

Relatório 3: Simulação de modelos adimensionais

Report 3: Model simulation dimensionless

Carina Estela Aquino¹; Iara Solimar da Silva²; Nicole Maia Argondizzi³

¹Aluna do Curso de Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Uberaba, Minas Gerais, Brasil. E-mail: d202011283@uftm.edu.br

²Aluna do Curso de Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Uberaba, Minas Gerais, Brasil. E-mail: d201810717@uftm.edu.br

³Aluna do Curso de Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Uberaba, Minas Gerais, Brasil. E-mail: d201811344@uftm.edu.br

RESUMO: O presente trabalho teve por objetivo resolver um modelo adimensional utilizando as funções *fsolve* e *ode*, com o auxílio do *software scilab*. Foi criado um sistema de equações e realizada a adimensionalização para análise do comportamento dinâmico e estacionário das concentrações dos componentes no reator em função do tempo. A comparação das figuras 3 e 4 indica que as curvas de concentração adimensional e dimensional de A e B versus tempo são basicamente iguais. A adimensionalização não afeta a dinâmica da reação química, apenas a escala das grandezas envolvidas. A figura 5 mostra uma curva exponencial da fração molar de A convertido, que se aproxima de 1 em aproximadamente 4,9 segundos.

Palavras-chave: Reator CSTR, Adimensionalização, Dimensionalização, Modelagem, *Scilab*.

ABSTRACT: The present work aimed to solve an adimensional model using the functions *fsolve* and *ode*, with the assistance of the software *Scilab*. A system of equations was created, and adimensionalization was performed to analyze the dynamic and steady-state behavior of the concentrations of the components in the reactor as a function of time. The comparison of figures 3 and 4 indicates that the adimensional and dimensional concentration curves of A and B versus time are basically the same. Adimensionalization does not affect the dynamics of the chemical reaction, only the scale of the quantities involved. Figure 5 shows an exponential curve of the molar fraction of converted A, which approaches 1 in approximately 4.9 seconds.

Keywords: CSTR Reactor, Adimensionalization, Dimensionalization, Modeling, *Scilab*.

INTRODUÇÃO

Na indústria e engenharia química, o reator batelada com reação simples de ordem n é frequentemente utilizado para fabricar uma grande variedade de produtos, tais como polímeros, compostos orgânicos e inorgânicos, fármacos, entre outros. Esse tipo de reator é particularmente útil para produzir quantidades limitadas de um produto ou quando a produção ocorre em lotes. A ordem da reação pode variar de acordo com a natureza dos reagentes e das condições de reação, o que pode influenciar o comportamento do reator e a eficiência do processo (FOGLER, 2016).

A simulação de modelos dimensionais do reator batelada com reação simples de ordem n é importante para o desenvolvimento de processos químicos mais eficientes e seguros. A simulação permite prever o comportamento do reator em diferentes condições de operação, o que é útil para otimizar o processo e reduzir custos. Além disso, a simulação pode ser utilizada para avaliar a segurança do processo e identificar potenciais riscos, permitindo a implementação de medidas preventivas (MCCABE, 2004)

Um modelo adimensional é uma forma de simplificar e generalizar um modelo matemático, removendo as unidades físicas das variáveis e parâmetros envolvidos. O objetivo é tornar o modelo mais fácil de entender e aplicar a diferentes situações. Nesse sentido, o Scilab é uma ferramenta muito útil para a simulação de modelos adimensionais em sistemas de reatores batelada com reações simples de ordem n . Para simular o modelo adimensional de um sistema de reator batelada com reação simples de ordem n , no Scilab, pode-se utilizar as funções *fsolve* e *ode*. A função *fsolve* é usada para resolver um sistema de equações não lineares, enquanto a função *ode* é usada para integrar um conjunto de equações diferenciais ordinárias.

