

Artigo

Modelagem de um Reator Químico do Tipo PFR não Isotérmico com Jaqueta como Instrumento Didático no Ensino de Engenharia Química: Um Estudo de Caso

Santos, S. B. F.; Damasceno, D. O.; Silva, L. N.; de Lima, J. S.; de Sousa, C. F.; Moitinho, J. A. D.; de Oliveira, L. G*

Rev. Virtual Quim., 2019, 11 (1), no prelo. Data de publicação na Web: 7 de janeiro de 2019

<http://rvq.sbg.org.br>

Modeling of a non-Isothermal PFR Type Chemical Reactor with Jacket as a Didactic Tool in Chemical Engineering: A Case Study

Abstract: Advances in industrialization and automation of chemical processes have required engineers to specialize in the operational study of equipment such as chemical reactors and heat exchangers. Amongst the most used reactors is the Plug-flow Reactor – PFR, due to its ease of installation and association with heat exchangers such as jackets. However, due to non-homogeneous composition on the axial side of the reactor, PFR operation and evaluation is still a challenge in many industries. This paper introduces a mathematical model that simplifies the ordinary differential equations and integers used in conventional models, in addition to a simulation and a case study with the objective to improve evaluation of equipment operation and sizing.

Keywords: Tubular reactor; modeling and simulation; computational tools.

Resumo

A crescente industrialização e o avanço na automação de processos químicos tem exigido uma especialização dos engenheiros no que tange o estudo operacional de equipamentos como os reatores químicos e os trocadores de calor. Dentre os reatores mais utilizados encontram-se os Reatores de Fluxo Pistonado (PFR), em função da facilidade de instalação do equipamento e da associação com trocadores de calor, como as jaquetas. Porém, a sua operação ainda é um desafio em muitas indústrias, em função da não-homogeneidade da composição no eixo axial do equipamento. Desta forma, este trabalho foi desenvolvido de forma a propor uma modelagem matemática com simplificações às equações diferenciais ordinárias e integrais dos modelos matemáticos convencionais, com base nos conceitos clássicos de cálculo de reatores, juntamente da simulação e de um estudo de caso, como forma de facilitar a avaliação da operação do equipamento e o seu dimensionamento.

Palavras-chave: Reator tubular; modelagem e simulação; Ferramentas computacionais.

* Universidade Federal de Campina Grande, Departamento de Engenharia Química, CEP 58109-970, Campina Grande–PB, Brasil.

✉ laercio@deq.ufcg.edu.br

DOI:

Modelagem de um Reator Químico do Tipo PFR não Isotérmico com Jaqueta como Instrumento Didático no Ensino de Engenharia Química: Um Estudo de Caso

Samuel B. F. Santos, David O. Damasceno, Luana N. Silva, Jean S. de Lima, Carolina F. de Sousa, Juliana A. D. Moitinho, Laércio G. de Oliveira*

Universidade Federal de Campina Grande, Departamento de Engenharia Química, CEP 58109-970, Campina Grande—PB, Brasil.

* laercio@deq.ufcg.edu.br

Recebido em 25 de março de 2018. Aceito para publicação em 23 de outubro de 2018

1. Introdução

2. Metodologia

2.1. Modelagem

2.2. Simulação

3. Resultados e Discussão

3.1. Dimensionamento do Reator

3.2. Análise Térmica

3.3. Dimensionamento vs. Temperatura de operação

4. Conclusão

1. Introdução

O reator químico é um equipamento onde as reações químicas de interesse são realizadas. No mesmo, o fluido reagente pode ser aquecido ou arrefecido e ocorre transferência de massa e/ou energia.^{1,2} Segundo Hill,¹ existem dois tipos de reatores, basicamente: o do tipo tanque e o tubular.

