

SIMULREANT: SIMULADOR DE REATORES NÃO-ISOTÉRMICOS

P. P. BARREIROS¹, M. T. S. L. LIMA¹ e J. A. SOUSA¹

¹ Universidade Federal dos Vales dos Jequitinhonha e Mucuri, Instituto de Ciência e Tecnologia, Engenharia Química

E-mail para contato: pollyanapereirabarreiros@gmail.com

RESUMO – A necessidade de se ampliar o entendimento de conceitos e teorias dos discentes na área de Projeto de Reatores Químicos, levou ao desenvolvimento de um simulador para reatores não-isotérmicos utilizando softwares livres e gratuitos. A simulação é feita de modo que o usuário possa variar parâmetros de processo, bem como interpretar e comparar os resultados a partir de conhecimento obtido durante a graduação em Engenharia Química. Para o estudo de caso analisado, utilizou-se um exemplo presente na literatura concernente e, a partir dos dados do mesmo, parâmetros de processo, como temperatura e vazão molar da entrada do reator, foram variados visando conhecer as influências de tais parâmetros na conversão de equilíbrio e no volume do vaso reacional. Para a análise foram utilizados Gráficos de Levenspiel de modo a avaliar o comportamento das curvas obtidas e então propor explicações para tal fenômeno. Após simulação e discussão dos resultados, percebeu-se que o simulador gera resultados satisfatórios e condizentes com o estudado.

1. INTRODUÇÃO

Presente em diferentes áreas e muito utilizada para resolução de problemas e tomada de decisão, a simulação computacional vem ganhando um grande destaque nos últimos anos, por se tratar de uma ferramenta versátil e de fácil utilização. A simulação computacional pode ser, igualmente, utilizada em pesquisas e projetos de um curso de Engenharia Química. Esta ferramenta, juntamente com os fundamentos de Balanço de Massa e Energia, Transferência de Calor, Movimento e Massa, Modelagem Computacional e Operações Unitárias auxiliam na elaboração de um projeto, desde as torres de destilação até um vaso reacional, tão presentes no ambiente de trabalho de um engenheiro químico. O simulador computacional pode ainda aprofundar e ampliar a compreensão das hipóteses que fundamentam a teoria dos três principais modelos de reatores químicos ideais.

Os autores Rodrigues *et al.* (2010) propuseram um simulador, implementado utilizando o software EMSO (Environment for Modeling, Simulation and Optimization), que trabalhasse reatores químicos de forma didática. Desenvolvido na Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), o simulador possui o intuito de auxiliar a compreensão de conceitos e teorias sobre o Cálculo de Reatores dentro da academia. Outro software conhecido utilizado para resolução de problemas envolvendo reatores químicos é o GNU Octave (Eaton, 1997), sendo desenvolvido originalmente para estudantes do curso de Engenharia Química da Universidade de Texas. Pode-se citar plataforma criada pela Universidade de Coimbra (UC),

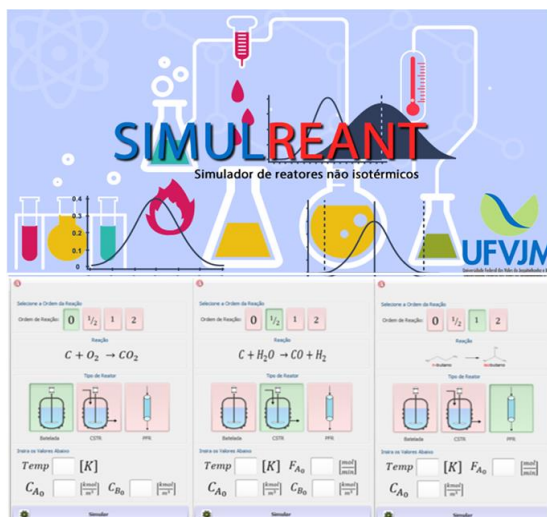
<http://www.engin.umich.edu/~cre/>, que consiste em um Laboratório Virtual de Reatores Químicos para simulação de processos (Universidade de Coimbra, 2017). Da mesma forma, foi proposto o desenvolvimento de um simulador que fosse capaz de tratar de forma didática e interativa grandes áreas como Cinética Química e Cálculo de Reatores, buscando sanar eventuais dúvidas e ampliar o conhecimento dos discentes de Engenharia Química da Universidade Federal dos Vales dos Jequitinhonha e Mucuri (UFVJM).

