

MODELAGEM DE UM REATOR PFR, ATRAVÉS DO SOFTWARE FORTRAN, COMO ESTUDO DE CASO PARA APLICAÇÃO DA METODOLOGIA DE APRENDIZAGEM BASEADA EM PROJETOS

Barbara Wittkowski Fendrich – bwfendrich6@gmail.com

Universidade Regional de Blumenau – Furb

Rua São Paulo, 3250 – Itoupava Seca

89.030-000 – Blumenau – Santa Catarina

Emanuel Joaquim Daniel Júnior – ejdj@poli.br

Escola Politécnica da Universidade de Pernambuco – Departamento de Eng. Civil

Rua José Múcio Monteiro, 124 – Madalena

50.720-555 – Recife – Pernambuco

Resumo: A simulação de processos faz uso de modelos matemáticos objetivando testar diversas possibilidades de configuração de funcionamento, buscando a idealidade ou prevendo o comportamento de sistemas em situações adversas. O ensino da modelagem matemática agrega, então, vários conhecimentos práticos e de gestão de projetos aos alunos de graduação, tornando-se uma experiência muito positiva no seu futuro profissional. Assim, a Aprendizagem Baseada em Projetos (PBL) atua como metodologia que transforma as antigas políticas pedagógicas em métodos de ensino mais dinâmicos, desmistificando as aulas apenas expositivas. Este trabalho objetiva demonstrar, como estudo de caso, a modelagem matemática de um reator PFR, geralmente utilizado em reações de fluidos gasosos, via Fortran, para a aplicação do PBL, principalmente em cursos de Engenharia Química. Cinco simulações testes foram realizadas e seus resultados foram analisados, mostrando a influência de cada um dos parâmetros nos resultados. Assim, aplicando-se a simulação matemática de processo em universidades, o PBL fomenta novas áreas de conhecimento, além de incentivar o desenvolvimento de experiência na área de gestão de projetos e do protagonismo estudantil.

Palavras-chave: Aprendizagem Baseada Em Projetos. Engenharia Química. Simulação Matemática.

1 INTRODUÇÃO

A modelagem e simulação de processos são ferramentas bastante utilizadas na Engenharia Química, devido à possibilidade que oferecem em prever condições operacionais ou simular equipamentos, sem interferir no sistema operante. A partir da década de 80, coincidindo com a evolução dos microcomputadores e a disponibilização de softwares, surgiram vários trabalhos científicos com o objetivo de simular computacionalmente o comportamento de diversos processos (SILVA, 2012).

A simulação de processos utiliza modelos matemáticos com o objetivo de testar diversas possibilidades de configuração, buscando a idealidade ou prevendo o comportamento de sistemas em situações adversas (PEGDEN *et al.*, 1990). Com os modelos simulados, pode-se analisar o comportamento de um processo para diferentes condições operacionais (PEGDEN *et al.*, 1990).

Em análise numérica, os métodos de Runge–Kutta compõem uma família importante de métodos iterativos implícitos e explícitos para a resolução numérica de soluções de equações diferenciais ordinárias. Estas técnicas foram desenvolvidas por volta de 1900 pelos matemáticos C. Runge e M.W. Kutta. Um membro da família de métodos Runge–Kutta é usado com tanta frequência que costuma receber o nome de "RK4" ou simplesmente "o método C".

Uma das aplicações do uso do método acima descrito é modelar reatores químicos, para obter informações essenciais para processos industriais. A determinação de concentrações, velocidades de reações e até mesmo a aproximação das equações de desempenho dos reatores reais pelas equações dos reatores ideais, a fim de diminuir o número de variáveis que influenciam o processo. Além destas funções, ainda pode-se testar diversas condições operacionais sem alterar a funcionalidade do equipamento ou do processo.

Paralelamente, um novo tipo de abordagem de aprendizagem tem ganhado espaço no meio acadêmico, a Aprendizagem Baseada em Projetos (PBL). Esta é uma metodologia de ensino centrada nos alunos, na qual aprendem novos conteúdos por meio da busca pela solução de um problema em aberto. Assim, os estudantes praticam estratégias de pensamento e de conhecimento prático (HMELO-SILVER, 2004).

