

# ESTIMAÇÃO DO VALOR DO COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE CALOR E DA TEMPERATURA DO ÓLEO TÉRMICO EM REATOR DO TIPO BATELADA ALIMENTADA

## ESTIMATION OF THE VALUE OF THE GLOBAL HEAT TRANSFER COEFFICIENT AND THERMAL OIL TEMPERATURE IN A REACTOR OF THE BATTED FED TYPE

**LEO KUNIGK**

Centro Universitário do Instituto Mauá de Tecnologia. E-mail: kunigk@maua.br

**RONALD CUELLAR HURTADO JÚNIOR**

Centro Universitário do Instituto Mauá de Tecnologia. E-mail: ronald.hurtado@hotmail.com

**TIAGO XAVIER**

Centro Universitário do Instituto Mauá de Tecnologia. E-mail: tiago.xaviert@gmail.com

**RUBENS GEDRAITE**

Universidade Federal de Uberlândia. E-mail: rgedraite@gmail.com

**Envio em:** Novembro de 2016

**Aceite em:** Abril de 2017

## RESUMO

O processo típico de produção de resina acrílica consiste em carregar previamente o reator com sol-vente orgânico, aquecer até a temperatura de reação, por volta de 150 °C, e então iniciar a transferência simultânea de monômero e iniciador com vazão controlada. Normalmente, alguns minutos após iniciada a transferência, tem início a reação exotérmica. O aquecimento e resfriamento do reator na maioria das aplicações são feitos através da circulação de fluido térmico quente (300 °C) e/ou frio (60 °C) na serpentina do reator. O controle da temperatura do reator é feito modulando a vazão do fluido de aquecimento. As temperaturas da massa reacional e do fluido térmico apresentam significativa oscilação durante a etapa inicial de aquecimento, podendo provocar trincas no material de construção da jaqueta de aquecimento. O conhecimento do valor efetivo do coeficiente global de transporte de calor é muito importante para permitir o adequado e eficiente controle do processo. O problema estudado neste trabalho consistiu no cálculo do valor do coeficiente global de transporte de calor para reatores de geometria cilíndrica, equipado com serpentina de aquecimento do tipo meia-cana. O valor obtido para esta propriedade de transporte foi validado por meio da comparação entre os valores da temperatura da massa reacional correspondentes à etapa inicial de aquecimento, medidos experimentalmente e disponíveis na literatura, e os respectivos valores obtidos por simulação computacional. A comparação foi feita com base em modelo matemático simplificado, a parâmetros concentrados, que representou de forma adequada e coerente o comportamento da temperatura da massa reacional em função do tempo. Os resultados obtidos sugerem que o erro cometido é inferior a 1% e, portanto, não significativo para fins de controle de processos.

**Palavras-Chave:** Reator polimerização. Modelo matemático invertido. Coeficiente global de transporte de calor. Identificação.

## ABSTRACT

*The typical acrylic resin production process consists of pre-loading the reactor with organic solvent, heating to the reaction temperature, around 150 °C, and then initiating the simultaneous transfer of controlled flow monomer and initiator. Usually, a few minutes after the initiation of the transfer, the exothermic reaction begins. Heating and cooling of the reactor in most applications is done by circulating hot (300°C) and / or cold (60°C) thermal fluid in the reactor coil. The temperature control of the reactor is done by modulating the flow of the heating fluid. The temperatures of the reaction mass and the thermal fluid exhibit significant oscillation during the initial heating step, which can cause cracking in the heating jacket construction material. The knowledge of the effective value of the global coefficient of heat transport is very important to allow adequate and efficient control of the process. The problem studied in this work was the calculation of the value of the global coefficient of heat transport for cylindrical geometry reactors, equipped with half-cane-type heating coils. The value obtained for this transport property was validated by comparing the values of the reaction mass temperature corresponding to the initial heating stage, measured experimentally and available in the literature, and the respective values obtained by computational simulation. The comparison was made on the basis of a simplified mathematical model, the concentrated parameters, which adequately and coherently represented the temperature behavior of the reaction mass as a function of time. The results obtained suggest that the error is less than 1% and therefore not significant for process control purposes.*

**Keywords:** *Polymerization reactor. Inverted mathematical model. Global coefficient of heat transfer. Identification.*

