

## **ANÁLISE DA PRODUÇÃO DE PROPILENOGLICOL COM O USO DO SOFTWARE COMPUTACIONAL MATLAB**

Daniel Pessanha de Queiroz 1; Willian Oliveira Dias 2; Talles Caio Linhares de Oliveira 3;

*1 Universidade Mauricio de Nassau, daniel\_pessanha99@hotmail.com; 2 Universidade Mauricio de Nassau, williandias.eng@gmail.com; 3 Universidade Mauricio de Nassau, tallescaio@hotmail.com*

### **Resumo:**

Com o aumento da competitividade do mercado, as indústrias químicas buscam cada vez mais otimizar os processos de produção dos seus produtos, uma vez que a matéria prima utilizada para a fabricação passa a se tornar cada vez mais escassa. O propilenoglicol é um díalcoól de significativo interesse industrial, que apresenta diversas utilizações na indústria alimentícia, química, farmacêutica e cosmética. O objetivo do projeto é desenvolver um método analítico a partir do software Matlab para aperfeiçoar o processo de fabricação do Propilenoglicol, visando o custo benefício. A metodologia consiste em fazer o levantamento de dados, parâmetros e condições de operação do sistema do reator, posteriormente lança-los no software Matlab, que permite resolver sistemas complexos de equações algébricas e diferenciais, resultando em gráficos que mensuram a proporção dos reagentes e produtos da reação. O gráfico gerado diagnostica uma conversão máxima alcançada de 58%, o que representa um percentual elevado quando comparado com os métodos práticos, onde com o auxílio da simulação computacional é possível alcançar índices de conversão mais elevados a partir de melhorias nesse processo, portanto a modelagem e simulação computacional permitiu a análise do comportamento das principais variáveis do processo.

**Palavras-chave:** Análise, Propilenoglicol, Software, Matlab.

### **Introdução**

A representação dos processos através de equações matemáticas é conhecida como modelagem do processo. Quanto mais próximo da realidade, mais complexos serão os modelos matemáticos propostos para tal tarefa (SCHUTZ, 2013).

Um dos equipamentos de maior influência no rendimento de processos é o reator, mais especificamente para este trabalho, o reator tipo tanque perfeitamente misturado (CSTR). Este tipo de reator é usado principalmente em reações em fase líquida, onde é normalmente operado em estado estacionário e é feita a consideração de perfeitamente misturado, conseqüentemente, a temperatura, concentração e a velocidade de reação não dependem do tempo nem da posição dentro do reator (FOGLER, 2009).

A utilização do Hidrotratamento é de fundamental importância na produção de óleos lubrificantes de alta qualidade e especificação de combustíveis como querosene de aviação e diesel, tendo em vista que surgem petróleos com mais altos teores de impurezas e cresce o grau de exigência do consumidor (Salmi, 2000).

Grande parte das indústrias químicas brasileiras foram concebidas através do licenciamento de tecnologias. O processo de licenciamento tecnológico raramente se configura em um processo de domínio tecnológico.

Embora este seja fundamental no entendimento, otimização, controle e projeto de processos (Julcour, 1999).

Portanto, a modelagem matemática e simulação de processos permite que algumas das etapas do processo de domínio tecnológico sejam realizadas de modo rápido e econômico. O resultado do trabalho de modelagem é um programa computacional que serve de base, quando validado adequadamente, para novos estudos e otimização, controle e projeto.

O objetivo desse artigo é utilizar a modelagem computacional, para fazer análises de reações químicas para a produção do propilenoglicol com baixo custo, em substituição dos métodos práticos que demandam uma taxa elevada de recursos financeiros e materiais.

### **Metodologia**

Deve-se a priori fazer o levantamento de dados dos parâmetros e das condições de operação do sistema do reator, determinando qual o tipo de reação que vai ocorrer, para que seja possível a produção do propilenoglicol, diante disso, deve-se determinar os seguintes dados:

- A reação que ocorrera no reator.
- Volume do reator.
- Temperatura de entrada e de saída do sistema.
- Temperatura da camisa de resfriamento.
- Concentrações iniciais do oxido de propileno, metanol e de água que são acrescentados a reação.

