – Valores dos parâmetros físico-químicos da espécie química tricloroetileno 87

Tabela 5 – Condições de contorno adotadas no estudo de degradação do tricloroetileno (TCE) para todos os submodelos de reatores NETMIX 89

Tabela 6 – Propriedades dos LED's para a simulação no software *Ansys Speos* . . 95

Tabela 7 – Parâmetros geométricos e tempos de geração CAD automatizada dos submodelos NETmix 99

Tabela 8 – Tempo de geração de malha para cada modelo utilizando o método *Multizone* 101

Tabela 9 – Tempo de simulação CFD dos submodelos do reator NETmix com automação do *solver* 105

Tabela 10 – Resultados ópticos obtidos nas simulações no *Ansys Speos* para os submodelos NETmix 109

Tabela 11 – Parâmetros geométricos e irradiância média dos modelos 39B e 39C . . 114

Tabela 12 – Parâmetros de saída nas simulações CFD 116

Tabela 13 – Tamanhos de elementos de malha utilizados e quantidade de elementos gerados para os submodelos 39A - SH e 39C - CH do reator NETmix no teste GCI 149

Tabela 14 – Parâmetros geométricos utilizados na geração dos modelos do reator *micropillar* apresentados na Figura 89 157

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

API	Application Programming Interface
BSI	Iluminação de lado posterior
CAD	Computer Aided Design
CAE	Computational Aided Engineering
CFD	Computational Fluid Dynamics
CH	Com canais horizontais
CSTR	Reator perfeitamente agitado
EDPs	Equações diferenciais parciais
FSI	Iluminação de lado frontal
GCI	Índice de Convergência de Grade
IDE	Ambientes de desenvolvimento integrado
PCB	Printed Circuit Board
PFR	Plug-Flow Reactor
SH	Sem canais horizontais
TCE	Tricloroetileno
TUI	Interface de texto do usuário
UDF	User defined Function
UV	Ultravioleta

LISTA DE SÍMBOLOS

L	Distância diagonal do ponto central de duas câmaras
e	Diâmetro dos canais em (mm)
Θ	Ângulo de abertura dos canais
D_1	Diâmetro das câmaras paralelas
D_2	Diâmetro das câmaras diagonais
p	Comprimento total de um canal
d	Altura da seção do círculo
A_{ch}	Área real do retângulo (canal)
S_c	subtração das áreas de seção do círculo
A_c	Área do círculo
r_d	Raio de câmaras diagonais
r_p	Raio de câmaras paralelas
H	Distância horizontal do ponto central de duas câmaras
a	Parâmetro de segregação
n_x	Numero de linhas do reator
CC_{ratio}	Razão entre o diâmetro das câmaras e o diâmetro dos canais
d_c	Diâmetro dos canais
ρ	Densidade (kg/m3)
ν	Velocidade (m/s)
P	Pressão (Pa)
τ	Tensor de tensões (Pa)
C_{tce}	Concentração de tricloroetileno (kmol/m3)
φ	Eficiência de absorbância de fótons
γ	uniformidade de irradiância
η	Eficiência global
A_{cat}	Área de catalisador (m^2)
N_L	Numero de LEDs
φ	Potência emitida por cada led (W)
$\bar{E}_a$	Irradiância média sobre a superfície (W/m^2)
P_e	Pressão na entrada do reator (Pa)
P_s	Pressão na saída do reator (Pa)

$y_{e_{tce}}$	Fração molar de tricloroetileno na entrada
$y_{e_{tce}}$	Fração molar de tricloroetileno na saída
hl	Distância entre os LED's e o vidro de borosilicato

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 22
1.1 ESTRUTURA DO TRABALHO 24
1.2 OBJETIVOS 25
1.2.1 Objetivo Geral 25
1.2.2 Objetivos Específicos 25
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA 27
2.1 AUTOMAÇÃO 27
2.1.1 CAE 27
2.1.2 Linguagens de Programação 28
2.1.2.1 *Python* 29
2.1.2.1.1 Visual Studio Code 30
2.1.3 Simulação em CFD 31
2.1.4 Computer-Aided Design (CAD) 33
2.1.4.1 Modelagem Parametrizada com Ansys SpaceClaim 34
2.1.5 Malha Numérica – *Ansys Fluent Meshing* 35
2.1.5.1 Simulação em Fluidodinâmica Computacional – *Software Ansys Fluent* 37
2.2 CFD APLICADO À DEGRADAÇÃO DE POLUENTES VIA FOTOCATÁLISE HETEROGÊNEA 38
2.2.1 Poluição Ambiental 38
2.2.2 Poluentes Atmosféricos 39
2.2.2.1 Tricloroetileno 40
2.2.3 Fotocatálise 41
2.2.3.1 Fotocatálise Heterogênea 41
2.2.3.1.1 Dióxido de Titânio Degussa P25 43
2.2.4 Reatores Fotoquímicos 44
2.2.4.1 Reatores de Placa 45
2.2.4.2 Reator de Disco Giratório (*spinning disk*) 46
2.2.4.3 Reatores Tubulares 47
2.2.4.4 Reatores de Leito Fluidizado 47
2.2.4.5 Misturadores estáticos 48
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 52

3.1 AUTOMAÇÃO NO PRÉ-PROCESSAMENTO: GERAÇÃO DE GEOMETRIA E MALHA NUMÉRICA . . . 53
3.2 AUTOMAÇÃO NO PROCESSAMENTO: *SOLVERS* NUMÉRICOS E INTEGRAÇÕES COMPUTACIONAIS . . . 56
3.3 AUTOMAÇÃO NO PÓS-PROCESSAMENTO . . . 58
3.4 CONSIDERAÇÕES FINAIS . . . 59
4 METODOLOGIA . . . 61
4.1 MODELO E PARAMETRIZAÇÃO . . . 62
4.1.0.1 Estrutura do reator NETmix para fotocatálise heterogênea . . . 69
4.1.0.2 Restrições paramétricas . . . 72
4.2 AUTOMAÇÃO . . . 73
4.2.1 Automação da geração de geometrias . . . 74
4.2.2 Automação da geração de malha numérica . . . 77
4.2.3 Automação do *solver* numérico . . . 78
4.3 AVALIAÇÃO DE SUBMODELOS DO REATOR NETMIX PARA DEGRADAÇÃO DE TRICLOROETILENO VIA SIMULAÇÃO EM CFD . . . 80
4.3.1 Seleção de submodelos com base na variação de parâmetros geométricos . . . 80
4.3.1.1 Geração CAD dos 18 submodelos do reator NETmix para o estudo de caso . . . 84
4.3.2 Geração de malha numérica para os 18 submodelos do reator NETmix . . . 84
4.3.3 Modelagem em CFD dos 18 submodelos do reator NETmix para degradação de tricloroetileno via fotocatálise heterogênea 85
4.3.3.1 Condições de contorno . . . 88
4.3.3.2 Configuração do *solver* numérico . . . 90
4.3.4 Simulações . . . 90
4.3.5 Simulação Empregando o Modelo de Ray Tracing . . . 93
4.3.5.1 Setup de simulação do *Ray Tracing* . . . 95
5 RESULTADOS . . . 97
5.1 AUTOMAÇÃO . . . 97
5.1.1 Automação CAD . . . 97

5.1.2 Automação da geração de malha numérica 100
5.1.3 Automação da etapa de simulação no *solver* 104
5.2 ANÁLISE FÍSICA: DEGRADAÇÃO DO TRICLOROETILENO . . . 106
5.2.1 Resultado das simulações Empregando o Modelo de Ray Tracing nos 18 submodelos do reator NETmix 108
5.2.2 Degradação de tricloroetileno e queda de pressão em função dos parâmetros geométricos 115
6 CONCLUSÃO 121
REFERÊNCIAS 123
APÊNDICE A – RESULTADOS DA GERAÇÃO DOS SUBMODELOS DO REATOR NETMIX. 146
APÊNDICE B – RESULTADOS DO ÍNDICE DE CONVERGÊNCIA DA MALHA (GCI – *GRID CONVERGENCE INDEX*) 149
APÊNDICE C – RESULTADOS DOS CONTORNOS DOS PERFIS DE IRRADIÂNCIA MÉDIA. . . . 151
APÊNDICE D – RESULTADOS DOS CONTORNOS DOS PERFIS DE CONVERSÃO DO TRICLOROETILENO. 153
APÊNDICE E – TESTES COMPLEMENTARES DA METODOLOGIA DE AUTOMAÇÃO PROPOSTA 155
E.1 ESTUDO 1 – ANÁLISE DE GEOMETRIAS *MICROPILLAR* 155
E.2 ESTUDO 2 – AUTOMAÇÃO DA CONFIGURAÇÃO E EXECUÇÃO NUMÉRICA 157

1 INTRODUÇÃO

A fluidodinâmica computacional (CFD, do inglês *Computational Fluid Dynamics*) tem se consolidado como uma ferramenta indispensável na análise e otimização de processos complexos em diversas áreas da engenharia e das ciências aplicadas. Sua relevância está na capacidade de modelar, de forma virtual e controlada, fenômenos intricados como escoamentos de fluidos (Matos *et al.*, 2021; Ranade; Utikar, 2022), transferência de calor (Arulanandam; Hollands; Brundrett, 1999) e reações químicas (Zimmermann; Taghipour, 2005). Essa abordagem permite reduzir significativamente a necessidade de experimentos físicos extensivos e custosos, promovendo economia de materiais e recursos financeiros (Szpicer *et al.*, 2023), além de contribuir para a segurança operacional ao antecipar e mitigar riscos em sistemas industriais antes de sua implementação prática (Frota, 2024; Ponte Junior, 2012). Essas características tornam a análise em CFD uma ferramenta estratégica em setores como energia, aeroespacial (Shams; Torabi, 2025), químico (Golshan *et al.*, 2020), automotivo (Ashton *et al.*, 2024b; Qin; Ricci; Blocken, 2024) e ambiental (Pardo del Viejo; Fernández-Rodríguez, 2024), nos quais a inovação e a sustentabilidade são prioridades. Refletindo sua crescente importância, estima-se que o mercado global de simulações CFD atinja USD 5,46 bilhões até 2032 (Insights, 2025).

No campo do tratamento de poluentes, as simulações em CFD têm se mostrado particularmente valiosas para estudar a eficiência de processos químicos, como reações de oxidação (Ahmadi *et al.*, 2024; Ghayour; Shabanian, 2024), de fotocatálise (Jamil; Rana; Matoh, 2024; Pandey, Pooja; Mohanan; Surenjan *et al.*, 2025) e de remoção de compostos tóxicos (Li, W. *et al.*, 2024; Seyyedbagheri *et al.*, 2024). Esses estudos permitem o desenvolvimento de estratégias mais eficazes e sustentáveis para a degradação de poluentes gasosos, atendendo a crescente demanda por soluções tecnológicas que minimizem os impactos ambientais das atividades humanas.

A degradação de poluentes gasosos é uma questão prioritária devido aos efeitos adversos destes sobre a saúde humana e o meio ambiente (Verbruggen, 2015; Zhao *et al.*, 2023). Nesse contexto, a fotocatálise surge como uma tecnologia promissora, oferecendo uma abordagem sustentável para a remoção eficiente desses compostos em reatores fotocatalíticos (Chengula *et al.*, 2024; Lin, Z. *et al.*, 2024; Zhang, G. *et al.*, 2024). No entanto, para maximizar sua eficácia, é imprescindível avançar na otimização dos reatores,

tornando-os mais eficientes, econômicos e ecologicamente sustentáveis. Tal otimização exige ferramentas avançadas para a análise detalhada dos fenômenos envolvidos, como dinâmica de fluidos, transferência de massa e interação luz-matéria.

Nesse cenário, as simulações em CFD desempenham um papel fundamental, permitindo o estudo do comportamento dos reatores fotocatalíticos sob diferentes condições, sem a necessidade de experimentação extensa (Balestrin *et al.*, 2024; Pandey, Pooja; Mohanan; Surenjan *et al.*, 2025). Além de reduzir custos e acelerar o desenvolvimento, essas simulações possibilitam a identificação de limitações operacionais e a proposição de melhorias de forma precisa e sistemática.

No entanto, a aplicação de CFD em larga escala ainda enfrenta obstáculos práticos, principalmente relacionados ao tempo e ao esforço envolvidos na preparação de cada simulação (Siegmund, 2024). O processo convencional demanda etapas repetitivas e extremamente dependentes da interface gráfica do usuário, como a criação de geometrias, geração de malhas e configuração de condições de contorno, que se tornam um gargalo quando se deseja testar múltiplas variações de projeto (Du; He; Martins, 2021). Esse cenário limita a capacidade de explorar soluções otimizadas em prazos razoáveis.

Nesse contexto, métodos automatizados têm ganhado destaque como soluções viáveis para ampliar a aplicação de CFD em estudos mais complexos e variáveis. A automação permite padronizar tarefas repetitivas, reduzir erros humanos e integrar diferentes etapas do processo de simulação, tornando possível executar análises em larga escala de forma mais ágil e com maior confiabilidade (Ashton *et al.*, 2024a; Wong *et al.*, 2024). Em áreas como engenharia química e desenvolvimento de reatores, isso representa um avanço estratégico, viabilizando a exploração de múltiplas alternativas de projeto com esforço computacional e humano significativamente reduzido.

Diante disso, este trabalho foca no desenvolvimento de uma metodologia automatizada para simulações CFD, com o objetivo de tornar a análise de reatores fotocatalíticos mais eficiente, acessível e escalável. A automação proposta visa reduzir a intervenção manual nas interfaces de usuário, aumentar a reprodutibilidade e permitir a análise sistemática de diferentes configurações geométricas de um reator fotocatalítico com maior agilidade. Essa abordagem possibilita a realização de estudos paramétricos complexos,

avaliação de diferentes cenários operacionais e identificação de melhorias de desempenho de forma rápida e precisa.

Apesar das vantagens, a automação de processos em CFD ainda apresenta desafios significativos, principalmente relacionados à integração entre diferentes softwares de modelagem, malha e solução. Além disso, sua implementação exige um alto grau de customização e domínio técnico, envolvendo conhecimentos em programação, modelagem matemática e simulação. Superar essas barreiras é essencial para tornar o uso da automação mais acessível e aplicável em contextos reais de engenharia.

1.1 ESTRUTURA DO TRABALHO

O trabalho está dividido em duas partes: a primeira aborda a automação do processo de simulação em CFD, enquanto a segunda apresenta a aplicação dessa automação em um estudo de caso focado na degradação de tricloroetileno no reator fotocatalítico NETmix.

Para maior clareza, a primeira etapa envolve três processos de automação: geração de geometrias, criação da malha numérica e execução do *solver*. A metodologia foi desenvolvida especificamente para reatores fotocatalíticos, utilizando um código *Python* modular que permite ao usuário executar cada etapa separadamente ou realizar todo o processo em uma única execução.

Na segunda etapa, será apresentado um estudo de caso sobre a degradação de tricloroetileno no reator NETmix. Embora diversos trabalhos já tenham abordado a modelagem e aplicação desse reator para diferentes finalidades, este estudo foca especificamente na degradação fotocatalítica do tricloroetileno, um composto amplamente utilizado na indústria como solvente químico e na limpeza de peças metálicas. Atualmente, esse composto é proibido em vários países devido à sua toxicidade e potencial carcinogênico. (Hempel; Kennedy, 2021; Slunge; Andersson; Sterner, 2022). É altamente volátil e considerado um poluente atmosférico, especialmente em ambientes internos (Bingham *et al.*, 2023; Xie; Suuberg, 2022). Diversos trabalhos buscam meios de degradar o tricloroetileno, por exemplo, através de sulfidação biogenética (Wang, A. *et al.*, 2023), método Fenton (Ali, M. *et al.*, 2021), biodegradação (Shukla *et al.*, 2009), entre outros. Dentre os diversos métodos

disponíveis, vários estudos têm explorado a degradação do tricloroetileno por meio da fotocatálise (Gao *et al.*, 2024; Lixiang; Qiang; Xiaoli, 2025).

Neste trabalho, será avaliada a performance de diferentes configurações geométricas do reator NETmix na degradação de tricloroetileno por fotocatálise heterogênea, utilizando o catalisador TiO_2. As variações geométricas serão definidas com base em parâmetros específicos que influenciam a eficiência da reação.

De maneira geral, busca-se desenvolver uma metodologia automatizada para simulações em CFD, com foco na otimização paramétrica do modelo de reator fotocatalítico NETmix. A degradação do poluente gasoso tricloroetileno é utilizada como estudo de caso para validar o método e, consequentemente, identificar o modelo de reator mais eficiente na degradação do poluente.

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Objetivo Geral

Avaliar se a metodologia de automação desenvolvida para o processo de simulação em reatores fotocatalíticos é eficiente, buscando otimizar e comparar o desempenho de diferentes modelos geométricos do mili reator NETmix na degradação de tricloroetileno e identificar a geometria mais eficiente para esse estudo de caso.

1.2.2 Objetivos Específicos

- Comparar se a metodologia de automação de geração de domínio numérico mostra-se mais eficiente em relação à geração não automatizada, analisando o modelo de reator desenvolvido por Laranjeira (2025);
- verificar se a metodologia de automação de malha numérica garante melhoria de performance e gera economia de tempo de processo;
- analisar se os modelos gerados são viáveis para uso nas simulações em CFD;
- examinar se a metodologia de automação do *setup* de simulação em CFD garante maior eficiência em relação à metodologia de simulação via interface de usuário;

- avaliar se a variação de parâmetros geométricos interfere na eficiência de iluminação dos modelos;
- verificar se os modelos gerados e a metodologia de automação influenciam na obtenção dos resultados para a degradação de tricloroetileno via fotocatálise heterogênea em simulação CFD.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 AUTOMAÇÃO

A automação pode ser definida como uma tecnologia por meio da qual um processo é executado sem a assistência humana. Podem ser considerados como automação diversos tipos de tecnologias, desde as mais primitivas, como a criação de dispositivos mecânicos, por exemplo, a roda, que data de 3200 a.C., até as mais atuais, repletas de códigos para automação e controle de softwares. Um dos elementos básicos que definem a automação de um sistema é um programa de instruções que direciona as ações do sistema ou máquina (Groover, 2016).

Nos países mais industrializados, a automação de processos tem crescido significativamente. Essa prática melhora a qualidade dos produtos, proporciona maior agilidade e segurança aos processos, além de aumentar a eficiência no uso de recursos (Jämsä-Jounela, 2007). Dentre os diversos processos nos quais a automação pode ser aplicada, este trabalho foca na automação voltada para softwares de simulação computacional.

2.1.1 CAE

Computer-Aided Engineering (CAE), em português "Engenharia assistida por computador", é um termo empregado para representar as atividades desenvolvidas por meio de *softwares* computacionais, com o objetivo de simular, validar e otimizar a criação de produtos, aprimorar projetos e analisar desempenho, entre diversas outras funcionalidades (Bahman; Iannuzzo, 2018a).

O CAE engloba o uso de softwares por engenheiros de todas as áreas para resolução de problemas de engenharia. Pode-se citar o uso de CAE, por exemplo, na criação de placas PCB na engenharia elétrica (Mitzner, 2011), na análise da qualidade de embalagens de alimentos na engenharia de alimentos (Bahman; Iannuzzo, 2018b), no desenvolvimento de sistemas hidráulicos de aeronaves na engenharia aeroespacial (Yin, 2019), entre muitos outros.

Em estudos de CFD, três etapas são cruciais no processo: o pré-processamento, a solução e o pós-processamento. O pré-processamento consiste na preparação dos dados de entrada, como a definição da geometria, da malha e das condições de contorno, aspectos que afetam diretamente a precisão e estabilidade da simulação. A etapa de solução refere-se à resolução numérica das equações de balanço, sendo que as técnicas de discretização e os algoritmos utilizados influenciam a eficiência computacional. Por fim, o pós-processamento envolve visualização e análise dos resultados, permitindo a interpretação dos fenômenos físicos e a validação dos modelos empregados (Resolved Analytics, 2024).

2.1.2 Linguagens de Programação

Considerando que o CAE é composto por ferramentas executadas em computadores, é essencial estabelecer uma comunicação entre o usuário e a máquina responsável por realizar as tarefas designadas. Para isso, utiliza-se linguagens de programação que podem ser classificadas em baixo nível e alto nível.

As linguagens de baixo nível, também chamadas de linguagem de máquina ou *assembly*, são caracterizadas por códigos escritos em binário, ou seja, sequências de 1's e 0's, o que as torna difíceis de programar, pois não se assemelham à notação matemática convencional nem à linguagem humana (Hemmendinger, 2024). No início da computação, essas linguagens foram a principal forma de comunicação com as máquinas, e os programadores utilizavam ferramentas chamadas "decompiladores"para traduzir códigos binários para uma linguagem de nível superior, facilitando sua compreensão e modificação (Housel; Halstead, 1974). Além da complexidade inerente ao seu formato, outro desafio das linguagens de baixo nível era a dependência do hardware, pois variações na arquitetura dos dispositivos frequentemente exigiam adaptações no código, dificultando a portabilidade e o escalonamento dos programas.

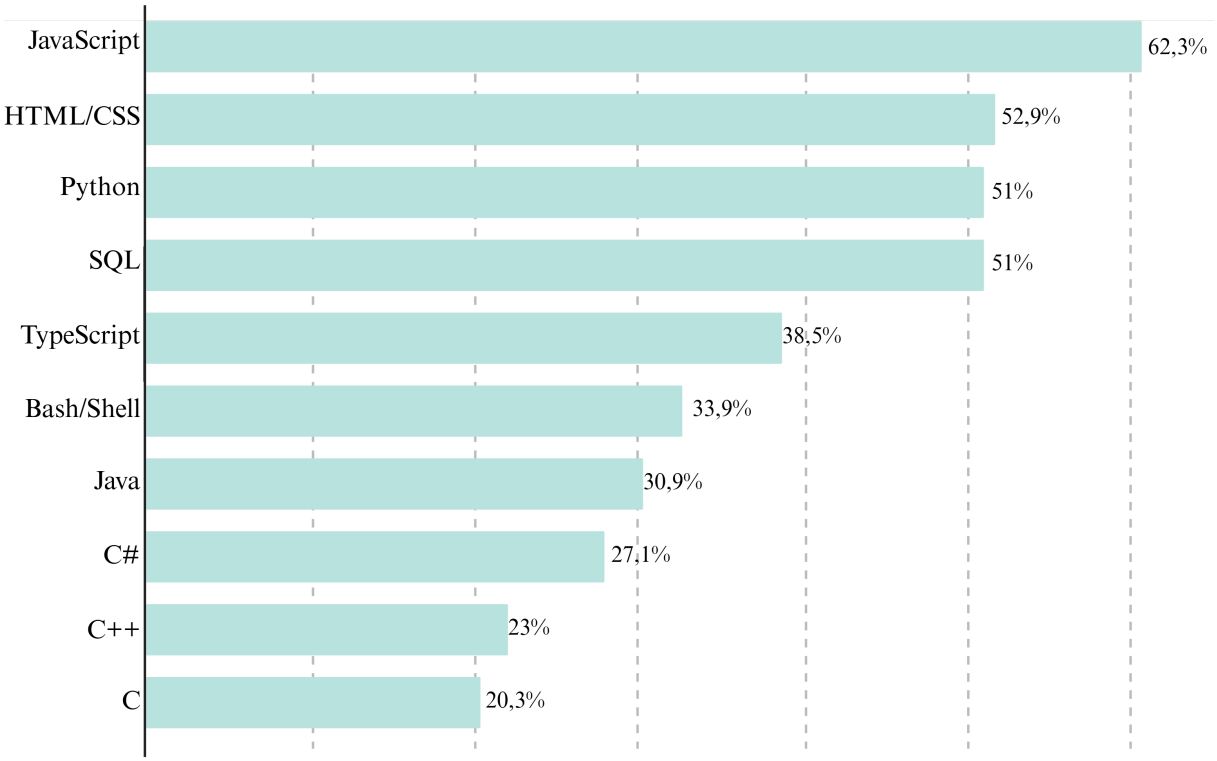
Atualmente, os programadores utilizam predominantemente linguagens de alto nível, como *Python*, *Java*, *C*, *C++*, *C#*, *Julia* e *JavaScript*, entre muitas outras (Kitthu, 2024). Essas linguagens possibilitam o desenvolvimento de programas sem a necessidade de um conhecimento detalhado sobre o hardware em que serão executados, tornando o código independente da máquina. Em 1957, o FORTRAN tornou-se a primeira linguagem de

programação padronizada além das linguagens de máquina, sendo considerada a linguagem de alto nível mais antiga (Science, 2024).

2.1.2.1 *Python*

Dentre as linguagens de programação mencionadas, o *Python* é atualmente uma das mais utilizadas globalmente. Em 2024, foi a terceira linguagem mais empregada por programadores em todo o mundo, com uma taxa de uso de 51%, atrás apenas de HTML/CSS, com 52,9%, e JavaScript, com 62,3%, conforme ilustrado na Figura 1 (Stack Overflow, 2024).

Figura 1 – Linguagens de programação mais utilizadas em 2024



Fonte: adaptado de Stack Overflow (2024)

O *Python* caracteriza-se por sua sintaxe simples e próxima de pseudocódigos, o que facilita seu aprendizado. Apresenta semântica segura, que fornece mensagens de erro compreensíveis em caso de falhas, sendo uma linguagem confiável e robusta. Trata-se de uma linguagem escalável, capaz de atender desde aplicações básicas até projetos avançados com estruturas de dados complexas e orientação a objetos. Além de ser gratuita

e de propósito geral, possui ampla adoção na indústria e forte presença na academia, especialmente em áreas como ciência de dados, inteligência artificial e engenharia (Lambert; Osborne, 2023).

A linguagem conta com uma comunidade ativa e extensa, responsável pelo desenvolvimento de bibliotecas e *frameworks* como *NumPy*, *Pandas*, *Matplotlib* e *TensorFlow*, os quais ampliam suas possibilidades de uso (Python, 2024). Outro destaque do *Python* é sua integração com ambientes modernos de desenvolvimento, como o Visual Studio Code (VS Code), abordado na próxima subseção.

2.1.2.1.1 Visual Studio Code

O *Visual Studio Code* (*VS Code*) é um editor de código-fonte leve, multiplataforma e de código aberto, desenvolvido pela Microsoft. Desde seu lançamento em 2015, consolidou-se como uma das ferramentas mais utilizadas por desenvolvedores de *software*. Em 2024, foi eleito o editor mais utilizado entre programadores, conforme dados da comunidade (Stack Overflow, 2024).

Entre suas principais características estão a capacidade de personalização, a compatibilidade com múltiplas linguagens de programação e o suporte à instalação de extensões, temas e atalhos, permitindo a adaptação do ambiente ao fluxo de trabalho de cada usuário. No contexto do desenvolvimento em *Python*, o *VS Code* é amplamente adotado devido à sua extensão oficial, que oferece funcionalidades como autocompletar, depurar e executar *scripts* diretamente no editor.

A combinação entre recursos avançados, interface intuitiva e compatibilidade com diversas tecnologias torna o *VS Code* uma ferramenta fundamental tanto para iniciantes quanto para profissionais experientes. Neste trabalho, a adoção desse ambiente visa garantir eficiência e organização no desenvolvimento das soluções propostas. Os *scripts* gerados para cada etapa do processo de *Computer-Aided Engineering* são escritos em *Python*, promovendo a automação integral do fluxo de trabalho.

2.1.3 Simulação em CFD

A fluidodinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics* — CFD) é uma ferramenta essencial na análise de problemas envolvendo a dinâmica de fluidos e transferência de calor e baseia-se na aplicação de métodos numéricos para resolver equações diferenciais parciais (EDPs) que regem o comportamento dos fluidos. As principais EDPs empregadas em CFD são as equações de conservação de massa, de quantidade de movimento e energia em um fluido.

Para resolver essas equações, o software de fluidodinâmica computacional emprega diversos métodos numéricos que discretizam as equações contínuas em sistemas discretos que podem ser solucionados computacionalmente. Dentre os métodos mais utilizados, destacam-se o Método dos Volumes Finitos (MVF), o Método dos Elementos Finitos (MEF) e o Método das Diferenças Finitas (MDF), cada um com características e aplicações específicas.

O Método dos Volumes Finitos (MVF) é uma técnica numérica amplamente empregada na solução de equações diferenciais parciais, sendo especialmente eficaz na área da dinâmica dos fluidos computacional (CFD). Sua principal vantagem está na conservação local e global de propriedades físicas fundamentais, como massa, quantidade de movimento e energia, o que o torna particularmente adequado para simulações de escoamento e transferência de calor. No MVF, o domínio físico é discretizado em pequenos volumes de controle que formam uma malha computacional. As equações de conservação são então integradas sobre cada volume de controle, transformando as equações diferenciais parciais (EDP's) em equações algébricas discretas que descrevem o comportamento médio das variáveis em cada volume (Ferziger & Perić, 2002).

Ao trabalhar diretamente com as formas integrais das equações de conservação, o MVF proporciona maior robustez na modelagem de fenômenos físicos complexos, como escoamentos multifásicos e reações químicas. Os fluxos através das interfaces entre os volumes de controle são computados por meio de esquemas numéricos apropriados (como upwind, central ou híbridos), que buscam equilibrar precisão e estabilidade numérica. Essa abordagem permite uma representação mais fiel dos processos de transporte convectivo e difusivo, especialmente em malhas não estruturadas ou geometrias tridimensionais comple-

xas. Além disso, a estrutura do MVF facilita a aplicação de condições de contorno físicas e o acoplamento com diferentes modelos físico-químicos (Versteeg & Malalasekera, 2007). Por ser amplamente utilizado no Ansys Fluent, o MVF é, por consequência, o método adotado neste trabalho para a realização das simulações numéricas. O Fluent utiliza o MVF como base para a discretização do domínio e solução das equações governantes, como continuidade, quantidade de movimento, energia e transporte de espécies. No presente estudo, que envolve a degradação de tricloroetileno via fotocatálise heterogênea, o método dos volumes finitos permite integrar de forma precisa os efeitos de escoamento com os mecanismos de transporte e reação química na interface fluido-catalisador. Assim, o MVF desempenha um papel fundamental na fidelidade das simulações realizadas, garantindo resultados consistentes e fisicamente coerentes (ANSYS Inc., 2023).

O Método dos Elementos Finitos, por sua vez, é amplamente empregado em problemas estruturais e de transferência de calor. Sua aplicação envolve a divisão do domínio em elementos finitos, nos quais são utilizadas funções de forma que aproximam a solução. Esse método é especialmente eficaz em domínios com geometria complexa ou que demandem alta precisão em regiões específicas (Jagota; Sethi; Kumar, K., 2013).

Por outro lado, o Método das Diferenças Finitas utiliza uma grade estruturada para aplicar aproximações diferenciais diretas às derivadas nas equações de conservação. Embora seja mais simples de implementar e eficaz em domínios regulares, apresenta limitações quanto à flexibilidade em lidar com geometrias e condições de contorno complexas (Li, C.; Zeng, 2012).

A escolha do método mais adequado deve considerar diversos fatores, como o tipo de problema, a complexidade geométrica, as condições de contorno e os recursos computacionais disponíveis. Independentemente da técnica empregada, é fundamental atentar-se a aspectos como a estabilidade, a consistência e a convergência das soluções.

Atualmente, existem diversos *softwares* de fluidodinâmica computacional, como *Ansys Fluent*, *OpenFOAM* e *COMSOL Multiphysics*, que possuem as equações fundamentais e métodos numéricos implementados. Tais ferramentas possibilitam modelagem e análise de uma ampla gama de aplicações de engenharia, desde a aerodinâmica de veículos até sistemas de refrigeração. O uso desses *softwares* em ambientes computacionais

modernos viabiliza simulações detalhadas que seriam impraticáveis por métodos analíticos tradicionais, impulsionando significativamente a inovação e a eficiência nos processos de engenharia.

2.1.4 Computer-Aided Design (CAD)

O CAD é um componente fundamental no processo de simulação em CFD, pois fornece as geometrias que definem o domínio numérico do problema. Antes que qualquer análise computacional possa ser realizada, é necessário construir modelos que representem com precisão o sistema físico em estudo. Assim, a etapa de CAD é o ponto de partida para a geração da malha e, consequentemente, para a resolução das equações de conservação aplicadas ao fluxo.

O livro *An Outline of the Requirements for a Computer-Aided Design System*, de Steven Anson Coons (Coons, 1963), relata como o CAD foi concebido a partir de esforços de grupos de pesquisa interessados em substituir métodos manuais, como os realizados com pranchetas, por abordagens computacionais mais precisas e eficientes. Um marco inicial foi o desenvolvimento, na década de 1950, pelo laboratório do MIT, de um dos primeiros sistemas CAD, voltado para o aprimoramento do controle de máquinas fresadoras. A introdução desses sistemas representou um avanço significativo para a engenharia, a arquitetura e o design industrial, permitindo maior precisão e agilidade na elaboração de projetos complexos.

Os softwares de CAD permitem modelagem geométrica, dimensionamento preciso, simulação de montagem e verificação de interferências. Em ambientes 3D, é possível aplicar materiais, simular movimento e exportar arquivos para análise estrutural ou fabricação digital, como impressão 3D e usinagem CNC. Além da modelagem, o CAD facilita a documentação técnica, com geração automática de vistas ortogonais, cortes, legendas e listas de materiais (Ban; Hyun, 2020).

Com o avanço da tecnologia e da computação, o CAD tornou-se essencial na produção da maioria dos produtos, desde automóveis até robôs. Ele substituiu os desenhos manuais feitos a lápis e caneta por *sketches* digitais, proporcionando maior reprodutibi-

lidade, flexibilidade e agilidade nos processos de design. Atualmente, a integração entre linguagens de programação e técnicas de CAD possibilita a geração de desenhos guiados por *scripts*, nos quais as entidades e restrições são definidas por meio de códigos, eliminando a necessidade de uma interface gráfica para o desenvolvimento manual da geometria (Ganin *et al.*, 2021).

2.1.4.1 Modelagem Parametrizada com Ansys SpaceClaim

O *Ansys SpaceClaim* é um sistema de modelagem geométrica tridimensional baseado em abordagem direta, com suporte a operações CAD voltadas a ambientes de simulação. Originalmente desenvolvido pela SpaceClaim Corporation em 2007 e posteriormente incorporado ao portfólio da Ansys Inc., o software tem sido utilizado em aplicações que exigem integração entre modelagem geométrica e análise numérica (Jenkins, 2009; Babunski *et al.*, 2020).

Entre seus recursos está a possibilidade de automatização de tarefas por meio de *scripts* escritos em linguagem *Python*. Essa funcionalidade permite a construção de geometrias parametrizadas e a repetição programada de operações de modelagem, o que pode ser explorado em contextos que envolvem otimização de projeto, geração de múltiplas variantes geométricas e integração com rotinas de simulação automatizadas (Mimery, 2020).

A modelagem via *script* apresenta benefícios em termos de reprodutibilidade e controle formal das alterações geométricas, especialmente em fluxos de trabalho onde os modelos CAD precisam ser atualizados de forma iterativa. Essa abordagem é compatível com metodologias de projeto orientadas a dados e pode ser integrada a ferramentas de análise como simulações em CFD e FEA, promovendo continuidade entre as etapas de modelagem e simulação.

Estudos recentes têm demonstrado o uso do SpaceClaim como ferramenta intermediária em processos que requerem flexibilidade na definição geométrica, como é o caso de análises multidisciplinares e otimização topológica (Babunski *et al.*, 2020; Mimery, 2020). Nesse contexto, sua integração com *scripts* em *Python* tem sido explorada como

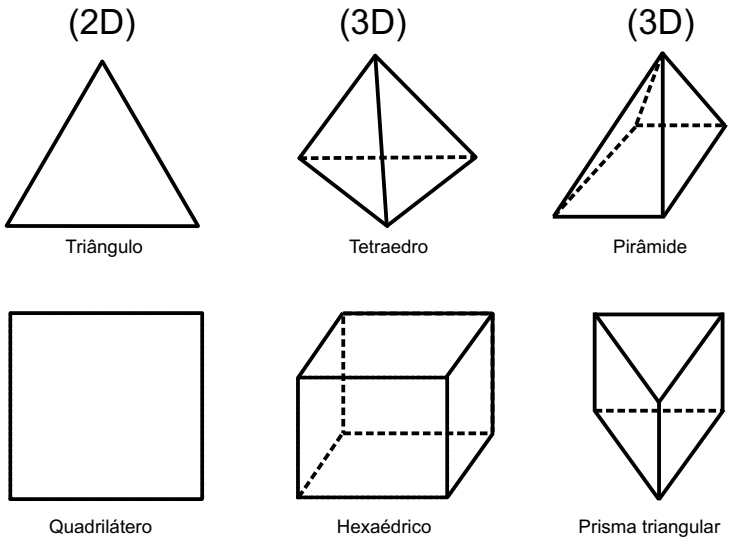
meio de construir fluxos de trabalho automatizados de modelagem e simulação, voltados à redução do esforço manual e à padronização de etapas.

2.1.5 Malha Numérica – Ansys Fluent Meshing

Na segunda etapa do pré-processamento, realiza-se a geração da malha numérica, um processo que tem evoluído significativamente para aprimorar a precisão e a eficiência das simulações computacionais. A malha numérica é um componente fundamental em fluidodinâmica computacional pois define como o domínio de estudo será discretizado para aplicação dos métodos numéricos. Em essência, o espaço contínuo é dividido em pequenos elementos, como células ou volumes, sobre os quais as equações de conservação são resolvidas. A qualidade e o refinamento da malha influenciam diretamente a precisão e a eficiência das simulações. Uma malha bem construída é crucial para capturar com precisão os fenômenos físicos, especialmente em regiões de alta complexidade, como camadas limites e zonas de turbulência.

Na Figura 2 é possível identificar os diferentes tipos de células de malha numérica, variando entre componentes bidimensionais e tridimensionais, além de formas triangulares e quadriláteras.

Figura 2 – Diferentes dimensões e geometrias das células de malha numérica



Fonte: elaborado pela autora (2025)

Os elementos de malha podem variar entre a dimensão e a forma geométrica. A

escolha para os diferentes formatos dos volumes de controle varia de acordo com o método de solução e do *solver* utilizado. A combinação desses elementos pode gerar diversos tipos de malhas, desde malhas estruturadas, onde todos os elementos são igualmente espaçados e distribuídos, até malhas não estruturadas, com variações de tamanhos e formatos.

No contexto de ferramentas modernas, o *Ansys Fluent Meshing* destaca-se como uma solução robusta para a geração de malhas. Ele suporta uma ampla gama de opções de malhas numéricas e oferece recursos avançados para automação e otimização do processo. O suporte à automação permite que engenheiros reduzam o tempo gasto na criação de malhas, garantindo consistência e qualidade em simulações complexas. Isso facilita a preparação de modelos para análise, tornando o processo de simulação mais eficiente e acessível, mesmo em problemas de alta complexidade.

A criação da malha via *Fluent meshing* pode ser realizada diretamente pela interface de usuário do Fluent. No entanto, é uma das ferramentas que recebe suporte das bibliotecas *PyAnsys*, as quais fornecem uma interface poderosa e flexível para acessar as funcionalidades do *software Ansys Fluent* diretamente por meio de *scripts Python* (ANSYS, 2024b).

Com o avanço da tecnologia e o desenvolvimento de *softwares* de CFD mais sofisticados, a geração de malhas tornou-se consideravelmente mais automatizada. Ferramentas modernas permitem que o usuário defina parâmetros gerais, como densidade de malha, refinamento em regiões de interesse (por exemplo, próximo às superfícies ou em áreas de alta variação de gradientes), além de adequar o método de geração da malha de acordo com a física do problema. Por exemplo, para simulações em CFD, *softwares* como o *Ansys Workbench Meshing* possuem malhas *Path dependent* e *Path independent*, sendo que *Path dependent* tem métodos como *Thin Sweeping* e *Hex dominant* e o *Path independent* tem métodos *MultiZone* e *CutCell*. Esses avanços não apenas reduziram o tempo necessário para a criação de malhas, mas também aumentaram a acessibilidade das simulações, permitindo que usuários com menos experiência na criação de malhas pudessem obter resultados satisfatórios.

A partir desse ponto, diversos trabalhos passaram a empregar malhas diretamente integradas aos simuladores de fluidodinâmica computacional, permitindo que o

próprio software selecionasse o domínio e gerasse a malha automaticamente conforme as especificações do usuário.

2.1.5.1 Simulação em Fluidodinâmica Computacional – *Software Ansys Fluent*

O *Ansys Fluent* é uma das ferramentas de simulação em CFD mais utilizadas no mercado devido à sua capacidade de lidar com uma vasta gama de problemas de dinâmica de fluidos. Oferece suporte para fluxos laminares e turbulentos, compressíveis e incompressíveis, além de modelos de reação química, radiação térmica e interação fluido-estrutura. Com uma interface amigável e robusta, o *Ansys Fluent* permite aos usuários configurar, executar e pós-processar simulações complexas de maneira eficiente, oferecendo soluções detalhadas que ajudam a otimizar o desempenho de projetos em várias indústrias, como aeroespacial, automotiva e energia.

Além de suas funcionalidades técnicas, o *Ansys Fluent* integra ferramentas de automação e otimização que favorecem o desenvolvimento de simulações precisas e reproduzíveis. Com recursos como o *Fluent Meshing* e a compatibilidade com *scripts Python* via *PyAnsys*, os usuários podem personalizar seus fluxos de trabalho, aumentando a eficiência e reduzindo o tempo de desenvolvimento. Essas características tornam o *Ansys Fluent* uma ferramenta estratégica para análises em CFD que exigem alto rigor técnico.

Assim como para as demais ferramentas disponibilizadas pela Ansys, a biblioteca *Python*, que dá suporte à interação por meio de códigos, ainda está em desenvolvimento. Apesar de ser um projeto relativamente recente, as bibliotecas *PyAnsys* já oferecem uma gama abrangente de funcionalidades, possibilitando a automação da maioria das tarefas disponíveis na interface gráfica. No contexto da automação de simulações, da otimização de projetos e da utilização de resultados em CFD para aplicações em inteligência artificial (como redes neurais), essa integração entre o *solver* e a programação é essencial. Exemplos de *setups*, guias e documentação estão disponíveis nos repositórios do GitHub das bibliotecas *PyAnsys* e *PyFluent*, bem como no site oficial da Ansys (ANSYS, 2024b, 2024a).

Softwares como *Ansys Fluent*, *COMSOL* e *OpenFOAM* são alguns dos mais

famosos e utilizados softwares para simulação em fluidodinâmica computacional, mas não são os únicos. Pode-se citar também *M-Star*, *SimScale*, *Autodesk* e uma variedade de softwares disponíveis para simulações em CFD, cada um com suas especificidades. Neste trabalho, não será discutida exaustivamente a compreensão a respeito do funcionamento destes softwares, mas é importante citá-los visto que metodologias de automação devem ser uma ideia generalizada possível de se aplicar para todos eles.

Do ponto de vista computacional, a automação torna-se mais viável em *softwares* que oferecem maior flexibilidade para integração com linguagens de programação externas, facilitando a personalização e o controle dos processos de simulação e análise.

2.2 CFD APLICADO À DEGRADAÇÃO DE POLUENTES VIA FOTOCATÁLISE HETEROGÊNEA

2.2.1 Poluição Ambiental

Toda e qualquer ação humana que resulta em desequilíbrio ambiental, ou mesmo na degradação e depreciação da qualidade do ambiente natural, é caracterizada como poluição (Audi; Poulin; Ali, A., 2024; Seesaard; Kamjornkittikoon; Wongchoosuk, 2024). Apesar de ser um tema amplamente discutido, a poluição continua a representar um dos principais desafios enfrentados pela humanidade na atualidade.

Embora as inovações tecnológicas tenham contribuído para a mitigação da poluição e as políticas públicas estejam cada vez mais voltadas à redução das emissões de dióxido de carbono, é essencial reconhecer que, paralelamente, os métodos de produção (Ritchie; Samborska; Roser, 2023) e o uso de novos compostos químicos nas indústrias farmacêutica (Singh; Shankar, 2024; Tran *et al.*, 2024) e agrícola (Mai *et al.*, 2024; Yao *et al.*, 2024) impõem uma pressão ambiental significativa. Essas práticas comprometem não apenas a sustentabilidade dos sistemas naturais, mas também aceleram a degradação dos recursos naturais, evidenciando a necessidade urgente de adotar abordagens mais ecológicas e sustentáveis nesses setores.

Embora fontes naturais, como incêndios florestais espontâneos e atividade vulcâ-

nica, também possam gerar poluição, a principal preocupação recai sobre os poluentes de origem antropogênica (Petrov; Nikolaeva; Dimitrov, 2023). Entre as diversas formas de poluição (água, ar, solo, visual e sonora), a poluição do ar destaca-se como uma das mais agressivas e prejudiciais à saúde humana (Organization, 2020). O aumento desse tipo de poluição nas últimas décadas é amplamente atribuído à ação humana. Fontes comuns incluem sistemas de combustão residencial, veículos automotores, instalações industriais e queimadas.

Segundo a *World Health Organization* (WHO) (Organization, 2020), a doença pulmonar obstrutiva crônica e as infecções respiratórias ocupam, respectivamente, o terceiro e quarto lugar entre as principais causas de morte na população mundial, estando diretamente relacionadas a esse tipo de poluição.

2.2.2 Poluentes Atmosféricos

A qualidade do ar está diretamente relacionada à qualidade de vida da população devido aos seus impactos diretos sobre a saúde pública. Estima-se que aproximadamente 90% da população mundial esteja exposta à poluição do ar, sendo esta responsável, em 2019, por um número significativo de mortes prematuras (Organization, 2020).

A poluição atmosférica é composta por materiais particulados (MPs) e gases emitidos por diversas fontes. Os poluentes primários são liberados diretamente na atmosfera a partir de suas fontes, enquanto os poluentes secundários resultam de reações químicas entre os poluentes primários. Os poluentes mais comuns incluem óxidos de enxofre (SO_2), óxidos de nitrogênio (NO e NO_2), compostos orgânicos voláteis (VOCs) e monóxido de carbono (CO) (Saxena *et al.*, 2019).

Os compostos orgânicos voláteis (VOCs) possuem alta volatilidade e se dispersam facilmente na atmosfera. Eles contribuem significativamente para a poluição ambiental e representam um risco à saúde pública devido à sua toxicidade e potencial carcinogênico (Zhou *et al.*, 2023). As principais fontes de emissão de VOCs são as atividades industriais, os veículos automotores, tarefas domésticas cotidianas e práticas agrícolas (Carpenter *et al.*, 2007). Entre os VOCs mais comuns estão os hidrocarbonetos aromáticos e os

halogenados, como o cloroetileno e o tricloroetileno (Pandey, Puneeta; Yadav, 2018). Dessa forma, os compostos orgânicos voláteis representam um grupo de poluentes atmosféricos de relevância crescente, com impacto direto na qualidade de vida da população. A investigação de métodos eficientes para sua degradação é fundamental nas pesquisas científicas, visando à redução de seus efeitos nocivos sobre o meio ambiente e a saúde humana.

2.2.2.1 Tricloroetileno

O tricloroetileno (TCE) é um composto orgânico volátil da classe dos hidrocarbonetos clorados, amplamente utilizado como solvente industrial devido à sua elevada eficácia na dissolução de óleos e gorduras (Kim *et al.*, 2024). Sua fórmula molecular é C_2HCl_3 e suas propriedades físico-químicas, como baixa inflamabilidade e alta estabilidade, contribuíram para seu uso extensivo em processos industriais, incluindo a limpeza de metais, a fabricação de componentes eletrônicos e, historicamente, até na extração de óleos vegetais, prática atualmente proibida em diversos países por razões sanitárias (Radosavljevic, 2025).

