



Marque a opção do tipo de trabalho que está inscrevendo:

Resumo

Relato de Caso

### SIMULAÇÃO DIDÁTICA DA OXIDAÇÃO DE DIÓXIDO DE ENXOFRE POR MEIO DO SOFTWARE DE MODELAGEM COCO

**AUTOR PRINCIPAL:** Gabriel Capellari Santos

**COAUTORES:** Alessandra Pezzini, Luana Meiry Dal Alba de Farias

**ORIENTADOR:** Aline Dettmer

**UNIVERSIDADE:** Universidade de Passo Fundo

#### INTRODUÇÃO:

A elaboração e aperfeiçoamento de processos químicos são as principais atribuições do engenheiro químico. Para se obter um processo sob condições ótimas, a correta relação dos parâmetros de processo é fundamental. A prática da simulação possibilita a avaliação de diferentes parâmetros no processamento de determinado produto, de modo que a partir de equações empíricas e dados experimentais, é possível estimar rendimentos, quantidades e estudo de viabilidade. O software COCO é uma das ferramentas de modelagem de protocolo CAPE-OPEN disponíveis no mercado, com enfoque em processos químicos. Apresenta a vantagem de ser gratuito e de interface intuitiva, e constitui uma ferramenta acessível para a elaboração de fluxogramas de processo. O objetivo do trabalho foi promover o contato com a prática de simulação de processos por meio da modelagem da reação de oxidação de  $\text{SO}_2$  a  $\text{SO}_3$ , processo muito comum na indústria, com base em trabalhos presentes na literatura.

#### DESENVOLVIMENTO:

Para a simulação, foram utilizados: COFE (versão 3.2.0.12), ambiente para organização dos fluxogramas de processo, onde são realizados os cálculos e as operações unitárias; pacote de reação química CORN, que contém as funções para cálculo cinético da reação, bem como balanços energéticos; as substâncias foram resgatadas a partir do pacote termodinâmico TEA, que contém todas as equações referentes a cada substância.

Com base no trabalho de La O, Sánchez e Merino (2017), foi delimitado como objeto de estudo um único reator de oxidação de  $\text{SO}_2$  a  $\text{SO}_3$ , do tipo PFR, o qual foi inserido na *flowsheet* a partir da própria biblioteca de operações unitárias do COFE. Os

# IV SEMANA DO CONHECIMENTO

COMPARTILHANDO E FORTALECENDO REDES DE SABERES

6 A 10 DE NOVEMBRO DE 2017



parâmetros de entrada de processo se encontram na Tabela 1, sendo que alguns foram propostos pelos autores do presente trabalho. A equação cinética da reação utilizada foi a seguinte:  $((2.1125e+005 * \exp(-3599.78/T)) * X(\text{Oxygen}) * X(\text{Sulfurdiox}) * (1 - (X * (\text{Sulfurtriox}) / ((\exp((-10.68 + 11300)/T)) * X(\text{Sulfurdiox}) * X(\text{oxygen})^2 * (P/101325)^{0.5}))) * (P / 101325)^{0.5} / (22.414 * (1 + (14.641 * X(\text{Sulfurdiox}) + 6.5775 * X(\text{Sulfurtriox})) * (P/101325))))$ . Os parâmetros do reator se encontram no quadro 1.

No estudo de La O, Sánchez e Merino (2017), o reator era recheado de catalisador, sobre o qual não foram explicitados dados, salvo sua contribuição na equação cinética supracitada. Com isso, na simulação do PFR, optou-se por não o fazer recheado. O fluxograma de processo é apresentado na Figura 1. Realizou-se um estudo paramétrico com as variáveis julgadas fundamentais na conversão de  $\text{SO}_2$  a  $\text{SO}_3$ , cujos intervalos se encontram na Tabela 2, de modo a se obter a região de maior conversão.

Os resultados de conversão e da corrente de saída foram os seguintes: A pressão se manteve praticamente constante; a temperatura sofreu um aumento de aproximadamente 25 °C; a fração molar de  $\text{SO}_3$  foi de 9,425%, indicando conversão quase total do  $\text{SO}_2$  inicial, o qual ficou com fração molar de 2,09% na saída. Esse resultado de conversão de  $\text{SO}_2$  a  $\text{SO}_3$  foi levemente superior ao encontrado por La O, Sánchez e Merino (2017) (aproximadamente 8,2%), fato que pode ser explicado pela desconsideração do parâmetro do catalisador e diferenças no tamanho do reator.