O reator batelada, ou do tipo tanque, armazena as espécies enquanto estas reagem, sendo operado isotermicamente e a um volume constante, onde a composição será dependente do tempo. Já o reator ideal

tubular, ou do tipo *Plug-Flow Reactor* - PFR, o fluido reagente se move através da tubulação como um pistão paralelo ao eixo do tubo, sendo a composição uma função do volume ou do eixo axial do equipamento.¹

O reator tubular é assim nomeado devido à sua configuração física, na qual os reagentes são consumidos continuamente à medida que avançam ao longo de seu comprimento.¹ Este tipo de reator caracteriza-se por um escoamento ordenado dos elementos. Neste, não ocorre difusão ao longo do percurso e a velocidade entre dois elementos do fluido não difere. Como condição para o reator tubular, o tempo de

permanência para qualquer elemento do fluido é constante.²

A necessidade de simular e testar condições de projeto para um equipamento torna-se uma alternativa de baixo custo e segura, permitindo uma aproximação das condições operacionais reais mediante a utilização de modelos matemáticos. Paxman *et al.*,³ por análise numérica, conseguiu validar uma simplificação da modelagem matemática de um reator de decomposição térmica do metano frente à um modelo experimental.

Devido à quantidade de modelos matemáticos diferenciais e integrais para a modelagem dos fenômenos que ocorrem em um reator do tipo PFR, Schultz *et al.*⁴ propôs a resolução desses modelos diferenciais através da utilização de dois softwares, EMSO⁵ e GNU Octave,⁶ para a resolução de um PFR mediante métodos numéricos.

A simplificação dos modelos de transferência de massa, energia e momento, em um PFR, também foi estudada por Kaskes *et al.*⁷ Estes observaram que os modelos matemáticos simplificados para um reator de síntese de Fischer-Tropsch não tem diferença

significativa para modelos diferenciais complexos.

Assim, este trabalho objetiva propor uma modelagem matemática simplificada das equações diferenciais e integrais para um reator PFR, como metodologia didática no ensino de Engenharia Química, com base em conceitos clássicos de Cinética e Cálculo de Reactores e mediante um estudo de caso.

2. Metodologia

Para a análise e dimensionamento do reator do tipo PFR, foi realizada a modelagem do reator, seguida da simulação e estudo de caso. A Figura 1 apresenta as etapas realizadas para a análise do equipamento, onde foram discriminadas as variáveis de projeto, utilizadas para a montagem dos balanços de massa, energia e de dimensionamento do trocador de calor, prosseguindo para a modelagem do equipamento e, por fim, o estudo de caso.

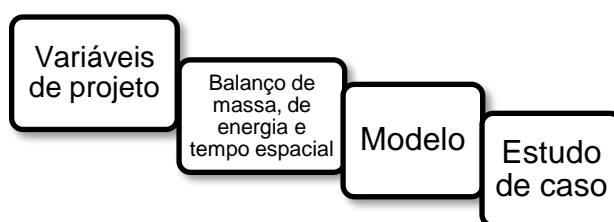


Figura 1. Etapas da modelagem do reator

2.1. Modelagem

Balanço Material

O balanço de matéria para um reator PFR¹ é apresentado na Equação 1, onde a matéria que entra equivale àquela que sai, podendo haver acúmulo ou reação no processo:

$$(\text{Entra}) = (\text{Sai}) + (\text{Reage}) + (\text{Acumulado}) \quad (1)$$

Como neste tipo de reator não há acúmulo, pois admite-se a condição de regime permanente, o balanço de massa pode ser expresso por:

$$F_{A0} dx_A = (-r_A) dV \quad (2)$$

Onde F_{A0} é o fluxo molar de entrada do reagente A, x_A é a fração convertida do reagente, r_A é a taxa de reação e V o volume do reator.

Tempo espacial

Uma vez que o reator PFR opera em função da localização do elemento de fluido no comprimento do equipamento, uma forma de relacionar a passagem deste elemento através do reator, é o tempo espacial, τ , que diz respeito ao tempo necessário para este elemento percorrer o reator desde a sua entrada até sua saída.

$$\tau = \frac{V_r}{\vartheta_0} \quad (3)$$

Onde este tempo espacial é definido por uma razão entre o volume do reator (V_r) e o fluxo volumétrico da entrada do equipamento (ϑ_0).

