



APLICAÇÃO DO SOFTWARE DE SIMULAÇÃO COCO PARA AVALIAÇÃO DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DE AMÔNIA ATRAVÉS DO PROCESSO HABER-BOSCH

L. P. ALENCAR¹, M. H. S. C. SILVA¹ e A. C. O. MAFRA¹

¹ Universidade Federal de Mato-Grosso, Faculdade de Engenharia de Várzea Grande
E-mail para contato: liapa10@hotmail.com

RESUMO – Empregado largamente em escala industrial, o processo Haber-Bosch, possui como objetivo a produção de amônia por meio dos reagentes Nitrogênio e Hidrogênio, o qual depende de algumas condições específicas de equilíbrio. A reação entre os gases é feita sob altas pressões e temperaturas, sendo utilizado um catalisador composto geralmente por óxidos de Alumínio e Potássio. Este trabalho, baseia-se na análise do processo de produção da amônia, através do auxílio do software de simulação de processos COCO, possuindo como objetivo a análise da rentabilidade de amônia quando os parâmetros de pressão são alterados, analisando, portanto, a teoria de equilíbrio químico. Como resultado, nota-se que quanto maior a pressão aplicada maior o rendimento e consequentemente maior rentabilidade.

1. INTRODUÇÃO

Em 1909, de acordo com Oliveira (2012), acontecia no mundo da catálise uma das maiores descobertas: o alemão Fritz Haber sintetizava um processo eficiente para a produção da amônia. Entretanto, a prática deste insigne acontecimento só viria anos depois por intermédio de Carl Bosch, um engenheiro metalúrgico da empresa que patenteou a ideia de Haber e a colocou em prática, rendendo-lhe o prêmio Nobel em 1931.

Inicialmente o uso principal para a amônia, seria para fins agrícolas, haja vista que a escassez de adubos naturais demandava a importação. Mas, como mostrado nos estudos de Ribeiro (2013), a amônia também podia ser convertida em compostos úteis para a fabricação de TNT que com a ajuda da primeira guerra em andamento, fez com que a amônia e o processo descoberto tivessem ainda mais atenção. A síntese do processo é resumida pela equação 1.



Esta reação entre gases é um processo exotérmico feito sob altas pressões e temperaturas com o auxílio de um catalisador, geralmente a magnetita (Fe_3O_4), enriquecida com óxidos, em sua grande maioria. A remoção do amoníaco ocorre, segundo Ribeiro (2013), devido a diferença nos pontos de ebulição, ou seja, o amoníaco tem ponto de ebulição maior que o dióxido de nitrogênio e o di-hidrogênio.

Além disso, esse processo, possui especificidades importantes na área de equilíbrio químico, isto é, a escolha da temperatura, da pressão e do catalisador torna-se de suma

importância para a produção em grande escala. Sendo compreendido, então, o porquê das escolhas de altas temperaturas e pressões.

Este trabalho, portanto, consiste em uma simulação computacional do processo de síntese da amônia tendo em vista que a utilização de softwares de simulação permite que se obtenha uma ideia prévia do processo químico a ser projetado fisicamente, verificando sua viabilidade econômica, assim como a escolha dos parâmetros de sintetização. Dessa forma, através do processo Haber-Bosch, analisa-se a influência da pressão na produção de amônia e espera-se que este trabalho auxilie e estimule futuras simulações de processos químicos por parte de estudantes da área.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