Após a obtenção desses dados, deve-se utilizar do software (Matlab), onde é feito o cadastro de todos os parâmetros e dados necessário, utilizando equações diferenciais ordinárias que são inseridas no programa, quando finalizada a analise o sistema reproduz em tempo real o que está acontecendo no reator através de gráficos.

Utiliza-se modelos matemáticos que consiste os balanços de massa por componente, e acordo com a equação 1, resultando na variação de concentração de cada componente dos materiais que foram adicionados ao reator em função do tempo, de forma analítica.

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{(C_i^0 - C_i)v^e}{V} \pm r_a \quad (1)$$

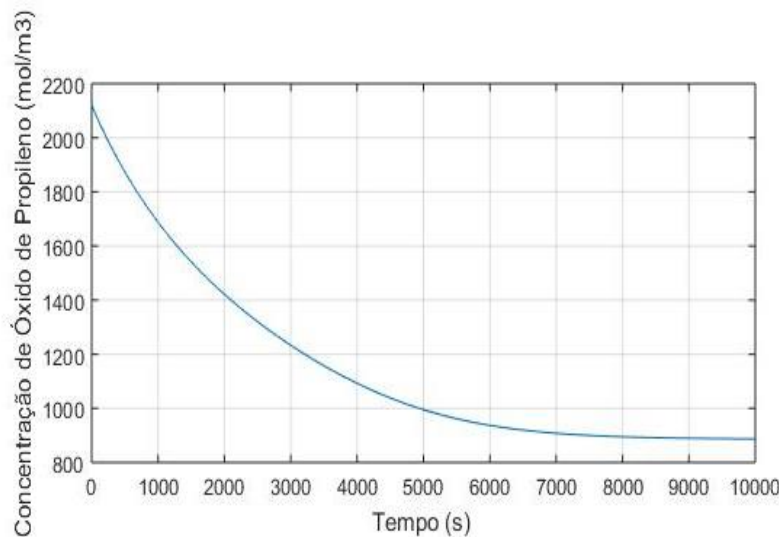
Acrescenta-se no software a equação 2 do balanço de energia, que determinara qual a variação de temperatura em função do tempo.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{v^e (\sum C_i^0 C_{p_i})}{\rho C_p V} (T^e - T) + \frac{(-\Delta H_R) r_a}{\rho C_p} + \frac{Q}{\rho C_p V} \quad (2)$$

## Resultados e Discussão

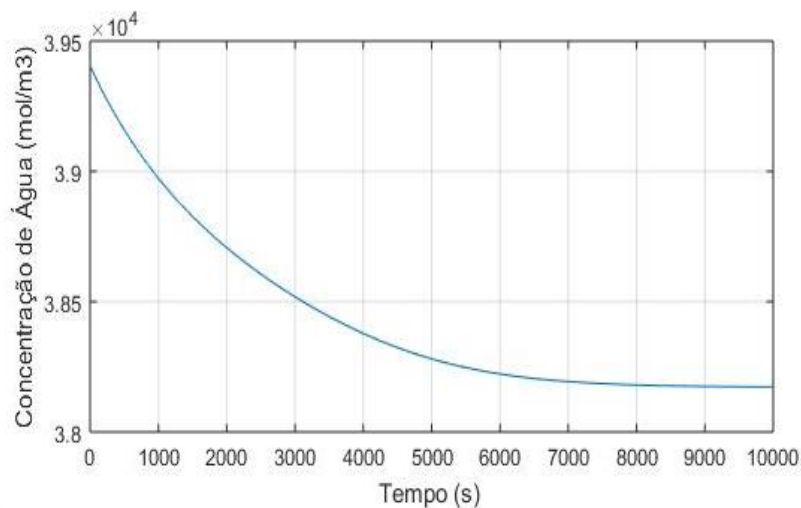
O comportamento da concentração na saída do reator para o óxido de propileno e água ao longo do tempo de operação do reator são mostrados nas figuras 1 e 2, respectivamente. O reator atinge o regime estacionário em aproximadamente 2 horas e com uma concentração de óxido de propileno de 887 mol/m<sup>3</sup>.

