



ENSINO DE CINÉTICA E CÁLCULO DE REATORES QUÍMICOS UTILIZANDO O SIMULADOR EMSO

R. Rodrigues; C. D. W. Guerra; A. R. Secchi; M. A. Lansarin

Grupo de Integração, Modelagem, Simulação, Controle e Otimização de Processos (GIMSCOP)
Departamento de Engenharia Química – Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Rua Sarmiento Leite, 288/24, CEP: 90050-170 – Porto Alegre – RS – Brasil
Telefone: (51)3316-4103 – Fax: (51)3316-3277 – Email: {rodolfo,wetzel,arge,marla}@enq.ufrgs.br

RESUMO – Atualmente o uso de ferramentas computacionais em sala de aula é bastante corriqueiro e importante por tornar o aprendizado mais construtivo e dinâmico. O objetivo deste trabalho é apresentar um material didático de apoio para utilização em aulas computacionais de disciplinas de cinética e cálculo de reatores químicos. O desenvolvimento do trabalho está fundamentado na implementação direta de exemplos e problemas propostos do livro “Elementos de Engenharia das Reações Químicas” de Fogler (2002) no simulador dinâmico baseado em equações, *EMSO*TM. Os problemas foram implementados de maneira a respeitar a estrutura do problema descrito no livro. Os resultados são ilustrados por gráficos gerados no próprio simulador, permitindo comparações com resultados apresentados no livro e análises mais detalhadas dos efeitos das variáveis do problema. Os problemas são de fácil modificação, permitindo ao aluno “experimentar” várias possibilidades, trocando equações e valores de variáveis, por exemplo, e observando os resultados.

PALAVRAS-CHAVE: cinética e cálculo de reatores químicos; ensino na graduação; material didático; modelagem e simulação; simulador *EMSO*.

ABSTRACT – Nowadays, the use of computational tools in class is quite habitual and important by making the learning process more constructive and dynamic. The objective of this work is to introduce a support didactic material for use in computational classes of chemical reaction engineering. The development of the work is based on a direct implementation of proposed examples and problems of the book “Elements of Chemical Reaction Engineering” by Fogler (1999) in the equation-based dynamic simulator: *EMSO*TM. The problems were implemented in a way to preserve the structure of the problem as described in the book. The results are shown using graphs generated in the simulator, allowing comparisons with the results presented in the book and detailed analyses for effects of variables in the problem. The problems are easily modified, allowing the student to “experiment” several possibilities, changing equations and values of variables, for example, and observing the results.

1. INTRODUÇÃO

O uso cada vez mais freqüente de ferramentas computacionais em sala de aula tem-se tornado bastante habitual e importante no intuito de tornar o aprendizado mais

construtivo e dinâmico. As aulas passam a ter um caráter mais prático, pois, de outra forma, deter-se-ia muito tempo em cima de atividades secundárias e cansativas (por exemplo, a solução analítica de equações matemáticas complexas e a representação de resultados em

gráficos), fugindo muitas vezes do foco principal. Concomitantemente, o uso de ferramentas computacionais torna o aluno por si só, agente de seu próprio aprendizado, pois o incentiva a manipular ferramentas, experimentar múltiplas situações e aprender com isto.

No final da década de 1970, estudos preliminares foram realizados a respeito da aplicação de ferramentas computacionais no ensino de Engenharia Química (Motard e Himmelblau, 1979). A partir de então, trabalhos têm sido apresentados com análises e alternativas no uso de tais recursos, como em Edgar et al. (1985) e Seader (1989). Atualmente, cada vez mais recursos têm sido propostos (David e Bogler, 1996; Kassim, 1996; entre outros), constituindo-se de materiais didáticos e novos softwares. Isto demonstra o quanto se está produzindo neste tema, tornando-se a faixa de opções cada vez mais ampla. Todavia, um dos impasses levantados torna-se a escolha do melhor recurso a ser adotado de acordo com as reais necessidades do usuário, neste sentido tem-se o trabalho de Shacham e Cutlip (1999).

Em Cinética e Cálculo de Reatores Químicos, muitos problemas recaem em sistemas de equações algébricas e/ou diferenciais, o que é, algumas vezes, de resolução trabalhosa por meios analíticos, quando estas existem. E, além do que, a interpretação dos seus resultados depende muitas vezes da confecção de gráficos. Ao se deter de forma manual nestas atividades, acaba-se fugindo do foco principal da disciplina, que é elucidar as equações para o projeto de reatores químicos e, a partir dessas, prever o seu comportamento. Assim, o emprego de ferramentas computacionais para a solução destes problemas torna-se necessário, como é o caso dos simuladores de processos que, dependendo de sua estrutura e forma de funcionamento, podem auxiliar nesta tarefa.