Para mais, este trabalho objetiva incentivar a aplicação da metodologia PBL em cursos de Engenharia, utilizando, como estudo de caso, a aplicação dos métodos de Runge–Kutta para modelagem numérica com auxílio da linguagem Fortran. Essa abordagem permitirá o desenvolvimento de novas competências para os alunos da graduação, que além de trabalhar em equipe para a elaboração do projeto, também irão adquirir novas competências, que irão tornar-se um diferencial no futuro.

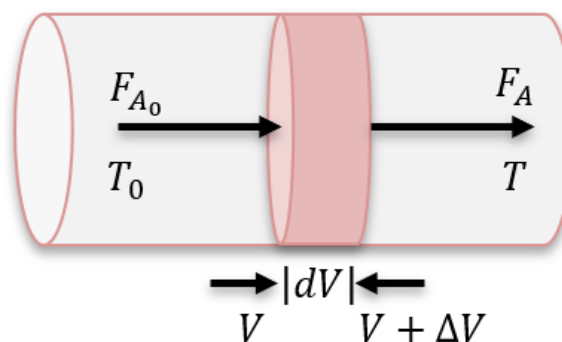
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

O reator PFR, foco deste trabalho, também conhecido como reator de fluxo em pistão (*plug flow*), é utilizado geralmente em reações de fluidos gasosos. Neste reator a conversão, contudo, é favorecida em altas temperaturas, podendo haver picos ao longo do seu comprimento. Os reagentes podem ser adicionados na alimentação em vários pontos ao longo do reator. Por definição, reatores químicos são equipamentos em que ocorrem reações em escala industrial para transformação de matérias-primas em produtos comercializáveis. Esses equipamentos existem nas mais variadas formas e tamanhos. Dois dos tipos de reatores ideais mais comuns são: batelada (BR) e tubular (PFR) (FOGLER, 2012).

É comum a aproximação das equações de desempenho dos reatores reais pelas equações dos reatores ideais, diminuindo consideravelmente o número de variáveis que influenciam no processo e simplificando as equações. Uma forma de analisar um reator para obter resultados rápidos e seguros, sem a realização de testes em uma planta real, consiste na utilização da modelagem e simulação.

Um fluido passando por um PFR pode ser modelado de forma a escoar através do reator como uma série de infinitamente finos "pistões" coerentes, cada um com uma composição uniforme, deslocando-se na direção axial do reator, sendo que cada pistão tenha uma composição diferente dos anteriores e posteriores a ele. O pressuposto fundamental é que, como um pistão fluindo através de um PFR, o fluido é perfeitamente misturado na direção radial, mas não na direção axial (para a frente ou para trás). Cada pistão de volume diferencial é considerado como uma entidade separada, de forma eficaz um reator em batelada infinitamente pequeno, tendendo no limite para o volume zero.

Figura 1 – Reator PFR



Fonte: Autores, 2019.

As equações diferenciais ordinárias são de grande importância em diversas áreas, pois determinam o comportamento futuro de vários problemas, com base nas condições presentes. Os problemas podem ser modelados matematicamente e, através dessa modelagem matemática, é possível a representação dos conceitos e processos envolvidos nesses tipos de problemas, o que leva ao entendimento do fenômeno físico modelado. Neste contexto, este trabalho faz uso do método de Runge-Kutta utilizado para resoluções de equações diferenciais ordinárias. A implementação do problema é realizada através do software Fortran e teve como objetivo a resolução do problema. A verificação dos métodos foi realizada através de simulações numéricas do problema com diferentes condições auxiliares, comparando com a solução analítica existente na literatura.

Assim, com a aplicação do PBL como metodologia de ensino nas universidades, o curso focará ainda mais no desenvolvimento de alunos que possam conceber soluções eficazes e eficiente para os problemas do mundo real, e mais sucesso esses estudantes irão obter em seu futuro profissional (CROCKETT, 2015).