A figura 1 representa o que acontece com a concentração do oxido de propileno, onde percebe-se que no marco inicial a concentração do oxido é máxima no sistema, atingindo 2100 mol por metro cubico (mol/m<sup>3</sup>), e que a partir do momento em que ele interage com os demais reagentes a sua concentração vai reduzindo com o passar do tempo, pelo fato que de já está ocorrendo a produção de propilenoglicol.



**Figura 1. Concentração de oxido de propileno no reator**

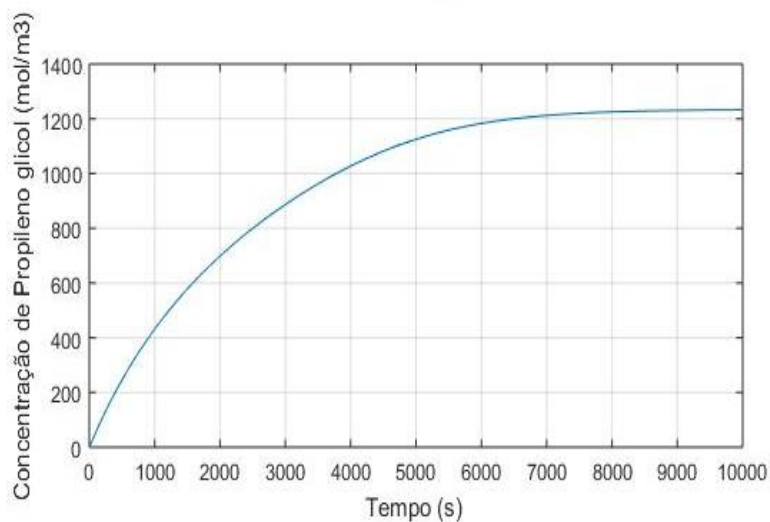
De acordo com a figura 2, no tempo inicial, a concentração de água está elevada, em torno de 40000 mol/m<sup>3</sup>, e a partir do momento que ela entra em contato com o propilenoglicol e com o metanol, ela passa a decair o seu teor de concentração com relação ao tempo.



**Figura 2. Concentração de água no reator**

A figura 3 ilustra o comportamento propilenoglicol, a concentração no regime estacionário corresponde a  $1233 \text{ mol/m}^3$ .

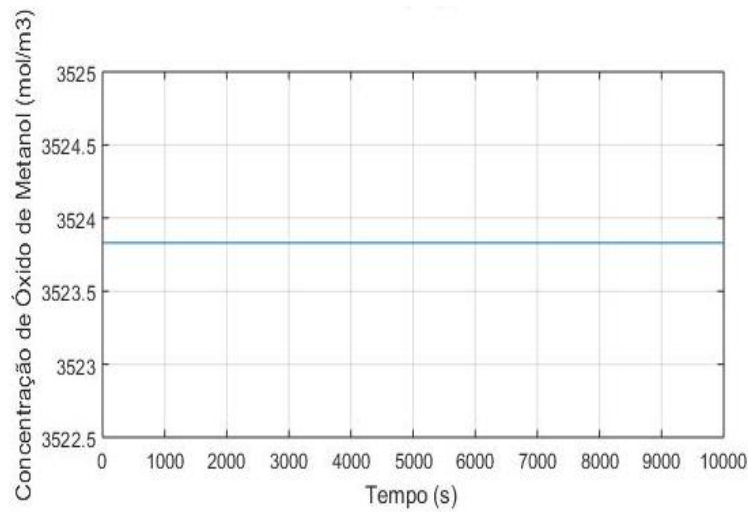
De acordo com a figura 3, percebe-se a produção de propilenoglicol, logo o gráfico inicia no marco zero, e a partir do momento que a reação exotérmica (liberando calor) entre (óxido de propileno, metanol e água), com relação ao tempo, percebe-se o aumento de propileno de forma exponencial.