Os simuladores de processos disponíveis no mercado podem ser agrupados

em dois grandes grupos: simuladores sequenciais modulares, tais como o *Aspen Plus*[®] (AspenTech, 2003) e o *HYSYS.Process*[®] (Hyprotech, 1996), e simuladores baseados em equações, tais como o *gPROMS*[®] (PSE, 2005) e o *Aspen Dynamics*[®] (AspenTech, 2003). Simuladores modulares sequenciais contemplam uma interface que dispensa ao usuário o conhecimento da modelagem do processo, o que torna o seu uso seriamente restrito as condições impostas pelo modelo implementado. Nos simuladores baseados em equações, o usuário trabalha diretamente com o modelo matemático, sendo assim extremamente flexíveis de forma a poder se adaptar a situações diversas.

Outro exemplo de simulador baseado em equações é o *EMSO*[™] (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*; Soares e Secchi, 2003), com desenvolvimento continuado previsto pelo projeto ALSOC (<http://www.enq.ufrgs.br/alsoc>), em um consórcio que reúne universidades e empresas petroquímicas nacionais. O simulador foi desenvolvido a partir do trabalho de Soares (2003) com o objetivo de apresentar um novo simulador genérico para processos dinâmicos que satisfaça os usuários, tanto da academia quanto da indústria, de forma mais completa do que os disponíveis no mercado. Como este simulador não apresenta custos para utilização em instituições de ensino, torna-se mais acessível para os fins propostos neste trabalho (utilização em aulas computacionais de Cinética e Cálculo de Reatores Químicos).

Atualmente, o livro “Elementos de Engenharia das Reações Químicas” (Fogler, 2002) tem se destacado como livro-texto predominante no ensino de Cinética e Cálculo de Reatores. Talvez, uma das suas características mais interessantes é o modo como trata exemplos e problemas, com o emprego de ferramentas computacionais. Já nos primeiros capítulos o autor apresenta o *software Polymath*[®] (Cutlip e Shacham, 1998), o qual é distribuído conjuntamente. Este é um

software de solução numérica de equações algébricas e/ou diferenciais, além de problemas de regressão linear e não-linear, com recursos limitados, que roda no sistema *DOS*. As limitações do *software Polymath* e o surgimento do simulador *EMSO* motivaram o desenvolvimento deste trabalho.

O objetivo deste trabalho é apresentar e demonstrar o uso do simulador *EMSO* como ferramenta computacional para dar suporte ao ensino de Cinética e Cálculo de Reatores Químicos. Para tanto, foi desenvolvido um material didático constituído de exemplos e problemas propostos de Fogler (2002) implementados no simulador *EMSO*. No decorrer do texto, as vantagens do uso deste simulador para este fim são evidenciadas e demonstradas com alguns exemplos. Da mesma forma são apresentados resultados comparativos com os apresentados por Fogler (2002), utilizando o *software Polymath*.

2. ALGUMAS CARACTERÍSTICAS DO SIMULADOR EMSO

As principais características e recursos disponíveis no simulador *EMSO* para os objetivos deste trabalho são:

Interface: Possui uma interface amigável, de maneira que se possam manipular múltiplos modelos simultaneamente e, de maneira análoga, visualizar resultados na forma de gráficos.

Linguagem de modelagem: Utiliza uma linguagem de modelagem própria, com conceitos de programação orientada a objetos, tais como herança e composição. O conceito de herança permite se construir modelos complexos a partir de modelos mais simples. Com o conceito de composição podem-se criar modelos a partir de vários outros modelos independentes.

A linguagem de modelagem é estruturada e de utilização prática, apresentando três entidades primordiais:

Model, **DEVICES** e **FlowSheet** (Soares, 2003). O processo como um todo é representado pela entidade **FlowSheet**. Um **FlowSheet** é constituído por um conjunto de componentes, chamados **DEVICES**. Os **DEVICES** são os equivalentes aos equipamentos de um processo. A descrição matemática de cada **DEVICES**, por sua vez é representada pela entidade **Model**.

