

MODELAGEM MATEMÁTICA FENOMENOLÓGICA E MONTAGEM EXPERIMENTAL DE UM REATOR CSTR (*Constant Flow Stirred Tank Reactor*) CONTÍNUO

¹ Diulia Caroline Quites Rodrigues, ² Samantha Pereira Nunes, Esly Ferreira da Costa Junior³, Andréa Oliveira Souza da Costa⁴

1. Graduando em Engenharia Química (diuliacaroline@hotmail.com)
 2. Graduando em Engenharia de Alimentos (samanthapnunes@hotmail.com)
 3. Docente do curso de Engenharia Química (eslyfcjr@yahoo.com.br)
 4. Docente do curso de Engenharia Química (andreaosc@yahoo.com.br)
- UFES – Universidade Federal do Espírito Santo, Campus de Alegre, Alto Universitário, s/n, Caixa Postal 16, Guararema, Alegre, ES, BRASIL. CEP: 29500.000

Recebido em: 04/05/2012 – Aprovado em: 15/06/2012 – Publicado em: 30/06/2012

RESUMO

Os reatores de mistura ideal, ou reatores tipo CSTR, são amplamente usados nos mais variados processos químicos. Neste trabalho são apresentados: a modelagem matemática fenomenológica e a montagem experimental de um reator de mistura ideal contínuo. Para isto, foi empregado um modelo matemático encontrado em literatura aberta que descreve tal sistema. Este modelo foi adaptado para a realidade experimental a ser reproduzida na unidade de laboratório. A simulação matemática foi empregada para o ajuste das condições de operação adotadas para a montagem. Posteriormente os dados obtidos no laboratório, que descrevem o nível do reator em função das vazões que o alimentam, foram empregados para a validação dos resultados simulados.

PALAVRAS-CHAVE: reator de mistura ideal contínuo, montagem experimental, modelagem matemática, validação dinâmica.

PHENOMENOLOGICAL MATHEMATICAL MODELING AND EXPERIMENTAL STUDY OF A CONTINUOUS CSTR REACTOR

ABSTRACT

The continuous stirred-tank reactor (CSTR) has been widely used in chemical processes. In this study are presented: the phenomenological mathematical modeling and the experimental study of a CSRT continuous reactor. For this, a mathematical model, obtained by open literature, was used. This model was modified to describe the laboratory unit. The mathematical simulation was used to adjust the operating conditions adopted in the laboratory unit. Experimental data were obtained to describe the dynamic behavior of the reactor level. The simulation results were validated using these experimental data.

KEYWORDS: continuous stirred-tank reactor (CSTR), experimental unit, mathematical modeling, dynamic validation.

INTRODUÇÃO

Quase que a totalidade dos processos industriais envolve reatores químicos em pelo menos uma parte da rota produtiva. Um reator químico frequentemente empregado na descrição de processo reais é reator de mistura ideal ou CSTR (*Constant Flow Stirred Tank Reactor*). Como o próprio nome indica, o CSTR se refere a um reator em que todo o conteúdo é agitado uniformemente. Dessa forma, assume-se que as características físicas e químicas da matéria contida no interior do reator independem da localização espacial.

Neste trabalho são destacadas a modelagem matemática e a montagem experimental do processo de neutralização de pH, o qual emprega diretamente reatores de mistura ideal. A dificuldade do controle do pH está presente em uma grande variedade de problemas industriais incluindo tratamento de rejeitos, processos biotecnológicos e processos químicos (MWEMBESHI et al., 2004; SALEHI et al., 2009). Todavia, embora seja um processo comum em diversas rotas produtivas, o controle do pH em um dado sistema não se mostra trivial uma vez que o mesmo possui comportamento fortemente não linear e tempos mortos, o que dificulta o emprego de controladores clássicos para essa tarefa. (FAANES & SKOGESTAD, 2004; MWEMBESHI et al., 2004; HAN et al., 2006; MAHMOODI et al., 2009; KUMBASAR et al., 2011).

Trabalhos que descrevem estudos relacionados à neutralização de pH são disponíveis em literatura aberta (NYSTÖM et al., 1998; GALÁN et al., 2000; AKESSON et al. 2005; BÖLING et al., 2007; MAHMOODI et al., 2009). Tais pesquisadores estudam estratégias de controle para sistemas de neutralização de pH através do emprego da modelagem matemática do processo, onde utiliza-se a realidade experimental para a proposta de um modelo matemático. No presente trabalho, porém, utilizou-se o modelo proposto para efetuar ajustes na realidade experimental.

