

08 a 11 de Outubro de 2018
Instituto Federal Fluminense
Búzios - RJ

ESTUDO DO MODELO DE DISPERSÃO PARA O REATOR TUBULAR COM RECHEIO (PBR)

Mariana Oliveira Marques¹ – marianamarques809@yahoo.com.br

Thalles de Assis Cardoso Gonçalves¹ – thalles.ifnmg@gmail.com

Mayara Mendes Costa¹ – mayaramendescosta19@gmail.com

Hugo Lopes Ferreira¹ – hugolopesferreiras2@gmail.com

Robson Antônio de Vasconcelos¹ – robson.vasconcelos@ifnmg.edu.br

¹ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Norte de Minas Gerais *Campus Montes Claros* – Montes Claros, MG, Brasil

Resumo. O reator químico é um equipamento onde ocorrem reações químicas, onde uma espécie molecular é transformada em outra espécie molecular. O reator tubular com recheio (PBR) é um equipamento muito utilizado na engenharia química. O presente trabalho objetivou comparar a não idealidade do Reator Tubular Com Recheio Inerte (PBR). Os reatores foram estudados a não idealidade em três volumes diferentes através da comparação de suas conversões não ideal alcançadas experimentalmente. Os experimentos foram efetuados no módulo didático do laboratório de Cinética e Cálculos de Reatores, do Instituto Federal do Norte de Minas Gerais – IFNMG – Campus Montes Claros. A partir dos experimentos, determinou-se a Distribuição do Tempo de Residência (DTR) para cada reator, e a partir da DTR encontrou-se o modelo de dispersão para prever a conversão não ideal de cada um dos reatores. E ao comparar as conversões para os diferentes volumes do reator PBR, percebe-se que a conversão é maior de acordo aumenta o volume do reator, e também isso se deve ao maior contato entre os reagentes no reator com presença de recheio inerte, uma vez que o recheio promove um aumento do nível de mistura.

Palavras-chaves: Conversão, Dispersão, Reator tubular com Recheio.

1. INTRODUÇÃO

O reator químico é um equipamento onde ocorrem reações químicas, onde uma espécie molecular é transformada em outra espécie molecular. Existem diferentes tipos de reatores, entre eles o reator tubular com recheio (PBR) (Laco, 2014).

O Reator (PBR) consiste em um tubo cilíndrico preenchido com Recheio, onde os reagentes são continuamente consumidos à medida que eles escoam ao longo do reator, seja o recheio catalítico ou inerte.

O recheio catalítico é quando esse participa da reação, acelerando a reação. Já o recheio inerte não participa da reação, mas pode intensificar o nível de mistura entre os reagentes.

Segundo Oliveira (2016), em um reator de escoamento real, cada elemento de fluido percorre um caminho diferente, e, por isso, possuem tempos de residência diferentes. Assim, no desenvolvimento de um reator com escoamento real, é preciso investigar maneira como o fluido escoam em seu interior, sendo necessária uma análise do escoamento do fluido a partir da determinação do tempo que cada porção de fluido permanece dentro do reator.

A distribuição dos tempos de residência (DTR) das porções do fluido possibilita analisar o comportamento dos sistemas contínuos reais e, assim, diagnosticar possíveis problemas de escoamento no interior do vaso.

Os módulos didáticos de reatores são de grande importância para o conhecimento prático dos acadêmicos, uma vez que, através de dados obtidos experimentalmente podem ser calculados a conversão ideal e não ideal dos reatores, a eficiência do módulo, e também é uma das oportunidades para se comparar os resultados experimentais com a literatura.

Com as diferentes configurações do módulo, pode ser feito o estudo da conversão dos mesmos. As conversões para cada reator são diferentes, e para cada configuração pode haver uma modelagem diferente.

2. REFERÊNCIAL

Nos Reatores devido a não idealidade o fluido geralmente não escoam uniformemente ao longo do reator.

2.1 Distribuição do Tempo de Residência

Devido os caminhos preferenciais, as moléculas que percorrem a direção axial permanecem menos tempo no reator do que aquelas que escoam nas regiões de alta resistência ao escoamento. Segundo Fogler (2009), em um reator de escoamento empistonado, todos os átomos do material que deixam o reator têm permanecido em seu interior exatamente o mesmo tempo, conforme Figura 1.

