



# Impactos das Tecnologias na Engenharia Química 3

---

Carmen Lúcia Voigt  
(Organizadora)

 **Atena**  
Editora

Ano 2019

Carmen Lúcia Voigt  
(Organizadora)

# Impactos das Tecnologias na Engenharia Química 3

Atena Editora  
2019

2019 by Atena Editora

Copyright © da Atena Editora

**Editora Chefe:** Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

**Diagramação e Edição de Arte:** Natália Sandrini e Lorena Prestes

**Revisão:** Os autores

#### **Conselho Editorial**

- Prof. Dr. Alan Mario Zuffo – Universidade Federal de Mato Grosso do Sul  
Prof. Dr. Álvaro Augusto de Borba Barreto – Universidade Federal de Pelotas  
Prof. Dr. Antonio Carlos Frasson – Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Prof. Dr. Antonio Isidro-Filho – Universidade de Brasília  
Profª Drª Cristina Gaio – Universidade de Lisboa  
Prof. Dr. Constantino Ribeiro de Oliveira Junior – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Profª Drª Daiane Garabeli Trojan – Universidade Norte do Paraná  
Prof. Dr. Darllan Collins da Cunha e Silva – Universidade Estadual Paulista  
Profª Drª Deusilene Souza Vieira Dall’Acqua – Universidade Federal de Rondônia  
Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Prof. Dr. Fábio Steiner – Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul  
Prof. Dr. Gianfábio Pimentel Franco – Universidade Federal de Santa Maria  
Prof. Dr. Gilmei Fleck – Universidade Estadual do Oeste do Paraná  
Profª Drª Girlene Santos de Souza – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia  
Profª Drª Ivone Goulart Lopes – Istituto Internazionele delle Figlie de Maria Ausiliatrice  
Profª Drª Juliane Sant’Ana Bento – Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
Prof. Dr. Julio Candido de Meirelles Junior – Universidade Federal Fluminense  
Prof. Dr. Jorge González Aguilera – Universidade Federal de Mato Grosso do Sul  
Profª Drª Lina Maria Gonçalves – Universidade Federal do Tocantins  
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte  
Profª Drª Paola Andressa Scortegagna – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Profª Drª Raissa Rachel Salustriano da Silva Matos – Universidade Federal do Maranhão  
Prof. Dr. Ronilson Freitas de Souza – Universidade do Estado do Pará  
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista  
Prof. Dr. Urandi João Rodrigues Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará  
Prof. Dr. Valdemar Antonio Paffaro Junior – Universidade Federal de Alfenas  
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande  
Profª Drª Vanessa Lima Gonçalves – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Prof. Dr. Willian Douglas Guilherme – Universidade Federal do Tocantins

<b>Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) (eDOC BRASIL, Belo Horizonte/MG)</b>	
134	Impactos das tecnologias na engenharia química 3 [recurso eletrônico] / Organizadora Carmen Lúcia Voigt. – Ponta Grossa (PR): Atena Editora, 2019. – (Impactos das Tecnologias na Engenharia Química; v. 3)  Formato: PDF Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader. Modo de acesso: World Wide Web. Inclui bibliografia ISBN 978-85-7247-231-9 DOI 10.22533/at.ed.319190104  1. Engenharia química – Pesquisa – Brasil. I. Voigt, Carmen Lúcia. II. Série.  CDD 660.76
<b>Elaborado por Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422</b>	

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores.

2019

Permitido o download da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

[www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)

## APRESENTAÇÃO

O acentuado crescimento da população mundial, bem como a ânsia de melhor nível de vida, têm criado elevadas pressões sobre os recursos naturais, matérias-primas, o solo, a água, o ar e os ecossistemas em geral. A intensificação das atividades humanas nas últimas décadas tem gerado um acelerado aumento na produção de resíduos sólidos urbanos, tornando-se um grave problema para as administrações públicas.

A indústria química tem contribuído para a geração de efluentes líquidos e gasosos contendo substâncias tóxicas, bem como de resíduos sólidos perigosos que, lançados diretamente ou indiretamente sem qualquer tratamento no meio ambiente, podem provocar grandes desequilíbrios ecológicos. O uso intensivo de produtos químicos, se por um lado trouxe elevados benefícios aos padrões de vida, por outro lado, os níveis de poluição que estão associados à sua produção são por vezes muito elevados.

As novas tecnologias na Engenharia Química auxiliam nos processos de recuperação e reutilização de resíduos, assim como conversão em novas fontes de energia. Além das diversas formas de obtenção de energia renovável já existente, cada vez mais vem surgindo uma maior procura por outras formas de energia não poluentes. Essas razões são as mais motivacionais: a ideia de uma possível escassez de recursos fósseis, a tentativa de reduzir as emissões de gases nocivos para a atmosfera e que causam o efeito estufa, e, além disso, almeja se alcançar certa independência em relação petróleo.

As questões energéticas são extremamente importantes para a sustentabilidade das sociedades modernas, uma vez que a sobrevivência humana depende do fornecimento contínuo de energia. Esse cenário faz com que seja preciso realizar buscas por alternativas energéticas que sustentem a necessidade humana e que não prejudiquem o ambiente.

Para empresas, além da questão ambiental, um excessivo gasto de energia (advinda de recursos não renováveis) é sinônimo de prejuízo. Eis então uma grande oportunidade para engenheiros químicos intervirem na melhoria da eficiência energética dos processos, ajudar a desenvolver tecnologias limpas e promover a utilização de energias alternativas nas indústrias. Com isso, ocorrerá uma redução de custos e será uma contribuição válida ao meio ambiente o que hoje em dia vem gerando maior competitividade para as empresas. O uso de resíduos agrícolas como fonte de bioenergia tem despertado crescente interesse no setor de agroenergia.

Neste terceiro volume, apresentamos trabalhos com impactos tecnológicos relacionados à indústria, focando na reutilização de produtos e conversão em energia renovável, bem como avanço nos processos para redução da poluição atmosférica e em efluentes. Com isso, convidamos você a aperfeiçoar seus conhecimentos da Engenharia Química voltada para a área ambiental trazendo benefícios para toda a sociedade.