O objetivo deste trabalho consiste em propor a simulação matemática de um reator CSTR contínuo similar ao empregado em sistemas de neutralização de pH e analisar a viabilidade de montagem de uma unidade experimental. Dessa forma, objetiva-se empregar um modelo matemático fenomenológico e determinar as melhores condições operacionais para a realização de experimentos.

METODOLOGIA

No desenvolvimento deste estudo, a metodologia utilizada consistiu inicialmente no reconhecimento das necessidades inerentes à reprodução em laboratório da operação de um reator CSTR contínuo.

A modelagem matemática para o processo de neutralização de pH foi posteriormente proposta, bem como as condições operacionais adotadas na realização dos experimentos. Para a resolução do modelo matemático fenomenológico proposto, foi utilizado o programa computacional Matlab (versão 7.5). O modelo matemático empregado foi desenvolvido por CAMPOS (2007) e adaptado para a realidade descrita neste estudo.

A metodologia consistiu ainda em empregar ferramentas matemáticas na fase de ajuste da montagem experimental. Assim, o modelo matemático proposto foi empregado na proposta da rotina experimental e na validação dinâmica dos resultados de simulação para a altura de nível do reator.

Finalmente, destaca-se que neste trabalho não é proposta a investigação experimental da neutralização de pH.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O reator e a montagem experimental utilizado no presente estudo estão representados na Figura 1.



1.1: Montagem experimental.



1.2: Reator CSTR.

FIGURA 1: Aparato experimental empregado nos ensaios (Fonte: autor).

Optou-se por iniciar os trabalhos ajustando-se as vazões que deveriam ser adotadas nos ensaios. Correntes de água foram utilizadas para a descrição das curvas de calibração das três bombas peristálticas usadas na montagem experimental, sendo estas bombas empregadas na entrada de ácido, base e tampão.

De modo paralelo, foi realizada a modelagem matemática do processo de neutralização de pH. As principais equações utilizadas na elaboração do modelo proposto são apresentadas nas equações (1) a (5) (CAMPOS, 2007).

$$Ar. \frac{dV}{dt} = Q_1 + Q_2 + Q_3 - Q_4 \quad (1)$$

$$Q_i = c\sqrt{h - h_0} \quad (2)$$

$$\frac{dW_a}{dt} = \frac{Q_1(W_{a1} - W_a) + Q_2(W_{a2} - W_a) + Q_3(W_{a3} - W_a)}{V} \quad (3)$$

$$\frac{dW_b}{dt} = \frac{Q_1(W_{b1} - W_b) + Q_2(W_{b2} - W_b) + Q_3(W_{b3} - W_b)}{V} \quad (4)$$

$$W_a = [H] \frac{K_w}{[H]} - W_b \frac{K_{a1}([H] + 2K_{a1}K_{a2}[H]^2)}{1 + K_{a1}([H] + K_{a1}K_{a2}[H]^2)} \quad (5)$$

Onde:

$$W_b = [H_2CO_3] + [HCO_3^-] + [CO_3^{2-}]$$

$$W_a = [H^+] - [OH^-] - [HCO_3^-] - 2[CO_3^{2-}]$$

Sendo os índices 1, 2, 3 e 4, respectivamente, referentes às entradas de ácido, tampão, base e saída do reator.

Além disso: Q são as vazões volumétricas; V o volume do reator; Ar é a área transversal do reator, c é a constante da válvula de saída, W_a e W_b são as espécies invariantes de reação para o fluxo de saída, K_w é o produto iônico da água, K_{a1} e K_{a2} constantes de reação, $[H^+]$ representa a concentração de H^+ , $[OH^-]$ representa a concentração de OH^- , $[H_2CO_3]$ representa a concentração de H_2CO_3 , $[CO_3^{2-}]$ representa a concentração de CO_3^{2-} , $[HCO_3^-]$ representa a concentração de HCO_3^- .

Na tabela 1 são listadas as condições inicialmente adotadas na simulação.

TABELA 1: Condições operacionais adotadas na simulação.

