



**COBENGE 2005**

**XXXIII - Congresso Brasileiro de Ensino de Engenharia**

"Promovendo e valorizando a engenharia em um cenário de constantes mudanças"

12 a 15 de setembro - Campina Grande Pb

Promoção/Organização: ABENGE/UFCG-UFPE

## **UTILIZAÇÃO DA TÉCNICA DA REGIÃO ACESSÍVEL NO PROJETO DE SISTEMAS DE REATORES**

**Vieira, A. L.** – [admilson@usacucar.com.br](mailto:admilson@usacucar.com.br)

Universidade Estadual de Maringá – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.

Av. Colombo, 5790, Bl. D-90 CEP 87020-900 Maringá - Paraná

**Andrade, C. M. G.** – [cid@deq.uem.br](mailto:cid@deq.uem.br)

***Resumo:** A síntese de sistemas de reatores, atualmente, é normalmente abordada por procedimentos heurísticos nos cursos de graduação em engenharia química e como um problema de otimização matemática nos cursos de pós-graduação. A técnica da região acessível se propõe a abordar o problema do ponto de vista geométrico, procurando identificar todas as possíveis saídas, para uma dada alimentação e uma determinada cinética, mas não a ótima da rede de reatores que possibilite a maior conversão. O objetivo deste trabalho é apresentar a técnica, aplicada à síntese de um sistema de reatores para uma reação química que segue a cinética de Van de Vusse. Para a implementação da técnica utilizou-se o software MATLAB<sup>®</sup>. A técnica mostrou-se poderosa e de fácil implementação, principalmente pelo uso do MATLAB<sup>®</sup>, que já possui embutida uma função que encontra regiões côncavas. Essa técnica pode ser utilizada no ensino do projeto de sistemas de reatores, tanto para alunos de graduação, como de pós, podendo ser acoplada a técnicas de otimização matemática.*

**Palavras-chaves:** Região acessível, Sistema de reatores, Reação de Van de Vusse, MATLAB<sup>®</sup>.

### **1. INTRODUÇÃO**

Os livros textos mais antigos sobre síntese de processos, como RUDD et al (1973), e mesmo os nem tanto como: SMITH (1995), DOUGLAS (1988), PETERS E TIMMERHAUS (1980), apresentam o problema da síntese de redes de reatores apenas sob a abordagem heurística, dando mais atenção à escolha da melhor rota de reação e pouca atenção a melhor síntese do sistema de reatores.

Outros mais modernos abordam a síntese segundo o enfoque heurístico e como um problema de otimização matemática, TURTON et al (1998), BIEGLER et al (1997), SEIDER et al (1999). Nos cursos de projeto de processos químicos, normalmente, para aos estudantes de graduação em engenharia química é reservado o estudo de técnicas heurísticas e para os estudantes de pós-graduação as técnicas de síntese que empregam otimização matemática.

O conceito da região acessível foi originariamente introduzido por HORN (1964), e é definido como todas as possíveis saídas para todos os reatores possíveis fisicamente, HILDEBRANDT et al (1990), utilizaram a idéia do ponto de vista geométrico. Eles consideraram um reator como um sistema onde apenas podem ocorrer os processos de mistura e reação.

Livros mais modernos como BIEGLER et all (1997) e SEIDER et all (2003), já apresentam capítulos exclusivos sobre a técnica, assim como, a técnica acoplada a otimização matemática.

O objetivo deste trabalho é a apresentação da técnica da região acessível para a síntese de sistema de reatores para uma reação química que segue a cinética de Van de Vusse, implementada por meio do software MATLAB<sup>®</sup>. Procuramos mostrar que esta técnica é de implementação simples, podendo ser utilizada no ensino de síntese de sistemas de reatores tanto para alunos de graduação em engenharia química, assim como para os de pós-graduação, uma vez que gerando pontos de máximo, podem servir como base para um processo de otimização matemático mais amplo.

