UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA

EQE776 Modelagem e Simulação de Processos

Aula 06. Craqueamento a vapor do etano em DWSIM

Professor: Roymel Rodríguez Carpio

E-mail: roymel@eq.ufrj.br

Recapitulando

- Dimensionamento de coluna desbutanizadora em Aspen Hysys

Temas da aula

- Craqueamento a vapor do etano em DWSIM

Apresentação do problema

O craqueamento a vapor consiste na quebra das moléculas de hidrocarbonetos saturados (etano, propano, etc.) para a obtenção de olefinas leves (eteno, propeno, etc.) na presencia e vapor de água.

A reação acontece em fornos a altas temperaturas, sendo que o vapor de água é um inerte, utilizado somente para diminuir a pressão parcial dos compostos que participam na reação.

Será realizada uma simulação simplificada, utilizando um reator do tipo PFR e considerado apenas a reação de conversão do etano em eteno.

Apresentação do problema

Condições da corrente de alimentação de gás:

- Temperatura: 953 K
- Pressão: 303000 Pa
- Vazão: 100 mol/s
- Fração molar C_2H_6: 1
- Fração molar de C_2H_4: 0
- Fração molar de H_2: 0,00
- Fração molar de H_2O: 0

Apresentação do problema

Condições da corrente de alimentação de vapor:

- Temperatura: 953 K
- Pressão: 303000 Pa
- Vazão: 60% da vazão molar de gás
- Fração molar C_2H_6: 0
- Fração molar de C_2H_4: 0
- Fração molar de H_2: 0,00
- Fração molar de H_2O: 1

Apresentação do problema

Informações da reação química:

$$C_2H_6 \Leftrightarrow C_2H_4 + H_2$$

Cujas taxas de reação (mol.m^{-3}.s^{-1}) direta e inversa dependem da concentração (mol. m^{-3}) segundo :

$$r_d = k_d C_{C_2H_6}$$
$$r_i = k_i C_{C_2H_4} C_{H_2}$$

Sendo que k obedece a equação de Arrhenius:

$$k = k_0 e^{\left(-\frac{Ea}{RT}\right)}$$

Com:

$$k_{d0} = 8{,}65E14; k_{i0} = 2{,}25E13; Ea = 273000\ \mathrm{J/mol}$$

Apresentação do problema

Informações do reator:

- Reator tubular do tipo PFR
- Operação isotérmica
- Volume efetivo: 5 m3
- Cumprimento do reator: 100 m

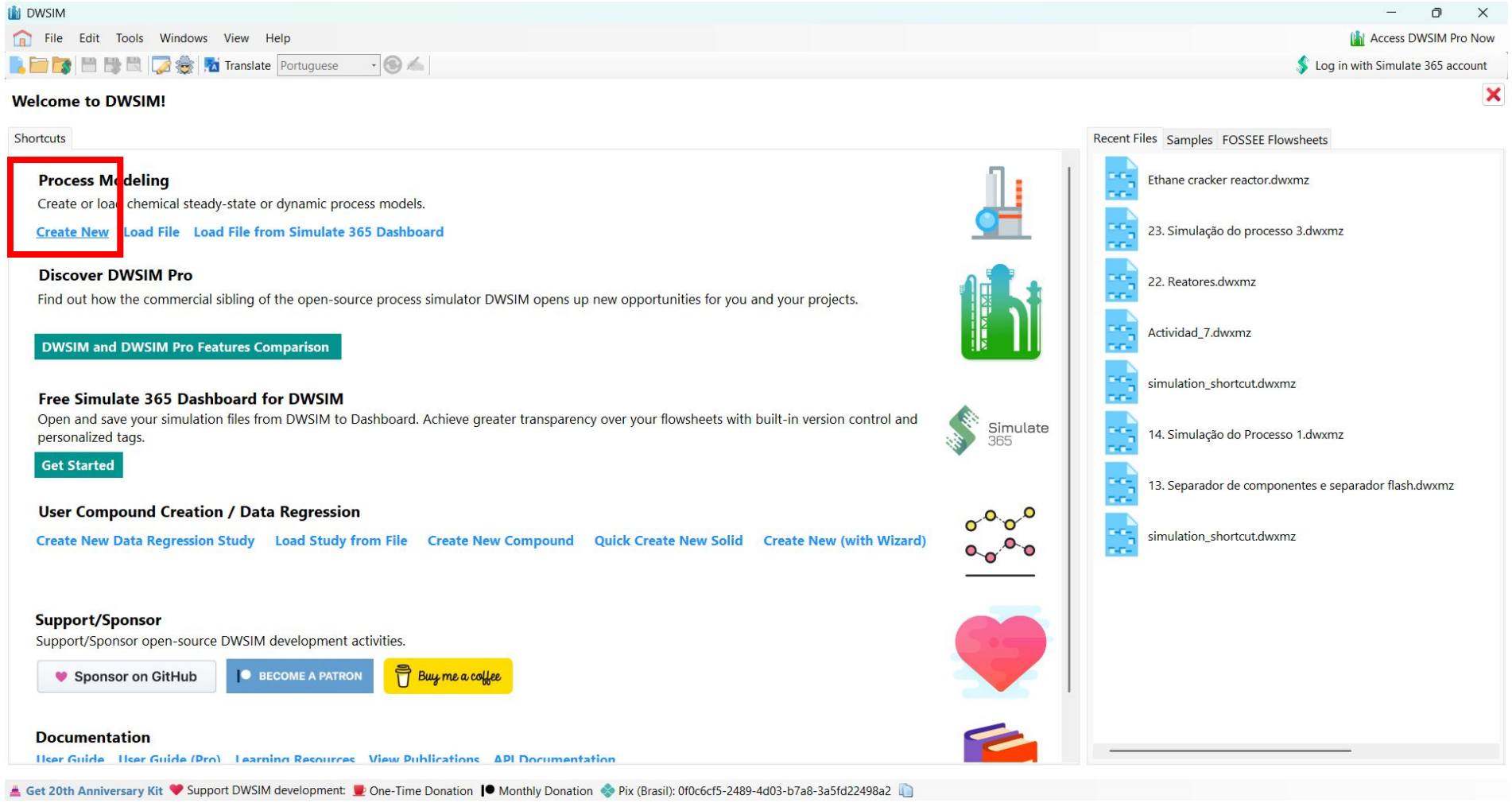
Apresentação do problema

Realize a simulação desse processo e responda:

- Qual será a conversão da reação?
- Quanta energia será necessária retirar do reator para manter a operação isotérmica?
- Troque o tipo de operação para adiabática e verifique qual o novo valor da conversão? Explique esse comportamento.
- Retome a operação isotérmica e realize uma análise de sensibilidade da conversão em função da vazão de gás. Utilize uma faixa de 10 a 100 mol/s de gás. Explique o comportamento encontrado.
- Proponha outras formas de aumentar a conversão.