Mantidas fixas:	
Concentração de base (NaOH)	0,006 mol/L
Concentração de ácido (HNO3)	0,006 mol/L
Diâmetro do reator	10 cm
Constante c da válvula	3 ml/(s.cm ^{1/2})
Condições iniciais:	
Altura do reator	1,787 cm
Concentração no interior do reator: mesma concentração do tampão	

Os comportamentos das vazões Q_1 , Q_2 e Q_3 , durante o tempo de simulação analisado, seguem o comportamento apresentado na Figura 2.

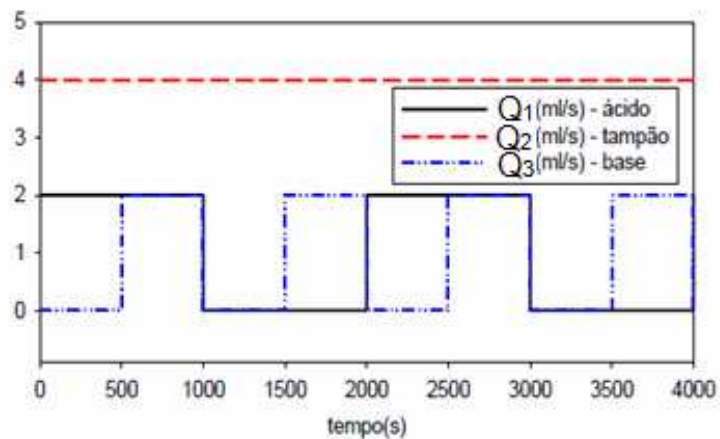


FIGURA 2- Comportamento simulado das vazões de ácido (Q_1), de tampão (Q_2) e de base (Q_3) ao longo do tempo de simulação (t).

Foram realizados três testes nos quais as vazões de alimentação de ácido e base variavam entre 0 e 2 mL/s durante todo o tempo de simulação. A vazão de tampão foi mantida e igual a 4 mL/s, conforme apresentado na Figura 2.

Primeiro Teste

No 1º teste adotou-se concentração de tampão igual a zero (água pura). Assim o pH no interior do reator durante a partida é igual a 7.

O comportamento simulado das variações no pH e na altura de líquido no interior do reator são descritos nas Figuras 3 e 4.

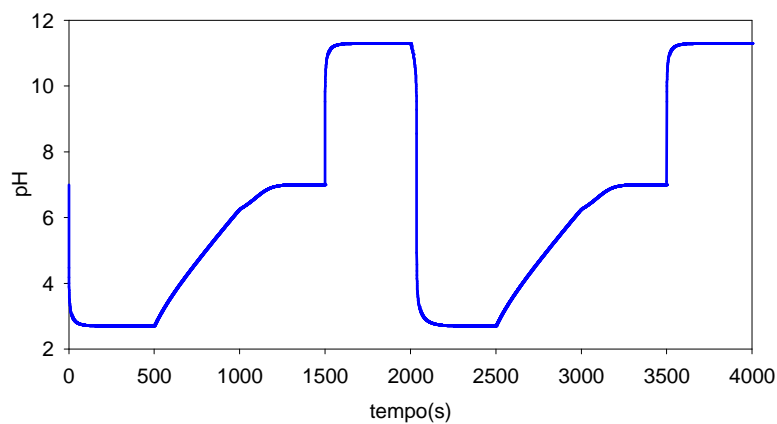


FIGURA 3 – Comportamento simulado do pH no interior do reator ao longo do tempo de simulação para o 1º teste.

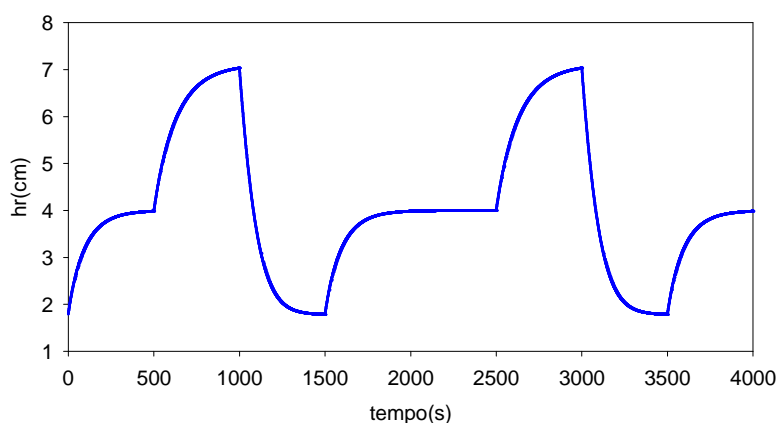


FIGURA 4 – Comportamento simulado da altura de líquido no interior do reator ao longo do tempo de simulação para o 1º teste.

