

UTILIZAÇÃO DO SOFTWARE SCILAB NA RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DA ENGENHARIA QUÍMICA

Alexandre Martins RIBEIRO¹; João Lameu SILVA JUNIOR ²; Rejane Barbosa SANTOS ³

RESUMO

A simulação é amplamente usada na Engenharia Química, pois a partir dos resultados obtidos decisões são tomadas em relação aos processos químicos reais. No presente trabalho foi utilizado o software gratuito *Scilab* em sua extensão *xcos* para resolver um problema típico de cinética química, bastante comum na engenharia, envolvendo uma reação em série em um reator do tipo batelada, retirado do livro “Cálculo de Reatores: O Essencial da Engenharia das Reações Químicas”. A modelagem foi implementada com sucesso no software *Scilab*, obtendo resultados promissores por meio de gráficos, gerados pelo próprio programa computacional, evidenciando a potencialidade da ferramenta.

Palavras-chave:

Simulação de processos; Cinética química; Engenharia Química.

1. INTRODUÇÃO

O uso de softwares para resolução de problemas de Engenharia Química é de grande ajuda devido ao recorrente uso de métodos numéricos após a fase de modelagem.

Segundo ARAÚJO (2005), os alunos passam a compreender melhor os fenômenos estudados com o auxílio de ferramentas computacionais, devido a simulação proporcionar diversas possibilidades de configurações de sistemas, podendo ser definidos parâmetros motivados pela sua curiosidade e interesse.

1 Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais – Campus Pouso Alegre. Pouso Alegre/MG – E-mail: alexandremribeiro96@hotmail.com

2 Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais – Campus Pouso Alegre. Pouso Alegre/MG.. E-mail: joao.lameu@ifsuldeminas.edu.br

3 Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais – Campus Pouso Alegre. Pouso Alegre/MG. E-mail: rejane.santos@ifsuldeminas.edu.br

Scilab é um software gratuito que utiliza sua linguagem de programação de alto nível para auxiliar na resolução de problemas matemáticos diversos. O software possui o recurso para modelagem dinâmica xcoss, possuindo uma interface a qual são dispostos blocos de funções, os quais são interligados entre si conforme a modelagem desejada pelo usuário.

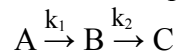
Para demonstrar a eficiência de xcoss na resolução de problemas gerais de Engenharia Química, foi implementado o item “a” do Exemplo 8-3 de FOGLER (2014), problema que envolve reações em série em um reator do tipo batelada, resultando na modelagem de equações diferenciais ordinárias.

2. MATERIAL E MÉTODOS

Foi utilizado na resolução do problema proposto o software Scilab versão 5.5.2. A modelagem foi implementada na interface da função xcoss do Scilab.

Uma demonstração do uso do software é demonstrada a partir da resolução do problema de cinética química a seguir, retirado de FOGLER (2014):

As reações elementares em série e em fase líquida



são realizadas em um reator batelada. A reação é aquecida muito rapidamente à temperatura de reação e permanece nessa temperatura até o tempo em que ela é resfriada rapidamente. Plote e analise as concentrações das espécies A, B e C em função do tempo.

O problema fornece a seguinte informação adicional:

$$C_{A0} = 2 \text{ M}; k_1 = 0,5 \text{ h}^{-1}; k_2 = 0,2 \text{ h}^{-1};$$

Onde C_{A0} é a concentração inicial da espécie A, k_1 a constante de taxa de reação 1 e k_2 a constante de taxa de reação 2.

Interpretando o problema, devemos fazer os balanços molares de A, B e C, e combinar com suas respectivas leis de velocidade de reação, obtendo taxas de variação das concentrações dos compostos em relação ao tempo de reação. A modelagem é feita de maneira a encontrar as equações diferenciais ordinárias que relacionam as taxas de variação a partir dos balanços molares. Pelo balanço molar das espécies A, B e C obtém-se:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \quad \frac{dC_B}{dt} + k_2 C_B = k_1 C_{A0} e^{-k_1 t} \quad \frac{dC_C}{dt} = k_2 C_B$$

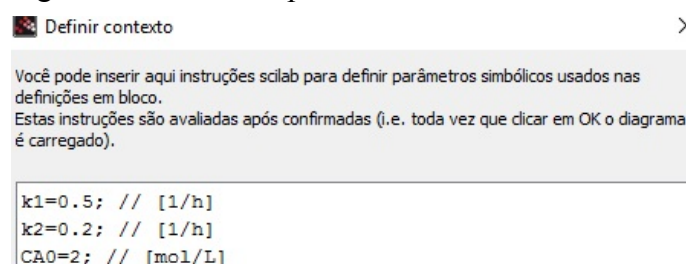
Onde C_A , C_B e C_C são respectivamente as concentrações das espécies A, B e C após um tempo de reação t .

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

As constantes de taxa de reação e a concentração inicial de A são declaradas em “Definir contexto”, informando suas respectivas unidades de medida (Figura 1).

