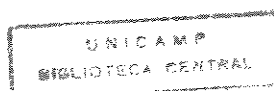


**CRITÉRIOS DE ESTABILIDADE PARA REATORES DE  
LEITO FIXO**

**AUTORA: ENG. VÂNIA DE FÁTIMA RODRIGUES**

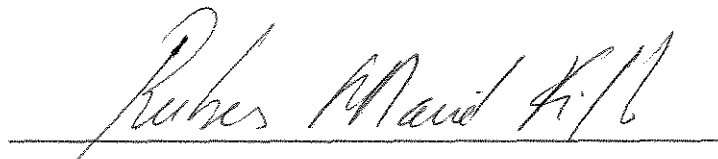
**AGOSTO/94  
CAMPINAS-SP**



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA  
DEPARTAMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

*CRITÉRIOS DE ESTABILIDADE PARA REATORES DE  
LEITO FIXO*

ESTA VERSÃO CORRESPONDE À REDAÇÃO FINAL DA TESE DE  
MESTRADO, DEFENDIDA PELA ENG. VÂNIA DE FÁTIMA RODRIGUES, E  
APROVADA PELA COMISSÃO JULGADORA EM 15/08/94.



PROF. DR. RUBENS MACIEL FILHO

Orientador

AGOSTO/94  
CAMPINAS - SP

FICHA CATALOGRAFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA CENTRAL - UNICAMP

Rodrigues, Vania de Fatima

R618c      Critérios de estabilidade para reatores de leito fixo / Vania  
de Fatima Rodrigues. - - Campinas, SP [s.n.], 1994.

Orientador : Rubens Maciel Filho.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Estadual de Campinas.  
Faculdade de Engenharia Química.

1. Reatores químicos. 2. Estabilidade. I. Maciel Filho,  
Rubens. II Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de  
Engenharia Química. III. Título.

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA  
DEPARTAMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS


**CRITÉRIOS DE ESTABILIDADE PARA REATORES DE  
LEITO FIXO**

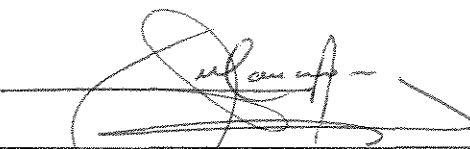
AUTORA: VÂNIA DE FÁTIMA RODRIGUES

Tese submetida à comissão de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Química - UNICAMP - como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química.

Aprovada por:

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Rubens Maciel Filho  
Orientador

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. João Jorge Ribeiro Damasceno

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. José Cláudio Moura

AGOSTO/94  
CAMPINAS - SP

Aos meus pais, José e Isabel  
e a minha filha, Maria Rita  
com carinho.

## AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Rubens Maciel Filho, pela valiosa contribuição na execução deste trabalho, em especial, pela amizade e paciência que demonstrou diante dos problemas que atrasaram o andamento deste.

A UNICAMP, Faculdade de Engenharia Química, Departamento de Processos Químicos, em especial ao LOPCA, Laboratório de Otimização, Projetos e Controle Avançado, pela disposição de suas instalações e suporte computacional.

Aos colegas do Laboratório de Otimização, Projetos e Controle Avançado (LOPCA), em especial ao amigo Vandoel Pedro Barbosa Júnior pelo carinho e amizade.

A todos aqueles que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

Ao CNPq pela bolsa de estudo oferecida.

A minha filha Maria Rita, que nasceu durante a execução deste trabalho, pela graça da sua presença.

Finalmente agradeço a DEUS, por ter conseguido concluir este trabalho.

## RESUMO

O sucesso de muitos processos industriais depende de uma troca de calor adequada de forma que uma operação estável com alta performance possa ser obtida. Para tanto é necessário definir procedimentos que permitam tomar decisões quanto ao projeto e operação do sistema.

Neste trabalho é proposto um procedimento para avaliação da estabilidade de reatores de leito fixo com reações altamente exotérmicas. A reação em estudo é a oxidação do etanol a acetaldeído sobre Fe-Mo.

É mostrado que através da definição de coeficientes de sensibilidade paramétrica e sua incorporação no modelo do sistema é possível obter informações de projeto e procedimento operacional que garantam a estabilidade do processo.

De uma maneira geral, no projeto de reatores químicos duas metas principais são: garantir faixas de operações seguras com alta performance e minimizar o comprimento do reator. Estes conceitos são usados neste trabalho como critério de comparação entre as possíveis configurações para o fluxo do refrigerante.

Diferentes esquemas para o fluxo do refrigerante são comparados através da análise dos coeficientes de sensibilidade paramétrica. Os resultados obtidos mostram a vantagem do esquema concorrente.

## ÍNDICE

Notação . . . . .	i
Lista de Figuras . . . . .	iii
Capítulo 1      Introdução. . . . .	1
Capítulo 2      Revisão Bibliográfica . . . . .	4
2.1 - Introdução . . . . .	4
2.2 - Reatores de Leito Fixo . . . . .	4
2.3 - Sensitividade Paramétrica . . . . .	6
2.4 - Conclusões . . . . .	12
Capítulo 3      Modelo Matemático . . . . .	13
3.1 - Introdução . . . . .	13
3.2 - Modelo Matemático . . . . .	13
3.3 - Influência do Fluxo Refrigerante na Performance do Reator . . . . .	23
3.4 - Conclusões . . . . .	31
Capítulo 4      Coeficientes de Sensitividade Paramétrica . .	32
4.1 - Introdução . . . . .	32
4.2 - Coeficientes de Sensitividade Paramétrica . . . . .	35
4.3 - Configurações do Fluxo do Refrigerante . . . . .	39
4.4 - Resultados . . . . .	41
4.4.1 - Análise da Sensitividade Paramétrica . . . . .	41
4.4.2 - Análise da Temperatura de Alimentação . . . . .	46
4.4.3 - Análise do Perfil de Temperatura Máxima . . . . .	48
4.4.4 - Análise da Sensitividade Paramétrica Máxima . . . .	50
4.4.5 - Análise do Comprimento do Reator . . . . .	52
4.5 - Conclusões . . . . .	54



Capítulo 5	Configurações Alternativas de Refrigeração .	56
5.1	- Introdução . . . . .	56
5.2	- Configurações Alternativas . . . . .	57
5.3	- Resultados . . . . .	60
5.3.1	- Configuração Alternativa 1 . . . . .	60
5.3.1.1	- Análise da Temperatura Máxima . . . . .	62
5.3.1.2	- Análise da Sensitividade Paramétrica Máxima . . .	66
5.3.1.3	- Análise da Temperatura de Alimentação . . . . .	70
5.3.2	- Configuração Alternativa 2 . . . . .	74
5.3.2.1	- Análise da Temperatura Máxima . . . . .	74
5.3.2.2	- Análise da Sensitividade Paramétrica Máxima . . .	76
5.3.2.3	- Análise da Temperatura de Alimentação . . . . .	79
5.4	- Conclusões . . . . .	82
Capítulo 6	- Configuração Concorrente . . . . .	83
6.1	- Introdução . . . . .	83
6.2	- Resultados . . . . .	84
6.2.1	- Influência da Vazão do Refrigerante . . . . .	84
6.2.2	- Influência da Vazão do Gás Reagente . . . . .	89
6.2.3	- Influência da Razão Molar . . . . .	93
6.2.4	- Influência da Pressão Total . . . . .	97
6.3	- Conclusões . . . . .	101
Capítulo 7	- Conclusões e Sugestões . . . . .	102
7.1	- Conclusões . . . . .	102
7.2	- Sugestões para Trabalhos Futuros. . . . .	104
Bibliografia	. . . . .	105
Apêndices	. . . . .	109

## NOTAÇÃO

$C_{Pg}$	capacidade calorífica do gás reagente	kcal/kg.°C
$C_{Pc}$	capacidade calorífica do fluido refrigerante	kcal/kg.°C
$d_e$	diâmetro externo do reator	m
$d_p$	diâmetro da partícula	m
$d_t$	diâmetro interno do reator	m
$E$	energia de ativação	atm.m <sup>3</sup> /kmol
$G$	vazão mássica do gás reagente	kg/h.m <sup>2</sup>
$h$	coeficiente interno de troca térmica	cal/h.m <sup>2</sup> °C
$h_e$	coeficiente externo de troca térmica	cal/h.m <sup>2</sup> °C
$K_a$	condutividade térmica do aço inoxidável	kcal/h.m°C
$K_g$	condutividade térmica do ar	kcal/h.m°C
$K_1$	constante da taxa da reação	Nl/(min.g.atm)
$k_3$	constante de equilíbrio de adsorção	atm <sup>-1</sup>
$K_o$	fator pré-exponencial	
$L$	comprimento do reator	m
$M$	peso molecular médio da mistura reagente	
$N_{RE}$	número de Reynolds	
$P_A$	pressão parcial do etanol	atm
$P_i$	pressão parcial da espécie i	atm
$P_T$	pressão total	atm
$r'$	taxa global da reação	kmol/(h.kg <sub>cat</sub> )
$R_M$	relação molar ar/etanol	
$S_{1j}$	coeficiente de sensibilidade paramétrica	
$S_1$	sensibilidade paramétrica da pressão do etanol	atm/°C
$S_2$	sensibilidade paramétrica da temperatura do reator	
$S_3$	sensibilidade paramétrica da temperatura do refrigerante	
$S_4$	sensibilidade paramétrica da pressão total	atm/°C
$S^*$	sensibilidade paramétrica máxima	
$T$	temperatura do reator	°C
$T_R$	temperatura do reator	R
$T_c$	temperatura do refrigerante	°C
$T_o$	temperatura de alimentação	°C

$T_M$	temperatura máxima	$^{\circ}\text{C}$
$t_n$	número de tubos do reator	
$U$	coeficiente global de troca térmica	$\text{kcal/h.m}^2\text{^{\circ}C}$
$X_A$	conversão do etanol	
$X_L$	conversão final do reator	
$Z$	posição axial do reator	$\text{m}$
$W_C$	vazão do refrigerante	$\text{kg/h}$

### *Letras Gregas*

$\Delta H$	calor de reação	$\text{kcal/kmol}$
$\epsilon$	porosidade do leito	
$\rho_b$	densidade aparente do leito	$\text{kg/m}^3$
$\rho_g$	densidade do gás	$\text{kg/m}^3$
$\rho_{LE}$	densidade do leito catalítico	$\text{kg/m}^3$
$\mu$	viscosidade do gás reagente	$\text{kg/m.h}$

### *ÍNDICES*

$C$	fluido refrigerante
$g$	mistura reagente
$i$	espécie $i$ na reação
$o$	alimentação

## LISTA DE FIGURAS

1	Diagrama PA-T. O ponto M é o máximo da curva máxima . . . . .	9
2	Configurações para o fluxo do fluido refrigerante . . . . .	24
3	Influência da temperatura de alimentação no perfil de temperatura do reator. Esquema concorrente com baixa vazão . . . . .	25
4	Influência da temperatura de alimentação no perfil de temperatura do reator. Esquema contracorrente com baixa vazão . . . . .	26
5	Influência da temperatura de alimentação no perfil de temperatura do reator. Esquema concorrente com alta vazão . . . . .	27
6	Influência da temperatura de alimentação no perfil de temperatura do reator. Esquema contracorrente com alta vazão . . . . .	28
7	Influência da vazão do fluido refrigerante no perfil de temperatura do reator. Escoamento concorrente . . . . .	29
8	Influência da vazão do fluido refrigerante no perfil de temperatura do reator. Escoamento contracorrente . . . . .	30
9	Perfil de sensibilidade paramétrica ao longo do reator no esquema concorrente . . . . .	43
10	Perfil de sensibilidade paramétrica ao longo do reator no esquema contracorrente . . . . .	44
11	Perfil de sensibilidade paramétrica ao longo do reator para $W_c \rightarrow \infty$ no esquema concorrente e contracorrente . . . . .	45
12	Perfil de temperatura de alimentação . . . . .	48

13	Perfil de temperatura máxima . . . . .	50
14	Perfil de sensibilidade paramétrica máxima . . . . .	52
15	Perfil do comprimento total do reator . . . . .	54
16	Esquema da Configuração Alternativa 1 . . . . .	58
17	Esquema da Configuração Alternativa 2 . . . . .	59
18	Perfil de temperatura máxima para a configuração alternativa 1 para $W_{cc} = 20$ kg/h . . . . .	64
19	Perfil de temperatura máxima para a configuração alternativa 1 para $W_{cc} = 50$ kg/h . . . . .	65
20	Perfil de sensibilidade paramétrica máxima para a configuração alternativa 1 para $W_{cc} = 20$ kg/h . . . . .	68
21	Perfil de sensibilidade paramétrica máxima para a configuração alternativa 1 para $W_{cc} = 50$ kg/h . . . . .	69
22	Perfil da temperatura de alimentação dos reagentes na configuração alternativa 1 para $W_{cc} = 20$ kg/h . . . . .	71
23	Perfil da temperatura de alimentação dos reagentes na configuração alternativa 1 para $W_{cc} = 50$ kg/h . . . . .	72
24	Perfil de temperatura máxima para a configuração alternativa 2 para $W_{ct} = 50$ kg/h . . . . .	75
25	Perfil de sensibilidade paramétrica máxima para a configuração alternativa 2 para $W_{cc} = 50$ kg/h . . . . .	77
26	Perfil de sensibilidade paramétrica máxima na região de estabilidade para a configuração alternativa 2 para $W_{cc} = 50$ kg/h . . . . .	78

27	Perfil da temperatura de alimentação dos reagentes na configuração alternativa 2 para $W_{cc} = 50$ kg/h . . . . .	81
28	Influência da vazão de refrigerante no perfil de sensibilidade paramétrica máxima no esquema concorrente . . . . .	86
29	Influência da vazão do refrigerante no perfil de temperatura máxima no esquema concorrente . . . . .	87
30	Influência da vazão do refrigerante no perfil de temperatura de alimentação dos reagentes no esquema concorrente . . . . .	88
31	Influência da vazão dos reagentes no perfil de sensibilidade paramétrica máxima no esquema concorrente . . . . .	90
32	Influência da vazão dos reagentes no perfil de temperatura máxima no esquema concorrente . . . . .	91
33	Influência da vazão dos reagentes no perfil de temperatura de alimentação dos reagentes no esquema concorrente . . . . .	92
34	Influência da razão molar no perfil de sensibilidade paramétrica máxima no esquema concorrente . . . . .	94
35	Influência da razão molar no perfil de temperatura máxima no esquema concorrente . . . . .	95
36	Influência da razão molar no perfil de temperatura de alimentação dos reagentes no esquema concorrente . . . . .	96
37	Influência da pressão total no perfil de sensibilidade paramétrica máxima no esquema concorrente . . . . .	98
38	Influência da pressão total no perfil de temperatura máxima no esquema concorrente . . . . .	99
39	Influência da pressão total no perfil de temperatura de alimentação dos reagentes no esquema concorrente . . . . .	100

# CAPÍTULO 1

## INTRODUÇÃO

Os reatores de leito fixo tem importância destacada na indústria química, petroquímica e correlatas sendo de importância fundamental para o bom desempenho da planta a operação segura e com alta performance do reator. O sistema do tipo leito empacotado com reação química é também interessante para o desenvolvimento de metodologias e procedimentos úteis para aplicações em reatores químicos pois são sistemas bastante estudados e com uma quantidade suficiente de informações que permitem a adoção de um modelo matemático sofisticado.

Neste trabalho a reação de interesse é a da oxidação do etanol a acetaldeído sobre catalisador a base de Fe-Mo, a qual apresenta uma equação de taxa complexa e se processa no interior de um reator de leito fixo. Por ser uma reação extremamente exotérmica, o resfriamento deste equipamento é fundamental para a segurança do processo e para a obtenção do produto desejado com alta seletividade. Da mesma forma o sucesso de muitos processos industriais depende de uma troca de calor adequada de forma que uma operação estável possa ser obtida. Para tanto é necessário definir procedimentos que permitam tomar decisões quanto ao projeto do sistema e procedimento operacional.

O objetivo deste trabalho é o de estudar o reator através de uma modelagem matemática e posterior simulação, com o intuito de verificar o efeito das condições do fluido refrigerante e do projeto mecânico nos perfis de temperatura do reator, uma vez que o comportamento geral das funções  $T(z)$  pode

ser fortemente modificado quando são considerados os gradientes térmicos do fluido refrigerante. Esta análise é feita através de técnicas da sensibilidade paramétrica das variáveis de operação a partir da definição dos coeficientes de sensibilidade e sua incorporação no modelo do sistema. Assim, é possível obter informações de projeto que garantam a estabilidade do processo. Em uma primeira etapa são analisados três modos diferentes para a configuração do fluxo do fluido refrigerante :

- fluxo concorrente;
- fluxo contracorrente;
- fluxo sem gradiente de temperatura.

Numa análise posterior são avaliadas configurações alternativas para o fluxo, de maneira a definir a melhor forma de refrigeração do reator, visando atingir condições seguras de operação com alta performance e maior vida útil para o catalisador. Para análise do comportamento do reator é utilizado um modelo pseudo-homogêneo que se mostra bastante adequado para atingir os objetivos deste trabalho.

Apesar do grande número de trabalhos existentes sobre reatores de leito fixo, relativamente poucos tem-se voltado para a influência do esquema de resfriamento no comportamento global e estabilidade do sistema. Apesar do presente trabalho não considerar modelos rigorosos em termos de projeto mecânico, como considerado por McGreavy e Maciel Filho, 1988 e Maciel Filho e McGreavy, 1993, os resultados obtidos são generalizados.

### *Organização da Dissertação*

O capítulo 1 apresenta uma breve introdução da Tese com seus objetivos e sua organização.



O capítulo 2 consiste da revisão da literatura dos principais tópicos a serem cobertos durante o desenvolvimento do trabalho com ênfase nos critérios de estabilidade mais comumente aceitos na literatura.

O modelo para o reator de leito fixo, considerando o leito fixo de partículas de Fe-Mo como um meio pseudo-homogêneo é apresentado no Capítulo 3.

O conceito de coeficiente de sensibilidade paramétrica e sua extensão e aplicação para o presente tipo de sistema são apresentados no Capítulo 4. Um detalhado estudo de variáveis operacionais e de projeto é também apresentado.

No Capítulo 5, são apresentadas Configurações Alternativas de Refrigeração. Sendo que a análise da melhor performance do sistema, em função dos novos arranjos para o fluxo do fluido refrigerante, é feita em termos da estabilidade do reator com base no conceito de sensibilidade paramétrica.

O Capítulo 6 é dedicado a um estudo detalhado da configuração concorrente para o resfriamento de reatores de leito fixo. A razão deste estudo é explorar os pontos positivos deste tipo de arranjo e elucidar certos pontos importantes, baseando-se nos critérios desenvolvidos neste trabalho, que não foram devidamente tratados na literatura.

O Capítulo 7 condensa as conclusões obtidas neste trabalho e apresenta sugestões para trabalhos futuros.

Finalmente, as deduções das equações dos coeficientes de sensibilidade paramétrica são apresentadas no Apêndice 4.1 e no Apêndice 3.1 é apresentado o software desenvolvido neste trabalho para a modelagem e simulação do reator.

## CAPÍTULO 2

### REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

#### 2.1 - Introdução

Reatores de Leito Fixo são bastante estudados e na literatura encontram-se vários trabalhos sobre a análise da sensibilidade paramétrica, visando atingir uma alta performance para o reator.

Neste capítulo será feito uma abordagem sobre o comportamento de reatores de leito fixo, com ênfase para o processo de oxidação catalítica do etanol a acetaldeído.

#### 2.2 - Reatores de Leito Fixo

A oxidação catalítica do etanol a acetaldeído sobre catalisador de cobre oxidado foi estudada por Moura (1984). A partir da montagem experimental deste trabalho, Maciel Filho (1985) levantou dados cinéticos da oxidação catalítica do etanol a acetaldeído sobre Fe-Mo oxidado. Estes dados foram tratados através de um mecanismo reacional baseado no método de Temkin, sendo deste modo obtido o modelo cinético da oxidação do etanol a acetaldeído. Este apresenta uma equação de taxa complexa seguindo a lei de Arrhenius.

Na literatura grande parte dos trabalhos sobre modelagem de reatores de leito fixo são baseados em um modelo pseudo-homogêneo considerando uma cinética simples para a reação

catalítica, dentre os quais podem ser citados , Welsenaere & Froment (1970), Hosten & Froment (1986), Lopez et al. (1981), Borio et al. (1989) e outros.

Entretanto, na prática industrial, geralmente as reações químicas apresentam uma taxa de reação complexa e os modelos da literatura não se ajustam satisfatoriamente ao processo real para toda a faixa de operação. Assim, as principais deficiências na modelagem dos processos catalíticos com reatores de leito fixo se devem ao fato de que as cinéticas químicas são incompletas ou imprecisas (Froment & Hofmann, 1987). Obviamente isto também tem um impacto sobre os critérios de estabilidade, que são normalmente derivados a partir de equações cinéticas de primeira ordem.

Neste trabalho, ao se utilizar uma reação química com cinética complexa, será abordado como tratar este tipo de problema utilizando-se dos modelos pseudo-homogêneos simplificados visando uma generalização de procedimentos para a modelagem de reatores industriais com ênfase na obtenção de critérios de estabilidade e de projetos que sejam generalizados.

A maior parte dos processos catalíticos envolvendo reagentes gasosos, fazem uso de reatores de leito fixo o qual consiste de um tubo cilíndrico preenchido por partículas de catalisador. O reagente escoar através deste meio poroso. Este tipo de reator apresenta baixo custo de construção, de operação e manutenção, sendo então largamente utilizado. Atualmente, este tipo de sistema tem sido também considerado conveniente para a redução de emissões poluentes, desde que adequadamente projetado (Maciel Filho e McGreavy, 1993).

Para processos onde a reação química é extremamente exotérmica ou requer altas pressões, a utilização de um reator de leito fixo se torna indispensável para minimizar o custo econômico do processo (Hill, 1977) .

As dificuldades relacionadas com o uso de reatores de leito fixo, se devem ao fato da temperatura do reator não ser uniforme ao longo do comprimento do tubo e a maior parte da reação ocorrer nas proximidades da entrada do reator se condições de projeto e operação não forem adequadamente escolhidas.

Em reatores não adiabáticos a temperatura do leito pode ser muito diferente da temperatura na parede, aumentando assim a taxa de reação local ( McGreavy e Maciel Filho, 1988; Maciel Filho, 1989 ). Os efeitos térmicos da reação podem ser reduzidos controlando-se a variação de temperatura e vazão do fluido refrigerante, o que permite então controlar a temperatura interna do reator, como será mostrado neste trabalho.

Uma maneira bastante apropriada para avaliar o comportamento do sistema quando diferentes projetos e procedimentos operacionais são utilizados, é aquela através da simulação por computador. O progresso dos métodos numéricos e o aperfeiçoamento dos modelos matemáticos contribuem para uma modelagem mais rigorosa dos reatores, de forma que resultados mais confiáveis podem ser obtidos.

### 2.3 - Sensitividade Paramétrica

A utilização do conceito de sensitividade paramétrica permite o desenvolvimento de análises úteis para a tomada de decisões. Trabalhos pioneiros sobre sensitividade paramétrica e comportamento "run away" de reatores de leito fixo foram publicados por Bilou & Amundson (1956) e por Barkelew (1959). No entanto o conceito não tem sido explorado com todo o seu potencial. De fato este conceito pode ser utilizado, como

mostrado ao longo deste trabalho, como um possível critério para o projeto de reatores de alta performance com estabilidade controlável.

Quando se processa uma reação química extremamente exotérmica a ocorrência de "hot spots" é praticamente inevitável, sobretudo quando se considera constante a temperatura da parede externa do reator. Para muitos casos a temperatura hot spot é muito sensível a pequenas mudanças nas variáveis de processo, tais como, temperatura de entrada dos reagentes, concentração, temperatura, vazão do fluido refrigerante etc.

Bilous & Amundson (1956) denominaram tais condições de "sensitividade paramétrica". A análise deste fenômeno mostra que alta sensibilidade paramétrica pode levar o reator a operar em condições "run away". Assim o estudo deste fenômeno é uma parte importante para o projeto e operação do reator.

Grande parte dos trabalhos da literatura ( Bilous and Amundson, 1956; Barkelaw, 1959; van Welsenaere and Froment, 1970; Mc Greavy and Adderley, 1974; Rajadhyasha et al., 1975; Oroskar and Stern, 1979; Morbidelli and Varma, 1982 ) baseia-se no modelo pseudo-homogêneo, considerando a temperatura da parede constante e restringem-se a cinéticas simples. Isto significa que intrinsecamente está sendo suposto que o fluido refrigerante tem temperatura constante, o que é uma suposição inadequada em muitos reatores industriais.

Van Welsenaere & Froment (1970) introduziram dois critérios intrínsecos para predizer condições "run away", baseados na ocorrência de pontos característicos no perfil de temperatura do reator. No primeiro critério é proposto que o ponto de máximo, da curva máxima, no diagrama  $P_A$  vs  $T$  é um ponto crítico e determina as condições iniciais de  $P_{A^0}$  e  $T_0$ .

A curva máxima é obtida pela união de todos os valores máximos de temperatura. O segundo critério é baseado na localização dos pontos de inflexão do perfil de temperatura do reator.

Hosten & Froment (1986) desenvolveram um critério intrínseco para sensibilidade paramétrica em reatores tubulares resfriados concorrentemente. Este critério baseia-se essencialmente na aproximação que van Welsenaere & Froment (1970) fizeram para o caso de temperatura constante na parede externa do reator. O método consiste em localizar a temperatura máxima do reator através do diagrama  $T$  vs  $P_a$  e assim calcular os valores críticos das variáveis de entrada (Figura 1).

McGreavy & Adderley (1974) consideraram os efeitos de transferência de massa e calor intrapartículas e interfaces. Eles indicaram que os modelos pseudo-homogêneos somente são boas aproximações para o estudo da sensibilidade paramétrica quando a taxa controladora do processo é a reação química. E somente neste caso os fenômenos de transporte inter ou intrapartículas podem ser negligenciados.

Rajadhyahsa et al. (1976) estenderam o critério de van Welsenaere & Froment (1970) para modelos heterogêneos catalíticos, porém as mesmas suposições simplificadoras anteriormente adotadas, relativas ao fluido refrigerante, foram ainda consideradas. Portanto a contribuição desses autores deve-se basicamente com relação às possíveis resistências à transferência de massa.

Lopez et al. (1981) estudaram a sensibilidade paramétrica de um reator do tipo leito fixo, supondo escoamento empistonado, considerando os gradientes térmicos do fluido refrigerante para a configuração concorrente. Foram analisados diferentes regimes de operação através do conceito de variáveis limites e variáveis críticas, as quais são obtidas por expressões analíticas deduzidas a partir das equações de balanço.

Figura 1

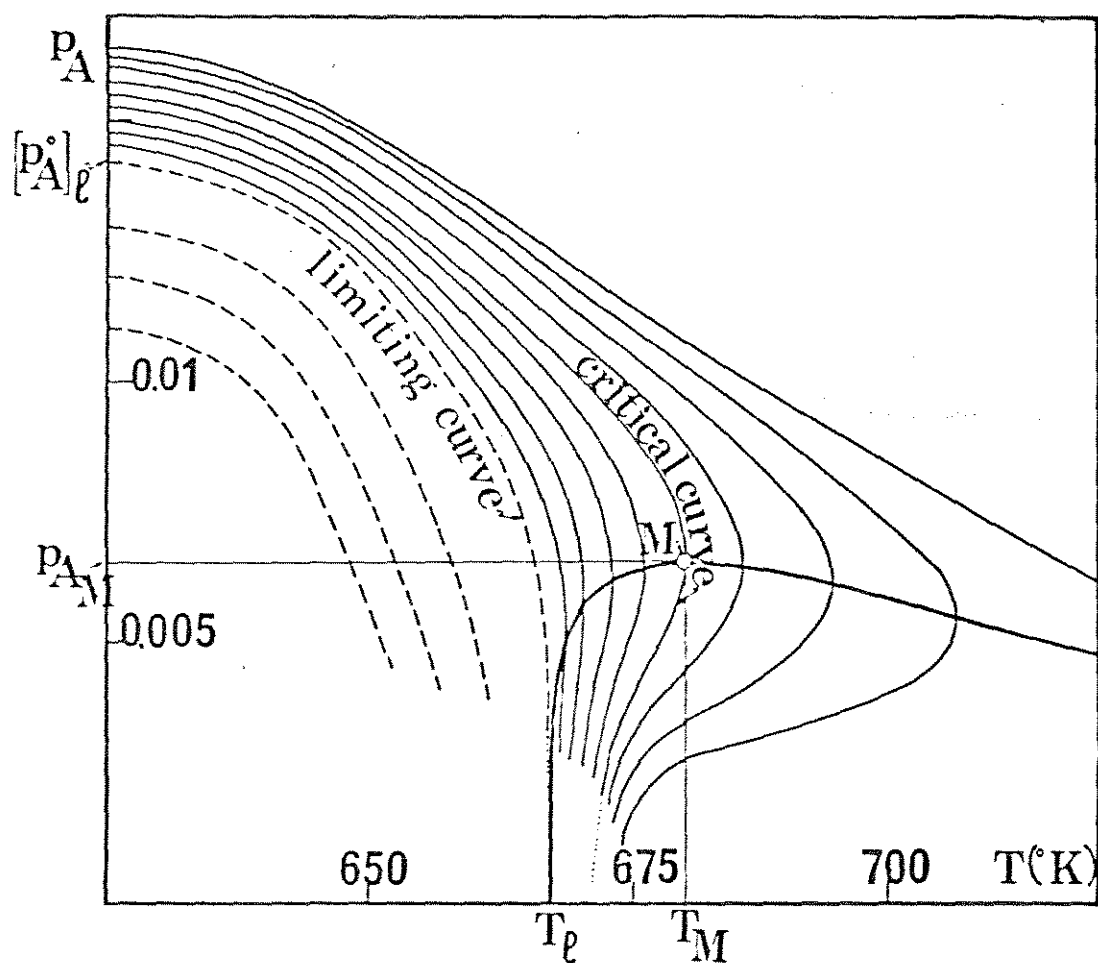


Figura 1 - Diagrama  $P_A$ - $T$ . O ponto  $M$  é o máximo da curva máxima (Lopez et al., 1981).

Hlavacek & Votruba (1977) definiram os coeficientes de sensibilidade paramétrica como critério de estabilidade. Seguindo as idéias do seu trabalho, Henning & Perez (1985) introduziram um critério intrínseco baseado na sensibilidade dos perfis de temperatura do reator com respeito a temperatura de entrada. Foram aplicados estes conceitos para reações múltiplas com bons resultados.

A situação contracorrente foi tratada por Akella & Lee (1983) que propuseram a diluição do catalisador para melhorar a performance do reator. Foi então desenvolvido um método aproximado para prever as condições seguras de operação, baseado na análise do diagrama de temperatura de entrada dos reagentes versus temperatura do fluido refrigerante.

McGreavy & Dunbobbin (1978) analisaram os esquemas concorrente e contracorrente para a refrigeração do reator levando em conta a influência de chicanas e descreveram um modelo mais detalhado para o fluxo do refrigerante. A reação utilizada foi a oxidação do benzeno sobre pentóxido de vanádio para a obtenção do anidrido maléico. A cinética considerada foi simples, de primeira ordem, e a ênfase do trabalho foi basicamente a de mostrar o efeito que o fluxo cruzado de refrigerante tem sobre o comportamento do reator e não o de estabelecer critérios gerais para reatores de leito fixo.

A comparação dos vários critérios de sensibilidade paramétrica com dados experimentais foi feita por El-Sawi et al. (1978) e Emy et al. (1980) e mostra, de uma forma simplificada, o potencial de aplicação da técnica.

Finalmente, Borio et al. (1989) desenvolveram equações básicas para os coeficientes de sensibilidade paramétrica, similar ao método proposto por Hlavacek & Votruba (1977). Estes coeficientes são utilizados como critério de estabilidade do reator. Foram analisados três diferentes configurações para o



fluxo do refrigerante, os quais são comparados através dos coeficientes de sensibilidade paramétrica. Os resultados mostram, de alguma maneira, a vantagem da configuração concorrente para o fluido refrigerante, porém um modelo cinético simplificado foi utilizado e os resultados são válidos somente para configurações convencionais de reatores de leito fixo.

A partir da metodologia proposta na literatura e, em especial, nos procedimentos adotados por Borio et al. (1989) e Hlavacek e Votruba (1977), neste trabalho serão desenvolvidas as equações para os coeficientes de sensibilidade paramétrica de um reator de leito fixo considerando os gradientes térmicos do fluido refrigerante, assim como o tipo de configuração para o seu fluxo. Na metodologia a ser proposta neste trabalho, será dada ênfase para reações cinéticas complexas, exemplificada pela oxidação do etanol a acetaldeído, de modo a permitir generalização dos critérios.

A análise obtida através da solução das equações de balanço em conjunto com as equações dos coeficientes de sensibilidade é importante pois prevê as condições mais adequadas de operação. Assim é possível definir o "design" do reator através de modelos mais detalhados, como os seguidos por Maciel Filho (1989) e por McGreavy & Maciel Filho (1991).

A nível de informação, uma revisão mais detalhada sobre sensibilidade paramétrica de reatores de leito fixo pode ser obtida nos trabalhos publicados por Hlavacek (1970), Froment (1984), Rajadhyaksha & Palekar (1984).

## 2.4 - Conclusões

Neste capítulo foi visto que a análise da sensibilidade paramétrica de reatores de leito fixo é estudada em vários trabalhos na literatura, no entanto os critérios desenvolvidos não são prontamente utilizados para cinéticas complexas e também não pressupõem, de uma maneira geral, variações da temperatura do fluido refrigerante.

A influência do fluido refrigerante nos perfis de temperatura do reator é analisada por vários autores porém de forma simplificada. Assim sendo, devido a importância das condições do meio refrigerante sobre o leito do catalisador, especialmente quando alta performance é considerada (Maciel Filho, 1989), existe necessidade de um estudo sistemático de sua influência no comportamento global do processo, inclusive com proposta de refrigeração alternativa.

## CAPÍTULO 3

### MODELO MATEMÁTICO

#### 3.1 - *Introdução*

Neste capítulo são apresentadas as equações matemáticas que descrevem um reator catalítico não isotérmico, não adiabático, unidimensional e com gradientes térmicos no fluido refrigerante. Também são apresentadas as correlações que permitem os cálculos dos coeficientes de transferência de calor e das propriedades físicas dos compostos químicos utilizados na simulação. O intuito é apresentar um modelo geral que possa ser aplicado para qualquer cinética, embora as equações apresentadas refiram-se à cinética de oxidação do etanol a acetaldeído.

#### 3.2 - *Modelo Matemático*

Para análise do comportamento do reator catalítico de leito fixo será utilizado um modelo pseudo-homogêneo, o qual baseia-se nas seguintes hipóteses:

1. A diferença de temperatura e concentração entre as partículas do catalisador e o fluido reagente é desprezível. Esta consideração é mais exata, quanto maiores forem as vazões utilizadas, o que normalmente ocorre em reatores industriais;

2. A dispersão axial mássica e térmica pode ser ignorada, devido as dimensões axiais dos tubos de acordo com os critérios propostos por Varma (1981);
3. O escoamento dos gases ocorre na forma empistonada, o que é comum em muitos sistemas industriais, especialmente quando diâmetros reduzidos são utilizados;
4. O modelo cinético empregado para a reação catalítica baseia-se numa reação irreversível de pseudo-primeira ordem com a equação de taxa dada por :

$$r' = K P_A P_B^0 \quad (1)$$

onde:

$$K = K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (2)$$

Esta última hipótese não é restrita para a utilização do modelo em processos com cinética complexas, como será mostrado a seguir. Na verdade, é intuito deste capítulo desenvolver expressões que sejam genéricas e que independam do tipo de cinética, visto que normalmente os trabalhos publicados tratam de cinéticas simples de primeira ordem. Assim as equações relacionando  $T$ ,  $T_c$ ,  $P_A$  e  $P_r$  são obtidas sob condições de regime estacionário utilizando-se os balanços de massa, energia e quantidade de movimento.

#### 1. Balanço de Massa

$$\frac{dx_A}{dZ} = \frac{M \rho_B r'}{G} \quad (3)$$

## 2. Balanço de Energia

- Interior do tubo

$$\frac{dT}{dZ} = \frac{(-\Delta H) \rho_B r'}{G C_{pg}} - \frac{4U (T - T_c)}{G C_{pg} d_t} \quad (4)$$

- Para o fluido refrigerante (parede externa do reator )

$$\frac{dT_c}{dZ} = \frac{\pi d_t U t_n (T - T_c)}{W_c C_{pc}} \quad (5)$$

## 3. Balanço de Quantidade de Movimento

$$\frac{dP_T}{dz} = - 7.165 \times 10^{-13} \left( 1.75 + \frac{150 (1 - \epsilon)}{N_{RE}} \right) \frac{(1-\epsilon)}{\epsilon^3} \frac{G^2}{\rho_g d_p} \quad (6)$$

Em condições industriais de operação, grande parte das reações químicas são complexas e a eq. 1 não representa a equação da taxa dessas reações. Como exemplo tem-se a oxidação do etanol a acetaldeído, que ocorre sobre catalisador comercial de Fe-Mo. Esta reação será representada por :



onde :

A : etanol      B : oxigênio      C : acetaldeído      D : água

O modelo cinético desta reação é dado pela seguinte expressão de taxa, obtida por Maciel Filho (1985) :

$$r = \frac{2 K_2 K_1 P_B P_A}{K_1 P_A + 2 K_2 P_B + K_3 K_4 P_C P_D + K_3 K_1 P_A P_C} \quad (8)$$

As pressões parciais dos componentes da reação acima, são dadas por :

$$P_A = \frac{(1 - X_A) P_T}{\delta} \quad (9)$$

$$P_B = \frac{(0.21R - 0.5X_A) P_T}{\delta} \quad (10)$$

$$P_C = \frac{X_A P_T}{\delta} \quad (11)$$

$$P_D = \frac{0.79 R_M P_T}{\delta} \quad (12)$$

onde :

$$\delta = 1 + 0.5X_A + R_M \quad (13)$$

O balanço de massa será expresso em termos da pressão parcial do etanol,  $P_A$ , o qual é o reagente limitante. Assim da eq.9 tem-se:

$$\frac{dP_A}{dZ} = \frac{d}{dZ} \left( \frac{(1 - X_A) P_T}{1 + 0.5 X_A + R_M} \right)$$

então:

$$-\frac{dP_A}{dZ} = \frac{dX_A}{dZ} \times \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R)} - \frac{P_A}{P_T} \times \frac{dT}{dZ} \quad (14)$$

Substituindo a eq.3 na eq.14 o balanço de massa passa a ser escrito por :

$$-\frac{dP_A}{dZ} = \frac{M \rho_b r'}{G} \times \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R)} - \frac{P_A}{P_T} \times \frac{dT}{dZ} \quad (15)$$

As equações de balanço podem ser reescritas da seguinte forma :

$$-\frac{dP_A}{dZ} = A P_A \exp\left(b - \frac{a}{T}\right) \times \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R)} - \frac{P_A}{P_T} \times \frac{dT}{dZ} \quad (16)$$

$$\frac{dT}{dZ} = B P_A \exp\left(b - \frac{a}{T}\right) - C(T - T_C) \quad (17)$$

$$\frac{dT_C}{dz} = D(T - T_C) \quad (18)$$

$$\frac{dP_T}{dz} = F \left( 1.75 + \frac{150(1 - \epsilon)}{N_{RE}} \right) \quad (19)$$

Onde os grupos A, B, C, D, F, a e b são definidos como:

$$A = \frac{\rho_B M P_B^o P_T}{G} \quad (20)$$

$$B = \frac{(-\Delta H) \rho_b P_B^o}{G C_{pg}} \quad (21)$$

$$C = \frac{4U}{G C_{pg} d_t} \quad (22)$$

$$D = \frac{\pi d_t U t_n}{W_c C_{pg}} \quad (23)$$

$$F = \frac{-7.165 \times 10^{-13} (1 - \epsilon) G^2}{\epsilon^3 \rho_g d_p} \quad (26)$$

$$a = \frac{E}{R} \quad (24)$$

$$b = \text{Ln}(K_o) \quad (25)$$

Para a utilização das equações de balanço, na forma apresentada é necessário fazer um rearranjo para que o valor de  $r$  nas expressões, seja dado pelo valor real da taxa (eq.8). Isto será feito pelo seguinte algoritmo de cálculo:

1. A cada passo de integração  $r$  é obtido pela eq.8 ;
2. Faz-se  $r' = r$
3. Obtém-se o valor de  $K$  pela eq. 1 e então determina-se  $K_o$  pela eq. 2, sendo este valor de  $K_o$  o utilizado nas equações de balanço através do termo  $b$ .

Assim a expressão da taxa é ajustada localmente em todo o comprimento do reator. As equações diferenciais ficam de uma forma genérica e qualquer que seja a equação de taxa de uma



uma reação química, as equações do modelo podem ser aplicadas fazendo este ajuste para a expressão da taxa da reação. Este procedimento permite uma generalização dos critérios a serem desenvolvidos pois são os mesmos para qualquer cinética, uma vez que a taxa da reação é sempre reavaliada localmente nas equações de balanço do modelo matemático. Desta maneira para a utilização do software desenvolvido neste trabalho e apresentado no Apêndice 3.1 é necessário somente a inclusão da cinética (que pode ser complexa) e dos dados operacionais do processo.

Na equação do balanço de energia para o fluido refrigerante, atenção deve ser dada para o grupo D. O uso apropriado de um sinal para Wc poderá adaptar as equações anteriores para qualquer tipo de configuração:

- Wc positivo para fluxo concorrente;
- Wc negativo para fluxo contracorrente.

Além disso, um valor muito grande de Wc (positivo ou negativo) poderá cancelar o valor de D, pois,  $D \propto 1/W_c$ . Por conseguinte  $dT_c / dz = 0$ . Isto permite utilizar o modelo acima no caso de operação com temperatura constante do fluido refrigerante. Assim sendo, através das mesmas equações de balanço, pode-se analisar três esquemas característicos do fluido refrigerante: concorrente, contracorrente e à temperatura constante (por exemplo um reator de escoamento paralelo com alto fluxo de refrigerante).

As equações de balanço podem ser resolvidas com as seguintes condições de contorno:

$$\text{Em } Z = 0 \quad \left[ \begin{array}{l} X_A = 0 \\ P_T = P_T^o \\ T = T_o \\ T_c = T_c^o \quad (\text{operação concorrente}) \end{array} \right.$$

onde:

$P_{T^0}$  é a pressão total inicial;

$T_0$  é a temperatura inicial dos reagentes;

$T_{c^0}$  é a temperatura inicial do fluido refrigerante em  $Z = 0$ .

Em  $Z = L \rightarrow T_c = T_{c^L}$  ( operação contracorrente )

onde:

$T_{c^L}$  é a temperatura inicial do fluido refrigerante em  $Z = L$ .

