

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS
ESCOLA DE ENGENHARIA DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE ENERGIA NUCLEAR**

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM TECNOLOGIAS ENERGÉTICAS E
NUCLEARES**

**MODELAGEM E AVALIAÇÃO DINÂMICA DE PROCESSOS CATALÍTICOS
TRIFÁSICOS EM REATOR DE LEITO GOTEJANTE**

JORNANDES DIAS DA SILVA

**RECIFE – PERNAMBUCO –BRASIL
JANEIRO-2003**

**MODELAGEM E AVALIAÇÃO DINÂMICA DE PROCESSOS CATALÍTICOS
TRIFÁSICOS EM REATOR DE LEITO GOTEJANTE**

JORNANDES DIAS DA SILVA

**MODELAGEM E AVALIAÇÃO DINÂMICA DE PROCESSOS CATALÍTICOS
TRIFÁSICOS EM REATOR DE LEITO GOTEJANTE**

Tese submetida ao Programa de Pós –
Graduação em Tecnologias Energéticas e
Nucleares da Universidade Federal de
Pernambuco para obtenção do título de
Doutor em Ciências. Área de concentração:
Engenharia de Reatores.

ORIENTADORES: Prof. DSc. FERNANDO ROBERTO ANDRADE LIMA
Prof. DSc. CÉSAR AUGUSTO MORAES DE ABREU

**RECIFE – PERNAMBUCO –BRASIL
JANEIRO-2003**

DEDICATÓRIAS

A Deus, fonte infinita de luz.

Aos meus pais Antônio e Joana pelo apoio dado em todos aspectos durante a minha vida profissional.

A minha esposa Elizabeth Rodrigues da Fonseca Dias.

A minha filha Vitória da Fonseca Dias.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. DSc Fernando Roberto de Andrade Lima pela orientação, oportunidade, sugestões e esclarecimentos nas dúvidas relacionadas à metodologia numérica aplicada neste trabalho.

Ao Prof. DSc César Augusto Moraes de Abreu pela orientação, sugestões e esclarecimentos nas dúvidas relacionadas a reatores trifásicos de leito gotejante.

Aos professores Sérgio Lucena, Nelson Medeiros de Lima Filho e Elias Silva Filho pelas profícuas discussões durante as reuniões do Comitê de Acompanhamento.

À colega Lázara Silveira Castrillo pelas sugestões e esclarecimentos sobre a modelagem numérica.

A todos os professores de Departamento de Energia Nuclear, pela contribuição na nossa formação.

A todos os colegas estudantes deste Departamento pela amizade e companheirismo.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento e Tecnológico (CNPq) e à Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia do Estado de Pernambuco (FACEPE) pelas bolsas de estudo concedidas que em muito colaboraram para realização deste trabalho.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	ix
LISTA DE TABELAS	xi
LISTA DE SÍMBOLOS	xii
RESUMO	xx
ABSTRACT	xxi
1. INTRODUÇÃO	1
2. REVISÃO DA LITERATURA	4
2.1. Regimes de escoamento em reatores trifásicos gás-líquido-sólido de leito fixo	5
2.2. Modelos fenomenológicos para reatores trifásicos de leito gotejante	9
2.2.1. Análise da concentração do reagente $A_{(G)}$ nas fases gasosa, líquida e sólida em um sistema trifásico	11
2.2.2. Análise da concentração do reagente $B_{(L)}$ nas fases líquida e sólida	14
2.2.3. Análise das concentrações dos reagentes $A_{(G)}$ e $B_{(L)}$ sob evolução nas fases gasosa, líquida e sólida	15
2.3. Análise hidrodinâmica dos reatores de leito gotejante	17
2.3.1. Queda de pressão em um reator de leito gotejante	18
2.3.2. Permeabilidade relativa das fases gasosa e líquida em um reator de leito gotejante	19
2.3.3. Avaliação das velocidades superficiais das gasosa e líquida em um reator de leito gotejante	20
2.3.4. Retenção gasosa em um reator de leito gotejante	21
2.3.5. Retenção líquida no reator no reator de leito gotejante	22
2.3.6. Molhabilidade parcial em um reator de leito gotejante	27
2.3.7. Dispersão axial em um reator de leito gotejante	31
2.4. Avaliação dos efeitos de transferência de massa em um reator de leito gotejante	33
2.4.1 Transferência de massa gás-líquido em reator de leito gotejante	35
2.4.2. Transferência de massa líquido-sólido em um reator de leito gotejante	36

