

SIMULAÇÃO DE UM REATOR BATELADA UTILIZANDO O XCOS

Victor Felipe Arthur Coutinho Ladeia¹; Rosilanny Soares Carvalho²; Tatiane Reis do Amaral³

Resumo: A modelagem e a simulação são ferramentas básicas para se prever o comportamento dos processos. No presente trabalho tem como objetivo analisar o comportamento dinâmico de um reator utilizando-se a ferramenta Xcos no software Scilab. Empregou-se o ambiente Xcos com o intuito de facilitar a compreensão tornando mais atrativo o estudo e entendimento do funcionamento de uma simulação. Neste ambiente o usuário tem a opção de entrar com os dados e obter as respostas prontas na forma de gráficos, além de utilizar este ambiente para criar o seu próprio código e analisar sua resposta. O resultado obtido foi satisfatório tendo em vista que coincidiu com a solução analítica, obtendo-se o tempo em que uma determinada conversão irá ocorrer em um reator batelada isotérmico perfeitamente agitado.

Palavras-chave: Modelagem. Reator. Simulação. Xcos.

Introdução

A modelagem pode ser interpretada como uma formulação de um modelo que represente algo e reproduza um sistema real através de uma linguagem, um meio, e de acordo com um ponto de vista. Os aspectos fundamentais de um modelo são simplicidade e facilidade (TRIVELATO, 2003).

A modelagem e simulação são imprescindíveis à engenharia quando se deseja fazer previsões sobre o comportamento de um processo, em diferentes condições de operação. Os parâmetros podem ser variados facilmente em grandes intervalos, ao contrário da investigação experimental que muitas vezes se torna inviável devido ao fato de ser muitas vezes onerosa, árdua, ou até mesmo impossível de ser realizada (BOYCE; PRIMA, 2010).

Para facilitar a construção do modelo considera-se que as misturas são perfeitas, ou seja, todos os componentes estão distribuídos uniformemente no espaço do qual contem a mistura. Em relação aos cálculos de balanços de massa, devem ser realizados para o componente que se deseja analisar, com o intuito de se obter uma equação diferencial, para que assim seja possível entender o modelo que caracteriza o estado dependente do tempo do sistema (FOGLER, 2009).

Uma maneira de se resolver um sistema dinâmico é a sua representação por meio de diagramas de blocos, onde a solução da simulação é obtida graficamente. Na ferramenta Xcos, ambiente de simulação Scilab, os blocos estão organizados em grupos específicos denominados paletas. Cada bloco exerce a

1 Acadêmico do curso de Engenharia Química do IFNMG, Campus Montes Claros. Email: ladeia_victor@yahoo.com.br

2 Acadêmica do curso de Engenharia Química do IFNMG, Campus Montes Claros. Email: rosilannysoares@hotmail.com

3 Docente do IFNMG, Campus Montes Claros. Curso de Engenharia Química. Email: tatianeramaral@gmail.com

função de receber e fornecer dados nas portas de entrada e saída, respectivamente (PATIL et al., 2012).

No presente trabalho, teve-se como objetivo analisar o comportamento dinâmico de um reator utilizando-se o Xcos com a finalidade de simular uma reação irreversível de segunda ordem no referido reator batelada ideal.

Material e Métodos

Por meio de manipulações matemáticas e combinando-se o balanço molar, a lei da velocidade e a estequiometria da reação $A \rightarrow B$, tem-se a seguinte equação diferencial para a reação irreversível de segunda ordem em batelada com volume constante, ocorrendo isotermicamente e perfeitamente agitada:

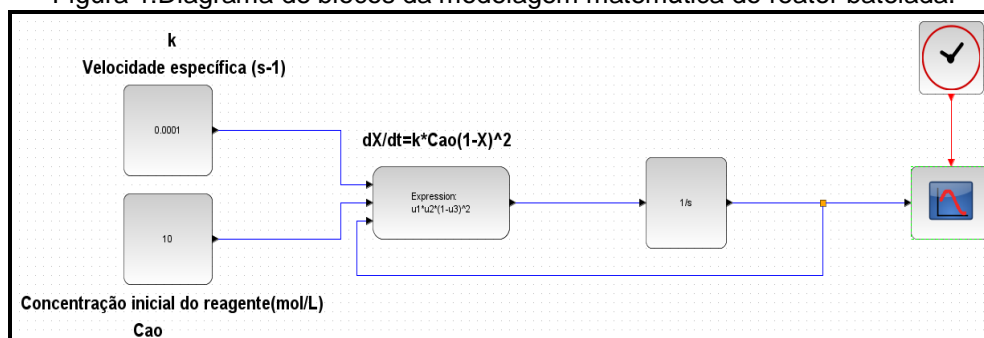
$$\frac{dX_A}{dt} = kC_{A0}(1 - X_A)^2$$