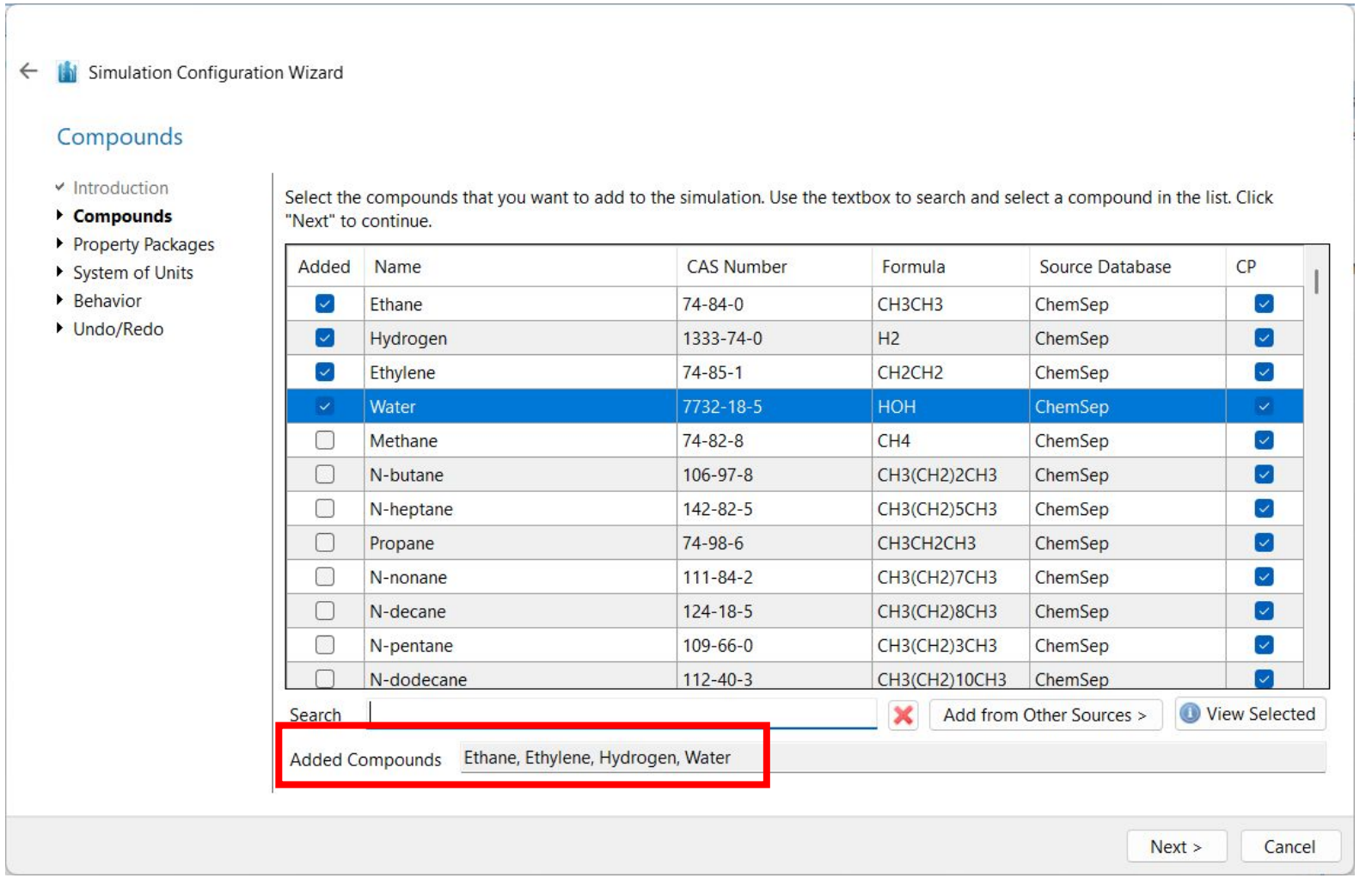
Simulação em DWSIM

Criar novo caso



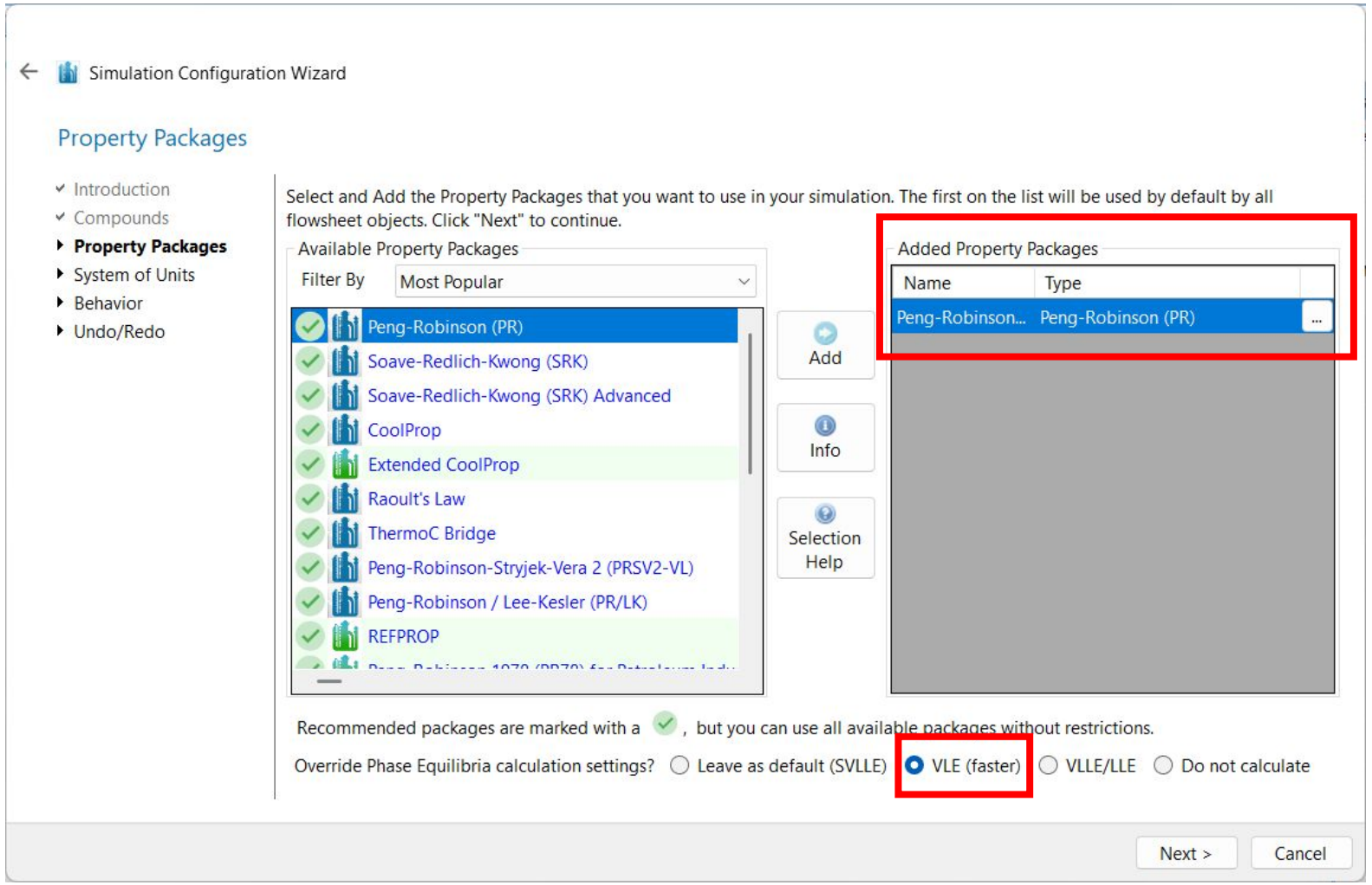
Simulação em DWSIM

Especificação dos componentes



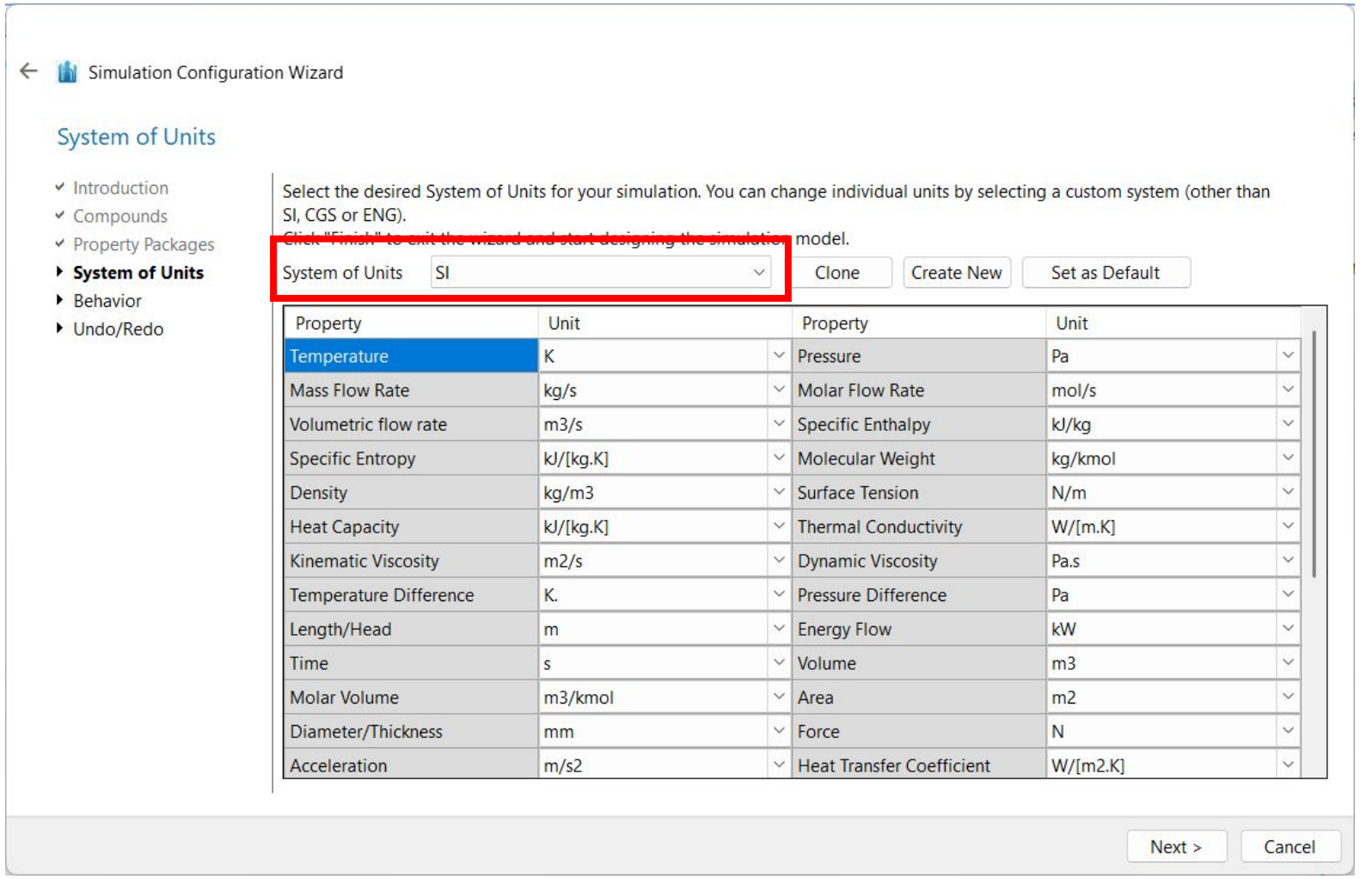
Simulação em DWSIM

Especificação do pacote termodinâmico



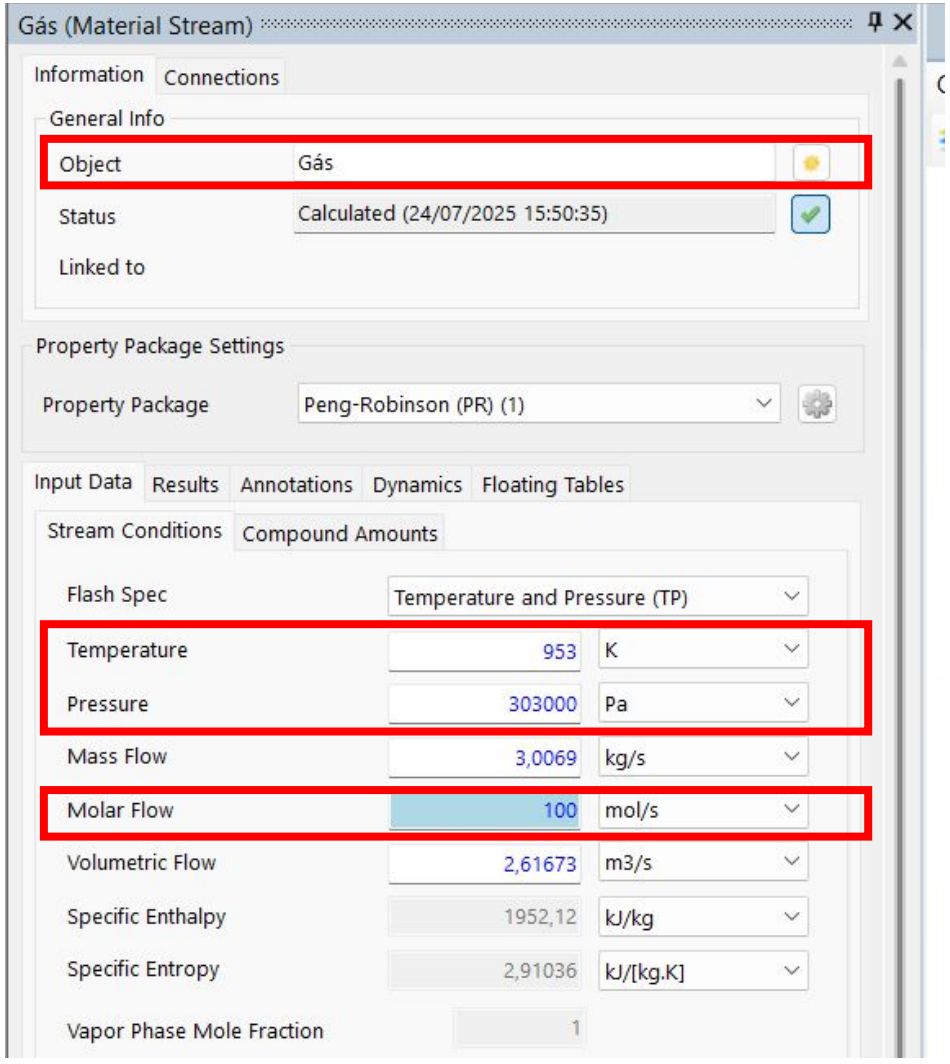