## 1 - INTRODUÇÃO

No contexto da engenharia química, a determinação do comportamento temporal da temperatura desejada para o óleo térmico representa uma etapa de extrema importância para fins de projeto do sistema de controle. De maneira geral, este comportamento depende do conceito do coeficiente global de transferência de calor, o qual é apresentado na significativa maioria dos textos como uma forma a sistematizar as diferentes resistências térmicas equivalentes existentes num processo de troca de calor (Bird *et al.* 2007; Incropera; Witt, 2002; Welty *et al.*, 2008). Além disso, este coeficiente é uma variável importante no que tange o tempo de vida do equipamento e de sua atual condição operacional. Isto porque a operação normal pode provocar a alteração das superfícies de troca de calor tanto do fluido frio quanto do fluido quente. Estas alterações são normalmente devidas às incrustações que ocorrem na superfície dos tubos ou chapas, tanto no contato do fluido quente quanto no do fluido frio, atuando como uma resistência térmica adicional no processo de troca (INCROPERA; WITT, 2002; WELTY *et al.*, 2008). Neste cenário, a determinação do coeficiente global de transferência, além de outros usos, visa aumentar a vida útil de equipamentos, haja vista que variações bruscas de ciclo térmico causam sérios danos às serpentinas do reator (GEDRAITE *et al.*, 2011).

Diante do que foi apresentado, o presente trabalho

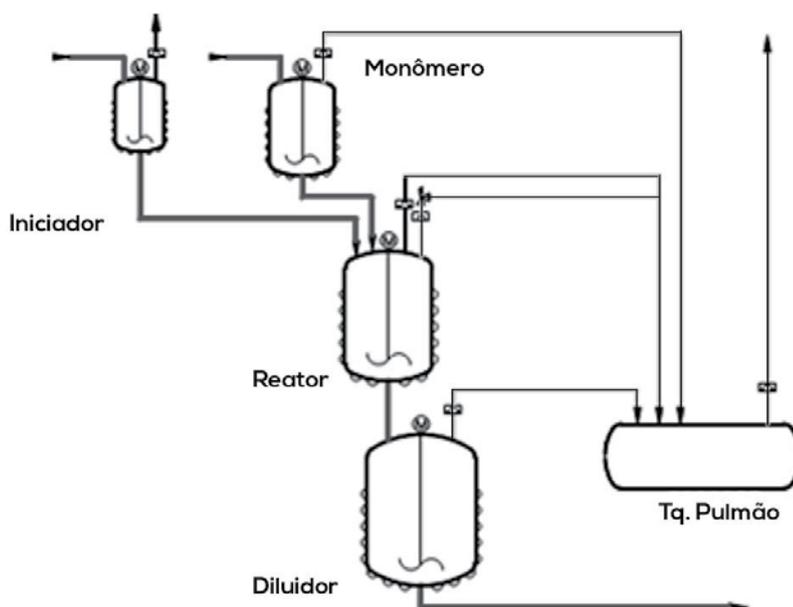
tem por objetivo apresentar a metodologia adotada para o cálculo em tempo real do valor da temperatura de entrada do óleo térmico e do valor do coeficiente global de troca térmica em um reator de polimerização do tipo batelada alimentada. Para essa finalidade são empregados resultados experimentais reais do comportamento da temperatura da massa reacional e da temperatura do óleo térmico em um reator em escala piloto.

O processo tradicional para a produção de resina acrílica consiste em inicialmente carregar o reator com solvente orgânico, promover o aquecimento deste até a temperatura de reação, 150 °C, e então iniciar a transferência simultânea de monômero e de iniciador sob vazão controlada visando o início da reação de polimerização propriamente dita. Tipicamente, decorridos alguns minutos após a transferência do monômero e do iniciador tem-se início a fase de reação exotérmica.

O fluxograma simplificado apresentado na Figura 1 ilustra este processo, o qual é chamado de “dual feeding”, porque o monômero e o iniciador ficam em tanques separados e são transferidos simultaneamente ao reator com vazão controlada (MILAN, 2010).

As etapas de aquecimento e de resfriamento do reator são realizadas através da circulação de fluido térmico quente (300 °C) e/ou frio (60 °C) na serpentina meia-cana do reator. O controle da temperatura do reator é feito por meio de malhas de controle das temperaturas da massa reacional e do óleo térmico com atuação sobre a vazão de óleo térmico quente/frio alimentado ao sistema.

**Figura 1** – Fluxograma simplificado do processo estudado.



Fonte: (MILAN, 2010).