Apesar de sua utilidade industrial, o tricloroetileno apresenta sérios riscos à saúde humana e ao meio ambiente (Lash, 2024; Seo; Shin; Byeon, 2024). A exposição prolongada ao TCE, especialmente em altas concentrações, está associada a efeitos adversos como danos ao sistema nervoso central, irritações na pele e nas vias respiratórias, além de ser classificado como cancerígeno para humanos pela Agência Internacional de Pesquisa em Câncer. Ambientalmente, o TCE é considerado um poluente persistente, frequentemente detectado em águas subterrâneas devido a vazamentos industriais ou descarte inadequado (Shiroudi; Czub; Altarawneh, 2024). Sua volatilidade favorece sua dispersão no ar e sua solubilidade permite sua migração em lençóis freáticos, dificultando significativamente sua remoção.

A concentração desse poluente em ambientes internos pode variar ao longo do ano, sendo influenciada por fatores sazonais. Durante o verão, os níveis do poluente tendem a ser mais elevados em espaços fechados (Shirazi *et al.*, 2020). Além da contaminação por ingestão de água contaminada e inalação, a exposição ao TCE por meio do uso doméstico da água, como em chuveiros e torneiras, também pode representar um risco adicional

(Lash, 2024).

2.2.3 Fotocatálise

Uma reação fotocatalítica é um processo no qual o fotocatalisador permanece inalterado quando exposto à luz. Nesse processo, a energia luminosa é convertida em energia química, impulsionando a produção ou a degradação de compostos (Mohamadpour; Amani, 2024). Desde 2014, a quantidade de trabalhos publicados relativos à fotocatálise praticamente duplicou, chegando a mais de 50 mil publicações em 2024 (Dimensions, 2025). A maior parte desses estudos concentra-se no uso da fotocatálise para o tratamento de águas contaminadas por poluentes emergentes (Tejashwini *et al.*, 2024; Wang, Zhaobo *et al.*, 2024; Kumar, A. *et al.*, 2024), na produção de hidrogênio (Dang *et al.*, 2024; Hu *et al.*, 2024; Li, T.; Tsubaki; Jin, 2024) e na busca por catalisadores mais eficientes e de baixo custo (Mirzaeifard; Shariatinia, 2024; Liang *et al.*, 2024; Tseberlidis *et al.*, 2024).

Existem dois tipos principais de fotocatálise: a homogênea e a heterogênea, a diferença fundamental entre elas está na forma de emprego do catalisador. Na fotocatálise homogênea, o catalisador encontra-se dissolvido na fase líquida; já na fotocatálise heterogênea, o catalisador está presente em fase sólida, separada da fase reacional (Feng; Su, R., 2024).

A fotocatálise homogênea apresenta desafios operacionais, como o difícil controle de concentração, custos elevados associados à recuperação do catalisador e limitações quanto à sua aplicação em larga escala. Em contrapartida, a fotocatálise heterogênea é mais amplamente utilizada na indústria devido à sua estabilidade, facilidade de separação e reutilização do catalisador, além da viabilidade para processos industriais. Por esses motivos, grande parte das pesquisas atualmente concentra-se na fotocatálise heterogênea.

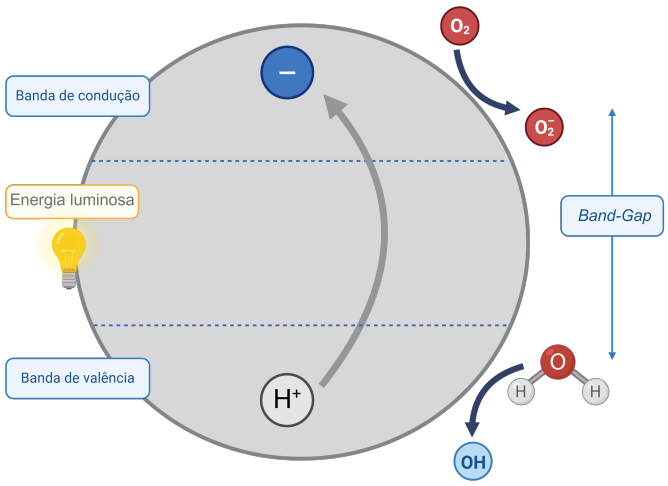
2.2.3.1 Fotocatálise Heterogênea

A fotocatálise heterogênea envolve o uso de um material semicondutor que deve receber energia sob a forma de fótons provenientes de radiação luminosa. Um semicondutor

é um material cuja condutividade situa-se entre a de um condutor e a de um isolante.

Na estrutura eletrônica de um semicondutor, o nível de energia mais alto ocupado por elétrons é chamado de banda de valência (VB), enquanto o nível de energia mais baixo disponível, porém desocupado, é denominado banda de condução (CB) (Kanoun *et al.*, 2024; Li, Li *et al.*, 2024; Yang, D. *et al.*, 2024). Entre a banda de valência e a banda de condução, tem-se uma região denominada *band-gap*. Essa diferença representa a quantidade de energia necessária para promover os elétrons da banda de valência para a banda de condução, cujo mecanismo é ilustrado na Figura 3.

Figura 3 – Mecanismo da fotocatálise heterogênea



Fonte: elaborado pela autora (2025)

O valor do *band gap* depende do semicondutor utilizado e, geralmente, estes se encontram na faixa de 2,0 eV e 3,5 eV (Behjatmanesh-Ardakani, 2024; Han *et al.*, 2022; Rashid *et al.*, 2024). A excitação dos elétrons gera um par elétron-lacuna, que é responsável por iniciar reações redox que mineralizam poluentes orgânicos. Na fotocatálise heterogênea, o semicondutor está presente em fase sólida, formando um sistema multifásico com o meio reacional.

O principal semicondutor utilizado até o momento é o dióxido de titânio (TiO_2), devido à sua alta fotoatividade, estabilidade química e baixo custo (Hashimoto; Irie; Fujishima, 2005; Sari *et al.*, 2024). O TiO_2 apresenta três formas alotrópicas: anatase, rutilo e brookita, sendo as duas primeiras as mais comuns. Algumas formulações combinam anatase e rutilo, como o conhecido catalisador Degussa P25®, que contém aproximadamente

70% de anatase e 30% de rutilo (Teran, 2014).

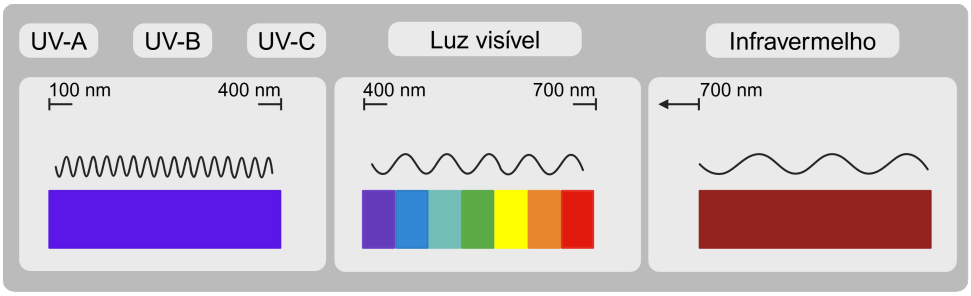
2.2.3.1.1 Dióxido de Titânio Degussa P25

Hashimoto *et al.* (2005) analisaram que o uso de TiO_2 para a geração de energia ou o tratamento de grandes volumes de água não é ideal, pois sua ativação depende apenas de uma pequena fração da radiação UV presente na luz solar. Isso ocorre porque o TiO_2 é ativado apenas por uma fração da radiação UV solar, devido ao seu *band-gap* de 3,2 eV. Esse valor corresponde a radiações com comprimento de onda inferior a 384 nm (Radecka *et al.*, 2008). Essa relação entre energia e comprimento de onda é dada pela equação de Max Planck,

$$E = h \cdot f \tag{1}$$

onde $h = 6{,}6260 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J \cdot s}$ é a constante de Planck, e f a frequência da radiação emitida (Félix *et al.*, 2016). O espectro eletromagnético na Figura 4 ilustra a proximidade da radiação UV com a luz visível. As ondas UV abrangem a faixa de 100 a 400 nm, enquanto a luz visível se estende de 400 a 750 nm.

Figura 4 – Faixas de onda UV, luz visível e infravermelho



Fonte: elaborado pela autora (2025)

Em relação à degradação do poluente gasoso tricloroetileno (TCE), Nguyen *et al.* (2023) demonstraram que, mesmo após exposições prolongadas à luz, não ocorre fotólise significativa do TCE na ausência de catalisador. Isso indica que a presença de um catalisador, como o TiO_2, é essencial para que a reação de degradação ocorra por fotocatálise heterogênea.

2.2.4 Reatores Fotoquímicos

A fotoquímica é um ramo da química que estuda o efeito da energia radiante na indução de reações químicas. Reatores fotoquímicos são dispositivos projetados para a realização dessas reações, sendo as principais transformações observadas nesses sistemas relacionadas a componentes químicos ou biológicos. Na maioria das aplicações, o foco está nas alterações químicas que ocorrem nas fases líquida ou gasosa dentro do reator (Blatchley III, 2022).

Segundo Paul R. Harris (1965), além da modelagem comum a todos os reatores, dois aspectos fundamentais devem ser analisados em reatores fotoquímicos: a especificação do perfil de intensidade luminosa ao longo do reator e a descrição da cinética de reação (Harris; Dranoff, 1965). Isso se deve ao fato de que nenhuma reação fotoquímica ocorre sem luz e sua evolução depende diretamente da cinética química.

Dada a relevância da luz em reatores fotoquímicos, os modelos devem ser desenvolvidos para maximizar a absorção luminosa, garantindo perfis de iluminação homogêneos e fontes de luz adequadas às exigências do processo. A compatibilidade entre as fontes luminosas e os componentes químicos deve ser considerada, assim como o uso de materiais transparentes na construção do reator. Para um transporte eficiente de fótons, a otimização geométrica do reator torna-se essencial, favorecendo a transferência de fótons e minimizando perdas de luz (Su, Y. *et al.*, 2014).

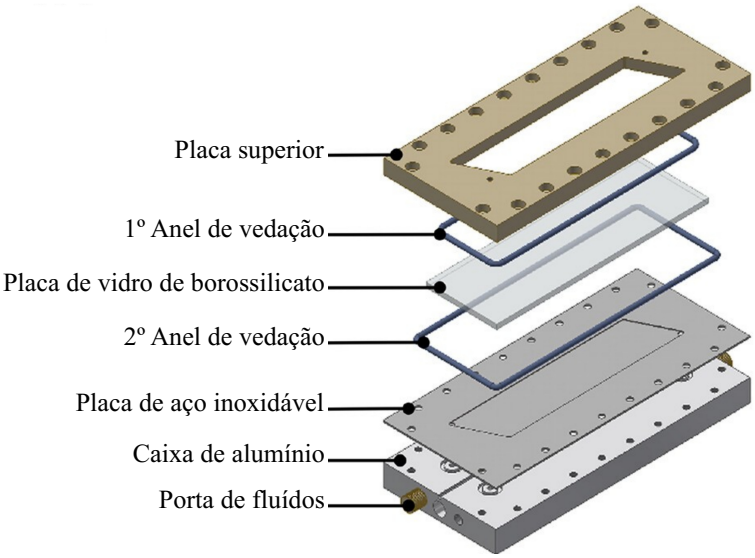
Levando em consideração a procura por uniformidade luminosa, reatores fotoquímicos de fluxo contínuo têm se mostrado mais promissores em comparação com os reatores batelada tradicionais, especialmente em aplicações que exigem alta eficiência e controle rigoroso sobre as condições de reação. Em um reator de fluxo contínuo, o fluido contendo o reagente é constantemente alimentado e removido, o que permite um controle mais preciso da exposição à luz, temperatura e tempo de residência. Isso resulta em maior uniformidade na distribuição de luz e melhoria na eficiência quântica do processo fotoquímico. Além disso, reatores de fluxo contínuo permitem um escalonamento mais fácil e seguro, minimizando riscos associados ao manuseio de grandes volumes de reagentes fotoativos (Rehm, 2020).

A evolução para microrreatores, que será abordada na próxima seção, intensifica ainda mais esses benefícios ao reduzir significativamente o volume de reação e aumentar a eficiência do processo, promovendo maior transferência de massa e calor devido à elevada razão área superficial/volume.

2.2.4.1 Reatores de Placa

Os reatores de placas (Figura 5) constituem uma configuração amplamente utilizada em processos fotocatalíticos devido à sua geometria compacta e eficiente. Caracterizam-se por possuir canais estreitos e superfícies planas, o que favorece uma ampla área de exposição à radiação e reduz a distância de penetração dos fótons. Essas características contribuem para uma distribuição mais uniforme da luz ao longo da seção transversal, fator crítico para reações que dependem da ativação luminosa.

Figura 5 – Componentes de um reator de placa



Fonte: adaptado de Khositanon *et al.* (2024)

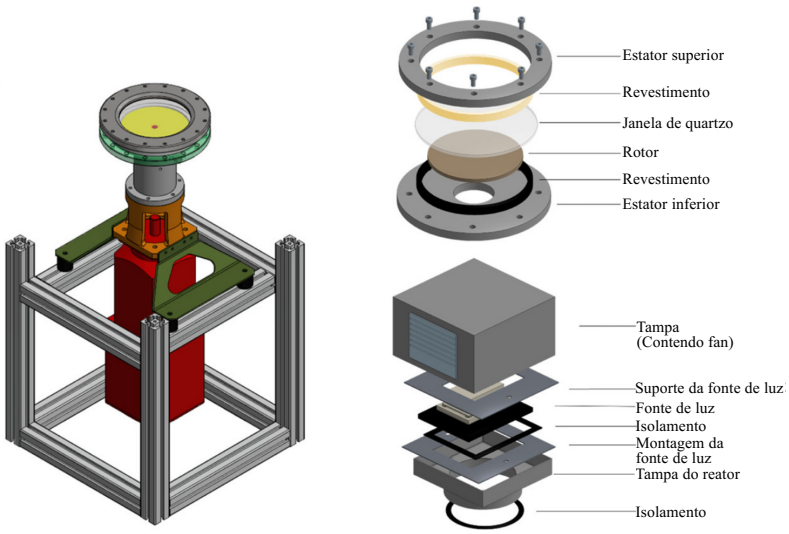
Nas últimas décadas, diferentes variações de reatores de placas têm sido propostas e avaliadas com o objetivo de otimizar a eficiência da conversão fotocatalítica. Essa tipologia permite flexibilidade na aplicação dos fotocatalisadores, que podem ser utilizados em suspensão, imobilizados diretamente nas paredes internas do reator ou fixados na superfície da janela de vidro que cobre o sistema (Morante *et al.*, 2024; Muñoz-Batista, 2024).

Um exemplo prático dessa abordagem foi apresentado por Khositanon *et al.* (2024), tendo utilizado um reator de placa com TiO_2 imobilizado na superfície interna da janela de vidro. O sistema foi empregado na hidroxilação de benzeno em fenol, utilizando H_2O_2 como agente oxidante. Nesse caso, a formação de radicais hidroxila foi favorecida pela combinação entre a boa exposição à luz e a proximidade do catalisador com a superfície reativa, demonstrando a viabilidade do uso de reatores de placa em processos oxidativos seletivos.

2.2.4.2 Reator de Disco Giratório (*spinning disk*)

O reator de disco giratório (Figura 6) é uma tecnologia promissora para o manuseio de sólidos em suspensões. Este tipo de reator gera um alto grau de cisalhamento e turbulência na mistura reacional através da rotação de um disco em um pequeno espaço entre o rotor e o estator. Como resultado, taxas elevadas de transferência de massa e calor têm sido reportadas para esse sistema, o que tem sido utilizado para intensificar vários processos e reações químicas.

Figura 6 – Componentes de um reator de disco giratório *spinning disk*)



Fonte: adaptado de Chaudhuri *et al.* (2022)

Recentemente, uma adaptação do reator de disco permitiu a irradiação homogênea de misturas reacionais dispersas, intensificando processos fotocatalíticos gás-líquido. O reator fotocatalítico "RS-SDR (pRS-SDR)", operando em modo disperso, mostrou-se

eficaz em sistemas contendo sólidos suspensos (Chaudhuri *et al.*, 2022).

2.2.4.3 Reatores Tubulares

Os reatores tubulares, quando utilizados para fotocatálise, consistem em tubos alongados por onde os reagentes fluem continuamente através de uma área iluminada. Esses tubos, geralmente feitos de materiais transparentes como vidro ou quartzo, permitem a passagem da luz UV ou visível necessária para ativar o fotocatalisador. O catalisador pode estar suspenso no fluido ou imobilizado nas paredes internas dos tubos. A montagem envolve a conexão com fontes de luz externas, como lâmpadas ou LEDs, dispostas ao longo do comprimento do tubo, garantindo uma iluminação uniforme.

Esses reatores oferecem vantagens como maior área de contato entre o fotocatalisador e os reagentes, aumentando a taxa de reação. Eles são ideais para operações em fluxo contínuo, com controle preciso de parâmetros como tempo de residência e temperatura. (Ayappan *et al.*, 2024) revisa os avanços recentes em fotocatalisadores à base de TiO_2 aplicados à purificação do ar, destacando estratégias inovadoras de design, fatores que influenciam a remoção de poluentes gasosos e otimizações no projeto dos reatores.

2.2.4.4 Reatores de Leito Fluidizado

Reatores de leito fluidizado são altamente eficazes no tratamento de contaminantes devido ao excelente contato entre catalisador e poluentes, baixa resistência à transferência de massa e distribuição uniforme da luz UV. Esses reatores têm se mostrado eficientes na remoção de poluentes persistentes em processos de tratamento de águas residuais.

Além disso, elementos internos como defletores, tubos, inserções e placas são frequentemente incorporados para modificar as estruturas de fluxo e otimizar a fluidização das partículas, adaptando o reator às exigências de cada aplicação. Essas modificações estruturais são fundamentais para aumentar a eficiência do processo em ambientes industriais.

Gouvea *et al.* (2024) utilizaram um reator de leito fluidizado para a degradação de 4-clorofenol, $ZnO/g - C_3N_4$/carbon xerogel como fotocatalisador. A degradação foi mais eficiente sob radiação solar, sendo a eficiência do processo fortemente dependente da

geração de radicais hidroxila.

2.2.4.5 Misturadores estáticos

Os reatores de mistura estática constituem uma abordagem emergente na engenharia de reatores químicos, promovendo micromistura eficiente sem partes móveis e, consequentemente, reduzindo custos operacionais e de manutenção. Diversos estudos demonstram a eficácia desses dispositivos para otimizar os processos de mistura tanto em escalas micro quanto macro. Por exemplo, Fourcade *et al.* (2001) desenvolveram uma metodologia inovadora que acopla simulações CFD a procedimentos de rastreamento de partículas para calcular a taxa média de afinamento das estriações em dois reatores de mistura estática comerciais, os modelos Kenics e SMX. Essa abordagem permitiu inferir a forma das estriações em desenvolvimento e converter trajetórias complexas em comportamentos mensuráveis, de acordo com a teoria de micromistura de (Ottino, 1989). Em uma linha de investigação voltada à otimização do desempenho hidráulico, (Hildner *et al.*, 2023) exploraram o design do Impeller SSM, inspirado em impulsores de bombas centrífugas. Esse estudo mostrou que o novo design do reator de mistura estática consegue reduzir significativamente a queda de pressão, atingindo reduções de até 18,2% em experimentos e aproximadamente 20% em simulações CFD, sem prejuízo à eficiência de mistura. A análise, fundamentada pelo índice KL, evidenciou que mesmo com a ocorrência de zonas de estagnação, a manutenção dos padrões de fluxo possibilita uma operação eficiente, demonstrando o potencial das modificações geométricas para a melhoria do desempenho desses reatores.

Paralelamente, a dinâmica do fluxo gás-líquido em reatores plug-flow integrados com misturadores estáticos foi investigada por (Wang, L. *et al.*, 2024) por meio de simulações CFD, nas quais se identificaram três padrões compostos de fluxo: o estratificado, o estratificado com ondas e o anular com ondas. A inclusão dos elementos de mistura promove aceleração local do fluido, intensificando o efeito inercial sobre as bolhas e resultando em sua fragmentação e dispersão. Tais alterações levaram a uma redução significativa do desvio relativo (RSD) e do diâmetro das bolhas, proporcionando um consumo energético otimizado em comparação com arranjos que utilizam diferentes números de elementos.

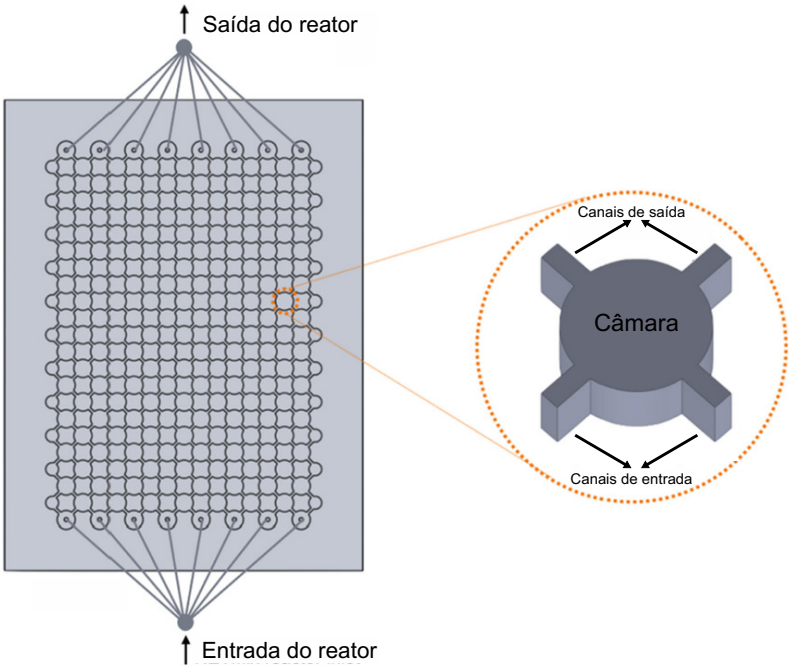
No âmbito das aplicações fotocatalíticas, Albertazzi *et al.* (2022) desenvolveram

um misturador estático projetado para enfrentar desafios impostos por reações com alta espessura óptica. Ao promover a recirculação dos reagentes em direção à fonte de luz, o dispositivo demonstrou elevar substancialmente as conversões em relação a um reator vazio, mesmo sob condições intensificadas de absorção e espalhamento da luz. Adicionalmente, o estudo evidenciou que a otimização da carga de catalisador, viabilizando cargas mais elevadas sem prejudicar a difusão luminosa, possibilita transformar processos fotocatalíticos em batelada em operações contínuas com comportamento *plug-flow*, ampliando as perspectivas de aplicação industrial.

Esses avanços ressaltam a versatilidade dos reatores de mistura estática, que combinam técnicas avançadas de modelagem e simulação com inovações experimentais para aprimorar tanto os mecanismos de micromistura quanto os aspectos hidráulicos do fluxo. Em vista desse cenário, o foco deste trabalho se direciona para a análise e modificação do NETmix, um reator e misturador químico inovador. O NETmix é composto por uma rede bidimensional de câmaras de mistura interligadas por canais de transporte, que criam zonas alternadas de mistura e segregação completas. Cada célula unitária é formada por uma câmara e quatro canais dispostos a 45° em relação à direção principal do fluxo (Figura 7). Acima de um número crítico de Reynolds nos canais, o sistema alcança um regime de fluxo laminar oscilatório autossustentado nas câmaras, resultando em uma mistura laminar intensa e repetitiva ao longo da rede. Esse reator foi desenvolvido por pesquisadores do Laboratório de Engenharia de Separação e Reação e do Laboratório de Catálise e Materiais (LSRE-LCM) da Universidade do Porto, Portugal (Laranjeira, 2005).

O design do reator NETmix permite a predefinição de taxas de mistura e diferentes esquemas de injeção de reagentes, possibilitando uma ampla gama de seletividades para reações complexas, variando entre os limites de reatores CSTR e PFR. O NETmix utiliza a energia de maneira eficiente para mistura, superando tanques agitados e misturadores estáticos convencionais, e proporciona controle preciso e reprodutível de misturas fluidas. A configuração geométrica do NETmix destaca-se como uma solução inovadora, conferindo-lhe duas características principais: um eficiente misturador e um reator químico. Isso resultou em melhorias significativas na eficiência de mistura e no controle de reações químicas. Por exemplo, em fotocatálise (Costa Filho *et al.*, 2019; Espíndola *et al.*, 2019; Lima *et al.*, 2016; Matiazzo *et al.*, 2022a), os estudos concentram-se na degradação de

Figura 7 – Estrutura das câmaras e canais do reator NETmix



Fonte: adapatado de Marques *et al.* (2024)

compostos contaminantes, avaliando diferentes parâmetros operacionais.

Outros estudos focaram no processo contínuo de produção de nanopartículas de fosfato de cálcio de alta pureza com aplicações em biomateriais (Lopes *et al.*, 2009), e na microencapsulação de Miglyol em melamina-formaldeído e de eugenol em acetato de celulose, para impregnação em materiais têxteis (toalhas, materiais hospitalares ou roupas de cama) com propriedades antimicrobianas e emolientes (Moreira *et al.*, 2020, 2022). Por outro lado, considera-se que a transferência de calor também é aprimorada devido à alta capacidade de mistura. Assim, existem estudos avaliando a eficiência da transferência de calor (Costa *et al.*, 2017; Fernandes *et al.*, 2023, 2024; Lopes *et al.*, 2023).

Recentemente, a eletrossíntese (com o chamado e–NETmix) tem atraído atenção pois possui o potencial de melhorar várias reações eletroquímicas e fotoquímicas, devido às melhorias na transferência de massa atribuídas principalmente ao misturador estático. Considerando esse regime, muitos estudos têm se concentrado na caracterização da mistura em sistemas NETmix (Cullen *et al.*, 2024; Marrocos *et al.*, 2024; Matos *et al.*, 2021, 2024; Laranjeira *et al.*, 2011; Pituco *et al.*, 2023), nos quais, geralmente, busca-se estabelecer uma relação entre o grau de mistura e a topologia do sistema (isto é, diâmetro da câmara). Dessa forma, a combinação entre eficiência de mistura, controle reacional e versatilidade

operacional posiciona o reator NETmix como uma plataforma promissora para aplicações que demandam intensificação de processos, como a fotocatálise heterogênea. Neste trabalho, o NETmix será avaliado quanto ao impacto de variações geométricas, como o diâmetro das câmaras, a abertura dos canais e o comprimento total do reator, sobre a distribuição de irradiância e a eficiência na degradação do poluente tricloroetileno, utilizando dióxido de titânio TiO_2 como catalisador. Os estudos serão conduzidos por meio de simulações numéricas em CFD, com foco na automação desse processo de modelagem e análise.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

As simulações em Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) têm sido aplicadas há décadas na engenharia química para a solução de problemas envolvendo transferência de calor (Khalid *et al.*, 2024; Nijemeisland; Dixon; Stitt, 2004; Sajjad *et al.*, 2024), transferência de massa (Chen *et al.*, 2024; Kashid; Agar; Turek, 2007; Yang, Y. *et al.*, 2016) e transporte de espécies (Fox, 2006; Marschall *et al.*, 2012; Yu *et al.*, 2024) em diferentes equipamentos, como reatores químicos (Jiang *et al.*, 2025; Wang, Zhe; Sun; Liu, N., 2025) e trocadores de calor (Zhang, X.; Ge; Lang *et al.*, 2024). O estudo e desenvolvimento de métodos em CFD são baseados em diversas linguagens de programação, como Fortran, C e C++ (Bogusz *et al.*, 1994) e, nos últimos anos, têm sido cada vez mais realizados também em *Python* (Idoko *et al.*, 2024).

Desde os primórdios da computação, a programação tem desempenhado um papel central na solução de problemas de engenharia assistida por computador (CAE). O surgimento de linguagens como FORTRAN possibilitou o uso de sistemas computacionais para resolver equações diferenciais complexas e otimizar processos industriais (Backus *et al.*, 1957). Com o passar das décadas, a programação tornou-se indispensável para o desenvolvimento de simulações dinâmicas (Dadebo; McAuley, 1995), controle de processos (Roberts, S. M., 1964) e modelagem de grandes sistemas industriais (Weifeng *et al.*, 2006), constituindo a base que sustenta as aplicações atuais de CFD.

O avanço das técnicas numéricas e da capacidade computacional permitiu que a CFD evoluísse para trabalhar na solução das equações de Navier-Stokes em geometrias complexas e sob diversas condições operacionais, ampliando seu alcance em problemas da engenharia química (Lodh, 2024). Tecnologias emergentes, como inteligência artificial (IA), computação em nuvem e Internet das Coisas (IoT), têm expandido ainda mais o potencial das ferramentas em CFD, promovendo uma nova revolução na forma de resolver problemas de engenharia (Ludermir, 2021).

Softwares comerciais como ANSYS Fluent (Kabdylkakov; Surayev; Irkimbekov, 2024; Viyyuri, 2024) e COMSOL Multiphysics (Sabol *et al.*, 2025; Zeeshan *et al.*, 2025) expandiram suas funcionalidades para integrar diferentes fenômenos físico-químicos em

simulações unificadas. Além disso, plataformas de código aberto como o OpenFOAM consolidaram-se como alternativas flexíveis e personalizáveis, especialmente pela capacidade de serem adaptadas via programação em linguagens como C++ e *Python* (Bogusz *et al.*, 1994; Idoko *et al.*, 2024).

Nas simulações em CFD, três etapas são cruciais no processo: o pré-processamento, a solução e o pós-processamento (Liu, Z., 2025). O pré-processamento envolve a preparação dos dados de entrada, como a definição da geometria, malha e condições de contorno, que influenciam significativamente a precisão e a estabilidade das simulações. A solução refere-se à resolução numérica das equações de balanço, em que as metodologias de discretização e os algoritmos de solução desempenham um papel fundamental na eficiência computacional. Finalmente, o pós-processamento é a fase de visualização e análise dos resultados obtidos, permitindo a interpretação física e a validação dos modelos utilizados (Zawawi *et al.*, 2018).

Uma ferramenta sem uma metodologia adequada representa mais um obstáculo do que uma solução. Diante disso, as sessões seguintes analisam a ordem de trabalho em simulações em CFD, demonstrando como as ferramentas de programação podem auxiliar em cada etapa e, em conjunto, formar uma metodologia eficaz de automação.

3.1 AUTOMAÇÃO NO PRÉ-PROCESSAMENTO: GERAÇÃO DE GEOMETRIA E MALHA NUMÉRICA

A geração de geometrias precisas é um dos primeiros e mais críticos passos para garantir a qualidade das simulações CFD. Na engenharia química, as geometrias variam desde sistemas simples como reatores tubulares (Lin, Y.; Zhang W. M., H.; Norinaga, 2022; Li, Y. *et al.*, 2024; Tobo *et al.*, 2023) até sistemas complexos como leitos empacotados (Chena *et al.*, 2020; Zahir *et al.*, 2023), trocadores de calor (Bhutta *et al.*, 2012; Congedo; Colangelo; Starace, 2012) e misturadores industriais (Haddadi *et al.*, 2020; Shabani *et al.*, 2012). Softwares como SolidWorks (Sher *et al.*, 2024), AutoCAD (Nuraini *et al.*, 2024) e ANSYS SpaceClaim (Tsitos; Yeganeh, 2023) são amplamente utilizados para modelagem CAD.

Inicialmente, os esforços para automação focaram na ligação direta entre geometria CAD e geração de malhas. Van der Velden (2007) propôs o uso do iSIGHT-FD para acoplamento automático entre CAD e simulação, integrando softwares comerciais e códigos próprios. Sua abordagem evidenciou os ganhos em produtividade e repetibilidade na análise de múltiplas alternativas de projeto voltados ao estudo de aeronaves por meio de modificações geométricas parametrizadas e execução automatizada de simulações.

No mesmo ano, Pegemanyfar *et al.* (2007) avançaram na automação de sistemas de combustão através do desenvolvimento do sistema PRECODES (Preliminary Combustor Design System) no contexto do projeto europeu INTELLECT D.M. O foco do estudo foi automatizar o processo de design de câmaras de combustão de baixa emissão, utilizando uma base de dados em Excel contendo regras de projeto e parâmetros. A geração da geometria CAD era integrada ao gerador de malhas ICEM-CFD, permitindo a criação automática de malhas estruturadas multiblocos. Essa abordagem garantiu alta comparabilidade entre diferentes geometrias de combustores, acelerando significativamente o processo de design.

No contexto específico da simulação de ciclones, Vegini (2007) desenvolveu o código CYCLO, baseado em um modelo multifásico euleriano-euleriano, validado com dados experimentais. A arquitetura do código permitiu a consideração de múltiplas fases sólidas e diferentes modelos de turbulência, tornando-se uma ferramenta robusta para análise e projeto de ciclones industriais.

Complementando essa visão de integração automatizada, Tomac e Eller (2011) discutiram a implementação de um ambiente específico para o design conceitual de aeronaves, o CEASIOM. A proposta incluiu a geração automática de malhas e a análise com modelos de diferentes fidelidades, embora tenham ressaltado desafios relacionados à robustez da malha em simulações RANS e à modelagem de geometrias não convencionais, ponto que reforça a importância da flexibilidade nos processos automatizados.

Anos depois, Pettinatti (2022) aplicou CFD na análise de separadores supersônicos, que combinam expansão adiabática, separação ciclônica e recompressão. Utilizando o Simcenter STAR-CCM+, o estudo evidenciou como a variação geométrica e o diâmetro das partículas impactam diretamente na eficiência do processo, apontando novamente para

a importância de ambientes que permitam simulações flexíveis, precisas e automatizadas em sistemas com alto grau de turbulência.

No setor industrial, a automação de modelos CFD também se mostrou promissora na redução de tempo de desenvolvimento. Kai (2023) aplicou uma metodologia a sistemas de exaustão, destacando como a geração automatizada de modelos permitiu maior agilidade no projeto de silenciadores de grande porte, sem comprometer a qualidade da simulação.

Na construção civil, Obadiah *et al.* (2024) utilizaram o ANSYS Workbench para simular o comportamento mecânico de concretos reforçados com fibras sob diferentes temperaturas. A modelagem numérica mostrou-se eficaz na previsão do comportamento estrutural, com boas correlações com dados experimentais. O estudo corroborou o uso de simulações como alternativa viável para validação experimental, com significativa economia de tempo e recursos.

Tecnologias recentes, como o uso de aprendizado por reforço para geração automática de malhas (Pan *et al.*, 2023) e automação de refinamento adaptativo no OpenFOAM (Hochberger; Richter, 2024), ampliam ainda mais a capacidade da automação nesta fase. McQuaid (2024) apresentou o acoplamento do método Solucionador Multifísico Adaptativo de Ordem Superior Cartesiano (CHAMPS) com *near body solvers* (NBS) para a automação de geração de malhas numéricas voltadas à previsão de fluxos de calor hipersônicos.

Hochberger e Elisabeth (2024) propuseram uma metodologia para automação do refino de malhas numéricas no software de código aberto OpenFOAM, com foco em simulações de fluxo de ar interno em escritórios. Destacaram a importância do refino da malha e da análise de critérios de qualidade para garantir a precisão dos resultados numéricos. O trabalho abordou a metodologia de automação aplicada ao refino de malhas em superfícies, apresentando os resultados obtidos e as limitações identificadas.

Em suma, a automação de malhas numéricas, assim como a automação da geração de domínio numérico (geometrias), representa um avanço significativo para a otimização de simulações computacionais. Contudo, desafios importantes persistem, incluindo a dificuldade de programar as especificidades de cada modelo geométrico na geração das malhas, uma vez que cada software apresenta seu próprio layout e requisitos, o que inter-

fere diretamente na programação dos setups de automação. Esses avanços indicam que o desenvolvimento de métodos de automação robustos e adaptativos é essencial para que as simulações em CFD tornem-se cada vez mais acessíveis, rápidas e precisas, promovendo novas oportunidades de aplicação em diversas áreas da engenharia.

3.2 AUTOMAÇÃO NO PROCESSAMENTO: *SOLVERS* NUMÉRICOS E INTEGRAÇÕES COMPUTACIONAIS

O *solver* em simulações de CFD, é uma etapa que envolve a resolução de complexas equações diferenciais parciais que descrevem o comportamento do escoamento de fluidos. Tradicionalmente, exige uma configuração manual dos parâmetros, tais como tolerâncias de convergência, esquemas de discretização e métodos de solução, além de ajustes específicos para a estabilidade e precisão dos resultados. Esse processo, embora essencial para o sucesso da simulação, pode ser demorado e propenso a erros, especialmente em modelos mais complexos ou com geometrias irregulares. Com os avanços recentes, a automação dessa etapa tem ganhado destaque com técnicas que buscam simplificar a configuração e o monitoramento do *solver*. Esses métodos de automação não apenas reduzem o tempo de configuração, mas também aprimoram a eficiência e a confiabilidade das simulações, adaptando parâmetros automaticamente para atender às especificidades de cada caso e garantindo maior controle sobre a convergência e precisão dos resultados.

Slack *et al.* (2004) aplicaram práticas de automação no projeto de hidro-ciclones, desenvolvendo interfaces simples para que usuários sem profundo conhecimento em CFD pudessem configurar e executar simulações baseadas em metodologias de modelagem consolidadas.

Pouco depois, Morvan (2005) demonstrou como a automação de simulações complexas poderia ser implementada utilizando linguagens de script, como PERL, integradas diretamente aos arquivos de comando do *solver* CFX-5. O estudo focou na simulação de ambientes de poluição atmosférica em plantas de tratamento de água. Por meio da automação, dados coletados remotamente eram incorporados diretamente nas simulações, que eram ajustadas e atualizadas em tempo real. O trabalho evidenciou que a utilização de scripts pode tornar o uso de CFD acessível a uma comunidade mais ampla dentro

de organizações, ao permitir a configuração e execução de simulações por usuários não especialistas, além de abrir possibilidades para o uso remoto de recursos de CFD via web.

Seguindo na pesquisa de ciclones, Dias (2009) aprofundou a discussão sobre o uso de CFD nessa área, avaliando como diferentes modelos de turbulência e condições de contorno influenciam a dinâmica do escoamento. Sua análise comparativa entre modelos multifásicos mostrou que abordagens com múltiplas fases sólidas oferecem maior acurácia e escalabilidade, reforçando a relevância da automação na condução de simulações de maior complexidade.

Mais recentemente, Jovanovic *et al.* (2021) introduziram o MCPlas, um conjunto de scripts em MATLAB integrados ao COMSOL Multiphysics via o módulo LiveLink, com o objetivo de automatizar a geração de modelos fluidodinâmicos para o estudo de descargas de barreira dielétrica (DBD) em plasmas não térmicos. O MCPlas permitiu a construção automática de modelos baseados em equações diferenciais para diferentes regimes de operação (1D e 2D axisimétricos), simplificando a análise de fenômenos complexos, como a interação de filamentos de plasma com superfícies dielétricas. A automação possibilitou a rápida adaptação dos modelos a diferentes níveis de complexidade geométrica, evidenciando ganhos expressivos em eficiência e flexibilidade no estudo de plasmas aplicados.

Zirwes *et al.* (2018) propuseram uma abordagem para automatizar a geração de bibliotecas químicas diretamente no OpenFOAM. Os autores desenvolveram uma ferramenta capaz de ler os dados de entrada e as taxas de reação, convertendo-os diretamente em código-fonte C++, que é compilado em uma biblioteca do OpenFOAM e pode ser utilizado diretamente em simulações em CFD.

É relevante citar o estudo de Lange *et al.* (2021), que apresenta diversos aspectos sobre a automação do processo em CFD, como a disponibilidade de recursos para simulação que geralmente não cobrem as necessidades de computação, a estrutura da automação que deve comportar usuários que não sejam especialistas em TI, o uso de High-Performance Computing (HPC), entre outros.

Posteriormente, Papkov *et al.* (2023) demonstraram o uso de *Python* para auto-

matizar séries de simulações no Ansys Fluent, acelerando análises paramétricas tanto para geometrias simples quanto para complexas. Assim, o grupo realizou uma automação para otimização geometria do aerofólio NACA0018.

Liu, Z. (2025) propôs o JIACFD, um conjunto de ferramentas de automação completa para simulações CFD voltado à simulação de canais de fluxo, abordando desde a definição de parâmetros até o pós-processamento via templates e Shell script, eliminando a necessidade de arquivos de geometria intermediários. Os cálculos numéricos foram efetuados através da biblioteca OpeanFOAM. De forma geral, a automação completa do processo de simulação foi atingida com o uso de diversos softwares intermediários e diferentes linguagens de programação.

3.3 AUTOMAÇÃO NO PÓS-PROCESSAMENTO

O pós-processamento de simulações CFD, tradicionalmente realizado de maneira manual, também tem sido alvo de esforços de automação, visando acelerar a análise de resultados e permitir avaliações mais amplas e sistemáticas. Benoit (2015) apresentou o Cassiopee, uma ferramenta de código aberto composta por módulos em Python, dedicada a operações de pré e pós-processamento em CFD.

Baseada no padrão de dados CGNS, a ferramenta permite a criação de fluxos de trabalho customizados para manipulação de malhas, dados de simulação e extração de variáveis de interesse. Além de acelerar tarefas rotineiras, o Cassiopee mostrou-se flexível para lidar com problemas não padronizados, como a fusão de malhas e soluções provenientes de diferentes *solvers*.

Complementando esse cenário, Pullan (2017) propôs uma abordagem baseada em banco de dados para o pós-processamento de grandes conjuntos de dados CFD. A metodologia envolve o armazenamento de dados processados em um servidor remoto e a visualização interativa através de um cliente web. A estrutura do banco de dados é hierárquica e permite que o usuário navegue das configurações gerais (como geometria e condições de operação) até dados detalhados (como distribuições de sustentação e cortes do campo de escoamento). A flexibilidade e interatividade da ferramenta foram demonstradas

em casos aplicados, como o perfil Onera M6 e um compressor de três estágios, evidenciando sua aplicabilidade para análises comparativas extensivas.

Tajsoleiman *et al.* (2019) desenvolveram um método de automatização da criação de modelos compartimentais derivados de resultados CFD, voltado para aplicações em biorreatores. O processo permitiu a conversão automática de informações de campo de escoamento em representações compartimentais simplificadas, otimizando o tempo de simulação sem grandes perdas de precisão.

Mais recentemente, Nascimento *et al.* (2022) integraram algoritmos de processamento de imagem com CFD para automatizar a quantificação de vazamentos submarinos. Utilizando dados de ROVs (Remotely Operated Vehicles), o sistema extraiu parâmetros hidrodinâmicos, como diâmetro e velocidade de bolhas, reduzindo significativamente o tempo de análise manual.

Paralelamente, o uso de inteligência artificial para potencializar a automação de processos CFD tem ganhado destaque. Wong *et al.* (2024) propuseram o framework PREDO, que integra modelos de linguagem e visão para a geração automática de geometrias e otimização evolutiva com base em resultados CFD. Já Gbadago *et al.* (2025) desenvolveram um framework que combina modelagem preditiva via IA, otimização de hiperparâmetros e simulações automatizadas com OpenFOAM. O sistema demonstrou alta precisão na validação de modelos de escalonamento de reatores químicos, estabelecendo um novo patamar na integração entre CFD e aprendizado de máquina.

3.4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Apesar dos avanços significativos observados em diversas áreas, a literatura ainda carece de fluxos automatizados de CFD voltados especificamente para aplicações da engenharia química, particularmente em sistemas complexos como reatores químicos e trocadores de calor. A diversidade de fenômenos físicos e a necessidade de integração multiparamétrica reforçam a importância de novos estudos nessa área.

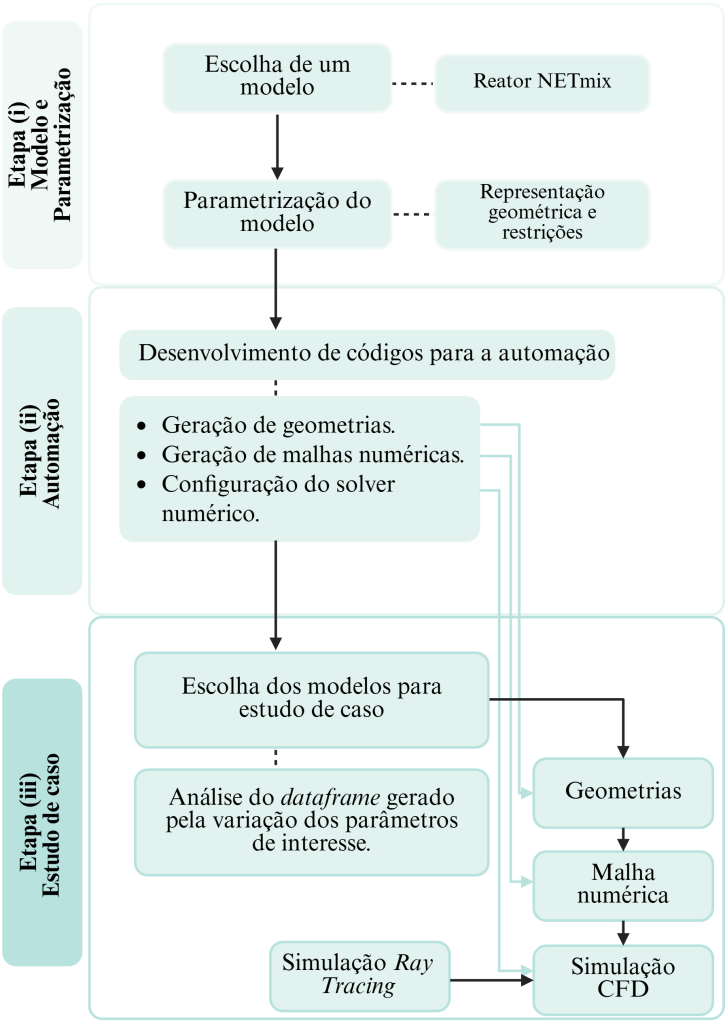
Diante desse cenário, a presente pesquisa propõe-se a contribuir para o desenvolvimento de metodologias de automação de simulações CFD aplicadas à engenharia química,

buscando ampliar a eficiência analítica, reduzir o tempo de projeto e viabilizar estudos de otimização de alta complexidade.

4 METODOLOGIA

Neste capítulo os procedimenthttps://www.overleaf.com/project/688771012c58f3f7015dab9fos adotados no desenvolvimento deste estudo serão abordados. A metodologia foi organizada em três etapas principais: (i) a definição do modelo e a parametrização do sistema, (ii) o desenvolvimento de uma metodologia de automação das simulações em CFD e (iii) a aplicação prática dessa metodologia de automação em um estudo de caso envolvendo a degradação de tricloroetileno por fotocatálise heterogênea. A Figura 8 apresenta uma visão geral do fluxo metodológico adotado neste trabalho.

Figura 8 – Representação esquemática das três etapas metodológicas desenvolvidas neste trabalho



Fonte: elaborado pela autora (2025)

Na primeira etapa, são definidos o modelo físico adotado para as simulações e

os principais parâmetros que descrevem o sistema. Essa etapa estabelece as bases para a padronização e a repetibilidade das simulações automatizadas.

A segunda etapa envolve o desenvolvimento de rotinas para automatizar as três fases principais do processo de simulação em CFD: geração da geometria (CAD), criação da malha numérica e configuração do *solver*. Essa automação busca reduzir o tempo de preparação das simulações, aumentar a consistência dos modelos e permitir a execução sistemática de múltiplas variações geométricas com mínima intervenção manual.

