

PROJETO DE UM REATOR DE FLUXO TUBULAR

Cálculo em programação BASIC

Benedito Inácio da Silveira*

RESUMO

Com o desenvolvimento tecnológico no campo da informática, principalmente no que se refere aos microcomputadores, estou certo tanto estudantes como engenheiros, para desenvolverem suas atividades com eficiência devem necessariamente ter completo domínio da programação eletrônica.
Este trabalho tem a finalidade de apresentar a eficiência, a exatidão e a simplicidade como um problema extenso, complexo e comum dentro da engenharia química pode ser resolvido por um programa em linguagem BASIC de microcomputador.

SUMMARY

With the technological improvement in the sphere of the electronic computation mainly the microcomputers, students and engineers for to develop yours activities with efficiency need a complete control of the calculator programs. The purpose of this work is to present the efficiency, the precision and the simplicity how a extensive, complex and usual problem within of the chemical engineering may be solved by a calculator program in BASIC language of micro computer.

*Engenheiro Químico (UFPR), mestre em engenharia (EPUSP), Prof. de Processos Químicos e de Cinética e Cálculo de Reatores no Departamento de Tecnologia Química - UFPR.

Introdução

No campo da engenharia, tanto na parte educacional como industrial, estudantes e profissionais deparam diariamente com problemas que envolvem cálculos complexos os quais muitas vezes são repetitivos, sendo necessária uma seqüência rotineira mas que exige esforço e tempo. Tais cálculos podem ser realizados de forma mais eficiente e adequada se bem programados por computadores.

Nos últimos anos vêm sendo desenvolvidos e aprimorados os microcomputadores, e com eles a linguagem BASIC, os quais quando bem explorados constituem uma eficiente ferramenta. Estes equipamentos tanto do ponto de vista econômico como do operacional são de fácil acesso, entretanto para se trabalhar com os mesmos é necessário um estudo minucioso, principalmente quando se trata de programar problemas mais extensos e mais complexos. Em virtude disto os microcomputadores vêm sendo difundidos de maneira lenta no meio técnico e de forma ainda mais lenta no meio educacional.

Atualmente existem muitos programas publicados principalmente em linguagem FORTRAN que realizam cálculos relacionados a projetos no campo da Engenharia Química. Apesar disto, em linguagem BASIC são poucos os existentes e mesmo assim estão pouco divulgados.

Quando se trata da formação escolar do engenheiro, temos observado que os alunos consomem mais tempo nas soluções numéricas dos problemas do que na solução conceitual, muitas vezes deixando até de compreender o assunto devido ao envolvimento de sua solução.

A programação é um recurso muito importante e estou inclinado a pensar que tal recurso já se tornou indispensável na vida acadêmica e profissional daqueles que pertencem ao meio técnico.

Este trabalho tem a finalidade de apresentar a solução de um problema no campo da cinética e cálculo de reatores cuja complexidade do mesmo pode ser observada na sua apresentação e solução e consequentemente detectar a importância da programação.

Necessário se faz acrescentar que se o programador não possuir uma certa habilidade no manejo das técnicas de programação, terá mais dificuldade para programar a solução do problema do que resolvê-lo manualmente. Pois para resolver um problema além da habilidade técnica é necessário uma definição precisa do procedimento resolutivo, bem como uma organização rigorosa do problema.

Apresentação do Problema

Dentro da cinética e cálculos de reatores, os reatores de fluxo tubular são apresentados com características especiais, quais sejam:

- Facilidade de controle
- Economia de mão de obra
- Construção mecânica simples
- Adaptabilidade à transferência de calor e a altas pressões
- Qualidade invariável do produto
- Elevada capacidade

Para se projetar um reator de fluxo tubular em escala comercial é muito vantajoso dispor de dados cinéticos obtidos em escala de laboratório. Nem sempre tais dados estão disponíveis, e mesmo com eles à disposição os cálculos de projeto são extensos e complexos, normalmente são utilizados os cansativos métodos das tentativas e erros. Às vezes não é possível ou desejável operar um reator de fluxo tubular em condições isotérmicas.

Para o caso onde a transferência de calor do meio para o reator ou no caso inverso é importante, tanto a temperatura como a conversão são funções do comprimento do reator. É o caso que vamos tratar a seguir.

A pirólise do etano no intervalo de temperatura de 650 à 930°C pode ser representada por uma reação irreversível de 1ª ordem, como:



São alimentados 820 Kg/h de etano puro a 650°C em um tubo de 8cm de diâmetro interno contido num forno de pirólise. O calor é fornecido ao tubo a razão de 12500Kcal/ h m² se.