Simulação em DWSIM

Especificação do sistema de unidades SI



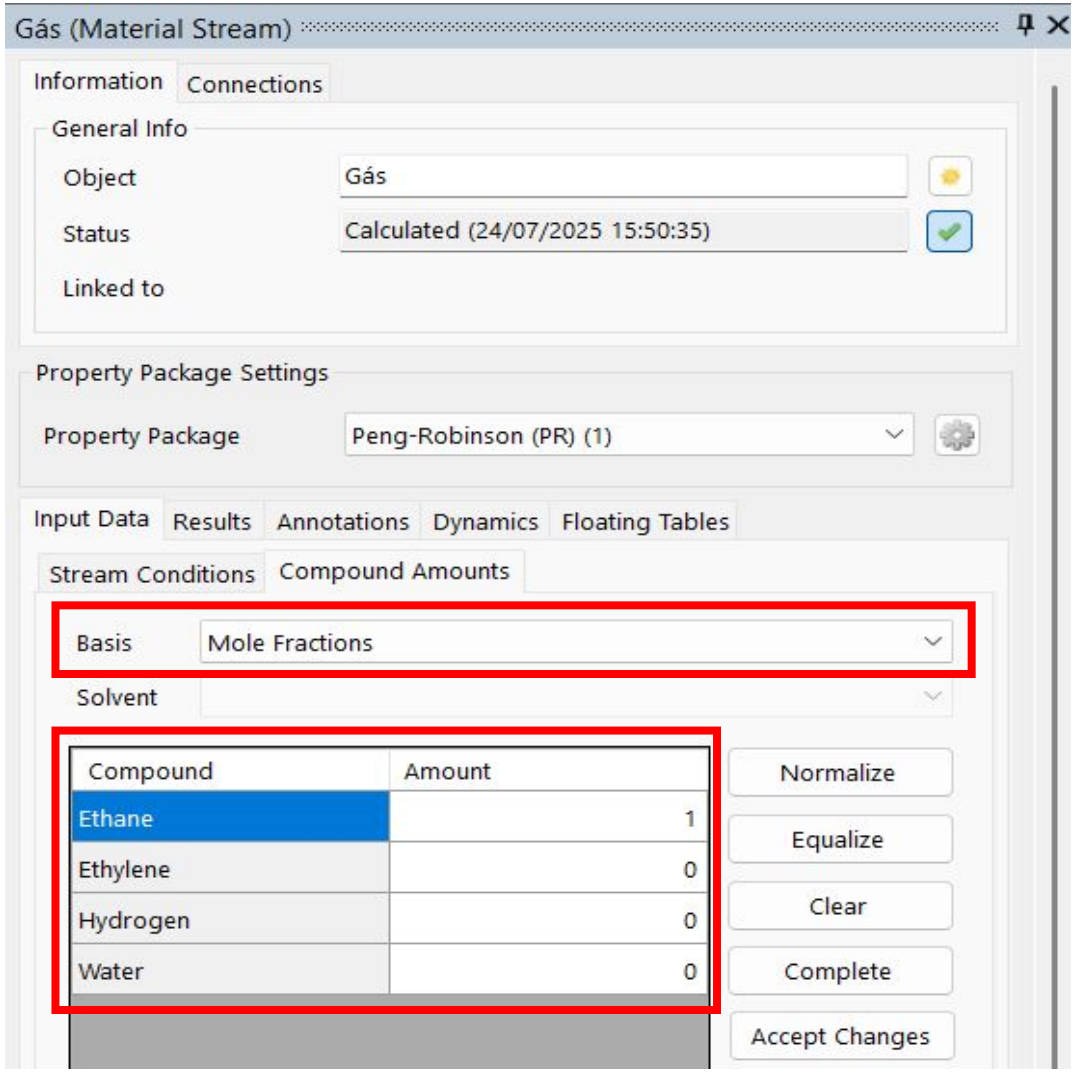
Simulação em DWSIM

Corrente de gás



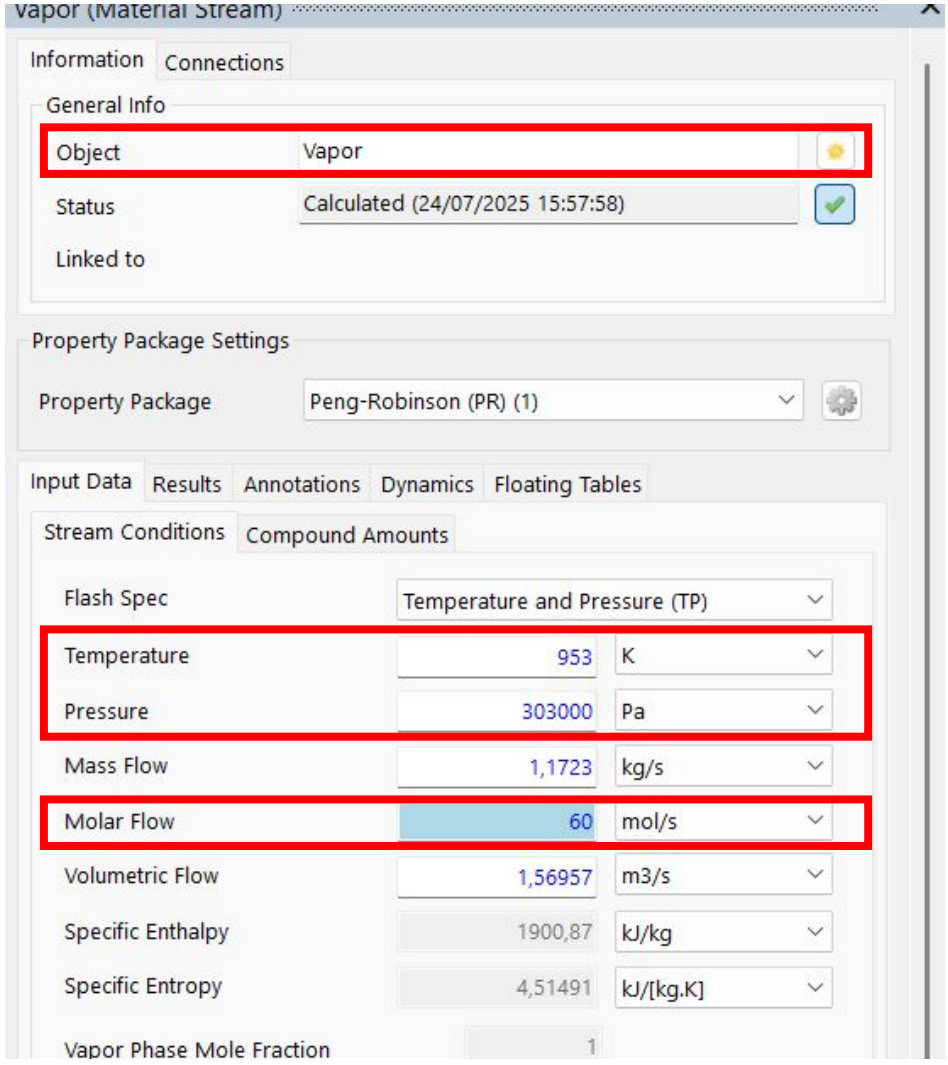
Simulação em DWSIM

Corrente de gás



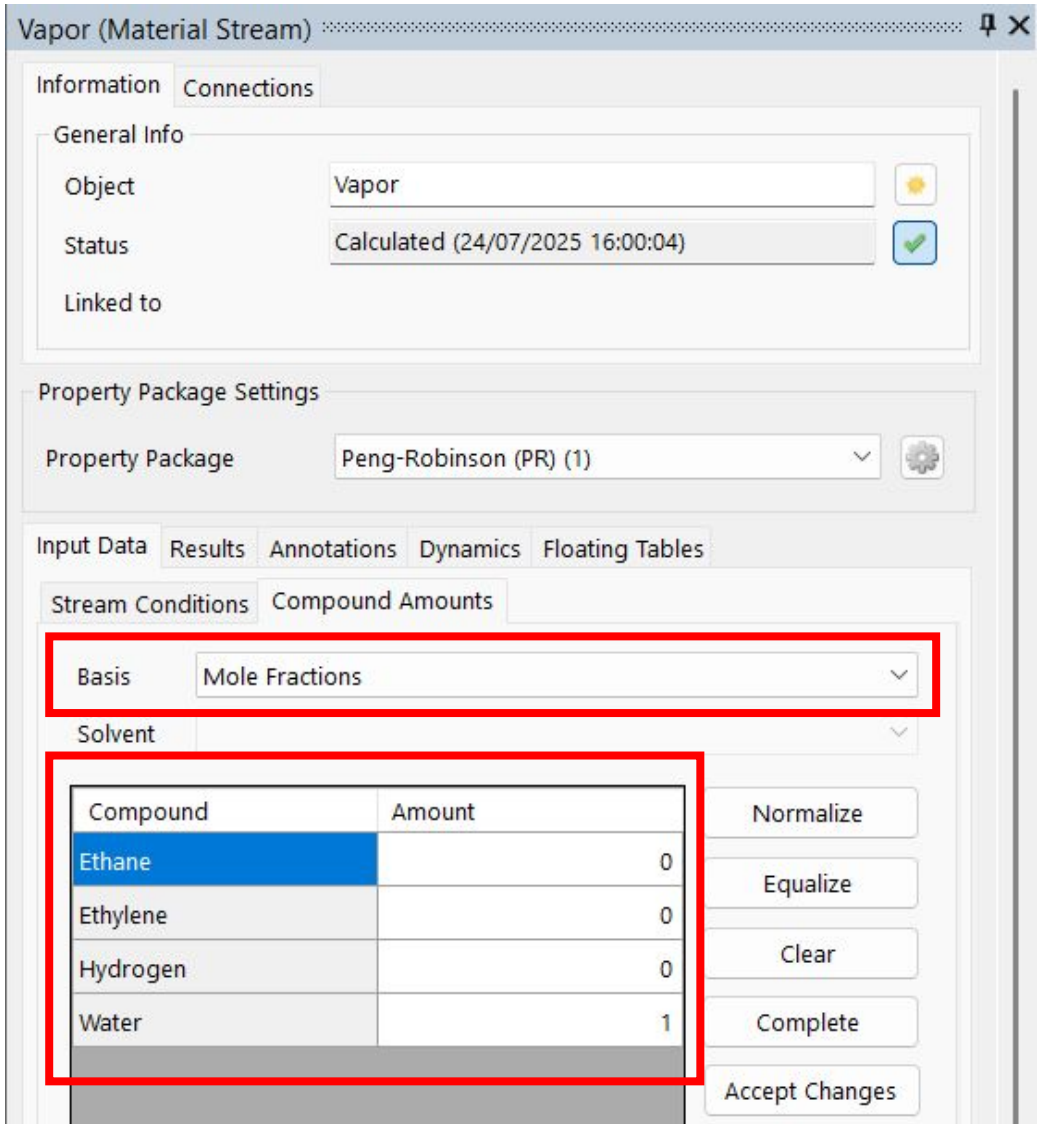
Simulação em DWSIM