Por fim, na terceira etapa, a metodologia automatizada é aplicada a um estudo de caso com reatores fotocatalíticos utilizando dióxido de titânio (TiO_2) como fotocatalisador. São gerados diferentes submodelos do reator NETmix, que passam pelas etapas automatizadas de CAD, malha e simulação. Adicionalmente, são realizadas simulações ópticas complementares via ray tracing, com o objetivo de avaliar a distribuição de luz nos diferentes modelos geométricos. Embora não façam parte da automação, essas simulações são essenciais para garantir a coerência física dos resultados.

O capítulo está estruturado da seguinte forma: a Seção 4.1 apresenta a definição do modelo adotado e sua parametrização; a Seção 4.2 descreve o processo de automação das simulações CFD; e a Seção 4.3 mostra a aplicação prática da metodologia por meio de um estudo de caso. Por fim, a Seção Simulação Ray Tracing aborda a modelagem da distribuição da luz nos sistemas simulados.

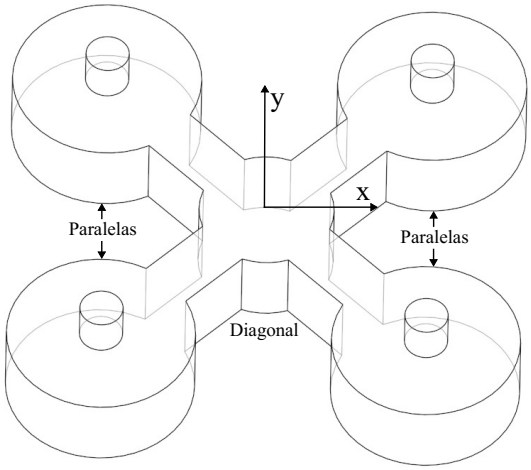
4.1 MODELO E PARAMETRIZAÇÃO

O processo de modelagem geométrica envolve a parametrização de um modelo base, que serve como referência para expandir e aplicar o método para outras geometrias. A construção cartesiana do modelo é realizada por meio da parametrização, que será detalhada posteriormente. A parametrização facilita a criação do modelo e também estabelece a conexão entre o modelo cartesiano e o código a ser desenvolvido para gerar as geometrias.

Um modelo tridimensional do reator NETmix foi escolhido como modelo base

para apresentação da metodologia. Esse modelo é geralmente definido por câmaras de mistura interligadas por quatro canais de fluxo estruturados a 45° em relação ao eixo X (Figura 9).

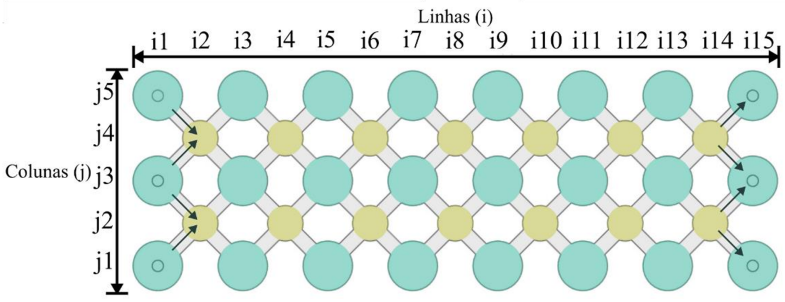
Figura 9 – Representação tridimensional de uma célula unitária do reator NETmix, composta câmaras de mistura interconectadas e canais de fluxo arranjados à 45º em relação ao eixo X



Fonte: elaborado pela autora (2025)

Essa estrutura base é amplamente utilizada experimentalmente. A geometria pode ser modificada de diversas formas, como alteração no número de linhas e colunas (Figura 10), no diâmetro das câmaras, na largura dos canais, na adição de canais horizontais e, em alguns casos, na variação da altura do reator. Neste trabalho, toda a estrutura foi modelada em milímetros.

Figura 10 – Representação da distribuição de linhas e colunas nos submodelos do reator NETmix desenvolvidos neste trabalho. Onde as linhas são paralelas ao escoamento, definindo o comprimento do reator e interferindo no tempo de residência, enquanto as colunas determinam a quantidade de entradas e saídas, afetando a distribuição do fluxo



Fonte: elaborado pela autora (2025)

Na parametrização, o modelo foi dividido com base nas câmaras de mistura. As câmaras de entrada de fluxo e todas as que são paralelas a elas foram denominadas "câmaras paralelas" realçadas em verde na Figura 10, enquanto as câmaras internas, localizadas no centro dessas câmaras, foram chamadas de "câmaras diagonais" realçadas em amarelo na Figura 10. Essa distinção foi fundamental para a implementação no código, onde, para as câmaras paralelas, tem-se:

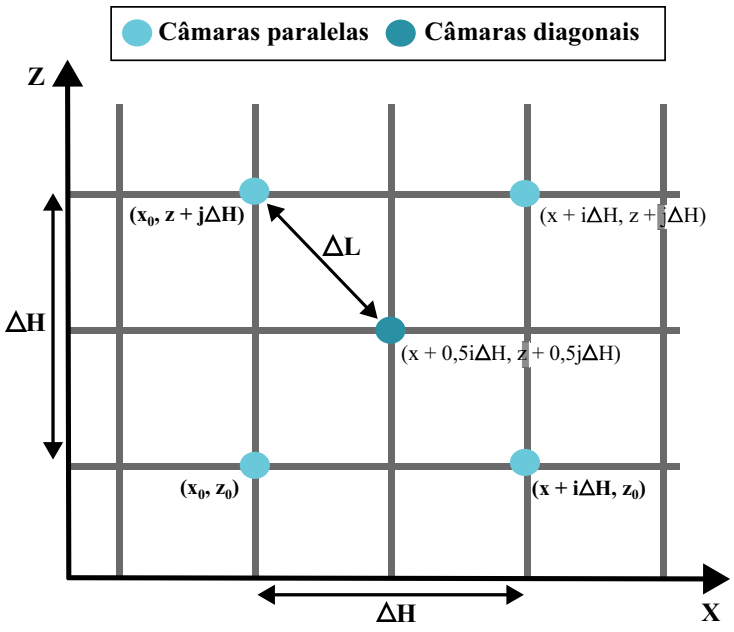
$$(x_{i,j}, y_{i,j}) = (x_0 + j \cdot \Delta H, y_0 + i \cdot \Delta H) \tag{2}$$

e para as câmaras diagonais:

$$(x_{i,j} - 1, y_{i,j} - 1) = (x_0 + (0.5j) \cdot \Delta H, y_0 + (0.5i) \cdot \Delta H) \tag{3}$$

onde ΔH representa o espaçamento fixo entre os centros das câmaras. Para exemplificar a distribuição espacial usada na formulação matemática, a Figura 11 mostra uma malha cartesiana bidimensional ortogonal, que representa como as câmaras foram distribuídas ao longo do domínio.

Figura 11 – Representação esquemática da disposição estruturada de câmaras paralelas e diagonais em um plano cartesiano bidimensional.

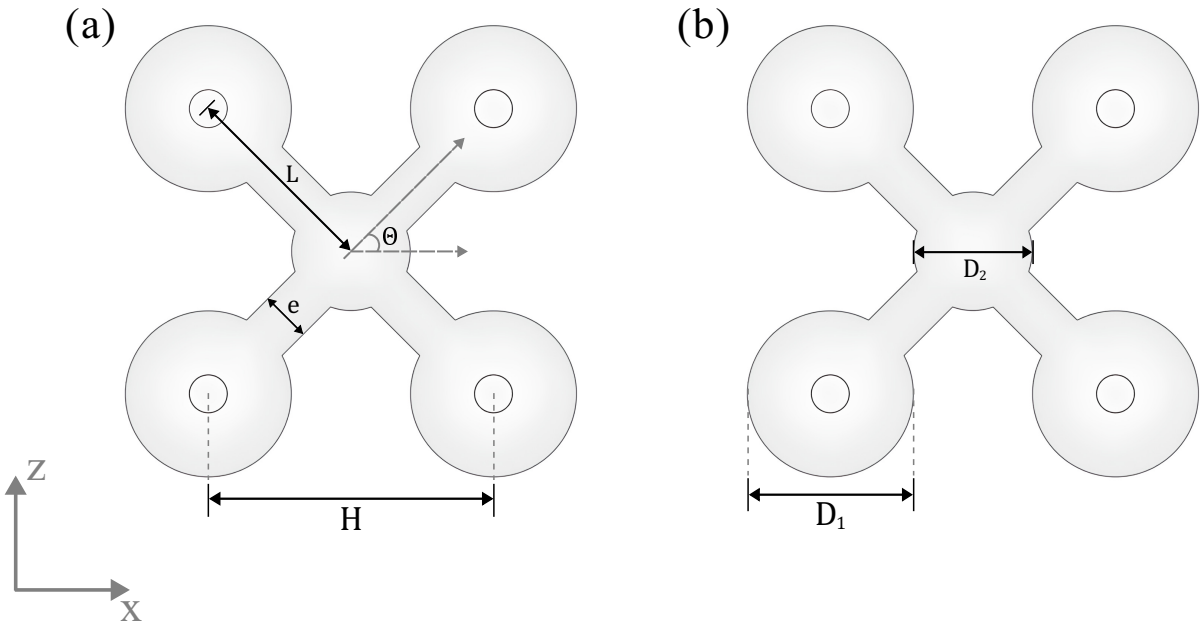


Fonte: elaborado pela autora (2025)

Todos os modelos são compostos por pelo menos uma célula unitária, como apresentado na Figura 9, contendo pelo menos quatro câmaras paralelas, duas de entrada de fluxo e duas de saída, com uma câmara diagonal central. As câmaras paralelas sempre estarão a uma distância fixa H. Por consequência, uma distância fixa L determina a distância entre as câmaras paralelas das diagonais.

Parâmetros como e e Θ são responsáveis por definir o diâmetro dos canais de conexão. Em relação ao diâmetro das câmaras, em geometrias denominadas "homogêneas", todas as câmaras têm o mesmo diâmetro. Por outro lado, em geometrias denominadas "heterogêneas" o diâmetro das câmaras paralelas difere do das câmaras diagonais, definidos como D_1 e D_2, respectivamente. Todos esses parâmetros podem ser vistos na Figura 12.

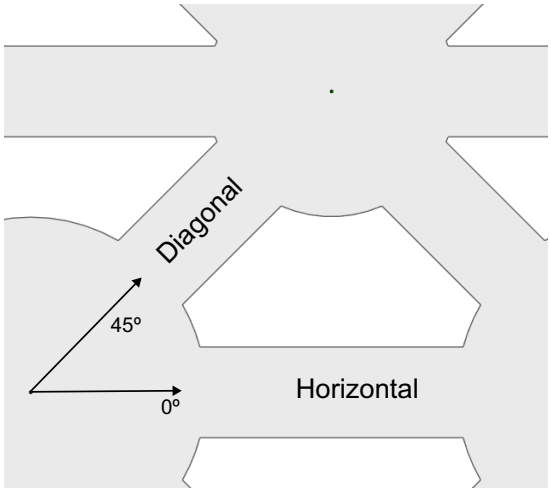
Figura 12 – Principais parâmetros considerados na parametrização: (a) parâmetros de distância e abertura dos canais de conexão, onde "e"representa a largura dos canais; (b) diâmetros das câmaras de mistura, onde D1 representa o diâmetro das câmaras paralelas e D2 representa o diâmetro das câmaras diagonais



Fonte: elaborado pela autora (2025)

A respeito dos canais, dois tipos de arranjo são possíveis. Os canais de conexão a 45° das direções X e Y são chamados de canais diagonais, enquanto os canais a 0° da direção X são chamados de canais horizontais, ausentes na geometria base, mas podem ser adicionados como exemplificado na Figura 13.

Figura 13 – Representação dos canais de fluxo que interligam as câmaras de mistura, onde os canais diagonais são dispostos à 45º do eixo X e os canais horizontais ficam à 0 graus do eixo X



Fonte: elaborado pela autora (2025)

É importante definir o comprimento das linhas p e d conforme descrito nas Equações (4) e (5) e ilustrado na Figura 14. O comprimento p é dado como o comprimento total do canal quando esse é visto como um retângulo e d é a altura da seção do círculo formado pela circunferência da câmara.

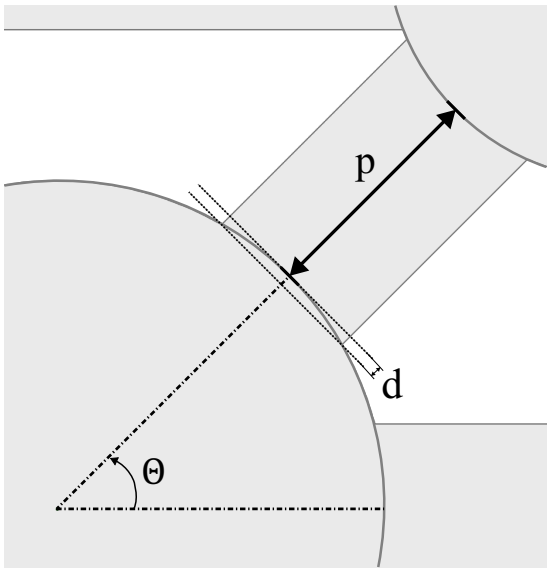
$$p = L - (2\,r) \tag{4}$$

$$d = r\sqrt{r^2 - \left(\sin\left(\vartheta\, r\right)^2\right)} \tag{5}$$

Esses parâmetros são fundamentais, pois a geração do canal via *script*, conforme será apresentado na Seção 4.2.1 "Automação da geração de geometrias", é realizada a partir de elementos básicos de desenho, ou seja, por meio da criação de linhas. Para que essas linhas sejam geradas, é necessário definir uma posição inicial e uma posição final no sistema cartesiano. A posição final da linha, por sua vez, será determinada pela soma do comprimento p com a variação d.

Além disso, em algumas situações, é importante determinar a área tanto dos canais quanto das câmaras. Como pode ser observado na Figura 14, uma parte da área do

Figura 14 – Representação esquemática do comprimento dos canais no modelo NETmix. O comprimento do canal (p) e a distância de deslocamento (d) são parâmetros geométricos-chave que definem a extensão dos canais de conexão entre as câmaras.



Fonte: elaborado pela autora (2025)

canal A_{ch} é ocupada pela área do círculo. Portanto, para obter a área real do retângulo, deve-se utilizar a Equação (6):

$$A_{ch} = (p + 2d)\, e - 2s_c \tag{6}$$

onde $p + 2d$ representa o comprimento total, e representa a largura do canal e o produto deles gera a área do retângulo completo. O fator $2S_c$ é a subtração das áreas de seção do círculo que excedem a área do retângulo, onde S_c é calculado através da Equação (7):

$$S_c = \frac{1}{2}[\vartheta r^2 - e(r - d)] \tag{7}$$

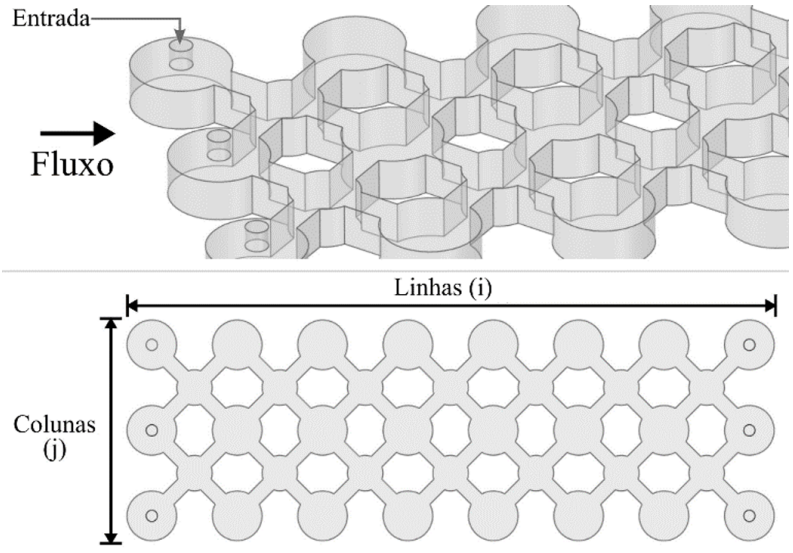
As áreas das câmaras são determinadas como a área do círculo A_c, conforme a Equação (8).

$$A_c = \pi r^2 \tag{8}$$

A área das câmaras e canais, além de ser uma informação importante, também tem papel na etapa a ser apresentada na seção 4.2.1 "Automação da geração de geometrias", pois é uma das formas de seleção de região utilizada pelo software *SpaceClaim*.

Além das variações nos diâmetros das câmaras e na abertura dos canais, outra possível modificação estrutural diz respeito ao número de linhas e colunas do modelo, como ilustrado anteriormente na Figura 10. As estruturas alinhadas com a direção do fluxo são denominadas linhas, enquanto as perpendiculares são chamadas de colunas (Figura 15). O aumento no número de linhas, portanto, influencia diretamente no tempo de residência do poluente no reator pois aumenta o comprimento dos modelos.

Figura 15 – Distribuição das linhas e colunas do reator em relação ao fluxo, a variação do número de linhas define o comprimento do reator e interfere no tempo de residência do poluente, sendo um dos parâmetros geométricos principais na variação paramétrica dos modelos



Fonte: elaborado pela autora (2025)

Embora o modelo NETmix tenha sido utilizado como exemplo para a demonstração da metodologia, a abordagem de parametrização desenvolvida é generalizável e pode ser aplicada a uma ampla variedade de modelos geométricos. Ao seguir o conceito de parametrização adotado nessa metodologia, torna-se possível descrever diferentes geometrias

através de variáveis de controle, facilitando sua tradução para scripts de geração CAD automatizados. Dessa forma, a criação de novos domínios geométricos, sejam eles reatores, trocadores de calor, misturadores ou outros equipamentos, pode ser realizada de forma sistemática e escalável, sem a necessidade de intervenção manual no ambiente gráfico.

4.1.0.1 Estrutura do reator NETmix para fotocatálise heterogênea

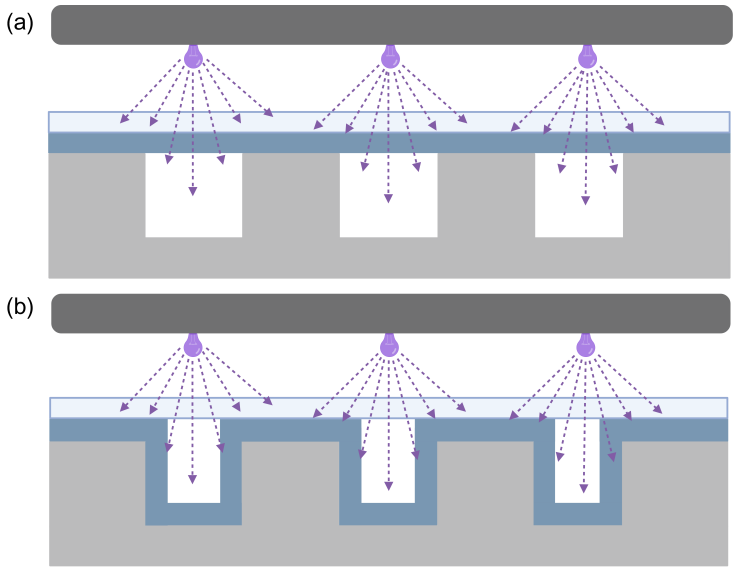
Como citado anteriormente, o NETmix é um reator de mistura que comporta diversos tipos de reações químicas, como a produção de nanomateriais em que a eficiência da mistura é essencial (Gomes, P. J. d. C. *et al.*, 2011), o processo Fischer-Tropsch (Coelho, 2018), a reforma de metano a vapor (Dias, L. B. S. A., 2018), a fotocatálise (Fonseca *et al.*, 2023), entre outros. A fotocatálise heterogênea será o foco do estudo de caso neste trabalho devido à sua crescente relevância na degradação de contaminantes como o TCE, além do desafio prático relacionado à modelagem do domínio numérico para esse tipo de processo no NETmix.

Embora o domínio numérico utilizado na simulação em CFD permaneça o mesmo, modelos voltados à simulação de processos fotocatalíticos frequentemente exigem o acoplamento da modelagem da radiação incidente. Isso inclui a simulação das fontes de luz responsáveis por fornecer a irradiância necessária para ativar os fotocatalisadores da reação. Para esse fim, realiza-se uma simulação por *Ray Tracing*, que permite calcular a absorção de fótons em cada submodelo, tornando a representação física do processo mais precisa. Dessa forma, alguns ajustes são necessários na construção do modelo para que a automação proposta seja compatível com simulações que combinam *Ray Tracing* e CFD.

Um dos aspectos fundamentais na preparação dessa geometria para uso em softwares de CFD, especialmente no *Ansys Fluent*, é a definição das regiões onde as reações fotoquímicas ocorrerão. No reator NETmix, além das reações no volume, as reações heterogêneas envolvendo fotocatalisadores imobilizados nas paredes do reator são particularmente vantajosas, sobretudo em processos fotocatalíticos. Para viabilizar essas simulações, foi necessário desenvolver um mecanismo capaz de gerar geometrias que permitissem a inclusão dessas regiões, garantindo a modelagem adequada tanto das reações quanto do perfil luminoso.

No NETmix, foram adotadas duas metodologias de iluminação: "iluminação de lado posterior" (*back-side illumination* - BSI) e "iluminação de lado frontal" (*front-side illumination* - FSI). No método BSI, o fotocatalisador é imobilizado na superfície do vidro, acima do fluxo, sendo iluminado pelo lado posterior. No método FSI, o fotocatalisador é imobilizado nas paredes inferiores e laterais do reator, com o fluxo de reagente passando sobre sua superfície, enquanto a luz incide através do fluxo, iluminando a parte superior do fotocatalisador (ver Figura 16).

Figura 16 – Mecanismos de iluminação no reator NETmix. (a) iluminação de lado posterior (BSI), onde o catalisador é depositado na superfície superior do reator e iluminado de cima. (b) iluminação de lado frontal (FSI), onde o catalisador é colocado na superfície inferior do reator, com a luz penetrando através do reagente em escoamento.



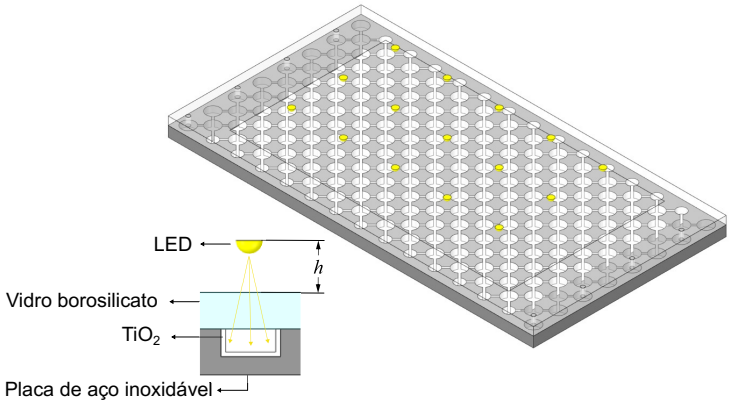
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Duas abordagens podem ser adotadas para a geração da superfície catalítica no software *SpaceClaim*, dependendo do tipo de irradiância considerada na simulação. Na primeira abordagem, assume-se uma irradiância fixa e homogênea ao longo de todo o reator, o que permite uma construção geométrica mais simples e rápida. Nessa configuração, as superfícies internas do volume do reator onde o fotocatalisador está presente são definidas como uma *NamedSelection*, permitindo que sejam reconhecidas separadamente no ambiente CFD e configuradas como condições de contorno. Após a criação do volume, as regiões catalíticas são selecionadas conforme a distribuição desejada, seja como BSI ou FSI.

Na segunda abordagem, voltada para simulações que consideram a distribuição

da irradiância simulada, a geometria do modelo precisa ser modificada para comportar o acoplamento com a simulação por *Ray Tracing*. Nesse caso, o fotocatalisador deixa de ser apenas uma superfície 2D e passa a ser modelado como uma camada tridimensional aderida às paredes internas do reator. Essa mudança implica em maior complexidade geométrica e, portanto, em um processo de modelagem mais robusto. Além disso, como a distribuição de luz em sistemas fotocatalíticos geralmente não é homogênea (Matiazzo *et al.*, 2024; Wang *et al.*, 2012), é necessário incorporar elementos adicionais à geometria no software *Ansys Speos* para simular corretamente o perfil de irradiância. O modelo utilizado no *Speos* deve reproduzir fielmente o sistema experimental para fotocatálise, incluindo a estrutura metálica do reator, o vidro superior e o conjunto de LEDs, conforme ilustrado na Figura 17. Para viabilizar esse nível de detalhamento, o código desenvolvido foi adaptado para gerar automaticamente esses componentes no modelo. Maiores detalhes a respeito do código e da geração dos componentes serão apresentados na seção 4.2.1 "Automação da geração de geometrias".

Figura 17 – Representação detalhada do reator NETmix, incluindo sua estrutura metálica, vidro superior e conjunto de LEDs.



Fonte: adaptado de Matiazzo *et al.* (2022b)

Dessa forma, além das variações possíveis no modelo (homogêneos ou heterogêneos, com ou sem canais horizontais, raio das câmaras e abertura dos canais), o usuário também poderá variar o tipo de distribuição de LEDs e a distância entre o conjunto de LEDs e o reator.

4.1.0.2 Restrições paramétricas

A construção das geometrias depende da escolha de parâmetros, principalmente o raio e o ângulo de abertura dos canais. Contudo, essas escolhas possuem restrições para garantir que a geometria respeite condições físicas aceitáveis. No modelo homogêneo, duas restrições principais garantem que os canais não se sobreponham e que as câmaras de mistura não se intersectem, como mostrado nas Equações (9) e (10).

$$\vartheta \leq 89^{\circ} \tag{9}$$

$$r < \frac{L}{2} \tag{10}$$

No caso do modelo homogêneo com canais horizontais, a restrição para o ângulo de abertura torna-se:

$$\vartheta \leq 44.8^{\circ} \tag{11}$$

No modelo heterogêneo, a restrição angular depende do valor do raio das câmaras diagonais, pois o ângulo de abertura do canal não pode exceder o diâmetro das câmaras paralelas. Essa restrição aplica-se sempre que o raio da câmara diagonal for maior que o da câmara paralela. Para uma melhor compreensão, considere a largura do canal em formato de linha reta calculada pela Equação (12). A restrição para a largura do canal será:

$$e < 2r_p \tag{12}$$

Contudo, essa restrição é negligenciável quando o raio da câmara diagonal é menor que o da câmara paralela. Nesse caso, a restrição radial é:

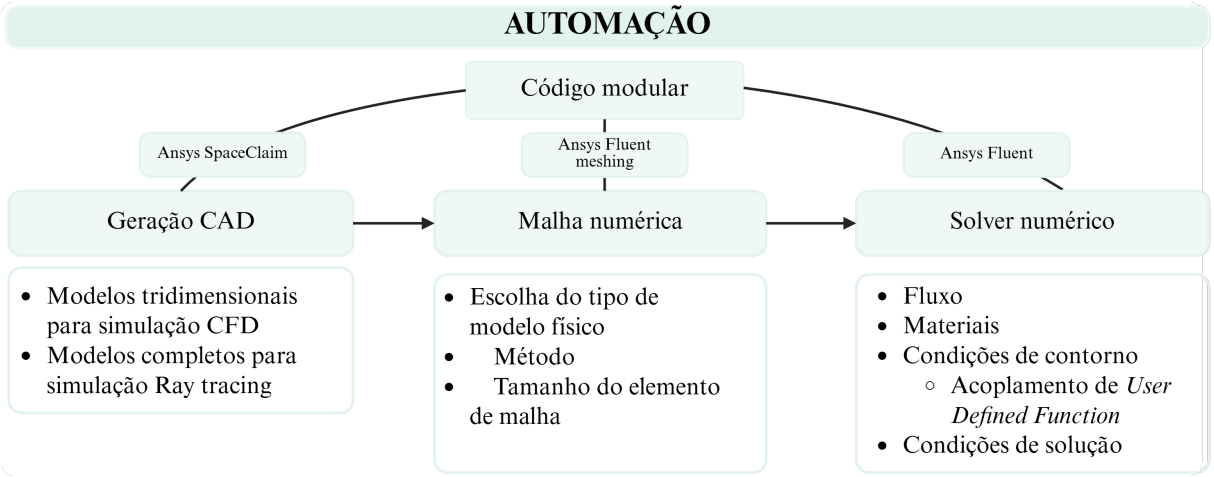
$$r_p + r_d < \frac{L}{2} \tag{13}$$

Para o modelo heterogêneo com câmaras horizontais, a restrição da Equação (12) aplica-se quando $r_d < r_p$. Além disso, a restrição angular da (11) permanece válida para evitar interseções entre os canais, assim como a restrição radial da Equação (13). Nos modelos com canais horizontais, é necessário um mínimo de três linhas e três colunas para viabilizar a formação de um canal horizontal.

4.2 AUTOMAÇÃO

Conforme introduzido anteriormente, a primeira etapa da metodologia consiste na automação do processo de simulação em CFD. O objetivo principal é otimizar a integração entre as ferramentas de software utilizadas nas diferentes fases da simulação: pré-processamento, solução e pós-processamento. A estrutura proposta foi desenvolvida para ser aplicada em diferentes plataformas da empresa Ansys ®, responsável por softwares de simulação de engenharia, com foco na execução de múltiplas simulações com mínima intervenção manual. O fluxo metodológico é ilustrado na Figura 18.

Figura 18 – Representação esquemática do fluxo de automação por meio de Softwares da plataforma Ansys, incluindo geração geométrica, malha numérica e *solver* numérico



Fonte: elaborado pela autora (2025)

No pré-processamento, a geração das geometrias é realizada no *Ansys SpaceClaim*, enquanto a criação das malhas numéricas ocorre no *Ansys Fluent Meshing* e a etapa de solução compreende as simulações em CFD conduzidas no *Ansys Fluent*.

Nesta seção, são apresentados em detalhes os procedimentos desenvolvidos para

automatizar cada uma dessas etapas, com ênfase na padronização dos fluxos de trabalho, no uso de *scripts* e na integração entre ferramentas, visando agilidade, reprodutibilidade e escalabilidade na avaliação de diferentes configurações geométricas.

As etapas de geração da malha numérica e da solução numérica utilizam bibliotecas baseadas em *Python* por meio da interface *PyAnsys*, que fornece módulos abrangentes para interação programática com processos de simulação.

4.2.1 Automação da geração de geometrias

Utilizando a linguagem de programação *Python* integrada ao software CAD *Ansys SpaceClaim*, o código parametrizado foi desenvolvido com o objetivo de facilitar a generalização de variáveis e viabilizar a criação de múltiplos modelos.

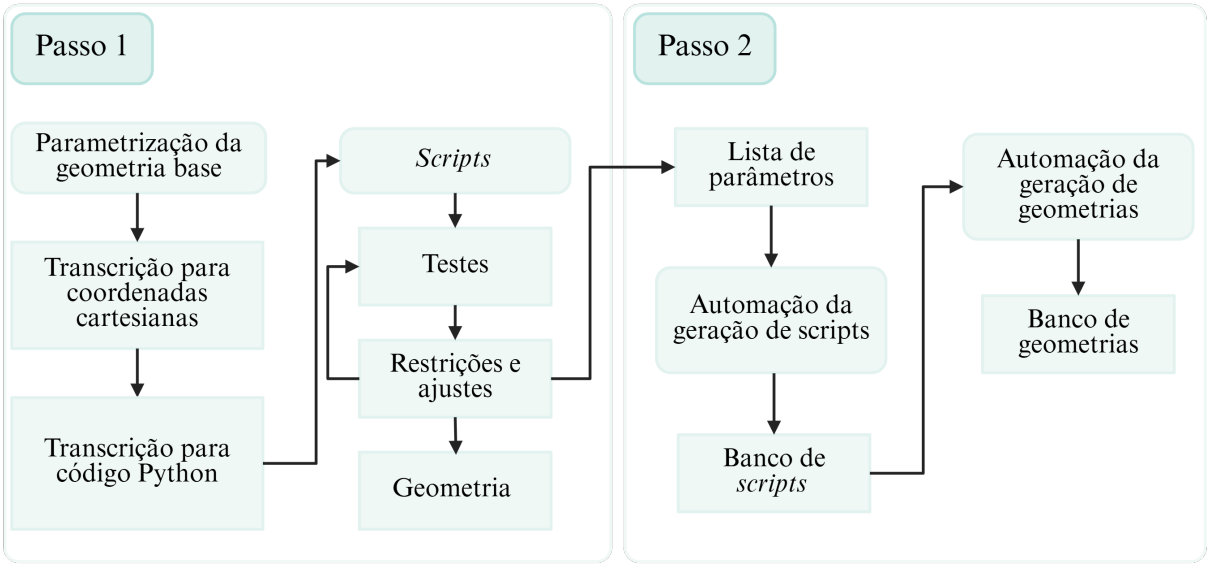
O software SpaceClaim possui uma *Application Programming Interface* (API) que permite acessar e manipular elementos internamente para automatizar processos e integrar novas funcionalidades. Esse API possibilita o uso direto de *scripts* em *Iron Python* para a geração de geometrias.

Com uma função integrada de leitura de *scripts*, o *SpaceClaim* interpreta esses códigos como instruções para criação de geometria. Essa funcionalidade é essencial para a abordagem de parametrização e automação, permitindo não apenas a geração de geometrias isoladas por meio de ajustes de parâmetros e seleção de modelos, mas também a iteração sobre listas de parâmetros, viabilizando a criação de variações geométricas de forma sistemática e ágil.

A aplicação prática dessa funcionalidade no projeto permitiu a geração automática de centenas de geometrias distintas em poucos minutos. Para isso, foram utilizados ambientes de desenvolvimento integrado (IDE), com destaque para o *Visual Studio*. O usuário insere diferentes valores para os parâmetros geométricos, criando uma lista diversificada. Em seguida, o código percorre essa lista, gerando e armazenando um *script* para cada conjunto de parâmetros especificado. A criação das geometrias segue de forma sequencial até que todas as combinações tenham sido processadas. O mecanismo dessa

geração automática pode ser visualizado na Figura 19.

Figura 19 – Diagrama da da geração de *scripts* e geometrias através da escolha de parâmetros físicos, com verificação das restrições de construção de cada modelo.



Fonte: elaborado pela autora (2025)

Essa metodologia permite a criação de centenas de geometrias diferentes, eliminando a necessidade de qualquer interação com a interface do usuário durante a geração de geometrias. Isto aumenta a segurança e a eficiência do processo e é particularmente vantajoso para geometrias complexas, como é o caso do NETmix, que requerem uma criação meticulosa.

Consequentemente, esta abordagem automatizada reduz significativamente o tempo do processo, assegurando simultaneamente a precisão e a fiabilidade na criação de geometrias extensas.

O script desenvolvido para o reator NETmix foi projetado de forma generalizada, abrangendo todas as variações paramétricas mencionadas anteriormente e permitindo ao usuário selecionar a geometria desejada. O modelo preserva a uniformidade das dimensões estruturais entre as câmaras, garantindo uma distância fixa de $H = 12{,}0208$ mm entre elas. Como resultado, as câmaras secundárias, denominadas aqui de câmaras diagonais, permanecem a uma distância diagonal de $L = 8{,}5080$ mm em relação às câmaras paralelas. Essa configuração assegura uma distribuição ordenada de câmaras e canais, independen-

temente das demais variações nos parâmetros, possibilitando a criação de modelos mais comparáveis entre si.

Como citado anteriormente na seção de parametrização, cálculos de posicionamento cartesiano são necessários, dado o fato de que a construção bidimensional das geometrias deve ser feita a partir de elementos básicos do software CAD, como círculos e retas. Muitos dos pontos raízes de um segmento devem ser calculados através de relações trigonométricas. A fim de generalizar o código de geração das geometrias, a correlação entre os objetos bidimensionais é de extrema importância, levando em consideração que a variação dos raios das câmaras influencia diretamente no comprimento dos canais, por exemplo.

Assim, o código é dividido em etapas. A primeira consiste na definição dos parâmetros de entrada pelo usuário, seguida pela criação dos planos bidimensionais necessários para a extrusão, responsável por gerar o volume do reator. Para esses modelos, uma etapa adicional é necessária para viabilizar seu uso em simulações de processos fotocatalíticos. Nessa fase, uma parte da geometria é dedicada à representação da estrutura do fotocatalisador imobilizado nas paredes do reator. Dessa forma, além do volume destinado ao fluxo de reagentes, uma fina camada é adicionada às paredes internas para representar a imobilização do fotocatalisador.

Além da geração do domínio principal, o código também automatiza a criação de componentes adicionais, como a placa de aço inoxidável, o vidro de borossilicato e o arranjo de LEDs, conforme ilustrado na Figura 17 anteriormente. Após a construção dos volumes, a terceira etapa do processo consiste na definição das *NamedSelections*, que são essenciais para identificar regiões específicas durante a simulação em CFD. A estrutura do código foi projetada para ser modular e adaptável: a seção responsável pelo arranjo de luzes, por exemplo, pode ser facilmente substituída por outros blocos de código, permitindo diferentes configurações conforme a necessidade do usuário.

Embora todo o processo esteja reunido em um único arquivo, suas seções são claramente separadas e identificadas, facilitando o manuseio e a personalização. Para gerar um novo modelo, o usuário precisa apenas modificar os parâmetros definidos na seção inicial do código. Caso deseje alterar o arranjo de luzes, basta integrar uma das configurações

disponíveis no repositório diretamente na seção correspondente. O código está disponível no *GitHub* como "NETMIX_CFD_Automation" e também será apresentado no Apêndice A.

A automação no *SpaceClaim* opera em dois níveis, conforme a complexidade da aplicação. No nível básico, o software executa um único *script* com os parâmetros exatos para gerar uma geometria específica. Já para a criação de múltiplas geometrias de forma sequencial, o *SpaceClaim* é integrado ao *Visual Studio Code*, onde um algoritmo em *Python* percorre uma lista de parâmetros e gera um script para cada combinação. Esses *scripts* são lidos individualmente pelo *SpaceClaim*, que é aberto automaticamente via *command prompt*, permitindo a criação de diferentes geometrias de forma contínua e desassistida.

Essa abordagem automatizada não apenas amplia a eficiência do processo de modelagem, como também viabiliza aplicações em áreas como *Machine Learning*, onde grandes volumes de dados geométricos são necessários para o treinamento de algoritmos de inteligência artificial.

4.2.2 Automação da geração de malha numérica

A geração de malha numérica é um passo essencial na simulação em CFD. Neste estudo, esse processo foi realizado com a biblioteca *PyFluent* v0.27, uma interface *Python* que conecta a programação em *Python* ao módulo *Fluent Meshing*, acessível pela interface do *Ansys Fluent*. O *Fluent Meshing* oferece dois tipos de processos: *Watertight* Geometry, adequado para geometrias previamente preparadas, como as aqui utilizadas, que são geradas no *Ansys SpaceClaim* e já estão prontas para receber a malha numérica; e *Fault-Tolerant*, destinado a geometrias não preparadas previamente, como aquelas com sobreposições, interseções e orifícios duplicados. Este não será abordado neste trabalho.

A escolha do método adequado para a geração de malha numérica é fundamental para garantir sua qualidade final. Tanto na interface do *Workbench* quanto no *Fluent Meshing*, é possível selecionar diferentes métodos de geração, como tetraédrico, hexaédrico dominante, *sweep*, *multizone*, cartesiano e tetraedros em camadas. Todos esses métodos também podem ser configurados via *script*, permitindo a escolha mais apropriada conforme

as exigências do modelo em estudo.

Na fase de automação da malha numérica, a geometria gerada no passo anterior é importada para o módulo, onde o programa lê o arquivo CAD e inicia a criação da malha numérica como uma geometria *watertight*. Como o código para automação pode ser utilizado de forma unificada ou em módulos, a transição para a realização da malha numérica pode ocorrer de duas formas. Se o usuário estiver utilizando o código da metodologia de forma unificada, o processo de construção de geometria e malha numérica irá ocorrer de forma sequencial, desde que o usuário já tenha inserido todos os parâmetros de entrada, tanto para geometria quanto para realização da malha. Por outro lado, para o uso do código de forma modular, o usuário pode primeiramente gerar a geometria e, depois, realizar a importação da geometria para a seção de malha numérica por meio do código.

No processo de geração da malha, é possível selecionar regiões do volume e atribuir as respectivas condições, como a definição de entradas e saídas, a especificação de regiões de paredes e a nomeação de zonas de condições de fronteira. A malha é gerada em duas etapas: primeiro, o software cria a malha de superfície e, em seguida, aplica o método *Multizone* para a malha volumétrica. Durante essa configuração, é possível definir os tamanhos mínimo e máximo dos elementos, além dos fatores de crescimento para o método *Multizone*. Embora a biblioteca *PyFluent* ofereça outras opções de configuração, elas não foram utilizadas neste estudo.

4.2.3 Automação do solver numérico

O *solver* é o núcleo da simulação em CFD, sendo responsável pela definição dos modelos de viscosidade, materiais, condições de contorno, parâmetros de solução e outras configurações essenciais. Tradicionalmente, essas definições são feitas por meio da interface gráfica do usuário (GUI), onde as modificações são aplicadas manualmente. No *Ansys Fluent*, além dessa abordagem, também é possível interagir via *Text User Interface* (TUI), utilizando comandos da própria API do *solver* para configurar o *setup*. No entanto, tanto na GUI quanto no TUI, o processo permanece manual e não permite a automação de ajustes iterativos.

Na etapa de solução, assim como na geração da malha numérica, a automação foi desenvolvida por meio de código *Python*, utilizando a biblioteca PyFluent v0.27. Duas abordagens podem ser adotadas na configuração do *solver*: a primeira consiste na transição direta da geração da malha para o *solver* com um único comando, *solver.switch_to_solution_mode()*. Alternativamente, para usuários que já possuem arquivos de malha numérica prontos e desejam pular a etapa de geração, a malha pode ser importada diretamente para o *solver* utilizando o comando *solver.file.read_mesh()*.

Além disso, os usuários podem importar diretamente para o *solver* arquivos de case e data. Como mencionado anteriormente, o *solver* utilizado neste estudo é o *Ansys Fluent*, sendo essa metodologia aplicável tanto à versão estudantil quanto à versão licenciada do software. No entanto, é fundamental destacar que, para usuários da licença estudantil, o limite de elementos imposto pela Ansys continua vigente. Portanto, durante a geração da malha, é necessário garantir que a contagem de elementos esteja dentro dessa restrição. Na versão do *Fluent* utilizada neste trabalho (24 R1), o limite máximo para solução no *Ansys Fluent Student* é de 1 milhão de elementos.

A biblioteca *PyFluent* para o *Fluent* está em desenvolvimento ativo, o que implica que nem todos os recursos estão totalmente acessíveis pela API em *Python* neste momento. Por isso, a abordagem mais prática para os usuários é gerar códigos com base nos comandos tradicionais da *Text User Interface* (TUI) do *Fluent*. Esses comandos podem ser facilmente convertidos para *Python*, permitindo a automação eficiente de processos.

Para os recursos totalmente suportados, os usuários podem consultar a documentação da API PyFluent e implementar as funções necessárias diretamente em *Python*, garantindo uma integração perfeita quando esses recursos estão disponíveis. No entanto, para tarefas ou configurações que ainda não são acessíveis via API em *Python*, os usuários podem continuar utilizando *scripts* baseados na TUI, garantindo controle total sobre a configuração da simulação.

Em resumo, embora a API continue evoluindo, a flexibilidade de combinar comandos TUI com *scripts* em *Python* garante que os usuários possam aproveitar a automação, integrando o melhor de ambas as abordagens enquanto o desenvolvimento da biblioteca *PyAnsys* avança.

4.3 AVALIAÇÃO DE SUBMODELOS DO REATOR NETMIX PARA DEGRADAÇÃO DE TRICLOROETILENO VIA SIMULAÇÃO EM CFD

Nas seções a seguir, a metodologia de automação será aplicada no processo de análise do reator NETmix, promovendo a geração de diversos submodelos de forma a buscar uma geometria otimizada para degradação de tricloroetileno em fase gasosa via fotocatálise heterogênea. A escolha dos modelos será feita através de parâmetros geométricos de maior importância, como visto na seção 4.1, sendo eles diâmetro das câmaras, abertura dos canais e quantidade de linhas do reator, visando aumentar a eficiência de irradiância e transferência de massa no reator.

4.3.1 Seleção de submodelos com base na variação de parâmetros geométricos

Com base na parametrização realizada, apresentada na seção 4.1, este trabalho buscou a variação dos diâmetros das câmaras, abertura dos canais e quantidade de linhas do reator de forma a obter 18 subtipos do modelo original, para avaliar a eficiência desses novos modelos em relação à degradação de tricloroetileno em fase gasosa.

A escolha dos diferentes valores para esses parâmetros foi feita a fim de verificar importantes aspectos deste reator, como eficiência de absorção luminosa e transferência de massa na superfície catalítica. No trabalho de (Laranjeira *et al.*, 2009) é discutida a diferença entre as duas principais regiões do volume do reator NETmix, os canais e as câmaras. Na modelagem, os canais podem ser vistos como *Plug-flow reactors* (PFR), zonas de segregação total, e as câmaras como reatores contínuos do tipo tanque de mistura (CSTR). Isso, em teoria, deve impactar substancialmente na qualidade da transferência de massa do reator, tratando-se de um processo de reação heterogênea nas paredes deste, visto que as áreas de maior transferência de massa dariam-se principalmente nas câmaras, por serem zonas de agitação e garantirem o contato entre o poluente e o fotocatalisador. Dessa forma, o parâmetro de segregação a,

$$a = \frac{V_{canais}}{V_{camaras}} \tag{14}$$

definido pela razão entre o volume total de canais, pelo volume total das câmaras, foi avaliado como um dos parâmetros de decisão de escolha dos modelos. Além disso, razão entre o diâmetro das câmaras de mistura em relação aos canais também foi avaliada, apresentado na patente de (Lopes *et al.*, 2023) na seção [0101] que cita o melhor valor para essa razão estando entre 6 e 7 para maximizar a intensidade de mistura.

Sabendo que a reação fotocatalítica depende da intensidade luminosa absorvida, a abertura das câmaras e canais também interfere na distribuição de luz nas regiões de acoplamento do fotocatalisador, sendo este outro parâmetro de análise em relação às geometrias do reator. Além disso, o tempo de residência é um fator extremamente importante em reatores contínuos e, no caso do reator NETmix, o fator de influência no tempo de residência nos modelos está relacionado com a quantidade de linhas do reator n_x, portanto quanto maior a quantidade de linhas, maior o tempo de residência do fluxo no interior do volume.

O cálculo desenvolvido nessa análise foi realizado em código *Python*, variando os parâmetros geométricos de acordo com a Tabela 1.

Tabela 1 – Valores da variação dos parâmetros de importância para escolha dos modelos

Parâmetro	**Intervalo**	**Frequência**
Raio das câmaras	0,5 mm - 2,0 mm	5
Diâmetro dos canais	2,0 mm - 4,0 mm	9
Número de linhas	19 - 39	3

Fonte: elaborado pela autora (2025)

Os demais parâmetros do reator foram fixados, como altura de extrusão, distância entre as câmaras e número de colunas. Os valores desses parâmetros podem ser vistos na Tabela 2. A combinação dos parâmetros geométricos resultou em 134 variações do reator NETmix original. Esse conjunto foi gerado por meio de um dataframe construído em Python, a partir da combinação dos valores apresentados na Tabela 2.

