

FACULDADES INTEGRADAS DE ARACRUZ
CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA

LENISE BERTELI BISSI
MARIA ANGÉLICA GUEDES MALTA
MARIANA BISI COMETTI
RAYANE BOTAN

**SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE REATORES UTILIZANDO SOFTWARES
LIVRES**

ARACRUZ
2017

LENISE BERTELI BISSI
MARIA ANGÉLICA GUEDES MALTA
MARIANA BISI COMETTI
RAYANE BOTAN

**SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE REATORES UTILIZANDO SOFTWARES
LIVRES**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
coordenadoria de Engenharia Química das
Faculdades Integradas de Aracruz, como requisito
parcial para obtenção do grau de Bacharel em
Engenharia Química.

Orientador(a): Prof. Ph.D. Marcos Roberto Teixeira
Halasz.

ARACRUZ
2017

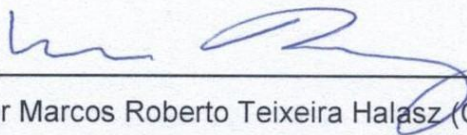
FICHA CATALOGRÁFICA

Autorização: Portaria MEC nº 2598 de 06/12/2001
Renovação de Reconhecimento: Portaria nº 304 de 02/08/2011

LENISE BERTELI BISSI
MARIA ANGÉLICA GUEDES MALTA
MARIANA BISI COMETTI
RAYANE BOTAN

**SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE REATORES UTILIZANDO
SOFTWARES LIVRES**

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO **APROVADO** PELA COMISSÃO
EXAMINADORA:



Professor Marcos Roberto Teixeira Halasz (Orientador)



Professor Vital Pereira Batista Júnior (Avaliador)



Eng. Químico Marcos Eduardo Koppershmidt (Convidado Externo)

Aracruz
2017

EPÍGRAFE

O mundo vai girando
Cada vez mais veloz
A gente espera do mundo
E o mundo espera de nós
Um pouco mais de paciência

(Lenine. Paciência. Na Pressão. **Recife**. Ariola Records, 1999.)

RESUMO

A modelagem e simulação de processos é um mecanismo de ampla utilização nas indústrias, uma vez que possibilita prever e avaliar o comportamento e influência de parâmetros operacionais bem como modelar e simular equipamentos, sem interferir no sistema operante. Deste modo, tal área tem crescido muito nos últimos anos, sendo útil desde a pesquisa e concepção até à operação de uma planta. Neste trabalho simula-se o esquema reacional de Van de Vusse em um reator CSTR, através do uso dos softwares livres - EMSO e GNU Octave – e, posteriormente, avalia-se o comportamento do sistema diante das modificações realizadas a fim de propor melhores condições de operação. São simulados o estado estacionário, como meio de validação de dados, e o estado dinâmico. Para efeitos de demonstração dos resultados, três importantes parâmetros foram selecionados para serem manipulados: a vazão de entrada de ciclopentadieno no reator, a temperatura da manta de troca térmica e o volume reacional. O propósito dessas variações no sistema, é favorecer a reação de formação do produto de interesse - ciclopentenol -, utilizado em análises laboratoriais de vacinas e proteínas, frente aos demais compostos originados pelas reações secundárias. Os resultados obtidos variando-se os parâmetros supracitados permitiram concluir que quanto maior a vazão alimentada no reator, maior será a formação do produto de interesse. Em contrapartida, a produção de ciclopentenol é favorecida quando a temperatura da jaqueta de troca térmica mantêm-se em valores intermediários. Nos testes envolvendo o volume reacional, avaliaram-se reatores de volume menor e maior, em busca de uma vazão e temperatura ótima para favorecer a reação principal. Tendo em vista os resultados obtidos, constata-se o bom desempenho dos softwares para fins industriais e acadêmicos em estudos de simulação e modelagem computacional.

Palavras-chave: Simulação. Van de Vusse. Octave. Reatores químicos. Otimização.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Reator tipo batelada	26
Figura 2 - Reator Tubular de Escoamento Uniforme	26
Figura 3 - Reator CSTR	27
Figura 4 - Etapas seguidas na metodologia do trabalho	28
Figura 5 - Representação esquemática do estudo de caso	30
Figura 6 - Comportamento do sistema - Sistema de Unidades MKS	38
Figura 7 - Comportamento do sistema - Sistema de Unidades MKS	39
Figura 8 - Comportamento do reator sob condições operacionais reais – Octave	40
Figura 9 – Comportamento em diversas vazões de alimentação - Octave	41
Figura 10 - Comportamento em diversas vazões de alimentação - EMSO	41
Figura 11 - Vazão mínima para otimização da produção de ciclopentenol	42
Figura 12 - Comportamento em diversas temperaturas de jaqueta - Octave	43
Figura 13 - Comportamento em diversas temperaturas de jaqueta - EMSO	44
Figura 14 – Tk mínima para otimização da produção de ciclopentenol - Octave	45
Figura 15 - Comportamento da reação: novas condições de Tk e F	46
Figura 16 - Influência da Temperatura da Jaqueta em um reator de $V=2L$ - Octave	47
Figura 17 - Comportamento utilizando um reator de $V=2L$ e $T_k=124^{\circ}C$ – octave	48
Figura 18 - Comportamento da reação utilizando um reator de volume $V=50 L$	49
Figura 19 - Comportamento do sistema utilizando reator de $V=50L$ e $T_k=45^{\circ}C$.	50

LISTA DE SÍMBOLOS E SIGLAS

r_A : velocidade de reação;
 t : tempo;
 τ : tempo espacial;
 V_R : volume total do reator;
 T : temperatura do reator;
 F_0 : vazão volumétrica da corrente de entrada;
 F : vazão volumétrica da corrente de saída;
 C_{a0} : concentração inicial do reagente A;
 C_a : concentração do reagente A;
 k_1 : constante cinética da reação de formação do ciclopentenol;
 k_2 : constante cinética da reação de formação do ciclopentanodiol;
 k_3 : constante cinética da reação de formação do dicitopentadieno;
 C_{b0} : concentração inicial do reagente B;
 C_b : concentração do reagente B;
 C_{c0} : concentração inicial do reagente C;
 C_c : concentração do reagente C;
 C_{d0} : concentração inicial do reagente D;
 C_d : concentração do reagente D;
 T_0 : temperatura inicial do reator;
 K_w : constante cinética da jaqueta de troca térmica;
 A_R : área do reator;
 ρ : massa específica;
 C_p : capacidade calorífica;
 T_k : temperatura da jaqueta de troca térmica;
 ΔH^{AB} : energia de ativação da reação de formação do ciclopentenol;
 ΔH^{BC} : energia de ativação da reação de formação do ciclopentanodiol;
 ΔH^{AD} : energia de ativação da reação de formação do dicitopentadieno;
 m_k : massa específica da jaqueta de troca térmica;
 C_{pk} : capacidade calorífica da jaqueta de troca térmica;
 k_i : constante cinética da reação i;

i : índice representativo do comportamento do sistema;

k_0 : constante cinética a uma condição conhecida;

E_i : energia de ativação da reação i ;

R : constante dos gases;

ALSOC – Free Environment for Simulation, Optimization, and Process Control;

BR – Batch Reactor;

CSTR – Constant Flow Stirred Tank Reactor;

DAE – Equações Algébrico-diferenciais;

EDO – Equação Diferencial Ordinária;

EML – EMSO Model Library;

EMSO – Environment for Modelling, Simulation and Optimization;

ERQ – Engenharia das Reações Químicas;

GNU – Gnu's Not Unix;

OOP – Object-Oriented Programming;

PFR – Plug Flow Reactor;

s.n. – Sine Nomine;

S.l. – Sine Loco;

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	12
2 OBJETIVOS	14
2.1 OBJETIVO GERAL	14
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	14
3 REFERENCIAL TEÓRICO	15
3.1 MODELAGEM E SIMULAÇÃO	15
3.1.1 Conceitos básicos de modelagem e simulação	15
3.1.2 Classificação dos modelos da simulação	17
3.1.3 Modelagem e simulação na engenharia	20
3.1.4 Otimização de processos	21
3.2 ENGENHARIA DAS REAÇÕES QUÍMICAS	23
3.2.1 Reator em batelada	25
3.2.2 Reator tubular pistonado	26
3.2.3 Reator CSTR	27
4 METODOLOGIA	28
4.1 DETERMINAÇÃO DO PROBLEMA	28
4.2 MODELAGEM MATEMÁTICA	29
4.3 IMPLEMENTAÇÃO DO ALGORITMO	31
4.3.1 GNU Octave	31
4.3.2 EMSO	32
4.4 VALIDAÇÃO DO MODELO	33
4.5 ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DO SISTEMA	34
4.5.1 Influência da vazão de alimentação	34
4.5.2 Influência da temperatura da jaqueta	35
4.6 AVALIAÇÃO DE NOVA CONDIÇÃO DE PROCESSO	35
5 RESULTADOS	37
5.1 VALIDAÇÃO DO MODELO	37
5.2 ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DO SISTEMA	39
5.2.1 Influência da vazão de alimentação	40
5.2.2 Influência da temperatura da jaqueta	42
5.3 AVALIAÇÃO DE NOVA CONDIÇÃO DE PROCESSO	46

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS	51
7 REFERÊNCIAS	52
APÊNDICE A	58
APÊNDICE B	59

1 INTRODUÇÃO

Com a globalização, as empresas tiveram de se adaptar a um cenário de ampla concorrência, sendo necessário redefinir as estratégias, a fim de aumentar a produtividade e oferecer produtos com preço e qualidade que até então não eram ofertados aos consumidores. Assim, técnicas e procedimentos passaram a ser adotados para a obtenção de processos mais econômicos, gerando uma melhor e maior produção, bem como análises de segurança e riscos e diminuição da emissão de produtos químicos (BELHOT; FIGUEREDO; MALAVÉ, 2001; SECCHI, 1995).

Uma destas técnicas é a modelagem para simulação, que consiste na experimentação de um sistema real por meio de um modelo detalhado, possibilitando verificar o desempenho do processo, frente às mudanças nas suas variáveis. A simulação permite melhor compreensão do processo em estudo, auxilia na solução de problemas e na tomada de decisões, sem que o processo seja interrompido (BATEMAN et al., 2013; BELHOT; FIGUEREDO; MALAVÉ, 2001; apud FRIGERI; BIANCHI; BAKES, 2007; MELLO, 2007; PIMENTEL, 2015).

Para a Engenharia Química programas capazes de simular processos são fundamentais, pois a análise da influência das variáveis contribui para aumentar a eficiência dos mesmos, na redução dos gastos e para garantir um melhor aproveitamento dos recursos. Os recursos computacionais podem ser utilizados de várias formas no cotidiano de um engenheiro químico, envolvendo desde atividades simples até as mais complexas, como o projeto de uma planta industrial ou a simulação de um determinado processo (ZOCRATTO et al., 2011).

Um exemplo seria o processo envolvendo a reação de Van de Vusse em um reator CSTR, o qual tem sido amplamente explorados na área de programação, por se tratar de um esquema reacional complexo, sendo portanto, alvo interessante para a otimização (TORRES; FARIA; BRAGA, 2016).

Atualmente, encontra-se disponível uma gama de softwares capazes de contribuir nas atividades dos engenheiros químicos, contudo, esses programas ainda não são propagados no ensino de maneira eficaz (ZOCRATTO et al., 2011).

Diante do exposto, o presente trabalho tem como objetivo utilizar softwares livres – EMSO e GNU Octave – para a simulação de reatores químicos sujeitos a condições operacionais reais, avaliando o comportamento dos mesmos frente à variação dos parâmetros do processo e comparando os resultados obtidos, a fim de mensurar qual cenário ocasionará melhor desempenho para o processo em questão.

Busca-se evidenciar os benefícios de se associar o conhecimento teórico à simulação, contribuindo não só para sua formação acadêmica como também para os desafios profissionais do engenheiro.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Utilizar softwares de simulação para prever e otimizar o comportamento de reatores químicos.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Utilizar os softwares para simular o comportamento do sistema previamente definido;
- Comparar os dados obtidos com os dados da literatura a fim de validá-los;
- Avaliar o desempenho dos reatores, otimizando-os frente à variação dos parâmetros do processo;
- Comparar os resultados obtidos nos diferentes softwares utilizados.

3 REFERENCIAL TEÓRICO

Neste capítulo é realizada uma breve revisão sobre modelagem e simulação de processos, onde são apresentados conceitos envolvidos no assunto e classificações dos modelos de simulação. Aborda-se também a importância do uso da simulação na engenharia química, especificamente na resolução de equações de desempenho de reatores, apresentando alguns estudos envolvendo modelagem e simulação dos mesmos. Por fim, são expostos conceitos sobre a engenharia das reações químicas.

3.1 MODELAGEM E SIMULAÇÃO

O interesse industrial em técnicas computacionais de modelagem e simulação tem aumentado satisfatoriamente (SECCHI, 1995). Isso se deve à competitividade crescente entre as empresas, que buscam progressivamente melhorar seu desempenho nos processos produtivos e produtos, redução de riscos ocupacionais, bem como dos impactos ambientais (PIMENTEL, 2015; SECCHI, 1995).

Diante do exposto, o domínio das ferramentas de controle está se tornando cada vez mais fundamental e onipresente no processo de formação de um engenheiro; diversificando áreas de atuação, incorporando complexidades variadas e aplicabilidade crescente (FERREIRA et al., 2006).

A modelagem para simulação vem sendo empregada em várias áreas, como na saúde, transportes, construção civil, manufaturas, organizações públicas, sistemas de computação, entre outras (MIYAGI, 2006).

3.1.1 Conceitos básicos de modelagem e simulação

Sistema é um conjunto de componentes que possuem uma relação de funcionalidade. Pode ser afetado por perturbações externas a ele. Logo, para uma modelagem, é preciso definir a fronteira do sistema, que dependerá do objetivo da análise. A situação do sistema, isto é, o valor das variáveis num dado instante de tempo, é definido como estado (MELLO, 2007; MIYAGI, 2006).