2.4.3. Análise da área interfacial de transferência de massa em um reator de leito gotejante	37
3. MODELAGEM FENOMENOLÓGICA DE PROCESSOS REATIVOS EM UM REATOR DE LEITO GOTEJANTE	40
3.1. Introdução.	40
3.2. Balanços de massa para os reagentes $A_{(G)}$ e $B_{(L)}$ nas fases gasosa, líquida e sólida e o produto $P_{(L)}$ nas fases líquida e sólida de um sistema trifásico de leito fixo com molhabilidade parcial	42
3.3. Sistema simplificado de equações diferenciais parciais para os reagentes hidrogênio e α - metilestireno	49
3.3.1. Balanços de massa nas fases fluidas	51
3.3.2. Balanços de massa na fase sólida	52
3.3.3. Taxa de reação química na superfície catalítica.	53
3.3.4. Balanços de massa dos reagentes H_2 e α -ME	58
3.3.5. Taxa de reação química na superfície catalítica, adimensionalizada	60
3.4 Solução numérica do sistema de equações diferenciais parciais	62
3.4.1 Método das diferenças finitas	62
3.4.2 Obtenção do sistema de equações algébricas para o processo de hidrogenação do α - metilestireno	64
3.5. Hidrogenação catalítica do α - metilestireno	66
3.6. Procedimento computacional	67
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	68
4.1. Processo de produção do ácido láctico	68
4.1.1. Equação de balanço	68
4.1.2. Validação do modelo desenvolvido	72
4.2. Processo de hidrogenação do α - metilestireno em reator trifásico sob regime de leito gotejante	75
4.2.1. Evolução do reagente H_2 nas fases gasosa, líquida e sólida e do reagente α -ME nas fases líquida e sólida para o processo de hidrogenação catalítica do α -ME	76

4.2.1.1. Evolução dos perfis de concentração e respostas transientes para o reagente H_2 nas fases gasosa, líquida e sólida.	79
4.2.1.2. Evolução dos perfis de concentração e respostas transientes s para o reagente α -ME nas fases líquida e sólida	83
4.2.2. Estudo de sensibilidade sobre as concentrações dos reagentes H_2 e α -ME. Aplicação de pulso dos reagentes nas fases gasosa e líquida.	86
4.2.2.1. Sensibilidade da velocidade superficial de alimentação do líquido sobre o perfis de concentração do reagente H_2	86
4.2.2.2. Sensibilidade da velocidade superficial de alimentação do líquido sobre os perfis de concentração do reagente α -ME	90
4.2.3. Análise de sensibilidade sobre as concentrações dos reagentes H_2 e α -ME. Aplicação de degraus positivos dos reagentes nas fases gasosa e líquida.	93
4.2.3.1. Sensibilidade da velocidade superficial de alimentação do líquido sobre os perfis de concentração do reagente H_2	93
4.2.3.2. Sensibilidade da velocidade superficial de alimentação do líquido sobre os perfis de concentração do reagente α -ME	97
4.2.4. Operação cíclica	100
5. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	103
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	105
APÊNDICE 1	112
APÊNDICE 2	115
APÊNDICE 3	118
APÊNDICE 4	121
APÊNDICE 5	129