Para os casos em que a temperatura de entrada dos reagentes é igual a temperatura do fluido na entrada do reator, tem-se a seguinte condição de contorno :

Em  $Z = 0 \rightarrow T = T_0 = T_c$

Os valores das constantes físicas, as correlações dos parâmetros que determinam o coeficiente global de troca térmica e as expressões das constantes do modelo cinético, foram apresentadas por Maciel Filho (1985). Outros grupos de parâmetros cinéticos foram também obtidos por Maciel Filho e Domingues (1991), porém não foram utilizados neste trabalho. Para o cálculo do coeficiente global de transferência de calor é utilizada a equação :

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_e} + \frac{d_e}{2 K_a} \ln \left( \frac{d_e}{d_t} \right) + \frac{1}{h} \quad (27)$$

O coeficiente interno de transferência de calor (para resfriamento) é estimado pela correlação de Leva (1984) :

$$h = 3.5 \frac{K_g}{d_t} \exp \left( - 4.6 \frac{d_p}{d_t} \right) N_{Re}^{0.7} \quad (28)$$

As propriedades físicas da mistura reagente são tomadas como sendo as do ar, pois a concentração de etanol é baixa (misturas altamente diluídas devem ser utilizadas, segundo Maciel Filho, 1985 e Maciel Filho & Domingues, 1991). Essas propriedades são tomadas como funções das variáveis de estado do sistema e portanto são recalculadas ao longo de todo o comprimento do reator. As correlações para propriedades físicas dos compostos usados na simulação são as seguintes:

$$K_g = 4.8825 \text{ EXP } ( - 9.624 + 0.8641 \text{ Ln } T ) \quad (29)$$

$$K_a = 2.6788 \text{ EXP } ( - 0.7618 + 0.3695 \text{ Ln } T ) \quad (30)$$

$$\mu = 0.0382 + 0.0061 \text{ } T^{0.5} \quad (31)$$

$$C_p = 0.24 + 3.442 \times 10^{-5} \text{ } t + 2.649 \times 10^{-8} \text{ } t^2 - 1.631 \times 10^{-11} \text{ } t^3 \quad (32)$$

$$\frac{D_p}{D} = 0.153 \quad (33)$$

Os valores das constantes  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_3$  e  $K_4$  são:

$$K_1 = 3.41492 \times 10^6 \text{ EXP } ( - \frac{15746}{R \text{ } T} ) \quad (34)$$

$$K_2 = 2.34757 \times 10^8 \text{ EXP } ( - \frac{21793}{R \text{ } T} ) \quad (35)$$

$$K_4 = 1.78585 \times 10^7 \text{ EXP } ( - \frac{13674}{R \text{ } T} ) \quad (36)$$

$$K_3 = 1.19281 \times 10^{-4} \text{ EXP } ( \frac{9347}{R \text{ } T} ) \quad (37)$$

A porosidade do leito catalítico é calculada pela expressão:

$$(1 - \epsilon) = \frac{\rho_b}{\rho_{LE}} \quad (38)$$

A solução simultânea das equações de balanço permite definir as condições mais adequadas para a operação do reator ou ainda, o projeto do reator para operação com alta performance.

O programa utilizado para executar a simulação foi desenvolvido em linguagem Fortran e apresentado no Apêndice 3.1. O sistema de equações diferenciais foi resolvido por um algoritmo numérico baseado no método de Runge-Kutta de 4ª ordem.

### 3.3 - *Influência do Fluido Refrigerante na Performance do Reator*

Para ilustrar a influência que o fluido refrigerante tem na performance global do reator são mostrados os perfis de temperatura no interior dos tubos ao longo do comprimento do reator, para diferentes condições do fluido refrigerante, assim como para diferentes esquemas de refrigeração, ou seja, fluxo concorrente e fluxo contracorrente ( Figura 2 ).

Na Figura 3 pode-se observar a influência da temperatura de alimentação quando o reator é refrigerado concorrentemente a uma baixa vazão ( $W_c = 20$  kg/h). Quanto maior a temperatura de alimentação, maiores os pontos quentes. Condições de "run away" ocorrem para  $T_0$  acima de 205 °C.

Quando se altera a direção do fluxo do refrigerante (fluxo contracorrente), a temperatura do reator também apresenta gradientes maiores com o aumento de  $T_0$ , embora menos acentuados como mostra a Figura 4. Observa-se que a partir de certa posição, a temperatura do reator é menor do que a temperatura inicial, o que leva a conversões bem menores do que no caso anterior.

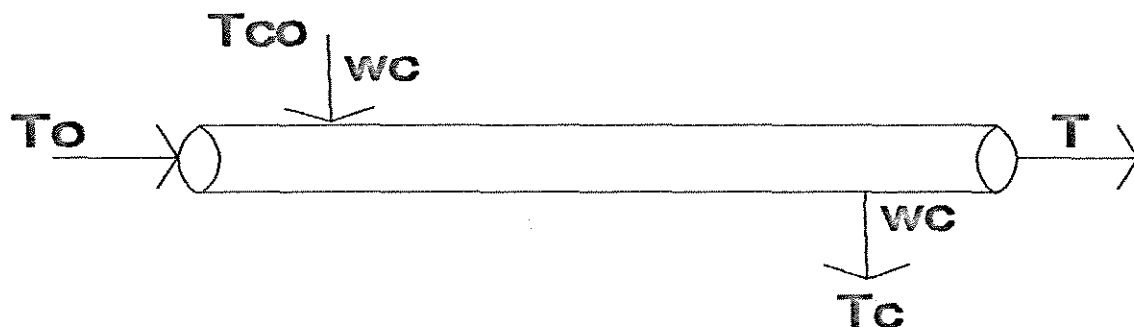
Aumentando a vazão do refrigerante para  $W_c = 100$  kg/h (Figura 5), observa-se uma queda da magnitude dos pontos quentes, embora para altas temperaturas de alimentação verifica-se a ocorrência de condições "run away".

Alterando o fluxo do refrigerante, Figura 6, observa-se que aumentando a vazão do refrigerante os valores dos picos de temperatura máxima também aumentam. Para vazões do refrigerante ainda maiores, os perfis de temperatura são iguais em ambos os esquemas, como era esperado.

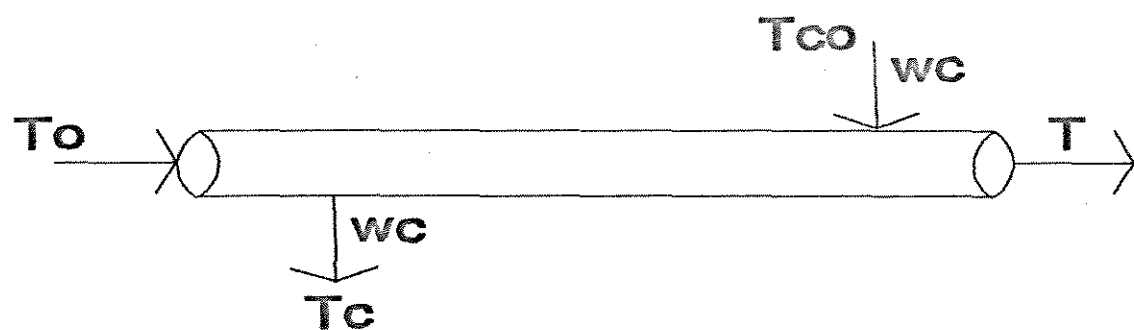
Fixando a temperatura de alimentação ( $T_0 = 200$  °C) e variando a vazão do refrigerante (fluxo concorrente), observa-se pela Figura 7, que quanto menor a vazão, maiores são os picos de temperatura máxima. Entretanto para o fluxo contracorrente, Figura 8, quanto menor a vazão do refrigerante menores são os gradientes de temperatura. Nestas condições a curva com o maior pico de temperatura é para  $W_c = 100$  kg/h e com  $\Delta T = 33$  °C. Observa-se pela Figura 7, que este  $\Delta T$  é próximo ao valor obtido, nas mesmas condições, para o fluxo concorrente.

Portanto, conclui-se que variação da temperatura de alimentação, vazão e configuração para o fluido refrigerante, altera sensivelmente o perfil de temperatura do reator, sendo então variáveis importantes na performance do reator. Uma análise mais detalhada da influência do refrigerante será feita no próximo capítulo.

Figura 2



Esquema com fluxo concorrente



Esquema com fluxo contracorrente

Figura 3

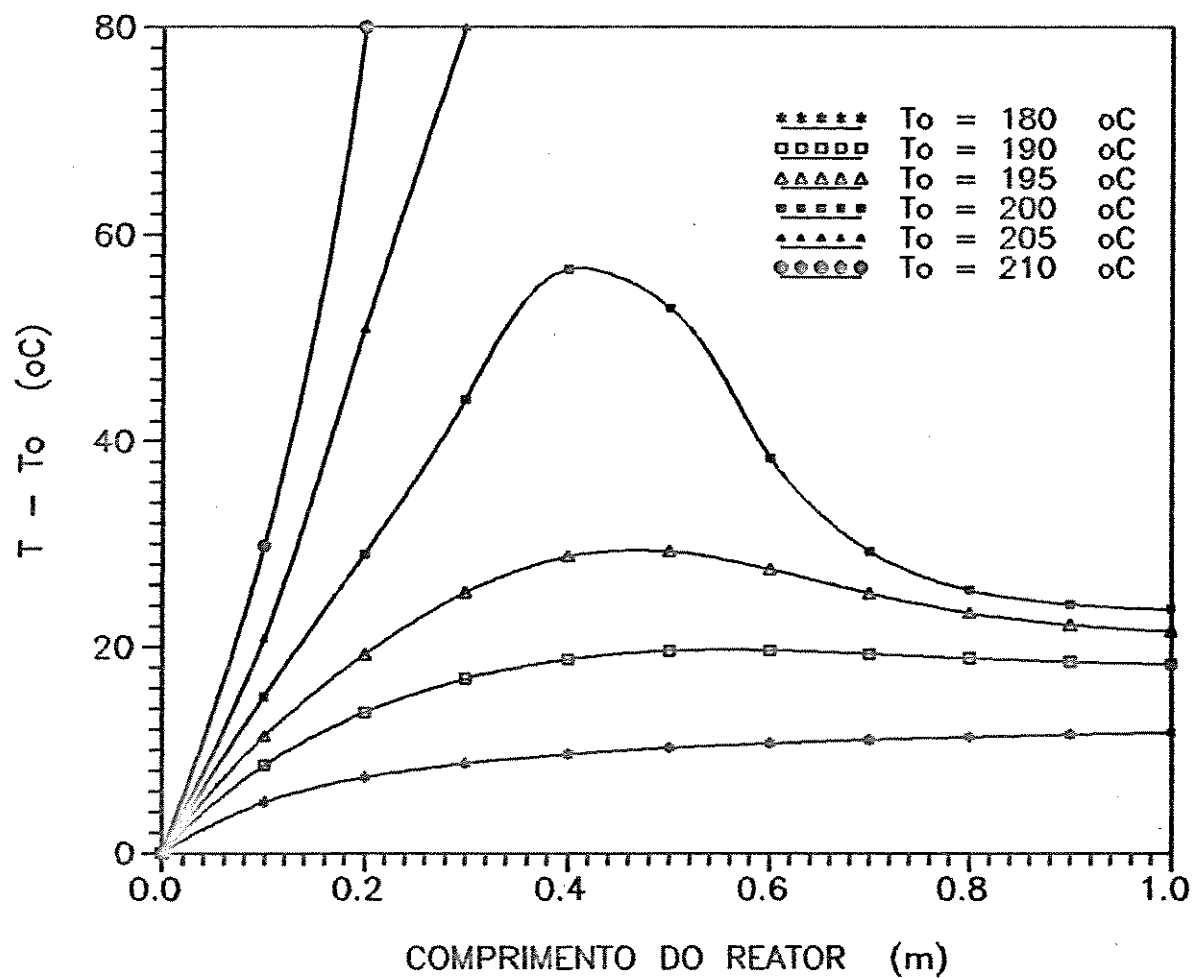


Figura 3 - Influência da temperatura de alimentação no perfil de temperatura do reator. Esquema concorrente com baixa vazão.

Figura 4

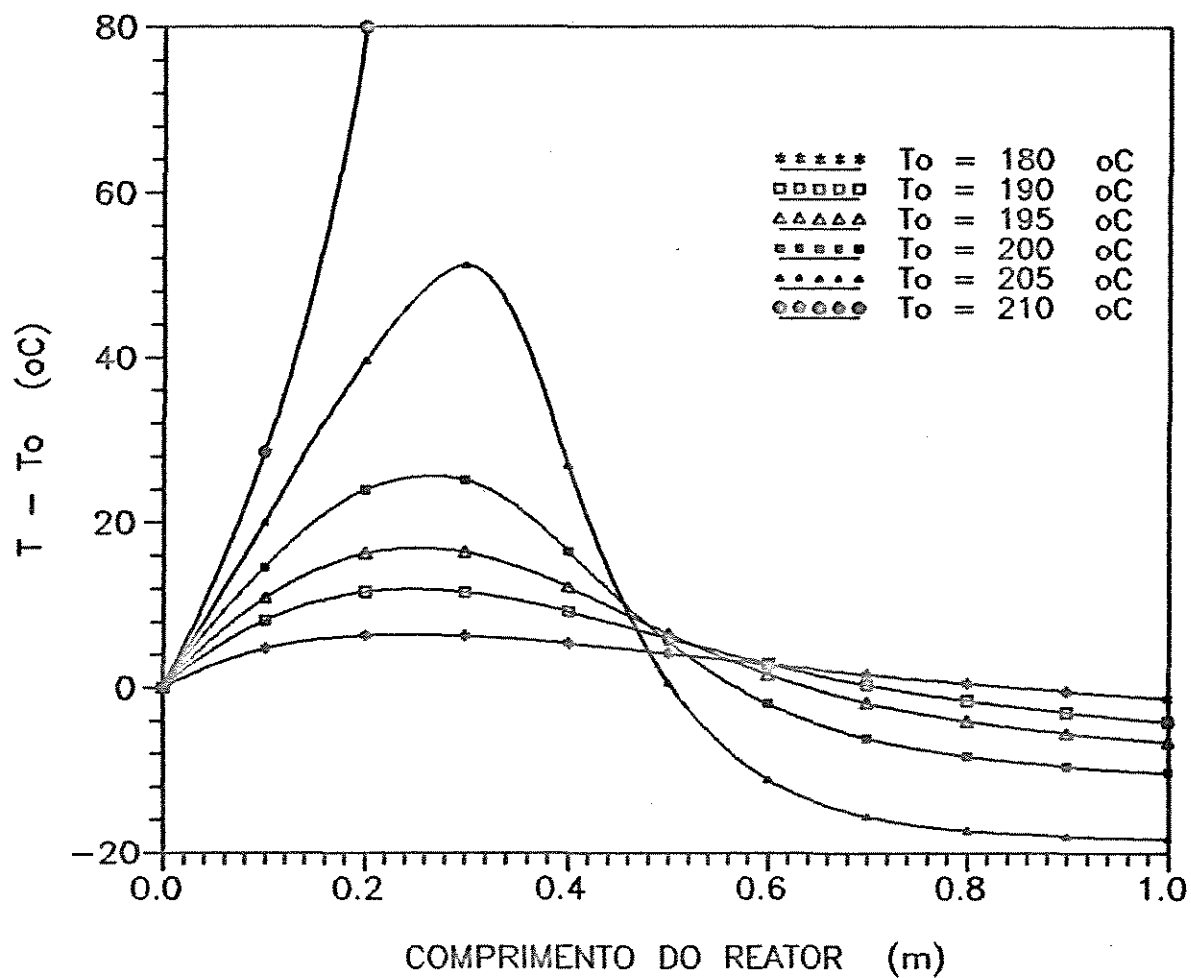


Figura 4 - Influência da temperatura de alimentação no perfil de temperatura do reator. Esquema contracorrente com baixa vazão.



Figura 5

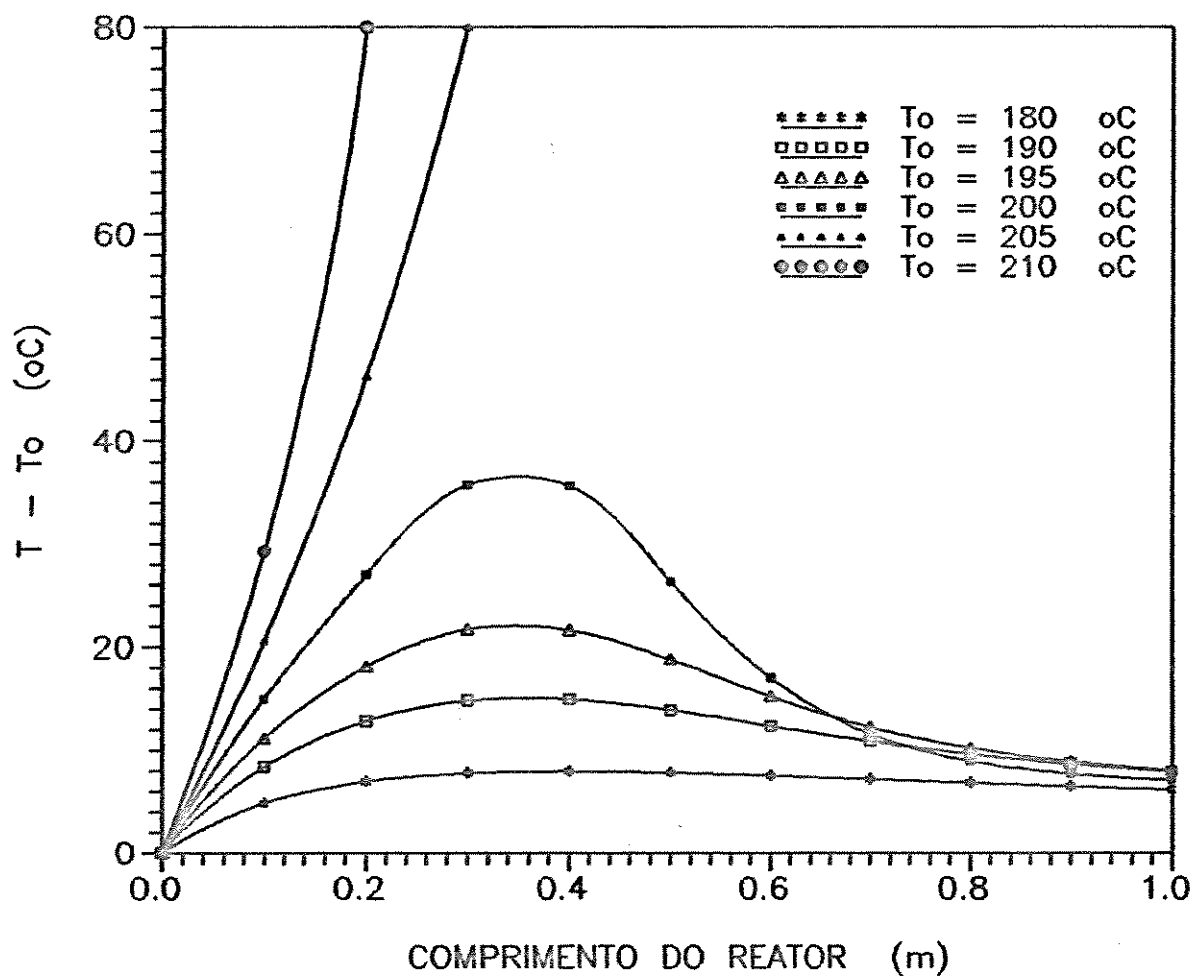


Figura 5 - Influência da temperatura de alimentação no perfil de temperatura do reator. Esquema concorrente com alta vazão.

Figura 6

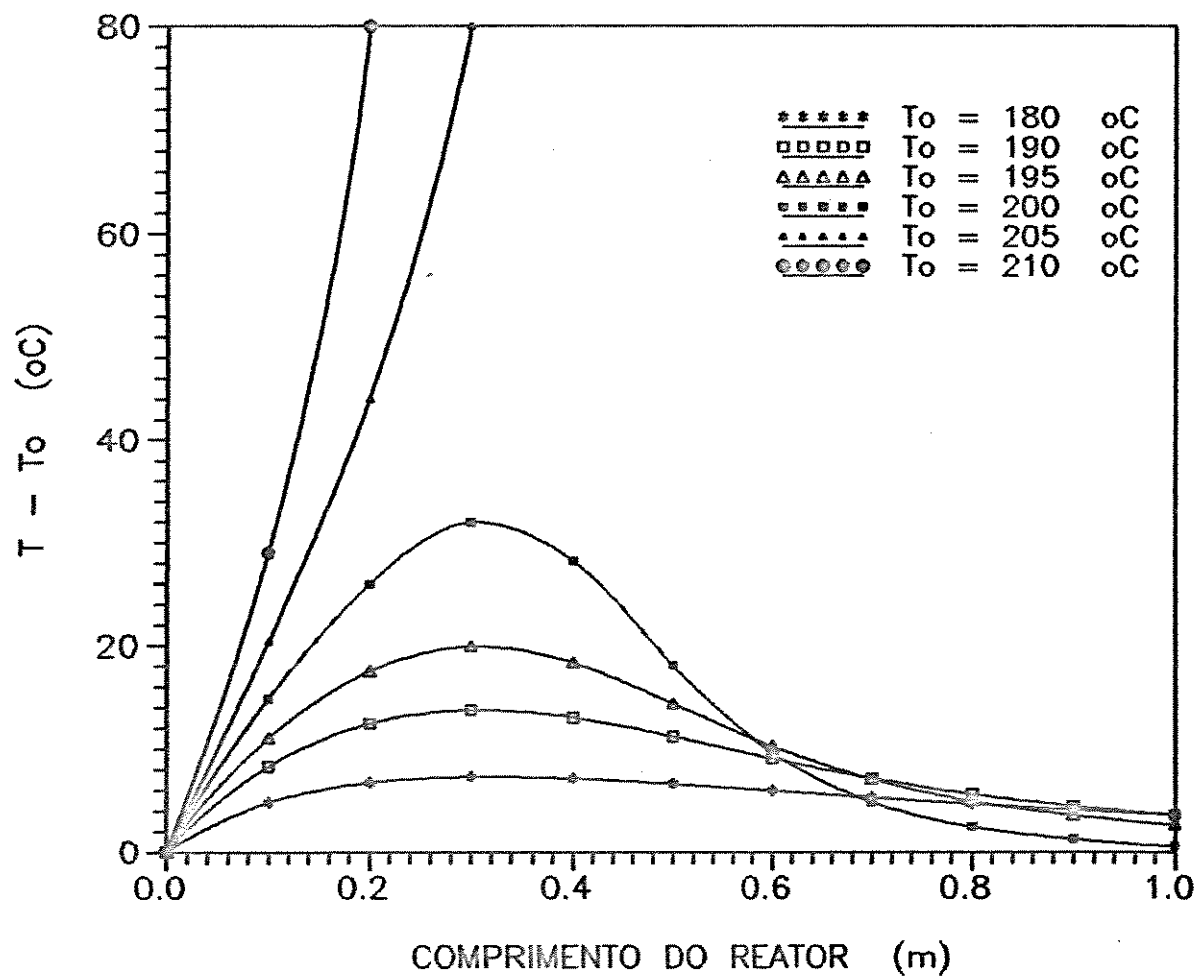


Figura 6 - Influência da temperatura de alimentação no perfil de temperatura do reator. Esquema contracorrente com alta vazão.

Figura 7

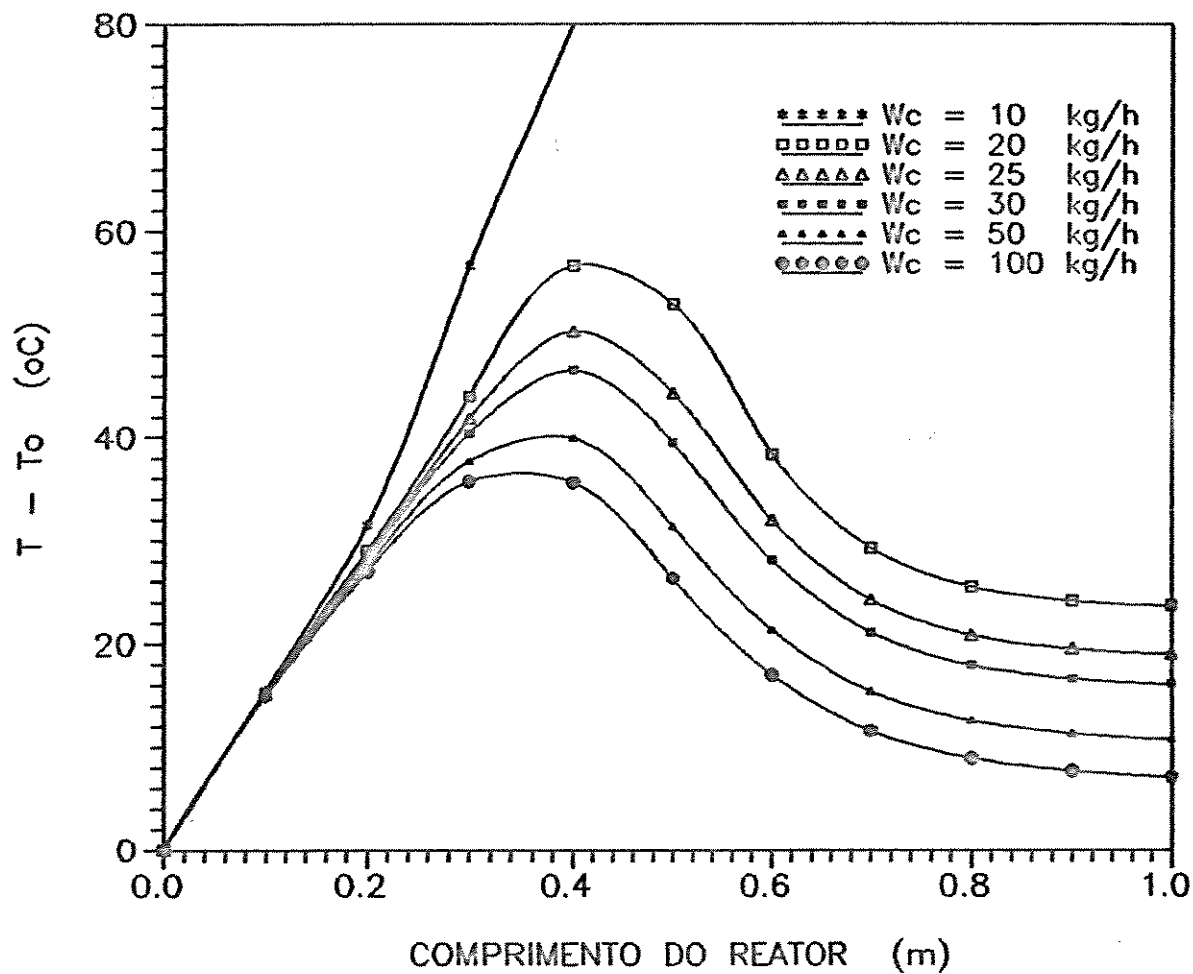


Figura 7 - Influência da vazão do fluido refrigerante no perfil de temperatura do reator. Escoamento concorrente.

Figura 8

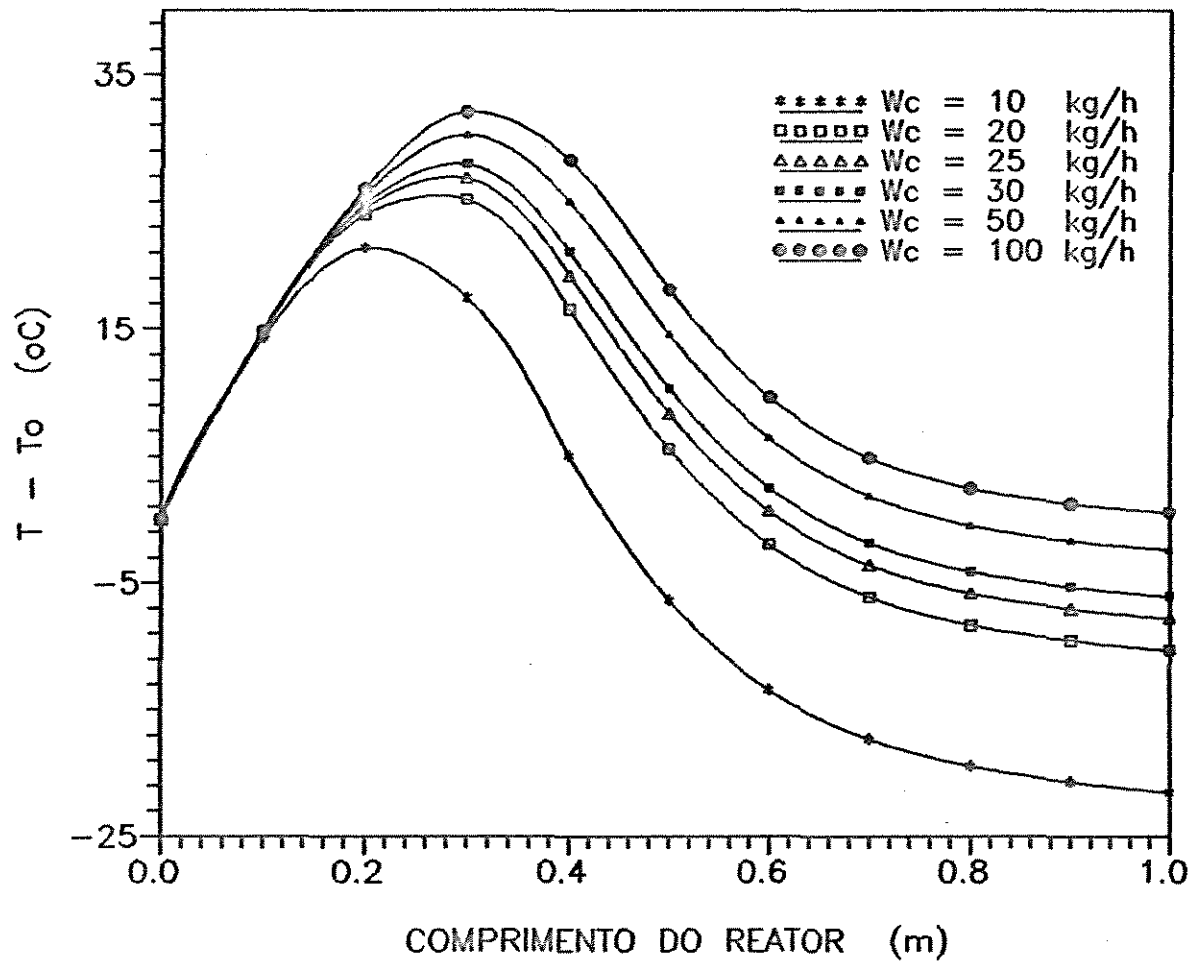


Figura 8 - Influência da vazão do fluido refrigerante no perfil de temperatura do reator. Escoamento contracorrente.

### 3.4 - Conclusões

Neste capítulo foram apresentadas as equações do modelo matemático pseudo-homogêneo em uma dimensão para representar o reator na oxidação catalítica do etanol para a obtenção do acetaldeído. Este modelo é também escrito em termos de grupos de variáveis que são adequadamente rearranjadas de forma que uma representação genérica é obtida. Consideração é dada em especial para a generalização do modelo para a utilização de cinéticas complexas de qualquer natureza.

São também mostradas as influências que condições operacionais do fluido refrigerante e do esquema de refrigeração exercem sobre o comportamento global do reator, a partir da análise dos perfis de temperatura no interior dos tubos.

## CAPÍTULO 4

### COEFICIENTES DE SENSITIVIDADE

#### PARAMÉTRICA

#### 4.1 - Introdução

Em condições industriais, devido as reações químicas serem altamente exotérmicas, a temperatura do reator tende a elevar-se repentinamente em direção a um máximo ou "hot spot", o qual é usualmente localizado perto da entrada do reator. Este gradiente de temperatura pode causar a queda da seletividade da reação no caso de reações múltiplas e temperaturas extremas podem causar rápida deterioração do catalisador. Na prática estes pontos quentes devem ser mantidos dentro de limites permissíveis de modo a não comprometer a segurança do reator.

No estado estacionário, os perfis de temperatura ao longo do reator, no qual se processa uma reação exotérmica, são usualmente caracterizados pela temperatura máxima ou "hot spot", embora o desenvolvimento do próprio perfil seja importante para a operação otimizada do reator.

Para certas condições de operação, a magnitude dos "hot spot" torna-se extremamente sensível para pequenas variações nos parâmetros de entrada do reator, ou mudanças nos parâmetros físico-químicos. Bilous e Amundson (1956) chamaram estas condições de "sensitividade paramétrica" ou comportamento "run away" do reator.

Desta maneira é de extrema importância obter procedimentos que permitam definir a estratégia operacional que leve o sistema a ter condições de operação conhecidas e desejadas. Isto é de extrema importância especialmente para a definição de estratégias de controle e operação otimizada do sistema, que normalmente ocorrem em condições muito próximas das que causam instabilidade operacional.

O objetivo deste trabalho é o de estimar as condições onde a sensibilidade paramétrica ocorre e selecionar as condições mais adequadas para a operação do reator, com intuito de evitar situações onde ocorra efeito do tipo "run away". Entre as variáveis operacionais, as de maior interesse são a temperatura e vazão do fluido refrigerante, sendo estas, variáveis importantes para garantir a operação segura do reator com alta performance. A utilização destas variáveis é devida a possibilidade de não alteração da produtividade do reator quando da escolha da variável manipulada, além da sensibilidade do sistema a estas variáveis.

Na literatura, grande parte dos trabalhos sobre sensibilidade paramétrica de reatores de leito fixo, consideram a temperatura do fluido refrigerante constante. Pode-se citar: Bilous & Amundson (1956), Barkelley (1959), Welsenaere & Froment (1970), McGreavy & Adderley (1974), Rajadhyaksha et al. (1975), Oroskar & Stern (1979). Esta não é uma consideração conveniente para fluidos que apresentem uma capacidade calorífica reduzida. O mais comum é a refrigeração com sal fundido e fluido térmico e nestes casos, o gradiente de temperatura do fluido refrigerante não pode ser desprezado. O mesmo pode ser dito dos fluidos térmicos comerciais que embora possuam uma boa capacidade calorífica, podem apresentar gradientes térmicos significativos, especialmente quando a operação em alta performance é pretendida (Maciel Filho, 1989). Somente alguns autores estudaram esta situação de não isothermicidade do refrigerante.

Na análise da influência do fluido refrigerante nos perfis de temperatura do reator, o tipo de configuração é um parâmetro muito importante. Assim, serão analisadas três configurações para o fluxo do refrigerante:

- fluxo concorrente em relação ao fluxo dos reagentes;
- fluxo contracorrente em relação ao fluxo dos reagentes;
- fluxo com temperatura constante para o refrigerante.

Dentre estas configurações, os reatores operados com fluxo concorrente e contracorrente são os mais utilizados e existe ainda hoje uma grande controvérsia sobre qual tipo de projeto é mais conveniente (Borio et. al., 1989; Maciel Filho e McGreavy, 1989).

Para que a temperatura do fluido refrigerante seja constante é necessário a combinação da utilização de fluidos refrigerantes com alta capacidade calorífica e altas vazões de operação quando são considerados processos com reações altamente exotérmica. Neste caso, reatores dotados com chicanas podem trazer problemas devido à elevada queda de pressão no casco e mesmo intensos fluxos secundários nos orifícios das chicanas e nas aberturas laterais entre as chicanas e o casco (McGreavy e Maciel Filho, 1988).

Uma outra opção são os reatores desprovidos de chicanas, conhecidos como reatores de fluxo paralelo, que possibilitam a utilização de altas vazões de fluido refrigerante sendo normalmente utilizados para reações fracamente exotérmicas.

Para os três esquemas de refrigeração, a análise através do conceito de sensitividade paramétrica e dos pontos quentes, é uma ferramenta muito útil podendo indicar as condições mais adequadas para a operação segura do reator.



## 4.2 - Coeficientes de Sensitividade Paramétrica

Neste capítulo a sensitividade paramétrica é calculada baseando-se no método proposto por Hlavacek and Votruba (1977). A sensitividade paramétrica ( $S_{ij}$ ) da variável  $x_i$  em relação ao parâmetro ou variável de entrada  $\pi_j$  pode ser definida como:

$$S_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial \pi_j} \quad (39)$$

Assim,  $S_{ij}$ , expressa o quanto a variável  $x_i$  é sensível a variável de entrada  $\pi_j$ . Ou seja, quanto maior for o valor absoluto de  $S_{ij}$  mais sensível é a variável  $x_i$  frente à mudanças na variável  $\pi_j$ . Para a temperatura do reator,  $x_i = T$ , (temperatura dos reagentes no interior do tubo, região do leito catalítico), é conveniente ter baixos valores de  $S_{ij}$  para garantir que o reator não opere em regiões instáveis, o que poderia levar a condições de "run away".

A temperatura do refrigerante,  $T_{c1}$ , será considerada como a variável de entrada, pois na prática a temperatura do refrigerante pode ser selecionada como a variável manipulada para alterar a performance de operação de um determinado reator sem alterar a vazão de reagente a ser convertido, embora outras variáveis também possam ser utilizadas.

Em algumas situações a temperatura do fluido refrigerante não é uma variável adequada para ser usada como variável manipulada em operação controlada por computador, pois o volume de fluido a ser tratado é muito grande de forma que o tempo de resposta do sistema é excessivamente longo.

Fazendo a derivada de  $S_{1j}$  em relação a  $Z$  tem-se :

$$\frac{dS_{1j}}{dz} = \frac{d}{dz} \left( \frac{\partial \chi_{1j}}{\partial \pi_j} \right) = \frac{\partial}{\partial \pi_j} \left( \frac{d\chi_{1j}}{dz} \right) \quad (44)$$

Então :

$$\frac{dS_1}{dz} = \frac{\partial}{\partial T_{ci}} \left( \frac{dP_A}{dz} \right) \quad (45)$$

$$\frac{dS_2}{dz} = \frac{\partial}{\partial T_{ci}} \left( \frac{dT}{dz} \right) \quad (46)$$

$$\frac{dS_3}{dz} = \frac{\partial}{\partial T_{ci}} \left( \frac{dT_c}{dz} \right) \quad (47)$$

$$\frac{dS_4}{dz} = \frac{\partial}{\partial T_{ci}} \left( \frac{dP_T}{dz} \right) \quad (48)$$

Portanto, tem-se as seguintes equações para a sensibilidade paramétrica:

$$\begin{aligned} \frac{dS_1}{dz} = & \frac{-A (P_T + 0.5 P_A)^2 \text{EXP} \left( b - \frac{a}{T} \right)}{P_T (1.5 + R)} \times \\ & \times \left( S_1 + \frac{a P_A S_2}{T^2} + P_A \left( \frac{2 (S_4 + 0.5 S_1)}{P_T + 0.5 P_A} - \frac{3 S_4}{P_T} \right) \right) \\ & - \frac{P_A 7.615 \times 10^{-13} (1-\epsilon) G^2}{P_T \epsilon^3 d_p} \times AT + \frac{dP_T}{dz} \left( \frac{S_1}{P_T} - \frac{P_A}{P_T^2} S_4 \right) \end{aligned} \quad (49)$$

Fazendo a derivada de  $S_{1j}$  em relação a  $Z$  tem-se :

$$\frac{dS_{1j}}{dz} = \frac{d}{dz} \left( \frac{\partial \chi_{1j}}{\partial \pi_j} \right) = \frac{\partial}{\partial \pi_j} \left( \frac{d\chi_{1j}}{dz} \right) \quad (44)$$

Então :

$$\frac{dS_1}{dz} = \frac{\partial}{\partial T_{cl}} \left( \frac{dP_A}{dz} \right) \quad (45)$$

$$\frac{dS_2}{dz} = \frac{\partial}{\partial T_{cl}} \left( \frac{dT}{dz} \right) \quad (46)$$

$$\frac{dS_3}{dz} = \frac{\partial}{\partial T_{cl}} \left( \frac{dT_c}{dz} \right) \quad (47)$$

$$\frac{dS_4}{dz} = \frac{\partial}{\partial T_{cl}} \left( \frac{dP_T}{dz} \right) \quad (48)$$

Portanto, tem-se as seguintes equações para a sensibilidade paramétrica:

$$\begin{aligned} \frac{dS_1}{dz} = & \frac{-A (P_T + 0.5 P_A)^2 \text{EXP} \left( b - \frac{a}{T} \right)}{P_T (1.5 + R)} \times \\ & \times \left( S_1 + \frac{a P_A S_2}{T^2} + P_A \left( \frac{2 (S_4 + 0.5 S_1)}{P_T + 0.5 P_A} - \frac{3 S_4}{P_T} \right) \right) \\ & - \frac{P_A 7.615 \times 10^{-13} (1-\epsilon) G^2}{P_T \epsilon^3 d_p} \times AT + \frac{dP_T}{dz} \left( \frac{S_1}{P_T} - \frac{P_A}{P_T^2} S_4 \right) \end{aligned} \quad (49)$$

$$\begin{aligned} \frac{dS_2}{dz} = & B \text{ EXP } \left( b - \frac{a}{T} \right) \times \left( \frac{aP_A S_2}{T^2} + S_1 + P_A \left( \frac{S_4}{P_T} - \frac{S_2 \times CT}{C_{pg}} \right) \right) \\ & - C \times \left( S_2 - S_3 + (T - T_c) S_2 \times BT - \frac{CT}{C_{pg}} \right) \end{aligned} \quad (50)$$

$$\frac{dS_3}{dz} = D ( S_2 - S_3 + S_2 ( T - T_c ) \times BT ) \quad (51)$$

$$\frac{dS_4}{dz} = \frac{- 7.515 \times 10^{-13} ( 1 - \epsilon ) G^2}{\epsilon^3 d_p} \times AT \quad (52)$$

onde :

$$\begin{aligned} AT = & \frac{1}{\rho_g} \left( \frac{0.4575 ( 1 - \epsilon ) S_2}{d_p G T^{0.5}} \right) - \left( 1.75 + \frac{150 ( 1 - \epsilon )}{N_{Re}} \right) \times \\ & \times \frac{M}{\rho_g^2 0.08205} \left( \frac{S_4}{T} - \frac{P_T}{T^2} S_2 \right) \end{aligned} \quad (53)$$

$$BT = \frac{d_o \text{ Ln } \left( \frac{d_o}{d_t} \right) \times 0.3695}{2 K_a T_R} + \frac{1}{h} \times \left( \frac{0.8641}{T_R} - \frac{0.002135 N_{Re}}{T^{0.5} d_p G} \right) \quad (54)$$

$$CT = 3.44201 \times 10^{-5} + 5.29706 \times 10^{-8} T - 4.89285 \times 10^{-11} T^2 \quad (55)$$

Para integrar o novo sistema definido pelas eqs. 16 a 19 e 49 a 52, quatro condições de contorno adicionais são necessárias:

$$\text{Em } Z = 0 \quad \begin{cases} S_1 = 0 \\ S_4 = 0 \\ S_2 = S_3 \quad (T=T_c) \end{cases}$$

$$S_3 = 1 \quad \text{em} \quad \begin{cases} Z = 0 & (\text{concorrente}) \\ Z = L & (\text{contracorrente}) \end{cases}$$

A temperatura do reator é a variável de maior sensibilidade para a operação segura do reator, e esta, é medida através de  $S_2$ . Assim, dos quatros perfis de sensibilidade, somente  $S_2(z)$  é crítico e deverá ser mantido dentro de certos limites para garantir a estabilidade do reator. Obviamente uma análise multivariável pode ser realizada, porém não é necessária pelo exposto acima e também pela interdependência das outras variáveis do reator com a temperatura.

