



## SIMULAÇÃO DO REATOR QUÍMICO DE RETROMISTURA NO SOFTWARE EMSO

Guilhermina Schultz<sup>1</sup>, Joice Lauer<sup>1</sup>, Junara Mendonça Lopes<sup>1</sup>, Rainer Sant'anna Rangel<sup>1</sup>, George Simonelli<sup>2</sup>

1. Discentes do curso de Engenharia Química das Faculdades Integradas de Aracruz (guilherminaschultz@hotmail.com; joicelauer@hotmail.com; junara.lopes@gmail.com; rainer\_rangel@yahoo.com.br), Aracruz – Brasil.
2. Professor dos cursos de Engenharia Química, Civil e de Produção das Faculdades Integradas de Aracruz, Aracruz – Brasil.

Recebido em: 30/09/2013 – Aprovado em: 08/11/2013 – Publicado em: 01/12/2013

### RESUMO

O aumento da demanda de muitos produtos e a menor disponibilidade de matérias-primas tem gerado uma constante necessidade de otimização dos processos produtivos, visando baixar os custos de produção e manter o preço dos produtos competitivos. Nesse sentido, a otimização de processos proporciona melhorias nas especificações dos produtos, redução de custos e até mesmo a diminuição da quantidade de resíduos gerados. A partir dessa necessidade, os engenheiros são motivados a testarem várias condições de funcionamento dos processos, de forma a obter a de maior eficiência. Como na maioria dos casos não é economicamente viável e nem seguro parar o processo produtivo para a realização de experimentos no equipamento desejado, o mesmo pode ser modelado por equações matemáticas e simulado computacionalmente com o máximo de condições possíveis. Tendo em vista a importância da modelagem e simulação de processos, essa pesquisa visou modelar e simular um dos principais reatores da indústria química, o reator de mistura perfeita (CSTR - Continuous Stirred-Tank Reactor). Como na simulação de processos diferentes *softwares* podem ser utilizados, entre as possibilidades, o programa escolhido para ser empregado nesse estudo foi o EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*) devido ao fato deste ser um *software* de alto desempenho, capaz de simular equipamentos ou processos que tenham sido modelados através de equações matemáticas. Para um sistema de três reatores CSTR em série foi possível simular a mudança da concentração de um reagente A com o tempo.

**PALAVRAS-CHAVE:** Reator CSTR. Reações químicas. Otimização de processos.

### SIMULATION OF CHEMICAL REACTOR IN EMSO BACKMIXING

#### ABSTRACT

The increased demand for many products and lower availability of raw materials has generated a need for constant optimization of production processes in order to lower production costs and keep the price of competitive products. Accordingly, the optimization process provides improvements in product specifications, cost reduction and even reducing the amount of waste generated. From this necessity, the

engineers are motivated to test various operating conditions of the process, in order to obtain higher efficiency. As in most cases it is not economically feasible nor safe to stop the production process for conducting experiments in the desired equipment, it can be modeled by mathematical equations and computationally simulated with maximum possible conditions. Given the importance of modeling and simulation processes, this research aimed to model and simulate a major chemical reactors, the reactor perfect mix (CSTR - Continuous Stirred-Tank Reactor). How to simulate different software processes can be used, among the possibilities, the program chosen to be used in this study was EMSO, due to the fact this is a high-performance software capable of simulating equipment or processes that have been modeled by mathematical equations. For a system of three CSTR reactors in series could simulate a change in the concentration of A reagent with time.

**KEYWORDS:** CSTR reactor. Chemical reactions. Process optimization.

## INTRODUÇÃO

A produção de forma economicamente viável de um produto qualquer, utilizando uma variedade de matérias-primas e uma sucessão de etapas de tratamento, requer o projeto de um processo químico industrial. Para que as matérias-primas possam reagir quimicamente no reator é necessário submetê-las a uma série de etapas de tratamento físico. Porém a etapa de tratamento químico, quando presente em uma planta química, é considerada o coração do processo, sendo responsável pelo seu sucesso ou fracasso (LEVENSPIEL, 2000).