Com o início da alimentação de ácido (do tempo 0 a 500s) ocorre uma queda brusca no pH (Figura 3), e a altura do reator aumenta (Figura 4). Em 500s o sistema já havia atingido um estado estacionário.

Com o tempo igual a 500s uma nova mudança é verificada. Inicia-se a alimentação de base (com a mesma vazão e a mesma concentração da de ácido), como evidenciado na Figura 2. Nesse momento, conforme apresentado na Figura 3, a altura do reator sofre uma elevação. A alimentação de base neutraliza a alimentação de ácido. À medida que o tempo tende a 1000s, o pH tende a 7 (Figura 3).

No tempo igual a 1000s o sistema ainda não está em estado estacionário (o pH ainda não atingiu 7) e as alimentações de ácido e base são eliminadas (vazões iguais a zero). Dessa forma, como é relatado na Figura 2, o sistema passa a ser alimentado apenas com tampão (que neste teste é água pura), provocando uma redução da vazão de alimentação e diminuindo assim a altura do reator.

A alimentação de água pura tende a “lavar” o reator fazendo com que o pH alcance o valor 7 antes do tempo atingir 1500s e um novo estado estacionário é atingido (Figura 3).

Em $t = 1500s$ a vazão de base volta a ser igual a 2 mL/s e a de ácido permanece nula. Desse modo, a altura e o pH no interior do reator sofrem um acréscimo e novamente um novo estado estacionário é atingido (Figuras 3 e 4).

Com o tempo igual a 2000s a vazão de base torna-se nula e a vazão de ácido volta a ser igual a 2 mL/s (Figura 2). A altura permanece constante e o pH sofre uma diminuição (Figuras 3 e 4). Assim, um novo estado estacionário é atingido antes de $t=2500s$.

Do tempo igual a 2500s até o final da simulação os comportamentos apresentados pela altura e pelo pH são réplicas do que já foi apresentado.

Segundo Teste

A concentração de tampão adotada no segundo teste foi de 0,006 mol/L (NaHCO_3). Como apresentado na Figura 5, o pH no interior do reator durante a partida foi de 8,33.

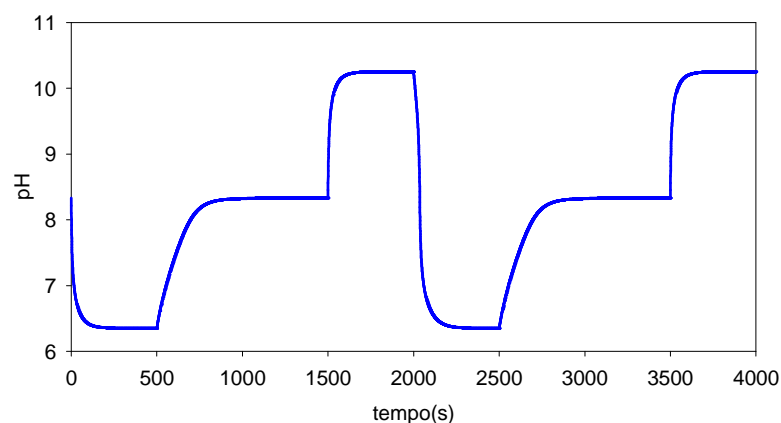


FIGURA 5 – Comportamento simulado do pH no interior do reator ao longo do tempo de simulação para o 2º teste.

Ao analisar a Figura 5 pode-se observar que as variações do pH, no interior do reator ao longo do tempo de simulação, apresentaram comportamentos condizentes àqueles obtidos no 1º teste. Ou ainda, ocorreram elevações e/ou diminuições no valor do pH, de acordo com o que era esperado (como já analisado anteriormente).