(de área interna).

A queda de pressão ao longo do tubo é pequena e a pressão média pode ser tomada como 2,5 ata.

Admitindo-se que o reator seja de fluxo tubular, deseja-se calcular o comprimento do tubo necessário para obter uma conversão de 75%.

Deseja-se também o comprimento (em m), a temperatura (em K) e a conversão após cada incremento no comprimento do tubo.

DADOS:

$$\Delta H_f \text{ a } 298 \text{ K}$$

$$C_p$$

$$(\text{cal/g - mol})$$

$$(\text{cal/g-mol K})$$

$$C_2 H_6 (\text{g}) = 20.236 - 3,75 + 35,7 \times 10^3 \times T - 10,12 \times 10^6 \times T^2$$

$$C_2 H_4 (\text{g}) = 12.496 - 5,25 + 24,2 \times 10^3 \times T - 6,88 \times 10^6 \times T^2$$

$$H_2 (\text{g}) = 0 - 7,00 - 0,385 \times 10^3 \times T + 0,6 \times 10^6 \times T^2$$

- Velocidade específica da reação

$$k = 5,764 \times 10^{16} \times e^{-\frac{41.310}{T}} \text{ (s}^{-1}\text{)}$$

- Constante dos gases

$$R = 0.082 \text{ m}^3 \text{ atm/kg-mol K}$$

A partir de um balanço material no elemento do etano, temos:

SOLUÇÃO:

Considerando a estequiométria da reação pode-se escrever:



Fluxo molar na entrada F_{Ao} 0 0

Fluxo molar após uma conversão X_A $F_{Ao} (1 - X_A)$ $F_{Ao} \cdot X_A$ $F_{Ao} \cdot X_A$

O fluxo molar total em qualquer ponto do reator é:

$$F_{Ao} (1 - X_A) + 2 F_{Ao} \cdot X_A = F_{Ao} (1 + X_A)$$

E a fração molar correspondente do etano é:

$$x = (1 - X_A) / (1 + X_A)$$

Com estas considerações pode-se concluir a solução do problema realizando-se um balanço material e de energia sob condições de fluxo em estado estacionário num elemento diferencial dL do comprimento do reator, como se encontra na figura abaixo:

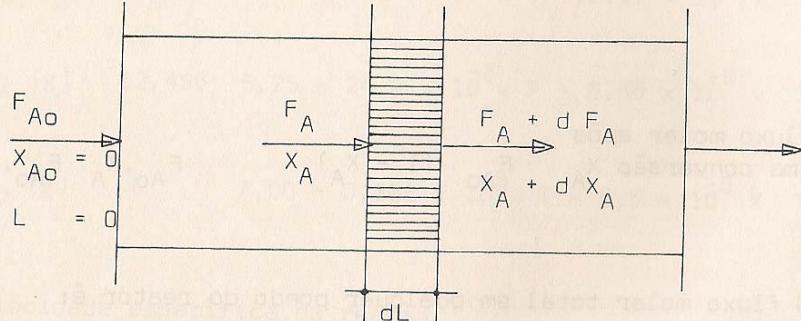


Figura representativa de um reator de fluxo tubular

A partir de um balanço material no elemento dV , chega-se à equação

$$(-r_A) = \frac{dF_A}{dV}$$

$$\text{ou } (-r_A) = \frac{F_{Ao}}{A} \times \frac{dX_A}{dL} \quad (1)$$

Por outro, para uma reação irreversível de 1ª ordem a velocidade de reação $(-r_A)$ vem dada por:

$$(-r_A) = -k C_A = -k \frac{x_A P}{RT} = -k \frac{1 - X_A}{1 + X_A} \frac{P}{RT}$$

A partir das eq. (1) e (2) é possível isolar o aumento diferencial da conversão $[dX_A]$ em função do elemento diferencial do comprimento (dL) , como segue:

$$dX_A = \frac{A P}{F_{Ao} \cdot R} \cdot \frac{k}{T} \cdot \frac{1 - X_A}{1 + X_A} \cdot dL \quad (3)$$

Para o elemento de volume dV o balanço da energia vem escrito por:

Fluxo de calor que entra no elemento dV a partir da fonte de aquecimento $+ dV$ calor consumido por reação $=$ calor que deixa o elemento dV

$$qdL + (-r_A) \cdot dV \cdot (-\Delta H_R) = (F_i \cdot C_{Pi}) dT \quad (4)$$

Utilizando a eq. (1) na eq. (4), tem-se:

$$qdL + F_{A0} (-\Delta H_R) \cdot dX_A = (F_A \cdot C_{pA} + F_B \cdot C_{pB} + F_C \cdot C_{pC}) \quad (5)$$

Considerando a estequiometria da reação, pode-se escrever:

$$qdL + F_{A0} (-\Delta H_R) \cdot dX_A = F_{A0} \cdot \left[(1-X_A) \cdot C_{pA} + X_A \cdot (C_{pB} + C_{pC}) \right] \cdot dT$$

ou

$$\frac{dT = Q \cdot dL + (-\Delta H_R) \cdot dX_A}{(1-X_A) \cdot C_{pA} + X_A \cdot (C_{pB} + C_{pC})} \quad (6)$$

onde $Q = q/F_{A0}$

A partir do desenvolvimento apresentado anteriormente, pode-se notar que a solução do problema consiste em se resolver as equações diferenciais (3) e (6), o que pode ser feito por passos, empregando a aproximação por diferenças finitas. Trocam-se dT , dL e dX_A por ΔT , ΔL e ΔX_A . No início admite-se qualquer incremento ΔL , com isto o incremento na conversão ΔX_A pode ser obtido a partir da eq. (3), o qual daria condições para se obter ΔT pela eq. (6). O cálculo é repetido para sucessivos incrementos de comprimento. Devem ser admitidos incrementos que sejam pequenos o suficiente para que os valores de T , k , X_A e C_p no início dos mesmos possam ser empregados nas eq. (3) e (6) sem erros consideráveis. A rigor deveriam ser tomados valores médios para cada incremento ΔL . Entretanto, o procedimento aqui utilizado é perfeitamente justificado uma vez que a influência do comprimento sobre os parâmetros apontados é pequena.

PROGRAMAÇÃO

ATUALIZADO

Para facilitar a programação foram feitos os seguintes cálculos:

$$B = \frac{AP}{F_{AO} R} = \frac{3,1416 \times (0,08)^2 / 4 \times 2,5}{(820/30) \times 0,082} = 20,1852 \frac{[s \cdot K]}{m}$$

$$Q = q/F_{AO} = \frac{12,500 \times 3,1416 \times 0,08}{(820/30)} = 114,936 \frac{\text{Kcal}}{\text{m.Kg-mol}}$$

Pode ser facilmente demonstrado que:

$$\Delta H_R^o = 32,732 + 8,50 \times (T - 298) - 5,9425 \times 10^{-3} \times (T^2 - 298^2) + 1,28 \times 10^{-6} \times (T^3 - 298^3)$$

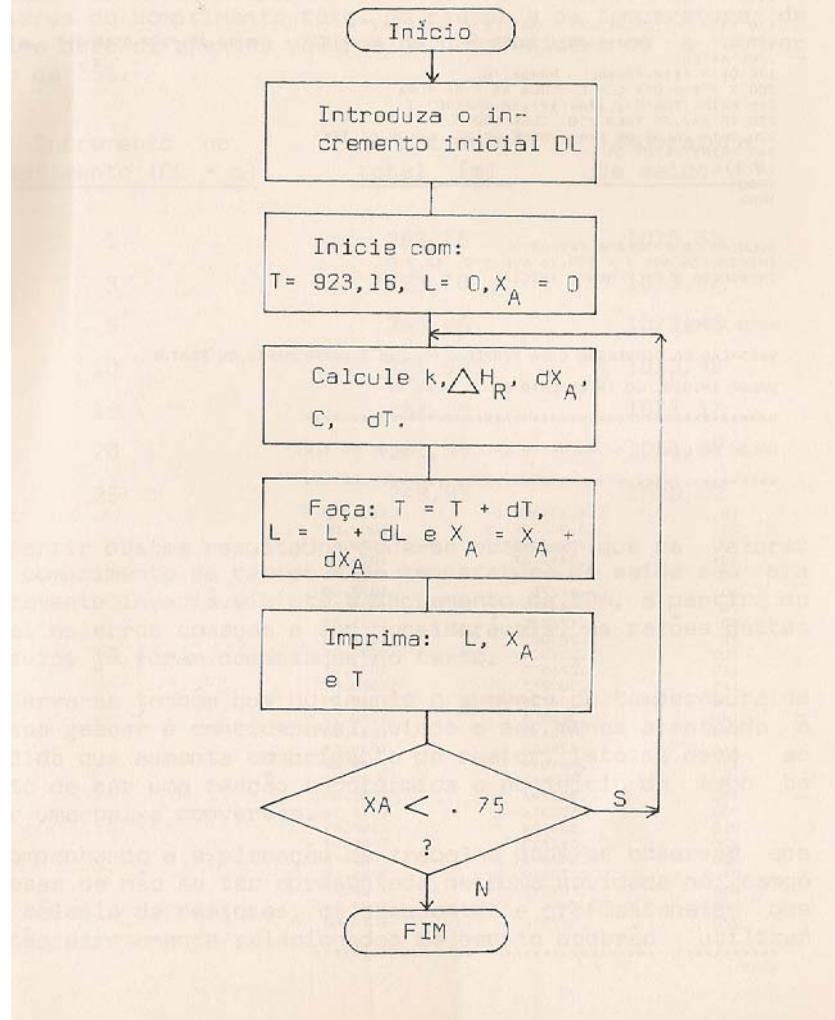
$$C = (1 - X_A) \cdot C_{PA} + X_A \times (C_{PB} + C_{PC}) = (1 - X_A) (3,75 + 35,7 \times 10^{-3} \times T - 10,12 \times 10^{-6} \times T^2) + X_A (12,25 + 23,815 \times 10^{-3} \times T - 6,28 \times 10^{-6} \times T^2)$$