## 2 METODOLOGIA

### 2.1 ESTRATÉGIAS PARA DETERMINAÇÃO DO COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR E RESPECTIVA VALIDAÇÃO

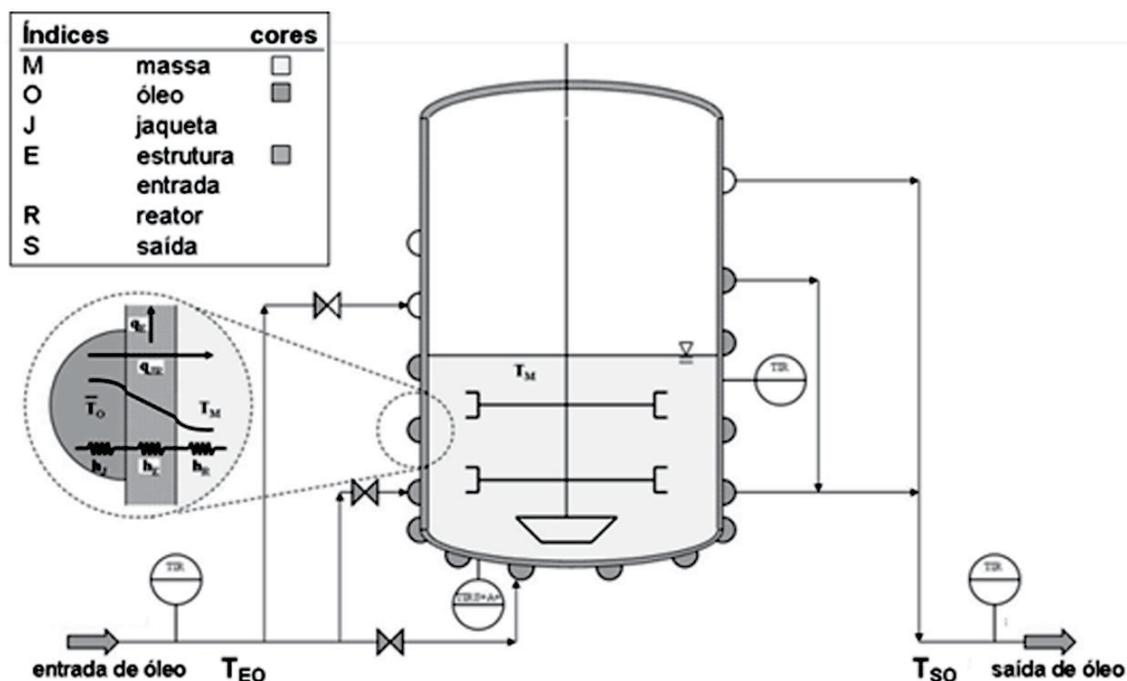
A determinação analítica do valor do coeficiente global de calor  $U \cdot A_{JR}$  consistiu em aplicar a metodologia proposta em VDI Heat Atlas (2010), a qual estabelece que o cálculo do coeficiente global de transporte de calor em reatores agitados e equipados com serpentina meia-cana deve ser feito dividindo-se a geometria do vaso em diferentes seções, a saber: interior do vaso, paredes e serpentina meia-cana. Foi encontrado para o coeficiente global de transporte de calor  $U \cdot A_{JR}$  o valor aproximado de 1.231,35 W/m<sup>2</sup>·K. (QUEIRÓZ; GEDRAITE, 2013).

A determinação experimental do valor do coeficiente global de transporte de calor  $U \cdot A_{JR}$  consistiu em aplicar equações de balanço de energia para o lado da jaqueta "meia cana", considerando as premissas apresentadas por Dhotre et al. (2006). De acordo com os autores citados, foram adotadas as seguintes hipóteses simplificadoras: (a)- sistema adiabático; (b)- acúmulo de energia nas paredes do reator desprezível; (c)- temperatura homogênea e uniforme da massa do reator e (d)- jaqueta meia cana completamente preenchida. A massa reacional de solvente orgânico utilizada neste trabalho (M) foi

