

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

## SIMULAÇÃO E ESTUDO DE SENSIBILIDADE PARAMÉTRICA DE UM REATOR DE LEITO FIXO PARA SÍNTESE DE ANIDRIDO FTÁLICO

Lucas S. Cardoso<sup>1</sup> – lucassoarescardoso@hotmail.com

Pedro Leite de Santana<sup>1</sup>

Rogério Luz Pagano<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidade Federal de Sergipe, PEQ – São Cristóvão, SE, Brasil

**Resumo.** Neste trabalho foi simulado um modelo de reator de leito fixo de síntese de anidrido ftálico com refrigeração externa que considera a fase gasosa e sólida, bem como as resistências de troca térmica e mássica entre as fases. A resolução numérica do modelo foi baseada no método das linhas e um estudo de malha e sensibilidade dos parâmetros do modelo foi realizado. O modelo mostrou-se muito sensível à temperatura do refrigerante, à concentração inicial de reagentes e à temperatura de entrada dos reagentes, sendo possível ocorrer descontrole de temperatura em função de pequenas alterações nessas variáveis.

**Palavras-chave:** reator, anidrido ftálico, modelo bitubular, sensibilidade paramétrica.

### 1. INTRODUÇÃO

O anidrido ftálico é um importante produto químico produzido industrialmente a partir de uma reação de combustão parcial de o-xileno na presença de pentóxido de vanádio ( $V_2O_5$ ), o qual atua como catalisador em um reator de leito fixo. Esta reação é conduzida em um reator multitubular, no qual os reagentes passam dentro dos tubos preenchidos com catalisador e um fluido de sal fundido arrefece a parede exterior dos tubos. Os principais problemas operacionais deste reator estão relacionados à possibilidade de ocorrência de pontos quentes no leito catalítico, o que leva a uma diminuição na seletividade da reação, à desativação do catalisador e a situações de descontrole da temperatura, fenômeno conhecido como “runaway” de temperatura.

Sendo o reator de leito fixo um sistema a parâmetros distribuídos, sua modelagem fenomenológica conduz a um conjunto de equações diferenciais parciais tendo o tempo e a posição como variáveis independentes. Ao longo dos anos, muitos trabalhos propuseram várias formas de controlar tais sistemas. Chen & Sun (1991) apresentaram um controle

adaptativo inferencial para reatores de leito fixo. O controle foi alcançado usando um esquema de controle inferencial não linear (*nonlinear inferencial control*) tomando a temperatura de entrada dos reagentes como variável manipulada. Wu e Huang (2003) desenvolveram um regulador de saída de baixa ordem para um reator de leito fixo em escala comercial usando a técnica de interpolação estática para reconciliação de dados. Aksikas *et al.* (2009) apresentaram um controlador para equações diferenciais parciais hiperbólicas lineares com entrada e saída distribuídas, as quais aparecem nos modelos para reatores de leito fixo. O controle foi alcançado usando um espaço infinito-dimensional de Hilbert com entrada e saída infinito-dimensionais (distribuídas). Jesus (2013) utilizou lógica *fuzzy* no controle de um reator de leito fixo para síntese de anidrido ftálico. O controle apresentado é constituído por dois controladores do tipo *fuzzy*-PI em cascata, sendo que a malha principal controla a concentração de saída do anidrido e a malha secundária controla a temperatura do leito, mediante manipulação da temperatura de entrada do fluido refrigerante. Zhou *et al.* (2015) desenvolveram um método para estabilização do controle de reatores tubulares baseado em uma função de Lyapunov, em que o controle é alcançado considerando a atuação distribuída da “camisa” do reator. Nájera *et al.* (2016) desenvolveram um controle não linear *feedforward-feedback* avançado (FF-SF) baseado num modelo simplificado para um reator de leito fixo. O comportamento do controlador avançado foi reproduzido com um controlador de temperatura industrial *feedforward* e compensação dinâmica de *setpoint*.

No contexto do controle de reatores de leito fixo, o conhecimento sobre o comportamento do sistema constitui o passo fundamental para a definição de estratégias eficientes de controle. Esse conhecimento pode ser conseguido sistematicamente através da modelagem e simulação do sistema. Este trabalho apresenta um estudo de sensibilidade paramétrica de um reator de leito fixo para produção de anidrido ftálico. Apresentam-se a modelagem dinâmica, a resolução do modelo utilizando o método das linhas e alguns resultados que mostram o comportamento do sistema frente a mudanças nas variáveis e parâmetros relevantes.

## 2. METODOLOGIA

A oxidação do o-xileno a anidrido ftálico envolve uma cinética com várias etapas e intermediários, como descrito em Papageorgiou (1994). Um esquema simplificado desta reação, com características fortemente exotérmicas, considera três reações básicas: a oxidação parcial do o-xileno a anidrido ftálico, a oxidação completa do anidrido ftálico a dióxido de carbono e a reação completa de oxidação do o-xileno, de acordo com as seguintes equações químicas:



Para fins de simulação e controle, muitos autores (Chen & Sun, 1991; Wu & Huang, 2003; Jesus, 2013) utilizaram esse esquema reacional, com cinéticas de pseudo-primeira ordem. Esse esquema foi considerado nesse trabalho, com taxas de reação dadas por:

$$r_{1p} = k_1 \exp\left(-\frac{E_1}{RT_p}\right) C_{Ap} \quad (4)$$

$$r_{2p} = k_2 \exp\left(-\frac{E_2}{RT_p}\right) C_{Bp} \quad (5)$$

$$r_{3p} = k_3 \exp\left(-\frac{E_3}{RT_p}\right) C_{Ap} \quad (6)$$

Sendo  $E_i$  a energia de ativação da reação  $i$ ,  $k_i$  o fator de frequência da reação  $i$ ,  $T_p$  a temperatura do catalisador,  $C_{Ap}$  a concentração na superfície do catalisador e  $R$  a constante universal dos gases. Os valores usados nas simulações para esses e outros parâmetros do modelo estão descritos no Apêndice A.

