

# MODELAGEM DO ESCOAMENTO EM UM REATOR LOOP

Andréia R. Machado<sup>1</sup>, Nilo S. M. Cardozo<sup>2\*</sup>, Marcelo A. S. Jesus<sup>3</sup>

Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS - Departamento de Engenharia Química -  
<sup>1</sup>andream@enq.ufrgs.br, <sup>2\*</sup>nilo@enq.ufrgs.br, <sup>3</sup>marcelo.jesus@polofilms.com.br

Reatores *loop* são empregados em várias aplicações, entre as quais encontra-se o processo Spheripol, utilizado no processo de polimerização de polipropileno e seus copolímeros. No caso específico do processo Spheripol, a mistura reacional é composta pelo polímero e catalisador dispersos no propeno em fase líquida. Apesar de que a modelagem e o controle de reatores *loop* têm sido foco de grande atenção nas últimas décadas, a modelagem detalhada das condições de escoamento no reator e a influência das propriedades da mistura reativa sobre a estabilidade do escoamento durante o processo ainda são aspectos pouco estudados. Durante o processo a fase líquida pode ter sua viscosidade aumentada devido à solubilização dos oligômeros no monômero, podendo até mesmo causar entupimento do reator. Neste trabalho é apresentada a modelagem do escoamento em um sistema similar, do ponto de vista de mecânica de fluidos, ao que se tem em um reator *loop*. O modelo foi implementado no pacote comercial de CFD Ansys CFX 11.0. Para modelar a variação da viscosidade do fluido foi utilizado o modelo de Carreau. Foram analisados os perfis obtidos de velocidade, fração volumétrica e viscosidade. Os resultados preliminares obtidos estão qualitativamente em concordância com o que ocorre no processo industrial.

**Palavras-chave:** Polipropileno, Reator Loop, Spheripol, CFD

## *Flow Modeling of a loop reactor*

Loop reactors find application in many chemical processes. In the specific case of the production of polypropylene and its copolymers by the Spheripol process, the use of loop reactors brings more efficient heat transfer from the complex reactive mixture consisting of liquid monomer and solid particles containing catalyst and polymer. In this process the flow behavior of the reactive mixture in the reactor is a particularly important issue, because the viscosity of the reactive mixture can increase during the process, due to oligomer or atactic fractions dissolution. Although many studies can be found in the literature about modeling and control of loop reactors, little is presented about the analysis of the flow conditions in the reactor and the influence of the transport properties of the reactive mixture on the stability of the flow. In this work a model for the flow in a system which is similar, from a fluid dynamics point of view, to that of a loop reactor is presented. Velocity, viscosity and volume fraction profiles were analyzed. Preliminary results show qualitative agreement with some observations of the industrial process.

**Keywords:** Polypropylene, Loop Reactor, Spheripol, CFD.

## Introdução

A produção mundial de polipropileno vem crescendo continuamente nos últimos anos, sendo atualmente uma das resinas termoplásticas mais produzidas. Esse crescimento se deve principalmente a aprimoramentos tecnológicos na área de produção da resina como avanços na área catalítica e nos processos de polimerização, que permitem um controle sobre a taticidade do polímero e conseqüente melhoria das propriedades mecânicas.

O processo Spheripol é um dos mais utilizados atualmente na produção de polipropileno homopolímero e copolímeros randômicos. Esse processo é composto por dois ou mais reatores tubulares em série. Reatores tubulares apresentam grandes vantagens com relação a reatores de

tanque agitado contínuos (CSTR), como maior produtividade, altas conversões, maior eficiência na remoção de calor e redução de custos devido à simplicidade de sua geometria [1].

Apesar de que a modelagem e o controle de reatores *loop* têm sido foco de grande atenção nas últimas décadas, a modelagem detalhada das condições de escoamento no reator e a influência das propriedades da mistura reativa sobre a estabilidade do escoamento durante o processo ainda são aspectos pouco estudados. No caso específico do processo Spheripol, no qual a mistura reativa é composta por partículas de polímero e catalisador suspensas no monômero líquido, as condições de escoamento representam um aspecto crítico do processo. Isto se deve ao fato de que a mistura reativa apresenta um comportamento reológico complexo e que a viscosidade do meio pode variar substancialmente durante o processo devido à solubilização de oligômeros e frações de polímero atático no monômero. Como consequência, pode surgir dificuldade no controle da reação e entupimento do reator.

