



PRPG | Pró-Reitoria de Pós-Graduação
PIBIC/CNPq/UFPG-2008



ESTUDO DO COMPORTAMENTO DE UM REATOR CILÍNDRICO DE LEITO FIXO: ASPECTOS TÉRMICOS E GEOMÉTRICOS

Débora Jamila Nóbrega de Melo¹, Laercio Gomes de Oliveira²

RESUMO

Este trabalho teve como objetivo estudar o comportamento térmico de um reator de leito fixo, visando avaliar posteriormente, através dos perfis de temperatura no interior do reator, seus parâmetros térmicos efetivos. Realizou-se um levantamento bibliográfico sobre o tema em estudo, desenvolveu-se um modelo matemático aplicado a um leito fixo, considerando: propriedades termofísicas variáveis; porosidade variável; Temperatura do fluido na entrada, função da posição radial; geração interna de energia por reação química. Estudou-se os efeitos dos coeficientes de transporte sobre a distribuição de temperatura no interior do leito. Utilizou-se o software Mathematica[®] na resolução das equações juntamente com o método dos volumes finitos. Pelos resultados obtidos verifica-se que a razão de aspecto geométrica não exerce grande influência sobre os gradientes térmicos. A variação dos coeficientes de transporte desempenha um importante papel no estudo da transferência de calor em reatores de leito fixo. O termo convectivo torna-se dominante comparado ao termo de condução de calor, quando aumenta-se a vazão de fluido percolante no leito.

Palavras chave: transferência de calor, reator, cilindro elíptico, volumes finitos

STUDY OF THE BEHAVIOR OF A CYLINDRICAL REACTOR OF FIXED STREAM BED: THERMAL AND GEOMETRIC ASPECTS

ABSTRACT

This work had as objective to study the thermal behavior of a packed bed reactor, aiming at to evaluate later, through the profiles of temperature in the interior of the reactor, its effective thermal parameters. A bibliographical survey was become fulfilled on the subject in study, developed an applied mathematical model to a fixed stream bed, considering: changeable thermalphysics properties; changeable porosity; Temperature of the fluid in the entrance, function of the radial position; internal generation of energy for chemical reaction. One studied the effect of the transport coefficients on the distribution of temperature in the interior of the stream bed. Mathematica[®] software was used together in the resolution of the equations with the method of the finite volumes. For the gotten results it is verified that the aspect geometric reason does not exert great influence on the thermal gradients. The variation of the transport coefficients plays an important role in the study of the heat transfer in packed bed reactors. The convective term becomes dominant comparative the term of conduction of heat, when it is increased percolante fluid outflow in the stream bed.

Keywords: heat transfer, reactor, elliptical cylinder, finite volumes

¹ Aluna de Curso de Engenharia Química, Unidade Acadêmica de Engenharia Química, UFPG, Campina Grande, PB, e-mail: debora_jamila@yahoo.com.br

² Engenheiro Químico, Prof. Doutor, Unidade Acadêmica de Engenharia Química, UFPG, Campina Grande, PB, Email: laercio@deg.ufcg.edu.br

INTRODUÇÃO

O estudo da transferência de calor em leito fixo pode ser realizado tanto em regime transiente quanto em regime permanente, porém em cada caso, o requisito considerado de importância capital, que deve sempre ser obedecido, é a obtenção de forma mais fidedigna possível dos perfis de temperatura no interior do leito. Embora, a rigor, as técnicas utilizadas para a obtenção dos perfis de temperatura independam do regime em questão, no caso do regime transiente a dificuldade é maior em relação ao regime permanente, pois neste caso existe a necessidade de uma aquisição freqüente e contínua dos perfis de temperatura ao longo do tempo, que podem ser influenciadas pela inércia térmica do tipo de sensor usado no sistema de aquisição de dados.

Particularmente quando o objetivo é controle de temperatura no leito, os modelos adotados são de preferência aqueles mais simples, que exigem menores esforços e tempos computacionais, embora simplificações demasiadas possam levar a previsões errôneas dos perfis de temperatura. Desse modo, a modelagem matemática adequada do fenômeno torna-se um requisito considerado imprescindível. Previsões confiáveis dos perfis de temperatura no leito advêm do conhecimento exato dos parâmetros térmicos do modelo matemático adotado. Para tanto, o uso de valores dos parâmetros de transporte de calor que sejam representativos para qualquer altura do leito (os valores assintóticos) torna-se uma exigência considerada fundamental.

Soluções analíticas ou numéricas da equação da difusão/convecção de calor em reator de leito fixo, para vários casos têm sido reportadas na literatura (Li e Finlayson, 1977; Dixon et al., 1978; Dixon, 1985; Dixon 1993; Dixon, 1996; Borkin e Westrterp, 1992a), contudo, todos os estudos estão limitados ao uso de geometria cilíndrica e poucos são os trabalhos que assumem propriedades termo físicas variáveis com a posição radial e condições de contorno para o fluido na entrada do reator, diferente daquela convencionalmente adotada, ou seja, a de fluxo pistonado. Desta forma fica evidente que mesmo com um grande número de estudos realizados nesta área, ainda existe uma lacuna a ser preenchida no sentido do entendimento dos fenômenos térmicos que ocorrem no interior do reator, e justifica, portanto a necessidade de serem apresentadas soluções mais robustas para o problema em discussão.

METODOLOGIA

Desenvolveu-se um modelo matemático aplicado a um leito fixo, considerando:

- propriedades termofísicas variáveis;
- porosidade variável;
- Temperatura do fluido na entrada, função da posição radial;
- geração interna de energia por reação química.