Para a análise detalhada neste trabalho, foram selecionados 9 subtipos com base em critérios estruturais e de desempenho. O parâmetro CC_{ratio}, que representa a razão entre o diâmetro das câmaras e o diâmetro dos canais, e o número de linhas dos modelos,

Tabela 2 – Parâmetros geométricos do reator NETmix mantidos fixos para a geração das geometrias.

Parâmetro	**Valor**
Altura de extrusão	3,0 mm
Distância entre câmaras	12,0208 mm
Número de colunas	7

Fonte: elaborado pela autora (2025)

que corresponde ao comprimento do reator, foram adotados como principais critérios de classificação dos modelos. A escolha para o CC_{ratio} fundamenta-se nos resultados de Lopes *et al.* (2023), que indicam desempenho ideal de mistura quando CC_{ratio} se encontra entre 6 e 7.

Dessa forma, os modelos foram distribuídos em três faixas de CC_{ratio}: abaixo de 6, entre 6 e 7, e acima de 7. Para cada uma dessas faixas, foram escolhidos modelos com três diferentes quantidades de linhas no reator: 19, 29 e 39. Isso resultou em nove combinações distintas, cobrindo a interação entre variação estrutural (quantidade de linhas) e regime de segregação (CC_{ratio}). Os demais parâmetros geométricos, como o diâmetro dos canais e o raio das câmaras, foram derivados das combinações entre n_x e CC_{ratio}, promovendo variações relevantes na geometria dos modelos.

Estudos como os de Fonte *et al.* (2013), Garcia *et al.* (2023) e Gomes *et al.* (2011) apresentam o modelo do reator NETmix com 49, 25 e 65 linhas, respectivamente. Neste trabalho, foram selecionadas geometrias com 19, 29 e 39 linhas, buscando não apenas se aproximar dos valores experimentais, mas também explorar configurações reduzidas, a fim de avaliar se é possível obter bons percentuais de degradação mesmo com menor número de linhas.

Essa estratégia de seleção visa garantir diversidade funcional e estrutural dentro de um conjunto reduzido de modelos, permitindo a análise comparativa dos efeitos dessas variações sobre o desempenho do reator. Além disso, a escolha de valores de n_x próximos aos observados em reatores NETmix experimentais descritos na literatura também permite uma ponte entre a simulação e a aplicação prática.

Para cada um desses nove modelos, foi criada uma versão com e uma sem câmaras

horizontais, totalizando 18 subtipos, classificados como "CH" (com câmaras horizontais) e "SH" (sem câmaras horizontais). A nomenclatura dos submodelos visa representar a quantidade de linhas assim como o CC_{ratio} de cada submodelo, os valores 19, 29 e 39 representam a extensão do reator em linhas, já a identificação "A", "B" e "C" designa o CC_{ratio}, sendo que, o CC_{ratio} abaixo de seis é representado pela letra A, o CC_{ratio} entre seis e sete é representado pela letra B e para os valores de CC_{ratio} acima de sete a letra C. Portanto, por exemplo, o submodelo "19A - SH" possui 19 linhas e possui um CC_{ratio} abaixo de seis, sem canais horizontais.

A Tabela 3 apresenta os parâmetros geométricos dos 18 subtipos definidos. As colunas da Tabela 3 indicam o diâmetro dos canais d_c, o raio das câmaras paralelas r_p, o número de linhas do reator n_x, a razão entre diâmetro das câmaras e dos canais CC_{ratio}, a razão volumétrica entre câmaras e canais (Vol_ratio) e o volume total estimado do reator.

Tabela 3 – *Parâmetros geométricos obtidos através da variação dos parâmetros de interesse para geração dos submodelos do reator NETmix*

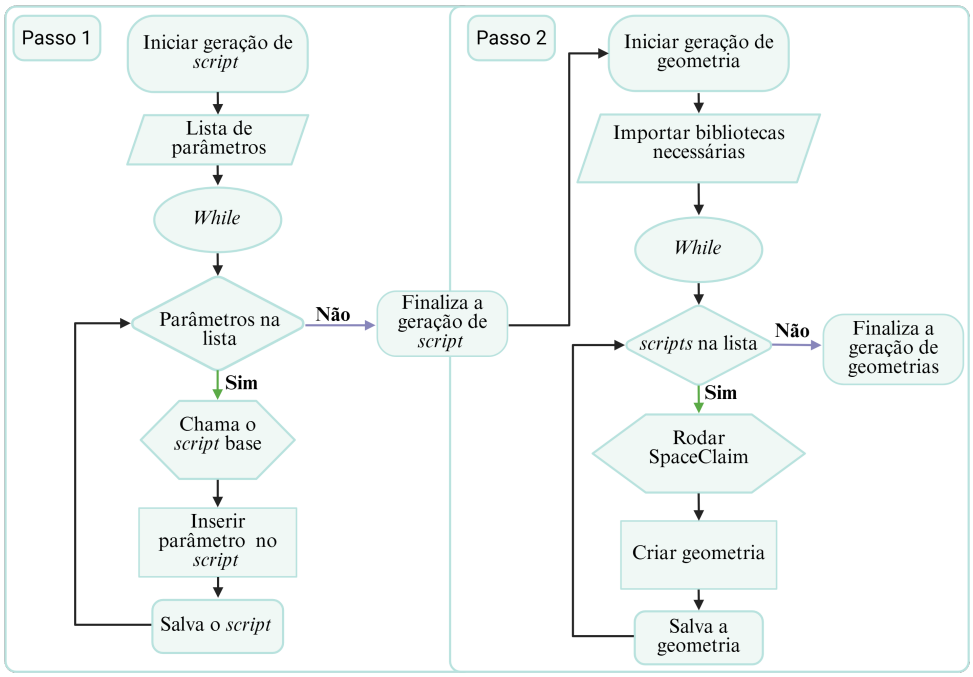
Modelo	**d_c (mm)**	**r_p (mm)**	**Num. linhas**	**CC_ratio**	**Vol_ratio**	**Volume (mm3)**
19A - SH	1,625	3,5	19	4,30	0,1016	13.494,4
29A - SH	0,875	2,25	29	5,14	0,1414	14.414,35
39A - SH	0,875	2,25	39	5,14	0,1421	19.460,1
19B - SH	1,250	3,75	19	6,00	0,0619	14.015,69
29B - SH	0,875	3,00	29	6,85	0,0863	17.200,3
39B - SH	0,875	2,75	39	6,28	0,1039	21.786,17
19C - SH	0,875	3,75	19	8,57	0,0435	13.746,5
29C - SH	0,875	3,25	29	7,42	0,0708	18.341,3
39C - SH	0,500	3,00	39	12,00	0,0513	22.290,5
19A - CH	1,625	3,5	19	4,30	0,1016	15.378,19
29A - CH	0,875	2,25	29	5,14	0,1414	16.383,9
39A - CH	0,875	2,25	39	5,14	0,1421	22.156,6
19B - CH	1,250	3,75	19	6,00	0,0619	15.389,4
29B - CH	0,875	3,00	29	6,85	0,0863	18.948,3
39B - CH	0,875	2,75	39	6,28	0,1039	24.282,2
19C - CH	0,875	3,75	19	8,57	0,0435	14.704,4
29C - CH	0,875	3,25	29	7,42	0,0708	20.015,6
39C - CH	0,500	3,00	39	12,00	0,0513	23.656,3

Fonte: elaborado pela autora (2025)

4.3.1.1 Geração CAD dos 18 submodelos do reator NETmix para o estudo de caso

Com base no processo de automação apresentado na Seção 4.2.1, a geração dos 18 submodelos do reator NETmix foi feita de forma automatizada, com base nos valores obtidos na Tabela 3 e dos parâmetros fixados apresentados na Tabela 2. Os *scripts* foram gerados para cada uma das combinações de parâmetros e posteriormente lidos pelo software *Ansys SpaceClaim* para a geração das geometrias, como apresentado na Figura 20.

Figura 20 – Representação esquemática do fluxo de trabalho automatizado para a geração de geometrias do reator NETmix. O algoritmo itera sobre um conjunto de parâmetros predefinidos, criando e salvando sistematicamente *scripts* de geometria para agilizar o processo de projeto. Essa abordagem permite a geração eficiente de múltiplas configurações, minimizando a intervenção manual.



Fonte: elaborado pela autora (2025)

4.3.2 Geração de malha numérica para os 18 submodelos do reator NETmix

Dando sequência às etapas de pré-processamento, a geração da malha numérica é essencial em toda e qualquer simulação em CFD. Erros numéricos nas simulações compreendem três principais componentes: erros de arredondamento, devido à precisão dos computadores, erros decorrentes das iterações, devido ao comportamento não-linear das

equações de balanço, e erros de discretização, consequência da transformação de equações contínuas em equações algébricas (Eça; Hoekstra, 2006).

Erros de discretização, derivados da diferença entre o valor exato da solução das equações de balanço e os obtidos nos cálculos numéricos do sistema discretizado, podem ser gerados pelos algoritmos numéricos, pelas condições escolhidas para o sistema, pela malha numérica, entre outros (Liu, H. *et al.*, 2015). Para evitar a proliferação dos erros derivados da malha numérica, é possível realizar um teste de Índice de Convergência de Malha, do inglês *grid convergence index* (GCI) (GCI).

Para avaliar a incerteza numérica devido à construção da malha, o (GCI) foi utilizado com a biblioteca *PyCGS*, desenvolvida para estudos de independência de malha. Os cálculos foram baseados na rotina descrita por Celik *et al.* (2008) e na metodologia proposta por Roache (1994), que utiliza a teoria de extrapolação de Richardson para estimar o erro de refinamento. Os resultados obtidos para o GCI podem ser visualizados no Apêndice B. Com a avaliação do (GCI) realizada, a malha de melhor desempenho foi utilizada para as simulações em CFD. No apêndice B são apresentados os detalhes aprofundados do estudo de independência de malha.

A malha foi gerada para cada um dos modelos, conforme descrito na Seção 4.2.2 "Automação da geração de malha numérica", no método *Multizone*, que irá construir preferencialmente elementos hexaédricos em todo o domínio. Nas regiões onde não é possível gerar uma malha totalmente estruturada, o método *Multizone* combina malha estruturada com uma malha livre, melhorando a qualidade ortogonal e reduzindo a assimetria, enquanto mantém um número de elementos menor em comparação com outros métodos. O tamanho do elemento foi fixado em $1{,}14e^{-}4m$, pois apresentou o melhor equilíbrio entre qualidade dos resultados de simulação e custo computacional, conforme a análise GCI.

4.3.3 Modelagem em CFD dos 18 submodelos do reator NETmix para degradação de tricloroetileno via fotocatálise heterogênea

Na etapa de *solver*, a simulação CFD foi realizada no software *Ansys Fluent*, com base na metodologia de automação descrita na seção 4.2. O *setup* foi programado em

Python e abordou todas as especificações necessárias para a descrição do modelo para degradação de tricloroetileno em fase gasosa nos 18 modelos geométricos gerados, como descrito na Seção 4.3.1.1 "Geração CAD dos 18 submodelos do reator NETmix para o estudo de caso".

A reação heterogênea foi conduzida em condições isotérmicas e em regime estacionário, desconsiderando a influência da gravidade. O fluxo de poluentes foi assumido como laminar e incompressível, com um número de Reynolds médio igual a 3 nos canais responsáveis pelo escoamento. A modelagem matemática foi baseada nas equações de conservação da massa, de momento e da espécie química, apresentadas nas Equações (15), (16), (17), respectivamente,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \upsilon_i))}{\partial x_j} = 0 \tag{15}$$

$$\frac{\partial(\rho \upsilon_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \upsilon_i \upsilon_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \tag{16}$$

$$\frac{\partial(\rho C_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \upsilon_j C_k)}{\partial x_j} = \frac{\partial J_{i,k}}{\partial x_j} + R_k \tag{17}$$

onde ρ (kg/m3) representa a massa específica do fluido, ν (m/s) é o vetor velocidade e x_j a coordenada espacial, P a pressão (Pa), g_i é o vetor aceleração da gravidade (m/s^2), τ (Pa) o tensor de tensões representado por:

$$\tau_{i,j} = \mu(\frac{\partial \upsilon_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \upsilon_j}{\partial x_i}) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \upsilon)\delta_{i,j} \tag{18}$$

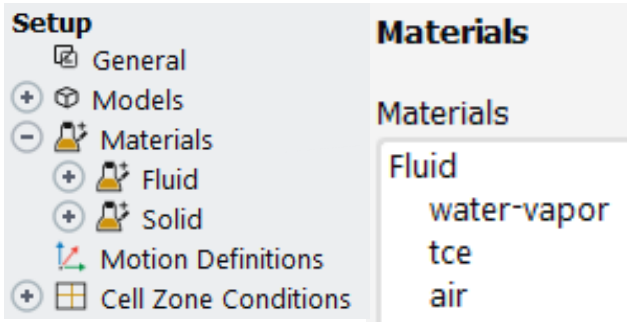
Onde μ é a viscosidade dinâmica. Na Equação (17), o C_k (kmol/m3) é a concentração da espécie química k e Ji (kmol/m2· s) representa o fluxo difusivo da espécie i, geralmente modelado pela Lei de Fick.

Na definição dos materiais (Figura 21), as espécies tricloroetileno, água e ar foram adicionadas. Como o tricloroetileno não consta na biblioteca base do *Fluent*, suas

propriedades físico-químicas foram incluídas diretamente no código, utilizando os valores apresentados na Tabela 4.

Figura 21 – Adição de materiais para simulação no *software Ansys Fluent*: (a) adição de materiais via GUI, (b) adição de materiais no código desenvolvido com uso de biblioteca *PyFluent*

(a)



(b)

```
#-------------------------------------------------------------------
#   SETUP: Materials
solver.tui.define.materials.copy("fluid", "air", "tce")

solver.setup.materials.fluid['tce'] = {
    "density" : {"option" : "constant", "value" : 1460.},
    "specific_heat" : {"option" : "constant", "value" : 120.1},
    "thermal_conductivity" : {"option" : "constant", "value" : 0.1159},
    "viscosity" : {"option" : "constant", "value" : 0.00053},
    "molecular_weight" : {"option" : "constant", "value" : 131.38},
    "formation_entropy" : {"option" : "constant", "value" : 2.284e-05}}

# Copy water-vapor from fluent DataBase
solver.tui.define.materials.copy("fluid", "water-vapor")
```

Fonte: elaborado pela autora (2025)

Tabela 4 – Valores dos parâmetros físico-químicos da espécie química tricloroetileno

Parâmetro	**Valor**	**Unidade**
Densidade	1460	kg/m^3
Calor específico	120,10	$J/mol.K$
Condutividade termal	0,1159	$W/m.K$
Viscosidade dinâmica	0,00053	$kg/m.s$
Massa molecular	131,38	$kg/kmol$
Entropia padrão	$2{,}284e^5$	$J/kmol.K$
Temperatura de referência	298,15	K

Fonte: elaborado pela autora (2025)

4.3.3.1 Condições de contorno

Neste estudo de caso envolvendo a degradação de tricloroetileno via fotocatálise, onde o fotocatalisador TiO_2 foi empregado, a reação química heterogênea foi incorporada à modelagem como uma condição de contorno, de modo que a taxa de degradação corresponde ao fluxo molar difusivo nas regiões do reator onde o fotocatalisador encontra-se imobilizado. Nas paredes sem fotocatalisador assume-se um fluxo difusivo nulo. Essas condições estão expressas nas Equações (19) e (20), respectivamente. Além disso, as paredes do reator foram modeladas como superfícies estacionárias com condição de não deslizamento (*no-slip boundary condition*).

$$\hat{n} \cdot \overrightarrow{N}_{tce|A_{cat}} = \hat{n} \cdot (-D_{tce,m} \overrightarrow{\nabla} C_{tce})|_{A_{cat}} = r_{tce} \tag{19}$$

$$\hat{n} \cdot \overrightarrow{N}_{tce|A_{non-cat}} = 0 \tag{20}$$

A taxa de degradação do tricloroetileno foi determinada com base no estudo de Salvadó-Estivill, Hargreaves e Li Puma (2007), no qual a cinética intrínseca da degradação desse composto foi obtida experimentalmente em um reator de placa plana operando em regime de escoamento laminar. No material suplementar desse estudo, os autores detalham a metodologia utilizada para a determinação das constantes de reação, conduzida em fluxos com números de Reynolds superiores a 65, faixa em que as limitações de transferência de massa não influenciam significativamente o processo. A equação (21) apresenta a reação de cinética intrínseca de degradação do tricloroetileno,

$$-r_{tce} = [I_{(x,y)}]^n \frac{k \cdot K \cdot C_{tce}}{1 + K \cdot C_{tce}} \tag{21}$$

Os parâmetros da equação são: $k = 3{,}8 \cdot 10^{-11}$ e $K = 7{,}0 \cdot 10^3$, o valor de $I_{(x,y)}$ é a Irradiância em W/m^2 e C_{tce} a concentração de tricloroetileno. A taxa de reação é acoplada ao simulador por meio de uma *User Defined Function (UDF)*, desenvolvida com base na macro "*DEFINE_SR_RATE*" do *Ansys Fluent*.

A irradiância, sendo uma função dependente da posição, é calculada conforme será descrito na Seção 4.3.5 utilizando o software *Ansys Speos*. Os valores obtidos são armazenados em um arquivo .csv, que é interpretado no *Ansys Fluent* como um *User Defined Scalar* (UDS). Esse UDS é, então, lido pela UDF e acoplado à equação da taxa de reação. Os valores das condições de contorno de entrada e saída, incluindo velocidade do fluxo, temperatura, frações molares e pressão, estão apresentados na Tabela 5.

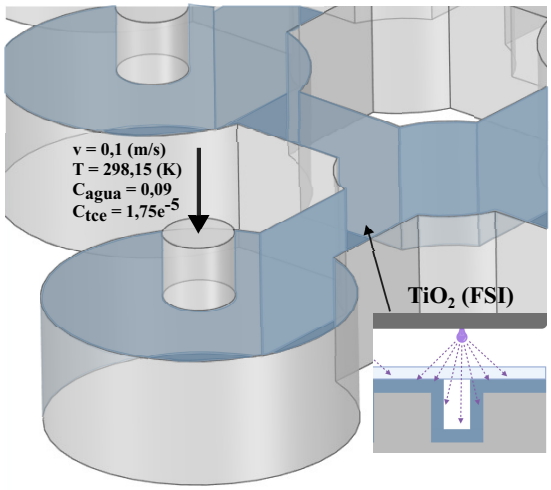
Tabela 5 – Condições de contorno adotadas no estudo de degradação do tricloroetileno (TCE) para todos os submodelos de reatores NETMIX

Modo de interação entre fluido e fotocatalisador sólido	*FSI*
Velocidade na entrada do reator	$0{,}1 m/s$
Fração molar de TCE na entrada do reator	$1{,}75e-5$
Fração molar de entrada de água vapor	0,09
Pressão na saída	$1 atm$
Temperatura na entrada	$298{,}15 K$
Temperatura na saída	$298{,}15 K$

Fonte: elaborado pela autora (2025)

As condições de contorno da tabela 5 podem ser visualizadas na Imagem 22 aplicadas à um modelo de exemplo.

Figura 22 – Representação visual das condições de contorno aplicadas aos submodelos do reator NETmix no estudo de caso da degradação de tricloroetileno via fotocatálise heterogênea



Fonte: elaborado pela autora (2025)

4.3.3.2 Configuração do *solver* numérico

Na simulação em fluidodinâmica computacional, as configurações padrão do *solver* no *Ansys Fluent* não precisam ser explicitamente definidas no código, sendo necessário especificar apenas os parâmetros que requerem ajuste.

O critério de convergência para a solução das equações de conservação foi estabelecido com um erro residual de $10^{-}5$ para as equações da continuidade e do balanço de quantidade de movimento, bem como para o transporte do vapor d'água. Para a equação da conservação de energia e do transporte da espécie tricloroetileno, o critério de convergência adotado foi de $10^{-}8$, garantindo maior precisão na solução dos campos escalar e vetorial.

O acoplamento pressão-velocidade foi tratado pelo método SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*), garantindo a consistência entre os campos de pressão e velocidade na formulação numérica. O número de iterações foi fixado em 3500, com base em estudos prévios que indicaram a estabilização dos resíduos e a convergência das equações governantes dentro desse intervalo iterativo. Por fim, o código armazena o estado final da simulação e os perfis dos campos de escoamento e transporte, permitindo a análise posterior dos resultados numéricos.

A versão *Ansys Fluent* 24R1 foi configurada para precisão dupla e executada em modo 3D com paralelismo em quatro processadores. A simulação foi realizada em um sistema com processador Intel® Core™ i5-10400F (seis núcleos, 12 threads) com clock de 2,9 GHz, 64 GB de RAM e sistema operacional Windows 11 Pro 64-bit.

4.3.4 Simulações

Com base nas geometrias geradas, na malha numérica e nas condições de contorno previamente estabelecidas, serão realizadas ao todo 18 simulações de mapa de irradiância utilizando o software *Ansys Speos*. Essas simulações baseiam-se na técnica de *ray tracing* e têm como objetivo determinar a distribuição espacial da irradiância incidente em cada um dos submodelos de reatores analisados. A escolha por realizar essas simulações previamente

se justifica pela necessidade de obter valores fisicamente realistas de irradiância, os quais são fundamentais para o acoplamento com as simulações fluidodinâmicas posteriores.

Os resultados obtidos no *Ansys Speos* são exportados em arquivos no formato .csv, contendo a distribuição da irradiância ao longo do domínio de interesse. Esses arquivos são então importados no software *Ansys Fluent*, onde são utilizados como entrada na equação de taxa de reação fotoquímica. Esse acoplamento permite uma simulação mais fidedigna dos fenômenos envolvidos, especialmente no que se refere à interação entre a radiação e o escoamento reativo.

Em seguida, são realizadas 18 simulações CFD no *Ansys Fluent*, mantendo-se constantes as configurações dos LEDs, conforme detalhado na seção 4.3.5.1, e os parâmetros de escoamento e reação, conforme especificado na seção 4.3.4. O objetivo dessas simulações é avaliar o desempenho global dos reatores, considerando-se não apenas a eficiência de absorção de fótons no fotocatalisador, mas também os efeitos na degradação do poluente e a perda de carga ao longo do escoamento.

As simulações em CFD realizadas no software Ansys Fluent fornecerão diversas variáveis de saída relevantes para a avaliação de desempenho dos reatores. Dentre os principais parâmetros analisados, destacam-se: a eficiência de absorção de fótons φ, a uniformidade da irradiância γ, a eficiência global η, a queda de pressão total ΔP_t e a degradação do tricloroetileno (TCE) X_{tce}.

A comparação do desempenho ótico entre os modelos será feita com base em três indicadores principais. A eficiência de absorção de fótons φ é definida pela Equação (22) e expressa a razão entre a energia irradiada efetivamente absorvida pelo fotocatalisador e a energia total emitida pelos LEDs. A uniformidade da irradiância γ, dada pela Equação (23), quantifica o quão homogênea é a distribuição da irradiância sobre a superfície catalítica. A partir desses dois parâmetros, calcula-se a eficiência global η, conforme a Equação (24), representando a combinação entre intensidade e homogeneidade da radiação incidente.

$$\varphi = \frac{EA_{cat}}{N_L \Phi_e} \tag{22}$$

$$\gamma = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} \left| E_i - \bar{E}_a \right| A_i}{2\,\bar{E}_a \sum_{i=1}^{n} A_i} \tag{23}$$

$$\eta = \varphi\gamma \tag{24}$$

Na Equação (22), E representa a irradiância média incidente sobre o fotocatalisador W/m^2, A_{cat} é a área do fotocatalisador (m^2), N_L é o número total de LEDs no sistema, e φ é a potência emitida por cada LED (W). Na Equação (23), E_i representa a irradiância local em uma subdivisão da superfície, $\bar{E}_a$ é a irradiância média sobre a superfície catalítica, e A_i é a área correspondente a cada subdivisão. Já a Equação (24) define a eficiência global como o produto entre eficiência de absorção e uniformidade de distribuição da irradiância.

No que se refere aos aspectos fluidodinâmicos, a interação entre a geometria dos modelos e o comportamento do escoamento será avaliada por meio da queda de pressão (ΔP_t) e da eficiência de conversão do poluente (X_{tce}). A queda de pressão total entre a entrada e a saída do reator é calculada conforme a Equação (25), enquanto a conversão do tricloroetileno é determinada pela Equação (26), a partir das frações molares de TCE na entrada e na saída do domínio simulado.

Em relação à fluidodinâmica, a interação entre a geometria dos modelos e a qualidade do fluxo e transferência de massa no reator, será analisada pela queda de pressão, dada pela equação (25), e a degradação do tricloroetileno, calculada pela conversão, dada pela equação (26).

$$\Delta P_t = (P_e - P_s) \tag{25}$$

$$X_{tce} = \frac{(y_{e_{tce}} - y_{s_{tce}})}{y_{e_{tce}}} \tag{26}$$

Onde P_e e P_s são as pressões de entrada e saída do reator, respectivamente, calculadas durante a simulação. Já a degradação é calculada pelas frações molares de tricloroetileno, de entrada e saída $y_{e_{tce}}$, $y_{e_{tce}}$, respectivamente.

Na Equação (25), P_e e P_s correspondem às pressões médias na entrada e na saída do reator, respectivamente. Já na Equação (26), $y_{e_{tce}}$ e $y_{e_{tce}}$ representam as frações molares de TCE na entrada e na saída. Esse indicador permite quantificar a eficiência reacional do reator na degradação do poluente ao longo do escoamento.

Dessa forma, para que as simulações fluidodinâmicas considerem uma fonte de radiação mais próxima da realidade física do sistema, torna-se essencial a obtenção precisa dos mapas de irradiância. Esses mapas são gerados por meio da técnica de Ray Tracing, conforme descrito a seguir.

4.3.5 Simulação Empregando o Modelo de Ray Tracing

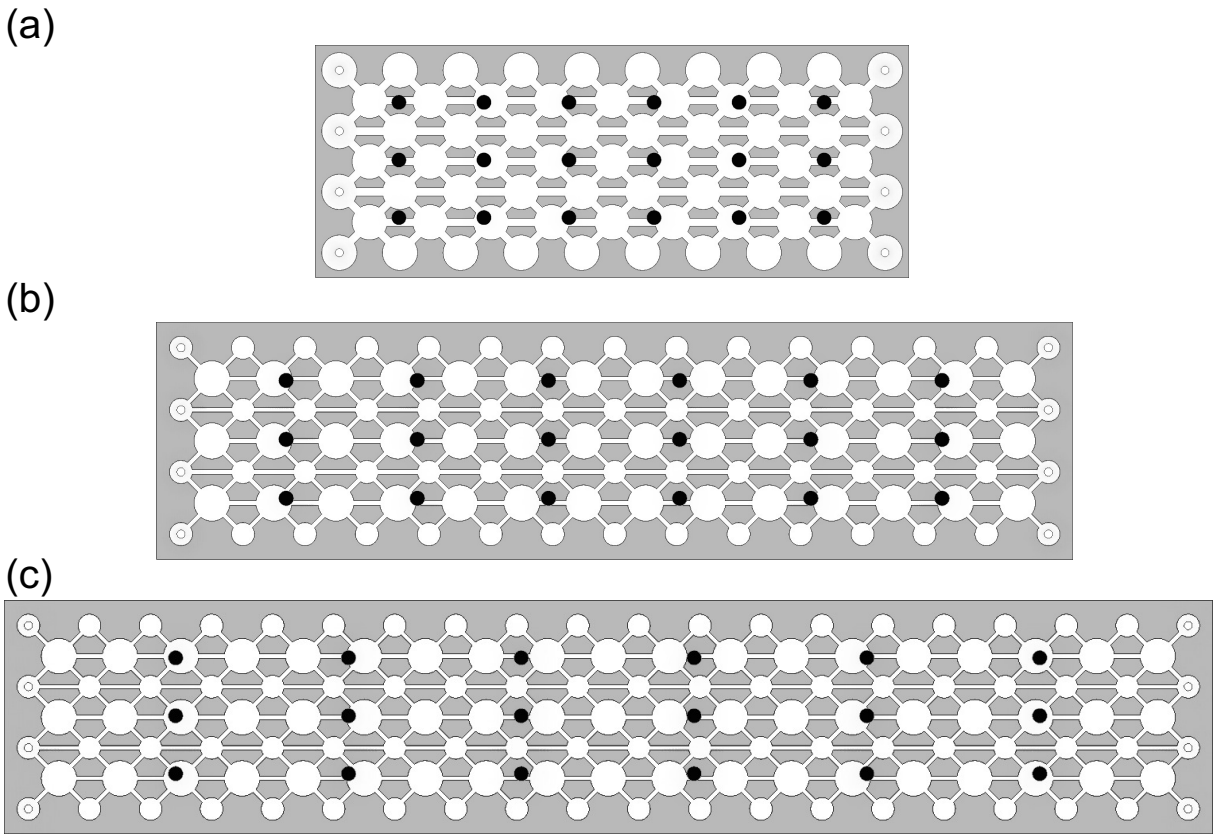
A etapa de simulação Ray Tracing foi conduzida com base na metodologia proposta por (Matiazzo *et al.*, 2022a, 2022b), onde a modelagem do conjunto de iluminação para o reator NETmix foi desenvolvida. Com base nas informações obtidas nos trabalhos citados, o arranjo de LED's escolhido para este trabalho foi a distribuição de 18 LED's, distribuídos em três fileiras igualmente espaçadas de seis LED's cada. A fim de avaliar a influência da modificação da geometria dos reatores, o arranjo de LED's não varia. Portanto, para cada modelo eles foram espaçados de forma a homogenizar o espaçamento ao longo de todo o reator, a altura da região dos LED's em relação a placa de vidro borosilicato é de $hl = 13$ mm. Portanto, para exemplificar a distribuição dos LED's para os modelos de 19, 29 e 39 linhas, apresenta-se o esquema da Figura 23.

Na etapa de simulação com o modelo de Ray Tracing, a metodologia adotada seguiu os trabalhos de Matiazzo *et al.* (2022a, 2022c), nos quais foi desenvolvido e validado o modelo de iluminação do reator NETmix. Com base nessas referências, optou-se pela utilização de um arranjo contendo 18 LEDs, organizados em três fileiras igualmente espaçadas com seis LEDs em cada fileira. Essa escolha fundamenta-se nos resultados apresentados pelos autores, que compararam diferentes configurações de iluminação incluindo arranjos

com 5, 12, 15, 18, 28 e 30 LEDs e identificaram que o arranjo com 18 LEDs apresentou desempenho eficiente em termos de distribuição de irradiância, mesmo em comparação com configurações mais densas. Assim, a adoção desse arranjo representa uma solução otimizada ao equilibrar desempenho e viabilidade econômica para o sistema fotocatalítico em estudo.

Para avaliar a influência da modificação geométrica dos reatores, o arranjo de LEDs foi mantido fixo. Assim, em cada modelo, os LEDs foram distribuídos de modo a uniformizar o espaçamento ao longo de todo o reator. A altura da região dos LEDs em relação à placa de vidro borossilicato foi definida como hl = 13 mm. A Figura 23 ilustra a distribuição dos LEDs para os modelos com 19, 29 e 39 linhas.

Figura 23 – Distribuição do conjunto de LED's para cada uma das dimensões dos submodelos do reator NETmix gerados: (a) modelos de 19 linhas, (b) modelos de 29 linhas, (c) modelos de 39 linhas



Fonte: elaborado pela autora (2025)

O modelo de LED Seoul Viosys UV Z5 selecionado para as simulações nos 18 modelos, segue o padrão do trabalho de (Matiazzo *et al.*, 2022a), com um comprimento de onda máximo de 365 nm, uma meia largura de espectro equivalente a 9 nm, uma potência

radiante de 900 mW e um ângulo de visão de 120 graus. O cálculo numérico do perfil de irradiância foi realizado utilizando o software *Ansys Speos*, que emprega o método de *Ray Tracing*, uma classe dos métodos de Monte Carlo para a solução de modelos matemáticos.

4.3.5.1 Setup de simulação do *Ray Tracing*

O Setup de simulação do *Ray Tracing* possui algumas etapas, sendo a primeira delas a criação das fontes luminosas, que representam os LED's. Nessa etapa, 18 fontes luminosas foram geradas e as informações necessárias para a execução do cálculo que foram incluídas estão apresentadas na Tabela 6.

Tabela 6 – Propriedades dos LED's para a simulação no software *Ansys Speos*

Diâmetro dos LED's	2,9 mm
Potência de emissão de cada LED	0,9 W
Pico do espectro de luz	365 nm

Fonte: elaborado pela autora (2025)

Em sequência, determina-se as propriedades ópticas dos materiais existentes no modelo, ou seja, especifica-se as propriedades ópticas do vidro borosilicato, da placa de aço inoxidável e do fotocatalisador presente nas paredes do volume de reação. Todas essas informações estão apresentadas no trabalho de (Matiazzo *et al.*, 2022a).

Os efeitos do sistema de iluminação sobre a superfície do fotocatalisador são analisados por meio de um sensor radiométrico posicionado diretamente sobre essa superfície. Para essa análise, emprega-se uma integração planar ortogonal ao plano do sensor, considerando a atenuação cossenoidal da irradiância em função do ângulo de incidência, conforme a Lei de Bouguer. A relação matemática que descreve esse fenômeno é apresentada na Equação (27).

$$I = \frac{In \cdot cos(\varepsilon)}{D^2} \tag{27}$$

Para essas simulações, uma *Direct Simulation* foi realizada, ou seja, a propagação dos raios entre as fontes luminosas (LED's) até o sensor (TiO_2) foi rastreada. Para as

simulações, todos os casos foram rodados com precisão dupla e $1{,}6e^7$ raios. Para o sensor, uma malha triangular com tamanho de passo de 0,75 mm e um ângulo de malha (ângulo máximo tolerado entre a normal da tangente formada nas extremidades de cada segmento) de 15° foram selecionadas.

Como a simulação Ray Tracing não é parte completamente integrada do processo CAE de simulação CFD de forma geral, a metodologia de automação não se estendeu ao software Ansys Speos, mas pode vir a ser alvo de futuros trabalhos.

5 RESULTADOS

Neste capítulo, os resultados obtidos a partir do desenvolvimento e aplicação da metodologia de automação para a simulação dos submodelos do reator NETmix serão apresentados e analisados. O foco da análise está na eficiência da utilização de metodologia de automação frente às simulações CFD, para a otimização e comparação do desempenho de diferentes modelos geométricos do mili reator NETmix na degradação de tricloroetileno.

Os resultados são discutidos à luz dos critérios estabelecidos para a avaliação do desempenho dos modelos, considerando parâmetros como eficiência na degradação do contaminante, eficiência global de irradiância e adequação do processo de automação. A seguir, serão detalhados os resultados obtidos, destacando as principais contribuições e implicações do estudo.

5.1 AUTOMAÇÃO

5.1.1 Automação CAD

Esta seção apresenta os resultados referentes à automação da geração da geometria CAD dos submodelos do reator NETmix. Tal análise tem como foco atender ao primeiro objetivo da pesquisa, que consiste em verificar se a metodologia automatizada proposta mostra-se mais eficiente do que a geração manual do domínio numérico, anteriormente realizada na interface gráfica do software CAD *Ansys SpaceClaim*.

A etapa de construção geométrica dos submodelos foi significativamente otimizada por meio da automação via *script*, substituindo o processo manual utilizado em trabalhos anteriores. A modelagem manual, especialmente em geometrias maiores como os modelos com 39 linhas, demandava, em média, cerca de 1h30min por geometria. Esse tempo foi confirmado a partir da construção manual do modelo 39C - CH, em um teste cronometrado, onde o modelo foi gerado via interface de usuário, que possui 39 linhas e sete colunas e foi utilizado como referência de comparação neste estudo. O mesmo modelo, quando gerado automaticamente, apresentou tempo de construção de apenas 36 minutos, conforme

apresentado na Tabela 7, evidenciando a expressiva economia de tempo proporcionada pela metodologia automatizada. O processo manual envolvia a construção de diversos elementos bidimensionais (linhas, arcos e círculos), que precisavam ser cuidadosamente posicionados e alinhados para evitar intersecções, descontinuidades e outros erros geométricos.

Além do tempo elevado, a construção via interface gráfica é altamente suscetível a erros, devido à dificuldade de garantir o posicionamento exato dos elementos do *sketch*, sobretudo quanto ao ponto inicial de cada componente e à orientação angular dos canais em relação ao eixo da câmara. Embora o uso de restrições geométricas, como paralelismo e coincidência de eixos, auxilie na organização dos elementos, essas ferramentas tornam-se limitadas quando aplicadas a geometrias complexas e de maior escala, como as utilizadas neste trabalho.

Com a implementação de uma rotina automatizada para a geração das geometrias, foi possível eliminar as principais fontes de erro humano, padronizar os modelos e reduzir significativamente o tempo de modelagem. Essa automação não apenas assegura a consistência entre os diferentes submodelos testados, como também viabiliza a criação rápida de variantes geométricas. Utilizando a metodologia automatizada, foram gerados 18 submodelos do reator NETmix, cada um com diferentes parâmetros geométricos. O tempo de geração, bem como seus respectivos parâmetros geométricos, estão apresentados na Tabela 7.

Os tempos indicados na Tabela 7 consideram a geração completa do modelo, com todos os elementos estruturais necessários. As imagens dos resultados dos 18 modelos podem ser vistas no Apêndice A. A Figura 24 ilustra o submodelo 39C - CH gerado automaticamente.

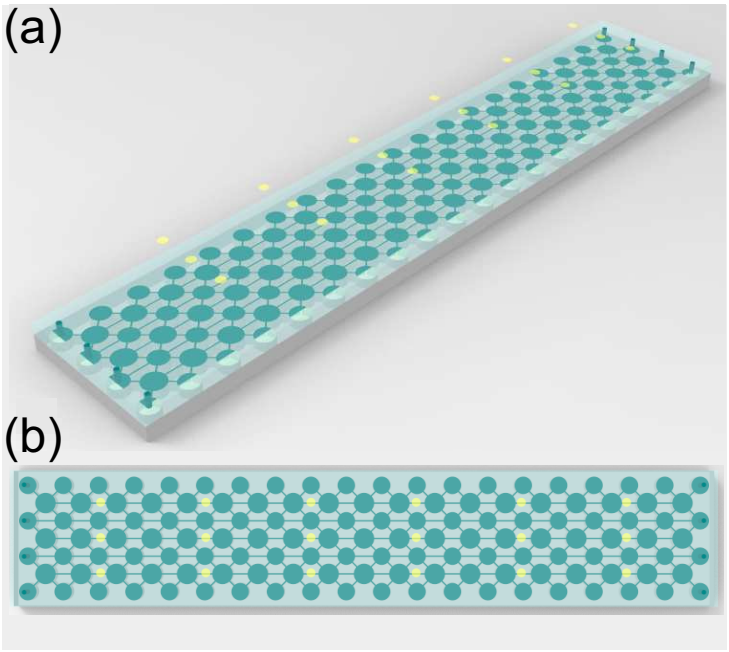
De maneira geral, observou-se uma economia média de aproximadamente 70% no tempo de geração CAD com o uso da metodologia automatizada, em comparação à abordagem tradicional. Esses resultados são especialmente relevantes em contextos que exigem otimizações geométricas frequentes, como estudos paramétricos e projetos iterativos.

Tabela 7 – Parâmetros geométricos e tempos de geração CAD automatizada dos submodelos NETmix

Modelo	**d_c (mm)**	**r_p (mm)**	**Nº de Linhas**	**Tempo (min)**
19A - SH	1,625	3,5	19	18
29A - SH	0,875	2,25	29	25
39A - SH	0,875	2,25	39	32
19B - SH	1,250	3,75	19	17
29B - SH	0,875	3,00	29	27
39B - SH	0,875	2,75	39	33
19C - SH	0,875	3,75	19	19
29C - SH	0,875	3,25	29	25
39C - SH	0,500	3,00	39	33
19A - CH	1,625	3,5	19	20
29A - CH	0,875	2,25	29	27
39A - CH	0,875	2,25	39	34
19B - CH	1,250	3,75	19	19
29B - CH	0,875	3,00	29	30
39B - CH	0,875	2,75	39	35
19C - CH	0,875	3,75	19	21
29C - CH	0,875	3,25	29	29
39C - CH	0,500	3,00	39	36
Geração manual	0,500	3,00	39	93

Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 24 – Geometria do submodelo 39C - CH do reator NETmix: (a) vista isométrica, (b) vista superior



Fonte: elaborado pela autora (2025)

Além disso, a possibilidade de gerar centenas de modelos a partir de listas parametrizadas, com alta eficiência e baixo tempo de execução, representa um avanço significativo. Essa capacidade amplia o potencial de aplicações, como a criação de bancos de dados para treinamento de modelos de *Machine Learning* voltados à pesquisa em CFD, fortalecendo o papel da automação na engenharia computacional moderna.

Com base nos resultados apresentados, conclui-se que a automação da etapa de geração CAD proporcionou ganhos substanciais em termos de tempo de execução, padronização geométrica e minimização de erros. A média de 1h30min para a construção manual de um único modelo foi reduzida a um terço do tempo anteriormente necessário por meio da automação. A padronização entre os modelos também garante maior confiabilidade nas análises comparativas subsequentes. Dessa forma, verifica-se que a metodologia automatizada é significativamente mais eficiente do que a abordagem manual, atendendo plenamente ao primeiro objetivo proposto nesta pesquisa.

5.1.2 Automação da geração de malha numérica

Após a construção do domínio geométrico, a geração da malha numérica representa uma das etapas mais críticas em processos de simulação em CFD. Com a implementação da rotina automatizada, foi possível aplicar os mesmos parâmetros de malha a todos os modelos de forma padronizada, reduzindo o tempo de configuração manual e aumentando a consistência entre os casos simulados. A Tabela 8 apresenta os tempos médios de geração de malha obtidos utilizando a abordagem Multizone, evidenciando a eficiência do método para diferentes geometrias.

Para fins de comparação qualitativa, estima-se que a configuração manual de cada modelo no Fluent Meshing, considerando operações como importação da geometria, definição de parâmetros de malha e exportação do arquivo, levaria aproximadamente entre 8 a 12 minutos por modelo, dependendo da familiaridade do usuário com a interface e da complexidade geométrica. Considerando os 18 modelos simulados, essa tarefa representaria um esforço total entre 144 e 216 minutos (2h24 a 3h36), apenas com etapas operacionais repetitivas. A automação dessas ações eliminou quase completamente essa carga, centralizando as configurações em um único script e reduzindo o trabalho manual

a uma única execução do processo, além de minimizar erros e garantir reprodutibilidade. Assim, mesmo sem acelerar diretamente o tempo de geração de malha por modelo, a rotina desenvolvida proporcionou uma economia operacional expressiva e alinhada aos objetivos de padronização e eficiência do estudo.

Tabela 8 – Tempo de geração de malha para cada modelo utilizando o método *Multizone*

Modelo	**Tempo de geração de malha (min)**
29A - SH	7,77
29A - CH	13,65
39A - SH	12,77
39A - CH	30,95
39B - SH	14,56
39B - CH	24,18
29B - SH	9,63
29B - CH	12,32
39C - SH	14,90
39C - CH	28,13
29C - SH	8,97
29C - CH	13,95
19A - SH	23,32
19A - CH	27,07
19C - SH	33,15
19C - CH	26,32
19B - SH	24,55
19B - CH	27,40

Fonte: elaborado pela autora (2025)

Nota-se que os tempos de geração variam em função da complexidade geométrica dos modelos. De maneira geral, geometrias com maior número de câmaras ou canais horizontais apresentaram maiores tempos de processamento, como evidenciado, por exemplo, nos modelos 39A - CH e 39C - CH. Ainda assim, a abordagem automatizada permitiu uma significativa economia de tempo frente a uma configuração manual, atendendo ao segundo objetivo deste trabalho de forma satisfatória.

Apesar dos avanços proporcionados pela automação da geração de malhas utilizando a biblioteca *PyFluent*, algumas limitações foram identificadas no processo. O *Ansys Fluent Meshing* permite a automação de grande parte das operações via *scripts Python*; no entanto, como a biblioteca *PyFluent* ainda está em processo de desenvolvimento, algumas funções específicas não estão completamente integradas.

Em particular, foi observado que, durante a geração da malha para os reatores fotocatalíticos, o software separava automaticamente as faces do fotocatalisador em múltiplas zonas de condição de contorno. Embora essa separação não impeça a execução das simulações, ela poderia dificultar a aplicação das condições físicas na etapa de solução numérica, uma vez que o *solver* interpreta essas regiões como superfícies independentes.

Com o objetivo de simplificar a definição das condições de contorno no Fluent e garantir maior praticidade e clareza na fase posterior de simulação, optou-se por incluir uma etapa adicional no processo: a unificação das zonas do fotocatalisador por meio da ferramenta Merge Zones no Fluent Meshing. Essa intervenção manual foi pontual e estratégica, voltada à otimização do fluxo de trabalho como um todo, sem interferir na automação da geração da malha propriamente dita.

Importante destacar que essa ação não comprometeu a padronização nem o tempo principal de geração das malhas. A automação foi bem-sucedida em todos os modelos, e a etapa manual adicionada representou apenas um refinamento local, com foco na integridade do modelo e na facilidade de configuração das simulações subsequentes.

Dois dos principais parâmetros utilizados na avaliação da qualidade da malha são a Skewness e a Qualidade Ortogonal (Orthogonal Quality). A Skewness mede o desvio das células em relação a uma forma ideal (como um hexaedro ou tetraedro regular), sendo que valores mais baixos indicam menor distorção e, consequentemente, menor risco de introdução de gradientes numéricos artificiais que podem comprometer a solução. Já a Qualidade Ortogonal avalia o alinhamento das células com os gradientes do escoamento. Valores elevados deste parâmetro indicam melhor alinhamento, favorecendo a precisão na discretização dos termos diferenciais e a estabilidade numérica do *solver*.

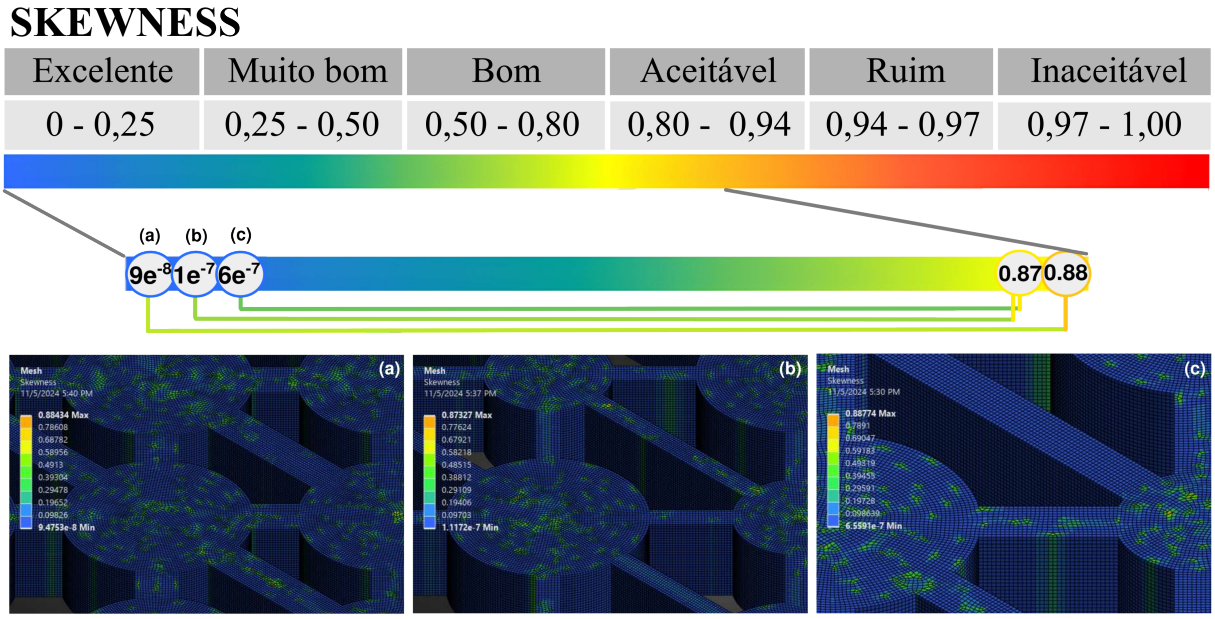
As Figuras 25 e 26 apresentam os mapas de Skewness e Qualidade Ortogonal, respectivamente, para três geometrias selecionadas. Essas geometrias foram escolhidas por representarem os casos com maior complexidade construtiva, uma vez que incluem canais horizontais que resultam em regiões com ângulos mais fechados e canais estreitos, características que tendem a dificultar a geração de malhas com boa qualidade.

