

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 °C e 2% O₂) 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, O₂ máximo para calor).

Tabela 1: Informações de Processo de Entrada

Parâmetro	Valor	Origem
Temperatura de Entrada (T_{in})	4.0 °C	Saída do Coalescedor
Pressão de Entrada (P_{in})	39.55 bar	Saída do Coalescedor
Vazão Molar Total (\dot{n}_{total})	8.53 mol/s	Calculado no Dimensionamento
Fração Molar O ₂ ($Y_{O_2,in}$)	0.02 (2%)	Pior caso de <i>crossover</i> 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 (ΔH_{rxn})	-242 kJ/mol	Valor de referência (H ₂ O vapor)
Cp Misto ($\bar{C}_{p,mix}$)	≈ 29.0 J/mol · K	Cálculo baseado na composição (H ₂ e O ₂)
Temperatura da Camisa (T_{jacket})	120.0 °C	Premissa de projeto para resfriamento
Coeficiente de Transf. Volumétrico (Ua)	5000 W/m ³ ·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 O₂ 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.

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

- O termo $(-\Delta H_{rxn}) \cdot r_{O_2}$ representa a **geração de calor** por volume de reator.
- O termo $Ua \cdot (T - T_{jacket})$ 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.
ΔT_{ad} Estimada	166.9	K	Calor máximo liberado se não houvesse resfriamento.
Temperatura Máxima (T_{max})	189.6	°C	Pico controlado pelo resfriamento (Ua).
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_2 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 $T_{\text{jacket}} = 120.0^\circ\text{C}$) 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.