

ANÁLISE DA VIABILIDADE DO USO DE MICRORREATORES EM LEITO FLUIDIZADO PARA SÍNTESE DO METANOL

Glaúcia F. Miranda¹; Harrson S. SANTANA²; João L. SILVA JR.³

RESUMO

O objetivo geral do projeto é avaliar a viabilidade do uso de microrreatores em leito de lama em microescala pelo desenvolvimento e implementação de um modelo matemático tridimensional, que prediga as principais características do escoamento, usando a técnica de fluidodinâmica computacional. Demonstrou-se a inviabilidade do uso de microrreatores em leito fluidizado, no entanto, foi proposto e avaliado inicialmente o uso de microrreatores em leito fixo. Estes últimos apresentaram índice de mistura em torno de 70%, necessitando otimizações adicionais. O modelo matemático proposto conseguiu prever o padrão de mistura das espécies químicas ao longo das geometrias analisadas, servindo como uma ferramenta de projeto e otimização de microcanais.

Palavras-chave:

Microrreatores, fluidodinâmica computacional, síntese de metanol.

1. INTRODUÇÃO

A microfluidica é uma área da ciência que estuda o comportamento dos fluidos com dimensões micrométricas. Os microdispositivos, entre eles os microrreatores, apresentam como vantagens a melhoria das características de transferência de massa e de calor, alta razão área superficial/volume, entre outras. Eles necessitam de menor quantidade de reagentes e catalizadores, produzindo menor quantidade de resíduos em comparação a reatores em escala convencional.

A técnica de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) se apresenta como um instrumento interessante, em que os equipamentos devem ser projetados de modo otimizado, a fim de se obter um processo eficiente. Essa é uma técnica de análise sofisticada, que consiste na simulação das características do escoamento em geometrias tridimensionais. Entre algumas de suas vantagens, têm-se a redução no tempo e nos custos em projetos, predição de propriedades em condições operacionais severas e o grande detalhamento do campo de escoamento. O projeto tem por objetivo analisar a viabilidade do uso de microrreatores em leito de lama em microescala pelo desenvolvimento e implementação de um modelo matemático tridimensional, que prediga as principais características do escoamento, usando a técnica de fluidodinâmica computacional.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A redução na dimensão dos reatores melhora as características de transferência de massa e

