

DESENVOLVIMENTO DE UM SOFTWARE COMPUTACIONAL PARA DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS CINÉTICOS E ORDEM DE REAÇÃO.

Venancio Vitor Lima da Silva Bezerra ¹
Jefferson Alves Bezerra ²
Mick Jhordan Vasconcelos Santos ³
Mario Henrique Cosme Juvêncio ⁴

RESUMO

A cinética de uma reação química apresenta grande importância no setor industrial. Na engenharia química, esta propriedade está focada na projeção e operação dos vários tipos de reatores, bem como no estudo de otimização de processos. A constante específica da reação e a Ordem da reação são as propriedades determinantes da projeção industrial, considerando que elas definem conversão de reação e volume de reator. Com o desenvolvimento de recursos computacionais, tornou-se mais preciso obter as propriedades cinéticas. No entanto, o software ainda solicita ao projetista um valor hipotético para a ordem de reação, o que elimina a precisão do processo e o desgaste desnecessário de reagentes ou mesmo a construção de reatores de tamanho excessivo - o que não é vantajoso em termos econômicos. Este trabalho discute o desenvolvimento de um código computacional que determina a ordem de uma reação química, bem como sua cinética de velocidade constante a partir da concentração de reagentes em um dado momento. O resultado da programação dá ao projetista a máxima conversão possível para um determinado reator, bem como um volume ideal para que um reator ofereça uma determinada conversão em reagente.

Palavras-chave: Cinética, Reação, Ordem, Computação, Software.

¹ Graduando do Curso de Engenharia Química da Universidade Federal de Alagoas - UFAL, limvitor@gmail.com;

² Graduando do Curso de Engenharia Química da Universidade Federal de Alagoas - UFAL, jefferson.bezerra@ctec.ufal.br;

³ Graduando do Curso de Química Licenciatura da Universidade Federal de Alagoas - UFAL, jhordan10mind@gmail.com

⁴ Graduando do Curso de Engenharia Química da Universidade Federal de Alagoas - UFAL, mario.juvencio@ctec.ufal.com;

INTRODUÇÃO

A cinética química é uma das propriedades da matéria mais importantes quando se trata de termos industriais. Em todo o momento, é necessário saber quanto tempo um reagente se transformará em produto e quais os parâmetros que determinam esse tempo de reação. É certo que alguns tópicos presente no estudo da matéria, como Estequiometria, que é uma avaliação quantitativa do processo, onde se é determinado quanto foi produtivo e também o rendimento total do processo, e a Termodinâmica, que define qualitativamente como esse processo ocorre sob dadas temperaturas e pressões. Também, deve-se levar em consideração os mecanismos de reação, que mostra as etapas em que os átomos se rearranjam durante o seu processo reacional.

Entretanto, definir quantos segundos, minutos ou horas uma reação vai durar é fundamental para que uma indústria funcione de tal forma que não gere más consequências tanto econômicas, quanto operacionais. É certo que pelos fundamentos da Termodinâmica, chega-se à conclusão que uma reação química acontecerá. E pela Estequiometria, o quanto de produto será gerado.

A nível de Engenharia, os fundamentos do balanço de massa e energia traçam um processo industrial em que são pontos nos cálculos todas as definições mencionadas anteriormente. Para o balanço de massa, tem-se a equação 1.

$$\textit{Entrada} - \textit{Saída} + \textit{Geração} = \textit{Acúmulo}$$

Enquanto para o balanço de energia, a equação 2

$$\Delta H + \Delta E_c + \Delta E_p = Q + W_s$$

Onde:

ΔH : Variação de Entalpia das substâncias do Processo;

ΔE_c : Variação de Energia Cinética;

ΔE_p : Variação de Energia Potencial Gravitacional;

Q: Quantidade de calor envolvida no processo;

W_s : Trabalho realizado por um motor.

A variável geração, e a variável acúmulo são os dois termos da equação que definem o tempo de um processo, que em outras palavras trata-se da velocidade da reação (Felder, 2012).

Os princípios da cinética relaciona a taxa de consumo de reagente com a concentração (elevada à determinada ordem) do mesmo de forma diretamente proporcional. Algumas definições do equilíbrio químico definem que a ordem de um determinado reagente é equivalente ao seu coeficiente estequiométrico. Contudo, muitas reações não obedecem a esse princípio, sendo necessário determinar os parâmetros cinéticos da reação (BALL, 2006).