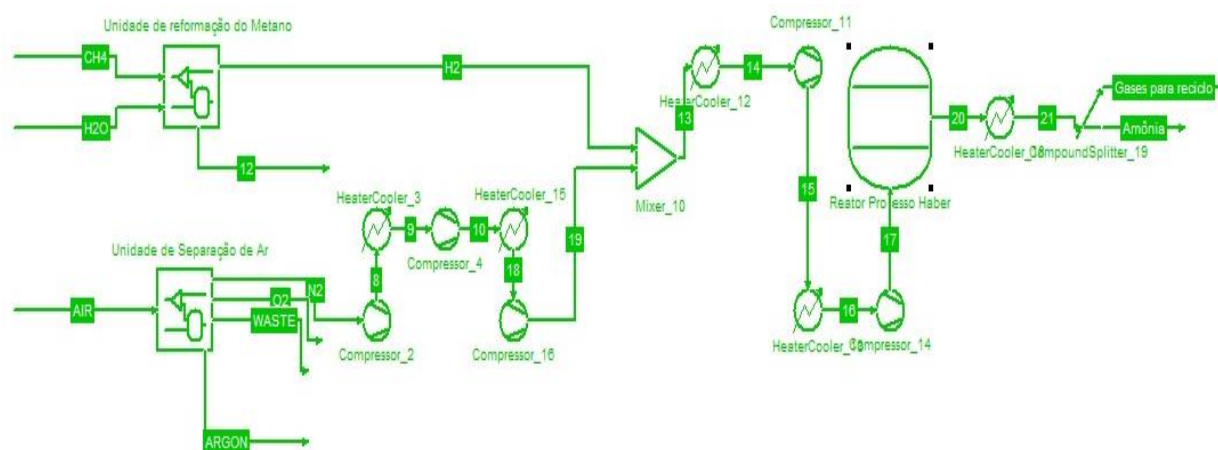
O COCO simulator é um ambiente de simulação de modelagem, o qual oferece gratuitamente suas ferramentas com foco no seu público alvo principal, os estudantes, sendo seu enfoque a simulação de processos químicos. De acordo com Smith *et al.* (1993), entre as suas várias ferramentas, destacam-se os pacotes termodinâmicos, análise de correntes, componentes e otimização de processos químicos.

Segundo Perry e Green (1997), seu desempenho é baseado em representação gráfica, onde é possível que o usuário edite os parâmetros de operação ou que abra a própria interface, quando disponível. O simulador possui operações unitárias variadas, separadores, bombas, reatores, trocadores de calor, entre outros.

Com plataformas como essa, a possibilidade de melhor entendimento por parte do aluno, além de auxílio para visualizações de processos de forma eficaz, agrega na formação, principalmente na área de engenharia, permitindo o aprofundamento do aluno com a matéria, ficando, portanto, mais propenso a assimilação dela.

O programa utilizado na simulação do processo de produção de amônia, que pode ser observado na figura 1, foi o CAPE-OPEN Flowsheet Environment (COFE), presente no software gratuito Coco Simulator® v.3.3.

FIGURA 1 – Fluxograma do processo de síntese de amônia utilizando o simulador COCO



A simulação foi realizada de maneira simplificada, baseada nos trabalhos de Amin *et al.* (2013) de modo que fosse projetado o necessário para que a análise na alteração da pressão fosse observada com sucesso. Portanto, a fim de obter o hidrogênio necessário para o processo haber, realizou-se a reforma a vapor do metano, de acordo com o estudos de Ramos (2015).

Além disso, foi introduzida uma unidade de separação de ar, fornecida pelo próprio software, com o objetivo de se conseguir o nitrogênio. Os parâmetros principais utilizados na simulação estão representados na tabela 1.

TABELA 1 – Principais parâmetros utilizados na simulação do processo de síntese de amônia

Componente/Corrente	Alimentação (kmol/h)	Parâmetro	Valor/Unidade
CH ₄	1472,5	Temperatura no reator	440 C°
H ₂ O	4417,5	Fase do reator	Vapor
AR	12431,2	Eficiência dos compressores	75%
H ₂	5703,29		
N ₂	1770,48		
NH ₃	0		

O Pacote termodinâmico escolhido foi o Peng-Robinson, por ser o que melhor se adequa as reações de equilíbrio. A descrição detalhada do processo Haber-Bosch pode ser observada nos trabalhos de Amin *et al.* (2013).

Para se analisar os efeitos da pressão na produção final de amônia efetuou-se a simulação do processo nas pressões 10, 25, 50, 100 e 150 atm.

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A tabela 2 demonstra o efeito da pressão em relação a produção de amônia. É possível notar que ao aumentar a pressão para 50 atm, a concentração de amônia é 398,3% maior que o primeiro parâmetro de 10 atm.

TABELA 2 – Influência da pressão no processo de síntese de amônia

Pressão (atm)	Amônia (kmol/h)
10	180
25	410
50	717
100	1157
150	1466

Na tabela 3 pode-se observar a vazão mássica dos produtos obtidos para uma alimentação de 5703,29 kmol/h de hidrogênio e 1770,48 kmol/h de nitrogênio.