Os modelos são representações matemáticas, cujo conjunto de equações deve descrever o sistema real (OGATA, 2005; TORRES; FARIA; BRAGA, 2016). Um mesmo sistema pode ser reproduzido por inúmeros modelos matemáticos, com variados níveis de fidelidade (OGATA, 2005; TORRES; FARIA; BRAGA, 2016). Entretanto, independente dos recursos disponíveis, é impossível que um modelo represente a realidade plenamente (ROSSONI, 2006).

Assim, para a construção de um modelo matemático, são utilizadas aproximações a fim de reduzir a complexidade do mesmo. Porém as aproximações devem ser feitas com cautela para que o modelo não forneça resultados duvidosos (FERREIRA, 2006).

Uma vez obtido o modelo matemático, este deve ser reescrito para uma linguagem que possa ser “entendida” por um computador e que seja capaz de fornecer uma estrutura organizada do sistema. A execução de um modelo chama-se simulação (MELLO, 2007; MIYAGI, 2006).

A simulação permite conhecer a resposta do sistema frente a distintas perturbações, antes mesmo de sua implantação, bem como realizar testes inúmeras vezes e solucionar problemas sem que o processo real seja interrompido, reduzindo custos e tempo (FREITAS, 2001 apud PIMENTEL, 2015; MELLO, 2007; NAYLOR et al., 1971 apud FRIGERI; BIANCHI; BAKES, 2007; SILVA, 2016).

A modelagem para simulação possui alguns mecanismos internos. São eles: componentes, parâmetros e variáveis. Componente é a parte do sistema que se deseja avaliar. O componente varia de acordo com o sistema (MELLO, 2007).

Parâmetros são características do sistema controladas pelo usuário e que tem um valor constante em toda a simulação, alterando somente se outras situações forem avaliadas (MEDEIROS, MOTEVECH, ALMEIDA FILHO, 2005).

Utilizam-se as variáveis para relacionar um componente a outro, desta forma, elas assumem valores distintos conforme o desempenho do sistema, quando simulado.

Podem ser classificadas como exógenas, de estado e endógenas (MELLO, 2007; MEDEIROS; MOTEVECH; ALMEIDA FILHO, 2005).

Conceitua-se como variáveis exógenas, ou variáveis manipuladas, aquelas cujo valor afeta o sistema, mas não são influenciados por ele, ou seja, são as variáveis de entrada do modelo (MEDEIROS; MOTEVECH; ALMEIDA FILHO, 2005; MELLO, 2007; OGATA, 2005). É nessa variável que se intervém a fim de manter a variável endógena no valor desejado (OGATA, 2005).

As variáveis endógenas têm o valor definido pelo sistema, ou seja, são as variáveis de saída. São obtidas a partir da relação das variáveis exógenas e de estado de acordo com cada sistema (MEDEIROS; MOTEVECH; ALMEIDA FILHO, 2005; MELLO, 2007). São também chamadas de variáveis controladas: seu valor é medido e então, a partir da variável manipulada são feitas correções a fim de se obter um resultado desejado (OGATA, 2005). A esse resultado dá-se o nome de setpoint (TORRES; FARIA; BRAGA, 2016).

Por outro lado, as variáveis de estado descrevem o estado do sistema simulado ou de cada componente, no início, final ou no decorrer de um determinado intervalo de tempo. Se a execução de uma simulação for interrompida, esta, só será retomada a partir desse ponto se os valores de todas as variáveis de estado no momento da interrupção forem conhecidos (MELLO, 2007).

3.1.2 Classificação dos modelos da simulação

Os modelos para simulação são classificados segundo o tipo de equações que são utilizadas na sua construção (GARCIA, 2005).

Dentre as classificações destacam-se os modelos estáticos e dinâmicos. Os modelos estáticos são aqueles que representam o sistema em um determinado momento, ou seja, o tempo é invariável. Logo, resultam em sistemas de equações algébricas. Já nos modelos dinâmicos (ou transientes), as variáveis mudam seu

valor ao longo do tempo, resultando em sistemas de equações diferenciais ordinárias (PIMENTEL, 2015; SILVA, 2016; TORRES; FARIA; BRAGA, 2016).

A simulação dinâmica corresponde à maioria dos modelos operacionais. Subdivide-se em outras classificações, onde se destaca quanto à linearidade. Um modelo é dito linear quando a saída depende proporcionalmente da entrada e de perturbações que possam existir (GARCIA, 2005).

Trabalhar com modelos lineares é mais simples que os modelos não-lineares. Isso se deve pelo fato de esses modelos satisfazerem o Princípio da Superposição, ou seja, o efeito das variáveis de entrada pode ser avaliado tratando cada entrada individualmente e posteriormente somando os resultados (GARCIA, 2005; OGATA, 2005).

Entretanto, a maioria das situações reais não é descrita precisamente por modelos lineares, em virtude da complexidade do processo, tamanho da região avaliada e nível de descrição desejado (TORRES; FARIA; BRAGA, 2016).

A não linearidade de uma equação pode apresentar-se de vários modos, dificultando descrevê-las em equações matemáticas (GARCIA, 2005; LATHI, 2007). Assim, utiliza-se linearizar equações não-lineares, considerando condições operacionais estacionárias. Com isso é possível representar a resposta do sistema com eficiência em alguma região próxima ao momento estacionário (GARCIA, 2005; TORRES; FARIA; BRAGA, 2016).

A simulação dinâmica pode ser classificada ainda como determinística, no qual as variáveis não são aleatórias, isto é, os valores das variáveis são conhecidos, fornecendo com precisão o comportamento do sistema; e estocásticas, onde ao menos uma das variáveis respeita a aleatoriedade ou uma função de probabilidade, fornecendo uma resposta estimada do desempenho do sistema (MEDEIROS; MOTEVECH; ALMEIDA FILHO, 2005; MELLO, 2007; PIMENTEL, 2015; SILVA, 2016).

O modelo estocástico, por sua vez, divide-se em contínua e discreta. Na simulação contínua, as variáveis de estado mudam o seu valor continuamente com o tempo de simulação. Na simulação discreta, variáveis de estado se mantêm estáticas por um período de tempo, até terem seu valor modificado pela ocorrência de algum evento (MEDEIROS; MOTEVECH; ALMEIDA FILHO, 2005; MELLO, 2007; PIMENTEL, 2015; SILVA, 2016).

Um modelo pode ser classificado também como misto quando algumas variáveis de estado têm os seus valores alterados de maneira contínua e outras de maneira discreta (MELLO, 2007; SILVA, 2016).

A classificação da modelagem pode se apresentar de outras formas, que podem tornar a modelagem mais completa, logo com resolução mais difícil (TORRES; FARIA; BRAGA, 2016).

A construção dos modelos dinâmicos dá-se essencialmente por duas categorias: modelagem caixa branca ou modelagem conceitual e modelagem caixa preta ou modelagem empírica. Na modelagem caixa branca a estruturação do modelo é baseada nas leis e propriedades físicas e químicas, sendo necessário conhecer o processo e definir os parâmetros através dos dados operacionais do mesmo. Essa modelagem muitas vezes é considerada inviável, graças ao tempo requerido para tal e disponibilidade de parâmetros (AGUIRRE, 2007; GARCIA, 2005).

Na modelagem caixa preta, contudo, não é necessário conhecer o sistema previamente, pois a modelagem utiliza os dados de entrada e de saída do processo, sendo normalmente mais fáceis de serem obtidos. Não relacionam estrutura e parâmetros com as características físicas reais, por isso, nas otimizações não são estabelecidas limitações (AGUIRRE, 2007).

Modelagem de sistemas que mesclam as características das modelagens caixa branca e caixa preta, são denominadas modelagem caixa cinza (AGUIRRE, 2007).

3.1.3 Modelagem e simulação na engenharia

Na maioria dos centros de ensino, a transmissão do conhecimento é baseada em aspectos conceituais, na memorização e repetição de mecanismos para a resolução de problemas (BELHOT; FIGUEREDO; MALAVÉ, 2001).

A competitividade entre as empresas, fez com que as mesmas tivessem que se adaptar a essa nova condição, passando a exigir soluções inéditas, criativas e rápidas. Para atender às novas exigências do mercado, faz-se necessário que engenheiros estejam aptos a superar de forma eficiente os desafios. Dessa forma, o ensino teve de passar por mudanças em sua estrutura, de forma a enviar para o mercado de trabalho, profissionais capazes de contextualizar os conceitos aprendidos (BELHOT; FIGUEREDO; MALAVÉ, 2001; GREPINO; RODRIGUES, 2015).

O avanço da tecnologia, a facilidade de acesso à mesma, e a necessidade de realização de estudos avançados e detalhados envolvendo problemas matemáticos complexos, com eficiência e confiabilidade, fizeram com que a simulação passasse a ser uma ferramenta útil, pois com ela é possível prever conflitos referentes ao sistema em questão, bem como maneiras de minimizá-los e otimizar o processo (BELHOT; FIGUEREDO; MALAVÉ, 2001; GALANTE, 2012; GREPINO, RODRIGUES, 2015; SCHULTZ, 2014).

Na engenharia química, por exemplo, a utilização da simulação é útil em todas as etapas de um processo: desde a determinação dos parâmetros e mecanismos cinéticos, passando pelo projeto, até a operação da planta; promovendo um controle mais efetivo e exato, graças a maior quantidade de informações que podem ser adicionadas à modelagem (GARCIA, 2005; SECCHI, 1995; ZOCCRATTO et al., 2011).

A simulação ainda permite ao engenheiro químico a realização de experimentos, sem modificá-lo. Com isso, podem-se testar diversas ideias e diferentes cenários, sem a interferência do meio real, além de possibilitar que o operador escolha o

contexto que traga maiores vantagens ao processo (FREITAS; 2001 apud PIMENTEL, 2015; MELLO, 2007; NAYLOR et al., 1971 apud FRIGERI; BIANCHI; BAKES, 2007; SILVA, 2016). Em consequência disso, tem-se redução nos custos: em sistemas já instalados, embora sejam necessários equipamentos, o custo com simulação se mantém inferior quando comparado à execução de testes no sistema real; em se tratando de novos projetos, reduz-se o custo devido ao menor tempo gasto na implantação (FREITAS, 2001 apud PIMENTEL, 2015; MELLO, 2007; NAYLOR et al., 1971 apud FRIGERI; BIANCHI; BAKES, 2007; SILVA, 2016). Como vantagem, pode-se citar ainda, a visualização dos resultados através de gráficos e tabelas, que são bastante utilizados pelos engenheiros por facilitar a análise (DIAS e CORREA, 1998 apud FRIGERI; BIANCHI; BAKES, 2007; MIYAGI, 2006).

Outra aplicação importante do uso de softwares para simulação na engenharia química, e que basicamente descreve a função de um engenheiro químico, é a otimização de processos (TORRES; FARIA; BRAGA, 2016).

3.1.4 Otimização de processos

Grande parte dos processos químicos industriais não são projetados para fornecer rendimento máximo. Por essa razão, as empresas buscam definir uma associação de valores para os parâmetros com o intuito de maximizar a produtividade (PRAXADES; TEIXEIRA JR.; RAVAGNANI, 2008).

A otimização de processos é uma ferramenta aliada à simulação, que consiste na utilização de diferentes valores para as variáveis controláveis e/ou geração de novas, que serão novamente testadas, a fim de se chegar a uma combinação que forneça o resultado desejado, que na maioria das vezes é o rendimento ótimo para o processo (MEDEIROS; MOTEVECH; ALMEIDA FILHO, 2005; TORGA; MONTEVECH; PINHO, 2006).

Diversos parâmetros podem ser avaliados para a otimização, como por exemplo, dimensões e condições de operação. Ela também pode ser realizada em qualquer equipamento de uma planta industrial, dos quais destaca-se o reator químico, onde

ocorre a conversão da matéria-prima em produto, sendo então parte insubstituível do processo (HILL e ROOT, 1937; PRAXADES; TEIXEIRA JR.; RAVAGNANI, 2008). Todavia, um reator tende a ser modelado por equações não-lineares, tornando-se mais complexo (PRAXADES; TEIXEIRA JR.; RAVAGNANI, 2008; TORRES; FARIA; BRAGA, 2016). Devido sua importância nas plantas químicas, encontram-se diversos estudos envolvendo-o, conforme apresentado no Quadro 1.

Quadro 1 - Estudos sobre simulação de reatores químicos.

Autor	Ano	Título	Abordagem
GALANTE, Raquel Manozzo	2012	Modelagem e Simulação de um Reator Tubular Contínuo para a Produção de Biodiesel	Simulação do escoamento reacional em reator tubular contínuo para a produção de biodiesel metílico por meio do método de elementos finitos em plataforma multifísica, COMSOL - versão 3.5.
GONÇALVES, Bruno Thomaz de Aquino	2015	Modelagem, Simulação e Estimação de Parâmetros de um Reator de Hidrodessulfurização	Simulação e estimação de parâmetros de processo objetivando à aplicação em sistemas de controle ou planejamento de paradas na unidade, a partir de um modelo previamente desenvolvido. Utilizada linguagem Python com auxílio da plataforma Jmodelica.org.
SAWAKI, R.V. et al.	2015	Modelagem e Simulação do Desempenho de Reatores de Fluxo Contínuo e em Batelada no Tratamento de efluente Têxtil Utilizando o Software Livre Python	Modelagem e simulação da eficiência de reatores de fluxo contínuo para o tratamento de efluentes têxteis frente a eficiência de um reator batelada tanto em escala de laboratório quanto em escala industrial utilizando o software livre iPython Notebook.

Fonte: Acervo do autor.

Além dos estudos mencionados, destacam-se aqueles realizados por Klatt e Engell (1998) e por Torres; Faria; Braga (2016), os quais foram utilizados como referência para este estudo.

Klatt e Engell (1998) retrataram um problema real em seu estudo: desenvolveram um modelo matemático para representar o esquema reacional de Van de Vusse em um reator tipo CSTR resfriado por jaqueta de troca térmica. Os autores apresentam informações como dados da cinética de reação e dimensionamento do reator. O modelo matemático obtido foi um sistema dinâmico não-linear.

