

# MODELAGEM E SIMULAÇÃO

PROCESSOS QUÍMICOS

Notas de Aulas Inovadoras

 Ivan Carlos Franco

Modelagem e Simulação

 **Análises**  
de processos 

# Modelagem e Simulação: Processos Químicos. NOTAS DE AULA INOVADORAS

# Modeling and Simulation: Chemical Processes. INNOVATIVE CLASS NOTES

Article Info:

Article history: Received 2020-12-20 / Accepted 2021-06-15 / Available online 2021-06-15

doi: 10.18540/jcecvl7iss4ppfrancoic2021-01



Ivan Carlos Franco

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4811-8158>

Centro Universitário FEI, Brasil

E-mail: [icfranco@fei.edu.br](mailto:icfranco@fei.edu.br)

## Resumo

A modelagem e simulação é fundamental para a Engenharia Química. Podemos por meio dela realizar estudos importantíssimos relacionados à dinâmica de sistemas. Os modelos matemáticos, se desenvolvidos de forma correta e consistentes, podem substituir uma planta química e permitir a realização de ensaios computacionais que tragam informações relevantes do processo. No atual cenário em que a indústria (não somente a química, mas todas as áreas) se encontra em decorrência da transformação industrial (Indústria 4.0) a modelagem e simulação terá um papel importantíssimo no desenvolvimento de sistemas baseados em modelos. Esta coletânea de notas de aulas é um auxílio para o ensino de modelagem e simulação.

# Sumário

<b>INTRODUÇÃO À MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE PROCESSOS .....</b>	<b>5</b>
1.1 CONCEITOS E DEFINIÇÕES DE MODELAGEM .....	6
1.2 CONSTRUÇÃO E CLASSIFICAÇÃO DOS MODELOS MATEMÁTICOS .....	8
1.2.1 Sistemas de parâmetros concentrados × parâmetros distribuídos .....	9
1.2.2 Sistemas lineares × não lineares.....	9
1.2.3 Sistemas contínuo × discreto.....	10
1.2.4 Sistemas estáticos × dinâmicos.....	10
1.2.5 Sistemas determinísticos × estocástico .....	10
1.3 APLICAÇÕES DE MODELOS MATEMÁTICOS NA ENGENHARIA QUÍMICA .....	10
<b>FERRAMENTAS PARA RESOLUÇÃO E ANÁLISE DE MODELOS MATEMÁTICOS 13</b>	
2.1 DETERMINAÇÃO DE RAÍZES.....	13
2.1.1 Método de Newton.....	13
2.1.2 Método das Secantes ou Newton-Secante.....	15
2.1.3 Método da Posição Falsa.....	16
2.1.3 Método da Bisseção.....	17
2.2 SISTEMAS LINEARES DE EQUAÇÕES .....	17
2.2.1 Método da eliminação de Gauss (direto) .....	18
2.2.2 Método da Fatoração LU (direto).....	19
2.2.3 Método de Gauss-Jacobi (iterativo) .....	19
2.2.4 Método de Gauss-Seidel (iterativo).....	19
2.3 SISTEMAS NÃO-LINEARES DE EQUAÇÕES .....	20
2.3.1 Método de Newton-Raphson.....	20
2.3.2 Método de Newton-Raphson modificado.....	20
2.4 EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS.....	20
2.4.1 Método de Euler.....	21
2.4.2 Método de Runge-Kutta de 4ª Ordem .....	22
2.5 RIGIDEZ OU STIFFNESS DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS .....	23
2.6 LINEARIZAÇÃO DE MODELOS.....	25
<b>DESENVOLVIMENTO DE MODELOS DINÂMICOS.....</b>	<b>29</b>
3.1 MODELOS DINÂMICOS .....	29
3.2 PRINCÍPIO DA CONSERVAÇÃO DE MASSA E DE ENERGIA .....	29
3.3 PRINCÍPIO DA CONSERVAÇÃO DE MOVIMENTO (MOMENTUM).....	33
3.4 ORDEM DO MODELO .....	35
3.5 ANÁLISE DO GRAU DE LIBERDADE.....	35
<b>PROBLEMAS TÍPICOS DA ENGENHARIA QUÍMICA: ESTUDOS DE CASO .....</b>	<b>37</b>
CASO 1: TANQUES DE ARMAZENAMENTO EM SÉRIES.....	37
CASO 2: MISTURADORES DE SOLUÇÕES AQUOSAS.....	38
CASO 3: ALETA ADIABÁTICA EM REGIME ESTACIONÁRIO .....	39
CASO 4: TANQUES CONECTADOS POR TUBULAÇÃO LONGA .....	39
CASO 5: REATOR ISOTÉRMICO COM VOLUME VARIÁVEL.....	40
CASO 6: REATOR CSTR NÃO-ISOTÉRMICO ENCAMISADO .....	40
CASO 7: SISTEMA DE VAPORIZAÇÃO.....	41
CASO 8: SISTEMA DE SEPARAÇÃO FLASH MULTICOMPONENTE .....	42
CASO 9: REATORES ISOTÉRMICOS COM REAÇÕES CONSECUTIVAS.....	43
CASO 10: REATOR TUBULAR NÃO-ISOTÉRMICO EM REGIME PERMANENTE.....	43
CASO 11: CSTR PRESSURIZADO, REAÇÃO EM FASE GASOSA .....	44
CASO 12: REATOR DE MEMBRANA ISOTÉRMICO E ISOBÁRICO.....	45
CASO 13: BIOREATORES .....	46
CASO 14: TRANSFERÊNCIA DE CALOR EM UMA BARRA METÁLICA EM REGIME TRANSIENTE .....	46
CASO 15: CONTROLE DE NÍVEL EM UM TANQUE DE ARMAZENAMENTO .....	47
<b>REFERÊNCIAS .....</b>	<b>49</b>



# Capítulo 1

## Introdução à modelagem e simulação de processos

A modelagem e a simulação são uma arte e não são engessadas. Neste Capítulo inicial é apresentado os conceitos básicos de modelagem matemática, os elementos básico existentes na modelagem, forma de construção dos modelos, tipos de modelos e suas classificações. Neste capítulo iremos entender que um modelo matemático nunca pode substituir observações e experimentos, é uma ferramenta complementar.

Uma nova tendência para a realização de processos integrados (sistemas caracterizados pela diversidade de massa e energia), visando a contenção de despesas, vem sendo introduzida na indústria química, Figura 1.1 (Luyben, 1996). Assim, para que haja uma validação da integridade do projeto e sua operabilidade prática, há a necessidade de se realizar a simulação em toda a planta utilizando modelos matemáticos rigorosos que descrevem a dinâmica de cada processo.

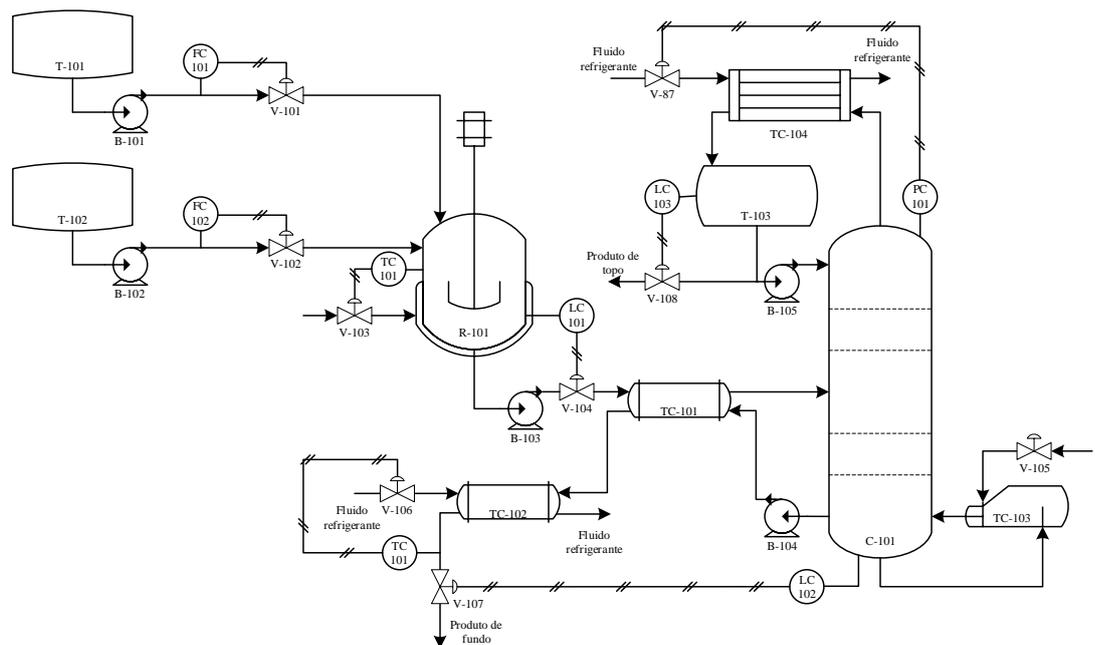


Figura 1.1 – Diagrama de processo de uma planta química típica

A modelagem de processos não é uma ciência “engessada” existindo apenas uma maneira correta de ser praticada, mas também não é não estruturada a ponto de ser praticada de qualquer jeito. Existem técnicas envolvidas na modelagem, e o procedimento de desenvolvimento de modelos, mesmo que não rígido, deve ser sistemático se quisermos obter sucesso e eficiência dos modelos (Luyben,1996).

O resultado mais importante do desenvolvimento de um modelo matemático que representa um sistema é a compreensão que se adquire do que realmente faz o processo funcionar. Os modelos matemáticos podem ser úteis em todas as fases da engenharia, desde pesquisa e desenvolvimento até operações de plantas e em estudos econômicos e de negócios. Portanto, o principal uso do modelo matemático é atuar como um substituto para o sistema físico, tornando possível investigar a resposta do sistema sob várias condições de entrada de

forma rápida e barata sem a necessidade de alterar o sistema físico ([Ogunnaike, 1994](#); [Luyben, 1996](#)). Isto não significa a eliminação da necessidade de testes na planta, pois os testes são fundamentais para a validação do modelo, ou seja, os modelos e simulação nunca podem substituir observações e experimentos, mas são complemento útil e importante.

## 1.1 Conceitos e definições de modelagem

Modelagem e simulação podem ser definidas como uma disciplina na qual se desenvolve a compreensão do comportamento das partes de um sistema e do sistema como um todo. Modelagem e simulação são uma arte, e como toda arte a prática é fundamental ([Jana, 2011](#)). Podemos entender de pintura lendo livros e conversando com pintores, porém para se alcançar habilidade e talento no desenvolvimento de modelos e na realização das simulações é necessário praticar a construção de modelos e simulação e análise desses modelos.

Quando desenvolvemos (criamos) um modelo matemático temos a ideia de que ele represente e possa responder algumas questões sobre o sistema estudado sem a necessidade de realizarmos testes experimentais.

Na modelagem matemática, o modelo matemático é a parte fundamental. *Mas o que é um modelo matemático?* Temos diversas definições de modelos matemáticos na literatura, porém notaremos que todas as definições irão enfatizar que um modelo (de forma geral) é a representação de um sistema ou objeto. [Eykhoff \(1974\)](#) defini um modelo matemático como sendo *a representação do comportamento de um sistema existente (ou sistema a ser construído) em uma forma utilizável*.

Como nosso foco é a determinação de modelos de processos podemos definir modelo, segundo [Bequette \(1998\)](#), como: *Conjunto de equações que nos permite prever o comportamento de um processo químico*. Sendo pragmático um modelo matemático *é apenas uma representação aproximada de um processo real*. A complexidade de um modelo matemático dependerá do uso final, se apenas for necessária uma resposta aproximada podemos utilizar um modelo simplificado do processo ([Bequette, 1998](#)).

Outro ponto importante é conhecer os elementos presentes na modelagem e simulação. Os conceitos básicos presentes no processo de modelagem e simulação podem ser observados na Figura 1.2.



Figura 1.2 – Conceitos básicos presentes na modelagem e simulação de processos

O **processo** é o agrupamento de unidades de operação. O **modelo** é a representação matemática do processo. As **bases para os modelos matemáticos** são as leis fundamentais da física e da química, tais como leis da conservação de massa, de energia e quantidade de movimento e conceitos de equilíbrio químico e termodinâmico. As **áreas de conhecimento básico** incluem escoamento de fluidos, transferência de massa, transferência de calor, cinética, termodinâmica e controle e otimização de processos. Os **elementos básicos da modelagem** envolvem etapas para a formulação do modelo ([Ogunnaike, 1994](#); [Luyben, 1996](#); [Bequette, 1998](#)).

A seguir são detalhados os elementos básicos da modelagem e simulação. Esses elementos devem estar presentes no processo de modelagem para que o modelo desenvolvido tenha o melhor desempenho possível (Luyben, 1996; Ogunnaike, 1994).

- **Descrição do processo e definição do problema:** Conhecimento dos fenômenos que envolvem o processo e o que se deseja conhecer de suas causas e efeitos. Pode-se considerar a parte mais importante para a análise de um processo.
- **Teoria e aplicação das leis fundamentais:** Após descrever o processo e entendê-lo deve-se aplicar a teoria que governa os seus fenômenos.
- **Equacionamento:** representar matematicamente as teorias que descrevem o processo estudado.
- **Considerações:** Nesta etapa a sensibilidade do engenheiro químico é fundamental para julgar as considerações a serem feitas. Lembrando que, modelos complexos podem resultar em dificuldade no momento de se resolver e analisar os resultados, ou seja, a complexibilidade do processo está diretamente ligada aos esforços e custos computacionais para sua resolução. As considerações devem ser analisadas cuidadosamente de forma que qualquer termo omitido no desenvolvimento do modelo é de fato insignificante. Como resultado das considerações temos um conjunto de equações matemáticas menos complexo e necessitando menos esforço computacional para resolvê-lo.
- **Consistência:** Este elemento nada mais é que a checagem do número de equações e o número de variáveis a determinar. Se o número de equações é igual ao número de variáveis o sistema é consistente. Caso o número de equações e variáveis a determinar forem diferentes, implicará que o sistema está sub especificado ou sobre especificado e às vezes com a formulação errada. Outro ponto importante é a consistência das unidades de medidas de todos os termos envolvidos nas equações.
- **Matemática e computação:** A natureza das equações do modelo é que determina o método para a obtenção da solução a ser selecionado, seja ele analítico ou numérico. Exemplo: um modelo dinâmico que resulta em um EDO de primeira ordem como condição inicial poderá ser resolvido pelo método de Runge-kutta de 4ª Odem. Na Figura 1.3 podemos observar um sistema algébrico-diferencial contendo os métodos de maior interesse de acordo com sua categoria.
- **Solução e validação:** Última fase do desenvolvimento de modelos de um processo é o estudo e verificação das soluções obtidas dos modelos matemáticos através de comparações com dados experimentais.

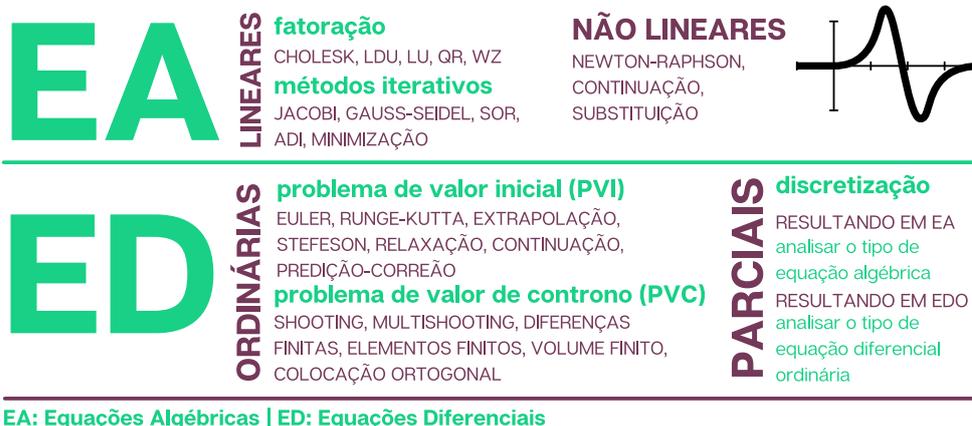
O entendimento de algumas definições é de fundamental importância para o desenvolvimento de um modelo matemático conciso. A seguir são apresentadas algumas definições.

- **Equação:** expressão matemática relacionando as variáveis.
- **Variável:** símbolo matemático que representa a grandeza
- **Variável de estado:** descreve o comportamento do processo. É a variável que surge naturalmente no termo de acúmulo do balanço material ou balanço de energia e é uma quantidade mensurável (pelo menos conceitualmente) que indica o estado do sistema. Por exemplo, a temperatura é uma variável de estado que surge do balanço de energia dinâmico (Bequette, 1998).
- **Variável de entrada:** é uma variável que normalmente deve ser especificada antes que um problema possa ser resolvido. Essas entradas são especificadas com base no conhecimento do processo considerado. Por exemplo, fluxos de entrada e saída do processo, composição e temperatura na entrada do sistema, dentre outras. É a variável que sofrerá modificação durante a operação e mudará o estado estacionário do sistema dinâmico (Bequette, 1998).
- **Parâmetros:** um parâmetro é normalmente um valor de propriedade física ou química que deve ser especificado ou conhecido para resolver matematicamente um problema. Exemplos, densidade, viscosidade,

condutividade térmica, coeficiente de transferência de calor e coeficiente de transferência de massa (Bequette, 1998).

- **Força motriz:** variável gerada por uma função conhecida ou imposta ao processo (existe somente em simulação dinâmica). Exemplo, em um sistema de tanques em série a vazão de entrada no primeiro tanque provocará uma mudança na dinâmica de todos os tanques que compõe o processo, logo a vazão de entrada é a força motriz do sistema.
- **Condição inicial:** estado inicial do processo.
- **Condição de contorno:** delimitação do processo (restrições nas variáveis espaciais)
- **Grau de liberdade:** Para simular um processo, devemos primeiro garantir que as equações do modelo constituem um conjunto de relações solucionável. Ou seja, as variáveis de saída podem ser resolvidas em termos das variáveis de entrada. Para que o modelo tenha uma solução única, o número de variáveis desconhecidas deve ser igual ao número de equações do modelo independente (Ogunnaike, 1994).  $N_F = N_V - N_E$ , sendo:  $N_F$  – grau de liberdade,  $N_V$  – número de variáveis independentes do processo,  $N_E$  – número de equações independentes do processo.

## Sistema Algébrico-Diferencial



EA: Equações Algébricas | ED: Equações Diferenciais

Figura 1. 3 – Sistema de Equações Algébrico -Diferenciais contendo os métodos de maior interesse na resolução de modelos matemáticos

## 1.2 Construção e classificação dos modelos matemáticos

Quando estamos construindo um modelo matemático podemos levar em conta os fenômenos físico e químicos do sistema ou de forma empírica, assim pode-se dizer que existem dois tipos básicos de construção de um modelo matemático (Luyben, 1996; Bequette, 1998):

1. *Modelagem física ou fenomenológica:* que o fundamento é dividir o sistema em subsistemas que possuem comportamentos conhecidos aplicando as leis fundamentais da engenharia química balanço de massa, de energia e de quantidade de movimento.
2. *Identificação:* que se baseia na utilização de observações (empírico) visando adequar as propriedades do modelo para o sistema.

Os modelos matemáticos são desenvolvidos para diferentes tipos de sistema que podem apresentar diferentes características. Alguns sistemas podem ser tratados de forma quantitativa e neste caso as variáveis são quantificáveis e as relações entre elas podem ser expressas analiticamente (Maya e Leonardi, 2014). Entender a classificação dos sistemas facilitará o desenvolvimento dos modelos que os representam. A seguir é apresentado um comparativo entre os sistemas existentes que nos auxiliará no entendimento e tomada de decisões quanto a solução dos modelos.

## 1.2.1 Sistemas de parâmetros concentrados × parâmetros distribuídos

Parâmetros de um sistema são as grandezas que representam propriedades dos elementos desse sistema. Por exemplo, em um sistema de reação química a concentração de um componente ou a constante da taxa de reação são parâmetros pertencentes a esse sistema.

Em sistemas de *parâmetros concentrados* as propriedades são descritas de forma concentrada em pontos bem definidos do sistema, ou seja, as variações espaciais são desprezadas, as propriedades/estado do sistema são consideradas homogêneas em todo o volume de controle e geram sistemas de equações diferenciais ordinárias. As variações estão concentradas em um variável independente ([Luyben, 1996](#); [Bequette, 1998](#); [Aguire, 2007](#); [Maya e Leonardi, 2014](#)). Um exemplo de sistemas de parâmetros concentrados é um tanque de aquecimento perfeitamente misturado (agitado), onde consideramos que a temperatura do fluido é uniforme em todo o tanque e pode ser representado pela Eq. 1.1.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V} (T_i - T) + \frac{Q}{\rho V C_p} \quad (\text{Eq. 1. 1})$$

Sendo: T – temperatura do fluido, F – vazão volumétrica, T<sub>i</sub> – temperatura na entrada, Q – calor adicionado, ρ – densidade do fluido, V – volume do tanque, C<sub>p</sub> – calor específico.

Já nos sistemas de *parâmetros distribuídos* é considerada variações espaciais no comportamento das variáveis dando origem a um sistema de equações diferenciais parciais. Há mais de uma variável independente. Um exemplo de sistema de parâmetros distribuídos é um trocador casco-tubo em contracorrente onde a temperatura do líquido varia ao longo do comprimento do trocador e também com o tempo e sua representação pode ser dada pela Eq. 1.2 ([Luyben, 1996](#); [Bequette, 1998](#); [Aguire, 2007](#), [Jana, 2011](#)). O que temos que ter em mente é que todo sistema real é distribuído. Sempre há variações espaciais e quando essas variações são muito pequenas, aproximamos a um sistema distribuído.

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial Z} = \frac{\pi d U}{\rho C_p A} (T_{st} - T) \quad (\text{Eq. 1.2})$$

Sendo: T – temperatura do fluido, v – velocidade do fluido, d – diâmetro do tubo, U – coeficiente global de troca térmica, ρ – densidade do fluido, C<sub>p</sub> – calor específico, A – área da seção transversal do tubo, T<sub>st</sub> – Temperatura no estado estacionário.