Boa leitura.

Carmen Lúcia Voigt

## SUMÁRIO

<b>CAPÍTULO 1</b> .....	<b>1</b>
UTILIZAÇÃO DE RESÍDUOS PARA O TRATAMENTO DE EFLUENTES CONTENDO METAIS PESADOS	
Kaíque Souza Gonçalves Cordeiro Oliveira	
Pedro Henrique Trindade Dias Cabral	
Roberta Resende Maciel da Silva	
Carla Torres Dias	
José Renato Guimarães	
Ana Paula Fonseca Maia de Urzedo	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3191901041</b>	
<b>CAPÍTULO 2</b> .....	<b>8</b>
RESÍDUOS DE CANA-DE-AÇÚCAR E MILHO COMO MATÉRIA PRIMA DO ETANOL 2G: ATUALIDADES E PERSPECTIVAS	
Caroline Müller	
Letícia Mara Milani	
Anderson Giehl	
Évelyn Taize Barrilli	
Letícia Deoti	
Ana Carolina Lucaroni	
Viviani Tadioto	
Helen Treichel	
Sérgio Luiz Alves Júnior	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3191901042</b>	
<b>CAPÍTULO 3</b> .....	<b>23</b>
MODELAGEM DA PRODUÇÃO DE BIOSURFACTANTE A PARTIR DE RESÍDUOS AGROINDUSTRIAIS EM BIORREATOR EM BATELADA ATRAVÉS DA OTIMIZAÇÃO DE PARÂMETROS CINÉTICOS POR ALGORITMO GENÉTICO	
Júlia do Nascimento Pereira Nogueira	
Ana Luiza Bandeira de Mello de Albuquerque Campos	
Brunno Ferreira dos Santos	
Filipe Alves Coelho	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3191901043</b>	
<b>CAPÍTULO 4</b> .....	<b>29</b>
VALORIZAÇÃO DE RESÍDUOS AGROINDUSTRIAIS PARA A PRODUÇÃO DO FUNGO ENTOMOPATOGÊNICO <i>METARHIZIUM ANISOPLIAE</i> POR PROCESSOS DE FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO	
Eloane Daize Gomes Dallastra	
Enylson Xavier Ramalho	
Lina María Grajales Agudelo	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3191901044</b>	
<b>CAPÍTULO 5</b> .....	<b>40</b>
DESENVOLVIMENTO DE UM COSMÉTICO A PARTIR DE RESÍDUO AGROINDUSTRIAL	
Ana Paula Olivo	
Kátya Regina de Freitas Zara	
Leonardo da Silva Arrieche	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3191901045</b>	

<b>CAPÍTULO 6</b> .....	<b>51</b>
INFLUÊNCIA DA GORDURA RESIDUAL DE UNIDADES INDUSTRIAIS DE AVES NA FABRICAÇÃO DE BASE PARA CREME HIDRATANTE	
Jacqueline Hahn Bernardi Cristina Helena Bruno Andreia Cristina Furtado Leonardo da Silva Arrieche	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3191901046</b>	
<b>CAPÍTULO 7</b> .....	<b>58</b>
ANÁLISE DA COMPRESSÃO AXIAL E ABSORÇÃO DE ÁGUA EM CONCRETO PRODUZIDO COM CAROÇO RESIDUAL DE AZEITONA	
Manoela Silva Lima Mariotini Carotta Alan Carlos de Almeida Ana Paula de Carvalho Faria Luiz Felipe Lima Panizzi Jonas dos Santos Pacheco Cristiane de Souza Siqueira Pereira	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3191901047</b>	
<b>CAPÍTULO 8</b> .....	<b>63</b>
INFLUÊNCIA DO TRATAMENTO QUÍMICO NA FIBRA DE COCO PARA UTILIZAÇÃO EM COMPÓSITO POLIMÉRICO	
Wenderson Gomes dos Santos Gilmar Alves Borges Lauro Henrique Hamoy Guerreiro Dilson Nazareno Pereira Cardoso Douglas Alberto Rocha de Castro Emerson Cardoso Rodrigues	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3191901048</b>	
<b>CAPÍTULO 9</b> .....	<b>68</b>
INFLUÊNCIA DOS TRATAMENTOS ORGANOSOLV E HIDROTÉRMICO APLICADOS AO BAGAÇO DE CANA NAS PROPRIEDADES MECÂNICAS DE COMPÓSITOS COM PEAD	
Bruno Chaboli Gambarato Tatiana Raposo de Paiva Cury Sérgio Teodoro de Oliveira	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3191901049</b>	
<b>CAPÍTULO 10</b> .....	<b>74</b>
PROPRIEDADES MECÂNICAS E TÉRMICAS DE COMPÓSITOS DE POLIPROPILENO RECICLADO REFORÇADOS COM BAGAÇO DE CANA	
Bruno Chaboli Gambarato Gilson Carlos Rodrigues Paulino Amanda Santos Leopoldino Lucas Bruno de Paiva	
<b>DOI 10.22533/at.ed.31919010410</b>	

**CAPÍTULO 11 ..... 79**

**BALANÇO ENERGÉTICO DO SISTEMA INTEGRADO DE BIO-COMBUSTÃO**

Ihana Aguiar Severo  
Yuri Naidon Favero  
Mariany Costa Deprá  
Rodrigo Stefanello Bizello Barrios  
Rosangela Rodrigues Dias  
Mariane Bittencourt Fagundes  
Roger Wager  
Leila Queiroz Zepka  
Eduardo Jacob-Lopes

**DOI 10.22533/at.ed.31919010411**

**CAPÍTULO 12 ..... 85**

**CARACTERIZAÇÃO DE GENÓTIPOS DE SORGO BIOMASSA PARA BIOENERGIA**

Maria Lúcia Ferreira Simeone  
Patrícia Abraão de Oliveira  
Kirley Marques Canuto  
Rafael Augusto da Costa Parrella  
Cynthia Maria Borges Damasceno  
Robert Eugene Schaffert

