

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

Jefferson Alves Bezerra ¹

Venancio Vitor Lima da Silva Bezerra ²

Mick Jhordan Vasconcelos Santos ³

Mario Henrique Cosme Juvêncio ⁴

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.

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.

Os princípios da cinética relacionam 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).

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

¹Graduando do Curso de Engenharia Química da Universidade Federal de Alagoas - UFAL, jefferson.bezerra@ctec.ufal.br;

² Graduando do Curso de Engenharia Química da Universidade Federal de Alagoas - UFAL, limvitor@gmail.com;

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;

operações desses reatores consistem num balanço de massa para um dado reagente no processo (Equação 1).

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.

É possível determinar o volume que um reator CSTR ou PFR deverá ter para alcançar uma determinada conversão de reagente em produto (Equação 2 e 3). No caso do reator Batelada, é possível obter o tempo do processo (Equação 4).

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

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

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

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).

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 aos 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.

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. 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, o 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.

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.

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 definições anteriormente citadas.

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

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 conseqüências.

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

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