Estudou –se os efeitos dos coeficientes de transporte sobre a distribuição de temperatura no interior do leito, ao longo da coordenada axial;

Estudou-se os aspectos geométricos do leito para cilindros circulares e cilindros elípticos com a utilização do software Mathematica®.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados obtidos estão relacionados com o desenvolvimento do modelo matemático e a análise da distribuição de temperatura no interior de um reator cilíndrico e os efeitos dos coeficientes de transporte, bem como os efeitos da geometria.

Modelo matemático

De acordo com Oliveira (2004) a equação de transporte de calor convectivo / difusivo em leito fixo, sob coordenadas cilíndricas, é dada pela equação abaixo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r\rho\varepsilon_p T) + \frac{\partial}{\partial z}(r\rho\varepsilon_{pz} T) = \frac{\partial}{\partial r}(rk \frac{\partial T}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial \theta}(\frac{1}{r}k \frac{\partial T}{\partial \theta}) + \frac{\partial}{\partial z}(rk \frac{\partial T}{\partial z}) + qr \quad (01)$$

Foram adotadas as seguintes hipóteses para a solução de problema de transferência de calor:

- i) o sistema encontra-se em regime estacionário;
- ii) os parâmetros térmicos não variam com a posição no leito;
- iii) as propriedades termofísicas das fases são constantes;
- iv) existe simetria cilíndrica do perfil radial de temperatura;
- v) não ocorre reação química, nem há termo(s) de geração interna de energia;
- vi) a velocidade superficial do fluido é constante em qualquer posição no interior do reator ao longo de z, e nula nas direções r e θ ;
- vii) a porosidade do leito é uniforme e constante;
- viii) os gradientes angulares de temperatura são desprezíveis;
- ix) a parede do reator tem espessura desprezível.

A equação 01 se reduz a:

$$Gc_p \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{k_r}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + k_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (02)$$

onde, $G = \rho a_L$ é o fluxo mássico.

As condições de contorno usadas, na obtenção da solução analítica, representadas pela Equação 02 são:

$$T(r, z=0) = T_0(r) \quad (03)$$

$$T(r, z \rightarrow \infty) = T_m \quad (04)$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} (r=0, z) = 0 \quad (05)$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial r} (r=R, z) = h_w (T - T_m) \quad (06)$$

Para facilitar a obtenção da solução da Equação 02, consideram-se as seguintes variáveis adimensionais,

$$T^* = \frac{(T - T_m)}{(T_0(r=0) - T_m)}; \quad Bi = \frac{h_w}{k_r} R \quad (07)$$

onde Bi é o número de Biot para a transferência de calor, definido como sendo a razão entre a resistência interna à transferência de calor por convecção a resistência à transferência de calor na camada limite externa por condução.

Análise dos coeficientes de transporte de calor para cilindro circular

Para obter os resultados, foi gerado um programa computacional codificado no Software Mathematica®. As Figuras 1-7, abaixo, mostram a distribuição de temperatura adimensional e as linhas isotérmicas no interior do leito, sob várias condições de trabalho. Os valores de parâmetros utilizados na geração dos resultados apresentados nas Figuras de 1-7 foram: k_r (0; 0,1; 10; 100) W/mK; k_z (0,1; 10; 100); G (0,05; 0,99) kg/s/m²; $Bi = 1$; $c_p = 1000$ J/kgK;

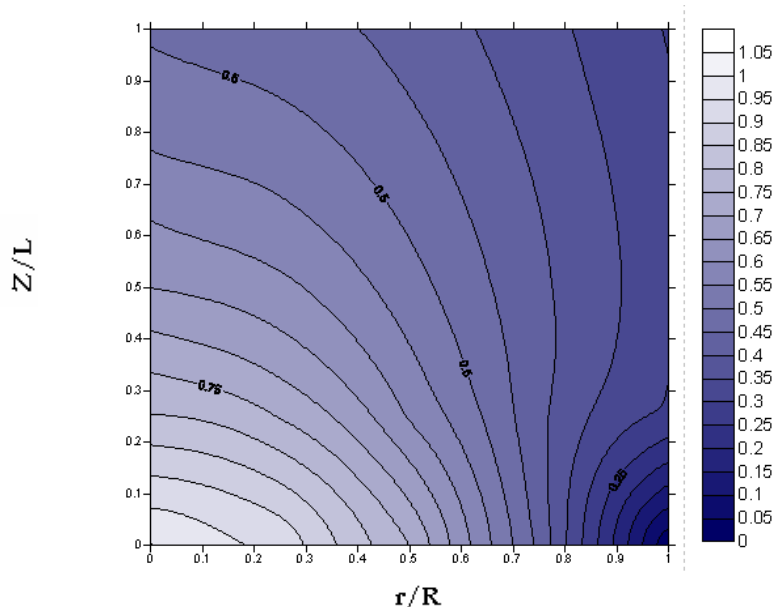


Figura 1-Distribuição de temperatura adimensional quando $k_r=0,1\text{W/mK}$; $k_z=0,1\text{ W/mK}$; $Bi=1,0$; $c_p=1000\text{ J/kgK}$ e $G=0,05\text{ kg/s/m}^2$

Observando-se as Figuras 1-7, percebemos que a temperatura sofre variações ao longo de ambas as posições adimensionais, radial e axial. Vale ressaltar que os maiores valores de temperatura estão concentrados no centro e na entrada do reator. Os maiores gradientes térmicos ocorrem na posição radial, tendendo sempre na região próxima da parede a mesma atingir a temperatura do fluido refrigerante.