Corrente de vapor



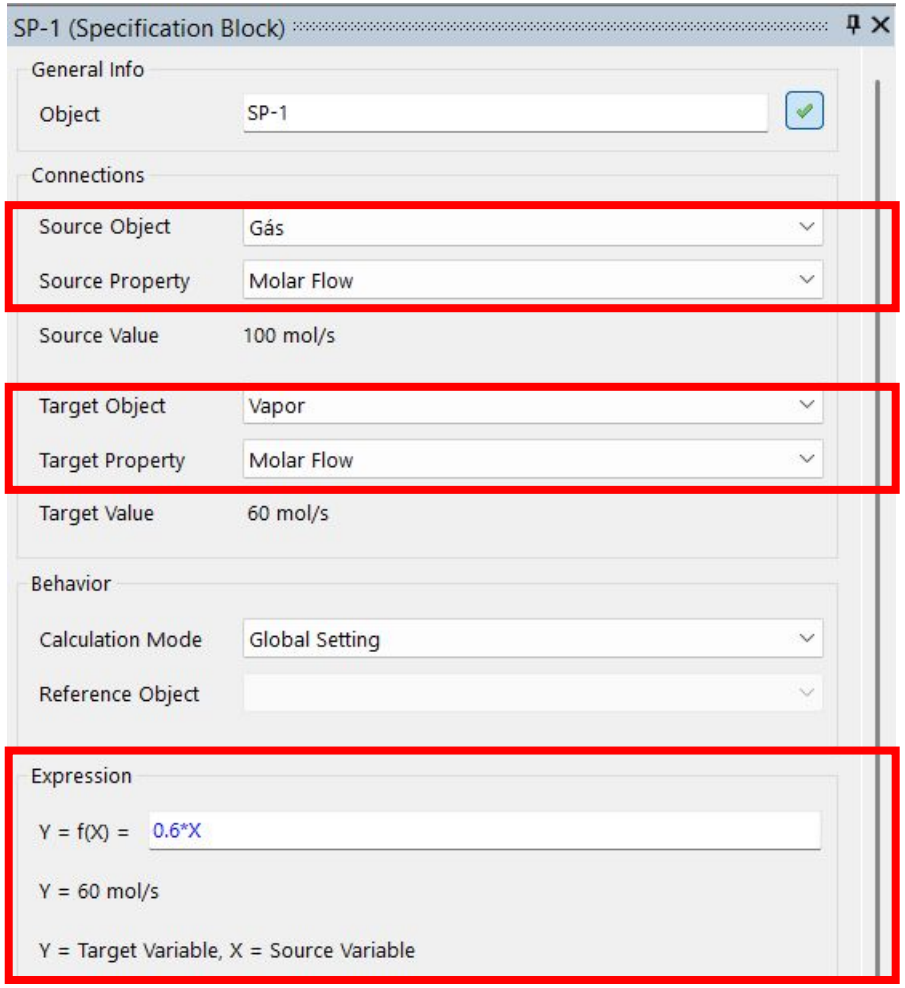
Simulação em DWSIM

Corrente de vapor



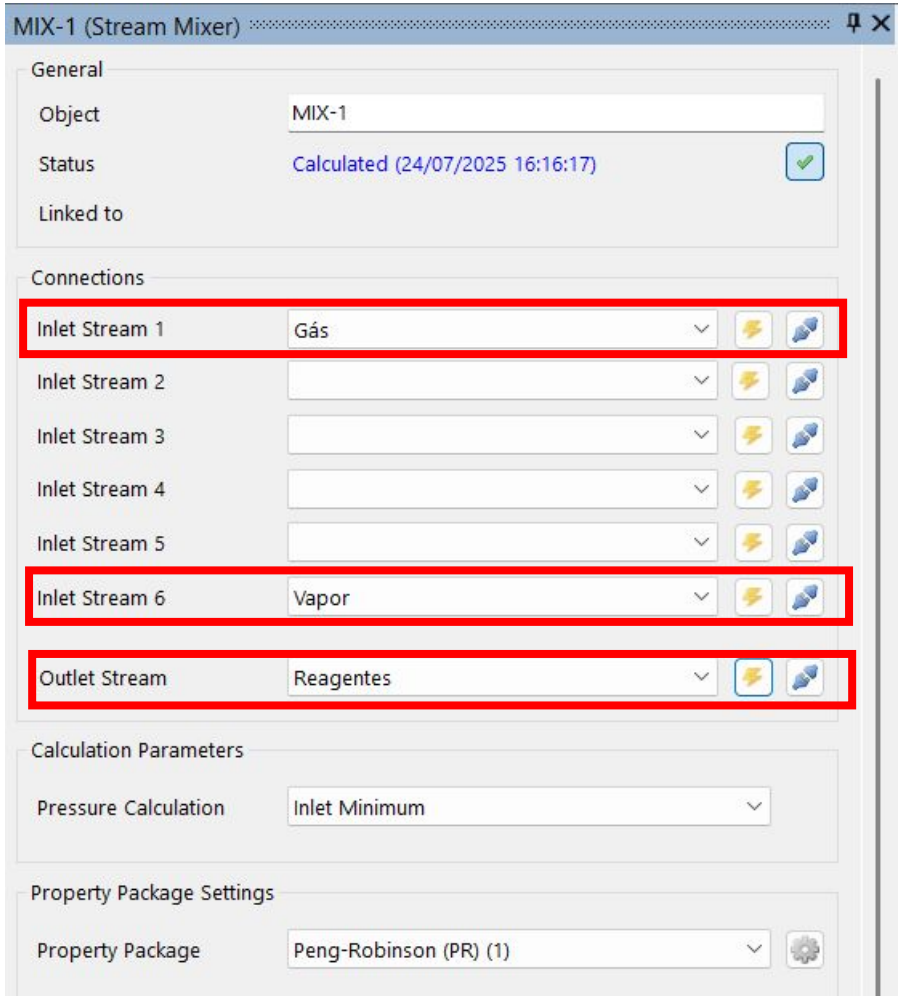
Simulação em DWSIM

Usando o bloque de especificação para fixar a proporção vapor/gás



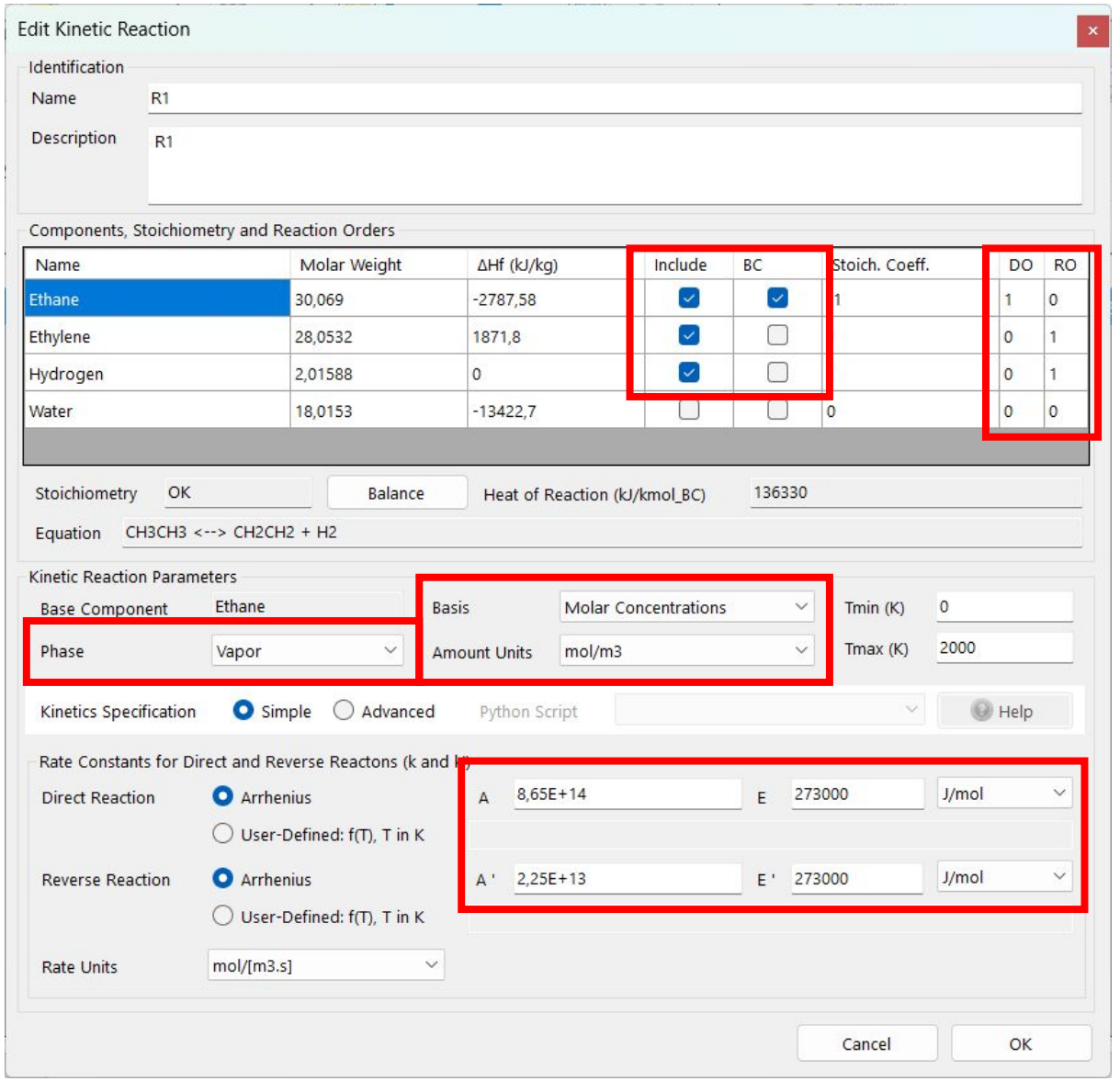
Simulação em DWSIM

