UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA

EQE776 Modelagem e Simulação de Processos

Aula 04. Modelagem e simulação de reator PFR não isotérmico

Professor: Roymel Rodríguez Carpio

E-mail: roymel@eq.ufrj.br

Recapitulando

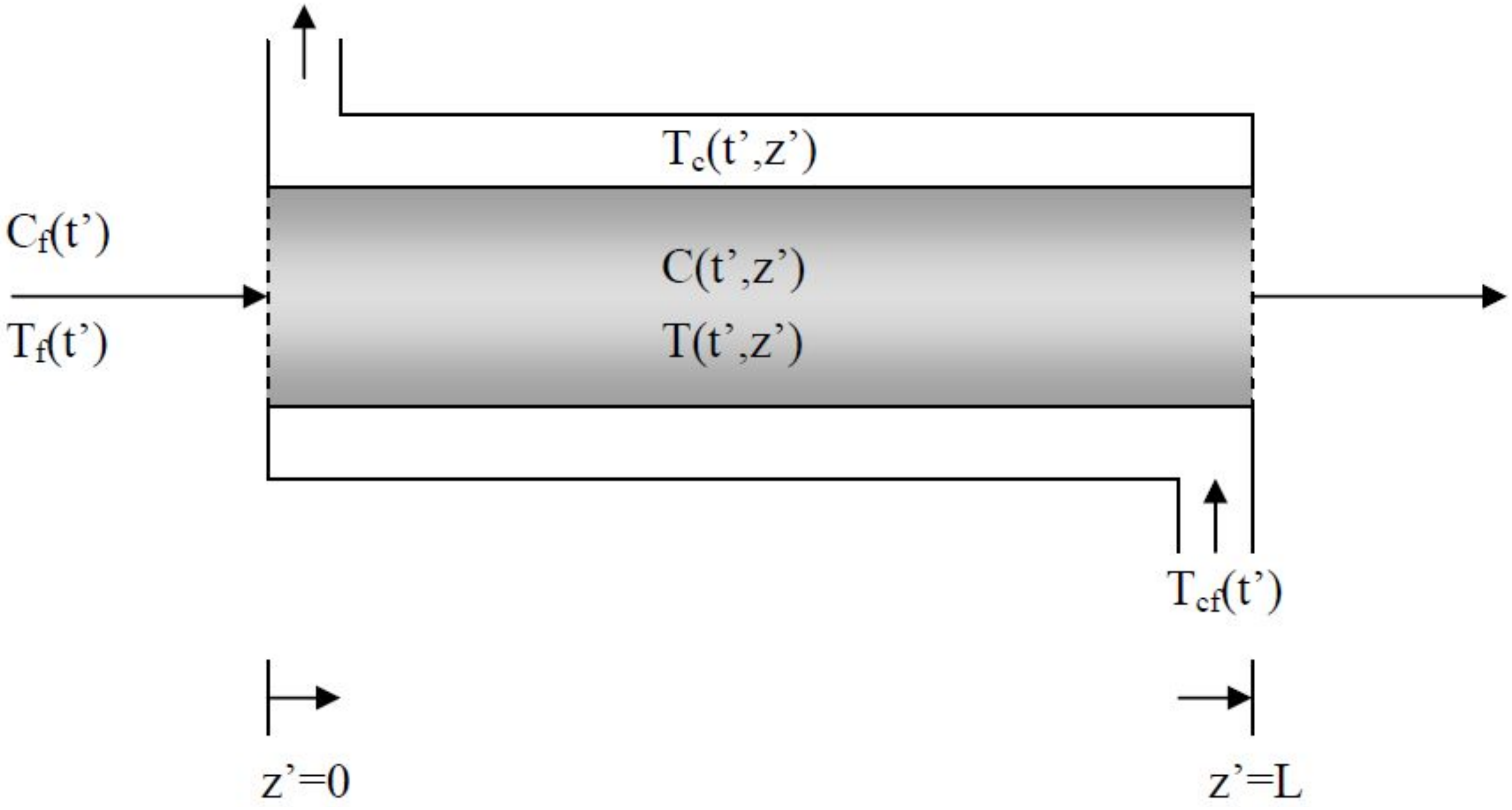
- Modelagem e simulação de reator CSTR não isotérmico

Temas da aula

- Modelagem e simulação de reator PFR não isotérmico

Apresentação do problema

Consideremos um PFR, onde acontece a reação exotérmica de decomposição do componente A: A□B+C.