Neste trabalho é apresentada a modelagem do escoamento em um reator *loop* no qual o meio reativo é bifásico envolvendo o fluido reativo e partículas sólidas suspensas. O modelo foi implementado no pacote comercial de CFD Ansys CFX 11.0. Para modelar a variação da viscosidade do fluido foi utilizado o modelo de Carreau.

## **Definição do problema e metodologia utilizada**

### *Geometria*

O processo *Spheripol* consiste em dois ou mais reatores *loop* em série e uma bomba axial que promove o escoamento da mistura reacional. Reatores *loop* são constituídos de duas seções tubulares principais conectadas de tal forma que formam um *loop*. A Figura 1 mostra um reator *loop* de forma esquemática.

A geometria do reator foi criada com base em dados de projeto. O reator tem 46,3m de altura e diâmetro de 0,609m. O diâmetro da tubulação da alimentação é de 0,1524m e o da descarga é de 0,076m.

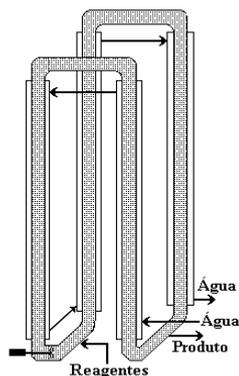


Figura 1 - Esquema do processo Spheripol.

### Modelagem

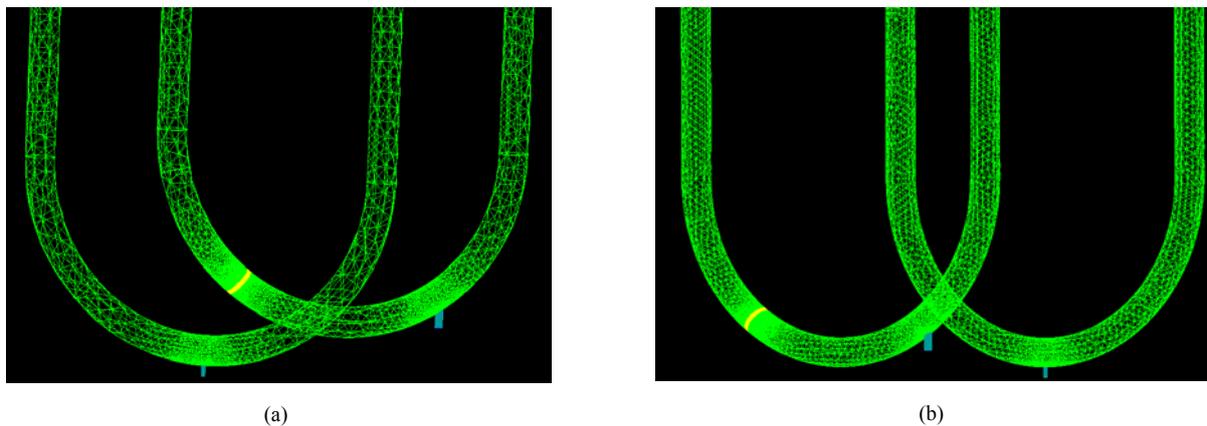
A modelagem do processo foi feita com base nos seguintes hipóteses: i) escoamento isotérmico na temperatura de 70°C; ii) turbulência representada pelo modelo SST (*Shear Stress Transport*); iii) representação mistura multifásica por meio de um modelo Euleriano; iv) utilização do conceito de fonte de quantidade de movimento para representar a bomba axial que é responsável pela recirculação da mistura no reator; v) fluido Newtoniano generalizado. A hipótese de escoamento isotérmica pode ser justificada devido a eficiência de troca térmica dos sistemas de camisas utilizados neste tipo de reator e à elevada velocidade de circulação da mistura reativa. O modelo de turbulência SST (*Shear Stress Transport*) foi escolhido devido à sua boa acurácia em simulações de camada limite [2]. Na representação Euleriana tanto a fase contínua quanto a fase dispersa são consideradas como meios contínuos, onde um sistema de referência Euleriano é utilizado para a dedução das equações governantes. A utilização de uma fonte de quantidade de movimento teve por objetivo evitar a necessidade de trabalhar com uma representação detalhada da geometria da bomba. A equação constitutiva de fluido Newtoniano generalizado utilizada para representar o comportamento reológico da fase líquida foi o Modelo de Carreau [3], que tem a forma:

$$\frac{\eta}{\eta_0} = \frac{1}{[1 + \lambda^2 \dot{\gamma}]^{\frac{1-n}{2}}} \quad (1)$$