Torres; Faria; Braga (2016), apresentaram o mesmo esquema proposto por Klatt e Engell (1998). O sistema foi modelado, simulado nos softwares EMSO e Scilab, e otimizado no estado estacionário. Os autores também simularam e avaliaram o controle ótimo do sistema dinâmico para um e dois setpoints. Para validação do modelo, Torres; Faria; Braga (2016) utilizaram o artigo de autoria de Klatt e Engell (1998).

3.2 ENGENHARIA DAS REAÇÕES QUÍMICAS

O estudo da engenharia das reações químicas (ERQ) combina o estudo da cinética química com os reatores nos quais as reações ocorrem. A cinética química e o projeto de reator são partes fundamentais da produção de quase todos os produtos químicos industriais. A seleção de um sistema de reação que opera da maneira mais segura e eficiente pode ser a chave para o sucesso ou o fracasso econômico de uma instalação química (FOGLER, 2014).

Define-se reação química o processo de transformações de materiais, através do rompimento de ligações entre átomos e moléculas. Diversos indicativos demonstram a ocorrência de uma reação química, entre eles: emissão de luzes, alterações de coloração, absorção ou liberação de calor, liberação de gases ou formação de sólidos. (CAMPOS, 2001).

A velocidade de reação (r_A) indica o quão rapidamente um dado número de mols de uma espécie química está sendo consumido, ou seja, a taxa com a qual as reações químicas ocorrem; as reações podem, portanto, ser classificadas de acordo com a velocidade com a qual se processam: lentas, intermediárias ou instantâneas (TITONI, 2008). A velocidade de reação pode ser afetada por inúmeros fatores - estado físico do reagente, concentrações, pressão, presença de catalisador e temperatura -, sendo necessário conhecê-los para viabilizar o controle da velocidade e aumentar a eficiência dos processos (RAMPON, 2016; TITONI, 2008).

Em um reator químico, geralmente ocorrem reações múltiplas, isto é, reações que necessitam de mais do que uma equação de taxa (LEVENSPIEL, 2000). Essas reações podem ser classificadas em quatro tipos: em série, em paralelo, complexas e independentes. Esses tipos de reações podem ocorrer simultaneamente ou não, dificultando a definição de regras para o projeto (FOGLER, 2014; LEVENSPIEL, 2000).

Segundo Fogler (2014), quando ocorrem reações múltiplas, é necessário definir o produto desejado e avaliar qual será o produto formado em maior quantidade, o que é possível através da seletividade, que consiste na razão de formação do produto desejado e formação do produto indesejado.

Essa razão auxilia na seleção do reator e das condições de operação, como por exemplo, a presença ou ausência de inertes, condições de temperatura e pressão, a fim de obter um maior rendimento do produto de interesse (FOGLER, 2014).

No caso das reações consecutivas, a variável mais importante a ser considerada é o tempo de reação, que corresponde ao tempo real (t) no caso de reatores em batelada e para reatores de escoamento contínuo é representado pelo tempo espacial (τ). O tempo espacial corresponde ao tempo necessário para que um volume de alimentação (F_0) seja processado, considerando um volume de controle (V), sob condições de entrada especificadas (LEVENSPIEL, 2000) (Equação 1).

$$\tau = \frac{V}{F_0}$$

(1)

Existem três modelos básicos de reatores utilizados para avaliar a variação dos parâmetros do processo de reações homogêneas: reator tanque agitado contínuo (CSTR), reator de fluxo em pistão (PFR) e o reator em batelada (BR) os quais terão suas equações de desempenho desenvolvidas adiante (FOGLER, 2014; LEVENSPIEL, 2000; PORTAL LABORATÓRIOS VIRTUAIS DE PROCESSOS QUÍMICOS, 2017).

3.2.1 Reator em batelada

Um reator do tipo batelada (Figura 1) geralmente é aplicável para reações em fase líquida que exigem produções em pequena escala. Pode alcançar altas conversões, pois os reagentes podem ser deixados em seu interior por períodos maiores, tendo como desvantagem, porém, o alto custo de operação referente à manutenção do equipamento (FOGLER, 2014; HILL e ROOT, 1937). Segundo Levenspiel (2000), os reagentes são inicialmente adicionados a um tanque, dentro do qual são misturados e reagem entre si durante um período determinado. Ao fim do período reacional o produto é descarregado, e outro ciclo se inicia.

Um reator do tipo batelada não possui entrada ou saída de correntes durante sua operação, e portanto, é considerado um reator descontínuo, no qual a composição dos elementos varia com o tempo. No entanto, em condições ideais, considera-se que a composição dentro do reator seja uniforme durante todo o tempo (FOGLER, 2014).

Figura 1 - Reator tipo batelada



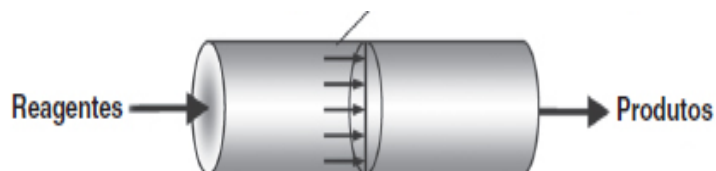
Fonte: FOGLER, 2014

3.2.2 Reator tubular pistonado

O reator tubular pistonado, também reconhecido por PFR opera em regime estacionário e geralmente é empregado para abrigar reações gasosas (Figura 2) (FOGLER, 2014).

Os elementos se movimentam ao longo do comprimento do reator, de forma que sua velocidade radial é constante ao longo do tempo; isto significa dizer que, como a velocidade é função da concentração dos reagentes, esta também é constante naquele determinado elemento de volume (HILL e ROOT, 1937; PORTAL DOS LABORATÓRIOS VIRTUAIS DE PROCESSOS QUÍMICOS, 2017). Pode-se considerar, diante disso, que o tempo de residência é o mesmo para todas as partículas de fluido (LEVENSPIEL, 2000).

Figura 2 - Reator Tubular de Escoamento Uniforme

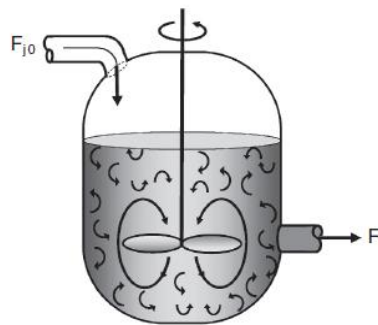


Fonte: FOGLER, 2014.

3.2.3 Reator CSTR

O reator de mistura perfeita (Figura 3), semelhante ao PFR, é um sistema permanente. A temperatura e a concentração dos elementos não variam com o tempo ou posição dentro do reator, uma vez que é idealizado como mistura perfeita. É um dos reatores mais comumente empregados no processamento industrial, sendo empregado principalmente para reações em fase líquida (FOGLER, 2014).

Figura 3 - Reator CSTR

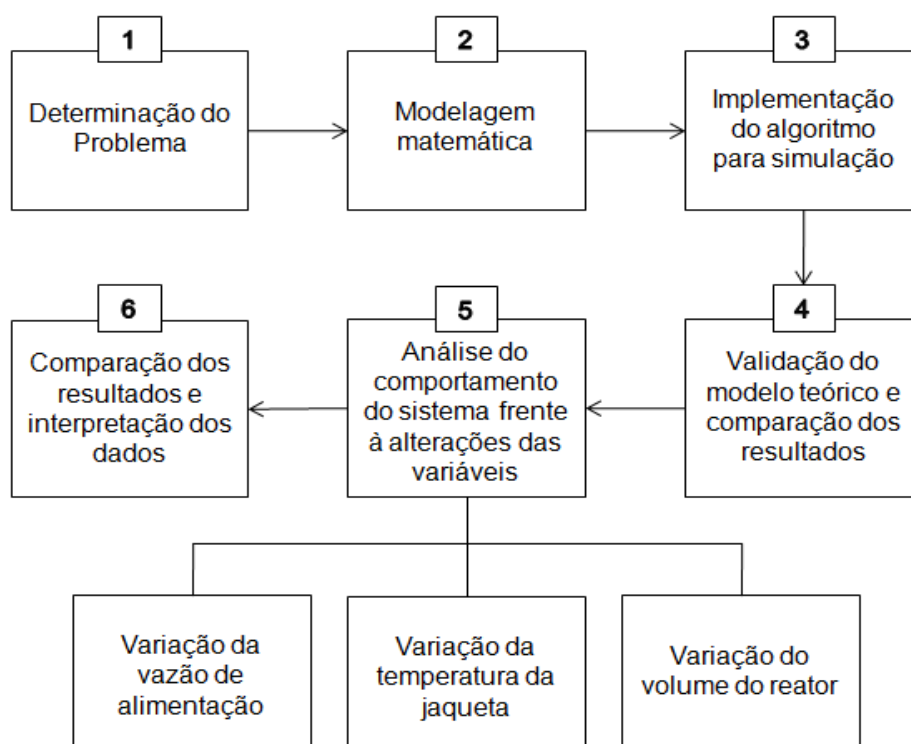


Fonte: FOGLER, 2014.

4 METODOLOGIA

O presente trabalho se propõe a simular o comportamento de um reator real avaliando possíveis modificações capazes de torná-lo ainda mais eficiente. Para tanto, seguiram-se as etapas descritas na Figura 4.

Figura 4 - Etapas seguidas na metodologia do trabalho



Fonte: Acervo do Autor.

4.1 DETERMINAÇÃO DO PROBLEMA

A partir do levantamento bibliográfico realizado (Figura 5), optou-se por estudar o comportamento do esquema reacional de Van de Vusse em um reator do tipo CSTR com uma jaqueta de resfriamento, previamente modelado por Klatt e Engell (1998).

Trata-se de um sistema de reações múltiplas, cujos produtos são utilizados como reagentes em análises laboratoriais de vacinas e proteínas (TORRES; FARIA; BRAGA, 2016). Na reação principal (Reação 1a) o ciclopentenol (composto B) é

produzido a partir do ciclopentadieno (composto A) sendo considerado o produto de interesse. O dicitlopentadieno (composto D), bem como o ciclopentenodiol (composto C) são produzidos devido uma reação secundária indesejada (Reação 1b) e uma reação consecutiva (Reação 1a) respectivamente, sendo considerados subprodutos da reação (CHEN; KREMLING; ALLGÖWER, 1995. apud TORRES; FARIA; BRAGA, 2016; KLATT e ENGELL, 1998).

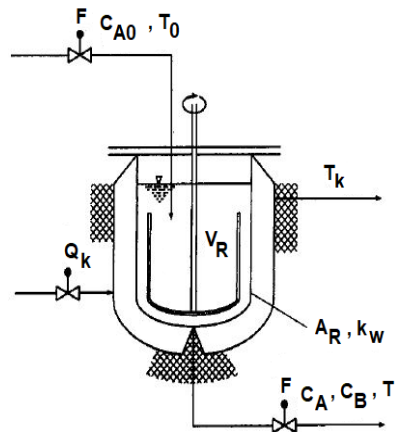


A reação é realizada em um reator CSTR, visto sua não linearidade frente à reações múltiplas, além do mais, sabe-se que nesta situação são beneficiadas as reações de ordens inferiores, neste caso, a reação de formação de B (Reação 1a) - de ordem cinética 1, em detrimento à reação paralela de formação de D (Reação 1b) - de ordem cinética 2 (FOGLER, 2014).

4.2 MODELAGEM MATEMÁTICA

A exemplo de Klatt e Engell (1998), considerou-se o esquema reacional de Van de Vusse ocorrendo em um reator de mistura perfeita resfriado por uma jaqueta de troca térmica (Figura 5), no qual a temperatura é variável com o tempo e as reações são elementares.

Figura 5 - Representação esquemática do estudo de caso



Fonte: (KLATT e ENGELL, 1998). Adaptado.

Aplicando o balanço material ao reator e às substâncias envolvidas na reação, bem como o balanço energético, determinou-se o sistema de equações diferenciais que representam a dinâmica do sistema (Equações 2 - 7). Para tal, assumiu-se que as propriedades físico-químicas da mistura e a entalpia reacional não variassem com a temperatura do meio.

$$\frac{dV_R}{dt} = F_0 - F$$

(2)

$$\frac{dC_a}{dt} = \frac{F}{V} (C_{a0} - C_a) - k_1 C_a - k_3 C_a^2$$

(3)

$$\frac{dC_b}{dt} = \frac{F}{V} C_{b0} + k_1 C_a - k_2 C_b$$

(4)

$$\frac{dC_c}{dt} = \frac{F}{V} C_{c0} - k_2 C_b$$

(5)

$$\frac{dC_d}{dt} = \frac{F}{V} C_{d0} - k_3 C_a^2$$

(6)

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V} (T_0 - T) + \frac{k_w A_R}{\rho C_p V} (T_k - T) - \frac{k_1 C_a \Delta H_R^{AB} + k_2 C_b \Delta H_R^{BC} + k_3 C_a^2 \Delta H_R^{AD}}{\rho C_p}$$

(7)

As constantes reacionais (k_1 , k_2 , k_3) dependem da temperatura reacional conforme previsto pela Lei de Arrhenius (Equação 8).

$$k_i(T) = k_{0_i} \exp\left(\frac{-E_{a_i}}{R(T+273,15)}\right)$$

(8)

4.3 IMPLEMENTAÇÃO DO ALGORITMO

Para representar o comportamento do sistema, optaram-se por dois softwares de simulação amplamente utilizados na literatura, que obtiveram êxito na simulação do funcionamento de sistemas semelhantes. EMSO e GNU Octave foram as opções preferidas, pois além de atenderem os critérios supracitados, são gratuitos e possuem linguagem de programação simples e de alto nível concomitantemente.

4.3.1 GNU Octave

O programa é dotado de diversas ferramentas numéricas, que permitem a construção de figuras de forma simples, sendo ideal para resolução de problemas numéricos lineares e não lineares, além de problemas comuns de álgebra linear, integração e solução de sistema de equações diferenciais. Apresenta linguagem de programação compatível com o Matlab (TEIXEIRA, 2010).

Por ser um programa livre, grande quantidade de pessoas contribuem com novos comandos que são incorporados às versões em fase de teste, os quais ficam disponíveis no site do GNU Octave, juntamente com o relato de quaisquer tipos de problemas (TEIXEIRA, 2005).