Os reatores químicos são equipamentos onde acontecem reações em escala industrial para transformação de matérias-primas em produtos comercializáveis. Esses existem nas mais variadas formas e tamanhos. Segundo Fogler (2008), no reator tanque-agitado contínuo ou reator de retromistura, o fluido é uniformemente misturado e a composição é a mesma em todo o interior, assim como na saída. Para isso, projeta-se o mesmo de modo a não possuir variação espacial de concentração, temperatura e velocidade da reação, obtendo-se a seguinte equação de desempenho para um reagente A qualquer:

$$\frac{dN_A}{dt} = F_{A0} - F_A - r_A V$$

Sendo:

$$N_A = C_A V$$

$$F_{A0} = W_0 C_{A0}$$

$$F_A = W C_A$$

Fazendo as devidas substituições, tem-se:

$$\frac{V dC_A}{dt} = W_0 C_{A0} - W C_A - r_A V$$

Onde:  $dN_A/dt$  é a variação do número de mols em função do tempo,  $F_{A0}$  e  $F_A$  são as vazões molares de entrada e saída respectivamente,  $r_A$  a taxa da reação química,  $V$  o volume em um tempo  $t$ ,  $W_0$  e  $W$  são as vazões volumétricas de entrada e saída respectivamente e  $C_A$  a concentração molar de A.

Frequentemente tenta-se fazer com que os reatores reais se aproximem o máximo dos reatores ideais, pois eles são fáceis de trabalhar devido à simplicidade

de se encontrar suas equações de desempenho (LEVENSPIEL, 2000).

Uma forma de analisar um processo ou equipamento para obter resultados rápidos e seguros sem a realização de testes em uma planta real, consiste na utilização de modelos matemáticos. Essa representação através de equações matemáticas é conhecida como modelagem de processos. Quanto maior a aproximação da realidade, mais complexas serão as equações matemáticas obtidas (BURDEN & FAIRES, 2010).

Essas equações matemáticas são conhecidas como equações diferenciais, cuja incógnita é uma função que aparece sob a forma das respectivas derivadas (MENDELSON & AYRES Jr., 1999).

Os modelos equacionados, que são em sua grande maioria para resolver problemas da Engenharia Química, tem natureza fenomenológica, ou seja, buscam descrever os fenômenos envolvidos no processo utilizando os princípios básicos de conservação de massa, energia e quantidade de movimento, além de equações constitutivas, condições iniciais e de contorno (STEPHANOPOULOS, 1984).

Com esses modelos associados à simulação, pode-se analisar o comportamento de um processo para diferentes condições operacionais. A simulação de processos utiliza modelos matemáticos baseados em condições reais de operação, com o objetivo de testar diversas possibilidades de configuração, buscando a idealidade ou prevendo o comportamento do sistema em situações adversas (PEGDEN et al., 1990).

A redução do custo dos computadores e a melhora no desempenho difundiram seu uso nos estudos de engenharia, através da utilização de *softwares* de computação numérica e simulação. Isso vem sendo ampliado pelo uso acadêmico de programas como o Scilab, MATLAB, HYSYS e o EMSO, que foi utilizado nesse trabalho (SILVA & CUNHA, 2006).

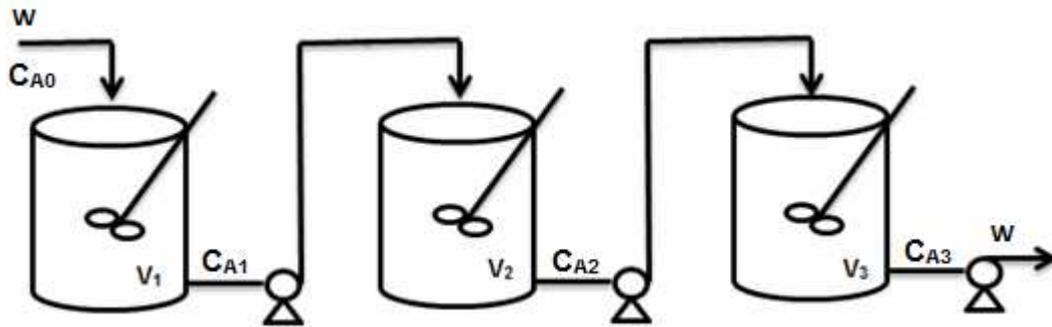
EMSO que é a sigla para *Environment for Modeling, Simulation and Optimization* (em tradução livre, Ambiente para Modelagem, Simulação e Otimização), teve seu desenvolvimento iniciado em 2001, sendo escrito em C++ (uma linguagem de programação muito utilizada e altamente acessível) (SOARES, 2006).

Diante do exposto o objetivo desse trabalho foi demonstrar como o EMSO pode ser utilizado na modelagem e simulação de processos, com base em um estudo de caso adaptado de KWONG (2012) envolvendo o reator CSTR.