O apêndice 4.1 contém a dedução das equações dos coeficientes de sensibilidade paramétrica.

### 4.3 - Configurações do Fluxo do Fluido Refrigerante

As performances dos três arranjos mais comuns do fluxo do fluido refrigerante, concorrente, contracorrente e à temperatura do refrigerante constante, podem ser comparadas definindo condições comuns de operação.

Assim, as variáveis escolhidas para análise serão comparadas com o reator operando com a mesma vazão mássica de gás reagente ( $G$ ), a mesma pressão inicial do reagente limite ( $P_{A^0}$ ) e produzindo igual conversão de saída ( $X_L$ ).

Os valores dos parâmetros utilizados nesta etapa são apresentados na tabela 1, e foram obtidos através de simulações e de informações de trabalhos anteriores (Maciel Filho e Domingues, 1992 e Domingues, 1992).

Tabela 01

$G = 4000 \text{ kg/h}$
$P_{A^o} = 0.0384 \text{ atm}$
$\rho_b = 2314 \text{ kg/m}^3$
$d_t = 0.025 \text{ m}$
$d_o = 0.03175 \text{ m}$
$d_p = 0.002 \text{ m}$
$t_n = 1$
$C_{PE} = 0.03108 \text{ kcal/kg } ^\circ\text{C}$
$R_M = 25 \text{ mol de ar / mol de etanol}$
$L = 2 \text{ m}$
$X_L = 0.7$

Destes dados  $d_t$ ,  $d_p$ ,  $d_o$ ,  $L$  e  $t_n$  referem-se às condições de projeto mecânico do equipamento, enquanto  $G$ ,  $P_{A^o}$  e  $R_M$  são condições de operação. Os outros parâmetros são dados físico-químicos da mistura reagente. A grandeza  $t_n = 1$ , significa dizer que apenas um tubo está sendo considerado, ou seja, as interações térmicas entre os tubos e o fluido refrigerante, verificadas por McGreavy e Maciel Filho (1988) são desprezadas. No entanto esta informações não são relevantes para que sejam atingidos os propósitos deste trabalho.

## 4.4 - Resultados

### 4.4.1 - Análise da Sensitividade Paramétrica

As Figuras 9 e 10 mostram os perfis de sensibilidade paramétrica,  $S_2$ , para diferentes condições do refrigerante. Pode-se observar que as curvas apresentam pontos de máximo ou pontos de mínimo. Este valor extremo de  $S_2$  será escolhido para caracterizar a sensibilidade de cada condição de operação, medindo assim a sensibilidade paramétrica por meio de um único valor. Para facilitar a nomenclatura e a exposição dos resultados, este valor de  $S_2$  será referido como sensibilidade paramétrica máxima e representado por  $S_2^*$ .

A Figura 9 corresponde a operação concorrente e todas as curvas começam em  $S_2 = 1$  para  $Z = 0$ . Observa-se ainda que todos os valores de  $S_2^*$  são positivos. Na Figura 10 a ocorrência de valores negativos de  $S_2^*$  é uma característica distinta da configuração contracorrente.

Pode ser notado que os valores de  $|S_2^*|$  tendem a ser maiores no esquema contracorrente em relação ao esquema concorrente, de onde pode-se concluir que os reatores operados contracorrentemente são potencialmente mais instáveis. A principal razão deste comportamento está associada com a retroalimentação de calor causada pela direção de fluxo do fluido refrigerante (Maciel Filho e McGreavy, 1989).

A Figura 11 mostra que as curvas de  $S_2$  correspondentes a vazões muito altas do refrigerante ( $W_c \rightarrow \infty$ ) são coincidentes para os fluxos concorrente e contracorrente. Esta situação

corresponde ao fluxo de temperatura constante do refrigerante, ou ainda em situações práticas quando pequenos gradientes térmicos entre as condições de entrada e saída do refrigerante são notadas. Assim, para este caso, a configuração do fluxo não influencia o perfil de temperatura do reator. Este comportamento era esperado pois altas vazões significam fisicamente uma alta capacidade calorífica no sistema.



Figura 9

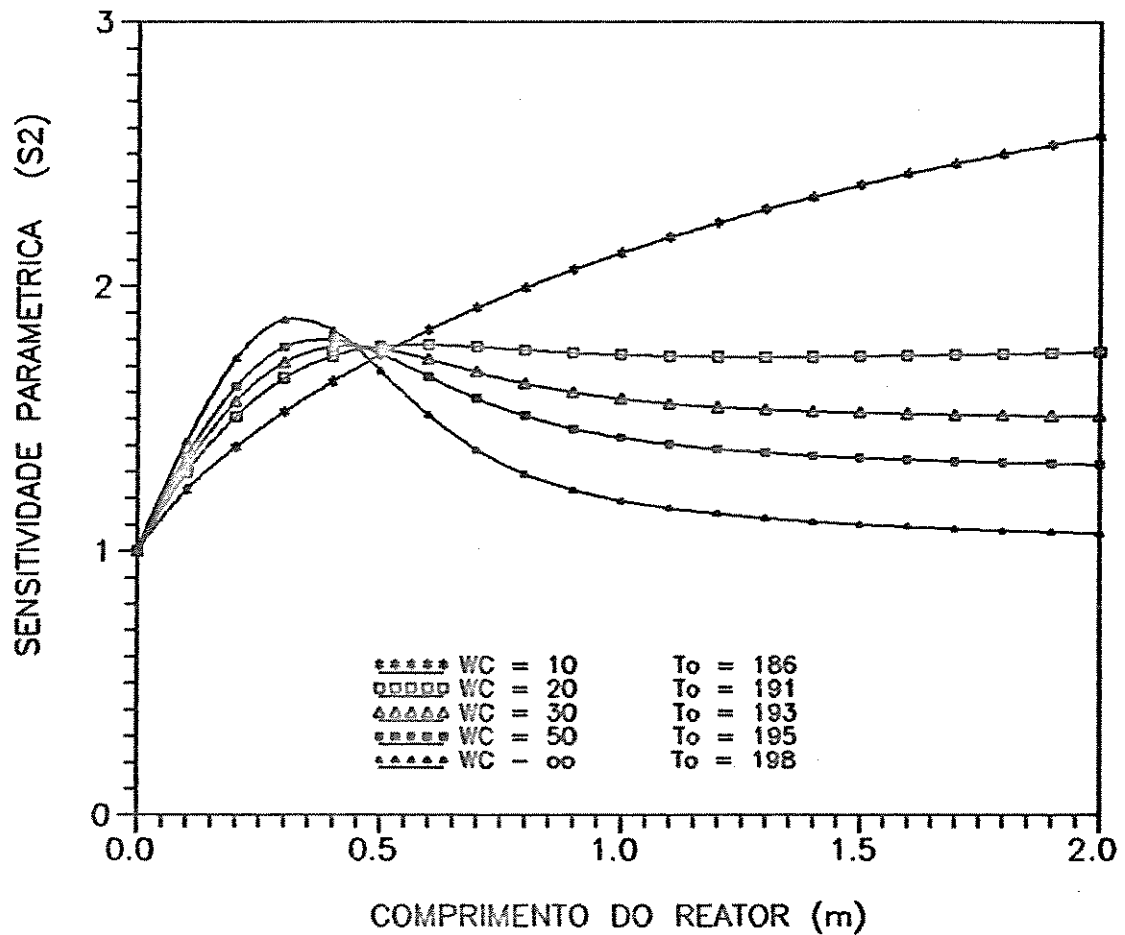


Figura 9 - Perfil de sensibilidade paramétrica ao longo do reator no esquema concorrente.

Figura 10

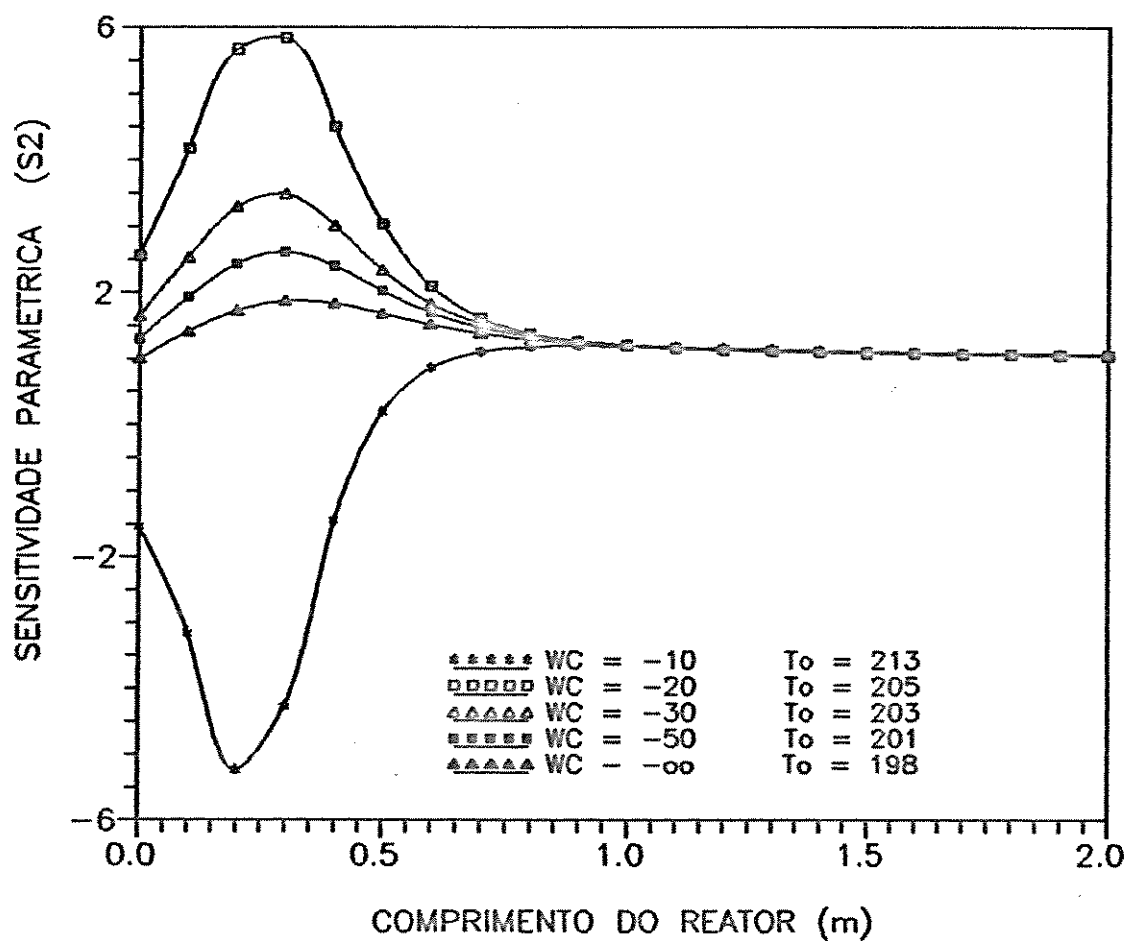


Figura 10 - Perfil de sensibilidade paramétrica ao longo do reator no esquema contracorrente.

Figura 11

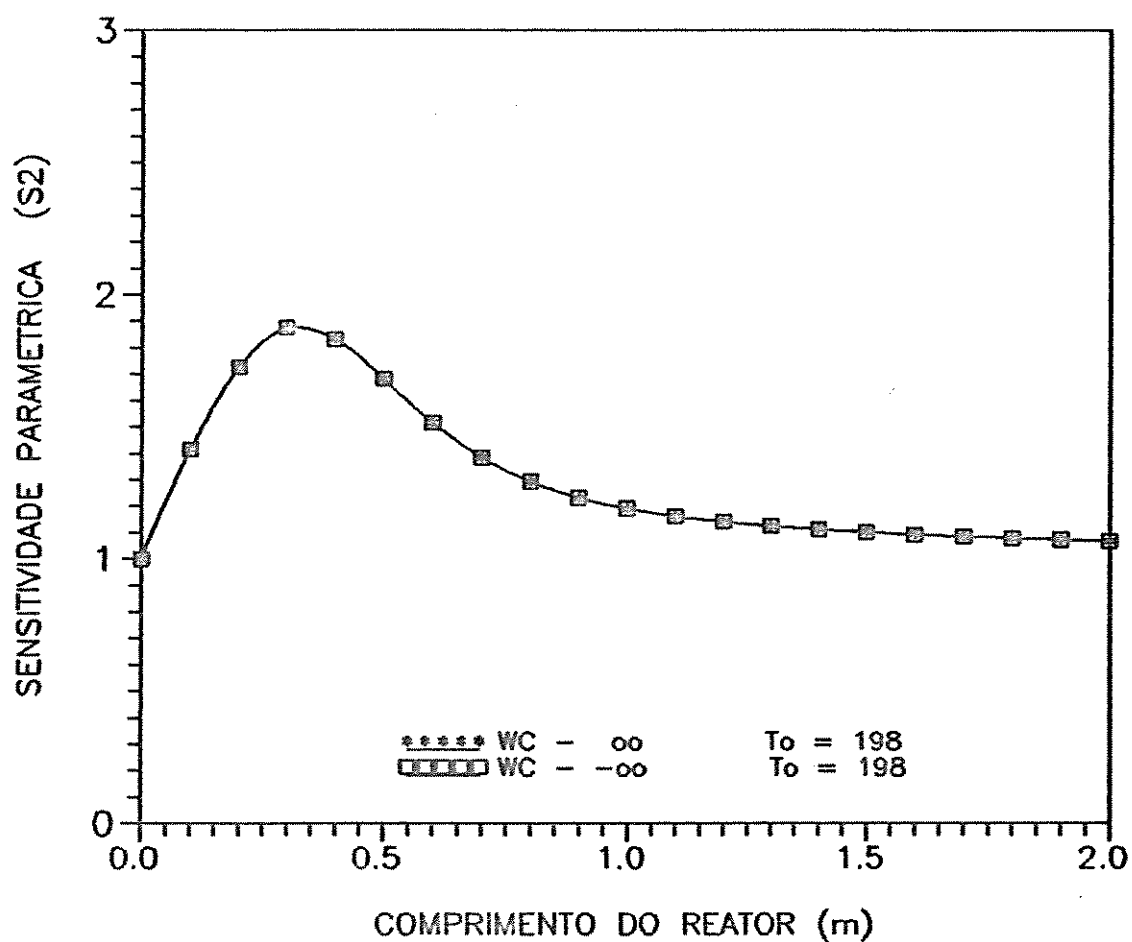


Figura 11 - Perfil de sensibilidade paramétrica ao longo do reator para  $W_C \rightarrow \infty$  no esquema concorrente e contracorrente.

As variáveis escolhidas e analisadas para definir a melhor configuração do fluxo do refrigerante são :

- Temperatura máxima ( $T_m$ );
- Sensitividade paramétrica máxima ( $S_2^*$ );
- Temperatura de entrada do fluido refrigerante ( $T_{c^0}$ );
- Comprimento total do reator.

A influência da configuração do fluxo do refrigerante pode ser vista claramente graficando as variáveis acima mencionadas para diferentes vazões do refrigerante. Para esta análise, uma escolha conveniente é a de adotar na abscissa o inverso da vazão do refrigerante. Isto porque os resultados com fluxos concorrente e contracorrente tendem a coincidir para

$$|W_c| \rightarrow \infty$$

o que leva a:

$$\frac{1}{|W_c|} = 0$$

A linha reta,  $\frac{1}{|W_c|} = 0$  corresponde à situação de

$$|W_c| \rightarrow \infty$$

o que representa o fluxo do refrigerante à temperatura constante. Esta reta divide o plano em duas regiões distintas. O plano à direita representa o arranjo concorrente e o plano à esquerda o arranjo contracorrente. Assim, em um mesmo gráfico pode-se analisar as três configurações para o fluxo do refrigerante. Deve ser notado que, embora o procedimento proposto tenha sido desenvolvido para o caso de reatores, o mesmo pode ser generalizado, com as devidas alterações, para outros sistemas de engenharia química.

#### 4.4.2 - Análise da Temperatura de Alimentação

Na Figura 12 é mostrado que para obter a mesma conversão e para um determinado comprimento do reator, o esquema contracorrente requer uma temperatura de alimentação dos reagentes mais elevada. Os menores valores para  $T_o$  encontram-se no esquema concorrente.

Como exemplo, tem-se que para  $|W_c| = 20 \text{ kg/h}$

$T_o = 191 \text{ }^\circ\text{C}$  ( arranjo concorrente )

$T_o = 205 \text{ }^\circ\text{C}$  ( arranjo contracorrente )

$T_o = 198 \text{ }^\circ\text{C}$  ( arranjo para  $T_c$  constante )

A análise do perfil de temperatura de alimentação dos reagentes indica que o esquema concorrente é mais conveniente pois, além de menores temperaturas estarem sendo utilizadas na alimentação o que significa menores custos e maior segurança, o reator é potencialmente mais estável como discutido anteriormente.

Figura 12

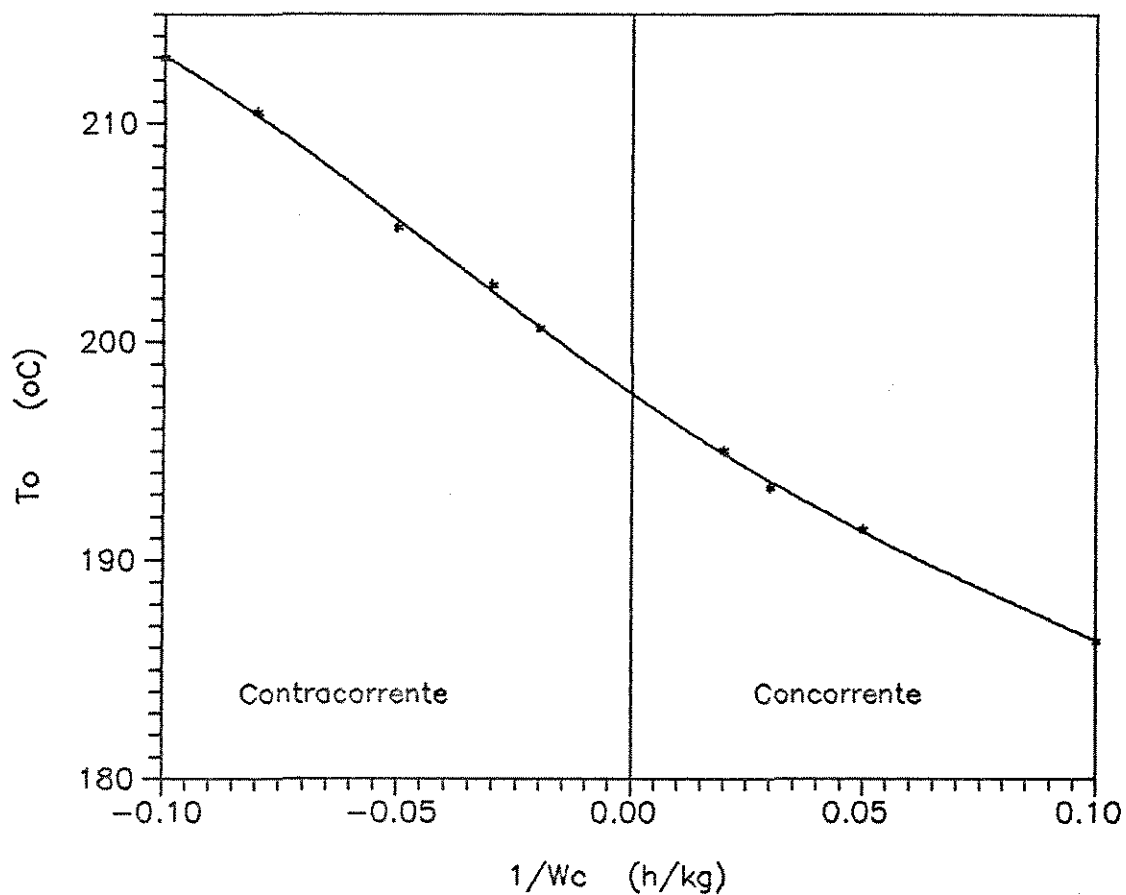


Figura 12 - Perfil de temperatura de alimentação.

#### 4.4.3 - Análise do Perfil de Temperatura Máxima

Para cada condição de  $W_c$ , o perfil de temperatura do reator apresenta um ponto de máximo ( $T_m$ ). A curva de temperatura máxima pode ser obtida graficando os valores de  $T_m$  versus  $1 / W_c$ , como mostra a Figura 13. Verifica-se ainda que a curva dos pontos quentes ( $T_m$ ) apresenta um ponto de mínimo para um determinado valor de  $W_c$  no esquema concorrente o que permite concluir que o procedimento desenvolvido tem potencial como uma ferramenta determinística na busca de condições ótimas de operação e projetos de reatores químicos.

As temperaturas máximas obtidas na operação concorrente são significativamente mais baixas que aquelas atingidas em qualquer condição na zona contracorrente, exceto para valores muito baixos de  $W_c$ , o que na prática não ocorre. Como exemplo tem-se :

para  $| W_c | = 20 \text{ kg/h}$

$T_m = 205 \text{ }^\circ\text{C}$  ( esquema concorrente )

$T_m = 225 \text{ }^\circ\text{C}$  ( esquema contracorrente )

$T_m = 213 \text{ }^\circ\text{C}$  ( esquema com  $T_c$  constante )

Valores baixos de  $T_m$  garantem uma melhor seletividade no caso de reações múltiplas e uma maior vida útil para o catalisador. Assim o esquema concorrente é o mais indicado através da análise do perfil de temperatura máxima do reator.

Figura 13

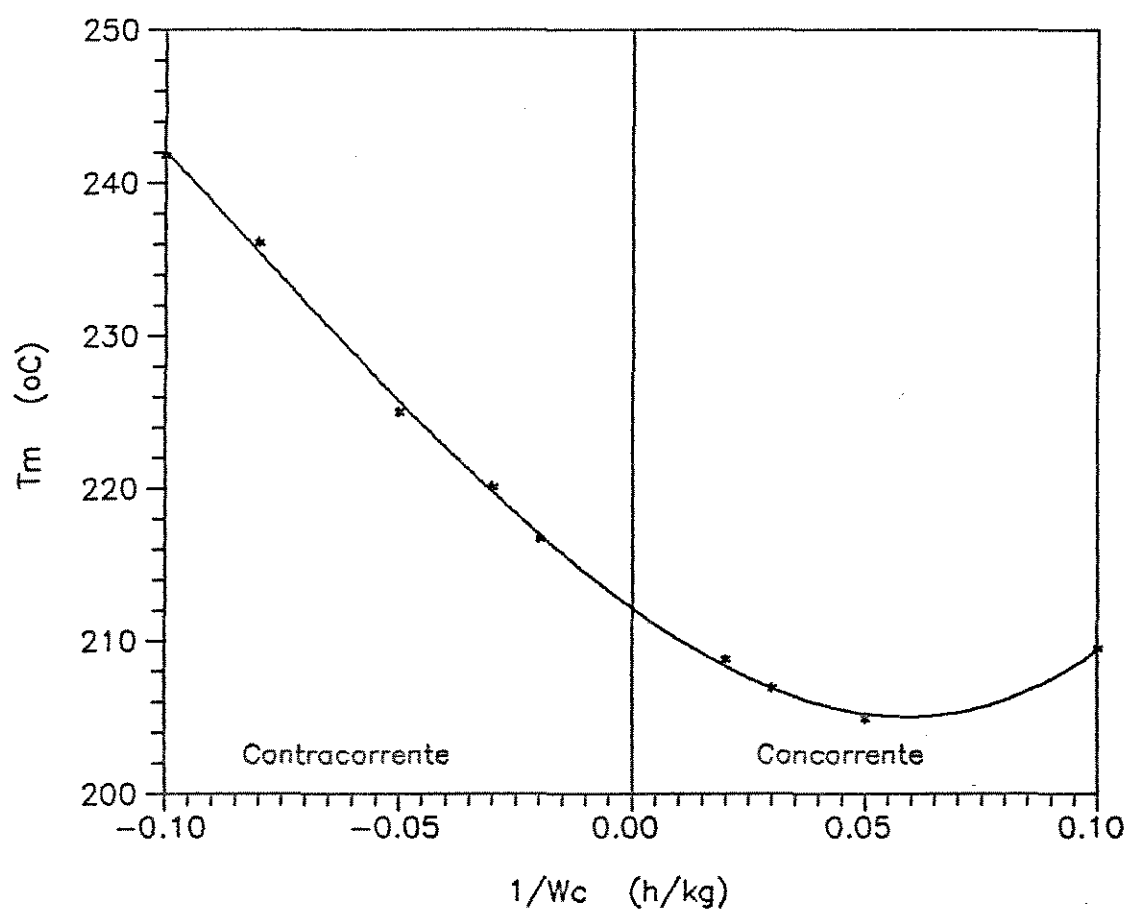


Figura 13 - Perfil de temperatura máxima.



#### 4.4.4 - Análise da Sensitividade Paramétrica Máxima

Para a escolha das condições de operação, apenas a análise do perfil de temperatura máxima não é suficiente para assegurar a estabilidade do reator, o que restringe muito a utilização de resultados provenientes de análises simplificadas. Para garantir operação segura é necessário operar o reator em zonas onde os coeficientes de sensibilidade paramétrica apresentam valores baixos. Ou seja, valores baixos de  $S_2^*$  asseguram que o reator não apresenta regiões onde a temperatura pode ser repentinamente elevada.

Para cada condição de  $W_c$ , o perfil de  $S_2$  apresenta um ponto de máximo ( $S_2^*$ ). A curva de  $S_2^*$  é obtida graficando os valores de  $S_2^*$  versus  $1/W_c$ , como mostra a Figura 14. Nesse gráfico, uma descontinuidade é observada para um valor específico de  $W_c$  no esquema contracorrente. Nas condições dadas nesta etapa, este valor de  $W_c$  está em torno de  $W_c = -13$  kg/h. Todos os pontos localizados na região onde  $S_2^*$  é negativo, correspondem a fluxos contracorrentes. Também pode ser dito que os pontos localizados próximos de  $W_c = -13$  kg/h são pontos intermediários de um estado estacionário instável. Por outro lado, a região direita da curva de  $S_2^*$  corresponde a estados estacionários estáveis. Esta é uma zona de condição de operação viável e compreende :

- configuração concorrente para todo  $W_c$ ;
- configuração contracorrente para valores altos de  $W_c$ ;
- configuração com temperatura constante do refrigerante.

Figura 14

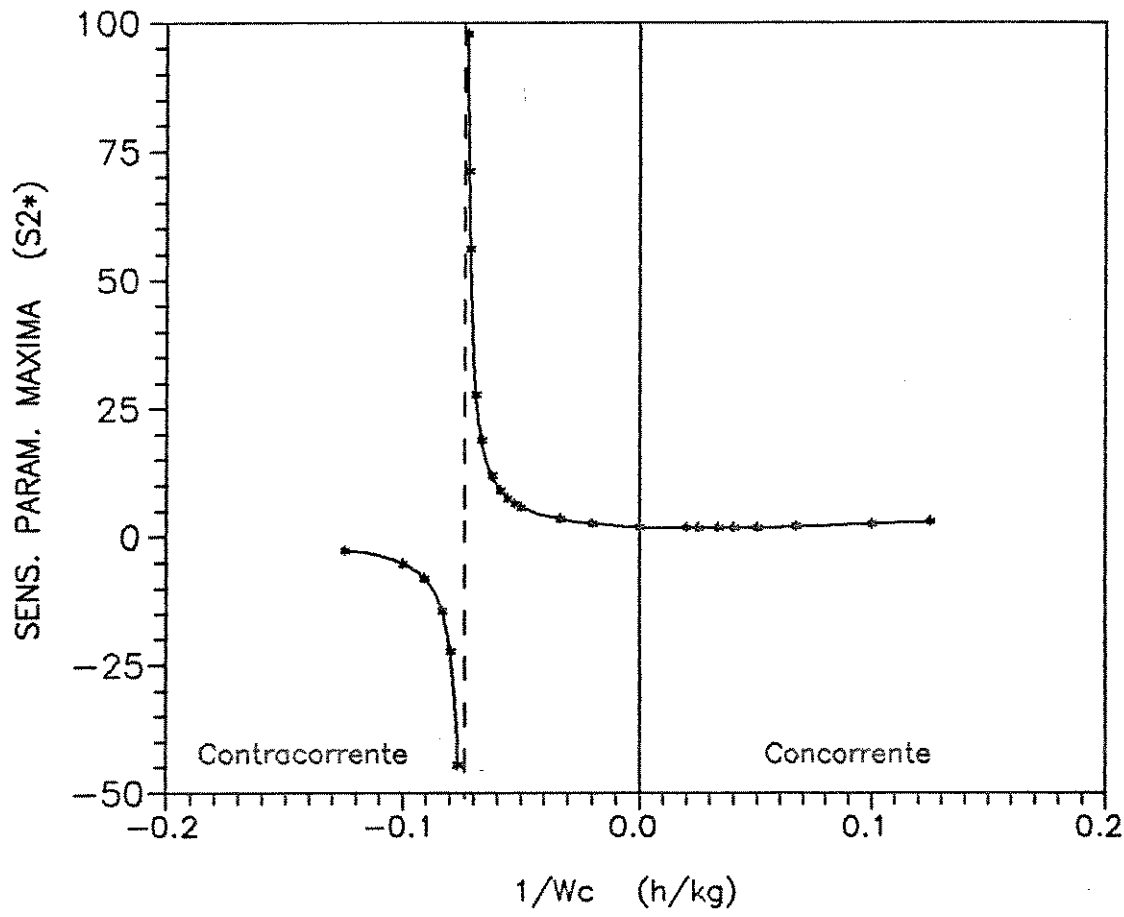


Figura 14 - Perfil de sensibilidade paramétrica máxima.

Portanto para as condições dadas nesta etapa, a análise da forma das curvas de  $T_m$  e  $S_2^*$  levam à uma escolha viável da vazão do refrigerante numa faixa de  $W_c \geq 20$  kg/h evitando operar o reator com uma vazão de refrigerante em torno de  $W_c = -13$  kg/h no esquema contracorrente. Observa-se que os menores valores de  $S_2^*$  estão compreendidos na região concorrente.

Deste modo a análise do perfil de sensibilidade paramétrica máxima indica que o arranjo concorrente é o mais conveniente para a segurança do reator, o que pode ser explicado pela ausência de retro-alimentação de calor neste tipo de configuração.

#### 4.4.5 - Análise do Comprimento do Reator

No projeto do reator, não somente a segurança, mas o aspecto econômico também é importante. Neste estudo não será feita uma análise de custo econômico, apenas será avaliada a condição de operação que requer um menor comprimento do reator, contribuindo assim para um menor custo de operação e investimento inicial. A economia em termos de operação refere-se a menores custos de bombeamento e queda de pressão quanto menores forem os comprimentos dos tubos.

Para cada condição de  $W_c$ , é obtido o valor necessário do comprimento do reator para atingir uma dada conversão final. Na Figura 15 são graficados os valores do comprimento do reator  $L$  versus  $1 / W_c$  para uma conversão igual a 0.7. Observa-se que o esquema concorrente fornece os menores comprimentos para o reator. Por exemplo, para  $W_c = 20$  kg/h, tem-se:

$L = 0.9$  m (esquema concorrente)

$L = 2.3$  m (esquema contracorrente)

$L = 1.35$  m (esquema com  $T_c$  constante).

Figura 15

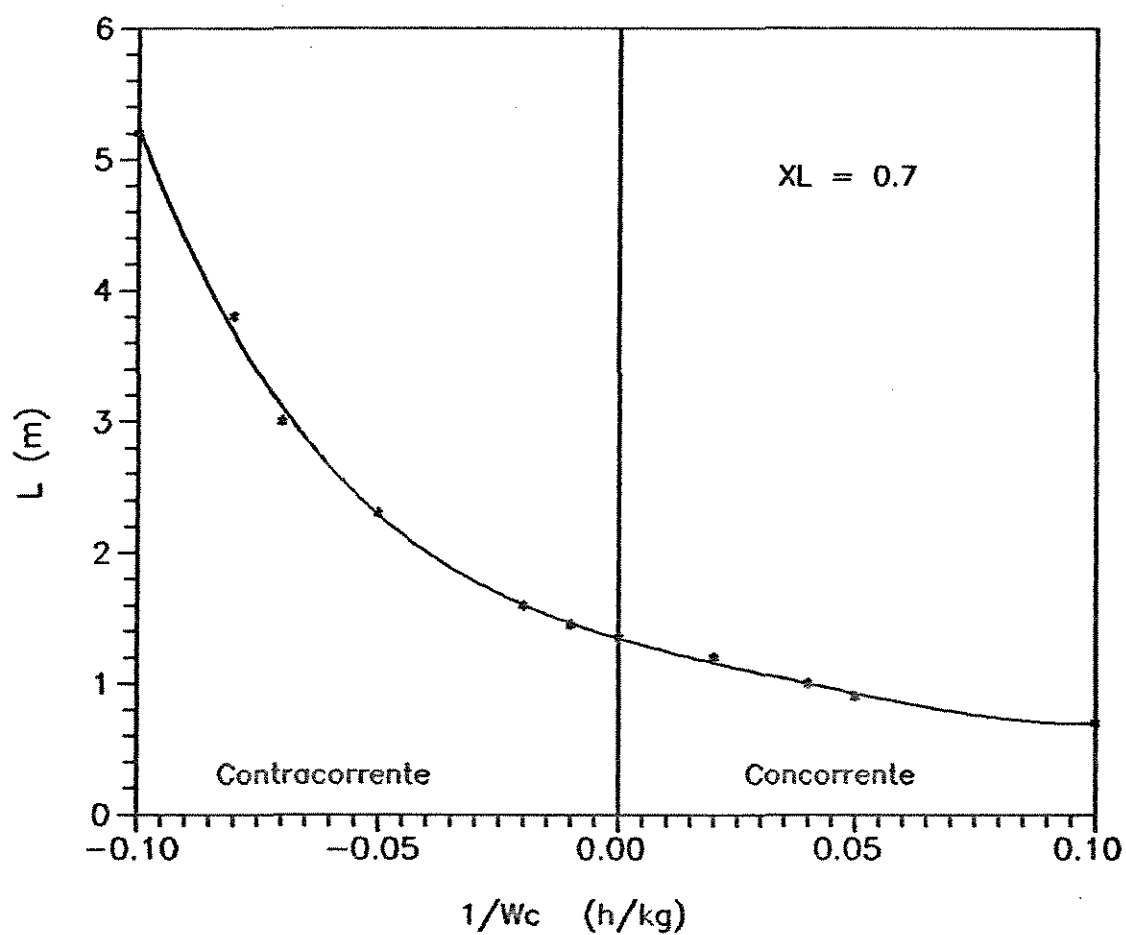


Figura 15 - Perfil do comprimento total do reator.

Esse resultado é interessante pois mostra o potencial do procedimento desenvolvido para encontrar condições de operação e projeto ( "design" ) otimizados.

A análise do comprimento do reator também mostra que o esquema concorrente é o mais indicado.

#### 4.5 - Conclusões

Neste capítulo foi apresentado o conceito dos coeficientes de sensibilidade que foram incorporados às equações de balanço de massa, energia e momento. Foram analisadas três diferentes configurações para o fluxo do fluido refrigerante: concorrente, contracorrente e temperatura constante para o refrigerante. Os resultados obtidos mostram que o esquema concorrente fornece os menores valores para :

- a temperatura máxima ( $T_m$ );
- a sensibilidade paramétrica máxima ( $S_2^*$ );
- o comprimento do reator ( $L$ ).

Valores baixos de  $T_m$  garantem uma melhor seletividade e uma maior vida útil do catalisador. Por outro lado, valores baixos de  $S_2^*$  garantem condições seguras de operação. E reatores projetados com menores comprimentos levam a um menor custo.

Portanto a análise em conjunto dessas variáveis, permite concluir que o esquema de refrigeração concorrente pode ser considerado no projeto de reatores de leito fixo, como sendo o mais adequado.

Além dos resultados específicos obtidos, deve também ser ressaltado o potencial do procedimento desenvolvido neste capítulo para a definição de procedimentos operacionais e tomadas de decisão quanto ao projeto de reatores químicos.

## CAPÍTULO 5

### CONFIGURAÇÕES ALTERNATIVAS DE REFRIGERAÇÃO

#### 5.1 - Introdução

No capítulo anterior foram analisadas duas configurações básicas para o fluxo do refrigerante:

- fluxo somente concorrente, ou
- fluxo somente contracorrente ao longo de todo reator.

Nesta etapa serão avaliadas configurações que sejam uma combinação destes dois arranjos. Ou seja, a corrente do refrigerante se divide em duas partes, sendo que uma flui contracorrentemente ao longo do reator até uma posição pré-especificada e a partir deste ponto passa a fluir concorrentemente ou vice-versa.

Em condições industriais, grande parte dos reatores de leito fixo são refrigerados pelo procedimento convencional. No entanto a performance destes sistemas de grande porte deixa a desejar, especialmente quando reações altamente exotérmicas são consideradas. Portanto o objetivo é avaliar o efeito de alguns tipos de configurações alternativas na performance do reator, comparando com o esquema somente concorrente, e definir o melhor esquema para o fluxo do refrigerante. Esta análise será feita através dos coeficientes de sensibilidade paramétrica, definidos no capítulo anterior.

Alguns trabalhos na literatura ( McGreavy e Dunbobbin, 1978; Dunbobbin, 1976; Stankiewicz, 1985; Stankiewicz et al, 1986; McGreavy e Maciel Filho, 1989; Maciel Filho, 1989 ) deram contribuições importantes, porém algumas novas alternativas possíveis precisam ainda ser testadas.

## 5.2 - Configurações Alternativas

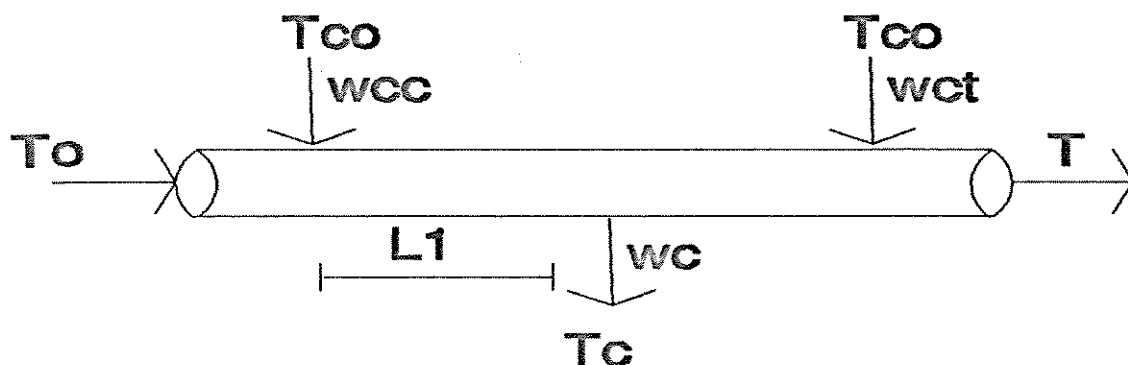
Para as novas configurações do fluxo do refrigerante serão avaliados dois esquemas básicos:

1 - O fluxo do refrigerante flui concorrente no intervalo de  $Z = 0$  até  $Z = L_1$  e passa a fluir contracorrentemente de  $Z = L_1$  até  $Z = L$ . Esta configuração é denominada de " Configuração Alternativa 1 ", Figura 16.

2 - O fluxo do refrigerante flui contracorrente no intervalo de  $Z = 0$  até  $Z = L_1$  e passa a fluir concorrentemente de  $Z = L_1$  até  $Z = L$ . Esta configuração será denominada de " Configuração Alternativa 2 ", Figura 17.

Observa-se que em  $Z = L_1$  o fluxo do refrigerante muda de direção em ambas os esquemas. Deve ser ressaltado também que a vazão de refrigeração total ( soma das vazões nos trechos concorrente e contracorrente ) é igual a utilizada nos reatores com projetos convencionais. Isto é feito para permitir uma comparação efetiva do projeto na performance do reator.

FIGURA 16



$L$  = comprimento total do reator;

$L_1$  = posição de saída do refrigerante ou o tamanho do trecho concorrente;

$w_{cc}$  = vazão do refrigerante no trecho concorrente;

$w_{ct}$  = vazão do refrigerante no trecho contracorrente.

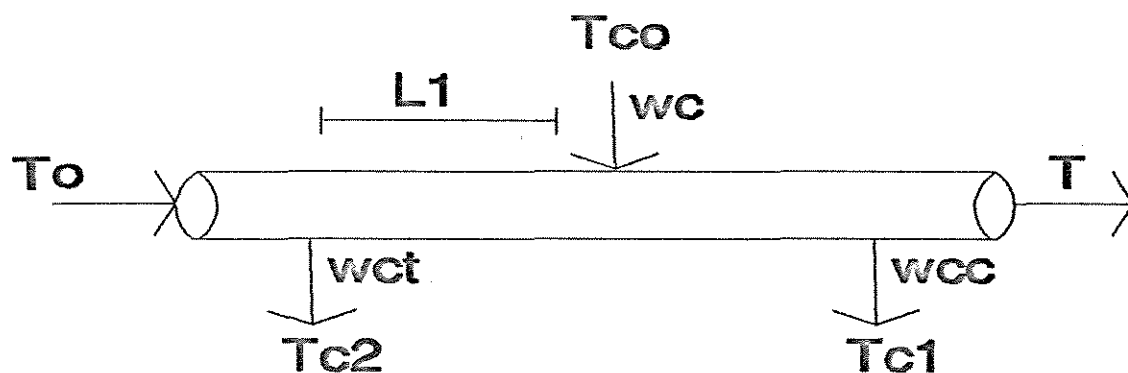
Sendo que :

$$w_c = w_{cc} + w_{ct}$$

Figura 16 - Esquema da Configuração Alternativa 1.



FIGURA 17



$L_1$  = posição em  $z$  da alimentação do refrigerante ou o tamanho do trecho contracorrente;

Figura 17 - Esquema da Configuração Alternativa 2.

A vazão em cada trecho, assim como a posição de L1 variam em cada análise. Considerando o comprimento total do reator igual a 2m, as posições de L1 a serem analisadas são :

$L1 = 0.5 \text{ m}$

$L1 = 1.0 \text{ m}$

$L1 = 1.5 \text{ m}$

$L1 = 1.7 \text{ m}$

Os perfis de temperatura e sensibilidade do reator serão obtidos para cada uma dessas situações em ambas as configurações.

