

## **SIMULAÇÃO DO STEAM CRACKING DO ETANO UTILIZANDO DESIGN II: INFLUÊNCIA DO COMPRIMENTO DO REATOR**

***Yvson Costa e Silva <sup>(1)</sup>; Marta Ligia Pereira da Silva <sup>(2)</sup>; Meiry Gláucia Freire Rodrigues <sup>(3)</sup>***

(1) Universidade Estadual da Paraíba/Centro de Ciências e Tecnologia/Departamento de Química

(2) Aluna de Pós-Graduação em Engenharia Química/UFCG/CCT/DEQ

(3) UFCG /Centro de Ciências e Tecnologia/Departamento de Engenharia Química;

Avenida Aprígio Veloso, 882 – Bodocongó – 58.109-970 - Campina Grande – Paraíba

Fone: 83 310.1115 Fax: 83 310 1114 – e-mail: [yvson77@yahoo.es](mailto:yvson77@yahoo.es);

[martaligia@bol.com.br](mailto:martaligia@bol.com.br); [meiry@deq.ufpb.br](mailto:meiry@deq.ufpb.br)

**Palavras-chave:** Etano; Etileno; Steam Cracking; Simulação; Design II

**Área do Conhecimento:** III - Engenharias

**RESUMO:** Estudou-se a influência do comprimento do reator sobre a conversão do etano e a produção e seletividade do etileno em um reator tubular por meio do processo de craqueamento conhecido como steam cracking, utilizando-se o simulador Design II for Windows. Realizaram-se experimentos variando-se o comprimento do reator de 80-130 m. A partir dos dados obtidos, os quais foram tratados e analisados através de gráficos, e baseando-se em dados disponíveis em literatura específica, verificou-se que o comprimento que fornece as melhores condições para a conversão do etano, para a seletividade e produção do etileno foi o de 95m.

### **1. Introdução**

A evolução da tecnologia permite ao profissional realizar as mais diversas tarefas com o uso de computadores. Algumas delas são demasiadamente complexas e o seu estudo, sem um recurso computacional adequado, se torna impossível.

A modelagem e simulação de processos, com o auxílio de computadores, são vantajosas do ponto de vista prático e econômico, já que propiciam rapidez na obtenção dos resultados, facilidade e baixo custo para realizações dos mais diversos ensaios, que mesmo em escala laboratorial, seriam bastante onerosos. O uso de modelos e simulação exige conhecimento multidisciplinar, pois envolve tópicos da ciência e tecnologia aplicada à engenharia.

Os simuladores não podem ser a única alternativa do projetista, já que, como os mesmos trabalham em uma “realidade limitada”, seus modelos apenas sugerem uma aproximação do cotidiano. Os resultados obtidos são da mesma forma limitados e devem ser analisados como cautela. Mas mesmo com essa restrição, a facilidade e a flexibilidade de reproduzir um determinado processo em um computador, torna o simulador uma ferramenta indispensável nas indústrias de grande porte. O uso de simuladores na indústria química surge com a necessidade de obter um controle mais rígido dos processos envolvidos, que ao longo do tempo tornam-se mais complexos.

Os ensaios realizados através de um simulador, em geral, são comparados com dados empíricos, e a partir destes, pode-se

escolher criteriosamente o tipo de equipamento para determinado processo e, conseqüentemente, fazer o seu dimensionamento.

## 2. Revisão Bibliográfica

### 2.1. Modelagem

Modelagem é a obtenção dos modelos de processos físicos, químicos e biológicos, que pode ser física ou matemática.

Um modelo é qualquer objeto, concreto ou abstrato, que é utilizado para explicar algum tipo de fenômeno. Um modelo dinâmico destina-se a prever o comportamento do processo e gerar recomendações ou critérios para o controle do seu andamento.

A modelagem tem por objetivo a aplicação de técnicas computacionais e o desenvolvimento de novas metodologias dirigidas à resolução de problemas inerentes à Engenharia Química. Suas atividades relacionam-se com o desenvolvimento de modelos matemáticos, a simulação, síntese e otimização de processos químicos, o tratamento de sinais e interferência de estado, e o controle de processos (HILL, 1977).

### 2.2. Simulação

Simular é aplicar os modelos gerados, de maneira que os mesmos reproduzam o comportamento real do sistema e ainda, permitam extrapolações válidas desse comportamento.