A utilização de modelos adimensionais e das funções *fsolve* e *ode* do *Scilab* permite a simulação eficiente e precisa do comportamento de um reator batelada com reação simples de ordem n , permitindo a otimização do processo de produção e a redução de custos. Desta forma o presente trabalho tem como objetivo encontrar o estado estacionário do sistema de estudo utilizando a função *fsolve* e analisar o comportamento dinâmico do sistema de estudo utilizando a função *ode*. Além de, propor e resolver um modelo adimensionalizado e comparar com o modelo dimensional.

PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS

O sistema consiste em um reator de batelada simples de ordem n , conforme ilustrado na figura 1. Esse sistema é descrito por um modelo matemático que é representado pelas equações 1 e 2, e a equação 3 é utilizada para calcular a conversão. Dessa forma, o sistema é composto por essas equações que descrevem seu comportamento.

$$\frac{dCA}{dt} = -KC_{A(t)}^n \quad (1)$$

$$\frac{dCB}{dt} = -KC_{A(t)}^n \quad (2)$$

$$XA = \frac{C_{A0} - C_{A(t)}}{C_{A0}} \quad (3)$$

Figura 1 - Reator batelada com reação simples de ordem n.



Fonte: Sousa, 2023.

Os parâmetros, definições e valores do problema estão descritos na figura 2.

Figura 2 - Parâmetros do reator

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
C_{A0}	concentração inicial de A	1,00	mol L^{-1}
k	constante da taxa de reação	1,30	$\text{L}^{n-1} \text{mol}^{n-1} \text{s}^{-1}$
n	ordem da reação	1,00	—
Condições iniciais			
$C_A(0) = C_{A0} \text{ (mol m}^{-3}\text{) e } C_B(0) = 0,00 \text{ (mol m}^{-3}\text{)}$			

Fonte: Sousa, 2023.

As equações de 4 a 12 descrevem o processo de adimensionalização, sendo que as equações 10 e 12 representam o modelo adimensional.

Derivadas:

$$\frac{dC_a}{dt} = -k \cdot C_a \quad (4)$$

$$\frac{dC_b}{dt} = k \cdot C_a \quad (5)$$

Adimensionais:

$$Ca^* = \frac{Ca}{Ca0} \quad (6)$$

$$Cb^* = \frac{Cb}{Ca0} \quad (7)$$

$$Tao = t.k \quad (8)$$

Adimensionalização:

$$Ca0.k.\frac{dCa^*}{dTao} = -k.Ca^*.Ca0 \quad (9)$$

$$\frac{dCa^*}{dTao} = -Ca^* \quad (10)$$

$$Ca0.k.\frac{dCb^*}{dTao} = k.Ca^*.Ca0 \quad (11)$$

$$\frac{dCb^*}{dTao} = Ca^* \quad (12)$$

RESULTADOS E DISCUSSÕES

O código apresenta dois modelos para a cinética de uma reação química, um modelo dimensional e outro adimensional.

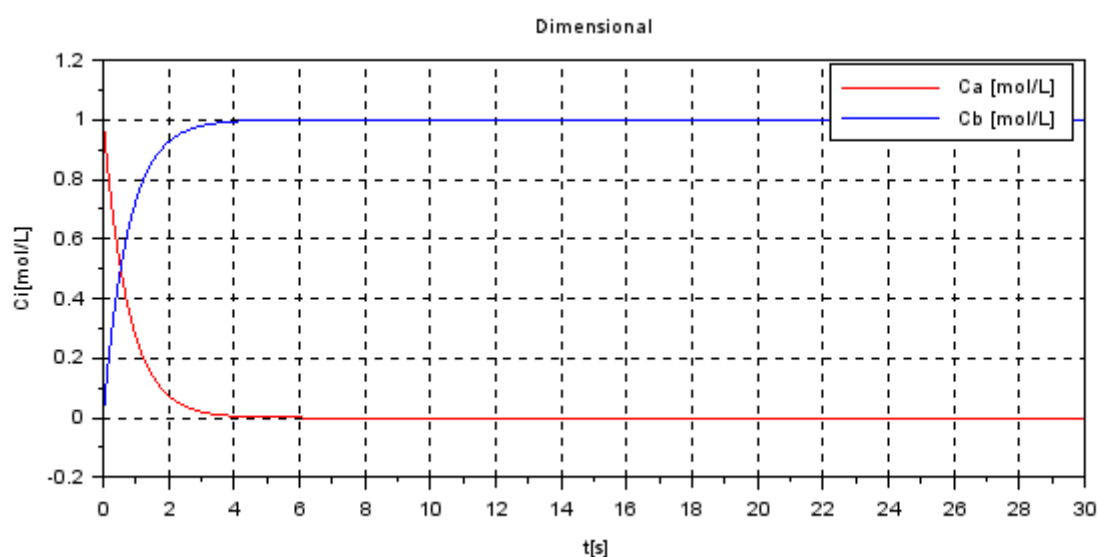
No modelo dimensional, os dados fornecidos foram a concentração inicial dos reagentes ($Ca0$), a constante de velocidade da reação (k), a concentração inicial de A (Cai) e a concentração inicial de B (Cbi). O modelo dimensional foi resolvido numericamente usando a função "ode" do *scilab*, que é uma implementação do método de *Runge-Kutta* de quarta ordem.