## 1.2.2 Sistemas lineares × não lineares

Os sistemas serão considerados *lineares* se a variável dependente ou suas derivadas aparecem apenas no 1º grau e os princípios da homogeneidade e da superposição são aplicáveis. De acordo com esses princípios da superposição, um sistema linear, deve satisfazer as seguintes condições ([Luyben, 1996](#); [Bequette, 1998](#); [Aguire, 2007](#); [Maya e Leonardi, 2014](#)):

- Se ao perturbarmos um sistema com uma entrada  $u_1(t)$  e a resposta for  $y_1(t)$  ao aplicarmos uma perturbação  $k$  vezes maior, ou seja,  $k \times u_1(t)$  a resposta deverá ser  $k \times y_1(t)$  assim teremos:  $y(ku_1) = ky(u_1)$ . Esse é o princípio da homogeneidade.
- Se a resposta a uma perturbação na entrada  $u_1(t)$  for  $y_1(t)$  e para outra perturbação  $u_2(t)$  for  $y_2(t)$ , então a resposta à soma das excitações,  $u_1(t) + u_2(t)$ , será igual a soma das respostas  $y_1(t) + y_2(t)$ . Matematicamente temos:  $y(u_1 + u_2) = y(u_1) + y(u_2)$ , sendo este o princípio da superposição)

Os sistemas onde não se aplica os princípios da homogeneidade e da superposição são considerados sistemas *não lineares*. Uma característica importante que devemos levar em consideração quando tratamos da linearidade de um sistema é que todos os sistemas reais são não lineares, porém podem se comportar como lineares dentro de um certo limite ou podemos realizar a linearização e termos uma aproximação do sistema (este assunto veremos mais tarde). Um exemplo de limite de linearidade é o de uma mola onde se aplica a Lei de Hook, ou seja, a deformação é proporcional a força aplicada. Contudo, se aplicarmos uma força muito grande a mola poderá apresentar deformações permanente, deixado de ser linear ([Maya e Leonardi, 2014](#))

Um exemplo de representação de sistemas linear e não linear pode ser observado nas Eq. 1.3 e 1.4, respectivamente. Na Eq. 1.3 temos a Lei de Hook e na Eq. 1.4 podemos verificar como a é o comportamento do fluxo de líquidos que passam por uma válvula (princípio de

$$F_e = kx \quad (\text{Eq. 1.3})$$

Sendo:  $F_e$  – força elástica,  $k$  – constante elástica,  $x$  – deformação elástica

$$F = C_v \sqrt{\Delta P} \quad (\text{Eq. 1.4})$$

Sendo:  $F$  – vazão volumétrica,  $C_v$  – constante da válvula,  $\Delta P$  – variação de pressão no sistema

### 1.2.3 Sistemas contínuo × discreto

Um sistema *contínuo* é aquele onde a relação entre a variável e o sinal de interesse é descrita de forma contínua no tempo. As equações diferenciais são utilizadas com frequência para descrever esta relação. Na prática os sinais de interesse são comumente obtidos na forma discreta no tempo. Assim, um sistema onde as relações da variável e o sinal de interesse são expressas diretamente em instantes de amostragem é denominado sistema discreto ou amostrado (Ogunnaike, 1996; Luyben, 1996; Aguire, 2007). As Eq. 1.5 e 1.6 representam a relação da concentração com o tempo em sistema químico na forma contínua e na forma discreta, respectivamente.

$$\frac{dc}{dt} = kc(t) \quad (\text{Eq. 1.5})$$

$$\frac{\Delta c}{\Delta t} = \frac{c(t+\Delta t) - c(t)}{\Delta t} = kc(t) \quad (\text{Eq. 1.6})$$

Sendo:  $c$  – concentração,  $k$  – constante da taxa de reação,  $\Delta c$  – variação de concentração,  $\Delta t$  – variação de tempo (taxa de amostragem)

### 1.2.4 Sistemas estáticos × dinâmicos

O sistema *estático* também conhecidos como *estacionário* ou *invariante no tempo* são sistemas cujo valor da variável permanece constante no tempo e são expressos por equações algébricas. Esses sistemas respondem de forma instantânea a uma perturbação e a resposta não depende das condições anteriores. Sistema *dinâmico* ou *transiente* tem como característica a variação das variáveis do processo o tempo. São expressos por equações diferenciais e resposta depende das condições anteriores (Aguire, 2007). Um sistema de armazenamento de líquido (tanque) pode ser representado tanto na forma transiente (Eq. 1.7) quanto na forma estacionária (Eq. 1.8).

$$A \frac{dh}{dt} = F_0 - C_v x \sqrt{h(t)} \quad (\text{Eq. 1.7})$$

$$F_0 - C_v x \sqrt{h} = 0 \quad (\text{Eq. 1.8})$$

Sendo:  $h$  – nível do tanque,  $A$  – área da seção transversal do tanque,  $F_0$  – vazão volumétrica na entrada,  $C_v$  – constante da válvula,  $x$  – abertura da válvula

### 1.2.5 Sistemas determinísticos × estocástico

Alguns modelos não consideram a natureza aleatório dos fenômenos e não envolvem variáveis aleatórias em sua construção. O modelo *determinístico* é aquele em que as variáveis e parâmetros não são aleatórios. Este tipo de modelo relaciona de forma exata as variáveis medidas sem levar em consideração as incertezas do sistema. Em contrapartida, o modelo estocástico lida com diversas fontes de incertezas e probabilidade (Aguire, 2007; Verna, 2015). Assim, podemos dizer que o determinístico é explicável e o estocástico inexplicável (Ogunnaike, 1994).

## 1.3 Aplicações de modelos matemáticos na Engenharia Química

A aplicação dos modelos matemáticos está em todas as fases da Engenharia Química, indo da pesquisa e desenvolvimento à operação da planta. Os modelos matemáticos são de grande importância para a compreensão do processo e visualização da relação cause-efeito e estudo da dinâmica do sistema (Luyben, 1994; Bequette, 1998).

Na **pesquisa e desenvolvimento**, está presente na determinação de mecanismos

cinéticos e parâmetros a partir de dados de relação em laboratório e em planta piloto; exploração de diferentes condições de operação para estudos de otimização; auxílio nos cálculos de *scale-up*; identificação de processos. Alguns exemplos dessas aplicações podem ser observados nos trabalhos realizados por [Pawlowsky e Howell \(1973\)](#), [Moreau et al. \(2002\)](#) e [Álvarez et al. \(2016\)](#).

Em **projetos**, permite a exploração do dimensionamento e arranjo de equipamentos de processos para desempenho dinâmico; estudo de várias partes do processo; cálculo e estratégias alternativas de controle; simulação de partida, parada e procedimento de emergência, identificação de sistemas. Alguns estudos realizados por [Mota et al. \(2015\)](#), [Fonseca et al. \(2016\)](#), [Dantas et al. \(2017\)](#), [Franco et al. \(2017\)](#), [Aguiar et al. \(2018\)](#), [Fonseca et al. \(2018a\)](#) e [Fonseca et al. \(2018b\)](#), aplicam a modelagem para esses fins.

Em **operação de plantas**, podemos realizar reconciliação de problemas de controle e processamento; partidas da planta e treinamento de operadores; estudos de efeitos de projeto de expansão; otimização da operação. Como por exemplo as aplicações realizadas por [Barg et al. \(2000\)](#), [Maia et al. \(2018\)](#), [Silva et al. \(2019\)](#) e [Carpio et al. \(2021\)](#).

Como observado, a aplicação de modelagem e simulação na Engenharia Química é muito ampla e de importância fundamental nos desenvolvimentos de novos processos ou mesmo otimização e controle de processos já existente.



# Capítulo 2

## Ferramentas para resolução e análise de modelos matemáticos

**M**étodos numéricos são ferramentas fundamentais na resolução de problemas encontrados na prática da engenharia. Neste capítulo será apresentado uma revisão dos principais métodos numéricos utilizados na resolução de problemas envolvendo equações algébricas lineares e não lineares, sistema de equações e solução de EDOs. Outro ponto importante é a análise da rigidez do sistema a ser resolvido, pois o método a ser utilizado depende da rigidez deste sistema.

O processo de resolução de um problema da engenharia terá influência das ferramentas disponíveis (métodos matemáticos). Dentre os métodos matemáticos estão os métodos numéricos que são técnicas pelas quais os problemas matemáticos são formulados de modo que possam ser resolvidos com operações lógicas e aritméticas. A solução de um problema utilizando métodos numéricos será um número aproximado para esta solução ([Gilat e Subramaniam, 2008](#); [Chapra, 2013](#)).

Os métodos numéricos são ferramentas extremamente poderosas na resolução de problemas de engenharia. São capazes de lidar com grandes números e equações lineares, não lineares e geometrias complicadas comumente encontradas na prática da engenharia e que não são facilmente resolvidas de forma analítica. Os métodos numéricos fornecem um vínculo para o profissional da engenharia reforçar seu conhecimento da matemática e utilizar pacotes comerciais disponíveis, porém o uso inteligente desses pacotes (programas) depende do conhecimento da teoria básica dos métodos ([Chapra, 2013](#)).

### 2.1 Determinação de Raízes

#### 2.1.1 Método de Newton

O método de Newton consiste em determinar uma função  $f(x)$  tal que  $f'(x^*)=0$ , onde  $x^*$  é a raiz da equação ([Ruggierro e Lopes, 1996](#); [Chapra, 2013](#); [Arenales e Darezzo, 2015](#)). Assim, temos o método descrito pela Eq. 2.1.

$$x^{k+1} = x^k - \frac{f(x^k)}{f'(x^k)}, k = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{Eq. 2.1})$$

Sendo:  $x^{k+1}$  – variável calculada no instante  $k+1$ ,  $f(x^k)$  – função que se deseja encontrar as raízes,  $f'(x^k)$  – derivada primeira da função  $f(x^k)$ .

Graficamente temos a linearização da função em torno da estimativa inicial encontrando o próximo ponto que satisfaça a função linearizada, Figura 2.1. A convergência do método de Newton é quadrática, e é representada pela Eq. 2.2.

$$|x^{k+1} - x^*| \leq |x^k - x^*|^2 \quad (\text{Eq. 2.2})$$

Sendo:  $x^{k+1}$  – variável calculada no instante  $k+1$ ,  $x^k$  – variável calculada no instante  $k$ ,  $x^*$  - raiz da função (solução)

Para verificar a convergência deve-se realizar a expansão de  $f(x^k)$  em torno da solução  $x^*$ , obtendo a Eq. 2.3.

$$f(x^k) \approx f(x^*) + f'(x^*)(x^k - x^*) + \frac{f''(x^*)}{2}(x^k - x^*)^2 \quad (\text{Eq. 2.3})$$

Em seguida substitui-se a Eq. 2.3 na Eq. 2.1 considerando que  $x^*$  seja próximo da solução de modo que se pode fazer a aproximação  $f'(x^k) \approx f'(x^*)$ . Aplicando o módulo na equação resultante obtém-se

$$|x^{k+1} - x^*| \approx \left| \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)} \right| |x^k - x^*|^2 \quad (\text{Eq. 2.4})$$

Sendo:  $x^{k+1}$  - variável calculada no instante  $k+1$ ,  $x^k$  - variável calculada no instante  $k$ ,  $x^*$  - raiz da função (solução),  $f'(x^k)$  - derivada primeira da função  $f(x^k)$ ,  $f''(x^k)$  - derivada segunda da função  $f(x^k)$

Onde  $\left| \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)} \right| \leq p < 1$  ( $p$  depende do método)

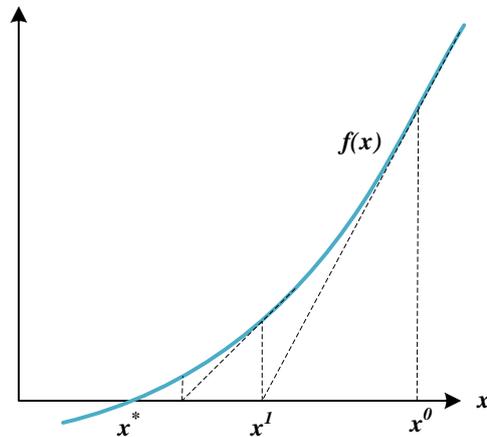


Figura 2. 1 – Representação gráfica do Método de Newton

### EXEMPLO 2.1 – APLICAÇÃO DO MÉTODO DE NEWTON

Em um reator CSTR a variação da concentração do reagente A pode ser descrita como:  $V \frac{dC_A}{dt} = FC_{0A} - FC_A - kC_A^2V$ . Utilizando o Método de Newton, determine o valor da concentração do componente A quando o sistema atingir o estado estacionário (critério de parada  $\epsilon = 10^{-3}$ ). Dados:  $F = 2$  (L s<sup>-1</sup>);  $C_{0A} = 0,7$  (mol L<sup>-1</sup>);  $k = 1,25$  (L mol<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>);  $V = 16,5$  (L)

Quando o sistema atingir o estado estacionário implicará que  $\frac{dC_A}{dt} = 0$ . Assim:

$$0 = FC_{0A} - FC_A - kC_A^2V = f(C_A)$$

O Método de Newton será aplicado diretamente da seguinte forma:

$$C_{A(k+1)} = C_{A(k)} - \frac{f(C_{A(k)})}{f'(C_{A(k)})}$$

Substituindo os valores fornecidos no problema na função  $f(C_A)$  temos:

$$f(C_A) = 1,4 - 2C_A - 20,625C_A^2 \text{ e } f'(C_A) = -2 - 41,25C_A$$

Com aproximação inicial  $C_{A(0)}=0,7$  (mol L<sup>-1</sup>), para  $k=0$ :

$$C_{A(1)} = C_{A(0)} - \frac{1,4 - 2C_{A(0)} - 20,625C_{A(0)}^2}{-2 - 41,25C_{A(0)}} = 0,373$$

Fazendo o mesmo procedimento para as próximas iterações  $k=1,2,\dots$ , obtemos os resultados apresentados na Tabela 2.1.

Tabela 2. 1 – Resultados obtidos pelo método de Newton

$k$	$C_{A(k)}$	$f(C_{A(k)})$	$f'(C_{A(k)})$	$C_{A(k+1)}$	$\epsilon$
0	0,700	-10,106	-30,875	0,373	0,327
1	0,373	-2,210	-17,373	0,245	0,127
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
3	0,218	-0,016	-10,990	0,217	0,001

### 2.1.2 Método das Secantes ou Newton-Secante

Uma grande desvantagem apresentada pelo método de Newton é a necessidade da obtenção da derivada da função,  $f'(x)$ , que se deseja determinar a raiz. Essa desvantagem pode ser contornada aproximando a derivada da função pela diferença à esquerda (Eq. 2.5) (Ruggiero e Lopes, 1996; Gilat e Subramaniam, 2008; Chapra, 2013; Arenales e Darezzo, 2015).

$$f'(x^k) = \left. \frac{df}{dx} \right|_{x^k} \approx \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x^k) - f(x^{k-1})}{x^k - x^{k-1}} \quad (\text{Eq. 2.5})$$

Substituindo a Eq. 2.5 na Eq. 2.1 (Método de Newton) obtemos o método das Secantes representada pela Eq. 2.6.

$$x^{k+1} = x^k - f(x^k) \frac{x^k - x^{k-1}}{f(x^k) - f(x^{k-1})}, k = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{Eq. 2.6})$$

Sendo:  $x^{k+1}$  - variável calculada no instante  $k+1$ ,  $x^k$  - variável calculada no instante  $k$ ,  $x^{k-1}$  - variável calculada no instante  $k-1$ ,  $f(x^k)$  - função calculada no instante  $k$ ,  $f(x^{k-1})$  - função calculada no instante  $k-1$

Como a equação da reta descrita pelo processo iterativo das Secantes é definida pela passagem por dois pontos (Figura 2.2), para a inicialização das iterações são necessários dois pontos como aproximações ( $x^0$  e  $x^1$ ).

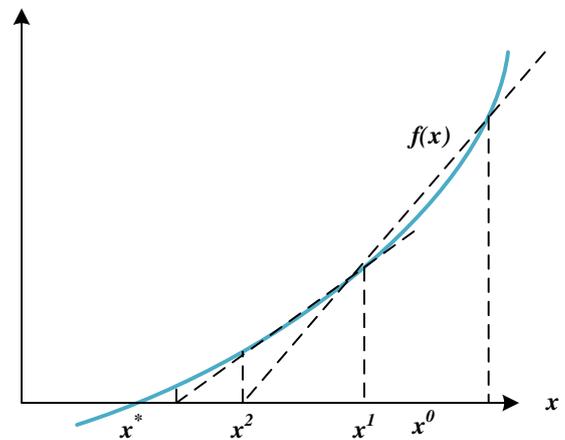


Figura 2.2 – Representação gráfica do método das Secantes

Sendo o método das Secantes uma modificação do método de Newton, as condições de convergência são parecidas, acrescentando que o método pode divergir se  $f(x^k) \approx f(x^{k-1})$ . A convergência é mais lenta que a quadrática do método de Newton e mais rápida que a linear do método das Substituições Sucessivas (aqui não apresentado) e é representada pela Eq. 2.7, onde  $0 < p < 1$ .

$$|x^{k+1} - x^*| \leq p|x^k - x^*|^{1,618} \quad (\text{Eq. 2.7})$$

#### EXEMPLO 2.2 – APLICAÇÃO DO MÉTODO DE NEWTON-SECANTE

Utilizando o Método de Newton-Secante, determine o valor da concentração do componente A, do exemplo 2.1, quando o sistema atingir o estado estacionário (critério de parada  $\epsilon = 10^{-3}$ ).

Aplicando o Método de Newton-Secante, tem-se:

$$C_{A(k+1)} = C_{A(k)} - f(C_{A(k)}) \frac{C_{A(k)} - C_{A(k-1)}}{f(C_{A(k)}) - f(C_{A(k-1)})}$$

Com aproximação inicial  $C_{A(0)} = 0,7$  (mol L<sup>-1</sup>) e  $C_{A(1)} = 0,6$  (mol L<sup>-1</sup>) para  $k=2$ :

$$C_{A(2)} = C_{A(1)} - f(C_{A(1)}) \frac{C_{A(1)} - C_{A(0)}}{f(C_{A(1)}) - f(C_{A(0)})} = 0,349$$

Fazendo o mesmo procedimento para as próximas iterações  $k=3,4,\dots$ , obtemos os resultados apresentados na Tabela 2.2.

**Tabela 2. 2 – Resultados obtidos pelo método de Newton-Secante**

$k$	$C_{A(k)}$	$f(C_{A(k)})$	$C_{A(k+1)}$	$\epsilon$
0	0,700	-10,106	–	–
1	0.600	-7.225	0.349	0.251
2	0.349	-1.814	0.265	0.084
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
5	0.217	-0.008	0.217	0.001

### 2.1.3 Método da Posição Falsa

O método da Posição Falsa também conhecido como Regula Falsi é um método onde se obtém a solução de uma função, na forma  $f(x)=0$ , sabendo-se que a solução está contida dentro de um dado intervalo  $[a,b]$  e que neste intervalo  $f(x)$  é contínua (Ruggiero e Lopes, 1996; Gilat e Subramanian, 2008).

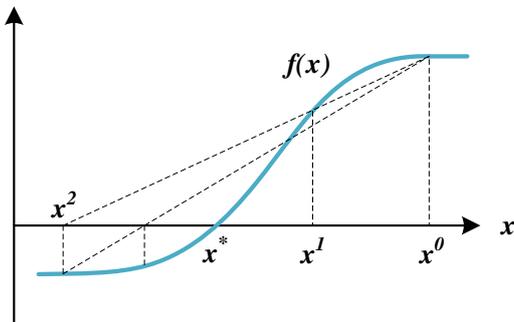
O método da Posição Falsa pode ser representado graficamente pela Figura 2.3 e é uma modificação do método Newton-Secante. Essa modificação consiste em aproximar a derivada da função  $f(x)$  pela equação das diferenças em relação a um ponto fixo (Eq. 2.8).

$$f'(x^k) = \left. \frac{df}{dx} \right|_{x^k} \approx \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x^k) - f(x^0)}{x^k - x^0} \quad (\text{Eq. 2.8})$$

Substituindo a Eq. 2.8 no método de Newton (Eq. 2.1), obtemos o processo iterativo representado pela Eq. 2.9.

$$x^{k+1} = x^k - f(x^k) \frac{x^k - x^0}{f(x^k) - f(x^0)}, \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{Eq. 2.9})$$

Sendo:  $x^{k+1}$  – variável calculada no instante  $k+1$ ,  $x^k$  – variável calculada no instante  $k$ ,  $x^0$  – aproximação inicial (valor fíco),  $f(x^k)$  – função calculada no instante  $k$ .



**Figura 2. 3 – Representação gráfica do método da Posição Falsa**

#### **EXEMPLO 2.3 – APLICAÇÃO DO MÉTODO DA POSIÇÃO FALSA**

Utilizando o Método da posição falsa, determine o valor da concentração do componente A, do exemplo 2.1, quando o sistema atingir o estado estacionário (critério de parada  $\epsilon = 10^{-3}$ ).

Aplicando o método da Posição Falsa obtém-se:

$$C_{A(k+1)} = C_{A(k)} - f(C_{A(k)}) \frac{C_{A(k)} - C_{A(0)}}{f(C_{A(k)}) - f(C_{A(0)})}$$

Com aproximação inicial  $C_{A(0)}=0,7$  (mol L<sup>-1</sup>) e  $C_{A(1)} = 0,6$  (mol L<sup>-1</sup>) para  $k=2$ :

$$C_{A(2)} = C_{A(1)} - f(C_{A(1)}) \frac{C_{A(1)} - C_{A(0)}}{f(C_{A(1)}) - f(C_{A(0)})} = 0,349$$

Fazendo o mesmo procedimento para as próximas iterações  $k=3,4,\dots$ , obtemos os resultados apresentados na Tabela 2.3.

Tabela 2.3 – Resultados obtidos para o método da Posição Falsa

$k$	$C_{A(k)}$	$f(C_{A(0)})$	$f(C_{A(k)})$	$C_{A(k+1)}$	$\epsilon$
0	0.700	-10.106	–	–	–
1	0.600	-10.106	-7.225	0.349	0.251
2	0.349	-10.106	-1.814	0.273	0.077
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
7	0.219	-10.106	-0.029	0.218	0.001

### 2.1.3 Método da Bissecção

É um método no qual a solução de uma função na forma  $f(x)=0$  é obtida dentro de um intervalo  $[a,b]$  e sendo  $f(x)$  contínua neste intervalo. O método da Bissecção tem como objetivo reduzir a amplitude do intervalo onde se encontra a raiz da função  $x^*$  de forma que a cada iteração o intervalo encontrado é metade do intervalo anterior, Figura 2.4. O novo intervalo torna-se o intervalo para a próxima iteração sendo o processo repetido até que a o critério de parada seja satisfeito (Ruggiero e Lopes, 1996; Gilat e Subramaniam, 2008; Chapra, 2013; Arenales e Darezzo, 2015).

