

**CENTRO UNIVERSITÁRIO DE FORMIGA – UNIFOR – MG**  
**CURSO DE ENGENHARIAQUÍMICA**  
**MARIA IZABELLE DA SILVA**

**ESTUDO DO EFEITO DAS CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO NO RENDIMENTO DA  
REAÇÃO DE SAPONIFICAÇÃO DO ACETATO DE ETILA**

**FORMIGA - MG**

**2019**

MARIA IZABELLE DA SILVA

ESTUDO DO EFEITO DAS CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO NO RENDIMENTO DA  
REAÇÃO DE SAPONIFICAÇÃO DO ACETATO DE ETILA

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao  
Curso de Engenharia Química do UNIFOR-MG,  
como requisito parcial para obtenção do título de  
bacharel em Engenharia Química. Orientador (a):  
Rosiene Pimenta.

Maria Izabelle da Silva

ESTUDO DO EFEITO DAS CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO NO RENDIMENTO DA  
REAÇÃO DE SAPONIFICAÇÃO DO ACETATO DE ETILA

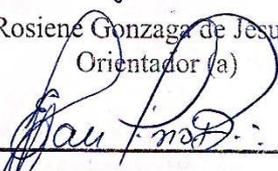
Trabalho de conclusão de curso apresentado  
ao Curso de Engenharia Química do  
UNIFOR-MG, como requisito parcial para  
obtenção do título de bacharel em  
Engenharia Química. Orientador (a):  
Rosiene Pimenta.

BANCA EXAMINADORA



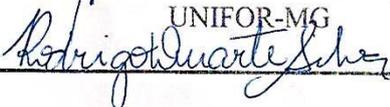
---

Prof.<sup>a</sup> Rosiene Gonzaga de Jesus Pimenta  
Orientador (a)



---

Prof. M.e Emerson Paulino dos Reis  
UNIFOR-MG



---

Prof. D.r Rodrigo Duarte Silva  
UNIFOR-MG

Formiga, 08 de Novembro de 2019.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço primeiramente a Deus por ser sempre meu refúgio, meu porto seguro e por cuidar de cada detalhe da minha vida. Aos meus pais e meu irmão eu dedico esse trabalho e agradeço por serem presentes em todos os momentos da minha vida, a conclusão deste trabalho e deste curso só possível graças a força e incentivo de vocês.

Agradeço também a minha orientadora Rosiene Pimenta por todo esforço e dedicação em me orientar e não me deixar desistir em meios às dificuldades que surgiram no percurso do trabalho. A toda equipe do Centro Universitário de Formiga por disponibilizar o laboratório, os equipamentos e reagentes necessários para a realização do experimento. Ao Sistema de Abastecimento de Água e Esgoto de Formiga, agradeço pela disponibilidade e confiança em emprestar o medidor multiparâmetro usado nas análises.

Quero deixar o meu agradecimento também ao aluno do 8º período de Engenharia Química, Gabriel Eduardo Amaral Graciano por ter me auxiliado com tanta dedicação durante toda a prática.

Clarice Lispector sabiamente disse que “Quem caminha sozinho pode até chegar mais rápido, mas aquele que vai acompanhado, com certeza vai mais longe”.

## RESUMO

Existem diversas condições para uma reação se processar, e encontrar qual a melhor delas tem sido a tarefa de muitos engenheiros nas indústrias. Para o processo químico apresentar um bom rendimento, é necessário que todas as suas variáveis estejam controladas e operando em sua melhor condição de funcionamento. A reação de saponificação é a hidrólise de um éster em meio básico para formar um álcool e um sal, é comumente utilizada para referir-se a reação de um metal alcalino com um teor de gordura para formar sabão. Devido a sua grande utilização e por ela ser muito estudada, escolheu-se a reação de saponificação do acetato de etila para ser analisada neste trabalho, a fim de saber qual seria o efeito das condições de operação no rendimento da reação. Em razão do aparato experimental, foram feitas variações na temperatura do reator, na vazão de alimentação dos reagentes e no tipo de reator utilizado para se processar a reação. O rendimento da reação foi analisado através da porcentagem de conversão dos reagentes em produtos. Utilizou-se a condutividade das amostras para calcular as concentrações iniciais e finais e através da concentração calculou-se a conversão. Os testes foram feitos nas temperaturas de 25, 30 e 35°C, nas vazões de 7, 13 e 20 L/h e nos reatores CSTR e PFR. Ao variar a temperatura obteve-se uma conversão final de 18,68 % na temperatura de 35°C, Ao variar a vazão de alimentação dos reagentes, se alcançou 21,56 % de conversão quando a vazão era de 7 L/h e entre os dois tipos de reator se alcançou uma conversão de 16,01 % no CSTR em comparação com 12,17 % no PFR. Com os resultados foi possível concluir que quanto maior a temperatura da reação e quanto menor a vazão de alimentação dos reagentes maior será a conversão dos reagentes em produtos.

Palavras-chave: Reatores Químicos. Condutividade. Conversão.

## ABSTRACT

There are several conditions for a reaction to take place, and finding the best one has been the task of many engineers in industries. For the chemical process to perform well, it is necessary that all its variables are controlled and operating at their best operating condition. The saponification reaction is the hydrolysis of an ester in basic medium to form an alcohol and a salt; it is commonly used to refer to the reaction of an alkali metal with a fat content to form soap. Due to its great use and because it is very studied, it was chosen the ethyl acetate saponification reaction to be analyzed in this work, in order to know what would be the effect of the operating conditions on the reaction yield. Due to the experimental area, variations were made in the reactor temperature, the reagent feed rate and the type of reactor used to process the reaction. Reaction yield was analyzed by percentage conversion of reagents to products. The conductivity of the samples was used to calculate initial and final concentrations and by concentration the conversion was calculated. The tests were performed at temperatures of 25, 30 and 35°C, at 7, 13 and 20 L / h flow rates and in the CSTR and PFR reactors. By varying the temperature, a final conversion of 18.68% was obtained at a temperature of 35 ° C. By varying the flow rate of the reagents, 21.56% conversion was achieved when the flow rate was 7 L / h between the two types. of reactor achieved a conversion of 16.01% in CSTR compared to 12.17% in PFR. With the results it was possible to conclude that the higher the reaction temperature and the lower the reagent feed rate the greater the conversion of reagents to products.

Keywords: Chemical Reactors. Conductivity. Conversion.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Reator Batelada simples homogêneo. ....	16
Figura 2 – Componentes de um Reator Batelada. ....	16
Figura 3 – Reator CSTR. ....	18
Figura 4 – Reatores CSTR em pequena escala. ....	19
Figura 5 – Reator Tubular de escoamento uniforme PFR. ....	20
Figura 6 – Reator Tubular de Resfriamento. ....	20
Figura 7 – Estrutura da reação de saponificação. ....	21
Figura 8 – Ataque nucleofílico da hidroxila ao grupo carbonila do éster e eliminação do grupo acetato. ....	23
Figura 9 - Desprotonação do ácido acético em meio básico para a produção do acetato. ....	23
Figura 10 – Estrutura molecular do Acetato de Sódio. ....	24
Figura 11 – Módulo didático de reatores ideais utilizado no experimento. ....	26
Figura 12 - Medidor multiparâmetro de bancada, utilizado para medir a condutividade. ....	27

## LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1 – Curva de Calibração a 25° C. ....	31
Gráfico 2 – Conversão versus tempo em função de três diferentes temperaturas. ....	33
Gráfico 3 – Conversão versus tempo em função de três diferentes vazões. ....	37
Gráfico 4 – Conversão versus tempo em função do tipo de reator. ....	39

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Condutividade dos Reagentes a 25°C. ....	30
Tabela 2 – Dado para a curva de calibração. ....	31
Tabela 3 – Dados coletados à temperatura de 25°C. ....	32
Tabela 4 – Dados coletados à temperatura de 30° C. ....	32
Tabela 5 – Dados coletados à temperatura de 35° C. ....	33
Tabela 6 - Resultados do cálculo da conversão teórica. ....	34
Tabela 7 – Dados coletados com a vazão de alimentação de 7 L/h a 35°C. ....	35
Tabela 8 – Dados coletados com a vazão de alimentação de 13 L/h a 35°C. ....	36
Tabela 9 – Dados coletados com a vazão de alimentação de 20 L/h a 35°C. ....	36
Tabela 10 – Dados coletados na saída do reator PFR. ....	38
Tabela 11 – Dados coletados na saída do reator CSTR. ....	39

## SUMÁRIO

<b>1.0 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>11</b>
<b>2.0 OBJETIVOS .....</b>	<b>12</b>
<b>2.1 Objetivo Geral .....</b>	<b>12</b>
<b>2.2 Objetivos Específicos .....</b>	<b>12</b>
<b>3.0 JUSTIFICATIVA .....</b>	<b>13</b>
<b>4.0 REFERENCIAL TEÓRICO .....</b>	<b>14</b>
<b>4.1 Reações Químicas e Reatores Químicos .....</b>	<b>14</b>
<b>4.2 Reação de Saponificação .....</b>	<b>21</b>
<b>5.0 METODOLOGIA.....</b>	<b>26</b>
<b>5.1 Curva de Calibração .....</b>	<b>28</b>
<b>5.2 Variações da Temperatura no reator CSTR.....</b>	<b>28</b>
<b>5.3 Variações da Vazão de alimentação no reator CSTR .....</b>	<b>29</b>
<b>5.4 Tipos de reator .....</b>	<b>29</b>
<b>6.0 RESULTADOS E DISCUSSÃO .....</b>	<b>30</b>
<b>6.1 Curva de Calibração .....</b>	<b>30</b>
<b>6.2 Variação da Temperatura no reator CSTR.....</b>	<b>32</b>
<b>6.3 Variação da Vazão no reator CSTR .....</b>	<b>35</b>
<b>6.4 Tipo de Reator .....</b>	<b>38</b>
<b>7.0 CONCLUSÃO.....</b>	<b>41</b>
<b>REFERÊNCIAS .....</b>	<b>42</b>

## 1. INTRODUÇÃO

O reator químico é um dos componentes mais importantes da indústria química e ele é utilizado para processar reações endotérmicas e exotérmicas. Existem várias formas de classificar os reatores, uma delas é pelo escoamento do fluido, podendo ser contínuo ou descontínuo. São classificados como reatores de fluxo contínuo, o reator contínuo de tanque agitado (CSTR), o reator com escoamento empistonado (PFR) e o reator de leito fixo (PBR). Como fluxo descontínuo, o reator batelada. (FOGLER, 2013)

A escolha do melhor reator e das condições em que ele vai operar é fundamental para o processo alcançar o maior rendimento com um menor custo possível, portanto torna-se necessário estudar as variáveis que podem alterar o comportamento da reação no decorrer do processo.