1 Iniciação Científica, IFSULDEMINAS – Campus Pouso Alegre. E-mail: glauciamiranda1@hotmail.com

2 Colaborador Externo – Faculdade de Engenharia Química/UNICAMP. E-mail: harrison.santana@gmail.com.

3 Orientador, IFSULDEMINAS – Campus Pouso Alegre. E-mail: joao.lameu@ifsulde Minas.edu.br

calor, permitindo um controle mais acurado das condições do processo, devido à resposta dinâmica mais rápida (KUKARD e SMITH, 2015). Esta condição melhorada de controle das condições reacionais frequentemente resulta na otimização da conversão e seletividade (WATTS *et al.*, 2005). No entanto, pode influenciar negativamente o sistema, pela diminuição nas taxas de mistura, devido aos efeitos de atrito viscoso. Em adição, as dimensões dos microrreatores tornam o escoamento não possível para reações com impregnação de resíduos nas partículas sólidas como na formação de coque (KUKARD e SMITH, 2015), que rapidamente entopem os microcanais e necessitam frequentemente de parada e limpeza. Por esta razão, microrreatores usados em reações deste tipo são quase que exclusivamente operados em batelada. Hidrogenação catalítica é o processo usado na síntese de metanol (BAKHTIARY-DAVIJANY *et al.* 2011). Reações deste tipo envolvem três fases, o gás fonte do hidrogênio, o catalisador que promove a reação química e os reagentes em fase líquida que também suportam a distribuição do catalisador pelo reator. A importância relativa das etapas individuais depende do tipo do contato entre as fases promovido pelo reator, por isso a sua escolha é de grande importância para o bom desempenho. Neste tipo de reação química, um ponto fundamental é a definição do processo como controlado pela difusão mássica (difusão molecular é a etapa lenta) ou pela cinética química (reação na superfície do catalisador é a etapa determinante). Em reações de hidrogenação controladas pela difusão, o tempo de reação deve ser maior e não é possível estudar os mecanismos cinéticos em reatores do tipo batelada, mesmo em altas velocidades de agitação. BAKHTIARY-DAVIJANY *et al.* (2011) desenvolveram unidade integrada de microrreator em leito fixo com trocador de calor para síntese de metanol com catalisador Cu/ZnO/Al₂O₃ em condições operacionais industriais (523 K, 80 bar). Boa conversão foi observada para baixos tempos de contato entre as fases, bem como capacidade superior de remoção de calor. Em adição, condições praticamente isobáricas foram observadas no meio reacional. Os autores concluíram que a microunidade representa perspectivas futuras promissoras para a intensificação e miniaturização do processo de síntese de metanol. Neste contexto, ressalta-se a necessidade de mais investigações detalhadas para o desenvolvimento de reatores contínuos aplicados aos processos com gás de síntese, com ênfase na síntese de metanol.

3. MATERIAL E MÉTODOS

Para realização do projeto de pesquisa, será necessário a utilização de um computador com configuração mínima de processador i7 de 3GHz, 8GB de RAM, 1TB de disco rígido.

A metodologia usada na análise é fundamentada na técnica CFD, esta se divide em etapas, primeiramente define a geometria a ser estudada, passando pela etapa de geração da malha numérica, definição das propriedades físicas do sistema, das condições iniciais e de contorno, da

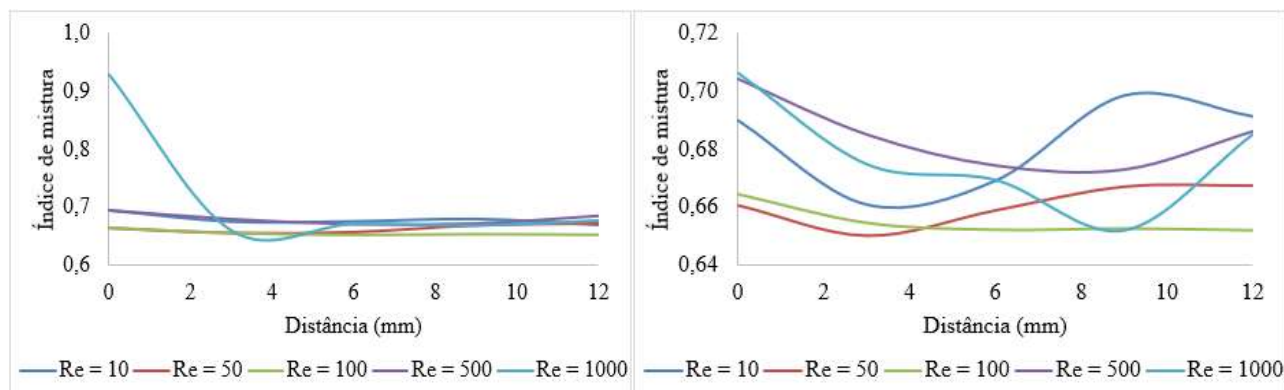
modelagem matemática e dos esquemas numéricos. A segunda etapa consiste na solução da simulação. E por fim, o tratamento e interpretação dos dados obtidos na solução do caso simulado. O parâmetro índice de mistura foi usado para avaliar o desempenho dos microcanais, este parâmetro fornece a medida estatística de uniformidade de distribuição da espécie química em uma seção normal ao escoamento, sendo 0 para a condição de mistura mínima (segregação total dos reagentes) e 1 para a condição de mistura perfeita.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Inicialmente, a viabilidade do micro-leito fluidizado foi avaliada variando a velocidade superficial do gás entre 0,1 e 1,087 m/s, correspondente à vazão volumétrica de gás de síntese de aproximadamente 1,2 à 12,2 L/h. Para todos os casos simulados, a lama foi arrastada para fora do leito. Isto é justificado pelo padrão do escoamento gás-líquido em microcanais. A formação dos slugs ocupando praticamente toda a área da seção resulta no arraste da fase líquida-sólida (lama), a qual deveria operar em batelada para fora do microcanal. Isto resulta na inviabilidade do uso deste tipo de microdispositivo para realização de processos catalíticos gás-líquido-sólido para a faixa de vazão avaliada. Para superar este problema, propõem-se a utilização de microcanais com leito fixo.