Misturando as correntes de gás e vapor



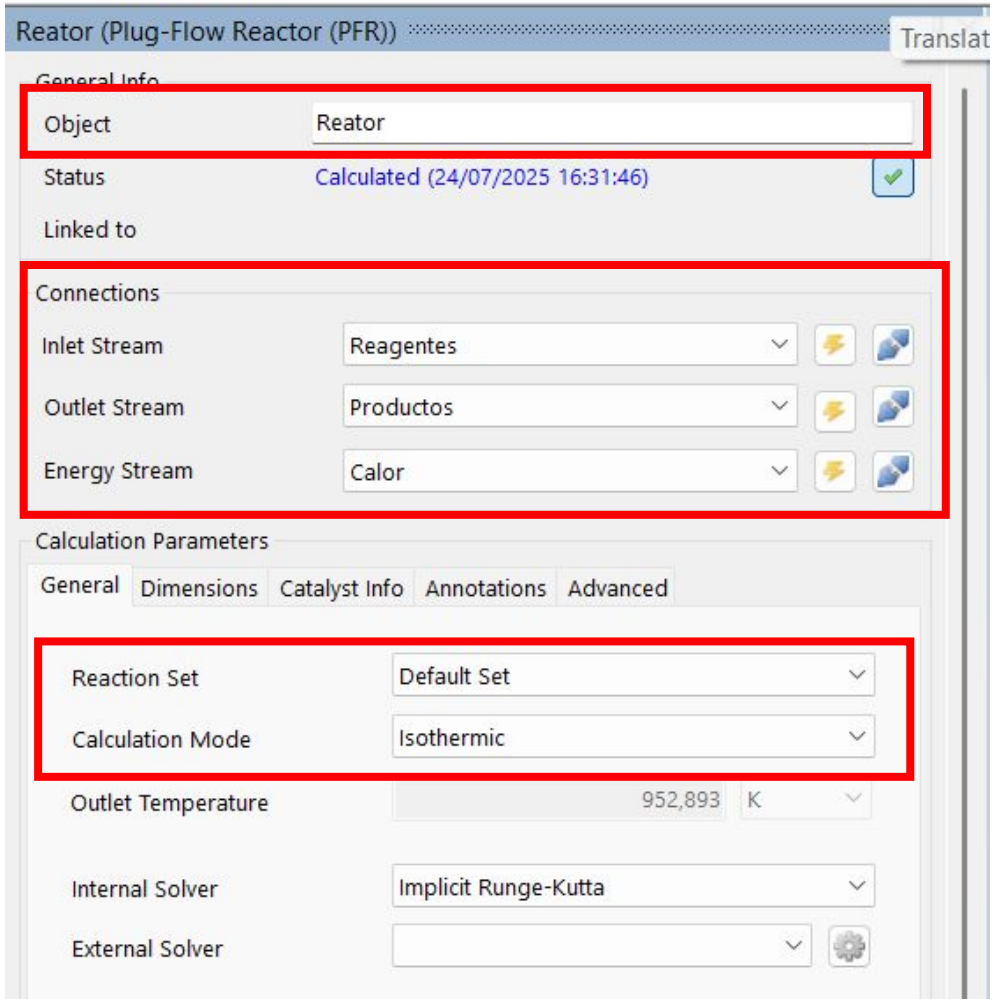
Simulação em DWSIM

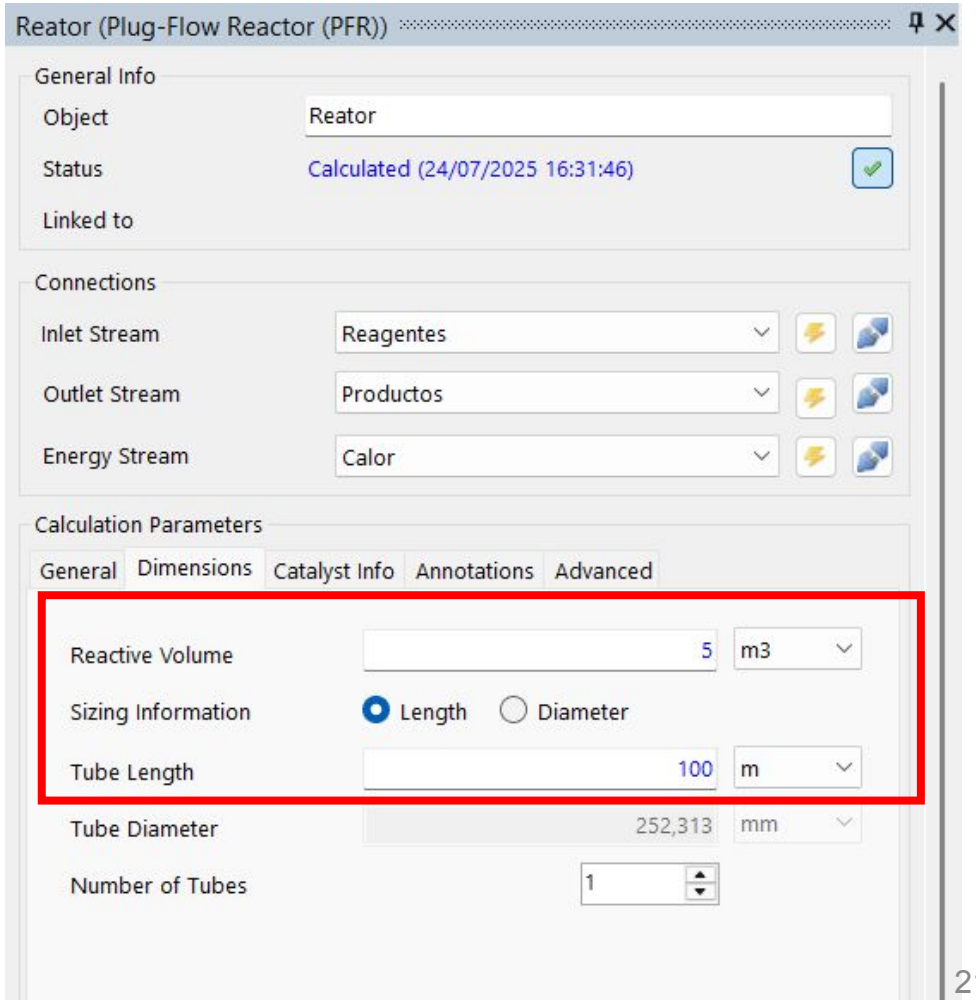
Especificando a reação



Simulação em DWSIM

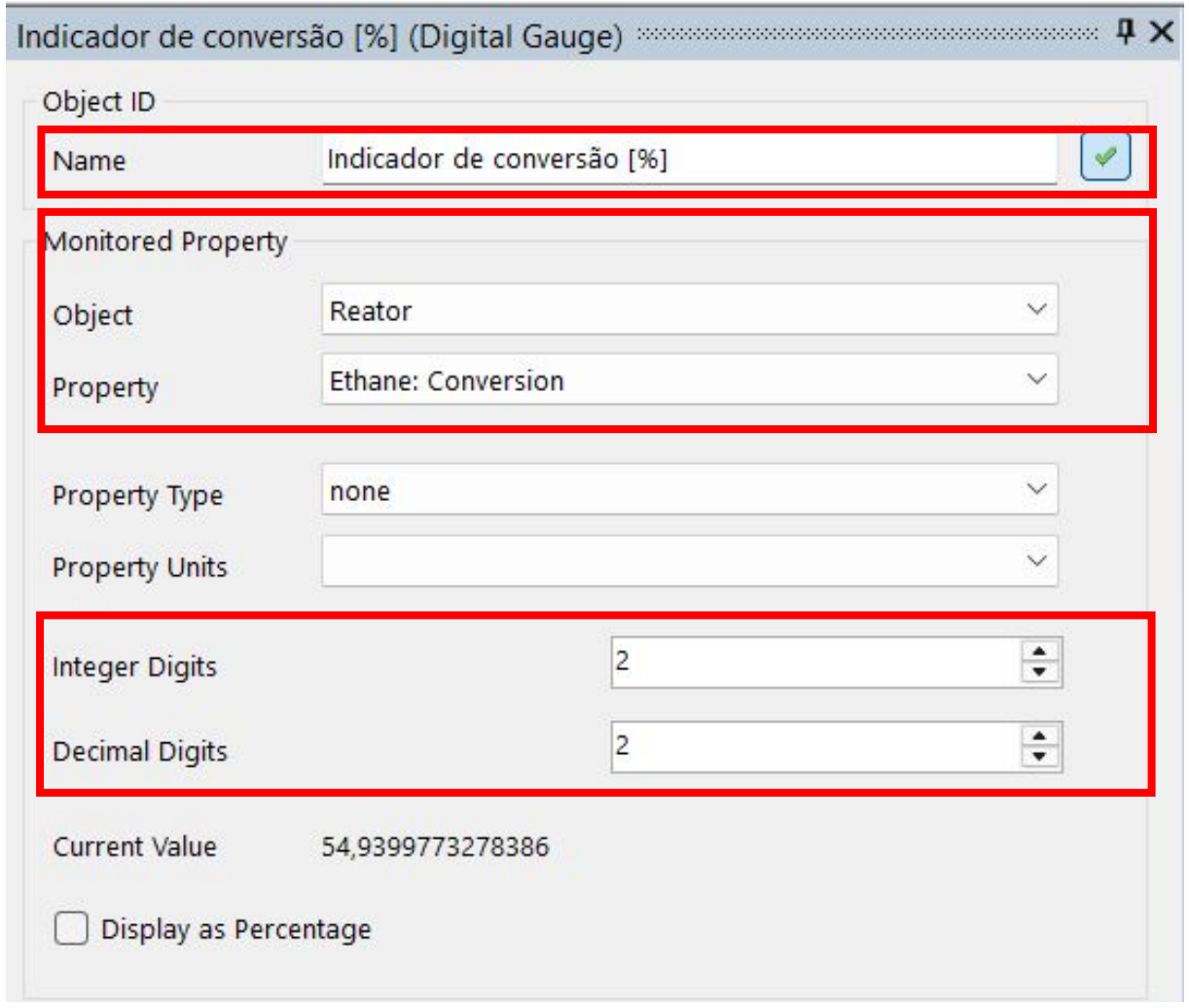
Especificando o reator





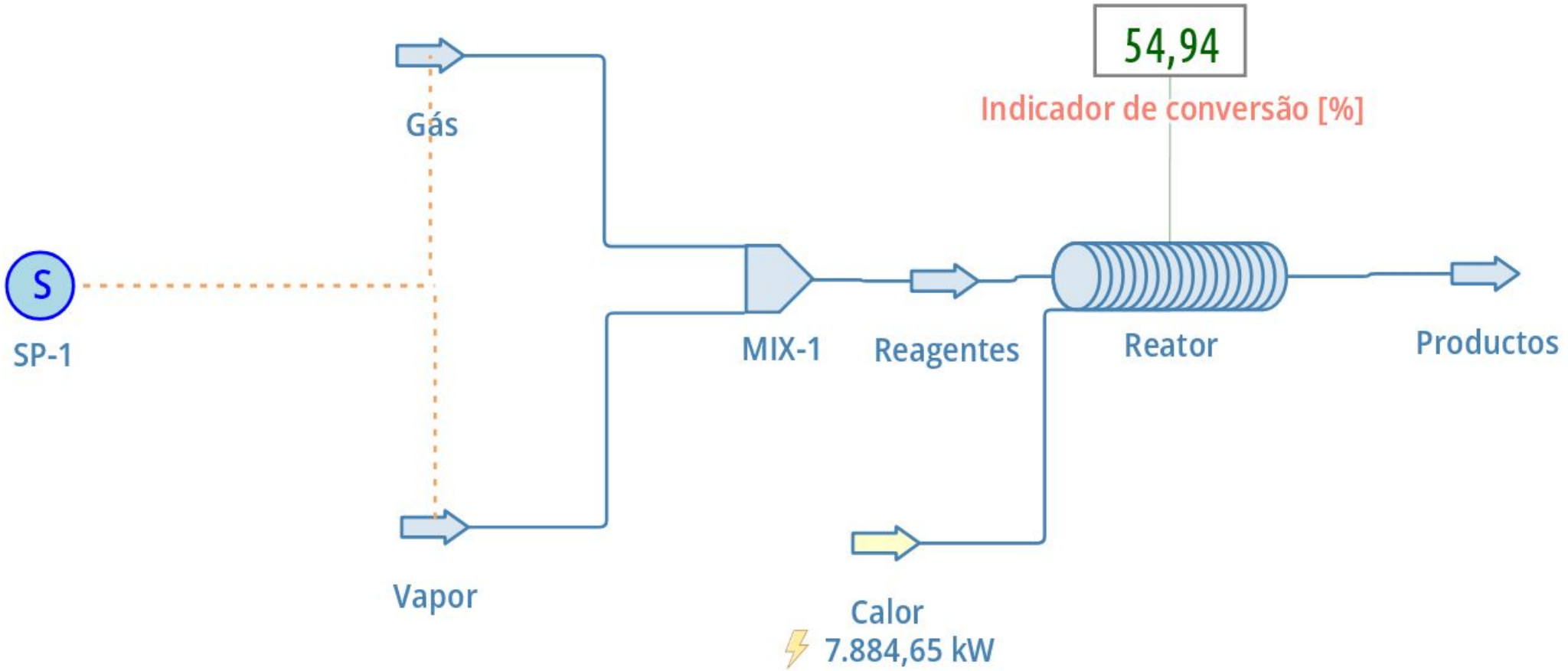