O procedimento de determinação deve ter quantidades significativas de amostras coletadas de reagente em função do tempo e assim encontrar as constantes que determinam a velocidade da reação.

Os reatores são recipientes projetados para reações químicas, transferência de calor e massa e processos bioquímicos. Atualmente, quatro tipos de reatores são utilizados na indústria química e nos laboratórios: Batelada, Contínuo de Tanque Agitado (CSTR), Tanque empistonado (PFR), Leito Fixo (Específico para reações catalisadas). A projeção e a operações desses reatores consistem num balanço de massa para um dado reagente no processo (Equação 3).

$$F_{j0} - F_j + \int^V r_j dV = \frac{dN_j}{dt}$$

Onde:

j: Reagente em análise;

F_{j0} : Vazão Molar de entrada do Reagente (mol/s);

F_j : Vazão Molar de saída do Reagente (mol/s);

r_j : Velocidade de Formação do Reagente;

N_j : Quantidade de Matéria do Reagente (mol).

A velocidade de formação de reagente é determinada pela equação 4:

$$r_j = -kC_{j0}^\alpha(1 - X)^\alpha$$

Onde:

k: Constante cinética de velocidade da reação;

α : Ordem da reação;

C_{j0} : A concentração molar inicial do componente em análise, a qual pode ser N_{j0} para Reator Batelada.

A partir das equações 3 e 4 é possível determinar o volume que um reator CSTR ou PFR deverá ter para alcançar uma determinada conversão de reagente em produto (Equação 5 e 6). No caso do reator Batelada, é possível obter o tempo do processo (Equação 7).

$$V = \frac{F_{j0}X}{-r_j}$$

$$V = F_{j0} \int_0^X \frac{dX}{-r_j}$$

$$t = \int_0^X \frac{N_{j0}dX}{-r_jV}$$

Ao determinar esses parâmetros, inicia-se a projeção em larga escala, com reatores de maiores dimensões e tipo, ou seja, CSTR ou PFR, sendo obviamente com suas equações determinadas pelo balanço de massa do processo (FOGLER, 2013).

O MatLab (Matrix Laboratory), é uma plataforma de linguagem de programação que têm como principal diferencial em comparação às outras linguagens de programação ser um software de projeção matemática de alta eficiência na resolução de problemas numéricos, além de apresentar simplicidade em seu funcionamento e ser capaz de se acoplar em outros programas, assim como fazer novos programas. Tais características foram determinantes na escolha desta linguagem que veio a ser usada no algoritmo do software, por ser a que melhor atendeu às necessidades de projeto.

Em virtude da facilidade de programação do MatLab, essa plataforma foi escolhida com a finalidade de elaborar um software que determinasse os parâmetros cinéticos de uma reação química avaliando os valores de concentração de reagente em função do tempo. O caminho lógico elaborado, ou seja o algoritmo, obedeceu os fundamentos do Cálculo diferencial e Integral assim como as equações anteriormente citadas. Pode-se até pensar que essa trajetória lógica é de fácil montagem, mas requer tanto dos programadores uma grande fundamentação teórica da computação, da química e da engenharia química.

O procedimento é de grande valia para o setor industrial, tendo em vista que para que um processo seja aprovado para grande escala, deve ser, primordialmente, aprovado em pequena escala. A razão disso é o fato de que a indústria tem como objetivo obter a maior quantidade possível de produtos e reduz os gastos em relação à operação e à projeção. Como os reatores são os principais componentes de uma planta industrial, ser impreciso no seu

dimensionamento traz consequências muito grandes para os investidores, assim como o gasto mal calculado de reagentes.

