

Residence Time Distribution for Tubular Reactors

L. R. de Souza Jr.¹, L. Lorenz¹

¹Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brazil

Abstract

Introdução:

A Engenharia das Reações Químicas (ERQ) que contempla em seu escopo o projeto de reatores químicos, usa informações, conhecimento e experiência de áreas como termodinâmica, cinética química, mecânica dos fluidos, transferência de calor, transferência de massa e análise econômica. Em geral, os processos de modelagem envolvidos na ERQ estabelecem sistemas idealizados, com premissas de mistura perfeita no CSTR (Continuous Stirred Tank Reactor), escoamento pistonado no PFR (Plug Flow Reactor), composição uniforme no caso dos reatores em batelada (Batch Reactor), entre outras. No entanto, apesar do tratamento matemático simplificado, no mundo real muitas das premissas citadas levam a reatores reais com comportamentos bem diferentes, sobretudo com capacidades e distribuição de produtos com desvios consideráveis que podem ser causados pela formação de canais preferenciais e recirculação dos fluidos, além da criação de regiões de estagnação.

É natural concluir que o projeto de um reator leve em consideração não idealidades que são diagnosticadas, entre outras maneiras, pela medida de Distribuição de Tempo de Residência (DTR) que é uma característica da mistura que ocorre no reator químico.

Resumidamente, a modelagem de reatores não-ideais segue a seguinte equação:

DADOS DE DTR + CINÉTICA + MODELO = PREVISÃO (1)

Diante do contexto acima, este trabalho teve como objetivo determinar a DTR de um reator tubular do laboratório de Engenharia Química da UFPR, em que dados obtidos experimentalmente foram comparados com os da simulação realizada no software COMSOL Multiphysics®.

Uso do COMSOL Multiphysics:

O software foi utilizado para simular uma experiência de DTR que é determinada injetando, no reator num instante $t = 0$, uma substância química inerte chamada traçador e medindo a sua concentração na corrente efluente em função do tempo. Para a modelagem do sistema foram utilizadas as interfaces físicas de Fluidodinâmica (Fluid Flow - Single-Phase Flow - Laminar Flow) acoplada ao modelo de transporte de massa (Chemical Species Transport - Transport of Diluted Species).

O modelo geométrico do reator foi construído com base no aparato experimental e está

esquematizado na Figura 1.

Resultados:

Os valores de concentração obtidos experimentalmente na saída do reator e os valores obtidos pela simulação estão dispostos na Figura 2. A partir desta curva, obtêm-se a DTR de onde o tempo de residência médio é determinado.

Conclusão:

De acordo com os resultados obtidos, observa-se que a modelagem do reator apresentou boa concordância com os resultados experimentais, coeficiente de correlação de 0,973. Além disso, com a simulação foi possível verificar o comportamento hidrodinâmico do escoamento - caminhos preferenciais, zonas de recirculação e zonas estagnadas - permitindo estabelecer a não idealidade do reator. Os estudos mostraram um tempo espacial de 7,90 min. e um tempo de residência médio de 2,36 min. É importante salientar que quanto mais próximos são esses valores, há um indicativo de que o reator vai operar de maneira mais adequada. No entanto, os problemas hidrodinâmicos não ficam evidentes, por isso a importância da fluidodinâmica computacional na análise, projeto e operação de reatores.

Reference

DANCKWERTS, P. V. Continuous Flow Systems. Distribution of Residence Times. Cambridge, Department of Chemical Engineering, Tennis Court Road, 1952.

FOGLER, H. S. Elementos de Engenharia das Reações Químicas. Rio de Janeiro, Editora LTC, 2009.

LEVENSPIEL, O. Engenharia das Reações Químicas. São Paulo, Editora Edgard Blücher, 2000.

Figures used in the abstract

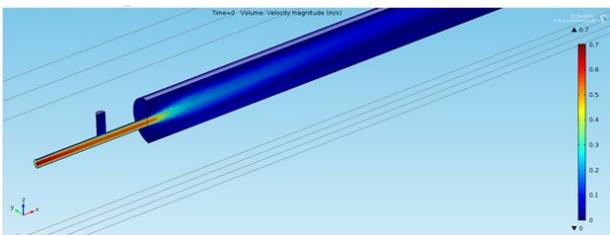


Figure 1: Modelo do reator tubular com a injeção do traçador.

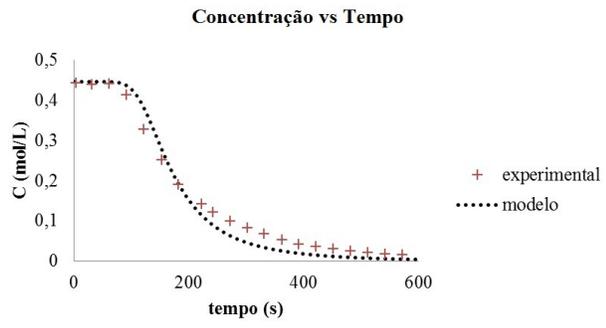


Figure 2: Concentração de traçador obtida na saída do reator.