igual a 1.950 kg e o calor específico correspondente igual a ( $CP_M$ ) 1.033 J/kg·K. Milan (2010) realizou experimentos destinados a calcular empiricamente o valor de  $U \cdot A_{JR}$  em virtude das significativas incertezas que poderiam afetar a sua determinação analítica (Subramanian; Mjalli, 2008). As seguintes variáveis de processo foram medidas ao longo dos experimentos: (i)- temperatura de entrada do óleo térmico ( $T_{EO}$ ); (ii)- temperatura de saída do óleo térmico ( $T_{SO}$ ) e (iii)- temperatura da massa dentro do reator ( $T_M$ ). Os experimentos foram realizados na instalação industrial onde o reator está instalado. A duração dos experimentos foi de aproximadamente 90 minutos. Antes do efetivo início do experimento, as temperaturas da massa reacional e do fluido térmico foram equalizadas. A seguir, foram geradas mudanças bruscas em grau na temperatura de entrada de fluido térmico ( $T_{EO}$ ), por meio do aumento brusco do respectivo valor de set-point com amplitudes iguais a 10°C, 20°C, 40°C e 60°C. A temperatura de entrada do óleo foi mantida constante e igual ao valor final da transição até o final do experimento. As variáveis de processo anteriormente citadas tiveram os respectivos valores registrados pelo sistema digital de controle existente na unidade industrial estudada com frequência de amostragem de 30 segundos.

A configuração do reator é apresentada na Figura 2. Cumpre ressaltar o fato de que o equipamento foi operado com aproximadamente 1/3 de seu volume preenchido.

Figura 2 – Configuração esquemática do reator estudado



Fonte: (MILAN, 2010).

O reator possui três segmentos independentes de jaqueta “meia cana”, utilizados acordo com o volume de massa reacional contida em seu interior. A escolha do número de segmentos é feita por meio de válvulas de bloqueio do tipo liga-desliga, que permitem ou não o estabelecimento da circulação de óleo térmico (MILAN, 2010).

Ao longo do período de duração dos experimentos, foram calculados os incrementos de temperatura da massa reacional visando determinar a energia absorvida pelo meio durante cada intervalo de tempo considerado (CHOPEY, 2006).

Com base nos experimentos realizados, Milan (2010) encontrou para o coeficiente global de transporte de calor  $U \cdot A_{JR}$  o valor aproximado de 1.144,20 W/m<sup>2</sup>.K. A validação do valor encontrado para  $U \cdot A_{JR}$  foi feita com base na comparação entre o comportamento temporal da temperatura da massa reacional medida experimen-

talmente e o simulado com base em modelo matemático proposto por Milan (2010).

O modelo matemático proposto por Milan (2010) – denominado de modelo direto – foi desenvolvido com base na equação de balanço global de energia aplicada ao volume de controle definido pelo volume útil do reator propriamente dito, dado que a etapa de processo estudada foi a de aquecimento inicial da massa de solvente carregada no reator, durante a qual a mesma permanece constante. Foi considerado que o volume de controle definido pela serpentina de aquecimento é adiabático e que todo o calor posto em jogo é transferido para o meio reacional. O calor recebido pela massa reacional no interior do reator foi modelado com base na Eq. (1), que é o balanço global de energia aplicado ao meio reacional propriamente dito. O modelo matemático desenvolvido foi implementado no ambiente Simulink® do aplicativo Matlab® (MILAN et al., 2013).

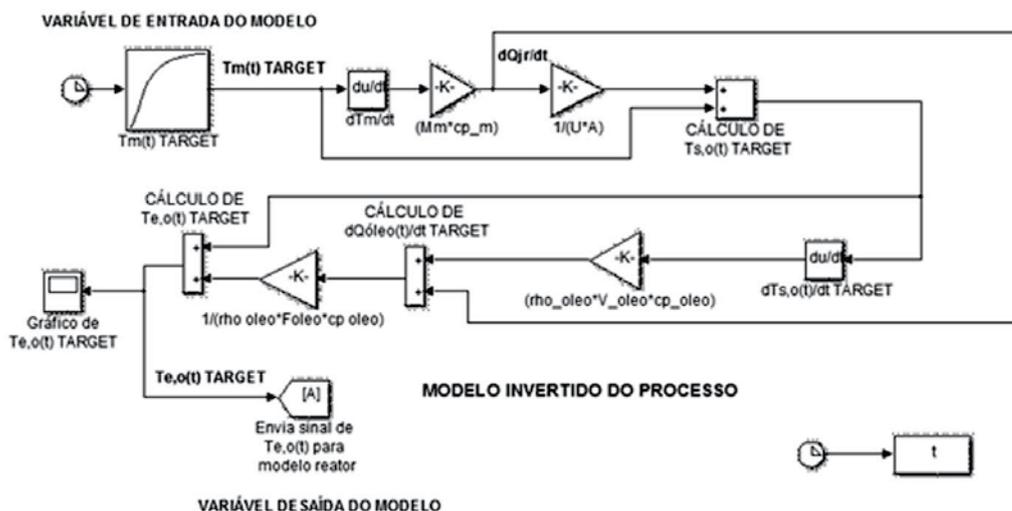
$$\frac{dT_M(t)}{dt} = \frac{U_{JR} \cdot A_{JR} \cdot [\bar{T}_O(t) - T_M(t)]}{\bar{\rho}_M \cdot V_M \cdot \bar{Cp}_M} \quad (1)$$