LISTA DE FIGURAS

FIGURA	PÁGINA
1. Tipos de reatores químicos trifásicos gás-líquido-sólido de leito fixo	5
2. Diagrama de Charpentier para regimes de escoamento em reatores de leito (CHARPENTIER e FAVIER,1975)	8
3. Perfil de concentração do reagente $A_{(G)}$ nas fases líquida e sólida. Alta velocidade da fase gasosa	11
4. Perfil de concentração reagente $A_{(G)}$ nas fases gasosa, líquida e sólida	13
5. Perfil de concentração do reagente $B_{(L)}$ nas líquida e sólida para um sistema trifásico gás-líquido-sólido	14
6. Perfis de concentração dos reagentes $A_{(G)}$ e $B_{(L)}$ nas fases gasosa, líquida e sólida	16
7. Arranjo de um reator trifásico de leito fixo com escoamento das fases gasosa e líquida em contato com as partículas sólidas.	41
8. Validação do modelo desenvolvido, avaliação experimentais da produção de ácido láctico (ZHENG e GU, (1996). Experimento 8(a) e Experimento 8(b) realizados a $T=318K$	74
9. Perfis de concentração do reagente H_2 na fase gasosa versus a posição axial (a) e versus tempo (b)	80
10. Perfis de concentração do reagente H_2 na fase líquida versus a posição axial (a) e versus tempo (b)	81
11. Perfis de concentração do reagente H_2 na fase sólida versus a posição axial (a) e versus tempo (b)	82
12. Perfis de concentração do reagente α - ME na fase líquida versus a posição axial (a) e versus tempo (b)	84
13. Perfis de concentração do reagente α -ME na fase sólida versus a posição axial (a) e versus tempo (b)	85
14. Perfis de concentração do reagentes H_2 na fase gasosa versus posição axial (ξ) do reator e versus tempo (τ)	87
15. Perfis de concentração do reagentes H_2 na fase líquida versus posição axial (ξ) do reator e versus tempo (τ)	88

16. Perfis de concentração do reagentes H_2 na fase sólida versus posição axial (ξ) do reator e versus tempo (τ)	89
17. Perfis de concentração do reagentes α -ME na fase líquida versus posição axial (ξ) do reator e versus tempo (τ)	91
18. Perfis de concentração do reagentes α -ME na fase sólida versus posição axial (ξ) do reator e versus tempo (τ)	92
19. Perfis de concentração do reagente H_2 na fase gasosa versus a posição axial (a) e versus tempo (b)	94
20. Perfis de concentração do reagente H_2 na fase líquida versus a posição axial (a) e versus tempo (b)	95
21. Perfis de concentração do reagente H_2 na fase sólida versus a posição axial (a) e versus tempo (b)	96
22. Perfis de concentração do reagente α -ME na fase líquida versus a posição axial (a) e versus tempo (b)	98
23. Perfis de concentração do reagente α -ME na fase sólida versus a posição axial (a) e versus tempo (b)	99
24 Comparação dos fluxos de transferência de massa gás-sólido e de líquido-sólido (a) baixa V_{SL} ; (b) alta V_{SL}	102
5.1. Diagrama de blocos simplificado para os cálculos das variáveis que representam o comportamento do reator trifásico	129

LISTA DE TABELAS

TABELA	PÁGINA
1. Identificações dos termos das Equações 51 a 57	45 e 46
2. Identificações das variáveis e coeficientes utilizados nas Equações 51 a 57	47 e 48
3. Identificações dos termos das Equações 58 a 74	54 e 55
4. Identificações das variáveis e coeficientes utilizados nas Equações 58 a 74	56
5. Definição de variáveis adimensionalizadas	57
6. Parâmetros adimensionalizados para as equações 75 a 91	61
7. Identificações dos termos das Equações 118 a 123	70
8. Identificações de variáveis e coeficientes utilizados nas Equações 118 a 123	70
9. Parâmetros usados nas simulações do processo da glicose (ZHENG e GU, 1996)	73
10. Parâmetros e correlações usadas para o processo de hidrogenação do α - ME	77 e 78
11. Resultados da simulação realizada por LANGE et al. (1999) para a conversão média do α - ME $(X_{\alpha - ME})_{med}$ e os resultados da simulação deste trabalho	100
12. Identificações dos termos das Equações 1.1 a 1.3 (Apêndice 1)	113
13. Identificações das variáveis e coeficientes utilizados nas Equações 1.1 a 1.3 (Apêndice 1)	114
14. Identificações dos termos das Equações 2.1 a 2.3 (Apêndice 2)	116
15. Identificações das variáveis e coeficientes utilizados nas Equações 2.1 a 2.3 (Apêndice 2)	117
16. Identificações dos termos das Equações 3.1 a 3.3 (Apêndice 3)	119
17. Identificações das variáveis e coeficientes utilizados nas Equações 3.1 a 3.3 (Apêndice 3)	120
18. Identificações dos termos das Equações 4.1 a 4.10 (Apêndice 4)	124 a 126
19. Identificações das variáveis e coeficientes utilizados nas Equações 4.1 a 4.10 (Apêndice 4)	127 e 128