### 5.3 - Resultados

#### 5.3.1 - Configuração Alternativa 1

As variáveis escolhidas e analisadas para definir a melhor configuração do fluxo do refrigerante serão:

- A temperatura máxima do reator ( $T_M$ );
- A sensibilidade paramétrica máxima ( $S_2^*$ );
- A temperatura de alimentação dos reagentes.

Assim, para cada condição os perfis de temperatura e sensibilidade paramétrica obtidos ao longo do reator serão caracterizados pelos seus pontos de máximo. Os valores destas variáveis serão comparados com os valores obtidos na configuração somente concorrente ou contracorrente nas mesmas condições de operação .

Para esta análise tem-se os seguintes valores das variáveis de operação, reportados na tabela 2 :

Tabela 2

$G = 4000 \text{ kg/h}$
$P_{A^o} = 0.0384 \text{ atm}$
$\rho_b = 2314 \text{ kg/m}^3$
$d_t = 0.025 \text{ m}$
$d_o = 0.03175 \text{ m}$
$d_p = 0.002 \text{ m}$
$C_{PE} = 0.03108 \text{ kcal/kg } ^\circ\text{C}$
$R_M = 25 \text{ mol de ar / mol de etanol}$
$L = 2 \text{ m}$
$X_L = 0.7$

Os perfis de temperatura e sensibilidade paramétrica são obtidos pela resolução simultânea das eqs. 16 a 19 e eqs. 49 a 52 para diferentes condições de vazão e posições da alimentação do fluido refrigerante.

Ao variar a vazão em cada trecho do reator, ou seja,  $W_{cc}$  e  $W_{ct}$  a vazão total,  $W_o$ , permanece a mesma em cada situação. Isto é feito para que possa ser comparado com o esquema somente concorrente ou contracorrente nas mesmas condições de vazão total. Assim, para uma corrente do fluido refrigerante a uma dada temperatura ( $T_o$ ) e vazão ( $W_o$ ), a análise dos perfis indicará qual a melhor maneira de refrigerar o reator.

### 5.3.1.1 - Análise da Temperatura Máxima

Na Figura 18 é graficada a temperatura máxima em função da vazão do refrigerante no trecho concorrente para uma vazão total de 20 kg/h. Observa-se que quanto menor o trecho  $L_1$ , ou seja, quanto menor o trecho concorrente, maiores são os valores dos picos de temperatura dentro do reator ( $T_m$ ). Por exemplo, fixando  $W_{cc} = 10$  kg/h e aumentando  $L_1$  de 0.5 para 1.5, verifica-se que  $T_m$  diminui de 222.98 para 212.10 °C (uma queda de 11 °C). Por outro lado, quanto maior a vazão no trecho concorrente, menores são os valores de  $T_m$ . Por exemplo, fixando  $L_1 = 1.5$  m e aumentando  $W_{cc}$  de 5 para 15 kg/h, ocorre uma diminuição de  $T_m$  de 221.6 para 208.5 °C (uma queda de 13 °C). Assim é mais conveniente que o maior trecho seja concorrente e com vazões maiores, ratificando a conveniência do uso deste tipo de refrigeração.

Os pontos que estão marcados sobre a ordenada representam os valores de temperatura máxima do esquema somente concorrente (ponto marcado com um círculo aberto) e do esquema somente contracorrente (ponto marcado com um círculo fechado) para a mesma vazão total. Por exemplo, na Figura 18, os pontos marcados na ordenada correspondente a  $W_{cc} = 20$  kg/h, representam os valores do esquema concorrente e contracorrente para uma vazão total de  $W_c = 20$  kg/h. Estes pontos foram localizados desta forma para que possa ser comparados com os demais valores de  $T_m$  obtidos nas configurações alternativas. Em todos os gráficos seguintes, vão estar sempre marcados estes pontos, obtidos em cada caso, para a mesma vazão total de refrigerante.

Pode ser notado que o valor de  $T_m$  para o esquema concorrente (  $T_m = 205\text{ }^{\circ}\text{C}$  ) é menor do que os valores de  $T_m$  para qualquer condição na configuração alternativa 1, o que implica em dizer que maiores conversões podem ser obtidas com esta configuração alternativa embora o reator ainda apresente estabilidade operacional. Observa-se que quanto maior for a parte do reator resfriado concorrentemente (  $L_1 = 1.5\text{ m}$  ) e para a maior vazão neste trecho (  $W_{cc} = 15\text{ kg/h}$  ) tem-se o menor valor de  $T_m$  para este tipo de configuração (  $T_m = 208\text{ }^{\circ}\text{C}$  ). Ou seja, para estas condições a configuração alternativa 1 tende a se aproximar do esquema somente concorrente.

Para valores baixos de  $L_1$  e  $W_{cc}$ , os valores de  $T_m$  são maiores do que o valor de  $T_m$  do esquema contracorrente, não sendo portanto condições adequadas de operação. Principalmente quando reações consecutivas e paralelas ocorrem.

Aumentando a vazão total para  $W_c = 50\text{ kg/h}$ , Figura 19, a influência de  $W_{cc}$  é menos significativa do que a de  $L_1$ . Por exemplo, fixando  $W_{cc} = 25\text{ kg/h}$  e aumentando  $L_1$  de 0.5 para 1.5 m, verifica-se que  $T_m$  diminui de 216 para 208  $^{\circ}\text{C}$  (uma queda de 8  $^{\circ}\text{C}$ ), enquanto que, fixando  $L_1 = 1.5\text{ m}$  e aumentando  $W_{cc}$  de 12.5 para 37.5  $\text{kg/h}$ , verifica-se que  $T_m$  diminui de 210 para 209.5 (uma pequena diferença de 0.5  $^{\circ}\text{C}$ ). Assim quanto maior a vazão total, menor é a influência da distribuição de vazão em cada trecho.

Quanto maior o trecho concorrente na configuração alternativa, mais os valores de  $T_m$  se aproximam do valor de  $T_m$  do esquema somente concorrente, como era de se esperar. Assim, dentre as possíveis condições para a configuração alternativa 1, a melhor seria aquela que tem o maior trecho concorrente e com uma maior vazão neste mesmo trecho, ou seja, uma configuração que se aproxima do esquema concorrente.

Figura 18

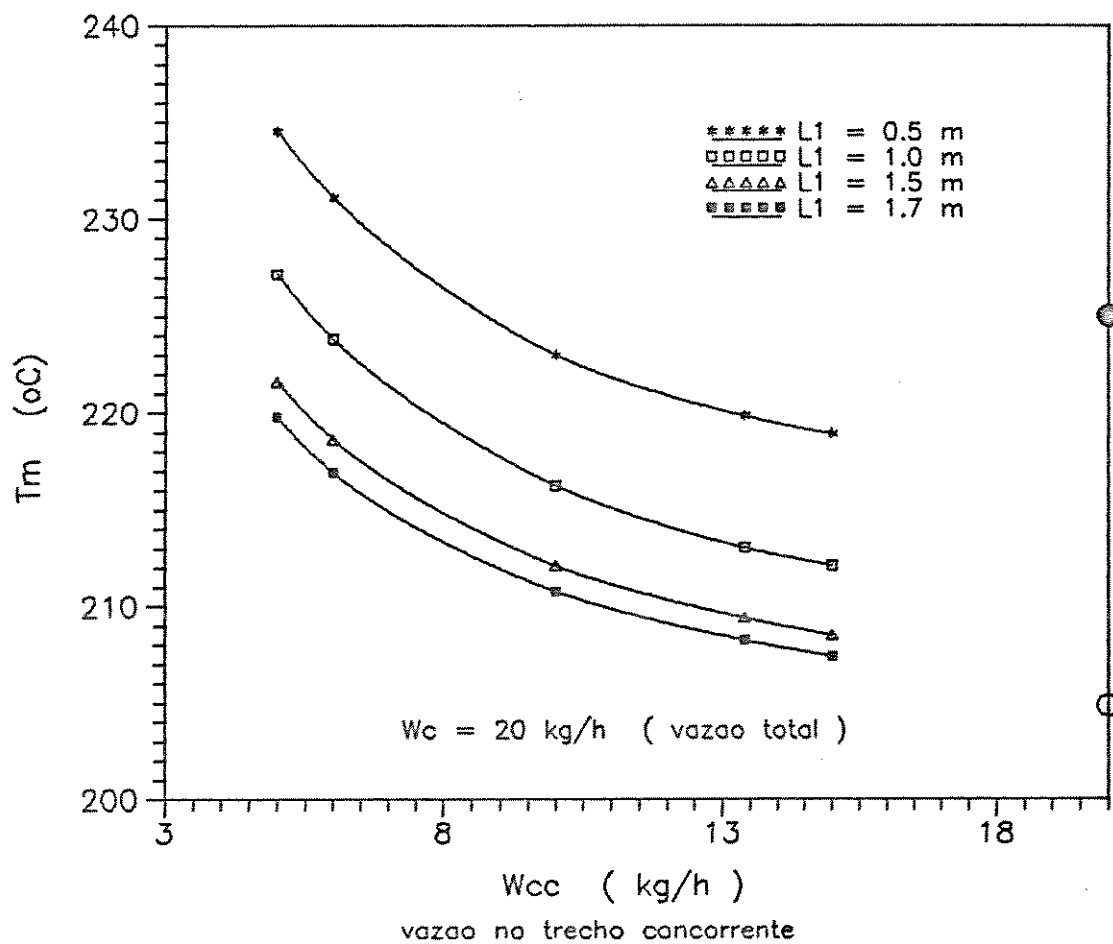


Figura 18 - Perfil de temperatura máxima para a configuração alternativa 1 para  $W_c = 20$  kg/h.

Figura 19

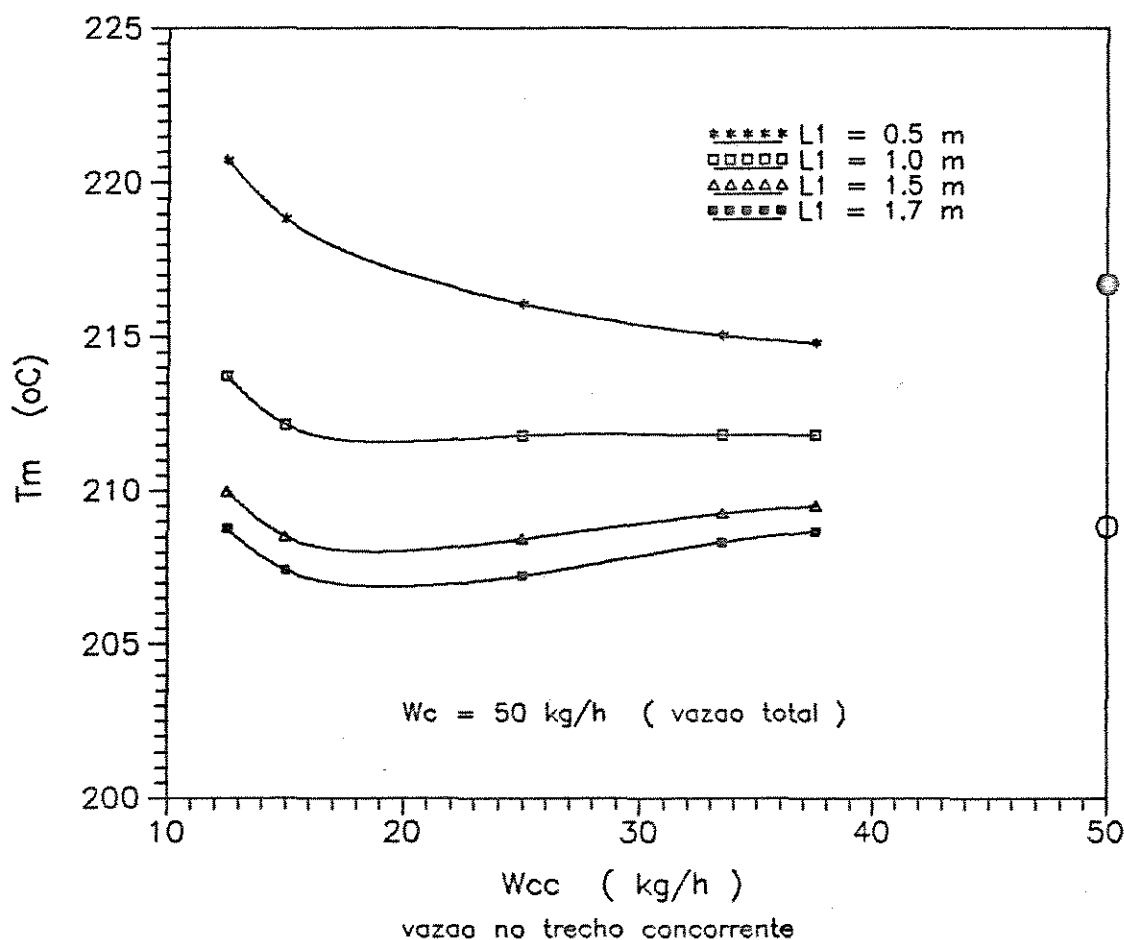


Figura 19 - Perfil de temperatura máxima para a configuração alternativa 1 para  $W_c = 50 \text{ kg/h}$ .

Portanto a análise da temperatura máxima ou " hot spot ", sugere o esquema concorrente para a refrigeração do reator, uma vez que é o esquema que fornece os menores valores dos pontos quentes dentro do reator. Isto garante uma melhor seletividade e uma maior vida útil para o catalisador. No entanto a seção contracorrente pode ser muito útil para promover reações quando baixas concentrações dos reagentes estão presentes, de forma que altas conversões podem ser atingidas sem ter problemas de instabilidade.

### 5.3.1.2 - *Análise da Sensitividade Paramétrica* *Máxima*

A análise do perfil de temperatura máxima não é suficiente para garantir a estabilidade do reator. A análise da sensitividade paramétrica máxima é importante na performance do reator, pois permite definir condições onde a temperatura não seja significativamente sensível a mudanças nas variáveis de operação.

Na Figura 20 é graficada a sensitividade paramétrica máxima (  $S_{2^*}$  ) em função da vazão no trecho concorrente (  $W_{cc}$  ) para uma vazão total de 20 kg/h. Observa-se que os valores de  $S_{2^*}$  são todos positivos para qualquer condição ( característica do esquema concorrente ). Assim para este tipo de configuração, não ocorre uma região de instabilidade para determinada faixa de vazão.

Verifica-se que a sensitividade paramétrica máxima é mais sensível com o aumento de  $W_{cc}$  do que o aumento de  $L_1$ . Por exemplo, fixando  $L_1 = 1.0$  m e aumentando  $W_{cc}$  de 5 para 15 kg/h, verifica-se que  $S_{2^*}$  diminui de 4.69 para 2.15 (uma queda 2.54).



Por outro lado, fixando  $W_{cc} = 10$  kg/h e aumentando  $L_1$  de 0.5 para 1.5 m, observa-se que  $S_2^*$  diminui de 2.94 para 2.59 (uma pequena diferença de 0.35).

A partir de  $L_1 = 1.0$  m as curvas tendem a coincidir, mesmo com o aumento do trecho concorrente, sendo que quanto maior a vazão no trecho concorrente, menor os valores de  $S_2^*$ .

Para o esquema concorrente o valor de  $S_2^* = 1.78$  é menor que os valores de  $S_2^*$  em qualquer condição da configuração alternativa.

Aumentando a vazão total para  $W_c = 50$  kg/h, Figura 21, observa-se que os valores de  $S_2^*$  são relativamente menores do que os valores de  $S_2^*$  para  $W_c = 20$  kg/h. A influência da posição de  $L_1$ , ou seja, do tamanho do trecho concorrente não é muito significativa. Por exemplo, fixando-se  $W_{cc} = 15$  kg/h e aumentando  $L_1$  de 0.5 para 1.5 m, observa-se que  $S_2^*$  diminui de 2.42 para 2.02 (uma pequena diferença de 0.4).

O aumento da vazão no trecho concorrente também fornece pequenas variações em  $S_2^*$ . Por exemplo, fixando  $L_1 = 0.5$  m e aumentando  $W_{cc}$  de 12.5 para 37.5 kg/h, verifica-se que  $S_2^*$  diminui de 2.67 para 2.06 (uma pequena diferença de 0.63). Assim quanto maior a vazão total, menor a variação da sensibilidade paramétrica máxima diante da variação de  $L_1$  e  $W_{cc}$ .

Todos os valores de  $S_2^*$  na configuração alternativa 1 estão acima do valor de  $S_2^*$  do esquema concorrente. Portanto a análise do perfil de sensibilidade paramétrica máxima indica que o esquema concorrente fornece os menores valores de  $S_2^*$ , o que garante então condições mais seguras de operação, ou seja, que a temperatura do reator não tende a elevar-se repentinamente em direção a um "hot spot". Porém é também possível encontrar condições em que a configuração alternativa apresenta as mesmas qualidades da refrigeração concorrente porém com maiores conversões.

Figura 20

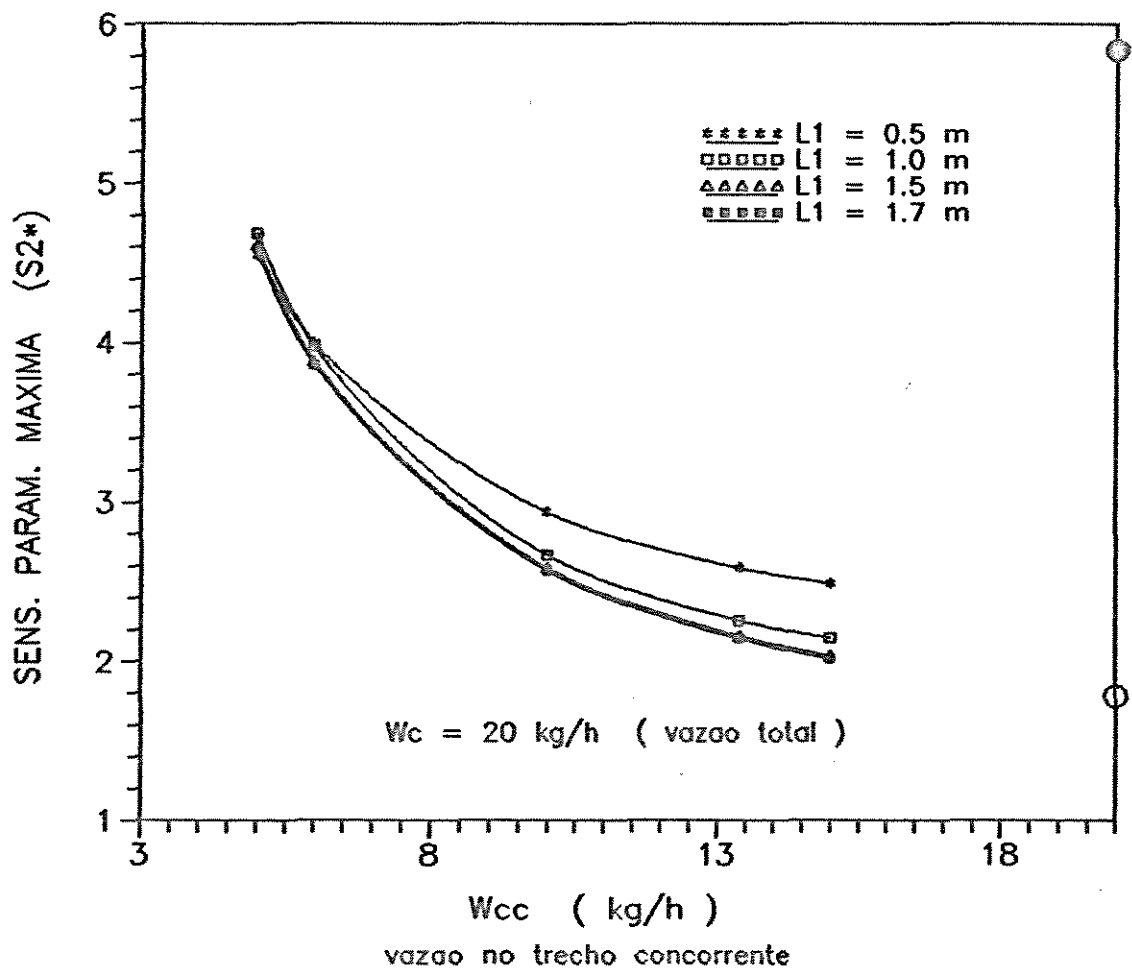


Figura 20 - Perfil de sensibilidade paramétrica máxima para a configuração alternativa 1 para  $W_c = 20$  kg/h.

Figura 21

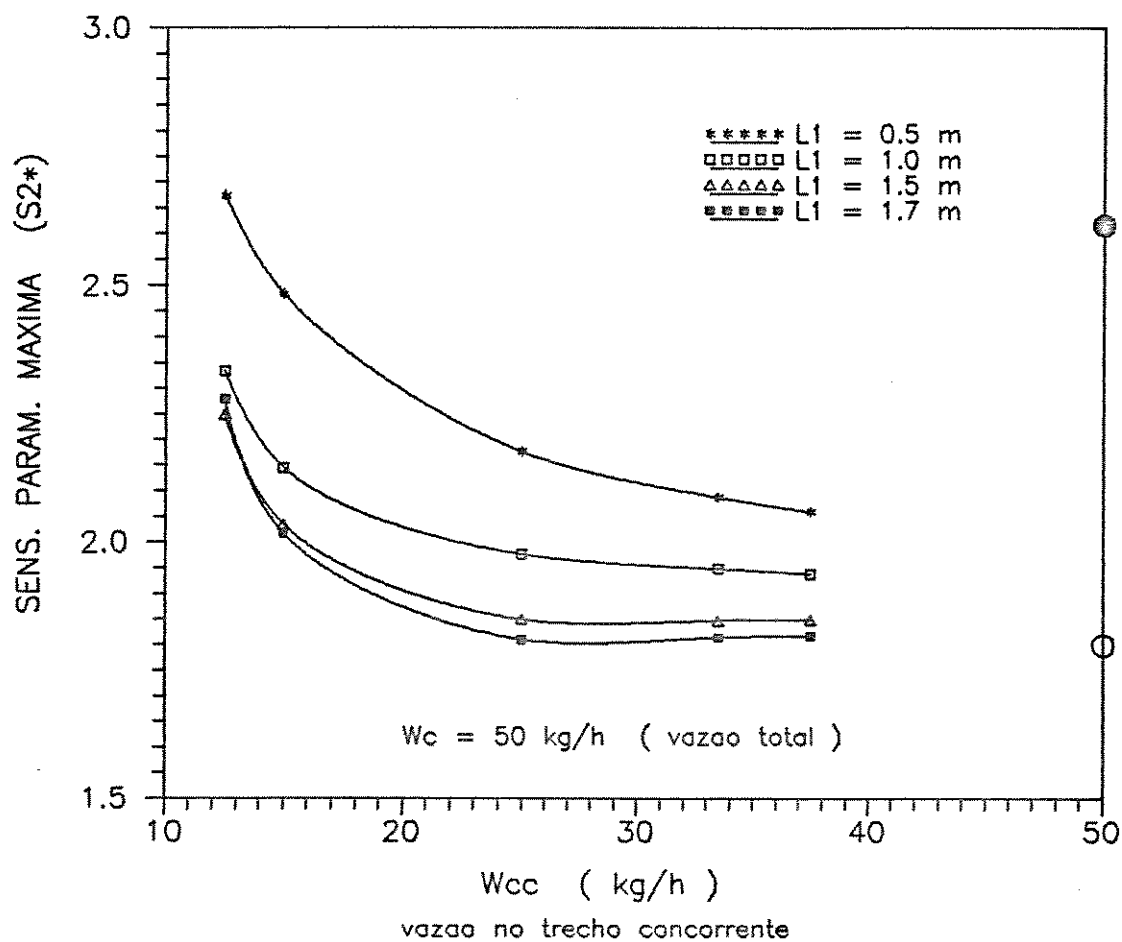


Figura 21 - Perfil de sensibilidade paramétrica máxima para a configuração alternativa 1 para  $W_c = 50$  kg/h.

### 5.3.1.3 - Análise da Temperatura de Alimentação

Na Figura 22 é mostrado a influência da vazão no trecho concorrente ( $W_{cc}$ ) na temperatura de alimentação dos reagentes ( $T_o$ ) para uma vazão total de  $W_c = 20$  kg/h. Observa-se que  $L_1$  tem uma influência maior em  $T_o$  do que  $W_{cc}$ . Por exemplo, fixando  $L_1 = 0.5$  m e aumentando  $W_{cc}$  de 5 para 15 kg/h, verifica-se que  $T_o$  aumenta de 196.7 para 198.1 °C (um aumento de 1.4 °C). Mas, fixando  $W_{cc} = 5$  kg/h e aumentando  $L_1$  de 0.5 para 1.5 m, o valor de  $T_o$  diminui de 196.7 para 182.7 °C (uma queda de 14 °C).

Observa-se ainda que para  $L_1 > 1.0$  m ( e  $W_c = 20$  kg/h) os valores de  $T_o$  são menores do que o valor de  $T_o$  para o esquema concorrente para obter a mesma conversão de saída, mostrando uma vantagem da configuração alternativa.

Aumentando a vazão total para  $W_c = 50$  kg/h , Figura 23, os valores de  $T_o$  são relativamente menores, principalmente para  $L_1 = 1.5$  m. Observa-se ainda que fixando  $L_1 = 0.5$  m o aumento da vazão no trecho concorrente não altera o valor de  $T_o$  . Mas quando se fixa  $L_1 = 1.5$  m e aumenta-se  $W_{cc}$  de 12.5 para 37.5 kg/h, verifica-se um aumento em  $T_o$  de 4.5 °C. Por outro lado, fixando  $W_{cc} = 12.5$  kg/h e aumentando  $L_1$  de 0.5 para 1.5 há uma queda 7.5 °C em  $T_o$ . Observa-se ainda que para  $L_1 > 1.0$  m todos os valores de  $T_o$  são menores do que o valor de  $T_o$  no esquema concorrente. Nestas condições, para a configuração alternativa 1, o menor valor de  $T_o$  é 190.1 °C enquanto que no esquema concorrente  $T_o = 195$  °C. Uma diferença de 4.4 °C.

No entanto, somente este critério não pode definir a configuração alternativa 1 como a melhor, em vista que a sensibilidade paramétrica máxima e a temperatura máxima do reator são menores no esquema concorrente, e essas são variáveis importantes para a segurança do reator.

Figura 22

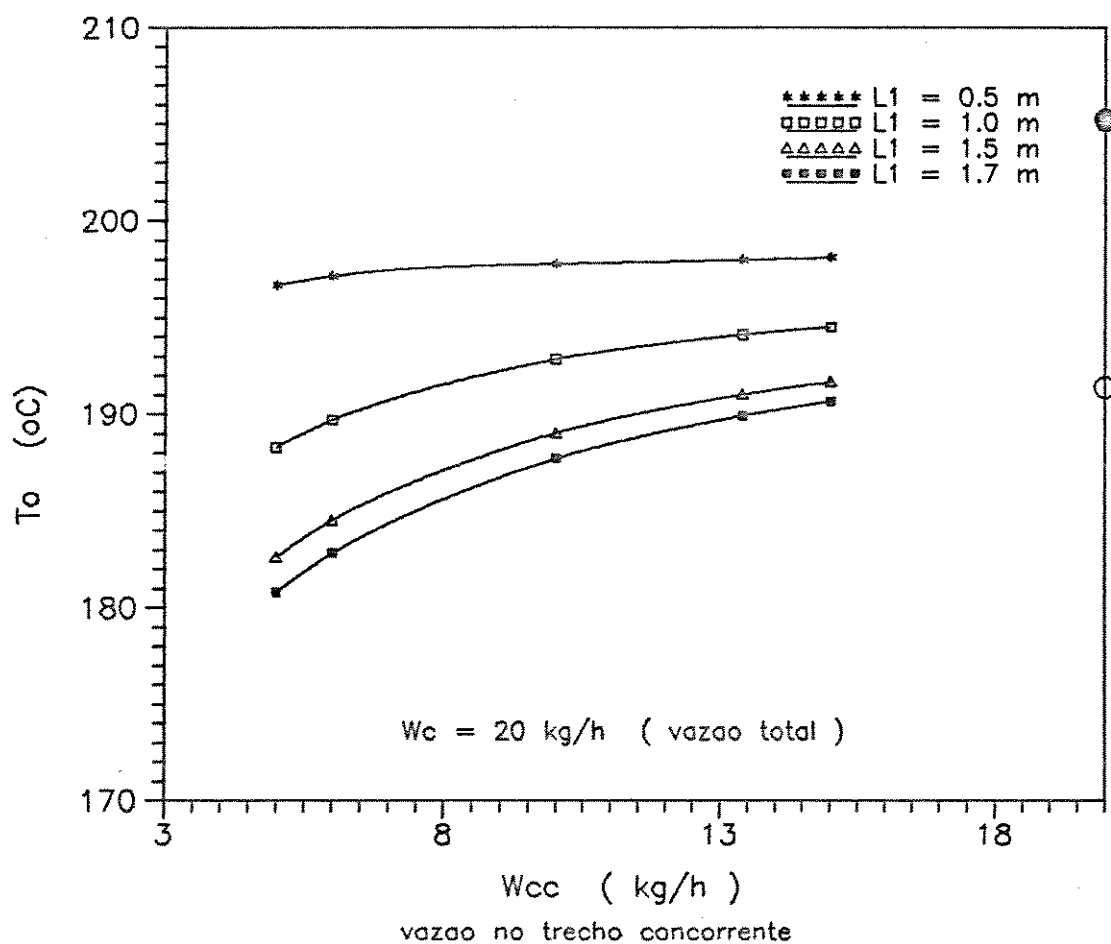


Figura 22 - Perfil da temperatura de alimentação dos reagentes na configuração alternativa 1 para  $W_c = 20$  kg/h.

Figura 23

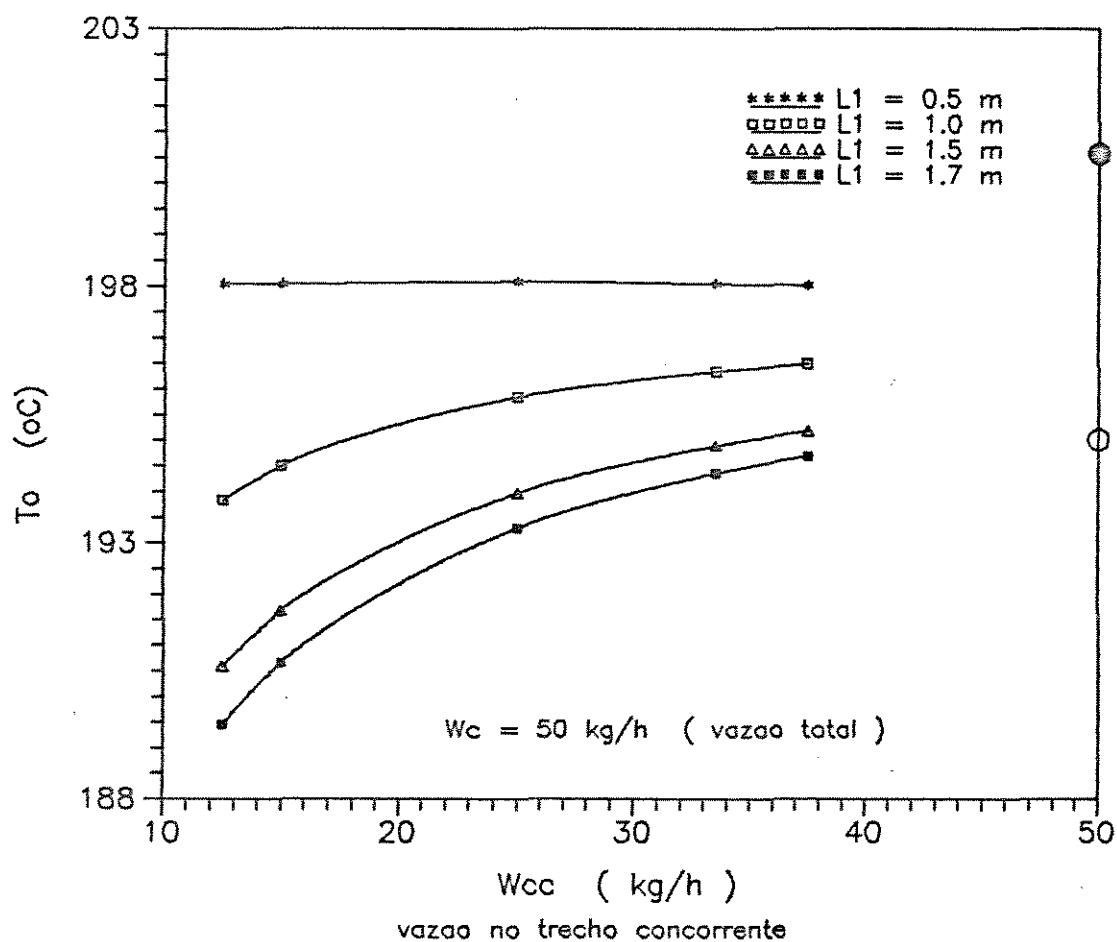


Figura 23 - Perfil da temperatura de alimentação dos reagentes na configuração alternativa 1 para  $W_c = 50$  kg/h.

Estes resultados são importantes pois uma das variáveis que pode sofrer alterações nas operações industriais rotineiras é a temperatura de alimentação dos reagentes, influenciando inclusive na escolha da configuração de controle do sistema.

Portanto em comparação com todas as condições na configuração alternativa 1, conclui-se que o esquema concorrente deve ser escolhido quando se deseja menores valores de temperatura máxima e sensibilidade paramétrica máxima, garantindo então condições mais seguras para a operação do reator. A nova configuração proposta é indicada quando conversões mais altas são desejadas, o que pode ser obtido devido a secção contracorrente, porém estando o reator ainda estável.

### 5.3.2 - Configuração Alternativa 2

#### 5.3.2.1 - Análise da Temperatura Máxima

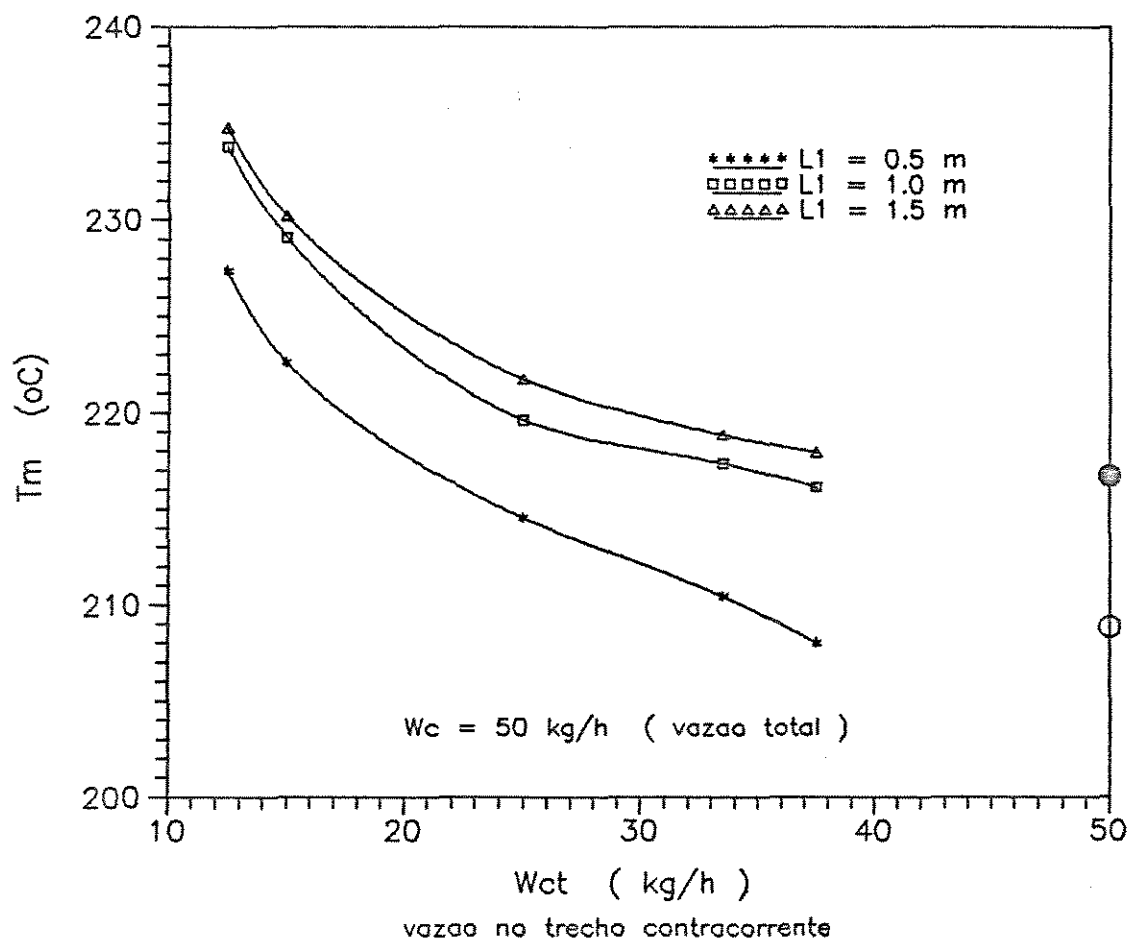
Na Figura 24 é graficada a temperatura máxima ( $T_M$ ) em função da vazão no trecho contracorrente ( $W_{CT}$ ) para uma vazão total de refrigerante de  $W_C = 50$  kg/h. Observa-se que quanto menor o trecho contracorrente, menor  $L_1$ , menores são os valores de  $T_M$ . Por exemplo, fixando  $W_{CT} = 15$  kg/h e aumentando  $L_1$  de 0.5 para 1.5 m, ocorre um aumento de  $T_M$  de 222.9 para 230.2 °C ( uma diferença de 7.6 °C ).

Quanto maior a vazão no trecho em contracorrente menores são os valores de  $T_M$ , pois uma maior capacidade térmica é inserida no sistema com o aumento da vazão de refrigerante. Por exemplo, fixando  $L_1 = 0.5$  m e aumentando  $W_{CT}$  de 15 para 37 kg/h, verifica-se que  $T_M$  diminui de 222.6 para 208.1 °C ( uma diferença de 14.6 °C ), o que mostra que a vazão no trecho contracorrente tem uma influência significativa nos valores de temperatura máxima. Os valores de  $T_M$  para a configuração alternativa 2 são todos maiores que o valor de  $T_M$  no esquema concorrente.

Quanto menor o trecho contracorrente ( menor  $L_1$  ) e quanto maior a vazão neste trecho, mais o perfil tende a se aproximar do perfil do esquema concorrente, fornecendo valores de  $T_M$  muito próximos. Esta característica pode ser utilizada para permitir atingir níveis desejados de conversão de acordo com o comprimento de cada seção, fixados a temperatura e vazão do refrigerante.



Figura 24

Figura 24 - Perfil de temperatura máxima para a configuração alternativa 2 para  $W_c = 50$  kg/h.

### 5.3.2.2 - Análise da Sensitividade Paramétrica

#### Máxima

Na Figura 25 é graficada a sensibilidade paramétrica máxima ( $S_2^*$ ) em função da vazão no trecho contracorrente ( $W_{CT}$ ) para uma vazão total de  $W_c = 50$  kg/h. Observa-se a ocorrência de valores negativos para  $S_2^*$ , a qual é característica do esquema contracorrente. O comportamento da curva de  $S_2^*$  é semelhante ao do esquema contracorrente. Para qualquer valor de  $L_1$ , ou seja, qualquer que seja o tamanho do trecho contracorrente, pode-se verificar a existência de uma região de instabilidade para uma certa faixa de  $W_{CT}$ , onde  $S_2^*$  assume valores extremamente elevados, indicando uma grande sensibilidade da temperatura do reator nestas condições de operação. Nestas circunstância pode ocorrer disparo na temperatura do reator ( condições de " run away " ), portanto deve-se evitar operar o reator nestas condições ( $11 < W_{CT} < 14$  kg/h).

Para valores altos de  $W_{CT}$  os valores de  $S_2^*$  são baixos, positivos e se localizam fora da região de instabilidade, sendo portanto condições mais adequadas para a segurança do reator. Esses valores foram graficados na Figura 26 para que se possa visualizar melhor a influência de  $L_1$  e  $W_{CT}$  longe da região de instabilidade. Observa-se que quanto maior o trecho contracorrente, menores são os valores de  $S_2^*$ , e quanto maior a vazão no trecho contracorrente menor  $S_2^*$ . Por exemplo, fixando  $W_{CT} = 15$  kg/h e aumentando  $L_1$  de 0.5 para 1.5 m observa-se que  $S_2^*$  aumenta de 5.05 para 18.1 ( uma diferença de 13.1 ). Por outro lado, fixando  $L_1 = 1.5$  m e aumentando  $W_{CT}$  de 15 para 37 kg/h verifica-se que  $S_2^*$  diminui de 18.1 para 2.91 ( uma diferença de 15.2 ).

Figura 25

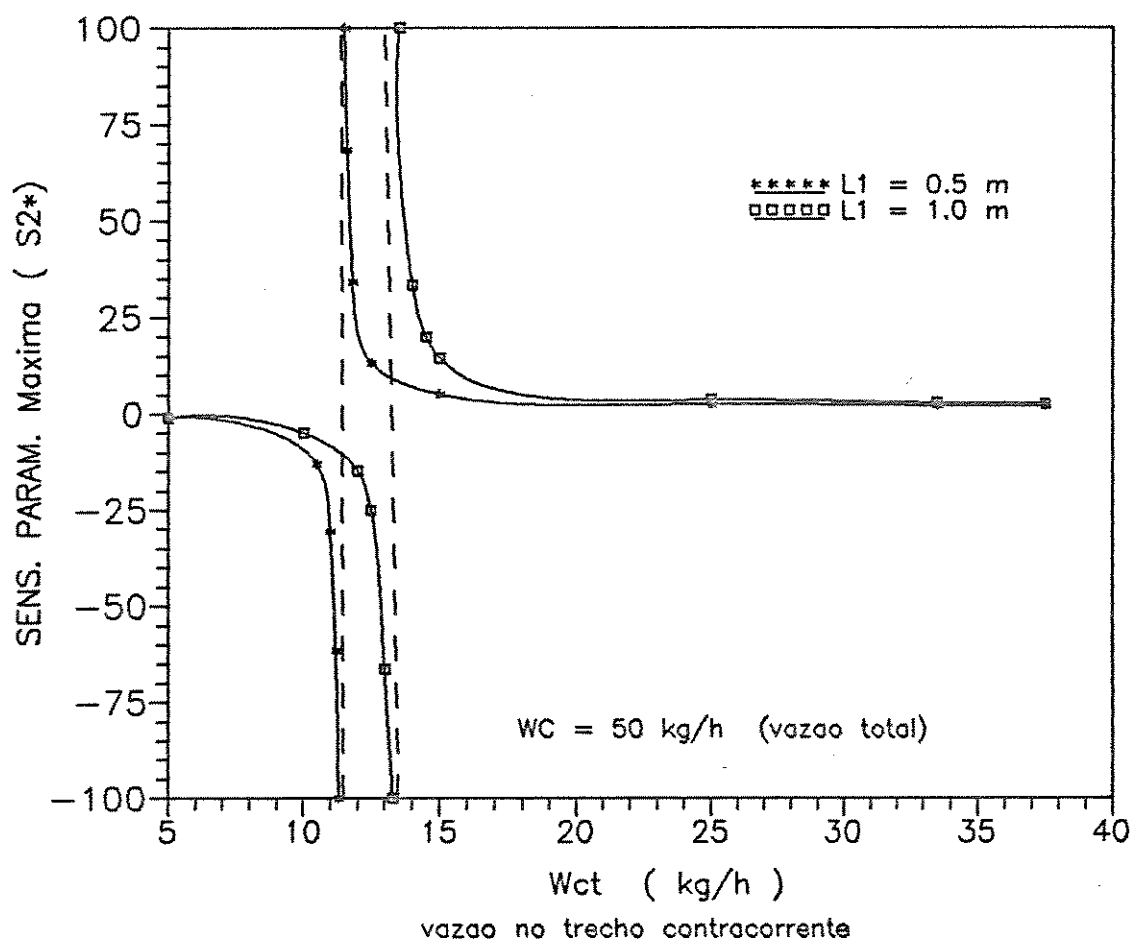


Figura 25 - Perfil de sensibilidade paramétrica máxima para a configuração alternativa 2 para  $W_c = 50$  kg/h.

