

# Relatório Técnico: Modelagem Termodinâmica do Deoxidador Catalítico (Deoxo)

Assistente de Engenharia Química

29 de novembro de 2025

## 1 Introdução e Objetivo

Este relatório complementa o dimensionamento preliminar do Deoxo, focando na **modelagem termodinâmica** do reator de leito fixo. O objetivo é simular o perfil axial de temperatura e conversão, validar o dimensionamento cinético para a condição crítica ( $4.0\text{ }^{\circ}\text{C}$  e 2%  $\text{O}_2$ ) e determinar a eficácia do sistema de resfriamento.

## 2 Informações de Entrada do Modelo

O modelo de Deoxo utiliza um conjunto de dados provenientes da simulação de processo (condições de entrada) e do dimensionamento físico (parâmetros do reator).

### 2.1 Dados de Processo (Condição Crítica)

Estes dados representam a saída do Coalescedor e o pior cenário de operação ( $T$  mínima para cinética,  $\text{O}_2$  máximo para calor).

Tabela 1: Informações de Processo de Entrada

Parâmetro	Valor	Origem
Temperatura de Entrada ( $T_{\text{in}}$ )	4.0 $^{\circ}\text{C}$	Saída do Coalescedor
Pressão de Entrada ( $P_{\text{in}}$ )	39.55 bar	Saída do Coalescedor
Vazão Molar Total ( $\dot{n}_{\text{total}}$ )	8.53 mol/s	Calculado no Dimensionamento
Fração Molar $\text{O}_2$ ( $Y_{\text{O}_2,\text{in}}$ )	0.02 (2%)	Pior caso de crossover PEM

### 2.2 Dados de Reator e Parâmetros Assumidos

Estes parâmetros são resultados do código de dimensionamento e premissas de engenharia.

## 3 Equações e Modelagem Utilizadas

O código utiliza o modelo de Reator de Fluxo em Pistão (PFR) com balanços de massa e energia acoplados, resolvidos por integração numérica de Equações Diferenciais Ordinárias (ODEs) usando o método RK45 (*Runge-Kutta*).

Tabela 2: Parâmetros Físicos e Termodinâmicos

Parâmetro	Valor	Origem
Comprimento do Reator ( $L$ )	1.294 m	Resultado do Dimensionamento
Diâmetro do Reator ( $D_R$ )	0.324 m	Resultado do Dimensionamento
Entalpia de Reação ( $\Delta H_{rxn}$ )	-242 kJ/mol	Valor de referência ( $H_2O$ vapor)
Cp Misto ( $\bar{C}_{p,mix}$ )	$\approx 29.0 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$	Cálculo baseado na composição ( $H_2$ re
Temperatura da Camisa ( $T_{jacket}$ )	120.0 °C	Premissa de projeto para resfriamento
Coeficiente de Transf. Volumétrico ( $U_a$ )	5000 W/m <sup>3</sup> ·K	Valor típico assumido para reatores com resfriamento

### 3.1 Equação de Balanço de Massa (Conversão)

Esta equação modela a taxa de conversão ( $X$ ) do  $O_2$  ao longo do comprimento do reator ( $L$ ):

$$\frac{dX}{dL} = \frac{A_R}{F_{O_2,in}} \times r_{O_2}(X, T)$$

Onde a taxa de reação ( $r_{O_2}$ ) é governada pela Lei de Arrhenius, tornando-a fortemente dependente da temperatura ( $T$ ).

### 3.2 Equação de Balanço de Energia (Temperatura)

Esta equação modela a variação de temperatura ( $T$ ) ao longo do reator. Ela considera o calor gerado pela reação exotérmica e o calor removido pela camisa de resfriamento.

$$\frac{dT}{dL} = \frac{A_R}{\dot{n}_{total} \bar{C}_{p,mix}} \times [(-\Delta H_{rxn}) \cdot r_{O_2} - U_a \cdot (T - T_{jacket})]$$

- O termo  $(-\Delta H_{rxn}) \cdot r_{O_2}$  representa a **geração de calor** por volume de reator.
- O termo  $U_a \cdot (T - T_{jacket})$  representa a **remoção de calor** pelo sistema de resfriamento.

## 4 Resultados de Saída e Avaliação

Os resultados do modelo fornecem a temperatura máxima e o destino final do oxigênio.

Tabela 3: Resultados Chave da Modelagem Termodinâmica

Parâmetro de Saída	Valor	Unidade	Implicação
Conversão Final de $O_2$	100.00%	—	Requisito de pureza atingido com folga.
$\Delta T_{ad}$ Estimada	166.9	K	Calor máximo liberado se não houvesse resfriamento.
Temperatura Máxima ( $T_{max}$ )	189.6	°C	Pico controlado pelo resfriamento ( $U_a$ ).
Temperatura de Saída ( $T_{out}$ )	130.5	°C	Ideal para integração térmica com o TSA.

### 4.1 Análise do Perfil Axial (Gráfico)

O gráfico do **Perfil de Temperatura e Conversão** ao longo do comprimento do reator ( $L$ ) confirma a dinâmica da reação exotérmica em leito fixo.

1. **Conversão Rápida (Curva Azul):** A conversão do O<sub>2</sub> atinge virtualmente 100% nos primeiros  $\approx 10\%$  do reator. Isso demonstra que o reator projetado tem um **excesso de comprimento cinético** para a condição crítica.
2. **Pico de Temperatura (Curva Vermelha):** Ocorre um **hot spot** em  $L \approx 0.1$  m (início do leito), onde a temperatura atinge o pico de 189.6 °C. Este é o ponto onde a taxa de geração de calor é máxima.
3. **Resfriamento a Jusante:** Após a conversão total, o termo de geração de calor se anula. A temperatura cai de 189.6 °C para 130.5 °C (próximo da  $T_{jacket} = 120.0$  °C) devido apenas à remoção de calor pela camisa.

## 4.2 Conclusão da Modelagem

A modelagem valida que:

- **Desempenho Cinético:** O reator atinge a pureza necessária mesmo sob as condições mais desafiadoras (4.0 °C).
- **Controle Térmico:** O resfriamento ativo é essencial, e o coeficiente  $U_a$  assumido é eficaz para limitar a temperatura máxima a 189.6 °C, dentro dos limites de segurança para catalisadores de Pd/Pt.
- **Oportunidade de Recuperação de Calor:** A alta temperatura de saída (130.5 °C) está disponível para ser transferida ao módulo TSA (Adsorção por Oscilação de Temperatura) para sua regeneração, otimizando o balanço energético da planta.