



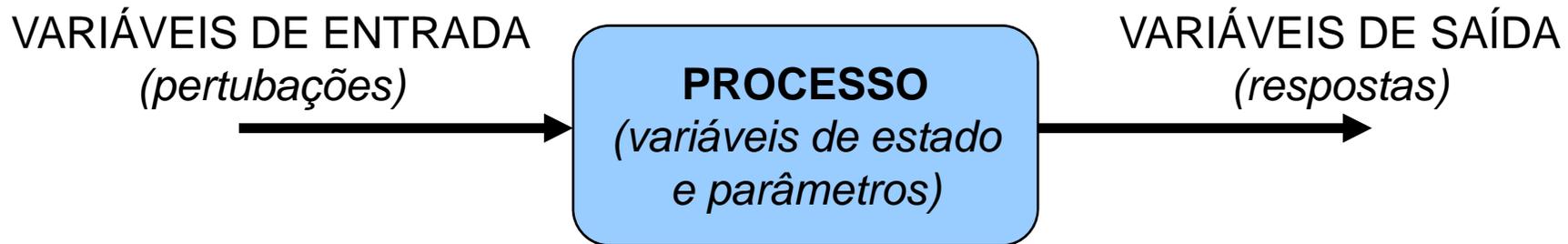
Universidade Federal do Rio de Janeiro
COPPE – Programa de Engenharia Química

COQ 790 – ANÁLISE DE SISTEMAS DA ENGENHARIA QUÍMICA

AULA 2:

*Variáveis de processo; Classificação de modelos;
Equações constitutivas; Modelagem do CSTR não
isotérmico*

Classificação de Variáveis em um Modelo Matemático



Variáveis de estado são aquelas que definem plenamente o processo. Exemplos são concentrações ou pressões parciais de espécies, temperatura e pressão do meio *etc.* São as variáveis descritas em balanços de massa, energia e quantidade de movimento, por exemplo.

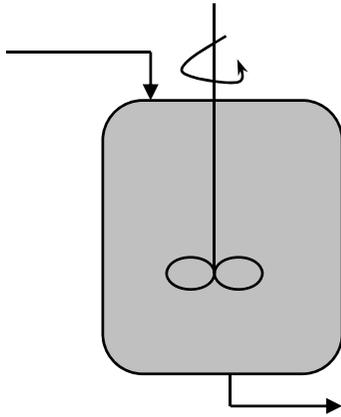
Variáveis de entrada são aquelas que podem ser usadas para causar perturbações à operação do processo. Exemplos são valores de variáveis na corrente de alimentação, vazões, velocidade de agitação, temperatura de operação (em sistemas isotérmicos) *etc.*

Variáveis de saída são aquelas escolhidas para serem usadas na análise do processo: podem ser as próprias variáveis de estado como também o resultado de um cálculo realizado com estas. Por exemplo, uma variável importante em um processo pode ser a viscosidade dos produtos, que pode ser obtida a partir das concentrações e temperatura na saída do processo. Em casos como este, as variáveis de saída podem ser determinadas *a posteriori*, após a obtenção dos valores das variáveis de estado.

Os **parâmetros** são grandezas que completam os modelos de processo e que não variam durante a operação (ou simulação). Exemplos são constantes cinéticas, dados estequiométricos, coeficientes nas equações que relacionam densidade e calor específico com temperatura *etc.*

Classificação de Variáveis em um Modelo Matemático: Exemplo

- Reação $A + 2B \rightarrow P$ levada a cabo em um tanque agitado.



$$V \frac{dC_A}{dt} = F_e(C_{Ae} - C_A) + Vr_A$$

$$C_A(t=0) = C_{A0}$$

$$r_A = -k(T)C_A C_B$$

$$V \frac{dC_B}{dt} = F_e(C_{Be} - C_B) + Vr_B$$

$$C_B(t=0) = C_{B0}$$

$$r_B = -2k(T)C_A C_B$$

$$V \frac{dC_P}{dt} = F_e(C_{Pe} - C_P) + Vr_P$$

$$C_P(t=0) = C_{P0}$$

$$r_P = k(T)C_A C_B$$

$$X_A = \frac{C_{Ae} - C_A}{C_{Ae}}$$

$$X_B = \frac{C_{Be} - C_B}{C_{Be}}$$

Variáveis de estado: C_A , C_B e C_P ;

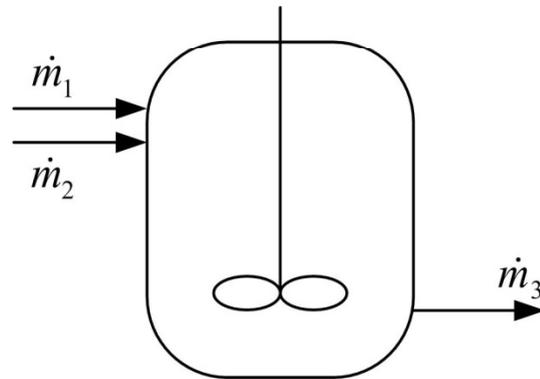
Variáveis de entrada: C_{Ae} , C_{Be} , C_{Pe} , F_e e T ;

Variáveis de saída: X_A e X_B ;

Parâmetro: k_0 , E_a e V ;

Classificação de Modelos

- Empíricos x Teóricos (Fenomenológicos)



Modelo matemático fenomenológico:

$$\dot{m}_3 = \dot{m}_1 + \dot{m}_2$$

Dados coletados:

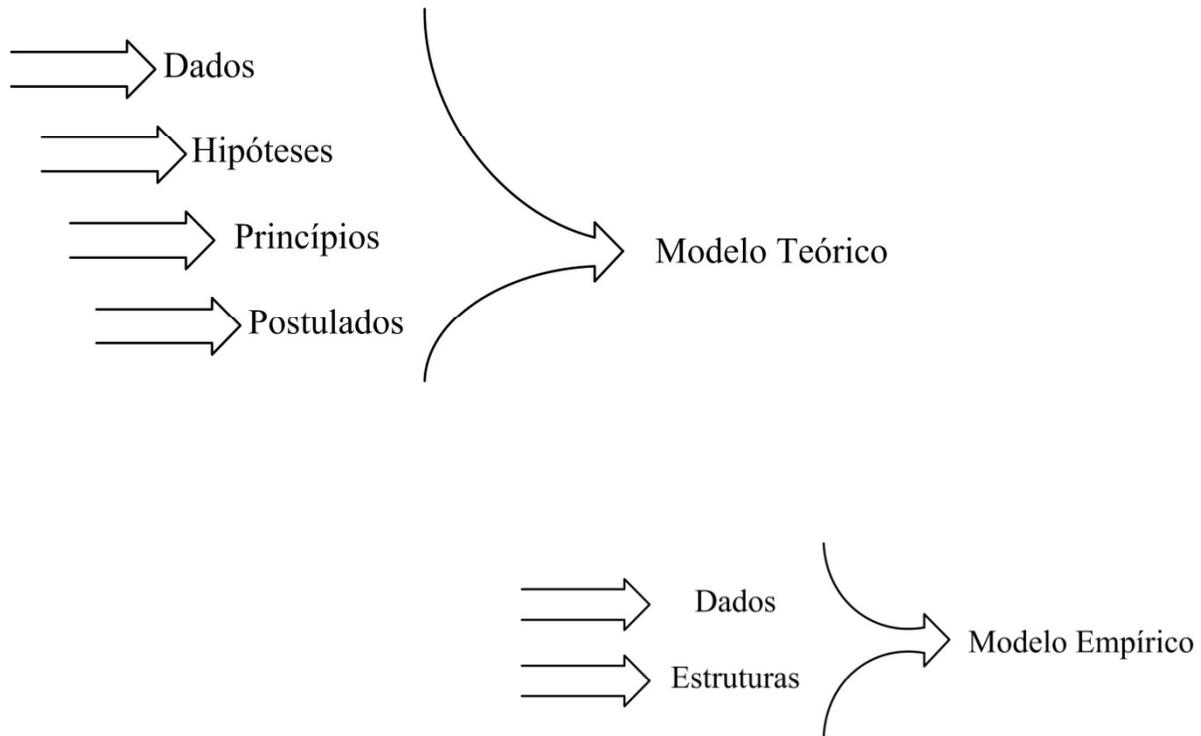
\dot{m}_1	(kg/h)	1.0	2.0	2.0
\dot{m}_2	(kg/h)	2.0	2.0	1.0
\dot{m}_3	(kg/h)	3.1	3.9	2.9

Modelo empírico: $\dot{m}_3 = \alpha \dot{m}_1 + \beta \dot{m}_2 \xrightarrow[\text{linear}]{\text{regressão}} \dot{m}_3 = 0.8882\dot{m}_1 + 1.08882\dot{m}_2$

\dot{m}_3 (kg/h)	3.1	3.9	2.9	(dado experimental)
\dot{m}_3 (kg/h)	3.0 (-0.1)	4.0 (+0.1)	3.0 (+0.1)	(modelo teórico)
\dot{m}_3 (kg/h)	3.06 (-0.04)	3.95 (+0.05)	2.86 (-0.04)	(modelo empírico)

Classificação de Modelos

- Empíricos x Teóricos (Fenomenológicos)



Classificação de Modelos

- Lineares x Não Lineares

Seja: $\mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$

onde \mathbf{x} é o vetor de *variáveis independentes* e \mathbf{y} o vetor de *variáveis dependentes*, não necessariamente com a mesma dimensão, e \mathbf{f} é o vetor de funções, com a mesma dimensão de \mathbf{y} .

O modelo matemático **explícito** da equação acima é linear se:

$$\mathbf{f}(\alpha\mathbf{u} + \beta\mathbf{w}) = \alpha\mathbf{f}(\mathbf{u}) + \beta\mathbf{f}(\mathbf{w})$$

onde \mathbf{u} e \mathbf{w} são vetores quaisquer da mesma dimensão que \mathbf{x} e α e β são escalares.

Seja: $\mathbf{g}(\mathbf{z}) = \mathbf{0}$ com $\mathbf{z} = \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix}$

O modelo matemático **implícito** da equação acima é linear se:

$$\mathbf{g}(\alpha\mathbf{u} + \beta\mathbf{w}) = \alpha\mathbf{g}(\mathbf{u}) + \beta\mathbf{g}(\mathbf{w})$$

Classificação de Modelos

- Determinísticos x Estocásticos

Um modelo **determinístico**: $\frac{dy}{dt} = -y$, com $y(0)=y_0 \Rightarrow y(t)=y_0e^{-t}$

- ✓ Na EQ, esse modelos vêm dos balanços de massa, energia e quantidade de movimento (uso de **princípios físico-químicos**), de balanços populacionais (descrição de **populações de indivíduos**) e de modelos empíricos (**ajuste empírico** de dados de planta)

Modelos **estocásticos**: possuem total ou parcialmente **variáveis probabilísticas**.