Em relação à Skewness, todas as malhas analisadas apresentaram valores dentro da

faixa considerada aceitável a excelente, segundo os critérios de referência utilizados (Figura 24). Os valores máximos encontrados ficaram abaixo de 0,89, sendo que a maior parte das células se concentrou em faixas inferiores a 0,5, o que evidencia uma boa qualidade geral da malha mesmo nas regiões mais críticas da geometria.

Para a Qualidade Ortogonal, os valores variaram entre aproximadamente 0,47 e 1,0, situando todas as malhas dentro das classificações de boa a excelente (Figura 25). Ressalta-se que mesmo nos modelos com geometrias mais desafiadoras, como aqueles com múltiplas interseções entre canais verticais e horizontais, os valores mínimos mantiveram-se acima do limite inferior de aceitabilidade (0,20), sem indicar risco de instabilidade numérica significativa.

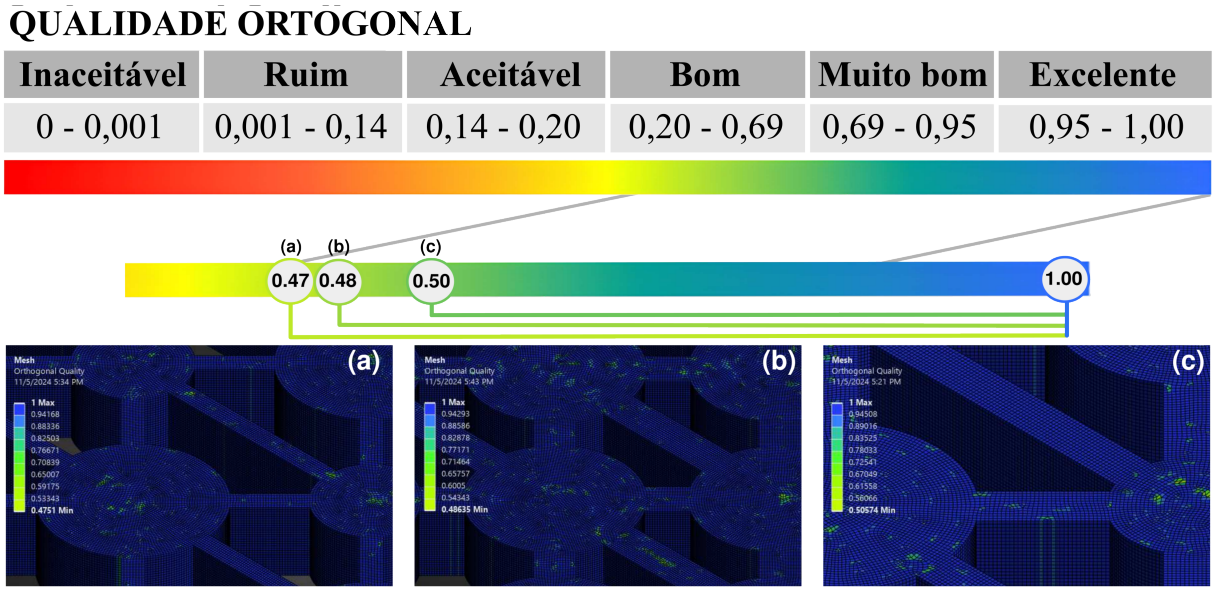
Figura 25 – Parâmetro de qualidade skewness para 3 submodelos do reator NETMIX: (a) modelo 29C – CH, (b) modelo 39C – CH, (c) modelo 19A – CH



Fonte: elaborado pela autora (2025)

Esses resultados demonstram que a metodologia automatizada foi capaz de gerar malhas de alta qualidade de forma consistente, mesmo para geometrias complexas, assegurando confiabilidade aos resultados das simulações subsequentes.

Figura 26 – Parâmetro de qualidade ortogonal para 3 submodelos do reator NETMIX: (a) modelo 39C – CH, (b) modelo 29C – CH, (c) modelo 19A – CH



Fonte: elaborado pela autora (2025)

5.1.3 Automação da etapa de simulação no solver

Após a geração da malha numérica, a etapa de simulação no *solver* representa o estágio final da preparação para análise CFD. Tradicionalmente, essa fase demanda que o usuário configure manualmente diversos parâmetros, como os modelos físicos aplicados, condições de contorno, métodos numéricos e, eventualmente, o carregamento de arquivos adicionais como funções definidas pelo usuário (UDFs) ou campos escalares definidos (UDSs).

A automação desenvolvida foi capaz de abranger todas as etapas necessárias à configuração das simulações no *Ansys Fluent*, substituindo completamente o processo via interface de usuário tradicional. A metodologia permitiu a execução contínua e padronizada de todos os submodelos, com suporte a três cenários distintos: simulação fluidodinâmica isolada, acoplamento com irradiância fixa via UDF e acoplamento com campos escalares via UDS, demonstrando versatilidade e eficiência no processamento de múltiplos casos com mínima intervenção do usuário.

Todos os 18 submodelos do reator NETmix foram simulados em sequência utilizando a rotina automatizada. A Tabela 9 apresenta os tempos totais de simulação de

cada modelo.

Tabela 9 – Tempo de simulação CFD dos submodelos do reator NETmix com automação do *solver*

Modelo	**Tempo de simulação (h)**
19A - SH	117,86
29A - SH	2,22
39A - SH	2,88
19B - SH	107,63
29B - SH	2,56
39B - SH	3,11
19C - SH	113,91
29C - SH	2,73
39C - SH	3,23
19A - CH	101,40
29A - CH	2,48
39A - CH	2,93
19B - CH	52,36
29B - CH	2,76
39B - CH	3,53
19C - CH	101,56
29C - CH	2,85
39C - CH	3,25

Fonte: elaborado pela autora (2025)

O tempo total de simulação dos modelos foi de 26 dias corridos, com execução contínua e sem intervenção humana. Durante esse período, o *script* foi capaz de importar automaticamente os arquivos de malha, aplicar os parâmetros físicos definidos e executar as simulações conforme as condições específicas de cada caso. Considerando que a preparação manual de uma simulação no *Ansys Fluent* pode levar entre 15 a 20 minutos por modelo (desconsiderando o tempo de cálculo), estima-se que o uso da automação poupou aproximadamente 6 horas de trabalho humano para os 18 modelos simulados.

Além da economia de tempo, a automação da etapa do *solver* amplia significativamente a viabilidade de projetos de maior escala. Em projetos de otimização, nos quais dezenas ou até centenas de modelos precisam ser simulados com variações sutis de parâmetros geométricos ou físicos, a preparação manual de cada simulação se tornaria extremamente custosa e, muitas vezes, inviável em termos de prazos. Dessa forma, a automação não apenas torna o processo mais eficiente, como também abre caminho para a realização de estudos mais robustos e abrangentes.

Com isso, observa-se que a automação da etapa do *solver* contribuiu de maneira decisiva para a redução do tempo de processo, aumento da confiabilidade e viabilização de projetos de alta complexidade, atendendo plenamente ao terceiro objetivo desta pesquisa.

5.2 ANÁLISE FÍSICA: DEGRADAÇÃO DO TRICLOROETILENO

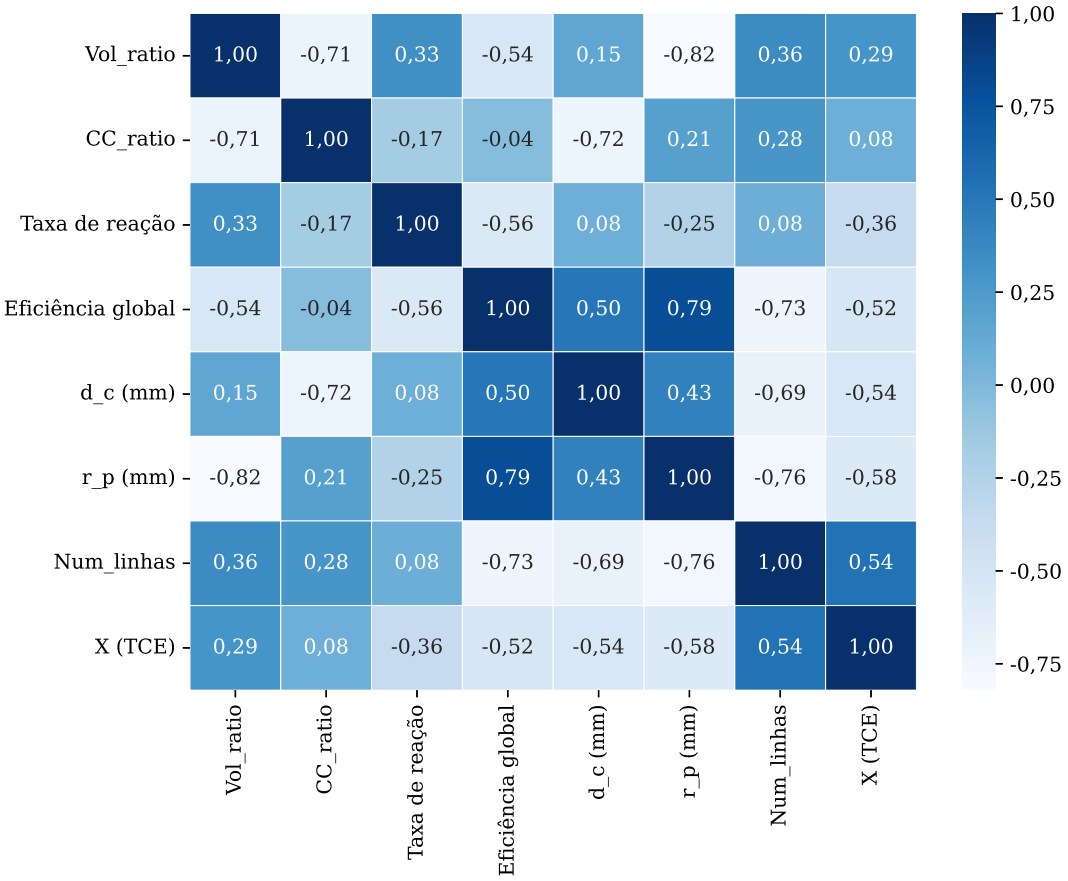
Nesta seção, são discutidos os principais resultados obtidos a partir da aplicação da metodologia automatizada no estudo de caso, com foco na análise física da degradação do tricloroetileno via fotocatálise. Os resultados englobam os efeitos das variações geométricas nos submodelos do reator NETmix sobre o desempenho reacional, bem como os impactos observados nos perfis de irradiância simulados.

A Figura 27 apresenta o mapa de correlação entre os principais parâmetros geométricos e os resultados obtidos. Neste gráfico, valores positivos indicam correlações diretas, nas quais o aumento de um parâmetro está associado ao aumento de outro. Já os valores negativos revelam correlações inversas, enquanto valores próximos de zero sugerem ausência de correlação significativa.

Dentre os destaques, observa-se uma correlação positiva moderada ($r = 0{,}54$) entre o número de linhas e a degradação do tricloroetileno X_{tce}, indicando que configurações com maior número de linhas favoreceram o desempenho reacional. Esse comportamento pode ser atribuído ao aumento do tempo de residência do fluido no interior do reator, o que proporciona maior contato entre o poluente e a superfície catalítica ao longo do escoamento. Como consequência, há também um incremento na área total de fotocatalisador disponível, o que contribui diretamente para a conversão do composto.

Por outro lado, o parâmetro *CC_ratio*, embora teoricamente reconhecido como influente na distribuição do escoamento, como discutido no trabalho de Lopes *et al.*, (2023) para sistemas líquidos, apresentou, neste estudo, baixa correlação com a taxa de reação ($r = -0{,}17$) e com a conversão de TCE ($r = 0{,}08$). Isso sugere que, nas condições aqui avaliadas, com escoamento gasoso e diferentes configurações geométricas de reatores, essa razão não se destacou como um fator determinante para o desempenho do processo. Ainda assim, em aplicações voltadas à análise da qualidade de mistura em sistemas líquidos,

Figura 27 – Mapa de correlação entre parâmetros geométricos e resultados simulados: valores positivos representam correlação diretamente proporcional enquanto valores negativos são correlações inversamente proporcionais, valores próximos de zero representam baixa correlação, onde o parâmetro não afeta o resultado



Fonte: elaborado pela autora (2025)

como os abordados por Lopes *et al.*, o parâmetro pode assumir papel mais relevante.

A eficiência global, definida como o produto entre a homogeneidade da irradiância e a eficiência de absorção de fótons, apresentou correlação positiva com o raio dos canais (r_p) e com o diâmetro da câmara (d_c) ($r = 0{,}79$ e $r = 0{,}50$, respectivamente), sugerindo que reatores com geometrias internas mais amplas favoreceram uma distribuição de luz mais homogênea e eficiente. Por outro lado, observou-se uma correlação negativa entre a eficiência global e o número de linhas ($r = –0{,}73$), indicando um *trade-off* importante entre eficiência ótica e desempenho reacional: enquanto modelos com maior número de linhas promovem maior degradação de poluentes, eles tendem a apresentar menor eficiência na utilização da radiação incidente, possivelmente devido à maior heterogeneidade da iluminação interna ou à atenuação da luz ao longo do percurso óptico.

5.2.1 Resultado das simulações Empregando o Modelo de Ray Tracing nos 18 submodelos do reator NETmix

Os resultados apresentados nesta subseção referem-se às simulações ópticas realizadas no *software Ansys Speos*, as quais forneceram os mapas de irradiância utilizados posteriormente como campos escalares (UDS) nas simulações CFD conduzidas no *Ansys Fluent*. Como descrito na Seção 4.3.5, a estrutura de LEDs foi mantida constante para todos os submodelos, assegurando que quaisquer variações nos perfis de irradiância sejam atribuídas exclusivamente às diferenças geométricas entre os modelos.

A Tabela 10 apresenta um panorama quantitativo dos resultados ópticos obtidos para os modelos simulados, incluindo os valores médios de irradiância, a eficiência de absorção de fótons, a homogeneidade da distribuição de luz e a eficiência global. Esses dados oferecem uma base comparativa sólida entre as diferentes configurações geométricas analisadas.

A análise dos dados da Tabela 10 evidencia tendências claras relacionadas ao comprimento dos submodelos do reator NETmix, representado aqui pelo número de linhas (19, 29 ou 39), bem como à presença de canais horizontais (CH) ou à ausência deles (SH).

Os modelos com menor número de linhas (19A, 19C, 19B) apresentaram as maiores irradiâncias médias dentre todos os simulados, com destaque para os modelos 19A - SH e 19B - SH, ambos com valores superiores a 1.140, $W.m^{-2}$. Isso está em conformidade com a Lei de Beer–Lambert (Seção 4.3.5.1), já que nesses modelos o caminho óptico é mais curto, resultando em menor atenuação da luz e, portanto, maior intensidade nas paredes internas do reator.

No entanto, essa maior intensidade de luz não se traduziu, necessariamente, em melhor desempenho óptico. Isso é evidente quando se observa que, apesar de possuírem elevada irradiância, os modelos SH (sem canais horizontais) dessa faixa apresentaram eficiências globais inferiores em comparação às suas versões CH equivalentes. O modelo 19B - CH, por exemplo, alcançou a maior eficiência global entre todos os simulados (48,68%), graças à combinação de alta eficiência de absorção (79,45%) e excelente homogeneidade

Tabela 10 – Resultados ópticos obtidos nas simulações no *Ansys Speos* para os submodelos NETmix

Modelo	**Irradiância média (W/m2)**	**Eficiência de abs. (%)**	**Homogeneidade**	**Eficiência Global (%)**
29A - SH	612,51	37,88	0,7437	28,17
29A - CH	612,51	47,68	0,7571	36,10
39A - SH	452,99	38,30	0,7118	27,26
39A - CH	461,10	48,58	0,7237	35,15
39B - SH	483,25	42,62	0,7268	30,97
39B - CH	489,96	52,61	0,7366	38,75
29B - SH	661,20	44,35	0,7578	33,61
29B - CH	665,29	53,54	0,7680	41,12
39C - SH	470,12	43,27	0,7057	30,54
39C - CH	477,52	52,71	0,7210	38,01
29C - SH	682,03	46,95	0,7627	35,81
29C - CH	682,52	55,73	0,7710	42,97
19A - SH	1.145,57	51,24	0,7927	40,62
19A - CH	1.134,88	59,50	0,7932	47,20
19C - SH	1.111,99	53,16	0,7887	41,93
19C - CH	1.102,92	60,76	0,7921	48,13
19B - SH	1.143,73	53,60	0,7932	42,52
19B - CH	1.132,01	79,45	0,7945	48,68

Fonte: elaborado pela autora (2025)

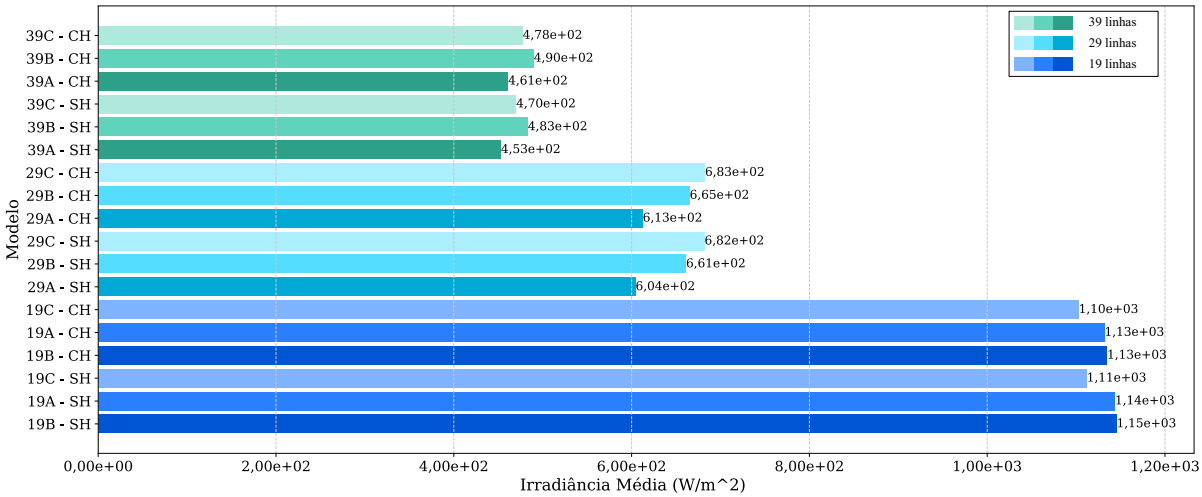
(0,7945), superando sua contraparte 19B - SH, que obteve apenas 42,52%.

Na faixa intermediária, com 29 linhas (modelos 29A, 29B, 29C), observou-se uma redução da irradiância média, situando-se entre 612, $W.m^{-2}$ e 682, $W.m^{-2}$. Ainda assim, os modelos CH mantiveram uma performance sólida em termos de eficiência global, com destaque para o modelo 29C - CH, que atingiu 42,97%, valor próximo ao dos melhores modelos com 19 linhas. Esse resultado indica que, mesmo com uma irradiância mais baixa, a compensação é possível pelo melhor aproveitamento da luz, evidenciado por altas taxas de absorção e homogeneidade.

Já os modelos com 39 linhas (39A, 39B, 39C) apresentaram, em geral, os menores valores de irradiância média, com destaque para o modelo 39A - SH (452,99, $W.m^{-2}$). Apesar disso, os modelos CH dessa faixa mostraram-se mais eficientes do ponto de vista global, especialmente o 39B - CH, com eficiência global de 38,75%, superior a diversos modelos SH com 29 linhas, mesmo com irradiância mais elevada.

A Figura 28 ilustra os valores de irradiância média obtidos para cada modelo simulado, organizados pelo número de linhas de cada um. Observa-se nitidamente que os modelos com 19 linhas (representados em tons de azul mais escuro) apresentam as maiores irradiâncias médias, com destaque para o modelo 19B - SH, que atinge aproximadamente 1,144 W/m^2. À medida que aumenta o número de linhas e, consequentemente, o comprimento do percurso óptico, os valores de irradiância diminuem, o que está de acordo com a tendência observada na Tabela 10. Uma vez que a potência e o ângulo de incidência dos LEDs foram mantidos constantes em todos os modelos, a variação no comprimento do caminho óptico torna-se o principal fator de impacto sobre a irradiância média.

Figura 28 – Irradiância média em função do modelo e quantidade de linhas dos submodelos



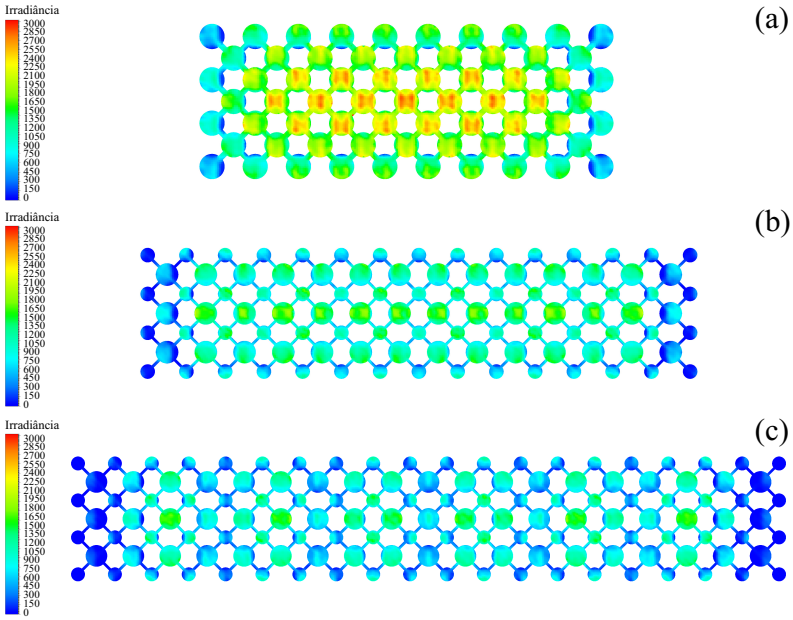
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Além dos resultados apresentados na Tabela 10 e na Figura 28, as Figuras 29 e 30 mostram o contorno da irradiância para seis submodelos distintos. Observa-se que os modelos com 19 linhas (Figuras 29a e 30a) apresentam zonas de alta irradiância. Isso se deve à maior concentração dos LEDs na região central desses modelos, o que favoreceu tanto a homogeneidade da distribuição da luz quanto a redução do comprimento do caminho óptico. Nos modelos com 30 linhas (Figuras 29b e 30b), nota-se uma irradiância geral mais baixa, sem regiões de alta absorbância. O restante dos resultados, referentes ao contorno de irradiância para cada um dos modelos, podem ser vistos no Apêndice C.

O contorno da irradiância nesses casos apresenta um comportamento significativamente homogêneo ao longo do comprimento dos reatores, com exceção das bordas.

Por fim, nos modelos com 39 linhas (Figuras 29c e 30c), identificam-se regiões de baixa irradiância, evidenciadas pela coloração azul escuro. A distribuição é menos homogênea, com zonas de coloração verde marcando as áreas diretamente abaixo dos LEDs, indicando maior absorção de fótons nessas regiões. Entretanto, nas demais áreas, a irradiância foi significativamente reduzida. Apesar da tendência geral de aumento da irradiância média nos modelos com canais horizontais (CH), existe uma inversão desse comportamento nos reatores menores, com 19 linhas (modelos 19A, 19C e 19B). Nesses casos, os modelos sem canais horizontais (SH) apresentaram irradiância média ligeiramente superior aos equivalentes CH.

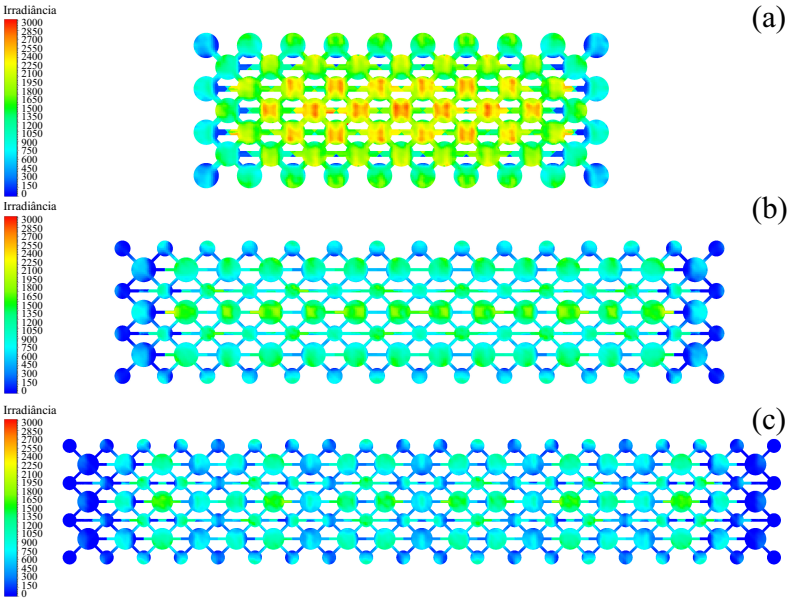
Figura 29 – Resultado do contorno do perfil de irradiância em submodelos sem canais horizontais (SH): (a) no modelo de 19 linhas 19A - SH, (a) no modelo de 29 linhas 29A - SH e (c) no modelo de 39 linhas 39A - SH



Fonte: elaborado pela autora (2025)

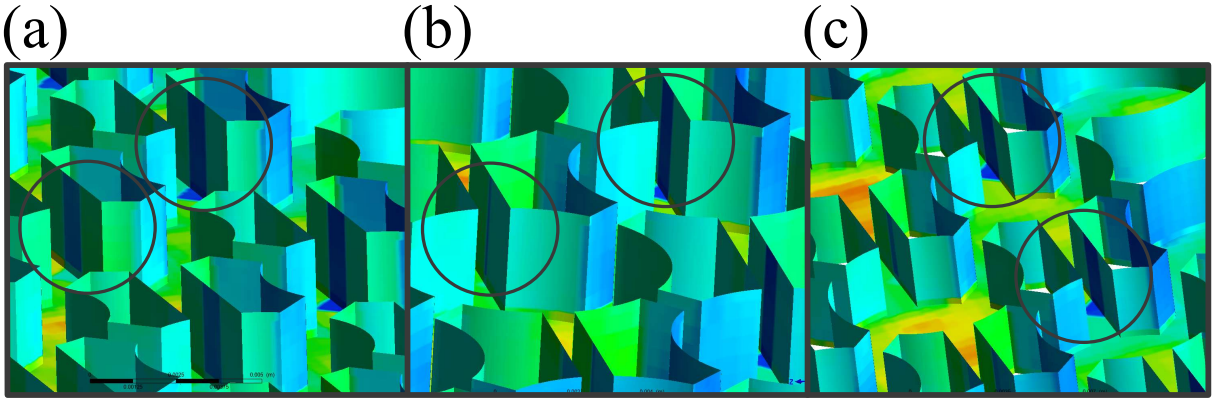
Esse comportamento pode ocorrer devido ao aumento da área total, por conta da adição dos canais horizontais sem um aumento significativo da irradiância nesses canais, principalmente nas regiões de parede que, por estarem muito alinhadas na direção vertical dos 108 LED's, não recebem iluminação. Esse aumento de área sem aumento de absorção de fótons pode reduzir o valor médio de irradiância do reator. Esse fenômeno será melhor ilustrado na Figura 31, que evidencia a concentração de irradiância nas paredes dos canais e o sombreamento acentuado nessas regiões.

Figura 30 – Resultado do contorno do perfil de irradiância em submodelos com canais horizontais (CH): (a) no modelo de 19 linhas 19A - CH, (a) no modelo de 29 linhas 29A - CH e (c) no modelo de 39 linhas 39A - CH



Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 31 – Resultado do contorno do perfil de irradiância nos submodelos de 19 linhas, ampliação da imagem nos canais horizontais dos submodelos evidenciando a baixa absorção de fótons nessa região: (a) submodelo 19A - CH, (b) submodelo 19B - CH e (c) submodelo 19C - CH



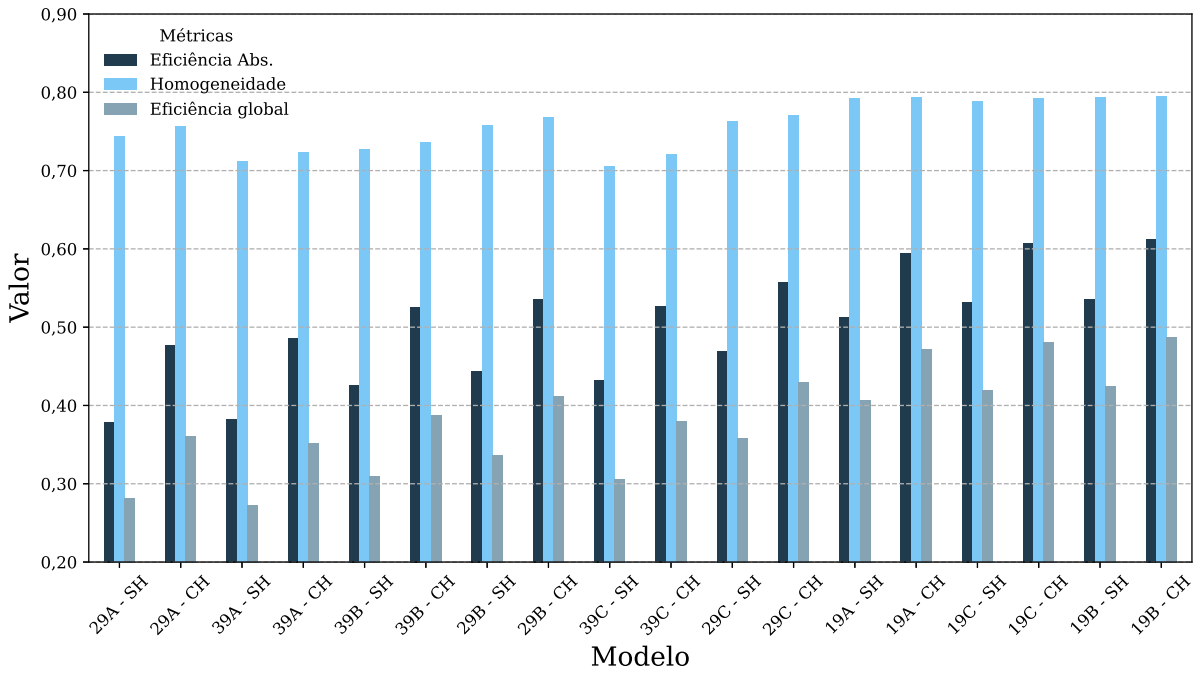
Fonte: elaborado pela autora (2025)

De forma geral, os modelos com canais horizontais (CH) apresentam maior absorção de luz, refletida tanto na irradiância média quanto na eficiência de absorção de fótons. No entanto, nos modelos de menor porte (19 linhas), a inserção dos canais horizontais resultou em uma redução na irradiância média, devido ao aumento da área de catalisador sem um ganho proporcional de energia luminosa, como discutido anteriormente. Esse efeito é indesejável em aplicações fotocatalíticas, já que valores mais baixos de irradiância média podem comprometer a taxa de degradação do poluente. Assim, para reatores menores,

a configuração sem canais horizontais (SH) se mostra mais vantajosa. Por outro lado, nos modelos de maior porte (29 e 39 linhas), a presença dos canais horizontais contribui positivamente para o desempenho óptico, sendo recomendada sua inclusão nesses casos.

Além da irradiância média, o aumento da área de passagem proporcionado pelos canais horizontais também influenciou diretamente outros parâmetros ópticos de desempenho, como a eficiência de absorção de fótons, a homogeneidade da distribuição luminosa e a eficiência global, conforme ilustrado na Figura 32. De maneira geral, observa-se que todos os modelos com canais horizontais (CH) apresentaram valores superiores para esses três parâmetros, quando comparados às suas versões equivalentes sem canais horizontais (SH). Esse comportamento indica que a adição de canais horizontais não apenas favorece a absorção de fótons, aumentando a área ativa de exposição à luz, como também contribui para uma distribuição mais homogênea da irradiância no interior do reator. Como resultado, há um ganho expressivo na eficiência global do sistema.

Figura 32 – Eficiência de absorção de fótons, homogeneidade da luz e eficiência Global para os modelos estudados



Fonte: elaborado pela autora (2025)

É importante destacar que, ao contrário da irradiância média, esses parâmetros mostraram-se menos sensíveis à quantidade de linhas (ou seja, ao comprimento dos modelos). A variação percentual entre o maior e o menor valor registrado foi de apenas 23,38%

para a eficiência de absorção, 0,08 para a homogeneidade e 21,41% para a eficiência global. Esses resultados sugerem que, embora o tamanho e a geometria do modelo influenciem a performance óptica, o principal fator determinante para a melhoria nesses indicadores foi a presença dos canais horizontais.

Além do número de linhas, os parâmetros geométricos dos modelos, como o raio das câmaras paralelas r_p e o diâmetro dos canais d_c, também influenciam significativamente a distribuição de luz no interior dos reatores. Para avaliar esse comportamento de forma mais isolada, pode-se comparar modelos com o mesmo número de linhas, eliminando essa variável como fator de interferência. Por exemplo, ao comparar os modelos 39B e 39C, nota-se que o modelo 39B apresenta valores ligeiramente mais elevados de irradiância média, mesmo possuindo um raio de câmara menor como apresentado na Tabela 11

Tabela 11 – Parâmetros geométricos e irradiância média dos modelos 39B e 39C

Modelo	**r_p** (mm)	**d_c** (mm)	**Irradiância Média** (W/m^2)
39C - SH	3,00	0,50	470,12
39C - CH	3,00	0,50	477,52
39B - SH	2,75	0,875	483,25
39B - CH	2,75	0,875	489,96

Fonte: elaborado pela autora (2025)

Esse resultado sugere que, quando o número de linhas é constante, o aumento no diâmetro dos canais d_c exerce maior influência positiva sobre a irradiância média do que o aumento no raio das câmaras. Canais mais largos permitem maior passagem de luz, reduzindo o sombreamento entre as estruturas e favorecendo uma iluminação mais intensa em regiões internas do reator.

Assim, enquanto o número de linhas mostra-se como o principal fator na determinação da irradiância média, os parâmetros r_p e d_c atuam como moduladores secundários, com destaque para o diâmetro dos canais, especialmente em configurações com geometrias mais compactas.

De forma geral, a partir das Figuras 28 e 32 foi possível concluir que o número de linhas teve maior impacto sobre a irradiância média, uma vez que influencia diretamente o tempo de residência e a extensão do percurso ótico, afetando a distribuição da luz no

interior do reator. Por outro lado, os parâmetros de eficiência de absorção de fótons e homogeneidade foram mais sensíveis à presença dos canais horizontais, que proporcionam maior área ativa e favorecem uma melhor dispersão da luz. Embora o raio das câmaras e o diâmetro dos canais também exerçam influência sobre o desempenho óptico, seu efeito foi menos expressivo quando comparado à geometria geral do modelo (como a quantidade de linhas) e à configuração estrutural (presença ou não dos canais horizontais). Esses resultados reforçam a importância do projeto geométrico como ferramenta para otimização da eficiência óptica dos reatores fotocatalíticos.

5.2.2 Degradação de tricloroetileno e queda de pressão em função dos parâmetros geométricos

Nesta seção, o foco principal está nos resultados da degradação do tricloroetileno (TCE), variável de maior relevância no processo fotocatalítico avaliado, e a queda de pressão nos submodelos do reator NETmix. As diferentes configurações geométricas testadas têm como objetivo final identificar os modelos que promovem maior conversão do poluente, maximizando a eficiência do reator e minimizam a perda de carga.

A Tabela 12 apresenta os principais parâmetros de saída obtidos nas simulações CFD, incluindo a queda de pressão (ΔP) e a conversão de TCE para cada configuração geométrica. A análise revela que a queda de pressão no escoamento está diretamente relacionada aos parâmetros geométricos do reator, especialmente ao diâmetro dos canais (d_c), ao raio das câmaras paralelas (r_p) e à extensão total do reator (número de linhas). De forma geral, reatores mais longos, com canais mais estreitos e câmaras menores, tendem a apresentar maiores resistências hidráulicas.

Um exemplo notável é o modelo 39C - SH, que apresentou a maior queda de pressão do conjunto (8,07 Pa). Esse resultado está diretamente ligado ao seu diâmetro de canal reduzido ($d_c = 0{,}5$), o menor entre todos os modelos analisados, que aumenta significativamente o atrito ao longo do escoamento. Além disso, a maior extensão do modelo também contribui para o aumento da resistência. Em contrapartida, modelos com canais mais largos e menor extensão, como os da série com 19 linhas, apresentaram quedas de pressão muito menores, mesmo com variações em r_p.

Tabela 12 – Parâmetros de saída nas simulações CFD

Modelo	**Extensão (linhas)**	**d_c**	**r_p**	**Queda de pressão** (Pa)	**Conversão Tce (%)**
29A - SH	29	0,875	2,25	1,88	85,52
29A - CH	29	0,875	2,25	1,13	88,27
39A - SH	39	0,875	2,25	2,48	80,96
39A - CH	39	0,875	2,25	1,45	79,60
39B - SH	39	0,875	2,75	2,16	82,81
39B - CH	39	0,875	2,57	1,32	82,09
29B - SH	29	0,875	3,00	1,52	89,05
29B - CH	29	0,875	3,00	0,98	90,48
39C - SH	39	0,5	3,00	8,07	82,21
39C - CH	39	0,5	3,00	5,02	79,52
29C - SH	29	0,875	3,25	1,40	90,07
29C - CH	29	0,875	3,25	0,94	91,29
19A - SH	19	1,625	3,5	0,42	71,69
19A - CH	19	1,625	3,5	0,34	71,19
19C - SH	19	0,875	3,75	0,93	72,00
19C - CH	19	0,875	3,75	0,68	71,40
19B - SH	19	1,250	3,75	0,54	71,43
19B - CH	19	1,250	3,75	0,42	72,14

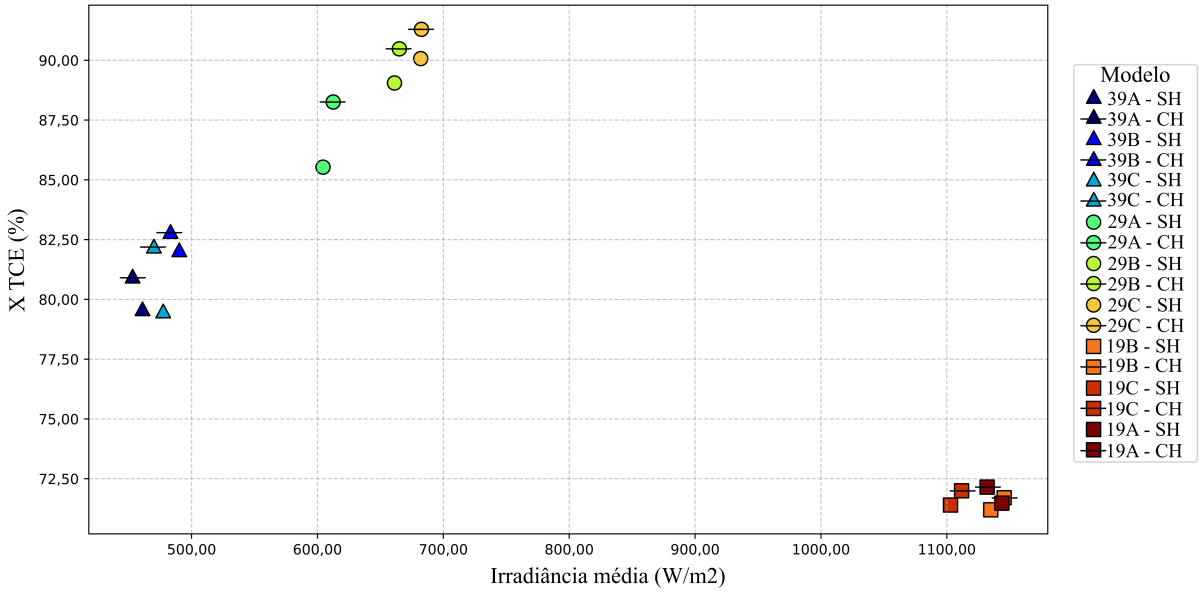
Fonte: elaborado pela autora (2025)

No entanto, embora os parâmetros geométricos influenciem diretamente a queda de pressão, seu impacto sobre a eficiência de conversão do TCE ocorre de forma mais complexa e não linear. A análise dos resultados evidencia que a degradação do tricloroetileno (TCE) não depende exclusivamente da irradiância média, mas do equilíbrio entre a geometria do reator, o tempo de residência do poluente e a distribuição da luz. A Figura 33 mostra a conversão do TCE em função da irradiância média, enquanto a Figura 34 organiza os modelos por número de linhas, destacando o desempenho de cada grupo.

Os modelos com 19 linhas apresentaram os maiores valores de irradiância média, devido à sua estrutura mais compacta e menor distância entre o centro da fonte e a superfície catalítica. No entanto, como se observa em ambas as figuras, esse grupo também obteve as menores taxas de conversão. Esse resultado é atribuído ao reduzido tempo de residência do poluente, que, mesmo sob alta irradiância, não foi suficiente para promover uma degradação mais eficaz.

Já os modelos com 39 linhas, mais longos e com maior área superficial de contato

Figura 33 – Conversão do poluente em razão da irradiância média



Fonte: elaborado pela autora (2025)

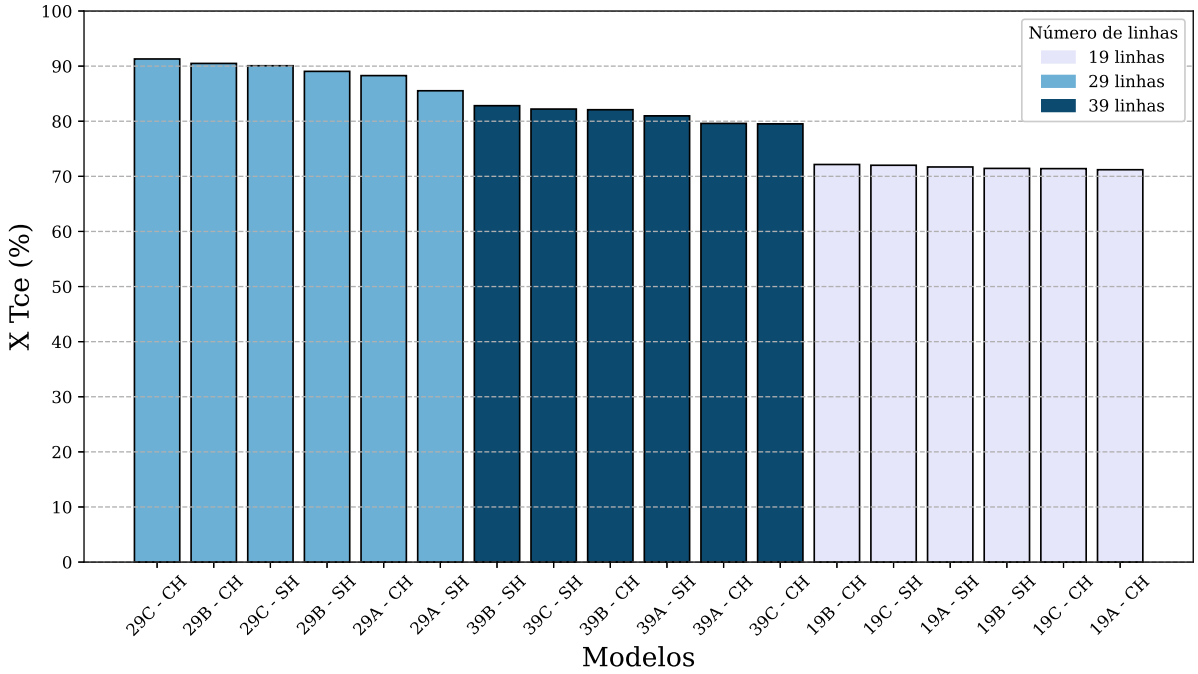
com o fotocatalisador, apresentaram os menores valores de irradiância média, mas ainda assim superaram os modelos de 19 linhas em conversão. Isso reforça a importância do tempo de residência como fator determinante no desempenho do reator.

Os modelos intermediários, com 29 linhas, alcançaram os melhores resultados globais. Apresentado na Figura 34, esse grupo concentrou as maiores taxas de conversão do TCE, com destaque para o modelo 29C - CH, que atingiu 91,29% de remoção. Isso demonstra que houve um equilíbrio ideal entre intensidade de irradiância, tempo de residência e área de fotocatálise — fatores que, em conjunto, proporcionaram um desempenho otimizado.

Portanto, os resultados indicam que a eficiência do processo fotocatalítico está mais associada à configuração geométrica do reator do que à irradiância média isoladamente. O modelo ideal não é aquele que concentra mais luz, mas sim aquele que proporciona tempo e condições adequadas para que o poluente reaja com o fotocatalisador ao longo de seu trajeto pelo reator.