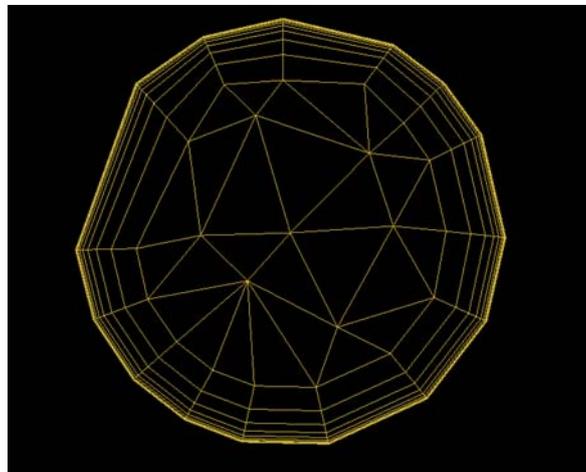
onde  $\eta_0$  é a viscosidade à taxa de cisalhamento zero,  $\lambda$  é um tempo de relaxação e  $n$  é o índice da lei da potência.

## Malhas utilizadas

A Figura 2 mostra o detalhe das malhas utilizadas na base do reator. A Figura 3 mostra uma seção transversal da malha com elementos prismáticos. Em ambas as malhas foi feito um refinamento nas regiões de alimentação e descarga, onde ocorre o maior acúmulo de partículas, e também na região da bomba e das paredes, para permitir o cálculo mais preciso dos gradientes nessas regiões. O resultado obtido utilizando-se a malha grossa foi utilizado como condição inicial para a simulação com a malha mais refinada, a fim de se obter a convergência da solução mais facilmente.



**Figura 2** - Malhas utilizadas nas simulações: (a) 400 mil e (b) 1 milhão de elementos



**Figura 3** - Seção transversal da malha com os elementos prismáticos

## Condições de contorno

Foi assumida a condição de não-escorregamento para a fase líquida nas paredes. Segundo o manual do Ansys CFX 11.0, a configuração mais robusta de condição de contorno é velocidade/taxa mássica na entrada e pressão estática na saída [2]. Sendo assim foi especificada a velocidade de 1m/s na entrada com fração volumétrica de sólidos de 50%, de acordo com dados de processo.

A magnitude da fonte de quantidade de movimento utilizada para representar a bomba axial foi definida através de testes preliminares, de maneira a gerar uma velocidade de circulação da mistura reacional de aproximadamente 6 m/s. Dessa forma, a fonte de quantidade de movimento foi fixada em  $1,5 \cdot 10^5 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-2}$ .

### Parâmetros da simulação

Foi feita a simulação em estado estacionário para o problema. A opção escolhida para passo de tempo foi *Auto Timescale*, pois foi a opção com a qual se obteve convergência mais facilmente. Esta opção usa um passo de tempo físico calculado internamente com base nas condições de contorno e geometria do domínio. O critério de convergência utilizado foi baseado no resíduo médio (RMS), que foi estipulado em  $1 \cdot 10^{-5}$ .

### Resultados e Discussão

Foi alcançada a convergência em ambas as simulações. Os resultados dos testes com a malha grosseira foram utilizados como condição inicial para os testes com malha refinada. A Figura 4 mostra os gráficos de RMS obtidos durante as simulações. Podemos observar que o número de iterações necessárias para se alcançar a convergência é menor na simulação com a malha refinada devido à interpolação com o resultado do teste com malha grosseira. Obteve-se a convergência de malha, com pequena diferença entre os valores das variáveis nos dois casos.