Um reator multitubular pode ser modelado considerando um único tubo e assumindo que condições idênticas ocorrem em todos os tubos que constituem o sistema. Para a modelagem do reator tomou-se como base o modelo bitubular apresentado por Jesus (2013), adicionando um termo de dispersão axial de calor na fase sólida e assumido uma condição adiabática na extremidade do reator. Como hipóteses de modelagem, considerou-se: (i) gradientes radiais de temperatura e concentração desprezíveis; (ii) efeito de dispersão axial de calor, (iii) fluxo com queda de pressão desprezível, (iv) presença de resistência externa à transferência de calor e massa entre as fases, e (v) reação catalisada por sólido não poroso. Além disso, considerou-se que a mistura reacional segue o comportamento de gás ideal e que as propriedades físicas e os coeficientes de troca térmica são constantes ao longo do reator.

Um modelo unidimensional heterogêneo transiente foi obtido, expressando os princípios de conservação de massa e energia nas fases fluida e sólida do reator, dado pelo seguinte sistema de equações diferenciais parciais:

$$\varepsilon \frac{\partial C_A}{\partial t} = -v_g \frac{\partial C_A}{\partial z} - (k_{gp} a_s)_A (C_A - C_{Aps}) \quad (7)$$

$$\frac{\partial C_{Ap}}{\partial t} = \frac{(k_{gp} a_s)_A}{1 - \varepsilon} (C_A - C_{Ap}) - (r_{1p} + r_{3p}) \mu C_{cat} \quad (8)$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = -v_g \frac{\partial C_B}{\partial z} - \frac{(k_{gp} a_s)_B}{1 - \varepsilon} (C_B - C_{Bp}) \quad (9)$$

$$\frac{\partial C_{Bp}}{\partial t} = \frac{(k_{gp} a_s)_B}{1 - \varepsilon} (C_B - C_{Bp}) - (r_{2p} - r_{1p}) \mu C_{cat} \quad (10)$$

$$\varepsilon \rho_g C_{pg} \frac{\partial T}{\partial t} = -v_g \rho_g C_{pg} \frac{\partial T}{\partial z} - (h_{gp} a_s) (T - T_p) - \frac{4U}{D_{ii}} (T - T_r) \quad (11)$$

$$\rho_s C_{pp} \frac{\partial T_p}{\partial t} = -\lambda_{eff} \frac{\partial^2 T_p}{\partial z^2} + \frac{(h_{gp} a_s)}{1 - \varepsilon} (T - T_p) + \mu C_{cat} [(-\Delta H_1) r_{1p} + (-\Delta H_2) r_{2p} + (-\Delta H_3) r_{3p}] \quad (12)$$

$$\rho_r C_{pr} \frac{\partial T_r}{\partial t} = v_r \rho_r C_{pr} \frac{\partial T_r}{\partial z} + \frac{4D_{ii}U}{D_{ie}^2 - D_{ei}^2} (T - T_r) \quad (13)$$

sendo  $C_A$  a concentração do reagente e  $C_B$  a concentração do produto, na fase gasosa;  $C_{cat}$  a concentração do catalisador;  $C_{Ap}$  a concentração do reagente e  $C_{Bp}$  a concentração do produto, na fase sólida;  $C_p$  a capacidade calorífica: do gás ( $C_{pg}$ ), da partícula ( $C_{pp}$ ) e do refrigerante ( $C_{pr}$ );  $D_{ei}$  o diâmetro externo do tubo interno,  $D_{ie}$  o diâmetro interno do tubo externo,  $D_{ii}$  o diâmetro interno do tubo interno;  $(h_{gp} a_s)$  o coeficiente volumétrico de troca térmica gás-sólido;  $(k_{gp} a_s)$  o coeficiente volumétrico de troca mássica gás-sólido;  $\lambda_{eff}$  a condutividade

efetiva do leito;  $t$  o tempo;  $T$  a temperatura: do gás ( $T$ ), do refrigerante ( $T_r$ ) e do sólido ( $T_p$ );  $U$  o coeficiente global de troca térmica;  $v_g$  a velocidade do gás;  $v_r$  a velocidade do fluido refrigerante;  $z$  a coordenada espacial;  $\varepsilon$  a porosidade do leito;  $(-\Delta H_i)$  o calor de reação volumétrico da reação  $i$  (1, 2, 3);  $\mu$  a atividade catalítica; e  $\rho$  a densidade: da fase gasosa  $\rho_g$ , da partícula  $\rho_p$ , do fluido refrigerante  $\rho_r$ .

Para a solução do sistema de equações diferenciais são necessárias condições de contorno e iniciais.