Nesse contexto, é relevante observar também como os parâmetros geométricos individuais, como o raio das câmaras e o diâmetro dos canais, atuam dentro dessas configurações globais. A Figura 35 explora a influência dos parâmetros geométricos individuais,

Figura 34 – Conversão do poluente em relação à quantidade de linhas de cada um dos submodelos



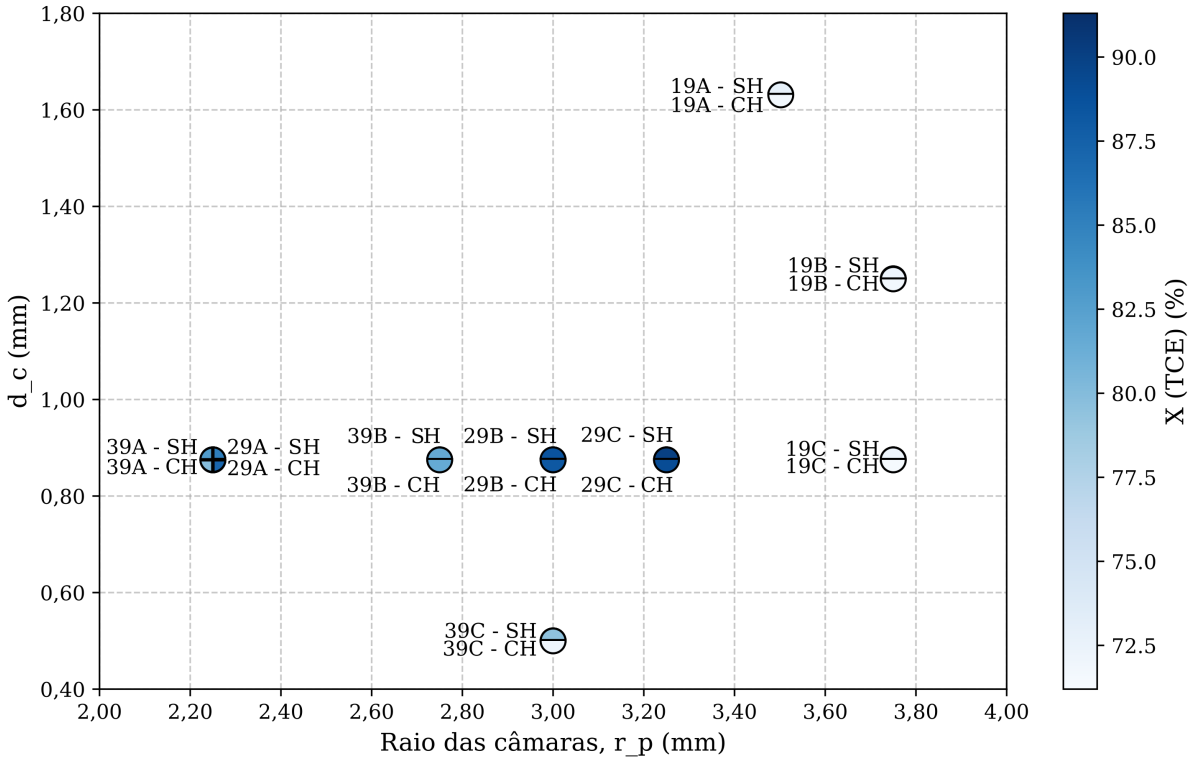
Fonte: elaborado pela autora (2025)

raio das câmaras r_p e diâmetro dos canais d_c, sobre a conversão do tricloroetileno. É possível observar que, dentro de cada grupo de número de linhas, os modelos com maiores raios das câmaras tendem a apresentar maiores taxas de conversão. Isso indica que o aumento da área superficial de contato do poluente com o fotocatalisador contribui positivamente para o desempenho do reator.

Apesar disso, os modelos com menor número de linhas (19), mesmo concentrando os maiores valores de r_p e d_c, mantiveram os menores índices de conversão do poluente, como é o caso dos modelos 19C - CH e 19B - CH. Esse comportamento reforça o que foi observado nas Figuras 33 e 34: a baixa eficiência desses modelos deve-se ao tempo de residência reduzido, que limita o aproveitamento da irradiância recebida e impede que os efeitos geométricos isolados sejam suficientes para promover uma degradação mais eficiente.

Portanto, os dados demonstram que a conversão do TCE é influenciada por uma combinação sinérgica entre fatores geométricos e operacionais, sendo o tempo de residência e a irradiância média tão ou mais importantes do que os parâmetros físicos das câmaras e canais. Reatores com configurações intermediárias, como os modelos com 29 linhas,

Figura 35 – Conversão de tricloroetileno em relação aos parâmetros: raio das câmaras e diâmetro dos canais



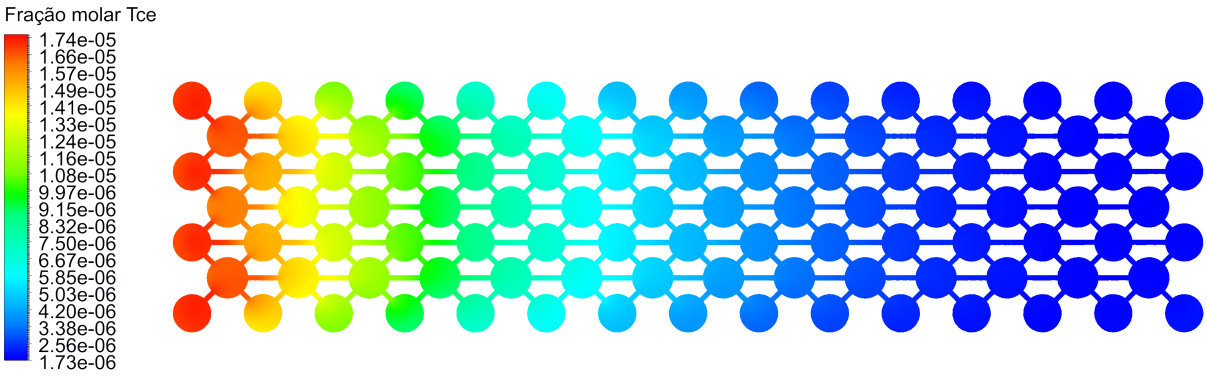
Fonte: elaborado pela autora (2025)

mostraram-se mais eficazes exatamente por conseguirem equilibrar irradiância, tempo de residência e área de fotocatalisador.

Dessa forma, foi possível analisar que para a degradação do tricloroetileno em fase gasosa via fotocatálise heterogênea, empregando TiO_2 como catalisador, o modelo 29C – CH apresentou 91,29% de conversão, a maior dentre os submodelos analisados nesse trabalho. O submodelo possui 29 linhas e câmaras horizontais, com 0,875 mm de largura dos canais 3,25 mm de raio nas câmaras paralelas e 3,5 mm de raio nas câmaras diagonais. Isso demonstra que mesmo com comprimentos intermediários, o modelo foi capaz de degradar o poluente de forma eficiente. Na Figura 36 está apresentado o contorno para a fração molar de TCE no modelo 29C - CH, os demais resultados para os contornos de fração molar dos outros submodelos estão apresentados no Apêndice D.

Além dos resultados apresentados neste capítulo, o Apêndice E reúne dois estudos adicionais que demonstram a versatilidade e aplicabilidade da metodologia de automação proposta nesta dissertação. O primeiro caso aborda a geração automatizada da geometria e da malha numérica de um reator fotocatalítico do tipo *micropillar*, destacando a flexibi-

Figura 36 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 29C - CH



Fonte: elaborado pela autora (2025)

lidade na variação geométrica e o potencial para estudos de otimização. O segundo caso apresenta a automação do setup numérico no ANSYS Fluent para um reator de placas planas com reações competitivas catalíticas nas paredes, com o objetivo de alimentar um estudo de otimização. Esses casos reforçam a capacidade da metodologia em agilizar etapas críticas da modelagem e simulação CFD, reduzindo o esforço manual e ampliando as possibilidades de aplicação em diferentes geometrias e fenômenos reacionais.

6 CONCLUSÃO

Os resultados deste estudo demonstram os benefícios da metodologia de automação desenvolvida para a geração de geometrias CAD, malha numérica e configuração do *solver*, permitindo significativa redução de tempo, padronização dos procedimentos e minimização de erros humanos. A abordagem automatizada proporcionou um aumento de eficiência em todas as etapas do processo, viabilizando a execução de múltiplas simulações de forma rápida e consistente.

Como estudo de caso, a metodologia foi aplicada à investigação de submodelos derivados do reator NETmix, com o objetivo de compreender o impacto das variações geométricas no desempenho fotocatalítico. Os resultados indicaram que a distribuição da irradiância e a eficiência de degradação do tricloroetileno (TCE) estão fortemente associadas a três parâmetros geométricos principais: o número de linhas (comprimento do reator), o raio das câmaras (r_p) e o diâmetro dos canais (d_c). O aumento no número de linhas contribui diretamente para a elevação do tempo de residência do fluido no interior do reator, favorecendo reações mais completas. Já os parâmetros r_p e d_c, ao expandirem a área interna das câmaras e canais, promovem maior absorção da irradiância incidente e aumentam a área de contato com a superfície catalítica, ambos fatores críticos para o aumento da taxa de reação.

Modelos com 19 linhas apresentaram maior irradiância média, resultado atribuído à menor extensão geométrica, que favorece a concentração de luz e o aumento da densidade de potência luminosa em regiões específicas, porém, apresentaram os menores valores para a degradação de TCE, devido ao baixo tempo de residência promovido por estes modelos. Por outro lado, modelos com 29 linhas atingiram as maiores taxas de conversão do poluente, beneficiados pelo equilíbrio entre a intensidade de luz absorvida e o tempo de exposição do contaminante ao meio reacional. Além disso, a inclusão de canais horizontais (CH) contribuiu para uma distribuição mais homogênea da irradiância ao longo do reator e, simultaneamente, ampliou a área catalítica disponível, elevando a eficiência global do processo de fotodegradação.

Observou-se que o raio das câmaras (r_p) exerceu influência mais expressiva sobre a degradação do poluente do que o diâmetro dos canais (d_c). Esses resultados reforçam

que a otimização da geometria do reator fotocatalítico deve buscar o equilíbrio entre a distribuição da luz e o tempo de exposição do poluente, maximizando assim a eficiência do processo.

Além de fornecer subsídios específicos para o aprimoramento do reator NETmix, a metodologia de automação desenvolvida neste trabalho apresenta-se como uma ferramenta versátil e de aplicação ampla em projetos que envolvam simulações CFD. A integração de rotinas automatizadas com ferramentas de análise paramétrica e algoritmos de otimização pode ampliar significativamente a capacidade de explorar cenários mais complexos, envolvendo múltiplas variáveis geométricas e operacionais. Nesse sentido, a metodologia proposta contribui não apenas para a redução de esforço computacional e operacional, mas também para o avanço de estratégias sistemáticas de projeto e melhoria de reatores, especialmente em aplicações ambientais e energéticas que exigem soluções eficientes e escaláveis.

Complementarmente, a versatilidade da metodologia foi validada por meio de dois estudos adicionais, apresentados no Apêndice E, os quais exploram sua aplicação em contextos distintos. O primeiro caso envolve a geração automatizada de geometrias para um reator fotocatalítico do tipo *micropillar*, caracterizado por sua complexidade geométrica e potencial para estudos de otimização. O segundo estudo demonstra a automação da etapa de configuração do *solver* numérico para um reator com reações competitivas catalíticas nas paredes, com foco em geração de dados para problemas de otimização.

Esses casos reforçam que a metodologia desenvolvida não está restrita a reatores do tipo NETmix nem a simulações reacionais: seu uso pode ser estendido a outros tipos de equipamentos de engenharia, como trocadores de calor, separadores ou dispositivos microfluídicos, nos quais a automação de etapas CAD, malha ou *solver* contribui diretamente para acelerar investigações paramétricas, reduzir erros manuais e aumentar a reprodutibilidade dos estudos. Assim, a abordagem proposta representa uma base sólida e expansível para o desenvolvimento de ferramentas automatizadas em simulações computacionais complexas na área da engenharia química e de processos.

REFERÊNCIAS

AHMADI, Maryam; HAGHIGHI, Mohammad; SOKHANSANJ, Amin; HAGHIGHI, Amir. Total oxidation of toluene at low temperatures in air using sono-impregnated Mn/Cu bimetal over activated clinoptilolite as a nanocatalyst: Designing the oxidation reaction rate with the optimization of the fixed bed reactor CFD model. **Molecular Catalysis**, Elsevier, v. 553, p. 113810, 2024.

ALI, Meesam *et al.* Advancement in Fenton-like reactions using PVA coated calcium peroxide/FeS system: Pivotal role of sulfide ion in regenerating the Fe (II) ions and improving trichloroethylene degradation. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, Elsevier, v. 9, n. 1, p. 104591, 2021.

ANSYS, Pyfluent. **Getting Started**. 2024. Disponível em: `https://fluent.docs.pyansys.com/version/stable/getting_started/index.html`. Acesso em: 6 jan. 2025.

ANSYS, Pyfluent. **PyFluent**. 2024. Disponível em: `https://github.com/ansys`. Acesso em: 6 jan. 2025.

ARULANANDAM, Sarah Jayanthi; HOLLANDS, KG Terry; BRUNDRETT, E. A CFD heat transfer analysis of the transpired solar collector under no-wind conditions. **Solar Energy**, Elsevier, v. 67, n. 1-3, p. 93–100, 1999.

ASHTON, Neil; MADDIX, Danielle C; GUNDRY, Samuel; SHABESTARI, Parisa M. AhmedML: High-fidelity computational fluid dynamics dataset for incompressible, low-speed bluff body aerodynamics. **arXiv preprint arXiv:2407.20801**, 2024.

ASHTON, Neil *et al.* DrivAerML: High-fidelity computational fluid dynamics dataset for road-car external aerodynamics. **arXiv preprint arXiv:2408.11969**, 2024.

AUDI, Marc; POULIN, Marc; ALI, Amjad. Environmental impact of business freedom and renewable energy: a global perspective. **International Journal of Energy Economics and Policy**, v. 14, n. 3, p. 672–683, 2024.

AYAPPAN, Chinnadurai; XING, Ruimin; ZHANG, Xintong; LUO, Daibing; LIU, Shanhu; FUJISHIMA, Akira. TiO2-based photocatalysts for emerging gaseous pollutants removal: From photocatalysts to reactors design. **Coordination Chemistry Reviews**, Elsevier, v. 515, p. 215960, 2024.

BABUNSKI, Darko; LAZAREVIKJ, Marija; ZAEV, Emil; MARKOV, Zoran. Direct tool for generation of the geometry of a Francis turbine guide vane system. *In*: IEEE. 2020 9th Mediterranean Conference on Embedded Computing (MECO). [*S.l.*: *s.n.*], 2020.

BACKUS, J. W. *et al.* The FORTRAN automatic coding system. *In*: PAPERS Presented at the February 26-28, 1957, Western Joint Computer Conference: Techniques for Reliability. Los Angeles, California: Association for Computing Machinery, 1957. (IRE-AIEE-ACM '57 (Western)), p. 188–198.

BAHMAN, Amir Sajjad; IANNUZZO, Francesco. 8 - Computer-aided engineering simulations. *In*: SUGANUMA, Katsuaki (Ed.). **Wide Bandgap Power Semiconductor Packaging**. [*S.l.*]: Woodhead Publishing, 2018. (Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials). P. 199–223. ISBN 978-0-08-102094-4.

BAHMAN, Amir Sajjad; IANNUZZO, Francesco. Computer-aided engineering simulations. *In*: WIDE Bandgap Power Semiconductor Packaging. [*S.l.*]: Elsevier, 2018. P. 199–223.

BALESTRIN, Evandro; VALLE, Rita de Cássia Siqueira Curto; VALLE, José Alexandre Borges; SILVA, Adriano da *et al.* Performance analysis of photocatalytic reactor with immobilized catalyst for emerging pollutants water treatment using cfd simulation and optimization method. **Chemical Engineering and Processing-Process Intensification**, Elsevier, v. 205, p. 110016, 2024.

BAN, Seonghoon; HYUN, Kyung Hoon. 3D computational sketch synthesis framework: Assisting design exploration through generating variations of user input sketch and interactive 3D model reconstruction. **Computer-Aided Design**, Elsevier, v. 120, p. 102789, 2020.

BEHJATMANESH-ARDAKANI, Reza. Theoretical Insights into Band Gap Tuning Through Cu Doping and Ga Vacancy in GaSe Monolayer: A First-Principles Perspective. **Journal of Electronic Materials**, Springer, v. 53, n. 5, p. 2398–2409, 2024.

BHUTTA, Muhammad Mahmood Aslam; HAYAT, Nasir; BASHIR, Muhammad Hassan; KHAN, Ahmer Rais; AHMAD, Kanwar Naveed; KHAN, Sarfaraz. CFD applications in various heat exchangers design: A review. **Applied Thermal Engineering**, 2012.

BINGHAM, QG; LUTES, C; GRAND, R; QUADRI, S; DOLLHOPF, R; POSAVATZ, N; BIRKETT, E. Emissions of Trichloroethylene from Bedroom Furniture Set as a Source of Indoor Air Contamination. **Groundwater Monitoring & Remediation**, Wiley Online Library, v. 43, n. 1, p. 78–83, 2023.

BLATCHLEY III, Ernest R. **Photochemical Reactors: Theory, Methods, and Applications of Ultraviolet Radiation**. [*S.l.*]: John Wiley & Sons, 2022.

BOGUSZ, E; FOX, G; HAUPT, T; HAWICK, K; RANKA, S. Preliminary evaluation of High-Performance Fortran as a language for computational fluid dynamics. *In*: FLUID Dynamics Conference. [*S.l.*: *s.n.*], 1994. P. 2262.

CARPENTER, PC *et al.* **Volatile organic compounds in the atmosphere**. [*S.l.*]: Wiley Online Library, 2007.

CELIK, Ishmail B; GHIA, Urmila; ROACHE, Patrick J; FREITAS, Christopher J. Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in CFD applications. **Journal of fluids Engineering-Transactions of the ASME**, ASME-AMER SOC MECHANICAL ENG THREE PARK AVE, NEW YORK, NY 10016-5990 USA, v. 130, n. 7, 2008.

CHAUDHURI, Arnab; ZONDAG, Stefan DA; SCHUURMANS, Jasper HA; SCHAAF, John van der; NOËL, Timothy. Scale-up of a heterogeneous photocatalytic degradation using a photochemical rotor–stator spinning disk reactor. **Organic Process Research & Development**, ACS Publications, v. 26, n. 4, p. 1279–1288, 2022.

CHEN, Hao; CHEN, Zhe; WANG, Xu-Qing; YI, Xiu-Guang; ZHANG, Xi-Bao; LUO, Zheng-Hong. Mass transfer and bubble hydrodynamics in stirred tank with multiple properties fluid via a CFD-PBM method. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, Wiley Online Library, v. 102, n. 11, p. 4038–4054, 2024.

CHENA, Lei; PANNALAA, Sreekanth; BROEKHUISA, Robert; GAUTAMA, Pankaj; GUA, Tian; WESTA, David; BALAKOTAIAH, Vemuri. Three-dimensional CFD simulation of pattern formation in a shallow packed-bed reactor for oxidative coupling of methane. **Chemical Engineering Journal**, 2020.

CHENGULA, Plassidius J; CHARLES, Hazina; PAWAR, Rajendra C; LEE, Caroline Sunyong. Current trends on dry photocatalytic oxidation technology for BTX removal: Viable light sources and highly efficient photocatalysts. **Chemosphere**, Elsevier, p. 141197, 2024.

COELHO, Frederico Silva. **Intensification of the Fischer-Tropsch Process through the NETmix® Technology**. 2018. Diss. (Mestrado) – Universidade do Porto (Portugal).

CONGEDO, P.M.; COLANGELO, G.; STARACE, G. CFD simulations of horizontal ground heat exchangers: A comparison among different configurations. **Applied Thermal Engineering**, 2012.

COONS, Steven Anson. An outline of the requirements for a computer-aided design system. *In*: PROCEEDINGS of the May 21-23, 1963, spring joint computer conference. [*S.l.*: *s.n.*], 1963. P. 299–304.

COSTA, Marcelo F; FONTE, Carlos M; DIAS, Madalena M; LOPES, José Carlos Brito. Heat transfer performance of NETmix—A novel micro-meso structured mixer and reactor. **AIChE Journal**, Wiley Online Library, v. 63, n. 6, p. 2496–2508, 2017.

DADEBO, SA; MCAULEY, KB. Dynamic optimization of constrained chemical engineering problems using dynamic programming. **Computers & chemical engineering**, Elsevier, v. 19, n. 5, p. 513–525, 1995.

DANG, Van-Han; NGUYEN, Tuan-Anh; LE, Minh-Vien; NGUYEN, Dinh Quan; WANG, Yen Han; WU, Jeffery C-S. Photocatalytic hydrogen production from seawater splitting: Current status, challenges, strategies and prospective applications. **Chemical Engineering Journal**, Elsevier, p. 149213, 2024.

DIAS, Lígia Beatriz Sá Azevedo. **Steam Methane Reforming: Process Intensification through NETmix® Technology**. 2018. Diss. (Mestrado) – Universidade do Porto (Portugal).

DIMENSIONS, IA. **Photocatalysis publications**. 2025. Disponível em: `https://app.dimensions.ai/discover/publication?search_mode=content&search_text=photocatalysis&search_type=kws&search_field=full_search`. Acesso em: 27 jan. 2025.

DU, Xiaosong; HE, Ping; MARTINS, Joaquim RRA. Rapid airfoil design optimization via neural networks-based parameterization and surrogate modeling. **Aerospace Science and Technology**, Elsevier, v. 113, p. 106701, 2021.

EÇA, Luis; HOEKSTRA, Martin. Discretization uncertainty estimation based on a least squares version of the grid convergence index. *In*: INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO LISBON, PORTUGAL. PROCEEDINGS of the Second Workshop on CFD Uncertainty Analysis. [*S.l.*: *s.n.*], 2006. P. 1–27.

FÉLIX, Fernanda KC; BONFIM, Pedro GB; SANTOS, Lucas SS; PEREIRA, Douglas Henrique. Teoria Quântica: Uma Abordagem Quantizada da sua Evolução–Parte I. **Revista Virtual de Química**, v. 8, n. 2, p. 319–337, 2016.

FENG, Sitong; SU, Ren. Synthetic Chemistry in Flow: From Photolysis & Homogeneous Photocatalysis to Heterogeneous Photocatalysis. **ChemSusChem**, Wiley Online Library, v. 17, n. 16, e202400064, 2024.

FERNANDES, Isabel S; BRITO, Margarida SCA; MANRIQUE, Yaidelin A; DIAS, Madalena M; LOPES, José Carlos Brito; SANTOS, Ricardo J. Experimental and numerical characterisation of two-phase flow in NETmix reactors. **Chemical**

Engineering and Processing-Process Intensification, Elsevier, v. 194, p. 109580, 2023.

FERNANDES, Isabel S; DIAS, Madalena M; LOPES, José Carlos Brito; SANTOS, Ricardo J. A new reduced geometric model for simulation and design of NETmix reactors: LoopNUB. **Chemical Engineering Science**, Elsevier, v. 293, p. 120061, 2024.

FONSECA, Jéssica de Matos; MIRANDA, Sandra M; MONTEIRO, Joana P; MOREIRA, Regina de Fátima Peralta Muniz; VALENCIA, Germán Ayala; MONTEIRO, Alcilene Rodrigues; VILAR, Vítor JP. Ethylene photocatalytic degradation using TiO2 immobilized in a NETmix mili-photoreactor. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, Elsevier, v. 11, n. 5, p. 110976, 2023.

FOX, Rodney O. CFD models for analysis and design of chemical reactors. **Advances in Chemical Engineering**, Elsevier, v. 31, p. 231–305, 2006.

FROTA, Maurício Nogueira. **Simulação CFD do escoamento nos circuitos hidráulicos de um dispositivo de limpeza online de trocadores de calor**. 2024. Tese (Doutorado) – PUC-Rio.

GANIN, Yaroslav; BARTUNOV, Sergey; LI, Yujia; KELLER, Ethan; SALICETI, Stefano. Computer-aided design as language. **Advances in Neural Information Processing Systems**, v. 34, p. 5885–5897, 2021.

GAO, Wei; XU, Xiaoying; HAN, Xueqi; ZHANG, Ling; DING, Haitao; DENG, Chengxun. Synergistic catalysis induced by a multicomponent system constructed with combined DBD plasma, g-C3N4/FOD and persulfate for trichloroethylene removal. **Journal of Water Process Engineering**, Elsevier, v. 58, p. 104822, 2024.

GHAYOUR, Maliheh Saravani; SHABANIAN, Seyed Reza. CFD study and RSM optimization of acetylene production in partial oxidation process. **Korean Journal of Chemical Engineering**, Springer, v. 41, n. 3, p. 729–747, 2024.

GOLSHAN, Shahab; SOTUDEH-GHAREBAGH, Rahmat; ZARGHAMI, Reza; MOSTOUFI, Navid; BLAIS, Bruno; KUIPERS, JAM. Review and implementation of CFD-DEM applied to chemical process systems. **Chemical Engineering Science**, Elsevier, v. 221, p. 115646, 2020.

GOMES, Paulo Jorge da Cunha *et al.* **The NETmix® Reactor: strategies for optimizing mixing and development of new reactor designs**. 2011. Tese (Doutorado) – Faculdade de Engenharia Universidade do Porto.

GROOVER, Mikell P. **Automation, production systems, and computer-integrated manufacturing**. [*S.l.*]: Pearson Education India, 2016.

HADDADI, M.M.; HOSSEINI, S.H.; RASHTCHIAN, D.; OLAZAR, Martin. Comparative analysis of different static mixers performance by CFD technique: An innovative mixer. **Chinese Journal of Chemical Engineering**, 2020.

HAN, Zongzhen; ZHU, Hengjiang; ZOU, Yanbo; LU, Junzhe; ZHU, Feiyu; NING, Qian. Band gap regulation and a selective preparation method for single-walled silicon carbide nanotubes. **Results in Physics**, Elsevier, v. 38, p. 105658, 2022.

HARRIS, Paul R; DRANOFF, Joshua S. A study of perfectly mixed photochemical reactors. **AIChE Journal**, Wiley Online Library, v. 11, n. 3, p. 497–502, 1965.

HASHIMOTO, Kazuhito; IRIE, Hiroshi; FUJISHIMA, Akira. TiO2 photocatalysis: a historical overview and future prospects. **Japanese journal of applied physics**, IOP Publishing, v. 44, 12R, p. 8269, 2005.

HEMMENDINGER, David. **Computer programming language**. 2024. Disponível em: `https://www.britannica.com/technology/computer-programming-language`. Acesso em: 19 dez. 2024.

HEMPEL, Alexander; KENNEDY, Wright. Trichloroethylene contamination of american military bases: An alternative toxic waste history. **Undergraduate senior history thesis**, 2021.

HOUSEL, Barron C.; HALSTEAD, Maurice H. A methodology for machine language decompilation. *In*: PROCEEDINGS of the 1974 annual conference - Volume 1. [*S.l.*: *s.n.*], 1974. P. 254–260.

HU, Shuaishuai; GAO, Ming-Liang; HUANG, Jiajia; WANG, He; WANG, Qingyu; YANG, Weijie; SUN, Zhihu; ZHENG, Xusheng; JIANG, Hai-Long. Introducing hydrogen-bonding microenvironment in close proximity to single-atom sites for boosting photocatalytic hydrogen production. **Journal of the American Chemical Society**, ACS Publications, v. 146, n. 29, p. 20391–20400, 2024.

IDOKO, Idoko Peter; EZEAMII, Gerald Chekwube; IDOGHO, Christian; PETER, Enemali; SUNDAY, Ubong. Mathematical modeling and simulations using software like MATLAB, COMSOL and Python. **Magna Scientia Advanced Research and Reviews**, 2024.

INSIGHTS, Business Research. **Computational Fluid Dynamics (CFD) market report overview**. 2025. Disponível em: `https://www.businessresearchinsights.com/market-reports/computational-fluid-dynamics-cfd-market-111787`. Acesso em: 23 jan. 2025.

JAGOTA, Vishal; SETHI, Aman Preet Singh; KUMAR, Khushmeet. Finite element method: an overview. **Walailak Journal of Science and Technology (WJST)**, v. 10, n. 1, p. 1–8, 2013.

JAMIL, Qasim; RANA, Khush Bakhat; MATOH, Lev. A CFD Study on Optimization of Mass Transfer and Light Distribution in a Photocatalytic Reactor with Immobilized Photocatalyst on Spheres. **Water**, MDPI, v. 16, n. 13, p. 1828, 2024.

JÄMSÄ-JOUNELA, Sirkka-Liisa. Future trends in process automation. **Annual Reviews in Control**, Elsevier, v. 31, n. 2, p. 211–220, 2007.

JENKINS, Bruce. 3D Engineering: How 3D Direct Modeling Empowers Conceptual Engineering and Enables Simulation-Driven Product Development. **White Paper, Ora Research LLC**, 2009.

JIANG, Zhou *et al.* Establishment of CFD-ANN-NSGA-II model for stirred reactor design. **Chemical Engineering Science**, Elsevier, p. 121614, 2025.

KABDYLKAKOV, Yerzhan; SURAYEV, Artur; IRKIMBEKOV, Ruslan. New approaches to CFD analysis of experimental devices in the Ansys fluent. *In*: AIP PUBLISHING, 1. AIP Conference Proceedings. [*S.l.*: *s.n.*], 2024. v. 3020.

KANOUN, Mohammed Benali; AHMED, Faheem; AWADA, Chawki; JONIN, Christian; BREVET, Pierre-Francois. Band gap engineering of Au doping and Au–N codoping into anatase TiO2 for enhancing the visible light photocatalytic performance. **International Journal of Hydrogen Energy**, Elsevier, v. 51, p. 907–913, 2024.

KASHID, Madhvanand N; AGAR, David W; TUREK, Stefan. CFD modelling of mass transfer with and without chemical reaction in the liquid–liquid slug flow microreactor. **Chemical Engineering Science**, Elsevier, v. 62, n. 18-20, p. 5102–5109, 2007.

KHALID, Rehan Zubair; IQBAL, Mehmood; HASSAN, Aitazaz; HARIS, Syed Muhammad; ULLAH, Atta. Improved Heat Transfer Capabilities of Nanofluids—An Assessment Through CFD Analysis. **Chemical Engineering & Technology**, Wiley Online Library, v. 47, n. 11, e202300523, 2024.

KIM, Jae-Hong; LONG, Donghui; FORTNER, John; WANG, Hailiang. Effective electrochemical trichloroethylene removal from water enabled by selective molecular catalysis. **Carbon**, v. 1, p. 9200015, 2024.

KITTHU, Haroon Ahamed. **100 Best Programming Languages in 2025 [Ultimate List]**. 2024. Disponível em: `https://www.simplilearn.com/best-programming-languages-start-learning-today-article`. Acesso em: 19 dez. 2024.

KUMAR, Amit; RANA, Sahil; DHIMAN, Pooja; SHARMA, Gaurav; STADLER, Florian J. Current progress in heterojunctions based on Nb2O5 for photocatalytic water treatment and energy applications. **Journal of Molecular Liquids**, Elsevier, p. 124360, 2024.

LAMBERT, Kenneth A.; OSBORNE, Martin. **Fundamentals of Python**. [*S.l.*]: Cengage, 2023.

LARANJEIRA, Paulo E; MARTINS, António A; LOPES, José Carlos Brito; DIAS, Madalena M. NETmix®, a new type of static mixer: Modeling, simulation, macromixing, and micromixing characterization. **AIChE journal**, Wiley Online Library, v. 55, n. 9, p. 2226–2243, 2009.

LASH, Lawrence H. Trichloroethylene: An Update on an Environmental Contaminant with Multiple Health Effects. **Annual Review of Pharmacology and Toxicology**, Annual Reviews, v. 65, 2024.

LI, Changpin; ZENG, Fanhai. Finite difference methods for fractional differential equations. **International Journal of Bifurcation and Chaos**, World Scientific, v. 22, n. 04, p. 1230014, 2012.

LI, Li; LU, Shun; CAO, Wenjun; ZHU, Qingqing; LI, Rui; WEI, Yijun; YANG, Shiliu; WANG, Chunchang. Band Gap Engineering and Lattice Distortion for Synergetic Tuning Optical Properties of NaNbO3 toward Enhanced Piezo-photocatalytic Activity. **Inorganic Chemistry**, ACS Publications, 2024.

LI, Lin; CHEN, Rong; LIAO, Qiang; ZHU, Xun; WANG, Guanyi; WANG, Dongye. High surface area optofluidic microreactor for redox mediated photocatalytic water splitting. **International journal of hydrogen energy**, Elsevier, v. 39, n. 33, p. 19270–19276, 2014.

LI, Teng; TSUBAKI, Noritatsu; JIN, Zhiliang. S-scheme heterojunction in photocatalytic hydrogen production. **Journal of Materials Science & Technology**, Elsevier, v. 169, p. 82–104, 2024.

LI, Wentao; LI, Mengkai; WANG, Hui; QIANG, Zhimin. Impact of Reactor Configuration on the Performance of UV/Persulfate Process for Atrazine Removal in Water: A CFD Modeling. **ACS ES&T Engineering**, ACS Publications, v. 4, n. 4, p. 861–869, 2024.

LI, Yonghui; AN, Jinxuan; WANG, Sheng; GENG, Zhongfeng; DONG, He. Computational fluid dynamics (CFD) simulation of CO2 methanation in a shell-and-tube reactor with boiling water cooling. **Advanced Powder Technology**, 2024.

LIANG, Honglian; JIAO, Jianli; DOU, Danyang; LI, Siyu. Cheap and efficient strategy for photocatalytic degradation of ionic liquids by La/Ce-codoped TiO2@ PAM composites. **Water Science & Technology**, IWA Publishing, v. 89, n. 4, p. 976–988, 2024.

LIN, Yixiong; ZHANG WEI MACHIDA, Hiroshi; NORINAGA, Koyo. CFD simulation of the Sabatier process in a shell and-tube reactor under local thermal non equilibrium conditions: Parameter sensitivity and reaction mechanism analysis. **ScienceDirect**, 2022.

LIN, Zhifeng; JIANG, Xueding; XU, Weicheng; LI, Fuhua; CHEN, Xin; WANG, Hailong; LIU, Si; LU, Xihong. The effects of water, substrate, and intermediate adsorption on the photocatalytic decomposition of air pollutants over nano-TiO 2 photocatalysts. **Physical Chemistry Chemical Physics**, Royal Society of Chemistry, 2024.

LIU, Houlin; LIU, Ming-ming; BAI, Yu; DONG, Liang. Effects of mesh style and grid convergence on numerical simulation accuracy of centrifugal pump. **Journal of Central South University**, Springer, v. 22, n. 1, p. 368–376, 2015.

LIU, Zijun. Fully automated CFD simulation system research based on design scheme tree. **Scientific Reports**, Nature Publishing Group UK London, v. 15, n. 1, p. 3975, 2025.

LIXIANG, Wang; QIANG, Ren; XIAOLI, Wang. Improved visible light activation of peroxymonosulfate by novel Bi modified TiO2/O-loaded g-C3N4 Z-scheme heterojunction for efficient degradation of trichloroethylene. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, Elsevier, v. 13, n. 1, p. 115039, 2025.

LODH, Bibhab Kumar. The transformative role of Computational Fluid Dynamics (CFD) in chemical engineering. **Open Journal of Chemistry**, v. 10, n. 1, p. 001–003, 2024.

LOPES, José Carlos Brito; DIAS, Madalena Maria Gomes De Queiroz; COSTA, Marcelo Filipe DOS SANTOS; TEIXEIRA, Carlos André De Moura; DOS SANTOS, Ricardo Jorge Nogueira. **Continuous Production of Clathrate Hydrates From Aqueous and Hydrate-Forming Streams, Methods and Uses Thereof**. 2023.

LOPES, José Carlos Brito; DIAS, Madalena Maria Gomes De Queiroz; DA SILVA, Viviana Manueal Tenedorio Matos; MONTEIRO, Fernando Jorge Mendes; GOMES, Paulo Jorge Da Cunha; MATEUS, Alis Yovana Pataquiva *et al.* **Production method for calcium phosphate nano-particles with high purity and their use**. 2009.

LUDERMIR, Teresa Bernarda. Inteligência Artificial e Aprendizado de Máquina: estado atual e tendências. **Estudos Avançados**, SciELO Brasil, v. 35, p. 85–94, 2021.

MAI, Xurui; TANG, Jing; TANG, Juexuan; ZHU, Xinyue; YANG, Zhenhao; LIU, Xi; ZHUANG, Xiaojie; FENG, Guang; TANG, Lin. Research progress on the environmental risk assessment and remediation technologies of heavy metal pollution in agricultural soil. **Journal of Environmental Sciences**, Elsevier, 2024.

MARSCHALL, Holger; HINTERBERGER, Korbinian; SCHÜLER, Christian; HABLA, Florian; HINRICHSEN, Olaf. Numerical simulation of species transfer across fluid interfaces in free-surface flows using OpenFOAM. **Chemical engineering science**, Elsevier, v. 78, p. 111–127, 2012.

MATIAZZO, Tatiana; PADOIN, Natan; SOARES, Cíntia. Radiance field modeling and CFD simulation of a model VOC degradation in distinct milli-photocatalytic reactors. *In*: ANAIS do IV Congresso Brasileiro de Fluidodinâmica Computacional - Vol. 4. Vitória: Galoá, 2024.

MATIAZZO, Tatiana; RAMASWAMY, Kishor; VILAR, Vítor JP; PADOIN, Natan; SOARES, Cintia. Radiation field modeling of the NETmix milli-photocatalytic reactor: effect of LEDs position over the reactor window. **Chemical Engineering Journal**, Elsevier, v. 429, p. 131670, 2022.

MATIAZZO, Tatiana; VILAR, Vítor JP; PADOIN, Natan; SOARES, Cíntia. CFD and radiation field modeling of the NETmix milli-photocatalytic reactor: Evaluation of illumination systems composed of LEDs with distinct view angles. **Chemical Engineering Science**, Elsevier, v. 285, p. 119576, 2024.

MATIAZZO, Tatiana; VILAR, Vítor JP; RIELLA, Humberto Gracher; PADOIN, Natan; SOARES, Cintia. CFD and radiation field modeling of the NETmix milli-photocatalytic reactor for n-decane oxidation at gas phase: Effect of LEDs number and arrangement. **Chemical Engineering Journal**, Elsevier, v. 444, p. 136577, 2022.

MATOS, Joana; SANTOS, Ricardo J; DIAS, Madalena M; LOPES, José Carlos Brito. Mixing in the NETmix reactor. **Frontiers in Chemical Engineering**, Frontiers Media SA, v. 3, p. 771476, 2021.

MIMERY, David Richard. **Multidisciplinary design optimization of part geometry in CAD**. 2020. Tese (Doutorado) – Massachusetts Institute of Technology.

MIRZAEIFARD, Zahra; SHARIATINIA, Zahra. Economical, one-pot, and green synthesis of plant-based carbon quantum dots for efficient visible-light photocatalytic dye degradation and water purification. **Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers**, Elsevier, v. 163, p. 105655, 2024.

MITZNER, Kraig. **Complete PCB design using OrCad capture and layout**. [*S.l.*]: Elsevier, 2011.

MOHAMADPOUR, Farzaneh; AMANI, Ali Mohammad. Photocatalytic systems: reactions, mechanism, and applications. **RSC advances**, Royal Society of Chemistry, v. 14, n. 29, p. 20609–20645, 2024.

MORANTE, Nicola *et al.* Influence of visible light LEDs modulation techniques on photocatalytic degradation of ceftriaxone in a flat plate reactor. **Chemical Engineering Journal**, Elsevier, v. 482, p. 149175, 2024.

MOREIRA, Ana CG; MANRIQUE, Yaidelin A; MARTINS, Isabel M; FERNANDES, Isabel P; RODRIGUES, Alírio E; LOPES, José Carlos Brito; DIAS, Madalena M. Continuous production of melamine-formaldehyde microcapsules using a mesostructured reactor. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, ACS Publications, v. 59, n. 41, p. 18510–18519, 2020.

MOREIRA, Ana CG; MANRIQUE, Yaidelin A; MARTINS, Isabel M; SIMÕES, MG; CARREIRA, AS; SIMÕES, Pedro N; RODRIGUES, Alírio E; LOPES, José Carlos Brito; DIAS, Madalena M. Continuous production of cellulose acetate microspheres for textile impregnation using a mesostructured reactor. **Cellulose**, Springer, v. 29, n. 6, p. 3595–3612, 2022.

MUÑOZ-BATISTA, Mario J. Photocatalytic and Thermo-Photocatalytic Processes: Advantages of Modelling Light Irradiation and Temperature Profiles. **Catalysts**, MDPI, v. 15, n. 1, p. 7, 2024.

NIJEMEISLAND, Michiel; DIXON, Anthony G; STITT, E Hugh. Catalyst design by CFD for heat transfer and reaction in steam reforming. **Chemical Engineering Science**, Elsevier, v. 59, n. 22-23, p. 5185–5191, 2004.

NURAINI, Annisaa; SETYOWATI, Dias Afifah; VALENTINUS, Enrico Kurniyanto; FITRIAH; NI'MAH, Kamilah Pathun; ALIFFIANTIKA, Nindya; PUSVITASARI, Anggun Bunga; SARI, Dessy Agustina. SIMULATION PROGRAM SKILLS FOR CHEMICAL ENGINEERING GRADUATES. **Jurnal Pendidikan Glasser**, 2024.

ORGANIZATION, World Health. **Trichloroethene in drinking-water Background document for development of WHO Guidelines for drinking-water quality**. [*S.l.*], 2020.

PANDEY, Pooja; MOHANAN, Sreelal; SURENJAN, Anupama *et al.* Photocatalytic Reactor Modelling Incorporating Computational Fluid Dynamics (CFD) for Water and Air purification: A Concise Review. **Process Integration and Optimization for Sustainability**, Springer, p. 1–15, 2025.

PANDEY, Puneeta; YADAV, Radheshyam. A review on volatile organic compounds (VOCs) as environmental pollutants: Fate and distribution. **International Journal of Plant and Environment**, v. 4, n. 02, p. 14–26, 2018.

PARDO DEL VIEJO, L; FERNÁNDEZ-RODRÍGUEZ, S. CFD with LIDAR applied to buildings and vegetation for environmental construction. **Automation in Construction**, Elsevier, v. 167, p. 105710, 2024.

PETROV, Mihai; NIKOLAEVA, Zdravka; DIMITROV, Aleksandar. The impact of anthropogenic activity on the global environment. **Science. Business. Society.**, Scientific Technical Union of Mechanical Engineering"Industry 4.0", v. 8, n. 2, p. 59–64, 2023.

PONTE JUNIOR, Gerardo Portela. **Gerenciamento de riscos, cultura de segurança e fatores humanos para simulação computacional de escape e abandono em instalações offshore**. 2012. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Rio de Janeiro.

PYTHON. **Python is a programming language that lets you work quickly and integrate systems more effectively.** 2024. Disponível em: `https://www.python.org/`. Acesso em: 2 jan. 2025.

QIN, Peng; RICCI, Alessio; BLOCKEN, Bert. CFD simulation of aerodynamic forces on the DrivAer car model: Impact of computational parameters. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, Elsevier, v. 248, p. 105711, 2024.

RADECKA, M; REKAS, M; TRENCZEK-ZAJAC, A; ZAKRZEWSKA, K. Importance of the band gap energy and flat band potential for application of modified TiO2 photoanodes in water photolysis. **Journal of power sources**, Elsevier, v. 181, n. 1, p. 46–55, 2008.

RADOSAVLJEVIC, Vladan. Human Exposure to Trichlorethylene. *In*: ASSESSING Human Exposure to Key Chemical Carcinogens: Diagnostic Approaches and Interpretation. [*S.l.*]: Springer, 2025. P. 147–156.

RANADE, Vivek; UTIKAR, Ranjeet P. Multiphase Flows and Process Industries. **Multiphase Flows for Process Industries: Fundamentals and Applications**, Wiley Online Library, v. 1, p. 1–21, 2022.

RASHID, Ruhma *et al.* Advancements in TiO2-based photocatalysis for environmental remediation: strategies for enhancing visible-light-driven activity. **Chemosphere**, Elsevier, v. 349, p. 140703, 2024.

REHM, Thomas H. Reactor technology concepts for flow photochemistry. **ChemPhotoChem**, Wiley Online Library, v. 4, n. 4, p. 235–254, 2020.

RESOLVED ANALYTICS, Inc. **Exploring Workflow in Commercial CFD Software Programs**. 2024. Disponível em: `https://www.resolvedanalytics.com/cfd-in-practice/what-is-the-cfd-workflow`.

RITCHIE, Hannah; SAMBORSKA, Veronika; ROSER, Max. Plastic pollution. **Our world in data**, 2023.

ROACHE, Patrick J. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. **The american society of mechanical engineers**, 1994.

ROBERTS, Sanford M. **Dynamic Programming in Chemical Engineering and Process Control by Sanford M Roberts**. [*S.l.*]: Elsevier, 1964.

SABOL, Goran; RADETIĆ, Benjamin; GRČIĆ, Ivana; KALAMBURA, Sanja; KIŠ, Darko. Computational Fluid Dynamics (CFD) Modelling of Annular Reactor for Photocatalytic Degradation of Air Pollutants Using COMSOL Multiphysics Software. **Tehnički vjesnik**, Sveučilište u Slavonskom Brodu, Stojarski fakultet, v. 32, n. 1, p. 353–360, 2025.

SAJJAD, Ramisha; HUSSAIN, Muzamil; KHAN, Sami Ullah; REHMAN, Abdul; KHAN, Muhammad Jahangir; TLILI, Iskander; ULLAH, Sami. CFD analysis for different nanofluids in fin waste heat recovery prolonged heat exchanger for waste heat

recovery. **South African Journal of Chemical Engineering**, South African Institution of Chemical Engineers (SAIChE), v. 47, n. 1, p. 9–14, 2024.

SARI, Yusnita; GARESO, Paulus Lobo; ARMYNAH, Bidayatul; TAHIR, Dahlang. A review of TiO2 photocatalyst for organic degradation and sustainable hydrogen energy production. **International Journal of Hydrogen Energy**, Elsevier, v. 55, p. 984–996, 2024.

SAXENA, Pallavi; SONWANI, Saurabh; SAXENA, Pallavi; SONWANI, Saurabh. Criteria air pollutants: chemistry, sources and sinks. **Criteria air pollutants and their impact on environmental health**, Springer, p. 7–48, 2019.

SCIENCE, Ada Computer. **High-level languages**. 2024. Disponível em: `https://adacomputerscience.org/concepts/proglang_high_level`. Acesso em: 19 dez. 2024.

SEESAARD, Thara; KAMJORNKITTIKOON, Kamonrat; WONGCHOOSUK, Chatchawal. A comprehensive review on advancements in sensors for air pollution applications. **Science of The Total Environment**, Elsevier, p. 175696, 2024.

SEO, Sueji; SHIN, Saemi; BYEON, Sanghoon. Occupational Inhalation Health Risk Assessment of TCE Exposure in the Korean Manufacturing Industry. **Applied Sciences**, MDPI, v. 14, n. 13, p. 5510, 2024.

SEYYEDBAGHERI, Hadi; ALIZADEH, Reza; MIRZAYI, Behruz; VALIBEKNEJAD, Mohammad. Modeling and CFD simulation of photocatalytic removal of tetracycline by ZnO/PbBiO2Cl nanocomposite catalyst. **Journal of Molecular Liquids**, Elsevier, v. 399, p. 124398, 2024.

SHABANI, Mohsen Ostad; MAZAHERY, Ali; ALIZADEH, Mehdi; TOFIGH, Ali Asghar; RAHIMIPOUR, Mohammad Reza; RAZAVI, Mansour; KOLAHI, Alireza. Computational fluid dynamics (CFD) simulation of effect of baffles on separation in mixer settler. **International Journal of Mining Science and Technology**, 2012.

SHAMS, Taleghani Arash; TORABI, Farschad. Recent Developments in Aerodynamics. **Frontiers in Mechanical Engineering**, Frontiers, v. 10, p. 1537383, 2025.

SHER, Anis Ahmad; AHMAD, Naseem; SATTAR, Mariyam; PHELAN, Patrick; LIN, Aqiang. **Computational analysis of multi-fuel micro-gas turbine annular combustion chamber**. Fev. 2024. F. 13. Tese (Doutorado) – Center for Advanced Studies in Energy (USPCAS-E).

SHIRAZI, Elham; HAWK, Gregory S; HOLTON, Chase W; STROMBERG, Arnold J; PENNELL, Kelly G. Comparison of modeled and measured indoor air trichloroethene (TCE) concentrations at a vapor intrusion site: influence of wind, temperature, and building characteristics. **Environmental Science: Processes & Impacts**, Royal Society of Chemistry, v. 22, n. 3, p. 802–811, 2020.

