

# 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  $\alpha$ -ME, simulando-se os comportamentos dos reagentes  $H_2$  e  $\alpha$ -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  $\alpha$ -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  $\alpha$  - ME was also evaluated, and the behaviour of  $H_2$  and  $\alpha$  - 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  $\alpha$  - ME) in the phases, sensibility analysis of the model and forced cyclic operation example were studied.