Apresentação do problema

<u>Hipóteses simplificadoras</u>:

- A área (A) da seção transversal do reator tubular é constante.
- A mistura reacional escoa com uma velocidade (v_z) constante
- Dentro do reator existe escoamento convectivo e difusivo, mas as corrente de alimentação e saída apresentam somente escoamento convectivo.
- A taxa de reação para um comprimento z é uma função da concentração do reagente A e da temperatura nesse ponto: $r(C_A, T)$.
- A capacidade calorífica da mistura reacional não varia significativamente.

Apresentação do problema

<u>Hipóteses simplificadoras</u>:

- A condutividade térmica da parede é extremamente elevada.
- A capacidade calorífica da parede é desprezível.
- A resposta da camisa de resfriamento é virtualmente instantânea
- A reação é de primeira ordem e irreversível.
- A constante de velocidade segue a equação: $k(T) = k_o e^{-E/RT}$.

Modelagem

Balanço de massa para o regente A:

$$\frac{\partial C_A(t,z)}{\partial t} + v_z \frac{\partial C_A(t,z)}{\partial z} = D_m \frac{\partial^2 C_A(t,z)}{\partial z^2} + r(t,z)$$

Este é o modelo de dispersão axial clássico unidimensional utilizado para descrever o escoamento com reação química em reatores tubulares. Observe que foi considerada a presença de escoamento difusivo, além do escoamento puramente convectivo do reator ideal de fluxo empistonado tradicional.

Modelagem

Balanço de energia do conteúdo do reator:

$$\rho Cp\frac{\partial T(t,z)}{\partial t}+\rho Cpv_z\frac{\partial T(t,z)}{\partial z}=D_h\frac{\partial^2 T(t,z)}{\partial z^2}+(-\Delta H)r(t,z)-hA[T(t,z)-T_c(t,z)]$$

Perceba que o balanço de energia é análogo ao balanço de massa, adicionando-se o termo referente ao calor retirado pela camisa de refrigeração.

Modelagem

Balanço de energia da camisa de resfriamento:

$$\rho_c C p_c \frac{\partial T_c(t,z)}{\partial t} - \rho_c C p_c v_{zc} \frac{\partial T_c(t,z)}{\partial z} = hA[T(t,z) - T_c(t,z)] \frac{A_{tubo}}{A_{casco}}$$

- O sinal negativo no termo convectivo deve-se ao fato do escoamento na camisa se dar no sentido negativo de z.
- Considerou-se escoamento puramente empistonado para esta seção.
- A multiplicação pelo fator $\frac{A_{tubo}}{A_{casco}}$ transforma hA de maneira a expressá-lo por unidade de área do casco.

Modelagem

Condições iniciais:

$$C_A(t=0,z) = C_{A0}(z)$$
$$T(t=0,z) = T_0(z)$$
$$T_c(t=0,z) = T_{c0}(z)$$

Ou seja, os perfiles das variáveis de estado no tempo inicial são conhecidos.

Modelagem

Condições de contorno de Danckwerts:

$$C_A(t, z=0) - \frac{D_m}{v_z}\left.\frac{\partial C_A(t,z)}{\partial z}\right|_{z=0} = C_f(t)$$

$$\rho CpT(t, z=0) - \frac{D_h}{v_z}\left.\frac{\partial T(t,z)}{\partial z}\right|_{z=0} = \rho CpT_f(t)$$

$$\left.\frac{\partial C_A(t,z)}{\partial z}\right|_{z=L} = 0$$

$$\left.\frac{\partial T(t,z)}{\partial z}\right|_{z=L} = 0$$

$$T_c(t, z=L) = T_{cf}(t)$$

Adimensionamento do modelo

Vamos definir as seguintes variáveis adimensionais:

$$z' = \frac{z}{L};\, t' = \frac{t}{\left(\frac{L}{v_z}\right)};$$

$$u(t',z') = \frac{C_A(t',z')}{C^*};\, u_f = \frac{C_f(t')}{C^*};$$

$$v(t',z') = \frac{T(t',z')}{T^*};\; v_f(t') = \frac{T_f(t')}{T^*};$$

$$v_c(t',z') = \frac{T_c(t',z')}{T^*};\; v_{cf}(t') = \frac{T_{cf}(t')}{T^*}$$

Onde C^* e T^* são a concentração e temperatura de referência, respectivamente.

Adimensionamento do modelo

Podemos também escrever os seguintes grupamentos adimensionais:

$$D_a = \frac{L}{v_z}\frac{r^*}{C^*};\ P_{em} = \frac{v_z L}{D_m}; P_{eh} = \frac{v_z L \rho Cp}{D_h};$$

$$B = \frac{hAL}{v_z \rho Cp}; B_c = \frac{hAL}{v_z \rho_c Cp_c}\frac{A_{tubo}}{A_{casco}}$$

$$\lambda = \frac{v_z}{v_{zc}};\ R(t', z') = \frac{r(t, z)}{r^*}$$

Onde r^* é a taxa de reação de referencia avaliada para C^* e T^*.