## MATERIAL E MÉTODOS

A modelagem do reator químico CSTR consistiu em um estudo sobre os modelos matemáticos que representam o seu comportamento. O modelo proposto foi uma equação diferencial que descreveu o comportamento da concentração ao longo do tempo. Após essa etapa, o modelo foi inserido no EMSO, juntamente com os dados de entrada (concentração, vazão e volume) utilizando sua linguagem de programação (DIJKSTRA, 1976). Assim foi obtido um gráfico que demonstrou como as concentrações variaram com o tempo, no interior dos reatores. Abaixo está apresentado o estudo de caso para a modelagem e simulação do reator CSTR no *software* EMSO.

Para o desenvolvimento de um processo composto por três reatores CSTR em série, um profissional da área da engenharia de processos químicos desenvolveu o seguinte sistema:



**FIGURA 1:** Reatores em série de Mistura Perfeita.

**Fonte:** Adaptado de Kwong, 2012.

A vazão volumétrica é mantida constante ao longo do sistema e o volume em cada reator é diferente. A temperatura varia em cada reator de forma independente e a taxa de reação é diferente. A concentração molar da corrente de alimentação dos reatores 2 e 3 variam com o tempo. A reação  $A \rightarrow B$  que acontece nos reatores é elementar e irreversível de primeira ordem. Deseja-se observar a dispersão gráfica de como a concentração de A varia com o tempo no interior de cada reator, considerando a equação de taxa a seguir (adaptado de KWONG, 2012):

$$-r_A = kC_A [\text{lbmol}/(\text{ft}^3 \cdot \text{min})]$$

Dados:

**TABELA 1:** Condições do processo.

PARÂMETROS	VALORES	UNIDADES
$W$	1	$\text{ft}^3/\text{min}$
$C_{A0}$	1	$\text{lbmol}/\text{ft}^3$
$V_1$	10	$\text{ft}^3$
$V_2$	1	$\text{ft}^3$
$V_3$	5	$\text{ft}^3$
$k_1$	0,0333	$\text{min}^{-1}$
$k_2$	0,2	$\text{min}^{-1}$
$k_3$	0,55	$\text{min}^{-1}$

**Fonte:** Adaptado de KWONG, 2012.

Onde:  $W$  é a vazão volumétrica;  $C_{A0}$  é a concentração de alimentação do reator 1;  $V_1$ ,  $V_2$  e  $V_3$  são os volumes dos reatores 1, 2 e 3 respectivamente e  $k_1$ ,  $k_2$  e  $k_3$  são as constantes cinéticas de cada reação.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Através da interpretação do estudo de caso citado na metodologia e aplicando o princípio da conservação de matéria, realizaram-se três balanços molares para o reagente A nos reatores 1, 2 e 3 (NUNES et al., 2010):

$$\text{Acúmulo de A} = \text{Entrada de A} - \text{Saída de A} - \text{Consumo de A}$$

As equações diferenciais que descrevem a taxa de variação da concentração do reagente A com o tempo, e suas respectivas condições iniciais são mostradas a seguir:

$$V_1 \frac{dC_{A1}}{dt} = WC_{A0} - WC_{A1} - k_1 C_{A1} V_1$$

$$V_2 \frac{dC_{A2}}{dt} = WC_{A1} - WC_{A2} - k_2 C_{A2} V_2$$

$$V_3 \frac{dC_{A3}}{dt} = WC_{A2} - WC_{A3} - k_3 C_{A3} V_3$$

*Em  $t = 0$ ,  $C_{A1} = C_{A2} = C_{A3} = 0$*

O modelo matemático obtido é um sistema de equações diferenciais e o uso de programas de simulação computacional como o EMSO torna rápida a solução do modelo matemático.

Para programar o modelo matemático no EMSO, torna-se necessário declarar as equações diferenciais, assim como seus parâmetros, variáveis e a condição inicial. Na Figura 2 tem-se a programação das equações diferenciais no EMSO.