Nas Figuras 1, 2, e 3, aumentou-se a condutividade térmica efetiva axial e manteve-se constante os demais parâmetros (k_r , Bi , c_p e G). O aumento da condutividade axial provocou um deslocamento das isolinhas de temperatura mais rapidamente em direção à parede, isto fica claro quando focalizamos a atenção sobre a isolinha de temperatura 0,5. A troca térmica entre o fluido percolante e o fluido refrigerante se torna mais eficiente. Sob essas condições operacionais, o termo de dispersão axial do calor na equação da energia (Eq 02) torna-se dominante quando comparado à dispersão radial e convectiva de calor.

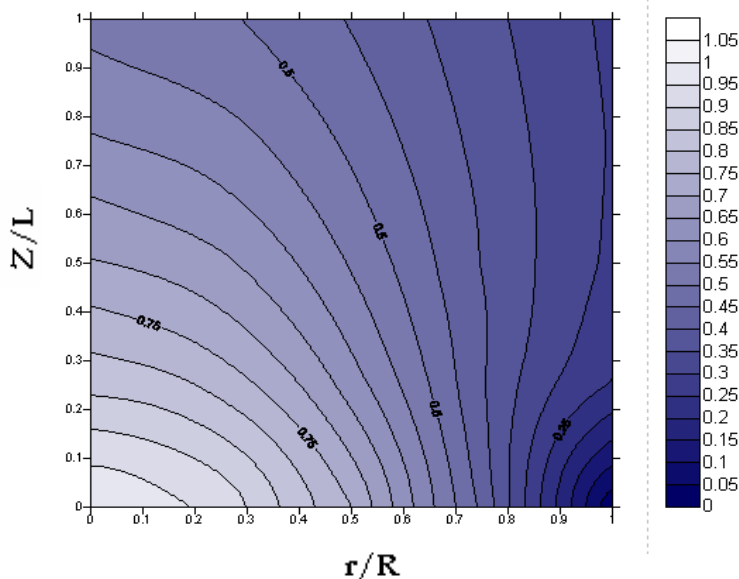


Figura 2-Distribuição de temperatura adimensional quando $k_r=0,1\text{W/mK}$; $k_z=10\text{ W/mK}$; $Bi=1,0$; $c_p=1000\text{ J/kgK}$ e $G=0,05\text{ kg/s/m}^2$

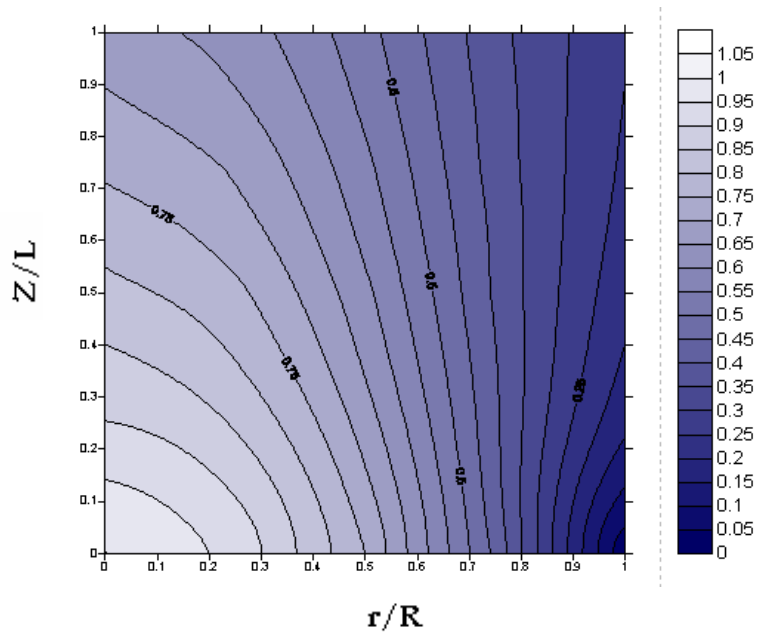


Figura 3-Distribuição de temperatura adimensional quando $k_r=0,1\text{W/mK}$; $k_z=100\text{ W/mK}$; $Bi=1,0$; $c_p=1000\text{ J/kgK}$ e $G=0,05\text{ kg/s/m}^2$

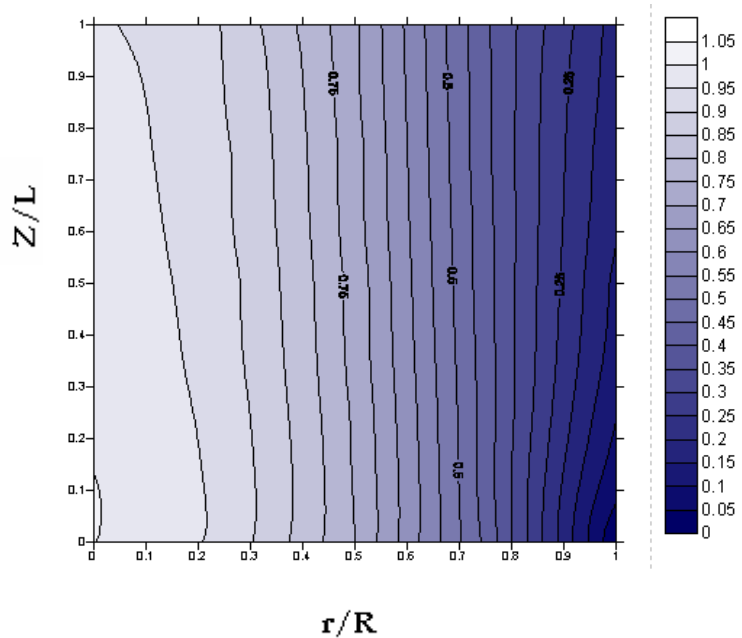


Figura 4-Distribuição de temperatura adimensional quando $k_r=0,1\text{W/mK}$; $k_z=0,1\text{ W/mK}$; $Bi=1,0$; $c_p=1000\text{ J/kgK}$ e $G=0,99\text{ kg/s/m}^2$

