



MODELAGEM DE REATORES QUÍMICOS

Rodolfo Rodrigues¹, Argimiro Resende Secchi¹, Marla Azário Lansarin¹

¹Grupo de Integração, Modelagem, Simulação, Controle e Otimização de Processos (GIMSCOP)
Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)
R. Eng. Luis Englert, s/n. Campus Central. CEP: 90040-040 - Porto Alegre - RS - BRASIL,
E-MAIL: {rodolfo,arge,marla}@enq.ufrgs.br

Palavras Chaves: Reatores Químicos, Modelagem, EMSO.

Resumo: Reatores químicos constituem em equipamentos muito comuns em plantas industriais. São amplamente usados para diversos processos e por isto mesmo é de extrema importância se prever resultados por meio de simulações. Sendo assim, usando o conceito de herança criar-se-á uma hierarquia de modelos, abrangendo 2 grandes grupos: reatores contínuos e reatores descontínuos. Dos reatores contínuos teremos: Reatores Contínuo de Tanque Agitado (CSTR) e Tubular (PFR), dos Reatores Descontínuos: Reatores Batelada e Semibatelada. Nosso objetivo é criar modelos versáteis que integrarão a biblioteca de modelos do simulador EMSO. Inicialmente serão modelados somente Reatores Homogêneos, mas conforme o tempo disponível se partirá para modelagem de Reatores Heterogêneos.

1 INTRODUÇÃO

A utilização de reatores químicos é muito comum em plantas industriais, sendo amplamente usados em diversos processos. A modelagem destes equipamentos é extremamente importante para se prever resultados através de simulações. Para tanto existe uma enorme variedade de *softwares* utilizados para a simulação, mas que na maioria das vezes contemplam uma interface que dispensa ao usuário o conhecimento da modelagem do processo. Isto torna a manipulação dos simuladores bastante prática e rápida, mas por outro lado torna o seu uso seriamente restrito as condições impostas pelo modelo implementado. Estes tipos de simuladores são chamados de sequencial-modulares. Um segundo grupo de simuladores são os ditos baseados em equações. Estes são extremamente flexíveis, adaptando-se as situações diversas uma vez que o usuário trabalha diretamente com o modelo matemático do processo.

O presente trabalho é uma atividade integrada ao Projeto ALSOC (Ambiente Livre para

Simulação, Otimização e Controle de Processos) o qual, como a própria sigla define, visa criar um ambiente para simulação, otimização e controle de processo. Isso será feito através do aperfeiçoamento do simulador baseado em equações, EMSO (Soares e Secchi, 2003).

Nosso objetivo com este trabalho é formar uma biblioteca de modelos versáteis e robustos de reatores químicos que será incorporada a EML (EMSO Model Library) do simulador EMSO. Estes modelos serão os mais gerais possíveis e farão uso do conceito de herança, ou seja, modelos mais complexos e específicos serão formados a partir de modelos mais simples e genéricos, constituindo-se em entidades separadas. Sendo assim a adaptação destes modelos para situações diversas torna-se mais simples, pois a independência entre os modelos torna desnecessária a modificação de todo o modelo para sua reutilização.

Para tornar a manipulação dos modelos mais prática e simples ao usuário, dividiram-se os reatores químicos em 2 grandes grupos: reatores contínuos e descontínuos, quanto às características



Oktober Fórum 2005 – PPGEQ

de operação. E todos os quais ainda foram divididos em reatores homogêneos e heterogêneos, quanto ao número de fases envolvidas. Desta forma teremos reatores contínuos homogêneos e heterogêneos, e da mesma forma, reatores descontínuos homogêneos e heterogêneos.

Reatores contínuos constituem nos reatores contínuo de tanque agitado (CSTR) e tubular (PFR). Já os reatores descontínuos constituem nos reatores batelada e semibatelada. Apesar de reatores semibatelada assumirem também características de reatores contínuos, esse foi considerado para fins práticos como reator descontínuo.

Num primeiro momento limitar-se-á a abordagem de reatores contínuos. E iniciando com uma única fase (reatores contínuos homogêneos) e posteriormente com 2 fases (reatores contínuos heterogêneos).

2 METODOLOGIA

Inicialmente foi definida uma estrutura de modelos com base na adotada pelo simulador comercial Aspen Plus[®] da AspenTech, Inc (Aspen, 2003).

Para a modelagem dos reatores contínuos, adotou-se assim 2 níveis de complexidades: modelos simplificados e modelos rigorosos. Os modelos ditos simplificados não necessitam informações da cinética das reações envolvidas. Assim sendo, a partir de informações das condições de entrada e do tipo de modelo de reator, esses podem calcular as condições de saída. Já os modelos ditos rigorosos constituem os modelos de reatores CSTR e PFR propriamente ditos. Com relação aos reatores descontínuos, teremos somente modelos rigorosos.

2.1 Modelos Simplificados

Os modelos simplificados de reatores contínuos abrangem os seguintes tipos: estequiométrico, rendimento, equilíbrio e Gibbs. Desta maneira, teremos reatores CSTR estequiométrico, rendimento, equilíbrio e Gibbs, da mesma forma para PFR.