Figura 26

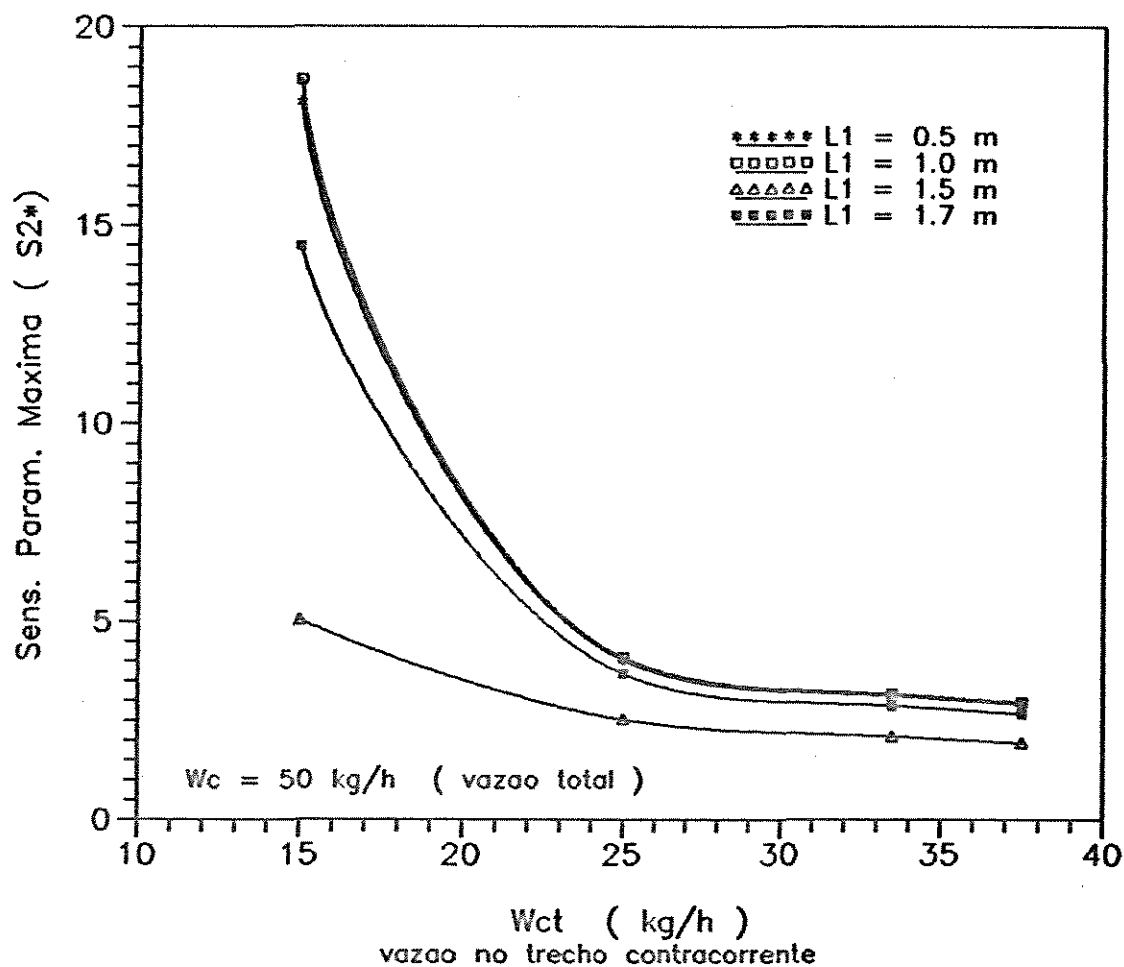


Figura 26 - Perfil de sensibilidade paramétrica máxima na região de estabilidade para a configuração alternativa 2 para  $W_c = 50$  kg/h.

A medida que se aumenta  $W_{cr}$  diminui a influência de  $L_1$ , ou seja, o tamanho do trecho contracorrente deixa de ser um fator importante, como pode ser visto com o seguinte exemplo: Fixando  $W_{cr} = 37 \text{ kg/h}$  e aumentando  $L_1$  de 0.5 para 1.5 m, observa-se que o valor de  $S_2^*$  aumenta de 2.67 para 2.96 ( uma pequena diferença de 0.28 ).

Todos os valores de  $S_2^*$  na configuração alternativa 2 são maiores do que o valor de  $S_2^*$  no esquema concorrente. Para condições adequadas ( valores altos para  $L_1$  e  $W_{cr}$  ) o perfil se aproxima do esquema concorrente.

Assim a análise da sensibilidade paramétrica máxima indica que o esquema puramente concorrente apresenta como característica menores valores de  $S_2^*$ , garantindo operações seguras, embora maiores comprimentos são necessários para atingir altas conversões.

### 5.3.2.3 - Análise da Temperatura de Alimentação

Na Figura 27 é mostrada a influência da vazão no trecho contracorrente (  $W_{cr}$  ) na temperatura de alimentação dos reagentes para uma vazão total do refrigerante de  $W_c = 50 \text{ kg/h}$ , para que ocorra uma conversão total igual a 0.7. Observa-se que quanto menor o trecho contracorrente, menores são os valores de  $T_o$  para que se possa obter a mesma conversão de saída (  $X_L = 0.7$  ). Para  $L_1 > 1.0 \text{ m}$  o tamanho do trecho contracorrente passa a não sofrer a influência de alterações em  $T_o$ . Por exemplo, fixando  $W_{cr} = 25 \text{ kg/h}$  e aumentando  $L_1$  de 1.0 para 1.5, o valor de  $T_o$  aumenta de 202.94 para 203.54 °C (um aumento de 0.6 °C).

Por outro lado, quanto maior  $W_{cr}$  menor  $T_o$ . Por exemplo: fixando  $L_1 = 0.5$  m e aumentando  $W_{cr}$  de 15 para 37 kg/h, observa-se que o valor de  $T_o$  diminui de 204.41 para 195.87 °C (uma queda de 8.5 °C). Os valores de  $T_o$  na configuração alternativa 2 são maiores do que o valor de  $T_o$  no esquema concorrente, e em condições adequadas tende a se aproximar deste valor.

Assim a análise de  $T_o$  indica que o esquema concorrente é o que leva a operação mais seguras, pois requer valores menores para a temperaturas de alimentação dos reagentes para atingir a mesma conversão de saída. Portanto em comparação com todas as condições na configuração alternativa 2, conclui-se que o esquema concorrente leva a menores valores de temperatura máxima e sensibilidade paramétrica máxima, garantindo então condições mais seguras para a operação do reator.

Figura 27

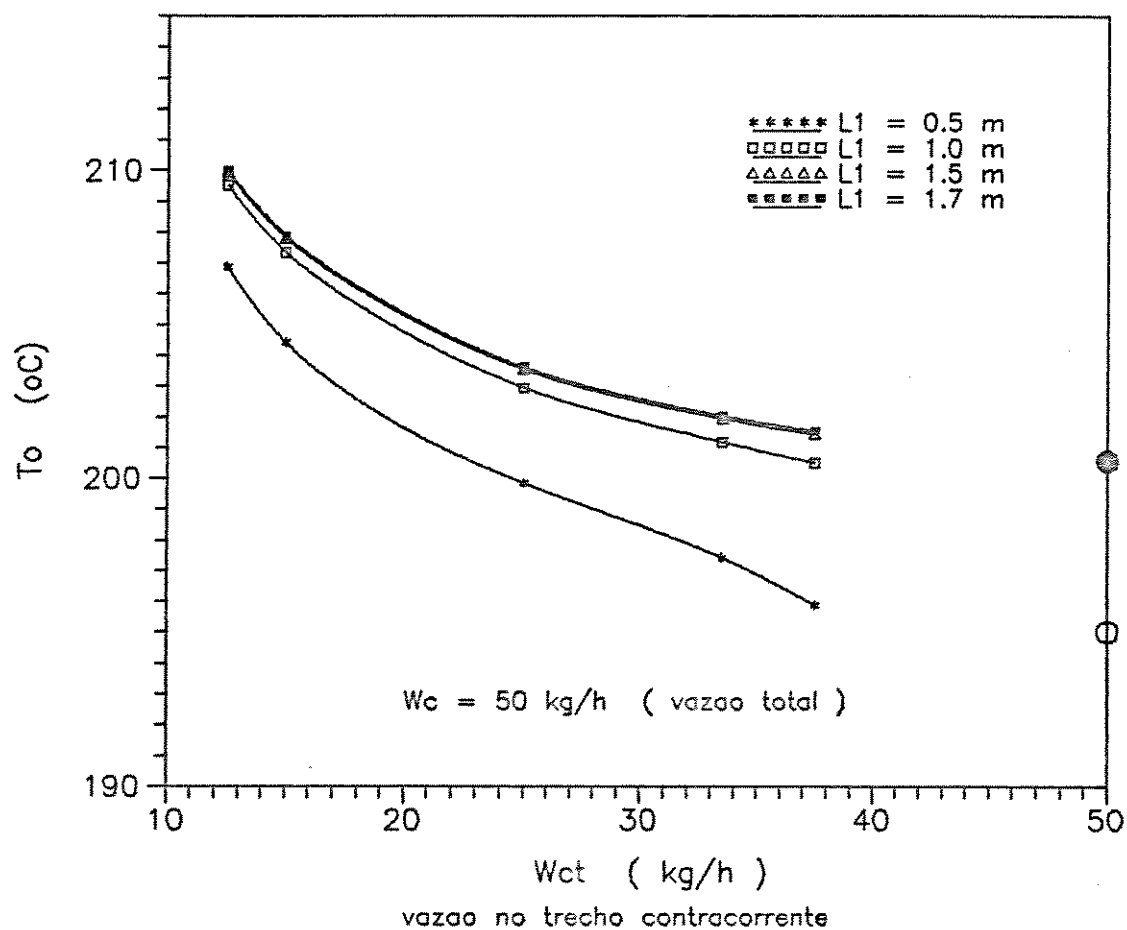


Figura 27 - Perfil da temperatura de alimentação dos reagentes na configuração alternativa 2 para  $W_c = 50 \text{ kg/h}$ .

## 5.4 - Conclusões

Neste capítulo foram apresentadas duas configurações alternativas de refrigeração, com o intuito de verificar se há uma maneira melhor de refrigerar o reator do que os esquemas convencionais de refrigeração (concorrente e contracorrente). Para cada uma das configurações foram analisadas várias condições de vazão do refrigerante. Em ambas as configurações a melhor performance é obtida quando se tem o maior trecho do reator refrigerado concorrentemente e para vazões altas do refrigerante. Entretanto, foi verificado que o esquema concorrente é o que fornece os menores valores para a sensibilidade paramétrica máxima, para a temperatura máxima do reator e para a temperatura de alimentação dos reagentes (exceto em algumas condições). Valores baixos de  $T_m$  garantem uma melhor seletividade e uma maior vida útil do catalisador. Em adição, valores baixos de  $S_2^*$  garantem condições seguras de operação.

Portanto a análise em conjunto dessas variáveis, permite concluir que o esquema concorrente é o mais indicado no projeto de reatores de leito fixo. No entanto as configurações alternativas tem um grande potencial para permitir projetos de reatores com menores comprimentos que podem trabalhar com altas conversões, bem controladas e portanto com operação estável.



## CAPÍTULO 6

### CONFIGURAÇÃO CONCORRENTE

#### 6.1 - Introdução

Nos capítulos anteriores foram analisadas várias condições de operação do reator, assim como configurações alternativas, no sentido de verificar qual a melhor forma de refrigerar o reator, visando atingir condições seguras de operação com uma alta performance. Todas as análises anteriores indicaram a configuração concorrente como sendo muito estável e portanto com grande potencial de utilização em processos industriais. De fato esta configuração é largamente utilizada e merece uma análise mais detalhada para avaliação de sua performance.

Neste capítulo, partindo-se deste fato, será feito uma análise das principais variáveis de operação, de modo a verificar quais as melhores condições operacionais quando o reator é refrigerado concorrentemente. Para tanto será utilizada a técnica desenvolvida no capítulo 3. ou seja, através de coeficientes de sensibilidade paramétrica.

As variáveis consideradas na análise são as vazões do fluido refrigerante e reagente e pressão total. Estas variáveis foram escolhidas pois são facilmente manipuladas (relativamente baixo custo de instrumentação) o que as torna bastante utilizadas nos reatores de porte industrial.

## 6.2 - Resultados

### 6.2.1 - Influência da Vazão do Refrigerante

Nesta análise serão considerados os seguintes dados:

$R_M = 25$  mol de ar/ mol de etanol;  $G = 4000$  kg/h.m<sup>2</sup> e  $X_L = 0.7$

Na Figura 28 é graficada a sensibilidade paramétrica máxima ( $S_{z^*}$ ) em função da vazão do refrigerante ( $W_c$ ). Observa-se que quanto maior a vazão do refrigerante menor o valor de  $S_{z^*}$ , sendo que para  $W_c > 20$  kg/h a sensibilidade paramétrica é praticamente constante. Por exemplo, aumentando  $W_c$  de 8 para 50 kg/h, verifica-se que  $S_{z^*}$  diminui de 3.03 para 1.79 ( uma queda de 1.23 ).

Na Figura 29 é graficada a influência da vazão do refrigerante na temperatura máxima do reator. Observa-se a ocorrência de um ponto de mínimo nesta curva para  $W_c$  de 20 kg/h, o que pode indicar que esta seria uma vazão adequada para o refrigerante. Verifica-se ainda que para valores baixos de  $W_c$  tem-se valores maiores para  $T_M$ . Por exemplo, aumentando  $W_c$  de 8 para 20 kg/h, verifica-se que  $T_M$  diminui de 211.75 para 204.86 °C ( uma queda de 6.7 °C ).

Na Figura 30 é graficada a influência da vazão do refrigerante na temperatura de alimentação dos reagentes. Para este caso, quanto maior  $W_c$  maior o valor de  $T_o$  para obter a mesma conversão de saída como mostrado a seguir. Aumentando  $W_c$  de 8 para 50 kg/h, verifica-se que  $T_o$  passa de 184.06 para 208.84 °C ( um aumento de 24.8 °C ).

Portanto, nestas condições, uma vazão adequada para o refrigerante seria  $W_c = 20 \text{ kg/h}$ , embora a temperatura de alimentação para esta vazão seja maior em relação a vazões menores. Por outro lado, para  $W_c = 20 \text{ kg/h}$  tem-se o menor valor de temperatura máxima e sensibilidade paramétrica máxima, garantindo operações mais seguras para o reator.

Figura 28

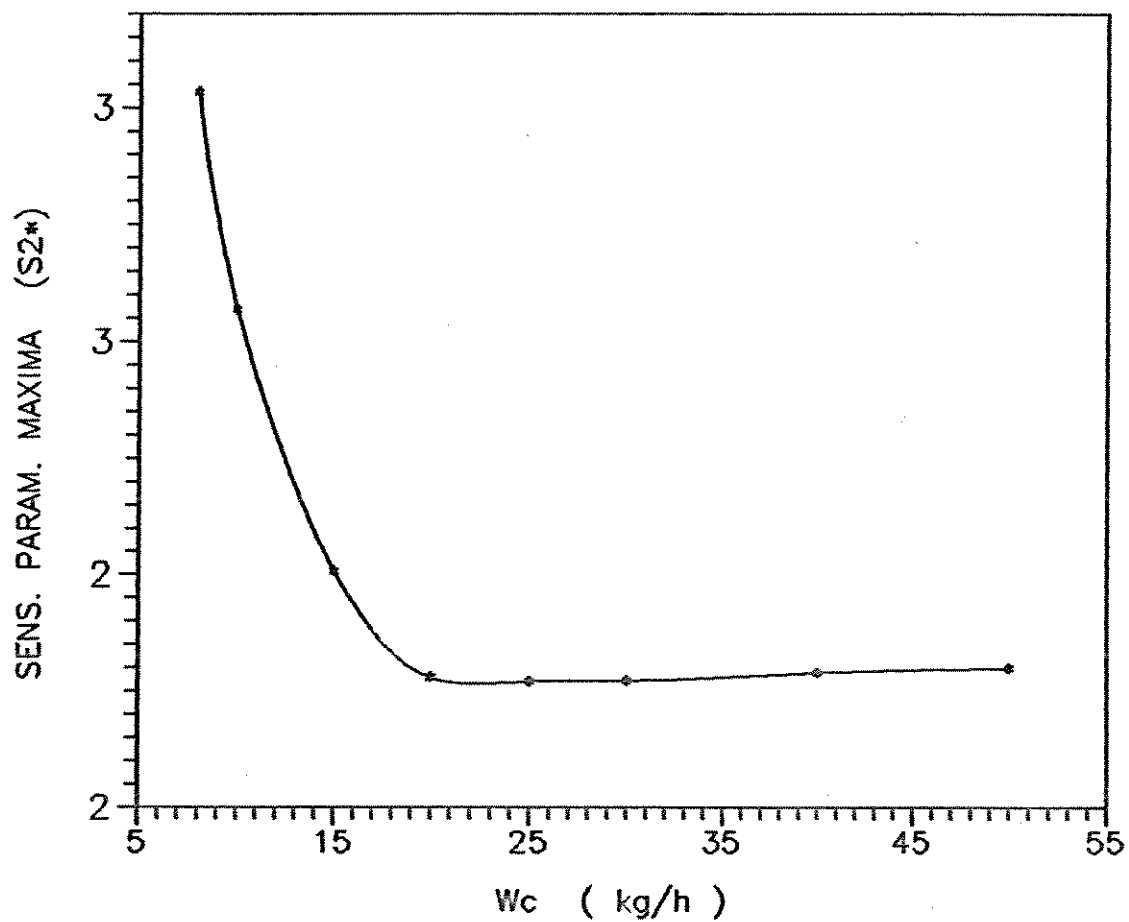


Figura 28 - Influência da vazão de refrigerante no perfil de sensibilidade paramétrica máxima no esquema concorrente.

Figura 29

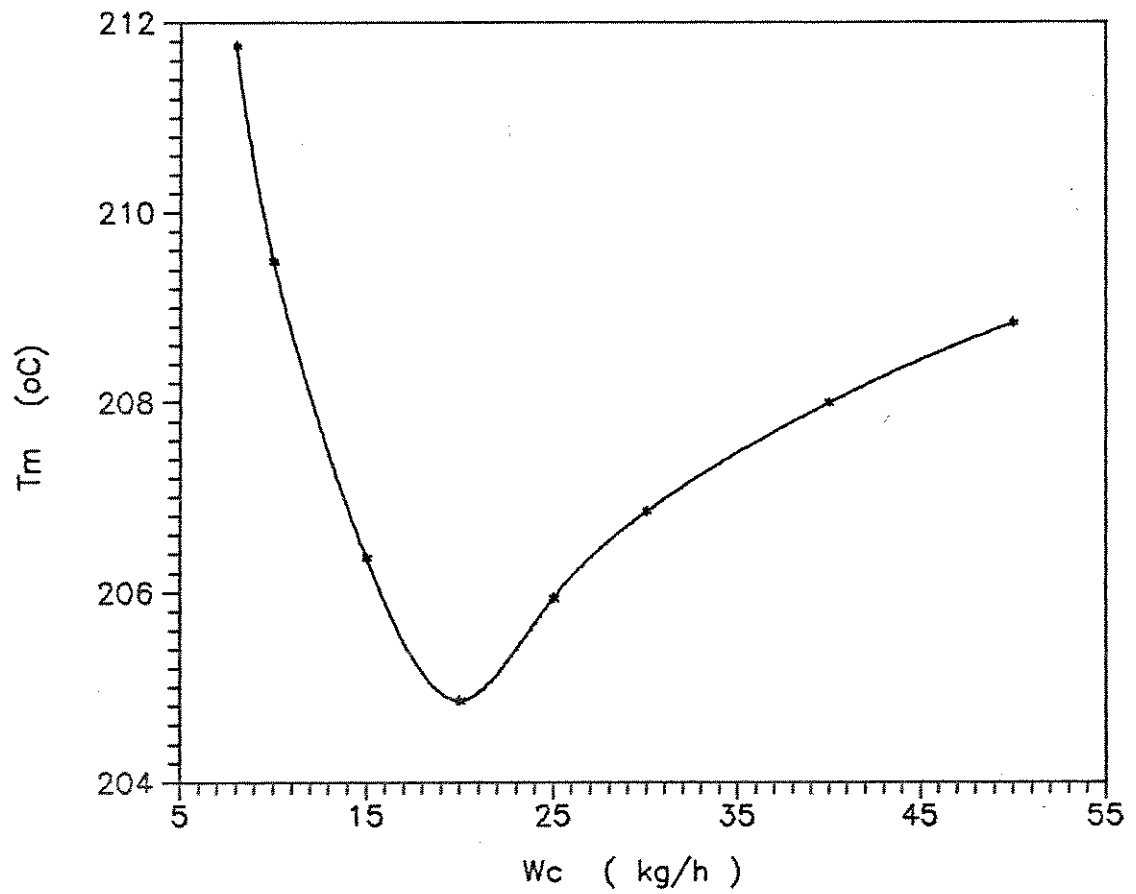


Figura 29 - Influência da vazão do refrigerante no perfil de temperatura máxima no esquema concorrente.

Figura 30

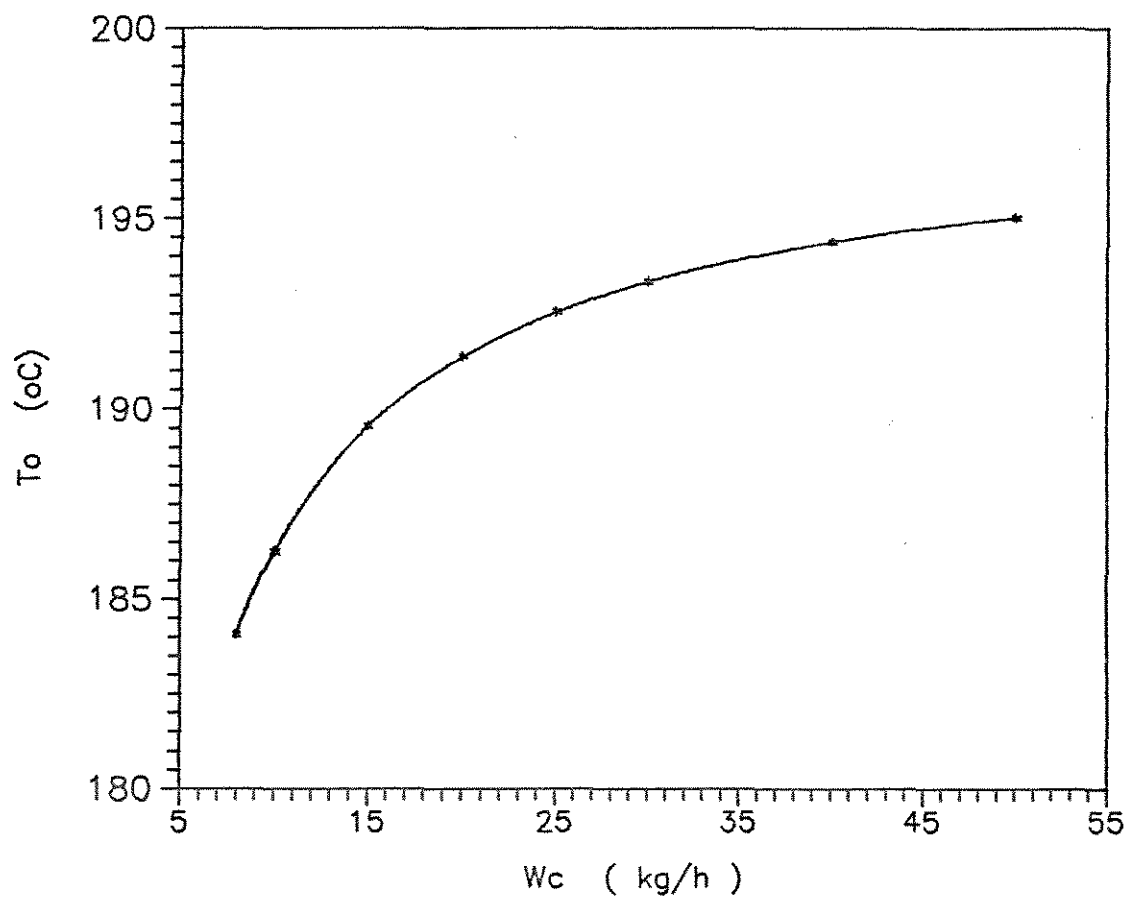


Figura 30 - Influência da vazão do refrigerante no perfil de temperatura de alimentação dos reagentes no esquema concorrente.

### 6.2.2 - Influência do Gás Reagente

Para verificar a influência da vazão do gás reagente sobre o desempenho do reator, serão fixados os valores das seguintes variáveis:

$$W_C = 20 \text{ kg/h}; \quad R_M = 25; \quad X_L = 0.7$$

Na Figura 31 é graficada a influência da vazão do gás reagente na sensibilidade paramétrica máxima. Observa-se a ocorrência de um ponto de mínimo para  $G = 3000 \text{ kg/h.m}^2$ . Quanto maior a vazão do reagente, maiores são os valores de  $S_2^*$ . Por exemplo, aumentando  $G$  de 3000 para 8000  $\text{kg/h.m}^2$ , observa-se que  $S_2^*$  aumenta de 1.76 para 2.55 (uma diferença de 0.78).

Na Figura 32 é graficada temperatura máxima em função da vazão dos reagentes. Quanto maior o valor de  $G$ , maior o valor de  $T_M$ . Nestas condições é mais conveniente trabalhar com uma vazão baixa para o gás reagente. Por exemplo, aumentando  $G$  de 3000 para 8000  $\text{kg/h.m}^2$ , nota-se que  $T_M$  aumenta de 200.6 para 225.3  $^{\circ}\text{C}$  (um aumento de 24.7  $^{\circ}\text{C}$ ).

Na Figura 33 é mostrada a influência da vazão do gás reagente na temperatura de alimentação. Quanto maior o valor de  $G$ , maiores são os valores da temperatura de alimentação dos reagentes, necessária para obter a mesma conversão. Por exemplo, aumentando  $G$  de 3000 para 8000  $\text{kg/h.m}^2$ , observa-se que  $T^{\circ}$  aumenta de 187.6 para 201.4  $^{\circ}\text{C}$  (um aumento de 13.7  $^{\circ}\text{C}$ ).

A análise das três variáveis em conjunto, indica que nas condições de operação acima uma vazão do gás reagente ótima seria em torno de  $G = 3000 \text{ kg/h.m}^2$  pois para esta vazão obtêm-se os menores valores para  $S_2^*$ ,  $T_M$  e  $T^{\circ}$ .

Figura 31

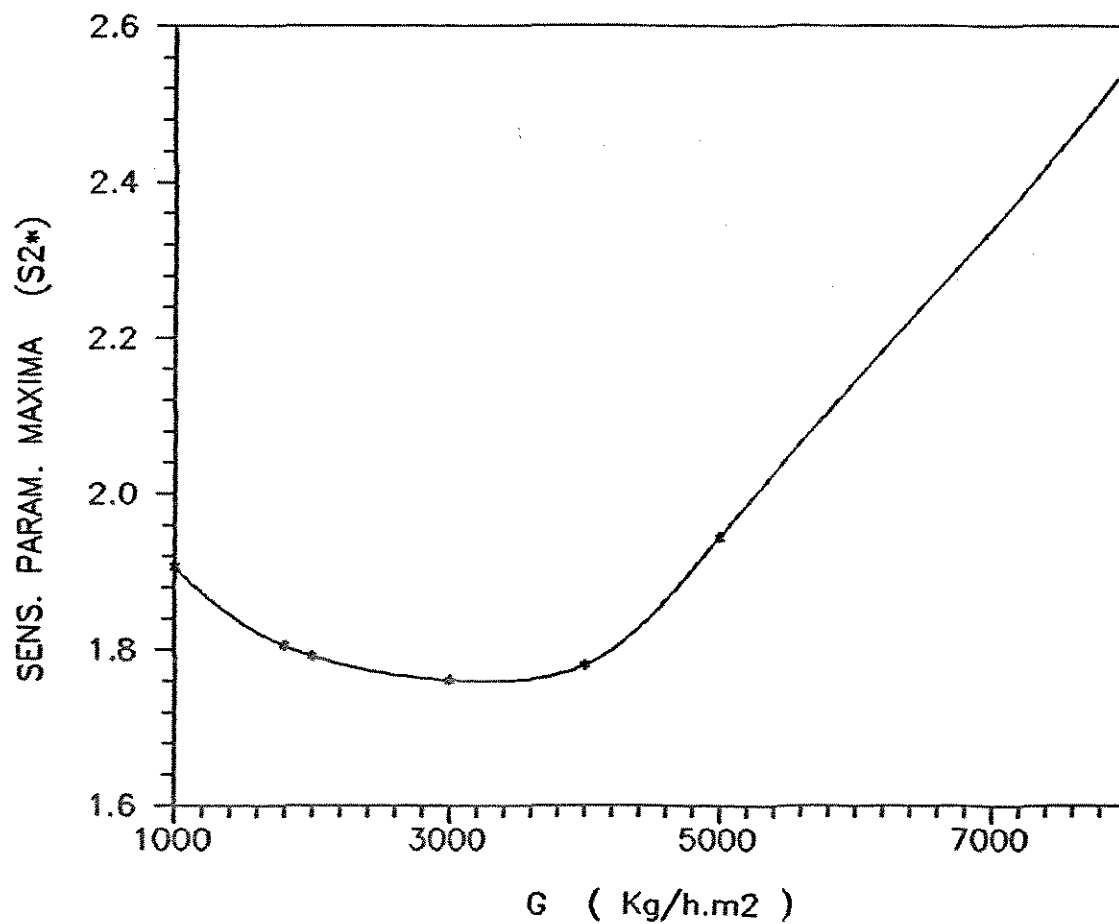


Figura 31 - Influência da vazão dos reagentes no perfil de sensibilidade paramétrica máxima no esquema concorrente.



Figura 32

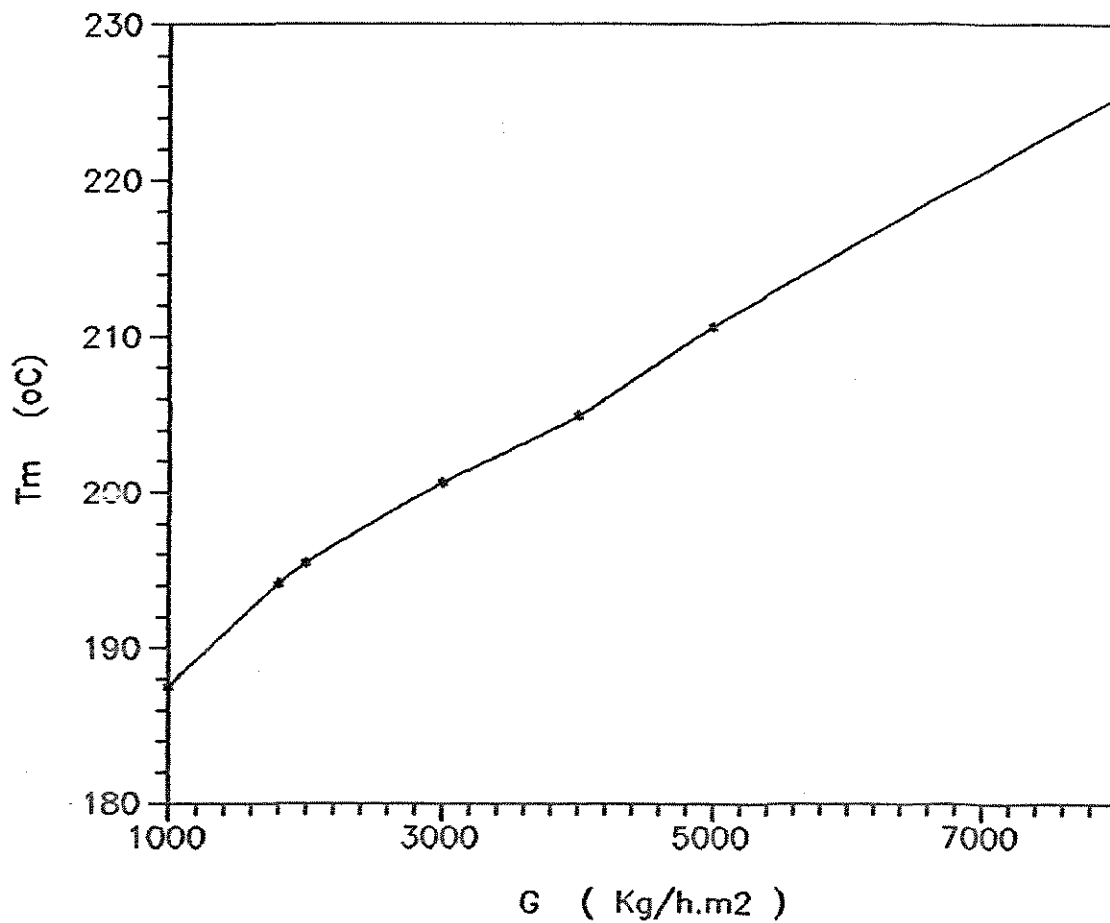


Figura 32 - Influência da vazão dos reagentes no perfil de temperatura máxima no esquema concorrente.

Figura 33

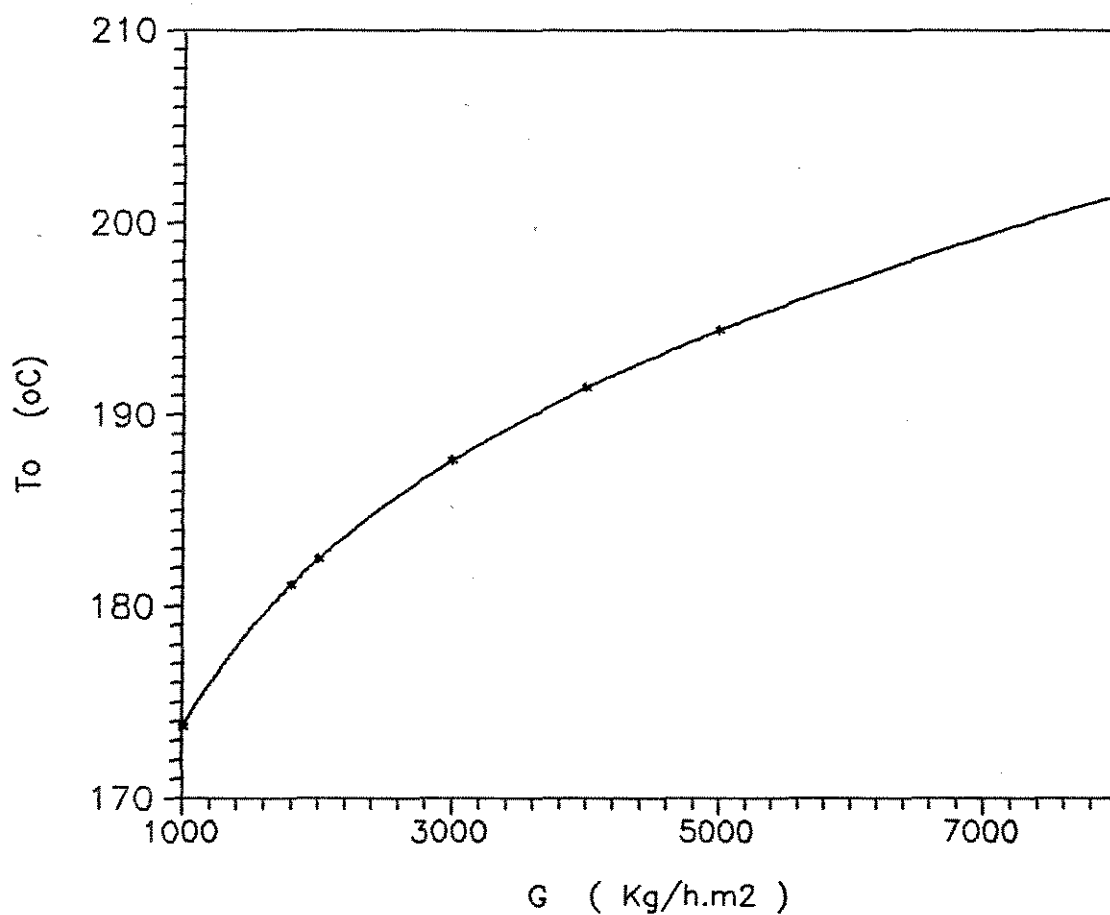


Figura 33 - Influência da vazão dos reagentes no perfil de temperatura de alimentação dos reagentes no esquema concorrente.

### 6.2.3 - Influência da Razão Molar

Nesta análise para verificar a influência da razão molar, serão fixados os valores das seguintes variáveis :

$$W_C = 20 \text{ kg/h}; \quad G = 4000 \text{ kg/h}; \quad X_L = 0.7$$

Na Figura 34 é graficada a influência de razão molar ar/etanol ( $R_M$ ) na sensibilidade paramétrica máxima. Observa-se que quanto maior  $R_M$  menor o valor de  $S_2^*$ . Por exemplo, aumentando  $R_M$  de 12 para 30, observa-se que  $S_2^*$  diminui de 6.14 para 1.59 ( uma queda de 4.54 ).

A influência da razão molar na temperatura máxima pode ser visualizada na Figura 35. Quanto maior o valor de  $R_M$  menor o valor de  $T_M$ . Por exemplo, aumentando  $R_M$  de 12 para 30, observa-se que  $T_M$  diminui de 227.9 para 201.7 °C ( uma queda de 26.2 °C ).

Na Figura 36 é mostrada a influência da razão molar na temperatura de alimentação dos reagentes. Observa-se um ponto de máximo para  $R_M \sim 15$  e quanto maior  $R_M$  menor o valor de  $T_o$ . Por exemplo, aumentando  $R_M$  de 15 para 30, observa-se que  $T_o$  diminui de 193.3 para 190.4 °C ( uma queda de 2.9 °C ).

A análise das três variáveis em conjunto, indica que é melhor trabalhar com razões molares maiores, entretanto uma alto valor de  $R_M$  pode causar problemas na separação do produto desejado dos reagentes, além de poder violar o limite de inflamabilidade da mistura. Assim nas condições de operação acima a razão molar ar/etanol conveniente seria em torno de  $R_M$  igual a 25 pois para esta valor obtem-se os menores valores para  $S_2^*$ ,  $T_M$  e  $T_o$  e está fora da faixa de inflamabilidade.

Figura 34

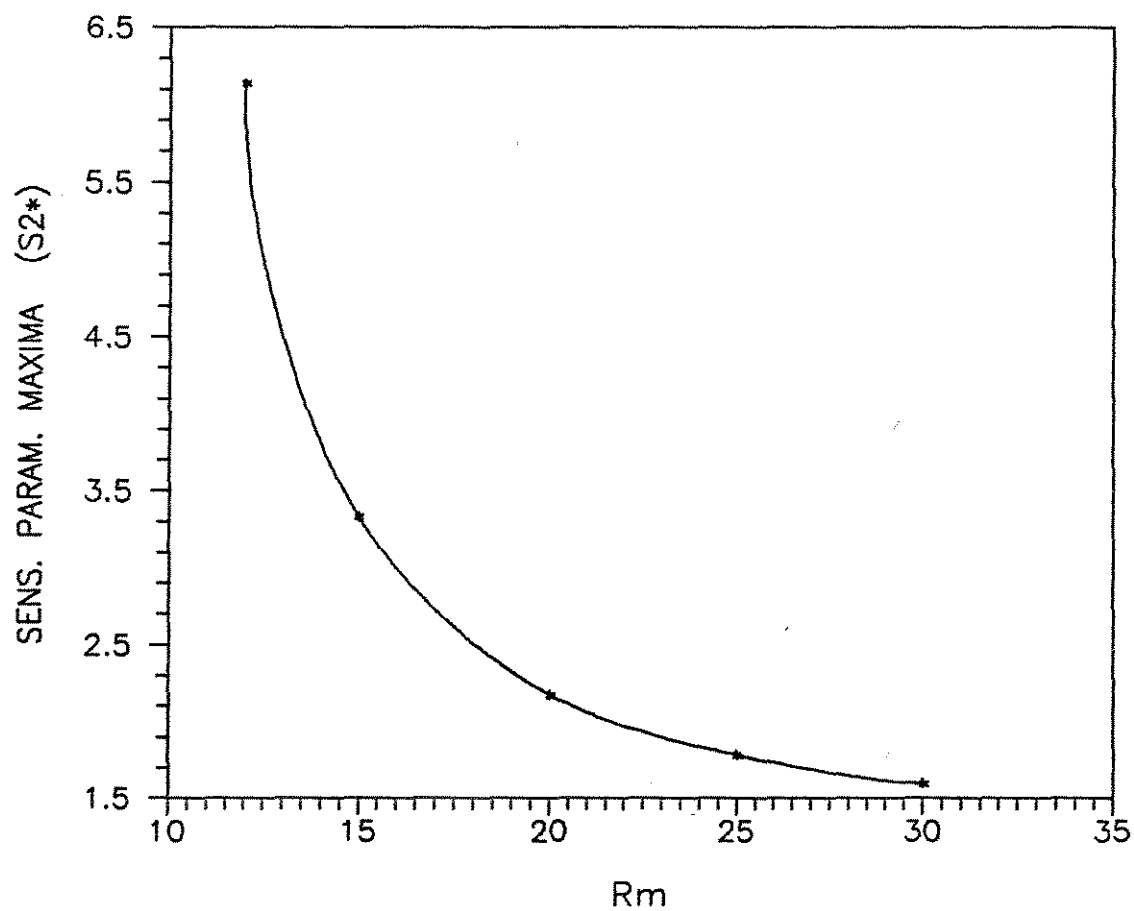


Figura 34 - Influência da razão molar no perfil de sensibilidade paramétrica máxima no esquema concorrente.