A solução foi plotada em gráficos separados para as concentrações de A e B em função do tempo (t) apresentado na figura 3. E para a fração molar de A (xa) em função do tempo (t) apresentado na figura 5.

No modelo adimensional, as mesmas informações são fornecidas, mas as concentrações são adimensionalizadas, isto é, divididas pela concentração inicial de A (C_{ao}). A solução é novamente resolvida numericamente usando a função "ode", mas agora com a equação diferencial adimensionalizada.

A solução foi plotada em gráficos separados para as concentrações adimensionais de A e B em função do tempo adimensional (τ) apresentado na figura 4. E para a fração molar adimensional de A ($x_{a,ad}$) em função do tempo adimensional (τ) apresentado na figura 6.

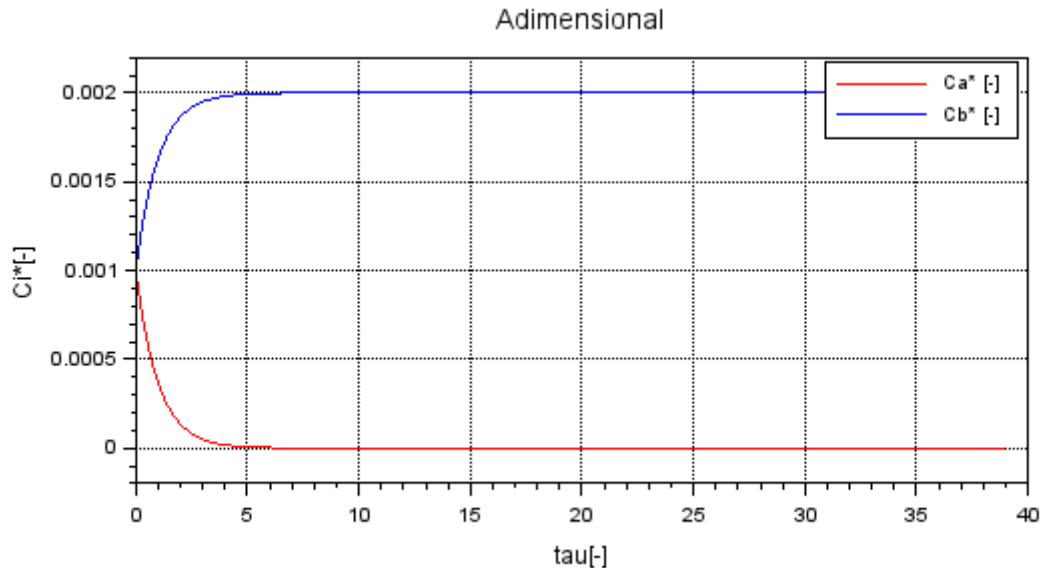
Figura 3 – Variação da concentração no modelo dimensional



Fonte: Dos Autores, 2023.