Simulação em DWSIM

Adicionando um indicador para apresentar a conversão



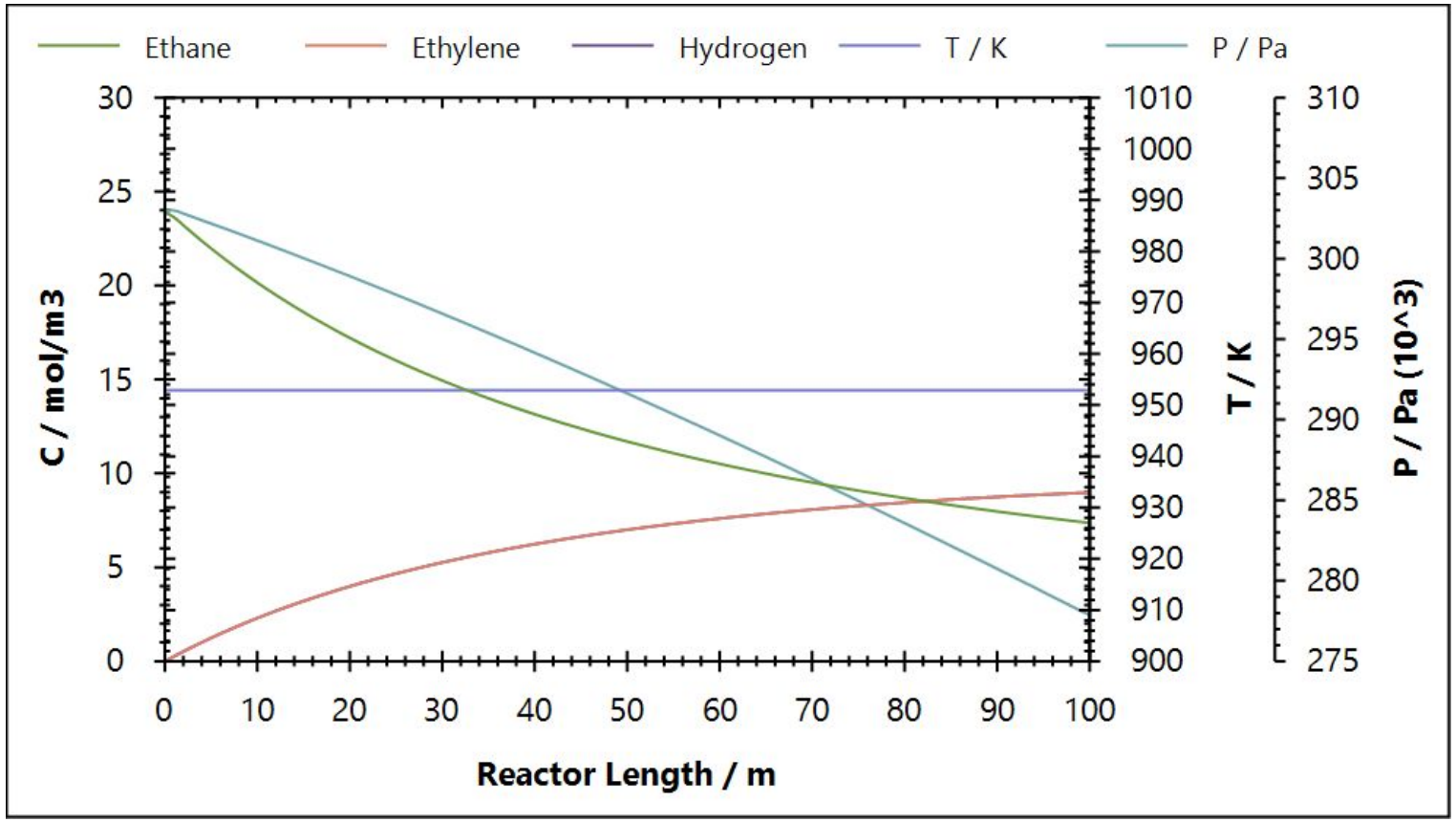
Simulação em DWSIM

Simulação convergida (operação isotérmica)



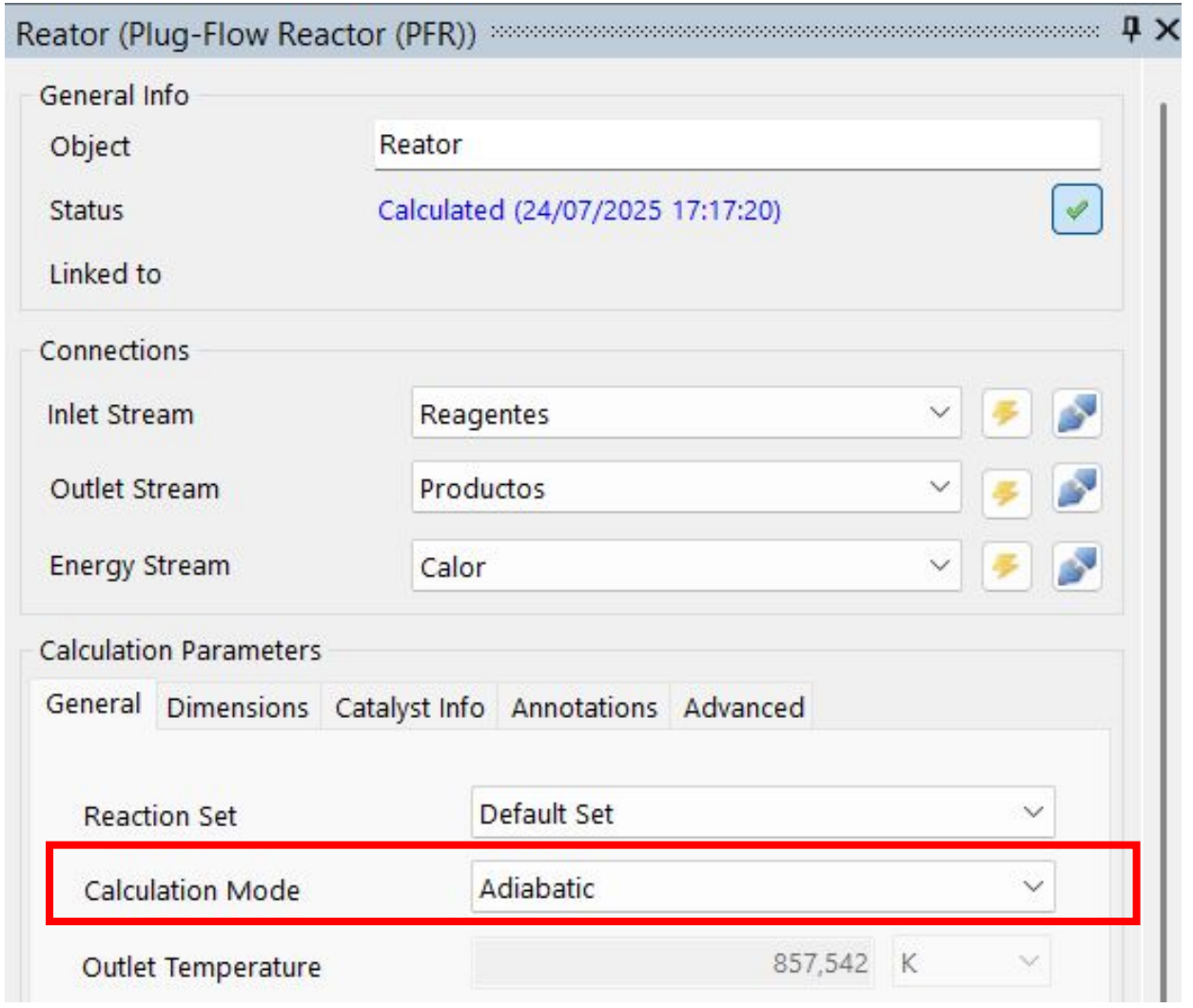
Simulação em DWSIM

Perfiles no reator (operação isotérmica)