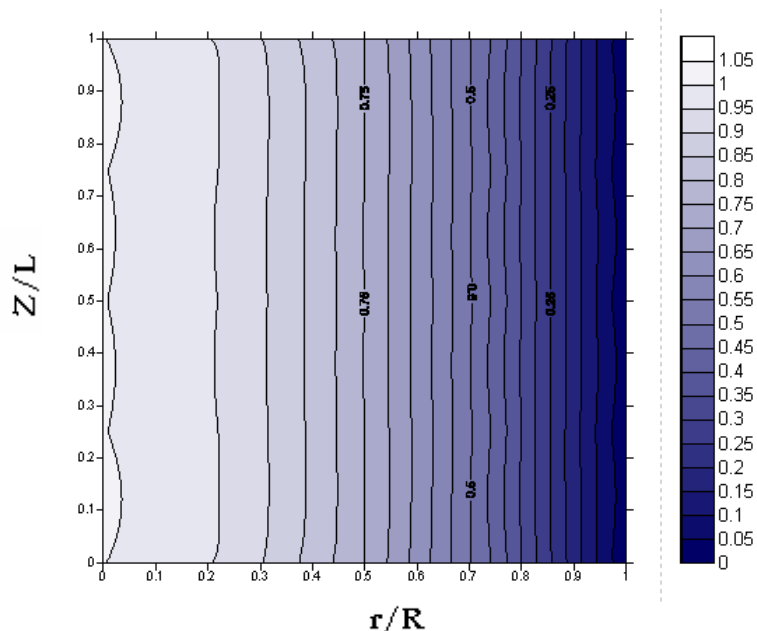


Figura 5-Distribuição de temperatura adimensional quando $k_r=0$ W/mK; $k_z=0,1$ W/mK; $Bi=1,0$; $c_p=1000$ J/kgK e $G=0,05$ kg/s/m²

Nas Figuras 4 e 5, variou-se a condutividade térmica efetiva radial e fluxo mássico de alimentação do fluido percolante e manteve-se constante os demais parâmetros (k_z , Bi e c_p). Comparando-se as Figuras 4 e 5, percebe-se que a alteração da condutividade térmica radial e do fluxo mássico provocou uma acentuada modificação no comportamento térmico do leito. É importante destacar que sob essas condições de trabalho praticamente não existe gradiente térmico na direção axial, mostrando que o termo de dispersão axial não exerce, praticamente, nenhuma influência sobre as trocas de calor no interior do leito, ou que seu valor absoluto é desprezível quando comparado com os demais termos da equação da energia (Equação 02). Pode –se notar, facilmente, que as isotermas das Figuras 4 e 5 sofreram uma acentuada modificação em relação as demais Figuras, tornando-se praticamente verticais. Essa modificação pode estar, talvez, atribuída à brusca alteração que foi imposta ao fluxo mássico de alimentação, fazendo com que o termo dominante na equação da energia seja o termo convectivo.

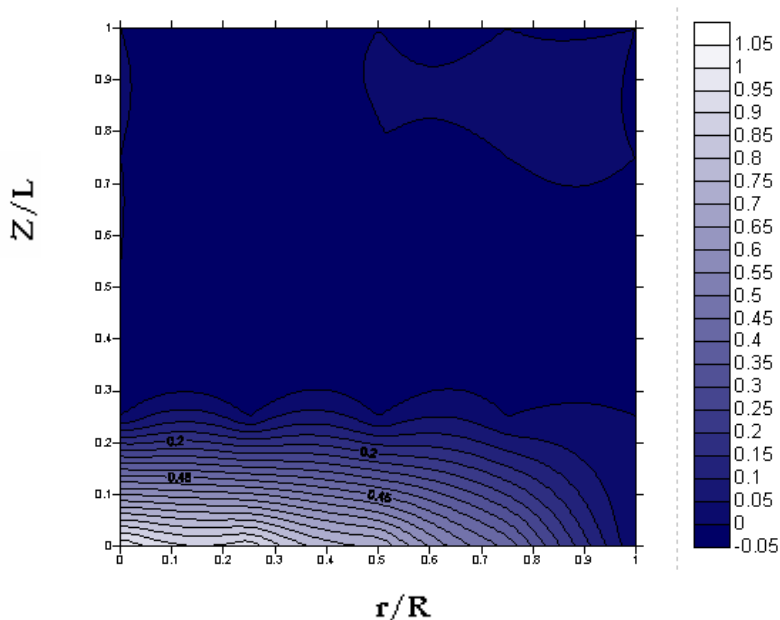


Figura 6-Distribuição de temperatura adimensional quando $k_r=10$ W/mK; $k_z=0,1$ W/mK; $Bi=1,0$; $c_p=1000$ J/kgK e $G=0,05$ kg/s/m²

Nas Figuras 6 e 7, variou-se a condutividade térmica efetiva radial e manteve-se constante os demais parâmetros (k_z , Bi , c_p e G). Comparando-se as Figuras 6 e 7, percebe-se que aumentando em (10) dez vezes a condutividade térmica efetiva radial nenhuma modificação foi observada no comportamento térmico do leito. Sob as condições operacionais das Figuras acima a dispersão radial de calor não se refletiu como termo dominante na equação de difusão/convecção. É importante destacar que, sob uma ótica experimental, a troca de um recheio de menor condutividade radial por um de condutividade radial dez vezes maior, talvez não seja uma alternativa mais apropriada. Pode-se notar, que as isotermais das Figuras 6 e 7, rapidamente, tendem a atingir a temperatura do fluido refrigerante nas direções radial e axial.