Todos os modelos simplificados são modelados como sendo um conjunto constituído por um tanque dinâmico de mistura ligado a um tanque estacionário, que aplicará diretamente as propriedades de cada modelo específico (Figura 1).

O uso deste esquema torna a modelagem mais prática de modo a tornar o conjunto utilizável para todos os tipos de reatores contínuos simplificados que serão abordados.

O conjunto modelará CSTRs e PFRs simplificados. O que diferenciarão os PFRs simplificados para os CSTRs é um tempo de residência acrescido à corrente de saída do modelo de tanque de mistura. Desta forma, a partir de um modelo simplificado de tanque, pode-se adaptar um modelo simplificado de reator tubular.

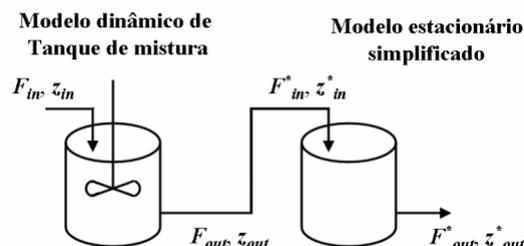


Figura 1: Representação do conjunto utilizado para a modelagem dos reatores simplificados.

Modelo de Tanque de Mistura (TBasic):

Constitui-se de um modelo dinâmico de um tanque de mistura com uma corrente de entrada e uma corrente de saída, com os seus respectivos balanços de massa e energia. Para um sistema homogêneo, com a presença de somente fase líquida, o equacionamento do modelo é dado por:

Balanço de massa

$$\frac{dM_i}{dt} = F_{in,i} - F_{out,i} \quad (1)$$

Quantidade de mols totais

$$M = \sum_{i=1}^n M_i \quad (2)$$

Volume total

$$V = M \cdot V_{molar}(T_{out}, P_{out}, z_{out}) \quad (3)$$

Normalização da fração molar

$$\sum_{i=1}^n z_{out,i} = 1 \quad (4)$$

Fração vaporizada

$$frac_{out,vap} = 0 \quad (5)$$

Balanço de energia

$$\frac{dE}{dt} = F_{in} h_{in} - F_{out} h_{out} + Q - W_s \quad (6)$$

Energia interna total

$$E = M h_{out} - P_{out} V \quad (7)$$

A partir deste modelo, os demais que seguem definem suas correntes de entrada como a corrente de saída do modelo de tanque de mistura, assim:

$$F_{out,i} = F_{in,i}^* \quad (8)$$



Oktober Fórum 2005 – PPGEQ

Modelo de Reator Estequiométrico (RStoic): A partir de informações da corrente de entrada: composição de entrada $F_{in,i}^*$ e estequiometria das reações envolvidas v_{ij} (definido como positivo para produto e negativo para reagente), e informando a conversão de um componente chave X_k :

$$F_{out,i}^* = F_{in,i}^* + \frac{v_i}{v_k} F_{in,k}^* X_k \quad (9)$$

ou a extensão das reações envolvidas \mathbf{x} :

$$F_{out,i}^* = F_{in,i}^* + \sum_{j=1}^m v_{i,j} \mathbf{x}_j \quad (10)$$

podem-se calcular as composições da corrente de saída $F_{out,i}^*$.

Modelo de Reator Rendimento (RYield): A partir das composições da corrente de entrada $F_{in,i}^*$ e da distribuição de rendimento Y_i dos produtos:

$$Y_i = \frac{F_{out,i}^*}{F_{in,k}^* - F_{out,k}^*} \quad (11)$$

podem-se calcular as composições da corrente de saída $F_{out,i}^*$. Sendo necessário se conhecer a estequiometria das reações.

Os demais modelos, equilíbrio e Gibbs, assumem equilíbrio químico e físico do sistema.

Modelo de Reator Equilíbrio (REquil): A constante de equilíbrio K para a reação j se relaciona com a energia livre de Gibbs pela equação (12), dado T_{out} . Pela equação (11), tem-se K_j como função da atividade que por sua vez é função dos coeficientes de atividades ou atividades, conforme as fases presentes, e da composição de saída, equação (13). O cálculo é realizado por um procedimento iterativo até encontrar-se \mathbf{x} que satisfaçam o sistema. As composições de saída são obtidas pelos \mathbf{x} na equação (9).

$$K_j = \prod_{i=1}^n \hat{a}_i^{v_{i,j}} \quad (12)$$

$$\sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i G_i^0 = -RT_{out} \ln K_j \quad (13)$$

$$z_{out,i} = \frac{F_{in,i} + \mathbf{a}_i \mathbf{x}_j}{F_{in} + \mathbf{x}_j \sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i} \quad (14)$$