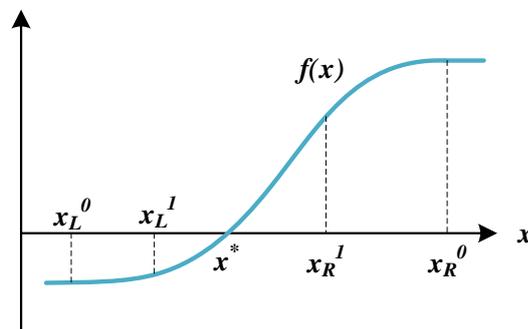


Figura 2.4 – Representação gráfica do método da Bissecção

O método da Bissecção é uma forma simples de calcular  $x^{k+1}$  por meio de uma simples média aritmética dos pontos  $x_L$  e  $x_R$  (Eq. 2.10)

$$x^{k+1} = \frac{x_R^k + x_L^k}{2}, k = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{Eq. 2.10})$$

Sendo:  $x^{k+1}$  – variável calculada no instante  $k+1$ ,  $x_L^k$  – valor a esquerda do intervalo de aproximação instante  $k$ ,  $x_R^k$  – valor a direita do intervalo de aproximação instante  $k$ .

Onde:

$$x_R^k = \begin{cases} \text{se: } \text{sign}(f(x^k)) = \text{sign}(f(x_R^{k-1})) \rightarrow x^k \\ \text{senão} \rightarrow x_R^{k-1} \end{cases}$$

$$x_L^k = \begin{cases} \text{se: } \text{sign}(f(x^k)) = \text{sign}(f(x_L^{k-1})) \rightarrow x^k \\ \text{senão} \rightarrow x_L^{k-1} \end{cases}$$

Os pontos iniciais,  $x_R^0$  e  $x_L^0$  devem satisfazer a condição  $\text{sign}(f(x_L^0)) = -\text{sign}(f(x_R^0))$ . A função  $\text{sign}(f(x))$  fornece o sinal da função  $f(x)$ .

## 2.2 Sistemas lineares de equações

As leis de conservação de massa, energia e movimento fornecem muitas das equações fundamentais da Engenharia. Muitas vezes o problema a ser resolvido envolvem diversas variáveis dependentes dando origem a um sistema de equações algébricas. Resolver este problema quando temos de duas a três variáveis é simples e pode ser feita de forma manual por meio de métodos matemáticos como por exemplo a Regra de Cramer, porém se este sistema apresentar mais de três variáveis dependentes resolvê-lo desta forma se torna muito complexa. Desta forma, recorreremos aos métodos numéricos para solução de sistemas lineares

de equações algébricas. Esses métodos podem ser divididos em dois grupos: métodos diretos e métodos indiretos (Ruggiero e Lopes, 1996; Gilat e Subramaniam, 2008; Chapra, 2013; Arenales e Darezzo, 2015).

A resolução de um sistema linear consiste em calcular os valores de  $x_i$  ( $i=1, \dots, n$ ) que satisfaçam as  $m$  equações existentes simultaneamente. O sistema pode ser representado, em notação matricial, pela Eq. 2.11 (Ruggiero e Lopes, 1996).

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \tag{Eq. 2.11}$$

Sendo:  $\mathbf{A}$  – matriz dos coeficientes,  $\mathbf{x}$  – vetor das variáveis,  $\mathbf{b}$  – vetor das constantes

$$\text{Onde: } \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}, \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}.$$

Segundo Ruggiero e Lopes (1996) e Gilat e Subramaniam (2008) os métodos diretos são aqueles que fornecem a solução exata do sistema linear (caso não existisse erros de arredondamento), após um número finito de operações; e os métodos iterativos geram uma sequência de vetores  $\{x^k\}$ , a partir de uma aproximação inicial  $x^0$ . Em termos de uso, Arenales e Darezzo (2015) observam que os métodos diretos devem ser utilizados quando a matriz dos coeficientes do sistema for densa (apresenta poucos elementos não nulos) e o sistema for de pequeno porte; e os métodos iterativos devem ser utilizados quando o sistema for de grande porte e a matriz dos coeficientes for esparsa (apresenta muitos elementos nulos).

### 2.2.1 Método da eliminação de Gauss (direto)

O método da eliminação de Gauss tem o objetivo de reduzir a matriz  $\mathbf{A}$  para uma estrutura triangular superior ou inferior por meio de triangulação (Eq. 2.12) ou diagonal a partir do método de Gauss-Jordan (Eq. 2.13) (Ruggiero e Lopes, 1996).

$$\begin{matrix} k = 1, \dots, n-1 \\ j = k+1, \dots, n+1 \\ i = k+1, \dots, n \end{matrix} \left\{ \begin{matrix} a_{kj} \leftarrow \frac{a_{kj}}{a_{kk}} \\ a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{ik}a_{kj} \end{matrix} \right. \tag{Eq. 2.12}$$

$$\begin{matrix} k = 1, \dots, n \\ j = k+1, \dots, n+1 \\ i = k+1, \dots, n (\neq k) \end{matrix} \left\{ \begin{matrix} a_{kj} \leftarrow \frac{a_{kj}}{a_{kk}} \\ a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{ik}a_{kj} \end{matrix} \right. \tag{Eq. 2.13}$$

Sendo:  $a_{ij}$  – coeficientes da matriz aumentada  $\bar{\mathbf{A}} = [\mathbf{A} \ \mathbf{b}]$

A solução utilizando o método de Gauss-Jordan é encontrada na  $(n+1)$ -ésima coluna da matriz aumentada depois das operações de eliminação gaussiana. Já para a triangulação há a necessidade de realização de operações de substituição, Eq. 2.14, quando a matriz for triangular inferior ou retro substituição, Eq. 2.15, quando a matriz for triangular superior.

$$x_1 = \frac{a_{1,n+1}}{a_{1,1}}, x_i = \frac{1}{a_{i,i}} (a_{i,n+1} - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}x_j) \text{ com } i = 2, \dots, n \tag{Eq. 2.14}$$

$$x_n = \frac{a_{n,n+1}}{a_{n,n}}, x_i = \frac{1}{a_{i,i}} (a_{i,n+1} - \sum_{j=i+1}^n a_{i,j}x_j) \text{ com } i = n-1, \dots, 1 \tag{Eq. 2.15}$$

O uso de técnicas de pivotamento\* é necessário para evitar divisões por zero e garantir a estabilidade numérica do algoritmo. As técnicas de pivotamento parcial† (Eq. 2.16) e pivotamento total‡ (Eq. 2.17) podem ser representadas por:

$$\mathbf{PAx} = \mathbf{Pb} \tag{Eq. 2.16}$$

$$\mathbf{PAQQ}^{-1}\mathbf{x} = \mathbf{Pb} \tag{Eq. 2.17}$$

Sendo:  $\mathbf{P}$  e  $\mathbf{Q}$  – matrizes de permutação

\* Operação de trocas de linhas e/ou colunas para se obter uma matriz tendo na diagonal elementos com maior valor absoluto;

† Efetuado apenas troca de linhas

‡ Efetuados trocas de linhas e colunas

## 2.2.2 Método da Fatoração LU (direto)

O processo de fatoração (ou decomposição) consiste em decompor a matriz **A** dos coeficientes em um produto de dois ou mais fatores resolvendo em seguida uma sequência de sistemas lineares que resultará na solução do sistema original. A matriz **A** é decomposta em uma matriz triangular inferior com diagonal unitária, **L**, e uma matriz triangular superior **U** (Eq. 2.18). No método de decomposição LU, as operações com a matriz **A** são feitas sem que o vetor *b* seja utilizado ou alterado, sendo isso a vantagem do método, e a redução das matrizes é realizada pelo método de Doolittle (Eq. 2.19) ([Ruggierro e Lopes, 1996](#); [Gilat e Subramaniam, 2008](#); [Chapra, 2013](#)).

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU} \quad (\text{Eq. 2.18})$$

$$\begin{cases} k = 1, \dots, n-1 \\ j = k+1, \dots, n \\ i = k+1, \dots, n \end{cases} \begin{cases} a_{kj} \leftarrow \frac{a_{kj}}{a_{kk}} \\ a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{ik}a_{kj} \end{cases} \quad (\text{Eq. 2.19})$$

Sendo: **A** – matriz dos coeficientes, **L** – matriz triangular inferior, **U** – matriz triangular superior,  $a_{ij}$  – coeficientes da matriz aumentada  $\bar{A} = [A \ b]$

Substituindo a decomposição LU (Eq. 2.18) na equação que representa o sistema na forma matricial (Eq. 2.11) e definindo o produto **Ux** como representado na Eq. 2.20 obtemos a Eq. 2.21 que representa a solução do sistema original.

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{y} \quad (\text{Eq. 2.20})$$

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b} \quad (\text{Eq. 2.21})$$

A solução *x* é obtida resolvendo a Eq. 2.21 para encontrar *y* e em seguida a solução é substituída na Eq. 2.20.

## 2.2.3 Método de Gauss-Jacobi (iterativo)

O método de Gauss-Jacobi transforma o sistema linear **Ax=b** em  $\mathbf{x}=\mathbf{Cx}+\mathbf{g}$  por meio relação recursiva apresentada na Eq. 2.22 ([Ruggierro e Lopes, 1996](#)).

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{Cx}^k + \mathbf{g}, k = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{Eq. 2.22})$$

$$\text{Onde } \mathbf{C}=\mathbf{D}^{-1}\mathbf{B}, \mathbf{g}=\mathbf{D}^{-1}\mathbf{b} \text{ e } \mathbf{B}=\mathbf{D}-\mathbf{A}.$$

Sendo:  $a_{ij}$  – Sendo **D** a diagonal da matriz **A**.

Por ser um método iterativo necessita de um valor inicial para cada uma das variáveis dependentes do sistema  $\{x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0\}$ . A estimativa posterior é realizada utilizando o valor da estimativa inicial, ou seja, a *(k+1)-ésima* estimativa da solução é calculada a partir da *k-ésima* estimativa conforme apresentado na Eq. 2.23 e a iteração continuará até que as diferenças entre os valores obtidos nas iterações sucessivas sejam pequenas, ou seja, atinge o critério de parada  $\epsilon$  (Eq. 2.24) ([Gilat e Subramaniam, 2008](#)).

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left[ b_i - \left( \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^k \right) \right], i = 1, 2, \dots, n \quad (\text{Eq. 2.23})$$

$$\left| \frac{x_i^{k+1} - x_i^k}{x_i^k} \right| < \epsilon \quad (\text{Eq. 2.24})$$

Sendo:  $\epsilon$  - critério de parada

## 2.2.4 Método de Gauss-Seidel (iterativo)

O método de Gauss-Seidel é o método iterativo mais utilizado na resolução de sistemas de equações algébricas. Da mesma forma que o método de Gauss-Jacobi, o sistema linear (Eq. 2.11) é escrito equivalentemente a Eq. 2.22 por separação da diagonal e são assumidos valores iniciais para as variáveis dependentes  $\{x_2^0, x_3^0, \dots, x_n^0\}$  (exceto  $x_1$ ). A Eq. 2.25 representa as estimativas posteriores e a interrupção das iterações se dará da mesma forma que o método de Gauss-Jacobi (Eq. 2.24) ([Ruggierro e Lopes, 1996](#); [Gilat e Subramaniam, 2008](#); [Chapra, 2013](#)).

$$\begin{aligned}
 x_1^{k+1} &= \frac{1}{a_{11}} \left[ b_1 - \sum_{j=2}^{j=n} a_{1j} x_j^k \right] \\
 x_i^{k+1} &= \frac{1}{a_{ii}} \left[ b_i - \left( \sum_{j=1}^{j=i-1} a_{ij} x_j^{k+1} + \sum_{j=i+1}^{j=n} a_{ij} x_j^k \right) \right], i = 2, 3, \dots, n-1 \quad (\text{Eq. 2.25}) \\
 x_n^{k+1} &= \frac{1}{a_{nn}} \left[ b_n - \sum_{j=1}^{j=n-1} a_{nj} x_j^{k+1} \right]
 \end{aligned}$$

## 2.3 Sistemas não-lineares de equações

### 2.3.1 Método de Newton-Raphson

O método de Newton-Raphson é o método mais utilizado para a resolução de sistema de equações não-lineares. Este método é uma extensão do método utilizado para resolver uma única equação (seção 2.1.1) sendo a derivada da função  $f(x)$  substituída pela matriz Jacobiana,  $J(x)$ . A matriz  $J(x)$  é representada pelas derivadas parciais de  $f(x)$  em relação a  $x$ . O método de Newton-Raphson resultará em um sistema linear que é representado pela Eq. 2.26 e pode ser resolvido por métodos diretos ou iterativos ([Ruggiero e Lopes, 1996](#); [Gilat e Subramaniam, 2008](#)).

$$x^{k+1} = x^k - [J(x^k)]^{-1} f(x^k), k = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{Eq. 2.26})$$

$$\text{Onde } J_{ij}(x^k) = \frac{\partial f_i(x^k)}{\partial x_j}$$

Sendo:  $J(x^k)$  – matriz Jacobiana calculada no instante  $k$

### 2.3.2 Método de Newton-Raphson modificado

Uma modificação realizada no método de Newton-Raphson é manter a matriz  $J(x)$  fixa. Desta forma, a matriz Jacobiana é avaliada apenas uma vez, e para todo  $k$ , o sistema terá a mesma matriz de coeficiente  $J(x^0)$  como pode ser observado na Eq. 2.27 ([Ruggiero e Lopes, 1996](#)).

$$x^{k+1} = x^k - \alpha [J(x^0)]^{-1} f(x^k), k = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{Eq. 2.27})$$

Sendo:  $J(x^0)$  – matriz Jacobiana calculada em um ponto fixo

O parâmetro  $\alpha$  é usado para compensar o fato da matriz Jacobiana ser mantida fixa e terá seu valor compreendido entre  $0 < \alpha < 1$ .

## 2.4 Equações diferenciais ordinárias

Ao contrário do estudo de sistema em estado estacionário onde temos equações algébricas a serem resolvidas, quando desenvolvemos modelos dinâmicos de sistemas temos como resultado ao combinarmos as leis de continuidade de massa, energia e movimento como equações diferenciais. Quando a equação diferencial resultante possui apenas uma variável dependente temos uma EDO – equação diferencial ordinária. Se a EDO for de primeira ordem teremos um problema de valor inicial (PVI) para ser resolvido e caso a EDO for de segunda ordem ou de ordem superior temos um problema de valor de contorno (PVC). Dentre os tipos de métodos existente para a resolução de EDO's temos os métodos explícitos e os métodos implícitos ([Ruggiero e Lopes, 1996](#); [Gilat e Subramaniam, 2008](#); [Chapra, 2013](#)).

Nos métodos explícitos o valor da variável dependente,  $y$ , em um instante  $k$  é calculado é calculado utilizando seu valor no instante anterior conforme observado na Eq. 2.28.

$$y_{k+1} = f(x_k, x_{k+1}, y_k) \quad (\text{Eq. 2.28})$$

Sendo:  $y_{k+1}$  – variável dependente calculada no instante  $k+1$ ,  $y_k$  – variável dependente no instante  $k$ ,  $x_k$  – variável independente no instante  $k$ ,  $x_{k+1}$  – variável independente no instante  $k+1$

Já nos métodos implícitos, o valor da variável dependente em um instante  $k$  é calculado utilizando seu valor no mesmo instante como apresentado na Eq. 2.29.

$$y_{k+1} = f(x_k, x_{k+1}, y_{k+1}) \quad (\text{Eq. 2.29})$$

Sendo:  $y_{k+1}$  – variável dependente calculada no instante  $k+1$ ,  $x_k$  – variável independente no instante  $k$ ,  $x_{k+1}$  – variável independente no instante  $k+1$

### 2.4.1 Método de Euler

O método de Euler é o mais simples dos métodos de solução de uma EDO de primeira ordem é baseado em série de Taylor e pode ser formulado de forma explícita ou implícita. O método consiste em calcular  $y'(x_0)=f(x_0,y_0)$  conhecendo  $x_0$  e  $y_0=y(x_0)$  assim, a reta que passa por  $(x_0,y_0)$  com coeficiente angular  $y'(x_0)$  é conhecida. Uma hipótese adota no método de Euler é que se tivermos uma distância  $h$  pequena na vizinhança de  $(x_k,y_k)$ , a função  $y(x)$  tem uma inclinação constante e igual a inclinação da reta que passa por  $(x_k,y_k)$ . A partir dessa hipótese podemos calcular o próximo ponto da solução  $(x_{k+1},y_{k+1})$  utilizando a Eq. 2.30 e a Eq. 2.31. (Ruggiero e Lopes, 1996; Gilat e Subramaniam, 2008; Arenales e Darezzo, 2015).

$$x_{k+1} = x_k + h \tag{Eq. 2.30}$$

$$y_{k+1} = y_k + f(x_k, y_k)h \tag{Eq. 2.31}$$

Sendo:  $y_{k+1}$  - variável dependente calculada no instante  $k+1$ ,  $x_{k+1}$  - variável independente no instante  $k+1$ ,  $x_k$  - variável independente no instante  $k$ ,  $y_k$  - variável dependente no instante  $k$ ,  $h$  - passo de integração.

#### EXEMPLO 2.4 – APLICAÇÃO DO MÉTODO DE EULER

Considere o reator descrito no exemplo 2.1. Utilizando o Método de Euler resolva a EDO que representa o modelo dinâmico do sistema com valor inicial  $C_{0A}$  para 8 s com passo de integração  $h=0,5$ .

A variação do componente A, já substituído os valores dos parâmetros é descrita por:

$$\frac{dC_A}{dt} = 0,085 - 0,121C_{A(t)} - 1,25C_{A(t)}^2$$

Com valor inicial  $C_{A(0)}=0,7$  (mol L<sup>-1</sup>) aplicando o método de Euler em  $k=1$ , tem-se:

$$C_{A(k)} = C_{A(k-1)} + hf(t_{(k-1)}, C_{A(k-1)})$$

$$C_{A(1)} = C_{A(0)} + h(0,085 - 0,121C_{A(0)} - 1,25C_{A(0)}^2) = 0,394$$

Fazendo o mesmo procedimento para as próximas iterações  $k=2,3,\dots$ , obtemos os resultados apresentados na Tabela 2.4.

Tabela 2. 4 - Resultados obtidos para o método de Euler

k	t(k)	C <sub>A(k)</sub>	f(t(k), C <sub>A(k)</sub> )	C <sub>A(k+1)</sub>
0	0.0	0.700	-0.612	0.394
1	0.5	0.394	-0.157	0.316
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
16	8.0	0.217	0.000	-

Os resultados obtidos na resolução pelo método de Euler dependem do passo de integração  $h$ . Na Figura 2.5 podemos observar essa influência na resposta.

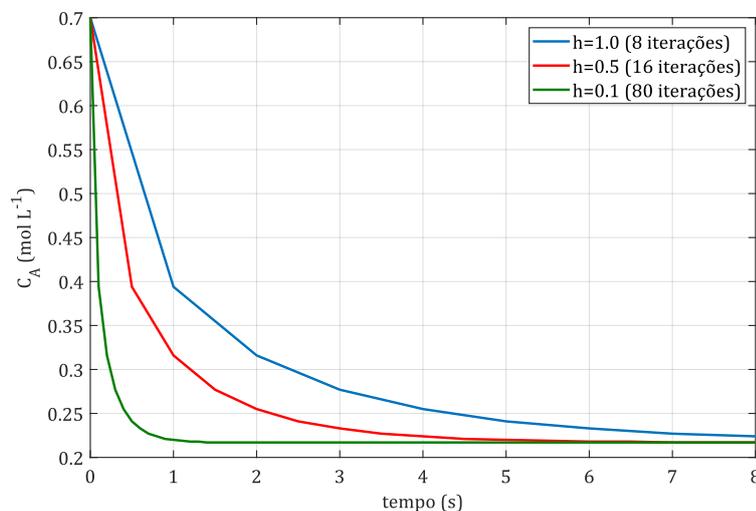


Figura 2. 5 – Influência do passo de integração na resposta do método de Euler

## 2.4.2 Método de Runge-Kutta de 4ª Ordem

Os métodos de Runge-Kutta (RK) são os métodos numéricos mais utilizados para calcular a solução aproximada de um PVI pelo fato de serem simples e apresentarem bom desempenho. Os métodos de RK alcançam a acurácia existente nos métodos por série de Taylor eliminando seu maior defeito que é o cálculo de derivadas de ordem superior. De forma geral esses métodos são escritos conforme a Eq. 2.32 ([Ruggiero e Lopes, 1996](#); [Gilat e Subramaniam, 2008](#); [Chapra, 2013](#); [Arenales e Darezzo, 2015](#)).

$$y_{i+1} = y_i + \phi h \quad (\text{Eq. 2.32})$$

Sendo:  $y_{i+1}$  – variável dependente calculada no instante  $i+1$ ,  $y_i$  – variável dependente no instante  $i$ ,  $\phi$  - inclinação da reta aproximada

Existem diferentes tipos de métodos de RK e estes são classificados de acordo com o número de pontos usados em um subintervalo para determinar o valor da inclinação  $\phi$  da Eq. 2.32. O método de Runge-Kutta de segunda ordem utiliza dois pontos para calcula a inclinação, o de terceira ordem três utilizam pontos e o de  $n$ -ésima ordem utilizam  $n$  pontos. Os métodos de RK são geralmente precisos e a precisão aumenta à medida que a ordem do método aumenta e o mais utilizado é o de quarta ordem e sua forma geral é dada pelas Eq. 2.33-2.37 ([Gilat e Subramaniam, 2008](#); [Chapra, 2013](#)).

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_{1(i)} + 2k_{2(i)} + 2k_{3(i)} + k_{4(i)})h \quad (\text{Eq. 2.33})$$

Onde os coeficientes de Runge-Kutta são descritos como:

$$k_{1(i)} = f(x_i, y_i) \quad (\text{Eq. 2.34})$$

$$k_{2(i)} = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_{1(i)}h\right) \quad (\text{Eq. 2.35})$$

$$k_{3(i)} = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_{2(i)}h\right) \quad (\text{Eq. 2.36})$$

$$k_{4(i)} = f(x_i + h, y_i + k_{3(i)}h) \quad (\text{Eq. 2.37})$$

Sendo:  $y_{i+1}$  – variável dependente calculada no instante  $i+1$ ,  $y_i$  – variável dependente no instante  $i$ ,  $k_{j=1,\dots,4(i)}$  – constantes de Runge-Kutta calculadas no instante  $i$ ,  $h$  – passo de integração.