A figura 3 mostra que a solução estacionária é uma concentração de B igual a C_{ao} e uma concentração de A igual a zero, o que indica que a reação química está completa. Além disso, as curvas de concentração de A e B versus tempo mostram uma queda exponencial da concentração de A e um aumento exponencial da concentração de B, o que é esperado para uma reação de primeira ordem. Pelo gráfico, podemos observar que a concentração de A chega em um estado estacionário em torno de 5,1 segundos.

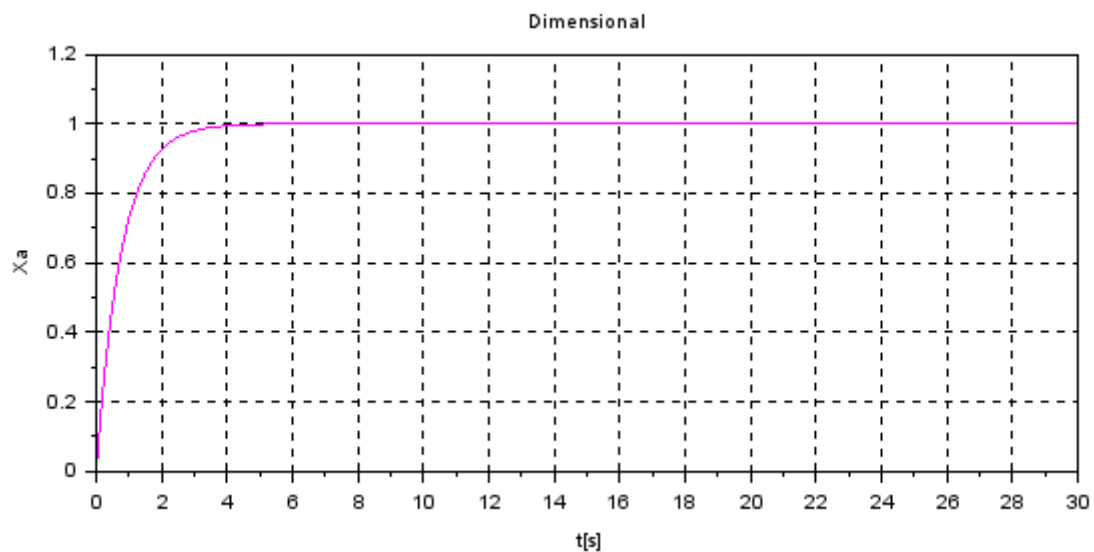
Figura 4 – Variação da concentração no modelo adimensional



Fonte: Dos Autores, 2023.

Comparando as figuras 3 e 4, observa-se que as curvas de concentração adimensional de A e B versus tempo são essencialmente as mesmas que as curvas dimensionais de concentração de A e B versus tempo, exceto pela escala dos eixos. Isso ocorre porque a adimensionalização não altera a dinâmica da reação química em si, apenas a escala das grandezas envolvidas.

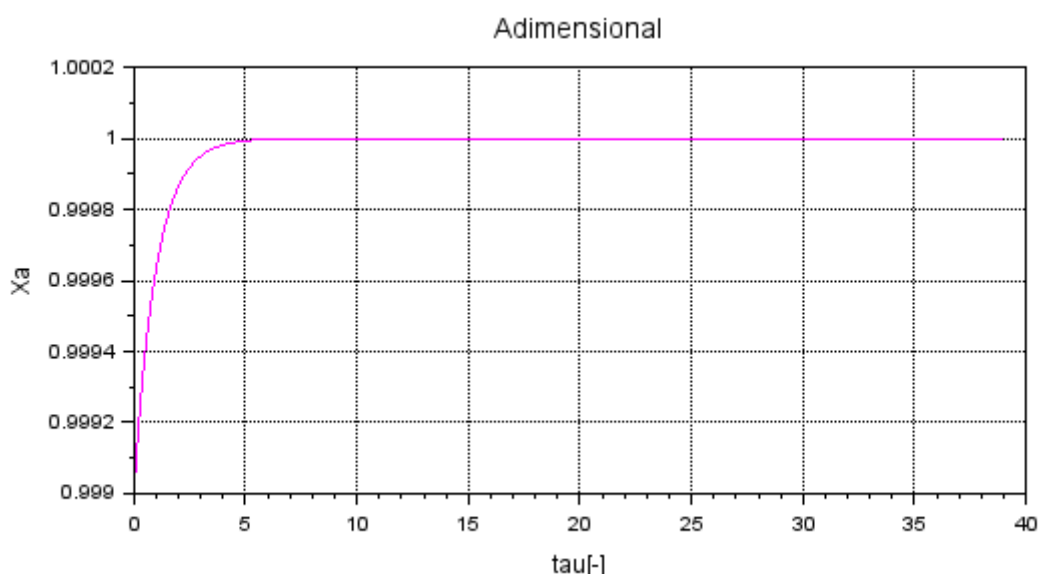
Figura 5 – Conversão no modelo dimensional.