3 MATERIAIS E MÉTODOS

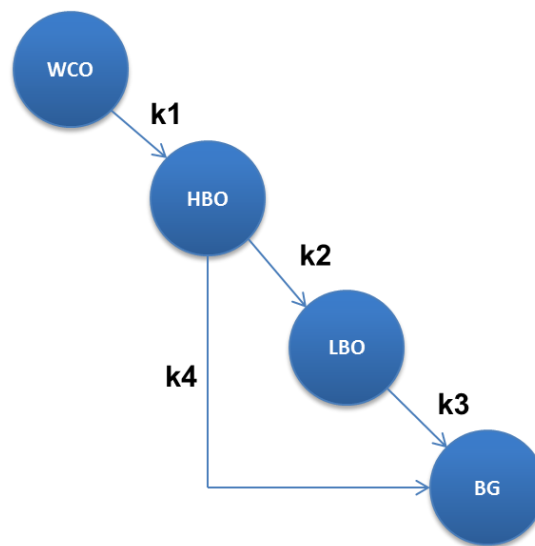
Esta seção apresenta a metodologia utilizada para a modelagem de um reator PFR e a sua simulação através do software Fortran, pelo modelo de Runge Kutta, que servirá como base para aplicação desta modelagem como PBL, principalmente para os cursos de Engenharia Química, além também de apresentar alguns comentários acerca do que foi realizado no caso em tela.

Inicialmente, buscou-se entender as reações químicas envolvidas a fim de iniciar a simulação do reator da melhor forma possível.

3.1 Situação física – Problema

A situação física do problema é demonstrada na Figura 2 abaixo.

Figura 2 – Transformação de óleo bruto em subprodutos fazendo uso de reator PFR isotérmico



Fonte: Autores, 2019.

Os acadêmicos (divididos em equipes) receberam diferentes diagramas de processo e o objetivo era simulá-los através do software Fortran. Além da simulação, priorizou-se a obtenção de dados fisicamente coerentes e também de otimizações processuais.

Recebido o trabalho, os alunos foram instigados a obter informações e parâmetros do processo sorteado, de modo a inserir tais condições no software. Nesta etapa, foi exigida pesquisa e busca por referências bibliográficas. Conhecidos alguns parâmetros principais das reações envolvidas, a simulação pôde ser iniciada e o modelo matemático escolhido.

3.2 Modelagem Matemática

O PFR foi modelado de acordo com a Equação (8):

$$\frac{dC_i}{dz} = - \left(\frac{k_i C_i A \rho}{Q} \right) \quad (8)$$

Em que: C é a concentração; i é a espécie química em análise; A é a área de seção transversal; $\rho\rho$ é a massa específica da mistura; Q é a vazão volumétrica de entrada no sistema e k é a velocidade específica da reação.

A modelagem matemática escolhida foi norteada basicamente no fato de que a concentração varia ao longo do comprimento do reator (z).

