ESTUDO DA TERMO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL DE UM PFR

A. D. FERREIRA¹ E S. R. FARIAS NETO¹

¹ Universidade Federal de Campina Grande, Departamento de Engenharia Química
Email para contato: alysson.dantas@eq.ufcg.edu.br

RESUMO – Combinação perfeita entre cinética química e projeto de reatores, a engenharia das reações químicas tem sido considerada, junto com as operações unitárias, como o coração dos mais diversos processos industriais em que se faz presente. Neste sentido, esse trabalho estuda e analisa o escoamento reacional não-isotérmico de fluido em um PFR. Foi empregado o software Salome para gerar as malhas e o Ansys CFX para as simulações numéricas. Com os resultados foi possível avaliar a qualidade dos modelos matemáticos utilizados, comparando-os com dados obtidos do software Aspen Plus. Foi possível também prever e analisar o comportamento hidrodinâmico e reacional do escoamento. Os resultados das simulações se mostraram coerentes e o erro relativo na saída do equipamento encontrado foi pequeno.

1. INTRODUÇÃO

O benzeno é usado para a produção de outras substâncias químicas. Os produtos derivados do benzeno que são amplamente produzidos incluem o estireno, o qual é usado na produção de polímeros e plásticos; o fenol, atualmente empregado em resinas e adesivos e o clcicoxano, o qual é usado na manufatura do nylon. O benzeno ainda é usado, porem em quantidades menores, na produção de lubrificantes, corantes, detergentes, fármacos, explosivos e pesticidas (MEIDANSHAH et al., 2011).

São quatro os principais processos químicos para a produção industrial do benzeno: Reforma Catalítica; Hidrodealquilação do Tolueno; Desproporcionamento do Tolueno, e Craqueamento a Vapor.

O processo de hidrodealquilação, também conhecido como HDA, tem o objetivo de produzir benzeno a partir de uma reação entre o tolueno e hidrogênio. Além dessa, ocorre uma reação secundaria, sendo essa indesejada, pois ela consome o benzeno e produz difenil e hidrogênio. Ambas reações ocorrem em fase vapor, e são mostradas a seguir:

Baseado no exposto, a proposta desse trabalho é analisar a reação de hidrodealquilação do tolueno no PFR. A contribuição que se pretende com esta pesquisa é responder alguns questionamentos via fluidodinâmica computacional e análises dos resultados com o intuito de compreender fisicamente os fenômenos das reações químicas.

2. MODELAGEM MATEMÁTICA

O escoamento no reator foi considerado está no regime permanente, não isotérmico, turbulento, apresenta reação química exotérmica e foi desconsiderando o efeito gravitacional. As paredes foram consideradas estáticas, sem rugosidade, sem deslizamento, fluido incompressível. Usou-se o modelo de turbulência SSG Reynolds Stress.

Com base nestas considerações as equações da continuidade (Equação 1); momento (Equação 2), energia (Equação 3) e transferência de massa (Equação 4) podem ser escritas como segue:

$$\nabla (\rho U) = 0 \quad (1)$$

$$\nabla (\rho U \otimes U) + \nabla p - \nabla \left[\mu \left(\nabla U + (\nabla U)^T - \frac{2}{3} \delta \nabla \cdot U \right) \right] - S_M = 0 \quad (2)$$

$$\nabla \left[\rho U \left(h_{tot} + \frac{1}{2} U^2 \right) \right] - \nabla (\lambda \nabla T) - \nabla \cdot (U \cdot \tau) = 0 \quad (3)$$

$$\nabla (\rho U \varphi) - \nabla \left(\left(\rho D_\phi + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla \varphi \right) - S_\varphi = 0 \quad (4)$$

Foram adotadas as seguintes condições de contorno para o PFR:

- Seção de Entrada: Vazão massica prescrita de 11,417 Kg/s e uma temperatura de 902,4K. As frações mássicas de cada componente estão disposta na Tabela 1:

Tabela 1 – Fração Mássicas na Entrada do PFR

$\omega_{Difenil}$	$\omega_{Tolueno}$	$\omega_{Hidrogênio}$	ω_{gua}	ω_{Metano}	$\omega_{Benzeno}$
0	0,0353	0,386	0,522	0,054	0.0027

- Seção de Saída: Pressão média na saída de 0 N/m²;

Os fluidos utilizados no presente trabalho foram o etano, etileno, água, hidrogênio e suas propriedades constam na Tabela 2:

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foram construídas quatro malhas de configurações hexaédrica para o PFR (malha 1 = 1,7x10⁵, malha 2 = 2,3x10⁵, malha 3 = 2.8x10⁵ e malha 4 = 3,4x10⁵), para serem utilizadas no estudo de dependência de malha. Foram tomados valores numéricos da conversão

Tabela 2 – Propriedades dos Fluidos

Propriedades	Difenil	Tolueno	Hidrogênio	Água	Metano	Benzeno
Densidade (Kg/m^3)	1041	863	0.07	1000	0,717	876
Condutividade Térmica (W/mK)	0.067	0.130	0.181	0.019	0.034	0.010
Viscosidade (Ns/m^2)	3.2×10^{-4}	8.6×10^{-4}	8.8×10^{-6}	9.4×10^{-6}	1.1×10^{-5}	9.9×10^{-3}
Cp (J/KgK)	2620.9	Constantes da NASA	Constantes da NASA	2080.1	Constantes da NASA	Constantes da NASA
Massa Molar ($Kg/Kmol$)	154.21	92.141	2.016	18.02	16.04	78.11

Figura 1 – Posição da coleta de dados.

na posição L1, conforme ilustrado na Figura 1. A partir desses valores, compararam-se os resultados das diferentes malhas.

Realizada a análise, observa-se na Figura 2 que as curvas das malhas propostas se sobrepõe, ou seja, para diferentes refinamentos da malha, são encontrados os mesmos resultados, garantindo assim uma independência de malha.

Para se verificar a eficiência do modelo proposto na representação da reação de hidrodealquilação ao longo do PFR, comparou-se o resultado da simulação com um resultado obtido pelo software Aspen Plus.

Na Figura 3 estão representados os valores da conversão do tolueno em função do comprimento do reator. Observa-se que os resultados obtidos da simulação via CFD apresentam uma boa aproximação quando comparado com os obtidos com o Aspen Plus®. Foi encontrado um erro relativo de 5,054% na saída do reator, um erro considerado aceitável para fins de comparação entre as metodologias empregadas nos dois aplicativos computacionais utilizados, possibilitando assim, maior confiabilidade dos resultados numéricos via CFD.

Figura 2 – Dependência de Malha.

Figura 3 – Posição da coleta de dados.

4. CONCLUSÃO

A cerca dos resultados obtidos, conclui-se que os modelos matemáticos de conservação de massa, de momento e de transferência de massa sugerido por esse trabalho e o modelo de turbulência SSG Reynolds Stress, foram capazes de prever o comportamento da mistura da corrente fluida no PFR, bem como o fenômeno de reação química.

5. REFERÊNCIAS

MEIDANSHAH, V.; BAHMANPOUR, A. M.; IRANSHAH, D.; RAHIMPOUR, M. R. Theoretical investigation of aromatics production enhancement in thermal coupling of naphtha reforming and hydrodealkylation of toluene. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 50, 893 – 903, 2011.