## 2. O MÉTODO DA REGIÃO ACESSÍVEL PARA A SÍNTESE DE SISTEMAS DE REATORES

O método da região acessível (RA) é um método que permite resolver problemas de síntese de processos e problemas de otimização. A região acessível é definida como um conjunto de todos os resultados possíveis, para o sistema considerado, que pode ser alcançada usando a operação dos processos fundamentais dentro do sistema, e que satisfaça todas as restrições a ele impostas. Isto significa que a região acessível, no caso de síntese de sistemas de reatores, é um conjunto de todas as concentrações possíveis de saída de A e B, que podem ser obtidas em um sistema de reator em regime permanente com uma alimentação dada. Aplicam-se os seguintes passos para construção da região acessível e a síntese de sistema de reatores:

- Escolha do processo fundamental.
- Escolha e definição das variáveis de estado, foi considerado neste trabalho concentração de A e B.
- Determinação da geometria das unidades de processo, escolha dos reatores ou sistemas, aqui trabalhamos com o CSTR (*continuous stirred tank reactor*), PFR (*plug flow reactor*), CSTR com *bypass* e PFR-CSTR em série.
- Determinação das condições entrada de  $c_a$  ( $c_a=1 \text{ kmol/m}^3$ ).
- Construção da região acessível. Resolução dos sistemas de equações resultantes através do programa MATLAB<sup>®</sup>, onde a função “*convexhull*” fornece a região côncava.
- Por meio da região obtida analisa-se o sistema ótimo de conversão de A em B.

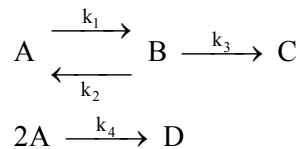
## 3. ESTUDO DE CASO

### 3.1 Reação reversível de Van de Vusse

Para determinar qual o sistema de reatores que dá uma maior conversão do produto desejado precisamos traçar o espaço dos estados, para cada uma das situações (escolha dos reatores).

Para aplicar a técnica da região acessível, considera-se a reação elementar, em fase líquida, isotérmica, em série e paralelo.

O objetivo é maximizar a produção do componente intermediário B, através de uma alimentação do componente A puro. Considera-se a situação mais simples, uma única corrente de entrada e uma única de saída. O mecanismo de reação é dado por:



A reação de A para D é de segunda ordem. A concentração inicial de alimentação é 1 kmol/m<sup>3</sup> e as constantes das taxas de reação são as seguintes:

Tabela 1 - Constantes cinéticas

A→B	B→A	B→C	2A→D
K <sub>1</sub> =0,01 s <sup>-1</sup>	K <sub>2</sub> =5 s <sup>-1</sup>	K <sub>3</sub> =10 s <sup>-1</sup>	K <sub>4</sub> =100 m <sup>3</sup> /kmol.s

### 3.2 Construção da região acessível

Para determinar quantidade máxima do produto desejado, constroem-se as trajetórias dos reatores: PFR, CSTR, CSTR com *bypass* e do sistema CSTR-PFR em série.

A partir do balanço molar das espécies A e B para o PFR chega-se à duas equações diferenciais a seguir:

$$\frac{dc_A}{d\tau} = -k_1 \cdot c_A + k_2 \cdot c_B - k_4 \cdot c_A^2 \quad (1)$$

$$\frac{dc_B}{d\tau} = k_1 \cdot c_A - k_2 \cdot c_B - k_3 \cdot c_B \quad (2)$$

Onde  $\tau$  é o tempo espacial definido como o tempo necessário para processar um volume de reator de alimentação, medido em condições específicas. Numa determinada condição de alimentação o tempo espacial a relação do tempo espacial com outras variáveis pertinentes é a razão do volume do reator e a velocidade volumétrica da alimentação.

De acordo com o programa desenvolvido neste trabalho Figura 1 consegue-se resolver o conjunto de equações diferenciais ordinárias com duas variáveis e o resultado está apresentado na Figura 2.

```

function fn=aux2n(t,cn)
fn(1)=-0.01*cn(1)+5*cn(2)-100*(cn(1)^2);
fn(2)=0.01*cn(1)-5*cn(2)-10*cn(2);
fn=fn(:);
t=0:0.01:0.8;
[t,cn]=ode23('aux2n',t,[0.8 0]);
n=length(t);
cn(n,1)=0;
cn(n,2)=0;
kp=convhull(cn(:,1),cn(:,2));
plot(cn(:,1),cn(:,2),'g-',c(:,1),c(:,2),'g-')
title('PERFIL DE REATOR DE FLUXO EMPISTONADO (PFR)')
xlabel('Concentracao de A'),ylabel('Concentracao de B')