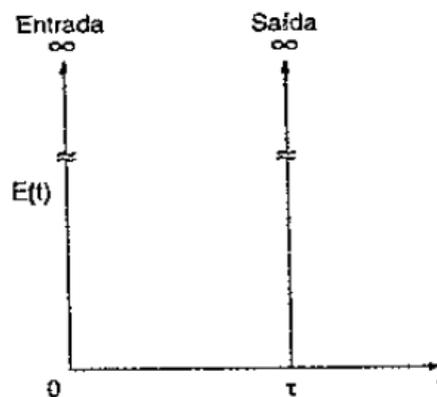


Figura 1- Resposta de um escoamento empistonado ideal a uma perturbação em pulso.

Fonte: FOGLER, (2009).

O escoamento de um fluido em um reator pode sofrer modificações devido às características do equipamento. Segundo Levenspiel (2000), os principais problemas de escoamento estão intimamente ligados ao aumento de escala, pois quanto maior a capacidade de processo de um reator, mais difícil se torna o escoamento de todas as variáveis importantes envolvidas no processo.

Geralmente, a variável não controlada no aumento de escala é a grandeza da não idealidade do escoamento. Assim, a necessidade de um estudo de como o fluido escoar através de um reator para o seu dimensionamento. Sendo o tempo que os átomos permanecem no decorrer do reator é chamado de Distribuição do Tempo de Residência (DTR).

Para o estudo da DTR, pode ser utilizado o método de pulso. A técnica de pulso foi escolhida para ser utilizada por ser simples, além de ser a técnica experimental mais utilizada para estudar a DTR. Segundo Oliveira (2016), para o método o traçador, substância química inerte, é injetado na entrada do reator e então as concentrações deste traçador são medidas na corrente do efluente em função do tempo.

A figura 1 representa o comportamento ideal para um reator empistonado ideal a uma perturbação pulso. Ao injetar o traçador no reator, ele tem uma resposta imediata na saída do reator, para um comportamento ideal.

O desvio no reator é considerado também como sendo os caminhos preferenciais. E a zona morta causada pelo volume morto. Ambos são utilizados para diagnosticar a não idealidade do reator, e a DTR pode ser usada para prever a conversão em reatores existentes, de acordo Figura 2.

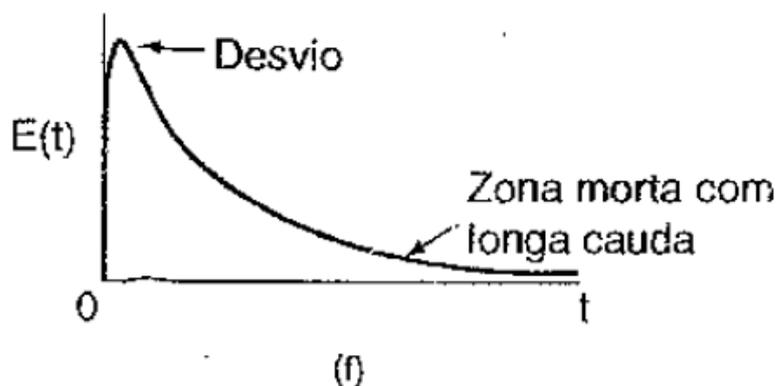


Figura 2- DTR para reator em tanque com caminhos preferenciais e zona morta.

Fonte: FOGLER, (2009).

Na perturbação em Pulso, o traçador é repentinamente injetado de uma só vez na corrente de alimentação do reator. Em seguida é feita a coleta de amostras em determinados tempos nos reatores posteriores, para a realização de análise da concentração do traçador no efluente em função do tempo assim plotar o gráfico da $E(t)$ versus tempo, para análise de DTR.

A função que descreve, de maneira quantitativa, quanto tempo diferentes elementos de fluido permanecem no reator é chamado de função de distribuição de tempo de residência $E(t)$. Para uma função pulso com vazão volumétrica constante, essa grandeza pode ser definida conforme a Equação 01 (FOGLER, 2009).

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) dt} \quad (01)$$

Onde t é o (tempo), a integral no denominador da Equação 01 é a curva e a área sob a curva C .