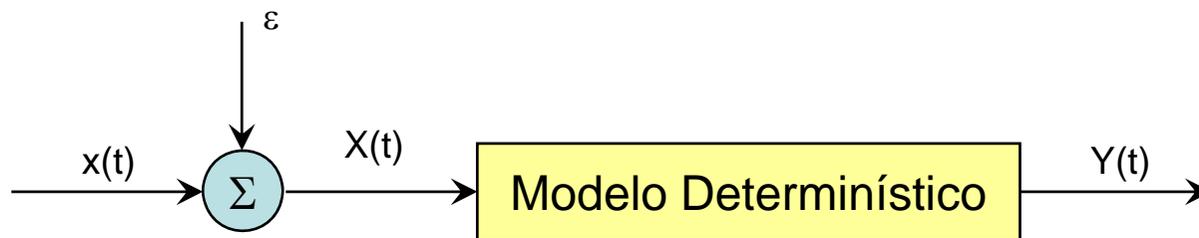
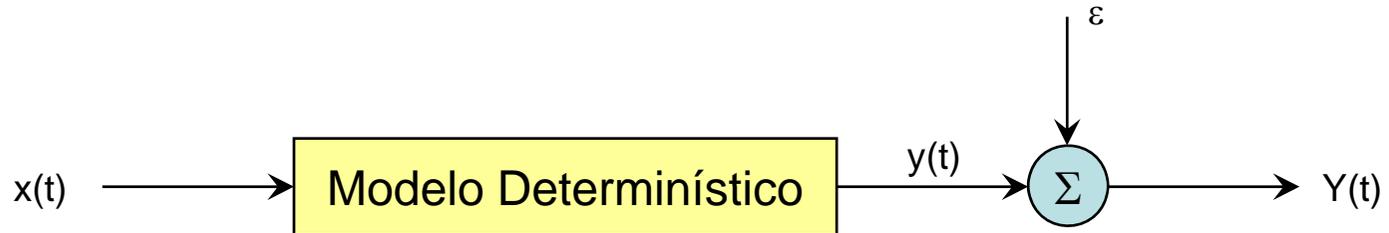
- ✓ Na vida real, medições de variáveis resultam em valores que podem variar de uma repetição a outra;
- ✓ Essas variáveis são ditas *aleatórias, estocásticas, estatísticas* ou *probabilísticas*;

Mas... porque isso ocorre?

- ✓ Em alguns casos a aleatoriedade reside no próprio fenômeno físico;
- ✓ Em outros casos, existe informação insuficiente sobre a variável ou falta de técnicas para obter a informação requerida

Processos químicos e bioquímicos convivem com sinais ruidosos durante sua operação!

Sejam: x e y – variáveis determinísticas;
 X e Y – variáveis aleatórias;
 ε – erro



Classificação de Modelos

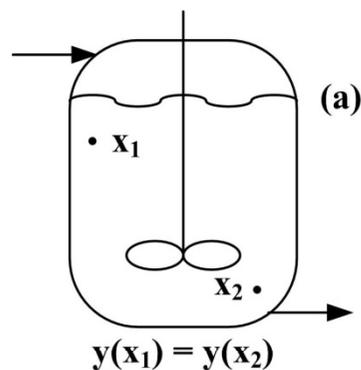
- Concentrados x Distribuídos

Como massa, energia e quantidade de movimento se distribuem no espaço?

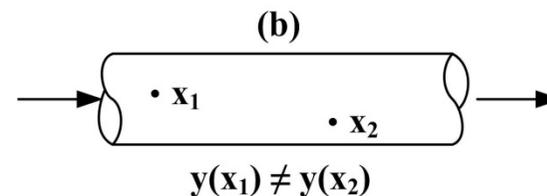
Em um **sistema concentrado**, *não existem* variações **espaciais** nos valores das variáveis do processo, ou essas variações são desprezíveis. Uma variável **se concentra** em um único valor ao longo do espaço.

Em um **sistema distribuído**, *existem* variações **espaciais** nos valores das variáveis do processo. Uma variável **se distribui** em valores ao longo do espaço.

Arquétipos desses sistemas:



O CSTR (*ideal*)



O PFR (*ideal*)

Exemplo: o estágio de equilíbrio em uma coluna de destilação, extração e processos similares:

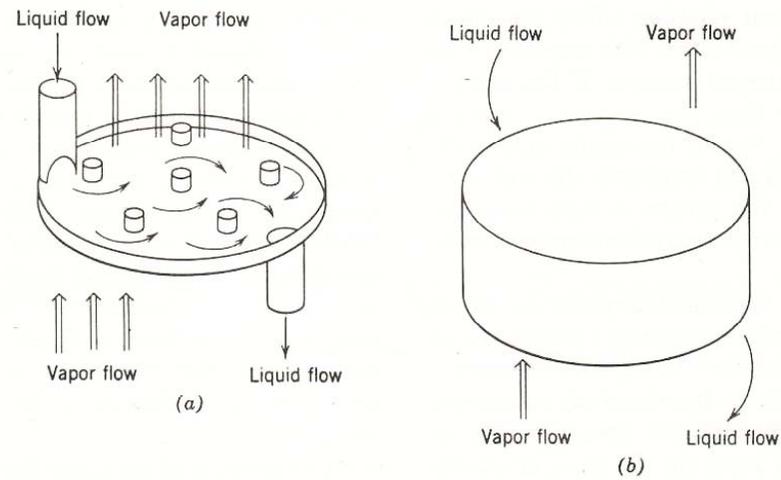


FIGURE 3.1-1 Comparison of lumped and distributed-parameter visualization of a distillation tray. (a) Actual plate with complex flow patterns and resulting variation in properties from point to point; distributed parameter. (b) Idealized equilibrium stage ignoring all internal variations; lumped parameter.