### EXEMPLO 2.5 – APLICAÇÃO DO MÉTODO DE RUNGE-KUTTA DE 4ª ORDEM

Considere o reator descrito no exemplo 2.1. Utilizando o Método de Runge-Kutta de 4ª Ordem resolva a EDO que representa o modelo dinâmico do sistema com valor inicial  $C_{0A}$  para 8 s com passo de integração  $h=0,1$ .

A variação do componente A, já substituído os valores dos parâmetros é descrita por:

$$\frac{dC_A}{dt} = 0,085 - 0,121C_{A(t)} - 1,25C_{A(t)}^2$$

Com valor inicial  $C_{A(0)}=0,7$  (mol L<sup>-1</sup>) e  $h=1$ , aplicando o método de Euler em  $i=0$ , tem-se:

$$k_{1(0)} = 0,085 - 0,121C_{A(0)} - 1,25C_{A(0)}^2 = -0,612$$

$$k_{2(0)} = 0,085 - 0,121\left(C_{A(0)} + \frac{h}{2}k_{1(0)}\right) - 1,25\left(C_{A(0)} + \frac{h}{2}k_{1(0)}\right)^2 = -0,157$$

$$k_{3(0)} = 0,085 - 0,121\left(C_{A(0)} + \frac{h}{2}k_{2(0)}\right) - 1,25\left(C_{A(0)} + \frac{h}{2}k_{2(0)}\right)^2 = -0,473$$

$$k_{4(0)} = 0,085 - 0,121(C_{A(0)} + hk_{3(0)}) - 1,25(C_{A(0)} + hk_{3(0)})^2 = -0,007$$

Assim, tem-se:

$$C_{A(1)} = C_{A(0)} + \frac{h}{6}(k_{1(0)} + 2k_{2(0)} + 2k_{3(0)} + k_{4(0)}) = 0,348$$

Fazendo o mesmo procedimento para as próximas iterações  $k=1,2,\dots$ , obtemos os

resultados apresentados na Tabela 2.5.

**Tabela 2. 5 – Resultados obtidos para o método de Runge-Kutta de 4ª Ordem**

$i$	$t(i)$	$C_{A(i)}$	$k_{1(i)}$	$k_{2(i)}$	$k_{3(i)}$	$k_{4(i)}$	$C_{A(i+1)}$
0	0	0.700	-0.612	-0.157	-0.473	-0.007	0.387
1	1	0.387	-0.149	-0.075	-0.110	-0.044	0.293
2	2	0.293	-0.058	-0.034	-0.044	-0.023	0.254
⋮	⋮	⋮	⋮				⋮
8	8	0.218	-0.001	-0.001	-0.001	0.000	0.217

## 2.5 Rigidez ou *stiffness* de equações diferenciais

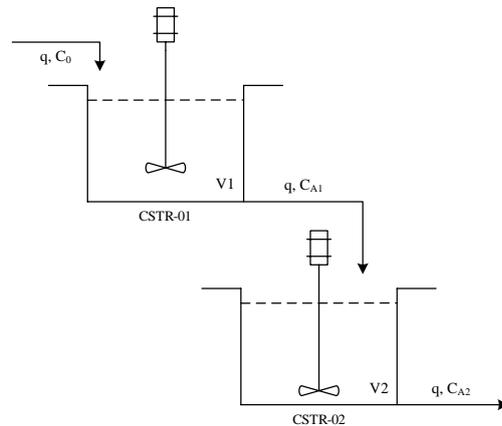
Alguns sistemas dinâmicos na engenharia envolvem fenômenos físicos que apresentam escalas espaciais e temporais completamente diferentes. Essa característica influencia na estabilidade da EDO que representa o sistema e é conhecida como *rigidez*. Em resumo, um sistema rígido é aquele envolvendo componentes que apresentam variações rápidas juntamente com variações lentas. A rigidez pode ocorrer tanto em EDO's individuais quanto em sistemas de EDO's (Gilat e Subramaniam, 2008; Rice e Do, 2012; Chapra, 2013)

### EXEMPLO 2.6 – SISTEMA DE EDO'S RÍGIDO

Considere os reatores CSTR em série e isotérmicos (Figura 2.6) onde ocorre uma reação irreversível de primeira em fase líquida do tipo  $A \rightarrow B$  (Fogler, 2002). A dinâmica da composição do reagente A, nos dois reatores, é dado por:

$$\text{CSTR-01: } V_1 \frac{dC_{A1}}{dt} = q[C_0 - C_{A1(t)}] - kC_{A1(t)}V_1$$

$$\text{CSTR-02: } V_2 \frac{dC_{A2}}{dt} = q[C_{A1(t)} - C_{A2(t)}] - kC_{A2(t)}V_2$$



**Figura 2. 6 – Reatores CSTR isotérmicos em série**

Considerando que no início temos  $C_{A1(0)}=C_{A2(0)}=0$  e que o instante  $t=0$  o primeiro reator é alimentado com uma concentração  $C_0$ . Adotando as variáveis adimensionais  $\tau = \frac{qt}{V_1}$ ,  $y_1 = \frac{C_{A1}}{C_0}$ ,  $y_2 = \frac{C_{A2}}{C_0}$ ,  $r = \frac{V_2}{V_1}$  e  $Da = \frac{kV_1}{q}$  temos:

$$\text{CSTR-01: } \frac{dy_1}{d\tau} = [1 - y_1(\tau)] - Day_1(\tau) \text{ com } y_1(\tau)=0$$

$$\text{CSTR-02: } r \frac{dy_2}{d\tau} = [y_1(\tau) - y_2(\tau)] - rDay_2(\tau) \text{ com } y_2(\tau)=0$$

Considerando:  $Da=0,01$  e  $r=100$  (isto é, o reator 2 tem um volume 100 vezes maior que o reator 1) obtemos:

$$\text{CSTR-01: } \frac{dy_1}{d\tau} = 1 - 1,01y_1(\tau) \text{ com } y_1(\tau)=0$$

$$\text{CSTR-02: } 100 \frac{dy_2}{d\tau} = y_1(\tau) - 2y_2(\tau) \text{ com } y_2(\tau)=0$$

A solução analítica do sistema é dada por

$$y_1(\tau) = \frac{1-e^{-1,01\tau}}{1,01} e \quad y_2(\tau) = \frac{1-e^{-0,02\tau}}{2,02} + \frac{e^{-1,01\tau}-e^{-0,02\tau}}{99,99}$$

A Figura 2.7 representa a resposta do sistema dinâmico. Podemos observar que na Figura 2.7a que a concentração do componente A no primeiro reator varia muito mais rapidamente no segundo reator. A concentração no primeiro reator atinge o estado estacionário em aproximadamente  $\tau=5$ , enquanto no segundo reator o estado estacionário se dá em aproximadamente  $\tau=200$ . Essa diferença acentuada da velocidade de resposta entre as duas variáveis é chamada de rigidez do sistema, ou seja, o sistema de EDO's é chamado de rígido.

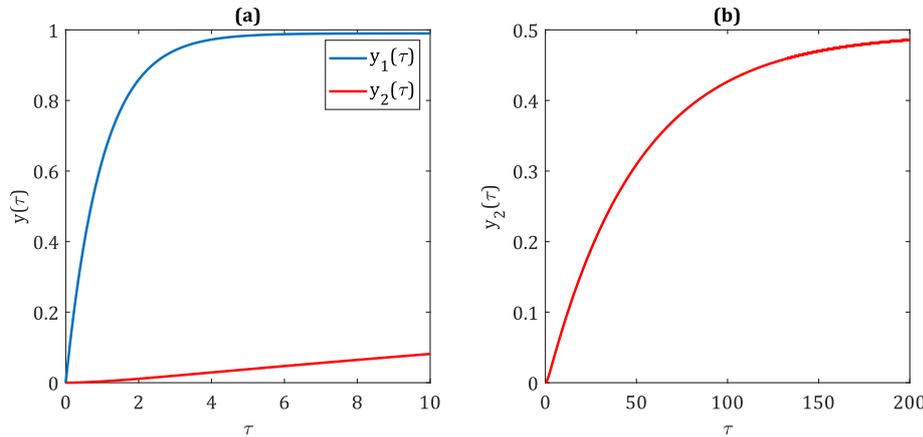


Figura 2.7 – Resposta dinâmica do sistema de reatores CSTR em série

Uma forma de verificar a rigidez de um sistema linear de EDO's, na forma da Eq. 2.37, sem a necessidade da solução analítica é realizar o cálculo da **razão de rigidez** ou *stiffness ratio* (SR) por meio dos autovalores do sistema,  $\lambda_i$ , a partir da Eq. 2.38 (Lambert, 1991; Finlayson, 2003; Rice e Do, 2012).

$$\frac{dU}{dt} + AU = B \tag{Eq. 2.37}$$

$$SR = \frac{|\lambda_{max}|}{|\lambda_{min}|} \tag{Eq. 2.38}$$

Sendo: U – vetor das variáveis de estado, A – matriz dos coeficientes do sistema, B – vetor das constantes, SR – grau de rigidez,  $\lambda$  - autovalor do sistema.

Sendo:  $\begin{cases} se\ SR \geq 20, \text{ não rígido} \\ se\ 20 < SR \leq 10^3, \text{ rígido} \\ se\ 10^3 < SR \leq 10^6, \text{ muito rígido} \end{cases}$

Os autovalores podem ser determinados aplicando a Eq. 2.38 no sistema de EDO's, onde I é uma matriz identidade.

$$\det(A - \lambda I) = 0 \tag{Eq. 2.39}$$

**EXEMPLO 2.7 – DETERMINAÇÃO DA RIGIDEZ DE UM SISTEMA**

Para o sistema linear de EDO's  $\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -c_1x_1(t) + c_2x_2(t) + d_1 \\ \frac{dx_2}{dt} = c_1x_1(t) - c_2x_2(t) - c_3x_2(t) - d_2 \end{cases}$ , determine

a rigidez do sistema calculando o Grau de Rigidez (SR).

Reescrevendo o sistema na forma da Eq. 2.37, obtemos:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} + c_1x_1(t) - c_2x_2(t) = d_1 \\ \frac{dx_2}{dt} - c_1x_1(t) + (c_2 + c_3)x_2(t) = -d_2 \end{cases}$$

$$\text{Sendo: } U = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}; A = \begin{bmatrix} c_1 & -c_2 \\ -c_1 & (c_2 + c_3) \end{bmatrix} \text{ e } B = \begin{bmatrix} d_1 \\ -d_2 \end{bmatrix}$$

Calculando os autovalores do sistema com a Eq. 2.39, teremos:

$$\det \left( \begin{bmatrix} c_1 & -c_2 \\ -c_1 & (c_2 + c_3) \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) = 0 \text{ ou } \det \left( \begin{bmatrix} c_1 - \lambda & -c_2 \\ -c_1 & (c_2 + c_3) - \lambda \end{bmatrix} \right) = 0$$

Resolvendo o determinante obtemos:  $\lambda^2 + (c_1 + c_2 + c_3)\lambda + c_1 c_3 = 0$ . Onde as raízes  $\lambda_i = -\frac{c}{2} \pm \frac{\sqrt{c^2 - 4c_1 c_3}}{2}$ , com  $c = c_1 + c_2 + c_3$ , são os autovalores do sistema. A rigidez do sistema será determinada pela Eq. 2.38 e dependerá dos valores dos coeficientes  $c_1, c_2$  e  $c_3$ . ■

### EXEMPLO 2.8 – CÁLCULO DO GRAU DE RIGIDEZ (SR) DE UM SISTEMA

Considere o sistema composto pelos dois reatores CSTR em série apresentado no exemplo 2.6 e representado por:

$$\text{CSTR-01: } \frac{dy_1}{d\tau} = 1 - 1,01y_{1(\tau)} \text{ com } y_{1(\tau)=0}$$

$$\text{CSTR-02: } 100 \frac{dy_2}{d\tau} = y_{1(\tau)} - 2y_{2(\tau)} \text{ com } y_{2(\tau)=0}$$

Para o sistema calcule o Grau de Rigidez e determine se o sistema é rígido.

Reescrevendo o sistema na forma  $\frac{dU}{dt} + AU = B$  teremos:

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{d\tau} + 1,01y_{1(\tau)} = 1 \\ \frac{dy_2}{d\tau} - \frac{1}{100}y_{1(\tau)} + \frac{2}{100}y_{2(\tau)} = 0 \end{cases}, \text{ onde: } U = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}; A = \begin{bmatrix} 1,01 & 0 \\ -\frac{1}{100} & \frac{2}{100} \end{bmatrix} \text{ e } B = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Aplicando a Eq. 2.39 obteremos:

$$\det \left( \begin{bmatrix} 1,01 & 0 \\ -\frac{1}{100} & \frac{2}{100} \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) = 0 \text{ ou } \det \left( \begin{bmatrix} (1,01 - \lambda) & 0 \\ -\frac{1}{100} & (\frac{2}{100} - \lambda) \end{bmatrix} \right) = 0.$$

A resolução do determinante fornece o seguinte polinômio:  $\lambda^2 - 1,03\lambda + 0,0202 = 0$  que possui as raízes  $\lambda_1=1,01$  e  $\lambda_2=0,02$ . Assim a razão de rigidez será determinada por:

$$SR = \frac{|\lambda_{max}|}{|\lambda_{min}|} = \frac{1,01}{0,02} = 50,5 \text{ o que caracteriza um sistema rígido.} \quad \blacksquare$$

## 2.6 Linearização de modelos

Muitos processos químicos dinâmicos são modelados por um conjunto de equações diferenciais não lineares de primeira ordem que geralmente surgem do balanço de massa e energia. A não linearidade pode estar presente por exemplo em: um modelo de um CSTR não isotérmico onde há a dependência exponencial da taxa de reação com a temperatura, no comportamento do pH com a vazão de ácido e base e em colunas de destilação onde as respostas assimétricas do destilado e da composição de fundo, em função da vazão de alimentação, estão presentes (Luyben, 1996; Bequette, 1998; Seborg et al., 2011).

Muitas vezes há interesse de realizar alguns tipos de estudos que necessitam que os modelos estudados sejam lineares, por exemplo, análise de estabilidade ou desenvolvimento de controladores. Além disso, trabalhar com sistemas lineares é muito mais simples e fácil podendo aplicar o princípio da superposição tornando possível analisar individualmente o efeito de cada variável de entrada e saída, sobrepondo posteriormente seus efeitos (Garcia, 2005).

Uma aproximação linear de um modelo estacionário sempre irá representar o modelo real de forma mais exata perto do ponto de linearização. Essa afirmação também é verdadeira quando estamos tratando de modelos dinâmicos. Porém, uma observação importante deve ser levada em consideração. Quando temos grandes mudanças nas condições operacionais de um processo linear não teremos uma resposta satisfatória da aproximação. A linearização é um

procedimento que consiste na aproximação de um sistema não linear ao comportamento linear (Stephanopoulos, 1990; Seborg et al, 2011).

Uma das técnicas de linearização baseia-se no método de expansão de uma função em Série de Taylor próximo a um ponto de linearização (Stephanopoulos, 1990; Luyben, 1996; Luyben e Luyben, 1997; Seborg et al., 2011). Considerando a equação diferencial representada na forma da Eq. 2.40

$$\frac{dx}{dt} = f(x) \tag{Eq. 2.40}$$

Onde  $f(x)$  é uma função não linear. Podemos realizar a expansão da função  $f(x)$  em Série de Taylor no ponto de linearização  $x(0)$  da seguinte forma:

$$f(x) \cong f(x_0) + \left(\frac{df}{dt}\right)_{x_0} \frac{x-x_0}{1!} + \left(\frac{d^2f}{dt^2}\right)_{x_0} \frac{(x-x_0)^2}{2!} + \dots + \left(\frac{d^nf}{dt^n}\right)_{x_0} \frac{(x-x_0)^n}{n!} \tag{Eq. 2.41}$$

Na Eq. 2.41, a partir dos termos de segunda ordem podemos negligenciar a ação por estarmos adotando um valor de  $x$  muito próximo do valor de  $x_0$ . Assim a equação 2.41 pode ser resumida na Eq. 2.42.

$$f(x) \cong f(x_0) + \left(\frac{df}{dt}\right)_{x_0} (x - x_0) \tag{Eq. 2.42}$$

Sendo:  $f(x)$  – aproximação linear,  $f(x_0)$  – função calculada no ponto de linearização,  $\left(\frac{df}{dt}\right)_{x_0}$  - derivada da função aplicada no ponto de linearização.

**EXEMPLO 2.9 – LINEARIZAÇÃO: MODELO DE UM TANQUE DE ARMAZENAMENTO**

Considere o sistema de armazenamento representado pela Figura 2.8

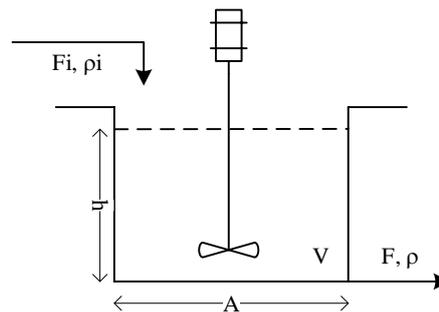


Figura 2. 8 – Tanque de armazenamento

O modelo matemático que representa a dinâmica do processo (veremos mais tarde como construí-lo), levando em consideração densidade constante, é dado por:

$$A \frac{dh}{dt} = F_i - F$$

A saída  $F$  pode ser considerada de forma mais realística como  $F = \beta\sqrt{h(t)}$  sendo o sistema representado por:

$$A \frac{dh}{dt} = F_i - \beta\sqrt{h(t)} \tag{Eq. 2.43}$$

A equação é não linear devido ao termo  $\sqrt{h}$ . Assim devemos aplicar a expansão por Série de Taylor truncada no segundo termo (Eq. 2.42) no termo em raiz,  $f = \sqrt{h(t)}$ , no ponto de linearização  $\bar{h}$  (valor no estado estacionário), temos:

$$f \cong f(\bar{h}) + C_1(h(t) - \bar{h}) \tag{Eq. 2.44}$$

Onde:  $C_1 = \left.\frac{df(h)}{dt}\right|_{\bar{h}} = \frac{1}{2\sqrt{\bar{h}}}$

Substituindo a constante  $C_1$  na Eq. 2.44 obteremos:

$$f \cong \sqrt{\bar{h}} + \frac{1}{2\sqrt{\bar{h}}}(h(t) - \bar{h})$$

Substituindo a função não linear pela função linearizada temos o modelo representado por:

$$A \frac{dh}{dt} = F_i - \beta \left( \sqrt{\bar{h}} + \frac{1}{2\sqrt{\bar{h}}}(h(t) - \bar{h}) \right)$$

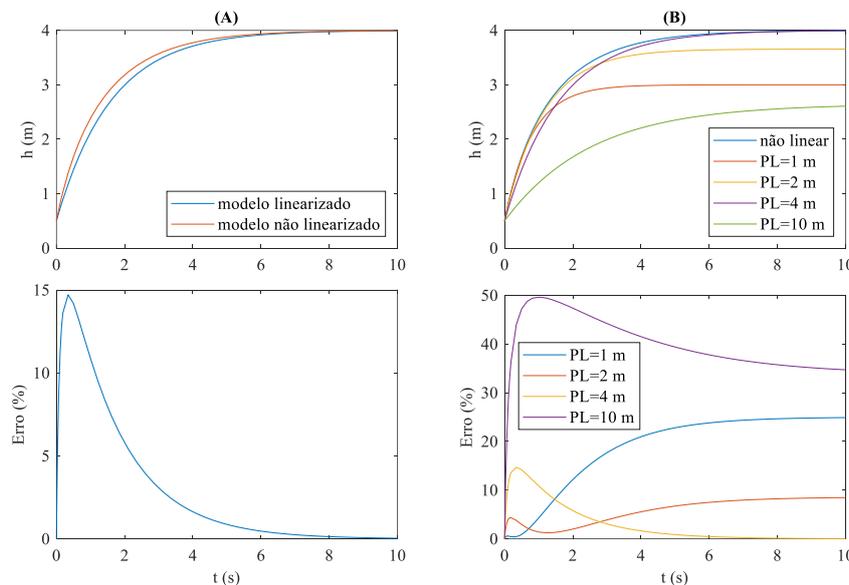
$$A \frac{dh}{dt} = F_i - \frac{\beta\sqrt{\bar{h}}}{2} h(t) - \frac{\beta\sqrt{\bar{h}}}{2} \quad (\text{Eq. 2.45})$$

Vamos considerar para as seguintes condições para o sistema:  $F_i = 10 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$ ,  $A = 2 \text{ m}^2$ ,  $\beta = 5 \text{ m}^3 \text{ m}^{-0.5} \text{ h}^{-1}$ ,  $h(0) = 0,5 \text{ m}$ .

Como o ponto de linearização,  $\bar{h}$ , considerado é o estado estacionário do sistema devemos encontrar este valor. Utilizando a equação não linear (Eq. 2.43) e substituindo as condições e considerando  $\frac{dh}{dt} = 0$  (estado estacionário) teremos;

$$\bar{h} = \left( \frac{F_i}{\beta} \right)^2 = \left( \frac{10}{5} \right)^2 = 4 \text{ m}$$

Realizando a simulação dos modelos não linear (Eq. 2.43) e linearizado (Eq. 2.45) obtemos a resposta apresentada na Figura 2.9.



**Figura 2.9 - Comparação dos modelos não linearizado e linearizado e análise do ponto de linearização**

Na Figura 2.9a observamos que o modelo linearizado teve o comportamento muito próximo do não linear e que o erro foi diminuindo à medida que o sistema atingiu o estado estacionário. O ponto de linearização (PL) é muito importante pois na Figura 3.6B podemos observar o comportamento do modelo linearizado para diversos valores para PL. Quanto mais longe, do estado estacionário, o PL maior é o erro apresentado pelo modelo linearizado. ■

### EXEMPLO 2.10 – LINEARIZAÇÃO: EQUAÇÃO DE ARRHENIUS

A dependência da taxa de reação com a temperatura é descrita pela equação de Arrhenius:  $k(T) = k_0 e^{-\frac{E}{RT}}$ . Linearize a equação da taxa de reação no ponto  $\bar{T}$ .