Figura 35

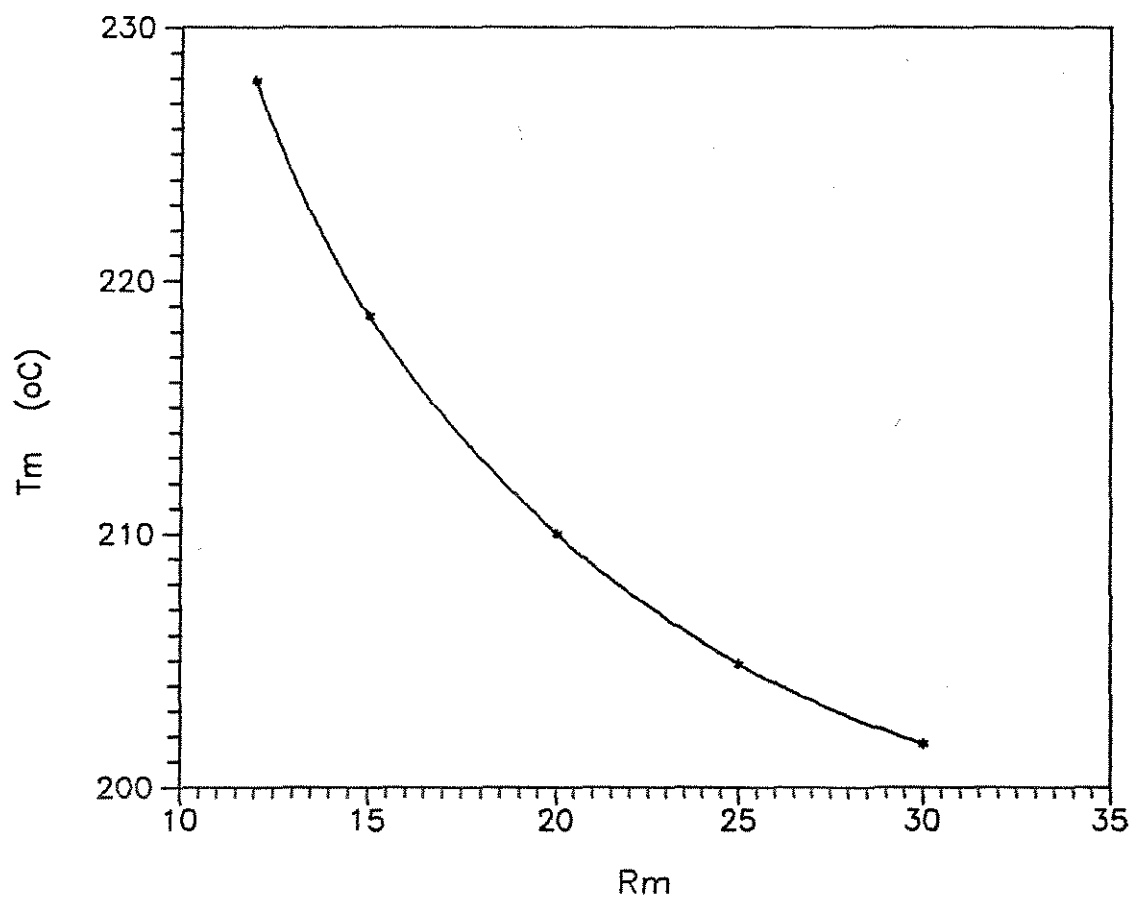


Figura 35 - Influência da razão molar no perfil de temperatura máxima no esquema concorrente.

Figura 36

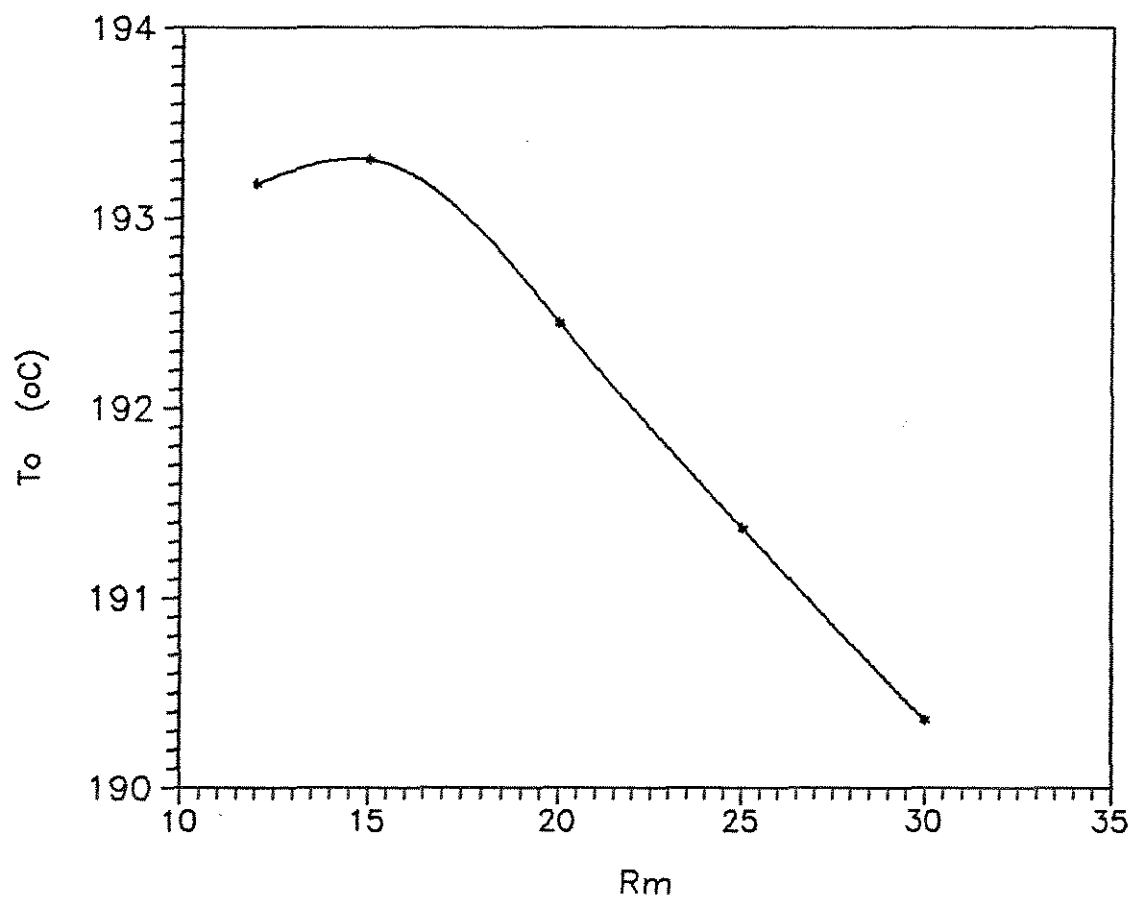


Figura 36 - Influência da razão molar no perfil de temperatura de alimentação dos reagentes no esquema concorrente.

#### 6.2.4 - Influência da Pressão Total

Nesta análise para verificar a influência da pressão total, as seguintes variáveis serão mantidas constantes:

$W_C = 20 \text{ kg/h}$ ;       $G = 4000 \text{ kg/h}$ ;       $R_M = 25$

Na Figura 37 é mostrada a influência da pressão total ( $P_r$ ) na sensibilidade paramétrica máxima. Observa-se que quanto maior o valor de  $P_r$  maiores são os valores de  $S_2^*$ . Por exemplo, aumentando a  $P_r$  de 1.0 para 2.0 atm, verifica-se que  $S_2^*$  aumenta de 1.77 para 2.32 ( uma diferença de 0.54 ).

A influência da pressão total na temperatura máxima do reator é mostrada na Figura 38. Observa-se a ocorrência de um ponto de mínimo para  $P_r = 1.7 \text{ atm}$ . Quanto maior o valor de  $P_r$  maior, menor o valor de  $T_M$ . Por exemplo, aumentando a  $P_r$  de 1.0 para 1.7 atm, verifica-se que  $T_M$  diminui de 204.9 para 202.2 °C (uma queda de 2.8 °C).

Na Figura 39 pode ser observada a influência da pressão total na temperatura de alimentação dos reagentes. Quanto maior o valor de  $P_r$  menor o valor de  $T_o$ .

Por exemplo, aumentando a  $P_r$  de 1.0 para 1.7 atm, verifica-se que  $T_o$  diminui de 191.4 para 183.7 °C ( uma queda de 7.7 °C ).

Pela análise de  $S_2^*$ ,  $T_M$  e  $T_o$  pode-se concluir que estas variáveis apresentam os menores valores para valores mais altos de  $P_r$ . Os resultados mostram que a  $P_r$  não é uma variável de grande influência, pois  $S_2^*$  varia de apenas 0.54 e  $T_M$  varia de 2.8 °C entre o maior e o menor valor. Assim é mais conveniente trabalhar com pressões baixas.

Figura 37

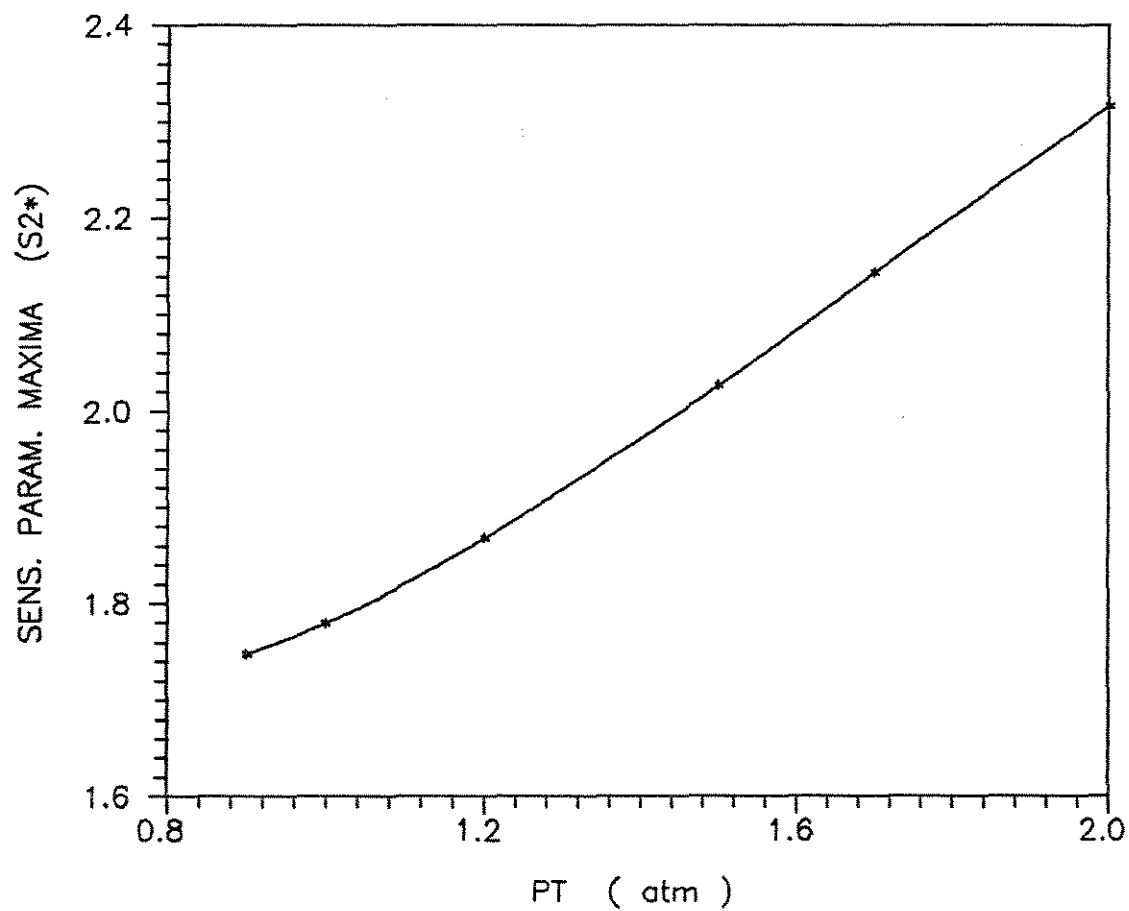


Figura 37 - Influência da pressão total no perfil de sensibilidade paramétrica máxima no esquema concorrente.



Figura 38

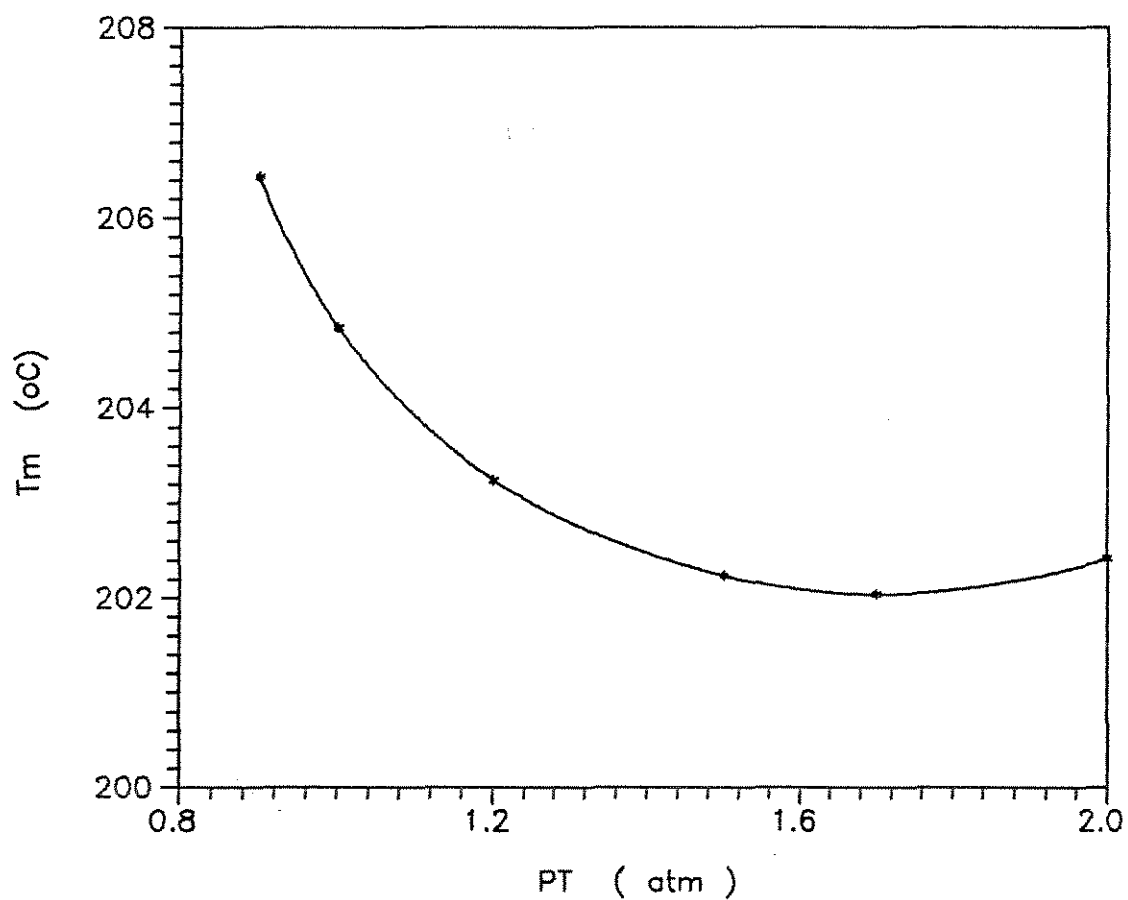


Figura 38 - Influência da pressão total no perfil de temperatura máxima no esquema concorrente.

Figura 39

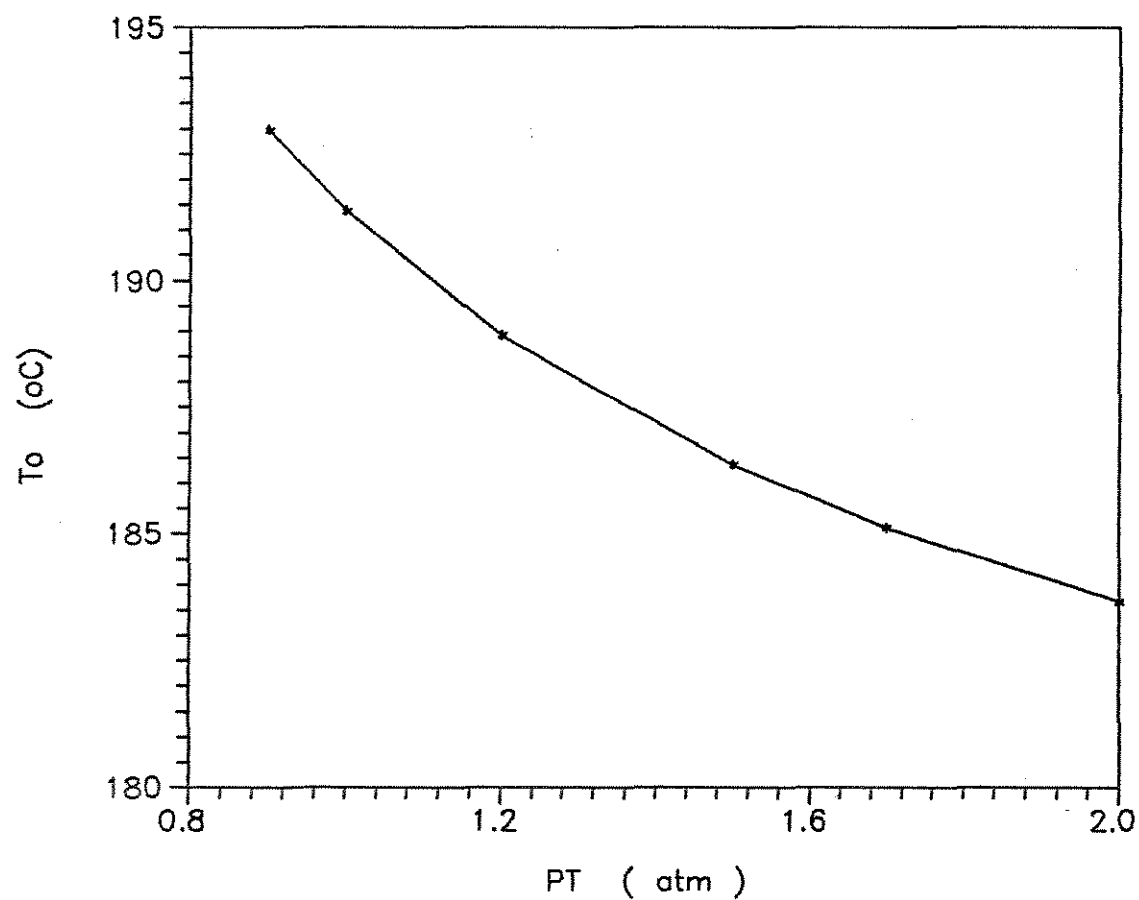


Figura 39 - Influência da pressão total no perfil de temperatura de alimentação dos reagentes no esquema concorrente.

### 6.3 - Conclusões

Neste capítulo foi feita uma análise das variáveis operacionais, verificando sua influência na performance do reator, quando o fluido refrigerante escoa concorrentemente em relação ao gás reagente. Dentre as variáveis analisadas a razão molar é a que mais influencia a sensibilidade paramétrica máxima e a temperatura máxima, sendo portanto uma variável importante na definição das condições de operação para uma melhor performance do reator. A vazão dos reagentes é a variável que tem um maior efeito na temperatura de alimentação dos reagentes.

Mais importante do que os valores específicos encontrados neste capítulo é a demonstração do potencial da metodologia proposta neste trabalho para definir procedimentos operacionais que permitam operar o reator de forma segura e com alta performance.

## CAPÍTULO 7

### CONCLUSÕES

#### 7.1 - *Conclusões*

Neste trabalho foi analisado um reator de leito fixo, usado para a oxidação catalítica do etanol a acetaldeído, através de uma modelagem matemática e posterior simulação com o objetivo de desenvolver novos procedimentos para auxiliar na definição do procedimento operacional e no projeto de reatores químicos. Embora os resultados tenham sido obtidos para um processo específico, o procedimento e a metodologia desenvolvidos são de uso geral.

Foi introduzido o conceito dos coeficientes de sensibilidade paramétrica, cujas equações foram incorporadas ao modelo matemático. A análise do perfil desses coeficientes é de grande importância, pois em conjunto com a análise do perfil de temperatura máxima, permitem definir condições seguras de operação para o reator com uma alta performance.

Foi verificado que o comportamento do perfil de temperatura do reator é fortemente modificado quando se altera as condições do fluido refrigerante: vazão, temperatura e o tipo de configuração, sendo estas portanto, variáveis importantes para garantir a operação segura com alta performance. Isto implica na importância da relação entre projeto mecânico do reator e definição do procedimento operacional como atividades que devem ser realizadas de maneira interativa e simultânea.

Foram analisados alguns tipos de configurações para o fluido refrigerante: concorrente, contracorrente e configurações alternativas. Dentre estas, foi concluído que a melhor forma de refrigerar o reator é quando o fluido refrigerante escoar concorrentemente em relação ao gás reagente. Esta conclusão foi obtida pela análise da temperatura máxima, sensibilidade paramétrica máxima e temperatura de alimentação dos reagentes. O esquema concorrente é o que fornece os menores valores para estas variáveis.

Valores baixos de  $T_m$  garantem uma melhor seletividade e uma maior vida útil do catalisador. Por outro lado, valores baixos de  $S_2^*$  garantem condições seguras de operação. Portanto a análise em conjunto dessas variáveis, permite concluir que o esquema concorrente pode ser seriamente considerado no projeto de reatores de leito fixo.

Sendo o esquema concorrente a melhor forma para o fluxo do fluido refrigerante, foram analisadas outras variáveis de entrada com o intuito de verificar quais as condições mais adequadas de operação para assegurar a estabilidade do reator.

As configurações alternativas apresentadas se mostraram interessantes quando se deseja aumentar a conversão do processo e ainda manter a estabilidade operacional. Devido a performance da refrigeração concorrente ser muito boa, configurações alternativas que fazem uso de escoamento misto (concorrente e contracorrente) podem ser altamente atrativas, se o escoamento contracorrente for usado em zonas do reator onde a concentração de reagente já é baixa. Isto porque o fenômeno de retroalimentação, neste caso, pode permitir o posterior desenvolvimento da reação sem causar problemas de instabilidade.

## 7.2 - Sugestões Para Trabalhos Futuros

Algumas sugestões para trabalhos futuros podem ser dadas:

- Extensão do conceito de coeficiente de sensibilidade para incorporar o efeito de outros parâmetros presentes nos modelos de reatores.

- Definição de coeficientes de sensibilidade paramétrica para os parâmetros cinéticos visando planejamento de experimentos para a obtenção destes parâmetros.

- Uso dos coeficientes de sensibilidade para obter informações sobre colocação de sensores.

- Aplicação da metodologia desenvolvida em modelos matemáticos detalhados para reatores de leito fixo considerando os detalhes de construção mecânica, visando desenvolvimento de projeto auxiliado por computador ( CAD ) para este tipo de sistema.

## BIBLIOGRAFIA

Akella, L. M.; Lee, H. H. - 1983 - AICHE J.,29,1,87 - A Design Approach Based on Phase Plane Analysis : Countercurrent Reactor/ Heat Exchanger with Parametric Sensitivity

Barkelley, C. H. - 1959 - CH.ENG.PROG.SYMP.SER.,55,25,37 - Stability of Chemical Reactors

Bilous, O.; Amundson, N. R. - 1956 - AICHE J.,2,1,117 - " Chemical Reactor Stability and Sensitivity of Empty Tubular Reactors "

Borio, D. O.; Gatica, J. E.; Porras, J. A. - 1989 - AICHE J.,35,2,287 - Wall Cooled Fixed Bed Reactors : Parametric Sensitivity as a Design Criterion

Domingues, A. - 1992 - " Tese de Mestrado " - Unicamp/FEQ/DPQ - Modelagem e Simulação de Processo de Oxidação do Etanol a Acetaldeído.

Dunbobbin, B. R. - 1976 - "PhD Thesis " - Analysis of the Operational Characteristics and Stability of Multitubular Reactors - The University of Leeds - Leeds, England, U.K.

El Sawi, M.; Emig, G.; Hofmann, H. - 1978 - INT.CHEM.ENG.,18,221 - Runaway of Packed Bed Reactors

Emig, G.; Hofmann, H.; Fiand, V. - 1980 - CH.ENG.SCI.,35,249 Experimental Studies on runaway of Catalytic Fixed Bed Reactor ( Vinyl Acetate Analysis )

Froment, G. F.; Hofmann, H. P. K. - 1987 - " Chemical Reaction and Reactor Engineering ", pg. 373 - Design of Fixed Bed Gas-Solid Catalytic Reactors - Ed. Carberry & Varma - Marcel Dekker, New York

Hlavacek, V. - 1970 - IND.ENG.CHEM.,62,8 - Packed Catalytic Reactors

Hlavacek, V.; Votruba, J. - 1977 - " Chemical Reactor Theory - A Review " - Prentice - Hall, N. J., EUA

Hill, C. G. Jr. - 1977 - " An Introduction to Chemical Engineering Kinetics & Reactor Design " - John Wiley & Sons, New York - 594 pp.

Hosten, L. H.; Froment, G. F. - 1986 - CH.ENG.SCI.,41,4,1073 Parametric Sensitivity in Co-currently cooled Tubular Reactors

Lopez, A. S.; De Lasa, H. I.; Porras, J. A. - 1981 - CH.ENG.SCI.,36,285 - Parametric Sensitivity of a Fixed Bed Catalytic Reactor

Maciel Filho, R. - 1984 - " Tese de Mestrado " - Unicamp FEC / DEQ / num 069/85 - Oxidação Catalítica de Etanol a Acetaldeído sobre Catalisador de Óxido de Ferro-Molibdênio

Maciel Filho, R. - 1989 - Eigenstructure and Variable Interactions in the Multitubular Reactor - Internal Report Departament of Chemical Engineering - The University of Leeds - Leeds, Inglaterra.

Maciel Filho, R. - 1989 - " Tese de Doutorado " - Modelling and Control of Multitubular Reactors - The University of Leeds - Leeds, Inglaterra

Maciel Filho, R.; Domingues, A. - 1992 - CH.ENG.SCI.,47,11,2571 A Multitubular Reactor for Obtention of Aldehyde by Oxidation of Ethyl Alcohol.

McGreavy, C.; Adderley, C. I. 1974 - ADV.CHEM.SER.,133,519 - Amer. Chem. Soc. - Parametric Sensitivity and Temperature Runaway in Heterogeneous Fixed Bed Reactors



McGreavy, C.; Dunbobbin, B. - 1978 - Proc. of 50 ISCRE, Houston, ACS, Symp. Series, 65,214-224 - Operational Flexibility Consideration in the Design of Multitubular Reactors.

McGreavy, C.; Maciel Filho, R. - 1988 - 30 Latin American Conf. on Heat and Mass Transfer - Influence of Flow Distribution on Heat Transfer in Multitubular Catalytic Reactors - Guanajuato, México.

McGreavy, C.; Maciel Filho, R. - 1989 - International Chemical Eng. Conf.Chem. Port' 89 - Lisbon, Portugal.

McGreavy, C.; Maciel Filho, R. - 1991 - PSE'91, Fourth International Symposium on Process System Engineering - Control Structures for Multitubular Reactors

Morbidelli, M.; Varma, A. - 1986 - CH.ENG.SCI.,41,4,1063 - Parametric Sensitivity and Runaway in Fixed Bed Catalytic Reactor

Moura, José Claudio - 1984 - " Tese de Doutoramento " - Unicamp / FEC / DEM / num 04/84 - Oxidação de Etanol a Acetaldeído sobre Catalisador de Cobre Oxidado.

Onderwater, D.; MacGregor, J. F.; Wright, J. D. - 1988 - J. Chem. Eng.,66,478-484 - Use of Nonlinear Transformations and a Self-Tuning Regulator to Develop an Algorithm for Catalytic Reactor Temperature Control.

Oroskar, A.; Stern, S. A. - 1979 - AIChE J.,25,5,903 - Stability in Chemical Reactors.

Rajadhyaksha, R. A.; Vasudeva, K.; Doraiswamy, L. K. - 1975 - CH.ENG.SCI.,30,1399 - Parametric Sensitivity in Fixed Bed Reactors.

Stankiewicz, A.; et al. - 1986 - CH.ENG.Process,20,79-84 - Hydraulic Design of Multitubular Reactors with a Heat Carrier Flowing in Parallel to the Tubes.

Stankiewicz, A.; et al. - 1986 - World Congress III of Chem. Eng., 243-246 - Improvements in the Design of Multitubular Reactors for Highly Exothermic Process - Tokio, Japan.

Van Welsenaere, R. J.; Froment, G. F. - 1970 - CH.ENG.SCI.,25,1503 - Parametric Sensitivity and Runaway in Fixed Bed Catalytic Reactors

Varma, A. - 1981 - Am. Chem. Soc. Symp. Series, 168,279-286 - Packed Bed Reactors. An Overview in chemical Reactors - Ed. by H. S. Fogler - Washington, U.S.A.

## APÊNDICES

## APÊNDICE 4.1

### Dedução das Equações dos Coeficiente de Sensitividade Paramétrica

#### 1 - Cálculo de $\frac{dS_1}{dz}$

Por definição, o coeficiente de sensibilidade paramétrica é dado por:

$$S_{ij} = \frac{\partial \chi_i}{\partial \pi_j} \quad (1)$$

Fazendo,  $\chi_1 = P_A$      $\chi_2 = T$      $\chi_3 = T_c$      $\chi_4 = P_T$     e     $\pi_j = T_{C1}$

$$S_1 = \frac{\partial P_A}{\partial T_{C1}}$$

$$S_2 = \frac{\partial T}{\partial T_{C1}}$$

$$S_3 = \frac{\partial T_c}{\partial T_{C1}}$$

$$S_4 = \frac{\partial P_T}{\partial T_{C1}}$$

Derivando  $S_1$  em relação a  $z$ :

$$\frac{dS_1}{dz} = \frac{d}{dz} \left( \frac{\partial P_A}{\partial T_{C1}} \right) = \frac{\partial}{\partial T_{C1}} \left( \frac{dP_A}{dz} \right) \quad (2)$$

Das equações de balanço, tem-se:

$$\frac{dP_A}{dZ} = - A P_A \text{EXP}\left(b - \frac{a}{T}\right) \times \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R_M)} + \frac{P_A}{P_T} \times \frac{dP_T}{dZ} \quad (3)$$

Substituindo eq.3 na eq.2 :

$$\frac{dS_1}{dZ} = \frac{\partial}{\partial T_{Cl}} \left( - A P_A \text{EXP}\left(b - \frac{a}{T}\right) \times \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R_M)} + \frac{P_A}{P_T} \times \frac{dP_T}{dZ} \right)$$

$$\begin{aligned} \frac{dS_1}{dZ} = & - A \left[ \left( \frac{\partial P_A}{\partial T_{Cl}} \text{EXP}\left(b - \frac{a}{T}\right) \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R_M)} \right) + \right. \\ & + P_A \left( \frac{\partial}{\partial T_{Cl}} \left( \text{EXP}\left(b - \frac{a}{T}\right) \right) \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R_M)} \right) + \\ & + \left. \frac{\partial}{\partial T_{Cl}} \left( \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R_M)} \right) \text{EXP}\left(b - \frac{a}{T}\right) \right] - \\ & - P_A \text{EXP}\left(b - \frac{a}{T}\right) \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R_M)} \frac{\partial A}{\partial T_{Cl}} + \\ & + \frac{P_A}{P_T} \frac{\partial}{\partial T_{Cl}} \left( \frac{dP_T}{dZ} \right) + \frac{dP_T}{dZ} \left( \frac{\partial P_A}{\partial T_{Cl}} \frac{1}{P_T} - \frac{P_A}{P_T^2} \frac{\partial P_T}{\partial T_{Cl}} \right) \end{aligned}$$

Portanto, tem-se a seguinte equação:

$$\begin{aligned}
\frac{dS_1}{dz} = & -A \left[ \frac{\partial P_A}{\partial T_{Cl}} \exp \left( b - \frac{a}{T} \right) \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R_M)} + \right. \\
& + P_A \left( \exp \left( b - \frac{a}{T} \right) \frac{a}{T^2} \frac{\partial T}{\partial T_{Cl}} \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R_M)} \right) + \\
& + \left( \frac{2(P_T + 0.5 P_A)}{P_T (1.5 + R_M)} \left( \frac{\partial P_T}{\partial T_{Cl}} + 0.5 \frac{\partial P_A}{\partial T_{Cl}} \right) - \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T^2 (1.5 + R_M)} \frac{\partial P_T}{\partial T_{Cl}} \right) \exp \left( b - \frac{a}{T} \right) \Big] - \\
& - \left( P_A \exp \left( b - \frac{a}{T} \right) \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R_M)} \frac{\partial A}{\partial T_{Cl}} \right) + \\
& + \frac{P_A}{P_T} \frac{\partial}{\partial T_{Cl}} \left( \frac{dP_T}{dz} \right) + \frac{dP_T}{dz} \left( \frac{\partial P_A}{\partial T_{Cl}} \times \frac{1}{P_T} - \frac{P_A}{P_T^2} \frac{\partial P_T}{\partial T_{Cl}} \right)
\end{aligned} \tag{4}$$

### 1.1 - Cálculo de $\frac{\partial A}{\partial T_{Cl}}$

Por definição:

$$A = \frac{\rho_B M P_B^o P_T}{G}$$

$$\frac{\partial A}{\partial T_{Cl}} = \frac{\partial}{\partial T_{Cl}} \left( \frac{\rho_B M P_B^o P_T}{G} \right)$$

Substituindo  $P_B^o$

$$\frac{\partial A}{\partial T_{Cl}} = \frac{\partial}{\partial T_{Cl}} \left( \frac{\rho_B M P_T}{G} \times \frac{(0.21 R_M P_T)}{(1 + R_M)} \right) = \frac{0.21 \rho_B M R_M}{G (1 + R_M)} \times \frac{\partial P_T^2}{\partial T_{Cl}} \tag{15}$$

Portanto:

$$\frac{\partial A}{\partial T_{Ci}} = \frac{2 A}{P_T} \times \frac{\partial P_T}{\partial T_{Ci}} \quad (5)$$

1.2 - Cálculo de  $\frac{\partial}{\partial T_{Ci}} \left( \frac{dP_T}{dz} \right)$

Pela equação de balanço:

$$\frac{dP_T}{dz} = - 7.165 \times 10^{-13} \left( 1.75 + \frac{150(1-\epsilon)}{N_{RE}} \right) \times \frac{(1-\epsilon)}{\epsilon^3} \times \frac{G^2}{\rho_g d_p} \quad (6)$$

Assim,

$$\frac{\partial}{\partial T_{Ci}} \left( \frac{dP_T}{dz} \right) = \frac{\partial}{\partial T_{Ci}} \left[ - 7.165 \times 10^{-13} \left( 1.75 + \frac{150(1-\epsilon)}{N_{RE}} \right) \times \frac{(1-\epsilon)}{\epsilon^3} \times \frac{G^2}{\rho_g d_p} \right]$$

$$\frac{\partial}{\partial T_{Ci}} \left( \frac{dP_T}{dz} \right) = - 7.165 \times 10^{-13} \frac{(1-\epsilon)}{\epsilon^3} \frac{G^2}{d_p} \times \frac{\partial}{\partial T_{Ci}} \left[ \left( 1.75 + \frac{150(1-\epsilon)}{N_{RE}} \right) \times \frac{1}{\rho_g} \right]$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T_{Ci}} \left( \frac{dP_T}{dz} \right) = & - 7.165 \times 10^{-13} \frac{(1-\epsilon)}{\epsilon^3} \frac{G^2}{d_p} \times \left[ \frac{-150(1-\epsilon)}{N_{RE}^2} \frac{\partial N_{RE}}{\partial T_{Ci}} \frac{1}{\rho_g} - \right. \\ & \left. - \left( 1.75 + \frac{150(1-\epsilon)}{N_{RE}} \right) \frac{1}{\rho_g^2} \frac{\partial \rho_g}{\partial T_{Ci}} \right] \quad (7) \end{aligned}$$

1.2.1 - Cálculo de  $\frac{\partial N_{RE}}{\partial T_{Ci}}$

$$N_{RE} = \frac{d_p G}{-0.0382 + 0.0061 T^{0.5}}$$

$$\frac{\partial(N_{RE})}{\partial T_{Ci}} = \frac{-0.5 d_p G 0.0061 T^{-0.5}}{(-0.0382 + 0.0061 T^{0.5})^2} \times \left( \frac{\partial T}{\partial T_{Ci}} \right)$$

Portanto,

$$\frac{\partial(N_{RE})}{\partial T_{Ci}} = \frac{-0.00305 d_p G}{T^{0.5} (-0.0382 + 0.0061 T^{0.5})^2} \times \left( \frac{\partial T}{\partial T_{Ci}} \right) \quad (8)$$

### 1.2.2 - Cálculo de $\frac{\partial \rho_g}{\partial T_{Ci}}$

$$\rho_g = \frac{M P_T}{0.08205 T}$$

Portanto,

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial T_{Ci}} = \frac{M}{0.08205} \left( \frac{1}{T} \frac{\partial P_T}{\partial T_{Ci}} - \frac{P_T}{T^2} \frac{\partial T}{\partial T_{Ci}} \right) \quad (9)$$

Substituindo a eq.8 e eq.9 na eq.7 tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T_{Ci}} \left( \frac{dP_T}{dz} \right) = & -7.165 \times 10^{-13} \frac{(1-\epsilon)}{\epsilon^3} \frac{G^2}{d_p} \times \left[ \frac{1}{\rho_g} \left( \frac{-150(1-\epsilon)}{N_{RE}^2} \times \right. \right. \\ & \times \left( \frac{-0.00305 d_p G}{T^{0.5} (-0.0382 + 0.0061 T^{0.5})^2} \times \frac{\partial T}{\partial T_{Ci}} \right) \left. \right] - \\ & - \left( 1.75 + \frac{150(1-\epsilon)}{N_{RE}} \right) \times \frac{M}{\rho_g^2 0.08205} \left( \frac{1}{T} \frac{\partial P_T}{\partial T_{Ci}} - \frac{P_T}{T^2} \frac{\partial T}{\partial T_{Ci}} \right) \end{aligned}$$



Portanto:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T_{Cl}} \left( \frac{dP_T}{d_z} \right) = & - 7.165 \times 10^{-13} \frac{(1 - \epsilon)}{\epsilon^3} \frac{G^2}{d_p} \times \left[ \frac{1}{\rho_g} \left( \frac{0.4575 (1 - \epsilon)}{d_p G T^{0.5}} \frac{\partial T}{\partial T_{Cl}} \right) - \right. \\ & \left. - \left( 1.75 + \frac{150 (1 - \epsilon)}{N_{RE}} \right) \times \frac{M}{\rho_g^2 0.08205} \left( \frac{1}{T} \frac{\partial P_T}{\partial T_{Cl}} - \frac{P_T}{T^2} \times \frac{\partial T}{\partial T_{Cl}} \right) \right] \end{aligned} \quad (10)$$

Substituindo a eq.10 na equação 4, tem-se :

$$\begin{aligned} \frac{dS_1}{dZ} = & - A \left[ \frac{\partial P_A}{\partial T_{Cl}} \text{EXP} \left( b - \frac{a}{T} \right) \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R_M)} + \right. \\ & + P_A \left( \text{EXP} \left( b - \frac{a}{T} \right) \frac{a}{T^2} \frac{\partial T}{\partial T_{Cl}} \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R_M)} + \right. \\ & + \left. \left( \frac{2 (P_T + 0.5 P_A)}{P_T (1.5 + R_M)} \left( \frac{\partial P_T}{\partial T_{Cl}} + 0.5 \frac{\partial P_A}{\partial T_{Cl}} \right) - \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T^2 (1.5 + R_M)} \frac{\partial P_T}{\partial T_{Cl}} \right) \text{EXP} \left( b - \frac{a}{T} \right) \right] - \\ & - \left( P_A \text{EXP} \left( b - \frac{a}{T} \right) \frac{(P_T + 0.5 P_A)^2}{P_T (1.5 + R_M)} \frac{2A}{P_T} \frac{\partial P_T}{\partial T_{Cl}} \right) - \\ & - \frac{P_A}{P_T} 7.165 \times 10^{-13} \frac{(1 - \epsilon)}{\epsilon^3} \frac{G^2}{d_p} \times \left[ \frac{1}{\rho_g} \left( \frac{0.4575 \times (1 - \epsilon)}{d_p G T^{0.5}} \times \frac{\partial T}{\partial T_{Cl}} \right) - \right. \\ & - \left. \left( 1.75 + \frac{150 (1 - \epsilon)}{N_{RE}} \right) \times \frac{M}{\rho_g^2 0.08205} \left( \frac{1}{T} \frac{\partial P_T}{\partial T_{Cl}} - \frac{P_T}{T^2} \frac{\partial T}{\partial T_{Cl}} \right) \right] + \\ & + \frac{dP_T}{dZ} \times \left( \frac{\partial P_A}{\partial T_{Cl}} \times \frac{1}{P_T} - \frac{P_A}{P_T^2} \times \frac{\partial P_T}{\partial T_{Cl}} \right) \end{aligned}$$

Substituindo

$$\frac{\partial P_A}{\partial T_{cl}} = S_1 \quad \frac{\partial T}{\partial T_{cl}} = S_2 \quad \frac{\partial T_c}{\partial T_{cl}} = S_3 \quad \frac{\partial P_T}{\partial T_{cl}} = S_4$$

na equação anterior e rearranjando, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{dS_1}{dz} = & \frac{-A (P_T + 0.5 P_A)^2 \text{EXP} \left( b - \frac{a}{T} \right)}{P_T (1.5 + R_M)} \times \\ & \times \left[ S_1 + \frac{a P_A S_2}{T^2} + P_A \left( \frac{2 (S_4 + 0.5 S_1)}{P_T + 0.5 P_A} - \frac{3 S_4}{P_T} \right) \right] - \\ & - \frac{P_A 7.615 \times 10^{-13} (1-\epsilon) G^2}{P_T \epsilon^3 d_p} \times AT + \frac{dP_T}{dz} \left( \frac{S_1}{P_T} - \frac{P_A}{P_T^2} S_4 \right) \end{aligned} \quad (11)$$

onde

$$\begin{aligned} AT = & \frac{1}{\rho_g} \left( \frac{0.4575 (1 - \epsilon) S_2}{d_p G T^{0.5}} \right) - \left( 1.75 + \frac{150 (1 - \epsilon)}{N_{Re}} \right) \times \\ & \times \frac{M}{\rho_g^2 0.08205} \left( \frac{S_4}{T} - \frac{P_T}{T^2} S_2 \right) \end{aligned} \quad (12)$$

2 - Cálculo de  $\frac{dS_2}{dz}$

$$\frac{dS_2}{dz} = \frac{d}{dz} \left( \frac{\partial T}{\partial T_{cl}} \right) = \frac{\partial}{\partial T_{cl}} \left( \frac{dT}{dz} \right) \quad (13)$$