LISTA DE SÍMBOLOS

a_{GL}	Área interfacial de transferência massa gás-líquido, m^{-1}
a_{GS}	Área interfacial de transferência massa gás-sólido, m^{-1}
a_{LS}	Área interfacial de transferência massa líquido-sólido, m^{-1}
a_p	Área da partícula, m^{-1}
C_A^G	Concentração do reagente A na fase gasosa, kg/m^3
C_A^L	Concentração do reagente A na fase líquida, kg/m^3
C_A^S	Concentração do reagente A na fase sólida, kg/m^3
C_B^L	Concentração do reagente B na fase líquida, kg/m^3
C_B^S	Concentração do reagente B na fase sólida, kg/m^3
$C_{CH_4}^G$	Concentração do traçador CH_4 na fase gasosa, kg/m^3
$C_{CH_4}^L$	Concentração do traçador CH_4 na fase líquida, kg/m^3
$C_{CH_4}^S$	Concentração do traçador CH_4 na fase sólida, kg/m^3
C_{Gli}^L	Concentração da glicose na fase líquida, kg/m^3
C_{Gli}^S	Concentração da glicose na fase sólida, kg/m^3
C_{Glo}^L	Concentração do gliconato de sódio na fase líquida, kg/m^3
C_{Glo}^L	Concentração do gliconato de sódio na fase líquida, kg/m^3
$C_{H_2}^G$	Concentração do hidrogênio na fase gasosa, kg/m^3
$C_{H_2}^L$	Concentração do hidrogênio na fase líquida, kg/m^3
$C_{H_2}^S$	Concentração do hidrogênio na fase sólida, kg/m^3
C_{MCh}^L	Concentração do 2 metil-hexano na fase líquida, kg/m^3
C_{MCh}^S	Concentração do 2 metil-hexano na fase sólida, kg/m^3
C_{OC}^L	Concentração do o-cresol na fase líquida, kg/m^3
C_{OC}^S	Concentração do o-cresol na fase sólida, kg/m^3
C_{PG}	Capacidade calorífica a pressão constante da fase gasosa, $kJ/kg\ K$
C_{PL}	Capacidade calorífica a pressão constante da fase líquida, $kJ/kg\ K$
C_{PS}	Capacidade calorífica a pressão constante da fase sólida, $kJ/kg\ K$
C_{PRF}	Capacidade calorífica a pressão constante do fluido refrigerante, $kJ/kg\ K$
C_P^L	Concentração do produto na fase líquida, kg/m^3
C_P^S	Concentração do produto na fase sólida, kg/m^3
$C_{SO_2}^L$	Concentração do SO_2 na fase líquida, kg/m^3
$C_{SO_2}^S$	Concentração do SO_2 na fase sólida, kg/m^3

