



MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE FABRICAÇÃO DE ASB

Gabriela Sporleder Straatmann¹, Carlos Alberto Krahl², Marla Azário Lansarin¹

¹ Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)
R. Eng. Luis Englert, s/n. Campus Central. CEP: 90040-040 - Porto Alegre - RS - BRASIL,
E-MAIL: {legaby, marla}@enq.ufrgs.br

² Fundação de Ciência e Tecnologia do Rio grande do Sul (CIENTEC)
Av. das Indústrias, 2270 - Distrito Industrial - CEP 94930-430 - Cachoeirinha – RS – BRASIL,
E-MAIL: Krahl@CIENTEC.RS.GOV.BR

Palavras Chaves: ASB, modelagem reator, modelagem coluna destilação

Resumo:

Neste trabalho, foi desenvolvida a modelagem do processo de fabricação de Acetato de sec-butila (ASB). O processo é composto basicamente por duas etapas: a fabricação propriamente dita do ASB (um reator multi-tubo) e a separação do ASB dos demais subprodutos (uma coluna stripper e duas colunas de destilação).

Primeiramente, foram levantados os dados cinéticos de reação (cinco conjuntos de dados) baseados em vários experimentos em batelada. Com esses dados cinéticos, um reator contínuo foi modelado e simulado no ASPEN Plus[®] e o modelo, validado com dados experimentais de um reator contínuo, com resultados bem satisfatórios (para um conjunto de dados cinéticos, a diferença não passou de 4,5%).

A primeira coluna de destilação do processo também foi modelada e simulada no ASPEN Plus[®] a partir de dados experimentais provenientes de cinco experimentos realizados em uma coluna de destilação em batelada. O modelo foi validado com dados experimentais de forma muito satisfatória, apresentando algumas diferenças em valores absolutos, mas sempre acompanhando as tendências demonstradas pelos dados experimentais.

Por fim, o processo como um todo foi modelado e simulado no ASPEN Plus[®] com grande sucesso, e análises de sensibilidade para as variáveis principais foram geradas.

1 INTRODUÇÃO

O objetivo geral do projeto era o estudo de uma nova rota para fabricação de Acetato de sec-Butila (ASB). O processo de fabricação de ASB pode ser dividido em duas partes: a etapa da fabricação de ASB propriamente dita (ou parte reacional) e a etapa de separação. Este trabalho contempla a parte de modelagem e simulação da parte reacional e da parte de separação a partir de dados experimentais e, também, a modelagem do processo como um todo.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

2.1 Etapa reacional do processo

A partir de dados experimentais e um programa de estimação de parâmetros, foram estipulados cinco conjuntos de parâmetros cinéticos para a reação principal da fabricação de ASB (F1, F2, F3, F4 e F5). Estes conjuntos de dados foram implementados no simulador ASPEN Plus[®] e, após a validação dos modelos cinético e termodinâmico em escala laboratorial, ampliou-se a simulação para



escala industrial baseada na produção total de ASB pretendida pela empresa.

validado e reutilizado na simulação de uma coluna contínua em escala industrial.

2.2 Etapa de separação dos produtos

Foram realizados experimentos de destilação em batelada em um equipamento REAKTEST DRR 410/10 da Fischer Technology, cujo o esquema é mostrado na Figura 2.1. Alguns experimentos foram alimentados com uma mistura de água e álcool com o objetivo de modelar a coluna (determinação de hold-up e nº de estágios teóricos). E os demais experimentos foram alimentados com a mistura reacional proveniente da etapa anterior.

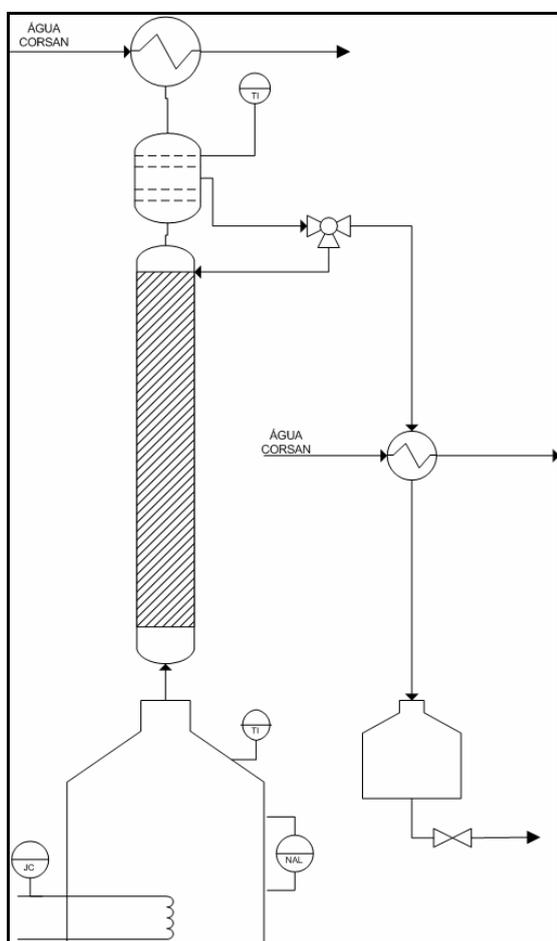


Figura 2.1: Esquema do equipamento utilizado no experimento de destilação em batelada.