Na entrada do reator têm-se as seguintes condições de contorno:

$$\begin{aligned} C_A(t, 0) = C_{A0}, \quad C_B(t, 0) = 0, \quad C_{Ap}(t, 0) = C_{A0}, \quad C_{Bp}(t, 0) = 0, \\ T(t, 0) = T_0, \quad \frac{\partial T_p}{\partial z}(t, 0) = 0, \quad T_r(t, 0) = T_{r0}. \end{aligned}$$

As condições iniciais são:

$$\begin{aligned} C_A(0, z) = 0, \quad C_{Ap}(0, z) = 0, \quad C_B(0, z) = 0, \quad C_{Bp}(0, z) = 0, \\ T(0, z) = T_0, \quad T_p(0, z) = T_0, \quad T_r(0, z) = T_0. \end{aligned}$$

Estas condições iniciais adotadas correspondem a assumir como partida um meio reacional inerte e isotérmico, cuja evolução temporal para determinadas condições de entrada leva, para tempos longos, à condição estacionária correspondente a estas condições.

O adimensionamento do modelo facilita a resolução numérica do mesmo reconfigurando as variáveis de modo que apresentem uma mesma ordem de grandeza. Esse adimensionamento foi realizado com as seguintes transformações:

$$\begin{aligned} y_1 = \frac{C_A}{C_{A0}}, \quad y_2 = \frac{C_{Ap}}{C_{A0}}, \quad y_3 = \frac{C_B}{C_{A0}}, \quad y_4 = \frac{C_{Bp}}{C_{A0}}, \quad y_5 = \frac{T}{T_0}, \\ y_6 = \frac{T_p}{T_0}, \quad y_7 = \frac{T_r}{T_0}, \quad \theta = \frac{v_g t}{L}, \quad \zeta = \frac{z}{L}. \end{aligned}$$

A substituição destas variáveis conduz às seguintes equações adimensionais para o modelo dinâmico do reator:

$$\frac{\partial y_1}{\partial \theta} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial y_1}{\partial \zeta} - \frac{\alpha_1}{\varepsilon} (y_1 - y_2) \quad (14)$$

$$\frac{\partial y_2}{\partial \theta} = \frac{\alpha_1}{1 - \varepsilon} (y_1 - y_2) - \left[ \beta_1 \exp\left(-\frac{y_1}{y_6}\right) + \beta_3 \exp\left(-\frac{y_3}{y_6}\right) \right] y_2 \quad (15)$$

$$\frac{\partial y_3}{\partial \theta} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial y_3}{\partial \zeta} - \frac{\alpha_2}{\varepsilon} (y_3 - y_4) \quad (16)$$

$$\frac{\partial y_4}{\partial \theta} = \frac{\alpha_2}{(1 - \varepsilon)} (y_3 - y_4) - \beta_2 \exp\left(-\frac{y_2}{y_6}\right) y_4 + \beta_1 \exp\left(-\frac{y_1}{y_6}\right) y_2 \quad (17)$$

$$\frac{\partial y_5}{\partial \theta} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial y_5}{\partial \zeta} - \frac{\alpha_3}{\varepsilon} (y_5 - y_6) - \frac{\varphi_1}{\varepsilon} (y_5 - y_7) \quad (18)$$

$$\frac{\partial y_6}{\partial \theta} = \lambda \frac{\partial^2 y_6}{\partial \zeta^2} + \frac{\alpha_4}{(1-\varepsilon)}(y_5 - y_6) + \beta_1 \delta_1 \exp\left(-\frac{\gamma_1}{y_6}\right) y_2 + \beta_2 \delta_2 \exp\left(-\frac{\gamma_2}{y_6}\right) y_4 + \beta_3 \delta_3 \exp\left(-\frac{\gamma_3}{y_6}\right) y_2 \quad (19)$$

$$\frac{\partial y_7}{\partial \theta} = -\omega \frac{\partial y_7}{\partial \zeta} + \varphi_2 (y_5 - y_7) \quad (20)$$

Os parâmetros adimensionais que aparecem nas equações são dados pelas relações:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{L(k_{gp}a_s)_A}{v_g}, & \alpha_2 &= \frac{L(k_{gp}a_s)_B}{v_g}, & \alpha_3 &= \frac{L(h_{gp}a_s)}{v_g \rho_g C_{pg}}, & \alpha_4 &= \frac{L(h_{gp}a_s)}{v_g \rho_s C_{ps}}, & \gamma_1 &= \frac{E_1}{RT_0}, \\ \beta_1 &= \frac{\mu L C_{cat} k_{01}}{v_g}, & \beta_2 &= \frac{\mu L C_{cat} k_{02}}{v_g}, & \beta_3 &= \frac{\mu L C_{cat} k_{03}}{v_g}, & \lambda &= \frac{\lambda_{eff}}{L v_g \rho_s C_{ps}}, & \gamma_2 &= \frac{E_2}{RT_0}, \\ \delta_1 &= \frac{(-\Delta H)_1 C_{A0}}{\rho_s C_{ps} T_0}, & \delta_2 &= \frac{(-\Delta H)_2 C_{A0}}{\rho_s C_{ps} T_0}, & \delta_3 &= \frac{(-\Delta H)_3 C_{A0}}{\rho_s C_{ps} T_0}, & \omega &= \frac{v_{rf}}{v_g}, & \gamma_3 &= \frac{E_3}{RT_0}, \\ \varphi_2 &= \frac{4D_{ii}UL}{v_g \rho_{rf} C_{prf} (D_{ie}^2 - D_{ei}^2)}, & \varphi_1 &= \frac{4UL}{v_g \rho_g C_{pg} D_{ii}}. \end{aligned}$$