Na ausência de dispersão e para uma vazão volumétrica constante, independente da DTR existente em um reator particular, ideal ou não ideal, esse tempo espacial nominal, τ , é igual ao tempo de residência médio, t_m , (FOGLER, 2009). Sendo que, a curva do traçador ao passar pela saída do reator, poderá ser calculado o tempo médio, t_m , e a variância, σ^2 , respectivamente pelas Equações 02 e 03.

$$t_m = \frac{\int_0^{\infty} t C dt}{\int_0^{\infty} C dt} = \frac{\sum t_i C_i \Delta t_i}{\sum C_i \Delta t_i} \quad (02)$$

Segundo Levenspiel (2000), a variância, cujo à unidade é (tempo)², representa o quadrado do espalhamento da distribuição, à medida que esta passa através da saída do reator.

$$\sigma^2 = \frac{\int_0^{\infty} (t - t_m)^2 C dt}{\int_0^{\infty} C dt} = \frac{\int_0^{\infty} t^2 C dt}{\int_0^{\infty} C dt} - t_m^2 \quad (03)$$

2.2 Modelo de Dispersão

O modelo de dispersão pode ser usado para descrever reatores tubulares não ideais. Onde as moléculas se difundirão avante ficando à frente da velocidade molar média, enquanto outras ficarão atrás (LENSPIEL, 2000).

Os modelos de dispersão são considerados de duas formas: Escoamento aberto, aquele onde a mistura não é perturbada ao passar pela entrada e saída do reator. Outra maneira é o escoamento pistonado onde ocorre a perturbação do lado de fora do reator nesse caso sendo conhecido como reator fechado.

Segundo Levenspiel (2000), foi desenvolvido um modelo de dispersão analítico para reatores de qualquer tipo de condição de entrada e de saída, podendo ser encontrada a conversão não ideal, representada pela Equação 04.

$$a = \sqrt{1 + 4 * \left(\tau \cdot k \cdot \frac{C_{A0}}{P e_r} \right)} \quad (04)$$

$$X = 1 - \frac{4 \cdot a \cdot \exp\left(\frac{P e_r}{2}\right)}{(1 + a)^2 \cdot \exp\left(\frac{P e_r}{2}\right) - (1 - a)^2 \cdot \exp\left(\frac{P e_r}{2}\right)} \quad (05)$$

O número de Peclet, Pe_r , foi resolvido numericamente para injeção em pulso, e uma constante adimensional resultante do traçador efluente. Onde as equações são correspondente para o tempo de residência médio, t_m e a variância, σ^2 .

Para sistemas fechados utiliza Pe_r , e é calculado de acordo Equação 06.

$$\frac{\sigma^2}{t_m^2} = \frac{2}{Pe_r} - \frac{2}{Pe_r^2} (1 - e^{-Pe_r}) \quad (06)$$

Conforme Schmal, (2010), Peclet é muito grande ($Pe \rightarrow \infty$) quando tem-se um comportamento próximo a um PFR e quando muito pequeno ($Pe \rightarrow 0$), aproxima-se de um CSTR ideal.

Para sistemas abertos calcula Peclet Pe_r , através da Equação 07.

$$\frac{\sigma^2}{t_m^2} = \frac{2Pe_r + 8}{Pe_r^2 + 4Pe_r + 4} \quad (07)$$

Então a partir dos dados obtidos na DTR, é possível resolver a Equação 07.

3. METODOLOGIA

A realização do experimento e coleta de dados foi realizada no módulo didático do laboratório de Cinética e Cálculo de Reatores, do Instituto Federal do Norte de Minas Gerais – IFNMG – Campus Montes Claros. Onde o reator tubular com Recheio Inerte (esferas de vidro), modular encamisado, formado por seis módulos de comprimento iguais, sendo que cada um deste reator possui um ponto de coleta de amostras em cada um do mesmo, de acordo Figura 3. Os módulos foram usados para representar reatores com diferentes comprimentos, sendo os reatores analisados denominados R2, R4 e R6.



Figura 3- Reator Tubular Com Recheio Inerte.