A entidade **Model** abrange as seguintes seções: **PARAMETERS**, **VARIABLES** e **EQUATIONS**. Nas seções **PARAMETERS** e **VARIABLES**, há a declaração respectivamente das constantes e variáveis do sistema a ser modelado. Em **EQUATIONS**, têm-se as expressões das equações que descrevem este sistema.

A entidade **FlowSheet** contém todas as especificações de um processo através de um conjunto de modelos definidos na seção **DEVICES** ligados entre si na seção **CONNECTIONS**. Em sistemas dinâmicos, as condições iniciais são definidas na seção **INITIAL**. Na seção **SET**, são atribuídos valores às constantes e a seção **SPECIFY** é usada para remover os graus de liberdade do sistema especificando valores para variáveis.

A estruturação de um **FlowSheet** também está baseada nos conceitos de composição e herança de **Models** internos, dentro do mesmo arquivo, ou referenciando-se a **Models** em arquivos externos utilizando o comando **using**.

Solvers: Utiliza-se de pacotes numéricos para resolução de sistemas de equações algébricas ou algébrico-diferenciais, para a solução de problemas estacionários e dinâmicos. Também há pacotes numéricos para resolução de problemas de otimização e estimação de parâmetros.

Rotinas externas: Permite o uso de rotinas externas, criadas pelo usuário em linguagem C/C++ ou Fortran. Assim torna-se possível, entre outras coisas, o uso de pacotes

de propriedades físicas externas permitindo-se resolução de problemas mais complexos.

3. IMPLEMENTAÇÃO

Fogler (1999) utiliza o *Polymath* como ferramenta computacional principal. Esta é apresentada no transcorrer dos capítulos na resolução de alguns problemas. Os problemas abordados pelo autor envolvem regressão linear, sistemas de equações algébricas e sistemas de equações algébrico-diferenciais ordinárias. Dentro das requisições do plano de trabalho do livro, o *Polymath* é usado para resolver estes problemas e obter resultados passíveis de interpretação na forma de gráficos, onde o usuário pode assim tirar as conclusões pertinentes. Os problemas são apresentados e implementados de modo bastante específico, o que torna estes problemas pouco flexíveis.

Dentre os problemas e exemplos propostos no livro-texto, procuraram-se abordar para este trabalho problemas algébricos ou algébrico-diferenciais, em estado estacionário ou transiente, de maneira que a variável independente seja o tempo ou equivalente de representação (por exemplo, o comprimento, em problemas envolvendo reatores tubulares).

A implementação dos problemas é feita da maneira como se o lê, ou seja, a forma da linguagem de modelagem permite que o problema seja escrito praticamente da maneira como o é apresentado no livro-texto. Assim fica acessível ao aluno visualizar a construção do problema, deixando de se preocupar muito com detalhes da linguagem em detrimento ao entendimento do problema físico proposto.

A seguir, para exemplificação, são tratados alguns exemplos de aplicações do simulador *EMSO* nos itens 3.1 e 3.2. No item 3.1 é feito um comparativo entre o *Polymath* e o *EMSO* na aplicação de ambos os *softwares* para a solução de um mesmo problema. E na seqüência, no item 3.2, evidencia-se através de

um outro exemplo algumas características do *EMSO* não contempladas no *Polymath*.

3.1 Comparativo entre *Polymath* e *EMSO*

Para fins de comparação da linguagem, é implementado o exemplo resolvido 9-4, pp. 504-509 de Fogler (2002). Este é um problema dinâmico, representando a partida de um CSTR em fase líquida com reação exotérmica do tipo $A + B \rightarrow C$ e de 1ª ordem em relação ao componente A, tendo-se M como inerte. Há também a presença de um trocador de calor. Solicita-se no problema a construção de gráficos com as variações temporais da concentração de A e da temperatura no reator.

Na Figura 1 tem-se a reprodução do problema no *Polymath*, da maneira como o é apresentado em Fogler (2002).

