



MODELOS CINÉTICOS E DE EQUILÍBRIO NA REDUÇÃO DO MECANISMO DE REAÇÕES CONSIDERANDO A PIRÓLISE DO ETANO¹

Ângela Patricia Grajales Spilimbergo², Viktor G. Krioukov³. UNIJUI

A pirólise de etano é amplamente aplicada na química do petróleo para a obtenção de etileno - componente básico da produção do plástico (polietileno). Esse processo ocorre em tubos pirolíticos em altas pressões ($P \approx 100 \text{ atm}$) e temperaturas ($T \approx 800, \dots, 900 \text{ K}$) e envolve muitas reações. Como resultado, na saída, além de etileno, são formados os subprodutos, cujas frações devem ser reduzidas, variando P , T e o comprimento dos tubos pirolíticos. Portanto, uma atenção considerável deve ser dada à simulação matemática do processo de pirólise. Modelos bastante completos que consideram: as reações químicas, as radiações de aquecimento, a transferência de calor no interior dos produtos de pirólise, etc, são desenvolvidos. No entanto, a aplicação de tais modelos é dificultada pela complexidade do mecanismo de reações, que é constituído por dezenas de substâncias e centenas de reações. Ao mesmo tempo, sabe-se que muitas destas reações apresentam pouca influência sobre as características dos produtos de saída. Portanto, se justifica a suposição de que parte substancial das reações e das substâncias pode ser retirada do mecanismo completo, sem prejuízo para a precisão dos resultados dos cálculos. Assim, foi proposto um conjunto de métodos para a solução deste problema. Métodos tais como: análise das taxas de reação; CSP - “computational singular perturbation method; ILDM - “Intrinsic low-dimensional manifold method”, e também o “método de engajamento” proposto pelos autores. No presente trabalho as simulações numéricas do processo de pirólise com o uso do equilíbrio e com abordagem cinética foram realizadas para as condições de um reator de mistura ideal. O mecanismo completo de reações inclui 63 reações. A zona de alteração dos parâmetros corresponde às condições de pirólise industrial: $T = 900; \dots; 1200 \text{ K}$, $P = 2; \dots; 8 \text{ atm}$, $C_2H_6/H_2O = 1; \dots; 2$,

. O método de engajamento, desenvolvido em trabalhos anteriores, foi aplicado para a redução do mecanismo “completo”, considerando τ , com indicador de redução τ . No intervalo de temperatura investigado, os resultados obtidos por esses métodos diferem significativamente entre si. De acordo com o modelo de equilíbrio os produtos de pirólise contém principalmente, metano e também pequenas concentrações de C_2H_4 , C_2H_2 e H_2 , com poucas alterações no intervalo $T = 900; \dots; 1200 \text{ K}$. Mas, de acordo com o modelo cinético os principais produtos de pirólise são C_2H_4 e H_2 , cujas concentrações dependem da temperatura. Além disso, na saída do reator pode conter concentrações significativas de reagentes (C_2H_6). Sua decomposição determina a temperatura estacionária T_f no reator: para pequenos graus de decomposição $T_f > T_0$, e para graus significativos, $T_f < T_0$. Além disso, para o modelo cinético, observou-se que o mecanismo completo (C-mecanismo), composto inicialmente por 63 reações foi reduzido em relação às reações em 3,5 vezes, enquanto que em relação às espécies em 1,3 vezes.



CT&I e SOCIEDADE

XVIII SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA
XV JORNADA DE PESQUISA
XI JORNADA DE EXTENSÃO

4 a 8 de OUTUBRO de 2010



¹ Pesquisa Institucional Docente

² Professora do DeFEM - Departamento de Física, Estatística e Matemática da UNIJUI

³ Pesquisador colaborador - Universidade estatal Técnica de Kazan / UETK - Rússia