A simulação, hoje em dia, está se transformando em uma ferramenta poderosa no estudo de processos industriais. Cada vez mais se observa o desenvolvimento de simuladores que podem ser aplicados nas diversas áreas da engenharia química (bioquímica, catálise, controle, etc.) (FEHR, 1980).

### 2.3. Craqueamento

O craqueamento, ou pirólise, é o processo de conversão de moléculas grandes em moléculas menores pela aplicação de calor (craqueamento térmico) e/ou de catalisadores (craqueamento catalítico). (SHREVE, 1980).

O craqueamento tanto pode ser térmico como catalítico. A diferença fundamental entre eles é que o térmico necessita de

temperaturas e pressões elevadas para romper as moléculas mais pesadas, enquanto o catalítico só exige a presença de uma substância denominada catalisador, o que permite maior segurança e fácil manejo, propiciando maior economia e rentabilidade. (PETROBRÁS, 1974).

### 2.4. Steam Cracking

Um caso particular do processo de craqueamento térmico, decorrente da utilização de vapor de água em conjunto com a alimentação, é o *steam cracking*.

Neste processo, na seção do tubo chamada zona de convecção, a mistura vapor-hidrocarbonetos é aquecida a temperaturas em torno de 600°C, para ser conseqüentemente, “craqueada” em temperaturas de até 900°C. O tempo de residência da mistura reacional varia de 0,2 – 0,5 s. A mistura gasosa “craqueada” emerge com uma velocidade de 200m/s e é resfriada imediatamente para 350 – 400°C, logo após a saída da fornalha. A velocidade de resfriamento se mantém em torno de 10<sup>4</sup>°C/s, para evitar reações subseqüentes. Sucessivos resfriamentos ocorrem para que haja a condensação da água (fase líquida) e conseqüentemente a separação da mistura de hidrocarbonetos (fase gasosa). (LYLE, 1983).

A função do vapor no *steam cracking* é de reduzir a pressão parcial dos hidrocarbonetos (RAO, 1998).

### 2.5. O Etileno

O Etileno (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) é um hidrocarboneto insaturado de peso molecular 28g/gmol, ponto de fusão -169°C, ponto de ebulição -102°C, menos denso que a água e insolúvel nesta. Sua maior aplicação está concentrada na indústria de polímeros. Alguns dos seus derivados são etileno glicol (anti-congelante), substâncias plásticas, fibras, películas, substâncias acrílicas, solventes, ácido acético e anidrido acético, gases refrigerantes e propelentes (MORRISON e BOYD, 1981).

## 3. Metodologia

Neste projeto, o caso em estudo partiu de um exemplo incluso no simulador, onde as

condições pré-estabelecidas são mostradas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Condições pré-estabelecidas no exemplo utilizado.

TCE	PCE	$\Delta PR$	DR	CR
630°C	3atm	2atm	2in	95m

Onde TCE é a temperatura da corrente de entrada do reator; PCE é a pressão da corrente de entrada do reator;  $\Delta PR$  é a variação da pressão no reator; DR é o diâmetro do reator; CR é o comprimento do reator.

A reações estudadas estão descritas através das equações químicas da Tabela 3.2, sendo a principal a reação 1:

Tabela 3.2 – Reações envolvidas na simulação do *steam cracking* do etano.

Reação	Equação Química
1	$C_2H_6 \rightarrow C_2H_4 + H_2$
2	$C_2H_4 + H_2 \rightarrow C_2H_6$
3	$2C_2H_6 \rightarrow C_3H_8 + CH_4$
4	$C_3H_8 \rightarrow C_2H_2 + CH_4$
5	$C_2H_2 + CH_4 \rightarrow C_3H_6$
6	$C_2H_4 + C_2H_2 \rightarrow C_4H_6$
7	$C_2H_4 + C_2H_6 \rightarrow C_3H_6 + CH_4$

As características dos componentes presentes nas reações do *steam cracking* do etano, são mostradas na Tabela 3.3:

Tabela 3.3 – Características dos Componentes presentes no *steam cracking* do etano.

Componentes	PM (lb/lbmol)	PE (°F)
H <sub>2</sub> (Hidrogênio)	2,02	-423
CH <sub>4</sub> (Metano)	16,04	-258,7
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (Etano)	30,07	-127,48
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> (Propano)	44,09	-43,78
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> (Etileno)	28,05	-154,68
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> (Acetileno)	26,04	-119,2
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> (Propileno)	42,08	-53,86
C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> (1,3-Butadieno)	54,09	24,06

Onde PM é o peso molecular de cada componente e PE os seus respectivos pontos de ebulição.