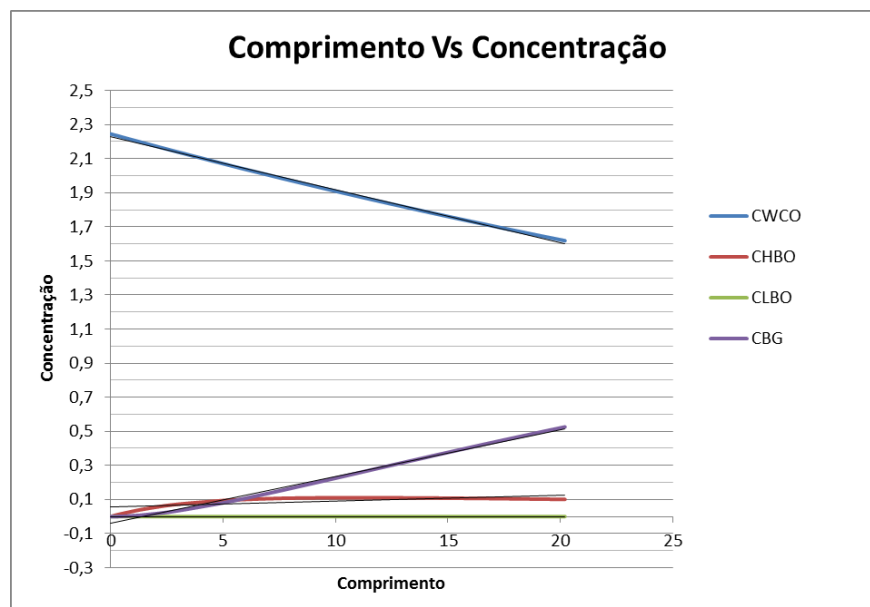
4 RESULTADOS OBTIDOS E COMENTÁRIOS

Os acadêmicos envolvidos no desafio apresentaram, inicialmente, dificuldades para ‘convergir’ a simulação do processo a eles apresentados. Diversas foram as justificativas, dentre elas falta de informações e certezas quanto aos parâmetros inseridos e a coerência dos resultados obtidos. Após buscas mais avançadas sobre o processo e o confronto dos resultados tratados com a literatura, a confiança dos estudantes aumentou e os resultados obtidos puderam ser analisados técnica e criticamente de uma maneira mais eficaz.

A seguir, apresentam-se alguns testes realizados e os resultados/comentários feitos pelos discentes. Previamente, fala-se nos parâmetros utilizados e posteriormente, o comportamento apresentado. Teste após teste, algum critério foi alterado a fim de conferir a influência deste no resultado final.

Primeiro teste: Q = 3,0 m³/h, A = 0,2 m², T = 200 °C.

Figura 3 – Comprimento vs Concentração – Teste 1



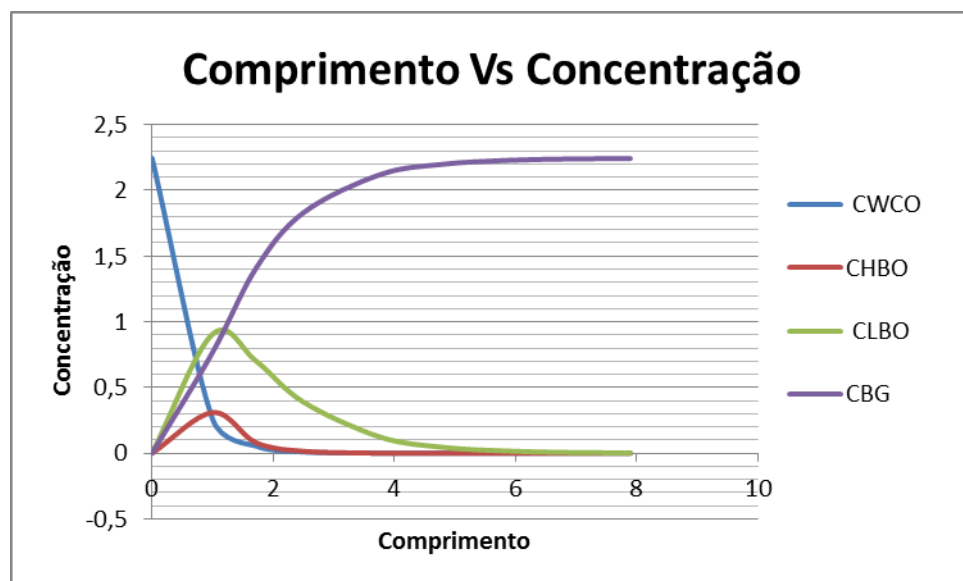
Fonte: Autores, 2019.

Comentário: Pôde-se perceber que a variação de concentração nestas condições não foi tão significativa, conforme esperado. Motivos alegados: baixa temperatura, visto que ela

interfere diretamente na velocidade específica da reação (k), e comprimento (z) do reator, visto que não se pôde analisar o comportamento completo do perfil de concentração, já que as iterações foram restringidas no comprimento de 20 m.

Segundo teste: $Q = 3,0 \text{ m}^3/\text{h}$, $A = 0,2 \text{ m}^2$, $T = 500 \text{ }^\circ\text{C}$.

Figura 4 – Comprimento vs Concentração – Teste 2



Fonte: Autores, 2019.