com isto as eq. (3) e (6) passam para:

$$dX_A = 20,1852 \times k \times (1 - X_A) / (1 + X_A) \times dL / T$$

$$dT = (114,933 \times dL - \Delta H_R^o \times dX_A) / C$$

FLUXOGRAMA



SIMBOLOGIA

k = velocidade específica da reação (s^{-1})

F_{A_0} = Fluxo molar de etano na entrada (g-mol/h)

F_A , F_B , F_C = Fluxos molares de etano, eteno e hidrogênio em um ponto qualquer do reator (g-mol/h)

C_{PA} , C_{PB} , C_{PC} = Capacidades caloríficas molares do etano, eteno e hidrogênio, respectivamente (Kcal/g - mol K)

T = temperatura

X_A = conversão fracional de etano

P = pressão total (ata)

$(-rA)$ = velocidade de reação (g-mol de etano/m³h)

C_A = concentração de etano em um ponto qualquer do reator (g-mol/m³)

A = área da secção transversal do tubo (m²)

x = fração molar do etano

q = calor cedido pelo forno (Kcal/h m)

ΔH_R = calor de reação (kcal/g - mol)

L = comprimento a partir do início do reator (m)

V = volume do reator (m³)

LITERATURA - C. SOLUÇÃO DO EXEMPLO

```

10 CLS
20 REI ESTE PROGRAMA TEM A FINALIDADE DE DIMENSIONAR UM REATOR DE FLUXO TUBULAR
PARA REALIZAR A PROVISÃO DO ETANO EM DADAS CONDIÇÕES
30 REI PROGRAMADOR: PROF. BENEDITO INÁCIO DA SILVEIRA - 25/06/1984
40 PRINT;PRINT;PRINT;"SOLUÇÃO DO PROBLEMA PROPOSTO"
50 PRINT;"INICIALIZAÇÃO: T = 923.16 K, L = 0, XA = 0"
60 READ A,B,C
70 INPUT;"INTRODUZA O INCREMENTO INICIAL .....";BL
80 T = 923.16 XA = 0 L = 0
70 PRINT;PRINT;PRINT;"RESULTADO"
100 PRINT;PRINT;"VARIACAO DA CONVERSÃO E DA TEMPERATURA COM O COMPRIMENTO DO REATOR"
0
110 PRINT;PRINT;"VALOR INICIAL DO INCREMENTO DL .....";BL
120 DS = STRINGS(0,"");PRINT;PRINT DS
130 PRINT;PRINT DS;TAB(17);BS;TAB(38);CS
140 PRINT;PRINT DS;PRINT
150 E = 5.754E4*EXP(-4.316/T)
160 HD = 32732 + 0.50*(T - 298) - 5.9435E-3*(T2 - 298E2) + 1.28E-6*(T3 - 298E3)
170 DX = 20.052*E*(1 - XA/(X1 + XA))*(DL/1)
180 DS = (1 - XA)*(0.75 + 35.7E-3*T - 10.12E-6*T2) + XA*(12.25 + 23.815E-3*T - 2.08E-6*T2)
190 DT = DL/100*DX/2
200 T = T + DT;L = L + DL;XA = XA + DX
210 PRINT TAB(3)L;TAB(19);XA;TAB(40);T
220 IF XA>75 THEN 150 ELSE 230
230 DATA VALOR DE L,VALOR DE XA, VALOR DE T(K)
240 PRINT;PRINT DS
250 END
READY
XRUN