Utilizando-se da definição de tempo espacial da Equação 3, e tornando-o uma função da taxa de reação. A Equação 4 foi utilizada para o cálculo do tempo espacial^{1,2}.

$$\tau = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{K(1-X_A)} \quad (4)$$

Partindo-se desta, o volume do reator foi determinado pela equação de projeto, Equação 5.

$$V_R = \tau \cdot \left(\frac{F_{A0}}{C_{A0}} \right) \quad (5)$$

Onde o volume do reator PFR é obtido em função do tempo espacial, do fluxo molar de entrada de A e da concentração inicial de A (C_{A0}).

Balço de Energia

Como a reação estudada é do tipo exotérmica, o resfriamento se faz necessário devido à geração de calor. Assim, estando o

reator envolto em uma jaqueta de resfriamento, este pôde ser modelado como um sistema aberto, do ponto de vista energético. Desta forma, partindo-se do princípio de conservação de energia, a formulação genérica da 1ª Lei da Termodinâmica permite elucidar de forma simples as condições de operação em estado estacionário ou transiente através da Equação 6.

$$\frac{dE}{dt} = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{\text{corrente entrada}} \left(h_e + \frac{v_{ein}^2}{2g_c} + \frac{gZ_e}{g_c} \right) \dot{m}_e - \sum_{\text{corrente saída}} \left(h_s + \frac{v_s^2}{2g_c} + \frac{gZ_s}{g_c} \right) \dot{m}_s \quad (6)$$

Onde, a variação da energia com o tempo ($\frac{dE}{dt}$) pode ser expressa em função do fluxo de calor (\dot{Q}), do trabalho (\dot{W}_s), entalpia (h), velocidades de entrada e saída (v), aceleração da gravidade (g_c), altura do deslocamento (Z) e fluxo mássico (\dot{m}).

Uma vez que para o dimensionamento de reatores de fluxo contínuo, como o PFR, o balanço de energia pode ser simplificado ao considerar a energia cinética, a energia potencial e o trabalho, referentes ao escoamento, desprezíveis quando comparados ao calor de reação. Sendo o balanço de calor expresso na Equação 7:

$$\dot{Q} = \sum_{\text{correntes saída}} h_s \dot{m}_s - \sum_{\text{correntes entrada}} h_e \dot{m}_e \quad (7)$$

Onde o fluxo de calor (\dot{Q}) é obtido pela diferença dos somatórios do produto da entalpia (h) e fluxo mássico (\dot{m}), para as correntes de entrada e saída, respectivamente os subscritos e e s.

Logo, a quantidade de calor transferido por unidade de massa pode ser aproximada à uma diferença entre as entalpias, por

unidade de massa, na entrada e saída do reator^{1,2}.

$$q \approx \Delta H \quad (8)$$

A taxa na qual o calor é transferido para o sistema de troca térmica é expressa pela equação 9.

$$\dot{Q} = UA(T_m - T) \quad (9)$$

Esta é relacionada ao coeficiente de transferência de calor global, U, a área de contato de troca térmica – em função do U – e à diferença entre as temperaturas da fonte de calor frio (T_m) e a de operação do reator, T ^{1,2}.

A variação da entalpia contém tanto o calor sensível quanto os termos de calor da reação, desta forma, a taxa de calor pode ser descrita em função da variação no calor sensível e da energia consumida/produzida durante a reação, Equação 10¹.

$$UA(T_m - T) = \Delta H_{R \text{ ref}} V_R + \left(\sum h_i \bar{C}_{p_i} \right) \frac{dT}{dt} \quad (10)$$

Desta forma, considerando o balanço de massa e de energia, para uma resolução simultânea, o modelo do reator pode ser expresso pela Equação 11.

$$\int_{X_{A \text{ entrada}}}^{X_{A \text{ saída}}} U \frac{4}{D} (T_m - T) F_{A0} \frac{dX_A}{(-r_A)} = - \frac{F_{A0} \Delta H_{R \text{ ref}} |_{T0}}{v} (X_{A \text{ saída}} - X_{A \text{ entrada}}) + \left(\sum \left(\int_{T0}^T h_i \bar{C}_{p_i} dT \right) \right) \quad (11)$$

Onde este balanço simultâneo (Equação 11) é expresso em função da conversão (X) da entrada até a saída do reator.