O software possui uma interface baseada em linha de comando, onde os parâmetros e equações são introduzidos no sistema. Desta forma, a fim de implementar um

programa que representasse com fidelidade o estudo de caso em questão, utilizaram-se os parâmetros e condições de processo inicialmente avaliados por Klatt e Engell (1998) (Tabela 1), bem como o sistema de equações apresentado no tópico 4.2.

Tabela 1 - Parâmetros e Condições Iniciais Utilizadas nas Simulações Matemáticas

Parâmetro	Valor	Unidade
k_1	$1,287e^{12}$	h^{-1}
k_2	$1,287e^{12}$	h^{-1}
k_3	$9,043e^9$	$l. mol. (h^{-1})$
E_1	9758,3	K
E_2	9758,3	K
E_3	8560	K
V	0,01	m^3
A_R	0,215	m^2
C_p	3,01	$kJ. (kg. mol)^{-1}$
ρ	0,9342	$kg. (l)^{-1}$
h_1	4,2	$kJ. (mol)^{-1}$
h_2	-11	$kJ. (mol)^{-1}$
h_3	-41,85	$kJ. (mol)^{-1}$
k_w	4032	$kJ. (h. m^2. K)^{-1}$
C_{A0}	5,10	$mol. (l)^{-1}$
C_{B0}	0	$mol. (l)^{-1}$
C_{C0}	0	$mol. (l)^{-1}$
C_{D0}	0	$mol. (l)^{-1}$
F_{vol}	0,1883	$m^3. (h)^{-1}$
T_{in}	403,15	K

Fonte: TORRES; FARIA; BRAGA (2016). Adaptado.

4.3.2 EMSO

O simulador EMSO foi elaborado em 2011 com parceria entre universidades e empresas petroquímicas nacionais como parte de um projeto de Mestrado. Trata-se de um software não livre, distribuído sob a licença ALSOC para fins educacionais e

não lucrativos, conquistando bastante espaço tanto nas universidades como em indústrias (HOTTES, 2015; RODRIGUES, 2011).

Consiste num ambiente que permite a modelagem matemática de processos complexos em regime estacionário ou transiente através da seleção e conexão de modelos (blocos), ou seja, possui linguagem de programação orientada a objetos (OOP). Além disso, permite a criação de novos modelos a partir da edição de outros já existentes ou a utilização de uma linguagem própria do simulador a partir do EMSO Model Library (EML), que por sua vez dispõe de modelos de equipamentos industriais pré-definidos (HOTTES, 2015).

Utiliza uma linguagem de modelagem, que inclui dois níveis: um baseado em equações e o outro em componentes. O programa é totalmente escrito na linguagem C++, não gerando arquivos intermediários ou etapa de compilação, já que os modelos são convertidos em sistemas de equações na memória. O software possibilita simulações em tempo real e de mais de um fluxograma por vez (HOTTES, 2015).

A realização do cálculo é sempre precedida por uma análise de consistência, que fornece parâmetros como número de variáveis, de equações, graus de liberdade, condições iniciais, entre outros. Tais dados são usados na resolução de sistemas de equações algébrico-diferenciais (DAE), capaz de apontar se houve falha na programação e assim determinar se o programa é consistente e pode ser rodado (HOTTES, 2015).

Semelhante ao que foi executado no GNU Octave, para representação do sistema reacional de Van de Vusse, utilizaram-se os dados da Tabela 2 e o sistema de equações apresentado no tópico 4. Cabe ressaltar que, para possibilitar melhor visualização dos resultados, realizou-se a transformação das unidades de medida dos parâmetros em questão, uma vez que o sistema demonstrou maior precisão utilizando o sistema de unidades empregado MKS.

4.4 VALIDAÇÃO DO MODELO

A fim de certificar-se de que o código implementado corresponde fielmente ao comportamento do sistema estudado, bem como para estimar as condições estacionárias a serem utilizadas na simulação do estado dinâmico do sistema, é necessário a representação do estado estacionário do processo.

Considerando que em estado estacionário as diferenciais em relação ao tempo são nulas, aplicou-se um comando pré-existente na biblioteca do GNU Octave, capaz de solucionar através de métodos numéricos o sistema de equações (Equação 2 -8) e determinar as concentrações dos produtos e reagentes bem como a temperatura do reator. Feito isso, fez-se necessário uma comparação entre os dados obtidos através da simulação e aqueles obtidos por Klatt e Engell (1998) em seu estudo.

O EMSO, por sua vez, possui uma função própria, que informa ao programa a necessidade de solucionar o sistema em condição estacionária.

4.5 ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DO SISTEMA

Uma vez validado o modelo e o código computacional, foi possível iniciar a análise do sistema, por meio da simulação em estado dinâmico.

Para a análise do sistema através do simulador GNU Octave, utilizou-se um comando específico do software, capaz de solucionar Equação Diferencial Ordinária (EDO) de quarta e quinta ordem, através do método numérico de Runge-Kutta, que fornece uma precisão na casa de 10^5 .

No caso do simulador EMSO, nenhum comando em especial foi utilizado, uma vez que o software reconhece de forma direta a definição da equação diferencial através da função 'diff ()'.

4.5.1 Influência da vazão de alimentação

Inicialmente realizaram-se diversos testes mantendo as mesmas condições e parâmetros anteriores e variando apenas a vazão de alimentação de

ciclopentadieno. Desta forma, foi possível avaliar a influência da vazão de entrada na concentração do produto B. Esta etapa foi realizada em ambos os simuladores.

Em seguida, exclusivamente no GNU Octave, determinou-se qual seria a vazão de entrada mínima para que o ciclopentenol fosse produzido em concentrações superiores ao composto C (ciclopentanodiol).

4.5.2 Influência da temperatura da jaqueta

De forma semelhante, utilizando ambas as ferramentas computacionais, avaliou-se a influência da temperatura da jaqueta de troca térmica no rendimento reacional do composto B, realizando-se a simulação do sistema para várias temperaturas de jaqueta.

Posteriormente, no GNU Octave, determinou-se qual seria a temperatura de jaqueta ideal a ser aplicada para que o composto B fosse produzido em maiores concentrações quando comparado ao composto C. Para tal, variou-se a temperatura da manta térmica a fim de avaliar a influência exercida pela temperatura no rendimento da reação.

4.6 AVALIAÇÃO DE NOVA CONDIÇÃO DE PROCESSO

De forma adicional, foi considerada a necessidade de se produzir ou projetar o processo em diferentes escalas. Para tanto, foram propostas duas novas configurações de condições de processo, utilizando novos volumes reacionais - um reator 5 vezes maior e outro 5 vezes menor que o atual.

Para ambas as situações foi fixado o volume proposto ($V=2L$ ou $0,002m^{-3}$ e $V=50L$ ou $0.005m^{-3}$), e, considerando a influência positiva do aumento da vazão sob o rendimento do composto B, aplicou-se a vazão máxima permitida para que as respectivas capacidades dos reatores não fossem excedidas, conforme definido por Klatt e Engell (1998) (Equação 9).

$$5 \text{ h}^{-1} \leq \frac{F}{V_R} \leq 35 \text{ h}^{-1}$$

(9)

Respeitadas as condições supracitadas, foram efetuados testes variando a temperatura da jaqueta - e consequentemente a do reator - com intuito de definir a temperatura ideal para que B pudesse ser produzido em quantidade considerável.

5 RESULTADOS

Neste capítulo são expostos e discutidos os resultados obtidos após executados os passos definidos na metodologia. Serão apresentados os dados gerados na simulação do estado estacionário, bem como os resultados obtidos através da simulação do estado dinâmico do sistema com a manipulação das variáveis de interesse, disponibilizando também, uma prévia dos algoritmos implementados no GNU Octave e no EMSO nos Apêndices A e B respectivamente.

5.1 VALIDAÇÃO DO MODELO

Os resultados alcançados durante a simulação do sistema em estado estacionário, bem como os resultados obtidos por Klatt e Engell (1998) estão descritos na Tabela 2.

Tabela 2: Validação dos resultados obtidos em simulação do estado estacionário.

	Ca_e [mol.L ⁻¹]	Cb_e [mol.L ⁻¹]	T_e [°C]
KLATT; ENGELL, 1998	1,235	0,900	134,14
Este trabalho (GNU Octave)	1,235	0,900	134,14
Este trabalho (EMSO)	1,707 ⁽¹⁾	1,050 ⁽¹⁾	124,76 ⁽²⁾

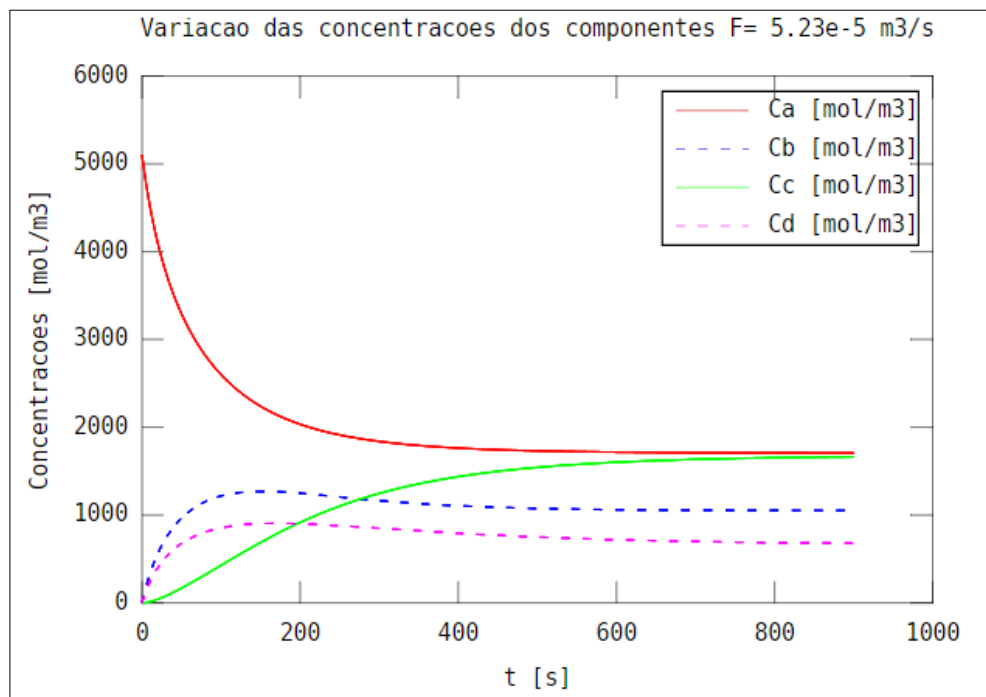
Fonte: Acervo do autor. (1) Valor obtido originalmente na unidade de [mol.m⁻³]; (2) Valor obtido originalmente em [K].

Levando-se em consideração a equivalência entre os resultados obtidos através do simulador GNU Octave e aqueles obtidos por Klatt e Engell (1998), pode-se concluir que a simulação realizada foi capaz de validar a modelagem utilizada.

Em contrapartida, os dados obtidos utilizando o software EMSO, demonstraram um desvio. Investigando a possível causa, chegou-se à conclusão que, a discrepância dos valores ocorreu devido ao arredondamento dos valores durante a conversão de

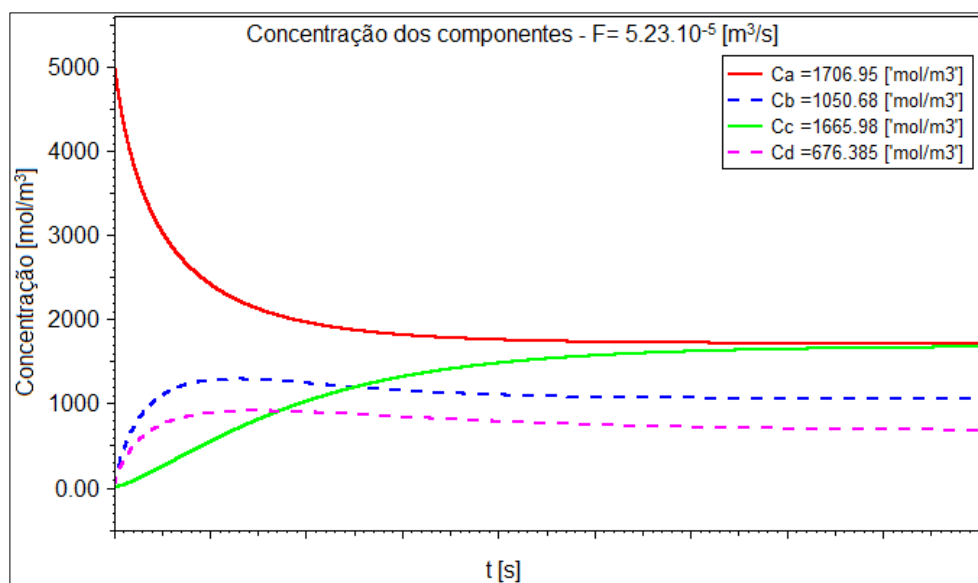
unidades. Evidência disso, é que, empregando os mesmos valores no código previamente implementado e validado no GNU Octave (Figura 6), obtiveram-se valores e comportamento de concentração e temperatura similares (Figura 7). Portanto, pode-se dizer que o modelo, também é capaz de representar o comportamento do sistema com fidelidade desde que utilizados os parâmetros no sistema de unidades MKS.

