

019

CINÉTICA DE REAÇÕES CATALÍTICAS ATRAVÉS DE PLANEJAMENTO SEQUÊNCIAL DE EXPERIMENTOS. *Gustavo S. Laranja, Oscar W. P. Lopez, Nilson R. Marcílio* (Departamento de Engenharia Química, Escola de Engenharia, UFRGS).

O estudo da cinética de reações catalíticas heterogêneas é importante para modelagem e projeto de reatores mais precisos e para a otimização de processos já existentes. Até alguns anos atrás, os métodos empregados no estudo cinético utilizavam-se de procedimentos inadequados como o rearranjo de equações cinéticas para permitir a estimação de parâmetros por regressão linear, violando assim algumas premissas da análise estatística. Além disso, não baseavam-se em qualquer teste estatístico na estimação de parâmetros. Mais recentemente, foram desenvolvidos métodos sequenciais de planejamento que consistem em duas etapas consecutivas: Discriminação de Modelos e Otimização de parâmetros. A primeira resume-se na escolha do modelo cinético mais adequado dentre todos os possíveis, adotando-se um critério de planejamento para determinação do próximo experimento e um teste de adequação dos modelos. A segunda consiste na otimização dos parâmetros do modelo adotado na etapa de discriminação. A metodologia descrita acima será aplicada ao estudo cinético da reação de desidrogenação do 2-butanol sobre catalisador de ZnO para produção de Metil-Etil-Cetona, que é um solvente amplamente utilizado. Os testes de atividade catalítica serão realizados em um microreator tubular de leito fixo operado na forma integral. Na estimação de parâmetros será utilizado o método dos mínimos quadrados não-linear. Na discriminação de modelos será adotado o critério de máxima divergência entre os modelos para o planejamento de experimentos e o teste do qui-quadrado para a adequação de modelos. No momento estão sendo realizadas simulações desta metodologia e os resultados indicam que é possível discriminar os modelos com um número reduzido de experimentos. (FAPERGS)