**DOI 10.22533/at.ed.31919010412**

**CAPÍTULO 13 ..... 90**

**DESENVOLVIMENTO DE BIODIGESTOR E AVALIAÇÃO DO DESEMPENHO PARA TRATAMENTO DE RESÍDUO SÓLIDO ORGÂNICO**

Flávia Souza Pio  
Letícia Tamara Santana  
Lorena Kelly Corrêia  
Francine Duarte Castro

**DOI 10.22533/at.ed.31919010413**

**CAPÍTULO 14 ..... 97**

**RESOLUÇÃO DE PROBLEMA DE VALOR NO CONTORNO ASSOCIADO À MODELAGEM DE BIORREATORES TUBULARES DE FLUXO DISPERSO E CINÉTICA DE MICHAELIS-MENTEN LINEARIZADA**

Samuel Conceição Oliveira  
Felipe Coelho Morilla

**DOI 10.22533/at.ed.31919010414**

**CAPÍTULO 15 ..... 104**

**SIMULAÇÃO E AVALIAÇÃO DE CICLOS A VAPOR PARA COGERAÇÃO DE BIOENERGIA NO SETOR SUCROENERGÉTICO**

Welban Ricardo Ursino  
Samuel Conceição Oliveira

**DOI 10.22533/at.ed.31919010415**

**CAPÍTULO 16 ..... 114**

AVALIAÇÃO DE ÓLEOS DE SOJA COM DIFERENTES ORIGENS NA PRODUÇÃO DO BIODIESEL VIA ROTA METÁLICA

Melissa Rafaela Wolf  
Isabela Silveira Tobias Perassi  
Nadine de Assis  
Fulvy Antonella Venturi Pereira

**DOI 10.22533/at.ed.31919010416**

**CAPÍTULO 17 ..... 123**

PRODUÇÃO DE BIODIESEL PELA TRANSESTERIFICAÇÃO SUPERCRÍTICA ETANÓLICA: MODELAGEM E SIMULAÇÃO

Erich Potrich  
Bruno Elias Suzart Chamas  
Antonio José Gonçalves da Cruz  
Roberto de Campos Giordano

**DOI 10.22533/at.ed.31919010417**

**CAPÍTULO 18 ..... 129**

PRODUÇÃO DE BIOETANOL UTILIZANDO CÉLULAS DE SACCHAROMYCES CEREVISIAE IMOBILIZADAS EM ESFERAS DE ALGINATO DE CÁLCIO REVESTIDAS COM QUITOSANA

Lucidio Cristovão Fardelone  
Taciani do Santos Bella de Jesus  
Leonardo Akira Kamimura Oura  
Gustavo Paim Valença  
José Roberto Nunhez  
José Augusto Rosário Rodrigues  
Paulo José Samenho Moran

**DOI 10.22533/at.ed.31919010418**

**CAPÍTULO 19 ..... 137**

AUTOMAÇÃO E DIAGNÓSTICO DE FALHAS EM SENSORES E ATUADORES APLICADOS NA PLANTA DE TRATAMENTO DA PRODUÇÃO DO BIODIESEL

Thalys de Freitas Fernandes  
Dinilton Pessoa de Albuquerque Neto  
Gerônimo Barbosa Alexandre  
José Nilton Silva

**DOI 10.22533/at.ed.31919010419**

**CAPÍTULO 20 ..... 157**

ESTUDO CINÉTICO DA REAÇÃO DE FENTON COM PÓ DE MINÉRIO NO TRATAMENTO DE ÁGUAS DE LAVAGEM DE BIODIESEL E AVALIAÇÃO DA LIXIVIABILIDADE DO RESÍDUO

Jamyla Soares Anício Oliveira Félix  
Aline Givisiez de Souza  
Francine Duarte Castro

**DOI 10.22533/at.ed.31919010420**

**CAPÍTULO 21 ..... 173**

APLICAÇÃO DE CARVÃO ATIVADO CALCINADO NA REMOÇÃO DE ÓLEO DIESEL

Leonardo Henrique de Oliveira  
Selene Maria Arruda Guelli Ulson de Souza  
Antônio Augusto Ulson de Souza

**DOI 10.22533/at.ed.31919010421**

<b>CAPÍTULO 22</b> .....	<b>178</b>
DETERMINAÇÃO EXPERIMENTAL DA CURVA DE POLARIZAÇÃO DE UMA CÉLULA A COMBUSTÍVEL TIPO PEM	
Roque Machado de Senna Thais Santos Henrique Senna Marcelo Linardi	
<b>DOI 10.22533/at.ed.31919010422</b>	
<b>CAPÍTULO 23</b> .....	<b>187</b>
ANÁLISE DA EFICIÊNCIA INDIVIDUAL DE COLETA E GLOBAL NA SEPARAÇÃO DE PARTICULADOS DE MAGNESITA EM CICLONE LAPPLE	
Polyana Gomes de Aguiar Daiane Ribeiro Dias Annanda Alkmim Alves Mariana Oliveira Marques João Carlos Gonçalves	
<b>DOI 10.22533/at.ed.31919010423</b>	
<b>CAPÍTULO 24</b> .....	<b>194</b>
ANÁLISE DE HIDROCARBONETOS AROMÁTICOS POLICÍCLICOS (PAH) NO AR ATMOSFÉRICO USANDO SISTEMA PASSIVO DE AMOSTRAGEM PARA MONITORAMENTO AMBIENTAL	
Aldo Muro Júnior Nicola Pittet Muro Nelson Roberto Antoniosi Filho Maria Isabel Ribeiro Alves	
<b>DOI 10.22533/at.ed.31919010424</b>	
<b>CAPÍTULO 25</b> .....	<b>213</b>
CAPTURA DE CO <sub>2</sub> UTILIZANDO O PROCESSO CALCIUM-LOOPING	
Juliana Alves da Silva Ricardo José Chimentão João Batista Oliveira dos Santos	
<b>DOI 10.22533/at.ed.31919010425</b>	
<b>CAPÍTULO 26</b> .....	<b>224</b>
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSO QUÍMICO DE CAPTURA DE CO <sub>2</sub> UTILIZANDO A TECNOLOGIA HIGEE NA INTENSIFICAÇÃO DE PROCESSOS PRODUTIVOS	
Kaíque Souza Gonçalves Cordeiro Oliveira José Renato Guimarães Brenda Sedlmaier Costa Coelho Camila Ceravolo de Carvalho Francine Silveira Vieira Luiza Moreira Santos Jorge David Alguiar Bellido	
<b>DOI 10.22533/at.ed.31919010426</b>	