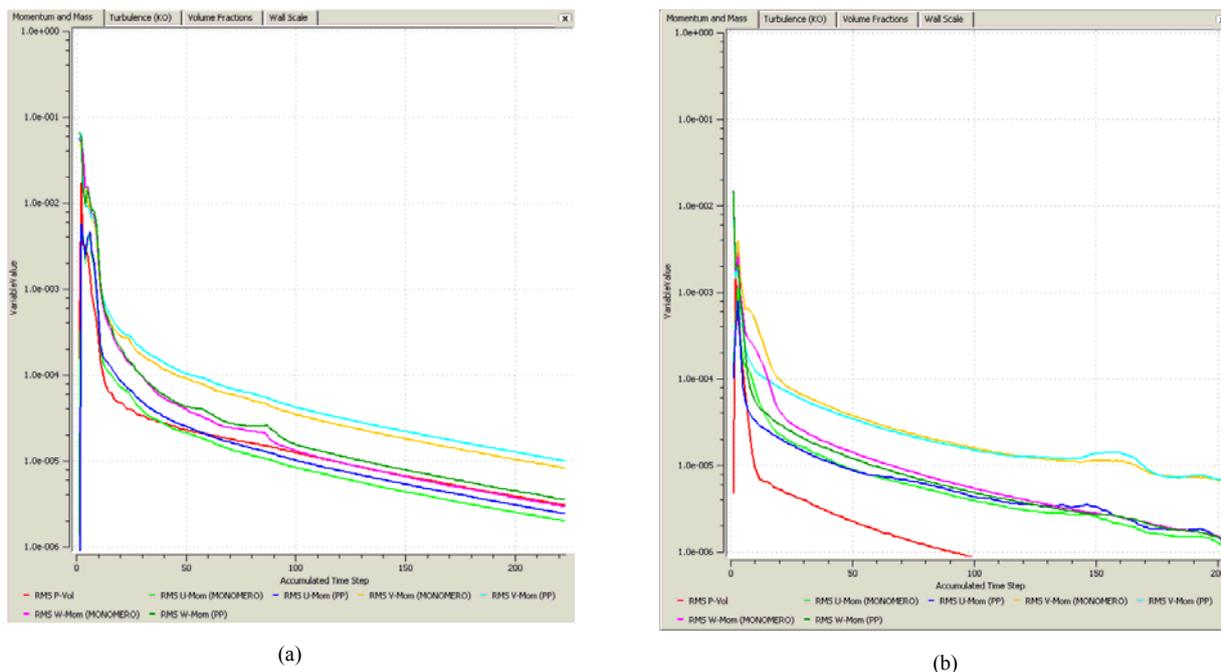


Figura 4 - Gráficos de resíduos para as simulações com malha grosseira (a) e malha refinada (b).

A Figura 4 mostra o campo vetorial de velocidade obtido. O aumento do número de vetores nas regiões de alimentação e descarga é devido ao refinamento da malha nessas regiões. Pode-se observar uma aceleração do fluido na tubulação de descarga devido à redução do diâmetro.

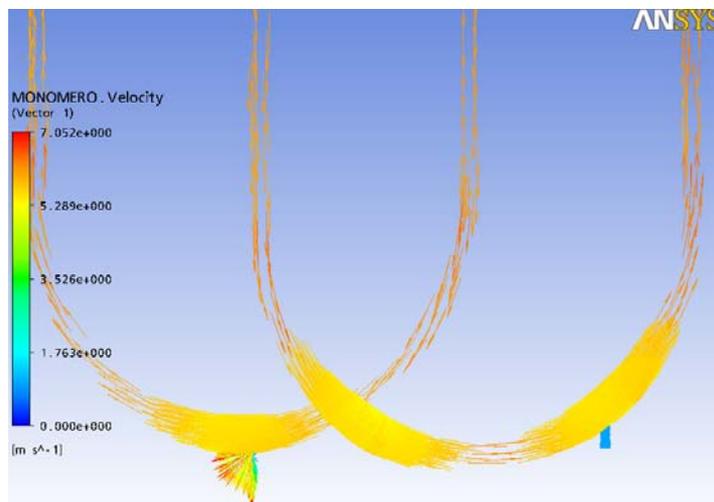


Figura 4 - Campo vetorial de velocidade.

A Figura 5 mostra os valores assumidos pela viscosidade do fluido em um plano do reator segundo o modelo de Carreau. Podemos observar que os valores estão de acordo com o que o modelo estabelece: próximo à parede, onde a taxa de cisalhamento é mais alta, temos menores valores de viscosidade; no centro da tubulação, onde temos baixas taxas de cisalhamento, o valor da viscosidade tende a  $\eta_0$ , que é de  $8,5 \cdot 10^{-4} \text{Pa.s}$ .