O presente trabalho objetiva apresentar o ambiente de simulação computacional, SIMULREANT – Simulador de Reatores Não-Isotérmicos para reatores químicos desenvolvido a partir de softwares livres e gratuitos, que foi validado a partir de dados disponíveis na literatura pertinente. Um estudo de caso é apresentado, contendo análises sobre a influência da variação de parâmetros de processos, como por exemplo, temperatura e da vazão molar de alimentação do reator.

2. MATERIAL E MÉTODOS

O código do simulador, primeiramente, foi implementado utilizando o Scinotes do programa Scilab® 5.5.2. Objetivando-se obter uma interface amigável ao usuário, foi escolhido o software NetBeans IDE® 8.0.2, o qual utiliza-se da linguagem Java, possibilitando a dinamização de outras plataformas de programação, sendo o Scilab umas delas. A interface do simulador, utilizando o software Netbeans, pode ser vista na Figura 1.

Figura 1 – Interface gráfica do SIMULREANT desenvolvida no NetBeans IDE.



Foi desenvolvida uma modelagem computacional de sistemas reacionais não-isotérmicos, operando adiabaticamente, para três modelos de reatores ideais: Batelada, CSTR (continuous stirred-tank reactor) e PFR (plugflow reactor). Dados cinéticos e termodinâmicos (Smith *et al.*, 2007) de sistemas reacionais homogêneos com modelos de taxa de reação de ordens zero (reação de combustão: $C + O_2 \rightarrow CO_2$ (Hurt *et al.*, 2001.)), meio (gaseificação a vapor do carvão vegetal: $C + H_2O \rightarrow CO + H_2$ (Barrio *et al.*, 2000)), um (isomerização do n-butano a isobutano: $n-C_4H_{10} \leftrightarrow i-C_4H_{10}$ (Fogler, 2009)) e dois (polimerização de estireno: $CH_2COC_2H_5 + NaOH \rightarrow C_2H_5OH + CH_3OONa$ (Almeida, 2004)) foram pesquisados na literatura científica e implementados.

Para cada sistema reacional implementado tem-se a possibilidade de simulá-lo utilizando os três modelos de reatores ideais, oferecendo ao estudante a chance de comparação de volume de vaso reacional requerido dentre os modelos de reatores, diferenças de conversão final alcançada e na temperatura final, bem como analisar as diferenças nos valores das taxas de reação.

A validação do Simulador foi realizada utilizando o Exemplo Resolvido 8.3 da obra “Elementos de Engenharia das Reações Químicas” Fogler H. S., 2009 (Barreiros; Sousa, 2017), o qual apresenta a isomerização em fase líquida do n-butano a isobutano, ocorrendo em um PFR operando adiabaticamente. A reação possui ordem de reação um. A temperatura de alimentação do reator é realizada a 330 K contendo 147,6 kmols/h de n-butano e 15,4 kmols/h de iso-pentano (inerte).

Ao se analisar de forma comparativa os resultados obtidos pelo simulador nas condições fundamentais de processo apresentadas pelo Exemplo 8.31, com os dados apresentados da Tabela E8-3.1 (Fogler 2009), na qual considera um intervalo de pontos para conversão entre 0 e 70%, nota-se que os resultados obtidos a partir do SIMULREANT são consistentes. Tomando como parâmetros de comparação a temperatura e a taxa de reação, como reportado por Barreiros (2017) observa-se que as temperaturas obtidas no SIMULREANT são inferiores às citadas na Tabela E8-3.1, e apresentam um desvio percentual máximo e inferior a 1%. Com relação a taxa reação o SIMULREANT apresentou resultados inferiores aos encontrados na Tabela E8-3.1, sendo o desvio máximo apresentado de aproximadamente 17,5%.