Discretizando a equação, através do balanço molar e balanço de energia pode-se utilizar o modelo expresso pela Equação 12, permitindo a manipulação das variáveis de projeto.

$$\frac{U \cdot (T_m - T) \cdot 4 \cdot F_{A0}}{D \cdot K \cdot C_{A0}} \cdot \ln \left[\frac{1}{(1 - X_A)} \right] - F_{A0} \cdot [C_p \cdot (T - T_0)] + F_{A0} \cdot X_A \cdot \frac{\Delta H_R}{X_A} = 0 \quad (12)$$

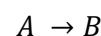
Especificando as variáveis da Equação 12, deixando apenas uma incógnita correspondente ao parâmetro que se deseja encontrar baseado nos valores das demais variáveis, utilizou-se a função Solver do Microsoft® Excel⁸ para encontrar um valor da incógnita que zere a função, condição para o estado estacionário estudado. Primeiramente, a incógnita escolhida foi a temperatura de operação do reator, T, encontrado um valor para essa variável pode-se calcular a constante de velocidade da reação, k, assim consequentemente pode-se encontrar o tempo espacial, τ .

2.2. Simulação

Foi utilizado o Solver do software Microsoft® Excel⁸ como programa para resolução dos modelos e simulação do PFR.

Estudo de caso

Foi considerada uma reação de isomerização onde esta obedece a cinética de primeira ordem, essencialmente irreversível e do tipo exotérmica, como esquematizado:



Sendo a constante de velocidade da reação, neste estudo de caso, determinada pela Equação 13.

$$k = 2,61 \times 10^{14} \cdot e^{-\frac{14570}{T}} \quad (13)$$

O reator opera de forma não isotérmica e imerso em um tanque de resfriamento, como mostra a Figura 2.

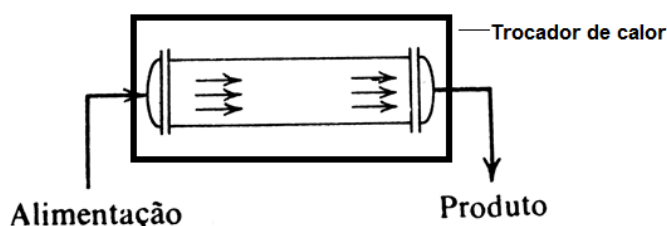


Figura 2. Esquema do PFR com trocador de calor (Adaptado de Levenspiel, 1926)

3. Resultados e Discussão

3.1. Dimensionamento do Reator

Para a determinação tanto do volume do reator, quanto da temperatura de operação, foram considerados os parâmetros expressos na Tabela 1.

Dando prosseguimento à análise do PFR com relação ao volume do reator, foi

analisada a influência da conversão sobre o volume do equipamento a ser projetado, como mostra a Figura 3.

Para valores de conversão maiores do que 0,3 faz-se necessário volumes de reator cada vez maiores. Isso se deve ao fato de que será necessário um tempo de residência maior dos reagentes dentro do equipamento, para que a conversão seja assim alcançada. Desta forma, quanto maior o reator, maior será o tempo espacial e, conseqüentemente, a conversão dos reagentes.