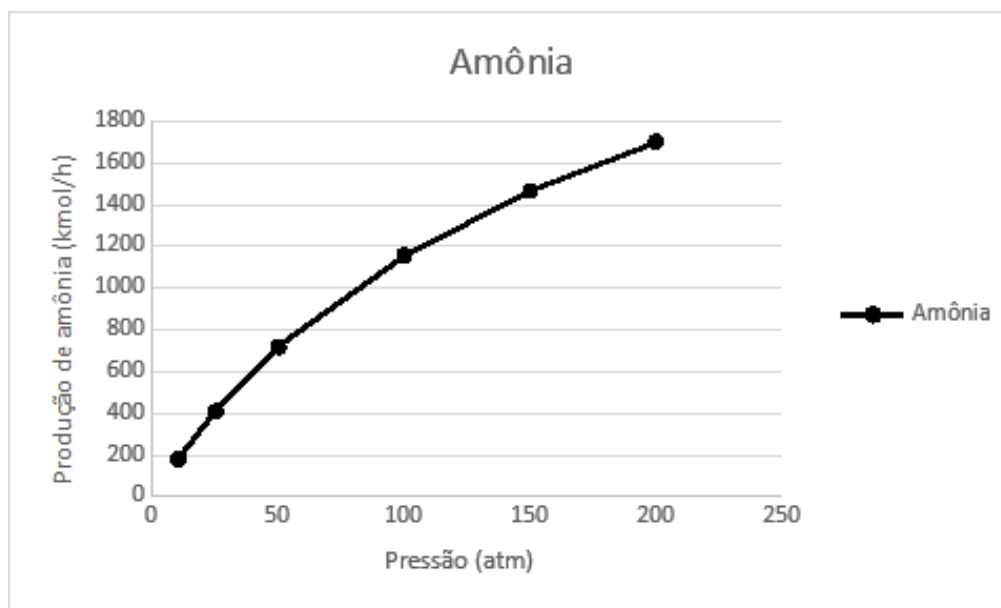
TABELA 3 – Vazão mássica dos produtos obtidos na simulação de síntese de amônia

Componente/ Corrente	Vazão mássica (kmol/h)
H ₂	3151,39
N ₂	919,85
NH ₃	1701,27

Ignorando os custos operacionais, é possível obter cada vez mais amônia alterando a pressão, entretanto, é necessário cuidado acentuado, haja visto que o aumento da pressão propicia automaticamente mudanças em outras variáveis da reação. Desta maneira, é necessário manter-se dentro dos padrões específicos e aconselháveis, de modo a não propiciar a operação do conversor instável.

A escolha do pacote termodinâmico foi essencial para a eficácia dos resultados, considerando que a reação de produção de amônia é intensificada devido ao equilíbrio químico proporcionado pelos parâmetros, como pressão, que favorece a reação para o lado dos produtos, onde há diminuição do número de moléculas. Como pode-se observar na figura 2.

FIGURA 2 – análise da dependência da produção de amônia pela alteração da pressão



4. CONCLUSÃO

Conclui-se, pelo trabalho apresentado, que a síntese de amônia através do processo Haber é beneficiada pela utilização de pressões mais elevadas, tendo em vista o equilíbrio químico da reação. Com relação a simulação utilizando o software COCO, obteve-se resultados satisfatórios, que atingiram as expectativas e os resultados esperados. Além disso,



deve-se levar em consideração o favorável manuseio do programa, sua acessibilidade gratuita e um grande acervo sobre o software, disponível na rede, que facilitou e auxiliou no artigo.

5. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a Faculdade de Engenharia de Várzea Grande – UFMT e ao Professor Doutor Adilson José de Assis da Universidade Federal de Uberlândia pelos vídeos e materiais disponíveis em seu nome quanto a simulação de processos no coco.

6. REFERÊNCIAS

- AMIN, M. R.; SHAREAR, S.; SIDDIQUE, N.; ISLAM, S. *Simulation of Ammonia Synthesis*. American Journal of Chemical Engineering. Vol. 1, No. 3, 2013, pp. 59-64.
- MCCABE, W.L.; SMITH, J.C.; HARRIOT, P.; *Unit Operations of Chemical Engineering*, 5th ed.
- OLIVEIRA, A. C. L; FABRIS, D. J; PEREIRA, C. M; *Óxidos de ferro e suas aplicações em processos catalíticos : uma revisão*, v.36, p. 123-124, 2013.
- PERRY, R. H.; GREEN, D.W.; *Perry's Chemical Engineers'*, 7th ed, p. 13-53.
- RAMOS, E. *Simulação e análise da influência dos parâmetros do processo de obtenção do gás de síntese para a produção de olefinas a partir do gás natural*. USP, 2015.
- RIBEIRO D. *Revista de ciência elementar. Processo de haber bosch*, v.3 , p.1-2, 2013.