Equations	Initial values
$d(Ca)/d(t)=1/\tau*(Ca_0-Ca)+ra$	0
$d(Cb)/d(t)=1/\tau*(Cb_0-Cb)+rb$	3.45
$d(Cc)/d(t)=1/\tau*(0-Cc)+rc$	0
$d(Cm)/d(t)=1/\tau*(Cm_0-Cm)$	0
$d(T)/d(t)=(Q-Fa_0*ThetaCp*(T-T_0))+(-36000)*ra*V)/NCP$	75
$Fa_0=80$ $T_0=75$ $V=(1/7.484)*500$ $UA=16000$ $Ta_1=60$ $k=16.96e12*exp(-32400/1.987/(T+460))$ $Fb_0=1000$ $Fm_0=100$ $mc=1000$ $ra=-k*Ca$ $rb=-k*Ca$ $rc=k*Ca$ $Nm=Cm*V$ $Na=Ca*V$ $Nb=Cb*V$ $Nc=Cc*V$ $ThetaCp=35+Fb_0/Fa_0*18+Fm_0/Fa_0*19.5$ $v_0=Fa_0/0.923+Fb_0/3.45+Fm_0/1.54$ $Ta_2=T-(T-Ta_1)*exp(-UA/(18*mc))$ $Ca_0=Fa_0/v_0$ $Cb_0=Fb_0/v_0$ $Cm_0=Fm_0/v_0$ $Q=mc*18*(Ta_1-Ta_2)$ $tau=V/v_0$ $NCP=Na*35+Nb*18+Nc*46+Nm*19.5$ $t_0 = 0, \quad t_f = 4$	

Figura 1 – Representação do problema 9-4 no *Polymath*.

Nesta representação, fica evidente a simplicidade de implementação nesta ferramenta matemática. As equações são inseridas de forma direta e, da mesma forma, é feita a declaração de variáveis e constantes. Como resultado, a leitura final das variáveis pode ser feita por meio de tabelas ou gráficos.

O ponto principal desta ferramenta está na flexibilidade, que se torna limitante para alguns casos. Procedimentos, tais como, execução de problemas em seqüência e a comparação simultânea de resultados, tornam-se irrealizáveis.

Na seqüência, tem-se a implementação do mesmo exemplo no *EMSO*, usando-se de todas as funcionalidades da sua linguagem de modelagem, conforme as Figuras 2 e 3.

```

01 using "types";
02
03
04 Model CSTR
05 PARAMETERS
06 NComp as Integer; # Number of components
07 stoic(NComp) as Real; # Stoichiometric number
08 UA as Real (Brief="Heat exchange coefficient", Unit="Btu/degR/h");
09 V as volume (Brief="Volume of the reactor");
10 Ta1 as temperature (Brief="Cooling temperature");
11 DH as enth_mol (Brief="Molar reaction enthalpy");
12 rho(NComp) as dens_mol (Brief="Molar density");
13 Cp(NComp) as cp_mol (Brief="Molar heat capacity");
14 k0 as frequency (Brief="Frequency factor");
15 E as energy_mol (Brief="Activation energy");
16 R as Real (Brief="Gas constant", Unit="Btu/lbmol/degR", Default=1.987);
17
18 VARIABLES
19 C(NComp) as conc_mol (Brief="Molar Concentration", Unit="lbmol/ft^3");
20 C0(NComp) as conc_mol (Brief="Initial Concentration", Unit="lbmol/ft^3");
21 T as temperature (Brief="Temperature of the reactor", Unit="degR");
22 mc as flow_mol (Brief="Molar flow of cooling water", Unit="lbmol/h");
23 r(NComp) as reaction_mol (Brief="Rate of reaction", Unit="lbmol/ft^3/h");
24 Ta2 as temperature (Brief="Temperature of heat exchange", Unit="degR");
25 N(NComp) as mol (Brief="Molar holdup", Unit="lbmol");
26 Q as heat_rate (Brief="Exchange heat", Unit="Btu/h");
27 k as frequency (Brief="Specific rate of reaction", Unit="1/h");
28 F0(NComp) as flow_mol (Brief="Initial molar flow", Unit="lbmol/h");
29 T0 as temperature (Brief="Initial temperature", Unit="degR");
30 Theta(NComp) as Real (Brief="Relation molar fraction");
31 v0 as flow_vol (Brief="Volumetric flow", Unit="ft^3/h");
32 tau as time_h (Brief="Residence time", Unit="h");
33
34 EQUATIONS
35 "Material balance"
36 diff(C) = r + (C0 - C)/tau;
37 "Energy balance"
38 diff(T) = sumt(N*Cp) = Q - F0(1)*sumt(Theta*Cp)*(T - T0) + DH*r(1)*V;
39 "Rate of reaction"
40 r = stoic*k*C(1);
41 "Specific rate of reaction"
42 k = k0*exp(E/R/T);
43 "Residence time"
44 tau = V/v0;
45 "Volumetric flow"
46 v0 = sumt(F0/rho);
47 "Temperature of heat exchange"
48 Ta2 = T - (T - Ta1)*exp(-UA/(Cp(2)*mc));
49 "Exchange heat"
50 Q = mc*Cp(2)*(Ta1 - Ta2);
51 "Input molar concentration"
52 C0 = F0/v0;
53 "Molar holdup"
54 N = C*V;
55 "Relation between molar fractions"
56 Theta = F0/F0(1);
57 end
58

```

Figura 2 – Representação do modelo do CSTR para o problema 9-4 no simulador *EMSO*.