Aplicando a expansão por Série de Taylor (Eq. 2.42) na função  $f(T) = k(T)$ , temos:

$$f(T) \cong f(\bar{T}) + C_1(T - \bar{T})$$

Onde:  $C_1 = \left. \frac{df(T)}{dT} \right|_{\bar{T}} = k_0 e^{-\frac{E}{R\bar{T}}} \left( \frac{E}{R\bar{T}^2} \right)$ . Assim a equação linearizada será:

$$k(T) \cong k_0 e^{-\frac{E}{RT}} + \frac{k_0 E}{RT^2} e^{-\frac{E}{RT}} (T - \bar{T}) \quad \blacksquare$$

A metodologia de linearização abordada anteriormente e exemplificada nos exemplos 2.9 e 2.10 levava em consideração sistemas dinâmicos não lineares que apresentavam apenas uma variável. Agora estenderemos essa abordagem para sistemas com mais de uma variável. Considere o sistema dinâmico não linear representado pelas Eq. 2.47 e 2.48, onde  $f_1(x_1, x_2)$  e  $f_2(x_1, x_2)$  são funções não lineares ([Stephanopoulos, 1990](#); [Luyben, 1996](#); [Luyben e Luyben, 1997](#); [Seborg et al., 2011](#)).

$$\frac{dx_1}{dt} = f_1(x_1, x_2) \quad (\text{Eq. 2.47})$$

$$\frac{dx_2}{dt} = f_2(x_1, x_2) \quad (\text{Eq. 2.48})$$

O ponto de linearização é dado por  $\bar{x}_1$  e  $\bar{x}_2$ . Aplicando a expansão por Série de Taylor truncada (Eq. 2.42) nas Eq. 2.47 e 2.48 teremos:

$$f_1(x_1, x_2) \cong f_1(\bar{x}_1, \bar{x}_2) + \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right|_{\bar{x}_1, \bar{x}_2} (x_1 - \bar{x}_1) + \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right|_{\bar{x}_1, \bar{x}_2} (x_2 - \bar{x}_2) \quad (\text{Eq. 2.49})$$

$$f_2(x_1, x_2) \cong f_2(\bar{x}_1, \bar{x}_2) + \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right|_{\bar{x}_1, \bar{x}_2} (x_1 - \bar{x}_1) + \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right|_{\bar{x}_1, \bar{x}_2} (x_2 - \bar{x}_2) \quad (\text{Eq. 2.50})$$

Substituindo as Eq. 2.49 e 2.50 nas Eq. 2.47 e 2.48 obtemos:

$$\frac{dx_1}{dt} = f_1(\bar{x}_1, \bar{x}_2) + \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right|_{\bar{x}_1, \bar{x}_2} (x_1 - \bar{x}_1) + \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right|_{\bar{x}_1, \bar{x}_2} (x_2 - \bar{x}_2) \quad (\text{Eq. 2.51})$$

$$\frac{dx_2}{dt} = f_2(\bar{x}_1, \bar{x}_2) + \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right|_{\bar{x}_1, \bar{x}_2} (x_1 - \bar{x}_1) + \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right|_{\bar{x}_1, \bar{x}_2} (x_2 - \bar{x}_2) \quad (\text{Eq. 2.52})$$

### **EXEMPLO 2.11 – LINEARIZAÇÃO: EQUAÇÃO DE ESTADO PARA DENSIDADE DO AR**

A densidade de um gás pode ser determinada pela seguinte equação de estado:  $\rho(P, T) = \frac{PM}{RT}$ . Linearize a equação da densidade nos pontos de linearização  $\bar{P}$  e  $\bar{T}$ .

Aplicando a expansão por Série de Taylor a função  $f(P, T) = \rho(P, T)$ , temos:

$$f(P, T) \cong f(\bar{P}, \bar{T}) + C_1(P - \bar{P}) + C_2(T - \bar{T}) \quad (\text{Eq. 2.53})$$

$$\text{Onde: } C_1 = \left. \frac{\partial f(P, T)}{\partial P} \right|_{\bar{P}, \bar{T}} = \frac{M}{R\bar{T}} \text{ e } C_2 = \left. \frac{\partial f(P, T)}{\partial T} \right|_{\bar{P}, \bar{T}} = -\frac{\bar{P}M}{R\bar{T}^2}$$

Substituindo as constantes C1 e C2 na Eq. 2.53:

$$f(P, T) \cong \frac{\bar{P}M}{R\bar{T}} + \frac{M}{R\bar{T}}(P - \bar{P}) - \frac{\bar{P}M}{R\bar{T}^2}(T - \bar{T}) \quad \blacksquare$$

# Capítulo 3

## Desenvolvimento de modelos dinâmicos

Neste capítulo é apresentada a formulação de modelos matemáticos dinâmicos de sistemas presentes na Engenharia Química. O desenvolvimento dos modelos será baseado em leis fundamentais como conservação de massa, conservação de energia e conservação de movimento juntamente com conceitos de mecânica dos fluidos, cinética química, termodinâmica e transferência de calor e massa.

Um modelo nada mais é do que uma abstração matemática de um processo real e a equação ou conjunto de equações que o constituem não representam exatamente o processo real, ou seja, todo modelo por natureza é errado devido ao fato de não ter a capacidade de incorporar todas as características do sistema quando fazemos simplificações e considerações (Bequette, 1998; Jana, 2011). O desenvolvimento de modelos matemáticos objetiva:

- Melhorar a compreensão do processo;
- Treinar o pessoal operacional da planta;
- Projetar equipamentos;
- Projetar sistemas de controle;
- Otimizar as condições operacionais do processo;
- Detectar falhas.

### 3.1 Modelos dinâmicos

Os modelos dinâmicos são muito importantes dentro da Engenharia Química (e outras engenharias) e a simulação destes modelos pode ser vista como uma parte essencial para estudos e avaliação de falhas em plantas e para otimização do processo. Um estágio importante no desenvolvimento de qualquer modelo dinâmico (ou estático) é a formulação das equações de balanço de massa, energia e movimento. Além dos balanços, devem ser adicionadas aos modelos equações cinéticas, taxa de transferência de calor e massa, equilíbrio de fase e controle. Importante ter em mente que quanto maior a complexidade do modelo, maior a dificuldade em realizar a simulação e análise (Ingham, 2007). Alguns exemplos de equações de balanço de massa total, massa por componente e de energia são apresentados nas Eq. 3.1-3.3, respectivamente:

$$\frac{d(\rho V)}{dt} = \sum \rho_i F_i - \sum \rho_j F_j \quad (\text{Eq. 3.1})$$

$$\frac{dn}{dt} = \frac{d(CV)}{dt} = \sum C_i F_i - \sum C_j F_j \pm rV \quad (\text{Eq. 3.2})$$

$$\frac{dE}{dt} = \frac{d(U+K+P)}{dt} = \sum \rho_i F_i h_i - \sum \rho_j F_j h_j \pm Q \pm W_s \quad (\text{Eq. 3.3})$$

Sendo:  $\rho$  - densidade,  $V$  - volume do sistema,  $F$  - vazão volumétrica,  $n$  - número de moles,  $C$  - concentração molar,  $r$  - taxa de reação,  $h$  - entalpia específica,  $U$  - energia interna,  $K$  - energia cinética,  $P$  - energia potencial,  $Q$  - quantidade de calor trocado,  $W_s$  - trabalho realizado.

### 3.2 Princípio da conservação de massa e de energia

Para desenvolver e utilizar os modelos matemáticos é necessário que o Engenheiro Químico esteja familiarizado com os fenômenos que regem os processos. Isto significa que o Engenheiro Químico deve saber aplicar as Leis Fundamentais da Engenharia Química.

O princípio da conservação de massa (Luyben, 1996; Bequette, 1998; Ingham et al.,

(2007) quando aplicado a um sistema aberto, onde não ocorre reação química, diz que o acúmulo de massa do sistema ou no volume de controle será igual a quantidade de massa que entra no sistema ou no volume de controle menos a quantidade de massa que sai do sistema ou do volume de controle, ou seja:

$$\left(\frac{\text{acúmulo de massa}}{\text{tempo}}\right) = \left(\frac{\text{quantidade de massa na entrada}}{\text{tempo}}\right) - \left(\frac{\text{quantidade de massa na saída}}{\text{tempo}}\right) \quad (\text{Eq.3.4})$$

Ao contrário da massa global do sistema, os componentes químicos não são conservados. Se ocorrer reações químicas em um sistema a quantidade individual de um componente irá aumentar se ele for produto ou diminuirá se for reagente. Assim para uma *i-ésima* espécie química do sistema teremos:

$$\left(\frac{\text{acúmulo de matéria do componente } i}{\text{tempo}}\right) = \left(\frac{\text{quantidade de matéria do componente } i \text{ que entra}}{\text{tempo}}\right) - \left(\frac{\text{quantidade de matéria do componente } i \text{ que sai}}{\text{tempo}}\right) \pm \left(\frac{\text{quantidade de matéria do componente } i \text{ gerada/consumida}}{\text{tempo}}\right) \quad (\text{Eq. 3.5})$$

A conservação de energia é necessária sempre que há mudanças de temperaturas consideráveis no sistema, como por exemplo as causadas por efeitos de aquecimento de reação exotérmicas. A principal lei da termodinâmica expõe o princípio da conservação de energia (Luyben, 1996; Bequette, 1998; Ingham et al., 2007). Escrito para um sistema aberto genérico (onde pode ocorrer fluxo de energia para dentro e para fora do sistema) pode ser representado por:

$$\left(\frac{\text{acúmulo de energia total}}{\text{tempo}}\right) = \left(\frac{\text{quantidade de energia total na entrada}}{\text{tempo}}\right) - \left(\frac{\text{quantidade de energia total na saída}}{\text{tempo}}\right) + \left(\frac{\text{quantidade de energia total transferida ao sistema}}{\text{tempo}}\right) - \left(\frac{\text{trabalho realizado pelo sistema}}{\text{tempo}}\right) \quad (\text{Eq. 3.6})$$

**EXEMPLO 3.1 – TANQUE DE AQUECIMENTO**

Considere o sistema térmico representado pela Figura 3.1. No sistema estão presentes uma corrente de entrada e uma corrente de saída. A corrente de entrada está a uma determinada temperatura e calor é adicionado no sistema fazendo com o líquido saia a uma temperatura diferente da entrada. A corrente de saída e entrada são diferentes fazendo com que haja uma variação de volume no tanque.

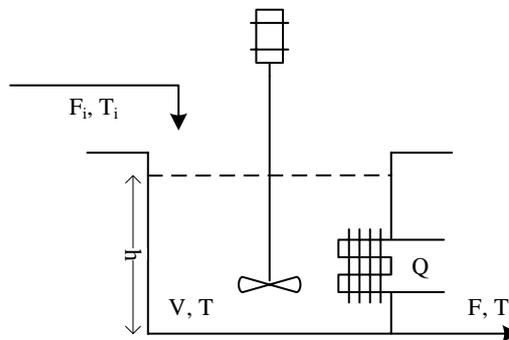


Figura 3. 1 – Representação do sistema térmico

Analisando o sistema de uma forma global podemos observar que ele apresenta um fluxo de massa e um fluxo de energia. Assim, será necessário desenvolver um modelo que represente a dinâmica do sistema baseado em um balanço de massa e um balanço de energia.

*Balanco de massa no sistema: Lei da conservação das massas*

Levando em consideração a Lei da conservação das massas em um sistema sem reação química (Eq. 3.4), temos o modelo dinâmico que representa a variação do nível do tanque dado pela Eq. 3.7.

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_e - \dot{m}_s \quad (\text{Eq. 3.7})$$

Sendo:  $m$  – massa do sistema,  $\dot{m}$  – vazão mássica

Considerando que na Eq. 3.7:  $m = \rho V$ ,  $V = Ah$  e  $\dot{m} = \rho F$ . E assumindo que a variação de densidade com a temperatura seja desprezível ( $\Delta\rho \cong 0$ ), temos:

$$A \frac{dh}{dt} = F_i - F \quad (\text{Eq. 3.8})$$

Sendo:  $h$  – nível do fluido no tanque,  $A$  – área da seção transversal do tanque,  $F$  – vazão volumétrica.

*Balanco de energia no sistema: Lei da conservação das energias*

A energia envolvida no sistema é a energia total, assim o balanço de energia pode ser escrito, com o auxílio da Eq. 3.6, da seguinte forma:

$$\frac{dE_{total}}{dt} = E_{total,entrada} - E_{total,saida} \pm \dot{Q} - W_s \quad (\text{Eq. 3.9})$$

A energia total representa a soma das energias interna, potencial e cinética e dada pela expressão termodinâmica:

$$E = U + P + K \quad (\text{Eq. 3.10})$$

Sendo:  $E$  – energia total,  $U$  – energia interna,  $P$  – energia potencial,  $K$  – energia cinética.

Assumindo que a energia cinética e a energia potencial são desprezíveis, pois não influenciam na temperatura do sistema devido a movimentações, temos que a energia total é igual a energia interna. A energia interna pode ser relacionada pela equação termodinâmica Eq. 3.11 sendo que para líquidos o termo  $P\bar{V}$  é desprezível, ficando energia interna igual a entalpia total do líquido.

$$H = U + P\bar{V} \quad (\text{Eq. 3.11})$$

Desprezando o trabalho realizado pelo sistema ( $W_s$ ), o balanço de energia resultante é representado pela Eq. 3.12.

$$\frac{dH}{dt} = h_e - h_s + \dot{Q} \quad (\text{Eq. 3.12})$$

A entalpia total ( $H$ ) e específica ( $h$ ) são representadas por:  $H = mC_p(T - T_{ref})$ ,  $h = \dot{m}C_p(T - T_{ref})$ . A massa de líquido dentro do tanque e a vazão mássica são expressas, respectivamente, por:  $m = \rho V = \rho Ah$  e  $\dot{m} = \rho F$ . Assim a Eq. 3.9 pode ser escrita como:

$$\frac{d}{dt} [\rho Ah C_p (T - T_{ref})] = \rho_i F_i C_{p,i} (T_i - T_{ref}) - \rho F C_p (T - T_{ref}) + \dot{Q} \quad (\text{Eq. 3.13})$$

Sendo:  $h$  – nível do fluido no tanque,  $T$  – temperatura do fluido,  $A$  – área da seção transversal do tanque,  $C_p$  – calor específico,  $T_{ref}$  – temperatura de referência,  $F$  – vazão volumétrica,  $\dot{Q}$  – calor adicionado ao fluido.

Assumindo que as variações de densidade e calor específico com a temperatura sejam desprezíveis ( $\Delta\rho \cong 0$  e  $\Delta C_p \cong 0$ ) e a temperatura de referência seja zero, temos:

$$A \frac{d(hT)}{dt} = F_i T_i - FT + \frac{\dot{Q}}{\rho C_p} \quad (\text{Eq. 3.14})$$

Aplicando a regra da cadeia na Eq. 3.14 e substituindo a Eq. 3.8 na equação resultante temos:

$$Ah \frac{dT}{dt} = F_i (T_i - T) + \frac{\dot{Q}}{\rho C_p} \quad (\text{Eq. 3.15})$$

As Eq. 3.8 e 3.15 constitui o modelo dinâmico que representam o sistema térmico. ■

**EXEMPLO 3.2 – REATOR CSTR NÃO ISOTÉRMICO**

Considere o CSTR apresentado na Figura 3.2 onde ocorre a reação exotérmica, elementar, na fase líquida, de primeira ordem,  $A \rightarrow B$ . Por se tratar de uma reação exotérmica há a necessidade de realizar o resfriamento do reator sendo isso feito por meio de uma jaqueta por onde passa um fluido refrigerante (Bequette, 1998).

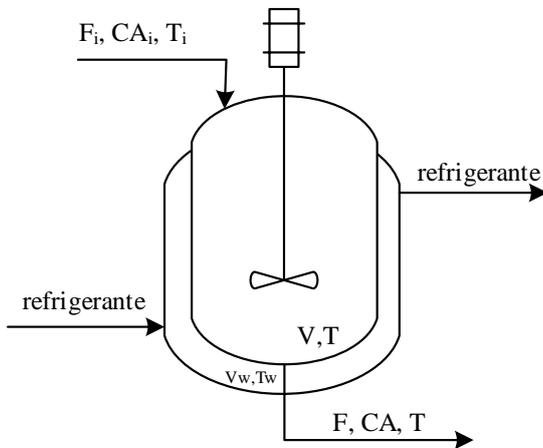


Figura 3.2 – Representação do CSTR não isotérmico

Da mesma forma que utilizamos as Leis da Conservação das Massas e da Conservação das Energias no Exemplo 3.1, iremos utilizá-las neste exemplo.

*Balanco de massa total do sistema:*

$$\frac{d(\rho V)}{dt} = \rho F_i - \rho F \quad (\text{Eq. 3.16})$$

Sendo: V - volume do meio reacional,  $\rho$  - densidade do meio reacional, F - vazão volumétrica.

Sabe-se que  $\rho = f(T, C)$ , porém iremos considerar que a variação da densidade do meio reacional seja desprezível, ou seja,  $\Delta\rho \cong 0$ . Assim, temos:

$$\frac{dV}{dt} = F_i - F \quad (\text{Eq. 3.17})$$

Por se tratar de um reator, devemos também realizar um balanço material levando em a reação química que ocorre no sistema.

*Balanco de massa por componente (molar):*

Levando em consideração a Lei da conservação das massas para um sistema com reação química (Eq. 3.5), teremos:

$$\frac{dn_i}{dt} = \dot{n}_{i,e} - \dot{n}_i \pm r_i V \quad (\text{Eq. 3.18})$$

Sendo:  $n_i$  - número de mol do componente i,  $\dot{n}_i$  - vazão molar do componente i,  $r_i$  - taxa de reação do componente i, V - volume reacional.

A Eq. 3.18 representa de forma genérica o balanço de massa no CSTR. Como temos uma reação  $A \rightarrow B$  precisamos realizar um balanço para os componentes A e B. Sabendo que  $n = CV$  e  $\dot{n} = FC$  e que para a reação elementar de primeira ordem a taxa de reação é dada por:  $r_A = -kC_A$ , o balanço material para os componentes A e B são representados pelas Eq. 3.19 e 3.20, respectivamente.

$$\frac{d(C_A V)}{dt} = C_{Ai} F_i - C_A F - k C_A V \quad (\text{Eq. 3.19})$$

$$\frac{d(C_B V)}{dt} = -C_B F + k C_A V \quad (\text{Eq. 3.20})$$

Sendo:  $C_A$  e  $C_B$  - Concentração dos componentes A e B, V - volume do meio reacional, k - constante da taxa de reação.

Considerando que uma das características de um reator CSTR é operar com volume

constante, ou seja,  $\frac{dV}{dt} = 0$  e a constante da taxa de reação sendo definida pela equação de Arrhenius ( $k=f(T)$ ) podemos reescrever as Eq. 3.19 e 3.20 da seguinte forma:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F_i}{V} (C_{Ai} - C_A) - k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_A \quad (\text{Eq. 3.21})$$

$$\frac{dC_B}{dt} = -\frac{F_i}{V} C_B + k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_A \quad (\text{Eq. 3.22})$$

Sendo:  $C_A$  e  $C_B$  – concentração dos componentes A e B,  $F$  – vazão volumétrica,  $V$  – volume reacional,  $k_0$  – fator pré-exponencial da constante da taxa de reação,  $E$  – energia de ativação,  $R$  – constante dos gases,  $T$  – temperatura.

O sistema apresentado é um CSTR onde uma reação exotérmica ocorre. Sendo assim, necessitamos de um balanço de energia para determinar o modelo que representa a variação da temperatura do meio reacional. Neste modelo devemos levar em consideração a calor gerado pela reação química (reação exotérmica libera energia para o meio) e o calor rejeitado pelo meio reacional devido a jaqueta de resfriamento.

#### Balanço de energia:

A mesma análise inicial realizada no Exemplo 3.1 para o balanço de energia será realizada neste exemplo. Além dos termos de energia que entra e sai do sistema devido aos fluxos de entrada e saída e do termo de transferência de calor entre o meio reacional e a jaqueta precisamos adicionar ao balanço a geração de energia devido a reação química. Sendo a reação  $A \rightarrow B$  teremos o termo de reação dado por  $(\tilde{H}_A - \tilde{H}_B)rV$ . Assim temos o balanço de energia dado por:

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = \rho_i F_i C_{pi} T_i - \rho F C_p T + (\tilde{H}_A - \tilde{H}_B)rV - \dot{Q} \quad (\text{Eq. 3.23})$$

Sendo:  $T$  – temperatura do meio reacional,  $\rho$  – densidade do meio reacional,  $V$  – volume do meio reacional,  $C_p$  – calor específico do meio reacional,  $F$  – vazão volumétrica,  $\tilde{H}$  – entalpia molar parcial,  $r$  – taxa de reação,  $\dot{Q}$  – calor trocado com a jaqueta.

Na Eq. 3.23, a diferença entre as entalpias molares parciais é a entalpia de reação  $\Delta H_r$ . Como a reação é exotérmica temos a entalpia de reação sendo negativa. Podemos incluir no modelo a taxa de transferência como sendo:  $\dot{Q} = UA_t(T - T_\infty)$ . Considerando desprezíveis as variações de densidade e calor específico do meio reacional ( $\Delta\rho \cong 0$  e  $\Delta C_p \cong 0$ ) o balanço de energia ficará:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_i}{V} (T_i - T) + \frac{(-\Delta H_r)}{\rho C_p} k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_A - \frac{UA_t(T - T_\infty)}{\rho V C_p} \quad (\text{Eq. 3.24})$$

Sendo:  $T$  – temperatura do meio reacional,  $\rho$  – densidade do meio reacional,  $V$  – volume do meio reacional,  $C_p$  – calor específico do meio reacional,  $F$  – vazão volumétrica,  $\Delta H_r$  – entalpia de reação,  $k_0$  – fator pré-exponencial da constante da taxa,  $U$  – coeficiente global de troca térmica,  $A_t$  – área de troca térmica,  $E$  – energia de ativação,  $R$  – constante dos gases,  $C$  – concentração,  $T_\infty$  – temperatura do fluido refrigerante.

As Eq. 3.21, 3.22 e 3.24 representam o modelo dinâmico do CSTR apresentado. ■

### 3.3 Princípio da conservação de movimento (*momentum*)

A conservação de movimento aparece em problemas que envolvem o fluxo de fluidos. *Momentum* é definido como sendo o produto da massa e velocidade. A segunda lei de Newton (Eq. 3.26) é a relação básica usada para escrever a equação do movimento. Ela define que a força é a massa vezes a aceleração e é igual à taxa de variação de *momentum* (Ingham et al., 2007). O balanço de movimento pode ser escrito como

$$\left( \frac{\text{acúmulo de movimento}}{\text{tempo}} \right) = \left( \frac{\text{quantidade de movimento que entra}}{\text{tempo}} \right) - \left( \frac{\text{quantidade de movimento que sai}}{\text{tempo}} \right) + \left( \frac{\text{quantidade de movimento gerado}}{\text{tempo}} \right) \quad (\text{Eq. 3.25})$$

$$\sum_{j=1}^n F_{ji} = ma \quad (\text{Eq. 3.26})$$

Sendo:  $F_{ji}$  – j-ésima força atuando na direção  $i$ ,  $m$  – massa deslocada no sistema,  $a$  – aceleração

**EXEMPLO 3.3 – TANQUE GRAVITACIONAL COM VELOCIDADE UNIDIRECIONAL**

O tanque de gravidade (ou gravitacional) representado pela Figura 3.3 é um típico exemplo macroscópico de aplicação de conservação de movimento. Considerando o tanque apresentado determine o modelo que descreve a variação de velocidade com o decorrer do tempo (Luyben 1996; Bequette, 1998).