Figura 6 - Comportamento do sistema - Sistema de Unidades MKS - Octave



Fonte: Acervo do autor

Figura 7 - Comportamento do sistema - Sistema de Unidades MKS -EMSO

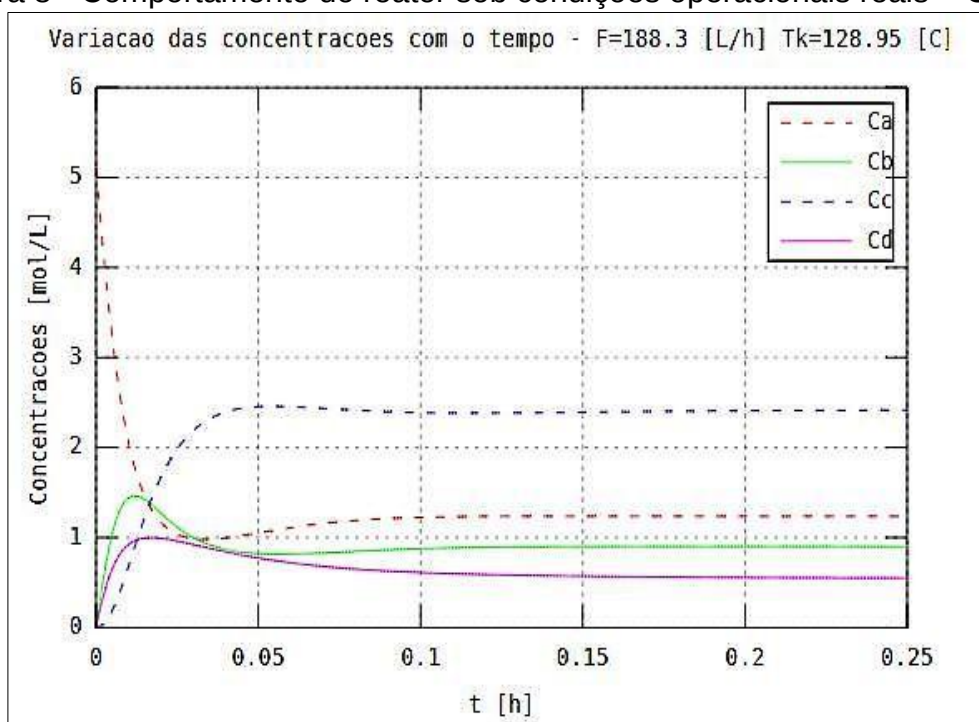


Fonte: Acervo do autor

5.2 ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DO SISTEMA

Analisando o resultado da simulação do sistema em GNU Octave (Figura 8), é possível acompanhar a variação das concentrações dos componentes do sistema reacional através do tempo. Observa-se que, a concentração do reagente A decresce rapidamente atingindo seu valor mínimo por volta de 0,025 h – ou 1,5 min –, tempo após o qual volta a crescer ligeiramente, estabilizando-se transcorridos aproximadamente de 0,1 h – ou 6 min do início da reação. Os compostos B e D chegam às suas respectivas concentrações máximas ainda nos primeiros instantes da reação. O composto C, produzido em maior quantidade no meio reacional, atinge a concentração máxima em torno de 0,05 h, equivalentes a 3 minutos. O momento no qual as curvas passam a apresentar um comportamento linear, representa o início do estado estacionário, instante no qual considera-se que as variáveis não variem mais com o tempo.

Figura 8 - Comportamento do reator sob condições operacionais reais – Octave



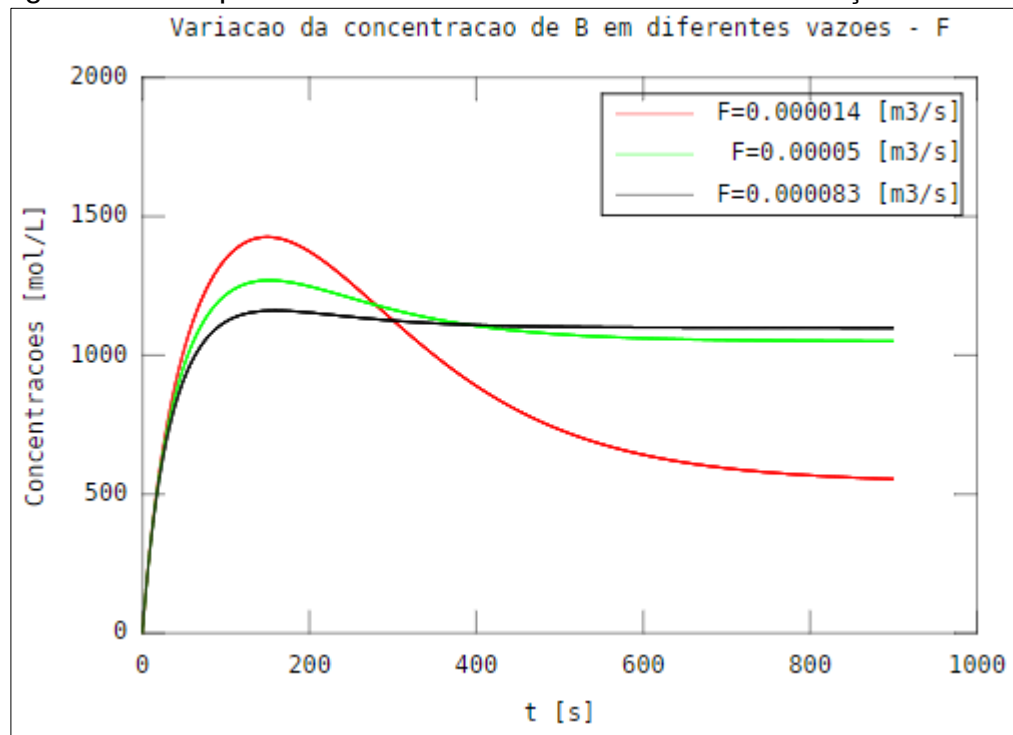
Fonte: Acervo do autor.

O sistema apresenta comportamento semelhante quando analisado através de simulação no software EMSO (Figura 7).

5.2.1 Influência da vazão de alimentação

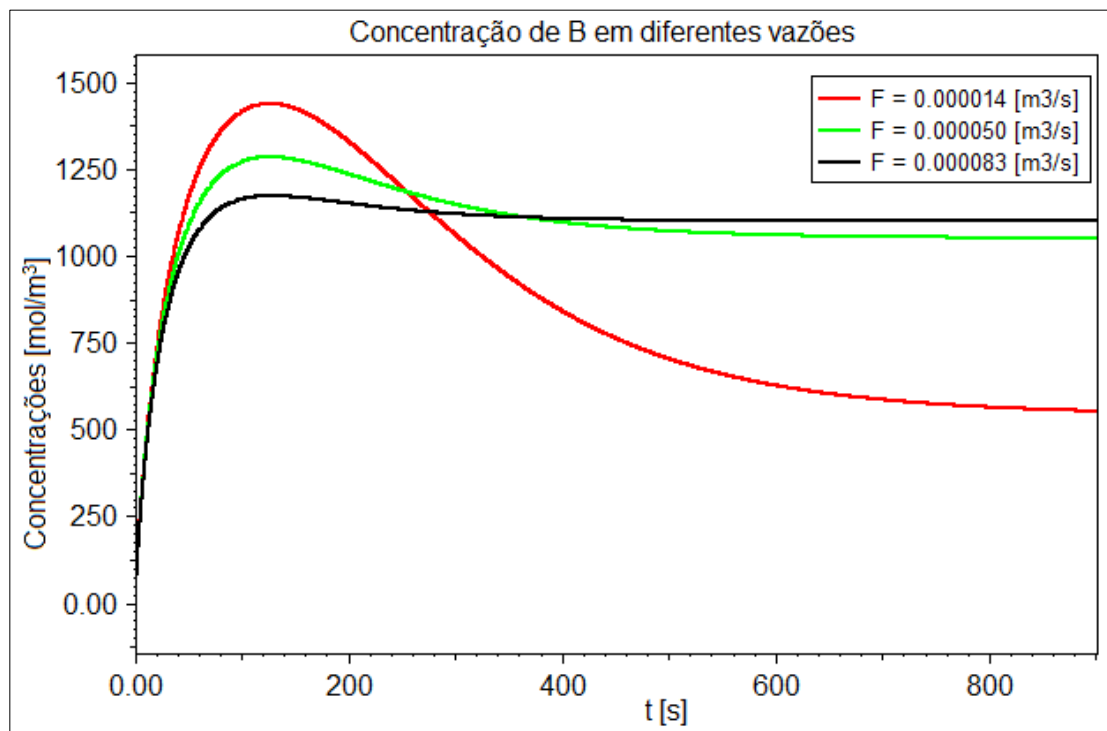
Os testes realizados para avaliar a influência da vazão de alimentação do ciclopentadieno sob a formação do composto de interesse no programa GNU Octave (Figura 9), assim como no EMSO (Figura 10), demonstraram que quanto maior a vazão alimentada no reator, maior será a formação de ciclopentenol.

Figura 9 – Comportamento em diversas vazões de alimentação - Octave



Fonte: Acervo do Autor.

Figura 10 - Comportamento em diversas vazões de alimentação - EMSO

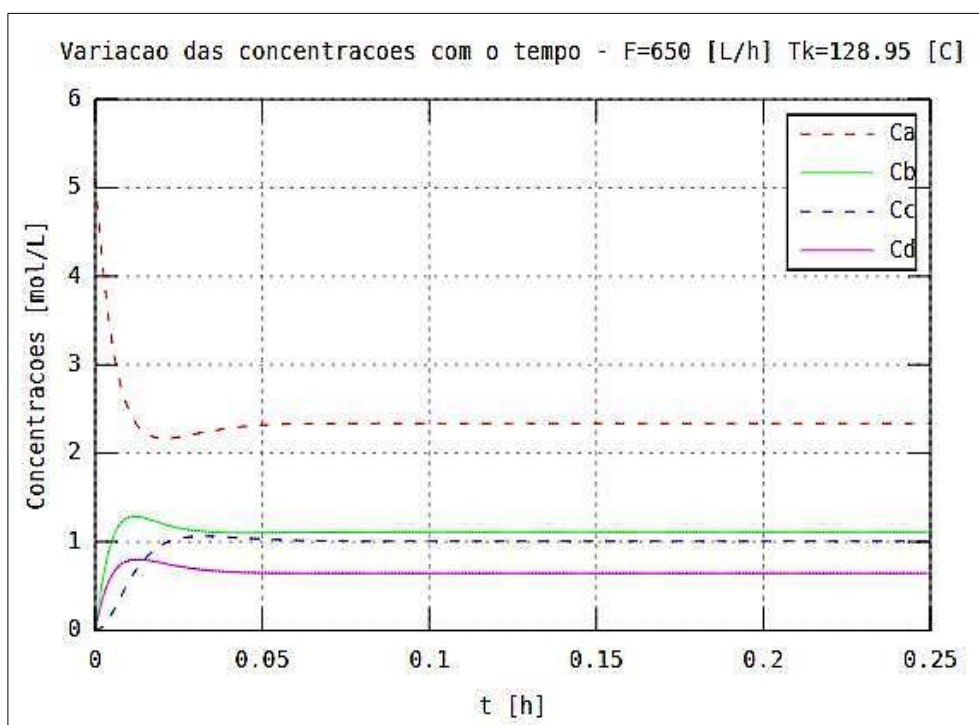


Fonte: Acervo do autor.

Este comportamento é esperado, uma vez que altas vazões de alimentação fornecem baixos valores de tempo espacial, e nesta situação um tempo reacional excessivo não seria interessante, uma vez que o composto B se degradaria formando o produto C.

Os dados obtidos através da simulação dinâmica (Figura 11), sugerem que a vazão mínima necessária para favorecer a formação de composto de interesse frente ao produto C corresponderia a pouco mais do triplo da vazão empregada atualmente - 650 L.h^{-1} . Porém, levando-se em consideração os limites estabelecidos por Klatt e Engell (1998), não é viável que a vazão ultrapasse a taxa de 350 L.h^{-1} para que a capacidade de volume do reator não seja excedida.

Figura 11 - Vazão mínima para otimização da produção de ciclopentenol



Fonte: Acervo do autor.

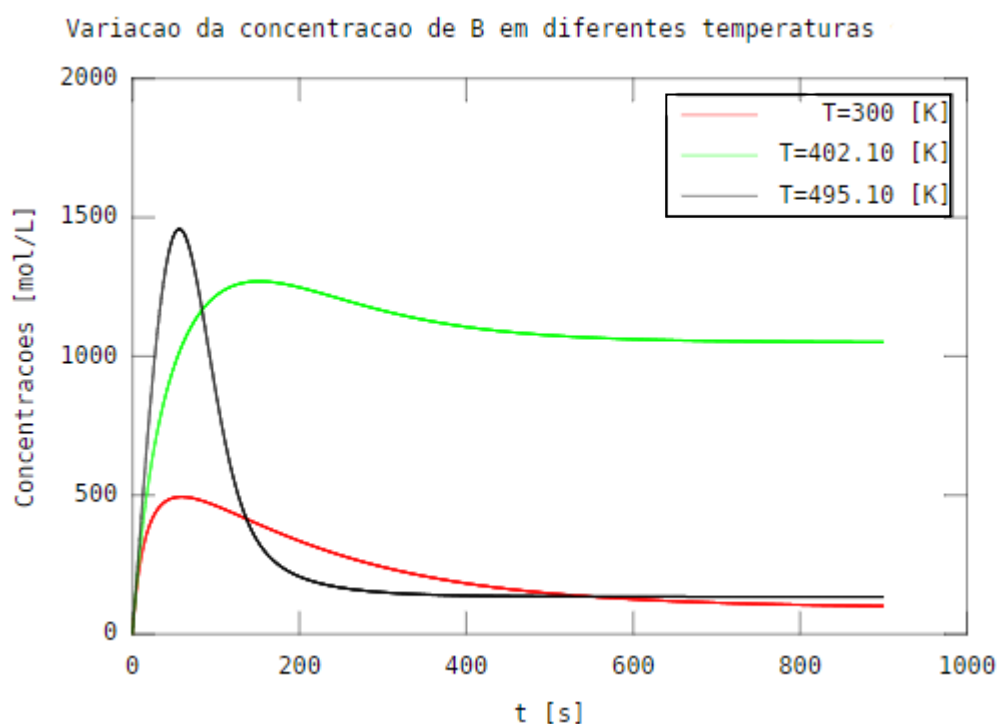
5.2.2 Influência da temperatura da jaqueta

A análise do comportamento do sistema frente à manipulação da temperatura da jaqueta de resfriamento em ambas as ferramentas (Figura 12 e 13) demonstrou que

operar com temperaturas intermediárias favorece a formação do produto de interesse.