Os resultados são representados nas Figuras 4 e 5, que são similares aos obtidos através do *Polymath*. A respeito da linguagem de modelagem e do simulador *EMSO* cabe-se salientar os seguintes pontos:

1. Possibilidade de se atribuir um tipo (comprimento, temperatura, pressão, etc.) às variáveis declaradas. Incompatibilidades de unidades são verificadas pelo próprio simulador que realiza as devidas conversões entre unidades.

2. Representação de variáveis como vetores, o que simplifica a representação destas no modelo. Por exemplo, a concentração *C* é definida como um vetor de componentes *NComp*, o que se permite apresentar o balanço material somente pela equação da linha 36 da Figura 1. Dispensa-se o uso de comandos em laços, este procedimento é feito internamente pelo simulador.

3. A estruturação da linguagem torna o problema mais customizável ao separá-lo em entidades. Tem-se variáveis, equações e atribuições de valores às variáveis, declaradas nas respectivas seções.

4. Os resultados gerados podem ser representados em gráficos na mesma interface. Há suporte a sobreposição de resultados no mesmo gráfico, o que é útil em comparações de resultados.

```

59
60 FlowSheet CSTR_startup
61 DEVICES
62 CSTR_startup as CSTR;
63
64 SET
65 CSTR_startup.NComp = 4; # A, B, C and M
66 CSTR_startup.stoic = [-1, -1, 1, 0];
67 CSTR_startup.UA = 16000*Btu/h/degR;
68 CSTR_startup.V = 500*gal^3;
69 CSTR_startup.Ta1 = (60 + 460)*degR;
70 CSTR_startup.DH = -3.6e4*Btu/lbmol;
71 CSTR_startup.rho = [0.923, 3.45, 1, 1.54]*lbmol/ft^3;
72 CSTR_startup.Cp = [35, 18, 46, 19.5]*Btu/lbmol/degR;
73 CSTR_startup.k0 = 16.96e12*1/h;
74 CSTR_startup.E = -32400*Btu/lbmol;
75
76 SPECIFY
77 "Inlet molar flow"
78 CSTR_startup.F0 = [80, 1000, 0, 100]*lbmol/h;
79 "Inlet temperature in the reactor"
80 CSTR_startup.T0 = (75 + 460)*degR;
81 "Molar flow of cooling water"
82 CSTR_startup.mc = 1e3*lbmol/h;
83
84 INITIAL
85 "Molar concentration"
86 CSTR_startup.C = [0, 3.45, 0, 0]*lbmol/ft^3;
87 "Temperature in the reactor"
88 CSTR_startup.T = CSTR_startup.T0;
89
90 OPTIONS
91 outputLevel = "high";
92 time = [0:0.01:4]*h;
93 end
94

```

Figura 3 – Representação do problema 9-4 propriamente dito no simulador *EMSO*.

Os resultados nas Figuras 4 e 5 são apresentados em unidades inglesas para manter as características do problema apresentado no livro, mas podem ser facilmente convertidos para o sistema internacional dentro do simulador *EMSO*.

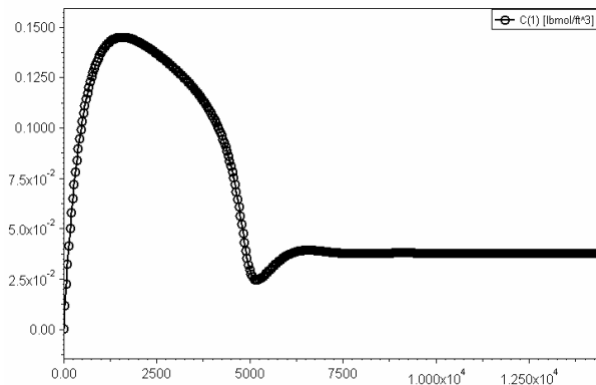


Figura 4 – Gráfico da variação temporal da concentração molar do componente A dada em lbmol/ft^3 e tempo em segundos, obtido no *EMSO*.