**Figura 3. Produção de propilenoglicol**

A figura 4 mostra o perfil de concentração do metanol (inerte) usada para solubilizar o óxido de propileno. Representando o perfil dinâmico de concentração do metanol, ele serve unicamente para que a reação possa ocorrer, diante disso, ele funciona como um agregado, logo o mesmo percentual de metanol que foi inserido

no início em torno de  $352 \text{ mol/m}^3$  ira sair com a mesma proporção, logo representa uma linearidade.

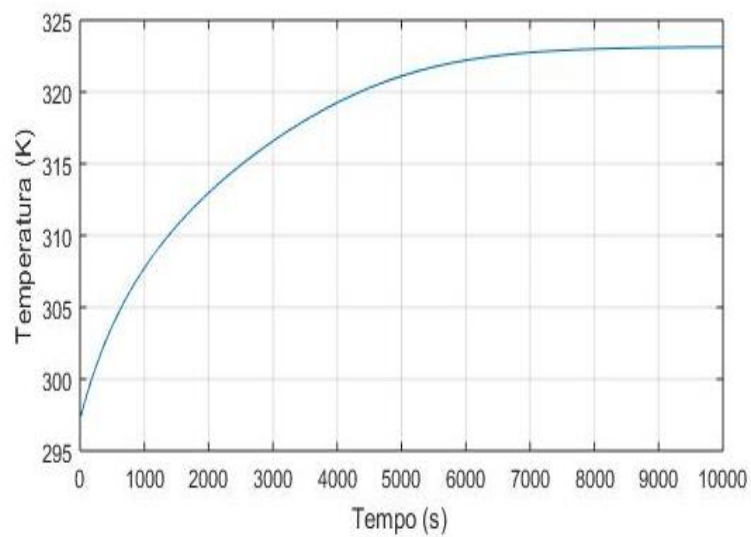


**Figura 4. Concentração de metanol**

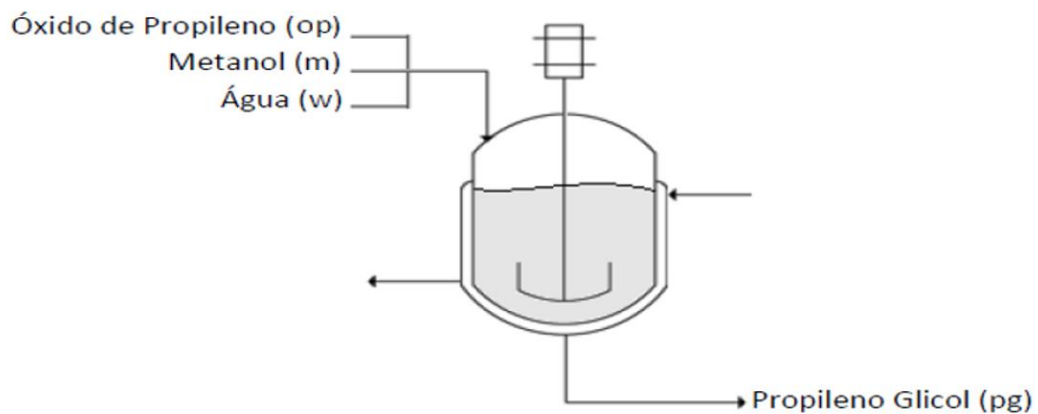
O aumento da temperatura no reator observado na figura 5 deve-se ao calor gerado pela reação, o controle de temperatura no reator é feito por um trocador de calor instalado, sendo a temperatura de operação no regime estacionário de  $50 \text{ }^\circ\text{C}$ .