O comportamento da altura de líquido no interior do reator ao longo do tempo de simulação para o 2º teste se apresentou igual ao observado no 1º teste (Figura 4). Esse fato mostra que a altura de nível do reator independe da concentração de tampão.

Terceiro Teste

No terceiro teste a concentração de tampão adotada foi de 0,06 mol/L (NaHCO_3) e o pH no interior do reator durante a partida foi de 8,34 (Figura 6).

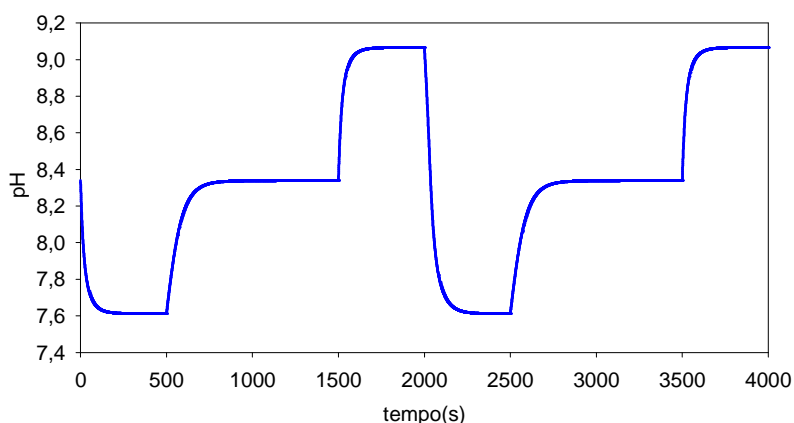


FIGURA 6 - Comportamento simulado do pH no interior do reator ao longo do tempo de simulação para o 3º teste.

Novamente o comportamento do pH no interior do reator em todo o período de simulação do 3º teste foi condizente aos resultados obtidos no 1º teste.

Como mencionado anteriormente, a altura do reator independe da concentração de tampão.

Ao examinar o comportamento do pH ao longo do período de simulação nos três testes realizados, verifica-se que com o aumento da concentração de tampão são evidenciados comportamentos mais suaves para o pH no interior do reator ao longo do tempo de simulação (Figura 7).

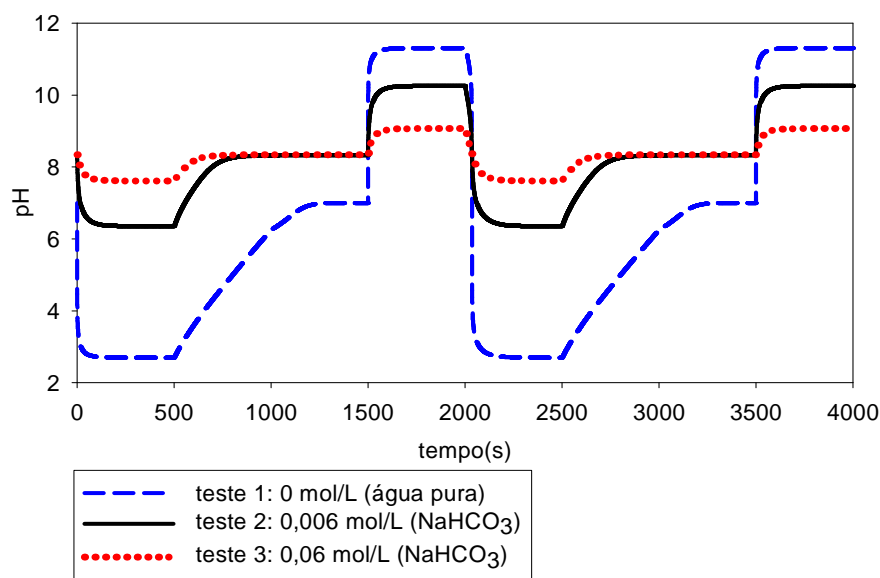


FIGURA 7 - Comportamento simulado do pH ao longo do tempo quando diferentes concentrações de tampão são usadas.

Depois de realizada a simulação matemática, iniciou-se a montagem experimental com o objetivo de validar os resultados dinâmicos obtidos na simulação para a altura do reator (Figura 4).