A reação de saponificação é a hidrólise de um éster em meio básico para formar um álcool e o sal de um ácido carboxílico e é comumente utilizada para referir-se à reação de um metal alcalino com gordura para formar sabão. A hidrólise de acetato de etila ( $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$ ) por hidróxido de sódio (NaOH) que produz o acetato de sódio ( $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2\text{Na}$ ) e etanol ( $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ) é considerada uma reação de saponificação mesmo seu produto final não sendo sabão. (DANISH M. et al., 2015)

Neste trabalho, escolheu-se a reação de saponificação do acetato de etila para estudar e comparar os efeitos das condições de operação do reator no rendimento da reação. Para o estudo, utilizou-se um módulo didático de reatores ideais e nele variaram-se as temperaturas de reação, as vazões de alimentação do reator e o tipo de reator utilizado.

O rendimento da reação foi observado pelo comportamento da conversão. As amostras foram coletadas na entrada e na saída do reator e mediu-se a condutividade de cada uma delas através de um medidor multiparâmetro. Como a condutividade tem correlação com a concentração da amostra, foi possível encontrar as concentrações de NaOH nas amostras coletadas por meio de uma curva de calibração e com os valores das concentrações iniciais e finais, foi possível calcular a conversão.

Os resultados encontrados foram analisados por meio de tabelas e gráficos e foram comparados com a literatura para a definição de sob quais condições operacionais se alcançaria uma maior conversão e conseqüentemente um melhor desempenho da reação.

## **2.0 OBJETIVOS**

### **2.1 Objetivo Geral**

Analisar experimentalmente quais são os efeitos das condições de operação do reator no rendimento da reação de saponificação do acetato de etila.

### **2.2 Objetivos Específicos**

- Analisar o efeito de três diferentes temperaturas na conversão da reação em um reator de bancada do tipo tanque agitado operado em fluxo contínuo.
- Analisar o efeito de três diferentes vazões de alimentação na conversão da reação em um reator de bancada do tipo tanque agitado operado em fluxo contínuo.
- Analisar o efeito de dois tipos de reatores ideais, CSTR e PFR com volumes diferentes, porém, com as mesmas condições de operação na conversão da reação.

### 3.0 JUSTIFICATIVA

Industrialmente um processo químico é planejado para produzir economicamente certo produto desejado, a partir de várias matérias-primas sujeitas a diversas etapas de tratamento, uma delas é o tratamento físico que as prepara para posteriormente reagir quimicamente dentro do reator. O projeto de um reator para determinada reação não é uma tarefa fácil, pois é preciso ter um processo ótimo, com baixo custo, mas essencialmente produzindo um produto de qualidade. Conseqüentemente para projetá-lo, é necessário o conhecimento e experiência em várias áreas como a termodinâmica, cinética química, mecânica dos fluidos, transferência de calor, transferência de massa e análise econômica. (LEVENSPIEL, 2000)

A cinética química de uma reação e o projeto de seu devido reator são etapas primordiais da produção da maioria dos produtos químicos industriais. Logo a escolha de um sistema de reação que atua de forma segura e eficaz pode ser o alicerce para o sucesso ou o fracasso econômico de uma indústria química. (FOGLER, 2014)

Um dos maiores interesses da indústria é maximizar o lucro de seu processo, e na engenharia das reações químicas, diversas variáveis podem afetar o rendimento de uma reação química, por exemplo, temperatura, pressão, composição, vazão, tempo de residência e também o modelo do reator a ser utilizado.

Dada a importância de planejar economicamente e também fisicamente um processo químico de uma planta industrial, visando maximizar sua produção, diminuindo desperdícios, garantindo a qualidade dos produtos formados e a máxima conversão da reação possível, este tema foi escolhido a fim de estudar as variáveis do processo que podem interferir no rendimento da reação de produção do acetato de sódio e do álcool através da reação de saponificação do acetato de etila.

## 4.0 REFERENCIAL TEÓRICO

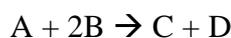
### 4.1 Reações Químicas e Reatores Químicos

As reações químicas são elementos primordiais em grande parte do setor industrial, como por exemplo, na indústria de combustível, de produtos químicos, na farmacêutica, na alimentícia, de produção de energia, de eletrônicos, automóveis, entre outras diversas. Reações químicas também podem ser utilizadas para transformar produtos de menos interesse e baixo valor comercial em produtos de grande interesse e alto valor comercial, como exemplo, a produção de ácido sulfúrico através de enxofre, água e ar. Elas também são muito usadas nos processo de controle de poluição, como no tratamento de efluentes aquosos reduzindo sua demanda de oxigênio e também na remoção de óxidos nitrogênio dos gases de exaustão em plantas de geração de energia. No organismo humano ocorrem várias reações químicas, uma série complexa delas é incumbida pela coagulação do sangue. (ROBERTS, 2010)

Existem vários meios de se classificar as reações químicas, o jeito mais usual é classificá-las conforme o seu número de fases, apresentando-se em sistemas homogêneos e sistemas heterogêneos. A reação é considerada homogênea quando acontece em apenas uma fase e heterogênea quando acontece em duas ou mais fases. Ainda na classificação, podem-se considerar também as reações catalíticas, onde a taxa de reação é alterada por materiais que não reagem no processo e nem são considerados produtos, estão no meio reacional apenas para retardar ou acelerar a reação. (LEVENSPIEL, 2000)

Algumas reações acontecem instantaneamente, outras já acontecem de maneira muito lenta. Com base nisso, segundo Fogler (2014, p. 4), “a velocidade de reação nos diz o quão rapidamente um dado número de mols de uma espécie química está sendo consumido para formar outra espécie química”.

Há várias formas de demonstrar a velocidade na qual uma dada reação química se completa. Considerando a reação a seguir, composta por um mol do reagente A, mais 2 mols do reagente B, resultando em um mol do produto C e um mol do produto D:



A velocidade de consumo do reagente A, é um número positivo representado por:  $-r_A$ . Logo a velocidade de reação ( $-r_A$ ) é o número de mols de A que reage por unidade de tempo e por unidade de volume (mols de A/ volume . tempo). (FOGLER, 2014)

A lei de velocidade de uma reação é independente da forma na qual a reação é conduzida, ela é definida em função das concentrações das espécies e temperatura. A lei de velocidade é, sobretudo uma equação algébrica abrangendo a concentração. Por exemplo, para a reação:



Temos,

$$-r_A = KC_A \quad (1)$$

Onde a velocidade de consumo de A é igual a uma constante de velocidade K (função da temperatura) vezes a concentração de A. (FOGLER, 2014).

Para a execução de reações químicas, na maioria das vezes é necessário um reator químico. Reactores químicos podem ser projetados de acordo com a necessidade da reação e da indústria.

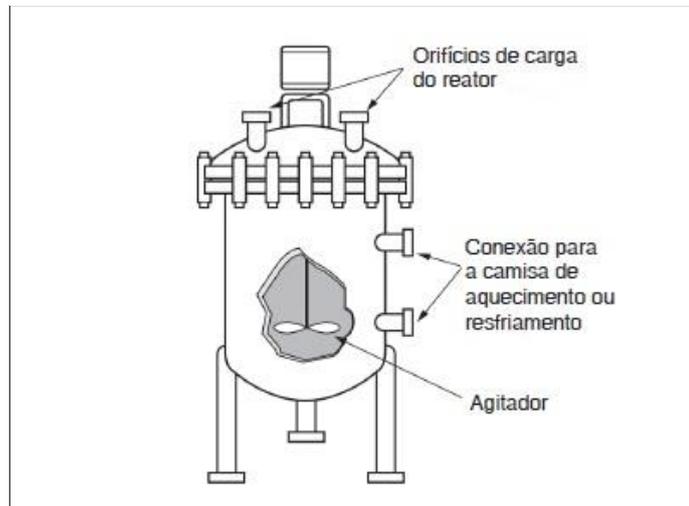
Neste trabalho serão analisados os reatores ideais, o experimento será feito em um reator de bancada. A realidade dos reatores industriais, ou seja, não ideais, difere dos reatores ideais. Em um reator não ideal existe uma distribuição do tempo de residência que deve ser considerada, a eficiência da mistura pode não ser perfeita, pode haver formação de zonas de estagnação (zonas mortas) e desvio de escoamentos. Reactores não ideais também possuem um volume maior e podem resultar em conversões menores do que os reatores ideais. No entanto, os reatores ideais ainda são utilizados nos cálculos de dimensionamento de reatores para facilitar as estimativas das condições ótimas de operação de um reator real. (FABREGA, 2012)

Existem diferentes tipos de classificação dos reatores ideais, como a natureza da mistura em seu interior e/ou o tipo de escoamento de seus reagentes e produtos, podendo ser de escoamento contínuo ou descontínuo. Dentro dessas classificações, os três principais utilizados em reações homogêneas são o reator batelada ideal, reator de tanque agitado contínuo ideal (CSTR) e o reator de escoamento pistonado ideal (PFR). As suas principais características, vantagens, desvantagens e equações de projeto serão mostradas a seguir. (ROBERTS, 2010)

Segundo Roberts (2010, p.36), “um reator batelada é definido como um reator no qual não há escoamento de massa através das fronteiras do sistema, uma vez que os reagentes tenham sido carregados”. Os reagentes são alimentados no topo do reator e são misturados até que o reagente limitante seja completamente consumido, ou seja, até que se atinja a conversão desejada.