```

Figura 1 – Listagem do programa para reator PFR

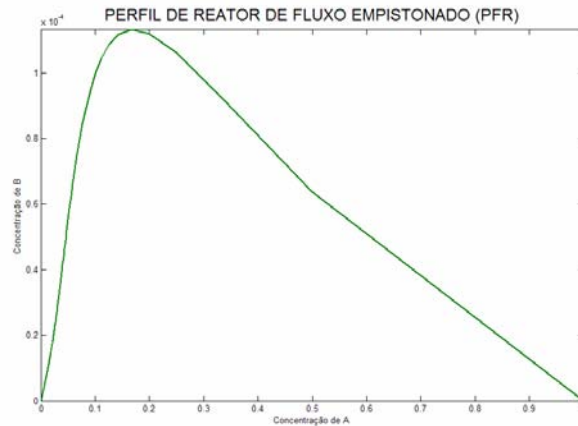


Figura 2 – Região Acessível de um PFR

A partir do balanço molar das espécies A e B para o CSTR chega-se às duas equações a seguir:

$$c_A - c_{A0} = \tau \cdot (-k_1 \cdot c_A + k_2 \cdot c_B - k_4 \cdot c_A^2) \quad (3)$$

$$c_B - c_{B0} = \tau \cdot (k_1 \cdot c_A - k_2 \cdot c_B - k_3 \cdot c_B) \quad (4)$$

```
function fn=aux1n(cbn)
global cain
k1=0.01;
k2=5;
k3=10;
k4=100;
fn=-cbn*(k1*cain-k2*cbn+k4*(cain^2))+[0.8-cain]*(k1*cain-k2*cbn-k3*cbn);
global cain
cbo=[0.5];
can=0:0.01:0.8;
for i=2:length(can)
    cain=can(i);
    cbe=fzero('aux1n',cbo);
    cbn(i)=cbe;
end
can(1)=0;
cbn(1)=0;
can(length(can))=0.8;
cbn(length(cbn))=0;
plot(can,cbn,'b-','ca,cb','b-')
title('PERFIL DO REATOR TANQUE CONTINUAMENTE AGITADO (CSTR)')
xlabel('Concentracao de A'),ylabel('Concentracao de B')
```

De acordo com o programa desenvolvido, Figura 3 consegue-se resolver o sistema de equações com duas variáveis e o resultado está apresentado na Figura 4.

Figura 3 – Listagem do programa para reator CSTR

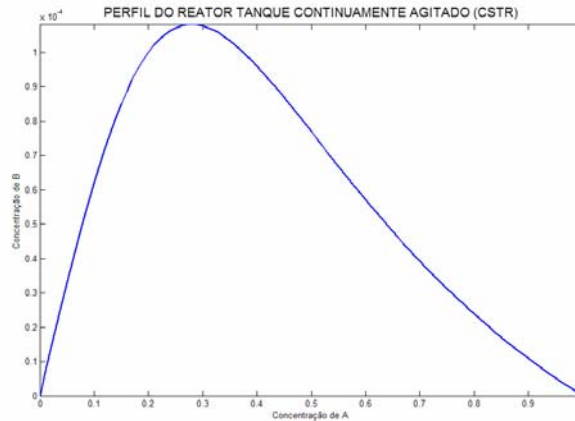


Figura 4 – Perfil de um CSTR

Pode-se observar pela Figura 4, que tem-se uma região de concavidade, assim faz-se necessário o procedimento a seguir onde os extremos da região côncava serão obtidos pela função “*convexhull*”.

O próximo passo a seguir é construir a trajetória da região acessível para um reator CSTR com *bypass*, criando assim uma região convexa.

O produto representado pela corrente de *bypass*, é a mistura da corrente do CSTR mais a de alimentação, pode ser representado por uma linha reta. De acordo com o programa desenvolvido, Figura 5, consegue-se resolver o sistema de equações com duas variáveis e o resultado está apresentado na Figura 6.

```

pause
kn=convhull(can,cbn);
[km,n,xn]=max(kn);
knn1=kn(1:(xn-1));
knn2=kn(xn+1:length(kn));
knn=[knn1;knn2];
knmax=max(knn);
xn=[0.8 can(knmax)];
yn=[0 cbn(knmax)];
pn=polyfit(xn,yn,1);
xin=linspace(0.8,can(knmax),10);
yin=polyval(pn,xin);
plot(xin,yin,'r','xi,yi','r');
title('PERFIL DO CSTR COM BY PASS')
xlabel('Concentraçao de A'),ylabel('Concentraçao de B')