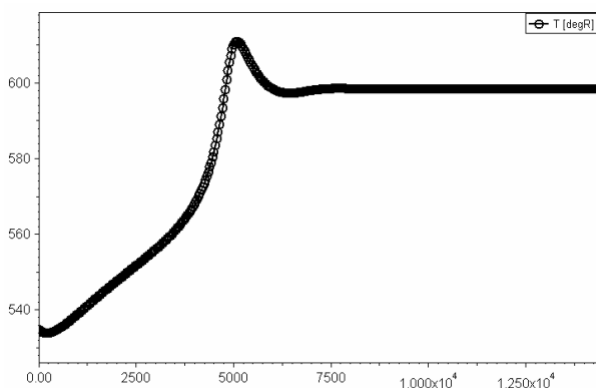


Figura 5 – Gráfico da variação temporal da temperatura no reator dada em $^{\circ}\text{R}$ e tempo em segundos, obtido no *EMSO*.

3.2 Reatores conectados em série

Um dos problemas clássicos em Cinética e Cálculo de Reatores Químicas é o de comparar a eficiência entre diversas configurações de reatores CSTR e PFR ligados em série. Os recursos da linguagem de modelagem do simulador *EMSO* tornam este tipo de problema de fácil implementação, resolução e interpretação de resultados.

Uma vez criados modelos (**Model**) independentes de reatores CSTR e PFR, o que se tem a fazer é criar um fluxograma (**FlowSheet**) conectando tais modelos (**DEVICES**) na ordem em que se queira. A

seguir, é tratado um exemplo simples no qual se testam duas ordens diferentes possíveis de conexões em série entre um reator CSTR e um PFR. Ambos os reatores são considerado isotérmicos de fase gasosa e em estado estacionário. Esta é uma adaptação do exemplo resolvido 2-7, pp. 48-49 de Fogler (2002).

```

01
02 using "types";
03
04
05 #*-----
06 * Model of a stream
07 #*-----
08
09 Model stream
10 VARIABLES
11 F as flow_mol (Brief="Molar flow", Unit="mol/s");
12 X as fraction (Brief="Molar conversion", Lower=0);
13 end
14
15 #*-----
16 * Model of a steady-state CSTR
17 #*-----
18
19
20 Model cstr
21 VARIABLES
22 in Inlet as stream # Inlet stream
23 out Outlet as stream # Outlet stream
24 r as reaction_mol (Brief="Rate of reaction", Unit="mol/l/s");
25 V as volume (Brief="Volume", Unit="l");
26
27 EQUATIONS
28 "Component molar balance"
29 Inlet.F - Outlet.F = (-r)*V;
30 "Outlet molar flow"
31 Outlet.F = Inlet.F*(1 - Outlet.X);
32 end
33
34 #*-----
35 * Model of a steady-state PFR
36 #*-----
37
38
39 Model pfr
40 VARIABLES
41 in Inlet as stream # Inlet stream
42 out Outlet as stream # Outlet stream
43 r as reaction_mol (Brief="Rate of reaction", Unit="mol/l/s");
44 V as volume (Brief="Volume", Unit="l");
45
46 EQUATIONS
47 "Molar balance"
48 diff(V) = Inlet.F/(-r)**1/s;
49 "Change time in X"
50 Outlet.X = time**1/s;
51 "Molar flow"
52 Outlet.F = Inlet.F*(1 - Outlet.X);
53 end
54
55 #*-----
56 * Model of a discreted steady-state PFR
57 #*-----
58
59
60 Model pfr_d
61 PARAMETERS
62 N as Integer (Brief="Number of discrete points", Default=200);
63
64 VARIABLES
65 in Inlet as stream # Inlet stream
66 out Outlet as stream # Outlet stream
67 r(N) as reaction_mol (Brief="Rate of reaction", Unit="mol/l/s");
68 V(N) as volume (Brief="Volume", Unit="l");
69 F(N) as flow_mol (Brief="Molar flow", Unit="mol/s");
70 X(N) as fraction (Brief="Molar conversion", Lower=0);
71 dx as fraction (Brief="Interval increment");
72
73 EQUATIONS
74 "Interval increment"
75 dx = X(N)/N;
76
77 for i in [2:N]
78 "Molar balance"
79 V(i) - V(i-1) = Inlet.F*dx/(-r(i));
80 "Discrete molar conversion"
81 X(i-1) = X(i) - dx;
82 end
83
84 "Molar flow"
85 F = Inlet.F*(1 - X);
86 "Outlet molar flow"
87 Outlet.F = F(N);
88 "Outlet molar conversion"
89 Outlet.X = X(N);
90 end
91

```

Figura 6 – Representação dos modelos de CSTR e PFR estacionário.