**CAPÍTULO 27 ..... 232**

Zn-ZIF EM TECIDO APLICADO NO PROCESSO DE CAPTURA DE CH<sub>4</sub>

Guilherme Andreoli Gil  
Guilherme Otávio Lima  
Lucas Mendes Pedro  
Bianca Bastos Caruzi  
Fabrício Maestá Bezerra  
Murilo Pereira Moisés

**DOI 10.22533/at.ed.31919010427**

**CAPÍTULO 28 ..... 239**

INIBIDOR DE CORROÇÃO OBTIDO POR LIXIVIAÇÃO DE CIGARRO APÓS SEU CONSUMO

Lauren Marcilene Maciel Machado  
Luciana Rodrigues Machado

**DOI 10.22533/at.ed.31919010428**

**CAPÍTULO 29 ..... 249**

ENRIQUECIMENTO DE BACTÉRIAS REDUTORAS DE SULFATO AUTÓCTONES E SUA ADESÃO EM ESPUMA DE POLIURETANO EM REATOR ANAERÓBIO NO TRATAMENTO DE DRENAGEM ÁCIDA DE MINA

Alessandra Giordani  
Renata Piacentini Rodriguez  
Leonardo Henrique Soares Damasceno  
Gunther Brucha

**DOI 10.22533/at.ed.31919010429**

**CAPÍTULO 30 ..... 255**

BIODEGRADAÇÃO DO SURFACTANTE LINEAR ALQUILBENZENO SULFONATO DE SÓDIO EM DOIS DETERGENTES LIQUIDOS COMERCIAIS UTILIZANDO FUNGO FILAMENTOSO *Penicillium crustosum*

Sulamita Aparecida Ambrosia dos santos  
Luiza Maria Amaral Frossard de Paula  
Mayara Costa Franco  
Karen Sartori Jeunon Gontijo  
Ana Maria de Oliveira  
Enio Nazaré de Oliveira Junior

**DOI 10.22533/at.ed.31919010430**

**CAPÍTULO 31 ..... 272**

DEGRADAÇÃO DE CORANTES ALIMENTÍCIOS UTILIZANDO LAFeO<sub>3</sub> COMO CATALISADOR EM REAÇÃO FOTO-FENTON SOLAR

Patrícia Grassi  
Fernanda Caroline Drumm  
Siara Silvestri  
Sérgio Luiz Jahn  
Edson Luiz Foletto

**DOI 10.22533/at.ed.31919010431**

<b>CAPÍTULO 32</b> .....	<b>281</b>
DEGRADAÇÃO FOTOCATALÍTICA DE RODAMINA B COM UM CATALISADOR À BASE DA BIOMASSA PORONGO: EFEITO DA DOPAGEM COM FERRO	
William Leonardo da Silva	
Mariéle Schaedler Nascimento	
Matheus Severo Schalenberger	
Joana Bratz Lourenço	
<b>DOI 10.22533/at.ed.31919010432</b>	
<b>CAPÍTULO 33</b> .....	<b>287</b>
AVALIAÇÃO DA DEGRADAÇÃO FOTOCATALÍTICA, UTILIZANDO $\text{TiO}_2$ E ZNO, DO ANTIBIÓTICO METRONIDAZOL (MTZ) A PARTIR DA ESPECTROFOTOMETRIA	
Luiza Barbosa Petersen Mendes	
Luciane Pimentel Costa Monteiro	
Leandro Vahia Pontual	
<b>DOI 10.22533/at.ed.31919010433</b>	
<b>CAPÍTULO 34</b> .....	<b>303</b>
CARACTERIZAÇÃO DE CÁPSULAS DE CAFÉ PÓS CONSUMO VISANDO A RECICLAGEM NA INDÚSTRIA TÊXTIL	
Valquíria Aparecida dos Santos Ribeiro	
Priscilla Sayuri Nakazawa	
Ana Maria Ferrari	
Ana Claudia Ueda	
<b>DOI 10.22533/at.ed.31919010434</b>	
<b>CAPÍTULO 35</b> .....	<b>315</b>
APPLICATION OF THE MARKOV CHAIN MONTE CARLO METHOD TO ESTIMATION OF PARAMETERS IN A MODEL OF ADSORPTION-ENHANCED REACTION PROCESS FOR MERCURY REMOVAL FROM NATURAL GAS	
Josiel Lobato Ferreira	
Diego Cardoso Estumano	
Mariana de Mattos Vieira Mello Souza	
Emanuel Negrão Macêdo	
<b>DOI 10.22533/at.ed.31919010435</b>	
<b>CAPÍTULO 36</b> .....	<b>322</b>
SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE CATALISADORES BASEADOS EM ÓXIDO DE FERRO SUPOSTADOS EM CARVÃO ATIVADO DERIVADO DA CASCA DO COCO VERDE	
Natália Matos Silva Pereira	
Marta Cecilia da Esperança Santos	
Sirlene Barbosa Lima	
Maria Luiza Andrade da Silva	
<b>DOI 10.22533/at.ed.31919010436</b>	
<b>SOBRE A ORGANIZADORA</b> .....	<b>334</b>

## APPLICATION OF THE MARKOV CHAIN MONTE CARLO METHOD TO ESTIMATION OF PARAMETERS IN A MODEL OF ADSORPTION-ENHANCED REACTION PROCESS FOR MERCURY REMOVAL FROM NATURAL GAS

### Josiel Lobato Ferreira

Universidade Federal do Pará - UFPA, Faculdade  
de Engenharia Química  
Belém - PA

### Diego Cardoso Estumano

Universidade Federal do Pará - UFPA, Faculdade  
de Engenharia de Bioprocessos  
Belém - PA

### Mariana de Mattos Vieira Mello Souza

Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ,  
Escola de Química  
Rio de Janeiro - RJ