O modelo matemático invertido proposto neste trabalho é responsável por estimar o comportamento da temperatura de entrada do óleo térmico com base no comportamento da temperatura desejada para a massa de solvente contida no interior do reator. A equação que

representa o comportamento temporal da temperatura de entrada do óleo térmico a partir do comportamento desejado para a temperatura da massa de solvente é a Eq. (2) e o diagrama de simulação correspondente é apresentado na Figura 3.

$$T_{e,o}(t) = T_{s,o}(t) + \frac{1}{\rho_o \cdot F_o \cdot Cp_o} \left\{ q_m(t) + \left[ \rho_o \cdot F_o \cdot Cp_o \cdot \frac{dT_{s,o}(t)}{dt} \right] \right\} \quad (2)$$

**Figura 3** – Diagrama de simulação do modelo invertido estudado neste trabalho



## 2.2 CONCEPÇÃO DO ALGORITMO PARA O CÁLCULO DE $U_{JR} \cdot A_{JR}$ UTILIZANDO O MODELO DIRETO

O algoritmo utilizado neste trabalho é bastante simples e foi concebido para ser executado em tempo real em sistema digital de controle distribuído tipica-

$$0,5 \text{ } ^\circ\text{C} \leq [\bar{T}_o(t) - T_M(t)]^{\text{Medidas}} \quad (3)$$

No caso da condição estabelecida na Eq. (3) ser verdadeira, o algoritmo calcula o valor da quantidade de ener-

$$E_M(t) = M_M \cdot \bar{C}_{pM} \cdot \Delta T_M(t) \quad (4)$$

Nesta equação, a diferença de temperatura da massa reacional é avaliada com base no valor medido no instante atual e o valor medido no instante anterior e armazenado na base de dados do sistema de controle.

$$q_{JR}(t) = \frac{E_M(t)}{(t_i - t_o)} \quad (5)$$

Uma vez conhecida a quantidade de calor transferida entre a camisa de aquecimento e a massa reacional por unidade de tempo, o algoritmo calcula o valor do coeficiente

$$q_{JR}(t) = U_{JR} \cdot A_{JR} \cdot [\bar{T}_o(t) - T_M(t)] \quad (6)$$

## 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A diferença constatada entre o valor do coeficiente global de transporte de calor calculado analiticamente (QUEIRÓZ; GEDRAITE, 2013) e aquele calculado experimentalmente (MILAN, 2010) foi de 6,75%. Tal diferença pode ser justificada pelo fato de existirem erros associados às medições de temperaturas, utilizadas nos cálculos e que não foram consideradas neste trabalho. Outro ponto que pode justificar a diferença entre os valores é o fato de ter sido adotado que o reator é adiabático, o que na realidade pode não ser verdadeiro.

Na Figura 4 é apresentado o resultado obtido com o emprego do algoritmo para o cálculo do valor do coeficiente global de transporte de calor utilizado neste trabalho. Foi verificado que o valor do coeficiente global de troca térmica não se manteve constante ao longo do período de aquecimento, o que era esperado, pois a ve-

mente empregado em controle de processos industriais. Partiu-se da premissa de que as temperaturas de entrada e de saída do óleo térmico são medidas continuamente na instalação industrial estudada, assim como a temperatura da massa reacional. Com base nos valores medidos é verificada a condição de processo estabelecida na Eq. (3).

gia absorvida pela massa reacional no instante considerado, usando a Eq. (4).

Com base na quantidade de energia absorvida, o sistema calcula a quantidade de calor transferida entre a camisa de aquecimento e a massa reacional por unidade de tempo, utilizando a Equação (5).