A FIG. 1 ilustra o esquema de um reator batelada, onde contêm os orifícios de carga do reator, as conexões para a camisa de aquecimento ou resfriamento e o modelo de agitador do reator.

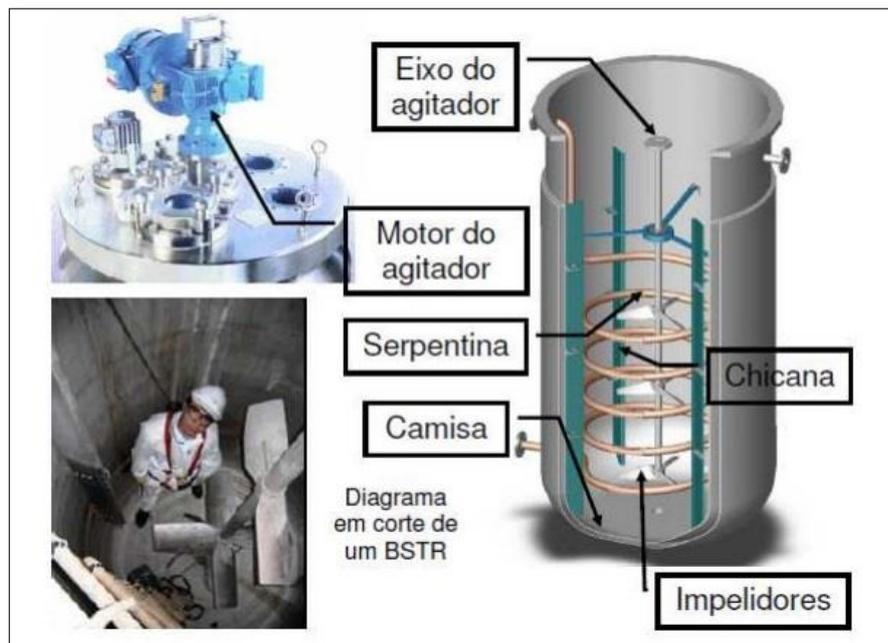
Figura 1 – Reator Batelada simples homogêneo.



Fonte: FOGLER, 2014.

A FIG. 2 ilustra alguns dos componentes de um reator batelada, como o eixo do agitador, o motor do agitador, a serpentina, a camisa, os impelidores, a chicana e mostra também um operador ao lado do agitador dentro de um tanque batelada.

Figura 2 – Componentes de um Reator Batelada.



Fonte: FABREGA, 2012.

O reator batelada é utilizado para operações em pequenas escalas, como testes em bancadas de laboratório. Ele tem a vantagem de obter altas conversões e flexibilidade, mas tem como desvantagens um alto custo de mão de obra, variabilidade de produtos de uma batelada a outra, dificuldade de produção em larga escala e o volume do reator é um limitante da produção. (FOGLER, 2014)

A forma integral do balanço molar para um reator batelada é dada na EQ 2:

$$t = N_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-r_A V} \quad , \quad (2)$$

Em que:

T = Tempo

$N_{A0}$  = Mols da espécie A alimentados.

X = Conversão

$-r_A$  = Velocidade de reação

V = Volume do reator

com essa equação é possível encontrar o tempo t de reação, necessário para alcançar uma conversão X. Quanto maior for o tempo de reação, maior será a conversão. (FOGLER, 2014)

Para definir a conversão, escolhe-se um dos reagentes como a base de cálculo e, assim se relaciona as demais espécies de reagentes com esta base. Na maioria das situações escolhe-se o reagente limitante como base de cálculo. (FOGLER, 2014). Sendo assim é possível desenvolver as relações estequiométricas e equações de projeto levando em consideração a seguinte reação:



Onde as letras maiúsculas representam as espécies químicas e as letras minúsculas representam os coeficientes estequiométricos. O reagente limitante é o primeiro que será consumido após a mistura dos reagentes. Então ao escolher a espécie A como reagente limitante, ou seja, como base de cálculo, a EQ. 3 será dividida pelo coeficiente estequiométrico de A, a fim de organizar a equação para que todos os coeficientes sejam expressos na base: por mol de A. (FOGLER, 2014).



Ainda considerando a espécie A como a base de cálculo, a conversão  $X \equiv X_A$  pode ser definida como:

$$X_A = \frac{\text{Mols de A reagidos}}{\text{Mols de A alimentados}} = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}, \quad (5)$$

Onde,

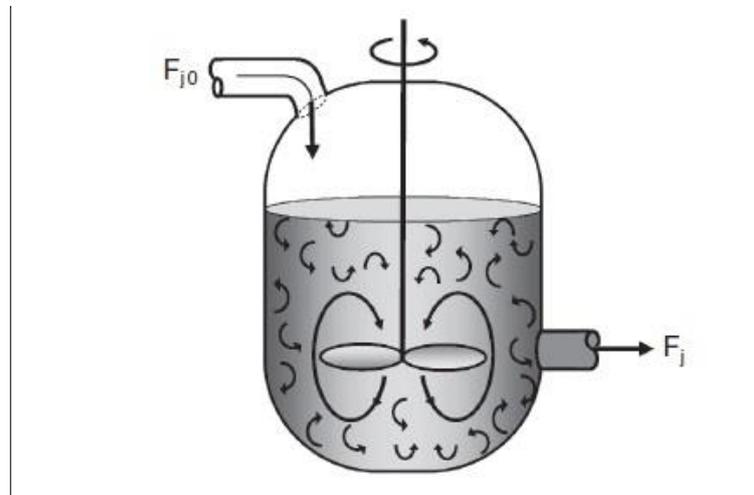
$C_{A0}$  = Concentração inicial de A.

$C_A$  = Concentração final de A.

Outro tipo de reator muito utilizado é o reator de escoamento contínuo perfeitamente misturado, mais conhecido como CSTR, na maioria das vezes opera em regime estacionário, ou seja, não há dependência espacial ou de tempo para a temperatura, concentração ou velocidade da reação no interior do reator. Com isso, os valores das variáveis não mudam de um ponto para outro, a temperatura e a concentração, tem o mesmo valor no ponto de saída, como em qualquer outro lugar do tanque de reação. (FOGLER, 2014)

A FIG. 3 ilustra o esquema de um reator CSTR, onde  $F_{j0}$  é a vazão de alimentação e  $F_j$  é a vazão de saída do reator.

Figura 3 – Reator CSTR.



Fonte: FOGLER, 2014.

A FIG. 4 mostra vários reatores industriais transportáveis em pequena escala.

Figura 4 – Reatores CSTR em pequena escala.



Fonte: BETAEQ, 2016.

O CSTR é comumente utilizado na indústria, principalmente para reações em fase líquida. Suas vantagens são o controle de temperatura, produção em grande escala por ser processo contínuo e baixo custo de operação. Mas tem como desvantagem a baixa conversão por volume em reações de ordem igual ou superior a um. (FOGLER, 2014)

A EQ. 4 é a equação de projeto para um reator CSTR ideal:

$$V = \frac{F_{A0}X}{-r_A} \quad , \quad (6)$$

Onde:

V = Volume do reator

$F_{A0}$  = Vazão molar de alimentação

X = Conversão

$-r_A$  = Velocidade de reação

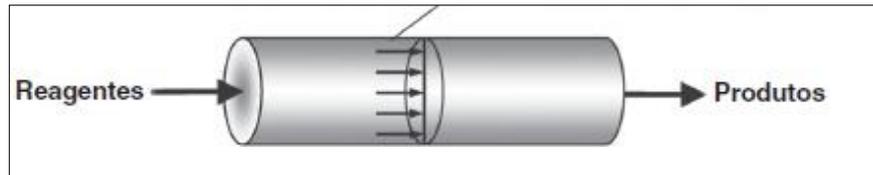
Com ela é possível encontrar o volume de reação necessário para alcançar uma conversão específica X, quando a espécie A está sendo consumida à velocidade  $-r_A$ . (FOGLER, 2014)

Outro importante tipo de reator onde os reagentes são consumidos de maneira contínua na medida em que percorrem o reator ao longo de seu comprimento, é conhecido como reator de escoamento pistonado, reator tubular ou PFR. Em seu projeto, assume-se que a

concentração varia continuamente na direção axial do reator. Com isso a velocidade de reação, que depende da concentração, também irá variar axialmente. (FOGLER, 2014).

A FIG. 5 ilustra o sentido axial do escoamento dos reagentes e produtos do reator PFR.

Figura 5 – Reator Tubular de escoamento uniforme PFR.



Fonte: FOGLER, 2014

A FIG. 6 mostra um reator industrial PFR de resfriamento em seu tamanho real.

Figura 6 – Reator Tubular de Resfriamento.



Fonte: Site DIRECTINDUSTRY, [2010].