FlowSheet ReatorCstr

*#Três reatores CSTR's em série, reação A->B de primeira ordem"*

PARAMETERS

```
k1 as Real(Brief="constante cinética 1", Unit='1/min', Default=0.0333);
k2 as Real(Brief="constante cinética 2", Unit='1/min', Default=0.2);
k3 as Real(Brief="constante cinética 3", Unit='1/min', Default=0.55);
W as Real(Brief="vazão volumétrica", Unit='ft^3/min', Default= 1);
V1 as Real(Brief="volume do reator 1", Unit='ft^3', Default=10);
V2 as Real(Brief="volume do reator 2", Unit='ft^3', Default=1);
V3 as Real(Brief="volume do reator 3", Unit='ft^3', Default=0.55);
cao as Real(Brief="concentração inicial de A", Unit='lbmol/ft^3', Default=1);
```

VARIABLES

```
ca1 as Real(Brief="concentração de A no reator 1", Unit='lbmol/ft^3');
ca2 as Real(Brief="concentração de A no reator 2", Unit='lbmol/ft^3');
ca3 as Real(Brief="concentração de A no reator 3", Unit='lbmol/ft^3');
```

EQUATIONS

```
"Equação do Balanço Molar na forma diferencial para o reator 1"
diff(ca1)=(((cao*W)/V1)-((ca1*W)/V1)-(k1*ca1));
```

```
"Equação do Balanço Molar na forma diferencial para o reator 2"
diff(ca2)=(((ca1*W)/V2)-((ca2*W)/V2)-(k2*ca2));
```

```
"Equação do Balanço Molar na forma diferencial para o reator 3"
diff(ca3)=(((ca2*W)/V3)-((ca3*W)/V3)-(k3*ca3));
```

INITIAL

```
ca1=0*'lbmol/ft^3';
ca2=0*'lbmol/ft^3';
ca3=0*'lbmol/ft^3';
```

OPTIONS

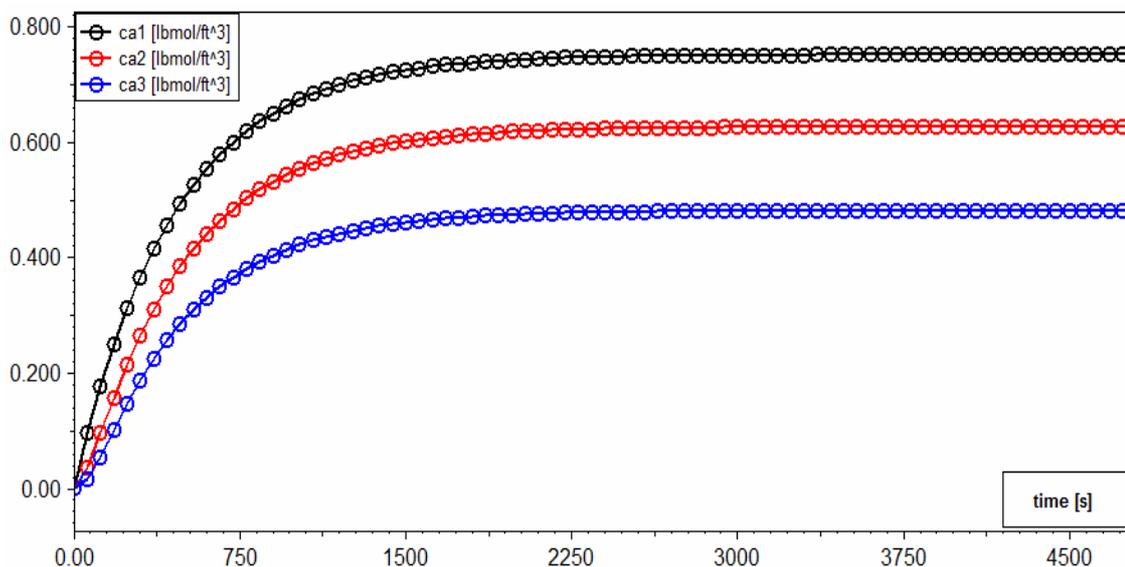
```
TimeStart = 0;
TimeStep = 1;
TimeEnd = 80;
TimeUnit = 'min';
```

end

**FIGURA 2:** Programação das equações diferenciais no EMSO.

**Fonte:** Resultado da pesquisa.

Na Figura 3, são mostradas as dispersões gráficas da variação da concentração do reagente A com o tempo, que são a resposta do EMSO a programação realizada. É válido ressaltar que o gráfico obtido é a dinâmica do processo sem controlador, visto que esse conhecimento é importante na etapa de elaboração do controle de processo.



**FIGURA 3:** Concentração do reagente A (lbmol/ft<sup>3</sup>) em função do tempo (s).

**Fonte:** Resultado da pesquisa.

Como no início do processo a concentração de A é igual à zero no interior de cada um dos reatores, a entrada do reagente na corrente de alimentação do primeiro reator provocará o aumento da concentração de A no interior de cada reator até o estado estacionário, sendo este atingido em aproximadamente 25 minutos (1500 segundos) do início da simulação nos três reatores, e sendo suas concentrações no estado estacionário  $C_{A1}=0,740 \text{ lbmol/ft}^3$ ,  $C_{A2}=0,620 \text{ lbmol/ft}^3$  e  $C_{A3}=0,480 \text{ lbmol/ft}^3$ .