O reator é modelado como um PFR e sua equação de projeto, juntamente com o modelo da taxa de reação, sendo considerada reversível e elementar, são mostrados pela Equação 1.

$$\frac{dX_{n-butano}}{dV} = \frac{-r_{n-butano}}{F_{n-butano 0}} = \frac{k_d C_{n-butano 0} \left[1 - \left(1 + \frac{1}{K} \right) X_{n-butano} \right]}{F_{n-butano 0}} \quad (1)$$

A taxa específica da reação direta é fornecida a 360 K, bem como sua energia de ativação. Logo, pode-se encontrar a taxa específica para as demais temperaturas, utilizando-se a Equação 2.

$$k_d(T_2) = k_d(T_1) \exp \left[\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \right] \quad (2)$$

A constante de equilíbrio também é fornecida a 333,15 K e, uma vez que a variação de entalpia padrão da reação foi considerada independente da temperatura, pode-se calcular as constantes de equilíbrio químico para as demais temperaturas utilizando a Equação 3.

$$K(T_2) = K(T_1) \exp \left[\frac{\Delta H_{reação}^0}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \right] \quad (3)$$

Para saber como a temperatura comporta-se ao longo do reator, basta realizar o Balanço de Energia, considerando operação adiabática, como apresenta a Equação 4.

$$T(X_{n-butano}) = \frac{X_{n-butano}(-\Delta H_{reação}^0(T_{ref}) + \sum v_i C_{pi} T_0) + \sum \frac{F_{i0}}{F_{n-butano 0}} C_{pi}}{X_{n-butano} \sum v_i C_{pi} + \sum \frac{F_{i0}}{F_{n-butano 0}} C_{pi}} \quad (4)$$

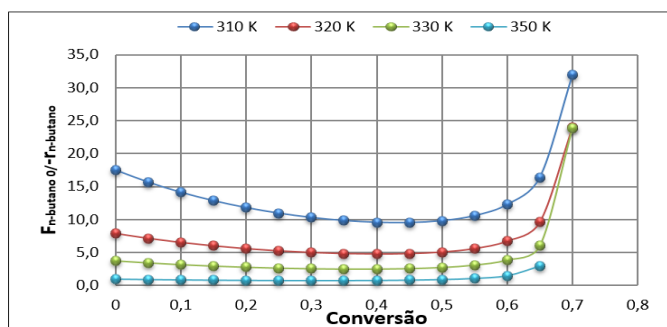
As equações diferenciais foram resolvidas utilizando a biblioteca Apache.Commons.Math, presente no software NetBeans®. Esse fornece vários métodos de integração numérica para resolução dessas equações. No SIMULREANT foi utilizado um método de integração numérica pertencente ao grupo dos métodos de Runge-Kutta; este método denomina-se Método de Dormand Price, o qual interpreta equações e calcula soluções com precisão até a oitava ordem. (Dormand, 1980; Lawrence, 1986).

Almejando visualizar as possíveis consequências da variação de parâmetros de processos, a primeira análise realizada foi a modificação da temperatura de alimentação. A temperatura inicial do exemplo original é de 330 K. Logo, essa temperatura foi diminuída para 230 K, depois para 180 K e aumentada para 430 K, mantendo-se constante a vazão molar de entrada, semelhante ao do problema original. Outra análise pertinente a este sistema é a variação da vazão molar de alimentação do reator. Um aumento de 50%, baseado no valor original, assim como uma redução nesse mesmo percentual foram testados, mantendo-se a temperatura de alimentação de 330 K.

