

---

# XII Encontro Luso-Galego de Química

---



Livro de Resumos

## Exponor

Feira Internacional do Porto  
Matosinhos  
11 a 13 de Novembro de 1998



Sociedade Portuguesa de Química  
DELEGAÇÃO DO PORTO



Colégio Oficial de Químicos



Associação Nacional de Químicos da Galiza

## RESOLUÇÃO DE UM SISTEMA DE PDE'S DE UMA REACÇÃO EM LEITO FIXO

Guiné, R. P. F.<sup>1</sup>; Castro, J. A. A. M.<sup>2</sup>; Oliveira, M. P. S.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto Politécnico de Viseu, <sup>2</sup>Universidade de Coimbra

Os reactores de leito fixo dominam actualmente a indústria química, particularmente no que respeita às reacções em fase gasosa, permitindo produções em grande escala a custos razoavelmente económicos. No entanto, sendo a grande maioria das reacções exotérmicas, é necessário um apertado controlo das variáveis do processo, baseado na capacidade de previsão do comportamento do sistema face a perturbações externas.

O sistema que serve de base ao trabalho apresentado é descrito por um conjunto de duas equações de derivadas parciais que resultam dos balanços mássico e energético a um reactor de leito fixo onde se dá a reacção em fase gasosa de síntese de anidrido ftálico a partir do orto-xileno. Essas equações representam a evolução das variáveis concentração e temperatura dentro do reactor, e a sua não linearidade resulta do termo de reacção química que está relacionado com a cinética da reacção.

O algoritmo desenvolvido é aplicável à resolução de sistemas de PDE's não lineares e baseia-se no método das linhas sendo a descretização das equações feita por aproximação das derivadas por diferenças finitas. A integração na variável independente é realizada com "software" robusto já disponível para resolução de sistemas de ODE's/AE's.

É definida uma grelha base, constante no tempo, e em cada estágio de tempo localizam-se as zonas onde a solução é mais fraca. Procede-se depois ao refinamento em cada subintervalo por resolução das equações em grelhas sucessivamente mais apertadas, e por fim actualiza-se a solução nos pontos da grelha base a partir da solução refinada.

Foram desenvolvidos quatro modelos para a resolução em estado estacionário, que diferem essencialmente no tipo de aproximação que é utilizado para o cálculo das 1ª e

2ª derivadas e na inclusão ou não das equações relativas aos pontos fronteiros directamente no sistema de equações algébricas a resolver. Da observação dos resultados obtidos com os quatro modelos foi possível seleccionar o que melhor representa o estado estacionário, que corresponde à solução inicial do problema transiente.

Para se poder avaliar o algoritmo desenvolvido é necessário dispôr de um “padrão” que possa servir para comparação e, uma vez que a solução exacta não é conhecida, a solução de referência é calculada também numericamente, mas com um passo de discretização tão pequeno quanto possível. Para a sua determinação foram utilizados dois métodos que se revelaram igualmente satisfatórios.

Em estado transiente, para uma perturbação de +20% na temperatura da alimentação é feita a comparação entre a solução de referência e a solução calculada com refinamento e verifica-se que, embora a evolução da variável concentração não apresente diferenças assinaláveis, relativamente à evolução da temperatura já há algumas considerações importantes a fazer. De facto, a solução refinada é aparentemente mais fraca, mas isso resulta apenas de limitações na representação gráfica, uma vez que a solução refinada é conhecida em bastante mais pontos do que os que constituem a grelha base representada.

É feita ainda a comparação de soluções obtidas por vários métodos para  $t=0,05$  seg. após a introdução da mesma perturbação de +20% na temperatura da alimentação. Verifica-se no início do reactor, que corresponde para este instante de tempo à zona crítica em que há mudanças bruscas de temperatura, que a solução refinada é até melhor do que a de referência, o que se revela bastante importante tendo em atenção que a solução refinada demora cerca de metade do tempo a ser obtida.

## Bibliografia

- Fung, K.Y., Tripp, J., Goble, B., “*Adaptive Refinement with Truncation Error Injection*”, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **66**, 1-16 (1987)
- Froment, G.F., Bischoff, K.B., “*Chemical Reactor Analysis and Design*”, 2nd Ed., John Willey and Sons, New York (1990)
- Kulkarni, M.S., Duducovic, M. P., “*A Robust Algorithm for Fixed-Bed Reactors with Steep Moving Temperature and Reaction Fronts*”, Chemical Engineering Science, vol **51**, nº 4, 571-585 (1996)
- Oliveira, F., Oliveira, P., Lopes, M. C., Castro, J. A. A. M., “*Two Adaptive Grid Methods for Fixed Bed Systems Simulation*”, Computers & Chemical Engineering, vol **18**, nº 3 227-243 (1994)