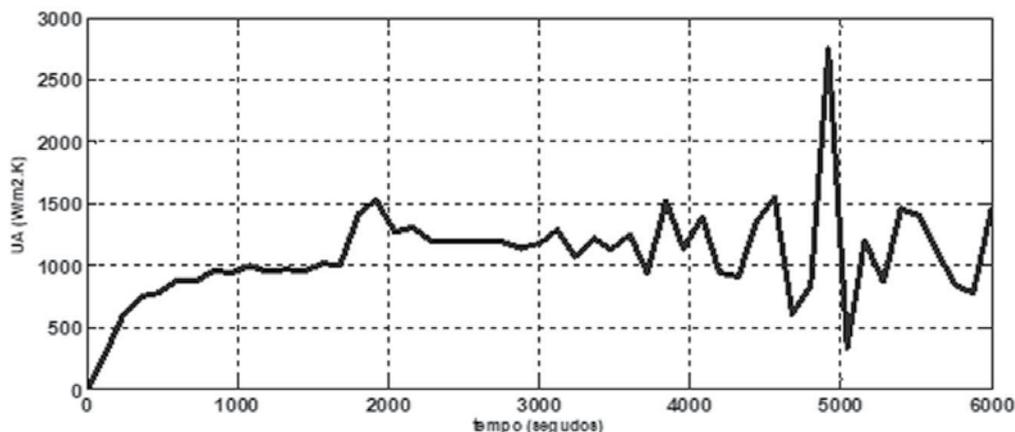
ficiente global de transporte de calor no instante considerado, utilizando a Eq. (6).

locidade de transporte de calor varia ao longo do tempo, diminuindo à medida que a temperatura da massa reacional se aproxima do valor estabelecido como valor desejado (150°C).

Foi também constatado que a partir do instante  $t = 3500$  segundos, o valor calculado para o coeficiente global de troca térmica apresentou maior variação. Tal comportamento pode estar associado à propagação de incertezas presentes no cálculo do valor de  $U_{JR} \cdot A_{JR}$ , haja vista o fato do cálculo da variação da temperatura da massa reacional com o tempo é feito com base na derivada do valor da mesma no instante considerando os instantes subsequentes.

É oportuno ressaltar que as variáveis de processo consideradas neste trabalho tiveram os respectivos valores registrados pelo sistema digital de controle existente na unidade industrial estudada com frequência de amostragem de 30 segundos.

**Figura 4** – Valor do coeficiente global de troca térmica em função do tempo.



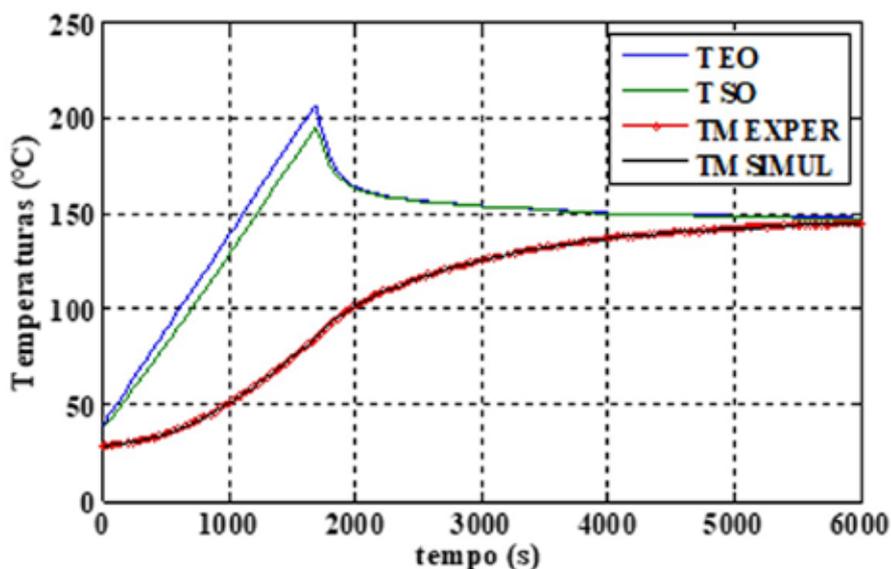
Considerando os resultados apresentados na Figura 4 e também aqueles obtidos por Queiroz e Gedraite (2013), foi verificado que para o intervalo de tempo compreendido entre 1080s e 1800s o valor médio do desvio em  $U \cdot A_{JR'}$  foi de aproximadamente 9%. Ainda considerando o mesmo critério, para o intervalo de tempo compreendido entre 2280s e 2640s, o referido desvio foi de aproximadamente 4%. Uma possível explicação para o aumento do valor de  $U \cdot A_{JR'}$  pode estar baseada no fato de que o valor da resistência térmica oferecida pelo mecanismo da convecção tende a diminuir com o aumento da temperatura, acarretando por conseqüência a diminuição no valor da resistência térmica total e assim no aumento de  $U \cdot A_{JR'}$ .