Considerando-se a concentração inicial do reator igual a $C_{A0}=10$ mols/L e a velocidade específica da reação acima $k= 10^{-4}s^{-1}$, assim obteve-se a modelagem matemática do reator em estudo, tornando possível a montagem do diagrama de blocos no Xcos e a simulação do reator em batelada.

Resultados e Discussão

Conforme descrito anteriormente foi obtido o seguinte o diagrama de blocos que representa a modelagem do reator batelada ideal.

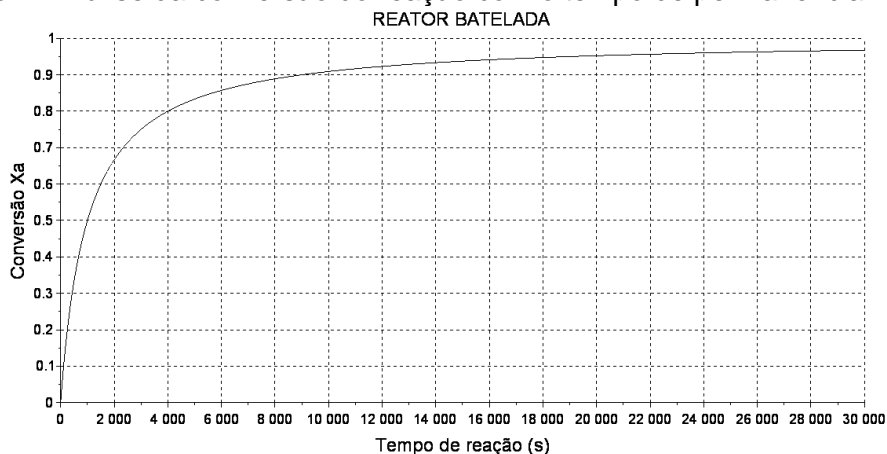
Figura 1: Diagrama de blocos da modelagem matemática do reator batelada.



Fonte: Autores.

Ao simular o diagrama acima foi obtido o seguinte gráfico1. Observando-se o Gráfico 1 pode-se constatar que 90% do produto A é convertido em reagente em um tempo de reação de 9000 segundos ou 2,5 horas. Tendo em vista que esse fora exatamente o tempo encontrado quando a equação de modelagem foi resolvida analiticamente, logo verifica-se que os resultados foram satisfatórios. E que apesar de ser um modelo de simples implementação pode-se estudar como a concentração e a velocidade específica influenciam na conversão sem a necessidade de se refazer cálculos, mas apenas mudando o valor das constantes no diagrama de blocos.

Gráfico 1: Análise da conversão do reação com o tempo de permanência no reator



Conclusões

O Xcos tem uma interface amigável, funções matemáticas e recursos gráficos, além de recursos computacionais capazes de desenvolver o modelo selecionado. O software Scilab atendeu ao objetivo que consistiu em simular um reator e compreender como se processou a conversão da reação com o tempo. Dessa forma o ambiente de simulação Xcos mostrou ser uma ferramenta eficiente na realização deste trabalho.

Referências

BOYCE, William E. **Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno**. Rio de Janeiro: LTC, 2010.

FOGLER, H. Scott. **Elementos de engenharia das reações químicas**. Rio de Janeiro: LTC, 2009

PATIL, J. Y.; DUBEY, B.; MOUDGALYA, K. M.; PETER, R. **GNURadio, Scilab, Xcos and COMEDI for Data Acquisition and Control: An Open Source Alternative to LabVIEW**, In: 8th IFAC Symposium on Advanced Control of Chemical Processes, **Anais**, Furama Riverfront, 2012.

TRIVELATO, G. C. **Técnicas de modelagem e simulação de sistemas dinâmicos**. Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais. São José dos Campos, 2003.

Agradecimentos

Agradecemos ao IFNMG-Campus Montes Claros pelo apoio financeiro e pela colaboração.