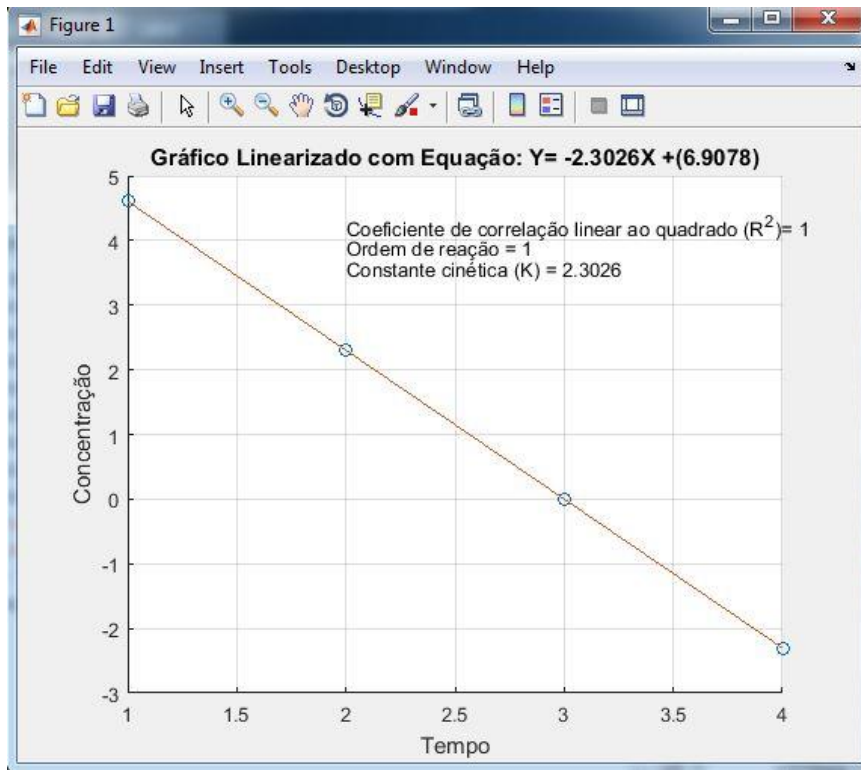
METODOLOGIA

O desenvolvimento do software começou com a elaboração do algoritmo de forma manuscrita a fim de ter uma prévia do que seria aplicado na plataforma de programação. A linha de raciocínio foi elaborada partindo das definições utilizadas para a determinação dos parâmetros cinéticos definidos por Fogler (2013). A partir das definições do Cálculo Diferencial e Integral, as condições numéricas foram estipuladas e o código computacional começou a ser escrito na plataforma de linguagem de programação MatLab. À medida que se era montada a programação, se fez necessário consultar o site de informações do MatLab para que fossem interpretadas determinadas propriedades e funções da plataforma, já que foram demandados alguns recursos os quais ainda não eram de total conhecimento e domínio dos alunos-programadores. Essa etapa se repetiu durante todo o procedimento. Com as condições numéricas e de entrada estipuladas, o código seguiu mais uma bateria de testes, sendo o caráter estatístico o resultado de maior peso da análise.

Na construção do código, inicialmente é pedido como entradas do software os tempos e as referentes concentrações da reação química a qual se está calculando a cinética. A partir do cálculo de correlação linear entre os tempos e os modelos cinéticos para cada ordem em particular (Variando de 0,1 em 0,1), os valores das correlações são armazenados em uma matriz, e o valor da ordem de reação com maior correlação é armazenado. Em seguida, é feita uma regressão linear com os dados ajustados para a ordem de reação encontrada anteriormente, a constante cinética (K) é obtida como a inclinação da reta regressão.

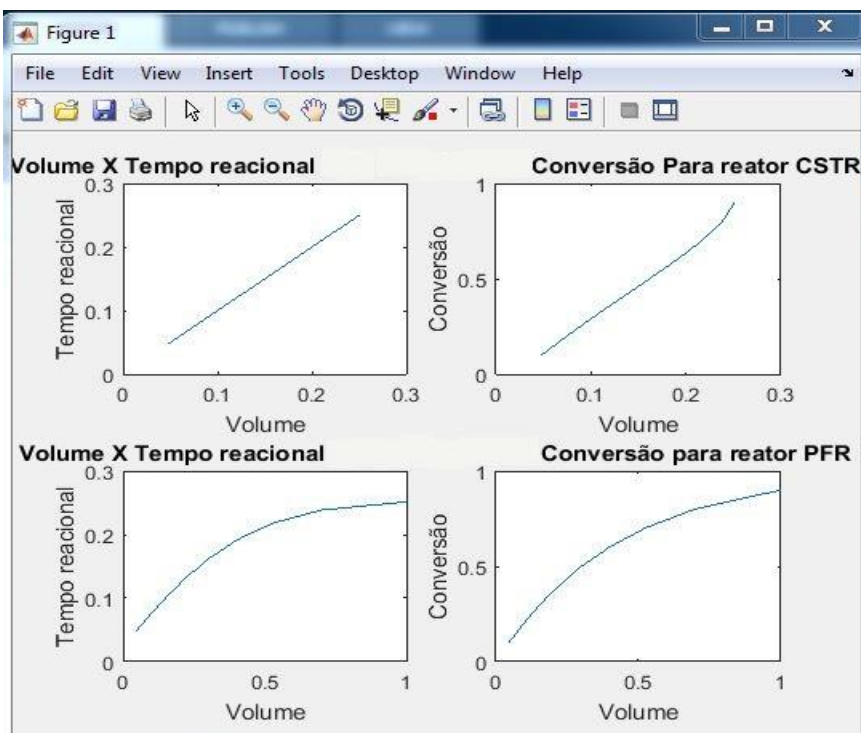
Posteriormente, com a constante cinética e ordem de reação obtidos na etapa anterior, é pedido a vazão do reator que se deseja obter o dimensionamento (Volume) de maior conversão fracional reacional. Os cálculos necessários são feitos para os reatores CSTR e PFR. Gráficos são exibidos para a regressão linear e para os dados no reator CSTR e PFR (Podem ser exibidos volume e conversão fracional em função do tempo de reação, volume e tempo de reação em função da conversão fracional ou conversão fracional e tempo em função do volume). A figura 1 e 2 exemplificam as deficições anteriormente citadas.