A etapa seguinte consistiu em medir a altura e o volume do reator e ajustar a constante da válvula. A altura foi medida com uma régua milimetrada, obtendo-se o valor de 7 cm a partir do zero adotado. Porém este valor não se apresenta preciso. Esta imprecisão se justifica pela configuração física do reator que, por exemplo, não possui uma simetria perfeita. Ressalta-se neste ponto que este tipo de equipamento é construído em vidro através de um processo manual.

O volume do reator foi obtido enchendo-se o reator completamente com água e pesando-a em uma balança semi-analítica. O valor obtido foi de 496g, aproximadamente 496 mL. Devido às dificuldades operacionais para ajustar a constante da válvula do reator, essa teve que ser ajustada pelo método de tentativa e erro. Por conta disso os valores das vazões Q_1 , Q_2 e Q_3 tiveram que ser modificados para que a altura de líquido no interior do reator permanecesse entre 0 e 7 cm.

Posteriormente, realizaram-se experimentos com água para se verificar a real possibilidade de reprodução das condições operacionais simuladas pelo modelo proposto. A montagem experimental empregada nos ensaios pode ser visualizada na Figura 1.1. As bombas (1), (2) e (3) bombeavam água de béqueres (5) e alimentavam o reator (4).

Por meio dos experimentos verificou-se que as vazões propostas não atendem à realidade experimental, uma vez que o valor inicial proposto para a constante da válvula do reator não representava a realidade experimental. Em certos momentos a altura atingida pelo reator ultrapassava 7cm, o valor limite de leitura. Inferiu-se então, que as vazões deveriam ser diminuídas, para que a altura no interior do reator estivesse entre 0 e 7cm. Por meio de testes de tentativa e erro e análises proporcionais foi possível chegar a seguintes vazões: Bomba 1 – 1 ml/s; Bomba 2 – 6,17ml/s; Bomba 3 – 1ml/s.

Inicialmente, em todos os experimentos, a bomba 2 de tampão era ligada até que a altura no interior do reator atingisse o valor adotado como 0 cm. Posteriormente seguiam-se as condições mostradas na Figura 2. Ou seja, no tempo de simulação ou de experimento (t) igual a 0s (início do procedimento experimental) ligava-se a bomba 1 de ácido e a bomba 2 de tampão, quando t =500s ligava-se a bomba 3 de base. Quando t atingia 1000s desligava-se a bomba 2 de ácido e a bomba 3 de base. Em t = 1500s ligava-se novamente a bomba 3 de base. Em t = 2000s ligava-se a bomba 1 de ácido e desligava-se a bomba 3 de base. O ciclo era repetido até t atingir 4000s, onde o experimento era encerrado.

Fazendo uso das novas vazões observou-se que as variações na altura do reator obtidas nos experimentos acompanhavam a dinâmica proposta pelo modelo, ou seja, quando se esperava uma diminuição na altura de líquido do reator ela diminuía, o mesmo pôde ser notado para o seu aumento e permanência. Foram feitos dois experimentos para análise da altura no interior do reator ao longo do tempo de simulação.

Na Figura 8 são comparados os valores simulados e os valores experimentais para a altura de líquido no interior do reator ao longo do tempo. Os resultados apresentados indicam que o modelo proposto descreve satisfatoriamente o comportamento da altura de líquido no reator de bancada.

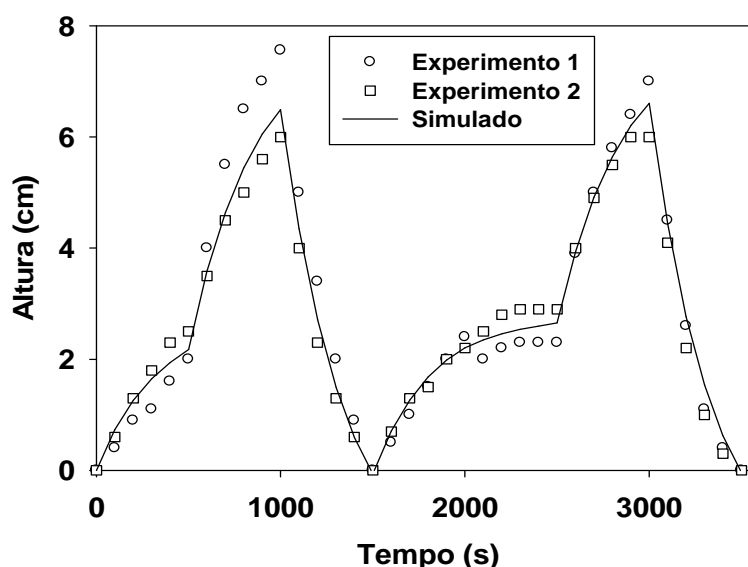


FIGURA 8 – Comportamento real e simulado da altura de líquido no interior do reator nos experimentos 1 e 2.