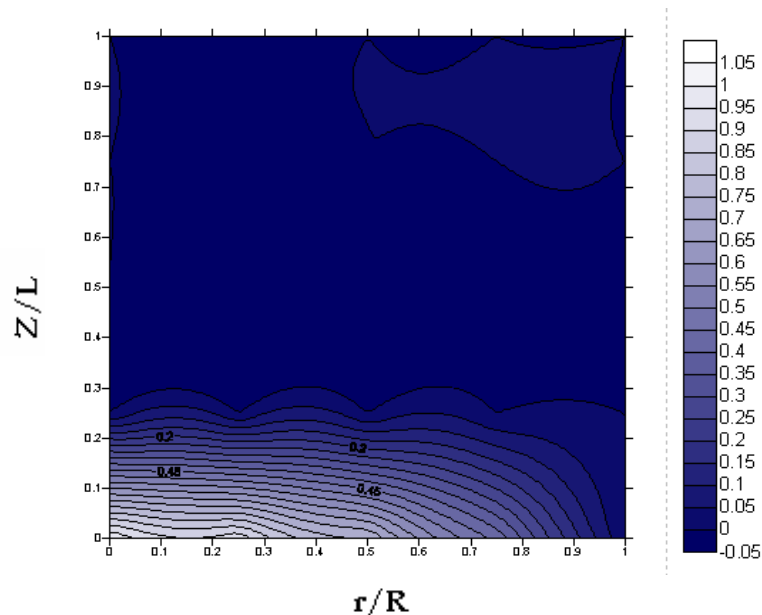


Figura 7-Distribuição de temperatura adimensional quando $k_r=100$ W/mK; $k_z=0,1$ W/mK; $Bi=1,0$; $c_p=1000$ J/kgK e $G=0,05$ kg/s/m²

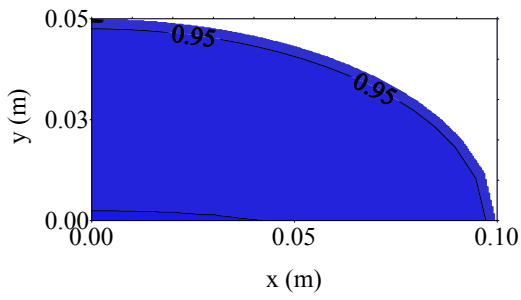
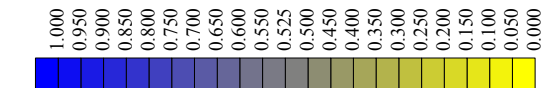
Distribuição de temperatura em um reator cilíndrico elíptico de leito fixo

O estudo da geometria para reatores de leitos compactados é um requisito fundamental para o bom entendimento dos fenômenos envolvidos no movimento de fluidos assim como da transferência de calor através de sistemas particulados.

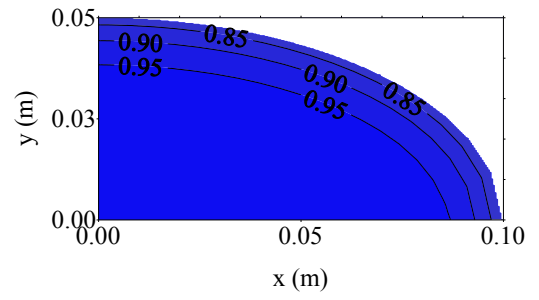
Para estudar o comportamento da distribuição de temperatura no interior do reator de leito compactado foi gerado um programa computacional codificado no Software Mathematica®.com os seguintes valores da condutividade térmica efetiva, velocidade intersticial, densidade e calor específico do gás, porosidade e dimensões do leito foram utilizados: $k=0,1$ W/mK, $\rho=0,109488$ kg/m³ , $u^z = 0,11417$ m/s, $c_p=1000$ J/kgK, $\varepsilon= 0,4$, $L_1=0,05$ m, $L_2=0,10$ e $0,25$ m e $H=0,2$ m.

A análise de distribuição de temperatura no interior do reator é muito importante a fim de verificar a estabilidade térmica do equipamento, assim como analisar se a solução numérica proposta é estatisticamente adequada para descrever o processo.

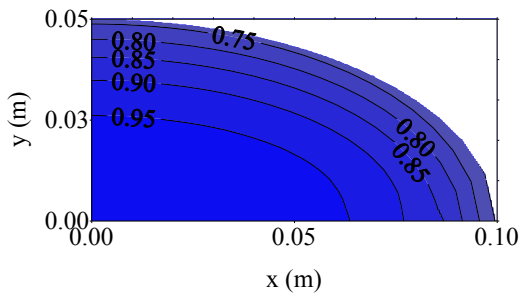
A representação dos perfis de temperatura adimensionais radiais e angulares no interior do leito fixo em estado estacionário, nas posições axiais $z=0,0056$ m , $z=0,03889$ m, $z=0,19444$ m e são mostradas nas Figuras 8 a 11, para valores de razão de aspecto geométrica $L_2/L_1 = 2$ e 5 , e coeficientes de transferência de calor parede-leito $h_w = 2,0$ W/m²K e infinito.



