

# ACOPLAMENTO DE REAÇÕES EM REATOR MULTIFUNCIONAL

Caroline Kimura Firmino<sup>1</sup>, Prof. Dr. Luís Fernando Novazzi<sup>2</sup>  
<sup>1,2</sup> Departamento de Engenharia Química, Centro Universitário da FEI  
 ckfirmino@gmail.com | lnovazzi@fei.edu.br

**Resumo:** Reatores multifuncionais promovem a integração de reações químicas, a fim de diminuir custos de energia e de capital. Nesse projeto, é estudado o acoplamento da desidratação de etanol (endotérmica) e de oxidação catalítica de metano (exotérmica). O sistema foi modelado por equações diferenciais ordinárias e simulado em Matlab. Até esse ponto, as reações foram analisadas de modo independente, mas os resultados mostraram que o acoplamento entre elas tem bom potencial.

## 1. Introdução

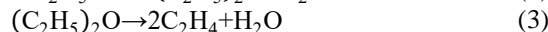
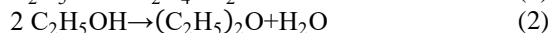
A sustentabilidade é um tema em alta, que está sendo aplicado aos poucos nas indústrias químicas e petroquímicas devido à falta de opções da fabricação. Uma das alternativas que vem se desenvolvendo é a Intensificação de Processos (PI), que envolve a área da engenharia. Os objetivos principais desta área são a redução do capital de investimento, redução do uso de energia, flexibilidade no processo, aumento da capacidade produtiva, diminuição de tamanho na planta, que está diretamente ligado com a segurança e melhor desempenho ambiental [4].

Sistemas reativos multifuncionais são uma forma de PI, pois são projetados para envolver mais de uma função ou processo que ocorre simultaneamente [3]. A integração ou acoplamento de reações exotérmicas com reações endotérmicas em reatores multifuncionais é uma maneira muito interessante de se promover a PI, pois diminui o gasto de energia, além do tamanho físico da planta. Para que este processo seja viável, a temperatura da reação exotérmica deve ser maior do que a da reação endotérmica, para haver a força motriz que regerá o fenômeno da troca de calor [5], responsável por promover a reação. Nesse cenário, pretende-se estudar o acoplamento da desidratação de etanol, de caráter fortemente endotérmico, com a oxidação catalítica do metano, que é exotérmica. O produto de interesse de ambos os sistemas é o etileno.

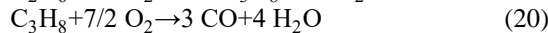
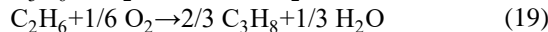
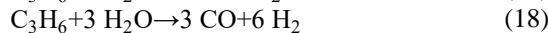
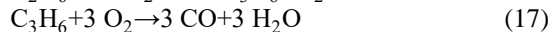
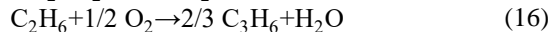
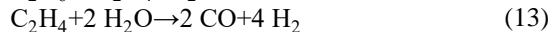
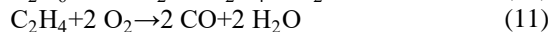
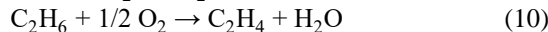
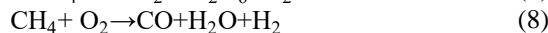
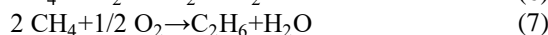
Trata-se de uma matéria-prima importante na indústria química e petroquímica, de grande aplicação, sendo um dos mais produzidos mundialmente. O etileno é utilizado para a fabricação de polímeros como polietileno, polietileno tereftalato e policloreto de vinila. Sabe-se que a desidratação do etanol para etileno ocorre em temperatura alta. Essa é uma das justificativas para a escolha da oxidação catalítica de metano, de natureza exotérmica e que é capaz de sustentar a reação endotérmica, pois a primeira opera em temperatura ainda mais elevada.

## 2. Metodologia

Na desidratação do etanol, reação endotérmica, há a presença de várias reações secundárias e subprodutos. A catálise é feita por alumina em reator heterogêneo (PBR). As reações presentes neste meio reacional estão escritas abaixo, as leis de velocidade e os parâmetros cinéticos dessas reações podem ser encontrados em literatura [1].



A oxidação catalítica do metano (OCM), reação exotérmica, é catalisada em reator heterogêneo e trata-se de uma reação complexa, com 16 passos. São apresentadas a seguir as reações principais e secundárias. As leis de velocidade e os parâmetros cinéticos dessas reações também foram tomados da literatura [2].



As hipóteses adotadas na modelagem foram as seguintes:

- regime permanente;
- comportamento de gás ideal;
- porosidade do leito constante;
- perdas de calor para o ambiente desprezíveis;
- modelo unidimensional (sem gradiente de temperatura ou concentração na direção radial).

Para o sistema proposto, a modelagem fenomenológica foi feita escrevendo-se o balanço molar para cada componente  $j$  (Equação 3) e o balanço de energia (Equação 4) para cada meio reacional  $i$ . Até esse ponto do trabalho as reações foram tratadas de modo independente, sendo  $T_a$  a temperatura do fluido de troca

térmica. O sistema de equações diferenciais ordinárias foi resolvido em Matlab, através da rotina *ode15s*, adequada para problemas rígidos.

$$\frac{dF_j}{dW} = \sum_{i=1}^q r_{ij}' \quad (22)$$

$$\frac{dT_i}{dW} = \frac{U a' (T_a - T_i) + \sum_{i=1}^q r_{ij} \Delta H_{r,i}}{\sum_{j=1}^m F_j C_{p,j}} \quad (23)$$

### 3. Resultados

Nas figuras 1 e 2 são apresentados os perfis de vazão molar para os sistemas endotérmico e exotérmico, respectivamente, em função do tempo espacial. Essas vazões foram escritas em base adimensional, sendo divididas pela vazão molar do reagente limitante na entrada do sistema,  $F_{A0}$ .