$C_{\alpha - ME}^L$	Concentração do reagente α - ME na fase líquida, kg/m^3
$C_{\alpha - ME}^S$	Concentração do reagente α - ME na fase sólida, kg/m^3
D_G	Dispersão do reagente gasoso na fase gasosa, m^2/s
D_L	Dispersão do reagente líquido na fase líquida, m^2/s
d_h	Diâmetro hidráulico, m
D_M	Difusividade molecular, m^2/s
D_R	Diâmetro do reator, m
D_S	Difusividade na fase sólida, m^2/s
$D_{ef, A}$	Difusividade efetiva do reagente A na fase sólida, m^2/s
$D_{ef, B}$	Difusividade efetiva do reagente B na fase sólida, m^2/s
$D_{ef, P}$	Difusividade efetiva do reagente P na fase sólida, m^2/s
$D_{ef, GLo}$	Difusividade efetiva gliconato de sódio na fase sólida, m^2/s
$D_{G, L}$	Dispersão do reagente gasoso na fase líquida, m^2/s
$D_{MCh, S}$	Difusividade do 2 metil-hexano na fase sólida, m^2/s
$D_{H_2, S}$	Difusividade do hidrogênio na fase sólida, m^2/s
$D_{OC, S}$	Difusividade do o-cresol na fase sólida, m^2/s
d_p	Diâmetro da partícula, m
$(D_{ef})_{ap}$	Difusividade efetiva aparente, m^2/s
f_e	Fator de molhabilidade
g	Aceleração da gravidade, m/s^2
G_G	Fluxo mássica da fase gasosa, $\text{kg/m}^2 \text{ s}$
G_L	Fluxo mássica da fase líquida $\text{kg/m}^2 \text{ s}$
H	Constante de Henry
h_d	Retenção dinâmica
h_G	Retenção da fase gasosa
h_L	Retenção da fase líquida
h_S	Retenção da fase sólida
h_t	Retenção total
h_{SC}	Coeficiente de transferência de calor da fase sólida, $\text{kJ/m}^2 \text{ s K}$
k_{ad}	Constante cinética de adsorção, s^{-1}
K_{ap}	Constante de reação aparente, s^{-1}
K_1	Primeira constante da Equação 4

K_2	Segunda constante da Equação 4
$\langle k_G \rangle$	Permeabilidade relativa da fase gasosa
$\langle k_L \rangle$	Permeabilidade relativa da fase líquida
K_{CH_4}	Coeficiente de transferência de massa do traçador CH_4 , m/s
k_{GL}	Coeficiente de transferência massa gás-líquido, m/s
K_{GLi}	Coeficiente de transferência de massa da glicose, m/s
K_{GLO}	Coeficiente de transferência de massa do gliconato sólido, m/s
k_{H_2}	Coeficiente de transferência de massa do hidrogênio, m/s
k_{LS}	Coeficiente de transferência massa líquido-sólido, m/s
k_r	Constante de reação, s^{-1}
K_{SO_2}	Coeficiente de transferência massa do SO_2 , m/s
$k_{A, GL}$	Coeficiente de transferência de massa do reagente A gás-líquido, m/s
$k_{A, GS}$	Coeficiente de transferência de massa do reagente A gás-sólido, m/s
$k_{A, LS}$	Coeficiente de transferência de massa do reagente A líquido-sólido, m/s
$k_{B, LS}$	Coeficiente de transferência de massa do reagente B líquido-sólido, m/s
$k_{P, LS}$	Coeficiente de transferência de massa do produto P líquido-sólido, m/s
$k_{H_2, GL}$	Coeficiente de transferência de massa do reagente H_2 gás-líquido, m/s
$k_{H_2, LS}$	Coeficiente de transferência de massa do reagente H_2 líquido-sólido, m/s
$k_{H_2, GS}$	Coeficiente de transferência de massa do reagente H_2 gás-sólido, m/s
K_{H_2}	Constante de adsorção no equilíbrio para o H_2 , m^3/kg
$K_{\alpha - ME}$	Constante de adsorção no equilíbrio para o α -ME, m^3/kg
$k_{\alpha - ME, LS}$	Coeficiente de transferência de massa do reagente α -ME líquido-sólido, m/s
$(ka)_{LS}$	Coeficiente de transferência de massa volumétrico líquido-sólido, s^{-1}
$K_{MCh, LS}$	Coeficiente de transferência de massa volumétrico líquido-sólido do MCh, s^{-1}
$k_{OC, LS}$	Coeficiente de transferência de massa volumétrico líquido-sólido do OC, s^{-1}
L	Comprimento do reator, m
$N_{A, GL}$	Fluxo de massa do reagente A gás-líquido, $kg/m^3 s$
$N_{A, GS}$	Fluxo de massa do reagente A gás-sólido, $kg/m^3 s$
$N_{A, LS}$	Fluxo de massa do reagente A líquido-sólido, $kg/m^3 s$
$N_{B, LS}$	Fluxo de massa do reagente B líquido-sólido, $kg/m^3 s$
Q_{Flesh}	Vazão de gases do Flesh, m^3/s
Q_L	Vazão de líquido, m^3/s