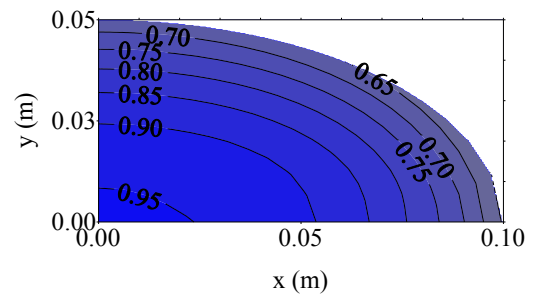
a) $z = 0.00556$ m



b) $z = 0.03889$ m

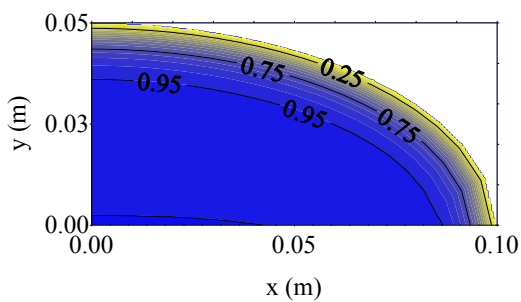
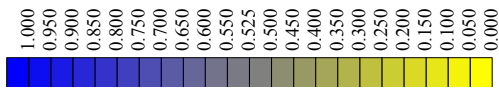


c) $z = 0.10556$ m

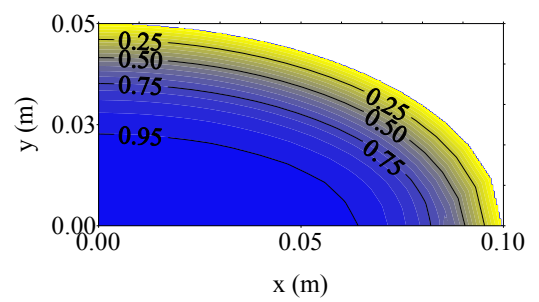


d) $z = 0.19444$ m

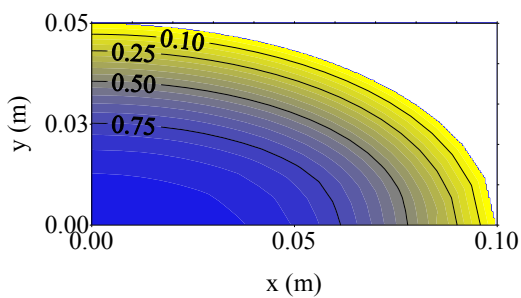
Figura 8 - Distribuição de temperatura no leito para $L_2/L_1 = 2,0$ e $hw = 2,0W/m^2K$.



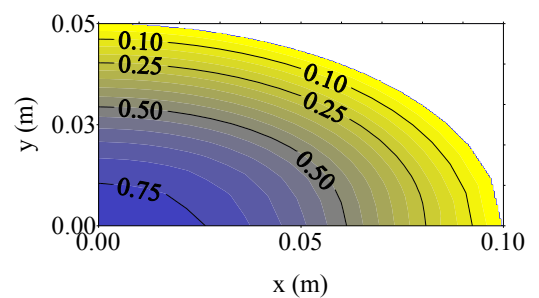
a) $z = 0,00556$ m



b) $z = 0,03889$ m



c) $z = 0,10556$ m



d) $z = 0,19444$ m

Figura 9 - Distribuição de temperatura no leito para $L_2/L_1 = 2,0$ e hw infinito.