A resolução numérico-computacional do modelo foi feita pelo método das linhas, tomando-se fórmulas de diferenças finitas para discretizar a coordenada espacial. O comprimento total do reator foi dividido em subintervalos definindo uma malha de discretização formada por N+1 pontos, que incluem a entrada e a saída do reator. Na entrada têm-se as condições fixas correspondentes às condições de contorno acima indicadas. Para a discretização nos pontos internos utilizou-se uma fórmula de diferença centrada e no ponto correspondente à saída do reator utilizou-se uma fórmula de diferença regressiva, ambas de segunda ordem (incluindo informação em três pontos para o cálculo de cada derivada). Verificou-se que o esquema de discretização por meio de fórmulas de diferenças simples apresenta desempenho similar àquele empregado por Jesus (2013), que utilizou colocação ortogonal para a discretização.

A aplicação do método das linhas transforma o sistema de equações diferenciais parciais envolvendo as variáveis z (coordenada axial) e t (tempo) em um sistema de equações diferenciais ordinárias tendo o tempo como variável independente, e cuja integração fornece a evolução das variáveis dependentes em cada ponto da malha de discretização. O sistema de EDO's resultante foi resolvido com o solucionador de sistemas de EDO's do MATLAB 2015 *ode23s*. Essa função utiliza o método de Rosenbrock de 2ª ordem e passo único, a qual é recomendada para solucionar sistemas rígidos.

A análise de sensibilidade foi realizada considerando o perfil estabilizado obtido por simulação do modelo dinâmico do reator para tempos longos, conforme Fig 1b. A sensibilidade do modelo foi calculada na posição espacial referente ao ponto de maior temperatura dos reagentes utilizando a derivada numérica da temperatura dos reagentes em relação aos parâmetros estudados.

### 3. RESULTADOS

A partir de várias simulações notou-se que um dado número de pontos de malha se mostra suficiente para descrever o comportamento de uma variável (concentração do reagente), mas insuficiente para outras (temperatura dos reagentes), dependendo também dos valores das variáveis de entrada ( $C_{A0}$ ,  $T_0$ ,  $T_{r0}$ ) e do parâmetro de troca térmica ( $U$ ). Uma malha com 80 pontos

foi suficiente para realizar as análises em toda a faixa de valores testados para as variáveis de entrada e parâmetros, conforme Fig 1, a qual também apresenta o perfil térmico de referência para o reator e o tempo para estabilização do modelo.

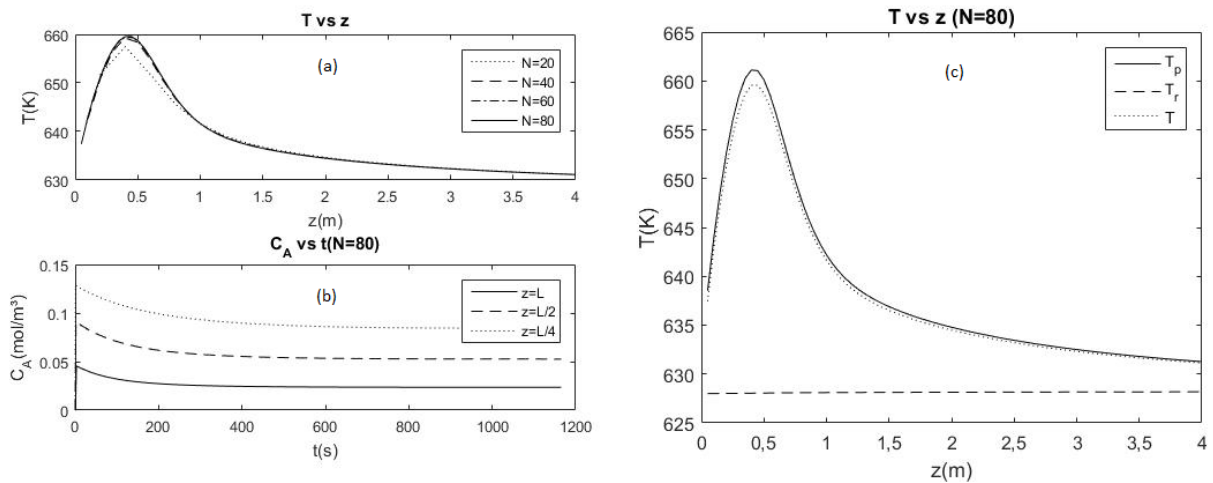


Figura 1: (a) Temperatura do gás ao longo do reator para diferentes tamanhos de malha; (b) tempo para obtenção do estado estacionário ilustrado pela concentração em pontos do reator e (c) perfil térmico do reator na condição de referência.

Fez-se um estudo do comportamento e sensibilidade paramétrica do reator através de diversas simulações. Algumas variáveis apresentaram baixíssima influência sobre o perfil de temperatura no reator, dentre as quais podem ser destacadas: a velocidade do fluido refrigerante e a condutividade efetiva do leito. Para as condições simuladas, típicas de uma condição industrial, a capacidade térmica do fluido refrigerante é muito maior que a dos reagentes, mantendo a temperatura do refrigerante praticamente inalterada ao longo do reator, o que faz o sistema se comportar como se a troca térmica se desse entre o meio reacional e um meio com temperatura constante, situação esta considerada por Wu e Huang (2003).