O PFR é usado frequentemente na indústria para reações na fase gasosa. Suas vantagens são operação em larga escala e baixo custo de operação e tem como desvantagens o baixo controle de temperatura e alto custo com limpeza. (FOGLER, 2014)

A equação de projeto para um reator PFR ideal é:

$$V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-r_A} \quad , \quad (7)$$

Em que:

V= Volume do reator

F<sub>A0</sub>= Vazão molar de alimentação

$X$  = Conversão

$-r_A$  = Velocidade de reação

Com a EQ 7 é possível encontrar o volume necessário para alcançar uma conversão  $X$  especificada. (FOGLER, 2014)

Para reatores de escoamento descontínuo, o tempo  $t$  é a medida de desempenho de uma reação e para reatores de escoamento contínuo, as medidas de desempenho da reação são conhecidas como tempo espacial e a velocidade espacial. (ROBERTS, 2010)

O tempo espacial pode ser definido como o tempo necessário para processar uma quantidade de alimentação, que corresponda a um volume de reator característico, o valor para o tempo espacial é encontrado em função das condições de operação selecionadas, geralmente na maioria dos casos se lida com velocidade espacial e tempo espacial em função da alimentação e nas condições reais de entrada. (ROBERTS, 2010)

Partindo da corrente de alimentação do reator a EQ. 8 mostra:

$$t = \frac{V}{v_0} = \frac{\text{(volume do reator)}}{\text{(vazão volumétrica de alimentação)}} \quad (8)$$

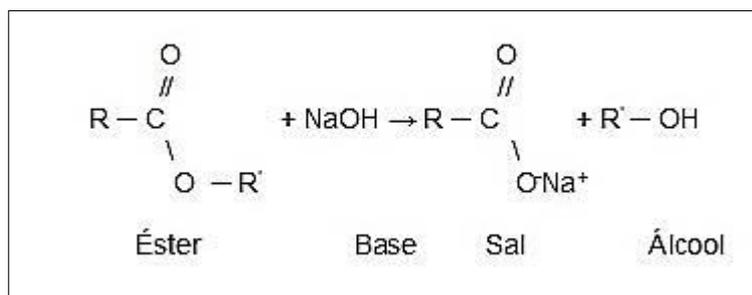
(ROBERTS, 2010)

## 4.2 Reação de Saponificação

A reação de saponificação pode ser definida como aquela em que um éster reage em meio aquoso com uma base forte, ou seja, é uma hidrólise alcalina. Os produtos formados são um sal e um álcool. Essas reações são denominadas de reações de saponificação porque, quando ocorre uma reação desse tipo, com um triéster proveniente de ácidos graxos, formam-se os sabões. (FOGAÇA, [2015])

A FIG. 7 ilustra uma reação de saponificação, onde um éster reage com uma base, formando um sal e um álcool.

Figura 7 – Estrutura da reação de saponificação.



Fonte: FOGAÇA, [2015].

De acordo com uma antiga lenda romana a palavra saponificação tem sua origem no Monte Sapo, onde realizavam o abate de animais. A chuva levava uma mistura de sebo animal (gordura) derretido, com cinzas e barro para as margens do Rio Tibre onde se realizava a lavagem de roupas. Essa mistura resultava numa pasta (sabão). As mulheres descobriram que usando esta pasta, suas roupas ficavam muito mais limpas. A essa mistura os romanos deram o nome de sabão e à reação de obtenção do sabão de reação de saponificação devido o nome do monte que era sapo. (DISEGNA, 2013).

A primeira patente do processo de fabricação de sabão é de 1791 quando o químico francês Le Blanc utilizou soda cáustica na sua fabricação e desde então seu processo de fabricação sofreu poucas alterações (DISEGNA, 2013).

### **Reação de Saponificação do Acetato de Etila**

O reagente acetato de etila ( $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$ ), também conhecido como etanoato de etila, é da família dos ésteres e tem um alto poder de solvência, sendo muito utilizado como solvente polar. É um líquido, límpido, incolor e com o odor forte e frutal, de polaridade moderada e instável na presença de bases fortes e ácidos aquosos. Em condições ambientes, possui um ponto médio de ebulição de  $77\text{ }^\circ\text{C}$ , ponto de fulgor de  $-4\text{ }^\circ\text{C}$  e temperatura de autoignição de  $426\text{ }^\circ\text{C}$  (VASCONCELOS et al., 2015).

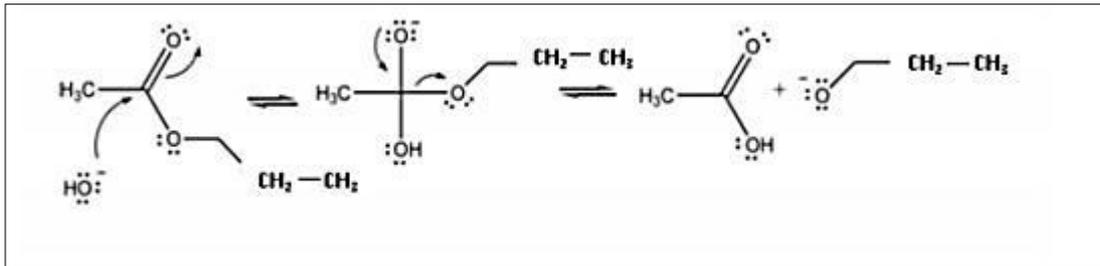
Devido ao seu alto poder de solvência e demais propriedades, o acetato de etila possui ampla aplicação nas indústrias de tintas, vernizes, esmaltes, lacas e thinners; tintas para impressão; adesivos, colas e removedores; filmes fotográficos; explosivos; recobrimentos para papéis; produtos farmacêuticos, perfumaria, cosméticos e processamento de alimentos; couro natural e sintético; anilinas e corantes; e solventes para limpeza (QUIMIDROL, 2013).

A hidrólise do acetato de etila é representada como um modelo de reação de segunda ordem na literatura que aborda a cinética química. Esta reação de saponificação tem sido analisada por diversos pesquisadores em diferentes parâmetros de medição (MOHD et al., 2015, tradução nossa).

A reação de saponificação do éster ocorre por substituição nucleofílica, no qual o íon hidroxila é adicionado ao grupo acetil, enquanto o íon sódio forma um sal orgânico com o íon acetato, permanecendo ionizado na solução (VASCONCELOS et al., 2015).

As FIG. 8 e 9 representam o mecanismo de reação proposto pela literatura para a reação de saponificação do Acetato de Etila com uma base forte. A FIG. 8 ilustra o ataque nucleofílico da hidroxila ao grupo carbonila do éster e a eliminação do grupo acetato.

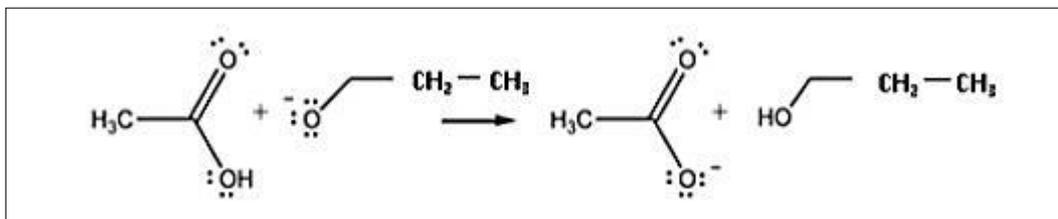
Figura 8 – Ataque nucleofílico da hidroxila ao grupo carbonila do éster e eliminação do grupo acetato.



Fonte: VASCONCELOS et al., 2015.

E a FIG. 9 ilustra a desprotonação do ácido acético em meio básico para a produção do acetato.

Figura 9 - Desprotonação do ácido acético em meio básico para a produção do acetato.



Fonte: VASCONCELOS et al., 2015.

A EQ. 9 exibe a reação de saponificação do acetato de etila.



A hidrólise de acetato de etila por hidróxido de sódio (NaOH) produzindo acetato de sódio (CH<sub>3</sub>COONa) e etanol (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH) é uma reação de saponificação, embora o produto final não seja sabão (DANISH et al., 2015, tradução nossa).

Souza et al. (2017), ajustando os dados experimentais em seu estudo, encontrou que a reação de saponificação do acetato de etila é de segunda ordem, cuja lei de velocidade pode ser descrita na EQ. 10.

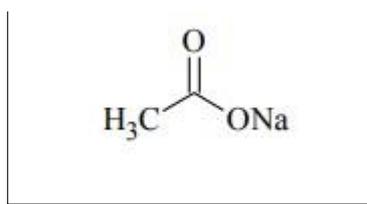
$$-r_A = k \cdot (C_A)^2 \quad (10)$$

### Acetato de Sódio

O Acetato de Sódio é o um dos produtos finais da reação de Saponificação do Acetato de Etila. Ele é um sal orgânico também designado por etanoato de sódio que pode ser encontrado de forma hidratada ou anidra. Possui massa molar de 82,03 g/mol e sua fórmula molecular é  $C_2H_3O_2Na$ . Ele é muito solúvel em água e solúvel em álcool. Apresenta-se fisicamente como cristais incolores, transparentes, pó cristalino branco, granular, ou flocos brancos. (LOJA QUÍMICA, 2018)

A FIG. 10 apresenta a estrutura molecular do Acetato de Sódio.

Figura 10 – Estrutura molecular do Acetato de Sódio.



Fonte: ANVISA, [2015].

Dadas suas diversas aplicações, o acetato de sódio é um produto químico essencial e facilmente encontrado no mercado, ele é utilizado em vários segmentos da indústria e algumas de suas aplicações são: na indústria farmacêutica pode ser usado como uma forma de sódio para medicamentos intravenoso; na indústria alimentícia, como conservante; na indústria de cosméticos é usado para fazer sabão e uma variedade de produtos cosméticos, isto é devido ao seu potencial de neutralização; na indústria têxtil, ele é usado para remover os sais de cálcio e prolongar a vida útil do tecido acabado; é também um agente de decapagem em curtumes de cromo, e ajuda a retardar a vulcanização da borracha de cloropreno na produção de borracha sintética; no processamento de algodões descartáveis, acetato de sódio é usado para eliminar o acúmulo de eletricidade estática. (BLRH, 2018)

### Etanol

O segundo produto formado é o álcool. O álcool é um líquido inflamável, incolor e inodoro, também conhecido como etanol, tem fórmula molecular  $C_2H_5OH$ , podendo ser

obtido dos produtos como: cana-de-açúcar, mandioca, milho, batata, eucalipto, beterraba, arroz, etc. Utilizado como combustível nos motores de ciclo Otto, especificamente no setor de transporte rodoviário. (UDOP, 2012)

O Etanol pode ser encontrado de duas formas, etanol anidro e etanol hidratado. O etanol hidratado é aquele comum vendido nos postos de gasolina, enquanto o etanol anidro é o que é adicionado à gasolina. A diferença entre os dois diz respeito à quantidade de água presente em cada um deles. O etanol hidratado combustível possui em sua composição entre 95,1% e 96% de etanol e o restante de água, enquanto o etanol anidro (também chamado de etanol puro ou etanol absoluto) possui pelo menos 99,6% de graduação alcoólica. (NOVA CANA, 2019)