CONCLUSÕES

O modelo matemático proposto foi utilizado como ponto de partida para o ajuste das condições experimentais que foram adotadas no laboratório.

Devido à configuração física do reator, que não possui simetria perfeita, não foi possível obter uma leitura precisa da altura de líquido no interior do mesmo. Além disso, ocorreram também dificuldades operacionais para o ajuste da constante da válvula do reator, esta teve que ser ajustada pelo método de tentativa e erro, ocasionando assim modificações nos valores das vazões Q_1 , Q_2 e Q_3 , de forma que a altura de líquido no interior do reator permanecesse entre 0 e 7 cm. Dessa forma o modelo proposto teve que ser adaptado à realidade experimental.

Observando os resultados obtidos no presente estudo verificou-se que o modelo matemático proposto se mostrou capaz de reproduzir coerentemente a dinâmica real do sistema representado pelo reator de bancada.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o apoio financeiro concedido pela Fapes (Fundação de Amparo à Pesquisa do Espírito Santo) (Edital Universal, Processo 45439842/09).

REFERÊNCIAS

AKESSON, B. M., TOIVONEN, H. T., WALLER, J. B., NYSTROM, R. H., (2005). "Neural network approximation of a nonlinear model predictive controller applied to a pH neutralization process". **Computers and Chemical Engineering**. 29. p. 323-335, 2005.

BÖLING, J. M., SEBORG, D. E., HESPANHA, J. P., (2007). "Multi-model adaptive control of a simulated pH neutralization process". **Control Engineering Practice**. 15. p. 663-672, 2007.

CAMPOS, R.C.C. (2007). **Projeto e Construção de Planta Piloto de Neutralização de pH e Proposta de Metodologia para Incorporação de Informações Auxiliares na Identificação NARX Racional**. Dissertação de mestrado. UnilesteMG, Programa de Pós Graduação em Engenharia, Coronel Fabriciano, 2007, 158 p.

FAANES, A., SKOGESTAD, S., (2004). "pH-neutralization: integrated process and control design". **Computers and Chemical Engineering**. 28. p. 1475-1487, 2004.

GALÁN, O., ROMAGNOLI, J. A., PALAZOGLU, A., (2000). "Robust H_∞ control of nonlinear plants based on multi-linear models: an application to a bench-scale pH neutralization reactor". **Chemical Engineering Science**. 55. p. 4435-4450, 2000.

HAN, M, HAN, B., GUO, W., (2006). "Process control of pH neutralization based on adaptive algorithm of universal learning network". **Journal of Process Control**. 16. p. 1-7, 2006.

KUMBASAR, T., EKSIN I., GUZELKAYA M., YESIL E.,(2011). "Type-2 fuzzy model based controller design for neutralization processes". **ISA Transactions**, p.11, 2011.

MAHMOODI, S., POSHTAN, J., JAHED-MOTLAGH, M. R., MONTAZERI, A., (2009). "Nonlinear model predictive control of a pH neutralization process based on Wiener-Laguerre model". **Chemical Engineering Journal**. 146, p. 328-337, 2009.

MWEMBESHI, M. M., KENT, C. A., SALHI, S., (2004). "A genetic algorithm based approach to intelligent modeling and control of pH in reactors". **Computers and Chemical Engineering**. 28, p. 1743-1757, 2004.

NYSTÖM, R. H., SANDSTRÖN, K. V., GUSTAFSSON, T. K., TOIVONEM, H. T., (1998). "Multimodel Robust Control Applied to a pH Neutralization Process". **Computers Chemical Engineering – Suppl.**, European Symposium on Computer Aided Process Engineering – 8, p. S467-S474, 1998.

SALEHI, S., SHAHROKHI, M., NEJATI, A., (2009). "Adaptive nonlinear control of pH neutralization processes using fuzzy approximators". **Control Engineering Practice**. 17. p. 1329–1337. 2009.