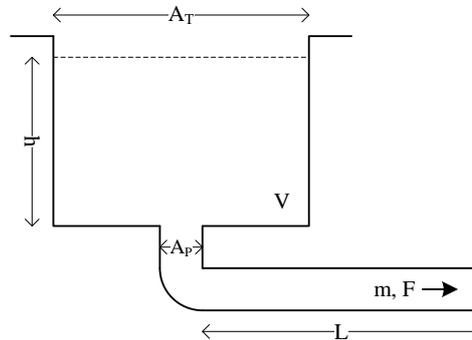


Figura 3.3 – Tanque gravitacional unidirecional

*Balanço de movimento:*

Partindo da segunda lei de Newton (Eq. 3.26) e sendo  $a = \frac{dv_i}{dt}$  temos a segunda lei de Newton expressa como

$$\sum_{j=1}^n F_{ji} = \frac{d(mv_i)}{dt} \quad (\text{Eq. 3.27})$$

Sendo:  $F_{ji}$  – j-ésima força atuando na direção i, m – massa deslocada no sistema,  $v_i$  – velocidade na direção i

As forças que atuam no sistema são a força hidráulica “empurrando” o líquido para fora do tanque e força de atrito atuando em sentido contrário à força de escoamento devido a viscosidade do líquido, representadas respectivamente pelas Eq. 3.28 e 3.29.

$$F_H = A_p \rho g h(t) \quad (\text{Eq. 3.28})$$

Sendo:  $F_H$  – força hidráulica,  $A_p$  – área da seção transversal do tubo,  $\rho$  – densidade do líquido, g – aceleração da gravidade, h – nível do tanque

$$F_a = \frac{2k_{f(Re)} \rho L A_p v_i^2(t)}{d_p} \quad (\text{eq. 3.29})$$

Sendo:  $F_a$  – força de atrito,  $k_f$  – coeficiente de atrito,  $\rho$  – densidade do líquido, L – comprimento do tubo,  $A_p$  – área do tubo,  $v_i$  – velocidade na direção i,  $d_p$  – diâmetro do tubo.

Observe que a massa presente na Eq. 3.27 é a que sai do tanque através da tubulação de comprimento L, assim ela será representada por:  $m = \rho V = A_p L \rho$ . Substituindo as Eq. 3.28 e 3.29 na Eq. 3.27 e considerando que a massa deslocada na tubulação seja constante, obtemos

$$\frac{dv_i}{dt} = \frac{g}{L} h(t) - \frac{2k_{f(Re)} v_i^2(t)}{d_p} \quad (\text{Eq. 3.30})$$

O coeficiente de atrito  $k_f=f(Re)$  depende do regime de escoamento, consequentemente depende do número de Reynolds que é função da velocidade. Desta forma  $k_{f(Re)}$  pode ser determinado utilizando as Equações Eq. 3.31 e 3.32.

$$Re = \frac{\rho d_p |v_i(t)|}{\mu} \quad (\text{Eq. 3.31})$$

Sendo:  $\rho$  – densidade do líquido,  $v_i$  – velocidade na direção i,  $d_p$  – diâmetro do tubo,  $\mu$  – viscosidade do líquido

$$k_{f(Re)} = 0 \text{ se } Re = 0$$

$$k_{f(Re)} = \frac{64}{Re} \text{ se } Re \leq 2000 \quad (\text{Eq. 3.32})$$

$$k_{f(Re)} = \frac{0,18}{Re^{0,2}} \text{ se } Re > 2000$$

### Balanço de massa:

Como temos o nível do tanque variando com o tempo, precisamos determinar o modelo que descreve essa variação. Levando em consideração a Lei da conservação das massas em um sistema sem reação química (Eq. 3.4), temos o modelo dinâmico que representa a variação do nível do tanque dado por

$$\frac{dm}{dt} = -F(t)\rho \quad (\text{Eq. 3.33})$$

Sendo:  $\rho$  - densidade do líquido,  $F$  - vazão volumétrica na saída do tanque,  $m$  - massa de líquido

Neste caso a massa presente é a contida no tanque e é expressa por:  $m = \rho A_T h(t)$ . A vazão de saída do líquido do tanque depende da velocidade que o ele deixa o tanque, assim podemos escrever a vazão como  $F(t) = A_p v_i(t)$ . Substituindo a massa e a vazão na Eq. 3.33 teremos

$$\frac{dv_i}{dt} = -\frac{A_p}{A_T} v_i(t) \quad (\text{Eq. 3.34})$$

Sendo:  $A_p$  - área da seção transversal do tubo,  $A_T$  - área da seção transversal do tanque,  $v_i$  - velocidade do líquido

As Eq. 3.30 e 3.34 representam a dinâmica do tanque gravitacional. ■

## 3.4 Ordem do modelo

A ordem de um sistema dinâmico é definida pela ordem da equação diferencial que o descreve. Uma equação diferencial de ordem  $n$  resultará em um sistema de  $n$ -ésima ordem como observado na Eq. 3.34 (Seborg et al., 2011).

$$a_n \frac{d^n x}{dt^n} + a_{n-1} \frac{d^{n-1} x}{dt^{n-1}} + \dots + a_1 \frac{dx}{dt} + a_0 x = f(t) \quad (\text{Eq. 3.34})$$

Sendo:  $a_i$  - constantes do sistema,  $f(t)$  - função distúrbio

Na engenharia química é muito frequente termos sistemas de 1ª e 2ª ordem. Os sistemas de 1ª ordem representam aproximadamente 80% dos sistemas estudados em Engenharia Química.

Um sistema de 1ª ordem pode ser representado, de forma genérica, conforme a Eq. 3.35.

$$a_1 \frac{dx}{dt} + a_0 x = bf(t) \quad (\text{Eq. 3.35})$$

Sendo:  $a_1, a_0, b$  - constantes do sistema,  $f(t)$  - função distúrbio

Uma forma padrão de representação de sistema de primeira ordem pode ser dada pela Eq. 3.36. Onde:  $\tau_p = \frac{a_1}{a_0}$  e  $K_p = \frac{b}{a_0}$ .

$$\tau_p \frac{dx}{dt} + x = K_p f(t) \quad (\text{Eq. 3.36})$$

Sendo:  $\tau_p$  - constante de tempo do processo,  $K_p$  - ganho estático do processo.

Um sistema de 2ª ordem pode ser representado conforme a Eq. 3.37 e a forma padrão de representação, pela Eq. 3.38 onde:  $\tau^2 = \frac{a_2}{a_0}$ ,  $2\xi\tau = \frac{a_1}{a_0}$  e  $K_p = \frac{b}{a_0}$ .

$$a_2 \frac{d^2 x}{dt^2} + a_1 \frac{dx}{dt} + a_0 x = bf(t) \quad (\text{Eq. 3.37})$$

$$\tau^2 \frac{d^2 x}{dt^2} + 2\xi\tau \frac{dx}{dt} + x = K_p f(t) \quad (\text{Eq. 3.38})$$

Sendo:  $a_2, a_1, a_0, b$  - constantes do sistema,  $\tau$  - período natural de oscilação,  $\xi$  - fator de amortecimento,  $K_p$  - ganho estático do processo.

## 3.5 Análise do grau de liberdade

Para simular um processo, devemos primeiro garantir que as equações do modelo constituem um conjunto de relações solucionável. Ou seja, as variáveis de saída podem ser resolvidas em termos das variáveis de entrada. Para que o modelo tenha uma solução única, o

número de variáveis desconhecidas deve ser igual ao número de equações do modelo independente. Isto significa que todos os graus de liberdade devem ser utilizados. O grau de liberdade de um sistema pode ser determinado pela Eq. 3.39. Um processo será efetivamente controlado quando todos os graus de liberdade forem especificados ([Stephanopoulos, 1990](#); [Ogunnaike, 1994](#); [Seborg et al., 2011](#)).

$$N_F = N_V - N_E \quad (\text{Eq. 3.39})$$

Sendo:  $N_F$  – grau de liberdade,  $N_V$  – número de variáveis independentes do processo,  $N_E$  – número de equações independentes do processo.

Uma análise de graus de liberdade permite que os problemas de modelagem sejam classificados de acordo com as seguintes categorias ([Seborg et al., 2011](#)):

1.  $N_F=0$ : o sistema está definido ou totalmente especificado, o número de equações independentes é igual ao número de variáveis independentes ( $N_E=N_V$ ). Não há como inserir controle.
2.  $N_F<0$ : o sistema é especificado em excesso, o número de variáveis é menor que o número de equações ( $N_V<N_E$ ) e, conseqüentemente, o conjunto de equações não tem solução. Não há como inserir controle.
3.  $N_F>0$ : o sistema é subespecificado, o número de variáveis é maior que o número de equações ( $N_V>N_E$ ) e terá soluções múltiplas. Pode haver tantas malhas de controle quantos forem os graus de liberdade.

Também utilizamos a análise de grau de liberdade quando uma variável de processo é especificada para ser uma variável manipulada (ajustado por um controlador). Quando isso ocorre, a lei de controle que indica como a variável manipulada será ajustada é introduzida no sistema. Desta forma,  $N_E$  aumenta e um e  $N_F$  diminui em um. A abordagem estruturada da modelagem envolve uma análise sistemática para determinar o  $N_F$ . As etapas da análise dos graus de liberdade estão resumidas na Tabela 3.1 ([Seborg et al., 2011](#)).

**Tabela 3.1 – Análise dos graus de liberdade**

Etapa	Análise
1	Liste todas as quantidades no modelo que são constantes conhecidas (ou parâmetros que podem ser especificados) com base nas dimensões do equipamento, propriedades físicas conhecidas e assim por diante
2	Determine o número de equações $N_E$ e o número de variáveis de processo, $N_V$ . Observe que o tempo $t$ não é considerado uma variável de processo porque não é uma entrada de processo nem uma saída de processo
3	Calcule o número de graus de liberdade utilizando a Eq. 3.39
4	Identifique as variáveis de saída que serão obtidas resolvendo o modelo
5	Identifique as variáveis de entrada que devem ser especificadas como variáveis de perturbação ou variáveis manipuladas, a fim de utilizar os graus de liberdade $N_F$ .

### EXEMPLO 3.4 – ANÁLISE DO GRAU DE LIBERDADE

Analise o grau de liberdade do modelo determinado no Exemplo 3.2 levando em consideração que o volume do reator seja constante.

A dinâmica do reator CSTR apresentado no exemplo é descrita pelas Eq. 3.21, Eq. 3.22 e Eq. 3.24. Analisando as equações temos

10 parâmetros:  $V, \rho, C_p, k_0, E, R, -\Delta H_R, U, A_t, T_\infty$

6 variáveis ( $N_V=6$ ):  $C_A, C_B, T, C_{A_i}, T_i, F_i$

3 equações ( $N_E=3$ ): Eq. 3.21, Eq. 3.22 e Eq. 3.24

Com base na análise acima teremos  $N_F=6-3=3$  (Eq. 3.39). Como  $N_F>0$  temos um sistema subespecificado e terá soluções múltiplas. Portanto, devemos identificar três variáveis de entrada que podem ser especificadas como função de tempo para que a equação tenha uma solução única. As variáveis dependentes  $C_A, C_B$  e  $T$  são uma escolha natural para as variáveis de saída. Assim,

3 saídas:  $C_A, C_B, T$

3 entradas:  $C_{A_i}, T_i, F_i$  ■

# Capítulo 4

## Problemas típicos da Engenharia Química: estudos de caso

A modelagem e simulação, como dito anteriormente, é uma arte e como toda arte temos que praticá-la e uma forma eficiente de realizar este entendimento prático é desenvolver modelos matemáticos de sistema presentes no cotidiano da engenharia química. Os Estudos de Caso abordarão sistemas da engenharia química que podem ser agrupados em: Sistemas envolvendo transferência de fluidos, transferência de calor, sistemas de separação (vaporização, flash e coluna de destilação), reatores (CSTR, batelada, semi-batelada, PFR, PBR) e sistemas com controle.

### Caso 1: Tanques de armazenamento em séries

**Descrição do problema:** O sistema isotérmico representado pela Figura 4.1 consiste em quatro tanques cilíndricos para armazenamento de líquido onde as correntes  $F_0, F_1, F_2, F_3, F_4$  e  $F_5$ , ( $\text{m}^3 \text{h}^{-1}$ ), representam as vazões de entrada e saída dos tanques sendo elas reguladas pelas válvulas  $V_1, V_2, V_3$  e  $V_4$  que possuem  $C_v$  ( $\text{m}^3 \text{m}^{-1/2} \text{h}^{-1}$ ) Para o sistema descrito determine o(s) modelo(s) que descreva(m) sua dinâmica.

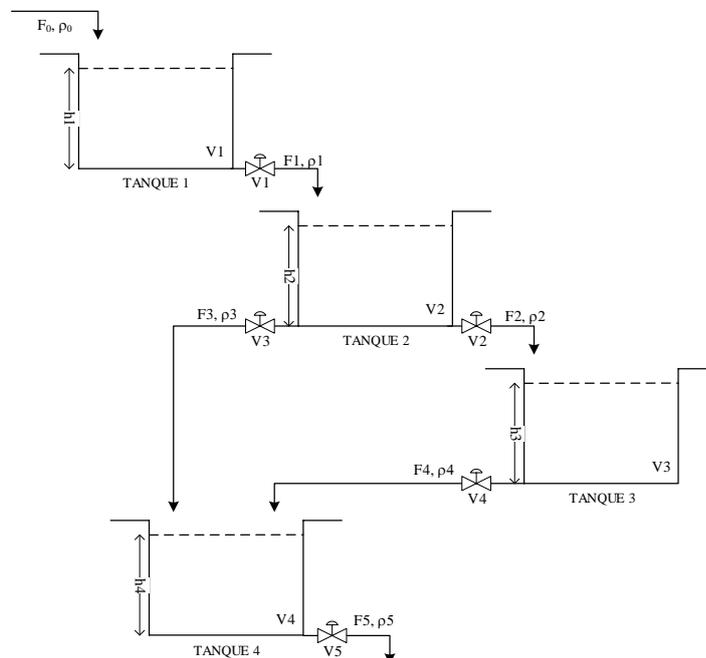


Figura 4. 1 – Sistema de tanques de armazenamento em série

**Desenvolvimento do modelo:** Considerando que a densidade do fluido seja constante (sistema isotérmico) e que as vazões de saída são representadas, de forma realística, por:  $F_i = C_v x_i \sqrt{h_j(t)}$  ( $i$  – saídas, com  $i \neq 0$  e  $j$  – número de tanques), aplicando a lei da conservação das massas em cada tanque teremos o sistema descrito pelas Eq. 4.1 a 4.4.

$$A_1 \frac{dh_1}{dt} = F_0 - C_v x_1 \sqrt{h_1(t)} \quad (\text{Eq. 4.1})$$

$$A_2 \frac{dh_2}{dt} = C_v [x_1 \sqrt{h_1(t)} - x_2 \sqrt{h_2(t)} - x_3 \sqrt{h_2(t)}] \quad (\text{Eq. 4.2})$$

$$A_3 \frac{dh_3}{dt} = C_v [x_2 \sqrt{h_2(t)} - x_4 \sqrt{h_3(t)}] \quad (\text{Eq. 4.3})$$

$$A_4 \frac{dh_4}{dt} = C_v [x_3 \sqrt{h_2(t)} + x_4 \sqrt{h_3(t)} - x_5 \sqrt{h_4(t)}] \quad (\text{Eq. 4.4})$$

Sendo: A – área transversal dos tanques;  $C_v$  – constante das válvulas;  $F_0$  – vazão na alimentação; h – nível dos tanques; x – abertura das válvulas

## Caso 2: Misturadores de soluções aquosas

**Descrição do problema:** A Figura 4.2 representa um sistema de mistura de soluções aquosas de propileno glicol (PG). No misturador M1, de capacidade  $V_1$  ( $\text{m}^3$ ), existe duas correntes de alimentação  $F_0$  ( $\text{m}^3 \text{min}^{-1}$ ) e  $F_a$  ( $\text{m}^3 \text{min}^{-1}$ ) com as concentrações  $C_0$  ( $\text{kg}_{\text{PG}} \text{m}^{-3}$ ) e  $C_a$  ( $\text{kg}_{\text{PG}} \text{m}^{-3}$ ), respectivamente. A corrente de saída do misturador M1 alimenta o misturador M2, de capacidade  $V_2$  ( $\text{m}^3$ ), juntamente com a corrente  $F_b$  ( $\text{m}^3 \text{min}^{-1}$ ) de concentração  $C_b$  ( $\text{kg}_{\text{PG}} \text{m}^{-3}$ ). A densidade da solução de propileno glicol em função da concentração pode ser expressa por:  $\rho(C) = -0,01C^2 + 1,17C + 996,1$  ( $\text{kg} \text{m}^{-3}$ ). Levando em consideração a descrição do sistema determine o(s) modelo(s) que descreva(m) sua dinâmica.

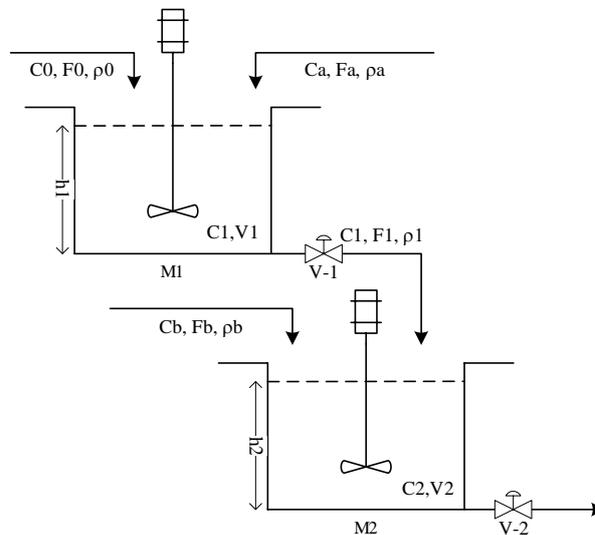


Figura 4. 2 – Sistema de mistura de solução aquosa de propileno glicol

**Desenvolvimento do modelo:** Analisando de forma geral o sistema podemos observar que temos que resolver duas questões: 1) A variação da concentração de propileno glicol e 2) a variação dos níveis dos misturadores M1 e M2. Considerando que o sistema opere como mistura perfeita, as vazões de saída dos misturadores podem ser representadas como  $F_i = C_v x_i \sqrt{h_i(t)}$  ( $\text{m}^3 \text{min}^{-1}$ ) e a concentração comum como  $C = \frac{m}{V}$ , aplicando a lei da conservação das massas em cada tanque do sistema e considerando que as válvulas possuem as mesmas características teremos o sistema descrito pelas Eq. 4.5 a 4.8 onde

$$V_1 \frac{dC_1}{dt} = C_0 F_0 - C_a F_a - C_{1(t)} C_v x_1 \sqrt{h_1(t)} \quad (\text{Eq. 4.5})$$

$$V_2 \frac{dC_2}{dt} = C_b F_b + C_{1(t)} C_v x_1 \sqrt{h_1(t)} - C_{2(t)} C_v x_2 \sqrt{h_2(t)} \quad (\text{Eq. 4.6})$$

$$A_1 \frac{dh_1}{dt} = \frac{\rho_0 F_0 + \rho_a F_a}{-0,01C_{1(t)}^2 + 1,17C_{1(t)} + 996,1} - C_v x_1 \sqrt{h_1(t)} \quad (\text{Eq. 4.7})$$

$$A_2 \frac{dh_2}{dt} = \frac{\rho_b F_b + (-0,01C_{1(t)}^2 + 1,17C_{1(t)} + 996,1) C_v x_1 \sqrt{h_1(t)}}{-0,01C_{2(t)}^2 + 1,17C_{2(t)} + 996,1} - C_v x_2 \sqrt{h_2(t)} \quad (\text{Eq. 4.8})$$

Sendo: A – área da seção transversal dos misturadores; C – concentração do propileno glicol nos misturadores;  $C_v$  – constante das válvulas; F -vazões volumétricas (0 e a – misturador 1 e b – misturador 2); h – nível dos tanques; V – volume dos misturadores; x – abertura das válvulas;  $\rho$  - densidade (0 e a – misturador 1 e b – misturador 2)

### Caso 3: Aleta adiabática em regime estacionário

**Descrição do problema:** Uma aleta de comprimento  $x$  (m) e diâmetro  $d$  (m) tem a função de realizar o resfriamento de uma superfície que se encontra a uma temperatura  $T_s$  trocando calor com o ambiente que está a uma temperatura  $T_a$  (Figura 4.3). Desenvolva o modelo que descreve a variação da temperatura da aleta apenas na direção axial e em regime permanente.

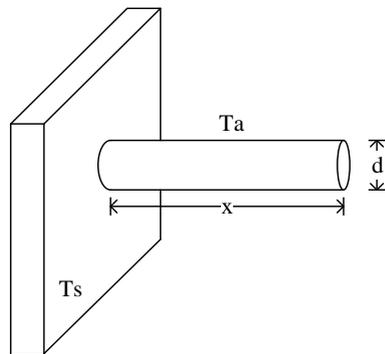


Figura 4.3 – Aleta cilíndrica adiabática

**Desenvolvimento do modelo:** O modelo a ser desenvolvido é de parâmetros distribuídos visto que há a variação espacial da temperatura na aleta. Considerando a aleta adiabática operando em regime permanente, a temperatura ambiente constante, a transferência de calor por condução dada pela lei de Fourier, a transferência de calor por convecção pela lei de resfriamento de Newton, aplicando a lei da conservação de energia no sistema teremos o modelo descrito pela Eq. 4.9.

$$\frac{d^2T}{dx^2} = \frac{4h}{kd} (T(x) - T_a) \tag{Eq. 4.9}$$

Sendo:  $d$  – diâmetro da aleta;  $h$  – coeficiente de troca de calor por convecção;  $k$  – coeficiente de troca de calor por condução;  $T$  – temperatura da aleta,  $T_a$  – temperatura ambiente, ..