O coeficiente de transferência de calor entre o fluido e o catalisador mostrou pouca influência no comportamento do reator na faixa de valores testados (Fig. 2a), o que significa que não há resistências térmicas e mássicas consideráveis entre estas fases, na condição operacional considerada. Por isso, tem-se uma pequena diferença de temperatura entre as fases sólida e fluida como pode ser verificado na Fig. 1c. Quanto ao parâmetro associado à dispersão axial de calor, para os valores simulados, verificou-se uma influência deste nos perfis de temperatura, notando-se uma redução mais intensa no pico de temperatura para maiores valores do coeficiente de dispersão axial de calor, como pode ser observado na Fig. 2b. Dentre os parâmetros que possuem maior influência no reator estão a temperatura do refrigerante, temperatura e concentração de entrada dos reagentes e o coeficiente global de transferência de calor, os quais possuem sensibilidades relativas  $S$  descritas na Tabela 1.

Tabela 1: Sensibilidade do modelo em relação aos parâmetros mais importantes.

$S_{T_0}^{Tmax}$	$S_{T_{r0}}^{Tmax}$	$S_{C_{A0}}^{Tmax}$	$S_U^{Tmax}$
0,29	3,96	1,09	-0,07

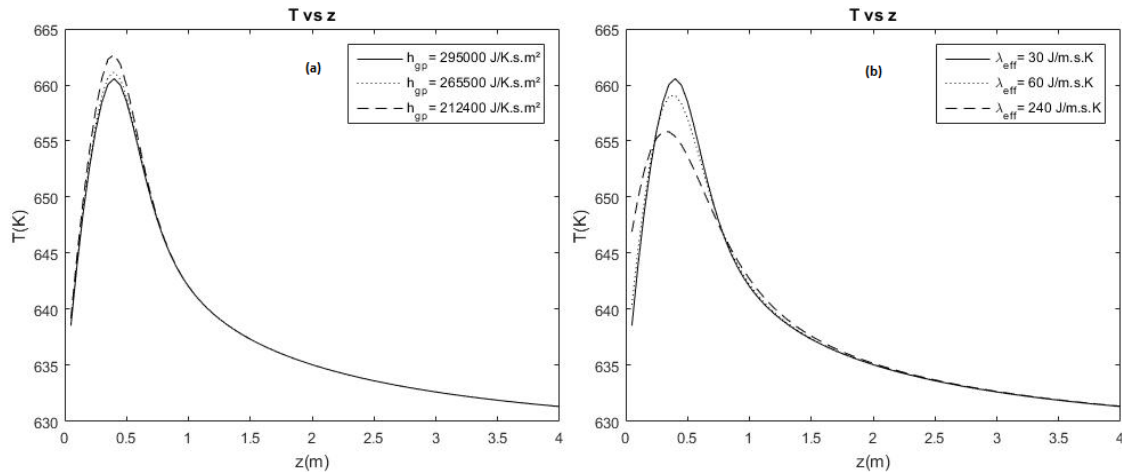


Figura 2: (a) Perfil de temperatura para diferentes condutividades térmicas do leito; (b) perfil de temperatura para diferentes coeficientes de transferência de calor gás-sólido.

O coeficiente global de troca térmica tem uma forte influência no perfil de temperatura ao longo do reator, dentro da faixa de valores apresentados por Chen e Sun (1991). A diminuição das condições de troca térmica do reator estreita as faixas de operação das variáveis, gerando uma situação em que pequenas mudanças nas variáveis de entrada conduzem ao descontrole da temperatura, como mostra a Fig. 3.