3. RESULTADO E DISCUSSÕES

Utilizando-se dos dados obtidos pelo simulador, construiu-se um gráfico de Levenspiel (Fogler, 2009) mostrado na Figura 2, para visualizar as consequências da variação da temperatura de alimentação. Por se tratar de uma reação exotérmica, sabe-se que a conversão de equilíbrio aumenta com a diminuição da temperatura de alimentação. No exemplo original pede-se que seja atingida uma conversão de 70%. Após a realização da simulação com a temperatura original de alimentação de 330 K, obteve-se uma conversão de equilíbrio de aproximadamente 71,5%. Diminuindo-se a temperatura de alimentação para 310 K há um aumento na conversão de equilíbrio para 74%; aumentando-se para 350 K há uma diminuição da conversão de equilíbrio para 69%. Portanto, observa-se que uma temperatura de alimentação de 350 K não permite a conversão desejada de 70%.

Figura 2 – Temperatura de alimentação

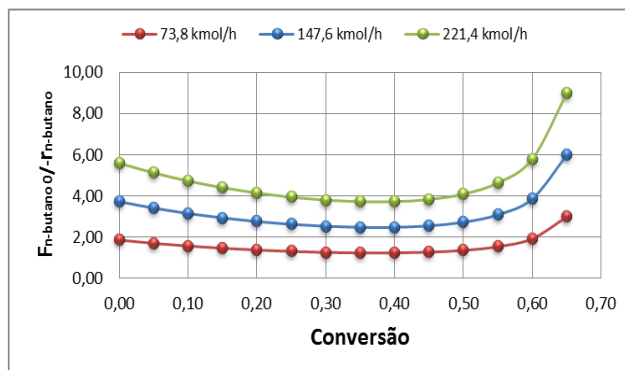


O volume do reator está ligado diretamente à área sob a curva no gráfico. Portanto, ao se analisar a Figura 2 nota-se que ao reduzir a temperatura de alimentação, para uma mesma conversão, aumenta-se a área sob a curva, logo um vaso reacional maior é necessário. O aumento do volume do reator está associado à diminuição da taxa específica de reação e, consequentemente, à diminuição da taxa de reação causada pela redução da temperatura de alimentação. Uma menor velocidade de reação exige um maior volume do equipamento para compensação em termos de tempo de residência. Para o presente sistema reacional em análise com temperatura de alimentação de 330 K, a variação da vazão molar de entrada não provoca

alterações em termos de conversão de equilíbrio, mantendo-se semelhante ao exemplo original.

A Figura 3 apresenta outro gráfico de Levenspiel para o caso em que a vazão molar de entrada é modificada. O gráfico foi construído de forma a apresentar conversões, no eixo das abscissas, de até 90% da conversão de equilíbrio.

Figura 3 – Vazão molar de entrada



A área sob a curva equivale ao volume do vaso reacional. Logo, a partir da análise da Figura 3, pode ser visto que o aumento ou a redução da vazão molar de entrada possui influência no volume do reator. Fato este explicado com base no tempo de residência do mesmo. Com o aumento da vazão molar de entrada, para que se atinja a mesma conversão final proposta, deve-se ter o mesmo tempo de residência para todos os casos, implicando na necessidade de um maior volume de um vaso reacional. A redução da vazão molar de entrada, pelos mesmos motivos apresentados anteriormente implicaria em um menor volume de reator; porém, deve-se lembrar de que neste caso a produção mássica por unidade de tempo também cairia.