### Emanuel Negrão Macêdo

Universidade Federal do Pará - UFPA, Faculdade  
de Engenharia Química  
Belém - PA

**ABSTRACT:** A mathematical model proposed in the literature for the adsorption of mercury was solved numerically. This model involved the diffusion in the adsorbent particle, followed by a chemical reaction inside the solid matrix. The model was obtained based on the differential mass balance for the solute in a volume element bed with an equation involving diffusion and a first-order chemical reaction. For the direct solution of the problem, the Method of Lines (MOL) was applied to simplify the system of Partial Differential Equations (PDEs) into a system of time dependent Ordinary Differential

Equations (ODEs). For the estimation of parameters, simulated measurements were generated with a normal distribution, with the direct solution as the mean and deviations of 10% regarding the maximum value of the exact solution. The sensor is located at the exit of the bed. Lastly, based on the sensitivity analysis, two parameters were chosen and estimated by the Markov Chain Monte Carlo (MCMC) method regarding the Gaussian distribution as a prior distribution to unknown parameters. In the estimation, the mean equal to the reference value with a standard deviation of 10% of the reference values. The results showed that the method was able to reproduce the reference values with relative errors of less than 3% for both the parameters.

**KEYWORDS:** Mercury removal, Natural gas, Markov Chain Monte Carlo Method.

### 1 | INTRODUCTION

Mercury can be released either from natural and anthropogenic sources. Anthropogenic sources of mercury are commonly the combustion of fossil fuels associated with energy or heat production in power plants and waste incineration plants. These contribute for approximately 70% of total emissions into the atmosphere (UNEP, 2008). Furthermore,

mercury is subject to many studies due to its adverse effects on human health, high toxicity and bio-accumulative properties (CAMARGO *et al.*, 2014).

The reference work provides a process model that comprises the superficial adsorption of mercury, the diffusion in the adsorbent particle and the chemical reaction in the solid matrix. The chemical reaction mechanism is included in the model in order to explain the high capacity for mercury fixation of the adsorbents that were used, previously confirmed by leaching stabilization results and heat treatment tests. In the simulations was observed the influence of mercury fixation on the dynamic behavior of the fixed bed column. The model proposed by CAMARGO *et al.* (2014) describing the removal of mercury from gaseous streams using modified hydroxyapatites is given by the following equations:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_f}{\partial t} + \frac{u_0}{\varepsilon} \frac{\partial C_f}{\partial z} + \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \frac{\partial \bar{q}}{\partial t} + \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \frac{\partial q_{RQ}}{\partial t} &= 0; \quad t > 0; \quad 0 < z < L \\ \frac{\partial \bar{q}}{\partial t} &= \frac{15D_{if}}{R_p^2} (q_{Rp} - \bar{q}) - \frac{\partial q_{RQ}}{\partial t}; \quad t > 0; \quad 0 < z < L \\ \frac{\partial q_{RQ}}{\partial t} &= k (q_{RQm} - q_{RQ}) \bar{q}; \quad t > 0; \quad 0 < z < L \\ C_f &= 0; \quad \bar{q} = 0; \quad q_{RQ} = 0 \quad \text{at } t = 0 \\ C_f &= C_{f0} \quad \text{at } z = 0; \quad \text{where } q_{Rp} = HC_f \quad (\text{Henry's Law}) \end{aligned} \tag{1-7}$$

The parameter K was calculated by the expression  $k = H(1-\varepsilon)/\alpha\varepsilon$  and the arbitrary parameter  $\alpha = 10^6$  was chosen to maintain the magnitude of the non-dimensional variables near unit (CAMARGO *et al.*, 2014).

## 2 | MARKOV CHAIN MONTE CARLO (MCMC) METHODS

Advancements in computational methods allowed for Bayesian inference to expand its applicability. Among other methods, Markov Chain Monte Carlo stands out and is known simply as MCMC. There are several algorithms used for the definition of Markov Chains and that are suitable for Bayesian inference such as Metropolis, Metropolis-Hastings, Gibbs-Sampler, and hybrids. The most common MCMC technique is the Metropolis-Hastings algorithm (GAMERMAN, 1997, ORLANDE *et al.*, 2011), which is the technique presented in this work. The implementation of the Metropolis-Hastings algorithm starts with the selection of a proposal distribution  $p(P^*, P^{(t-1)})$ , which is used to draw a new candidate state  $P^*$ , given the current state  $P^{(t-1)}$  of the Markov chain. Once the proposal distribution is selected, the Metropolis-Hastings sampling algorithm can be implemented by repeating the following steps:

1. Sample a Candidate Point  $P^*$  from the proposal distribution  $p(P^*, P^{(t-1)})$ .

2. Calculate the acceptance factor:

$$AF = \min \left[ 1, \frac{\pi(\mathbf{P}^* | \mathbf{Y}) p(\mathbf{P}^{(t-1)} | \mathbf{P}^*)}{\pi(\mathbf{P}^{(t-1)} | \mathbf{Y}) p(\mathbf{P}^* | \mathbf{P}^{(t-1)})} \right] \quad (8)$$

3. Generate a random value  $U$ , which is uniformly distributed on  $(0, 1)$ .

4. If  $U \leq AF$ , set  $\mathbf{P}^{(t)} = \mathbf{P}^*$ . Otherwise, set  $\mathbf{P}^{(t)} = \mathbf{P}^{(t-1)}$ .

5. Return to step 1 while some convergence criteria is not satisfied.

Therefore, a sequence is generated to represent the posterior distribution. Inferring on this distribution is obtained from inference on the samples  $\{\mathbf{P}^{(1)}, \mathbf{P}^{(2)}, \dots, \mathbf{P}^{(n)}\}$ . However, we note that values of  $\mathbf{P}^{(i)}$  must be ignored while the chain has not yet converged to equilibrium (the warm-up period). In this work, the proposal was chosen as a random walk in the form:

$$\mathbf{P}^* = \mathbf{P}^{(t-1)} + \omega \mathbf{P}^{(t-1)} \boldsymbol{\varepsilon} \quad (9)$$

where  $\boldsymbol{\varepsilon}$  is a random vector with a standard normal distribution, i.e.,  $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N(0,1)$  and  $\omega$  is the search step.