### Caso 4: Tanques conectados por tubulação longa

**Descrição do problema:** Na figura 4.4 é apresentado um sistema que consistem em dois tanques conectados por uma tubulação longa de comprimento  $L$  (m) onde um líquido entra no tanque T1 a uma vazão  $F_0$  ( $m^3 s^{-1}$ ) e é transferido para o tanque 2 a uma vazão  $F_1$ . No tanque T2 existe uma válvula fazendo com que a vazão de saída seja da forma:  $F_2 = C_v x \sqrt{h_2(t)}$ . Considerando o sistema apresentado desenvolva o(s) modelo(s) que representa(m) a dinâmica do sistema (adaptado de [Bequette, 1998](#)).

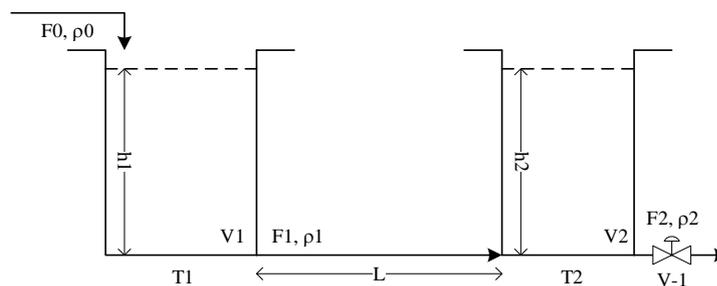


Figura 4.4 – Tanques conectados por tubulação longa

**Desenvolvimento do modelo:** Para a determinação do modelo necessitamos aplicar a lei de conservação do movimento para a determinação da velocidade do fluido que sai do tanque T1 e a lei de conservação das massas para determinar a variação dos níveis dos tanques T1 e T2. A vazão de saída do tanque T2 pode ser representada por  $F_2 = C_v x \sqrt{h_2(t)}$  e a força de atrito pela Eq. 3.29 (exemplo 3.3). Logo o sistema será dado pelas Eq. 4.10 a 4.12.

$$\frac{dv}{dt} = \frac{g}{L} (h_1(t) - h_2(t)) - \frac{2k_f(Re)v^2(t)}{d_p} \tag{Eq. 4.10}$$

$$\frac{dh_1}{dt} = \frac{F_0}{A_1} - v(t) \frac{A_p}{A_1} \quad (\text{Eq. 4.11})$$

$$\frac{dh_2}{dt} = v(t) \frac{A_p}{A_2} - C_v x \sqrt{h_2(t)} \quad (\text{Eq. 4.12})$$

Sendo: A – área da seção transversal (p – tubulação, 1 – tanque 1, 2 – tanque 2);  $C_v$  – constante da válvula;  $d_p$  – diâmetro da tubulação;  $F_0$  – vazão na entrada do tanque;  $g$  – aceleração da gravidade;  $h$  – nível dos tanques;  $k_{f(Re)}$  – coeficiente de atrito;  $v$  – velocidade do fluido na tubulação;  $x$  – abertura da válvula.

## Caso 5: Reator isotérmico com volume variável

**Descrição do problema:** A reação elementar, em fase líquida,  $2A + \frac{1}{2}B \rightarrow C$  ocorre em um reator de batelada alimentada. O reator já está carregado com o reagente A e o reagente B é alimentado a uma vazão  $FB_0$  ( $\text{dm}^3 \text{min}^{-1}$ ) e concentração  $CB_0$  ( $\text{mol dm}^{-3}$ ). Para o sistema descrito na Figura 4.5, desenvolva o(s) modelo(s) que representa(m) seu comportamento transiente (adaptado de [Luyben, 1996](#)).

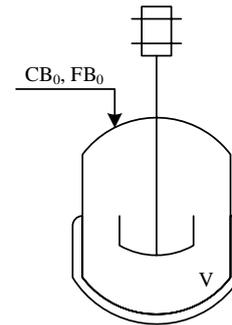


Figura 4.5 – Reator batelada alimentada operando isotermicamente

**Desenvolvimento do modelo:** Para o desenvolvimento dos modelos precisamos 1) da aplicação da lei da conservação das massas com reação química (reação) para a determinação da variação das concentrações dos componentes envolvidos na reação; 2) da aplicação da lei da conservação das massas para a determinação da variação do nível ou do volume do reator (reator batelada alimentada). Considerando que a densidade do meio reacional seja constante (mistura perfeita) a dinâmica do sistema será representada pelas Eq. 4.13 a 4.16.

$$\frac{dCA}{dt} = -kCA_{(t)}^2CB_{(t)}^{0.5} - \frac{CA_{(t)}FB_0}{V_{R(t)}} \quad (\text{Eq. 4.13})$$

$$\frac{dCB}{dt} = \frac{FB_0(CB_0 - CB)}{V_{R(t)}} - \frac{1}{4}kCA_{(t)}^2CB_{(t)}^{0.5} \quad (\text{Eq. 4.14})$$

$$\frac{dCC}{dt} = \frac{1}{2}kCA_{(t)}^2CB_{(t)}^{0.5} - \frac{CC_{(t)}FB_0}{V_{R(t)}} \quad (\text{Eq. 4.15})$$

$$\frac{dV_R}{dt} = FB_0 \quad (\text{Eq. 4.16})$$

Sendo: C – concentração dos componentes A, B e C;  $CB_0$  – concentração na alimentação;  $FB_0$  – vazão na alimentação;  $k$  – constante da taxa de reação;  $V_R$  – volume do meio reacional.

## Caso 6: Reator CSTR não-isotérmico encamisado

**Descrição do problema:** No CSTR representado na Figura 4.6 ocorre a reação exotérmica e elementar na fase líquida,  $A + B \rightarrow C$ . No reator são alimentados dos reagentes A e B a uma vazão  $F_0$  ( $\text{dm}^3 \text{min}^{-1}$ ) e concentrações  $CA_0$  ( $\text{mol dm}^{-3}$ ) e  $CB_0$  ( $\text{mol dm}^{-3}$ ) a uma temperatura  $T_0$  ( $^{\circ}\text{C}$ ). O reator possui uma camisa (jaqueta) para garantir o resfriamento da mistura reacional por meio de uma corrente fria (água) que entra na camisa a uma vazão  $Fw_0$  ( $\text{dm}^3 \text{min}^{-1}$ ) e a uma temperatura  $Tw_0$  ( $^{\circ}\text{C}$ ). Para o sistema descrito, desenvolva o(s) modelo(s) que descreva(m) seu comportamento dinâmico (adaptado de [Luyben, 1996](#)).

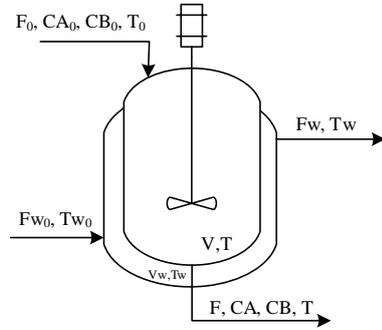


Figura 4.6 – Reator CSTR não-isotérmico encamisado

**Desenvolvimento do modelo:** Neste problema teremos que lidar com as variações de massa e energia do sistema. A lei da conservação das massas deverá ser aplicada para a determinação das concentrações e a lei da conservação de energia para as variações das temperaturas do reator e da camisa (jaqueta) resultando nas Eq. 4.17 a 4.21. Como o sistema é não isotérmico a constante da taxa de reação é dada pela equação de Arrhenius. A troca de calor entre o reator e jaqueta pode ser expressa por  $q = UA(T - T_{\infty})$ .

$$\frac{dCA}{dt} = \frac{F}{V_R} (CA_0 - CA(t)) - k_0 e^{-\frac{E_A}{RT_{R(t)}}} CA(t) CB(t) \quad (\text{Eq. 4.17})$$

$$\frac{dCB}{dt} = \frac{F}{V_R} (CB_0 - CB(t)) - k_0 e^{-\frac{E_A}{RT_{R(t)}}} CA(t) CB(t) \quad (\text{Eq. 4.18})$$

$$\frac{dCC}{dt} = \frac{F}{V_R} CC(t) + k_0 e^{-\frac{E_A}{RT_{R(t)}}} CA(t) CB(t) \quad (\text{Eq. 4.19})$$

$$\frac{dT_R}{dt} = \frac{F}{V_R} (T_0 - T_{R(t)}) - k_0 e^{-\frac{E_A}{RT_{R(t)}}} CA(t) CB(t) (-\Delta\tilde{H}_R) - \frac{UA(T_{R(t)} - T_w(t))}{V_R \rho_R C p_R} \quad (\text{Eq. 4.20})$$

$$\frac{dT_w}{dt} = \frac{F_w}{V_j} (T_{w0} - T_w(t)) + \frac{UA(T_{R(t)} - T_w(t))}{V_j \rho_w C p_w} \quad (\text{Eq. 4.21})$$

Sendo: A – área de transferência de calor; C – concentração dos componentes A, B e C; Cp – calor específico (R- meio reacional e w – fluido refrigerante); EA – energia de ativação; F – vazão na saída do reator (=F0), Fw – vazão na saída da camisa (=Fw0); k0 – fator pré exponencial da constante da taxa de reação; R – constante dos gases; T – temperatura (R – reator e w – fluido refrigerante); U – coeficiente global de transferência de calor; V – volume (R - meio reacional e j – camisa),  $\Delta\tilde{H}_R$  – entalpia de reação ( $\Delta H_A + \Delta H_B$ ),  $\rho$  – densidade (R - meio reacional e w – fluido refrigerante).

## Caso 7: Sistema de vaporização

**Descrição do problema:** No gerador de vapor representado pela Figura 4.7, água entra no vaporizador a uma vazão volumétrica F (m<sup>3</sup> s<sup>-1</sup>) e a uma temperatura T (°C). Uma quantidade de calor constante q (kJ s<sup>-1</sup>) é adicionado ao sistema sendo gerado uma quantidade de vapor Fv (m<sup>3</sup> s<sup>-1</sup>) a uma temperatura Tv (°C) e uma taxa de vaporização Wv (kg s<sup>-1</sup>). O volume do gerador de vapor é VT (m<sup>3</sup>). Desenvolva o(s) modelo(s) que descreva(m) o comportamento do sistema de vaporização (apenas 1 componente) em regime transiente (adaptado de [Luyben, 1996](#); [Bequette, 1998](#)).

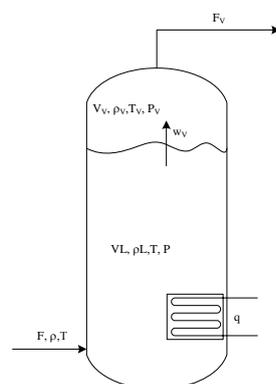


Figura 4.7 – Gerador de vapor

**Desenvolvimento do modelo:** Para este problema devemos considerar que as fases gasosas e líquidas devem ser tratadas separadamente e que: 1) as perdas térmicas sejam desprezíveis; 2) ambas as fases se comportam como mistura perfeita; 3) o líquido é incompressível (densidade constante,  $C_p=C_v$ ); 4) a pressão pode ser escrita pela equação de Antoine:  $\ln P v = \frac{A}{T(t)} + B$ ; 5)  $C_p$  do líquido é constante; 6) as capacidades caloríficas do vapor (a pressão e volume constantes) em função da temperatura podem ser representadas por:  $C_{p_v} = aT_{v(t)} + b$  e  $C_{v_v} = C_{p_v} - R$ ; 7) o vapor se comportando como gás ideal, logo temos:  $\rho_v = \frac{\bar{M}P}{RT_{v(t)}}$ ; 8) o taxa de transferência de massa é expressa por:  $w_v = K_G(P - P_v)$ ; 9) teremos ao aplicar a lei da conservação das massas e da energia para ambas as fases as Eq. 4.22 a 4.25.

$$\rho_L \frac{dV_L}{dt} = \rho_f F_f - w_v \tag{Eq. 4.22}$$

$$\rho_L V_{L(t)} C_{p_L} \frac{dT_L}{dt} = \rho_f F_f C_{p_f} T_f - w_v (C_{p_L} T_{L(t)} + \lambda_v) + \dot{q} \tag{Eq. 4.23}$$

$$\rho_v \frac{dV_v}{dt} = w_v - \rho_v F_v \tag{Eq. 4.24}$$

$$\rho_v V_{v(t)} C_{v_v} \frac{dT_v}{dt} = w_v (C_{p_L} T_{L(t)} + \lambda_v) - \rho_v F_v C_{p_v} T_{v(t)} \tag{Eq. 4.25}$$

Sendo: A e B – constantes de Antoine; a e b – constante da equação da capacidade calorífica do vapor;  $C_p$  – capacidade calorífica (f – alimentação, L – da fase líquida, v- fase vapor); F – vazão (f – alimentação e v – fase vapor);  $K_G$  – coeficiente global de transferência de massa;  $\bar{M}$  – massa molar média da fase vapor;  $P_v$  – pressão do vapor; q – calor adicionado ao sistema; R – constante dos gases; T – temperatura (f – alimentação, L – fase líquida, v – fase vapor), V – volume (L – fase líquida, v – fase vapor);  $\rho$  – densidade (f – alimentação, L – fase líquida, v- fase vapor);  $\lambda_v$  – calor latente de vaporização.

### Caso 8: Sistema de separação Flash multicomponente

**Descrição do problema:** A Figura 4.8 representa um sistema de destilação flash onde uma mistura contendo n-componentes entra a vazão F ( $\text{kg h}^{-1}$  ou  $\text{m}^3 \text{h}^{-1}$ ) a uma temperatura  $T_0$  ( $^{\circ}\text{C}$ ) e uma pressão  $P_0$  (kPa) passa por uma válvula de expansão (irreversível a H constante) gerando uma corrente de vapor V com uma composição y e uma corrente de líquido L com uma composição x. Uma quantidade de calor, constante, q ( $\text{kJ h}^{-1}$ ), é adicionado ao sistema antes da expansão. Levando em consideração a descrição do sistema apresentada desenvolva o(s) modelo(s) que descreva(m) o comportamento dinâmico do sistema de destilação flash multicomponente (adaptado de [Luyben, 1996](#); [Bequette, 1998](#)).

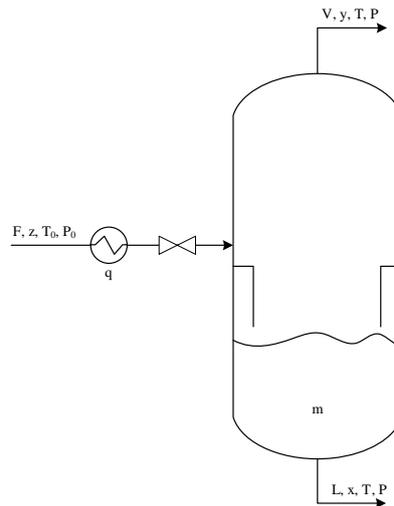


Figura 4. 8 – Sistema de separação flash multicomponente

**Desenvolvimento do modelo:** Neste problema devemos aplicar a lei da conservação das massas e da energia considerando que 1) a dinâmica da fase gasosa seja desprezada; 2) há equilíbrio termodinâmico (estágio ideal); 3) a energia interna é aproximadamente igual a entalpia; 4) sem perda de calor e 5) mistura perfeita em ambas as fases. Desta forma teremos a dinâmica do sistema representada (em base mássica) pelas Eq. 4.26 a 4.28.

$$\rho_L \frac{dV_L}{dt} = F_f \rho_f - F_v \rho_v - F_L \rho_L \quad (\text{Eq. 4.26})$$

$$\frac{\rho_L V_L(t)}{\sum_{i=1}^n x_i(t) \bar{M}_i} \frac{dx_i}{dt} = \frac{F_f \rho_f}{\sum_{i=1}^n z_i \bar{M}_i} z_i - \frac{F_v \rho_v K_i}{\sum_{i=1}^n K_i x_i(t) \bar{M}_i} x_i(t) - \frac{F_L \rho_L}{\sum_{i=1}^n x_i(t) \bar{M}_i} x_i(t) \quad (\text{Eq. 4.27})$$

$$\rho_L V_L(t) C_p \frac{dT}{dt} = F_f \rho_f C_p T_f + \dot{q} - F_v \rho_v C_p T(t) - F_L \rho_L C_p T(t) \quad (\text{Eq. 4.28})$$

Sendo:  $C_p$  – calor específico;  $F$  – vazão volumétrica (f – alimentação, L – fase líquida, v – fase vapor);  $K_i$  – constante de equilíbrio líquido-vapor;  $\bar{M}_i$  – massa molar média do componente  $i$ ;  $\dot{q}$  – calor adicionado;  $T$  – temperatura;  $V$  – volume da fase líquida;  $x_i$  – composição do componente  $i$  na fase líquida;  $y_i$  – composição do componente  $i$  na fase vapor;  $z_i$  – composição do componente  $i$  na alimentação;  $\rho$  – densidade (f – alimentação, L – fase líquida, v- fase vapor).

## Caso 9: Reatores isotérmicos com reações consecutivas

Descrição do problema: A reação consecutiva elementar em fase líquida  $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$  ocorre em um reator de mistura perfeita. Existe uma alimentação  $F_0$  ( $\text{dm}^3 \text{min}^{-1}$ ) no reator contendo o reagente A à uma concentração  $CA_0$  ( $\text{mol dm}^{-3}$ ). As vazões volumétricas são mantidas constantes na entrada e na saída do reator. Levando em consideração o sistema apresentado na Figura 4.9, desenvolva o(s) modelo(s) que represente(m) o comportamento dinâmico do sistema descrito (adaptado de [Fogler, 2002](#))

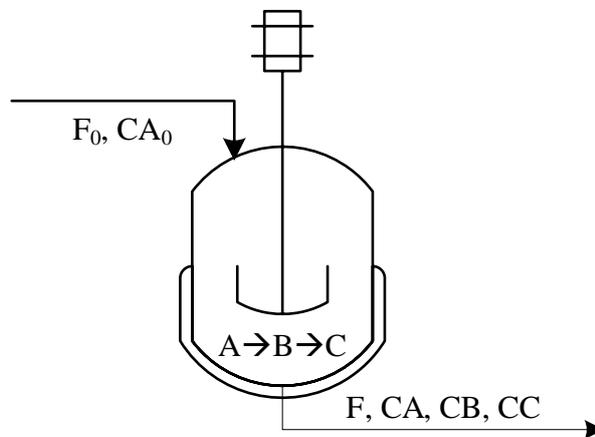


Figura 4.9 – Reator CSTR com reações consecutivas operando isotermicamente

**Desenvolvimento do modelo:** O sistema apresentado será modelado aplicando a lei de conservação das massas para os componentes A, B e C. Considerando que o sistema opere isotermicamente e que temos mistura perfeita no reator sua dinâmica será representada pelas Eq. 4.29 a 4.31.

$$\frac{dCA}{dt} = \frac{F(CA_0 - CA(t))}{V} - k_1 CA(t) \quad (\text{Eq. 4.29})$$

$$\frac{dCB}{dt} = -\frac{FCB(t)}{V} + k_1 CA(t) - k_2 CB(t) \quad (\text{Eq. 4.30})$$

$$\frac{dCC}{dt} = -\frac{FCC(t)}{V} + k_2 CB(t) \quad (\text{Eq. 4.31})$$

Sendo:  $C$  – concentração dos componentes A, B e C;  $CA_0$  – concentração no componente A na alimentação;  $F$  – vazão na saída do reator ( $=F_0$ );  $k$  – constante da taxa de reação;  $V$  – volume do meio reacional.

## Caso 10: Reator tubular não-isotérmico em regime permanente

**Descrição do problema:** Considere o reator tubular não-isotérmico representado pela Figura 4.10, no qual ocorre uma reação exotérmica em fase gasosa irreversível de 2ª ordem:  $A \rightarrow B$ . Uma vazão  $F_0$  ( $\text{mol s}^{-1}$ ) do componente A entra no reator a uma temperatura  $T_0$  ( $^{\circ}\text{C}$ ) e uma pressão  $P_0$  (Pa) e existe uma troca de calor ao longo do reator (não-adiabático) para o ambiente. Desenvolva o(s) modelo(s) que represente(m) o comportamento do sistema em regime estacionário (adaptado de [Fogler, 2002](#)).

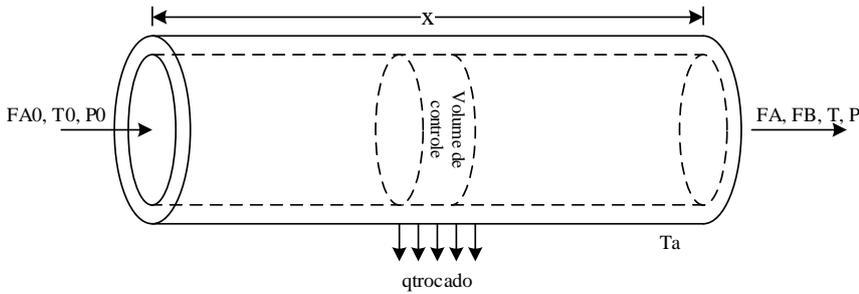


Figura 4. 10 – Reator tubular não isotérmico e não adiabático

Desenvolvimento do modelo: Este é um problema de parâmetros distribuídos que será modelado levando em consideração que: 1) há variação dos componentes apenas na direção axial; 2) o sistema opera em regime permanente; 3) a mistura reacional se comporta como um gás ideal; 4) a taxa de reação segue a lei de Arrhenius; 5) o calor trocado segue a lei de resfriamento de Newton e; 6) não há perda de carga no sistema. Aplicando a lei da conservação das massas e a lei da conservação da energia teremos as Eq. 4.32 a 4.34 como sendo a representação do comportamento do sistema.

$$\frac{dFA}{dx} = -\frac{\pi d^2}{4} k_0 e^{-\frac{Ea}{RT_{R(x)}}} \left( \frac{FA(x)}{FA(x)+FB(x)} \frac{P}{RT_{R(x)}} \right)^2 \quad (\text{Eq. 4.32})$$

$$\frac{dFB}{dx} = \frac{\pi d^2}{4} k_0 e^{-\frac{Ea}{RT_{R(x)}}} \left( \frac{FA(x)}{FA(x)+FB(x)} \frac{P}{RT_{R(x)}} \right)^2 \quad (\text{Eq. 4.33})$$

$$F_T C_p \frac{dT}{dx} = -\frac{\pi d^2}{4} k_0 e^{-\frac{Ea}{RT_{R(x)}}} \left( \frac{FA(x)}{FA(x)+FB(x)} \frac{P}{RT_{R(x)}} \right)^2 (-\Delta H_R) - \pi dh(T_{(x)} - Ta) \quad (\text{Eq. 4.34})$$

Sendo: d – diâmetro do reator; Cp – calor específico; Ea – energia de ativação; F – vazão molar (A e B – componentes; T – total); h – coeficiente de troca de calor por convecção; k<sub>0</sub> – fator pré-exponencial da taxa de reação; P- pressão no reator; R- constante universal dos gases; T – temperatura (a – ambiente; R – reator); ΔH<sub>R</sub> – entalpia de reação.