A DTR foi determinada utilizando-se a água como fluido de escoamento e o azul de metileno 1,0 g/L (0,10% em peso) como traçador. Assim, injetou-se rapidamente 0,5 mL de traçador na base do módulo um e iniciou-se a contagem do tempo. Ao todo, coletaram-se 14 amostras. Em seguida, determinou-se a concentração do traçador, $C(t)$, através das leituras da absorbância das amostras no espectrofotômetro, fazendo-se uso de uma curva de calibração.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

As curvas de DTR obtidas no experimento mostra o comportamento das moléculas dentro reator. A Figura 4 representa o gráfico da função da DTR *versos* tempo, nos reatores tubulares com recheio inerte.

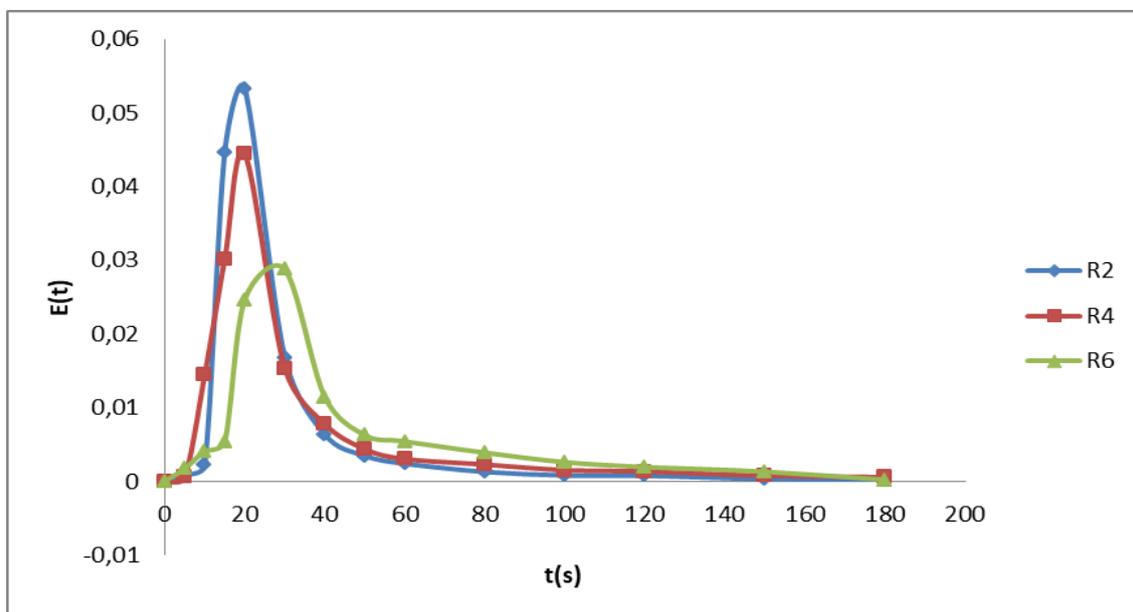


Figura 4- Função da DTR versus Tempo, reator tubular Com recheio (R2, R4 e R6).

É possível perceber que o R2 apresentou um maior pico, o R4 intermediário e o R6 um menor pico.

Os picos representados por cada reator estar conforme o esperado, de acordo o volume de cada um. Uma vez que o reator de menor volume, as moléculas saem mais rápido, o volume intermediário as moléculas demoram um maior tempo para sair, e já o reator com maior volume as moléculas permanecem mais tempo dentro do reator, demorando um maior tempo para sair.

Para os três reatores estudados, a curva de DTR apresentou uma longa cauda, que está relacionada com as zonas de estagnação do reator, e essas zonas mortas representadas para todos os volumes do reator PBR, possivelmente está relacionada ao próprio recheio, que faz com que algumas moléculas tomem caminhos preferenciais e outras formando zonas mortas, provocando uma longa cauda na curva de DTR. Conseqüentemente, seu tempo de permanência no reator se torna maior.

Indicando que as moléculas têm um comportamento conforme o tempo de residência médio encontrado, pois quanto maior o tempo de residência médio encontrado nos reatores,

maior são as áreas das curvas ilustradas pelas Figuras 4. Uma vez que o tempo de residência médio encontrado para os reatores R2, R4 e R6, são respectivamente, 31,21, 37,81 e 49,17.

