

Modelagem Matemática de Reatores Químicos: Aplicação do Método de Runge-Kutta de 4º Ordem

Naylla B. da Silva¹ Luis F. Q. Cavalcante² Silvia C. B. e Silva³ Eduardo L. de Oliveira⁴
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 4º 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]:

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

Na equação acima, $-\Delta H_{Rx}^\circ T_R$ é a variação de entalpia padrão na temperatura T_R , C_{Pi} é a capacidade calorífica do reagente i , ΔC_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]:

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

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.

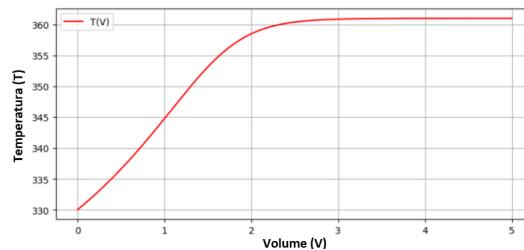
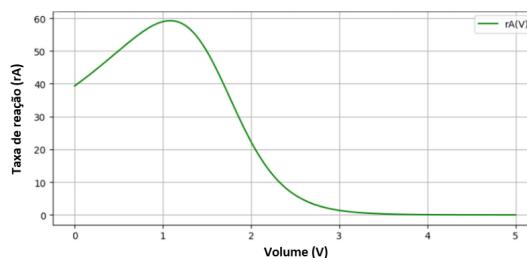
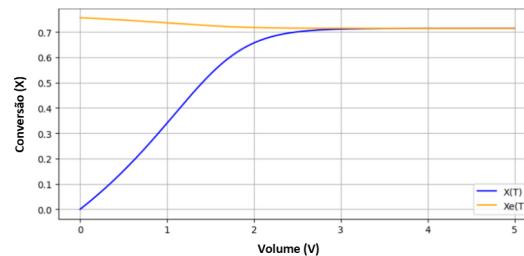
Essas equações podem ser relacionadas e solucionadas através da aplicação do método de Runge-Kutta de 4º ordem com o auxílio da linguagem de programação Python, permitindo obter soluções aproximadas por meio de uma sequência de cálculos interativos [1]. Os resultados obtidos foram analisados graficamente, 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.

¹nbds.geq21@uea.edu.br

²lfqc.geq21@uea.edu.br

³scbsilva@uea.edu.br

⁴eldeoliveira@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.