Considerando o intervalo de tempo compreendido entre 1080 s e 6000 s, foi verificado que o desvio global em  $U \cdot A_{JR'}$  foi de aproximadamente 2 %. Este desvio pode ser considerado como de pequena amplitude face às variações verificadas no valor de  $U \cdot A_{JR'}$  no trecho final da curva. Estas últimas variações podem ser atribuí-

das mais a um problema matemático de cálculo do valor de  $U \cdot A_{JR'}$  do que a um problema físico propriamente dito. Como o modelo matemático empregado neste trabalho calcula o valor do coeficiente global de transporte de calor pelo quociente da quantidade de calor trocado por unidade de tempo entre a camisa e o conteúdo do reator e a diferença de temperatura entre a jaqueta e o reator, a partir do instante 5000 s, a diferença de temperatura entre o óleo térmico e a massa de solvente no interior do reator se torna pequena o suficiente para fazer com que o valor de  $U \cdot A_{JR'}$  tenda a aumentar muito, provocando o comportamento apresentado na Figura 4.

Na Figura 5 são apresentados os comportamentos temporais das temperaturas da massa reacional (T\_M EXPER), de entrada (T\_EO) e de saída do óleo térmico (T\_SO) medidas experimentalmente e, também, da temperatura da massa reacional simulada (T\_M SIMUL) com base no modelo matemático apresentado na Eq. (2), que foi o modelo direto.

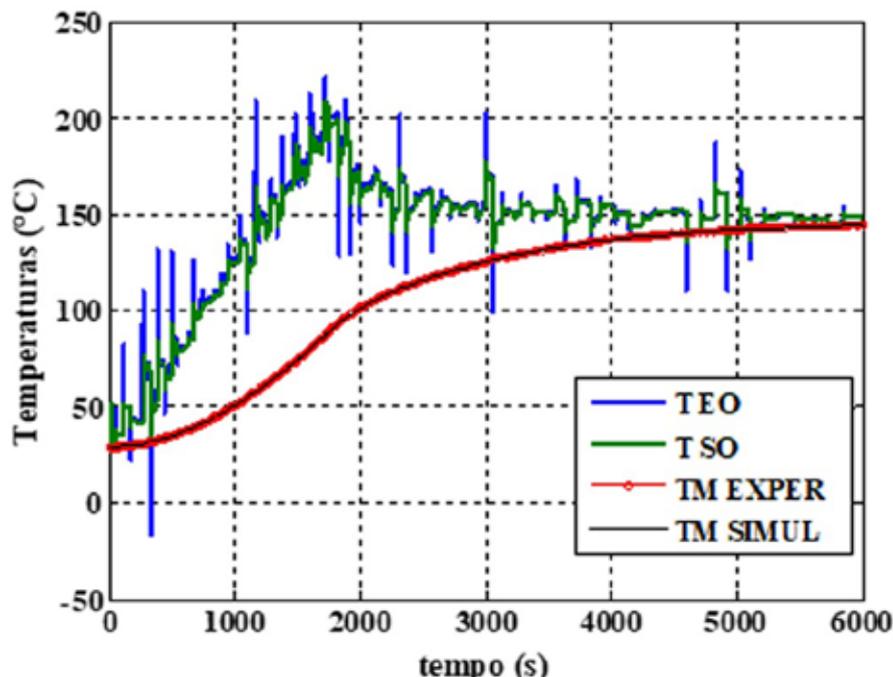
**Figura 5** – Comportamento temporal das temperaturas considerando o emprego do modelo direto



Na Figura 6 são apresentados os comportamentos temporais das temperaturas da massa reacional ( $T_{M\text{ EXPER}}$ ), de entrada ( $T_{EO}$ ) e de saída do óleo térmico ( $T_{SO}$ ) medidas experimentalmente e, também, da

temperatura da massa reacional simulada ( $T_{M\text{ SIMUL}}$ ) com base no modelo matemático apresentado na Eq. (1), que foi o modelo invertido.