4. CONCLUSÕES

O simulador desenvolvido apresenta resultados coerentes quando comparados aos resultados apresentados pelo exemplo resolvido 8.3 (Fogler, 2009). Além da validação do software pelo exemplo, o mesmo foi utilizado para visualizar a influência da variação de parâmetros do processo. Através das análises, juntamente com os conceitos e teorias de Cinética Química, pôde-se concluir que o simulador foi capaz de gerar resultados satisfatórios e lógicos frente à variação dos parâmetros de processo. Quando há variação na temperatura de alimentação pode-se notar que esta interfere diretamente no volume do vaso reacional pois, quanto maior a temperatura inicial, menor o volume, considerando uma mesma conversão; deve-se atentar apenas para a conversão de equilíbrio atingível para cada temperatura da corrente de entrada. Isto deve-se ao aumento da taxa específica de reação e, consequentemente, na velocidade de reação. Tratando-se das modificações na vazão molar de alimentação, a mesma acarreta mudanças no volume do reator requerido para atingir a conversão proposta. Tendo-se em vista o tempo de residência dos reagentes dentro do reator, quanto maior a vazão molar, menor este tempo e menor a chance de se alcançar a conversão desejada, para a mesma concentração inicial. Logo, deve-se aumentar o volume de forma a suprir essa perturbação causada ao sistema. De forma semelhante, diminuindo-se a vazão, maior o tempo de residência, ou seja, é requerido um menor volume para atingir a conversão.

5. LISTA DE VARIÁVEIS

$C_{n-butano\ 0}$: concentração inicial (kmol/m ³);	componente i (kmol/h);	$-r_{n-butano}$: taxa de consumo de n- butano (kmol/m ³ h);	$X_{n-butano}$: conversão de n- butano (-);
C_{pi} : calor específico da espécie i (J/mol K);	$F_{n-butano\ 0}$: vazão molar de alimentação de n- butano (kmol/h);	R : constante universal dos gases ideias (J/mol K);	$\Delta H_{reação}$: entalpia da reação (J/mol K);
E_a : energia de ativação da reação (J/mol);	$k_d(T_i)$: taxa específica de reação (h ⁻¹);	T_i : temperatura (K);	v_i : número estequiométrico do componente i (-);
F_{i0} : vazão molar de alimentação do	$K(T_i)$: constante de equilíbrio químico (-);	T_{ref} : temperatura de referência (K);	
		V : volume do reator (m ³);	

6. REFERÊNCIAS

- ALMEIDA, A. S. P. N. Simulação de Reatores de Polimerização de Estireno: *Modelagem Cinética e Termodinâmica*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2004.
- BARREIROS, P. P; SOUSA J. A. Modelagem Computacional: Laboratório Virtual de Reatores. In: SEMANA DA INTEGRAÇÃO – ENSINO, PESQUISA E EXTENSÃO – SINTEGRA, 5., 2017. Diamantina. *Anais da V Semana da Integração – Ensino, Pesquisa e Extensão*. Diamantina: Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, 2017. No prelo.
- BARRIO, M. et al. Steam gasification of wood char and the effect of hydrogen inhibition on the chemical kinetics. *Progress in Thermochemical Biomass Conversion*. Tyrol, Austria, 2000.
- DORMAND J, PRINCE P. A family of embedded Runge–Kutta formulae. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 6: 19-26, 1980.
- EATON, J. W. *GNU Octave*. 2013. Disponível em: <<http://page.math.tu-berlin.de/~baerwolf/spektrumbuch/utilities/readme-octave-2.0.13.pdf>>. Acesso em: 23 abril 2017.
- FOGLER, H. S. *Elementos de Engenharia das Reações Químicas*, 4ª Ed, LTC, 2009.
- HURT, R. H.; CALO, J. M. Semi-Global Intrinsic Kinetics for Char Combustion Modeling. *Combustion and flame* 125: 1138–1149, Providence, USA, 2001.
- LAWRENCE F. SHAMPINE. Some Practical Runge-Kutta Formulas*. *Mathematics of Computation*, 46, 135-150, 1986.
- RODRIGUES, R.; SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. Teaching Chemical Reaction Engineering Using EMSO Simulator. *Computer Application in Engineering Education*, 18: 607-618, 2010.
- SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C. e ABBOTT M. M. *Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química*, 7ª Ed, LTC, 2007.
- UNIVERSIDADE DE COIMBRA – UC. Disponível em: <http://labvirtual.eq.uc.pt/siteJoomla/index.php?Itemid=456&id=178&option=com_content&task=view>. Acesso em 03/05/2017.