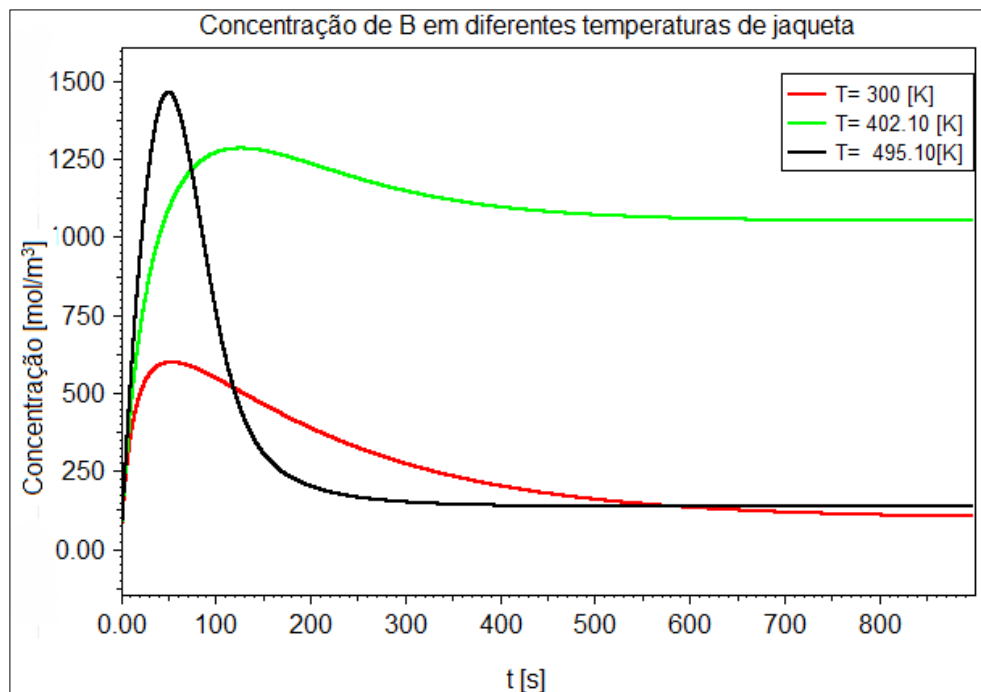
Uma vez que é utilizado um reator do tipo CSTR, no qual a concentração do reagente no interior do reator é idêntica à corrente de saída, anula-se o favorecimento da reação paralela (Reação 1b) devido à ordem reacional, favorecendo assim, a ocorrência da reação consecutiva (Reação 1a). Posto isso, a temperatura passa a ser a variável de maior influência sob o rendimento do processo, tendo em vista que altas temperaturas favorecem as reações de maior energia de ativação – no caso, a reação de formação do ciclopentenol. No entanto, elevando-se bruscamente a temperatura, intensifica-se a velocidade de formação do composto B, que estando em altas concentrações no meio reacional, deslocará o equilíbrio no sentido da formação do subproduto C, explicando a necessidade de se manter um equilíbrio térmico no sistema.

Figura 12 - Comportamento em diversas temperaturas de jaqueta - Octave



Fonte: Acervo do autor.

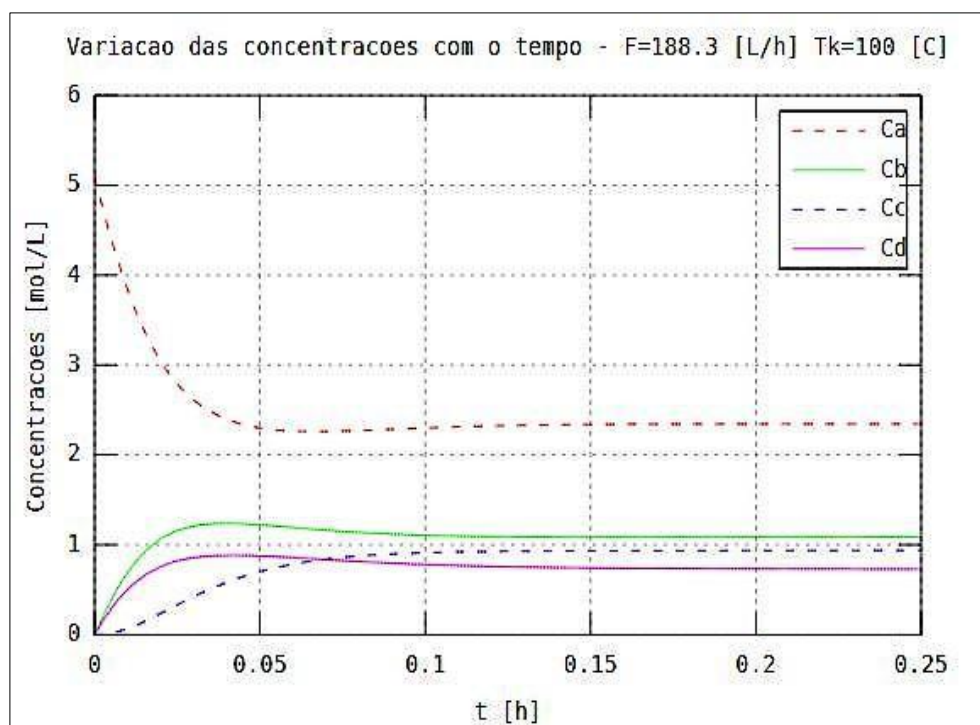
Figura 13 - Comportamento em diversas temperaturas de jaqueta - EMSO



Fonte: Acervo do autor.

Os testes realizados no programa GNU Octave demonstraram que uma temperatura de jaqueta $T_k=100^{\circ}\text{C}$ [373.15 K], já se mostra capaz de produzir B em proporções maiores do que a substância C (Figura 14) nas condições de processo atuais.

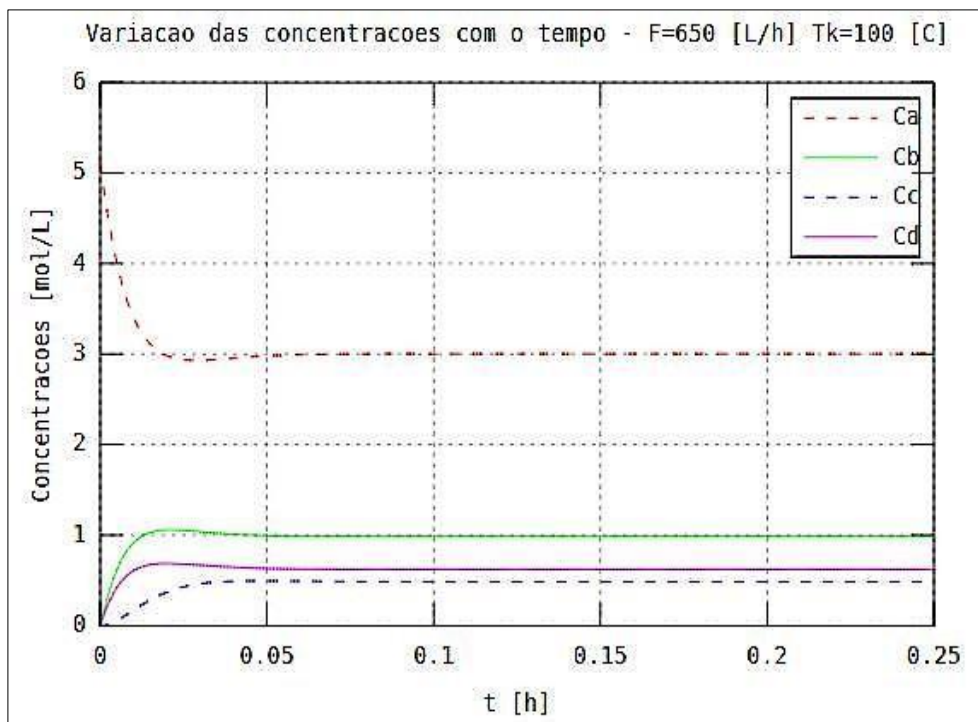
Figura 14 – T_k mínima para otimização da produção de ciclopentenol - Octave



Fonte: Acervo do autor.

Associando as melhores condições de vazão de alimentação e temperatura da jaqueta ideais – respectivamente $650 \text{ L} \cdot \text{h}^{-1}$ e 100°C – verifica-se que a concentração do reagente A no reator é maior (Figura 15) quando comparada às situações em que apenas a vazão ou a temperatura da jaqueta são alteradas. Desta forma, constata-se que alterar as variáveis de forma isolada é mais eficaz.

Figura 15 - Comportamento da reação: novas condições de T_k e F



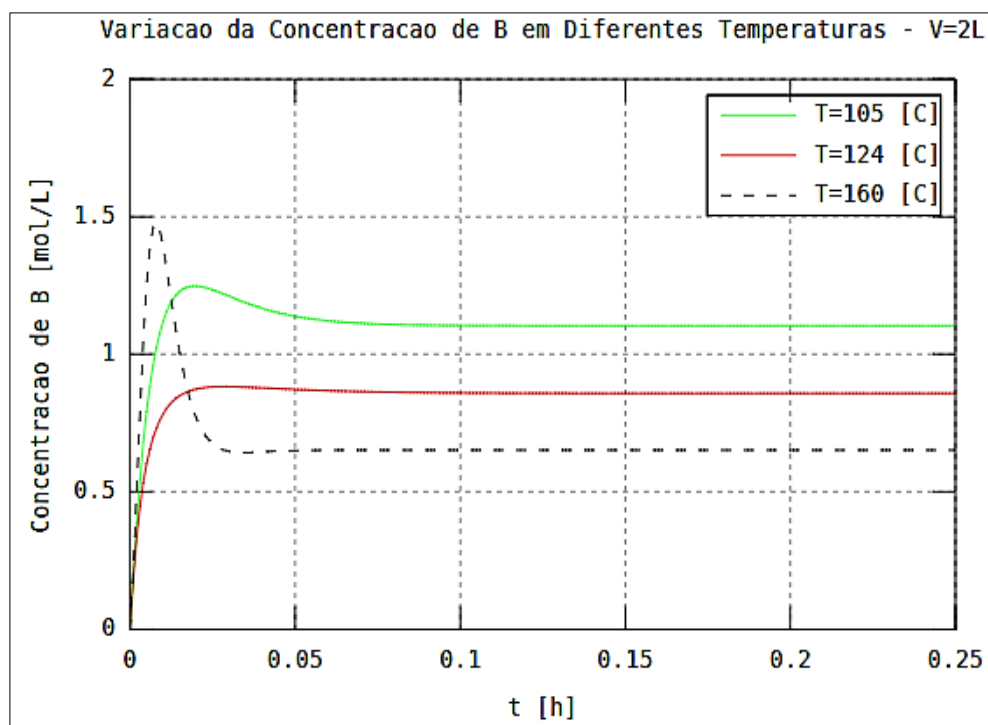
Fonte: Acervo do autor.

5.3 AVALIAÇÃO DE NOVA CONDIÇÃO DE PROCESSO

Como discutido anteriormente, de acordo com os testes realizados no GNU Octave, o reator atual não está habilitado a suportar a vazão mínima requerida para melhorar a conversão do ciclopentenol nas condições de processo atuais, diante disso, foram propostas duas novas condições operacionais, baseadas em escalas diferentes de reatores.

Os testes realizados para o reator de menor proporção ($V=2L$), demonstraram que, utilizando a máxima vazão de alimentação suportada pelo equipamento ($F=70L.h^{-1}$), dentre as temperaturas avaliadas, a menor temperatura ($T_k=105^{\circ}C$) é responsável pelas mais altas concentrações do composto B (Figura 16).

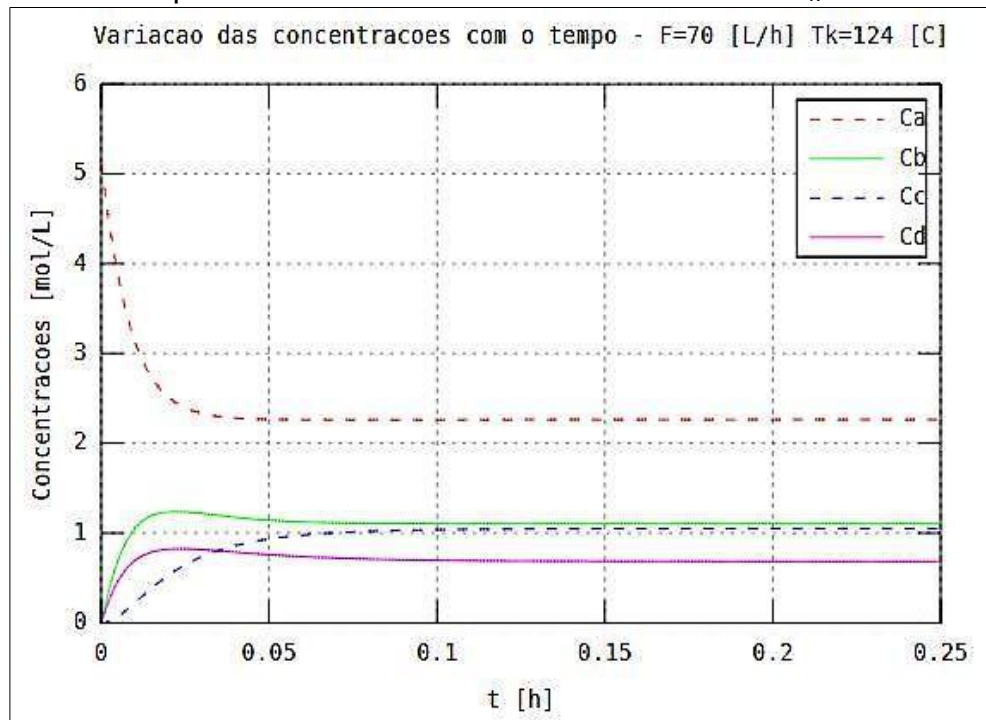
Figura 16 - Influência da Temperatura da Jaqueta em um reator de $V=2L$ - Octave



Fonte: Acervo do autor.