$q_{\text{SO}_2}^{\text{ad}}$	Concentração do reagente SO_2 na superfície do sólido, kg/m^3
$q_{\text{GLi}}^{\text{ad}}$	Concentração do reagente GLi na superfície do sólido, kg/m^3
R	Raio da partícula na superfície do sólido, m
r_R	Raio do reator, m
r_p	Raio da partícula, m
R_W	Taxa de reação química, s^{-1}
R_W^*	Taxa de reação química adimensionalizada
R_{GL}	Relação entre as fases gasosa/líquida
t	Tempo, s
$t_{R, \text{exp}}$	Tempo de residência experimental, s
T_{FL}	Temperatura das fases fluidas, $^{\circ}\text{C}$
T_{RF}	Temperatura do fluido refrigerante, $^{\circ}\text{C}$
V_{SG}	Velocidade superficial da fase gasosa, m/s
V_{SL}	Velocidade superficial da fase líquida, m/s
$V_{\text{SL, RF}}$	Velocidade superficial do fluido refrigerante, m/s
U	Coeficiente de transferência de calor global do reator, $\text{kJ/m}^2 \text{ s K}$
z	Coordenada na direção z do reator, m

LETRAS GREGAS

β	Ângulo em radiano
β_{GL}	Parâmetro definido na Tabela 6, Gás - líquido
β_{LS}	Parâmetro definido na Tabela 6, líquido-sólido
γ_{GS}^*	Parâmetro definido na Tabela 6, gás-sólido (modificado)
γ_{GL}^*	Parâmetro definido na Tabela 6, gás-líquido (modificado)
δ_i	Queda de pressão monofásica, $(i = \text{G, L}), \text{kg/m}^2 \text{ s}^2$
δ_{GL}	Queda de pressão bifásica, $\text{kg/m}^2 \text{ s}^2$
ΔH_R	Calor de reação
ε	Porosidade interna
ε_{ex}	Porosidade externa
η_e	Fator de efetividade efetivo
η_G	Fator de efetividade da fase gasosa

η_L	Fator de efetividade da fase líquida
θ_P	Coordenada na direção θ da partícula
θ_R	Coordenada na direção θ do reator
θ_{R, H_2}	Parâmetro definido na Tabela 6 para o reagente H_2
$\theta_{R, \alpha-ME}$	Parâmetro definido na Tabela 6 para o reagente α -ME
λ	Parâmetro definida na Equação 1
λ_G	Condutividade térmica da fase gasosa, kJ/m s K
λ_L	Condutividade térmica da fase líquida, kJ/m s K
λ_S	Condutividade térmica da fase sólida, kJ/m s K
λ_{LS}	Parâmetro definido na Tabela 6 para o reagente α -ME
λ_{LS}^*	Parâmetro definido na Tabela 6 para o reagente α -ME (modificado)
μ_G	Viscosidade dinâmica da fase gasosa, kg/ m s
μ_L	Viscosidade dinâmica da fase líquida, kg/ m s
μ_{H_2O}	Viscosidade dinâmica da água, kg/ m s
ν_{LS}	Parâmetro definido na Tabela 6 para o reagente H_2
ξ	Coordenada axial do reator adimensionalizada
τ	Tempo adimensionalizado
ρ_G	Densidade da fase gasosa, kg/m ³
ρ_L	Densidade da fase líquida, kg/m ³
ρ_{ar}	Densidade do ar, kg/m ³
ρ_{H_2O}	Densidade da água, kg/m ³
ρ_{Leito}	Densidade do leito, kg/m ³
ρ_S	Densidade do sólido, kg/m ³
ρ_{RF}	Densidade do fluido refrigerante, kg/m ³
σ_L	Tensão superficial do líquido
σ_{H_2O}	Tensão superficial da água
φ_{GS}	Parâmetro definido na Tabela 6 para o reagente H_2
ψ	Parâmetro definido na Equação 2
ϕ	Módulo de Thiele
ϕ_e	Módulo de Thiele efetivo

