

171ª DEFESA DE DISSERTAÇÃO EM ENGENHARIA INDUSTRIAL - MAEI


PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA INDUSTRIAL - PEI




ANDERSON NASCIMENTO PRUDENTE

 pei@ufba.br

 www.pei.ufba.br

 @peiufba

 @peiufba

 PEI TV

Orientadora:

- Profª Drª Karen Valverde Pontes Vater (PEI-UFBA);
- Prof. Dr. Idelfonso Bessa dos Reis Nogueira (NTNU-Noruega)

Banca Examinadora:

- Profª Drª Karen Valverde Pontes Vater (PEI-UFBA);
- Prof. Dr. Idelfonso Bessa dos Reis Nogueira (NTNU-Noruega)
- Prof. Dr. Mauricio Bezerra de Souza Junior (UFRJ);
- Prof. Dr. Marco Paulo Seabra dos Reis (Universidade de Coimbra – Portugal).

Suplente:

- Prof. Dr. Márcio André Fernandes Martins (PEI-UFBA).

Título: "MODELAGEM, ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS E INCERTEZAS NA SÍNTESE DE PROPIL PROPIONATO EM UM REATORCROMATOGRÁFICO DE LEITO FIXO".

Data: 01 de setembro de 2023 **Horário:** 11h00min.

Local: Sala da Congregação da Escola Politécnica e https://conferenciaweb.rnp.br/webconf/pei_epufba.

Resumo:

Esta dissertação aborda a modelagem e estimação de parâmetros, incluindo incertezas e regiões de confiança, para o processo de síntese do Propil Propionato (Pro-Pro). O estudo emprega um modelo rigoroso que considera a natureza heterogênea do sistema investigado, envolvendo um reator cromatográfico de leito fixo com o catalisador sólido Amberlyst™ 46. A abordagem de estimação de parâmetros combina a Otimização por Enxame de Partículas (PSO) e o Método Gradiente (MG) de ponto interior para estimar tanto os parâmetros termodinâmicos quanto cinéticos em duas etapas distintas. Inicialmente, a estimação dos parâmetros termodinâmicos ocorreu utilizando dados de equilíbrio da literatura. Na segunda etapa, para a estimação dos parâmetros cinéticos com o modelo heterogêneo, foram empregados dados experimentais do autor. As incertezas dos dados experimentais foram avaliadas e calculadas para uso na estimação dos parâmetros cinéticos. Através do PSO, os parâmetros foram estimados e suas regiões de confiança determinadas, proporcionando uma compreensão abrangente de suas incertezas. As incertezas dos parâmetros termodinâmicos e cinéticos são avaliadas e propagadas até as atividades do modelo termodinâmico e nas constantes de Arrhenius e taxa reacional do modelo cinético heterogêneo. Os resultados demonstram uma boa concordância entre as previsões do modelo com os parâmetros estimados neste trabalho e os dados experimentais, refletindo adequadamente a variabilidade estatística das observações experimentais com uma incerteza expandida de 95%. Além disso, o modelo heterogêneo de Langmuir-Hinshelwood apresenta uma representação aprimorada dos dados experimentais, tanto no estado transiente quanto no estado estacionário, em comparação com o modelo Pseudo-Homogêneo utilizado na literatura. O Desvio Médio Quadrático (RMSD) para a estimação de parâmetros mostra uma melhora significativa em relação aos valores encontrados usando os parâmetros disponíveis na literatura.

Palavras-chave: Estimação de Parâmetros, Modelagem de um reator cromatográfico de leito fixo, Incerteza, Propil Propionato, NRTL, PSO.