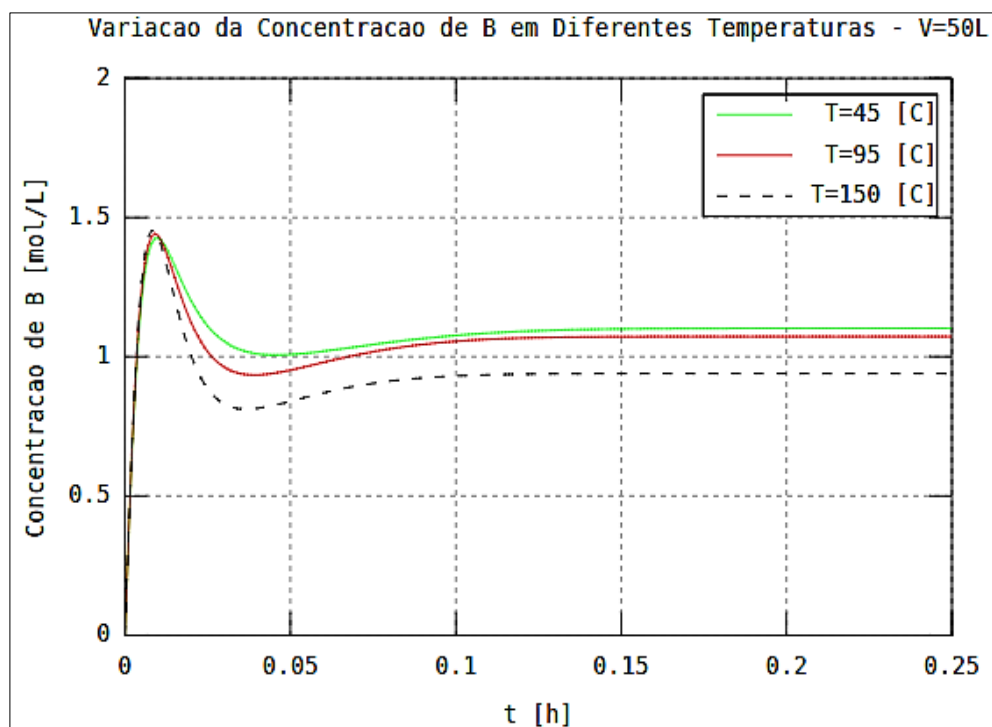
No entanto, realizando-se testes adicionais, verificou-se que utilizar uma temperatura de $T_k=124^{\circ}\text{C}$, próxima da temperatura original ($T_k=128.95^{\circ}\text{C}$), já seria suficiente para que o composto B atingisse concentrações maiores que o composto secundário C, mantendo-se as mesmas condições anteriores (Figura 17).

Figura 17 - Comportamento utilizando um reator de $V=2\text{L}$ e $T_k=124^\circ\text{C}$ – Octave



Fonte: Acervo do autor.

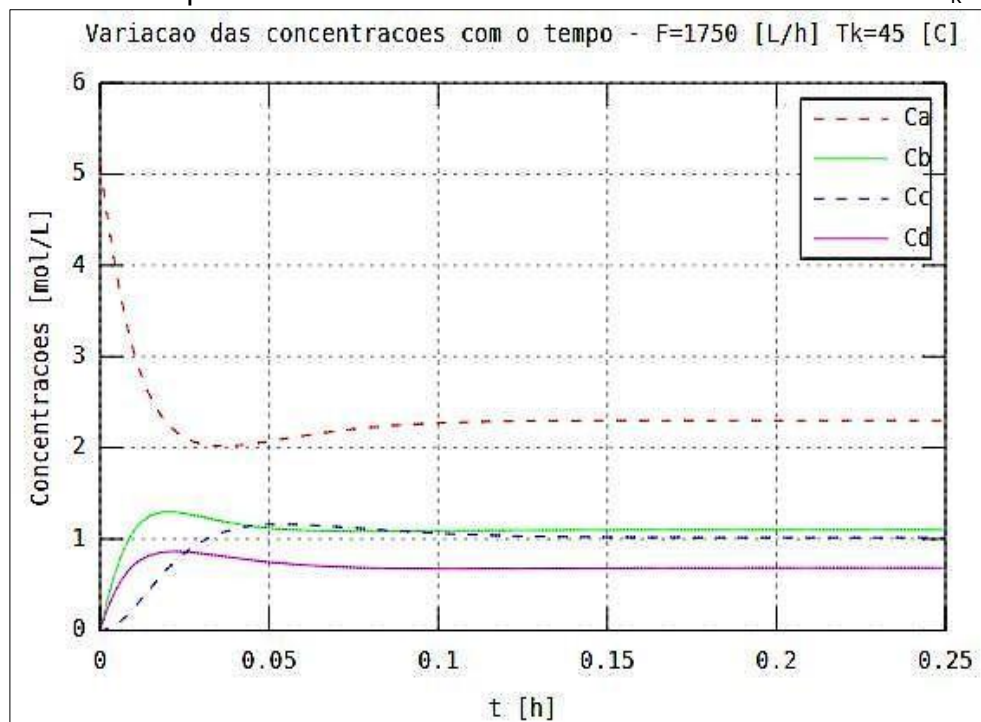
De forma análoga, para a operação de um reator de maiores proporções ($V=50 \text{ L}$), os testes foram realizados considerando a vazão máxima de 1750 L.h^{-1} (Figura 18).

Figura 18 - Comportamento da reação utilizando um reator de volume $V=50L$ 

Fonte: Acervo do autor.

Mais uma vez, notou-se que a menor temperatura testada apresentou melhor influência sob a concentração do ciclopentenol ($T_k=45^{\circ}C$). A temperatura em questão, já seria suficiente para que houvesse maior produtividade do composto B (Figura 19).

Figura 19 - Comportamento do sistema utilizando reator de $V=50\text{L}$ e $T_k=45^\circ\text{C}$



Fonte: Acervo do Autor.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Apoiados na proposta deste estudo consideram-se os resultados obtidos satisfatórios em ambos os softwares utilizados.

Foi possível demonstrar de maneira eficaz o desempenho de um reator químico CSTR na execução do esquema reacional de Van de Vusse, a partir de um modelo caixa branca, bem como o comportamento desse sistema frente às alterações nas condições de processo.

O programa GNU Octave possui interface mais elaborada em relação ao EMSO, exigindo maior conhecimento a respeito. Conquanto, ambos mostraram-se eficientes para as finalidades desse trabalho.

Para as simulações em estado dinâmico observa-se que, para as condições operacionais reais, o composto C atinge maior concentração no reator, tanto no GNU Octave, quanto no EMSO. Os testes para otimização do reator também apresentam convergência nos valores obtidos nas duas ferramentas computacionais utilizadas. O sistema mostrou-se mais eficiente, isto é, resultou em maior formação do produto B, quando havia aumento na vazão de entrada do reagente A. Além disso, a temperatura da jaqueta de troca térmica deve apresentar valores intermediários a fim de favorecer a produção de ciclopentenol.

Avaliou-se ainda o desempenho de reatores com volume reacional diferente da condição real, e confirmou-se que independente do volume utilizado a reação apresenta o mesmo comportamento frente a variação da temperatura da manta de troca térmica

Os softwares utilizados podem então ser considerados eficazes na solução de problemas envolvendo reatores reais, sem a necessidade de interromper o processo, auxiliando o engenheiro a definir melhores condições de operação.

7 REFERÊNCIAS

AGUIRRE, Luis Antonio. **Introdução à Identificação de Sistemas:** Técnicas Lineares e Não-Lineares a Sistemas Reais. 3 ed. Belo Horizonte: UFMG, 2007. 730 p. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=f9lwE7Ph0fYC&printsec=frontcover&hl=pt-BR&source=gbs_ge_summary_r&cad=0#v=onepage&q&f=false>. Acesso em: 21 out. 2017.

BATEMAN, Robert E. et al. **Simulação De Sistemas:** Aprimorando Processos de Logística, Serviços e Manufatura. 5. ed. Rio de Janeiro: Elsevier Editora Ltda, 2013. 184 p. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=82HcAwAAQBAJ&hl=ptBR&source=gbs_navlinks_s>. Acesso em: 09 mar. 2017.

BELHOT, Renato V.; FIGUEIREDO, Reginaldo S.; MALAVÉ, Cesar O. O USO DA SIMULAÇÃO NO ENSINO DE ENGENHARIA. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENSINO DE ENGENHARIA, 29., 2001, Porto Alegre. **Anais...** Porto Alegre: PUCs, 2001. p. 445 - 451. Disponível em: <<http://www.pp.ufu.br/Cobenge2001/trabalhos/NTM093.pdf>>. Acesso em: 11 mar. 2017.

CAMPOS, Reinaldo Calixto de. **Reações Químicas.** Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2001. Disponível em: <http://web.ccead.puc-rio.br/condigital/mvsl/Sala%20de%20Leitura/conteudos/SL_reacoes_quimicas.pdf>. Acesso em: 19 nov. de 2017.

CHEN, H.; KREMLING, A.; ALLGÖWER, F. "Nonlinear Predictive Control of a Benchmark CSTR". In: EUROPEAN CONTROL CONFERENCE, 3., 1995, Roma. **Proceedings...** Roma: [s.n.] p.3247-3252. Disponível em: <https://www.researchgate.net/publication/220045343_Nonlinear_Predictive_Control_of_a_Benchmark_CSTR>. Acesso em: 12 ago. 2017.

DIAS, G. P. P.; CORREA, Henrique L. USO DE SIMULAÇÃO PARA DIMENSIONAMENTO E GESTÃO DE ESTOQUES DE PEÇAS SOBRESSAIENTES. In: SIMPÓSIO DE ADMINISTRAÇÃO DA PRODUÇÃO, LOGÍSTICA E OPERAÇÕES INTERNACIONAIS, 1., 1998, São Paulo. **Anais...** São Paulo: FGVP, 1998. Disponível em: <http://www.correa.com.br/biblioteca/artigos/A14_II_SIMPOI_1999_Uso_de_simula%E7%E3o_para_estoques.pdf>. Acesso em: 30 nov. 2007.

FERREIRA, Ana Luiza S. et al. O PROBLEMA DA DEFASAGEM ENTRE A TEORIA E A PRÁTICA: PROPOSTA DE UMA SOLUÇÃO DE COMPROMISSO PARA UM PROBLEMA CLÁSSICO DE CONTROLE. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE EDUCAÇÃO EM ENGENHARIA, 34., 2006, Passo Fundo. **Anais...** Passo Fundo: Universidade de Passo Fundo, 2006. p. 1223 - 1235. Disponível em: <<http://www.ufjf.br/peteletrica/files/2010/03/2006-COBENGE-O-Problema-da->

Defasagem-entre-a-Teoria-e-a-Prática-Proposta-de-uma-Solução-de-Compromisso-para-um-Problema-Clássico-de-Controle.pdf>. Acesso em: 28 jul. 2017.

FERREIRA, Fábio Magalhães. **MODELAGEM DE SISTEMAS MECÂNICOS UTILIZANDO PROCEDIMENTOS MODULARES**. 2006. 151 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Mecânica, Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 2006. Disponível em: <http://www.ime.eb.br/arquivos/teses/se4/mec2006/mec_Dissertacao_2006_Fabio_Ferreira_12012006.pdf>. Acesso em 16 set. 2017.

FOGLER, H. Scott. **Cálculo de Reatores: O Essencial da Engenharia das Reações Químicas**. 4. ed. Rio de Janeiro: Ltc, 2014. 598 p. Tradução e revisão de Flávio F. de Moraes, Luismar M. Porto e Gustavo P. Valença.

FREITAS, P.J Introdução à modelagem e simulação de sistemas. Florianópolis: Visual Books, 2001.

FRIGERI, Jadir Antonio; BIANCHI, Márcia; BACKES, Rosemary Gelatti. UM ESTUDO SOBRE O USO DAS TÉCNICAS DE SIMULAÇÃO NO PROCESSO DE ELABORAÇÃO E EXECUÇÃO DOS PLANEJAMENTOS ESTRATÉGICO E OPERACIONAL. **ConTexto**, Porto Alegre, v. 7, n. 12, p.1-24, jul. 2007. Disponível em: <<http://seer.ufrgs.br/index.php/ConTexto/article/view/11162/6607>>. Acesso em: 29 abr. 2017.

GALANTE, Raquel Manozzo. **Modelagem e simulação de um reator tubular contínuo para a produção de biodiesel**. 2012. 146 f. Tese (Doutorado) - Curso de Engenharia Química, Centro Tecnológico, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2012. Disponível em: <<https://repositorio.ufsc.br/bitstream/handle/123456789/100540/308800.pdf?sequence=1>>. Acesso em: 30 out. 2017.

GARCIA, Claudio. **Modelagem e Simulação de Processos Industriais e de Sistemas Eletromecânicos Vol.1**. 2. ed. revista e ampliada. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2005. 678 p. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=PdxwQs6P0nIC&printsec=frontcover&hl=pt-BR&source=gbs_ge_summary_r&cad=0#v=onepage&q&f=false>. Acesso em: 21 out. 2017.

GONÇALVES, Bruno Thomaz de Aquino. **Modelagem, simulação e estimação de parâmetros de um reator de hidrodessulfurização**. 2015. 51 f. Monografia (Graduação) - Curso de Engenharia Química, Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2015. Disponível em: <<http://www.lume.ufrgs.br/handle/10183/127794>>. Acesso em: 30 out. 2017.

GREPINO, P.h.f.; RODRIGUES, F. A.. UTILIZAÇÃO DE SOFTWARES LIVRES NO ENSINO DA ENGENHARIA QUÍMICA. **Revista de Engenharia Química e Química: Journal of Chemical Engineering and Chemistry - REQ2**, Viçosa, v. 01, n. 01, p.016-029, jan. 2015. Disponível em:

<<http://www.seer.ufv.br/seer/rbeq2/index.php/req2/article/view/15/17>>. Acesso em: 09 mar. 2017.

HILL, C. G; ROOT, T. W. **An introduction to Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design**. 2nd ed. New York: Wiley, 1977. 575p.

HOTTES, S. **[I SSEQ] EMSO – UM SOFTWARE PARA MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS**. 2015. Disponível em: <<http://betaeq.com.br/index.php/2015/10/26/i-sseq-EMSO-um-software-para-modelagem-simulacao-e-otimizacao-de-processos/>>. Acesso em: 21 abr. de 2017.