Pela eq. de balanço:

$$\frac{dT}{dz} = B P_A \text{EXP}\left(b - \frac{a}{T}\right) - C(T - T_c) \quad (14)$$

Substituindo eq.14 na eq.13,

$$\frac{dS_2}{dz} = \frac{\partial}{\partial T_{ci}} \left( B P_A \text{EXP}\left(b - \frac{a}{T}\right) - C(T - T_c) \right)$$

Portanto:

$$\begin{aligned} \frac{dS_2}{dz} &= B \frac{\partial}{\partial T_{ci}} \left( P_A \text{EXP}\left(b - \frac{a}{T}\right) \right) + P_A \text{EXP}\left(b - \frac{a}{T}\right) \frac{\partial B}{\partial T_{ci}} \\ &\quad - C \frac{\partial}{\partial T_{ci}} (T - T_c) - (T - T_c) \frac{\partial C}{\partial T_{ci}} \end{aligned} \quad (15)$$

## 2.1 - Cálculo de $\frac{\partial B}{\partial T_{ci}}$

Por definição:

$$B = \frac{(-\Delta H) \rho_b P_B^o}{G C_{pg}} = \frac{(-\Delta H) \rho_b}{G C_{pg}} \frac{(0.21 R_M P_T)}{(1 + R_M)}$$

Assim,

$$\frac{\partial B}{\partial T_{ci}} = \frac{(-\Delta H) \rho_b 0.21 R_M}{G (1 + R_M)} \frac{\partial}{\partial T_{ci}} \left( \frac{P_T}{C_{pg}} \right)$$

Portanto:

$$\frac{\partial B}{\partial T_{ci}} = \frac{(-\Delta H) \rho_b 0.21 R_M}{G (1 + R_M)} \frac{1}{C_{pg}} \frac{\partial P_T}{\partial T_{ci}} - \frac{P_T}{C_{pg}^2} \frac{\partial C_{pg}}{\partial T_{ci}} \quad (16)$$

2.1.2 - Cálculo de  $\frac{\partial C_{pg}}{\partial T_{ci}}$

$$C_p = 0.24 + 3.442 \times 10^{-5} t + 2.649 \times 10^{-8} t^2 - 1.631 \times 10^{-11} t^3$$

Portanto:

$$\frac{\partial C_{pg}}{\partial T_{ci}} = (3.44201 \times 10^{-5} + 5.29706 \times 10^{-8} T - 4.89285 \times 10^{-11} T^2) \frac{\partial T}{\partial T_{ci}} \quad (17)$$

Substituindo a eq. 17 na eq. 16 e rearranjando, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial B}{\partial T_{ci}} &= \frac{B}{P_T^2} \frac{\partial P_T}{\partial T_{ci}} - \frac{B}{C_{pg}} (3.44201 \times 10^{-5} + 5.29706 \times 10^{-8} T - \\ &\quad - 4.89285 \times 10^{-11} T^2) \frac{\partial T}{\partial T_{ci}} \end{aligned} \quad (18)$$

2.2 - Cálculo de  $\frac{\partial C}{\partial T_{ci}}$

Por definição:

$$C = \frac{4U}{G C_{pg} d_t}$$

Portanto:

$$\frac{\partial C}{\partial T_{ci}} = \frac{4}{G d_t} \left( \frac{1}{C_{pg}} \frac{\partial U}{\partial T_{ci}} - \frac{U}{C_{pg}^2} \frac{\partial C_{pg}}{\partial T_{ci}} \right) \quad (19)$$

### 2.2.1 - Cálculo de $\frac{\partial U}{\partial T_{ci}}$

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_e} + \frac{D_o}{2 K_a} \ln \left( \frac{D_o}{D} \right) + \frac{1}{h}$$

Assim,

$$\frac{\partial U}{\partial T_{ci}} = \frac{-1}{\left( h_e + \frac{D_o}{2 K_a} \ln \left( \frac{D_o}{D} \right) + \frac{1}{h} \right)^2} \times \frac{\partial}{\partial T_{ci}} \left( h_e + \frac{D_o}{2 K_a} \ln \left( \frac{D_o}{D} \right) + \frac{1}{h} \right)$$

Portanto:

$$\frac{\partial U}{\partial T_{ci}} = \frac{-1}{\left( h_e + \frac{D_o}{2 K_a} \ln \left( \frac{D_o}{D} \right) + \frac{1}{h} \right)^2} \times \left( - \frac{D_o}{2} \ln \left( \frac{D_o}{D} \right) \frac{1}{K_a^2} \frac{\partial K_a}{\partial T_{ci}} - \frac{1}{h^2} \frac{\partial h}{\partial T_{ci}} \right) \quad (20)$$

#### 2.2.1.1 - Cálculo de $\frac{\partial K_a}{\partial T_{ci}}$

$$K_a = 2.6788 \text{ EXP } (-0.7618 + 0.3695 \ln T_R)$$

$$\frac{\partial K_a}{\partial T_{Cl}} = (2.6788 \text{ EXP}(-0.7618 + 0.3695 \text{ Ln } T_R) ) \times 0.3695 \frac{1}{T_R} \frac{\partial T}{\partial T_{Cl}}$$

Portanto,

$$\frac{\partial K_a}{\partial T_{Cl}} = K_a \frac{0.3695}{T_R} \frac{\partial T}{\partial T_{Cl}} \quad (21)$$

2.2.1.2 - Cálculo de  $\frac{\partial h}{\partial T_{Cl}}$

$$h = 3.5 \frac{K_g}{D} \text{ EXP} \left( -4.6 \frac{D_p}{D} \right) N_{Re}^{0.7}$$

onde

$$K_g = 1.473 \text{ EXP} (-9.624 + 0.8641 \text{ Ln } T_R)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial T_{Cl}} &= 1.473 \frac{3.5}{d_t} \text{ EXP} \left( -4.6 \frac{D_p}{d_t} \right) \text{ EXP} (-9.624 + 0.8641 \text{ Ln } T_R) \times \\ &\times \frac{0.8641}{T_R} \frac{\partial T}{\partial T_{Cl}} N_{Re}^{0.7} + \text{ EXP}(-9.624 + 0.8641 \text{ Ln } T_R) 0.7 N_{Re}^{-0.3} \frac{\partial N_{Re}}{\partial T_{Cl}} \end{aligned}$$

Portanto:

$$\frac{\partial h}{\partial T_{Cl}} = h \frac{\partial T}{\partial T_{Cl}} \left( \frac{0.8641}{T_R} - \frac{0.002135}{T^{0.5} d_p G} N_{Re} \right) \quad (22)$$

Substituindo a eq.21 e eq.22 na eq.20,

$$\frac{\partial U}{\partial T_{Cl}} = U \left[ \frac{d_o}{2} K_a \ln \left( \frac{d_o}{d_t} \right) 0.3695 \frac{\partial T}{T_R \partial T_{Cl}} + h \frac{\partial T}{\partial T_{Cl}} \left( \frac{0.8641}{T_R} - \frac{0.002135}{T^{0.5} d_p G} N_{RE} \right) \right] \quad (23)$$

Substituindo a eq.23 na eq.19,

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial T_{Cl}} = C \left[ \frac{d_o}{2} K_a \ln \left( \frac{d_o}{d_t} \right) 0.3695 \frac{\partial T}{T_R \partial T_{Cl}} + h \left( \frac{0.8641}{T_R} - \frac{0.002135}{T^{0.5} d_p G} N_{RE} \right) - \right. \\ \left. - \frac{1}{C_{pg}} (3.44201 \times 10^{-5} + 5.29706 \times 10^{-8} T - 4.89285 \times 10^{-11} T^2) \right] \frac{\partial T}{\partial T_{Cl}} \end{aligned} \quad (24)$$

Substituindo eq.15 e eq.16 na eq. 24 e rearranjando tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{dS_2}{dz} = B \exp \left( b - \frac{a}{T} \right) \times \left( \frac{a P_A S_2}{T^2} + S_1 + P_A \left( \frac{S_4}{P_T} - \frac{S_2 \times CT}{C_{pg}} \right) \right) \\ - C \times \left( S_2 - S_3 + (T - T_c) S_2 \times BT - \frac{CT}{C_{pg}} \right) \end{aligned} \quad (25)$$

onde:

$$BT = \frac{d_o L_n \left( \frac{d_o}{d_t} \right) \times 0.3695}{2 K_a T_R} + \frac{1}{h} \times \left( \frac{0.8641}{T_R} - \frac{0.002135 N_{RE}}{T^{0.5} d_p G} \right) \quad (26)$$

e

$$CT = 3.44201 \times 10^{-5} + 5.29706 \times 10^{-8} T - 4.89285 \times 10^{-11} T^2 \quad (27)$$

### 3 - Cálculo de $\frac{dS_3}{dz}$

$$\frac{dS_3}{dz} = \frac{d}{dz} \left( \frac{\partial T_c}{\partial T_{ci}} \right) = \frac{\partial}{\partial T_{ci}} \left( \frac{dT_c}{dz} \right) \quad (28)$$

Pela eq. de balanço:

$$\frac{dT_c}{dz} = D(T - T_c) \quad (29)$$

Substituindo a eq.29 na eq.28,

$$\frac{dS_3}{dz} = \frac{d}{dz} (D(T - T_c))$$

Portanto:

$$\frac{dS_3}{dz} = (T - T_c) \frac{dD}{dz} + D \frac{\partial}{\partial T_{ci}} (T - T_c) \quad (30)$$

### 3.1 - Cálculo de $\frac{\partial D}{\partial T_{ci}}$

Por definição:

$$D = \frac{\pi d_t U t_a}{W_c C_{pg}}$$

então:



$$\frac{\partial D}{\partial T_{cl}} = \frac{\pi d_t t_n}{W_c C_{pc}} \frac{\partial U}{\partial T_{cl}} \quad (31)$$

Substituindo eq.23 na eq.31,

$$\frac{\partial D}{\partial T_{cl}} = \frac{\pi d_t t_n U}{W_c C_{pc}} \left[ \frac{d_o}{2 K_a} \ln \left( \frac{d_o}{d_t} \right) \frac{0.3695}{T_R} + \frac{1}{h} \left( \frac{0.8641}{T_R} - \frac{0.002135 N_{RE}}{T^{0.5} d_p G} \right) \right] \frac{\partial T}{\partial T_{cl}}$$

Portanto,

$$\frac{\partial D}{\partial T_{cl}} = D \left[ \frac{d_o}{2 K_a} \ln \left( \frac{d_o}{d_t} \right) \frac{0.3695}{T_R} + \frac{1}{h} \left( \frac{0.8641}{T_R} - \frac{0.002135 N_{RE}}{T^{0.5} d_p G} \right) \right] \frac{\partial T}{\partial T_{cl}} \quad (32)$$

Substituindo eq.32 na eq.30

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_3}{\partial z} = D \left[ \frac{d_o}{2 K_a} \ln \left( \frac{d_o}{d_t} \right) \frac{0.3695}{T_R} + \frac{1}{h} \left( \frac{0.8641}{T_R} - \frac{0.002135 N_{RE}}{T^{0.5} d_p G} \right) \right] \times \\ \times \frac{\partial T}{\partial T_{cl}} (T - T_{cl}) + D \left( \frac{\partial T}{\partial T_{cl}} - \frac{\partial T_c}{\partial T_{cl}} \right) \end{aligned}$$

Rearranjando tem-se :

$$\frac{dS_3}{dz} = D (S_2 - S_3 + S_2 (T - T_c) BT) \quad (33)$$

#### 4 - Cálculo de $\frac{dS_4}{dz}$

$$\frac{dS_4}{dz} = \frac{d}{dz} \left( \frac{\partial P_T}{\partial T_{cl}} \right) = \frac{\partial}{\partial T_{cl}} \left( \frac{dP_T}{dz} \right) \quad (34)$$

A expressão para  $\frac{\partial}{\partial T_{cl}} \left( \frac{dP_T}{dz} \right)$  foi obtida anteriormente (eq. 7).

Substituindo a eq.7 na eq.34 tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{dS_4}{dz} = & - 7.165 \times 10^{-13} \frac{(1 - \epsilon)}{\epsilon^3} \frac{G^2}{d_p} \times \left[ \frac{1}{\rho_g} \left( \frac{0.4575 \times (1 - \epsilon)}{d_p G T^{0.5}} \times \frac{\partial T}{\partial T_{cl}} \right) + \right. \\ & \left. + \left( 1.75 + \frac{150 (1 - \epsilon)}{N_{RE}} \right) \times \frac{M}{\rho_g^2 0.08205} \left( \frac{1}{T} \frac{\partial P_T}{\partial T_{cl}} - \frac{P_T}{T^{0.5}} \frac{\partial T}{\partial T_{cl}} \right) \right] \end{aligned}$$

Rearranjando,

$\frac{dS_4}{dz} = \frac{- 7.515 \times 10^{-13} (1 - \epsilon) G^2}{\epsilon^3 d_p} \times AT \quad (35)$
--

onde AT é dado pela eq.19.

```

*-----*
*  PROGRAMA TESE - ESTE PROGRAMA CALCULA OS PERFIS DE TEMPERATURA *
*  E SENSITIVIDADE PARAMETRICA PARA OS SEGUINTEES ESQUEMAS:      *
*                                                                    *
*      1 - ESQUEMA CONCORRENTE                                     *
*      2 - ESQUEMA CONTRACORRENTE                                 *
*      3 - CONFIGURACAO ALTERNATIVA 1                             *
*      4 - CONFIGURACAO ALTERNATIVA 2                             *
*-----*

```

```

*-----*
*  PROGRAMA      PRINCIPAL                                         *
*-----*

```

\$LARGE

```

INTEGER GI
COMMON/DADOS1/XAD,ZE,ZL,PP,NP,TOL,CPFRE,TN,DT,DO,DC,GE,R,RDB,WC,U
COMMON/DADOS2/PBO,PAO,TBO,TCO,S10,S20,S30,S40,GWC,GXA,GX2A,CAM
COMMON/DADOS3/GPA,PT,GTP,RWC,PEL,PWC,XA,FA,FB,XO,XF,VX,FT,GX1,GX2
COMMON/DADOS4/GX3,GX4,GX5,GX6,GX7,GX8,GTO,TO,GI,GZE,TCOA,S3OA
COMMON/DADOS5/CTEA,CTEB,CTEC,CTED,CBM,YF,KONA,VINTI,VINTF
COMMON/DADOS6/FXO,HV,GV,X1,AO,BO,FX,KTDET,KLDET,KS3O
COMMON/CONTA1/ITB,NTB,PASSO,NPASS,NESC2,KONTA77,NESC10,KN1,NESC
COMMON/CONTA2/KKVIT,NTIPO,NTIPO1,KVIT,KEND,NRP,KK,K3,N,ICONT,KN2
COMMON/VETOR1/TBI(15),TCI(15),PAI(15),WCI(15),X(15),TM(15),VPM(15)
COMMON/VETOR2/DTM(15),TF(15),PMS2(15),VS2(30,15),Z(30),DELT(30,15)
COMMON/VETOR3/Y(10),C(4,10),CONV(30,15),TR(30,15),PTFR(30,15)
COMMON/VETOR4/F(10),PA(30,15),PPT(30,15),ZET(15),ZE1(30,15)
COMMON/VETOR5/VS3(30,15),KALT,KALT1,TCOAM,S3OAM,KJ,KZE,KIS3O
COMMON/DADOS7/KTCF,GTCO,KFWC,KMWC,I
COMMON/DADOS8/KCSET

```

C      DEFINICAO DOS VALORES INICIAIS

```

ITB=1
WRITE(*,*) ' QUANTAS SIMULACOES SERAO FEITAS ? '
READ(*,*)NTB
WRITE(*,*) ' ENTRE COM O VALOR DE PASSO E NPASS '
READ(*,*) PASSO,NPASS
WRITE(*,*) ' DESEJA-SE : '
WRITE(*,*) ' 1 - OBTER CONVERSAO      (L e To PRE-FIXADOS) '
WRITE(*,*) ' 2 - OBTER COMPRIMENTO    ( Xa e To PRE-FIXADOS ) '
WRITE(*,*) ' 3 - OBTER TCo             ( Xa e L PRE-FIXADOS ) '
READ(*,*) NESC2
IF ( NESC2 .EQ. 1 ) GO TO 2
IF ( NESC2 .EQ. 3 ) GO TO 3
WRITE(*,*) ' VALOR DA CONVERSAO DESEJADA '
READ(*,*) XAD
GO TO 4
3 WRITE(*,*) ' VALOR DA CONVERSAO DESEJADA '
READ(*,*) XAD
2 WRITE(*,*) ' VALOR DO COMPRIMENTO DO REATOR '
READ(*,*) ZE
ZL=ZE
GZE=ZE
ZET(ITB)=ZE
PP=ZE/(PASSO*NPASS)+1
PP=INT(PP)

```

```

NP=PP
4 KONTA77=0
TOL=0.0015
NESC10=2
KN1=0
KN2=0
KKVIT=0
KLDET=0
KTDET=0
KS30=0
KALT=0
KALT1=0
KTCF=0
KZE=0
KFWC=0
KMWC=0
CPFRE=0.3108
TN=1
KCSET=0
500 WRITE(*,*) ' QUAL O TIPO DE CONFIGURACAO PARA O REFRIGERANTE ? '
WRITE(*,*) '      1- CONCORRENTE PARA TODO Z '
WRITE(*,*) '      2- CONTRACORRENTE PARA TODO Z '
WRITE(*,*) '      3- CONFIGURACAO ALTERNATIVA '
READ(*,*) NTIPO
IF ( NTIPO .NE. 3 ) GO TO 5
WRITE(*,*) ' O FLUXO DO REFRIGERANTE SERA DE : '
WRITE(*,*) '      1 - UMA ALIMENTACAO E DUAS SAIDAS '
WRITE(*,*) '      2 - DUAS ALIMENTACOES E UMA SAIDA '
READ(*,*) NTIPO1
5 OPEN (5501,FILE='DTAB1.DAT',STATUS='OLD')
READ(5501,*) DT,DO,DC,GE,R,RDB,PT
REWIND 5501
CLOSE(5501,STATUS='KEEP')
GO TO 6
6 WRITE(*,*) 'ENTRE COM : WC '
READ(*,*) WC
7 IF ( NTIPO .EQ. 1 ) GO TO 8
IF ( NTIPO .EQ. 2 ) GO TO 9
IF ( NTIPO1 .EQ. 2 ) GO TO 8
9 WC=-WC
8 KKVIT=1
10 IF ( NESC2 .EQ. 3 ) GO TO 110
GO TO 8702
WRITE(*,*) ' VALOR INICIAL DA TEMP. DO REFRIGERANTE '
READ(*,*) TCA
IF ( NTIPO .EQ. 1 ) GO TO 8701
IF ( NTIPO .EQ. 2 ) GO TO 8702
IF ( NTIPO1 .EQ. 1 ) GO TO 8702
8701 TCO=TCA
TBO=TCO
GO TO 8703
8702 WRITE(*,*) ' VALOR DE TBO '
READ(*,*) TBO
TCO=TBO
8703 IF ( NTIPO .EQ. 1 ) GO TO 8704
IF ( NTIPO .EQ. 2 ) GO TO 5109
IF ( NTIPO1 .EQ. 1 ) GO TO 5109
KIS30=1
GO TO 5105
8704 KIS30=1
GO TO 11
5109 WRITE(*,*) ' O VALOR DE S30 VAI SER DETERMINADO ? '

```

```

WRITE(*,*)          1 - SIM
WRITE(*,*)          2 - NAO
READ(*,*) KIS30
IF ( KIS30 .EQ. 1 ) GO TO 11
WRITE(*,*) ENTRE COM O VALOR DE S30
READ(*,*)S30
GO TO 11
5105 WRITE(*,*) O VALOR DE S30A E TCOA SERAO DETERMINADOS ?
WRITE(*,*)          1 - SIM
WRITE(*,*)          2 - NAO
READ(*,*) KCSET
IF ( KCSET .EQ. 1 ) GO TO 11
WRITE(*,*) ENTRE COM S30A e TCOA
READ(*,*) S30A
READ(*,*) TCOA
GO TO 11
110 IF ( NTIPO .EQ. 1 ) GO TO 11
IF ( NTIPO .EQ.2 ) GO TO 8700
IF ( NTIPO1 .EQ. 2 ) GO TO 11
8700 WRITE(*,*)
11 GWC=WC
PAO=PT/(1.019+R)
GPT=PT
GPA=PAO
TBI(ITB)=TBO
TCI(ITB)=TCO
PAI(ITB)=PAO
WCI(ITB)=WC
KFWC=0
KMWC=0
13 IF ( NTIPO .NE. 3 ) GO TO 14
IF ( KONTA77 .EQ. 1 ) GO TO 14
IF ( NTIPO1 .EQ. 2 ) GO TO 5701
WRITE(*,*) QUAL A VAZAO NO ESQUEMA CONTRACORRENTE (WCT)
READ(*,*) RWC
RWC=-RWC
GO TO 5702
5701 WRITE(*,*) QUAL A VAZAO NO TRECHO CONCORRENTE ( WCC)
READ(*,*) RWC
5702 WRITE(*,*) QUAL A POSICAO DA ENTRADA DO FLUXO
READ(*,*) PEL
PWC=PEL
14 IF ( NTIPO .EQ. 1 ) GO TO 15
IF ( NTIPO .EQ. 2 ) GO TO 16
GO TO 17

C-----ESQUEMA CONCORRENTE
15 CALL SUB1(*23,*24)
C-----SAIDA DO RETURN 1
23 IF ( NESC2 .EQ. 3 ) GO TO 19
GO TO 20
19 WRITE(*,*) VALOR FINAL DE XA = ,XA
WRITE(*,*) VALOR INICIAL DE TBO = ,TBO
WRITE(*,*) VALOR INICIAL DE TCO = ,TCO
TBI(ITB)=TBO
TCI(ITB)=TCO
GO TO 20

C-----SAIDA DO RETURN 2
24 GO TO 30

C-----ESQUEMA CONTRACORRENTE

```

```

      GTCO=TCA
16    CALL SUB2(*25,*24)

C-----SAIDA DO RETURN 1
25    WRITE(*,*)` VALOR INICIAL DE S30 = `,S30
      WRITE(*,*)` VALOR FINAL DE S30 = `,X(7)
      IF ( NESC2 .EQ. 3 ) GO TO 19
      GO TO 20

17    IF ( NTIPO1 .EQ. 1 ) GO TO 22

C-----ESQUEMA CONCORRENTE NA PRIMEIRA REGIAO ( COM 2 ALIMENTACOES )

      CALL SUB3(*27,*24)

C-----SAIDA DO RETURN 1
27    IF ( KCSET .EQ. 2 ) GO TO 20
C27   IF ( NESC2 .NE. 3 ) GO TO 20
      WRITE(*,*)` VALOR DE S30A DETERMINADO = `,S30A
      WRITE(*,*)` VALOR DE TCOA DETERMINADO = `,TCOA
      GO TO 19

C-----ESQUEMA CONTRACORRENTE NA PRIMEIRA REGIAO ( 1 ALIMENTACAO )
      GTCO=TCA
22    CALL SUB5(*25,*24)

20    VS2(1,ITB)=S20
      VS3(1,ITB)=S30
      IF ( ITB .LT. NTB ) GO TO 40
      GO TO 50
40    ITB=ITB+1
      WRITE(*,*)` DESEJA MUDAR O TIPO DE CONFIGURACAO ? `
      WRITE(*,*)`           1 - SIM `
      WRITE(*,*)`           2 - NAO `
      READ(*,*) KNTIPO
      IF ( KNTIPO .EQ. 1 ) GO TO 400
      IF ( NTIPO .NE. 3 ) GO TO 400
      WRITE(*,*)` A RAZAO E A POSICAO DO REFRIGERANTE E A MESMA ? `
      WRITE(*,*)`           1 - SIM `
      WRITE(*,*)`           2 - NAO `
      READ(*,*) NRP
      IF ( NRP .EQ. 2 ) GO TO 400
      KONTA77=1
400   IF ( KNTIPO .EQ. 1 ) GO TO 500
      GO TO 6

C-----IMPRESSAO DOS RESULTADOS

50    OPEN (55,FILE=`TAB1.DAT`,STATUS=`OLD`)
      OPEN (56,FILE=`TAB2.DAT`,STATUS=`OLD`)
      OPEN (57,FILE=`TAB3.DAT`,STATUS=`OLD`)
      OPEN (75,FILE=`TAB4.DAT`,STATUS=`OLD`)
      OPEN (65,FILE=`TAB5.DAT`,STATUS=`OLD`)
      OPEN (78,FILE=`TAB6.DAT`,STATUS=`OLD`)
      OPEN (87,FILE=`TAB7.DAT`,STATUS=`OLD`)
      OPEN (88,FILE=`TAB8.DAT`,STATUS=`OLD`)
      OPEN (2,FILE=`TAB9.DAT`,STATUS=`OLD`)
      OPEN (3,FILE=`TAB10.DAT`,STATUS=`OLD`)

```

```

OPEN (4,FILE='TAB11.DAT',STATUS='OLD')
OPEN (7,FILE='TAB12.DAT',STATUS='OLD')
OPEN (8,FILE='TAB13.DAT',STATUS='OLD')
OPEN (381,FILE='TAB14.DAT',STATUS='OLD')
OPEN (382,FILE='TAB15.DAT',STATUS='OLD')

NTB=ITB
Z(1)=0.
DO 333 J=1,NTB
DELT(1,J)=0.
CONV(1,J)=0.
911 TR(1,J)=TBI(J)
PTFR(1,J)=TCI(J)
PA(1,J)=PAI(J)
PPT(1,J)=PT
333 CONTINUE
KK=0
IF ( NESC2 .NE. 2 ) GO TO 9014
K3=1
I=1
9009 ZE=ZET(K3)
ZE=ZE+0.002
PP=ZE/(PASSO*NPASS)+1
PP=PP+0.01
PP=INT(PP)
NP=PP
IF ( NTIPO .EQ. 3 ) GO TO 9014
DO 9011 K4=2,NP
9011 Z(K4)=ZE1(K4,K3)
GO TO 99
9014 WRITE(*,*)
I=1
99 WRITE(55,106) Z(I),(DELT(I,J),J=1,NTB)
106 FORMAT(1X,F6.4,15(1X,F7.3))
WRITE (56,120) Z(I),(PA(I,J),J=1,NTB)
120 FORMAT(1X,F6.4,15(1X,F7.4))
WRITE (57,459) Z(I),(PTFR(I,J),J=1,NTB)
459 FORMAT (1X,F6.4,15(1X,F7.3))
WRITE(75,120) Z(I),(CONV(I,J),J=1,NTB)
KK=KK+1
IF(KK .GT. NTB) GO TO 391
WRITE (87,121) TM(KK),VPM(KK)
121 FORMAT (1X,F5.1,1X,F7.4)
391 WRITE(65,122) (TR(I,J),PA(I,J),J=1,NTB)
122 FORMAT(15(1X,F5.1,1X,F7.4))
WRITE(4,444) Z(I),(TR(I,J),J=1,NTB)
444 FORMAT(1X,F6.4,15(1X,F7.3))
WRITE(78,712) Z(I),(VS2(I,J),J=1,NTB)
712 FORMAT(1X,F6.4,15(1X,F9.3))
WRITE(8,100) Z(I),(VS3(I,J),J=1,NTB)
100 FORMAT(1X,F6.4,15(1X,F9.3))
WRITE(88,819) Z(I),(PPT(I,J),J=1,NTB)
819 FORMAT(1X,F6.4,15(1X,F7.4))
IF ( NESC2 .NE. 2 ) GO TO 5101
I=I+1
IF ( I .LE. NP ) GO TO 99
K3=K3+1
IF( K3 .GT. NTB ) GO TO 9015
GO TO 9009
5101 I=I+1
IF ( I .LE. NP ) GO TO 99
9015 WRITE(*,*)

```

```

DO 8010 JJ=1,NTB
8010 WCI(JJ)=1./WCI(JJ)
    GV1=TM(1)
    GV2=PMS2(I)
    DO 8012 I=1,NTB
        VZERO=0.
        WRITE(2,222) WCI(I),TM(I),VZERO
222    FORMAT(1X,F5.2,1X,F5.1,1X,F5.2)
        IF ( PMS2(I) .LT. 0 ) GO TO 380
        WRITE(3,301) WCI(I),PMS2(I)
301    FORMAT(1X,F5.2,1X,F9.3)
        GO TO 921
380    WRITE(381,301) WCI(I),PMS2(I)
921    WRITE(382,301) WCI(I),VZERO
        WRITE(7,704) WCI(I),TBI(I)
704    FORMAT(1X,F5.2,1X,F5.1)
8012 CONTINUE
8011 WRITE(*,*)
        REWIND 55
        CLOSE(55,STATUS='KEEP')
        REWIND 56
        CLOSE(56,STATUS='KEEP')
        REWIND 57
        CLOSE(57,STATUS='KEEP')
        REWIND 75
        CLOSE(75,STATUS='KEEP')
        REWIND 65
        CLOSE(65,STATUS='KEEP')
        REWIND 78
        CLOSE(78,STATUS='KEEP')
        REWIND 88
        CLOSE(88,STATUS='KEEP')
        REWIND 2
        CLOSE(2,STATUS='KEEP')
        REWIND 3
        CLOSE(3,STATUS='KEEP')
        REWIND 4
        CLOSE(4,STATUS='KEEP')
        REWIND 7
        CLOSE(7,STATUS='KEEP')
        REWIND 8
        CLOSE(8,STATUS='KEEP')
        CLOSE(381,STATUS='KEEP')
        CLOSE(382,STATUS='KEEP')
        IF ( NESC2 .NE. 2 ) GO TO 30
        WRITE(*,9012) (ZET(J1),J1=1,NTB)
9012 FORMAT(/,1X, ' COMPRIMENTO DO REATOR = ',/(27X,F6.4,/))
30    STOP
    END

```

C-----

C-----  
C SUBROUTINA PARA O ESQUEMA CONCORRENTE

SUBROUTINE SUB1(\*,\*)  
COMMON/DADOS1/XAD,ZE,ZL,PP,NP,TOL,CPFRE,TN,DT,DO,DC,GE,R,RDB,WC,U



```

COMMON/DADOS2/PBO,PAO,TBO,TCO,S10,S20,S30,S40,GWC,GXA,GX2A,CAM
COMMON/DADOS3/GPA,PT,GTP,RWC,PEL,PWC,XA,FA,FB,XO,XF,VX,FT,GX1,GX2
COMMON/DADOS4/GX3,GX4,GX5,GX6,GX7,GX8,GTO,TO,GI,GZE,TCOA,S3OA
COMMON/DADOS5/CTEA,CTEB,CTEC,CTED,CBM,YF,KONA,VINTI,VINTF
COMMON/DADOS6/FXO,HV,GV,X1,AO,BO,FX,KTDET,KLDET,KS30
COMMON/CONTA1/ITB,NTB,PASSO,NPASS,NESC2,KONTA77,NESC10,KN1,NESC
COMMON/CONTA2/KKVIT,NTIPO,NTIPO1,KVIT,KEND,NRP,KK,K3,N,ICONT,KN2
COMMON/VETOR1/TBI(15),TCI(15),PAI(15),WCI(15),X(15),TM(15),VPM(15)
COMMON/VETOR2/DTM(15),TF(15),PMS2(15),VS2(30,15),Z(30),DELT(30,15)
COMMON/VETOR3/Y(10),C(4,10),CONV(30,15),TR(30,15),PTFR(30,15)
COMMON/VETOR4/F(10),PA(30,15),PPT(30,15),ZET(15),ZE1(30,15)
COMMON/VETOR5/VS3(30,15),KALT,KALT1,TCOAM,S3OAM,KJ,KZE,KIS30
COMMON/DADOS7/KTCF,GTCO,KFWC,KMWC,I

```

KN1=0

```

IF ( NESC2 .EQ. 3 ) GO TO 1
IF ( NESC2.EQ. 1 ) GO TO 50
KLDET=0
ZET(ITB)=0
CALL SUB4
ZE=ZET(ITB)
WRITE(*,*) VALOR DE Z = ,ZE
RETURN 1
50 CALL SUB4
RETURN 1

```

```

1 CALL SUB7(*2,*3)
C-----SAIDA 2 ( DETERMINOU Tco )
2 RETURN 1

C-----SAIDA DO RETURN 3 ( NAO DETERMINOU Tco )
3 RETURN 2

```

END

C-----

C-----

C SUBROUTINA DO ESQUEMA CONTRACORRENTE

```

SUBROUTINE SUB2(*,*)
COMMON/DADOS1/XAD,ZE,ZL,PP,NP,TOL,CPFRE,TN,DT,DO,DC,GE,R,RDB,WC,U
COMMON/DADOS2/PBO,PAO,TBO,TCO,S10,S20,S30,S40,GWC,GXA,GX2A,CAM
COMMON/DADOS3/GPA,PT,GTP,RWC,PEL,PWC,XA,FA,FB,XO,XF,VX,FT,GX1,GX2
COMMON/DADOS4/GX3,GX4,GX5,GX6,GX7,GX8,GTO,TO,GI,GZE,TCOA,S3OA
COMMON/DADOS5/CTEA,CTEB,CTEC,CTED,CBM,YF,KONA,VINTI,VINTF
COMMON/DADOS6/FXO,HV,GV,X1,AO,BO,FX,KTDET,KLDET,KS30
COMMON/CONTA1/ITB,NTB,PASSO,NPASS,NESC2,KONTA77,NESC10,KN1,NESC
COMMON/CONTA2/KKVIT,NTIPO,NTIPO1,KVIT,KEND,NRP,KK,K3,N,ICONT,KN2
COMMON/VETOR1/TBI(15),TCI(15),PAI(15),WCI(15),X(15),TM(15),VPM(15)
COMMON/VETOR2/DTM(15),TF(15),PMS2(15),VS2(30,15),Z(30),DELT(30,15)
COMMON/VETOR3/Y(10),C(4,10),CONV(30,15),TR(30,15),PTFR(30,15)
COMMON/VETOR4/F(10),PA(30,15),PPT(30,15),ZET(15),ZE1(30,15)
COMMON/VETOR5/VS3(30,15),KALT,KALT1,TCOAM,S3OAM,KJ,KZE,KIS30
COMMON/DADOS7/KTCF,GTCO,KFWC,KMWC,I

```

KN3=0

KN1=0

IF ( NESC2 .EQ. 3 ) GO TO 1  
IF ( NESC2 .EQ. 1 ) GO TO 16

C-----CALCULO DIRETO DO COMPRIMENTO-----

ZET(ITB)=0  
CALL SUB4  
GZE=ZET(ITB)  
WRITE(\*,\*) VALOR DE Z = ,GZE  
RETURN 1

C-----

C-----CALCULO DIRETO DO PERFIL-----

16 KS30=1  
IF ( KIS30 .EQ. 1 ) GO TO 161  
CALL SUB4  
RETURN 1

C-----

C----- DETERMINA TCO E S30 -----

1 KTCF=1  
CALL SUB7(\*11,\*12)  
11 WRITE(\*,\*)  
161 KTDET=1  
KN1=0  
KN2=0  
KS30=1  
CALL SUB6(\*4,\*12)  
4 RETURN 1

C-----

C-----SAIDA 12 ( STOP )  
12 RETURN 2

END

C-----

C SUBROTINA DO ESQUEMA ALTERNATIVO - ESQUEMA CONCORRENTE NO TRECHO  
C INICIAL E COM 2 ALIMENTACOES

SUBROUTINE SUB3 (\*,\*)  
INTEGER GI,GGI  
COMMON/DADOS1/XAD,ZE,ZL,PP,NP,TOL,CPFRE,TN,DT,DO,DC,GE,R,RDB,WC,U  
COMMON/DADOS2/PBO,PAO,TBO,TCO,S10,S20,S30,S40,GWC,GXA,GX2A,CAM  
COMMON/DADOS3/GPA,PT,GTP,RWC,PEL,PWC,XA,FA,FB,XO,XF,VX,FT,GX1,GX2

```

COMMON/DADOS4/GX3,GX4,GX5,GX6,GX7,GX8,GTO,TO,GI,GZE,TCOA,S3OA
COMMON/DADOS5/CTEA,CTEB,CTEC,CTED,CBM,YF,KONA,VINTI,VINTF
COMMON/DADOS6/FX0,HV,GV,X1,AO,BO,FX,KTDET,KLDET,KS30
COMMON/CONTA1/ITB,NTB,PASSO,NPASS,NESC2,KONTA77,NESC10,KN1,NESC
COMMON/CONTA2/KKVIT,NTIPO,NTIPO1,KVIT,KEND,NRP,KK,K3,N,ICONT,KN2
COMMON/VETOR1/TBI(15),TCI(15),PAI(15),WCI(15),X(15),TM(15),VPM(15)
COMMON/VETOR2/DTM(15),TF(15),PMS2(15),VS2(30,15),Z(30),DELT(30,15)
COMMON/VETOR3/Y(10),C(4,10),CONV(30,15),TR(30,15),PTFR(30,15)
COMMON/VETOR4/F(10),PA(30,15),PPT(30,15),ZET(15),ZE1(30,15)
COMMON/VETOR5/VS3(30,15),KALT,KALT1,TCOAM,S3OAM,KJ,KZE,KIS30
COMMON/DADOS7/KTCF,GTCO,KFWC,KMWC,I
COMMON/DADOS8/KCSET

```

```

KN3=0
KN1=0
KALT1=0
KALT=0
KS30=0
IF ( NESC2 .EQ. 3 ) GO TO 1
IF ( NESC2 .EQ. 2 ) GO TO 2
KTCF=1

```

```

3      GTCO=TCO
      WC=RWC
      ZE=PWC
      CALL SUB4
      WC=-(GWC-RWC)
      IF ( KALT1 .EQ. 0 ) GO TO 440
      GO TO 441
440    IF ( KCSET .EQ. 2 ) GO TO 441
      GO TO 4
C----- ( CALCULO DIRETO DO PERFIL )-----

```

```

441    GGTC=X(2)
      GGS3=X(7)
      GI=I-1
      X(2)=TCOA+273.16
      X(7)=S3OA
      KALT=1
      ZE=GZE
      CALL SUB4
      KJ=GI
C      WRITE(*,*) ' VALOR DE X2 = ',X(2)-273.16
C      WRITE(*,*) ' VALOR DE KJ = ',KJ
      IF ( NESC2 .NE. 1 ) RETURN 1
      VS3(KJ,ITB)=(GGS3+S3OA)/2
      PTFR(KJ,ITB)=((GGTC-273.16)+TCOA)/2
      RETURN 1

```

C-----

C----- ( CALCULA TCOA )-----

```

4      GX1=X(1)
      GX2=X(2)
      GX3=X(3)
      GX4=X(4)
      GX5=X(5)
      GX6=X(6)
      GX7=X(7)

```

```

GX8=X(8)
GXA=XA
GTO=TO
GI=I-1
KALT=1
ZE=GZE
TCOA=150
7   X(1)=GX1
    X(2)=TCOA+273.16
    X(3)=GX3
    X(4)=GX4
    X(5)=GX5
    X(6)=GX6
    X(7)=GX7
    X(8)=GX8
    TO=GTO
    I=GI
    WRITE(*,*) ' VAI DETERMINAR O PERFIL COM TCOA = ',TCOA
    CALL SUB4
    IF ( KN1 .EQ. 1 ) GO TO 8
    IF ( KN1 .EQ. 2 ) GO TO 9
    XO=150
    AO=150
    FA=TCO-(X(2)-273.16)
    TCOA=220
    KN1=1
    GO TO 7
8   XF=220
    BO=220
    FB=TCO-(X(2)-273.16)
    KN2=0
13  CALL SUBSP(*10,*11,*12)

C----- ( CONTINUA CALCULANDO O PERFIL )
11  TCOA=VX
    KN1=2
    KN2=1
    GO TO 7
9   FT=TCO-(X(2)-273.16)
    IF ( KTCF .EQ. 1 ) GO TO 13
    ERRO1=ABS((XA-XAD))
    IF ( XA .LT. XAD ) GO TO 209
    IF ( ERRO1 .GT. 0.01 ) GO TO 1
    GO TO 13
209 IF ( ERRO1 .GT. 0.05 ) GO TO 1
    GO TO 13

C----- ( DETERMINOU TCOA )
12  WRITE(*,*) ' DETERMINOU O VALOR DE TCOA = ',TCOA
    IF ( KZE .EQ. 1 ) GO TO 2

C-----

C----- ( CALCULA S3OA )-----

28  GX2A=TCOA+273.16
    KTDET=1
    KS3O=1
    KN1=0
    S3OA=-5

```

```

14      X(1)=GX1
        X(2)=GX2A
        X(3)=GX3
        X(4)=GX4
        X(5)=GX5
        X(6)=GX6
        X(7)=S30A
        X(8)=GX8
        TO=GTO
        I=GI
        WRITE(*,*) ' VAI OBTER O PERFIL COM S30A = ',S30A
        CALL SUB4
        IF ( KN1 .EQ. 1 ) GO TO 15
        IF ( KN1 .EQ. 2 ) GO TO 16
        XO=-5
        AO=-5
        FA=1-X(7)
        S30A=5
        KN1=1
        GO TO 14
15      XF=5
        BO=5
        FB=1-X(7)
        KN1=2
        KN2=0
17      CALL SUBSP(*10,*19,*20)

C----- ( CONTINUA CALCULANDO O PERFIL )
19      S30A=VX
        GO TO 14
16      FT=1-X(7)
        GO TO 17

C----- ( ENCONTROU S30A )
20      S30AM=(GX7+S30A)/2
        TCOAM=(TCOA+(GX2-273.16))/2
        KALT1=1
        KALT=0
        KS30=0
        GO TO 3

C-----

C----- (CALCULA TBO )-----

1      IF ( KN3 .EQ. 1 ) GO TO 30
        IF ( KN3 .EQ. 2 ) GO TO 32
        IF ( KN3 .EQ. 3 ) GO TO 33
        KZE=0
        TCO=180
        TBO=TCO
        KN3=1
        WRITE(*,*) ' PERFIL COM TCO = ',TCO
        GO TO 3
30      GX0=180
        GAO=180
        GFA=XAD-XA
        TCO=210
        TBO=TCO

```

```

KN3=2
KN1=0
KN2=0
KALT=0
WRITE(*,*)` PERFIL COM TCO = `,TCO
GO TO 3
32  GXF=210
    GBO=210
    GFB=XAD-XA
    XO=GXO
    XF=GXF
    AO=GAO
    BO=GBO
    KN2=0
    FA=GFA
    FB=GFB
    KN2=0
37  CALL SUBSP(*43,*44,*45)
43  WRITE(*,*)` SAIDA 1 - GFA = `,GFA,`GFB = `,GFB
    RETURN 2
44  TCO=VX
    TBO=TCO
    GVX=VX
    GGV=GV
    GHV=HV
    GFXO=FXO
    GX1A=X1
    GXO=XO
    GAO=AO
    GBO=BO
    KN3=3
    KN1=0
    KN2=0
    KALT=0
    WRITE(*,*)` PERFIL COM TCO = `,TCO
    GO TO 3
33  FT=XAD-XA
    AO=GAO
    BO=GBO
    XO=GXO
    XF=GXF
    X1=GX1A
    VX=GVX
    GV=GGV
    HV=GHV
    FXO=GFXO
    FA=GFA
    FB=GFB
    KN2=1
    GO TO 37
45  WRITE(*,*)` DETERMINOU TCO = `,TCO
    TCO=VX
    TBO=TCO
    GO TO 28