Neste tipo de microdispositivo, a fase sólida particulada é fixada em uma região, então as fases fluidas escoam realizando os processos de transferência de massa, calor e reações químicas. Um microleito fixo com 12 mm de comprimento e diâmetro e 1 mm com entrada em Y, geometria comum de microcanais, foi avaliado pelo índice de mistura dos reagentes (hidrogênio e monóxido de carbono) do gás de síntese para a faixa de escoamento com número de Reynolds de 10 a 1000 (com base na vazão total e diâmetro de entrada do microleito). A Figura 1 apresenta estes resultados. Pela Figura 1 pode-se observar que para a faixa de Reynolds de 10-500, o hidrogênio apresentou um índice de mistura praticamente constante ao longo do leito fixo. Para $Re = 1000$, um alto índice de mistura foi obtido logo no início do leito, apresentando uma diminuição ao longo do leito. Isto pode ser atribuído a alta velocidade do gás nesta condição, levando a zonas de recirculação logo na entrada do leito, devido a dissipação de quantidade de movimento pela diminuição da área efetiva ao escoamento (presença das partículas). Para o monóxido de carbono o índice de mistura apresenta uma variação ao longo do leito para toda a faixa de Reynolds observada. Estas variações podem ser atribuídas pelos padrões de escoamento inerentes do sistema gás-líquido. Para ambas as espécies avaliadas, nota-se que o índice de mistura fica próximo a 0,7, indicando que existe a possibilidade de otimização da geometria visando atingir valores mais próximos a 1,0 (mistura perfeita), o que consequentemente otimizaria a operação nos casos com reação química.

Figura 1: Índice de mistura ao longo do reator para o H₂ (a esquerda) e para o CO (a direita).



5. CONCLUSÕES

Levando em conta os resultados obtidos não é viável trabalhar com microrreatores em leito fluidizado, sendo então necessário o uso de leitos fixos. Dessa forma foi proposta a utilização de leito fixo. Este último ainda requer otimização para se alcançar o máximo índice de mistura (perfeita). Estas etapas estão sendo desenvolvidas em outros projetos. O modelo matemático proposto conseguiu prever o padrão de mistura das espécies químicas ao longo das geometrias analisadas, servindo como uma ferramenta de projeto e otimização de microcanais.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Os autores agradecem o apoio do IFSULDEMINAS/Pouso Alegre (Edital 07/2017) e a FAPEMIG (Processo TEC-APQ-02144-17).

REFERÊNCIAS

- BAKHTIARY-DAVIJANY, H.; HAYER, F.; PHAN, X.K.; MYRSTAD, R.; VENVIK, H.J.; PFEIFER, P.; HOLMEN, A. Characteristics of an Integrated Micro Packed Bed Reactor-Heat Exchanger for methanol synthesis from syngas. **Chem Eng J**, 167, 496-503, 2011.
- KUKARD, R.S.; SMITH, K.J. Slurry-Phase Batch Microreactor for Hydroconversion Studies. **Energy & Fuels**, 29, 5274-5281, 2015.
- WATTS, P.; HASWELL, S. J. The application of micro reactors for organic synthesis. **Chem Soc Rev**, 34, 235-246, 2005.