ϕ_G	Módulo de Thiele da fase gasosa
ϕ_L	Módulo de Thiele da fase líquida
$\vartheta_{H_2}^G$	Concentração do hidrogênio na fase gasosa, adimensionalizada
$\vartheta_{H_2}^L$	Concentração do hidrogênio na fase líquida, adimensionalizada
$\vartheta_{H_2}^S$	Concentração do hidrogênio na fase sólida, adimensionalizada
$\vartheta_{\alpha-ME}^L$	Concentração do α -ME na fase líquida, adimensionalizada
$\vartheta_{\alpha-ME}^S$	Concentração do α -ME na fase sólido, adimensionalizada

GRUPOS ADIMENSIONAIS

$Eo_L = \frac{\rho_L g d_p^2}{\sigma_L}$	Número de Eötvös
$Fr_G = \frac{\rho_G V_{SG}^L}{d_p (\rho_G g + \delta_{GL})}$	Número Froude da fase gasosa
$Fr_L = \frac{\rho_L V_{SL}^L}{d_p (\rho_L g + \delta_{GL})}$	Número Froude da fase líquida
$Ga_L = \frac{d_p^2 g \rho_L^2}{\mu_L^2}$	Número de Galileo
$G_{aL}^* = \frac{d_p}{\left[\mu_L^2 / (g \rho_L^2) \right]^{1/3}}$	Número de Galileo modificado
$Pe_G = \frac{V_{SG} L}{D_G}$	Número de Peclet da fase gasosa
$Pe_M = \frac{V_{SL} L h_L}{D_G h_G}$	Número de Peclet da fase líquida modificado
$Pe_L = \frac{V_{SL} L}{D_L}$	Número de Peclet da fase líquida
$Re_G = \frac{\rho_G V_{SG} d_p}{\mu_G}$	Número de Reynolds da fase gasosa

$Re_L = \frac{\rho_L V_{SL} d_p}{\mu_L}$	Número de Reynolds da fase líquida
$Sc_G = \frac{\mu_G}{\rho_G D_G}$	Número de Schmidt da fase gasosa
$Sc_G = \frac{\mu_L}{\rho_L D_L}$	Número de Schmidt da fase líquida
$Sh_G = \frac{R k_{LS}}{3 D_G}$	Número de Sherwood da fase gasosa
$Sh_G = \frac{R k_{LS}}{3 D_L}$	Número de Sherwood da fase líquida
$We_L = \frac{d_p V_{SL}^2 \rho_L}{\sigma_L}$	Número de Weber da fase líquida

SUBSCRITOS

A	Regente A
A, GL	Reagente A, gás-líquido
A, GS	Componente A, gás-sólido
A, LS	Reagente A, líquido-sólido
B	Reagente B
B, LS	Reagente B, líquido-sólido
d	Dinâmica
e	Efetividade
ex	Externa
ef, A	Efetivo, reagente A
ef, AB	Efetivo, reagente B
ef, GLo	Efetivo, gliconato de sódio
FL	Fluido-sólido
G	Gás
GL	Gás-líquido
GS	Gás-sólido
H ₂	Hidrogênio
H ₂ , GL	Hidrogênio, gás-líquido

H ₂ , GS	Hidrogênio, gás-sólido
H ₂ , LS	Hidrogênio, líquido-sólido
L	Líquido
LS	Líquido-sólido
P	Produto, Partícula
P, LS	Produto, líquido-sólido
PRF	Pressão do fluido refrigerante constante
R	Reator, reação
S	Sólido
W	Referente a reação