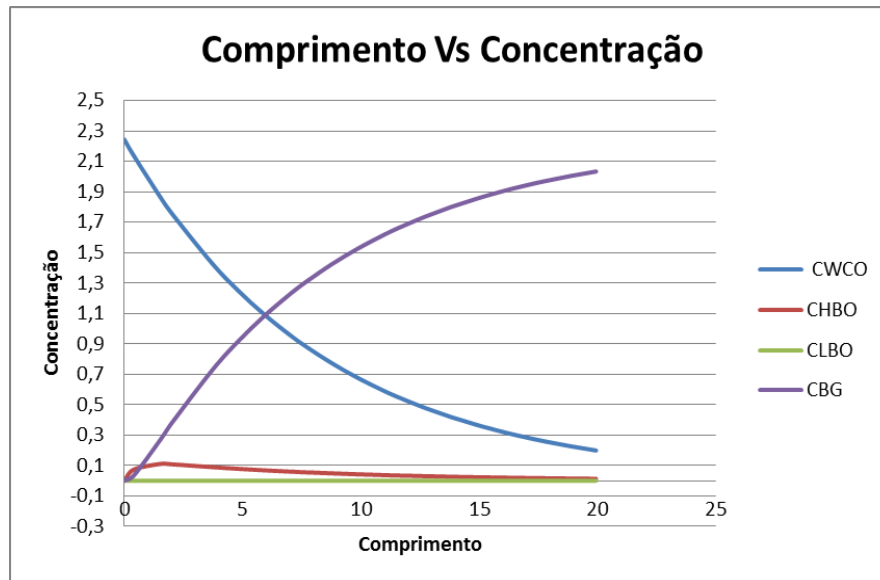
Comentários acerca da comparação entre o primeiro e segundo teste: Operado a mesma condição de vazão e área, aumentando-se a temperatura no segundo teste, pôde-se perceber que é requisitado um reator menor a uma temperatura maior, já que a partir de 6 m as concentrações tornaram-se praticamente constantes no reator operando a 500°C . Isso significa que a conversão é melhor a uma temperatura maior.

Paralelos aos testes realizados, outro ponto debatido foi a dificuldade do uso do software, mais especificamente em relação à linguagem de programação utilizada. Embora o contato com Linguagens de Programação, no curso em questão, seja forte, a dificuldade em lidar com a ferramenta apresentada foi notória. Porém, ao longo dos trabalhos, pôde-se perceber que a frequência do seu uso desenvolveu técnicas e expertise na resolução dos problemas. Sendo assim, com o passar do tempo, esta reclamação foi eliminada.

Destaca-se aqui a relevância do domínio de ferramentas computacionais nos engenheiros (de forma genérica), visto que muitos processos podem ser simulados, testados e otimizados fazendo-se uso dos softwares, poupando assim tempo operacional e custos relacionados.

Terceiro teste: $Q = 1,0 \text{ m}^3/\text{h}$, $A = 0,5 \text{ m}^2$, $T = 200 \text{ }^\circ\text{C}$.