SHIROUDI, Abolfazl; CZUB, Jacek; ALTARAWNEH, Mohammednoor. Chemical Investigation on the Mechanism and Kinetics of the Atmospheric Degradation Reaction of Trichlorofluoroethene by OH and Its Subsequent Fate in the Presence of O2/NOx. **ChemPhysChem**, Wiley Online Library, v. 25, n. 3, e202300665, 2024.

SHUKLA, Awadhesh K; VISHWAKARMA, Pranjali; UPADHYAY, SN; TRIPATHI, Anil K; PRASANA, HC; DUBEY, Suresh K. Biodegradation of trichloroethylene (TCE) by methanotrophic community. **Bioresource technology**, Elsevier, v. 100, n. 9, p. 2469–2474, 2009.

SIEGMUND, David. **Extension of a CFD-CSM Toolchain for Simulating the Wing of a Regional Aircraft with Distributed Propulsion Employing an Actuator Disk Model**. 2024. Tese (Doutorado) – Technische Universität Braunschweig.

SINGH, M Vijay Pradhap; SHANKAR, K Ravi. Next-generation hybrid technologies for the treatment of pharmaceutical industry effluents. **Journal of Environmental Management**, Elsevier, v. 353, p. 120197, 2024.

SLUNGE, Daniel; ANDERSSON, Ida; STERNER, Thomas. REACH authorisation and the substitution of hazardous chemicals: the case of trichloroethylene. **Journal of Cleaner Production**, Elsevier, v. 364, p. 132637, 2022.

STACK OVERFLOW, Developer Survey. **Most popular technologies**. 2024. Disponível em: `https://survey.stackoverflow.co/2024/technology#most-popular-technologies-language`. Acesso em: 2 jan. 2025.

SU, Yuanhai; STRAATHOF, Natan JW; HESSEL, Volker; NOËL, Timothy. Photochemical transformations accelerated in continuous-flow reactors: basic concepts and applications. **Chemistry–A European Journal**, Wiley Online Library, v. 20, n. 34, p. 10562–10589, 2014.

SZPICER, Arkadiusz; BIŃKOWSKA, Weronika; WOJTASIK-KALINOWSKA, Iwona; SALIH, Salih Mustafa; PÓŁTORAK, Andrzej. Application of computational fluid dynamics simulations in food industry. **European Food Research and Technology**, Springer, v. 249, n. 6, p. 1411–1430, 2023.

TEJASHWINI, DM; HARINI, HV; NAGASWARUPA, HP; NAIK, Ramachandra; HARLAPUR, Sujatha; BASAVARAJU, N. Nanoferrites in photocatalytic wastewater treatment: Advancements, characterization, and environmental implications. **Results in Chemistry**, Elsevier, v. 7, p. 101247, 2024.

TERAN, Francisco. Aplicação de fotocatálise heterogênea e homogênea para a remoção de cor em efluentes provenientes de indústria de procesamento de couro. **Revista Monografias Ambientais**, v. 13, n. 3, p. 3316–3325, 2014.

TOBO, Yohannis; LOTFI, Ashraf; VIRLA, Luis D.; MAHINPEY, Nader. Fast pyrolysis multiphase CFD-kinetics model in a drop tube reactor. **Fuel**, 2023.

TRAN, Gia Hong; TRAN, Thien Khanh; LEU, Hoang-Jyh; RICHARDS, Delmaria; LO, Shih-Shou. An integrated system combining electrochemical oxidation and filtration processes to remove chlorine from pharmaceutical industry wastewater. **Arabian Journal of Chemistry**, Elsevier, v. 17, n. 3, p. 105611, 2024.

TSEBERLIDIS, Giorgio; TRIFILETTI, Vanira; HUSIEN, Amin Hasan; L'ALTRELLA, Andrea; BINETTI, Simona; GOSETTI, Fabio. Cu2ZnSnS4 Nanoparticles as an Efficient Photocatalyst for the Degradation of Diclofenac in Water. **Applied Sciences**, MDPI, v. 14, n. 21, p. 9923, 2024.

TSITOS, Alexandros; YEGANEH, Roozbeh Atash Biz. **Modeling and Simulation of Mixing Phenomena in a CSTBR Reactor Using CFD Approach**. [*S.l.*], 2023.

VERBRUGGEN, Sammy W. TiO2 photocatalysis for the degradation of pollutants in gas phase: From morphological design to plasmonic enhancement. **Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews**, Elsevier, v. 24, p. 64–82, 2015.

VIYYURI, Sreenivas. Computational Fluid Dynamics (CFD) Modeling of Flow Boiling Heat Transfer in Microchannels: Modeling Approaches Using ANSYS Fluent and Validation Studies. *In*: AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS. ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition. [*S.l.*: *s.n.*], 2024. v. 88674, v009t11a042.

WANG, Anqi; HOU, Jun; TAO, ChunMei; MIAO, Lingzhan; WU, Jun; XING, Baoshan. Performance enhancement of biogenetic sulfidated zero-valent iron for trichloroethylene degradation: role of extracellular polymeric substances. **Environmental Science & Technology**, ACS Publications, v. 57, n. 8, p. 3323–3333, 2023.

WANG, Zhaobo; WANG, Hongxin; SHI, Peng; QIU, Jiangyuan; GUO, Rui; YOU, Junhua; ZHANG, Hangzhou. Hybrid organic frameworks: Synthesis strategies and applications in photocatalytic wastewater treatment-A review. **Chemosphere**, Elsevier, p. 141143, 2024.

WANG, Zhe; SUN, Tao; LIU, Na. Dispersed phase formation and separation mechanism using high resolution CFD and artificial intelligence technique for simulation of reactors. **Chemical Engineering Science**, Elsevier, p. 121268, 2025.

WANG; ZIMENG, Liu; JING, Dai; YUANCAN, Dong; WEIYANG, Zhang; SHICHENG, Chen; JIANMIN. CFD modeling of a UV-LED photocatalytic odor abatement process in a continuous reactor. **Rev. Virtual Quim.**, Elsevier, p. 7, 2012.

WEIFENG, HOU; HONGYE, SU; YONGYOU, HU; JIAN, CHU. **Modeling, Simulation and Optimization of a Whole Industrial Catalytic Naphtha Reforming Process on Aspen Plus Platform**. Ago. 2006. F. 8. Tese (Doutorado) – National Laboratory of Industrial Control Technology.

WONG, Melvin; RIOS, Thiago; MENZEL, Stefan; ONG, Yew Soon. Prompt evolutionary design optimization with generative shape and vision-language models. *In*: IEEE. 2024 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC). [*S.l.*: *s.n.*], 2024. P. 1–8.

XIE, Shuai; SUUBERG, Eric. Adsorption of trichloroethylene on common indoor materials studied using a combined inverse gas chromatography and frequency response technique. **Journal of Chromatography A**, Elsevier, v. 1669, p. 462926, 2022.

YANG, Dehong *et al.* Flower-like superstructure of boron carbon nitride nanosheets with adjustable band gaps for photocatalytic hydrogen peroxide production. **Journal of Materials Science & Technology**, Elsevier, v. 183, p. 23–31, 2024.

YANG, Yucheng; XIANG, Yang; CHU, Guangwen; ZOU, Haikui; SUN, Baochang; AROWO, Moses; CHEN, Jian-Feng. CFD modeling of gas–liquid mass transfer process in a rotating packed bed. **Chemical Engineering Journal**, Elsevier, v. 294, p. 111–121, 2016.

YAO, Cong *et al.* Heavy metal pollution in agricultural soils from surrounding industries with low emissions: Assessing contamination levels and sources. **Science of The Total Environment**, Elsevier, v. 917, p. 170610, 2024.

YIN, Yaobao. **Electro hydraulic control theory and its applications under extreme environment**. [*S.l.*]: Butterworth-Heinemann, 2019.

YU, Guanghui; ZHANG, Shanhong; CHEN, Xiaomeng; LI, Daoliang; WANG, Yang. Investigation on aeration efficiency and energy efficiency optimization in recirculating aquaculture coupling CFD with Euler-Euler and species transport model. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, Elsevier, v. 12, n. 5, p. 113927, 2024.

ZAHIR, Abdul; KUMAR, Perumal; SAPTORO, Agus; SHAH, Milinkumar; TIONG, Angnes Ngieng Tze; HAMEED, Samreen. Parametric Study of Experimental and CFD Simulation Based Hydrodynamics and Mass Transfer of Rotating Packed Bed: A Review. **SpringerLink**, 2023.

ZAWAWI, Mohd Hafiz; SALEHA, A; SALWA, A; HASSAN, NH; ZAHARI, Nazirul Mubin; RAMLI, Mohd Zakwan; MUDA, Zakaria Che. A review: Fundamentals of computational fluid dynamics (CFD). *In*: AIP PUBLISHING, 1. AIP conference proceedings. [*S.l.*: *s.n.*], 2018. v. 2030.

ZEESHAN, A; ELLAHI, R; SAIT, Sadiq M; NAWAZ SHARIF, Shah. Heat Transfer Characteristics of Hybrid Nanoparticles in Newtonian Fluid inside a Channel with Airfoil: A CFD Simulation using COMSOL Multiphysics. **Journal of Computational Applied Mechanics**, University of Tehran Press, v. 56, n. 1, p. 170–195, 2025.

ZHANG, Guoqing; LIU, Jiayou; TAN, Zhongchao; YU, Hesheng. Multivariate modeling of intrinsic kinetics for gas-solid heterogeneous photocatalytic reaction: A general method for different pollutant-photocatalyst systems. **Chemical Engineering Journal**, Elsevier, v. 479, p. 147651, 2024.

ZHANG, XY; GE, YT; LANG, PY *et al.* Experimental investigation and CFD modelling analysis of finned-tube PCM heat exchanger for space heating. **Applied Thermal Engineering**, Elsevier, v. 244, p. 122731, 2024.

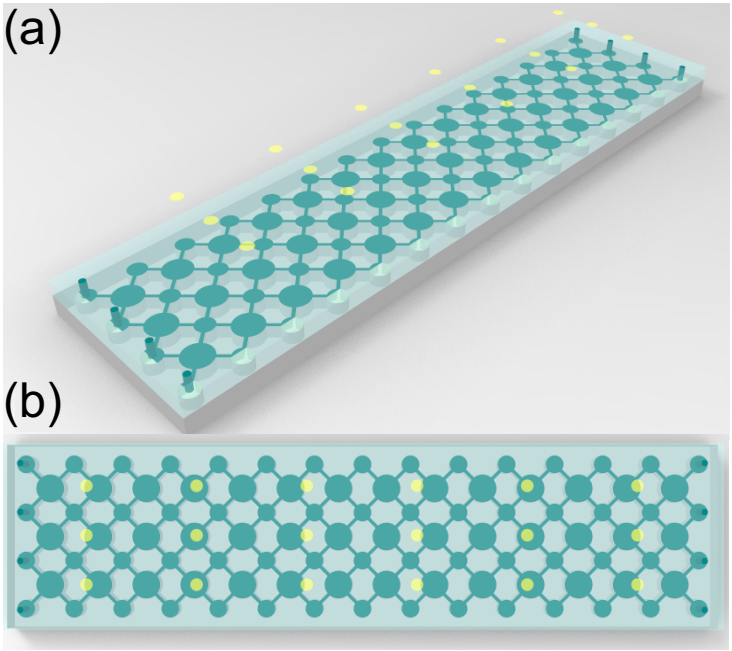
ZHAO, Shenghao; YANG, Yang; BI, Fukun; CHEN, Yifan; WU, Minghong; ZHANG, Xiaodong; WANG, Guan. Oxygen vacancies in the catalyst: Efficient degradation of gaseous pollutants. **Chemical Engineering Journal**, Elsevier, v. 454, p. 140376, 2023.

ZHOU, Xihe; ZHOU, Xiang; WANG, Chengming; ZHOU, Handong. Environmental and human health impacts of volatile organic compounds: A perspective review. **Chemosphere**, Elsevier, v. 313, p. 137489, 2023.

ZIMMERMANN, Sebastian; TAGHIPOUR, Fariborz. CFD modeling of the hydrodynamics and reaction kinetics of FCC fluidized-bed reactors. **Industrial & engineering chemistry research**, ACS Publications, v. 44, n. 26, p. 9818–9827, 2005.

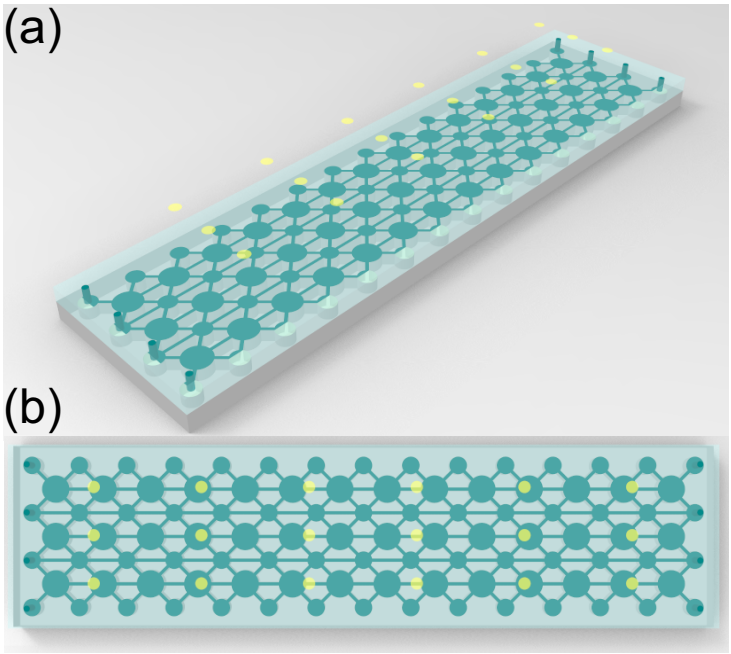
APÊNDICE A – RESULTADOS DA GERAÇÃO DOS SUBMODELOS DO REATOR NETMIX.

Figura 37 – Modelo 29A - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



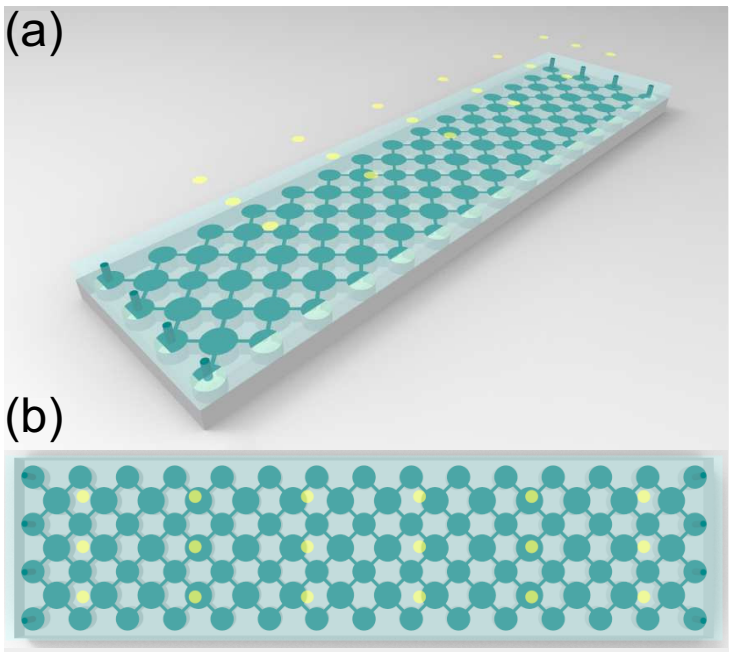
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 38 – Modelo 29A - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



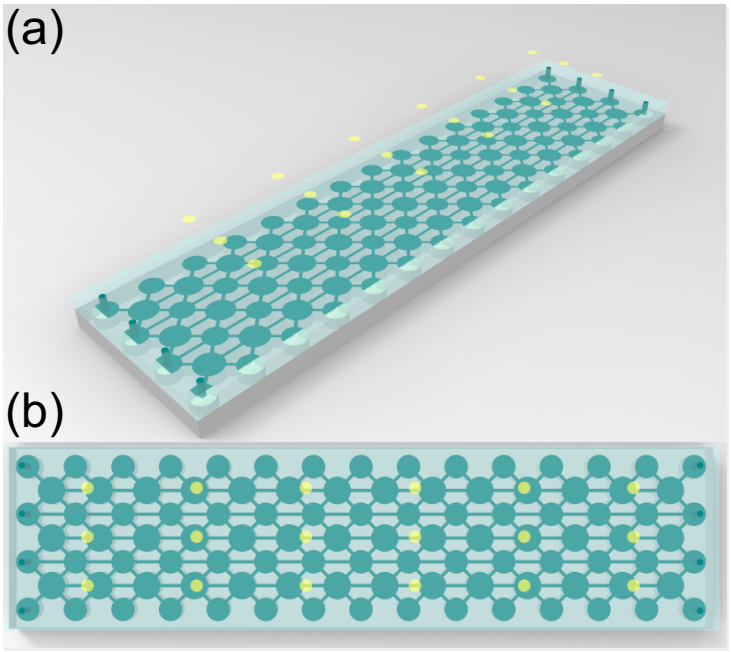
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 39 – Modelo 29B - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



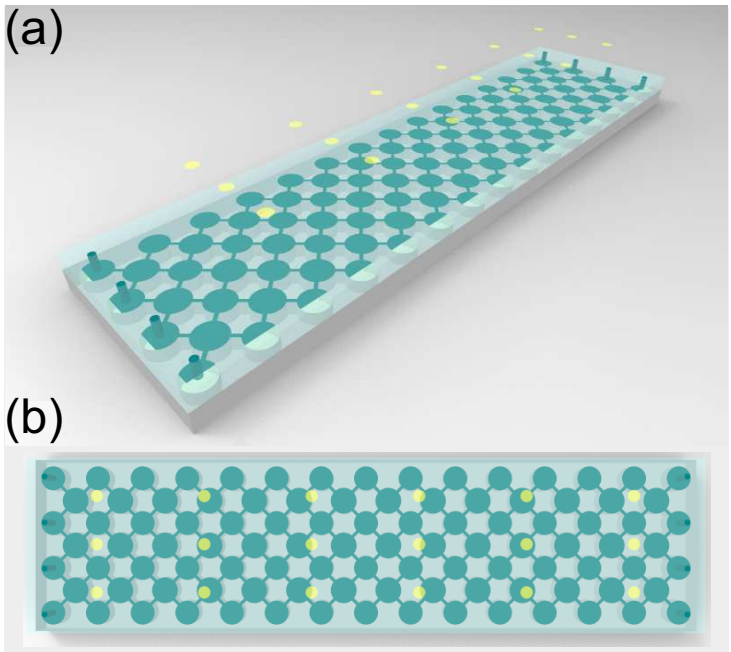
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 40 – Modelo 29B - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



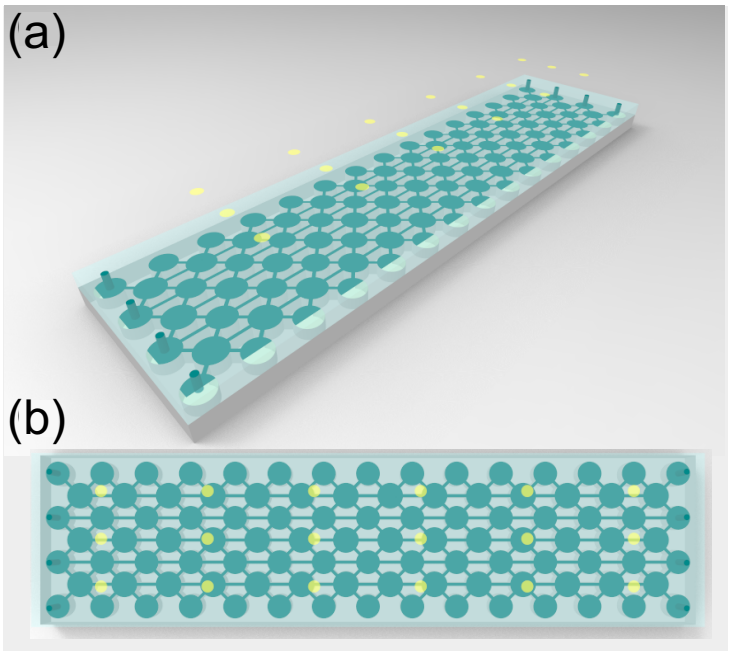
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 41 – Modelo 29C - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



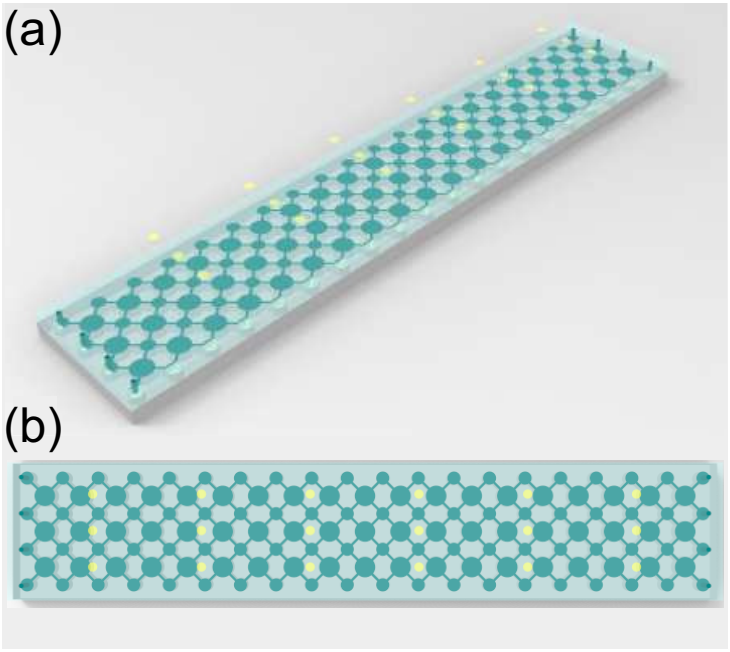
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 42 – Modelo 29C - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



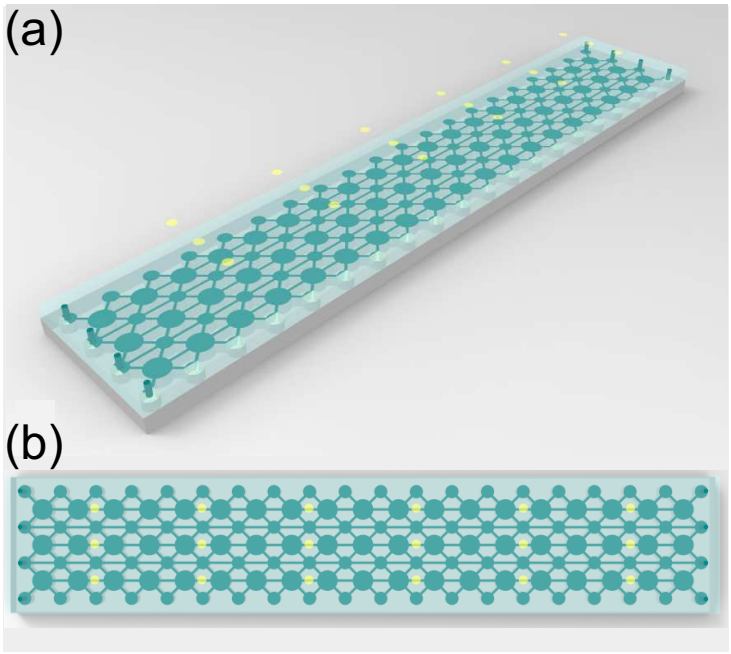
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 43 – Modelo 39A - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 44 – Modelo 39A - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 45 – Modelo 39B - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior

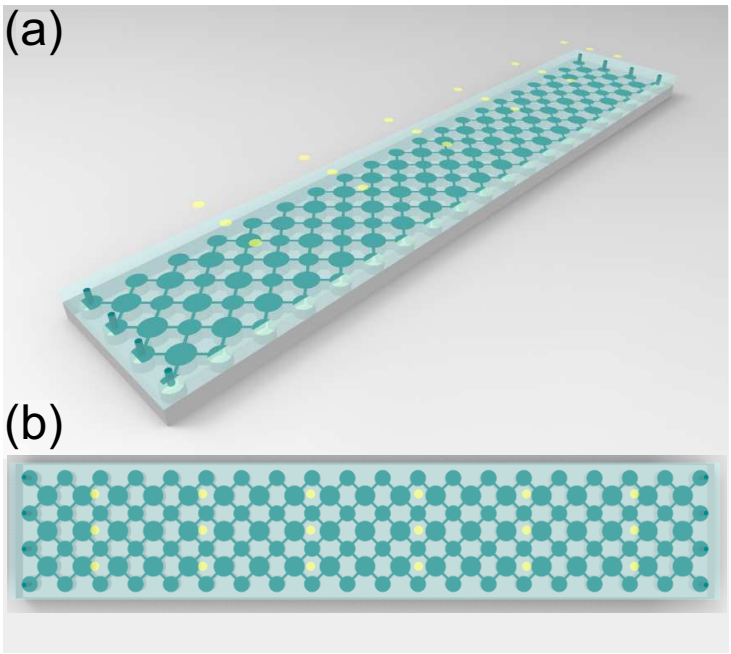
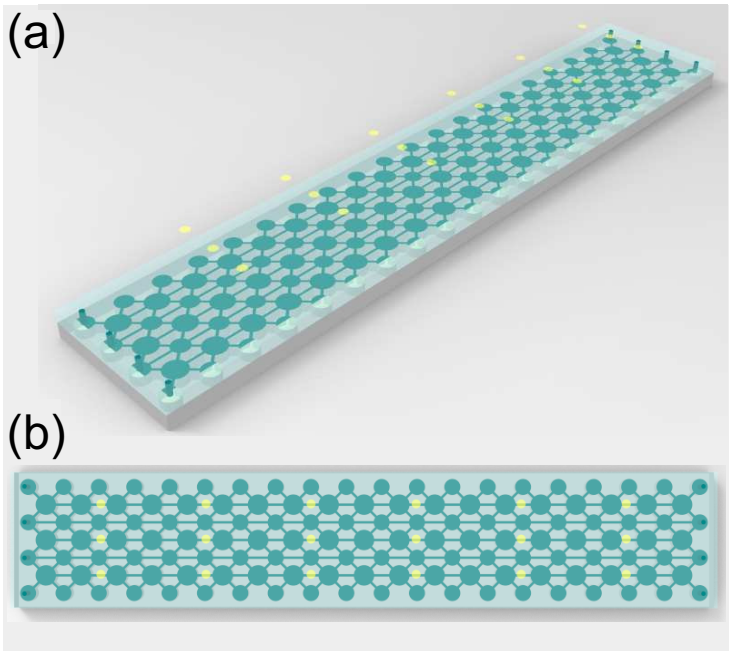
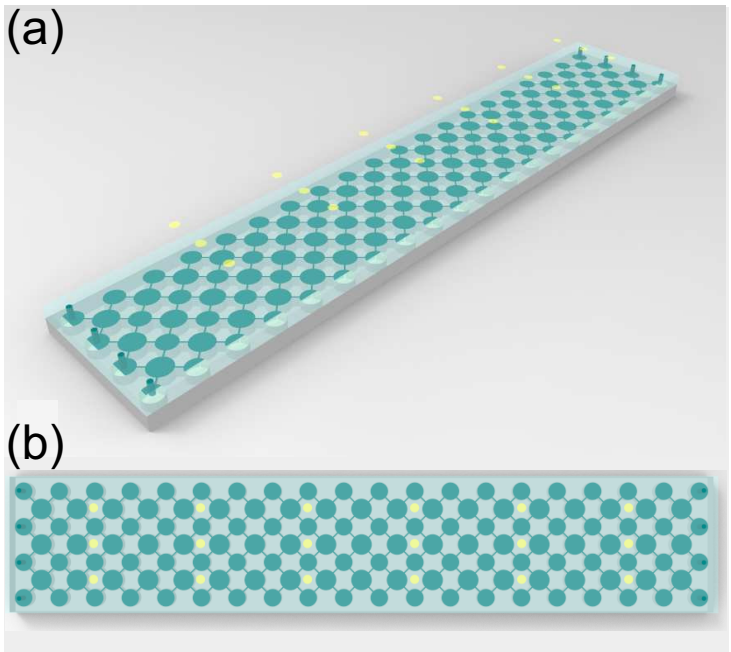


Figura 46 – Modelo 39B - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



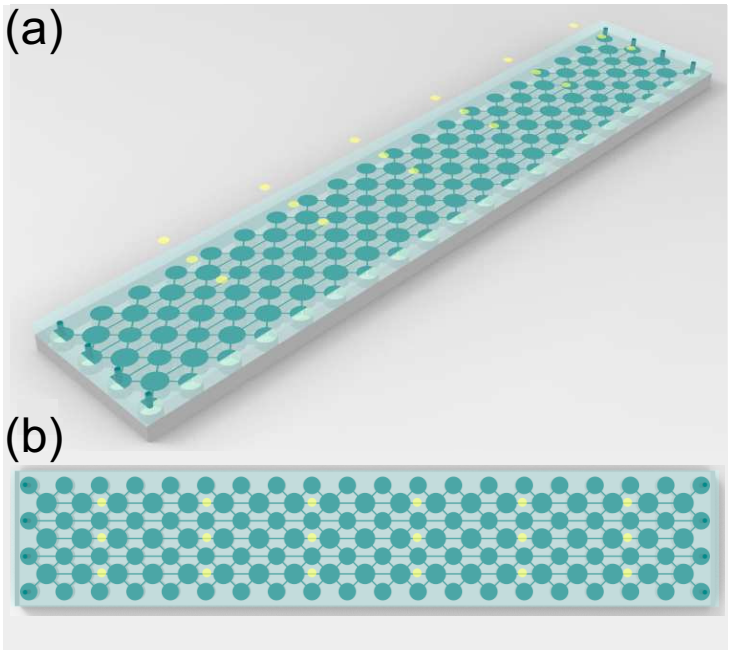
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 47 – Modelo 39C - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



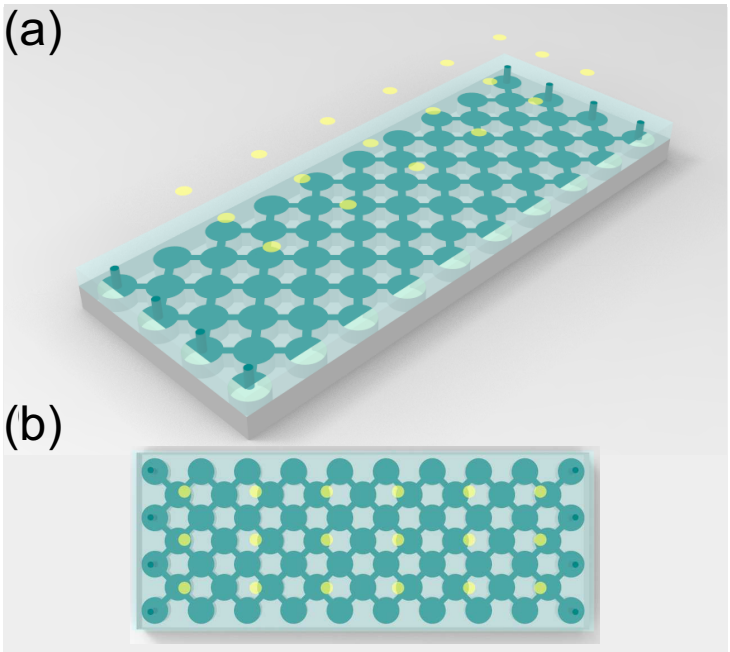
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 48 – Modelo 39C - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



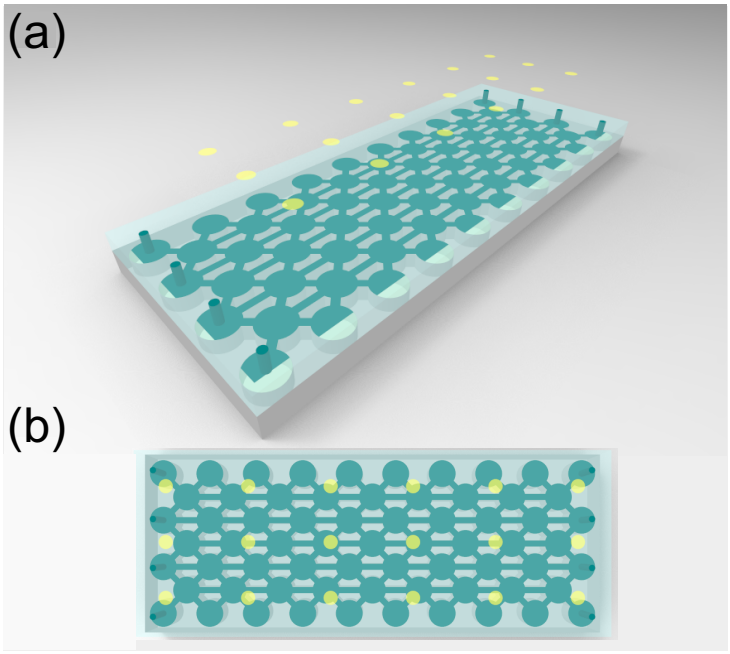
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 49 – Modelo 19A - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



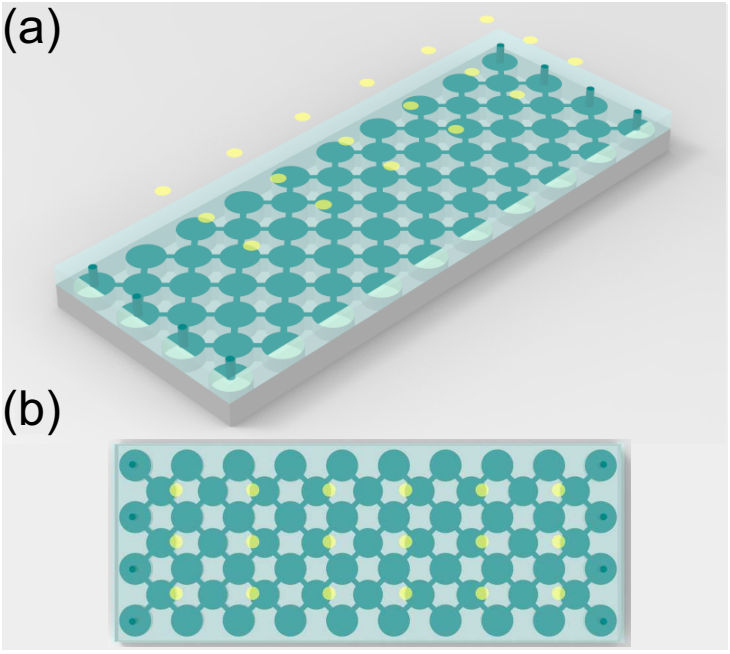
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 50 – Modelo 19A - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



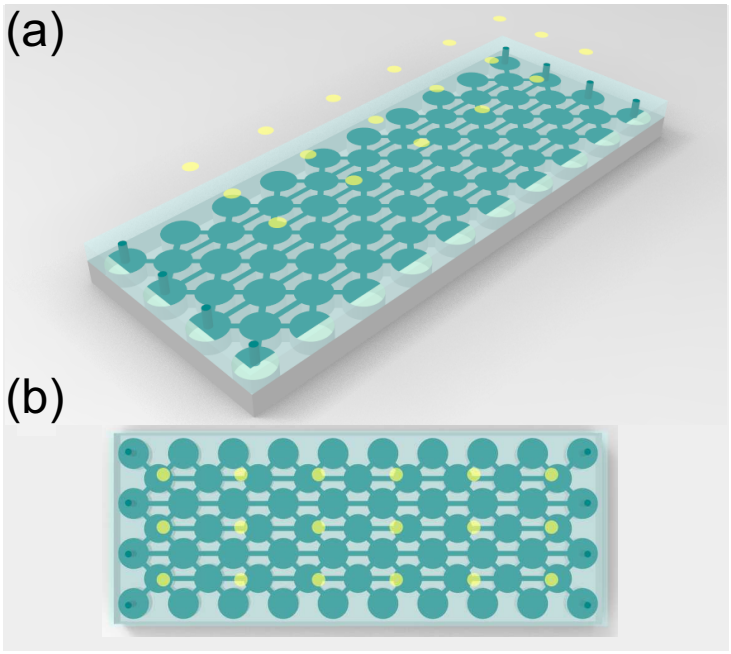
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 51 – Modelo 19B - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



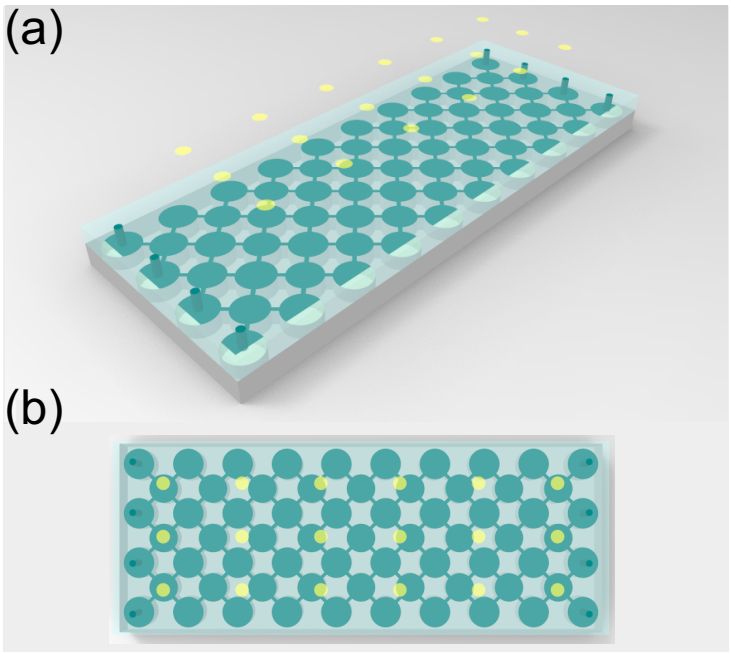
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 52 – Modelo 19B - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



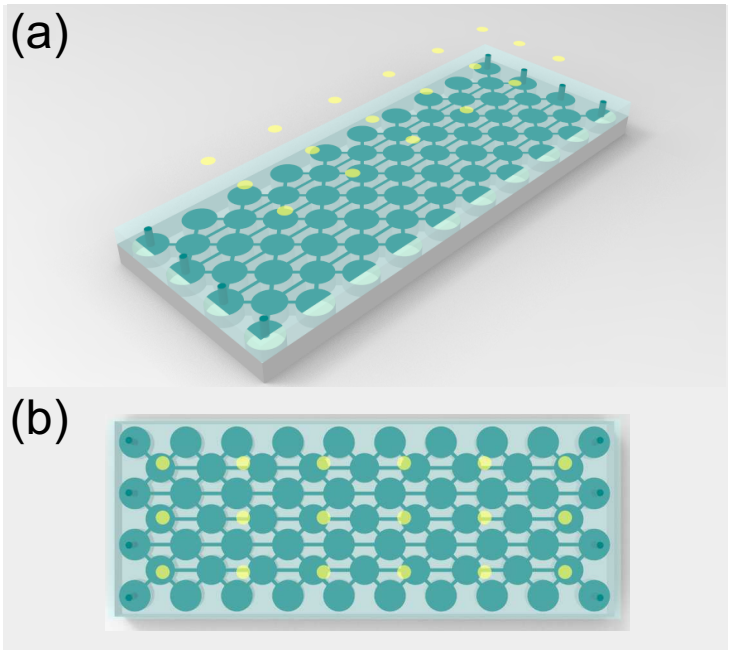
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 53 – Modelo 19C - SH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 54 – Modelo 19C - CH completo, desenvolvido através da geração automatizada de geometrias: (a) vista isométrica, (b) vista superior



Fonte: elaborado pela autora (2025)

APÊNDICE B – RESULTADOS DO ÍNDICE DE CONVERGÊNCIA DA MALHA (GCI – *GRID CONVERGENCE INDEX*)

Para avaliar a incerteza numérica devido à construção da malha, o Índice de Convergência da Malha (GCI) foi utilizado com a biblioteca *PyCGS*, desenvolvida especificamente para estudos de independência de malha. Os cálculos foram baseados na rotina descrita por Celik *et al.* (2008), e na metodologia proposta por Roache (1994), que utiliza a teoria de extrapolação de Richardson para estimar o erro de refinamento.

Neste trabalho, o GCI foi aplicado a dois modelos geométricos distintos, denominados 39A - SH e 39C - CH. Para cada modelo, três malhas foram geradas, caracterizadas por diferentes tamanhos de elementos. Os resultados para o tamanho de elemento e a quantidade de elementos gerados podem ser vistos na Tabela 13. O fator de refino da malha, r, foi mantido constante no valor de 1,4.

Tabela 13 – Tamanhos de elementos de malha utilizados e quantidade de elementos gerados para os submodelos 39A - SH e 39C - CH do reator NETmix no teste GCI

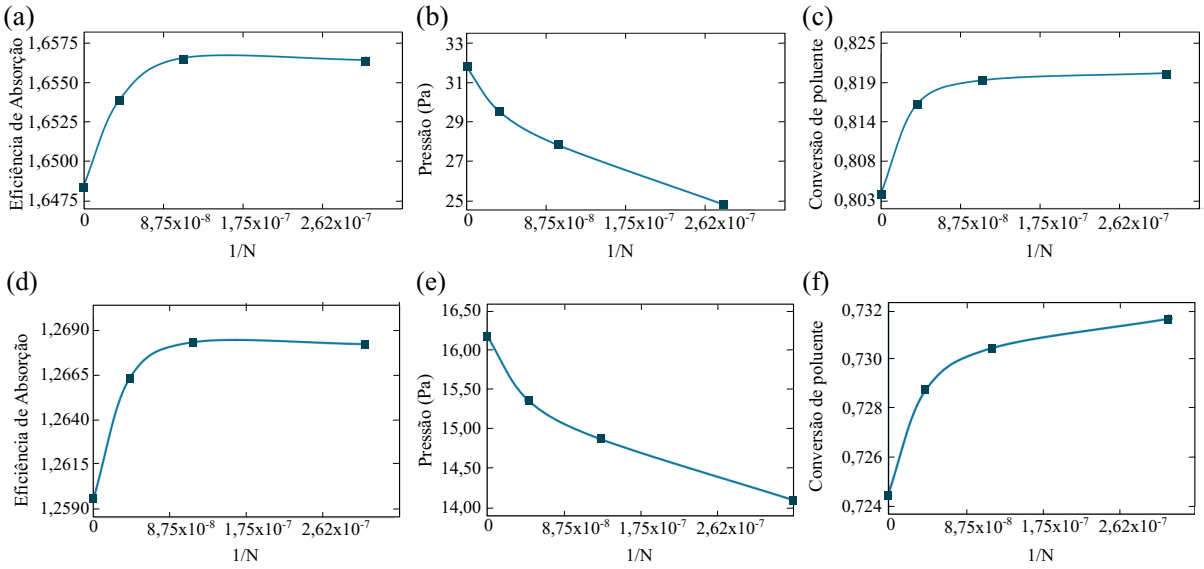
Modelo	**Tamanho de elemento (m)**	**Quantidade de elementos gerados**
39A - SH	$1{,}6 \times 10^{-4}$	3.166.888
39A - SH	$1{,}14 \times 10^{-4}$	8.561.374
39A - SH	$0{,}8142 \times 10^{-4}$	23.528.214
39C - CH	$1{,}6 \times 10^{-4}$	3.753.284
39C - CH	$1{,}14 \times 10^{-4}$	10.542.574
39C - CH	$0{,}8142 \times 10^{-4}$	28.937.151

As configurações das simulações utilizadas para a obtenção dos resultados numéricos, tanto para a análise de independência de malha quanto para as simulações responsáveis pela obtenção dos resultados de todos os modelos, são as mesmas e estão apresentadas na Tabela 5, na Seção 4.3.3. Essas configurações incluem as condições de contorno, propriedades físicas dos fluidos, parâmetros de operação e demais aspectos relevantes do modelo computacional.

Foram avaliadas variáveis relevantes do processo, como eficiência de absorbância de fótons, pressão de saída do reator e conversão de poluente na saída do reator. Os

resultados de cada variável foram plotados em função do inverso do número de elementos da malha (N), na Imagem 55, para os modelos 39A - SH e 39C - CH, permitindo observar o comportamento assintótico das soluções numéricas.

Figura 55 – Índice de convergência de malha para os modelos 39A - SH e 39C - CH: (a), (b) e (c) são os resultados para eficiência de absorção global, pressão e conversão de poluente do modelo 39A - SH, respectivamente; (d), (e) e (f) são os resultados para eficiência de absorção global, pressão e conversão de poluente do modelo 39C - CH, respectivamente.

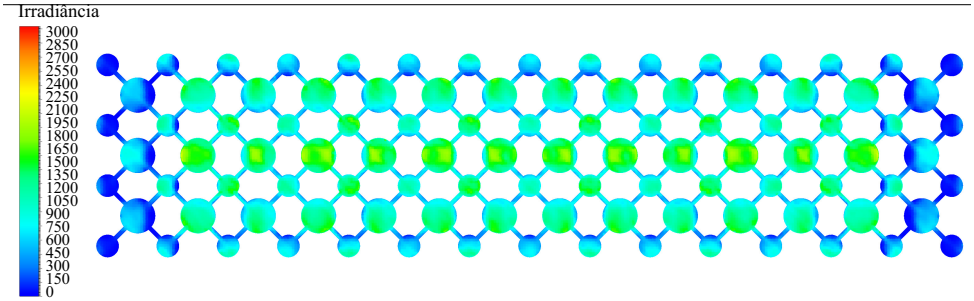


Fonte: Elaborado pela autora (2025)

Em todos os casos analisados, verificou-se um comportamento assintótico consistente, e os valores calculados de GCI permaneceram inferiores a 1,5%, indicando uma adequada independência de malha. Dessa forma, a malha de melhor desempenho, que apresentou um equilíbrio satisfatório entre precisão numérica e custo computacional, foi a malha média, com tamanho de elemento de $1{,}14 \times 10^{-4}$ m, selecionada para a realização das simulações finais em CFD.

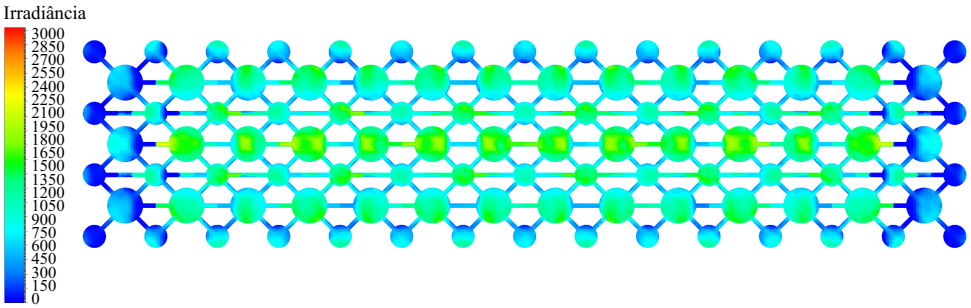
APÊNDICE C – RESULTADOS DOS CONTORNOS DOS PERFIS DE IRRADIÂNCIA MÉDIA.