Na Figura 6, tem-se representados os modelos de reatores CSTR e PFR, e na Figura 7, a modelo do processo, considerando

os dois esquemas possíveis de conexão. Para a primeira configuração, isto é, PFR seguido de CSTR, obteve-se como resposta um volume total de 370,58dm³. Já para a segunda configuração, isto é, CSTR seguido de PFR, obteve-se como resposta um volume total de 243,142dm³. Estas respostas apresentam discrepâncias com as apresentadas em Fogler (2002), pois a taxa da reação foi considerada como uma expressão polinomial ajustada (linha 109 da Figura 7) pelos valores apresentados na Tabela 2-1 (Fogler, 2002).

```
92
93 #*-----*#
94 * Example 2-7a: PFR and CSTR in series
95 *-----*#
96
97 FlowSheet_pfr_cstr
98 DEVICES
99 Inlet as stream # Inlet stream
100 R1 as pfr_d;
101 R2 as cstr;
102
103 CONNECTIONS
104 Inlet to R1.Inlet;
105 R1.Outlet to R2.Inlet;
106
107 EQUATIONS
108 "Rate of reaction in 1st reactor"
109 (-R1.r) = (0.0092*R1.X^3 - 0.0153*R1.X^2 +
110 0.0013*R1.X + 0.0053)*"mol/l/s";
111 "Rate of reaction in 2nd reactor"
112 (-R2.r) = (0.0092*R2.Outlet.X^2 +
113 0.0013*R2.Outlet.X + 0.0053)*"mol/l/s";
114
115 SPECIFY
116 "Inlet molar flow"
117 Inlet.F = 0.866541*"mol/s";
118 "Inlet molar conversion"
119 Inlet.X = 0;
120 "Required conversion in 1st reactor"
121 R1.Outlet.X = 0.5;
122 "Required conversion in 2nd reactor"
123 R2.Outlet.X = 0.8;
124 "Inlet volume in 1st reactor"
125 R1.V(1) = 0*"l";
126
127 OPTIONS
128 outputLevel = "high";
129 mode = "steady";
130 end
131
132 #*-----*#
133 * Example 2-7b: CSTR and PFR in series
134 *-----*#
135
136 FlowSheet_cstr_pfr
137 DEVICES
138 Inlet as stream # Inlet stream
139 R1 as cstr;
140 R2 as pfr_d;
141
142 CONNECTIONS
143 Inlet to R1.Inlet;
144 R1.Outlet to R2.Inlet;
145
146 EQUATIONS
147 "Rate of reaction in 1st reactor"
148 (-R1.r) = (0.0092*R1.Outlet.X^3 - 0.0153*R1.Outlet.X^2 +
149 0.0013*R1.Outlet.X + 0.0053)*"mol/l/s";
150 "Rate of reaction in 2nd reactor"
151 (-R2.r) = (0.0092*R2.X^3 - 0.0153*R2.X^2 +
152 0.0013*R2.X + 0.0053)*"mol/l/s";
153
154 SPECIFY
155 "Inlet molar flow"
156 Inlet.F = 0.866541*"mol/s";
157 "Inlet molar conversion"
158 Inlet.X = 0;
159 "Required conversion in 1st reactor"
160 R1.Outlet.X = 0.5;
161 "Required conversion in 2nd reactor"
162 R2.Outlet.X = 0.8;
163 "Inlet volume in 1st reactor"
164 R2.V(1) = 0*"l";
165
166 OPTIONS
167 outputLevel = "high";
168 mode = "steady";
169 end
170
171
```

Figura 7 – Representação do processo nos dois esquemas de conexão.

Na Figura 6 também são apresentadas duas maneiras de implementar o modelo do reator PFR estacionário, usando os recursos

atuais da linguagem do simulador. Na primeira versão (**Model pfr**, linha 39), o modelo é implementado no modo dinâmico do simulador, onde a equação diferencial que descreve o balanço de massa diferencial no reator é integrada usando a variável independente reservada para o “tempo”, bastando para isto converter esta variável para conversão com as devidas correções de unidades. Na segunda versão (**Model pfr_d**, linha 60), o modelo é implementado no modo estacionário, aplicando a técnica de diferenças finitas para discretizar a variável espacial. Esta segunda versão foi necessária para poder se conectar os dois reatores em estado estacionário. A Figura 8 mostra o perfil de conversão ao longo do reator PFR, comparando as soluções das duas versões do modelo. Esta comparação foi realizada para definir o número adequado de pontos para a discretização.