A partir destes dados experimentais o modelo termodinâmico utilizado no ASPEN Plus® para simular a coluna de destilação em batelada foi

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

3.1 Etapa reacional do processo

Para modelar o reator foram utilizados os dados cinéticos obtidos pela estimação de parâmetros apresentada anteriormente. Esses dados, que constituem cinco conjuntos de parâmetros (F1, F2, F3, F4 e F5), foram inseridos no Aspen Plus 12.1 em Reactions do tipo General, onde é possível entrar com os dados de Energia de ativação (E_a) e fator pré-exponencial (k_0) das reações inversa e direta para cada conjunto F.

Foram selecionados dois experimentos com condições diferentes ao longo do experimento para mostrar de forma ilustrativa a validação do modelo. Nas figura 3.1 e 3.2 são mostrados gráficos de comparação entre os valores experimentais e simulados para cada condição de reação de cada experimento e para cada conjunto de dados cinéticos.

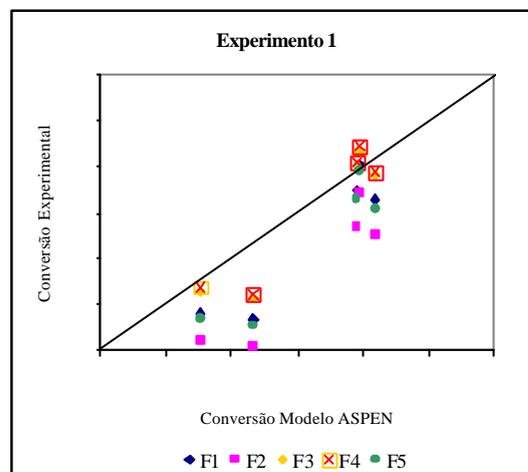


Figura 3.1: Comparação dos valores experimentais e simulados para o Experimento 1 a quatro condições diferentes para os cinco conjuntos de dados cinéticos.

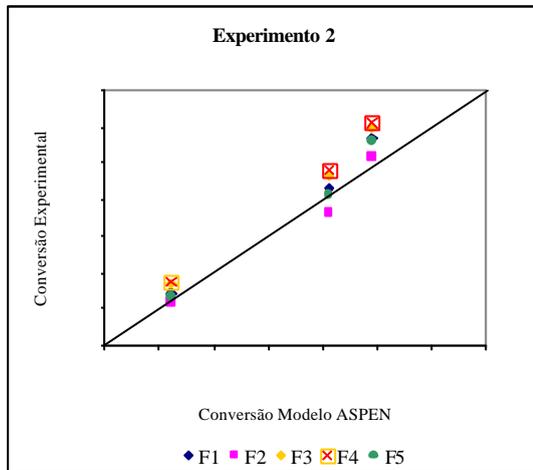


Figura 3.2: Comparação dos valores experimentais e simulados para o Experimento 2 a três condições diferentes para os cinco conjuntos de dados cinéticos.

A partir das simulações feitas em escala industrial para a etapa reacional foram construídas curvas do tipo Conversão do reator x Comprimento do tubo para várias vazões de alimentação como, por exemplo, as do gráfico da Figura 3.3.

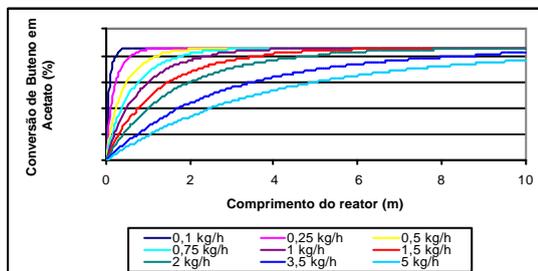


Figura 3.3: Exemplo de uma curva do tipo Conversão do reator x Comprimento do tubo construída com base na Simulação do ASPEN.

Gráficos como o da figura acima foram construídos para uma grande variação de parâmetros como temperatura do reator, relação molar de alimentação, diâmetro do tubo, etc.