O etanol anidro é adicionado à gasolina para diminuir o custo do combustível, aumentar sua octanagem e reduzir a emissão de poluentes. O Brasil atualmente utiliza a mistura na proporção de 20%, sendo que essa taxa já atingiu 25% em algumas épocas. Mais de 40 países, como Estados Unidos, Canadá, Paraguai e China também utilizam esse mistura, porém em proporções que costumam ser de 5% ou 10%. O etanol anidro ainda é utilizado na fabricação de tintas, vernizes, solventes, bebidas destiladas, entre outros produtos. (NOVA CANA, 2019)

Já o etanol hidratado é utilizado como combustível somente no Brasil, desde o fim da década de 70. Sendo o maior produtor mundial de cana-de-açúcar, melhor matéria prima do etanol, esse uso torna-se viável economicamente apenas no país, algo possível graças a incentivos governamentais com o programa Proálcool, de 1975. Além de combustível, o etanol hidratado também está é utilizado na produção de cosméticos, produtos de limpeza, antissépticos, vinho, cerveja e outros líquidos, em graduações alcoólicas que variam de produto a produto. (NOVA CANA, 2019)

## 5.0 METODOLOGIA

Para identificar quais são os efeitos das condições de operação no rendimento da reação de Saponificação do Acetato de Etila, foi feita uma reação de Acetato de Etila e Hidróxido de Sódio variando a temperatura, a vazão e o tipo de reator utilizado para a reação.

O experimento foi realizado no Laboratório de Operações Unitárias do Centro Universitário de Formiga, localizado em Formiga – Minas Gerais.

Para a análise, foi utilizado um módulo didático de reatores ideais da marca Up. Control, contendo um reator CSTR que também pode ser usado como batelada, com volume de 1,8 L e um PFR com volume de 0,4 L. O módulo possui um controlador de temperatura que opera na faixa de temperatura de 15 a 80°C e um rotâmetro com range de 6 a 60 L/h, onde é feito o controle da vazão de alimentação do reator. A FIG. 11 ilustra o módulo de reatores utilizado.

Figura 11 – Módulo didático de reatores ideais utilizado no experimento.



Fonte: A autora.

Preparou-se as soluções de Acetato de Etila e Hidróxido de Sódio nas concentrações de 0,02 mol.L<sup>-1</sup>. A solução de acetato de Etila foi feita pela diluição de 0,039 litros de Acetato

de Etila para 20 litros de água destilada e a solução de Hidróxido de Sódio foi pela diluição de 16 gramas do Hidróxido de Sódio para 20 litros de água destilada.

Para verificar o rendimento da reação, foram calculadas as concentrações iniciais e finais das amostras nas condições de operação estudadas e através das concentrações foram calculadas as conversões dos reagentes em produtos utilizando a EQ.5. Existe uma correlação linear entre a condutividade do meio reacional com a concentração do mesmo e foi por meio desta correlação que se calcularam as concentrações.

Foram coletadas amostras simples nas saídas dos reatores nos mesmos intervalos de tempo para as diversas condições de operações avaliadas. Mediu-se a condutividade das amostras com um medidor multiparâmetro de bancada Versa Star da marca Thermo Scientific, ilustrado na FIG. 12.

Figura 12 - Medidor multiparâmetro de bancada, utilizado para medir a condutividade.



Fonte: Fotografia tirada pela autora.

Através da condutividade, foi possível encontrar as concentrações de cada uma das amostras e calcular a conversão da reação utilizando a EQ. 5, que é a quantidade de mols reagidos sobre a quantidade de mols alimentados.

Com os resultados obtidos em cada experimento e por meio de gráficos de tendência, foi possível comparar entre as temperaturas, qual delas fez com que a reação alcançasse a conversão mais alta. Comparou-se também com qual das vazões a reação obteve o maior

valor de conversão e por fim qual o tipo de reator que proporcionou um melhor desempenho para a reação. Nessas condições, foi feita uma avaliação das condições ótimas de operação para esta reação.

### 5.1 Curva de Calibração

Para determinar a correlação entre a condutividade e a concentração, mediu-se a condutividade dos reagentes a temperatura de 25°C. Como a condutividade do Acetato de Etila (0,02 mol.L<sup>-1</sup>) é muito baixa em relação à condutividade do Hidróxido de Sódio (0,02 mol.L<sup>-1</sup>), considerou-se desprezível a participação da condutividade do Acetato de Etila (0,02 mol.L<sup>-1</sup>).

Sendo a estequiometria da reação de 1 mol de NaOH para 1 mol de Acetato de Etila, tomou-se por base apenas o NaOH e a sua concentração foi determinada através da regressão linear em uma curva de calibração.

Para a construção da curva, foram preparadas as soluções de Hidróxido de Sódio com concentrações de 0,01; 0,008; 0,006; 0,004 e 0,002 mols/L e mediram-se suas respectivas condutividades utilizando o medidor multiparâmetro citado anteriormente. Em posse dos resultados, plotou-se o gráfico com o eixo X apresentando as concentrações e o eixo Y apresentando as condutividades das soluções.

A equação da reta obtida pelo gráfico foi utilizada para calcular as concentrações das amostras coletadas e utilizando a EQ. 5 calcularam-se as conversões.

### 5.2 Variações da Temperatura no reator CSTR

Para encontrar em qual temperatura a reação alcançaria maior conversão, foram feitos experimentos com as temperaturas de 25, 30 e 35°C.

Em cada experimento, alimentou-se o reator CSTR com as soluções preparadas, programou-se o controlador de temperatura na temperatura desejada e ajustaram-se as vazões de alimentação dos dois reagentes em 13L/h e a rotação do reator em 1 rpm/min.

Foram coletadas amostras simples na saída do reator, em intervalos de 4, 12, 15, 20, 25 e 30 minutos após o início da reação.

Mediu-se a condutividade de cada amostra retirada e o valor encontrado foi lançado na equação da reta para encontrar qual a concentração de NaOH do meio reacional naquele

instante. Com o valor da concentração inicial e da concentração no tempo  $t$ , foi possível calcular a conversão da reação usando a EQ.5.

### **5.3 Variações da Vazão de alimentação no reator CSTR**

Para analisar com qual vazão de alimentação a reação alcançaria a maior conversão, foram feitos experimentos com as vazões de 7, 13 e 20 L/h.

Para cada uma das condições de operação, alimentou-se o reator com os reagentes, ajustou-se o rotâmetro na vazão desejada, programou-se o controlador de temperatura na temperatura de 35°C e a rotação do reator em 1 rpm/min.

As amostras foram coletadas na saída do reator, em intervalos de 4, 12, 15, 20, 25 e 30 minutos após o início da reação, mesmo intervalo de tempo descrito no tópico anterior.

Mediu-se a condutividade de cada amostra retirada, encontraram-se as concentrações e calcularam-se as conversões (EQ. 5).

### **5.4 Tipos de reator**

Para comparar em qual reator esta reação obteria uma maior conversão, foi feito um experimento no reator PFR e outro no reator CSTR.

Para cada experimento alimentou-se os reatores com os reagentes, ajustou-se a temperatura do controlador em 25°C e ajustou-se a vazão dos dois reagentes em 13 L/h.

As amostras foram coletadas nas saídas dos reatores, em intervalos de 4, 12, 15, 20, 25 e 30 minutos após o início da reação, mesmo intervalo de tempo usado nos itens anteriores.

Mediu-se a condutividade de cada amostra, determinou-se a concentração de NaOH utilizando-se a equação de regressão encontrada no item 5.1 e, por fim foram determinadas as conversões em cada condição de operação descrita.

## 6.0 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para verificar o efeito das condições de operações no rendimento da reação de saponificação do Acetato de Etila, construiu-se a curva de calibração da condutividade e a concentração para que através dela se encontrasse a conversão de reagentes em produtos, variaram-se as temperaturas de reação, variaram-se as vazões de alimentação dos reagentes e o tipo de reator utilizado para o processamento da reação. Os dados obtidos serão descritos nos próximos tópicos.

### 6.1 Curva de Calibração

Para determinar a relação entre a condutividade e a concentração, construiu-se uma curva de calibração. Para isso foram medidas as condutividades dos reagentes a temperatura de 25°C (TAB.1).

Tabela 1 – Condutividade dos Reagentes a 25°C.

Reagente	Condutividade ( $\mu\text{S}/\text{cm}$ ) 25°C
Acetato de Etila	101,1
Hidróxido de Sódio	4830

Fonte: a própria autora.

Ao desprezar a colaboração da condutividade do Acetato de Etila no meio reacional devido ela ser muito baixa e colocando a reação em função do NaOH, pode-se observar a relação entre a condutividade e a concentração de NaOH na mistura através de uma curva de calibração.

Os dados utilizados para a construção da curva de calibração estão descritos na TAB.

2.

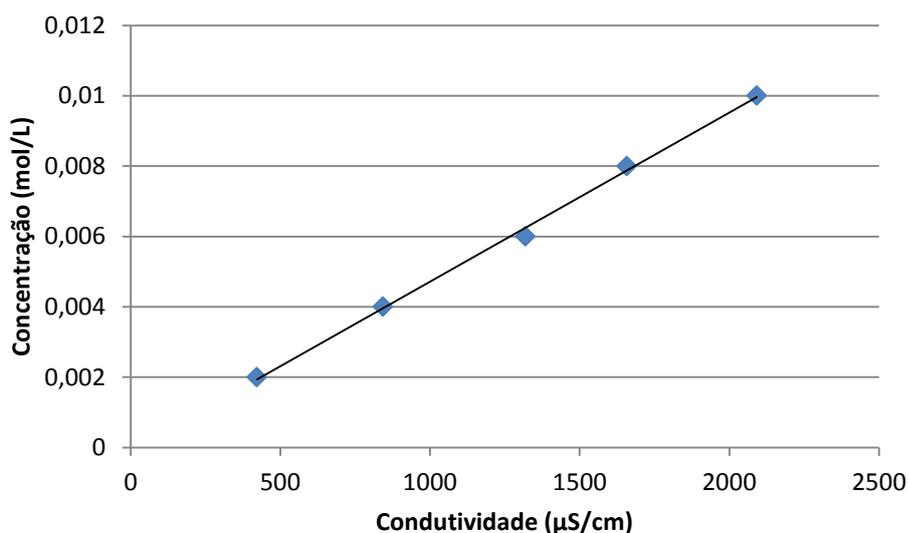
Tabela 2 – Dado para a curva de calibração.