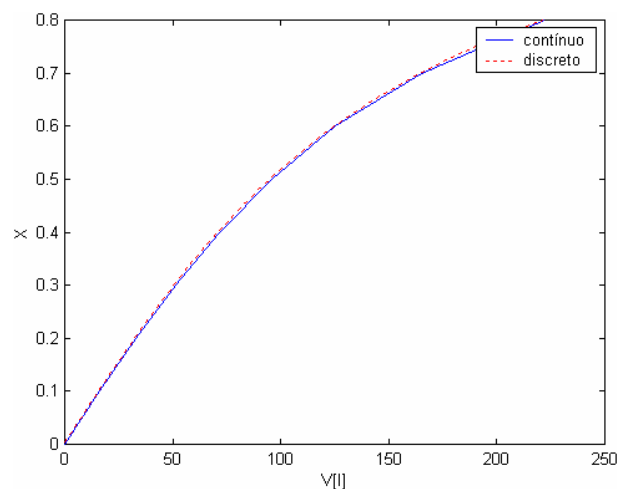


Figura 8 – Comparação dos perfis de conversão dos modelos contínuo e discreto do reator PFR.

4. CONCLUSÕES

Com este presente trabalho procurou-se demonstrar uma ferramenta alternativa robusta para o uso no ensino de Cinética e Cálculo de Reatores Químicos. O simulador *EMSO* apresentou-se bastante flexível para os fins propostos. Sua linguagem de modelagem



estruturada deixa as implementações melhores organizadas e com isto de fáceis visualizações e modificações. O usuário ganha em entendimento e rapidez no aprendizado. Os exemplos apresentados e implementados no simulador EMSO, bem como outros exemplos do livro de Fogler (2002) à medida que estão sendo gerados, estão disponíveis no endereço <http://www.enq.ufrgs.br/alsoc>.

5. REFERÊNCIAS

- Aspen Tech, Engineering Suite, version 12.1. Cambridge, 2003.
- CUTLIP, M. B.; SHACHAM, M., Polymath, version 4.1., 1998.
- DAVID, I.; BOGLE, L. An introductory course in computer aided process engineering (CAPE). *Comp. & Chem. Eng.*, v. 20, s. 2, p. S1323-S1327, 1996.
- EDGAR, T. F.; MAH, R. S. H.; REKLAITIS, G. V. Use of computers in chemical-engineering education. *Chem. Eng. Prog.*, v. 81(9), p. 9-13, 1985.
- FOGLER, H. S. *Elementos de Engenharia das Reações Químicas*. 3ª ed. Rio de Janeiro, RJ: LTC, 2002.
- FOGLER, H. S. *Elements of Chemical Reaction Engineering*. 3rd ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 1999.
- Hyprotec, HYSYS.Process, version 1.5. Calgary, 1996.
- KASSIM, H. O.; CADBURY, R. G. The place of the computer in chemical engineering education. *Comp. & Chem. Eng.*, v. 20, s. 2, p. S1341-S1346, 1996.
- MOTARD, R. L.; HIMMELBLAU, D. M. Current situation on the use of computers in the education of chemical engineers in the U.S.A. *Comp. & Chem. Eng.*, v. 3, i. 1-4, p. 213-216, 1979.
- PSE, Process Systems Enterprise Limited, gPROMS ModelBuilder, version 2.3.5. London, 2005.
- SEADER, J. D. Education and training in chemical engineering related to the use of computers. *Comp. & Chem. Eng.*, v. 13, i. 4-5, p. 377-384, 1989.
- SHACHAM, M.; CUTLIP, M. B. Selecting the appropriate numerical software for a chemical engineering course. *Comp. & Chem. Eng.*, v. 23, s. 19, p. S645-S648, 1999.
- SOARES, R. P. *Desenvolvimento de um Simulador Genérico de Processos Dinâmicos*. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Escola de Engenharia. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2003.
- SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. Emso: A new environment for modelling, simulation and optimization. In ESCAPE, 13., 2003. *Elsevier Science Publishers*, 2003, p. 947-952.