**Figura 6** – Comportamento temporal das temperaturas considerando o emprego do modelo invertido



## 4 CONCLUSÕES

A partir da análise dos resultados, pode-se concluir que o valor de  $U_{JR} \cdot A_{JR'}$  calculado pelo algoritmo utilizado forneceu resultados adequados à estimação da temperatura da massa reacional e pode ser considerado adequado para a finalidade a qual se destina, tendo representado de maneira satisfatória o comportamento daquela temperatura medida experimentalmente.

Por se tratar de um modelo a parâmetros concentrados, a sua implementação na base de dados de sistemas digitais de controle pode ser feita pelo emprego de blocos de função tipicamente disponível em sistemas de controle industriais, sendo esta a sua principal vantagem em rela-

ção ao modelo anteriormente desenvolvido, o qual exigia a execução de algoritmo específico para o cálculo da condição de interrupção do aquecimento do sistema.

O comportamento da temperatura de entrada do óleo, simulada com base no modelo invertido do processo, apresentou desvios inferiores a 1% em relação ao comportamento da temperatura calculada com base no modelo anteriormente apresentado na literatura.

As oscilações apresentadas nos valores das temperaturas de entrada e de saída do óleo térmico que foram obtidos com base no modelo invertido não são consideradas relevantes, uma vez que não apresentam diferenças significativas no comportamento estudado da temperatura da massa reacional.

## REFERÊNCIAS

- ACKLEY, E. J. , Film coefficients of heat transfer for agitated process vessels, **Chem. Eng.**, , v.22, p. 133–140, 1960.
- BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N., **Transport Phenomena**, 2nd ed., John Wiley & Sons, Inc., New York, 2007.
- BOUCHENCHIR H., CABASSUD M., LE LANN M.V., CASAMATTA G., A General Simulation Model and a Heating/Cooling Strategy to Improve Controllability of Batch Reactors, França, **Trans IChemE**, Vol.79, Part A, 2001.
- CHOPEY N.P, **Handbook of Chemical Engineering Calculation**, USA, McGraw-Hill Professional 3rd. Edition, 2006.
- DHOTRE M.T., MURTHY Z.V.P, J.N SUBRAMANIAN Modeling & Dynamic Studies of Heat Transfer Cooling of Liquid in Half-Coil Jackets, India, **Chemical Engineering Journal** 118(2006) 183-188.
- GEDRAITE, R.; LOBATO, F. S., NEIRO, S. M. S.; MILAN, W.; KUNIGK, L. Modelo Matemático para a Execução em Tempo Real visando a Avaliação de Transiente de Temperatura em Reator de Polimerização Semi-batelada. **Proceeding of the Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering (CILAMCE XXXII)**, 13-16 Novembro, Ouro Preto, 2011.
- INCROPERA, F. P.; WITT, D. P. **Fundamentals of Heat and Mass Transfer**, 5th ed., J. Wiley & Sons, N.Y., 2002.
- MILAN, W. **Desenvolvimento de sensor virtual de temperatura para calcular valor de referência em controle de temperatura aplicado a processo de produção de resinas com reator de batelada**. São Caetano do Sul, SP: CEUN-IMT, Mestrado, 2010.
- MILAN, W.;KUNIGK, I.; GARCIA, C.; FERREIRA, N. L.; NEIRO, S. M. S.; LOBATO, F. S.; QUEIROZ, C. G.; GEDRAITE, R. Uso de sensor virtual para controle de transiente de temperatura em reator de polimerização semi-batelada. **Petro & Química**, 2013.
- QUEIROZ, C. G.; GEDRAITE, R. Contribuição ao estudo da transferência de calor em reatores de polimerização visando à minimização da variação de temperatura da massa reacional na etapa inicial de aquecimento. **Anais da XVIII Jorneq**. Agosto, Uberlândia, 2013.
- SUBRAMANIAN J.N, MJALLI F.S. (2008) The Dynamics of Liquid Cooling in Half-Coil Jackets, Malaya, In: CHEMICAL PRODUCT AND PROCESS MODELING, 3, Iss. 1, Art.51
- SINGH, S. **Heat Transfer in Agitated Vessel**. Article from Petroleum Forum Community, 2008. Disponível em: <[http://www.cheresources.com/jacketed\\_vessel\\_design.shtml](http://www.cheresources.com/jacketed_vessel_design.shtml)>
- VDI GESELLSCHAFT (GVC),VDI- HEAT ATLAS, Berlin, Springer-Verlag, 2th.edition, 2010.
- WELTY, J. R.; WICKS, C. E.; Wilson, R. E. **Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer**, 5th ed. John Wiley & Sons Inc; N.Y., 2008.