

A modelagem de reatores é um estudo de grande importância no desenvolvimento de novos processos, bem como na simulação e otimização de unidades existentes. Dentro deste contexto o objetivo do trabalho foi realizar a modelagem de um reator industrial no qual a reação envolvida foi a desidrogenação do 2-Butanol. O reator estudado é do tipo multitubular (tipo trocador casco-tubo) cujo fluido utilizado na camisa está em contracorrente em relação ao reagente alimentado nos tubos do reator. O estudo foi efetuado considerando-se um tubo como sendo representativo de todo o reator e inicialmente considerou-se o reator como sendo unidimensional. Para o estudo dos perfis de temperatura do reagente no reator e do fluido de aquecimento ao longo de cada tubo, foi modelado um trocador de calor em contracorrente, via o software g-PROMS (General Process Modeling Simulation). À partir disto, foi possível modelar o reator introduzindo-se os balanços de massa e termos de reação química para o qual tornou-se necessário estimar parâmetros termodinâmicos, cinéticos e de transporte. Os perfis de temperatura e concentração obtidos apresentaram razoável aproximação em relação aos dados do processo. Foi também estudado o modelo unidimensional com difusão axial tendo-se observado que este termo não apresenta contribuição significativa nos perfis de temperatura e concentração podendo ser considerado desprezível. No momento está-se procurando refinar a cinética da reação química e os parâmetros de transporte. Posteriormente deverá ser aumentado o grau de complexidade do reator com o intuito de obter uma descrição mais detalhada do processo (Cnpq-PIBIC/UFRGS).