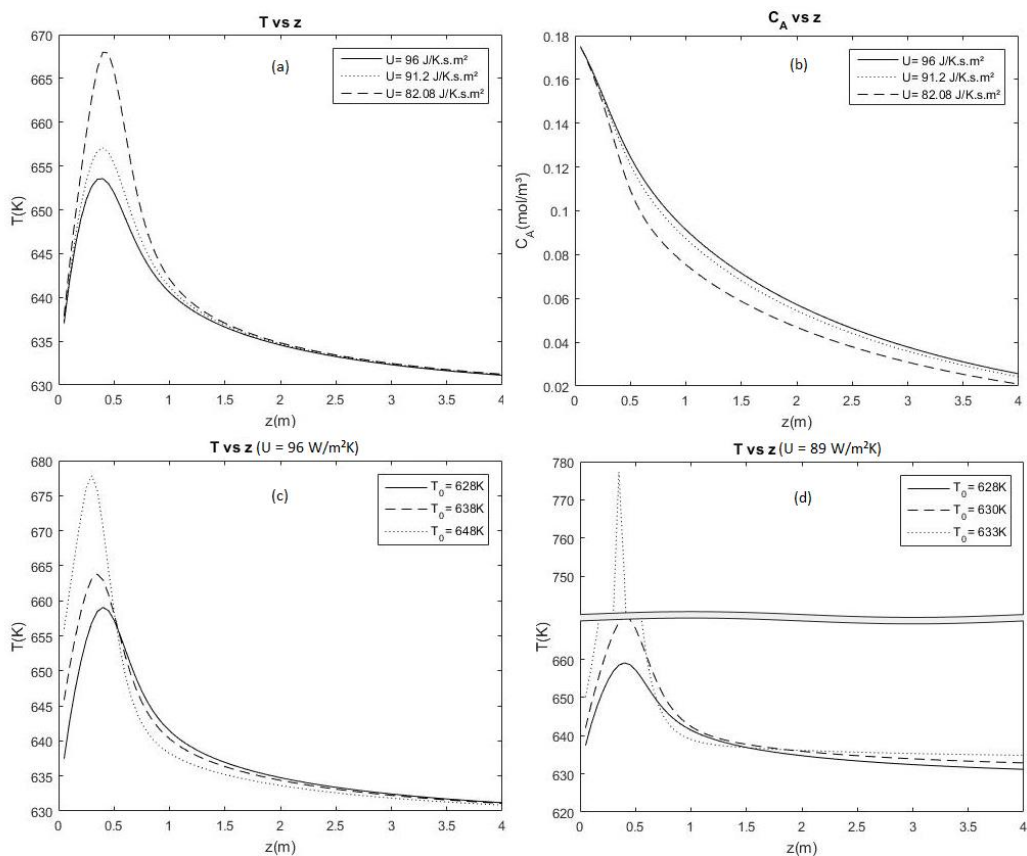


Figura 3: (a) perfil de temperatura e (b) perfil de concentração para diferentes valores do coeficiente global de troca térmica; (c) e (d) perfis de temperatura para valores diferentes de  $U$  em função da temperatura de entrada.

A velocidade de escoamento da mistura gasosa reacional, assim como a velocidade do fluido refrigerante, apresenta pouca influência no valor do pico de temperatura que ocorre no perfil de temperatura, mas promove um pequeno deslocamento deste perfil, afastando-o da entrada do reator (Fig.4a). A conversão do reagente aumenta na medida em que a velocidade de escoamento da mistura diminui (maiores tempos de residência), como pode ser observado a partir dos perfis de concentração mostrados na Fig. 4b. Neste trabalho não se considerou a influência das velocidades de escoamento no coeficiente global de troca térmica.

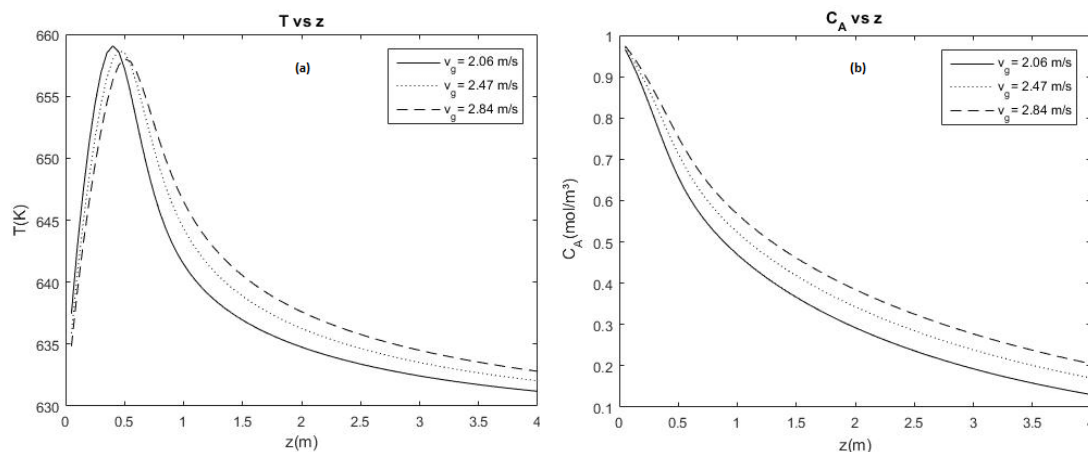


Figura 4: (a) perfil de temperatura e (b) perfil de concentração em função da velocidade.

A temperatura do fluido refrigerante tem uma forte influência no perfil de temperatura. Para baixas temperaturas de entrada (615 K), o reator assume perfis estacionários de baixas conversão e temperatura. Em contrapartida, uma reação fora de controle ocorre quando a temperatura é elevada a 635 K e tem-se uma situação de *runaway*, um aumento excessivo da temperatura se estabelece, conforme mostrado na Fig. 5a.

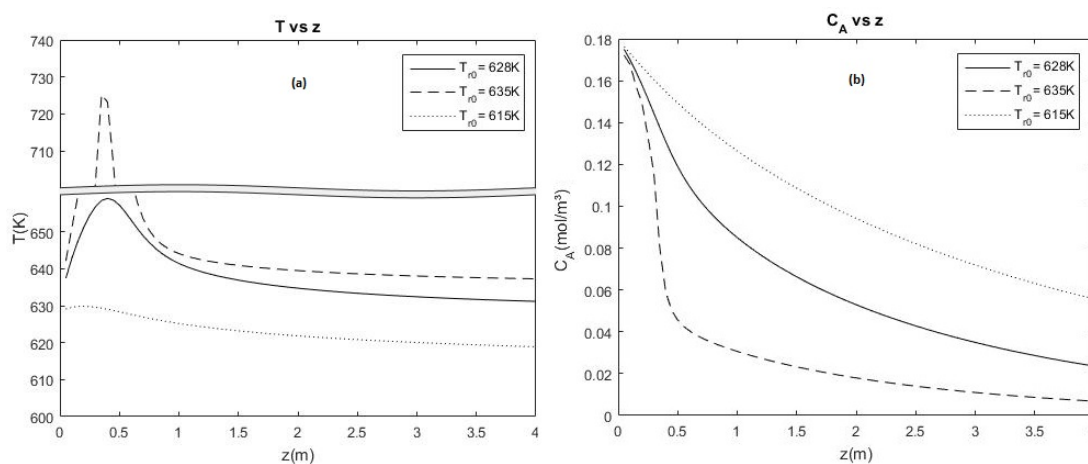


Figura 5: (a) perfil térmico e (b) perfil de concentração do reator em função temperaturas do refrigerante.