Exemplo: tanque de mistura para mistura de fluidos ou para reações químicas

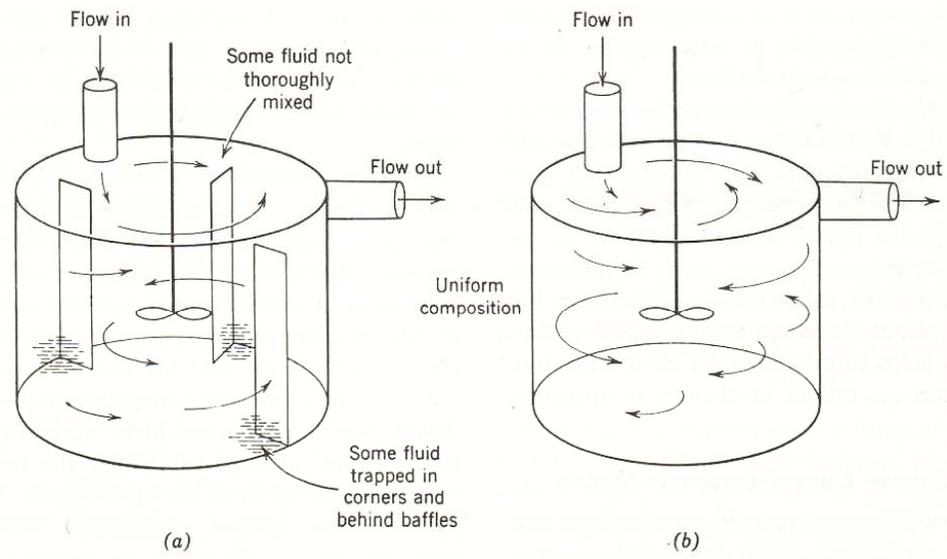


FIGURE 3.1-2 Lumped-parameter versus distributed-parameter analysis of mixing. (a) Actual mixing tank with variations in concentration from point to point; distributed parameter. (b) Idealized mixing tank with fluid assumed uniform in composition throughout; lumped parameter.

Exemplo: Reação química em um tubo

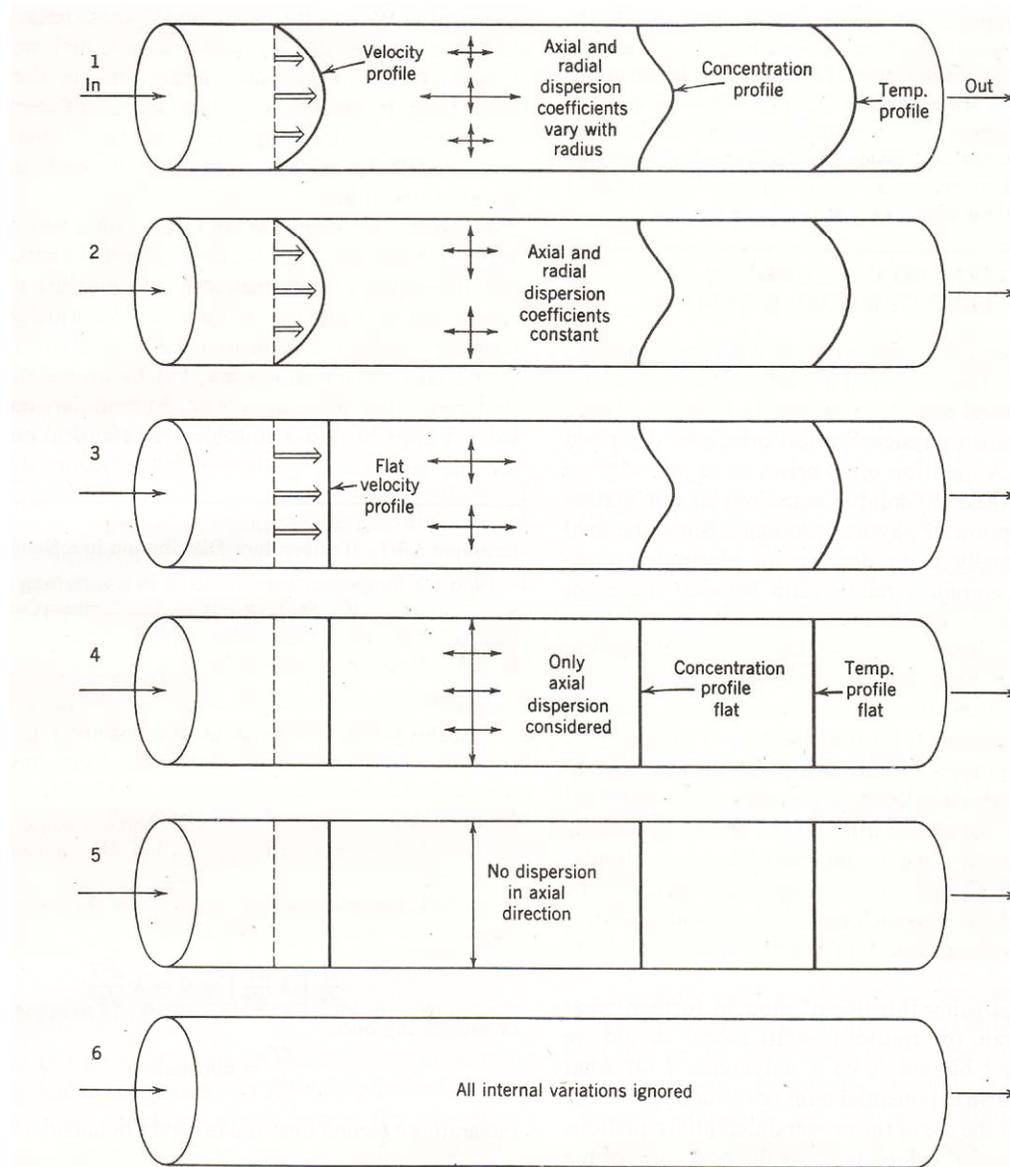


FIGURE E3.2-1 Physical situation corresponding to equations in Table 3.2-2.