Para cada gráfico há uma tabela interativa (como é mostrada na Figura 3.4), em que é possível preencher nas células verdes as informações de comprimento e conversão do reator (de acordo com as curvas, passando o *mouse* sobre elas para visualizar a informação) e a tabela estima automaticamente os seguintes valores, necessários para atingir uma produção pré-determinada de ASB:

- nº de tubos;
- área ocupada pelos tubos;
- área total ocupada pelo reator;
- diâmetro externo do reator;
- massa de catalisador por tubo;
- massa total de catalisador no reator.

comprimento	2	5	8	11	15	20	4	8	15
conversão	10,00%	20,00%	30,00%	40,00%	50,00%	60,00%	70,00%	80,00%	90,00%
kg/h	0,100	0,250	0,500	0,750	1,000	1,500	2,000	3,500	5,000
Nº Tubos	164297	32859	10953	5477	3286	1926	1174	587	383
Área Tubos (m ²)	143,8	28,8	9,6	4,8	2,9	1,6	1,0	0,5	0,3
Área Total (m ²)	215,6	43,1	14,4	7,2	4,3	2,4	1,5	0,8	0,5
Diâmetro ext	16,6	7,4	4,3	3,0	2,3	1,7	1,4	1,0	0,8
M Tubo Cat (g)	447	1118	1789	224	1342	2236	894	671	1342
M Total Cat (kg)	73471	36736	19592	1225	4408	4082	1050	394	490

Figura 3.4: Exemplo das tabelas interativas de informações de projeto do reator.

3.2 Etapa de separação dos produtos

A seguir serão apresentados os gráficos com os valores experimentais e simulados para cada componente de um dos experimentos de destilação realizados.

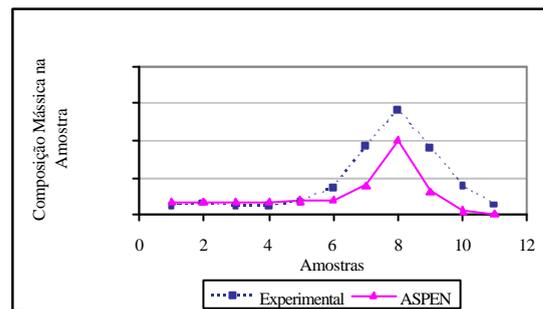


Figura 3.5: Valores experimentais e simulados para o componente A.

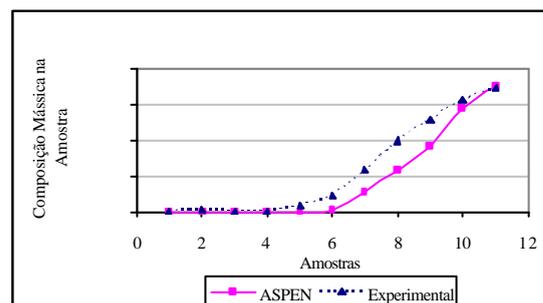


Figura 3.6: Valores experimentais e simulados para o componente B.



10 anos

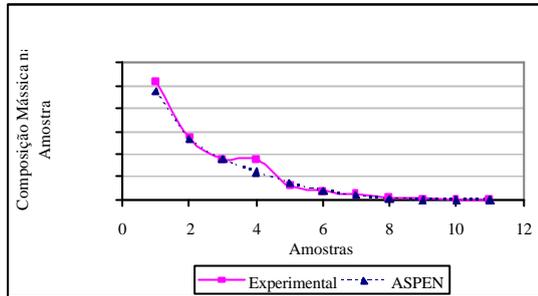


Figura 3.7: Valores experimentais e simulados para o componente C.

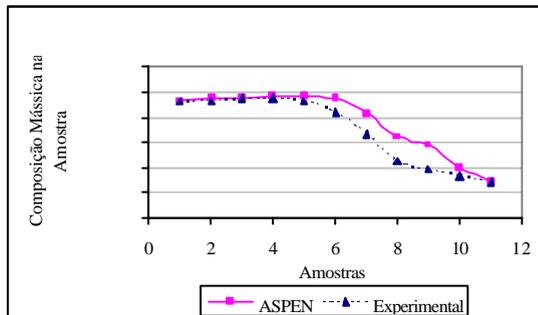


Figura 3.8: Valores experimentais e simulados para o componente D.

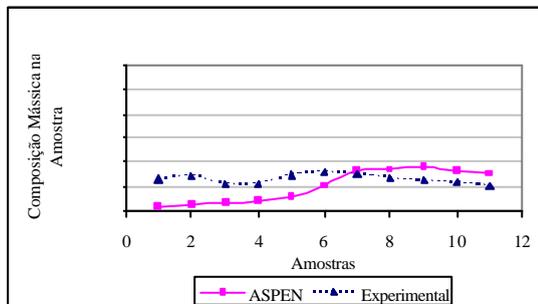


Figura 3.9: Valores experimentais e simulados para o componente E.

3.3 Processo

O processo como um todo foi modelado em escala industrial no ASPEN Plus[®]. Com as simulações do processo completo foi possível estudar as possibilidades de reciclo, fazer análises de sensibilidade das variáveis e estudar as instabilidades causadas pelas restrições impostas.

4 CONCLUSÕES

- A modelagem para a etapa reacional foi bem satisfatória conseguindo diferenças sempre menores

que 8 % para um determinado conjunto de parâmetros cinéticos;

- de uma forma geral, os valores da simulação da etapa de separação conseguiram representar bem os valores experimentais, ou pelo menos, representou bem as tendências das curvas experimentais;

5 AGRADECIMENTOS