```

Figura 5 – Listagem do programa para reator PFR com *bypass*

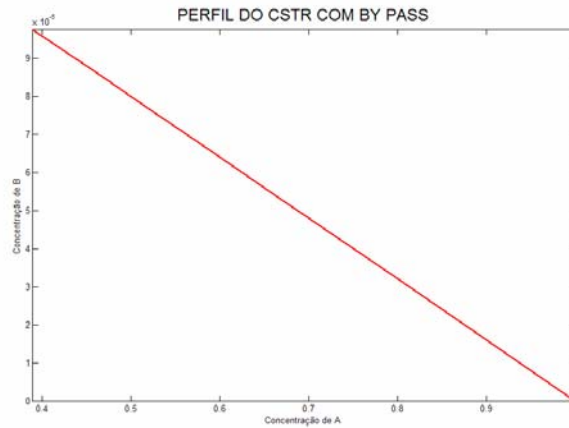


Figura 6 – Perfil de CSTR com by-pass

Assim, a partir, do ponto onde deixa de haver concavidade, constrói-se a trajetória de um PFR. Pode-se verificar que este novo sistema de CSTR bypass com PFR seria o mesmo que o PFR sozinho, caso a concentração de alimentação partisse deste ponto. De acordo com o programa desenvolvido, Figura 7, consegue-se resolver o sistema de equações com duas variáveis e o resultado está apresentado na Figura 8.

```
t=0:0.01:0.8;
[t,c2n]=ode23('aux2n',t,[can(knmax) cbn(knmax)]);
nn=length(t);
c2n(nn,1)=0;
c2n(nn,2)=0;
plot(c2n(:,1),c2n(:,2),'c',c2(:,1),c2(:,2),'c')
title('PERFIL CSTR + PFR')
xlabel('Concentraçao de A'),ylabel('Concentraçao de B')
```

Figura 7 – Listagem do programa para reator CSTR seguido de um PFR

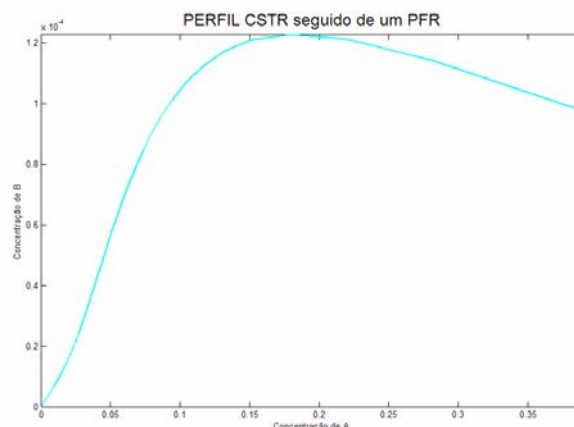


Figura 8- Perfil do sistema reator CSTR seguido de um PFR

Na listagem apresentada na Figura 9, englobamos todas as trajetórias, que são apresentadas na Figura 10.

```

plot(can,cbn,cn(:,1),cn(:,2),xin,yin,c2n(:,1),c2n(:,2),ca,cb,c(:,1),c(:,2),xi,yi,c2(:,1),c2(:,2));
title('REGIAO ACESSIVEL')
xlabel('Concentracao de A'),ylabel('Concentracao de B')
legend('CSTR','PFR','CSTR-by pass','CSTR-PFR')