Adimensionamento do modelo

Finalmente o modelo adimensionado fica:

Balanço de massa do reagente:

$$\frac{\partial u(t',z')}{\partial t'} + \frac{\partial u(t',z')}{\partial z'} = \frac{1}{P_{em}} \frac{\partial^2 u(t',z')}{\partial z'^2} - \mathrm{DaR}(t',z')$$

Balanço de energia do reator:

$$\frac{\partial v(t',z')}{\partial t'} + \frac{\partial v(t',z')}{\partial z'} = \frac{1}{P_{eh}} \frac{\partial^2 v(t',z')}{\partial z'^2} + \mathrm{BDaR}(t',z') - \beta[v(t',z') - v_c(t',z')]$$

Balanço de energia da camisa de resfriamento:

$$\lambda \frac{\partial v_c(t',z')}{\partial t'} - \frac{\partial v_c(t',z')}{\partial z'} = \beta_c\, [v(t',z') - v_c(t',z')]$$

Simulação

Considere um reator tubular isotérmico cujo balanço de massa para o reagente é dado pela equação diferencial parcial:

$$\frac{\partial C(t,z)}{\partial t} + \frac{\partial C(t,z)}{\partial z} = \frac{1}{P_e}\frac{\partial^2 C(t,z)}{\partial z^2} - \mathrm{DaC}(t,z)$$

Com as condições de contorno:

$$C(t,0) - \frac{1}{P_e}\frac{\partial C(t,z)}{\partial z}\bigg|_{z=0} = C_{alim}$$

$$\frac{\partial C(t,z)}{\partial z}\bigg|_{z=1} = 0$$

No instante inicial não há reagente dentro do reator.

Simulação

São conhecidas ademais as seguintes informações:

$$C_{alim} = 1$$
$$P_e = 15$$
$$\mathrm{Da} = 1$$

Determine os perfiles temporais da concentração do reagente para diferentes cumprimentos do reator.

Dica: discretize da dimensão z aplicando a técnica de diferencias finitas para transformar a equação diferencial parcial (EDP) num sistema de equações diferencias ordinárias (EDO).

Simulação

Discretizando a dimensão z:

$$\Delta L = \frac{L}{Np} = \frac{1}{50}$$

$$\left.\frac{\partial C(t,z)}{\partial z}\right|_{z=z_i} \approx \frac{C_{i+1}(t) - C_{i-1}(t)}{2\Delta L}$$

$$\left.\frac{\partial^2 C(t,z)}{\partial z^2}\right|_{z=z_i} \approx \frac{C_{i+1}(t) - 2C_i(t) + C_{i-1}(t)}{\Delta L^2}$$

$$C(t,0) - \frac{1}{P_e}\left.\frac{\partial C(t,z)}{\partial z}\right|_{z=0} = C_{alim} \to\to C_0 - \frac{1}{P_e}\frac{C_1 - C_0}{2\Delta L} = C_{alim}$$

$$\left.\frac{\partial C(t,z)}{\partial z}\right|_{z=1} = 0 \to\to C_{51} = C_{50}$$

Simulação

Sistema de Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs):

Para i=1 até i=50

$$\frac{dC_i}{dt} + \left(\frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta L}\right) = \frac{1}{P_e}\left(\frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta L^2}\right) - DaC_i$$

Condições de contorno:

$$C_0 - \frac{1}{P_e}\frac{C_1 - C_0}{2\Delta L} = C_{alim}$$

$$C_{51} = C_{50}$$

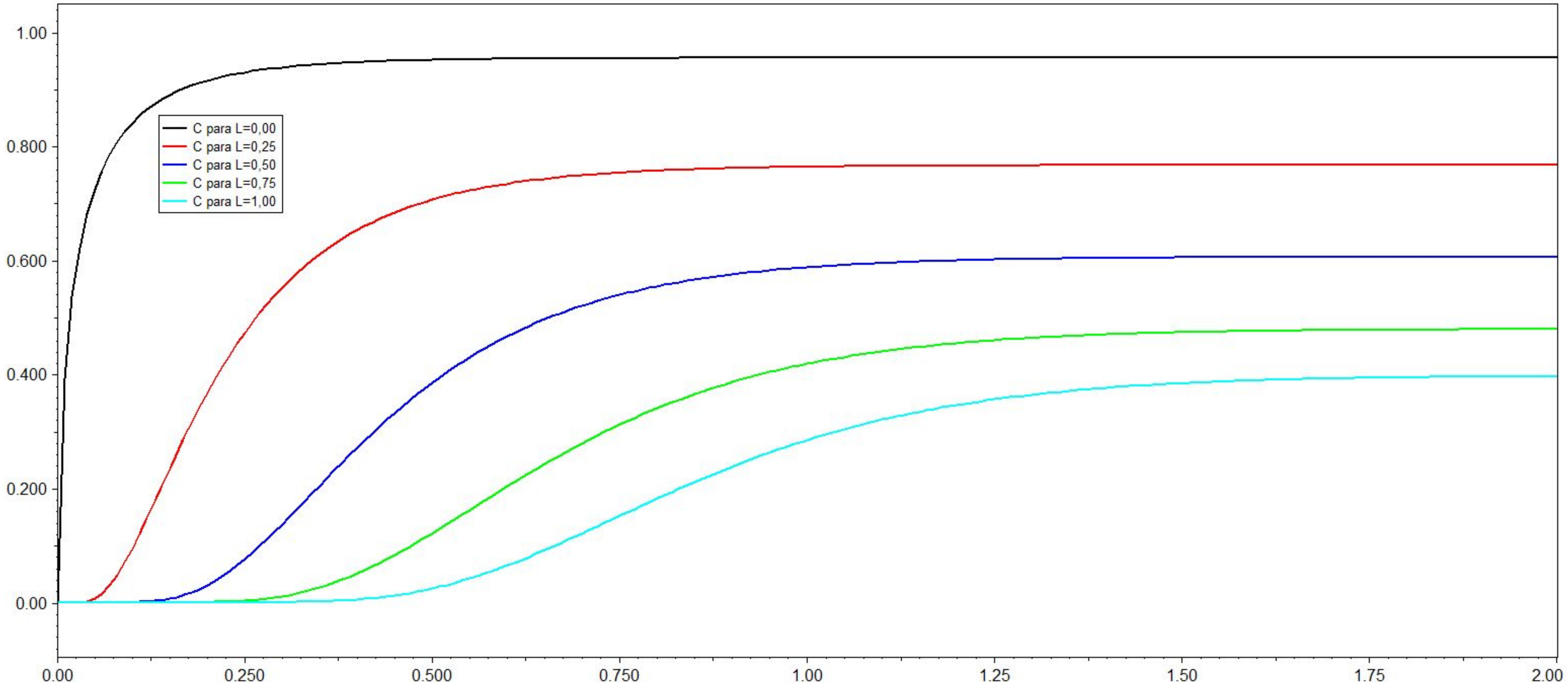
Simulação

Ver solução em EMSO!

```
using "types";

Model PFR_model

	PARAMETERS
	L as positive;
	Calim as positive;
	Pe as positive;
	Da as positive;
	Np as Integer;

	VARIABLES
	DL              as positive;
	C(Np+2)         as positive;
	C_in            as positive; #Concentracao na entrada
	C_um_quarto     as positive; #Concentracao para L=0,25
	C_medio         as positive; #Concentracao para L=0,5
	C_tres_quartos  as positive; #Concentracao para L=0,25
	C_out           as positive; #Concentracao na saida

	EQUATIONS

	DL = L/Np; #Passo de discretizacao

	#Sistema de equacoes
	for i in [2:Np+1] do
		diff(C(i))*'s' + (C(i+1)-C(i-1))/(2*DL) = (1/Pe) * (C(i+1)-2*C(i)+C(i-1))/(DL^2) - Da*C(i);
	end

	#Condicoes de contorno
	C(1) - (1/Pe) * (C(2)-C(1))/(2*DL) = Calim;
	C(Np+2) = C(Np+1);

	#Pontos de amostragem
	C_in = C(2);
	C_um_quarto = C(16);
	C_medio = C(31);
	C_tres_quartos = C(46);
	C_out = C(61);

end
```

```
FlowSheet PFR_sim

	DEVICES
	PFR as PFR_model;

	SET
	PFR.L = 1;
	PFR.Calim = 1;
	PFR.Pe = 15;
	PFR.Da = 1;
	PFR.Np = 60;

	INITIAL
	PFR.C = 0;


	OPTIONS
	Dynamic = true;
	TimeUnit = 's';
	TimeStart = 0;
	TimeStep = 0.01;
	TimeEnd = 2;

end
```

Simulação



1.00
0.800
0.600
0.400
0.200
0.00
C para L=0,00
C para L=0,25
C para L=0,50
C para L=0,75
C para L=1,00
0.00
0.250
0.500
0.750
1.00
1.25
1.50
1.75
2.00

Dúvidas?

Recados importantes

- Próxima aula: Dimensionamento de coluna desbutanizadora em Aspen Hysys
- Os slides desta aula estarão disponíveis no Classroom da disciplina.

“Ensinar não é transferir conhecimento, mas criar as possibilidades para a sua própria produção ou a sua construção.”

Paulo Freire