TABLE E3.2-1 MODELS USED TO DESCRIBE A TUBULAR CHEMICAL REACTOR WITH STEADY-STATE TURBULENT FLOW^a

$A + B + \dots \rightarrow R + S + \dots$	
Form of Balance Relation	Boundary Conditions
1. Multiple gradient, with velocity profile and radially variable axial and radial dispersion coefficients.	
$v_z(r) \frac{\partial c_i}{\partial z} = \bar{D}_z(r) \frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} r \bar{D}_R(r) \frac{\partial c_i}{\partial r} \right) + R_i$ $\rho C_p \left[v_z(r) \frac{\partial T}{\partial z} \right] = \bar{k}_z(r) \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} r \bar{k}_R(r) \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \Delta H_r R_A$	$v_z(r)c_{i0} = v_z(r)c_i(0, r) - \bar{D}_z(r) \frac{\partial c_i(0, r)}{\partial z}$ $\frac{\partial c_i}{\partial z}(L, r) = 0$ $\frac{\partial c_i}{\partial r}(z, 0) = 0$ $\frac{\partial c_i}{\partial r}(z, R) = 0$ $v_z(r)T_0 = v_z(r)T(0, r) - \frac{\bar{k}_z(r)}{\rho C_p} \frac{\partial T(0, r)}{\partial z}$ $\frac{\partial T}{\partial z}(L, r) = 0$ $\frac{\partial T}{\partial r}(z, 0) = 0$ $\frac{\partial T}{\partial r}(z, R) = \frac{U}{\bar{k}_R} [T_S - T(z, R)]$
2. Multiple gradient, with velocity profile and constant axial and radial dispersion coefficients.	
$v_z(r) \frac{\partial c_i}{\partial z} = \bar{D}_z \frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2} + \frac{\bar{D}_R}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_i}{\partial r} \right) + R_i$ $\rho C_p \left[v_z(r) \frac{\partial T}{\partial z} \right] = \bar{k}_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{\bar{k}_R}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \Delta H_r R_A$	$\bar{D}_z(r) \rightarrow \bar{D}_z$ $\bar{k}_z(r) \rightarrow \bar{k}_z$ <p>Same form as in 1 with</p>
3. Multiple gradient, with constant velocity.	
$v_z \frac{\partial c_i}{\partial z} = \bar{D}_L \frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2} + \frac{\bar{D}_R}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_i}{\partial r} \right) + R_i$ $\rho C_p \left[v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right] = \bar{k}_L \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{\bar{k}_R}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \Delta H_r R_A$	$v_z(r) \rightarrow v_z$ <p>Same form as in 2 with $\bar{D}_z \rightarrow \bar{D}_L^*$</p> $\bar{k}_z \rightarrow \bar{k}_L$
4. Multiple gradient, ignoring radial gradients.	
$v_z \frac{dc_i}{dz} = \bar{D}_L \frac{d^2 c_i}{dz^2} + R_i$ $\rho C_p \left[v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right] = \bar{k}_L \frac{d^2 T}{dz^2} + \Delta H_r R_A + U \frac{P}{S} (T_S - T)$	$v_z c_{i0} = v_z c_i(0) - \bar{D}_L \frac{dc_i(0)}{dz}$ $\frac{dc_i}{dz}(L) = 0$ $v_z T_0 = v_z T(0) - \frac{\bar{k}_L}{\rho C_p} \frac{dT(0)}{dz}$ $\frac{dT(L)}{dz} = 0$
5. Maximum gradient, ignoring all dispersion.	
$v_z \frac{dc_i}{dz} = R_i$ $\rho C_p \left[v_z \frac{dT}{dz} \right] = +\Delta H_r R_A + U \frac{P}{S} (T_S - T)$	$c_{i,0} = c_i(0)$ $T_0 = T(0)$
6. Macroscopic material and heat balances assuming conversion known.	
$\Delta(c_i v_z S) = R_{i,av} V_{tot}$ $\Delta(\rho C_p T v_z S) = +\Delta H_r R_{i,av} V_{tot} + U A_{tot} (T_S - T)$	<p>None</p>

- Estacionários x Dinâmicos

Modelos **estacionários**:

- ✓ Taxas de acúmulo nos vários balanços de interesse são iguais a zero;
- ✓ Historicamente, as técnicas clássicas de projeto em EQ para operações unitárias, reatores químicos *etc.* lidaram quase inteiramente com operações em estado estacionário;

Modelos **dinâmicos**:

- ✓ Quando controle de processos se tornou amplamente considerado, observou-se que a operação em regime transiente deveria receber mais importância;
- ✓ Projetar a planta em EE e, então, adicionar os sistemas de controle foram consideradas práticas inadequadas;
- ✓ Assim, tanto as unidades quanto o controle deveriam ser projetados simultaneamente.