Após, o estudo paramétrico foi realizado buscando a maior conversão, e os resultados se encontram na Figura 2. Em teoria, a influência da temperatura e pressão na reação em fase gasosa seria positiva (maior conversão) quanto maior fossem estes parâmetros, devido a aumento de choques entre partículas. Também que quanto maior fosse o diâmetro do reator, maior seria o tempo de residência dos gases no reator, e por consequência, maior taxa de reação. Observa-se que para os dados de estudo, a maior conversão em base molar (11,64%), se deu no valor máximo de ambas as variáveis, e a partir dos resultados, é possível notar que a variável de maior influência é o diâmetro do reator, demonstrando que a influência do tempo de residência é muito mais significativa do que o choque entre as moléculas dos gases.

## CONSIDERAÇÕES FINAIS:

Após a simulação, concluiu-se que os valores obtidos não podem ser comparados aos apresentados na dissertação, devido às diferenças de delineamento e desconhecimento de alguns parâmetros de estudo. Com as variáveis utilizadas obteve-se uma conversão superior à da dissertação. Por fim, verificou-se que o *software* COCO possui um bom desempenho e se mostra cabível ao estudo de simulação de processos.

## REFERÊNCIAS:

LA O, Cristina Marcela Cortez de; SÁNCHEZ, Noemí Abigail Saballos; MERINO, Fabio Mateo Sorto. *Aplicación del programa "COCO simulator" en la simulación de*

# IV SEMANA DO CONHECIMENTO

COMPARTILHANDO E FORTALECENDO REDES DE SABERES

6 A 10 DE NOVEMBRO DE 2017



*componentes de procesos de industrias químicas en El Salvador, como una herramienta didáctica para la ingeniería química.* 2017. Trabalho de conclusão de curso (graduação em engenharia química) – Curso de Engenharia Química, Universidade de El Salvador, San Salvador, 2017.

**NÚMERO DA APROVAÇÃO CEP OU CEUA (para trabalhos de pesquisa):** Número da aprovação.

# IV SEMANA DO CONHECIMENTO

COMPARTILHANDO E FORTALECENDO REDES DE SABERES

6 A 10 DE NOVEMBRO DE 2017



## ANEXOS:

Tabela 1 - Parâmetros da corrente de entrada

| Temperatura | Pressão   | Fração molar SO <sub>2</sub> | Fração molar O <sub>2</sub> | Fração molar N <sub>2</sub> | Alimentação    |
|-------------|-----------|------------------------------|-----------------------------|-----------------------------|----------------|
| 425 °C      | 101325 Pa | 0,11                         | 0,1869                      | 0,7031                      | 155,94 ton/dia |

Fonte: Sánchez et al, (2017).

Quadro 1 - Parâmetros do reator

| Comprimento | Diâmetro | Temperatura | Direção do Fluxo | Recheio | Fase de reação |
|-------------|----------|-------------|------------------|---------|----------------|
| 6 m *       | 2 m *    | 723 K *     | cima p/ baixo *  | Não *   | Vapor *        |

Legenda: \* = Dados retirados de Sánchez et al. (2017).

\* = Dados explicitados pelos autores do trabalho.

Fonte: Próprios autores.

Tabela 2 - Intervalo de valores do estudo paramétrico

| Propriedade        | Valor mínimo | Valor máximo |
|--------------------|--------------|--------------|
| Temperatura        | 400 °C       | 500 °C       |
| Pressão            | 100000 Pa    | 110000 Pa    |
| Diâmetro do reator | 2 m          | 6 m          |

Fonte: Próprios autores.

Figura 1 – Fluxograma de processo na flowsheet do COFE.



Fonte: Próprios autores.

Figura 2 – Resultados do estudo paramétrico quanto à conversão de SO<sub>3</sub>.

| Temperature stream Entrada 1<br>°C | Pressure stream Entrada 1<br>Pa | Diameter of PFR 1 - Etapa 1<br>m | Mole fraction Sulfur trioxide stream Saída 1 |
|------------------------------------|---------------------------------|----------------------------------|--|
| 400                                | 100000                          | 2                                | 0.094269999                                  |
| 500                                | 100000                          | 2                                | 0.094269999                                  |
| 400                                | 110000                          | 2                                | 0.094089576                                  |
| 500                                | 110000                          | 2                                | 0.094089576                                  |
| 400                                | 100000                          | 4                                | 0.11631153                                   |
| 500                                | 100000                          | 4                                | 0.11631153                                   |
| 400                                | 110000                          | 4                                | 0.11631313                                   |
| 500                                | 110000                          | 4                                | 0.11631313                                   |
| 400                                | 100000                          | 6                                | 0.11640106                                   |
| 500                                | 100000                          | 6                                | 0.11640106                                   |
| 400                                | 110000                          | 6                                | 0.1164011                                    |
| 500                                | 110000                          | 6                                | 0.1164011                                    |

Fonte: Próprios autores.