Figura 5 – Comprimento vs Concentração – Teste 3

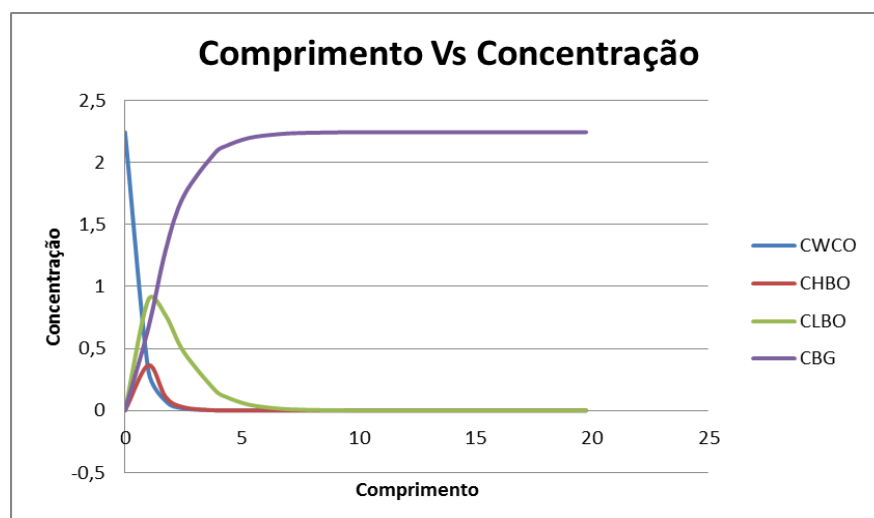


Fonte: Autores, 2019.

Comentários acerca da comparação entre o primeiro e terceiro teste: agora, operado a mesma temperatura e variando-se a vazão (diminuindo-a) e a área (aumentando-a), foi possível perceber que no terceiro caso a conversão da espécie CWCO em CBG é melhor em relação ao primeiro teste.

Quarto teste: $Q = 5,0 \text{ m}^3/\text{h}$, $A = 0,3 \text{ m}^2$, $T = 500 \text{ }^\circ\text{C}$.

Figura 6 – Comprimento vs Concentração – Teste 4

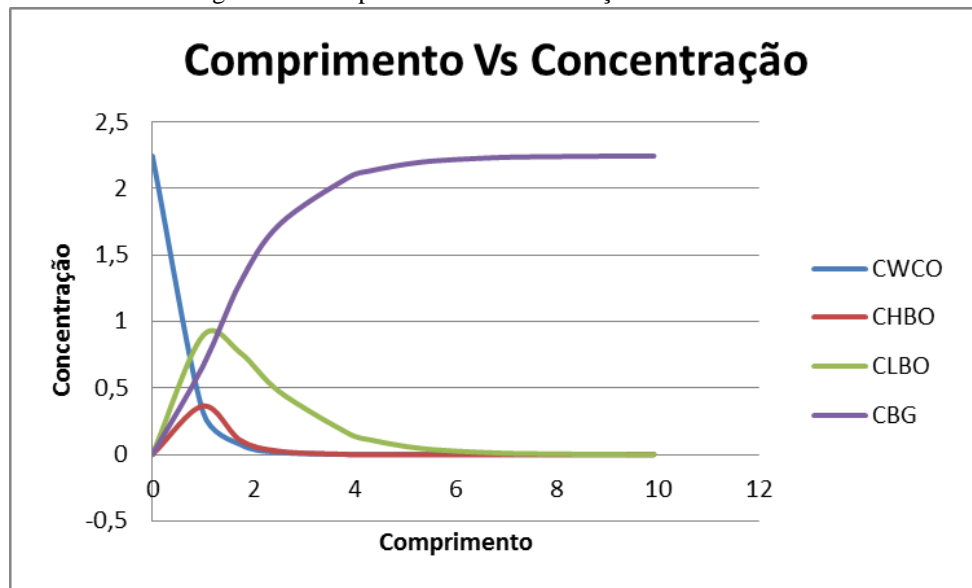


Fonte: Autores, 2019.

Comentário: pôde-se perceber que aumentando a temperatura, a área e a vazão, a conversão é mais eficiente.

Quinto teste: $Q = 5,0 \text{ m}^3/\text{h}$, $A = 0,3 \text{ m}^2$, $T = 500 \text{ }^\circ\text{C}$.

Figura 7 – Comprimento vs Concentração – Teste 4



Fonte: Autores, 2019.

Comentários acerca da comparação entre o quarto e quinto teste: verificou-se que no comprimento igual a 10,65 m, as espécies químicas CWCO e CHBO foram totalmente consumidas. Isto quer dizer que não necessitamos de um reator maior que 10,65 m caso o produto de interesse seja um dos mencionados anteriormente.

Os resultados obtidos, além de fisicamente coerentes, desenvolveram nos alunos capacidades de investigação e resolução de ‘defeitos’ na Simulação. Entre uma convergência e outra, buscou-se entender o que mudava e também o que fazia com que o programa não resolvesse corretamente o problema estimado. O objetivo final do trabalho apresentado era obter dados referentes ao dimensionamento do reator PFR dada a reação química, por isso vários testes foram simulados para melhor interpretação dos dados obtidos.