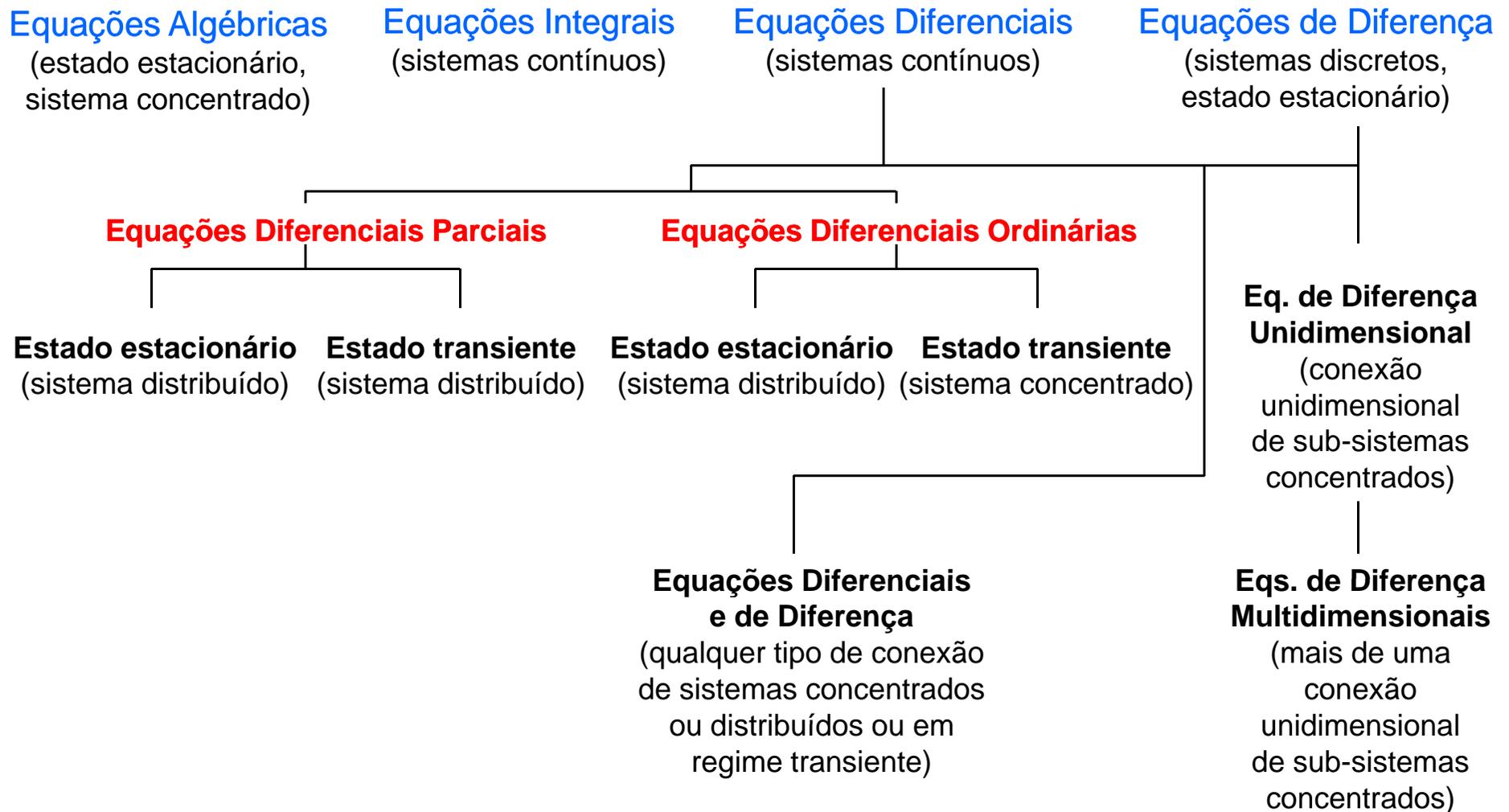
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} - kC$$

$$C(0, z) = C_0(z), \quad C(t, 0) = C_0(t), \quad \left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{z=L} = 0$$

Classificação de modelos fenomenológicos quanto à estrutura matemática:

Tipo de equações	Caso em que se aplica
Equações algébricas	modelo estacionário de sistemas concentrados
Equações diferenciais ordinárias	(1) modelo dinâmico de sistemas concentrados – problemas de condição inicial; (2) modelo estacionário de sistemas distribuídos em apenas uma direção espacial – problemas de valores no contorno; (3) modelo dinâmico de sistemas distribuídos após processo de discretização nas direções espaciais – problemas de condições iniciais.
Equações diferenciais parciais	(1) modelo estacionário de sistemas distribuídos em mais de uma variável espacial; (2) modelo dinâmico de sistemas distribuídos.
Equações de diferenças	(1) modelo estacionário de sistemas em estágios; (2) modelo estacionário de sistemas distribuídos após processo de discretização nas direções espaciais.
Equações diferenciais de diferenças	(1) modelo dinâmico de sistemas em estágios; (2) modelo dinâmico de sistemas distribuídos após processo de discretização nas direções espaciais; (3) modelo dinâmico de sistemas de polimerização com balanços de todas as espécies poliméricas envolvidas (dimensão infinita).

Classificação de modelos fenomenológicos quanto à estrutura matemática:



Equações Constitutivas

São equações auxiliares que completam o modelo matemático fornecendo relações entre as suas variáveis.

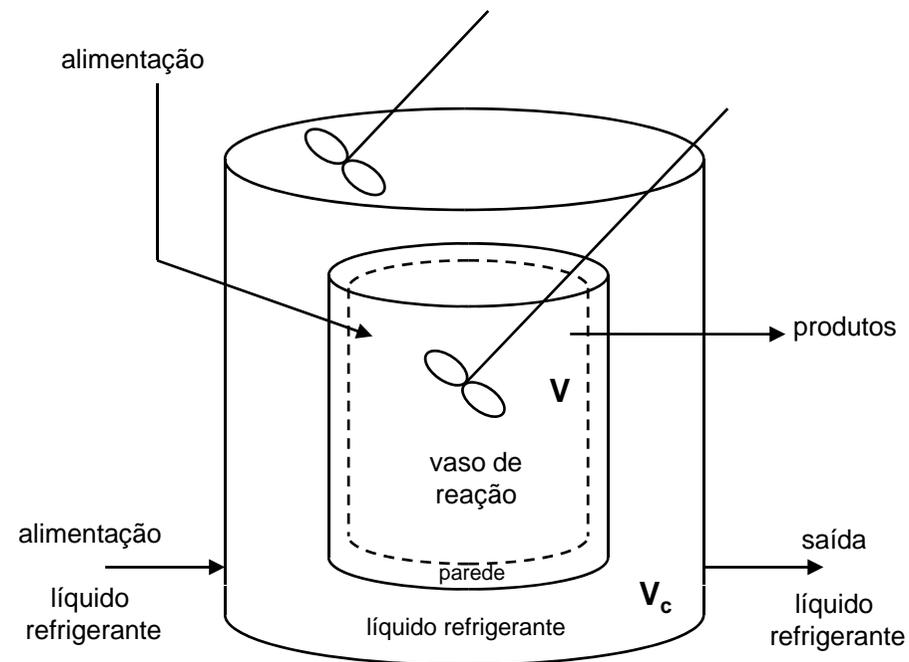
Exemplos:

- *Equações de estado:* $Pv = RT \quad \left(P + \frac{a}{v^2} \right) (v - b) = RT$
- *Taxas de reação:* $r_A = -kC_A C_B^2$
- *Relações de equilíbrio:* $y_i = K_i x_i$
- *Taxas de transferência de calor:* $Q = UA\Delta T$
- *Fluxo através de válvulas:* $F = C_v f(x) \sqrt{\frac{\Delta P_v}{\rho}}$

Exemplos de Modelos de Processos

Modelagem Matemática do CSTR Não Isotérmico

- O processo:



Modelagem Matemática do CSTR Não Isotérmico

- Hipóteses simplificadoras:

H0: Hipótese fundamental que agrega a aplicabilidade de todas as leis físicas, como a conservação da massa e energia ou a lei de Fourier para a condução de calor.

H1: A mistura é perfeita, de modo que as concentrações C_j , a temperatura da reação T e T_c , a temperatura da camisa de resfriamento, são todas independentes da posição, embora possam ser função do tempo. Os volumes V e V_c são constantes, como também as vazões volumétricas q_j e a temperatura das correntes de alimentação, T_{jf} . O trabalho realizado pelas palhetas de agitação pode ser ignorado.

H2: A taxa de reação é uma função $r(C_1, \dots, C_s, T)$ de modo que a taxa de variação no número de moles de A_j , por unidade de volume, devido apenas à reação química, é $\alpha_j r$.

H3: A transferência de calor para os lados interno e externo da parede do reator, sendo as temperaturas de superfície denotadas por T_i e T_o , respectivamente, pode ser descrita por coeficientes de transferência h_i e h_o , de modo que o calor transferido por unidade de área é dado por $h_i(T-T_i)$ e $h_o(T_o-T_c)$, respectivamente.

H4: A capacidade calorífica da mistura reacional não varia significativamente.

H5: O sistema está em estado estacionário.

H6: A curvatura da parede é desprezível e suas quinas podem ser ignoradas.

H7: A condutividade térmica da parede é extremamente elevada.

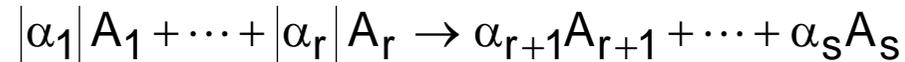
H8: A capacidade calorífica da parede é desprezível.

H9: A resposta da camisa de resfriamento é virtualmente instantânea.

H10: A reação é de primeira ordem e irreversível como relação ao componente-chave.

Modelagem Matemática do CSTR Não Isotérmico

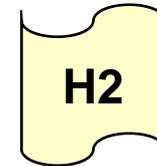
- A reação:



α_j = coeficiente estequiométrico de A_j (>0 para produto, <0 para reagente)

- Consideremos A_1 o componente-chave ou reagente limitante:

$r(C_1, \dots, C_s, T)$ = taxa de reação do componente-chave com $|\alpha_1|=1$



Logo: $r_j = \alpha_j r(C_1, \dots, C_s, T)$ para $j=1, \dots, s$.

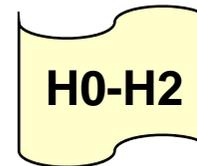
H2: A taxa de reação é uma função $r(C_1, \dots, C_s, T)$ de modo que a taxa de variação no número de moles de A_j , por unidade de volume, devido apenas à reação química, é $\alpha_j r$.

Modelagem Matemática do CSTR Não Isotérmico

- Balanço molar da espécie j:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de acúmulo} \\ \text{de mols de } A_j \\ \text{no reator} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de} \\ \text{alimentação} \\ \text{de } A_j \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de} \\ \text{retirada} \\ \text{de } A_j \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de formação} \\ \text{ou consumo de} \\ A_j \text{ por reação} \end{array} \right\}$$

$$V \frac{dC_j}{dt} = qC_{jf} - qC_j + \alpha_j V r(C_1, \dots, C_s, T)$$



H0: Hipótese fundamental que agrega a aplicabilidade de todas as leis físicas, como a conservação da massa e energia ou a lei de Fourier para a condução de calor.

H1: A mistura é perfeita, de modo que as concentrações C_j , a temperatura da reação T e T_c , a temperatura da camisa de resfriamento, são todas independentes da posição, embora possam ser função do tempo. Os volumes V e V_c são constantes, como também as vazões volumétricas q_j e a temperatura das correntes de alimentação, T_{jf} . O trabalho realizado pelas palhetas de agitação pode ser ignorado.