#### 4. Resultados e Discussão

As Figuras 01 e 02 apresentam, respectivamente, a conversão do etano em função do comprimento do reator e a seletividade do etileno em função de sua produção.

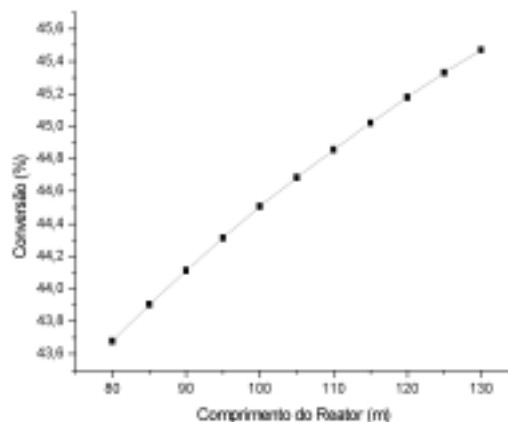


Figura 01: Comportamento da conversão do etano em função do comprimento do reator no craqueamento do etano.

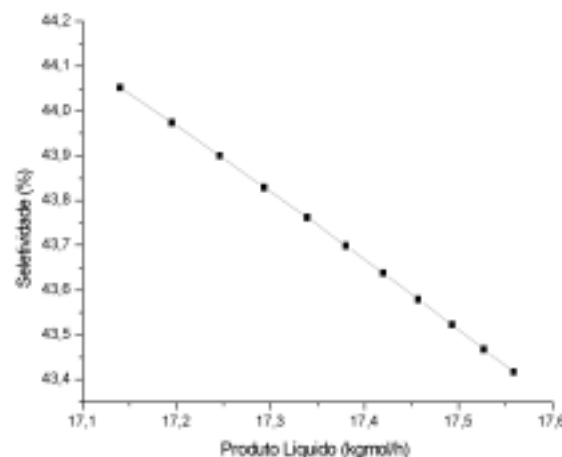


Figura 02 – Comportamento da seletividade do etileno em função de sua produção no craqueamento do etano.

De acordo com a Figura 01 pode-se observar que a conversão do etano é favorecida pelo aumento do comprimento do reator, embora a seletividade do etileno decresça, como mostra a Figura 02.

Para o efeito do comprimento do reator, obteve-se um valor de 95m como

sendo o que possui a melhor relação produção-seletividade. Também foi observado graficamente que para a faixa de comprimento entre 80 e 130m, não houve grande alteração na produção do etileno, indicando que, para este parâmetro, a variação de comprimento do reator não é relevante.

## 5. Conclusão

A análise e interpretação dos resultados obtidos, através da simulação do craqueamento do etano na presença de vapor (*steam cracking*) em um reator PFR, no simulador Design II for Windows, sugere que para a influência do comprimento do reator, considerando os fatores quantidade de etileno produzido e sua seletividade, a condição favorável ao processo é quando o reator mede 95m.

## Referências Bibliográficas

FEHR, M., Revista Brasileira de Engenharia de Engenharia Química, Vol. IV, Nº 02, Julho de 1980.

HILL Jr., C. G., An Introduction to Chemical Engineering Kinetics & Reactor Design, John Wiley & Sons – 1977.

LYLE F. A.; et al, Pyrolysis – Theory and industrial practice, Academic Press, New York – 1983.

MORRISON, R. T.; BOYD, R. N., Química Orgânica – Sétima Edição – Fundação Calouste Gulbenkian – Lisboa – Portugal – 1981.

PETROBRÁS, O Mundo Fabuloso do Petróleo – Petróleo Brasileiro S.A. – PETROBRÁS, Rio de Janeiro – RJ, Julho de 1974.

RAO, B. K. B. - Modern Petroleum Refining Processes - 3rd Edition - Oxford & IBH Publishing CO. PVT. LTD - New Delhi - Calcutta – 1998.

SHREVE, R. N.; BRINK Jr, J. A. - Indústrias de Processos Químicos - Quarta Edição - Editora Guanabara Dois S. A. - Rio de Janeiro – RJ – 1980.