SUPERESCRITOS

G	Gás
L	Líquido
S	Sólido
ad	adsorção

ABRVIACÕES DE FÓRMULAS QUÍMICAS

CH ₄	Metano
GLi	Glicose
GLo	Gliconato de sódio
H ₂	Hidrogênio
H ₂ , GL	Hidrogênio gás-líquido
H ₂ , GS	Hidrogênio gás-sólido
H ₂ , LS	Hidrogênio líquido-sólido
H ₂ O	Água
MCh	2 metil - hexano
MCh, LS	2 metil – hexano, líquido-sólido
OC	O-cresol
OC, LS	O-cresol, líquido-sólido
SO ₂	Dióxido de enxofre
α-ME	Metilestireno
α-ME, LS	Metilestireno, líquido-sólido

MODELAGEM E AVALIAÇÃO DINÂMICA DE PROCESSOS CATALÍTICOS TRIFÁSICOS EM REATOR DE LEITO GOTEJANTE

Autor: Jornandes Dias da Silva

ORIENTADORES: Prof. DSc. Fernando Roberto Andrade Lima
Prof. DSc. César Augusto Moraes de Abreu

RESUMO

A análise de reatores químicos trifásicos de leito fixo requer desenvolvimento de soluções de sistemas de equações diferenciais parciais com aplicação de métodos numéricos. Através dessas ferramentas têm sido possível simular o comportamento desses reatores, permitindo avaliações de seus componentes, constituindo importantes previsões para as realizações dos seus projetos individuais. A estimação de perfis de concentrações dos componentes presentes nas fases dos sistemas trifásicos caracteriza a quantificação das análises, garantindo informações completas a respeito do comportamento do sistema. No presente trabalho, o método das diferenças finitas é aplicado ao modelo que descreve o sistema reativo de hidrogenação e ao modelo que descreve o sistema da produção de ácido láctico. Busca-se analisar o comportamento de reatores de leito fixo, operando sob regime de leito gotejante. As equações de balanços de massa, juntamente com as condições iniciais e de contorno, são utilizadas para descrever os sistemas estudados, tendo suas soluções originadas das equações discretizadas conforme o método das diferenças finitas. O modelo desenvolvido permite, como 1ª aplicação, a simulação do comportamento experimental do processo da produção de ácido láctico. De forma mais completa, procede-se a modelagem do processo de hidrogenação do α -ME, simulando-se os comportamentos dos reagentes H_2 e α -ME nas fases presentes no reator de leito gotejante. Simulações dinâmicas, com estímulos de concentrações na alimentação das fases gasosa e líquida do reator foram realizadas, destacando perfis de concentrações ao longo do reator e as respostas transientes. Evoluções das concentrações dos reagentes H_2 e α -ME nas fases, sensibilidade do modelo e um exemplo de operação periódica forçada foram estudados.

MODELING AND DYNAMIC EVALUATION OF THREE-PHASE CATALYTIC PROCESSES IN TRICKLE BED REACTOR

Author: Jornandes Dias da Silva

ADVISERS: Prof. D. Sc. Fernando Roberto Andrade Lima
 Prof. D. Sc. César Augusto Moraes de Abreu

ABSTRACT

The analysis of three-phase fixed bed reactors requires solutions of partial differential equations systems with numerical methods. So, via these methods it has been possible to simulate the behavior of these reactors turning the evaluation of the reagents of the reacting system possible. The concentration profiles estimation of the reagents present in the phases, produce information of the behaviour of the system. In the present work, the method of finite differences was applied to the hydrogenation reaction and to the lactic acid production model. The analysis the behaviour of fixed bed reactors at trickle bed conditions was proposed. Mass balance equations with their respective initial and boundary conditions were applied to the evaluated system. Its solutions were obtained by finite differences. The suggested model simulates the behaviour of the lactic acid production process. The model of the hydrogenation process of α - ME was also evaluated, and the behaviour of H_2 and α - ME in the phases of the trickle bed reactor were simulated. Dynamic simulations with concentration stimulus in the gas and liquid feeds were evaluated and concentrations profiles in the reactor and transient responses were obtained. The evaluation of the reagents (H_2 and α - ME) in the phases, sensibility analysis of the model and forced cyclic operation example were studied.