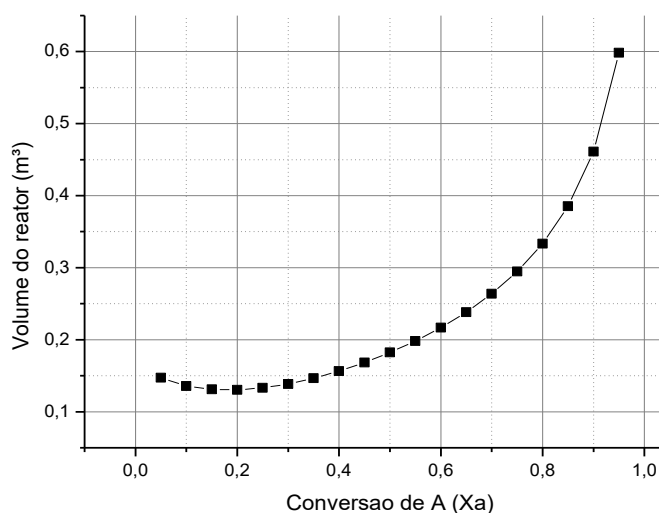


Figura 3. Volume do reator em função da conversão

Ao propor uma otimização numérica de um reator tubular com recheio estruturado e randômico (Random Packed Bed – RPB e Packed Closed Cross Flow Structure – CCFS), para a utilização na síntese de Fischer-

Tropsch, Kaskes *et al.*⁷ também observaram o mesmo comportamento assintótico para a conversão, com relação ao comprimento do reator.

McDonough *et al.*⁹ estudando um reator tubular compartimentado oscilatório com jaqueta (HPOBR), também observaram que a conversão é intimamente ligada ao espaço explorado dentro do equipamento, onde para que sejam alcançadas altas conversões é necessário um maior tempo de residência. Além disso, observaram que para baixos valores de Reynolds, as conversões tendem a

serem maiores, devido ao aumento no tempo de residência.

3.2. Análise Térmica

Na Figura 4, foi estudada a temperatura de operação em função da conversão do reagente.

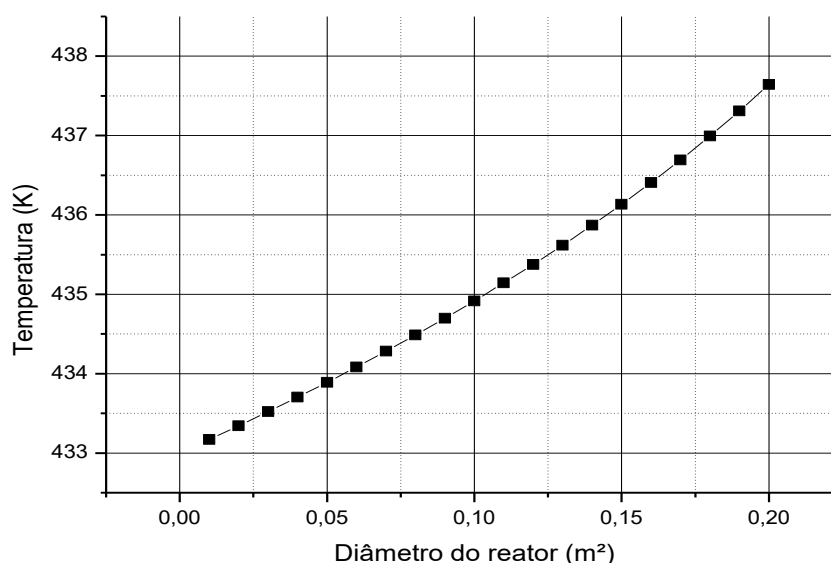


Figura 4. Temperatura de operação em função da conversão

Analisando o perfil de temperatura em função da conversão, apresentados na Figura 4, pode-se traçar um paralelo onde a conversão seja o passo no eixo axial do equipamento, lembrando que a conversão será maior no final do reator. Com isso, pode-se observar que para conversões entre 0 e 20 %, há um incremento na temperatura do reator. Isto ocorre por, neste intervalo, haver uma maior concentração dos reagentes, havendo uma maior liberação de energia, uma vez que a reação é exotérmica. Para conversões maiores do que 20 %, a temperatura tende a ser reduzida até alcançar uma faixa próxima à temperatura média da jaqueta de resfriamento, 433 K, em função da remoção do calor no sistema, mostrando sua eficiência

Schultz *et al.*⁴ durante o estudo de caso para a modelagem e simulação de um reator

PFR, também observaram um incremento da temperatura ao longo do eixo axial do reator, em concordância com a conceituação de uma reação exotérmica.