$C_{(\text{NaOH})0}$ (mol/L)	Condutividade ( $\mu\text{S/cm}$ )
0,01	2092
0,008	1658
0,006	1319
0,004	843
0,002	422

Fonte: a própria autora.

Com esses dados plotou-se o gráfico para observar o comportamento da curva de calibração a 25° C. (GRAF. 1)

Gráfico 1 – Curva de Calibração da correlação linear entre a condutividade e concentração de NaOH a 25° C.



Fonte: a própria autora.

Através da regressão linear, obteve-se a EQ. 11 que correlaciona a concentração de NaOH à condutividade:

$$\text{Cond} = 2,0775 \times 10^5 C_{\text{NaOH}} + 20,3 \quad (11)$$

$$R = 0,99$$

Para comprovar que o comportamento linear entre os dois parâmetros seja satisfatório, sabe-se que é desejável um coeficiente de determinação ( $R^2$ ) próximo de 1. Sendo assim o valor de  $R^2 = 0,99$  encontrado comprova a relação entre eles.

Com a EQ. 11 determinou-se as concentrações das amostras e calcularam-se as conversões através da EQ. 5.

## 6.2 Variação da Temperatura no reator CSTR

Para avaliar em qual temperatura se alcançaria a maior conversão, os reagentes foram bombeados à uma vazão de 13 L/h, programou-se o controlador primeiro em 25° C e foram coletadas seis amostras nos tempos 4, 12, 15, 20, 25 e 30 minutos. Os dados obtidos estão descritos na TAB.3.

Tabela 3 – Dados coletados à temperatura de 25°C.

<b>Cond.<sub>0</sub> (μS/cm)</b>	<b>C<sub>NaOH 0</sub> (mol/L)</b>	<b>Cond. (μS/cm)</b>	<b>C<sub>NaOH</sub> (mol/L)</b>	<b>X (%)</b>
1894	0,0090	1650	0,0078	13,02
1894	0,0090	1602	0,0076	15,58
1894	0,0090	1604	0,0076	15,48
1894	0,0090	1615	0,0077	14,89
1894	0,0090	1627	0,0077	14,25
1894	0,0090	1609	0,0076	15,21

Fonte: a própria autora.

Em seguida, com a mesma vazão, o controlador de temperatura foi ajustado para 30° C e obtiveram-se os dados presentes na TAB.4.

Tabela 4 – Dados coletados à temperatura de 30° C.

<b>Cond.<sub>0</sub> (μS/cm)</b>	<b>C<sub>NaOH 0</sub> (mol/L)</b>	<b>Cond. (μS/cm)</b>	<b>C<sub>NaOH</sub> (mol/L)</b>	<b>X (%)</b>
1894	0,0090	1800	0,0096	5,02
1894	0,0090	1776	0,0085	6,30
1894	0,0090	1757	0,0084	7,31
1894	0,0090	1749	0,0083	7,74
1894	0,0090	1741	0,0083	8,17
1894	0,0090	1756	0,0084	7,37

Fonte: a própria autora.

Por fim, ainda com a vazão de 13 L/h, o controlador de temperatura foi ajustado para 35° C e se obteve os dados presentes na TAB.5.

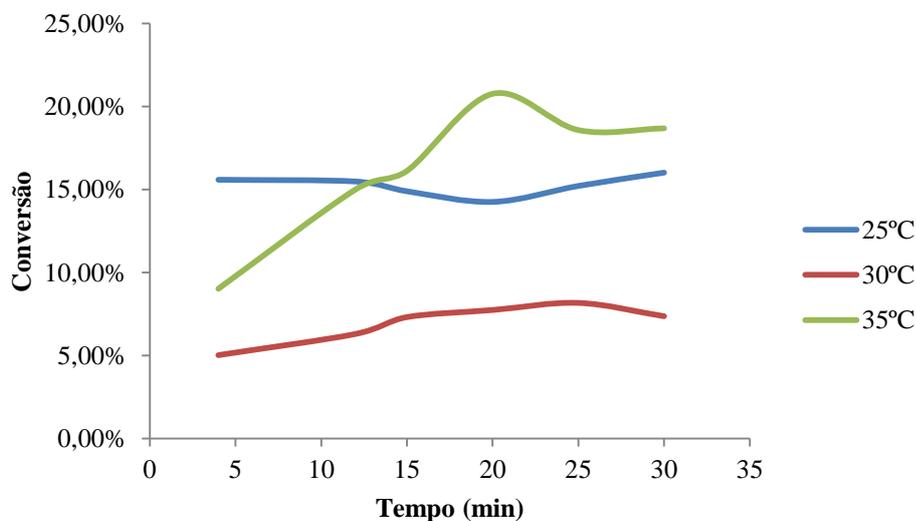
Tabela 5 – Dados coletados à temperatura de 35° C.

Cond. <sub>0</sub> (μS/cm)	C <sub>NaOH 0</sub> (mol/L)	Cond. (μS/cm)	C <sub>NaOH</sub> (mol/L)	X (%)
1894	0,0090	1725	0,0082	9,02
1894	0,0090	1613	0,0077	15,0
1894	0,0090	1592	0,0076	16,12
1894	0,0090	1505	0,0071	20,76
1894	0,0090	1546	0,0073	18,57
1894	0,0090	1544	0,0073	18,68

Fonte: a própria autora.

Com os dados descritos nas tabelas, construiu-se o gráfico de conversão versus tempo em função das três temperaturas. (GRAF.2)

Gráfico 2 – Conversão versus tempo em função de três diferentes temperaturas.



Fonte: A própria autora.

Através do GRAF.2 observa-se que na temperatura de 25°C a conversão da reação variou lentamente no decorrer do tempo. Na temperatura de 30°C, pode-se notar que a conversão alcançou um menor valor em relação à conversão em 25°C. Já com a temperatura do reator em 35°C, a conversão aumentou significativamente, atingindo o maior valor dentre as três temperaturas. Analisando este comportamento, percebe-se que com a maior temperatura se atingiu a maior conversão, com exceção da conversão da reação em 30°C que foi menor que a de 25°C. Isso pode ter ocorrido devido alguma perturbação no sistema ou

pelo fato de o sistema não ter alcançado o estado estacionário, para verificar qual seria a conversão teórica foi feito o cálculo utilizando o volume do reator e os dados da constante de velocidade e energia de ativação encontrados na literatura.

Souza M. S. et al. (2017) encontrou em seu estudo o valor da constante da taxa (k) para 35°C igual a 25,90646 (L/mol.min) e a energia de ativação ( $E_A$ ) de  $1,7855 \times 10^4$ . Em posse desses valores foi possível calcular os valores das constantes de velocidade para as temperaturas de 25 e 30°C utilizando a EQ. 12.

$$K = K_{T_1} \cdot e \left[ \frac{E_A}{R} \cdot \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (12)$$

Com os valores das constantes de velocidade para as três temperaturas e as concentrações finais obtidas em cada temperatura, calculou-se a equação da taxa de velocidade para a reação utilizando a EQ. 10, em seguida calculou-se a conversão teórica com a EQ. 6 para cada temperatura. Os resultados dos cálculos estão na TAB.6.

Tabela 6 - Resultados do cálculo da conversão teórica.

Temperatura (°C)	Temperatura (K)	k(L/mol.min)	Equação da Taxa: -r <sub>A</sub> (mol/L.min)	Conversão X (%)
25	298,15	20,506762	0,001093	45
30	303,15	23,09350	0,001231	51
35	308,15	25,90646	0,001381	57

Fonte: A própria autora.

Comparando os valores das conversões máximas alcançadas no experimento com os valores das conversões teóricas calculadas presentes na TAB.6 percebe-se uma diferença no valor entre elas sendo que as conversões alcançadas no experimento foram bem menores que as calculadas, o que reforça a necessidade de se repetir o experimento para confirmar os resultados.

O comportamento ideal de um reator CSTR é de mistura perfeita e escoamento contínuo, mas alguns comportamentos não ideais podem ser explicados pelo fato de o escoamento ter caminhos preferenciais conhecidos como áreas de *by-pass*, onde os reagentes percorrem um caminho mais curto sem se misturar com o fluido restante e pode ocorrer também formação de zonas de estagnação, com boa conversão de reagentes, porém o fluido contido nelas não sai do reator, diminuindo assim a conversão média. (ISHIDA, 2017)

Segundo Levenspiel (2000, p. 21), “a constante da taxa que é usada para encontrar a velocidade de consumo do reagente A (EQ.1), depende diretamente da temperatura da

reação”, ou seja, quanto maior a temperatura, maior será a velocidade em que o reagente A será convertido em produto. Isso explica porque a conversão aumenta com o aumento da temperatura.

Danish M. e Al Mesfer MK (2015, v.5, p. 14 e 15), observaram em seu estudo um comportamento semelhante da conversão em relação à temperatura, alcançando uma conversão máxima de 68,4 % para o reator PFR a 40°C e de 63,4 % para o reator CSTR a 40°C, valores bem maiores comparados às conversões obtidas quando a temperatura era de 25°C.

Em outro artigo, Danish M. et al. (2015, v. 5, p, 76 e 77), também observaram o aumento da conversão com o aumento da temperatura. No estudo realizado por eles, a conversão atinge um valor de 63,3% a 35°C, em comparação com a conversão de 50,2% a uma temperatura de 25°C.