```

Figura 9- Listagem do programa para a Região Acessível

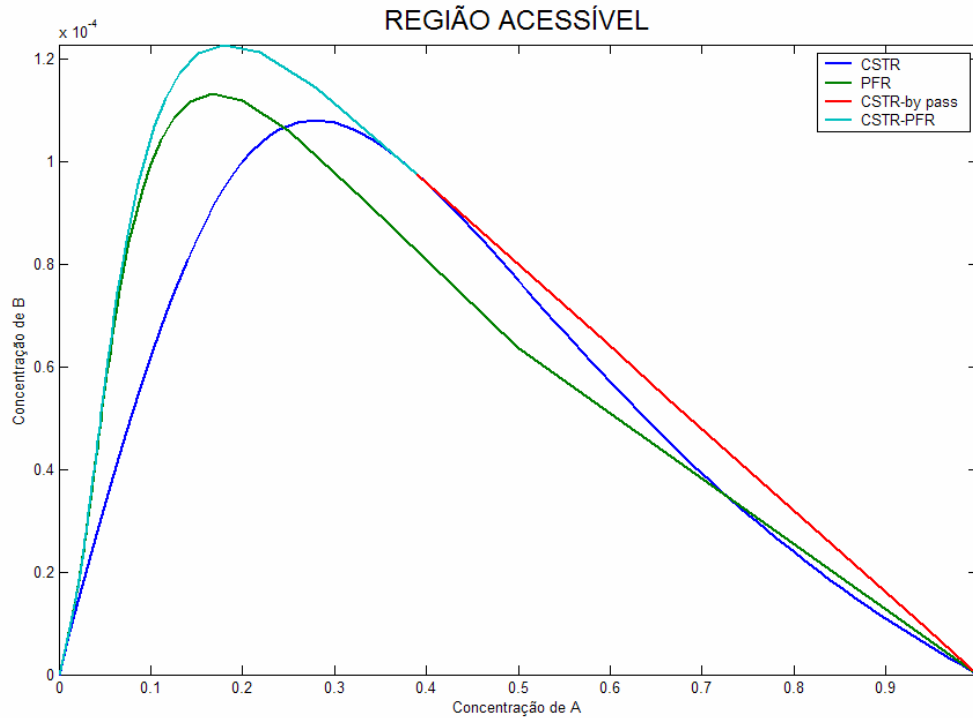


Figura 10 – Região Acessível

### 3.3 Análise da região acessível obtida

Da Figura 10, podemos concluir que se o tempo espacial for tal que a concentração de saída de A estiver entre  $0,38$  e  $1,0 \text{ kmol/m}^3$ , um CSTR com *bypass* nos fornecerá a máxima concentração de saída de B. Se a concentração de saída de A for exatamente  $0,38$ , o CSTR será a melhor escolha. Se o tempo espacial for ficar abaixo de  $0,38 \text{ kmol/m}^3$ , então um CSTR seguido de um PFR fornecerá a máxima quantidade de B na saída.

## 3. CONCLUSÕES

A técnica da região acessível é uma técnica muito útil para o projeto de sistemas de reatores.

A utilização do MATLAB na implementação desta técnica mostrou-se simples, principalmente pelo fato do programa já ter implementado a função *convexhull* para a obtenção da região côncava.

Assim, essa técnica pode ser utilizada no ensino do projeto de sistemas de reatores, tanto para alunos de graduação, como de pós, podendo ser acoplada a técnicas de otimização matemática.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BIEGLER, L. T. et al. **Systematic Methods of Chemical Process Design**, New Jersey: Prentice-Hall, 1997.
- DOUGLAS, J. M. **Conceptual Design of Chemical Processes**, USA: McGraw-Hill, 1988.
- HILDEBRANDT, et al. The Geometry of the Attainable Region Generated by Reaction and Mixing: With and Without Constraints. **I & EC Research**, 29(1), p. 49, 1990.
- HORN, F. Attainable Regions in Chemical Reaction Technique. In: THE THIRD EUROPEAN SYMPOSIUM ON CHEMICAL REACTION ENGG., 1964, London, **Procedins**, Pergamon, 1964.
- PETERS, M. S.; TIMMERHAUS, K.D. **Plant Design and Economics for Chemical Engineers**, 3<sup>a</sup> ed., USA: McGraw-Hill, 1980.
- RUDD, D. F. et al. **Process Synthesis**, New Jersey: Prentice-Hall, 1973.
- SEIDER, W. D. et al. **Process Design Principles: Synthesis, Analysis, and Evaluation**, USA: John Wiley & Sons, 1999.
- SEIDER, W. D. et al. **Process Design Principles: Synthesis, Analysis, and Evaluation**, 2<sup>a</sup> ed., USA: John Wiley & Sons, 2003.
- SMITH, R. **Chemical Process Design**, USA: McGraw-Hill, 1995.
- TURTON, R. et al. **Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Process**, New Jersey: Prentice-Hall, 1998.

## The Utilization of Attainable Region in the Network Reactors Design

**Abstract:** *The synthesis of reactor network, still today, is usually approached by heuristics procedure in the undergraduated chemical engineering courses and as a problem of mathematics optimization in the graduated level courses. The attainable region approach addresses reactor network feasibility, for a fed composition and for a given system of reactions, based on geometric properties and allows one to identify feasibility, but not optimal reactor sequences for production of desired product. The objective fo this work is present the attainable region techniques, appyed to synthesis of reactor networks for a chemistry reaction that follows the cinetic proposed by Van de Vussen. For the impementation of this techniques was used the software MATLAB<sup>®</sup>. The techiniques showed be powerfull and of easy implementation, principlally by using MATLAB<sup>®</sup>, that already possess inlaid, for example, a function to find concave regions. This techiniques can be used in teaching of reactor network design, as many for students of undergraduations as for graduated students, and may be conjugated techiniques of mathematics optimization.*

**Key-words:** Attainable region, Network reactor, Van de Vusse reaction, MATLAB<sup>®</sup>.