A concentração dos reagentes na alimentação apresentou grande influência no perfil de temperatura (Fig. 6). Variações de 10% podem gerar descontrole de temperatura e causar os efeitos indesejáveis de desativação do catalisador e queda de seletividade da reação.



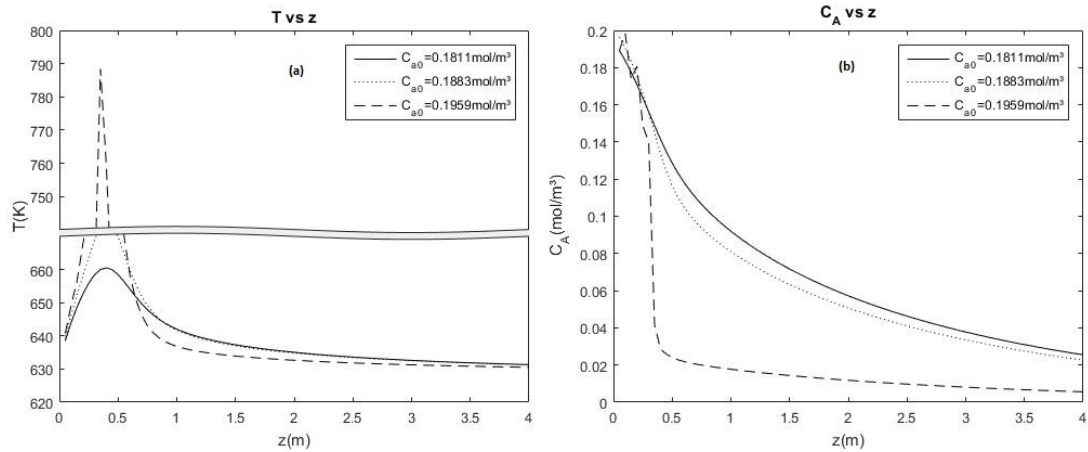


Figura 6: (a) perfil de temperatura e (b) perfil de concentração do reagente em função da concentração de entrada do reagente.

O aumento na temperatura de entrada dos reagentes provoca uma elevação no valor do pico de temperatura, e, dependendo das condições de troca térmica com o fluido refrigerante, é possível observar um deslocamento do ponto quente mais para a entrada do reator. Esse efeito é mais pronunciado quando o coeficiente global de troca térmica tem valores elevados, como pode ser visto anteriormente na Fig. 3c. Em situações nas quais o coeficiente global tem menores valores, o reator entra em situação de descontrole para temperaturas de entrada bem menores e esse efeito de deslocamento não é observado, como mostra a Fig. 7a.

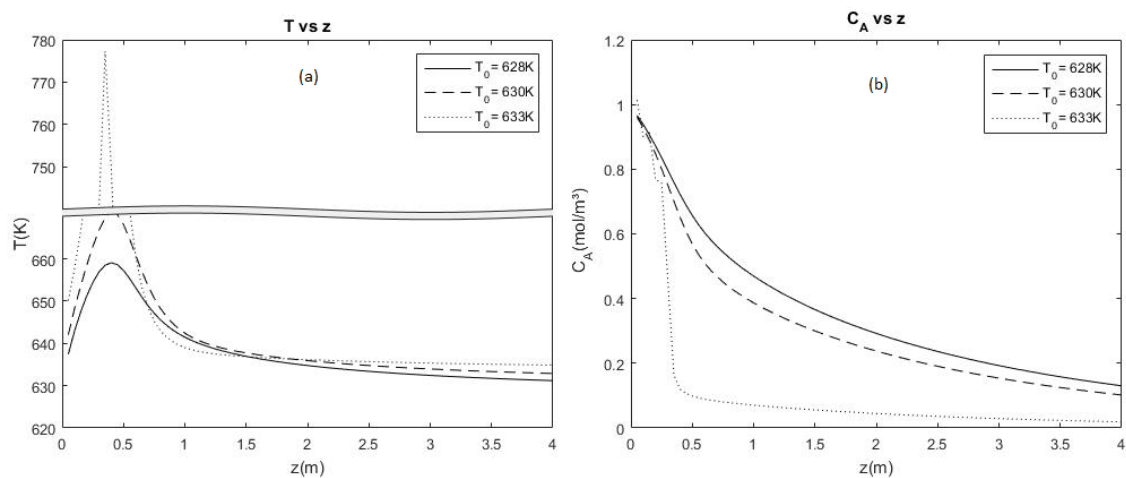


Figura 7: (a) perfil de temperatura e (b) perfil de concentração em função da temperatura de entrada do reagente.