Fonte: Dos Autores, 2023.

No início da reação, a fração molar do reagente A convertido é pequena, mas à medida que o tempo passa, a taxa de consumo do reagente A aumenta e, conseqüentemente, a fração molar do reagente A convertido aumenta mais rapidamente. A figura 5 mostra uma curva exponencial que começa em 0 e se aproxima de 1 à medida que a reação se aproxima da sua conclusão em aproximadamente 4.9 segundos.

Figura 6 – Conversão no modelo adimensional



Fonte: Dos Autores, 2023.

A curva de fração molar adimensional de A versus tempo mostrada na figura 6 é idêntica à curva de fração molar dimensional de A versus tempo mostrada na figura 5. O que demonstra que o processo de adimensionalização foi realizado com eficiência.

CONCLUSÕES

Os resultados mostram que a adimensionalização foi eficiente, pois as curvas de concentração adimensional e dimensional de A e B são essencialmente as mesmas, indicando que a dinâmica da reação não foi alterada. Além disso, a curva de fração molar adimensional de A é idêntica à curva dimensional de A, demonstrando que a fração molar foi adequadamente adimensionalizada. Em resumo, a adimensionalização permitiu uma apresentação mais clara e fácil de interpretar dos resultados da simulação, sem afetar a dinâmica da reação química.

REFERÊNCIAS

FOGLER, H. S. **Elements of chemical reaction engineering**. Prentice Hall, 2016.

MCCABE, W. L., Smith, J. C., & Harriott, P. **Unit operations of chemical engineering** (7th ed.). McGraw-Hill Education, 2004.

SOUSA, Nádia Guimarães. **Simulação de modelos adimensionais**. 22 slides. Disponível em: <https://drive.google.com/file/d/1N-1sjrsfTARB9CToE6w14G5-OLKoRtAd/view>. Acesso em: 17 fev. 2023.

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

Fogler, H. S. (2016). **Elements of Chemical Reaction Engineering** (5th ed.). Prentice Hall.

Froment, G. F., Bischoff, K. B., & De Wilde, J. (2010). **Chemical Reactor Analysis and Design** (3rd ed.). John Wiley & Sons, Inc.

Levenspiel, O. (1999). **Engineering Flow and Heat Exchange** (3rd ed.). John Wiley & Sons, Inc

MENDELSON, E.; AYRES Jr., F. **Cálculo**. 5. Ed. Porto Alegre: Editora Bookman, 2012;

MILLI, B. B.; GRIPA, D. C.; SIMONELLI, G.; ALVES, V.M. **Análise Do Processo De Mistura De Água E Cal Utilizando O Scilab**. ENCICLOPÉDIA BIOSFERA, [S. I.], v. 7, n. 13, 2011. Disponível em: <https://conhecer.org.br/ojs/index.php/biosfera/article/view/4256>. Acesso em: 12 set. 2022.

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

SILVA, Beliza Patrícia da. **Uma percepção dos engenheiros químicos em formação sobre a importância da engenharia de processos assistida por computador**. 2020. Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado em Engenharia Química) - Universidade Federal Da Paraíba, 2020.