Mesmo apresentando baixos valores, o comportamento da conversão em relação à temperatura observado neste trabalho, com exceção na conversão à 30°C, condiz com a literatura e com outros trabalhos que foram apresentados acima.

### 6.3 Variação da Vazão no reator CSTR

Para avaliar qual o efeito da variação da vazão de alimentação dos dois reagentes para o rendimento da reação, observou-se que na temperatura de 35°C se alcançou uma maior conversão, então ajustou-se o controlador a essa temperatura para que se obtivesse o melhor resultado possível.

Os dados de concentrações, condutividades e conversão onde a vazão era de 7 L/h, estão presentes na TAB. 7.

Tabela 7 – Dados coletados com a vazão de alimentação de 7 L/h a 35°C.

Cond. <sub>0</sub> (μS/cm)	C <sub>NaOH 0</sub> (mol/L)	Cond. (μS/cm)	C <sub>NaOH</sub> (mol/L)	X (%)
1894	0,0090	1595	0,0076	15,96
1894	0,0090	1540	0,0073	18,89
1894	0,0090	1525	0,0072	19,69
1894	0,0090	1515	0,0072	20,23
1894	0,0090	1495	0,0071	21,29
1894	0,0090	1490	0,0071	21,56

Fonte: a própria autora.

No segundo teste, a vazão era de 13 L/h e foram obtidos os dados da TAB. 8.

Tabela 8 – Dados coletados com a vazão de alimentação de 13 L/h a 35°C.

<b>Cond.<sub>0</sub> (μS/cm)</b>	<b>C<sub>NaOH 0</sub>(mol/L)</b>	<b>Cond. (μS/cm)</b>	<b>C<sub>NaOH</sub> (mol/L)</b>	<b>X (%)</b>
1894	0,0090	1725	0,0082	9,02
1894	0,0090	1613	0,0077	15,0
1894	0,0090	1592	0,0076	16,12
1894	0,0090	1505	0,0071	20,76
1894	0,0090	1546	0,0073	18,57
1894	0,0090	1544	0,0073	18,68

Fonte: a própria autora.

No último teste, a vazão ajustada foi de 20 L/h e os dados de concentrações medidas nas amostras bem como as respectivas conversões obtidas são apresentados na TAB.9.

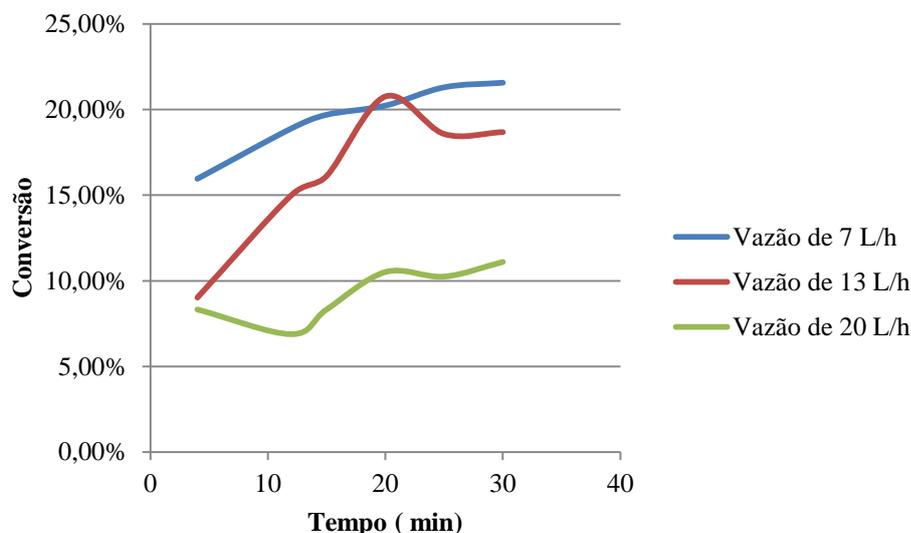
Tabela 9 – Dados coletados com a vazão de alimentação de 20 L/h a 35°C.

<b>Cond.<sub>0</sub> (μS/cm)</b>	<b>C<sub>NaOH 0</sub>(mol/L)</b>	<b>Cond. (μS/cm)</b>	<b>C<sub>NaOH</sub> (mol/L)</b>	<b>X (%)</b>
1894	0,0090	1738	0,0083	8,33
1894	0,0090	1765	0,0084	6,88
1894	0,0090	1738	0,0083	8,33
1894	0,0090	1697	0,0081	10,51
1894	0,0090	1702	0,0081	10,25
1894	0,0090	1686	0,0080	11,10

Fonte: a própria autora.

Utilizando os dados apresentados nas TAB. 7, 8 e 9 construiu-se o gráfico de conversão versus tempo para três vazões. (GRAF.3)

Gráfico 3 – Conversão versus tempo para três diferentes vazões.



Fonte: A própria autora.

Ao analisar o GRAF. 3 percebe-se que com a vazão de alimentação em 20 L/h, se alcançou uma menor conversão. Com a vazão de alimentação em 13 L/h, o valor de conversão aumentou gradativamente no decorrer do tempo, teve um pico com o tempo de 20 minutos e depois se estabilizou. Já com a vazão de 7 L/h, observa-se uma curva mais estável e um maior valor de conversão atingida, ou seja, a maior conversão foi atingida quando o reator operava com o menor valor de vazão.

Danish M. et al. (2015, v. 5, p, 76), também estudaram a variação da conversão em relação à taxa de fluxo dos reagentes, eles utilizaram três vazões de alimentação diferentes e encontraram um comportamento semelhante, a conversão atingiu um valor de 54% a uma vazão de 40 ml/min e caiu para de 49% quando a vazão era de 60 ml / min, ou seja, a conversão diminuiu na medida que as vazões de hidróxido de sódio e acetato de etila aumentaram.

Analisando a definição de tempo espacial, que segundo Fogler (2013, p. 52) é: “O tempo necessário para se processar um volume de fluido no reator” e observando a EQ.8, onde o tempo espacial é inversamente proporcional à vazão inicial, entende-se que quanto menor a vazão de alimentação, maior será o tempo em que a reação permanece se processando no reator, sendo assim, se alcança uma maior conversão dos reagentes em produtos.

Em reatores não ideais, o tempo de residência não é o mesmo para todas as moléculas, o que pode causar variações nas concentrações e conseqüentemente nas conversões da reação

ao longo do reator, sendo assim a concentração no interior do reator e na saída, não serão uniformes. (SCHMAL, 2010 *apud* MORAIS, 2015, p.19).<sup>1</sup>

Os picos na conversão durante o tempo de reação podem ser explicados por possíveis perturbações no sistema, sugere-se repetir o experimento para confirmar, mas de modo geral os resultados da variação da conversão em função da vazão de alimentação encontrados neste estudo são condizentes com a literatura e com o trabalho analisado acima.

#### 6.4 Tipo de Reator

Para verificar o desempenho do reator PFR, ajustou-se o rotâmetro na vazão de 13L/h para os dois reagentes e programou-se o controlador na temperatura de 25°C. As amostras foram coletadas na saída do reator e imediatamente calculou-se a conversão delas. Os dados encontrados para o reator PFR são apresentados na TAB. 10.

Tabela 10 – Dados coletados na saída do reator PFR.

Cond. <sub>0</sub> (μS/cm)	C <sub>NaOH 0</sub> (mol/L)	Cond. (μS/cm)	C <sub>NaOH</sub> (mol/L)	X (%)
1894	0,0090	1751	0,0083	7,63
1894	0,0090	1706	0,0081	10,03
1894	0,0090	1677	0,0080	11,58
1894	0,0090	1661	0,0079	12,44
1894	0,0090	1677	0,0080	11,58
1894	0,0090	1666	0,0079	12,17

Fonte: A própria autora.

Para a análise do desempenho do reator CSTR, foram estabelecidas as mesmas condições de operação do PFR, as amostras também foram coletadas na saída do reator e foram calculadas as conversões. Os dados encontrados no reator CSTR estão descritos na TAB. 11.

<sup>1</sup> SCHMAL, M. Cinética e reatores: aplicação na engenharia química. 1ª ed. Rio de Janeiro: Synergia, 2010.

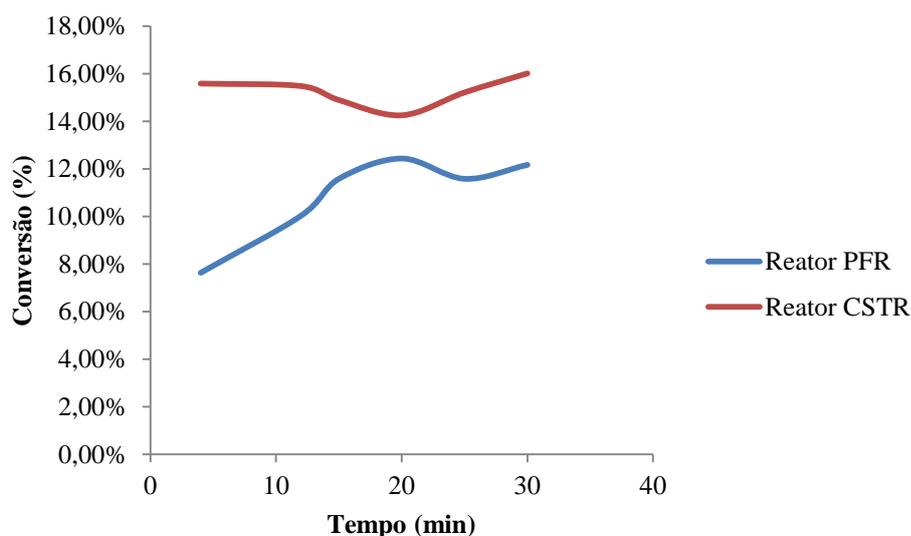
Tabela 11 – Dados coletados na saída do reator CSTR.