Kaskes *et al.*⁷ também observaram que, para os reatores RPB e CCFS, a reação de síntese de Fischer-Tropsch apresentou picos de temperatura no início do reator, causados pela reação altamente exotérmica e a forte relação de dependência entre a temperatura e a taxa de reação.

Para uma reação de decomposição de ácido sulfúrico em um PFR, Wang *et al.*¹⁰ também observaram a tendência de aproximação entre a temperatura no seio do fluido no reator e a temperatura do fluido refrigerante. Onde a temperatura dos reagentes-produtos tende a se aproximar da temperatura do fluido refrigerante nos comprimentos finais do equipamento.

Perfis semelhantes de temperatura foram observados por Haarlemmer e Bensabath¹¹ ao estudarem a aplicação de um modelo não ideal para um PFR objetivando a síntese por Fischer-Tropschi, onde o reator utilizado consistia em um reator de leito fixo semi-plug-flow reactor.

3.3. Dimensionamento vs. Temperatura de operação

Já na Figura 5, foi fixada uma conversão de 97 % e o diâmetro do reator foi variado, sendo analisado o seu efeito sobre a temperatura de operação.

A partir da Figura 5 é possível observar menores temperaturas de operação no equipamento para os menores diâmetros. Este resultado indica que, para menores diâmetros, a área de troca térmica é maior, favorecendo com que haja um aumento no potencial de arrefecimento.

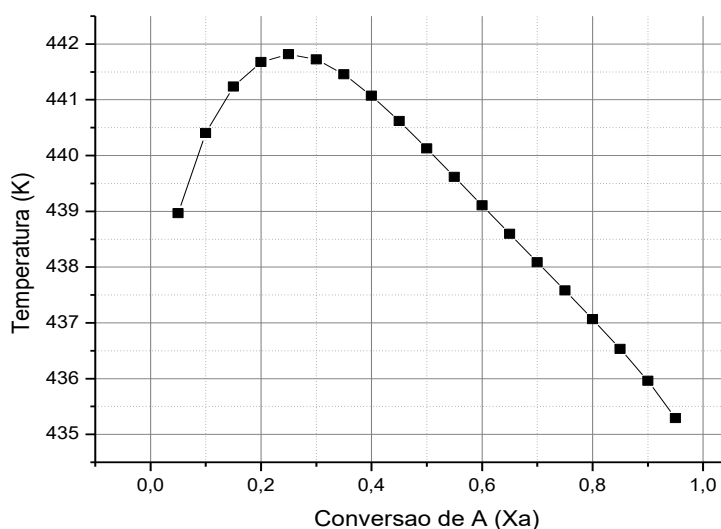


Figura 5. Temperatura de operação do reator em função do diâmetro do tubo

Hou *et al.*¹² ao propor a modelagem de um reator com recheio (Packed Bed Reactor) com troca térmica em escala industrial, utilizando fluidodinâmica computacional (CFD), validaram com dados experimentais o modelo predito e observaram uma queda de temperatura com a aproximação da parede do reator, decorrente da refrigeração do tubo e conseqüente remoção do calor produzido pela reação, indicando que para menores diâmetros de tubo, maior seria a área de troca térmica e melhor a refrigeração do equipamento, corroborando com os resultados obtidos na Figura 5, da modelagem proposta.

trabalho, através da resolução do caso, permitiu simplificar o estudo de reatores químicos do tipo PFR, cuja análise se torna de difícil compreensão aos discentes de graduação que estudam as conversões químicas que ocorrem neste tipo de equipamento. Desta forma, foi possível avaliar as condições operacionais e de dimensionamento de um reator PFR não-isotérmico com jaqueta de resfriamento, comprovados na literatura através de diversos tipos de reatores tubulares, permitindo uma didática mais simples e igualmente eficiente, em oposição às resoluções diferenciais e integrais, para o ensino de reatores químicos.