Figura 1 – Gráfico da regressão obtido pelos dados de entrada de concentração e tempo.



Fonte: Autores.

Figura 2: Gráficos que relacionam as principais variáveis da projeção de reatores.



Os resultados obtidos estavam voltados para reatores do tipo batelada, tanque agitado (CSTR) e tanque empistonado (PFR) vieram em forma de gráfico em duas dimensões (R^2), sendo as abscissas e ordenadas os termos relacionados à conversão de produto em reagente, dimensionamento (volume) e tempo de operação para cada reator.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados obtidos superaram as expectativas, uma vez que o procedimento de determinação dos parâmetros cinéticos de uma reação química é um procedimento estatístico que demanda muito tempo e que conseqüentemente geram muitos erros de precisão, mostrando sua inviabilidade para a indústria. De contra-partida, o software otimiza esse processo, pois executa o processo em aproximadamente 7,0 segundos, em um desktop com processador Intel® Core™ 2 Duo 2,93GHz e 4 GB de memória RAM, cabendo apenas ao analista discriminar os valores de concentração de reagente ao passar do tempo.

Isso comprova que o software desenvolvido tem grande potencial para ser aplicado em larga escala laboratorial e industrial sem um grande custo computacional.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A Inovação Tecnológica, dentro dos ramos da Engenharia Química, traz desafios cada vez maiores para os profissionais, tendo em paralelo a sua atualização com o ramo da programação. É certo que para que a operação seja a mais eficiente possível, determinadas atividades precisam ter seu tempo otimizado, já que a corrida por obtenção de resultados exatos e precisos é cada vez mais intensa.

Dentro desses parâmetros, as principais utilidades industriais de um processo químico passam por constantes estudos que, antes de qualquer projeção em larga escala, é necessário várias análises laboratoriais, que, na obtenção de produtos de reação, está voltada para os reatores.

Ao ver a aplicação da linguagem de programação para projeção de reatores, é notório que o software elaborado traz uma grande vantagem por ser uma aplicação da otimização de processos. Essa conclusão é sensata, pois não se trata apenas na redução do tempo de análise, mas sim da obtenção de resultados mais precisos e exatos. Que, ao olhar para a projeção de uma planta, traz melhores resultados econômicos quanto ao gasto de materiais e reagentes para

execução do processo, e também para melhoria de operações já consolidadas no ramo da indústria química.

Vendo que o futuro pertencerá aos computadores, adaptar tudo que é estudado no ramo da Engenharia é um avanço tecnológico em razão as agilidade que as ferramentas computacionais proporcionam, que em mãos hábeis mostram uma ampla aplicabilidade e suas deslumbrantes consequências.

REFERÊNCIAS

Ball, David W., 1962- Físico-Química, vol. 2/ David W. Ball; tradução Ana Maron Vichi; revisão técnica Eduardo J. S. Vichi. – São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2006. ISBN 85-221-0418-2.

Fogler, H. Scott, 1939 – Elementos de Engenharia das reações Químicas/ H. Scott Fogler; Tradução Verônica Calado, Evaristo C. Biscaia Dr.; revisão técnica Frederico W. Tavares – 4. Ed. – Rio de Janeiro : LTC, 2009. ISBN 987-85-216-1716-7

Felder, Richard M., 1939 – Princípios elemntares dos processos químicos/ Richard M. Felder, Ronald W. Rousseau; Tradução Martin Aznar – [Reimpr.]. – Rio de Janeiro : LTC, 2012