

SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE OBTENÇÃO DO ACRILATO DE ETILA

André Luiz Almeida da Silva*; Maria Regina Wolf Maciel; Elenise Bannwart de Moraes Torres

Departamento de Processos Químicos – Faculdade de Engenharia Química – UNICAMP

Cidade Universitária "Zeferino Vaz" - Caixa Postal 6066 - CEP: 13083-970, Campinas-SP, Brasil. *andresilvaeq@gmail.com

Financiado por bolsa de Iniciação Científica PIBIC/CNPq

Palavras-Chave: Simulação – Otimização – Acrilato de Etila

INTRODUÇÃO

Através da reação de esterificação do ácido acrílico, são produzidos importantes ésteres que encontram grande aplicação na indústria. Atualmente, os acrilatos são utilizados para a síntese de materiais como colas, tintas e plásticos. O acrilato de etila, em especial, é amplamente utilizado na indústria como um precursor para vernizes, adesivos e acabamentos de papéis e têxteis.

Contudo, as reações de esterificação são tipicamente limitadas pelo equilíbrio termodinâmico e encontram problemas no momento da separação. Por isso, após a produção do acrilato de etila, é necessário que seja feita a separação do mesmo do ácido acrílico e etanol não reagidos e da água.

Neste trabalho, estabeleceu-se o problema de separação do acrilato de etila produzido através da reação entre ácido acrílico e etanol, utilizando ácido sulfúrico como catalisador.

Para isso, utilizou-se o software comercial Aspen Plus® em dois momentos: na caracterização termodinâmica da mistura reacional e, em seguida, na simulação dos principais equipamentos utilizados na separação com o intuito de otimizar o processo.

METODOLOGIA

Nesse trabalho, os modelos termodinâmicos utilizados foram UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical) e NRTL (Non-Random, Two Liquids) e o Método de Contribuição de Grupos UNIFAC (UNIQUAQ Functional Activity Coefficients) foi usado para a predição de dados de equilíbrio.

Utilizando-se o software Aspen Plus®, obtiveram-se dados do equilíbrio líquido-vapor (ELV) e pode-se fazer a identificação dos azeótropos homogêneos ou heterogêneos, dependendo do par. Conseguiu-se dados experimentais para os pares água-ácido acrílico e etanol-água através do DECHEMA (1981).

Com tais informações, e dados sobre os pontos de ebulição dos componentes da mistura, estabeleceu-se o melhor método de separação para cada componente.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Assumiu-se uma corrente de saída, extraída de Ambrogi 2007, com a seguinte composição:

Tabela 1. Dados da corrente de entrada

Composição molar	
Ácido Acrílico	0,2082
Etanol	0,2082
Água	0,2918
Acrilato de Etila	0,2918
Vazão Total (kmol/h)	100
Temperatura (°C)	78,7
Pressão (atm)	1

Pela caracterização termodinâmica, estabeleceu-se que primeiramente seria utilizada uma destilação convencional para remoção do ácido acrílico, seguida de uma extração líquido-líquido, utilizando-se água, para remoção do etanol. Com tais componentes separados, utilizou-se uma destilação convencional para purificar o acrilato de etila e outra destilação convencional para recuperar o etanol.

A seguir, tem-se a Figura 1, gerada no software comercial Aspen Plus®, que mostra o fluxograma geral do processo:

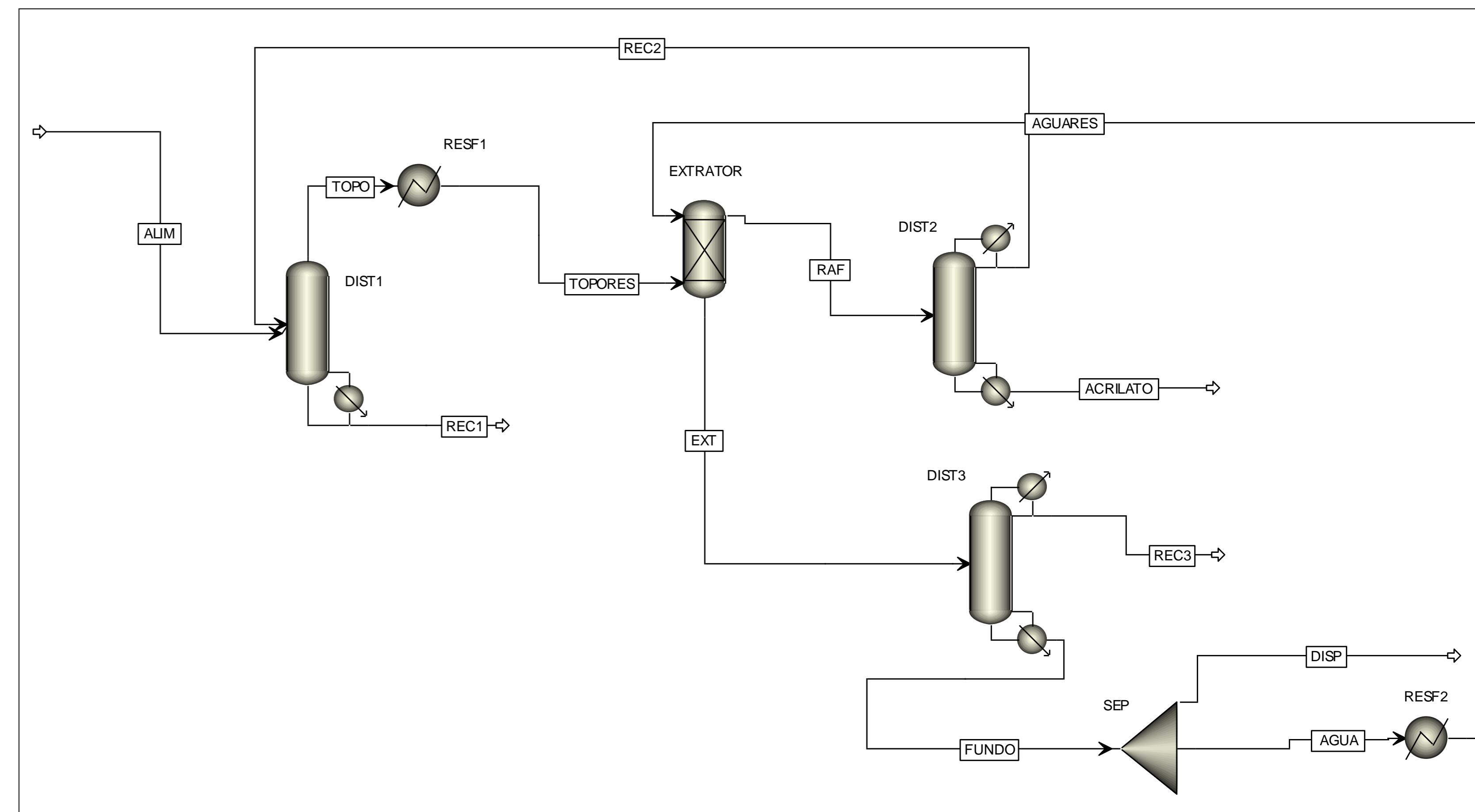


Figura 1. Fluxograma geral do processo

Pode-se observar, na Tabela 2, que o acrilato de etila é obtido com pureza acima de 99,9% na corrente ACRILATO:

Tabela 2. Dados da corrente de saída da coluna de destilação DIST2

Composição Molar	RAF	ACRILATO	REC2
Ácido Acrílico	0,000	0,000	0,000
Etanol	0,003	0,000	0,011
Água	0,165	0,000	0,604
Acrilato de Etila	0,832	1,000	0,385
Vazão Total (kmol/h)	31,276	22,730	8,548
Temperatura (°C)	29,5	99,3	82,2
Pressão (atm)	1	1	1

Ressalta-se que nas colunas de destilação, fizeram-se várias simulações para encontrar o prato ótimo de alimentação, aquele no qual o menor calor no refeedor foi obtido. No caso da extratora, escolheu-se a menor razão entre a vazão de solvente e a vazão de alimentação visando-se menor uso do primeiro.

CONCLUSÃO

Concluiu-se que a metodologia aplicada neste trabalho foi eficiente para atingir aos objetivos propostos.

Com as simulações realizadas com as colunas de destilação e com a extratora líquido-líquido, mostrou-se ser possível se obter o acrilato de etila com alta pureza, acima de 99,9%.

BIBLIOGRAFIA

Ambrogi, L.G.; Maciel Filho, R.; Wolf Maciel, M.R., Modelagem e simulação do processo de produção do acrilato de etila, Tese de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 2007.

Gmehling, Onken e Arlt, 1981 Gmehling, J., Onken, U., Arlt, W., 1981. Vapor liquid equilibrium data collection/Pt. 1a. Aqueous-organic systems, vol. 1, Part 1a. DECHEMA, Deutsche Gesellschaft für Chemisches Apparatewesen, Chemische Technik und Biotechnologie eV.