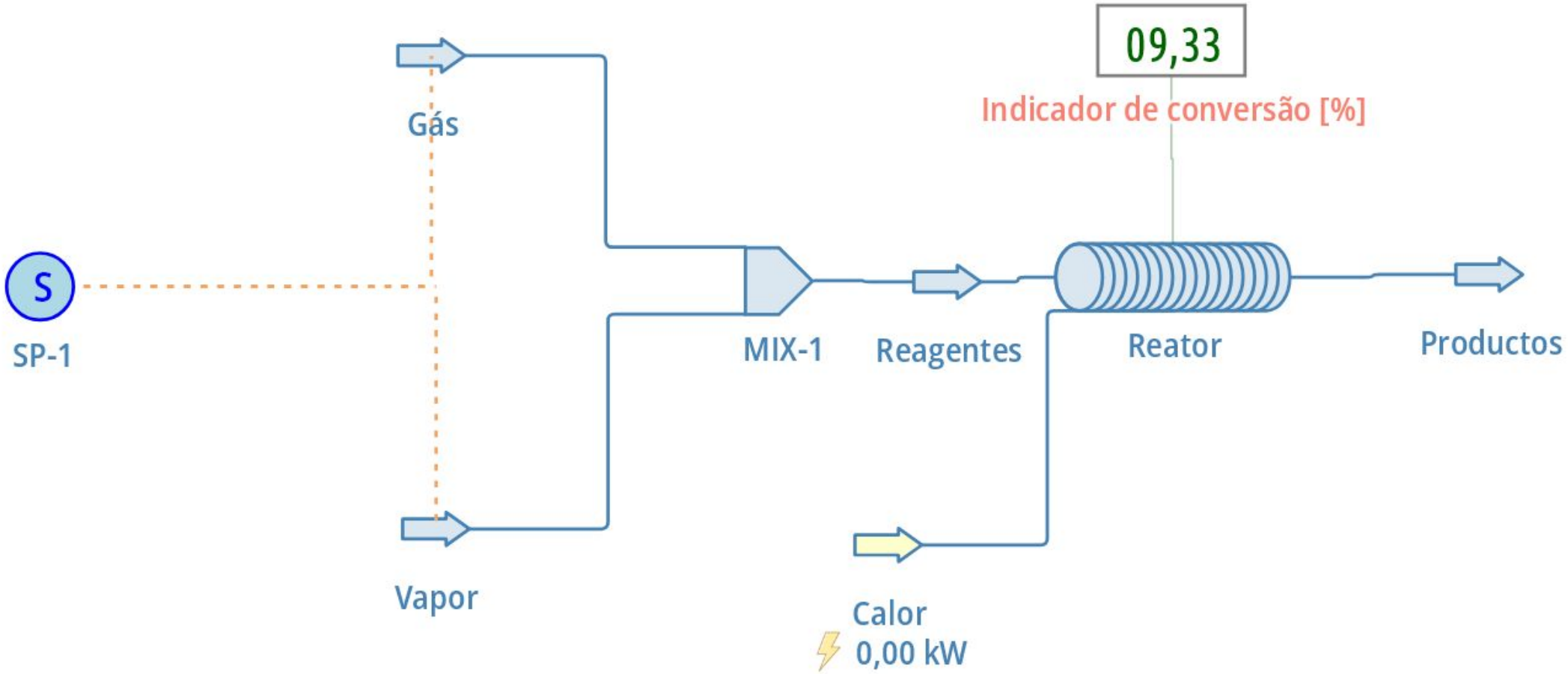
Simulação em DWSIM

Trocando para operação adiabática no reator



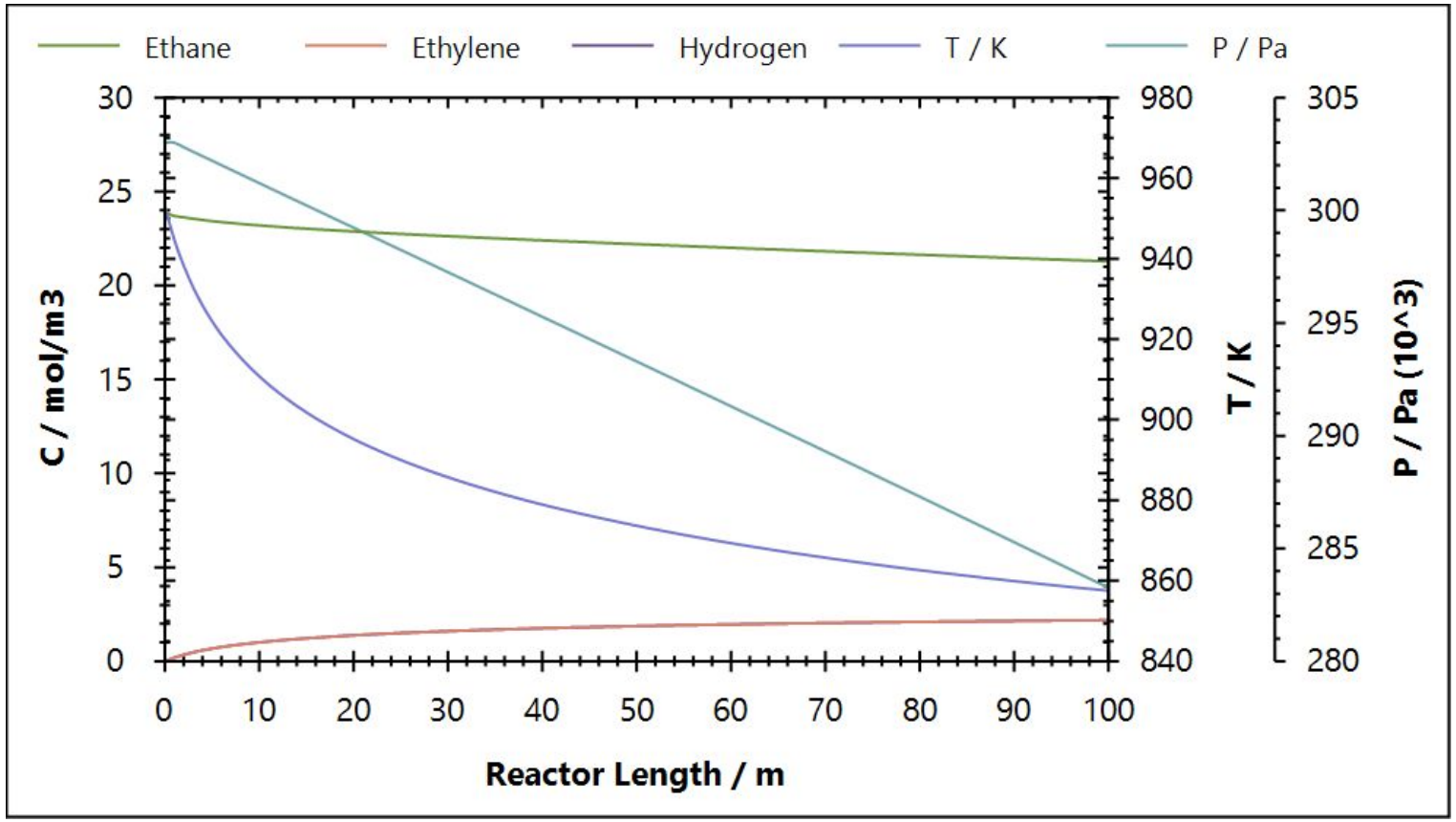
Simulação em DWSIM

Simulação convergida (operação adiabática)



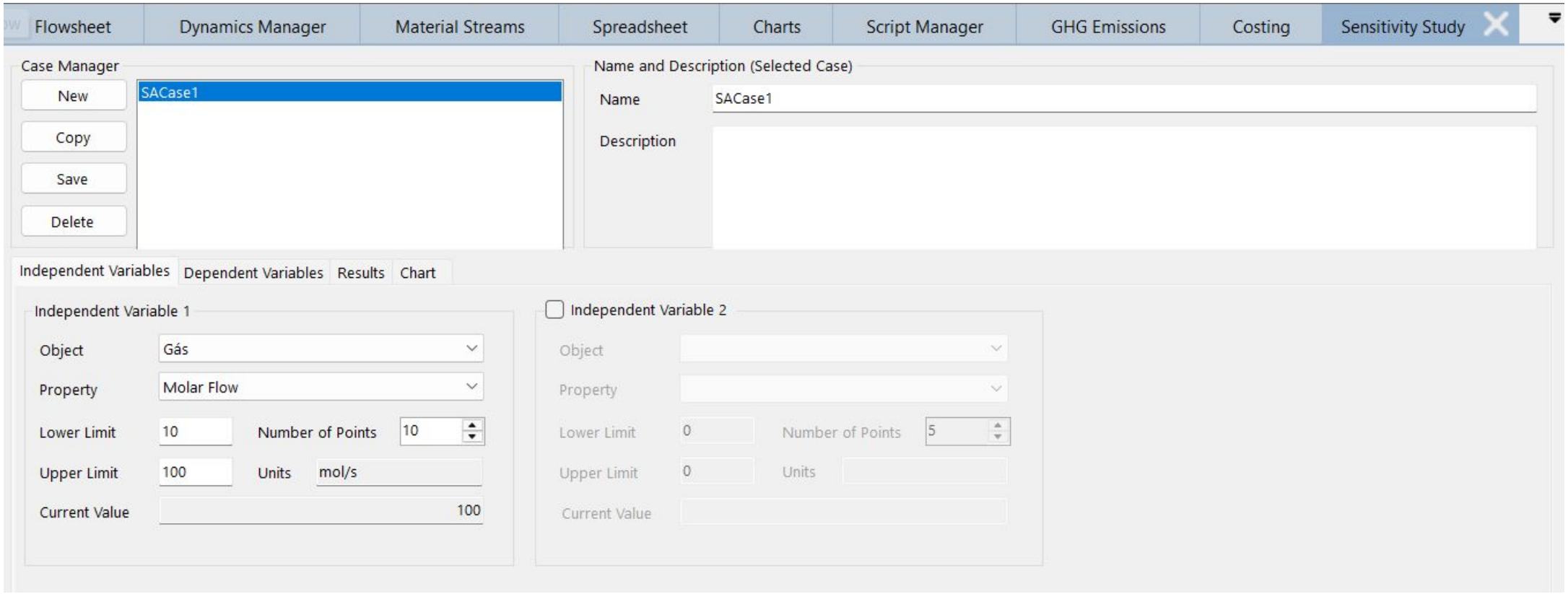
Simulação em DWSIM

Perfiles no reator (operação adiabática)