O uso da Aprendizagem Baseada em Projetos (PBL) atuou de forma bastante eficaz no que diz respeito a incentivar o desenvolvimento de experiência na área de gestão de projetos e a questão do protagonismo estudantil.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Por meio deste trabalho, demonstrou-se que é possível prever comportamento dinâmico de um reator, tal como comportamento estacionário, como é o caso do PFR. Esta demonstração deu-se através da simulação computacional de modelos matemáticos que descrevem o

comportamento desses reatores, tendo em vista que esses comportamentos são necessários para a etapa de elaboração do sistema de controle dos processos.

Identificou-se que o comportamento de diversos processos da Engenharia Química é estudado e analisado fazendo uso de ferramentas de modelagem matemática e simulação de processos, devido às possibilidades em se testar diversas condições operacionais sem alterar a funcionalidade real do equipamento ou processo, além de permitir testes com intuito de se chegar ao ótimo operacional.

Assim, tal aplicação de modelagem matemática em sala de aula por meio do PBL é importante para a formação do estudante de engenharia, pois além de fomentar novas áreas de conhecimento, ainda incentiva a gestão de projetos e o protagonismo estudantil. Também, é válido ressaltar o aprendizado envolvido no que diz respeito a enfrentamento de dilemas e resolução deles. Embora o desafio fora julgado como 'difícil', os acadêmicos reagiram de forma bastante positiva frente ao projeto e a discussão dos resultados mostrou-se de suma importância para melhorias futuras na aplicação deste.

REFERÊNCIAS

CROCKETT, R. **The critical 21st century skills every student needs and why**: Retrieved from: <https> 2015.

FOGLER, H. S. **Elementos de engenharias das reações químicas**. 4. Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2012.

HMELO-SILVER, C. E. Problem-based learning: What and how do students learn?. **Educational psychology review**, v. 16, n. 3, p. 235-266, 2004. ISSN 1040-726X.

Levenspiel, O. **Engenharia das Reações Químicas**, 3ª ed., Editora Edgard Blucher, 2000.

PEGDEN, C. D.; SHANNON, R. E.; SADOWSKI, R. P. **Introduction to simulation using SIMAN**. New York: McGraw-Hill, 1990.

Schmal, Martin. **Cinética e Reatores: Aplicação na Engenharia Química: teoria e exercícios**, Editora Synergia, 2010.

SILVA, J. L. **Modelagem e simulação de reatores autoclave para produção de PEBD**. 2012. Dissertação (Mestrado em Engenharia, Programa De Pós-Graduação Em Engenharia Química) (Área de Concentração: Modelagem e Simulação de Processos) - Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012

STEPHANOPOULOS, G. **Chemical process control: an introduction to theory and practice**. New Jersey: Prentice Hall, 1984.

MODELING A REACTOR PFR, THROUGH THE FORTRAN SOFTWARE, AS A CASE STUDY FOR THE APPLICATION OF THE PROJECT-BASED LEARNING METHODOLOGY

Abstract: *The simulation of processes uses mathematical models with the objective of testing many possibilities of operating configuration, seeking the ideality or predicting the behavior of systems in adverse situations. The teaching of mathematical modeling would then add a lot of practical and project management knowledge to graduate students, making it a very positive experience in their professional future. Thus, Project-Based Learning (PBL) acts as a methodology that transforms the old pedagogical policies into more dynamic teaching methods, demystifying the lectures only expositive. This work aims to demonstrate, as a case study, the mathematical modeling of a PFR reactor, generally used in gaseous fluid reactions, using Fortran, for the application of PBL, mainly in Chemical Engineering courses. Five simulations tests were performed and their results were analyzed, showing the influence of each of the parameters on the results. Thus, applying mathematical process simulation in universities, the PBL fosters new areas of knowledge, as well as encouraging the development of experience in the area of project management and student leadership.*

Key-words: *Chemical engineering. Project-Based Learning. Simulation*