#### 4. CONCLUSÃO

Um estudo de sensibilidade dos principais parâmetros operacionais de um reator de leito fixo foi realizado utilizando um modelo matemático. O perfil térmico no reator é fortemente influenciado pela temperatura do refrigerante e pela concentração e temperatura de entrada dos reagentes, sendo possível constatar o fenômeno de *runaway* frente a uma pequena variação nessas variáveis. Foi possível verificar que o controle torna-se crucial quando as condições de troca térmica no reator não estão numa condição ótima, pois nessas situações os

valores de referência das principais variáveis (temperatura de entrada dos reagentes, temperatura do fluido refrigerante e concentração de entrada dos reagentes) ficam muito mais próximos dos valores críticos em que ocorre a possibilidade de *runaway*, o que faz com que a elaboração de estratégias de controle que evitem o aumento excessivo de temperatura sem prejudicar a produtividade e seletividade da reação de grande importância prática.

## REFERÊNCIAS

- Anastasov, A.S.; Elenkov, D. e Nikolov, V. (1988), “A Model Study of a Conventional fixed bed Tubular Reactor with a Catalyst Layer on the inside tube Wall”, *Chemical Engineering Process*, Vol.23, 203-211.
- Aksikas, I.; Fuxman, A.; Forbes, J.F.; Winkin, J.J. (2009), “LQ control design of a class of hyperbolic PDE systems: Application to fixed bed-reactor”, *Automatica*, Vol. 45, 1542-1548.
- Chen, C. e Sun, C. (1991), “Adaptative inferential control of packed-bed reactors”, *Chemical Engineering Science*, Vol.46, No. 4, 1041-1054.
- Jesus, J.M. (2013), *Modelagem matemática de um reator de leito fixo para síntese de anidrido ftálico e controle utilizando estratégias convencionais e lógica fuzzy*. Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.
- Nájera, I.; Álvarez, J.; Baratti, R.; Gutiérrez, C. (2016), “Control of an exothermic packed-bed tubular reactor”, *IFAC-PapersOnLine*, Vol.49, No.7, 278–283.
- Papageogiou, J.N.; Abello, M.C.; Froment, G.F. (1994), “Kinetic modeling of the catalytic oxidation of o-xylene over the industrial V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-TiO<sub>2</sub> (anatase) catalyst”, *Applied Catalysis A: General*. Vol.120, 17-43.
- Pitarch, J.L.; Rakhshan, M.; Mardani, M.M.; Sadegui, M.S.; Prada, C.D. (2016) “Distributed Nonlinear Control of a Plug-flow Reactor Under Saturation” *IFAC-PapersOnLine*, Vol.49, No.24, 087–092.
- Wu, W. e Huang, M.Y. (2003), “Nonlinear inferential control for an exothermic packed-bed reactor: geometrics approaches”, *Chemical Engineering Science*, Vol.58, 2023 – 2034.
- Zhou, W.; Hamroun, B.; Gorrec, Y. L. (2015), “Lyapunov based nonlinear control of tubular chemical reactors”, *IFAC-PapersOnLine*. Vol.48, No.8, 1045–1050.

## APÊNDICE A

Valores dos parâmetros usados nas simulações.

L	4 m	$k_1$	$2,418 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$	$(k_{gp} a_s)_B$	$79 \text{ s}^{-1}$
$D_{ei}$	0,030 m	$k_2$	$2,706 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$	$(h_{gp} a_s)$	$2,95 \times 10^5 \text{ J/s.K.m}^3$
$D_{ie}$	0,045 m	$k_3$	$1,013 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$	U	$89 \text{ J/s.m}^2\text{K}$
$D_{ii}$	0,025 m	$\Delta H_1$	$1,285 \times 10^6$	$\rho_g$	$0,582 \text{ kg/m}^3$
R	8,314 J/mol.k	$\Delta H_2$	$3,276 \times 10^6$	$\rho_s$	$2000 \text{ kg/m}^3$
$E_1$	$1,129 \times 10^5 \text{ J/mol}$	$\Delta H_3$	$4,561 \times 10^6$	$\rho_r$	$1851 \text{ kg/m}^3$
$E_2$	$1,313 \times 10^5 \text{ J/mol}$	$\varepsilon$	0,35	$C_{pg}$	$1045 \text{ J/kg.K}$
$E_3$	$1,129 \times 10^5 \text{ J/mol}$	$(k_{gp} a_s)_A$	$83 \text{ s}^{-1}$	$C_{ps}$	$836 \text{ J/kg.K}$
$T_0$	628 K	$\lambda_{eff}$	$30 \text{ kW/m.K}$	$C_{pr}$	$483 \text{ J/kg.K}$
$T_r$	628 K	$v_g$	$2,06 \text{ m/s}$	$C_{A0}$	$0,1811 \text{ mol/m}^3$

**Abstract.** *In this work a model of fixed bed reactor of phthalic anhydride synthesis with external refrigeration that considers the gaseous and solid phase and the thermal and mass exchange between the phases was simulated. The numerical resolution of the model was based on the method of lines and a study of mesh and sensitivity of the model parameters was performed. The model showed to be very sensitive to refrigerant temperature, the initial concentration of reagents and the initial temperature of the reagents, being possible to occur uncontrolled temperature rise with small variations of these variables.*

**Keywords:** *reactor, phthalic anhydride, bitube model, parametric sensitivity.*