4. Conclusão

A modelagem matemática proposta neste

Tabela 1. Parâmetros operacionais do estudo de caso (Adaptado de Hill, 1937)

Parâmetros	Símbolo	Valor	Unidade
Coefficiente global de troca térmica	U	200000	cal/m ² .hr.K
Temperatura de Resfriamento Média	T _m	433	K
Diâmetro do reator	D	0,1016	m
Fluxo de entrada do reagente A	F _{A0}	133608,2	g/hr
Massa do reagente B produzida por ano	M _B	2,00E+06	lb
Tempo de operação do reator por ano	t	7000	hr
Fluxo de saída do reagente B	F _B	129600	g/hr
Calor Específico Global	C _p	0,5	cal/g.K
Temperatura do fluxo de entrada	T ₀	436	K
Razão entre variação da entalpia de reação pelo coeficiente estequiométrico	$\Delta H_R / \nu_A$	83	cal/g
Concentração inicial do reagente A	C _{A0}	9,00E+05	g/m ³
Conversão da reagente A	X _A	0,97	

Referências Bibliográficas

- ¹ Hill, C. G.; Root, T. H.; *An introduction to chemical engineering kinetic & reactor design*, 1st. ed., John Wiley & Sons: Nova Jersey, 2014.
- ² Levenspiel, O.; *Engenharia das reações químicas*, Edgard Blücher Ltda: São Paulo, 1926.
- ³ Paxman, D.; Trottier, S.; Flynn, M. R.; Kostiuik, L.; Secanell, M. Experimental and numerical analysis of a methane thermal decomposition reactor. *International Journal of Hydrogen Energy* **2017**, *42*, 25166. [CrossRef]
- ⁴ Schultz, G.; Lauer, J.; Lopes, J. M.; Rangel, R. S.; Simonelli, G. Modelagem e simulação dos reatores químicos BR e PFR no EMSO e GNU Octave. *Enciclopédia Biosfera* **2014**, *10*, 3737. [Link]
- ⁵ EMSO: Environment for Modeling, Simulation, and Optimization. Version 0.9.60. [S.I.]: ALSOC, 2009. [Link]
- ⁶ GNU Octave. Version 4.0.0. John W. Eaton, 2015. [Link]
- ⁷ Kaskes, B.; Vervloet, D.; Kapteijn, F.; Ommen, J. R. Numerical optimization of a structured tubular reactor for Fischer-Tropsch synthesis. *Chemical Engineering Journal* **2016**, *283*, 1465. [CrossRef]
- ⁸ Microsoft Office Professional Plus 2010: Microsoft Excel. Version 14.0.6023.1000. [S.I.]: Microsoft Corporation, 2010.
- ⁹ Mcdonough, J. R.; Phan, A. N.; Reay, D. A.; Harvey, A. P. Passive isothermalisation of an exothermic reaction in flow using a novel "Heat Pipe Oscillatory Baffled Reactor (HPOBR)". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* **2016**, *110*, 201. [CrossRef]
- ¹⁰ Wang, C.; Chen, L.; Xia, S.; Sun, F. Maximum production rate optimization for sulphuric acid decomposition process in tubular plug-flow reactor. *Energy* **2016**, *99*, 152. [CrossRef]
- ¹¹ Haarlemmer, G.; Bensabath, T. Comprehensive Fischer-Tropsch reactor model with non-ideal plug flow and detailed reaction kinetics. *Computers and Chemical Engineering* **2016**, *84*, 281. [CrossRef]
- ¹² Hou, B.; Ye, R.; Huang, Y.; Wang, X.; Zhang, T. A CFD model for predicting the heat transfer in the industrial scale packed bed. *Fluid Dynamics and Transport Phenomena* **2017**, *26*, 228. [CrossRef]