```

SOLUÇÃO DO PROBLEMA PROPOSTO
INICIALIZAÇÃO: T = 923.16 K, L = 0, XA = 0
INTRODUZA O INCREMENTO INICIAL 10

RESULTADOS:

VARIACAO DA CONVERSÃO E DA TEMPERATURA COM O COMPRIMENTO DO REATOR

VALOR INICIAL DO INCREMENTO DL 10

VALOR DE L(m)	VALOR DE XA	VALOR DE T(K)
10	4.6394E-04	923.160
20	3.0979E-03	900.02
30	.0166145	1023.6
40	.0492767	1024.31
50	.0907224	1026.44
60	.11275	1027.66
70	.13447	1029.68
80	.15615	1031.33
90	.20008	1032.03
100	.235004	1034.92
110	.271576	1036.61
120	.302277	1038.42
130	.334936	1040.29
140	.366554	1042.16
150	.398125	1044.13
160	.429642	1046.14
170	.461095	1048.22
180	.492463	1050.38
190	.523794	1052.53
200	.555125	1054.71
210	.586454	1056.41
220	.617133	1058.99
230	.647996	1062.73
240	.678659	1065.64
250	.709212	1069.77
260	.739816	1072.14
270	.769516	1075.82

READY

CONCLUSÃO:

A tabela de resultados apresentada foi obtida para um único incremento ($\Delta L = 10m$), mas foi calculado também a variação de X_A e de T para diversos outros incrementos, e os resultados para a conversão de 75% foram os seguintes:

Valores do comprimento total do reator e da temperatura de saída para diferentes valores de DL considerando a conversão de 75%.

Incremento no comprimento (DL - m)	comprimento total (m)	Temperatura de saída (K)
1	263,75	1073,53
3	263,70	1073,47
5	263,65	1073,46
10	263,50	1073,43
15	262,25	1071,17
20	255,95	1051,62
25	243,93	1020,02

A partir destes resultados pode-se observar que os valores do comprimento do reator e da temperatura de saída são praticamente invariáveis até o incremento de 10m, a partir do qual os erros começam a ser consideráveis, as razões destes desvios já foram comentados no texto.

Observa-se também que no início o aumento de temperatura da massa gasosa é considerável, vindo a ser menos acentuado à medida que aumenta comprimento do reator. Isto se deve ao fato de ser uma reação endotérmica e no início do tubo haver uma baixa conversão.

Acompanhando a explanação do trabalho pode-se observar que apesar de não se ter apresentado nenhuma novidade no campo do cálculo de reatores, os estudantes e profissionais que estão diretamente relacionados ao assunto poderão utilizar

do desenvolvimento aqui apresentado de maneira direta ou adaptá-lo ao caso específico. De uma forma ou de outra esperamos que este trabalho venha a contribuir com a biblioteca de programas calculadores de problemas escolares e profissionais no campo da engenharia química.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 01 - HOUGEHEN, OLAF, A. ET. AL. Chemical Process Principles, Parte I and II, John Wiley & Sons. Inc, N.Y., 1959.
- 02 - LAIDLER, K.J., Cinética de Reacciones. Tradução Editorial Alhambra, S.A., Madrid, 1966.
- 03 - LEVENSPIEL, O., Ingenieria de las Reacciones Químicas, Traduzido por Editorial Reverte S.A., Argentina, 1976.
- 04 - SMITH, J.M., Chemical Engineering Kinetics, Mc Graw-Hill Book Co. N. Y., 1956.
- 05 - THE USE OF COMPUTERS IN ENGINEERING EDUCATION, Final Report of Project Supported by the Ford Foundation, College of Engineering The University of Michigan. 1963.
- 06 - THOMPSON, E.V. and CECKLER, W. H., Introduction to Chemical Engineering, Mc Graw-Hill International Book Co., 1977.
- 07 - WALAS, S.M., Cinética de Reacciones Químicas, Tradução de Aguilar, Madrid, 1965.