



T593

SIMULAÇÃO DE REATORES DE POLIMERIZAÇÃO PARA PRODUÇÃO DE COPOLÍMEROS E VALIDAÇÃO DE MODELOS USANDO DADOS EXPERIMENTAIS

Luciana Mary Tonon (Bolsista PIBIC/CNPq) e Profa. Dra. Liliane Maria Ferrareso Lona (Orientadora), Faculdade de Engenharia Química – FEQ, UNICAMP

A simulação de reatores de polimerização auxilia a produção de polímeros com características específicas. Os processos de polimerização são caracterizados pela sua complexidade, devido principalmente a reações secundárias que ocorrem, os efeitos difusionais e a própria reação principal de polimerização com suas diversas etapas envolvendo o crescimento das cadeias. Um trabalho de simulação de reatores de homopolimerização em batelada para produção de poliestireno foi desenvolvido, validando-se os resultados com dados experimentais existentes na literatura. O modelo, desenvolvido em Fortran, foi ampliado, a fim de levar em conta a copolimerização, utilizando-se o estireno-metilmacrilato. Um estudo paramétrico foi realizado, utilizando-se de várias estratégias operacionais, referentes a iniciadores, solventes e agentes de transferência de cadeias (CTA). O efeito das várias condições operacionais foi analisado em termos de produtividade, propriedades dos polímeros formados (peso molecular médio numérico e mássico) e composição do polímero (no caso da co-polimerização). Boa concordância entre os dados experimentais e de simulação foi obtida, mostrando eficácia do modelo na predição do comportamento deste tipo de reator e na predição das características do polímero formado.

Polimerização – Copolímero – Simulação