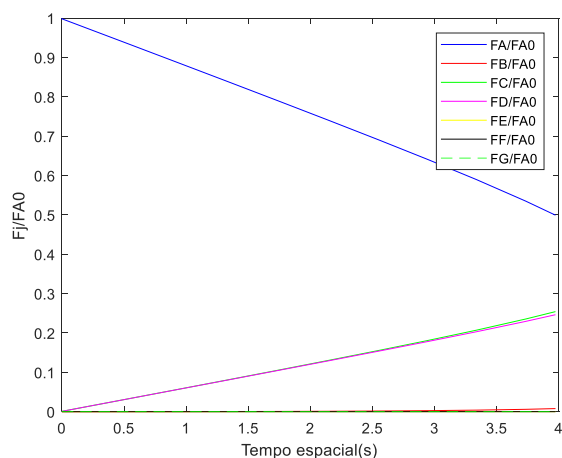


Figura 1 – Perfis de vazão molar do meio endotérmico

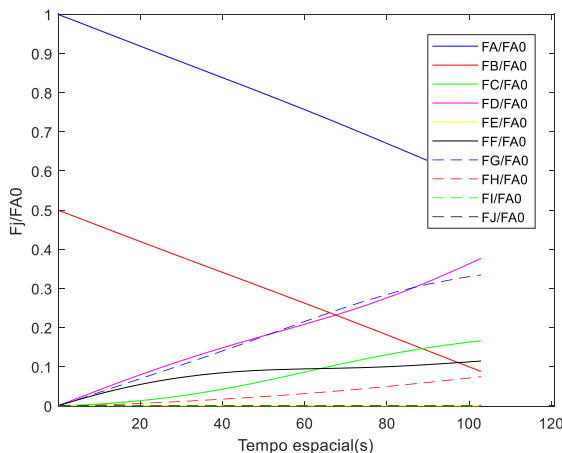


Figura 2 – Perfis de vazão molar do meio exotérmico

Na Figura 1 as letras de A a G representam o etanol, etileno, água, dietil-éter, acetaldeído, hidrogênio e butileno, respectivamente. Pode-se observar que a conversão do etanol (curva azul) foi de 50%, mas com baixa seletividade, pois o produto obtido em maior quantidade foi o éter, indicado na curva rosa. Essa baixa seletividade pode ser explicada pelo tempo espacial, que precisaria ser maior.

Na Figura 2 as letras de A a J representam o metano, oxigênio, gás carbônico, água, etano, monóxido de

carbono, hidrogênio, etileno, propileno e propano, respectivamente. Assim, analisando-se a curva azul, associada ao metano, reagente limitante do processo, tem-se uma conversão de 50%. É interessante também notar a razoável formação de etileno, representado pela curva laranja, em tracejado. Nesse cenário, consegue-se uma seletividade de 8%. Os resultados de conversão e de seletividade, bem como as faixas de temperatura, são sumarizados na Tabela 1.

Tabela 1 – Resultados obtidos

	Endotérmica	Exotérmica
<b>Conversão</b>	50%	50%
<b>Seletividade</b>	0,035	0,080
<b>Temperatura de Operação</b>	240 – 450 °C [1]	710 – 850 °C [2]
<b>Temperatura do Fluido de Troca</b>	727 °C	277 °C

### 4. Conclusões

As conversões em ambos os casos, endotérmico e exotérmico, foram satisfatórias, girando em torno de 50%. Porém, as seletividades foram baixas e a da reação endotérmica é pouco significativa (0,035), precisando ser melhorada.

No caso endotérmico, a temperatura escolhida para o fluido de troca casa perfeitamente com a temperatura de processo indicada para a reação OCM. O mesmo pode ser dito para o caso exotérmico, já que a temperatura do fluido está dentro do intervalo recomendado. Isto indica que para ambas as reações o acoplamento é viável, mas as seletividades precisam ser melhoradas.

### 5. Referências

- [1] KAGYRMANOVA, A.P.; CHUMACHENKO, V.A.; KOROTKIKH, V.N.; et al. Catalytic dehydration of bioethanol to ethylene: pilot-scale studies and process simulation. **Chem. Eng. J.** 2011. V.176, p.188-194.
- [2] VATANI, A. et. al Kinetic modeling of oxidative coupling of methane over Li/MgO catalyst by genetic algorithm. **J. Nat Gas Sci Eng**, 2014. 20, p. 347-356.
- [3] DAUTZENBERG, F., MUKHERJEE, M. Process intensification using multifunctional reactors. **Chem. Eng. Sci**, 2001. 56 (2), 251–267.
- [4] REAY, D., RAMSHAW, C., HARVEY, A. Process Intensification: Engineering for Efficiency. **Sustainability and Flexibility**. Elsevier Pub, Amsterdam, 2008, ch. 2, p. 21-45.
- [5] RAHIMPOUR, M.R.; DEHNAVI, M.R.; ALLAHGHOLIPOUR, F.; et al. Assessment and comparison of different catalytic coupling exothermic and endothermic reactions: A review. **Applied Energy**, 2012. V.99, p.496-512.

### Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer todo o apoio institucional do Centro Universitário da FEI

<sup>1</sup> Aluna de IC do Centro Universitário FEI. Projeto com vigência de 12/17 a 11/18.