Figura 56 – Perfil de irradiância média no modelo 29A - SH



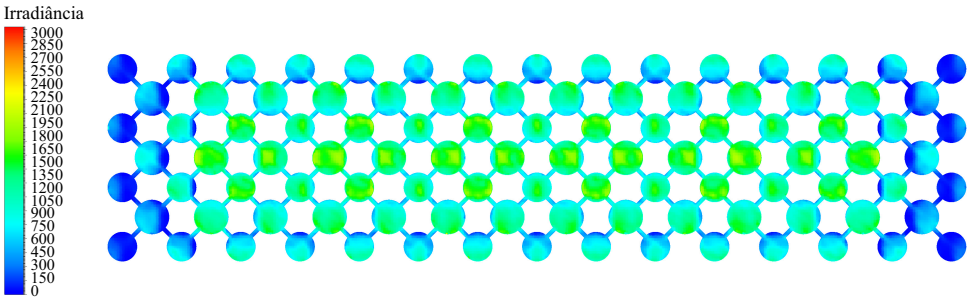
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 57 – Perfil de irradiância média no modelo 29A - CH



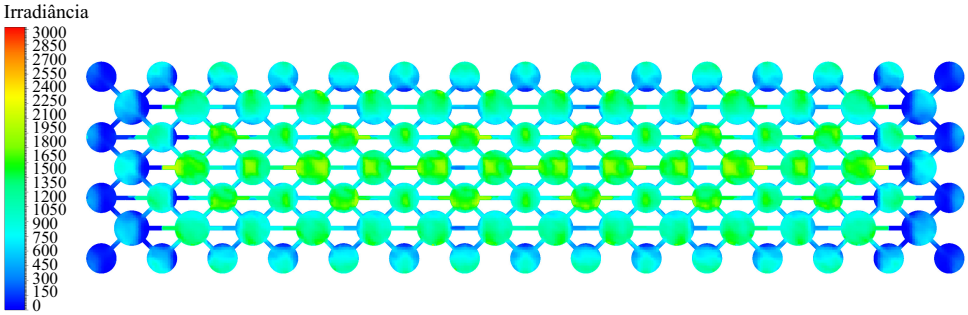
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 58 – Perfil de irradiância média no modelo 29B - SH



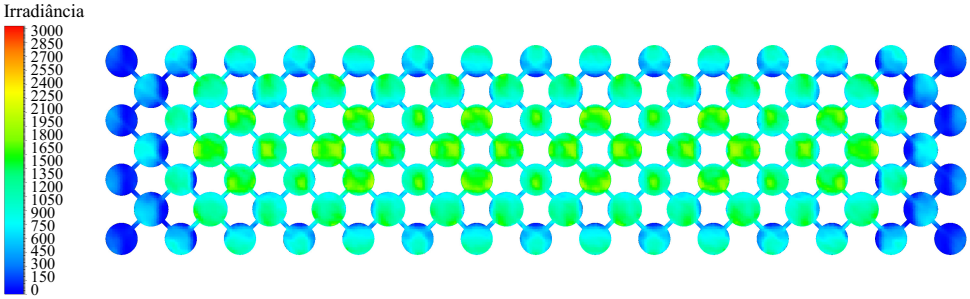
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 59 – Perfil de irradiância média no modelo 29B - CH



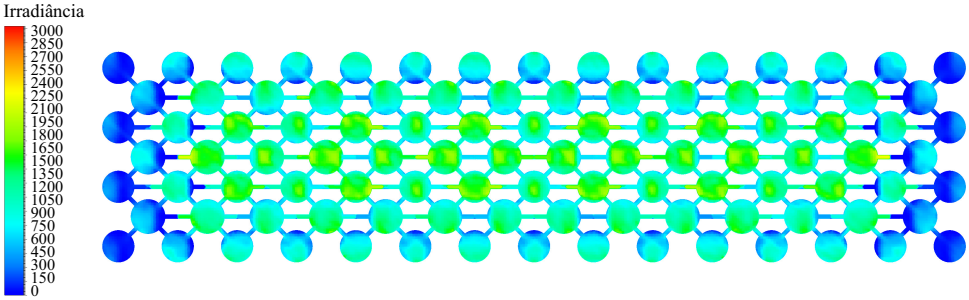
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 60 – Perfil de irradiância média no modelo 29C - SH



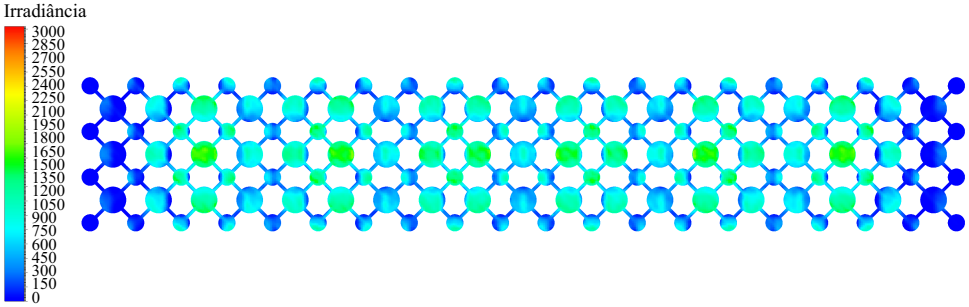
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 61 – Perfil de irradiância média no modelo 29C - CH



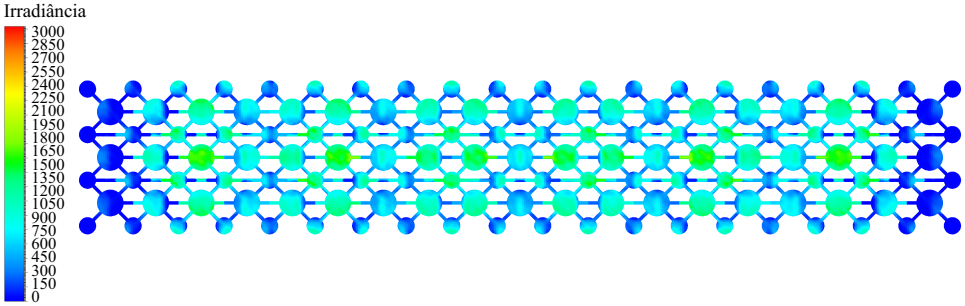
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 62 – Perfil de irradiância média no modelo 39A - SH



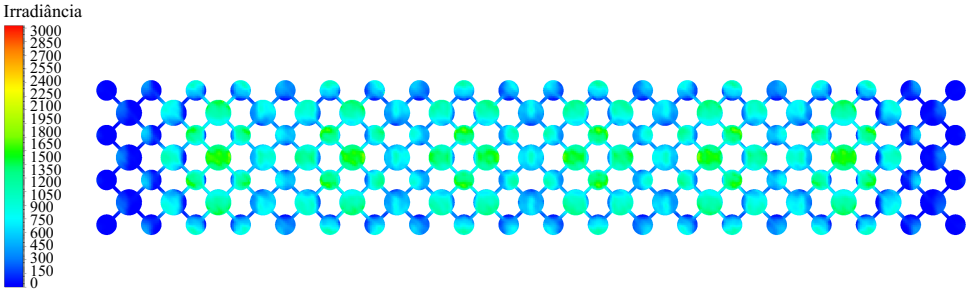
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 63 – Perfil de irradiância média no modelo 39A - CH



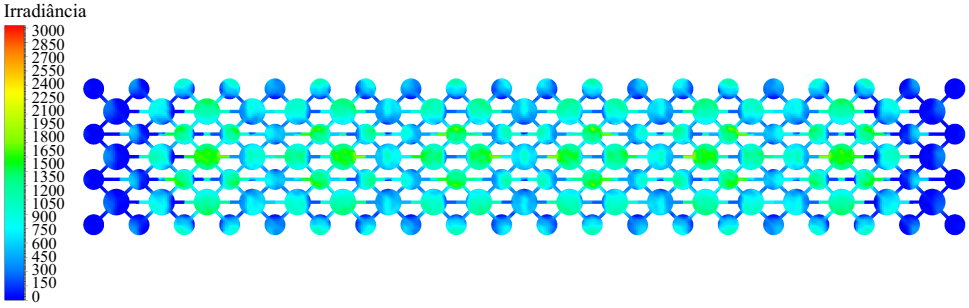
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 64 – Perfil de irradiância média no modelo 39B - SH



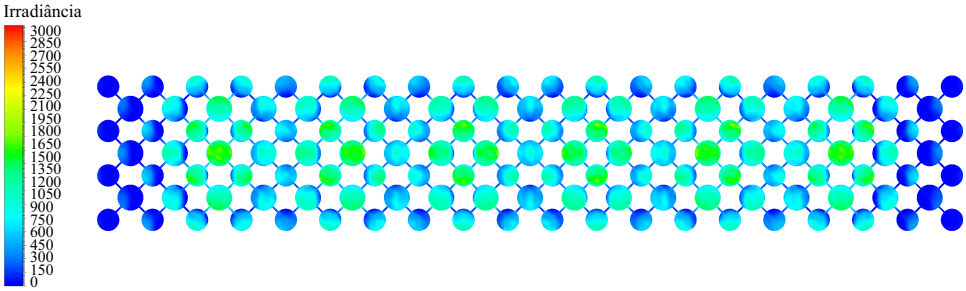
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 65 – Perfil de irradiância média no modelo 39B - CH



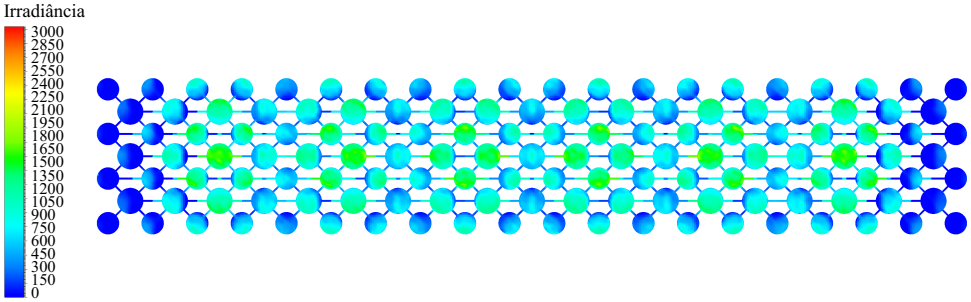
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 66 – Perfil de irradiância média no modelo 39C - SH



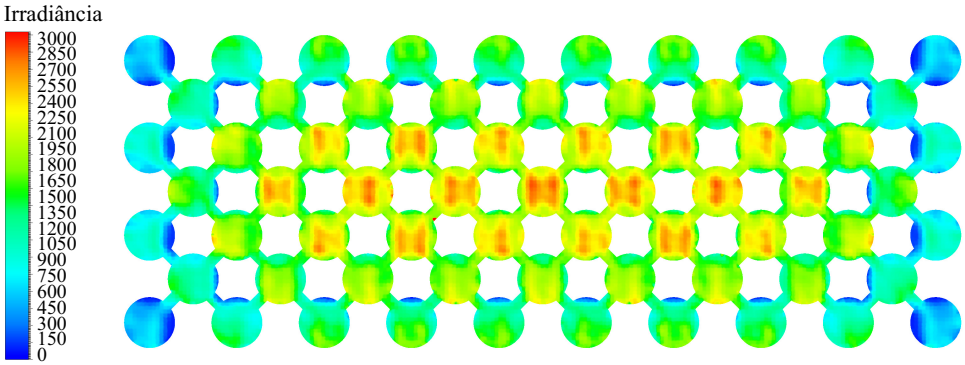
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 67 – Perfil de irradiância média no modelo 39C - CH



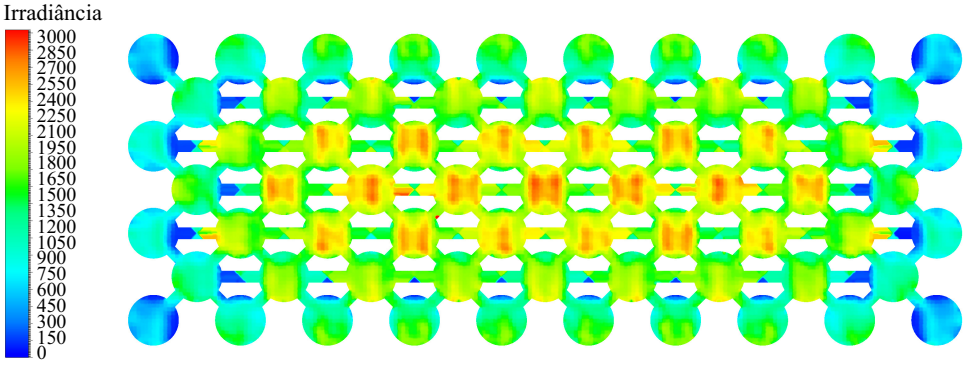
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 68 – Perfil de irradiância média no modelo 19A - SH



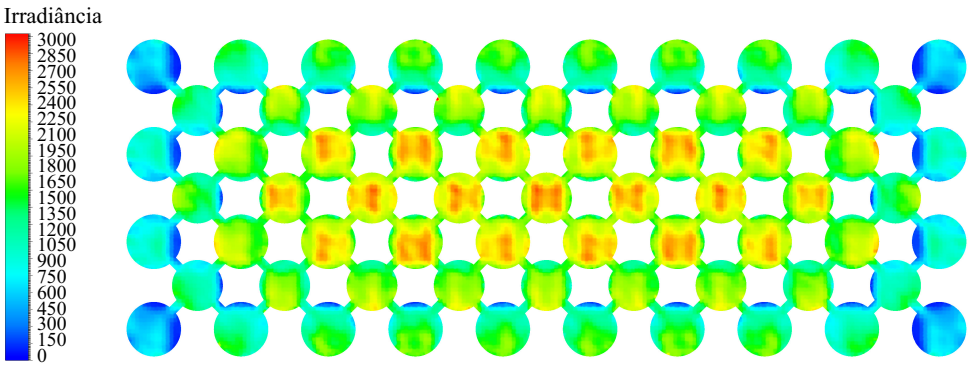
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 69 – Perfil de irradiância média no modelo 19A - CH



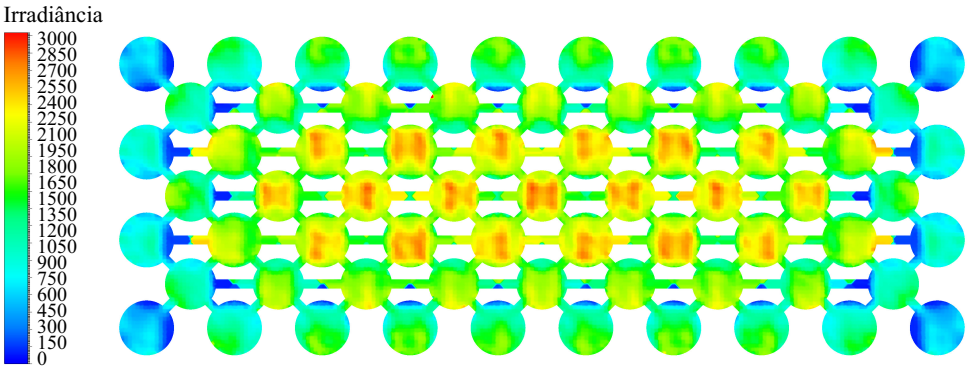
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 70 – Perfil de irradiância média no modelo 19B - SH



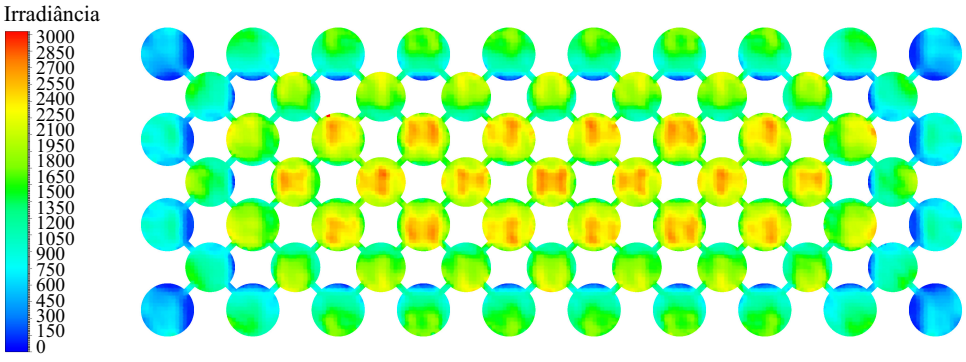
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 71 – Perfil de irradiância média no modelo 19B - CH



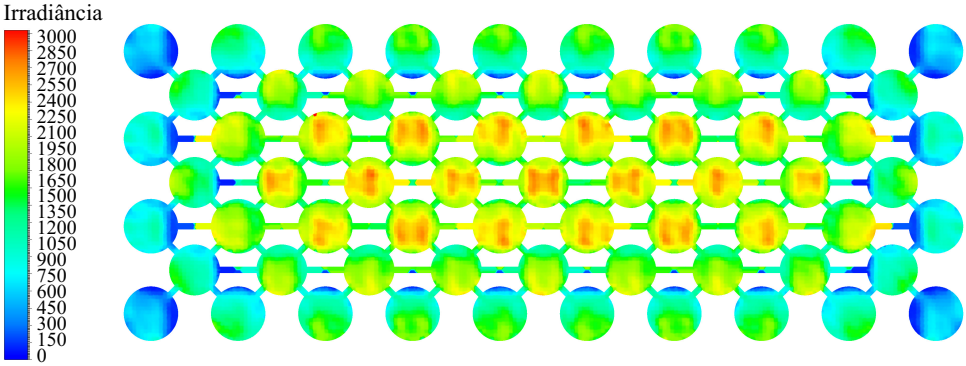
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 72 – Perfil de irradiância média no modelo 19C - SH



Fonte: elaborado pela autora (2025)

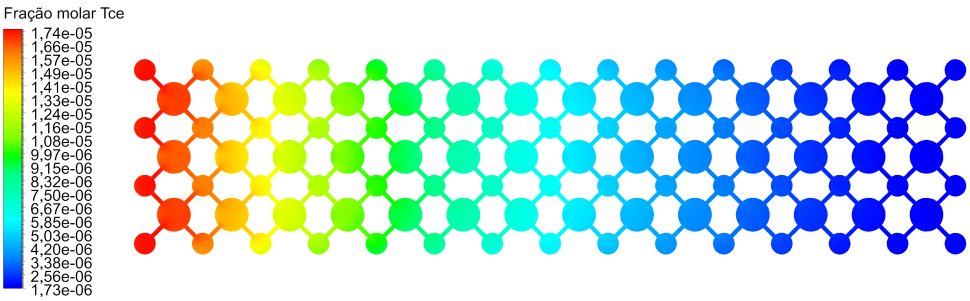
Figura 73 – Perfil de irradiância média no modelo 19C - CH



Fonte: elaborado pela autora (2025)

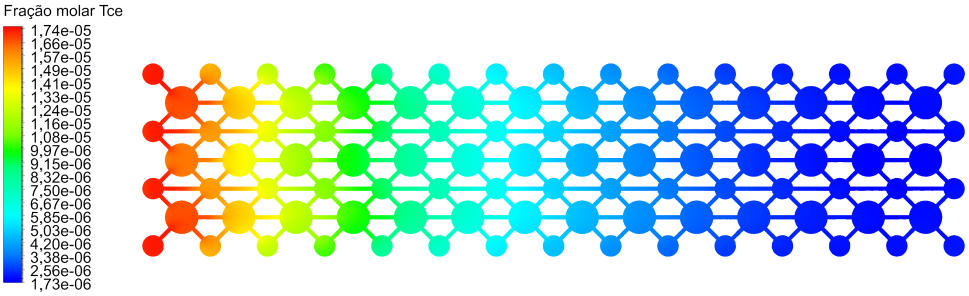
APÊNDICE D – RESULTADOS DOS CONTORNOS DOS PERFIS DE CONVERSÃO DO TRICLOROETILENO.

Figura 74 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 29A - SH



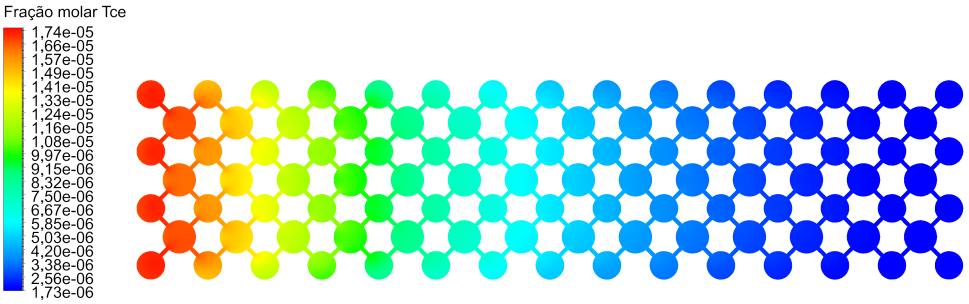
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 75 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 29A - CH



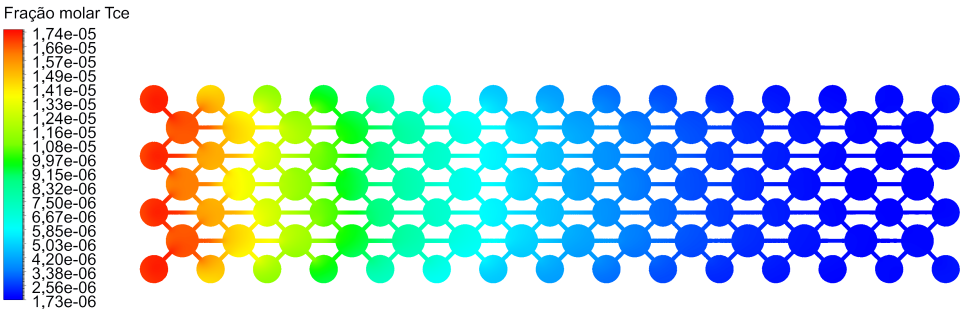
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 76 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 29B - SH



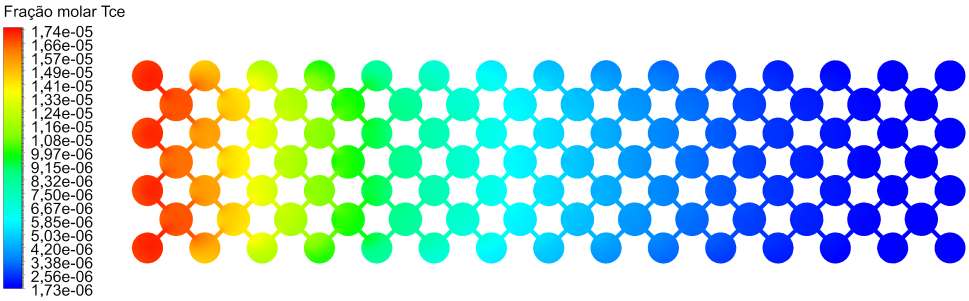
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 77 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 29B - CH



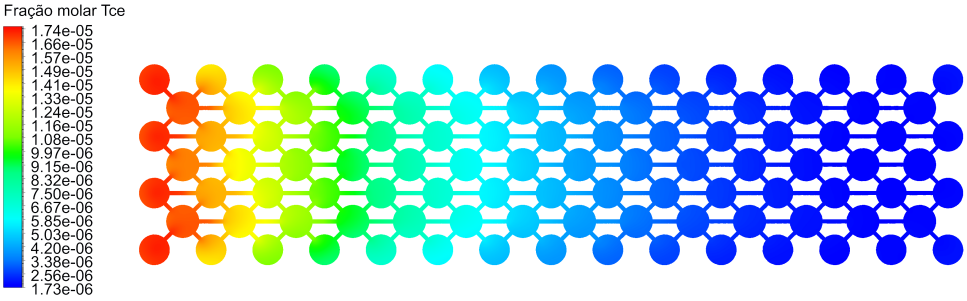
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 78 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 29C - SH



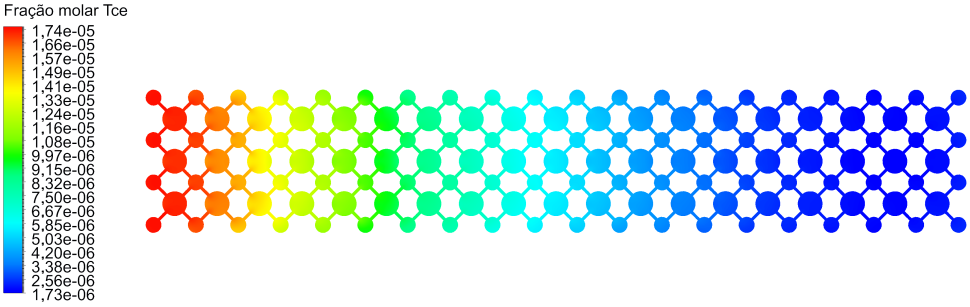
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 79 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 29C - CH



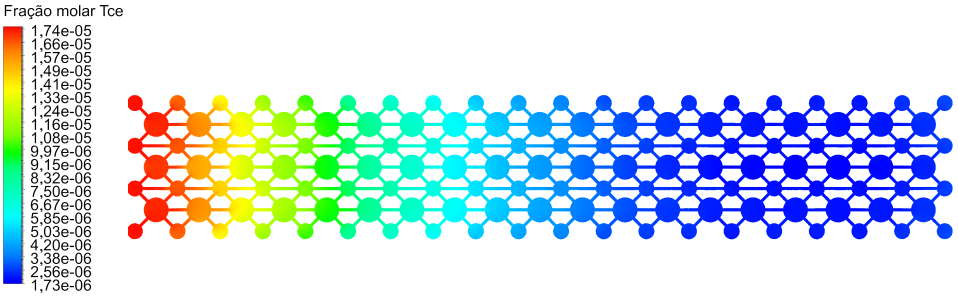
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 80 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 39A - SH



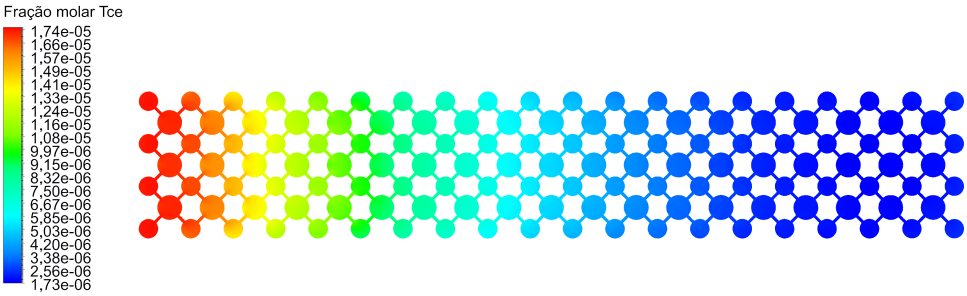
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 81 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 39A - CH



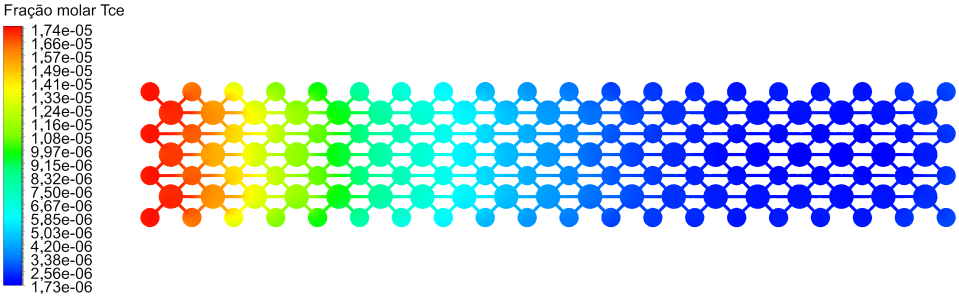
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 82 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 39B - SH



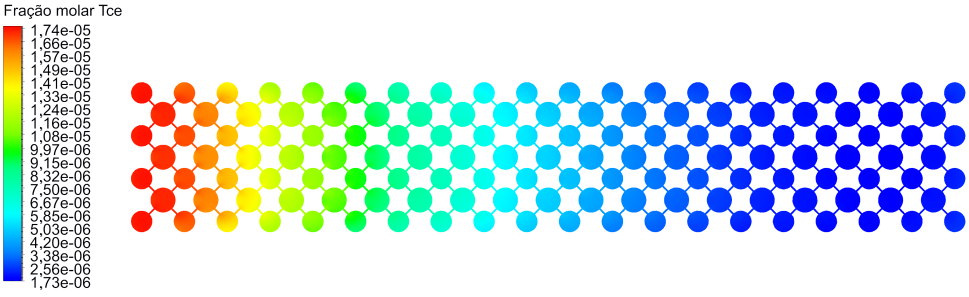
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 83 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 39B - CH



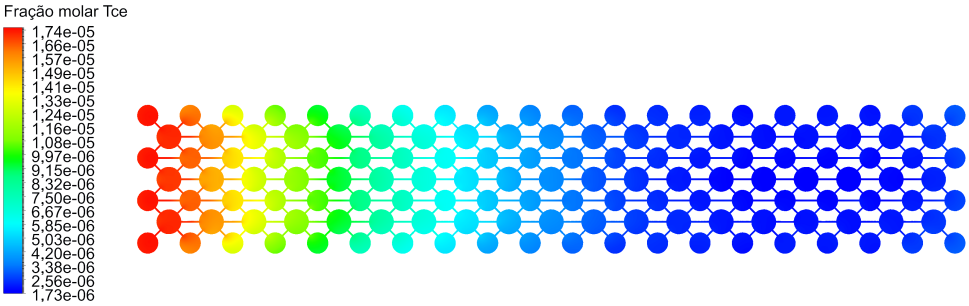
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 84 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 39C - SH



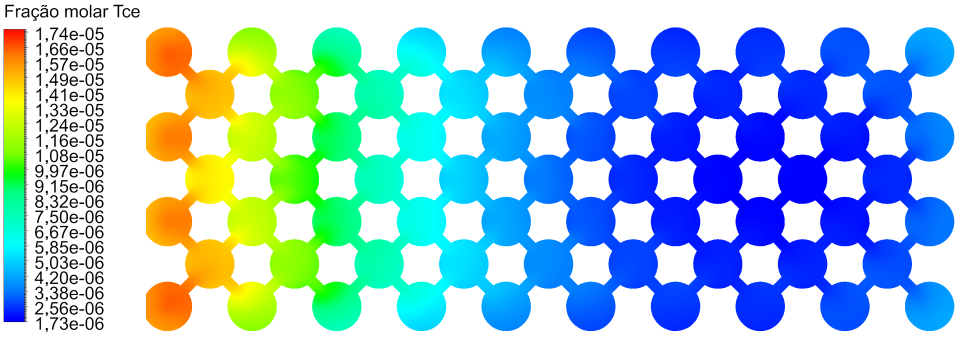
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 85 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 39C - CH



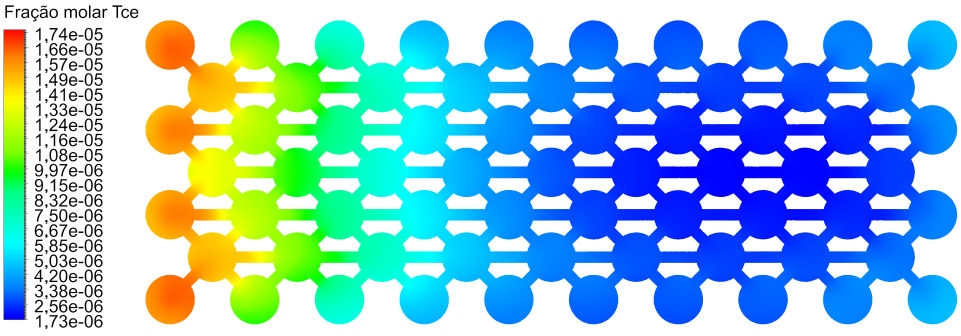
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 86 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 19A - SH



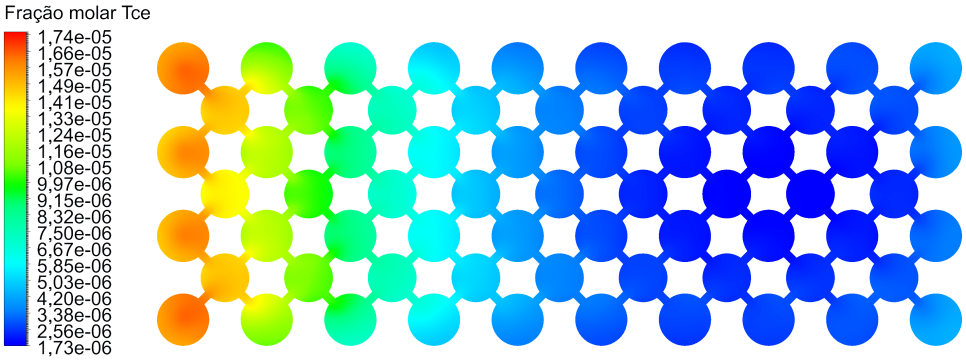
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 87 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 19A - CH



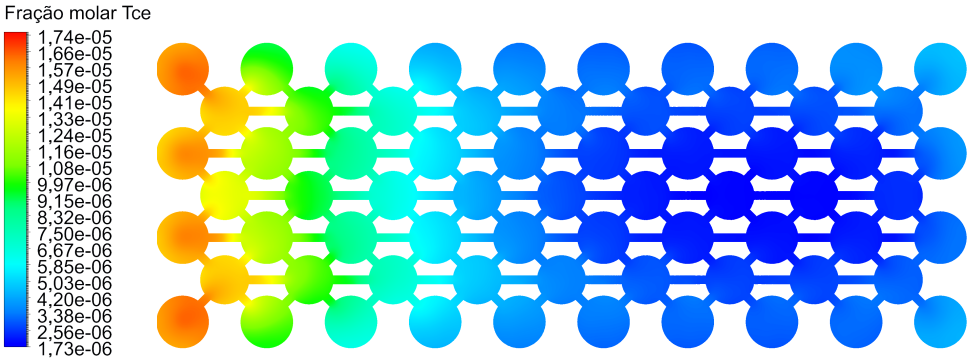
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 88 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 19B - SH



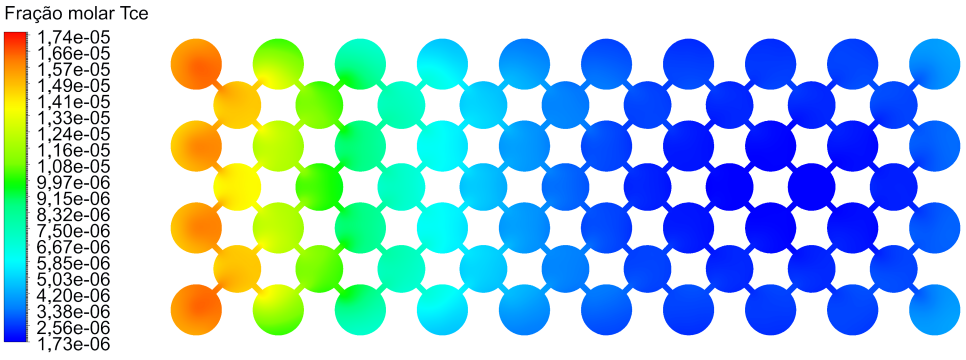
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 89 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 19B - CH



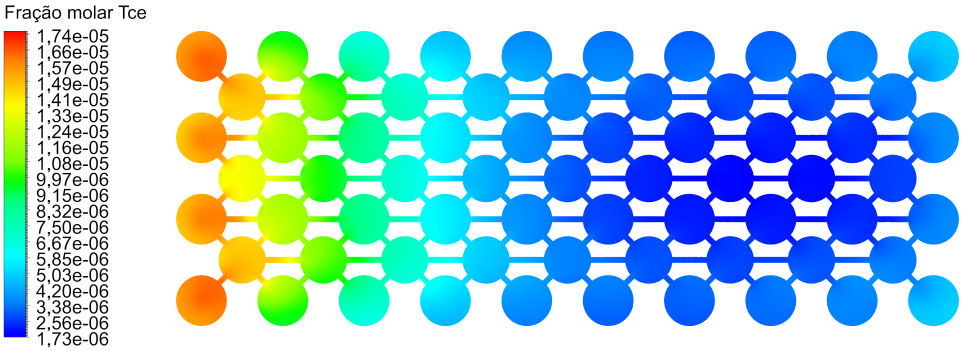
Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 90 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 19C - SH



Fonte: elaborado pela autora (2025)

Figura 91 – Perfil de conversão do tricloroetileno no modelo 19C - CH



Fonte: elaborado pela autora (2025)

APÊNDICE E – TESTES COMPLEMENTARES DA METODOLOGIA DE AUTOMAÇÃO PROPOSTA

ESTUDO 1 – ANÁLISE DE GEOMETRIAS MICROPILLAR

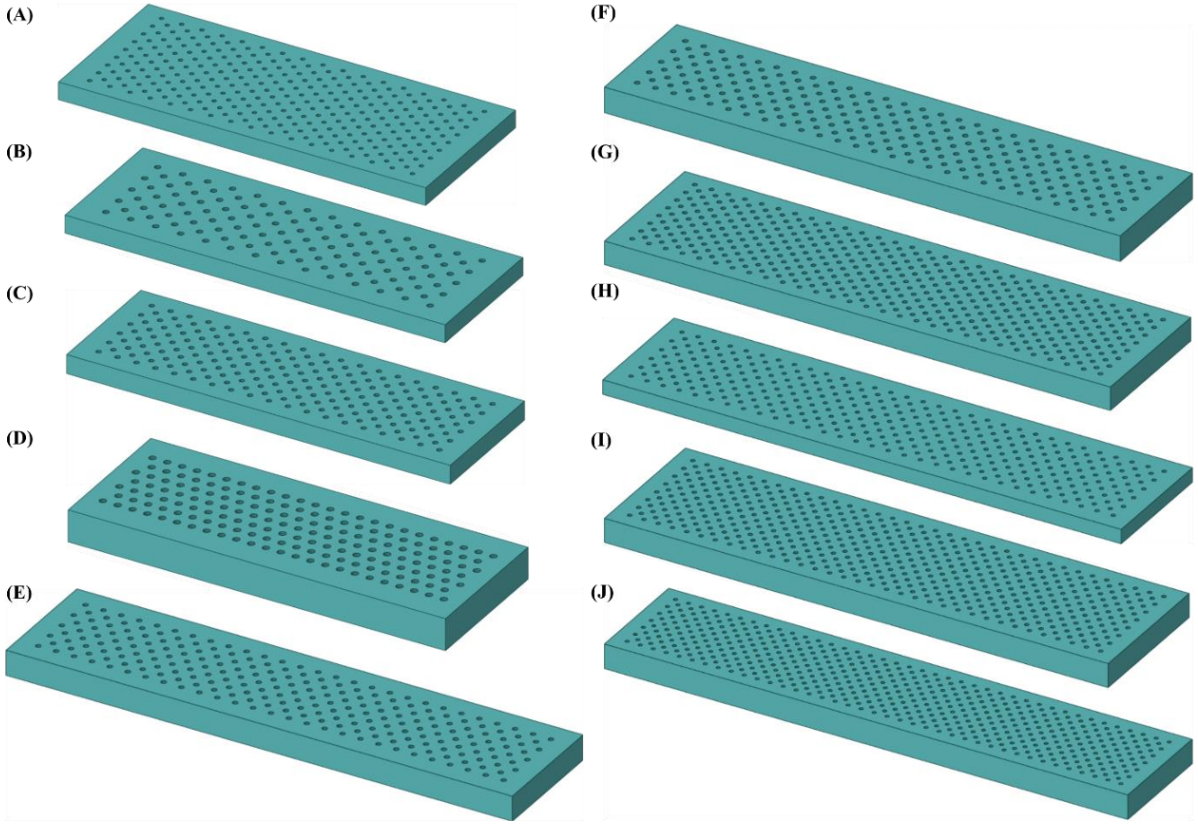
Com o intuito de comprovar a robustez e versatilidade da metodologia desenvolvida para automação de simulações CFD no reator NETmix, este apêndice apresenta a aplicação da mesma abordagem a um caso distinto: um mili reator fotocatalítico com estruturas internas conhecidas como *micropillars*. O objetivo é demonstrar que a metodologia é generalizável e capaz de lidar com geometrias de complexidade distinta. O reator *micropillar* consiste em uma placa retangular onde microestruturas cilíndricas (pilares) são distribuídas periodicamente, promovendo o aumento da área de contato e favorecendo reações fotocatalíticas.

A geometria *micropillar* foi selecionada como caso adicional para validação da metodologia automatizada devido à sua complexidade construtiva. Esse tipo de reator fotocatalítico possui múltiplas estruturas cilíndricas dispostas periodicamente no interior do canal, o que torna sua modelagem CAD e malhagem particularmente desafiadoras quando realizadas manualmente. Dessa forma, o caso se apresenta como um teste relevante da robustez e flexibilidade do pipeline automatizado desenvolvido neste trabalho.

Além do desafio geométrico, essa configuração tem sido explorada em pesquisas recentes. Por exemplo, Lin Li *et al.* (2014) propõe um microreator optofluídico com micropillars como alternativa para ampliar a área superficial ativa e otimizar a transferência de massa em processos de fotocatálise, resultando em um aumento de até 56% na taxa de reação em comparação a configurações planas. Adicionalmente, a geometria *micropillar* foi objeto de estudo comparativo direto com o reator NETmix em simulações numéricas de transporte radiativo e degradação de poluentes orgânicos voláteis (VOCs), como mostrado por Matiazzo, Padoin e Soares (2024). Os resultados indicaram maior eficiência de absorção de luz (84,4% contra 43,7%) e maior conversão de poluentes (70% contra 43,7%) no reator *micropillar*, evidenciando que suas características geométricas influenciam significativamente o desempenho fotoquímico.

A Figura 92 apresenta dez diferentes configurações geométricas do reator *micropil-*

Figura 92 – Conjuntos de dez geometrias geradas automaticamente com diferentes arranjos de pilares internos. As variações incluem alterações no espaçamento, número de fileiras e colunas de pilares. Além da variação da estrutura do reator, como altura, largura e comprimento do reator.



Fonte: elaborado pela autora (2025)

lar, cujas combinações de parâmetros estão detalhadas na Tabela 14. Neste tipo de reator, a largura e o comprimento do canal não estão diretamente vinculados à quantidade de pilares internos, o que permite manter o mesmo comprimento total e, ainda assim, variar o número de pilares ao longo do escoamento. Essa flexibilidade possibilita o aumento da área de contato com o fluido, influenciando diretamente o desempenho reacional. A ampla variedade de configurações viáveis torna a parametrização geométrica, quando associada à metodologia de automação desenvolvida neste trabalho, um recurso estratégico para estudos de otimização e análise de sensibilidade em reatores desse tipo.

Tabela 14 estão apresentados os conjuntos de parâmetros para cada um dos modelos apresentados na Figura 92. As letras de A a J correspondem às geometrias exibidas na Figura 92, indicando diferentes configurações paramétricas automatizadas. São apresentados os valores de altura (Alt.), largura (Larg.), e comprimento (Compr.) do

domínio reacional, além da quantidade de pilares distribuídos nas direções X (ao longo do escoamento) e Z (transversal ao escoamento). As variações permitem explorar diferentes valores de área superficial, efeitos hidrodinâmicos potenciais e efeitos na absorção de luz no caso de reação fotocatalítica.

Tabela 14 – Parâmetros geométricos utilizados na geração dos modelos do reator micropillar apresentados na Figura 89

Variável	**A**	**B**	**C**	**D**	**E**	**F**	**G**	**H**	**I**	**J**
Alt. (mm)	1,2	2,1	2,8	1,5	2,6	1,9	2,3	1,7	2,0	1,4
Larg. (mm)	9,0	12,5	14,0	10,2	11,8	8,5	13,5	15,0	9,8	12,0
Compri. (mm)	25,0	45,0	60,0	30,0	55,0	22,0	48,0	35,0	40,0	50,0
Pilares X	15	30	45	20	40	25	35	18	28	32
Pilares Z	6	9	10	7	8	5	9	10	6	7

Fonte: Elaborado pela autora (2025)

Em síntese, a aplicação da metodologia de automação no reator *micropillar* demonstrou sua capacidade de lidar com geometrias complexas, viabilizando a geração rápida e sistemática de múltiplas configurações paramétricas. Esse estudo evidenciou a flexibilidade da metodologia proposta, destacando sua utilidade para análises de sensibilidade e exploração de soluções de engenharia mais eficientes. Os resultados reforçam o potencial da abordagem desenvolvida para ampliar a investigação de reatores fotoquímicos, servindo como base para a próxima aplicação apresentada neste apêndice.

ESTUDO 2 – AUTOMAÇÃO DA CONFIGURAÇÃO E EXECUÇÃO NUMÉRICA

Com o intuito de reforçar a versatilidade e aplicabilidade da metodologia de automação desenvolvida neste trabalho, em um segundo estudo de caso o foco foi a etapa de configuração e execução automatizada do solver numérico. O objetivo foi viabilizar, de forma eficiente e escalável, a geração de um conjunto de dados para aplicação em um problema de otimização envolvendo um reator de placas planas com reações catalíticas heterogêneas nas paredes do canal.

Neste sistema, a espécie reagente A é convertida simultaneamente em um produto desejado B e em um subproduto indesejado C, por meio de duas reações competitivas, ambas de natureza exotérmica:

$$A \rightarrow B \tag{28}$$

$$A \rightarrow C \tag{29}$$

A formulação do problema de otimização teve como função objetivo uma composição mista baseada em três critérios: Conversão da espécie A, a ser maximizada, seletividade em relação ao produto B, também a ser maximizada, e temperatura máxima atingida no reator, a ser minimizada, visando segurança operacional e controle térmico.

Foram consideradas como variáveis de entrada do estudo: velocidade de entrada do escoamento, temperatura de entrada, fatores pré-exponenciais de ambas as reações, energias de ativação e entalpias de reação.

A alta dimensionalidade do espaço de decisão e a necessidade de varrer amplas faixas de valores para cada variável tornam inviável a preparação manual dos arquivos de simulação. Cada combinação de parâmetros requer não apenas a definição de novas condições operacionais, mas também a reconfiguração de parâmetros termoquímicos, tempo de simulação e critérios de convergência do solver. Além disso, para cada simulação, deve-se garantir a correta extração de resultados relevantes, como perfis de temperatura e composição.

A metodologia de automação foi adaptada para este estudo com foco na geração automatizada de configurações numéricas para o solver, possibilitando:

- A criação automatizada de diretórios de simulação para cada caso paramétrico;
- A escrita dos arquivos de entrada com os parâmetros atualizados de forma dinâmica;
- A extração e organização automática dos resultados (conversão de A, seletividade em B, temperatura máxima), armazenando os dados em formato compatível com algoritmos de otimização e aprendizado de máquina.

Essa abordagem permitiu a construção de um dataset consistente e extenso, adequado para a aplicação de técnicas como superfícies de resposta, algoritmos evolutivos e

outras estratégias de otimização multiobjetivo. Sem a automação, esse processo envolveria a configuração manual de centenas (ou milhares) de simulações, tornando o estudo impraticável em termos de tempo, além de mais propenso a erros operacionais.

Os códigos desenvolvidos para ambos os estudos de caso apresentados neste apêndice estão disponibilizados em repositório público, hospedado na plataforma GitHub, com o objetivo de garantir reprodutibilidade, transparência e promover o uso da metodologia por outros pesquisadores. O acesso ao repositório pode ser feito por meio do seguinte endereço: `https://github.com/NickPtav/AnsysFluent_automation_Reactor/tree/main`

Além disso, os resultados obtidos no segundo estudo de caso, incluindo dados das simulações e discussões adicionais sobre o desempenho do reator de placas planas sob diferentes condições operacionais, estarão disponíveis no livro Computational Fluid Dynamics in Chemical Engineering: Fundamentals and Applications, com lançamento previsto para 1º de julho de 2026 (ISBN: 9780443237119).