### 3 | RESULTS

To select the parameters to be estimated, a sensitivity analysis was performed, evaluating the magnitude and the linear dependence between the parameters. From this analysis, there was noticed a linear dependence between  $\omega$  and  $K$ . Since these parameters show high and close magnitudes, any choice would be acceptable. It was also observed a linear dependence between  $R_p$  and  $D_{if}$ , and the parameter  $R_p$  showing a higher magnitude. Nonetheless, as the radius of the particle can be determined effortlessly, by means of a particle size analysis, the parameters chosen for the estimation were  $K$  and  $D_{if}$ .

Table 1 displays the results of the estimates (mean  $\pm$  standard deviation) of the parameters  $K$  and  $D_{if}$ . A 10% deviation of simulated measurements and a deviation of parameters for the Gaussian distribution were also used. For the mean and standard deviation calculations of the estimates, the warm-up period, defined as the number of states required for the estimated value to begin to oscillate around a mean, was neglected. In both two analyzed scenarios, 5000 states were used in the Markov Chain. Figures 1 and 2 exhibit the breakthrough curves for Cases 1 and 2, respectively, for the dimensionless concentration and in Figures 4 to 6 the evolution of the Markov Chains for the two parameters estimated in each analyzed case.

	Case 1		Case 2	
	Mean ( $\mu$ ) $\pm$ standard deviation ( $\sigma$ )	Exact (CAMARGO <i>et al.</i> , 2014)	Mean ( $\mu$ ) $\pm$ standard deviation ( $\sigma$ )	Exact (CAMARGO <i>et al.</i> , 2014)
<b>k (-)</b>	1.9674 $\pm$ 0.0050	<b>1.9474</b>	2.4557 $\pm$ 0.0655	<b>2.5089</b>
$D_{if}$ (m <sup>2</sup> /s)	4.1508 $\times 10^{-14}$ $\pm$ 3.7701 $\times 10^{-15}$	<b>4.1929<math>\times 10^{-14}</math></b>	3.4857 $\times 10^{-15}$ $\pm$ 3.6000 $\times 10^{-16}$	<b>3.5627<math>\times 10^{-15}</math></b>

Table 1: Estimated parameters for each case.

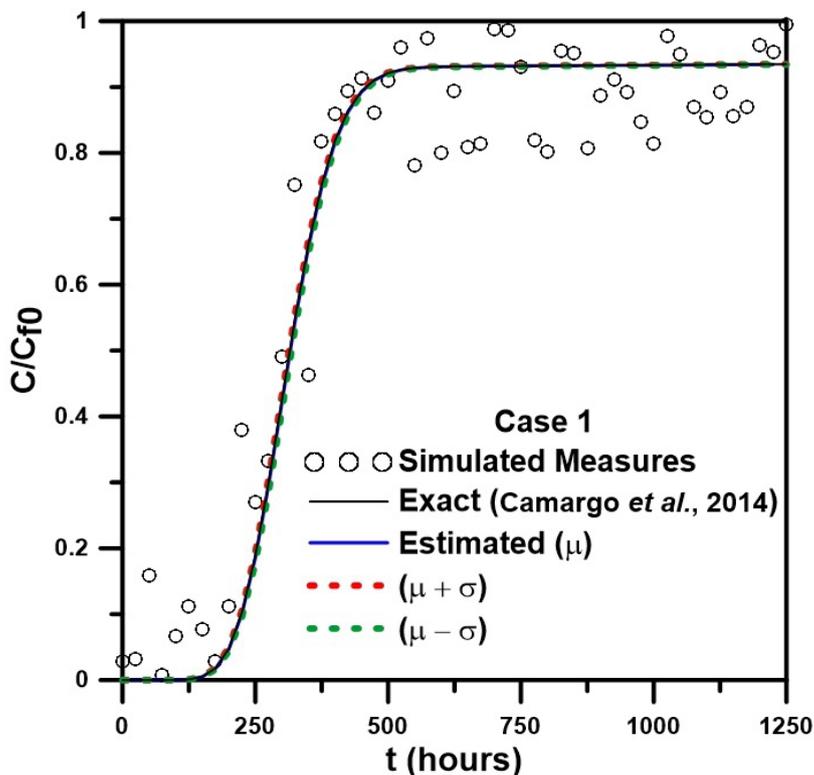


Figure 1: Breakthrough curve for Case 1.

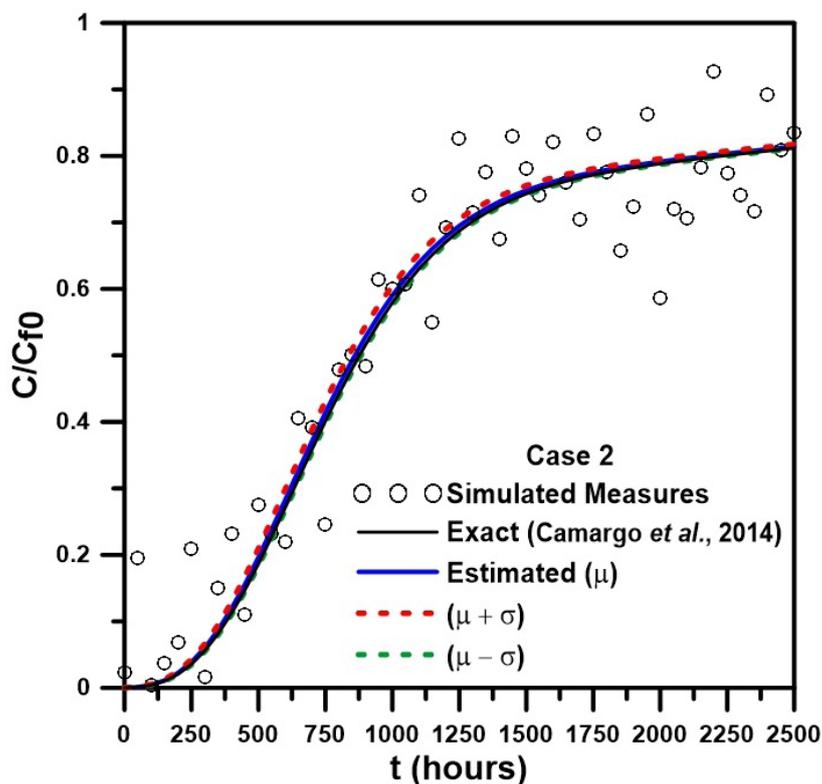


Figure 2: Breakthrough curve for Case 2.