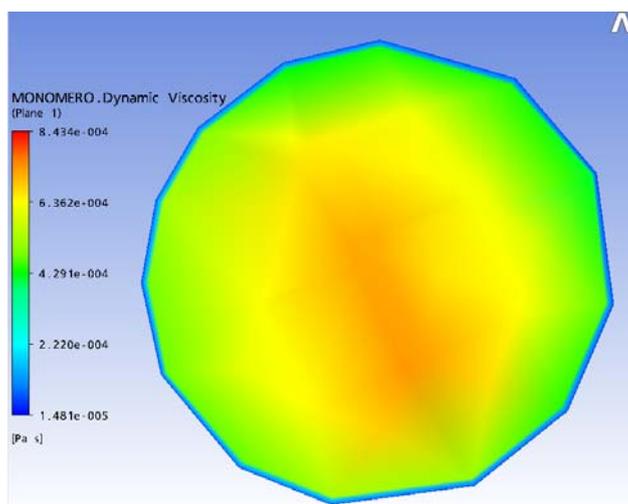
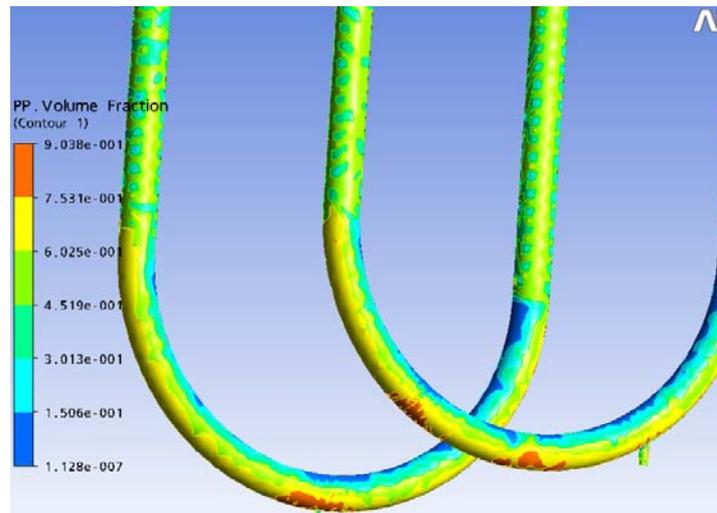


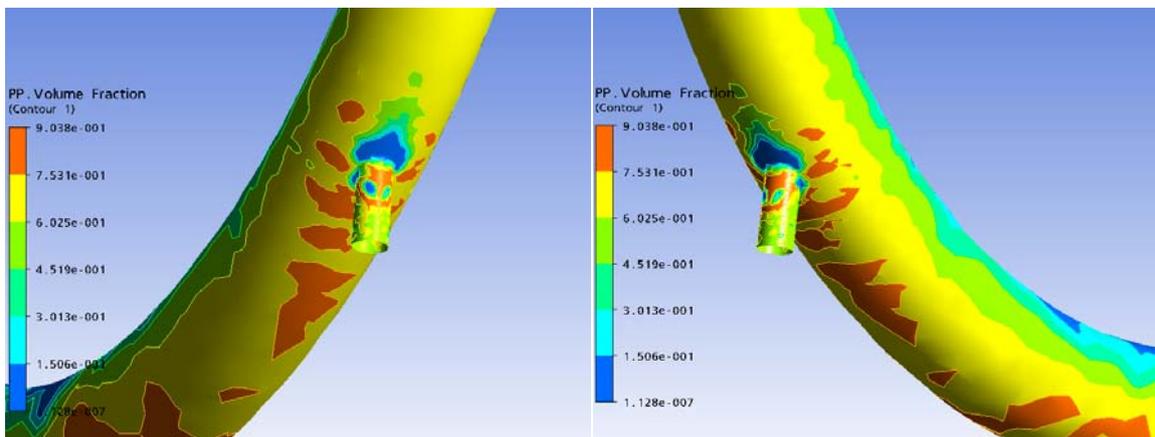
Figura 6 - Variação da viscosidade em uma seção do reator.

A seguir temos a análise dos perfis de fração volumétrica para o polímero. A Figura 7 mostra uma vista da base do reator. A Figura 8 mostra as regiões de alimentação e descarga. Conforme ocorre no processo, essas regiões se mostraram as mais críticas em termos de acúmulo de

partículas, sendo que a fração volumétrica do polímero chegou a 90% nessas regiões, o que está de acordo com o que se verifica no processo industrial.



**Figura 7** - Fração volumétrica de polímero na base do reator.



**Figura 8** - Fração volumétrica de polímero nas regiões de alimentação e descarga, respectivamente.

## Conclusões

Os resultados obtidos até o momento estão qualitativamente em concordância com o que ocorre no processo industrial e justificam estudos posteriores visando à validação dos resultados preditos com dados obtidos no processo industrial e, numa etapa posterior, a sua utilização para analisar a estabilidade do processo em função de variações da viscosidade do meio reativo.

## Agradecimentos

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

## Referências Bibliográficas

1. M.P. Vega, E.L. Lima, J.C. Pinto, *Computers Chem. Engng*, Vol. 21, 13, S1049.S1054, 1997.
2. *Ansys CFX-Solver Modeling Guide*, 2006.
3. C.W. Macosko in *Rheology: Principles, Measurements and Applications*, John Wiley & Sons, New York, 1993.