```

C-----

C----- ( CALCULA COMPRIMENTO ) -----

```

2      IF ( KN3 .EQ. 1 ) GO TO 21
      IF ( KN3 .EQ. 2 ) GO TO 22
      IF ( KN3 .EQ. 3 ) GO TO 23
      KZE=1
      ZE=1
      PWC=ZE*PEL
      GZE=ZE
      KN3=1
      WRITE(*,*) ' PERFIL COM ZE = ',ZE
      GO TO 3
21     GXO=1
      GAO=1
      GFA=XAD-XA
      ZE=3
      PWC=ZE*PEL
      GZE=ZE
      KN3=2
      KN1=0
      KN2=0
      KALT=0
      WRITE(*,*) ' PERFIL COM ZE = ',ZE
      GO TO 3
22     GXF=3
      GBO=3
      GFB=XAD-XA
      XO=GXO
      XF=GXF
      AO=GAO
      BO=GBO
      KN2=0
      FA=GFA
      FB=GFB
      KN2=0
27     CALL SUBSP(*24,*25,*26)
24     RETURN 2
25     ZE=VX
      GVX=VX
      GGV=GV
      GHV=HV
      GFXO=FXO
      GX1A=X1
      GXO=XO
      GAO=AO
      GBO=BO
      PWC=ZE*PEL
      GZE=ZE
      KN3=3
      KN1=0
      KN2=0
      KALT=0
      WRITE(*,*) ' PERFIL COM ZE = ',ZE
      GO TO 3
23     FT=XAD-XA
      AO=GAO
      BO=GBO
      XO=GXO
      XF=GXF
      X1=GX1A
      VX=GVX
      GV=GGV
      HV=GHV
      FXO=GFXO

```

```

FA=GFA
FB=GFB
KN2=1
GO TO 27
26  WRITE(*,*) ' DETERMINOU ZE = ',ZE
    WRITE(*,*) ' TBO = ',TBO,' TCO = ',TCO
    ZE=VX
    GZE=VX
    PWC=ZE*PEL
    GO TO 28

```

C-----

C----- ( INTERVALO NAO SATISFAZ ) -----

```

10  RETURN 2

    END

```

C-----

C-----

C SUBROTINA DO ESQUEMA ALTERNATIVO - ESQUEMA CONTRACORRENTE NO TRECHO

C INICIAL E COM 1 ALIMENTACAO

SUBROUTINE SUB5(\*,\*)

```

COMMON/DADOS1/XAD,ZE,ZL,PP,NP,TOL,CPFRE,TN,DT,DO,DC,GE,R,RDB,WC,U
COMMON/DADOS2/PB0,PA0,TBO,TCO,S10,S20,S30,S40,GWC,GXA,GX2A,CAM
COMMON/DADOS3/GPA,PT,GTP,RWC,PEL,PWC,XA,FA,FB,XO,XF,VX,FT,GX1,GX2
COMMON/DADOS4/GX3,GX4,GX5,GX6,GX7,GX8,GTO,TO,GI,GZE,TCOA,S3OA
COMMON/DADOS5/CTEA,CTEB,CTEC,CTED,CBM,YF,KONA,VINTI,VINTF
COMMON/DADOS6/FX0,HV,GV,X1,AO,BO,FX,KTDET,KLDET,KS30
COMMON/CONTA1/ITB,NTB,PASSO,NPASS,NESC2,KONTA77,NESC10,KN1,NESC
COMMON/CONTA2/KKVIT,NTIPO,NTIPO1,KVIT,KEND,NRP,KK,K3,N,ICONT,KN2
COMMON/VETOR1/TBI(15),TCI(15),PAI(15),WCI(15),X(15),TM(15),VPM(15)
COMMON/VETOR2/DTM(15),TF(15),PMS2(15),VS2(30,15),Z(30),DELT(30,15)
COMMON/VETOR3/Y(10),C(4,10),CONV(30,15),TR(30,15),PTFR(30,15)
COMMON/VETOR4/F(10),PA(30,15),PPT(30,15),ZET(15),ZE1(30,15)
COMMON/VETOR5/VS3(30,15),KALT,KALT1,TCOAM,S3OAM,KJ,KZE,KIS30
COMMON/DADOS7/KTCF,GTICO,KFWC,KMWC,I

```

```

KALT=0
KFWC=0
KMWC=0
IF ( NESC2 .EQ. 3 ) GO TO 1
IF ( NESC2 .EQ. 2 ) GO TO 2
IF ( KVIT .EQ. 2 ) GO TO 4
IF ( KIS30 .EQ. 1 ) GO TO 28
KS30=1
WC=RWC
289 CALL SUB4
    RETURN 1

```

4 IF ( KIS30 .EQ. 2 ) GO TO 289



```

GTCO=TCO
KTCF=1
KLDET=0
WC=RWC
ZE=PWC
KFWC=1
CALL SUB7(*5,*41)
41 RETURN 2
5 WRITE(*,*) VALOR DE TCO DETERMINADO = ',TCO
GO TO 28

```

```

ZE=GZE
KALT=1
WC=-(GWC-RWC)
CALL SUB4
IF ( NESC2 .EQ. 2 ) GO TO 2
IF ( GNESC2 .EQ. 3 ) GO TO 1
RETURN 1

```

```

2 IF ( KVIT .EQ. 1 ) GO TO 60
60 GTCO=TCO
CALL SUB8(*5,*41)
KZE=1
ZE=1
PWC=ZE*PEL
GZE=ZE
KN3=1
WRITE(*,*) PERFIL COM ZE = ',ZE
3 WC=GWC*RWC
ZE=PWC
CALL SUB4
IF ( NESC2 .EQ. 3 ) GO TO 1
IF ( KN3 .EQ. 1 ) GO TO 21
IF ( KN3 .EQ. 2 ) GO TO 22
IF ( KN3 .EQ. 3 ) GO TO 23
21 XO=1
AO=1
FA=XAD-XA
ZE=3
PWC=ZE*PEL
GZE=ZE
KN3=2
KALT=0
WRITE(*,*) PERFIL COM ZE = ',ZE
GO TO 3
22 XF=3
BO=3
FB=XAD-XA
KN2=0
27 CALL SUBSP(*24,*25,*26)
24 RETURN 2
25 ZE=VX
PWC=ZE*PEL
GZE=ZE
KN3=3
KALT=0
WRITE(*,*) PERFIL COM ZE = ',ZE
GO TO 3
23 FT=XAD-XA

```

```

KN2=1
GO TO 27
26 WRITE(*,*)` DETERMINOU ZE = `,ZE
WRITE(*,*)` TBO = `,TBO,` TCO = `,TCO
ZE=VX
GZE=VX
PWC=ZE*PEL
KLDET=1
KALT=0
KN1=0
ZET(ITB)=PWC
GO TO 28
1 KTCF=0
WC=RWC
WRITE(*,*)` VALOR DE WC = `,WC
CALL SUB7(*45,*43)
IF ( KN3 .EQ. 1 ) GO TO 30
IF ( KN3 .EQ. 2 ) GO TO 32
IF ( KN3 .EQ. 3 ) GO TO 33
IF ( KVIT .EQ. 2 ) GO TO 34
KZE=1
TBO=180
34 TCO=180
GNESC2=NESC2
KN3=1
WRITE(*,*)` PERFIL COM TCO = `,TCO
GO TO 3
30 XO=180
AO=180
FA=XAD-XA
IF ( KVIT .EQ. 2 ) GO TO 35
TBO=220
35 TCO=220
KN3=2
KALT=0
WRITE(*,*)` PERFIL COM TCO = `,TCO
GO TO 3
32 XF=220
BO=220
FB=XAD-XA
KN2=0
37 CALL SUBSP(*43,*44,*45)
43 RETURN 2
44 TCC=VX
IF ( KVIT .EQ. 2 ) GO TO 36
TBO=TCO
36 KN3=3
KALT=0
WRITE(*,*)` PERFIL COM TCO = `,TCO
GO TO 3
33 FT=XAD-XA
GO TO 37
45 WRITE(*,*)` DETERMINOU TCO = `,TCO
WRITE(*,*)` VALOR DE VX = `,VX
WRITE(*,*)` VALOR DE XA = `,XA
IF ( KVIT .EQ. 2 ) GO TO 38
TBO=TCO
38 KLDET=1
ZET(ITB)=PWC
28 WC=RWC
WRITE(*,*)` WC = `,WC
ZE=PWC

```

```

      KFWC=1
      CALL SUB6(*51,*52)
52    RETURN 2
51    ZE=GZE
      KALT=1
      WC=-(GWC-RWC)
      WRITE(*,*)' NOVO WC = ',WC
      CALL SUB4
      RETURN 1

50    NESC2=GNESC2
      RETURN 1
      END

```

C-----  
C SUBROTINA QUE CALCULA OS PERFIS

```

SUBROUTINE SUB4
COMMON/DADOS1/XAD,ZE,ZL,PP,NP,TOL,CPFRE,TN,DT,DO,DC,GE,R,RDB,WC,U
COMMON/DADOS2/PB0,PA0,TBO,TCO,S10,S20,S30,S40,GWC,GXA,GX2A,CAM
COMMON/DADOS3/GPA,PT,GTP,RWC,PEL,PWC,XA,FA,FB,XO,XF,VX,FT,GX1,GX2
COMMON/DADOS4/GX3,GX4,GX5,GX6,GX7,GX8,GTO,TO,GI,GZE,TCOA,S3OA
COMMON/DADOS5/CTEA,CTEB,CTEC,CTED,CBM,YF,KONA,VINT1,VINTF
COMMON/DADOS6/FX0,HV,GV,X1,AO,BO,FX,KTDET,KLDET,KS30
COMMON/CONTA1/ITB,NTB,PASSO,NPASS,NESC2,KONTA77,NESC10,KN1,NESC
COMMON/CONTA2/KKVIT,NTIPO,NTIPO1,KVIT,KEND,NRP,KK,K3,N,ICONT,KN2
COMMON/VETOR1/TBI(15),TCI(15),PAI(15),WCI(15),X(15),TM(15),VPM(15)
COMMON/VETOR2/DTM(15),TF(15),PMS2(15),VS2(30,15),Z(30),DELT(30,15)
COMMON/VETOR3/Y(10),C(4,10),CONV(30,15),TR(30,15),PTFR(30,15)
COMMON/VETOR4/F(10),PA(30,15),PPT(30,15),ZET(15),ZE1(30,15)
COMMON/VETOR5/VS3(30,15),KALT,KALT1,TCOAM,S3OAM,KJ,KZE,KIS30
COMMON/DADOS7/KTCF,GTCO,KFWC,KMWC,I

KFZE=0
IF ( NTIPO .NE. 3 ) GO TO 60
IF ( KFWC .EQ. 1 ) GO TO 60
WC=RWC
60    IF ( KALT .EQ. 1 ) GO TO 1
      IF ( KS30 .EQ. 1 ) GO TO 15
      IF ( KVIT .EQ. 2 ) GO TO 10
      S20=1
      GO TO 11
10    S20=0
11    IF ( KIS30 .EQ. 2 ) GO TO 16
      S30=1
      GO TO 16
15    IF ( KVIT .EQ. 2 ) GO TO 17
      S20=S30
      GO TO 16
17    S20=0
16    PT=PA0*(R+1.019)
      S10=0.
      S40=0.
      TO=0.
      XA=0.
      YF=1
      N=8
      X(1)=PA0
      X(2)=TCO+273.16
      X(3)=TBO+273.16

```

```

X(4)=PT
X(5)=S10
X(6)=S20
X(7)=S30
X(8)=S40
PB0=0.21*R*YF*PT/(YF+0.019+R*YF)
I=2
1   ICONT=0
    KZE1=0
4   CALL RKUTTA
    IF ( NTIPO .EQ. 3 ) GO TO 20
    IF ( NTIPO .NE. 2 ) GO TO 181
    GO TO 191
181  IF ( NTIPO .NE. 3 ) GO TO 189
191  IF ( NESC2 .NE. 2 ) GO TO 18
    IF ( KUIT .EQ. 1 ) GO TO 189
    ERRO=ABS(TO-ZE)
    IF ( ERRO .GT. 0.005 ) GO TO 18
    KZE1=1
    GO TO 3
20   IF ( KFWC .EQ. 1 ) GO TO 18
    IF ( KMWC .EQ. 1 ) GO TO 18
    ERRO=ABS(TO-PWC)
    IF ( ERRO .GT. 0.001 ) GO TO 18
    KMWC=1
    WC=-(GWC-RWC)
    IF ( KIS30 .EQ. 1 ) GO TO 25
    X(7)=1
25   WRITE(*,*) ' NOVO VALOR DE WC = ',WC
    GO TO 18
189  IF ( NESC2 .NE. 2 ) GO TO 18
    DCOMP=ABS(XA-XAD)
    IF ( DCOMP .GT. 0.0005 ) GO TO 18
    ZET(ITB)=TO
    KFZE=1
    GO TO 3
18   ICONT=ICONT+1
    IF ( ICONT - NPASS ) 2,3,3
2    GO TO 4
3    DELT(I,ITB)=(X(3)-273.16)-TBO
    TR(I,ITB)=(X(3)-273.16)
    PA(I,ITB)=X(1)
    CONV(I,ITB)=XA
    PTFR(I,ITB)=X(2)-273.16
    PPT(I,ITB)=X(4)
    VS2(I,ITB)=X(6)
    VS3(I,ITB)=X(7)
    XTZ=X(3)-273.16

```

C-----DETERMINACAO DOS PONTOS MAXIMOS

```

    IF ( I .EQ. 2 ) GO TO 9001
    IF ( ABS(VMS2) .GE. ABS(X(6)) ) GO TO 9002
9001  VMS2=X(6)
9002  IF( I .EQ. 2 ) GO TO 9026
    IF( PTM .GE. XTZ ) GO TO 778
9026  PTM=XTZ
    VVPM=X(1)

778  WRITE(*,*) ' XA = ',XA
    IF ( KFZE .EQ. 1 ) GO TO 50
    IF ( NTIPO .EQ. 3 ) GO TO 7

```

```

7      IF ( NESC2 .EQ. 2 ) GO TO 5
      Z(I)=TO
      I=I+1
      KJ=I-1
      IF ( KZE1 .EQ. 1 ) GO TO 50
      ERRO=ABS(TO-ZE)
      IF ( NTIPO .NE. 3 ) GO TO 61
      IF ( NESC2 .NE. 2 ) GO TO 61
      IF ( TO .LT. ZE ) GO TO 1
      GO TO 50
61     IF ( ERRO .GT. 0.001 ) GO TO 1
      GO TO 50
5      IF ( KLDET .EQ. 1 ) GO TO 7
      ZE1(I,ITB)=TO
      ZET(ITB)=ZET(ITB)+(PASSO*NPASS)
      DCOMP=ABS(XA-XAD)
      IF ( DCOMP .GT. 0.005 ) GO TO 6
      GO TO 50
6      I=I+1
      GO TO 1
50     TM(ITB)=PTM
      VPM(ITB)=VVPM
      PMS2(ITB)=VMS2
      IF ( NTIPO .NE. 3 ) RETURN
      WC=RWC
      KMWC=0
      RETURN
      END

```

C-----

C-----  
C  
C  
C

# SUBROUTINA QUE DETERMINA S30

SUBROUTINE SUB6(\*,\*)

```

COMMON/DADOS1/XAD,ZE,ZL,PP,NP,TOL,CPFRE,TN,DT,DO,DC,GE,R,RDB,WC,U
COMMON/DADOS2/PBO,PAO,TBO,TCO,S10,S20,S30,S40,GWC,GXA,GX2A,CAM
COMMON/DADOS3/GPA,PT,GTP,RWC,PEL,PWC,XA,FA,FB,XO,XF,VX,FT,GX1,GX2
COMMON/DADOS4/GX3,GX4,GX5,GX6,GX7,GX8,GTO,TO,GI,GZE,TCOA,S30A
COMMON/DADOS5/CTEA,CTEB,CTEC,CTED,CBM,YF,KONA,VINTI,VINTF
COMMON/DADOS6/FXO,HV,GV,X1,AO,BO,FX,KTDET,KLDET,KS30
COMMON/CONTA1/ITB,NTB,PASSO,NPASS,NESC2,KONTA77,NESC10,KN1,NESC
COMMON/CONTA2/KKVIT,NTIPO,NTIPO1,KVIT,KEND,NRP,KK,K3,N,ICONT,KN2
COMMON/VETOR1/TBI(15),TCI(15),PAI(15),WCI(15),X(15),TM(15),VPM(15)
COMMON/VETOR2/DTM(15),TF(15),PMS2(15),VS2(30,15),Z(30),DELT(30,15)
COMMON/VETOR3/Y(10),C(4,10),CONV(30,15),TR(30,15),PTFR(30,15)
COMMON/VETOR4/F(10),PA(30,15),PPT(30,15),ZET(15),ZE1(30,15)
COMMON/VETOR5/VS3(30,15),KALT,KALT1,TCOAM,S3OAM,KJ,KZE,KIS30
COMMON/DADOS7/KTCF,GTCO,KFWC,KMWC,I

```

```

161    KS30=1
      S30=-1000
      WRITE(*,*) ' VAI OBTER PERFIL PARA S30 = ',S30
3      CALL SUB4
      XO=-1000

```

```

      AO=-1000
      FA=1-X(7)
      S30=1000
      WRITE(*,*) ' VAI OBTER O PERFIL PARA S30 = ',S30
      CALL SUB4
4      XF=1000
      BO=1000
      FB=1-X(7)
      KN2=0
6      CALL SUBSP(*8,*9,*10)
C-----SAIDA DO RETURN 1 ( NAO CONSEGUIU ENCONTRAR S30 )
8      RETURN 2
C-----SAIDA DO RETURN 2 ( CONTINUA CALCULANDO O PERFIL COM NOVO S30 )
9      S30=VX
      WRITE(*,*) ' PERFIL DENTRO DE SUBSP COM S30 = ',S30
      CALL SUB4
5      FT=1-X(7)
      GO TO 6

C-----SAIDA DO RETURN 3 ( ENCONTROU S30 )

10     RETURN 1

      END

```

C-----

C-----

C  
C  
C           SUBROUTINA QUE DETERMINA To OU Tco

SUBROUTINE SUB7(\*,\*)

```

COMMON/DADOS1/XAD,ZE,ZL,PP,NP,TOL,CPFRE,TN,DT,DO,DC,GE,R,RDB,WC,U
COMMON/DADOS2/PBO,PAO,TBO,TCO,S10,S20,S30,S40,GWC,GXA,GX2A,CAM
COMMON/DADOS3/GPA,PT,GTP,RWC,PEL,PWC,XA,FA,FB,XO,XF,VX,FT,GX1,GX2
COMMON/DADOS4/GX3,GX4,GX5,GX6,GX7,GX8,GTO,TO,GI,GZE,TCOA,S3OA
COMMON/DADOS5/CTEA,CTEB,CTEC,CTED,CBM,YF,KONA,VINTI,VINTF
COMMON/DADOS6/FXO,HV,GV,X1,AO,BO,FX,KTDET,KLDET,KS30
COMMON/CONTA1/ITB,NTB,PASSO,NPASS,NESC2,KONTA77,NESC10,KN1,NESC
COMMON/CONTA2/KKVIT,NTIPO,NTIPO1,KVIT,KEND,NRP,KK,K3,N,ICON,KN2
COMMON/VETOR1/TBI(15),TCI(15),PAI(15),WCI(15),X(15),TM(15),VPM(15)
COMMON/VETOR2/DTM(15),TF(15),PMS2(15),VS2(30,15),Z(30),DELT(30,15)
COMMON/VETOR3/Y(10),C(4,10),CONV(30,15),TR(30,15),PTFR(30,15)
COMMON/VETOR4/F(10),PA(30,15),PPT(30,15),ZET(15),ZE1(30,15)
COMMON/VETOR5/VS3(30,15),KALT,KALT1,TCOAM,S3OAM,KJ,KZE,KIS30
COMMON/DADOS7/KTCF,GTCO,KFWC,KMWC,I

```

```

TCO=180
TBO=TCO
WRITE(*,*) ' VAI CALCULAR O PERFIL PARA TCO = ',TCO
CALL SUB4
XO=180
AO=180
IF ( KTCF .EQ. 0 ) GO TO 3
FA=GTCO-(X(2)-273.16)
GO TO 4

```

```

3      FA=XAD-XA
4      TCO=230
      TBO=TCO
10     WRITE(*,*) 'VAI CALCULAR O PERFIL PARA TCO = ',TCO
      CALL SUB4
8      XF=230
      BO=230
      IF ( KTCF .EQ. 0 ) GO TO 5
      FB=GTCO-(X(2)-273.16)
      GO TO 6
5      FB=XAD-XA
6      KN2=0
13     CALL SUBSP (*15,*16,*17)
C-----SAIDA 15 - ( STOP )
15     RETURN 2

```

```

C-----SAIDA 16 - ( CALCULO DO PERFIL COM NOVO TCO )
16     TCO=VX
      TBO=TCO
11     WRITE(*,*) 'PERFIL DENTRO DE SUBSP COM TCO = ',TCO
      CALL SUB4
      IF ( KTCF .EQ. 0 ) GO TO 12
      FT=GTCO-(X(2)-273.16)
      IF ( KLDET .EQ. 0 ) GO TO 13
      ERRO1=ABS((XA-XAD))
      IF ( XA .LT. XAD ) GO TO 20
      IF ( ERRO1 .GT. 0.01 ) RETURN 1
      GO TO 13
20     IF ( ERRO1 .GT. 0.05 ) RETURN 1
      GO TO 13
12     FT=XAD-XA
      GO TO 13

```

```

C-----SAIDA 17 ( DETERMINOU O VALOR DE TCO )
17     TCO=VX
      RETURN 1

```

END

C-----

C-----

C SUBROUTINA QUE CALCULA O COMPRIMENTO

SUBROUTINE SUB8(\*,\*)

```

COMMON/DADOS1/XAD,ZE,ZL,PP,NP,TOL,CPFRE,TN,DT,DO,DC,GE,R,RDB,WC,U
COMMON/DADOS2/PBO,PAO,TBO,TCO,S10,S20,S30,S40,GWC,GXA,GX2A,CAM
COMMON/DADOS3/GPA,PT,GTP,RWC,PEL,PWC,XA,FA,FB,XO,XF,VX,FT,GX1,GX2
COMMON/DADOS4/GX3,GX4,GX5,GX6,GX7,GX8,GTO,TO,GI,GZE,TCOA,S30A
COMMON/DADOS5/CTEA,CTEB,CTEC,CTED,CBM,YF,KONA,VINTI,VINTF
COMMON/DADOS6/FXO,HV,GV,X1,AO,BO,FX,KTDET,KLDET,KS30
COMMON/CONTA1/ITB,NTB,PASSO,NPASS,NESC2,KONTA77,NESC10,KN1,NESC
COMMON/CONTA2/KKVIT,NTIPO,NTIPO1,KVIT,KEND,NRP,KK,K3,N,ICONT,KN2
COMMON/VETOR1/TBI(15),TCI(15),PAI(15),WCI(15),X(15),TM(15),VPM(15)
COMMON/VETOR2/DTM(15),TF(15),PMS2(15),VS2(30,15),Z(30),DELT(30,15)
COMMON/VETOR3/Y(10),C(4,10),CONV(30,15),TR(30,15),PTFR(30,15)
COMMON/VETOR4/F(10),PA(30,15),PPT(30,15),ZET(15),ZE1(30,15)

```

COMMON/VETOR5/VS3(30,15),KALT,KALT1,TCOAM,S3OAM,KJ,KZE,KIS3O  
COMMON/DADOS7/KTCF,GTCO,KFWC,KMWC,I

```
KLDET=1
ZE=1
GZE=ZE
IF ( NTIPO .NE. 3 ) GO TO 1
IF ( NTIPO1 .EQ. 2 ) GO TO 1
IF ( NESC2 .NE. 2 ) GO TO 1
PWC=ZE*PEL
ZE=PWC
KLDET=0
KFWC=1
KTCF=1
WC=GWC*PEL
1  WRITE(*,*)' PERFIL COM ZE = ',ZE
   CALL SUB7(*21,*12)
21  IF ( NTIPO .NE. 3 ) GO TO 61
   IF ( NTIPO1 .EQ. 2 ) GO TO 61
   IF ( NESC2 .NE. 2 ) GO TO 61
   ZE=GZE
   KALT=1
   WC=-GWC*(1-RWC)
   WRITE(*,*)' VAI CONTINUAR CALCULANDO O PERFIL ATE Z = ',ZE
   CALL SUB4
61  GXO=1
   GAO=1
   GFA=XAD-XA
   ZE=3
   GZE=ZE
   IF ( NTIPO .NE. 3 ) GO TO 2
   IF ( NTIPO1 .EQ. 2 ) GO TO 2
   IF ( NESC2 .NE. 2 ) GO TO 2
   PWC=ZE*PEL
   ZE=PWC
   KALT=0
2  WRITE(*,*)' PERFIL COM ZE = ',ZE
   CALL SUB7(*22,*12)
22  IF ( NTIPO .NE. 3 ) GO TO 62
   IF ( NTIPO1 .EQ. 2 ) GO TO 62
   IF ( NESC2 .NE. 2 ) GO TO 62
   ZE=GZE
   KALT=1
   WC=-GWC*(1-RWC)
   CALL SUB4
62  GXF=3
   GBO=3
   GFB=XAD-XA
   XO=GXO
   XF=GXF
   AO=GAO
   BO=GB0
   FA=GFA
   FB=GFB
   KN2=0
27  CALL SUBSP(*12,*25,*26)
25  ZE=VX
   GVX=VX
   GGV=GV
   GHV=HV
   GFXO=FXO
```



```

GX1A=X1
GXO=XO
GAO=AO
GBO=BO
GZE=ZE
IF ( NTIPO .NE. 3 ) GO TO 3
IF ( NTIPO1 .EQ. 2 ) GO TO 3
IF ( NESC2 .NE. 2 ) GO TO 3
PWC=ZE*PEL
ZE=PWC
KALT=0
3  WRITE(*,*)' PERFIL COM ZE = ',ZE
   CALL SUB7(*23,*12)
23  IF ( NTIPO .NE. 3 ) GO TO 63
   IF ( NTIPO1 .EQ. 2 ) GO TO 63
   IF ( NESC2 .NE. 2 ) GO TO 63
   ZE=GZE
   KALT=1
   WC=-GWC*(1-RWC)
   CALL SUB4
63  FT=XAD-XA
   AO=GAO
   BO=GBO
   XO=GXO
   XF=GXF
   X1=GX1A
   VX=GVX
   GV=GGV
   HV=GHV
   FXO=GFXO
   FA=GFA
   FB=GFB
   KN2=1
   GO TO 27
26  WRITE(*,*)' DETERMINOU ZE = ',ZE
   WRITE(*,*)' TBO = ',TBO,' TCO = ',TCO
   ZE=VX
   GZE=ZE
   RETURN 1
12  RETURN 2

END

```

C-----

C-----

C  
C  
C            SUBROUTINA DO METODO DA FALSA POSICAO

```

SUBROUTINE SUBSP(*,*,*)
COMMON/DADOS1/XAD,ZE,ZL,PP,NP,TOL,CPFRE,TN,DT,DO,DC,GE,R,RDB,WC,U
COMMON/DADOS2/PBO,PAO,TBO,TCO,S10,S20,S30,S40,GWC,GXA,GX2A,CAM
COMMON/DADOS3/GPA,PT,GTP,RWC,PEL,PWC,XA,FA,FB,XO,XF,VX,FT,GX1,GX2
COMMON/DADOS4/GX3,GX4,GX5,GX6,GX7,GX8,GTO,TO,GI,GZE,TCOA,S3OA
COMMON/DADOS5/CTEA,CTEB,CTEC,CTED,CBM,YF,KONA,VINTI,VINTF
COMMON/DADOS6/FXO,HV,GV,X1,AO,BO,FX,KTDET,KLDET,KS3O
COMMON/CONTA1/ITB,NTB,PASSO,NPASS,NESC2,KONTA77,NESC10,KN1,NESC

```

```

COMMON/CONTA2/KKVIT,NTIPO,NTIPO1,KVIT,KEND,NRP,KK,K3,N,ICONT,KN2
COMMON/VETOR1/TBI(15),TCI(15),PAI(15),WCI(15),X(15),TM(15),VPM(15)
COMMON/VETOR2/DTM(15),TF(15),PMS2(15),VS2(30,15),Z(30),DELT(30,15)
COMMON/VETOR3/Y(10),C(4,10),CONV(30,15),TR(30,15),PTFR(30,15)
COMMON/VETOR4/F(10),PA(30,15),PPT(30,15),ZET(15),ZE1(30,15)
COMMON/VETOR5/VS3(30,15),KALT,KALT1,TCOAM,S3OAM,KJ,KZE,KIS3O
COMMON/DADOS7/KTCF,GTCO,KFWC,KMWC,I

```

```
TOL=0.001
```

```
IF ( KN2 .EQ. 1 ) GO TO 2
```

```
IF ( FA*FB .LT. 0 ) GO TO 1
```

```
WRITE(*,*) ' INTERVALO NAO SATISFAZ '
```

```
RETURN 1
```

```
1 FXO=FA
```

```
HV=FA
```

```
GV=FB
```

```
X1=(GV*AO-HV*BO)/(GV-HV)
```

```
VX=X1
```

```
KN2=1
```

```
RETURN 2
```

```
2 FX=FT
```

```
IF ( FA*FX .LT. 0 ) GO TO 3
```

```
AO=X1
```

```
HV=FX
```

```
IF ( FXO*FX .GT. 0 ) GV=GV/2
```

```
GO TO 4
```

```
3 BO=X1
```

```
GV=FX
```

```
IF ( FXO*FX .GT. 0 ) HV=HV/2
```

```
4 ERRO=ABS(X1-XO)
```

```
IF ( ERRO .LT. TOL ) GO TO 5
```

```
XO=X1
```

```
FXO=FX
```

```
X1=(GV*AO-HV*BO)/(GV-HV)
```

```
VX=X1
```

```
RETURN 2
```

```
5 WRITE(*,*)
```

```
RETURN 3
```

```
END
```

C-----

C-----

```

C SUBROUTINA FUNC PARA CALCULAR O VALOR DAS DERIVADAS DX(I)/DTB
C IE,F(I) PEDIDAS EM RKUTTA

```

```
SUBROUTINE FUNC
```

```

COMMON/DADOS1/XAD,ZE,ZL,PP,NP,TOL,CPFRE,TN,DT,DO,DC,GE,R,RDB,WC,U
COMMON/DADOS2/PBO,PAO,TBO,TCO,S10,S20,S30,S40,GWC,GXA,GX2A,CAM
COMMON/DADOS3/GPA,PT,GTP,RWC,PEL,PWC,XA,FA,FB,XO,XF,VX,FT,GX1,GX2
COMMON/DADOS4/GX3,GX4,GX5,GX6,GX7,GX8,GTO,TO,GI,GZE,TCOA,S3OA
COMMON/DADOS5/CTEA,CTEB,CTEC,CTED,CBM,YF,KONA,VINTI,VINTF
COMMON/DADOS6/FXO,HV,GV,X1,AO,BO,FX,KTDET,KLDET,KS3O

```

```

COMMON/CONTA1/ITB,NTB,PASSO,NPASS,NESC2,KONTA77,NESC10,KN1,NESC
COMMON/CONTA2/KKVIT,NTIPO,NTIPO1,KVIT,KEND,NRP,KK,K3,N,ICONT,KN2
COMMON/VETOR1/TBI(15),TCI(15),PAI(15),WCI(15),X(15),TM(15),VPM(15)
COMMON/VETOR2/DTM(15),TF(15),PMS2(15),VS2(30,15),Z(30),DELT(30,15)
COMMON/VETOR3/Y(10),C(4,10),CONV(30,15),TR(30,15),PTFR(30,15)
COMMON/VETOR4/F(10),PA(30,15),PPT(30,15),ZET(15),ZE1(30,15)
COMMON/VETOR5/VS3(30,15),KALT,KALT1,TCOAM,S3OAM,KJ,KZE,KIS3O
COMMON/DADOS7/KTCF,GTCO,KFWC,KMWC,I

```

C      CALCULO DE XK1,XK2,XK3,XK4,XK5

```

S1=X(5)
S2=X(6)
S3=X(7)
S4=X(8)
100 XA=(YF*X(4)-X(1)*YF*(1.019+R))/(X(4)+0.5*X(1))
XKD1=1.3395E6
XKD2=9.2685E7
XKD3=1.1928E-4
XKD4=7.0051E6
XE1=15745
XE2=21793
XQ=9347
XE4=13674
XRC=1.987
XK1=XKD1*EXP(-XE1/(XRC*X(3)))
XK2=XKD2*EXP(-XE2/(XRC*X(3)))
XK3=XKD3*EXP(XQ/(XRC*X(3)))
XK4=XKD4*EXP(-XE4/(XRC*X(3)))

```

C      CALCULO DE RS,RS1,RENDI

```

AUXL=(R+1.)
AUX1=2.*XK1*XK2*(.21*R*YF-.5*XA)*(YF-XA)
AUX2=XK1*(YF-XA)*(YF+R*YF+1.9E-2+.5*XA)/X(4)
AUX3=2.*XK2*(.21*R*YF-.5*XA)*(YF+R*YF+1.9E-2+.5*XA)/X(4)
AUX4=XK4*XK3*XA*(XA+1.9E-2)
AUX5=XK1*XK3*XA*(YF-XA)
RS=AUX1*AUXL/(AUX2+AUX3+AUX4+AUX5)

```

```

CTEK=RS/X(1)/PBO
CTEKO=CTEK/EXP(-XE1/(XRC*X(3)))

```

```

IF (XA.EQ.0.) RENDG=1.
RS1=CTEKO*EXP(-XE1/(XRC*X(3)))*X(1)*PBO

```

C      CALCULO DO CP DO AR E DO COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA  
C      DE CALOR U

```

XTZ=X(3)-273.16
XDP=1.35*DC
XTR=1.8*X(3)
XDPE=3.2808*XDP
XDTE=3.2808*DT
XGEF=0.2048*GE
XCPJ=28.94+.4147E-2*XTZ+.3191E-5*XTZ**2.-1.965E-9*XTZ**3.
XKGE=EXP(-9.6240+.8641*ALOG(XTR))
XCP=.0083*XCPJ
XKAE=EXP(-.7618+.3695*ALOG(XTR))
XKCE=EXP(5.675-.075*ALOG(XTR))

```

```

XKA=2.6788*XKAE
XV=-0.0382+.0061*X(3)**.5
XVE=.0720*XV
XNRE=XDP*GE/XV
XFNRE=XNRE**.7
XHCE=3.5*XKGE*EXP(-4.6*XDP/DT)*XFNRE/XDTE
XKC=4.8325*XHCE
XHS=DO*ALOG(DO/DT)/(2.*XKA)
XHO=2500
XUI=1./XKC+XHS+1./XHO
U=1./XUI

```

C      CALCULO DE F(1),F(3),F(4)

```

XDELH1=-41.44E3/(R+1)
XPOMO=(R*28.85+46.08)/(R+1.)
TBOK=TBO+273.16
COR=((1.019+R)*(X(4)+0.5*X(1))+0.5*(X(4)-X(1)*(1.019+R)))
COR1=((X(4)+0.5*X(1))*2)/COR
COR2=F(4)*X(1)*(0.5+1.019+R)/COR
10      CTEA=(RDB*XPOMO*PBO*COR1)/GE
11      CTEB=(-XDELH1*RDB*PBO)/(GE*XCP)
CTEC=(4*U)/(GE*XCP*DT)
CTED=(3.1415926*DT*TN*U)/(WC*CPFRE)
CAM=7924.006039
CBM=ALOG(CTEKO)
F(1)=-CTEA*X(1)*EXP((-CAM/X(3))+CBM)+COR2
F(3)=CTEB*X(1)*EXP((-CAM/X(3))+CBM)-CTEC*(X(3)-X(2))
F(2)=CTED*(X(3)-X(2))
XE=.61
XR=.08205
XF1=(1.75+150.*(1.-XE)/XNRE)*(1.-XE)/(XE**3.)
XRD=XPOMO*X(4)/(XR*X(3))
F(4)=-7.615E-13*XF1*GE**2./(XRD*XDP)
AUX1S1=-CTEA*(X(4)+.5*X(1))*2*EXP(CBM-CAM/X(3))/(X(4)*(1.519+R))
AUX2S1=S1+CAM*X(1)*S2/(X(3)**2)+X(1)*(2*(S4+.5*S1)/(X(4)+.5*X(1))
*-3*S4/X(4))
AUX3LS1=-7.615E-13*(1.-XE)*GE**2/(XE**3*XDP)
AUX3S1=X(1)/X(4)*AUX3LS1
AUX4S1=0.4575*(1.-XE)*S2/(XDP*GE*X(3)**0.5*XRD)+(1.75+150*(1.-XE)/
*XNRE)*XPOMO/XR*(S4/X(3)-X(4)*S2/(X(3)**2))
AUX5S1=F(4)*(S1/X(4)-X(1)*S4/(X(4)**2))
F(5)=AUX1S1*AUX2S1+AUX3S1*AUX4S1+AUX5S1
AUX1S2=CTEB*EXP(CBM-CAM/X(3))
AUX2S2=3.44201E-5+5.29706E-8*XTZ-4.89285E-11*XTZ**2
AUX3S2=CAM*X(1)*S2/(X(3)**2)+S1+X(1)*(S4/X(4)-AUX2S2*S2/XCP)
AUX4S2=S2-S3+(X(3)-X(2))*S2*(XHS*0.3695/XTR+((0.8641/XTR-0.002153
**XNRE)/(X(3)**0.5*XDP*GE))/XKC)-AUX2S2/XCP)
F(6)=AUX1S2*AUX3S2-CTEC*AUX4S2
AUX1S3=(XHS*.3695/XTR+(.8641/XTR-0.002135*XNRE)/(X(3)**.5*XDP*GE))
*/XKC)*(X(3)-X(2))*S2
F(7)=CTED*(S2-S3+AUX1S3)
F(8)=AUX3LS1*AUX4S1
RETURN
END

```

C-----

C      SUBROUTINA RKUTTA

C SUBROUTINA QUE PROGRAMA O METODO DE RUNGE-KUTTA PARA RESOLVER  
C SISTEMA DE EQUACOES DIFERENCIAIS ORDINARIAS DE PRIMEIRA ORDEM

C PARAMETROS : TO=VARIABEL INDEPENDENTE  
C PASSO= PASSO DE INTEGRACAO  
C N= NUMERO DE EQUACOES DIFERENCIAIS  
C X(I)= VARIABEIS DEPENDENTES  
C F(I)= VALORES DAS FUNCOES DX(I)/DTO  
C

C ESTA SUBROTINA DEVE SER CHAMADA A CADA INCREMENTO, POIS ELA  
C RETORNA AO PROGRAMA PRINCIPAL A CADA PASSO DE INTEGRACAO COM OS  
C NOVOS VALORES DE TO E X(I) NO PASSO SEGUINTE.

SUBROUTINE RKUTTA

COMMON/DADOS1/XAD,ZE,ZL,PP,NP,TOL,CPFRE,TN,DT,DO,DC,GE,R,RDB,WC,U  
COMMON/DADOS2/PBO,PAO,TBO,TCO,S10,S20,S30,S40,GWC,GXA,GX2A,CAM  
COMMON/DADOS3/GPA,PT,GTP,RWC,PEL,PWC,XA,FA,FB,XO,XF,VX,FT,GX1,GX2  
COMMON/DADOS4/GX3,GX4,GX5,GX6,GX7,GX8,GTO,TO,G1,GZE,TCOA,S3OA  
COMMON/DADOS5/CTEA,CTEB,CTEC,CTED,CBM,YF,KONA,VINTI,VINTF  
COMMON/DADOS6/FXO,HV,GV,X1,AO,BO,FX,KTDET,KLDET,KS30  
COMMON/CONTA2/KKVIT,NTIPO,NTIPO1,KVIT,KEND,NRP,KK,K3,N,ICONT,KN2  
COMMON/VETOR1/TBI(15),TCI(15),PAI(15),WCI(15),X(15),TM(15),VPM(15)  
COMMON/VETOR2/DTM(15),TF(15),PMS2(15),VS2(30,15),Z(30),DELT(30,15)  
COMMON/VETOR3/Y(10),C(4,10),CONV(30,15),TR(30,15),PTFR(30,15)  
COMMON/VETOR4/F(10),PA(30,15),PPT(30,15),ZET(15),ZE1(30,15)  
COMMON/VETOR5/VS3(30,15),KALT,KALT1,TCOAM,S3OAM,KJ,KZE,KIS30  
COMMON/DADOS7/KTCF,GTCT,KFWC,KMWC,I

DO 10 II=1,N  
Y(II)=X(II)  
10 CONTINUE  
T1=TO  
CALL FUNC  
DO 20 II=1,N  
C(1,II)=PASSO\*F(II)  
X(II)=X(II)+C(1,II)/2.  
20 CONTINUE  
TO=TO+PASSO/2.  
CALL FUNC  
DO 30 II=1,N  
C(2,II)=PASSO\*F(II)  
X(II)=Y(II)+C(2,II)/2.  
30 CONTINUE  
CALL FUNC  
DO 40 II=1,N  
C(3,II)=PASSO\*F(II)  
X(II)=Y(II)+C(3,II)  
40 CONTINUE

C DEFINICAO DA VARIABEL INDEPENDENTE PARA O PROXIMO PASSO  
C T = T + DELTAT

TO=T1+PASSO  
CALL FUNC  
DO 50 II=1,N

C(4,II)=PASSO\*F(II)

C     DEFINICAO DAS VARIAVEIS DEPENDENTES X(I) PARA O PROXIMO PASSO

X(II)=Y(II)+(C(1,II)+2.\*C(2,II)+2.\*C(3,II)+C(4,II))/6.

50     CONTINUE

       RETURN

       END

C-----

## ABSTRACT

The viability of many industrial process depends on adequate heat transfer so that high performance and stable operation can be achieved. To do that it is necessary to have procedures to take decisions related to design and operation.

In the work it is proposed stability evaluation of fixed bed catalytic reactor with highly exothermic reactions. As a case study the oxidation of ethanol to acetaldehyde over Fe-Mo catalyst is considered.

It is shown that through the definition of parametric sensitivity coefficients and their incorporation with the model equations is possible to have information on process design and operational policy so that high performance and stable operation can be guaranteed.

Generally in the design of chemical reactor, two of the main goals are to guarantee a safe operation and to minimize the reactor length. Therefore, these concepts are used here as criteria for comparing the performance between the possible cooling-medium flow arrangements.

Different coolant-flow schemes are compared in light of parametric sensitivity coefficients. The results obtained show the advantages of the cocurrent arrangement.