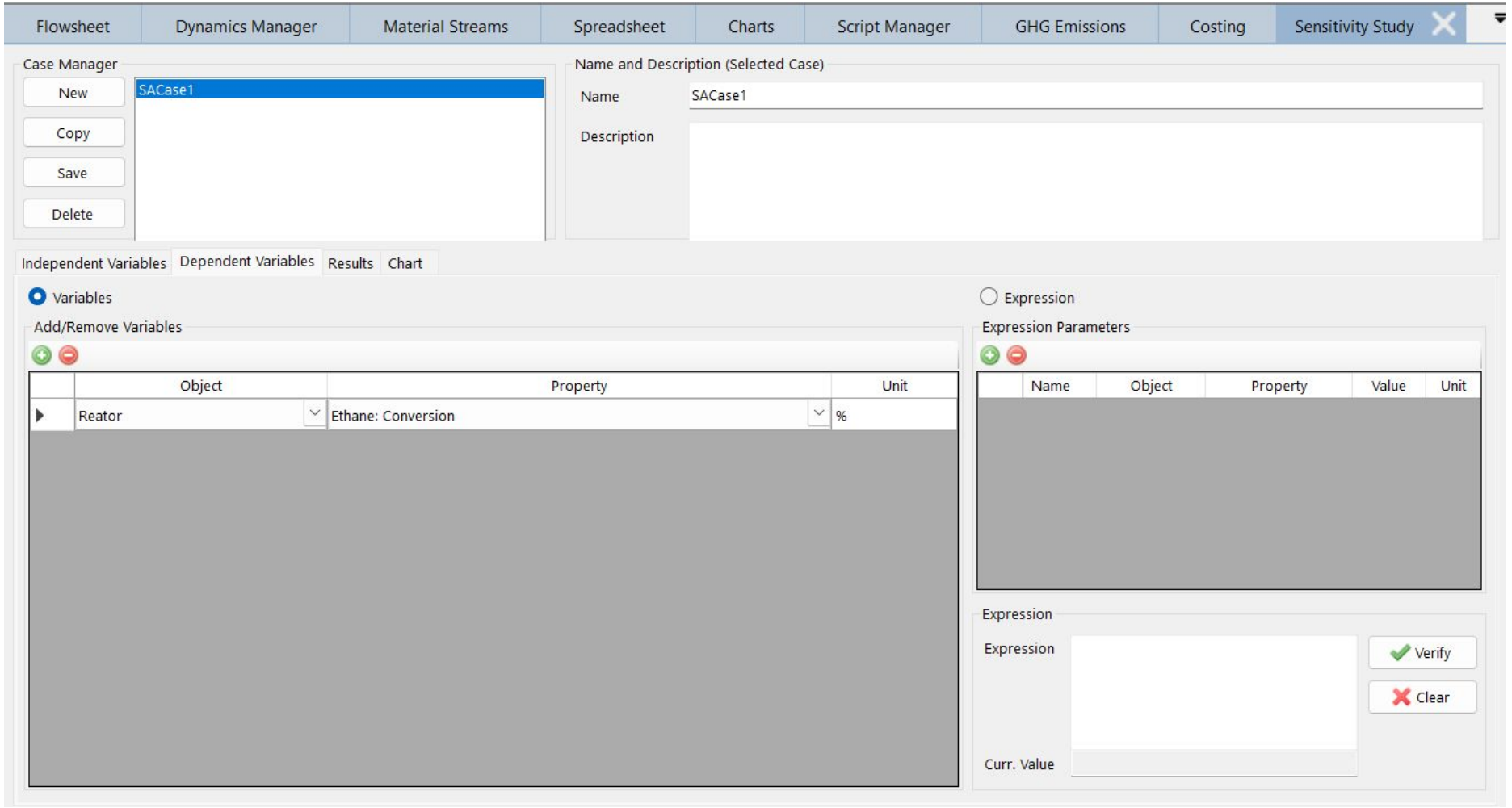
Simulação em DWSIM

Configurando a variável independente na análise de sensibilidade



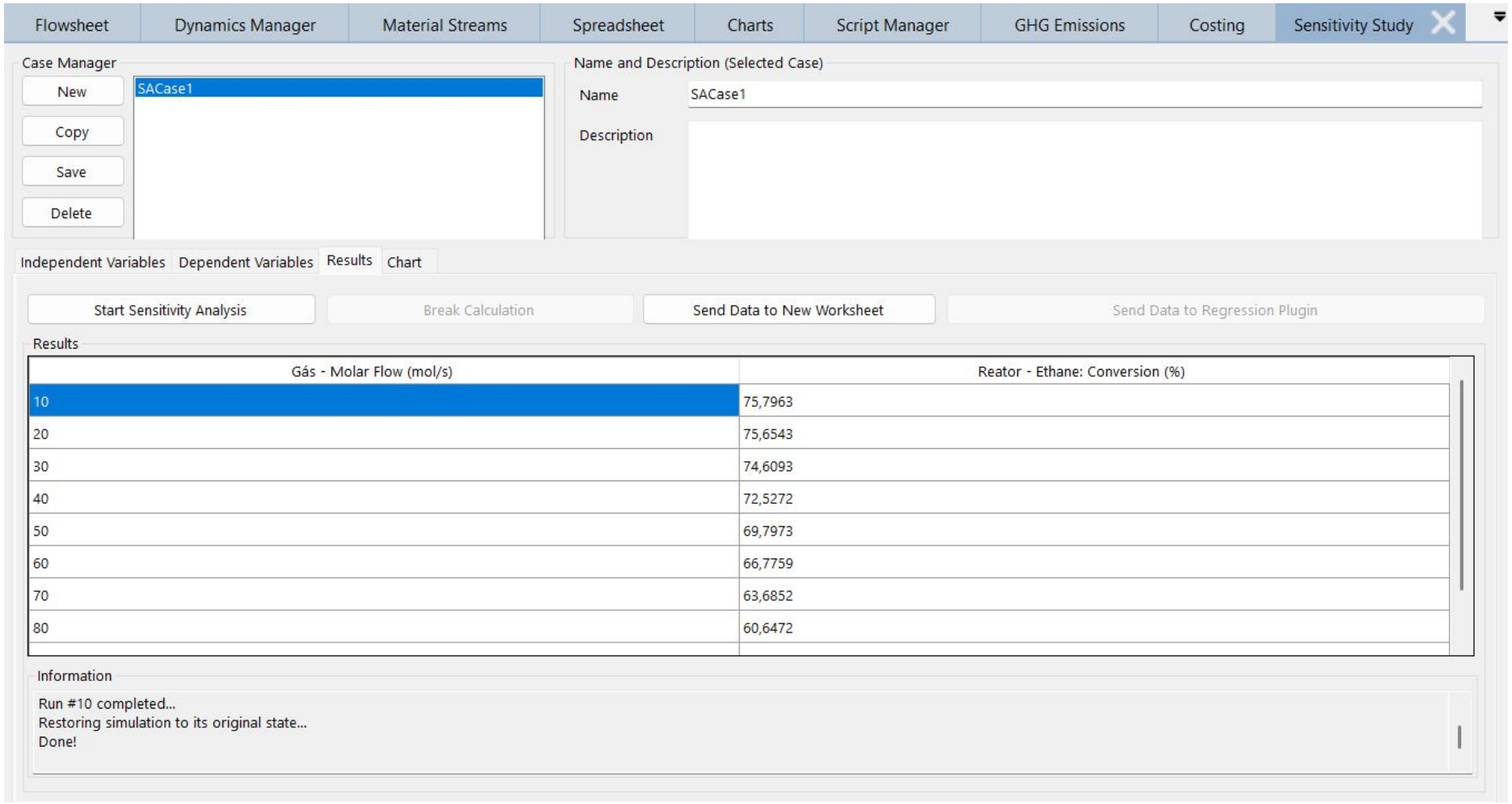
Simulação em DWSIM

Configurando a variável dependente na análise de sensibilidade



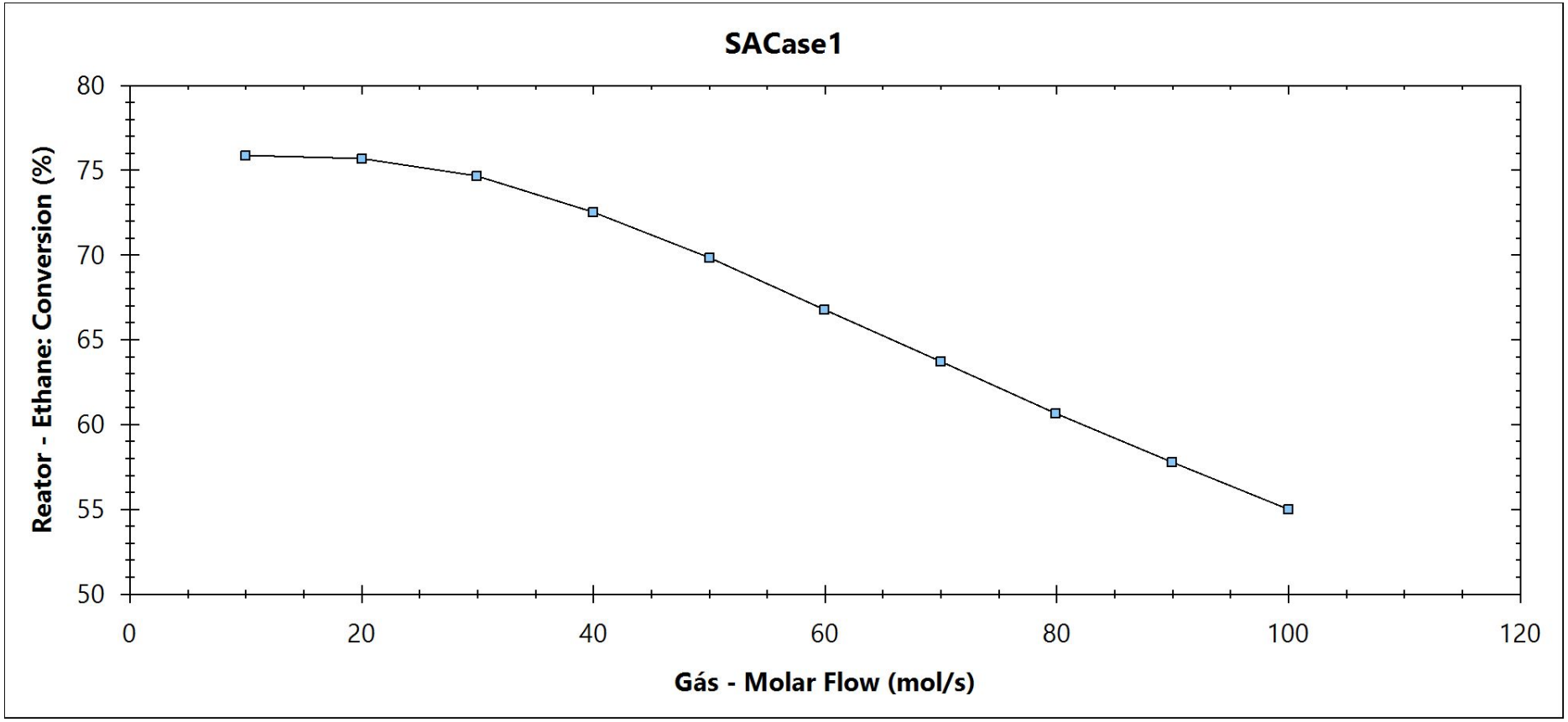
Simulação em DWSIM

Resultados da análise de sensibilidade (tabela)



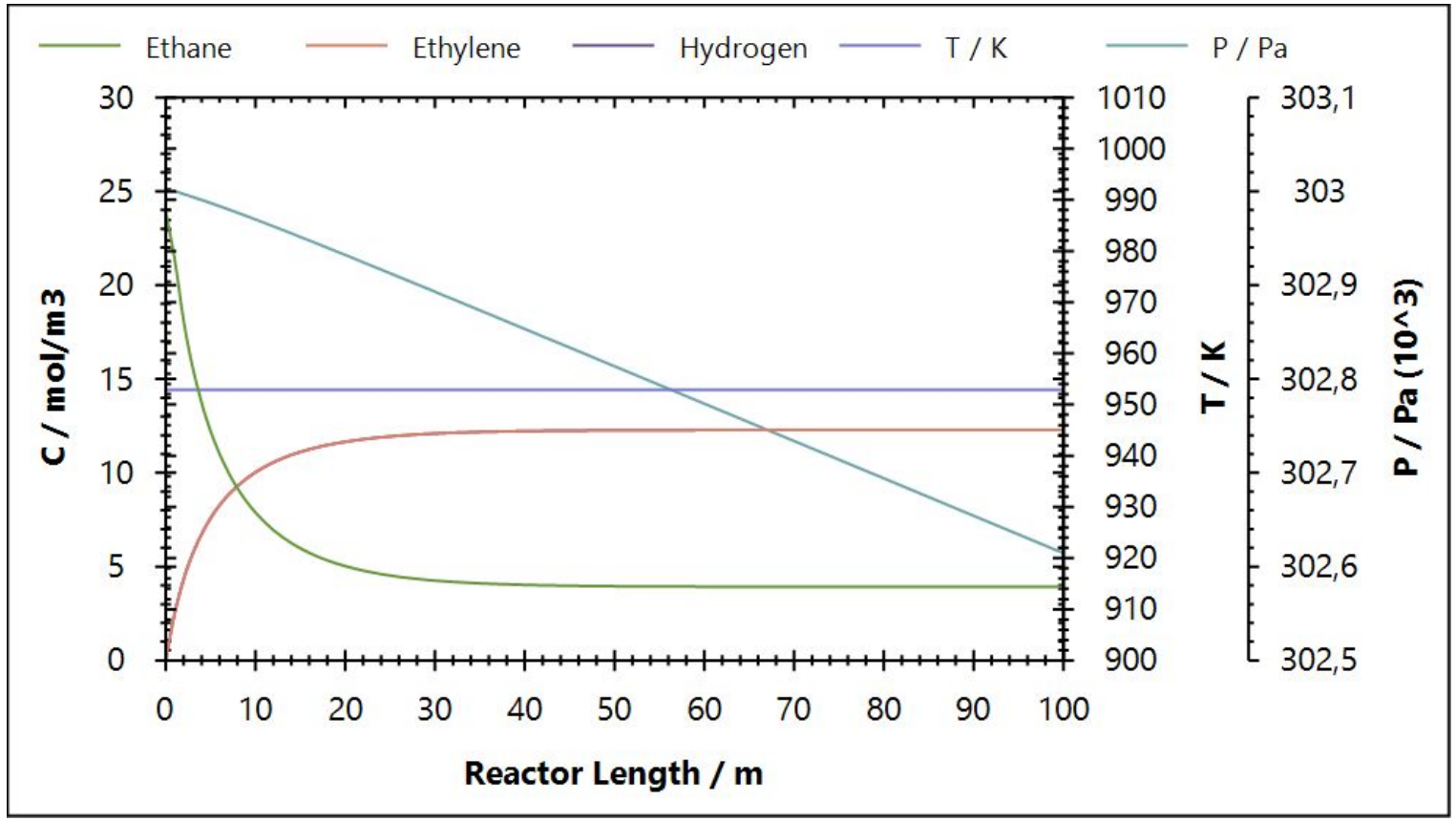
Simulação em DWSIM

Resultados da análise de sensibilidade (gráfico)



Simulação em DWSIM

Perfiles no reator para 10 mol/s de gás (operação isotérmica)



Dúvidas?

Recados importantes

- Próxima aula: Modelo customizado de separador por membrana em Aspen Plus

- Os slides desta aula estarão disponíveis no Classroom da disciplina.

“Ensinar não é transferir conhecimento, mas criar as possibilidades para a sua própria produção ou a sua construção.”

Paulo Freire