KLATT, K.-u.; ENGELL, S.. Gain-scheduling trajectory control of a continuous stirred tank reactor. **Computers & Chemical Engineering**, [S.l.], v. 22, n. 4-5, p.491-502, jan. 1998. Elsevier BV. [http://dx.doi.org/10.1016/s0098-1354\(97\)00261-5](http://dx.doi.org/10.1016/s0098-1354(97)00261-5). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135497002615>>. Acesso em: 13 ago. 2017.

LATHI, B.P. **Sinais e sistemas lineares**. 2. ed. Porto Alegre: Bookman, 2007. 856 p. Tradução de Gustavo Guimarães Parma.

LEVENSPIEL, Octave. **Engenharia das Reações Químicas**. 3. ed. São Paulo: Edgar Blucher LTDA, 2000. 584 p. Tradução Verônica M. A. Calado. Revisão Frederico W. Tavares.

MEDEIROS, A. L.; MONTEVECHI, J. A. B.; ALMEIDA FILHO, R. G. de. **Uso da simulação e otimização no planejamento do número de operários em uma indústria de material de defesa**. XXXVII Simpósio Brasileiro de Pesquisa Operacional. Gramado, RS. Set. de 2005. Disponível em: <<http://www.din.uem.br/sbpo/sbpo2006/pdf/arq0134.pdf>>. Acesso em: 11 mar. 2017.

MELLO, Bráulio Adriano de. **Modelagem e Simulação de Sistemas**. Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões. Santo Ângelo. 69 p. 2007. Disponível em: < <https://docgo.org/modelagem-e-simulacao-de-sistemas>>. Acesso em: 15 abr. 2017.

MIYAGI, P. E. **Introdução à Simulação Discreta**. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Mecatrônica e de Sistemas Mecânicos. São Paulo, 2006. Disponível em: <https://producao.wikispaces.com/file/view/Apostila_Simulacao.pdf>. Acesso em: 11 mar. 2017.

NAYLOR, T. H. et al. **Técnicas de simulação em computadores**. Petrópolis: Vozes, 1971. 402 p.

OGATA, Katsuhiko. **Engenharia de Controle Moderno**. 4 ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005. 788 p. Tradução Paulo A. Maya. Revisão Fabrizio Leonardi.

PIMENTEL, Caroline Alcalde. **APLICAÇÃO DA SIMULAÇÃO COMO FERRAMENTA DE APOIO À TOMADA DE DECISÃO GERENCIAL EM UMA CÉLULA DE MANUFATURA**. 2015. 99 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia de Produção, Faculdade de Engenharia Arquitetura e Urbanismo, da Universidade Metodista de Piracicaba – Unimep, Santa Bárbara D Oeste, 2015. Disponível em: <https://www.unimep.br/phpg/bibdig/pdfs/docs/19052015_143840_carolinealcaldepi mentel_ok.pdf>. Acesso em: 19 ago. 2017.

PORTAL LABORATÓRIOS VIRTUAIS DE PROCESSOS QUÍMICOS. **Fundamentos**. Disponível em: <http://labvirtual.eq.uc.pt/siteJoomla/index.php?Itemid=456&id=178&option=com_cont ent&task=view>. Acesso em: 09 mar. 2017.

PRAXADES, M. A.; TEIXEIRA JR, A.; RAVAGNANI, M. A. da S. S. OTIMIZAÇÃO DE SISTEMAS DE REATORES UTILIZANDO PROGRAMAÇÃO MATEMÁTICA. **Revista Tecnológica**, Paraná, v. 17, n. 1, p. 19-28, 2008. Disponível em: <<http://periodicos.uem.br/ojs/index.php/RevTecnol/article/view/5234/0>>. Acesso em: 01 out. 2017.

RAMPON, Daniel S. **Cinética Química**. Curitiba: Daniel S. Rampon, 2016. 125 slides, color, 25 cm X 20 cm. Universidade Federal Paraná Departamento de Química. Disponível em: <http://www.quimica.ufpr.br/mparaujo/CQ092/Aula_13_-_Revisão.pdf>. Acesso em: 19 nov. 2017.

RODRIGUES, Rodolfo. **MINICURSO DE SIMULADOR EMSO**: Curitiba: Rodolfo Rodrigues, 2011. 192 slides, color, 25 cm X 20 cm. Disponível em: <http://rodolfo.chengineer.com/data/uploads/minicurso_emso_dia1.pdf>. Acesso em: 21 abr. 2017.

ROSSONI, Luciano. MODELAGEM E SIMULAÇÃO SOFT EM ESTRATÉGIA. **Revista Produção Online**, Florianópolis, v. 6, n. 2, ago. 2006. Disponível em: <<https://www.producaoonline.org.br/rpo/article/view/291>>. Acesso em 16 set. 2017.

SAWAKI, R.V. et al. MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO DESEMPENHO DE REATORES DE FLUXO CONTÍNUO E EM BATELADA NO TRATAMENTO DE EFLUENTE TÊXTIL UTILIZANDO O SOFTWARE LIVRE PYTHON. IN CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA EM INICIAÇÃO CIENTÍFICA - COBEQ IC, 11., 2015, Campinas. **Anais...** Campinas: Unicamp, 2015. p.2648-2654. Disponível em: <<http://pdf.blucher.com.br.s3-sa-east-1.amazonaws.com/chemicalengineeringproceedings/cobeqic2015/311-33902-260242.pdf>>. Acesso em: 23 set. 2017.

SCHULTZ, Guilhermina et al. MODELAGEM E SIMULAÇÃO DOS REATORES QUÍMICOS BR E PFR NO EMSO E GNU OCTAVE. **Enciclopédia Biosfera**, Goiânia, v. 10, n. 18, p.3736-3756, 01 jul. 2014. Disponível em: <<http://www.conhecer.org.br/enciclop/2014a/ENGENHARIAS/MODELAGEM.pdf>>. Acesso em: 16 set. 2017.

SCHULTZ, Guilhermina et al. SIMULAÇÃO DO REATOR QUÍMICO DE RETROMISTURA NO SOFTWARE EMSO. **Enciclopédia Biosfera**, Goiânia, v. 9, n. 17, p.3122-3129, 01 dez. 2013. Disponível em: <<http://www.conhecer.org.br/enciclop/2013b/ENGENHARIAS/SIMULACAO.pdf>>. Acesso em: 16 set. 2017.

SECCHI, R. A. **Modelagem e Simulação de Processos**. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1995. Disponível em: <http://www2.peq.coppe.ufrj.br/Pessoal/Professores/Arge/COQ790/Modelagem_Processos.pdf>. Acesso em: 09 mar. 2017.

SILVA, Nathália Cristina Ortiz da. **Aplicação de simulação para análise do makespan devido à inserção e/ou desistência de tarefas no problema de sequenciamento de produção em uma máquina**. 2016. 108 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Matemática, Programa de Pós graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, área de Concentração Programação Matemática, Setor de Ciências Exatas, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2016. Disponível em: <http://acervodigital.ufpr.br/bitstream/handle/1884/45051/R_-_D_-_NATHALIA_CRISTINA_ORTIZ_DA_SILVA.pdf?sequence=1&isAllowed=y>. Acesso em: 11 abr. 2017.

TEIXEIRA, B. C. **Tutorial GNU Octave / Matlab**. Campinas, 2005. Disponível em: <<http://www.ime.unicamp.br/~marcio/tut2005/octave/042565Cassia.pdf>>. Acesso em: 22 abr. 2017.

TEIXEIRA, R. S. **OCTAVE - Uma Introdução: Primeiros contatos com o ambiente de programação numérica**. UNIVERSIDADE ESTADUAL DE LONDRINA, 2010. Disponível em: <http://www.uft.edu.br/engambiental/prof/catalunha/arquivos/octave/octave_Teixeira.pdf>. Acesso em: 22 abr. 2017.

TITONI, M. **Um Estudo de Caso Sobre o Uso de Atividades Experimentais na Escola Agrotécnica Federal de Sombrio**. 2008. 119f. Dissertação (Pós-Graduação em Ciências) – Departamento de Bioquímica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre. 2008. Disponível em: <<http://www.lume.ufrgs.br/handle/10183/14970>>. Acesso em: 19 nov. 2017.

TORGA, B. L. M.; MONTEVECHI, J. A. B.; PINHO, A. F. de. Modelagem, simulação e otimização em sistemas puxados de manufatura. In Simpósio de Engenharia de Produção, 13., 2006. Bauru. **Anais...** Bauru: Universidade Estadual Paulista, 2006. p. 1 - 12. Disponível em: <http://www.simpep.feb.unesp.br/anais/anais_13/artigos/168.pdf>. Acesso em: 13 abr. 2017.

TORRES, Gabriel Fernando Barbosa; FARIA, Isabella da Rocha; BRAGA, Walkiria Barbosa Silveira. **Modelagem, controle e otimização de um reator contínuo com cinética de Van de Vusse**. 2016. 80 f. TCC (Graduação) - Curso de Engenharia

Química, Universidade Federal Fluminense, Niterói, 2016. Disponível em: <<http://www.repositorio.uff.br/jspui/handle/1/2838>>. Acesso em: 12 ago. 2017.

ZOCRATTO, Bárbara Werkema et al. **O software livre no ensino da engenharia química.** Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Engenharia Química. Belo Horizonte., jul. 2011. Disponível em: <<http://ueadsl.textolivre.pro.br/2011.2/papers/upload/103.pdf>>. Acesso em: 12 abr. 2017.

APÊNDICE A

```

1 global k10 k20 k30 e1 e2 e3 v DeltahAB DeltahBC DeltahAD ro cp kw ar ca0 t0 tk u x ca cb teta cc cd
2 % Parametros do reator
3
4 k10=1.287e12; % 1/h
5 k20=1.287e12; % 1/h
6 k30=9.043e9; % L/molAh
7 E1=-9758.3; % K (E/R)
8 E2=-9758.3; % K (E/R)
9 e3=-8560.0; % K (E/R)
10 DeltahAB=-4.2; % kJ/molA
11 DeltahBC=11; % kJ/molB
12 DeltahAD=41.85; % kJ/molA
13 ro=0.9342; % kg/L
14 cp=3.01; % kJ/kgK
15 v=10; % L
16 kw=4032.0; % kJ/hKm^2
17 ar=0.215; % m^2
18 ca0=5.1; % mol/L
19 t0=130.00; % (°C)
20 tk=128.95; % (°C)
21 u=18.83 ; % 1/h
22
23 % a) Calculo do Estado Estacionario
24 x0=[5.1 0.0 130 0.0 0.0]'; % Chute inicial de Ca, Cb e T
25 %options = ('MaxFunEvals')
26 x=(fsolve('cstr',x0))
27 % Valores estacionarios
28 disp('Concentração estacionaria de A em mol/L')
29 ca=x(1) % cae (mol/L)
30 disp('Concentração estacionaria de B em mol/L')
31 cb=x(2) % cbe (mol/L)
32 disp('Temperatura estacionaria do reator em graus Celsius')
33 teta=x(3) % te (°C)
34
35 % Arrhenius
36 k1=k10*exp(e1/(teta+273.15));
37 k2=k20*exp(e2/(teta+273.15));
38 k3=k30*exp(e3/(teta+273.15));
39
40 % c)Calculo da Resposta Dinamica

```

APÊNDICE B

```

1 FlowSheet ReatorCSTR
2
3 PARAMETERS
4 k10 as Real(Brief="Constante Cinética 1", Default=357500000, Unit='1/s');
5 k20 as Real(Brief="Constante Cinética 2", Default=357500000, Unit='1/s');
6 k30 as Real(Brief="Constante Cinética 3", Default=2512, Unit='m^3/mol/s');
7 E1 as Real(Brief="Energia de Ativação 1", Default=9758.3, Unit='K');
8 E2 as Real(Brief="Energia de Ativação 2", Default=9758.3, Unit='K');
9 E3 as Real(Brief="Energia de Ativação 3", Default=8560, Unit='K');
10 V as Real(Brief="Volume do Reator", Default=0.01, Unit='m^3');
11 Ar as Real(Brief="Área do Reator", Unit='m^2', Default=0.215);
12 Cp as Real(Brief="Capacidade Calorífica", Unit='J/kg/K', Default=3010);
13 rho as Real(Brief="Densidade", Unit='kg/m^3', Default=934.2);
14 h1 as Real(Brief="Entalpia da Reação A-B", Unit='J/mol', Default=4200);
15 h2 as Real(Brief="Entalpia da Reação B-C", Unit='J/mol', Default=-11000);
16 h3 as Real(Brief="Entalpia da Reação A-D", Unit='J/mol', Default=-41850);
17 kw as Real(Brief="Coeficiente de Transferência de Calor da Jaqueta de Resfriamento", Unit='J/s/K/m^2', Default=112);
18
19 Ca0 as Real(Brief="Concentração A na Alimentação", Default=5100, Unit='mol/m^3');
20 Cb0 as Real(Brief="Concentração B na Alimentação", Default=0, Unit='mol/m^3');
21 Cc0 as Real(Brief="Concentração C na Alimentação", Default=0, Unit='mol/m^3');
22 Cd0 as Real(Brief="Concentração D na Alimentação", Default=0, Unit='mol/m^3');
23 u as Real(Brief="Relação F/V", Unit='1/s', Default=0.005);
24 T0 as Real(Brief="Temperatura Inicial", Unit='K', Default=403.15);
25 Ta as Real(Brief="Temperatura Fórmula k", Unit='K', Default=0);
26 Tk as Real(Brief="Temperatura Inicial da Jaqueta", Unit='K', Default=402.1);
27
28 VARIABLES
29 Ca as Real(Brief="Concentração A", Unit='mol/m^3');
30 Cb as Real(Brief="Concentração B", Unit='mol/m^3');
31 Cc as Real(Brief="Concentração C", Unit='mol/m^3');
32 Cd as Real(Brief="Concentração D", Unit='mol/m^3');
33 T as Real(Brief="Temperatura", Unit='K');
34 k1 as Real(Brief="Constante Cinética 1", Unit='1/s');

```