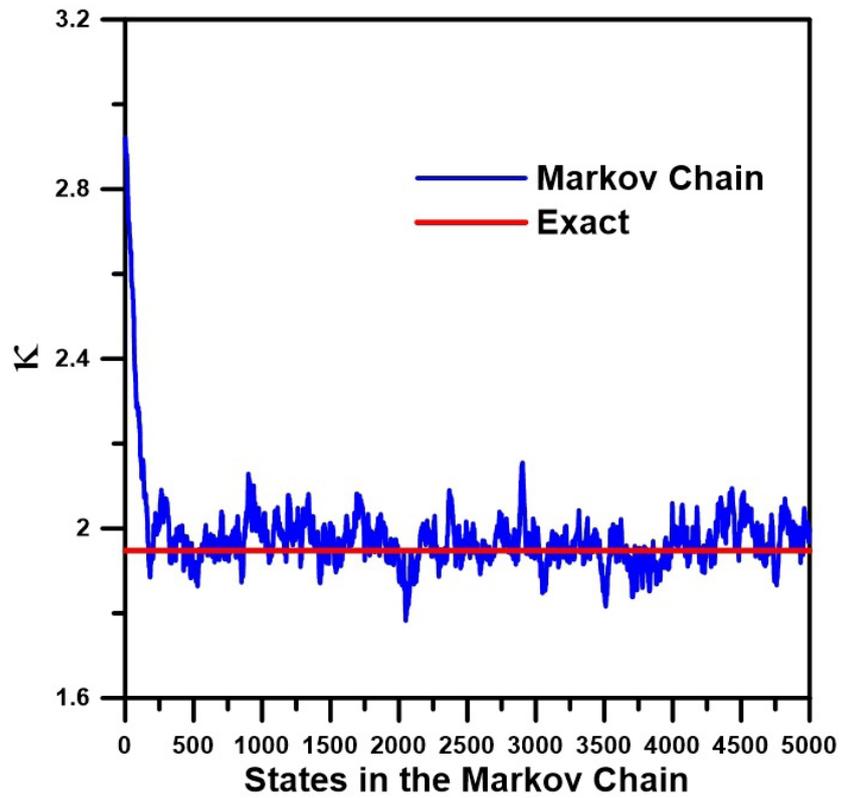


Figure 3: Evolution of Markov Chain for Case 1 ( $k$ ).

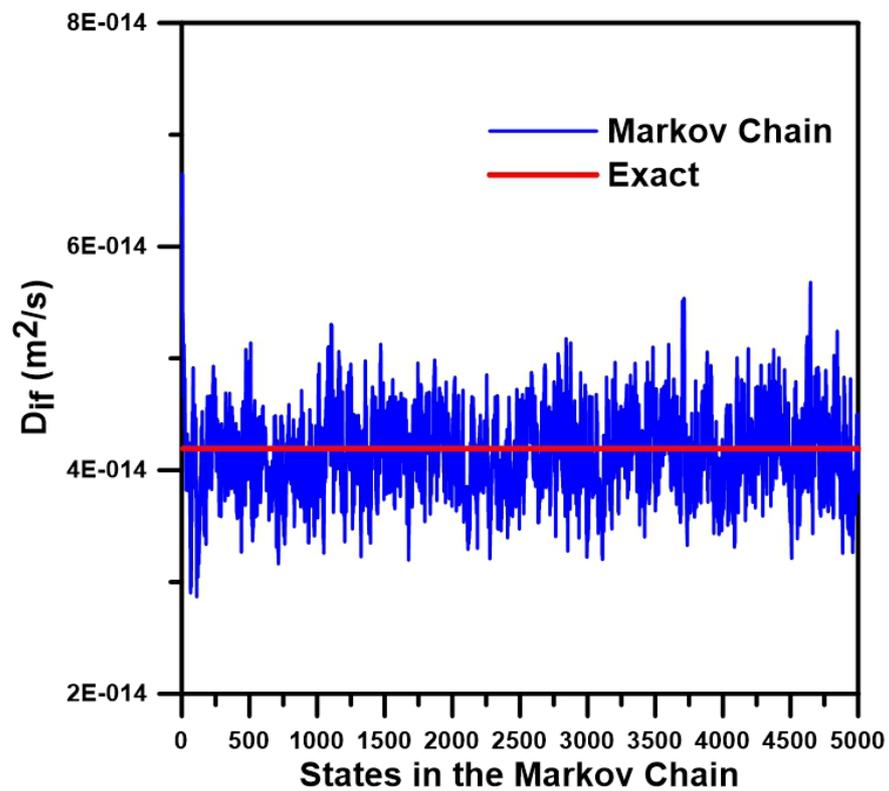


Figure 4: Evolution of Markov Chain for Case 1 (Dif).

