

## Modelagem Matemática de Reatores Químicos: Aplicação do Método de Runge-Kutta de 4<sup>o</sup> Ordem

Naylla B. da Silva,<sup>1</sup> Luis F. Q. Cavalcante,<sup>2</sup> Silvia C. B. e Silva,<sup>3</sup> Eduardo L. de Oliveira<sup>4</sup>  
EST/UEA, Manaus, AM

A modelagem matemática de reatores químicos é fundamental para prever o comportamento das reações e otimizar processos industriais. Este estudo utiliza o método de Runge-Kutta de 4<sup>o</sup> ordem (RK4) para resolver equações diferenciais ordinárias (EDOs) associadas à reatores químicos através de equações que descrevem os parâmetros envolvidos no comportamento de um reator.

O modelo computacional partiu de equações diferenciais baseadas nos princípios da conservação de massa e energia, juntamente com as expressões cinéticas da taxa de reação e suas respectivas relações estequiométricas. Assim, considerando o balanço de massa para um reator tubular de fluxo contínuo em estado estacionário, tem-se [2]:

$$F_{A0} \frac{dX}{dV} = -r_A(X, T) \quad (1)$$

Onde  $X$  é a conversão,  $r_A$  é a taxa de reação e  $F_{A0}$  é o fluxo molar inicial. O balanço de energia, por sua vez, considera o efeito térmico da reação e, por meio dele, pode-se determinar a temperatura em um determinado ponto de um reator tubular adiabático em função da conversão, como se segue [2]:

$$T = \frac{X[-\Delta H_{Rx}^\circ T_R] + T_0 \sum \theta_i C_{P_i} + X \Delta C_P T_R}{\sum \theta_i C_{P_i} + X \Delta C_P} \quad (2)$$

Na equação acima,  $-\Delta H_{Rx}^\circ T_R$  é a variação de entalpia padrão na temperatura  $T_R$ ,  $C_{P_i}$  é a capacidade calorífica do reagente  $i$ ,  $\Delta C_P$  a variação da capacidade calorífica entre produtos e reagentes. O formato da função  $-r_A(X, T)$  depende do mecanismo da reação e, portanto, tem uma grande especificidade. Por exemplo, para reação de isomerização do butano, tem-se [2]:

$$-r_A = k_0 e^{\left(-\frac{E}{R} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right)} C_{A0} \left(1 - \left(1 + \frac{1}{K_c}\right) X\right) \quad (3)$$

Onde  $C_A$  é a concentração do reagente,  $T$  é a temperatura,  $k_0$  é a constante da taxa de reação na temperatura  $T_0$  e  $K_c$  é a constante de equilíbrio que descreve a reversibilidade da reação.

Essas equações podem ser relacionadas e solucionadas através da aplicação do método de Runge-Kutta de 4<sup>o</sup> ordem com o auxílio da linguagem de programação Python, permitindo obter soluções aproximadas por meio de uma sequência de cálculos iterativos [1]. Os resultados obtidos foram analisados graficamente, evidenciando a influência das variáveis do sistema. Nas figuras 1 e 2, observa-se a variação da temperatura  $T$  e da taxa de reação  $r_A$  com o aumento do volume  $V$ , destacando o efeito do aquecimento na velocidade de reação. Na figura 3, compara-se a conversão  $X$  e a conversão de equilíbrio  $X_e$  em função do volume  $V$ , indicando se a reação está se aproximando ou se afastando do equilíbrio químico.

<sup>1</sup>nbdsg.geq21@uea.edu.br

<sup>2</sup>lfqc.geq21@uea.edu.br

<sup>3</sup>scbsilva@uea.edu.br

<sup>4</sup>eldeoliveira@uea.edu.br

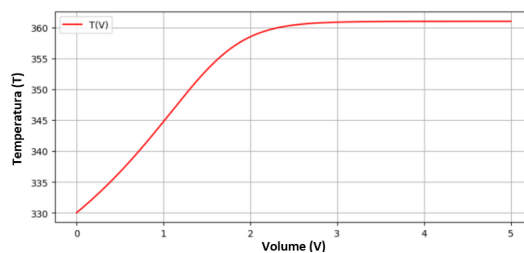


Figura 1: Comportamento volume ( $V$ ) vs. temperatura ( $T$ ). Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

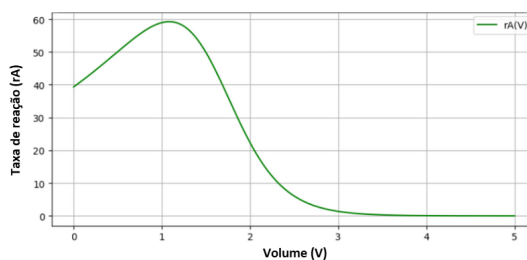


Figura 2: Comportamento volume ( $V$ ) vs. taxa de reação ( $r_A$ ). Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

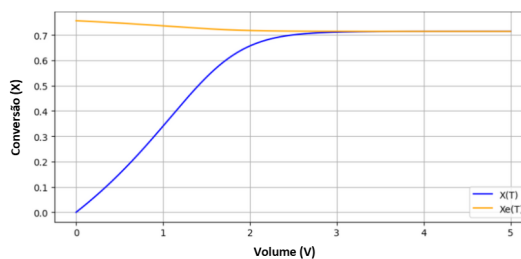


Figura 3: Comportamento volume ( $V$ ) vs. conversão ( $X$ ). Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

A análise dos gráficos demonstra que o aumento da temperatura acelera a reação e a conversão, mas, com o avanço da conversão, o balanço de energia se torna ainda mais crucial pois, se a remoção de calor for inadequada, o aumento excessivo da temperatura pode reduzir tanto a conversão quanto a eficiência. Essas observações destacam a importância das técnicas numéricas e programação no ensino de reatores, aprimorando habilidades de engenharia em nível de graduação.

## Referências

- [1] A. T. B. Celeste, V. H. de Holanda e D. S. Santos. “Uma exposição didática do método de Runge-Kutta no estudo do pêndulo amortecido”. Em: **Revista Brasileira de Ensino de Física** 88 (2024), pp. 317–324. DOI: 10.1590/1806-9126-RBEF-2024-0088.
- [2] H. S. Fogler. **Elementos de Engenharia das Reações Químicas**. 4a. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2009. ISBN: 9788521617167.