Cond. <sub>0</sub> (μS/cm)	C <sub>NaOH 0</sub> (mol/L)	Cond. (μS/cm)	C <sub>NaOH</sub> (mol/L)	X (%)
1894	0,0090	1602	0,0076	15,58
1894	0,0090	1604	0,0076	15,48
1894	0,0090	1615	0,0077	14,89
1894	0,0090	1627	0,0077	14,25
1894	0,0090	1609	0,0076	15,21
1894	0,0090	1594	0,0076	16,01

Fonte: A própria autora.

Para comparar os resultados, os dados das TAB. 10 e 11 foram utilizados para plotar um gráfico de conversão versus tempo em função do tipo de reator. (GRAF.4)

Gráfico 4 – Conversão versus tempo em função do tipo de reator.



Fonte: A própria autora.

Estudando o GRAF.4, observa-se que no reator PFR, a reação alcançou valores mais baixos de conversões, chegando ao máximo de 12,17 % até o tempo de 30 minutos. Já no reator CSTR, a reação alcançou 16,01% de conversão, apresentando um melhor resultado em comparação com o PFR.

Ao levar em consideração o tempo espacial em função do volume do reator, analisando novamente a EQ.8, tem-se que o tempo de residência é diretamente proporcional ao volume, portanto, quanto maior for o volume do reator, mais tempo se levará para a reação ser processada e quanto maior for o tempo de reação maior será a conversão dos reagentes em

produtos (FOGLER, 2013). Analisando essa explicação, a diferença de volume entre os dois reatores do experimento pode explicar a diferença nas conversões alcançadas por eles.

Danish M. et al. (2015, v. 5, p, 77) variaram o volume de um reator CSTR para ver qual efeito surgiria na conversão da reação e encontraram uma mudança de 48,4% de conversão em um reator de  $1.26 \text{ dm}^3$  para cerca de 59% de conversão com o volume do reator de  $2,06 \text{ dm}^3$ .

Mas em alguns casos analisados na literatura, como no estudo Danish M. e Al Mesfer MK (2015, v.5, p. 14 e 15), a conversão do reator PFR apresentou um melhor resultado em comparação ao reator CSTR, o que difere do resultado encontrado neste estudo.

Essa divergência pode ser explicada pelo comportamento não ideal dos reatores. O reator PFR utilizado era de escoamento laminar, o que o faz se distanciar da idealidade porque as moléculas de reagentes não interagem o suficiente para alcançar bons resultados de conversão. Se utilizar um reator PFR de recheio esse problema irá diminuir porque o regime passará a ser turbulento. (MORAIS, 2015)

Outra explicação para a divergência nos resultados é que o reator PFR não encheu o seu volume completamente, ficando várias zonas mortas onde não havia fluxo de reagentes, diminuindo assim o tempo de contato entre as moléculas.

## 7.0 CONCLUSÃO

Os efeitos das condições de operação do reator no rendimento da reação de Saponificação do Acetato de Etila foram estudados variando-se as temperaturas da reação, vazões de alimentação dos reagentes e o tipo de reator utilizado.

Ao variar a temperatura da reação, se atingiu a maior conversão quando o reator operava na temperatura de 35°C. Já na variação da vazão de alimentação dos reagentes, foi observado que na maior a vazão, obteve-se menor conversão. Quanto ao tipo de reator, se alcançou a maior conversão no reator CSTR, levando em consideração de o seu volume ser maior que o volume do reator PFR, o resultado encontrado também está de acordo com as referências utilizadas. O reator PFR poderia ter apresentado melhores resultados de conversão, mas o reator utilizado continha muitas zonas mortas, resultando em baixa conversão de reagentes em produtos.

Num contexto geral, os valores de conversões encontrados são considerados baixos, sugere-se que sejam repetidos os experimentos deixando a reação se processar até que sejam alcançados valores de conversões próximos das conversões teóricas.

Analisando as condições estudadas, as condições desta reação em que se obteve melhores conversões foram: o reator CSTR, com o controlador de temperatura em 35°C e com uma vazão de alimentação dos reagentes de 7 L/h.

## REFERÊNCIAS

ANVISA. **Acetato de sódio**. Disponível em:

<<http://portal.anvisa.gov.br/documents/10181/2954708/monografias+do+volume+2+-+letra+a.pdf/c341b455-af5e-4ae1-8038-e0d723ab258e>>. Acesso em: 27 abr. 2019.

BETAEQ. **Introdução aos reatores químicos**. Disponível em:

<<https://betaeq.com.br/index.php/2016/08/20/reatores-quimicos/>>. Acesso em: 27 abr. 2019

BLRH. **O acetato de sódio é usado para?**. Disponível em:

<<http://pt.blrhchem.com/news/what-is-sodium-acetate-used-for-blrh-18778786.html>>. Acesso em: 27 abr. 2019.

DANISH M. et al. Efeito das Condições Operacionais no Desempenho do CSTR: um Estudo Experimental. **Revista Internacional de Pesquisa e Aplicações de Engenharia**, v. 5, n. 2, p. 74-78, fev./mar. 2015. Disponível

em:<[https://www.researchgate.net/publication/303686508\\_Effect\\_of\\_Operating\\_Conditions\\_on\\_CSTR\\_performance\\_an\\_Experimental\\_Study](https://www.researchgate.net/publication/303686508_Effect_of_Operating_Conditions_on_CSTR_performance_an_Experimental_Study)>. Acesso em: 05 jun. 2019.

DANISH, M.; AL MESFER, MK. Um Estudo Comparativo da reação de saponificação em um PFR e CSTR. **Revista de Ciências Químicas**, Abha - Arábia Saudita, v. 5, Número, p. 13-17, nov./2015. Disponível em:

<[https://www.researchgate.net/publication/303696490\\_A\\_Comparative\\_Study\\_of\\_Saponification\\_Reaction\\_in\\_a\\_PFR\\_and\\_CSTR](https://www.researchgate.net/publication/303696490_A_Comparative_Study_of_Saponification_Reaction_in_a_PFR_and_CSTR)>. Acesso em: 3 out. 2019.

DIRECTINDUSTRY. **Reator tubular de resfriamento de processo**. Disponível em:

<<http://www.directindustry.com/pt/prod/man-diesel-turbo/product-19648-473080.html>>. Acesso em: 27 abr. 2019.

DISEGNA, T.; JUNQUEIRA, A. M. **Reprodução e análises em formulações de sabão caseiro**. 2013. Artigo. Centro Universitário UNIVATES, Lajeado, 2013. Disponível em:

<[https://www.univates.br/tecnicos/media/artigos/artigo\\_tiago\\_disegna.pdf](https://www.univates.br/tecnicos/media/artigos/artigo_tiago_disegna.pdf)>. Acesso em: 01 mai. 2019.

FABREGA, F. M. **Cálculo de Reatores I**. 1. Ed. Jundiaí: Faculdade Pitágoras, 2012.

FOGAÇA, J. R. V. **Reação de Saponificação**. Manual da Química. Disponível em:

<<https://www.manualdaquimica.com/quimica-organica/reacao-saponificacao.htm>>. Acesso em: 01 mai. 2019.

FOGLER, H. S. **Cálculo de Reatores: O essencial da engenharia das reações químicas**. 1. Ed. Rio de Janeiro: LCT, 2014.

FOGLER, H. S. **Elementos de Engenharia das Reações Químicas**. 4. Ed. Rio de Janeiro: LCT, 2013.

ISHIDA, Sabrina. **Análise da Eficiência de um reator tubular (PFR) submetido a diferentes modos de alimentação**. 2017. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado Engenharia Química) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Ponta Grossa, 2017.

LEVENSPIEL, O. **Engenharia das Reações Químicas**. 3. Ed. Americana. São Paulo: Blucher, 2000.

LOJA QUIMICA. **Acetato de sódio anidro p.a. - 1000g**. Disponível em: <<https://www.lojaquimica.com.br/materia-prima/nacional/acetato-de-sodio-anidro-pa>>. Acesso em: 27 abr. 2019.

MORAIS, G. R. **Estudo teórico sobre o afastamento da idealidade de reatores ideais: reação de saponificação do acetato de etila**. 2015. Trabalho de Conclusão de Curso (Engenharia Química) – Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo, Lorena, 2015.

NOVA CANA. **Anidro ou hidratado: diferenças**. Disponível em: <<https://www.novacana.com/etanol/anidro-hidratado-diferencas>>. Acesso em: 05 jun. 2019.

QUIMIDROL. **Ficha técnica acetato de etila**. Disponível em: <[http://www.quimidrol.com.br/media/blfa\\_files/acetato\\_de\\_etila\\_2.pdf](http://www.quimidrol.com.br/media/blfa_files/acetato_de_etila_2.pdf)>. Acesso em: 05 jun. 2019.

ROBERTS, G. W. **Reações Químicas e Reatores Químicos**. Rio de Janeiro: LTC, 2010.

SOUZA et al. Estudo cinético da hidrólise do acetato de etila em meio alcalino em reator batelada de tanque agitado. Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica, São Paulo, p. 1-6, jul./2017. Disponível em: <<http://pdf.blucher.com.br.s3-sa-east-1.amazonaws.com/chemicalengineeringproceedings/cobeqic2017/492.pdf>>. Acesso em: 15 out. 2019.

UDOP. **Álcool etílico e álcool metílico**. Araçatuba. 2012. Disponível em: <<https://www.udop.com.br/index.php?item=noticias&cod=75845>>. Acesso em: 27 abr. 2019.

VASCONCELOS, S. F. de et al. Obtenção e análise dos dados cinéticos da reação de saponificação do acetato de etila em um reator batelada agitado. **Blucher chemistry proceedings**, Campina Grande, v. 3, n. 1, p. 2-3, nov. 2015. Disponível em: <<http://pdf.blucher.com.br.s3-sa-east-1.amazonaws.com/chemistryproceedings/5erq4enq/eng7.pdf>>. Acesso em: 01 mai. 2019.