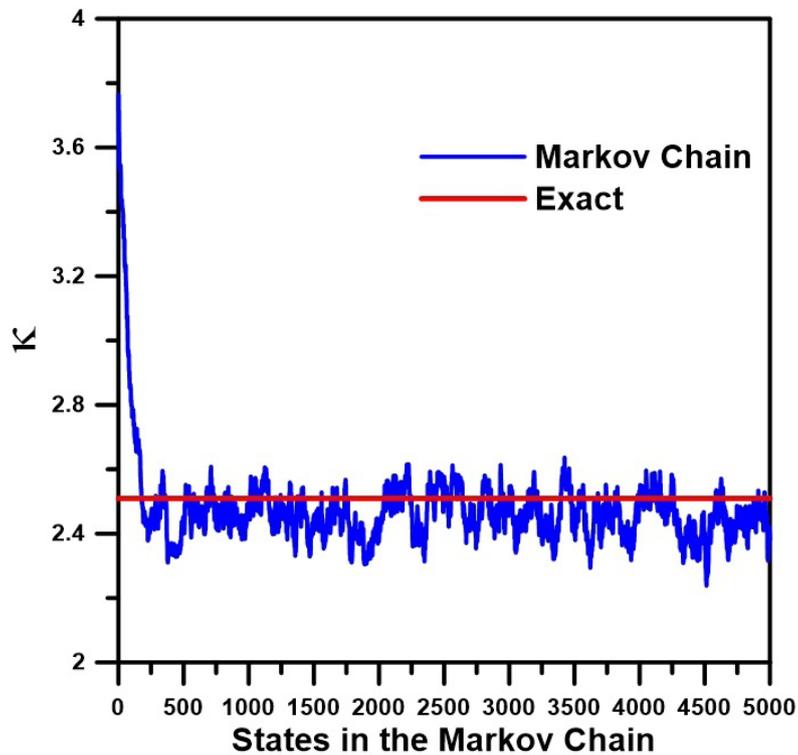


Figure 5: Evolution of Markov Chain for Case 2 ( $k$ ).

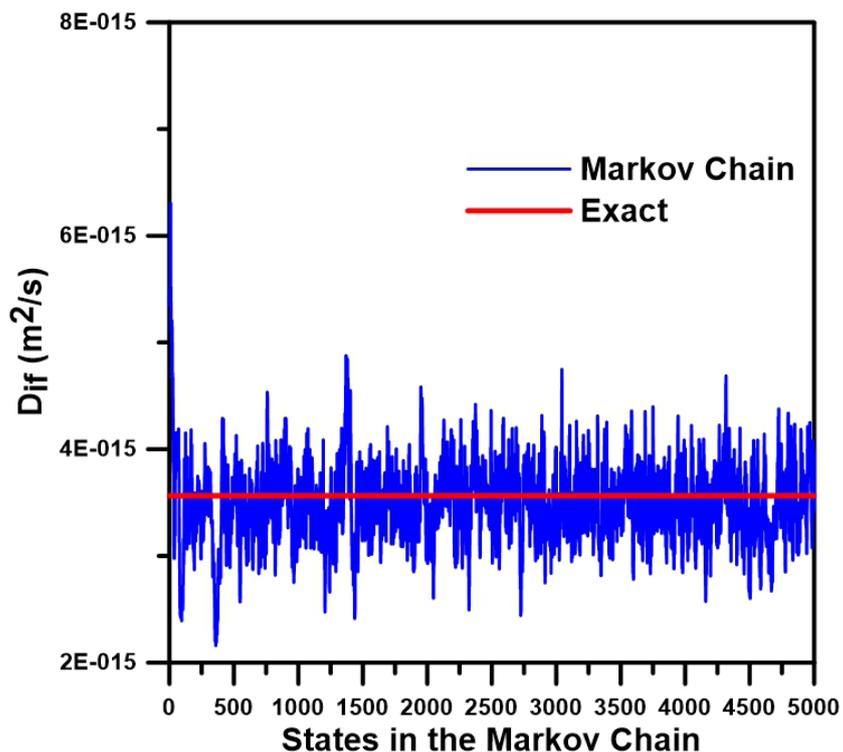


Figure 6: Evolution of Markov Chain for Case 2 (Dif).

#### 4 | CONCLUSIONS

Only simulated measurements were utilized in this work, aiming to evaluate the application of the proposed methodology. However, new studies must be conducted using experimental data for a new estimative of the parameters. The results obtained by the Markov Chain Monte Carlo method, using the Metropolis-Hastings algorithm,

are very satisfactory for the parameters estimation in the proposed mercury adsorption model. The Markov Chains reached equilibrium at roughly 300 iterations and the parameters obtained have relative errors of less than 3% related to the reference.

## 5 | ACKNOWLEDGEMENT

The authors are grateful to the Engineering of Natural Resources of the Amazon Graduate Program (PRODERNA/UFPa) and to CAPES for the financial incentive to carry out this research.

## REFERENCES

CAMARGO C. L. M.; RESENDE N. S.; OLIVEIRA A. G.; SALIM V. M. M.; TAVARES F. W. **Investigation of adsorption-enhanced reaction process of mercury removal from simulated natural gas by mathematical modeling.** Fuel, v. 129, p. 129-137, 2014.

GAMERMAN, D. **Markov Chain Monte Carlo: Stochastic simulation for Bayesian Inference.** 1ed. London: Chapman & Hall, 1997.

ORLANDE, H.; FUDYM, F.; MAILLET, D.; COTTA, R. **Thermal Measurements and Inverse Techniques,** CRC Press, Boca Raton, 2011.

UNEP Chemicals Branch. **The global atmospheric mercury assessment: sources, emissions and transport.** UNEP-Chemicals, Geneva, Switzerland, 2008.

## **SOBRE A ORGANIZADORA**

**CARMEN LÚCIA VOIGT** Doutora em Química na área de Química Analítica e Mestre em Ciência e Tecnologia de Alimentos pela Universidade Estadual de Ponta Grossa. Especialista em Química para a Educação Básica pela Universidade Estadual de Londrina. Graduada em Licenciatura em Química pela Universidade Estadual de Ponta Grossa. Experiência há mais de 10 anos na área de Educação com ênfase em avaliação de matérias-primas, técnicas analíticas, ensino de ciências e química e gestão ambiental. Das diferentes atividades desenvolvidas destaca-se uma atuação por resultado, como: supervisora de laboratórios na indústria de alimentos; professora de ensino médio; professora de ensino superior atuando em várias graduações; professora de pós-graduação *lato sensu*; palestrante; pesquisadora; avaliadora de artigos e projetos; revisora de revistas científicas; membro de bancas examinadoras de trabalhos de conclusão de cursos de graduação. Autora de artigos científicos. Atuou em laboratório multiusuário com utilização de técnicas avançadas de caracterização e identificação de amostras para pesquisa e pós-graduação em instituição estadual.

Agência Brasileira do ISBN  
ISBN 978-85-7247-231-9