O gráfico representado pela Figura 4 apresentam comportamentos previstos na literatura, de acordo Figura 2. Uma vez que a injeção em pulso apresenta resposta formando uma curva não uniforme confirmando o comportamento não ideal nos dois tipos de reatores.

Pelo modelo de dispersão utilizado, a conversão não ideal encontradas para os reatores PBR estudados são, R2= 24,62, R4=28,60 e R6=34,91. Para o reator PBR a conversão para o modelo de dispersão implica que se adequa melhor ao reator, pois este modelo leva em consideração os caminhos preferenciais percorridos pelas moléculas.

Pode-se observar a partir do modelo de dispersão para ambos os reatores que conforme aumenta o volume, maior é a conversão. Estes resultados se devem provavelmente ao tempo de permanência das moléculas dentro reator ser maior confirmado pela Figura 4, pois o recheio faz com que as moléculas se interajam mais, aumentando a conversão. O que pode estar relacionado ao maior t_m e uma mistura mais intensa devido ao recheio inerte.

E o modelo de dispersão foi usado somente para o reator com recheio. Uma vez que este modelo é utilizado para reatores com escoamento dispersivo, segundo Fogler (2009), algumas moléculas se difundirão avante ficando à frente da velocidade molar média, enquanto outras ficarão atrás.

5. CONCLUSÃO

Neste trabalho, desenvolveu-se um modelo matemático para a distribuição do tempo de residência e o modelo de dispersão para o módulo didático do reator tubular com recheio inerte do Instituto Federal do Norte de Minas Gerais – Campus Montes Claros.

Utilizando o azul de metileno como traçador, e a DTR foi obtida através dos dados coletados experimentalmente para os reatores PBR, em três volumes diferentes.

Ao analisar volumes diferentes no reator PBR, percebe-se que as conversões não ideal aumenta conforme maior volume. Isso ocorre devido o recheio inerte fazer com que os reagentes tenham um maior contato, e quanto maior o volume, maior é o tempo de contato entre os reagentes.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Instituto Federal do Norte de Minas Gerais – Campus Montes Claros pelo apoio.

REFERÊNCIAS

- AGUIAR, L. *Cinética Química Aplicada*. Universidade de São Paulo Escola de Engenharia de Lorena. 2018.
- FOGLER, H. S. *Elementos de Engenharia das Reações Químicas*. 4. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2009.
- LACO. *Apostila Promopetro: Engenharia das Reações Químicas*. Universidade Federal de Pernambuco. Disponível em: <http://www.laco.ufpe.br/wp-content/uploads/2013/08/reatores.pdf>. 2014.
- LEVENSPIEL, O. *Engenharia das Reações Químicas*. 3. ed. São Paulo: Blucher, 2000.
- OLIVEIRA, R. C. *Estudo da não-idealidade de Reatores Tubulares a Partir da Determinação de suas Distribuições de Tempos de Residência e Validação dos Resultados*. Monografia (Graduação) – Curso de Engenharia Química, Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Norte de Minas Gerais – IFNMG-Campus Montes Claros. 2016.
- SCHMAL, M. *Cinética e Reatores: aplicação na engenharia química*. 1ª ed. Rio de Janeiro: Synergia, 2010.

STUDY OF THE DISPERSION MODEL FOR THE TUBULAR REACTOR WITH (PBR)

Abstract. *The chemical reactor is an equipment where chemical reactions occur, where a molecular species is transformed into another molecular species. The tubular packed reactor (PBR) is a widely used equipment in chemical engineering. The present work aimed to compare the non ideality of the Tubular Reactor With Inert Filling (PBR). The reactors were studied non-ideality in three different volumes by comparing their non-optimally achieved experimental conversions. The experiments were carried out in the didactic module of the Laboratory of Kinetics and Calculations of Reactors, Federal Institute of Northern Minas Gerais - IFNMG - Campus Montes Claros. From the experiments, the Residual Time Distribution (DTR) was determined for each reactor, and from the DTR the dispersion model was found to predict the non-ideal conversion of each of the reactors. When comparing the conversions for the different volumes of the PBR reactor, it is noticed that the conversion is greater according to the volume of the reactor, and this is also due to the greater contact between the reagents in the reactor with the presence of inert filling once that the filling promotes an increase in the mixing level.*

Keywords: *Conversion, dispersion model, tubular reactor with filling.*