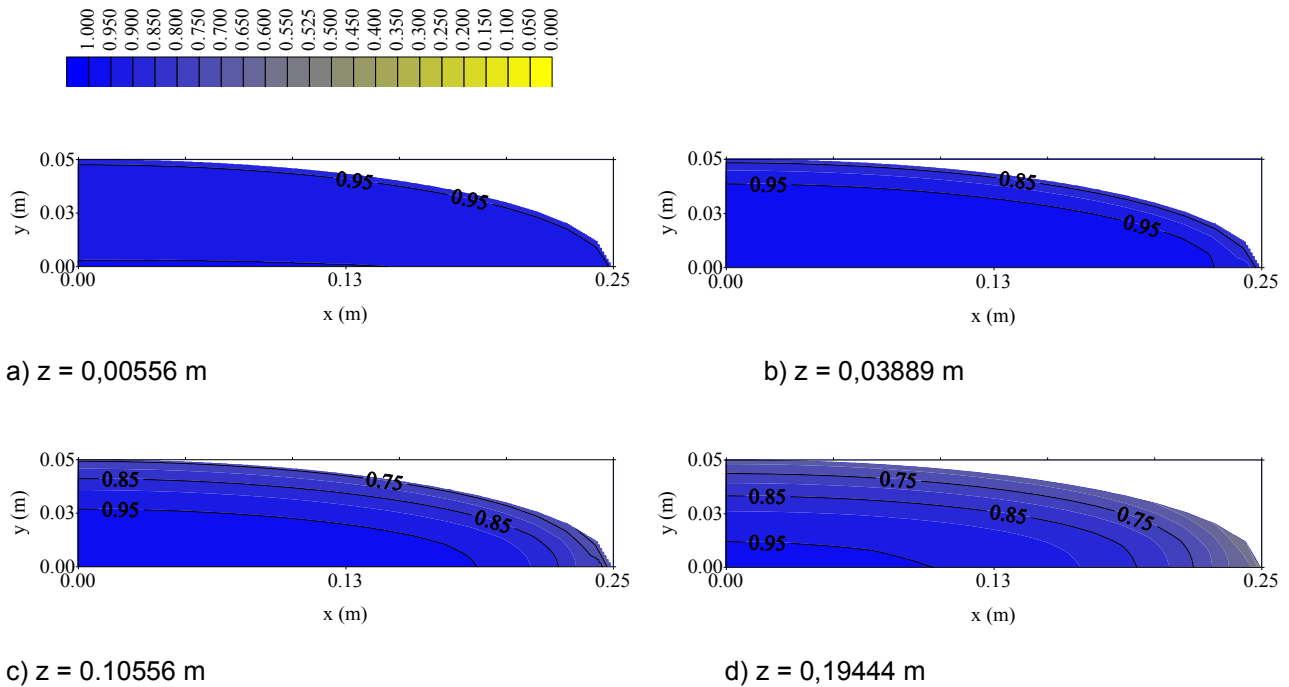


Figura 10 - Distribuição de temperatura no leito para $L_2/L_1 = 5,0$ e $h_w = 2,0 \text{ W/m}^2\text{K}$.

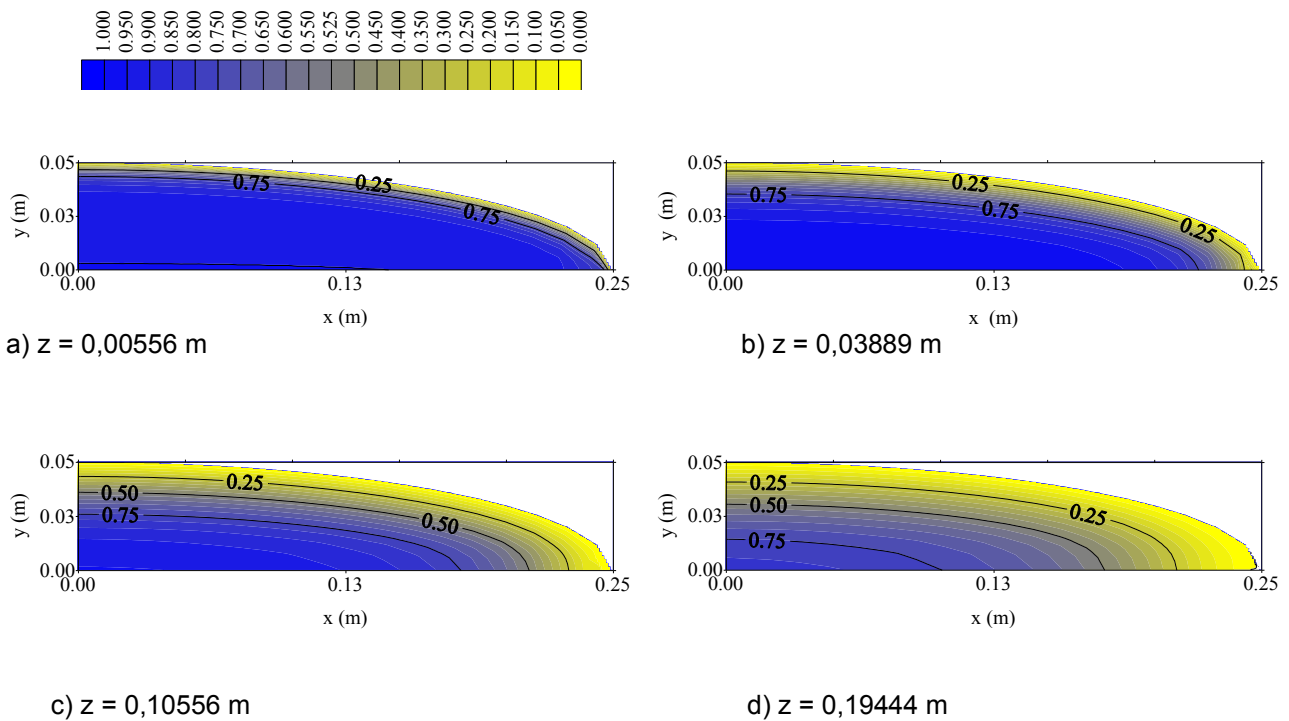


Figura 11 - Distribuição de temperatura no leito para $L_2/L_1 = 5,0$ e h_w infinito.

Observando-se as Figuras de 8 a 11 de mesma razão de aspecto geométrica L_2/L_1 e mesmo coeficiente de transferência de calor h_w , mas com diferentes alturas de leito compactado, podemos verificar que as isolinhas de maiores temperaturas se deslocam para o centro do reator de leito fixo, gerando assim grandes gradientes de temperatura. Este fato pode estar associado à razão altura do leito por diâmetro, H/L_1 , torna-se cada vez maior para leitos de maior comprimento de altura, fazendo assim os efeitos térmicos de entrada tornarem-se cada vez menos pronunciados.

Podemos verificar também que aumentando se o coeficiente de transferência de calor, h_w , de $2,0 \text{ W/m}^2\text{K}$ para infinito e mantendo-se constante a razão de aspecto geométrica L_2/L_1 , aumenta-se,

consequentemente, as regiões de maiores gradientes térmicos, aparecendo assim um maior número de isolinhas de temperatura com valores cada vez menores, isto pode ser observado comparando-se as Figuras 8 e 9 ou as Figuras 10 e 11. Acredita-se que isso ocorre devido o fato de que para elevados valores de transferência de calor, no caso $h_w = \text{infinito}$, o mecanismo de transporte de calor convectivo torna-se dominante em relação a taxa de transporte por condução.