Modelagem Matemática do CSTR Não Isotérmico

- Balanço de energia da mistura reacional:

$$V \frac{d}{dt} \sum_{j=1}^s C_j h_j = q \sum_{j=1}^s C_{j_f} h_{j_f} - q \sum_{j=1}^s C_j h_j - Ah(T - T_c)$$



h_j = entalpia por mol da espécie j

- Rearranjos:

$$V \frac{dC_j}{dt} = qC_{jf} - qC_j + \alpha_j Vr(C_1, \dots, C_s, T)$$

$$Vh_j \frac{dC_j}{dt} = qC_{jf}h_j - qC_jh_j + \alpha_jh_j Vr(C_1, \dots, C_s, T)$$

$$V \sum_{j=1}^s h_j \frac{dC_j}{dt} = q \sum_{j=1}^s C_{jf}h_j - q \sum_{j=1}^s C_jh_j + Vr(C_1, \dots, C_s, T) \sum_{j=1}^s \alpha_jh_j$$

$$V \frac{d}{dt} \sum_{j=1}^s C_jh_j = q \sum_{j=1}^s C_{jf}h_{jf} - q \sum_{j=1}^s C_jh_j - Ah(T - T_c)$$

$$V \sum_{j=1}^s \frac{dC_jh_j}{dt} = q \sum_{j=1}^s C_{jf}h_{jf} - q \sum_{j=1}^s C_jh_j - Ah(T - T_c)$$

$$V \sum_{j=1}^s C_j \frac{dh_j}{dt} + V \sum_{j=1}^s h_j \frac{dC_j}{dt} = q \sum_{j=1}^s C_{jf}h_{jf} - q \sum_{j=1}^s C_jh_j - Ah(T - T_c)$$

$$V \sum_{j=1}^s C_j \frac{dh_j}{dt} + V \sum_{j=1}^s h_j \frac{dC_j}{dt} = q \sum_{j=1}^s C_{jf} h_{jf} - q \sum_{j=1}^s C_j h_j - Ah(T - T_c)$$

$$V \sum_{j=1}^s h_j \frac{dC_j}{dt} = q \sum_{j=1}^s C_{jf} h_j - q \sum_{j=1}^s C_j h_j + Vr(C_1, \dots, C_s, T) \sum_{j=1}^s \alpha_j h_j$$

$$V \sum_{j=1}^s C_j \frac{dh_j}{dt} = q \sum_{j=1}^s C_{jf} (h_{jf} - h_j) - \left(\sum_{j=1}^s \alpha_j h_j \right) Vr(C_1, \dots, C_s, T) - Ah(T - T_c)$$

- Agora vejam:

$$\sum_{j=1}^s \alpha_j h_j = \text{variação de entalpia devido à reação química } (\Delta H)$$

- Mais:

$$\frac{dh_j}{dt} = \frac{dh_j}{dT} \frac{dT}{dt} = C_{p_j} \frac{dT}{dt}$$

└─ Capacidade calorífica molar de j

$$\sum_{j=1}^s C_j \frac{dh_j}{dt} = \left(\sum_{j=1}^s C_j C_{p_j} \right) \frac{dT}{dt} = C_p \frac{dT}{dt}$$

└─ Capacidade calorífica volumétrica média da mistura

- Agora vejamos:

$$h_{j_f} = h_j^* + C_{p_j} (T_f - T^*)$$

$$h_j = h_j^* + C_{p_j} (T - T^*)$$

$$q \sum_{j=1}^s C_{j_f} (h_{j_f} - h_j) = q \left(\sum_{j=1}^s C_{j_f} C_{p_j} \right) (T_f - T) = q C_p (T_f - T)$$



H4: A capacidade calorífica da mistura reacional não varia significativamente.

- Voltando, então, ao balanço de energia:

$$V \sum_{j=1}^s C_j \frac{dh_j}{dt} = q \sum_{j=1}^s C_{jf} (h_{jf} - h_j) - \left(\sum_{j=1}^s \alpha_j h_j \right) V r(C_1, \dots, C_s, T) - Ah(T - T_c)$$

ΔH

$qC_p(T_f - T)$

$C_p \frac{dT}{dt}$

$$VC_p \frac{dT}{dt} = qC_p(T_f - T) + (-\Delta H) V r(C_1, \dots, C_s, T) - Ah(T - T_c)$$

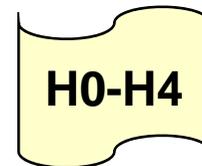
$$\left\{ \begin{array}{l} \text{taxa de} \\ \text{acúmulo} \\ \text{de energia} \\ \text{no reator} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{calor adicionado} \\ \text{através da} \\ \text{corrente} \\ \text{de alimentação} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{calor retirado} \\ \text{através da} \\ \text{corrente} \\ \text{de saída} \end{array} \right\} \pm \left\{ \begin{array}{l} \text{calor} \\ \text{gerado} \\ \text{pela} \\ \text{reação} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{calor} \\ \text{removido pela} \\ \text{camisa de} \\ \text{resfriamento} \end{array} \right\}$$

- Balanço de energia para a camisa de resfriamento:

$$V_c C_{p_c} \frac{dT_c}{dt} = q_c C_{p_c} (T_{cf} - T_c) + Ah(T - T_c)$$

- Portanto, até aqui o modelo é o seguinte:

$$\left\{ \begin{array}{l} V \frac{dC_j}{dt} = qC_{jf} - qC_j + \alpha_j Vr(C_1, \dots, C_s, T) \quad j=1, \dots, s \\ VC_p \frac{dT}{dt} = qC_p(T_f - T) + (-\Delta H) Vr(C_1, \dots, C_s, T) - Ah(T - T_c) \\ V_c C_{p_c} \frac{dT_c}{dt} = q_c C_{p_c} (T_{cf} - T_c) + Ah(T - T_c) \end{array} \right.$$



(s+2) EDOs acopladas; fenomenológico, determinístico, dinâmico, concentrado, *potencialmente* não-linear.

- O modelo estacionário:

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = qC_{jf} - qC_j + \alpha_j Vr(C_1, \dots, C_s, T) \quad j=1, \dots, s \\ 0 = qCp(T_f - T) + (-\Delta H) Vr(C_1, \dots, C_s, T) - Ah(T - T_c) \\ 0 = q_c Cp_c (T_{cf} - T_c) + Ah(T - T_c) \end{array} \right. \quad \text{H5}$$

(s+2) equações algébricas acopladas; fenomenológico, determinístico, estacionário, concentrado, *potencialmente* não-linear.

H5: O sistema está em estado estacionário.