### Caso 11: CSTR pressurizado, reação em fase gasosa.

**Descrição do problema:** A reação reversível em fase gasosa,  $2A \leftrightarrow B$ , ocorre em um reator CSTR pressurizado (Figura 4.11). A reação espontânea é de ordem 1,5 com uma constante de reação k<sub>1</sub> em relação ao reagente A e a reação reversível é de primeira ordem com constante de reação k<sub>2</sub> em relação ao produto B. A fração molar do reagente A (y) e a pressão no reator (P) variam com o tempo. A massa molar média do meio reacional pode ser

expressa por  $M = [yM_A + (1 - y)M_B]$  e A vazão de saída do reator por  $F = Cv \sqrt{\frac{(P(t)-P_D)}{\rho(P)}}$

Desenvolva, para o descrito o(s) modelo(s) que descreva(m) a dinâmica do sistema.

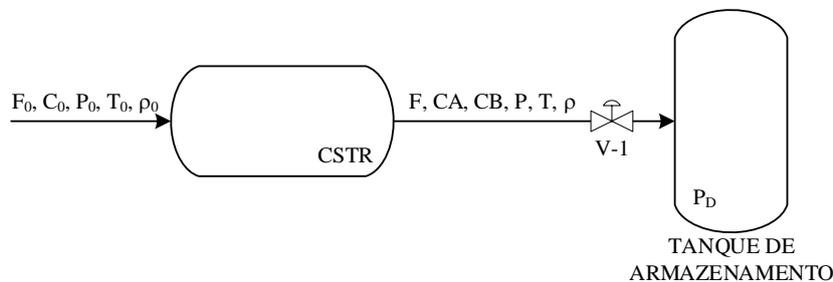


Figura 4. 11 - Reator CSTR pressurizado

**Desenvolvimento do modelo:** Para o desenvolvimento do modelo devemos aplicar a lei da conservação das massas para determinar a variação das concentrações dos componentes A e B e a variação da pressão do sistema. Considerando o sistema isotérmico e que o meio reacional se comporte como gás ideal, temos a dinâmica representada pelas Eq. 4.35 a 4.37.

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F_0 C_0}{V} - \frac{Cv C_A(t)}{V} \sqrt{\frac{(P(t)-P_D)RT}{P(t) \left[ \frac{C_A(t)}{C_A(t)+C_B(t)} M_A + \left(1 - \frac{C_A(t)}{C_A(t)+C_B(t)}\right) M_B \right]}} - k_1 C_A^{1,5} + 2k_2 C_B(t) \quad (\text{Eq. 4.35})$$

$$\frac{dC_B}{dt} = -\frac{Cv C_B(t)}{V} \sqrt{\frac{(P(t)-P_D)RT}{P(t) \left[ \frac{C_A(t)}{C_A(t)+C_B(t)} M_A + \left(1 - \frac{C_A(t)}{C_A(t)+C_B(t)}\right) M_B \right]}} + \frac{1}{2} k_1 C_A^{1,5} - k_2 C_B(t) \quad (\text{Eq. 4.36})$$

$$\frac{dP}{dt} = \frac{\rho_0 F_0 RT}{V \left[ \frac{C_A(t)}{C_A(t)+C_B(t)} M_A + \left(1 - \frac{C_A(t)}{C_A(t)+C_B(t)}\right) M_B \right]} - Cv \sqrt{\frac{(P(t)-P_D)RT}{P(t) \left[ \frac{C_A(t)}{C_A(t)+C_B(t)} M_A + \left(1 - \frac{C_A(t)}{C_A(t)+C_B(t)}\right) M_B \right]}} \frac{P(t)}{V} \quad (\text{Eq. 4.37})$$

Sendo: C – concentração do componente A e B; Cv – constante da válvula; F0 – vazão volumétrica na alimentação do reator; k – constante da taxa de reação (1 – reação direta, 2 – reação inversa); M – massa molar dos componentes A e B; P – pressão do reator; P<sub>D</sub> – pressão no vaso de armazenamento; R – constante universal dos gases; T – temperatura do reator; V – volume do reator.

## Caso 12: Reator de membrana isotérmico e isobárico

Descrição do problema: Reatores de membranas podem ser utilizados para garantir um maior rendimento de reações que são altamente reversíveis em um determinado intervalo de temperatura. Considere que a reação, em fase gasosa, elementar de segunda ordem reversível  $2A \leftrightarrow B + 2C$  ocorre em um reator de membrana (Figura 4.12), onde o componente A puro entra no reator e o componente B (produto de interesse) se difunde pela membrana. Devido ao fato dos componentes A e B possuírem moléculas de tamanhos próximos, A também se difunde pela membrana. Como se trata de uma reação elementar podemos descrever a taxa de reação como sendo:  $r_A = k \left( C_A - \frac{C_B C_C}{K_C} \right)$ . As taxas de transferência de massa podem ser escritas como:  $R_i = k_{ci} C_i$  (adaptado de [Fogler, 2002](#)). Determine o(s) modelo(s) que descreva(m) o sistema descrito.

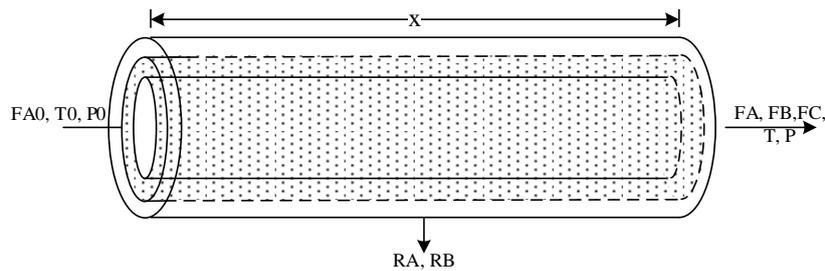


Figura 4. 12 – Reator tubular de membrana

**Desenvolvimento do modelo:** Assim como no Caso 10, estamos interessados em determinar a variação dos componentes envolvidos na reação ao longo do reator. Considerando que o sistema seja isotérmico e isobárico e que as concentrações podem ser expressas pela equação de estado  $C_i = C_{T0} \left( \frac{F_i}{F_T} \right) \left( \frac{P}{P_0} \right) \left( \frac{T_0}{T} \right)$ , aplicando a lei da conservação das massas teremos o modelo de parâmetros distribuídos representados pelas Eq. 4.38 a 4.40.

$$\frac{dF_A}{dx} = -A_{Tim} k \left( C_{T0} \frac{F_A(x)}{F_T(x)} - \frac{C_{T0} \frac{F_B(x)}{F_T(x)} C_{T0} \frac{F_C(x)}{F_T(x)}}{K_C} \right)^2 - k_{CA} \left( C_{T0} \frac{F_A(x)}{F_T(x)} \right) \quad (\text{Eq. 4.38})$$

$$\frac{dF_B}{dx} = A_{Tim} \frac{k}{2} \left( C_{T0} \frac{F_A(x)}{F_T(x)} - \frac{C_{T0} \frac{F_B(x)}{F_T(x)} C_{T0} \frac{F_C(x)}{F_T(x)}}{K_C} \right)^2 - k_{CB} \left( C_{T0} \frac{F_B(x)}{F_T(x)} \right) \quad (\text{Eq. 4.39})$$

$$\frac{dF_C}{dx} = A_{Tim} k \left( C_{T0} \frac{F_A(x)}{F_T(x)} - \frac{C_{T0} \frac{F_B(x)}{F_T(x)} C_{T0} \frac{F_C(x)}{F_T(x)}}{K_C} \right)^2 \quad (\text{Eq. 4.40})$$

Sendo: A<sub>Tim</sub> – área de seção transversal (interna) da membrana; C<sub>T0</sub> – concentração total na alimentação; F – vazão molar (A, B e C – dos componente; T – total); k – constante da taxa de reação; K<sub>C</sub> – constante de equilíbrio químico; k<sub>ci</sub> – taxa de transferência de massa (i – componentes A e B)

### Caso 13: Bioreatores

**Descrição do problema:** A fermentação de glicose para produção de etanol pode ser conduzida em um reator batelada e o crescimento celular pode ser representado, de forma resumida, por:  $S \xrightarrow{\text{células}} Y_{C/S}C + Y_{P/S}P$ . Sabendo que a taxa de crescimento celular pode ser dada pela equação de Monod com inibição  $r_g = k_{obs} \frac{\mu_{max} C_S(t) C_C(t)}{K_S + C_S(t)}$  onde a inibição  $k_{obs} = \left(1 - \frac{C_P(t)}{C_P^*}\right)^n$  e a taxa de morte celular e a taxa de consumo de substrato, respectivamente, por  $r_d = k_d C_C(t)$  e  $r_{sm} = m C_C(t)$ , desenvolva o(s) modelo(s) que descreva(m) a dinâmica do sistema (adaptado de [Fogler, 2002](#)).

**Desenvolvimento do modelo:** Aplicando a lei da conservação das massas no sistema, termos a dinâmica sendo representada pelas Eq. 4.41 a 4.43.

$$\frac{dC_C}{dt} = \mu_{max} \left(1 - \frac{C_P(t)}{C_P^*}\right)^n \left(\frac{C_S(t) C_C(t)}{K_S + C_S(t)}\right) - k_d C_C(t) \tag{Eq. 4.41}$$

$$\frac{dC_S}{dt} = Y_{C/S} \mu_{max} \left(1 - \frac{C_P(t)}{C_P^*}\right)^n \left(\frac{C_S(t) C_C(t)}{K_S + C_S(t)}\right) - m C_C(t) \tag{Eq. 4.42}$$

$$\frac{dC_P}{dt} = Y_{P/S} \mu_{max} \left(1 - \frac{C_P(t)}{C_P^*}\right)^n \left(\frac{C_S(t) C_C(t)}{K_S + C_S(t)}\right) \tag{Eq. 4.43}$$

Sendo: C – concentração (C – células; P – produto; S – substrato);  $C_P^*$  – concentração de produto no qual o mecanismo cessa;  $k_d$  – taxa de morte celular;  $K_S$  – constante de Monod;  $m$  – coeficiente de manutenção celular;  $n$  – constante empírica da inibição;  $Y_{C/S}$  – coeficiente de rendimento que caracteriza o consumo de substrato para manutenção;  $Y_{P/S}$  – coeficiente de rendimento de produto,  $\mu_{max}$  – velocidade específica de crescimento máxima.

### Caso 14: Transferência de calor em uma barra metálica em regime transiente

**Descrição do problema:** Considere a barra metálica de comprimento  $z$  (m) e área transversal  $A_T$  (m<sup>2</sup>) representada pela Figura 4.13. Considerando que a barra possua um isolamento em seu perímetro desenvolva o modelo que represente o comportamento do sistema em regime transiente.

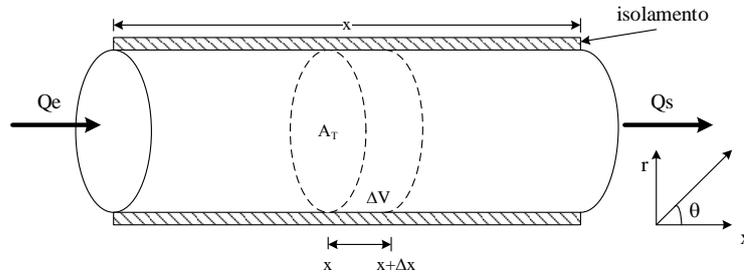


Figura 4. 13 – Barra metálica com isolamento

**Desenvolvimento do modelo:** O modelo desenvolvido será de parâmetros distribuídos, pois há variação da temperatura da barra ao longo de seu comprimento. Aplicando a lei da conservação de energia no sistema considerando que não há transferência de calor por convecção na barra (isolamento) e que o calor transferido ao logo da barra seja definido pela lei de Fourier podemos representar o sistema pela Eq. 4.44.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{\rho C_p} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{Eq. 4.44}$$

Sendo:  $C_p$  – calor específico,  $k$  – constante de troca de calor por condução,  $\rho$  - densidade do material.

Outra opção e chegarmos na Eq. 4.44 por meio da equação da continuidade de transferência de calor para coordenadas cilíndricas Eq. 4.45.

$$\rho C_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + G \tag{Eq. 4.45}$$

## Caso 15: Controle de nível em um tanque de armazenamento

Descrição do problema: Considere o sistema apresentado na Figura 4.14 onde se faz necessário realizar o controle de nível de um tanque de armazenamento. O tanque é alimentado por uma corrente  $F_0$  ( $\text{m}^3 \text{h}^{-1}$ ) e possui uma válvula de controle na saída regulando a vazão  $F$  ( $\text{m}^3 \text{h}^{-1}$ ) para manter o nível no setpoint ( $h_{SP}$ ) e para isso é necessário adicionar o modelo dinâmico do controlador no sistema.

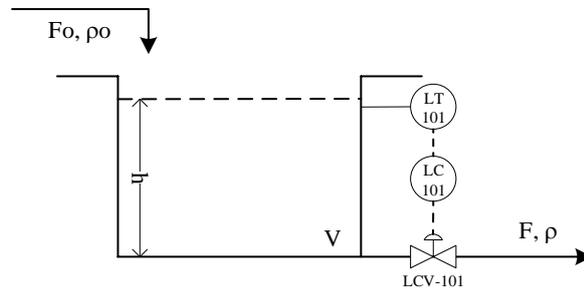


Figura 4. 14 – Tanque de armazenamento com controle de nível

**Desenvolvimento do modelo:** No problema apresentado devemos determinar a variação do nível do tanque aplicando a lei da conservação das massas e substituir o modelo dinâmico do controlador. O modelo dinâmico de um controlador PID (Proporcional-Integral-Derivativo) é representado pelas Eq. 4.46 e 4.47 e deve ser analisado em relação ao tipo de controlador desejado (P, PI ou PID). Considerando que: 1) o sistema seja isotérmico; 2) a vazão de saída é representada por  $F = C_v x \sqrt{h(t)}$  e; 3) o controle a ser utilizado é um PID, teremos como modelo que representa o sistema descrito com o controle a Eq. 4.48. Uma observação a ser feita é que não se pretende realizar estudo de controle e sim apresentar a possibilidade de incluir um controlador em um modelo dinâmico.

$$Y = Y_0 + K_C e(t) + \frac{K_C}{\tau_I} \int e(t) dt + K_C \tau_D \frac{de(t)}{dt} \quad (\text{Eq. 4.46})$$

$$e(t) = y_{SP} - y(t) \quad (\text{Eq. 4.47})$$

Sendo:  $e(t)$  – o desvio da variável controlada em relação ao valor de referência (setpoint);  $K_C$  – constante de ganho do controlador;  $y(t)$  – variável controlada;  $y_{SP}$  – valor de referência da variável controlada (setpoint);  $Y$  – variável manipulada;  $Y_0$  – valor da variável manipulada no estado estacionário;  $\tau_I$  – constante de tempo integral;  $\tau_D$  – constante de tempo derivativo.

$$A \frac{dh}{dt} = F_0 - C_v \sqrt{h(t)} \left[ x_0 + K_C (h_{SP} - h(t)) + \frac{K_C}{\tau_I} \int (h_{SP} - h(t)) dt + K_C \tau_D \frac{d(h_{SP} - h(t))}{dt} \right] \quad (\text{Eq. 4.48})$$

Sendo:  $A$  – área da seção transversal do tanque;  $C_v$  – constante da válvula;  $F_0$  – vazão volumétrica na entrada do tanque;  $h$  – nível do tanque;  $h_{SP}$  – valor de referência do nível do tanque;  $x_0$  – abertura da válvula no estado estacionário.



# Referências

- Aguiar, R. A., Franco, I. C., Leonardi, F., Lima, F. (2018). Fractional PID Controller Applied to a Chemical Plant with Level and pH Control. **Chemical Product and Process Modeling**, 13(4), 1-12.
- Aguirre, L. A. (2007). **Introdução à Identificação de Sistemas – Técnicas Lineares e Não-Lineares Aplicadas a Sistemas Reais**. Belo Horizonte: Editora UFMG.
- Arenales, S., Darezzo, A. (2015). **Cálculo numérico: aprendizagem com apoio de software**. São Paulo: Cengage Learning.
- Álvarez, A., Pizarro, C., García, R. Bueno, J. L., Lavín, A. G. (2016). Determination of kinetic parameters for biomass combustion. **Bioresource Technology**, 216, 36-43.
- Barg, C., Ferreira, J. M. P., Trierweiler, J. O., Secchi, A. R. (2000). Simulation and optimization of an industrial PSA unit. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, 17 (4-7), 695-704.
- Bequette, B. W. (1998). **Process Dynamics Modeling, Analysis, and Simulation**. New Jersey: Prattice Hall.
- Carpio, R. R., Miyosho, S. C., Elias, A. M., Furlan, F. F., Giordano, R. C., Secchi, A. R. (2021). Multi-objective optimization of a 1G-2G biorefinery: A tool towards economic and environmental viability. **Journal of Cleaner Production**, 284, 125431.
- Chapra, S. C. (2013). **Métodos numéricos aplicados com MATLAB® para engenheiros e cientistas**. Porto Alegre: AMGH Editora Ltda
- Dantas, T. S. S., Franco, I. C., Fileti, A. M. F., Silva, F. V. (2017). Dynamic linear modeling of a refrigeration process with electronic expansion valve. **International Journal of Refrigeration**, 75, 311-321.
- Eykhoﬀ, P. (1974). **System Identification: Parameter and State Estimation**. London: Wiley & Sons.
- Finlayson, B. A. (2003). **Nonlinear Analysis in Chemical Engineering**. Washington: Ravenna Park Publishing, Inc.
- Fogler, H. S. (2002). **Elements of Chemical Reaction Engineering**. New Jersey: Prentice-Hall Book Company.
- Fonseca, R. R., Fileti, A. M. F., Franco, I. C., Silva, F. V. (2016). Experimental Fuzzy/Split-Range Control: Novel Strategy for Biodiesel Batch Reactor Temperature Control. **Chemical Engineering Communications**, 203(9), 1251-1259.
- Fonseca, R. R., Franco, I. C., Thompson Jr, J. P., Silva, F. V. (2018). Turbidity control on dissolved air flotation process using fuzzy logic. **Water Science and Technology**, 78(12), 2586–2596.
- Fonseca, R. R., Sêncio, R. R., Franco, I. C., Silva, F. V. (2018). An Adaptive Fuzzy Feedforward-Feedback Control System Applied to a Saccharification Process. **Chemical Product and Process Modeling**, 13(4), 1-14.
- Franco, I. C., Schmitz, J. E., Costa, T. V., Fileti, A. M. F., Silva, F. V. (2017). Development of a Predictive Control Based on Takagi-Sugeno Model Applied in a Nonlinear System of Industrial Refrigeration. **Chemical Engineering Communications**, 204(1), 39-54.
- Garcia, C. (2005). **Modelagem e Simulação de Processos Industriais e de Sistemas Eletromecânico**. São Paulo: Edusp.
- Gilat, A., Subramaniam, V. (2008) **Métodos numéricos para engenheiros e cientistas: uma introdução com aplicação usando MATLAB**. Porto Alegre: Bookman.
- Ingham, J.; Dunn, I. J.; Heinze, E.; Přenosil, J. E.; Snape, J. B. (2007). **Chemical Engineering Dynamics – An Introduction to Modelling and Computer Simulation**. Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co.
- Jana, A. K. (2011). **Chemical Process Modelling and Computer Simulation**. Delhi: PHI Learning Private Limited.
- Lambert, J. D. (1991). **Numerical Methods For Ordinary Differential Systems: The Initial Value Problem**. New York: John Wiley & Sons.
- Luyben, W. L. (1996). **Process Modeling, Simulation, and Control for Chemical Engineers**. New York: The MacGraw-Hill Companies.
- Luyben, W. L., Luyben, M. L. (1997). **Essentials of Process Control**, New York: The MacGraw-Hill Companies.
- Maia, J. G. S. S., Demuner, R. B., Secchi, A. R., Melo, P. A., Carmo, R. W., Gusmão, G. S. (2018). Process Modeling and Simulation of an Industrial-Scale Plant for Green Ethylene Production. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, 57(18), 6401-6416.
- Maya, P. A., Leonardi, F. (2014). **Controle Essencial**. São Paulo: Pearson Education do Brasil.
- Moreau, V., Renotte, Y., Lion, Y. (2002). Characterization of DuPont photopolymer: determination of kinetic parameters in a diffusion model. **Applied Optics**, 41(17), 3427–3435.
- Mota, A. S., Menezes, M. R., Schmitz, J. E., Costa, T. V., Silva, F. V., Franco, I. C. (2015). Identification and Online Validation of a pH Neutralization Process Using an Adaptive Network-Based Fuzzy Inference System. **Chemical Engineering Communications**, 203(4), 516-526.
- Ogunnaike, B. A., Ray, W. H. (1994). **Process Dynamics, Modeling, and Control**. New York: Oxford University Press.
- Pawlowsky, U., Howell, J. A. (1973). Mixed culture biooxidation of phenol. I. Determination of kinetic parameters. **Biotechnology and Bioengineering**, 15(5), 889-896.

Referências

- Rice, R. G., Do, D. D. (2012). **Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers**. New Jersey: John Wiley & Sons.
- Ruggiero, M. G., Lopes, V. L. R. (1996). **Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais**. São Paulo: Perarson Makron Books.
- Seborg, D. E., Edgar, T. F., Mellichamp, D. A. (2011). **Process Dynamics and Control**. John Wiley & Sons.
- Silva, B. F., Schmitz, J. E., Franco, I. C., Silva, F. V. (2019). Plantwide control systems design and evaluation applied to biodiesel production. **Biofuels**, 1-8.
- Stephanopoulos, G. (1990). **Chemical Process Control: An Introduction to Theory and Practice**. New Jersey: Prentice Hall.
- Verma, A. K. (2015). **Process Modelling and Simulation in Chemical, Biochemical and Environmental Engineering**. Boca Raton: Taylor & Francis Group.



Modelagem e Simulação



**JCEC**

THE JOURNAL OF ENGINEERING  
AND EXACT SCIENCES

**ISSN 2527-1075**