De acordo com as Figuras de 8 a 11, não há influência significativa sobre os mecanismos de transporte de calor quando se altera a razão de aspecto geométrica L_2/L_1 de 2,0 para 5,0, apesar do aumento na área de fluxo de calor.

Comparando-se as Figuras, verificamos que as regiões de maiores gradientes térmicos situam-se próximas a $y=L_2$ caracterizando-se dessa forma, como a região mais crítica para a transferência de calor no reator elíptico.

CONCLUSÕES

Dos resultados obtidos na análise dos coeficientes de transporte de calor para cilindro circular, é possível apresentar as seguintes conclusões:

- A temperatura sofre, no interior do reator, variações nas direções radial e axial;
- Os maiores gradientes térmicos são encontrados na direção radial;
- O fluxo mássico provoca uma acentuada modificação nas isolinhas de temperatura;
- Aumentando em (10) dez vezes o valor de k_r , sob as condições trabalhadas, o leito tende rapidamente à temperatura do fluido refrigerante;
- O aumento de k_z , sob as condições trabalhadas, provoca um deslocamento das isolinhas de temperatura mais rapidamente em direção à parede.

Dos resultados obtidos no estudo da distribuição de temperatura em um reator cilíndrico elíptico de leito fixo, é possível apresentar as seguintes conclusões:

- Diferentes alturas de leito empacotado geram gradientes de temperatura;
- Elevando-se o coeficiente de transferência de calor de $2,0 \text{ W/m}^2\text{K}$ para infinito, para uma mesma razão de aspecto geométrica, aumenta-se o número de isolinhas de temperatura;
- Não há influência significativa sobre os mecanismos de transporte de calor quando se altera a razão de aspecto geométrica L_2/L_1 de 2,0 para 5,0;
- A região mais crítica para a transferência de calor em um reator elíptico situa-se próxima a $y=L_2$.

AGRADECIMENTOS

Ao CNPq pela bolsa de Iniciação Científica, à UFCG, à UAEG, meu orientador e meus amigos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Afandizadeh, S., Foumeny, E. A., Desing of packed bed reactors: guide to catalyst shape, size, and loading selection. Applied Thermal Engineering, vol. 21, pp. 669-682, 2001.
- Borkink, J.G.H. and Westerterp, K.R. Determination of effective heat transport coefficients for wall-cooled packed beds. Chem. Eng. Sci., 47: 2337, 1992a.
- Dixon, A.G. An improved equation for the overall heat transfer coefficient in packed beds. Chemical Engineering Processing, 35: 323-331, 1996.
- Dixon, A.G. Angular temperature variations in fixed beds of spheres. Proc. Nat. Heat Transfer Conf., p.55, Atlanta, 1993.
- Dixon, A.G. Paterson, W.R and Cresswell, D.L. Heat transfer in packed beds of low tube/particle diameters ration. ACS – Symp. Series, 65: 238, 1978.
- Dixon, A.G. The length effect on packed bed effective heat tranfer parameters. The Chem. Eng. J., 31: 163, 1985.
- Foumeny, E. A. Moallemi, H. A Moallemi, H. A. Mc Greavy, C. and Castro, J.A.A. Elucidation of mean voidage in packed beds. Canadian Journal of Chemical Engineering, 69, 1010-1015, 1991.
- GAERTNER, R. Modelação Matemática no 3º Grau – uma estratégia de ensino-aprendizagem de matemática no curso de administração de empresa. Blumenau, 1994. Dissertação de Mestrado, Universidade Regional de Blumenau.
- Li, C.H. and Finlayson, B. A. Heat transfer in packed beds- a reevaluation. Chem. Eng. Sci., 32: 1055, 1977.
- Oliveira L. G. “Transferência de calor em reator cilíndrico elíptico de leito fixo: aspectos termofluidodinâmicos e geométricos”, 2004, PhD. Teses, Universidade Federal de Campina Grande.
- Oliveira, L. G., Swarnakar, R., Lima, A. G. B., Steady state model for heat transfer in a packed bed reator of elliptic cylidrical shape. International jounal of Chemical reactor engineering, vol.6, 2008.
- Pillai, K. K., Voidage variation at the wall of packed bed of spheres. Chem. Eng. Sci., vol, 32, pp. 59-61, 1997.
- Puszynski, D. S., Hlavacek, V., Hofmann, H., A revision of multiplicity and parametric sensitivity concepts in nonisothermal nonadiabatic packed bed reactord. Chem. Eng. Sci., vol36, pp. 1605-1609, 1981.
- Roblee, L. H. S., Baird, R. M., Tierney, J. W., Radial porosity variations in packed beds AIChE J., vol., 4, pp. 460-464, 1958.
- Schouten, E. P. S., Westerterp, K. R., Angular temperature variations in a wall-cooled packed-bed reactor. AiChE J., vol. 42, n. 9, pp. 2635-2644, 1996.
- Schwartz, C. E. and Smith, J.M. Flow distribution in packed beds. Ind. Eng. Chem., 45: 1209-1218, 1953.
- SWETZ, F. Quando e Como Podemos usar Modelação? Educação e Matemática. Lisboa, n23, 3º trimestre, 1992.