Modelo de Reator Gibbs (RGibbs): Está baseado no fato de que no equilíbrio a energia de Gibbs total do sistema alcança seu valor mínimo. A modelagem está baseada no método dos multiplicadores indeterminados de Lagrange, descrito em Smith, 2000. Como o modelo de reator

rendimento, este modelo também dispensa o conhecimento da estequiometria da reação. A partir das equações (15) e (16) obtém-se um sistema de equações somente funções de $z_{out,i}$, definida pela equação (17), e λ_k .

$$\Delta G_{f,i}^0 + RT_{out} \ln \hat{a}_i + \sum_{k=1}^w I_k a_{i,k} = 0 \quad (15)$$

$$\sum_{i=1}^n N_{out,i} a_{i,k} = A_k \quad (16)$$

$$z_{out,i} = \frac{N_{out,i}}{\sum_{i=1}^n N_{out,i}} \quad (17)$$

2.2 Modelos Rigorosos

Leva em conta a cinética das reações envolvidas para o cálculo das condições de saída. São os modelos rigorosos de reatores CSTR, PFR, batelada e semibatelada.

A implementação destes reatores se fará logo após o término da modelagem dos reatores simplificados.

2.3 Implementação no Simulador

Os modelos abordados anteriormente estão sendo implementados no simulador respeitando uma hierarquia adotada. A hierarquia proposta para os modelos de reatores contínuos pode ser visualizada pela Figura 1, e a dos modelos de reatores descontínuos pela Figura 2.

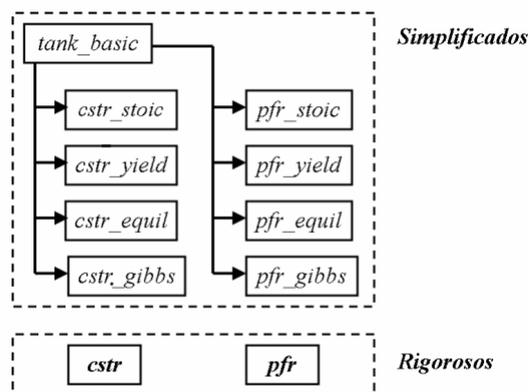


Figura 1: Hierarquia adotada para os modelos de reatores contínuos.

Para os modelos simplificados de reatores contínuos, temos um modelo básico (*tank_basic*) o qual corresponde ao modelo de tanque de mistura e dele, todos os demais modelos são derivados (*cstr_stoic*, *cstr_yield*, *cstr_equil*, *cstr_gibbs*,



Oktober Fórum 2005 – PPGEQ

10 Anos

pfr_{stoic} , pfr_{yield} , pfr_{equil} e pfr_{gibbs}). Os modelos rigorosos de reatores contínuos são totalmente independentes e assim sendo, não derivam de nenhum outro.

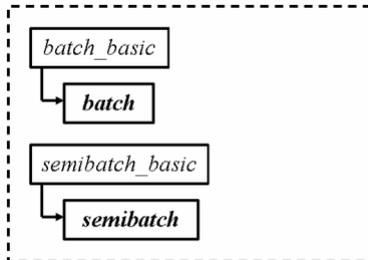


Figura 2: Hierarquia adotada para os modelos de reatores descontínuos.

Para os modelos de reatores descontínuos, temos um modelo básico ($batch_basic$ e $semibatch_basic$) para cada tipo de reator ($batch$ e $semibatch$).

Como implementação adicional, temos o cálculo do volume total do tanque e do nível de líquido no mesmo que é realizado por uma rotina externa comum a todos os modelos. Já que se consideram os reatores CSTR como um tanque com orientação e geometria já pré-estabelecidas. As configurações de tanques disponíveis estão classificadas conforme a orientação como vertical ou horizontal, e quanto à geometria da calota como elíptica, esférica e sem calota (Jones, 2002).

3 DESENVOLVIMENTO

Na atual fase do Projeto encontra-se na etapa de implementação dos modelos de reatores contínuos no simulador EMSO. Os modelos estão sendo elaborados conforme a hierarquia proposta neste trabalho, com suporte a sistemas monofásicos (fase líquida ou vapor unicamente – reatores contínuos homogêneos) e bifásicos (fases líquida e vapor simultaneamente – reatores contínuos heterogêneos).

Está dentro das previsões a abordagem de reatores des contínuos ainda neste trabalho.

REFERÊNCIAS

Aspen Technology, Inc. *Aspen Plus 12.1: Unit Operation Models*. Cambridge: 2003.

FOGLER, H. S. *Elementos de Engenharia das Reações Químicas*. 3ª ed. LTC Editora S.A.: 2002.

FROMENT, G. F.; BISCHOFF, K. *Chemical Reactor Analysis and Design*. 2ª ed. Editora John Wiley & Sons, Inc: 1990.

JONES, D. Computing Fluid Tank Volumes. *Chemical Processing Magazine*, p. 46-50, novembro, 2002.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. *Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química*. 5ª ed. LTC Editora S.A.: 2000.

SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. Emso: A new environment for modelling, simulation and optimization. In ESCAPE 13th [S.I.]: Elsevier Science Publishers, v. 1, p. 947-952, 2003.