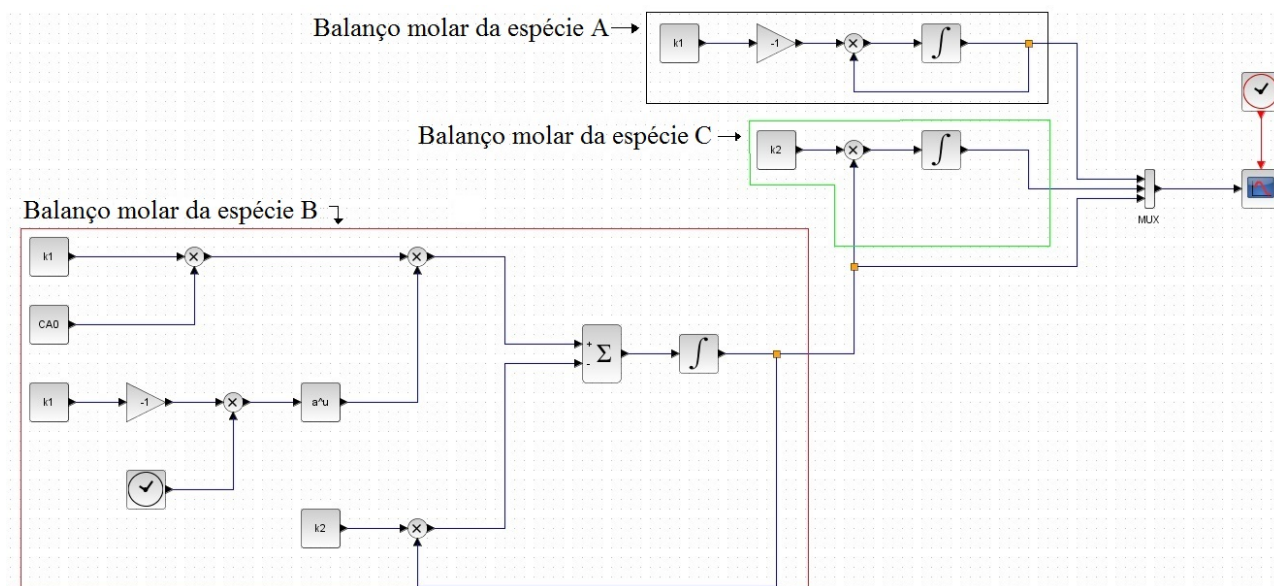
Toda modelagem é implementada na interface do xcos, resultando no diagrama de blocos, conforme Figura 2.

Figura 1 – Definindo parâmetros utilizados nos blocos:



Fonte: Do autor.

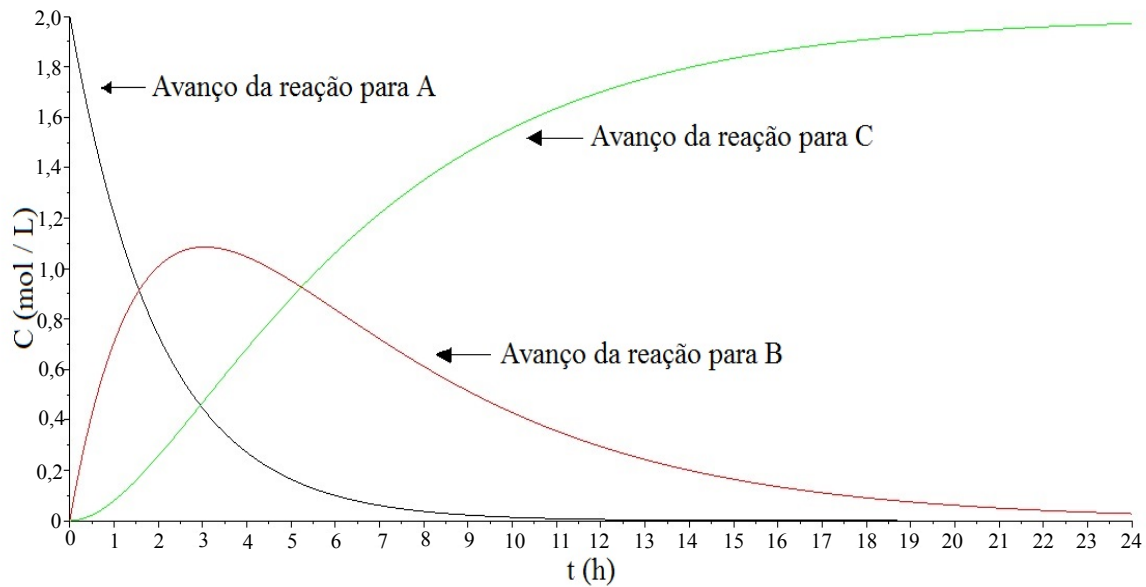
Figura 2 – Interface do xcos com o diagrama de blocos do problema proposto:



Fonte: Do autor.

A simulação é realizada, gerando um gráfico cujos pontos são obtidos num período de tempo de 0,01, iniciando a plotagem no tempo 0, tais parâmetros são configurados pelo bloco “CLOCK_c”. Na prática, o gráfico refere-se ao tempo de reação desde o seu início, o eixo das abscissas é o tempo (t), em horas, e o eixo das ordenadas é referente a concentração (C), em mol/L. A simulação é programada para obtenção dos pontos até que se complete 24 horas de reação (Figura 3).

Figura 3 – Gráfico da concentração das espécies em função do tempo:



Fonte: Do autor.

4. CONCLUSÕES

O uso do software é de grande importância, a modelagem foi feita com o auxílio de diagrama de blocos, que possuem parâmetros a serem editados, com janelas informativas ao usuário, facilitando a resolução de problemas. Também como resultado foi obtido um gráfico, que dá uma perspectiva visual acerca do problema.

Pelo menu definir contexto, pode-se facilmente editar as variáveis envolvidas no processo, assim há a possibilidade de testar valores distintos de entrada a fim de analisar as mudanças que ocorrem no processo devido a essas alterações, podendo então ser realizadas otimizações práticas.

REFERÊNCIAS

ARAÚJO, I. S. *Simulação e modelagem computacionais como recursos auxiliares no ensino de física geral*. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Física, 2005. (Tese de doutorado).

FOGLER, H. S. *Cálculo de reatores: o essencial da engenharia das reações químicas*. 1. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2014.

SCILAB GROUP. *Manual Scilab*. Disponível em: <https://help.scilab.org/docs/5.3.0/pt_BR/index.html>. Acesso em: 12 ago. 2016.