A realização desse trabalho e os resultados obtidos por ele têm como base alguns estudos que buscam a programação de modelos matemáticos de reatores químicos em simuladores de alto desempenho. SILVA (2012) buscou um modelo matemático que representasse os reatores autoclave de produção de polietileno de baixa densidade (PEBD), onde o modelo desenvolvido foi capaz de descrever o comportamento do reator através de seu perfil de temperatura, vazões iniciais e conversão.

MOREIRA et al., (2011) elaboraram um modelo fenomenológico para a produção de polietileno de alta densidade (PEAD) em um reator do tipo *Slurry* (leito fluidizado), com a utilização do *software* EMSO, onde os resultados da simulação seriam utilizados para o desenvolvimento de modelos para controle avançado de processos.

Com intuito de facilitar o ensino de cinética e cálculo de reatores em um ambiente computacional, RODRIGUES et al., (2006) programou problemas propostos no livro “Elementos de Engenharia das Reações Químicas” de FOGLER (2002) no ambiente do *software* EMSO, onde os resultados obtidos foram ilustrados em gráficos gerados pelo próprio simulador.

## CONCLUSÕES

Por meio deste estudo foi demonstrado que é possível prever o comportamento de um sistema de reatores químicos CSTR, sem operá-los, através do emprego da modelagem e simulação do processo. O estudo foi realizado com dados presentes na literatura, mas a mesma metodologia pode ser utilizada na modelagem e simulação de dados reais de operação de um sistema de reatores CSTR.

A modelagem e simulação do processo é uma forma econômica de análise, pois evita a realização de paradas de equipamentos para testar diferentes condições de operação, proporcionando uma economia de tempo e dinheiro.

## REFERÊNCIAS

BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. **Numerical Analysis**. 9. ed. Boston, Massachusetts: Brooks/Cole, Cengage Learning, 2010;

DIJKSTRA, E. W. **A Discipline of Programming**. Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice Hall, 1976;

FOGLER, H. S. **Elementos de engenharias das reações químicas**; tradução Flávio Faria de Moraes. Rio de Janeiro: LTC, 2008;

KWONG, W. H. **Introdução ao controle de processos químicos com MATLAB**. Série Apontamentos, v.1. São Paulo: EdUFSCar, 2012. 212p;

LEVENSPIEL, O. **Engenharia das reações químicas**. São Paulo: Edgard Blücher Ltda., 2000;

MENDELSON, E.; AYRES Jr., F. **Teoria e problemas de cálculo**. São Paulo: Artmed Editora S.A., 1999;

MOREIRA, I. de S. et al. Seminário de Pós-Graduação em Engenharia Química, 2011, Rio Grande do Sul. **Modelagem e Simulação de um reator de produção de PEAD**. Porto Alegre: UFRGS, 2011;

NUNES, G. C., et al. **Modelagem e controle na produção de petróleo**. São Paulo: Edgard Blücher Ltda., 2010;

PEGDEN, C. D., et al. **Introduction to simulation using SIMAN**. New York: McGraw-Hill, 1990;

RODRIGUES, R. et al. XVI Congresso Brasileiro de Engenharia Química, 2006, Rio Grande do Sul. **Ensino de cinética e cálculo de reatores químicos utilizando o simulador EMSO**. Porto Alegre: UFRGS, 2006;

SILVA, E. M.; CUNHA, J. P. V. S. da. **SCILAB, SCICOS e RLTOOL: softwares livres no ensino de engenharia elétrica**. 2006. Disponível em: <<http://www.lee.eng.uerj.br/~elaine/501.pdf>>. Acesso em: 22 mar. 2013;

SILVA, J. L. **Modelagem e simulação de reatores autoclave para produção de PEBD**. 2012. Dissertação (Mestrado em Engenharia, Programa De Pós-Graduação Em Engenharia Química) (Área de Concentração: Modelagem e Simulação de Processos) - Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012;

SOARES, R. de P. **Simulador EMSO: Curso Introductorio**. 2006. Disponível em: <<http://www.enq.ufrgs.br/alsoc/download/emso/docs/EMSOCursoIntroductorio3pg.pdf>>. Acesso em: 15 set. 2013;

STEPHANOPOULOS, G. **Chemical process control: an introduction to theory and practice**. New Jersey: Prentice Hall, 1984.