De acordo com a figura 5, obtém-se a análise da temperatura do reator, percebe-se que no início do processo a temperatura está em equilíbrio com o ambiente, sendo considerada igual a zero, e que a partir do momento que se inicia a reação a temperatura vai se elevando com relação ao tempo, esse fenômeno ocorre pelo fato que de internamente ao reator tem-se um processo exotérmico, onde libera energia em forma de calor.

Diante disso o reator deve conter um acessório chamado de camisa de resfriamento ilustrado na figura 6, que é um compartimento acoplado ao reator que contém água, com o objetivo de manter o recipiente (reator), com uma temperatura ideal em torno de  $322 \text{ graus kelvins (K)}$  para que o processo ocorra com eficiência.

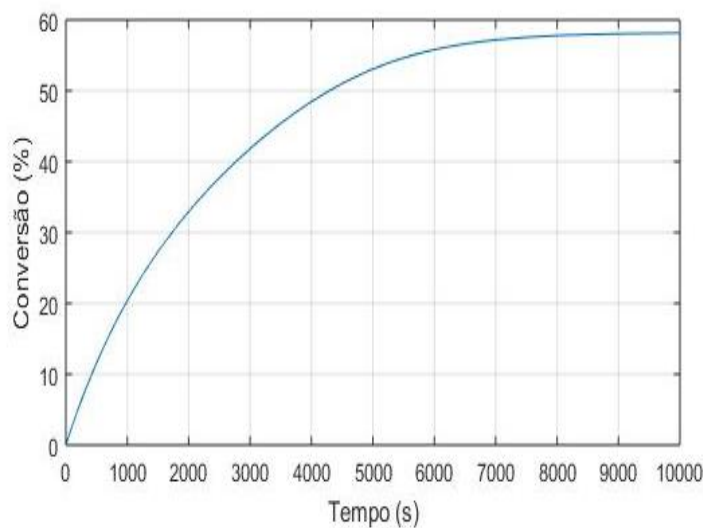


**Figura 5. Temperatura do sistema**



**Figura 6. Encopo do projeto**

De acordo com a figura 7, onde demonstra a conversão, ou seja, quanto é que o reator conseguirá produzir de propilenoglicol com eficiência. A conversão máxima alcançada no processo é de aproximadamente 58 %



**Figura 7. Conversão do processo**

### **Conclusões**

Neste trabalho a modelagem e a simulação da produção de propilenoglicol em um reator CSTR foi implementado com êxito no Matlab. Portanto foi possível obter o comportamento das principais variáveis do processo.

O modelo desenvolvido mostrou-se capaz de prever adequadamente o comportamento do reator, o que permite a utilização do mesmo para estudos de projeto, controle e otimização em tempo real.

O sistema exige um estudo detalhado do seu comportamento dinâmico afim de elaborar uma estratégia de controle eficiente e segura, além de atender as exigências ambientais.

O presente trabalho permite simular mudanças no processo sem a necessidade de realização de experimentos em escala de laboratório ou piloto, reduzindo eventuais custos e otimizando o processo de análise e fabricação do propilenoglicol.

### **Referências.**

FOGLER, H. Scott. Elementos de Engenharia das Reações Químicas. 4ª edição. Rio de Janeiro: Editora LTC, 2009.

JULCOUR, C., STÜBER, F., LE LANN J. M., WILHELM, A. M., DELMAS, H. 1999. Dynamics of a Three-Phase Upflow Fixed-Bed Catalytic Reactor. Chemical Engineering Science, 54, 2391-2400.

SALMI, T., WÄRNA, J., TOPPINEN, S., RÖNNHOLM, M., MIKKOLA, J. -P. Dynamic Modelling of Catalytic Three-Phase Reactors for Hydrogenation and Oxidation Processes. Brazilian Journal of Chemical Engineering, 17, No. 04-07, 1023-1034, 2000.

SCHUTZ, G.; LAUER, J.; LOPES, J. M.; RANGEL, R. S. Modelagem e Simulação de Reatores Químicos no EMSO e GNU OCTAVE. 2013. Monografia (Bacharel em Engenharia Química). Faculdades Integradas de Aracruz. Aracruz, Brasil, 2013.