1 INTRODUÇÃO

Neste curso são apresentadas e usadas ferramentas necessárias para a análise do **comportamento dinâmico** de sistemas (processos e operações unitárias) da engenharia química.

Numa abordagem bastante simplista, em termos do número de palavras utilizadas, porem abrangente em termos de conteúdo, pode-se dizer que as duas principais atividades do engenheiro químico são **projetar e operar**.

O que basicamente se deseja dos sistemas da engenharia química é uma **operação eficiente** (com segurança, preservando o meio ambiente, obtendo boa qualidade e grande quantidade de produto) **respeitando limites** (restrições de diversos tipos e origens).

Em termos temporais há duas formas possíveis de operação dos sistemas: **estacionária e dinâmica.**

A operação **estacionária** é talvez a forma mais comum na indústria de processos químicos (trata-se de uma simplificação, pois é difícil imaginar alguma coisa real que consiga ficar literalmente estacionária).

A forma de operação **dinâmica** é observada nos casos de partida ou parada do processo, nos sistemas em batelada, nas respostas a perturbações e, ainda, em certos casos em que a oscilação das variáveis é desejada.

Para operar um processo de forma eficiente é necessário conhecer profundamente suas principais características (um operador experiente - especialista, “expert” - é aquele que domina esse conhecimento) em termos de **sensibilidade a perturbações, velocidade de resposta e estabilidade.**

Uma boa prática para se acompanhar os ensinamentos desta disciplina é associa-los a outros sistemas comuns do nosso dia a dia: **o automóvel, o corpo humano, um corpo d’água, um sistema econômico, etc.**

A análise do comportamento dos sistemas busca identificar as principais **características** que determinam esse **comportamento**.

O **comportamento dinâmico**, que é o objetivo principal do curso, está presente na operação de todo processo, operação unitária ou sistema em geral.

Em termos matemáticos, comportamento dinâmico é equivalente à solução de **equações diferenciais** ou de **diferencias finitas** na variável independente tempo. O curso se baseia na análise dessas soluções, ao caracterizar os sistemas da engenharia química através de **modelos matemáticos** formados por equações diferenciais, equações de diferencias finitas ou suas transformações.

1.1 Exemplo introdutório: o reator CSTR

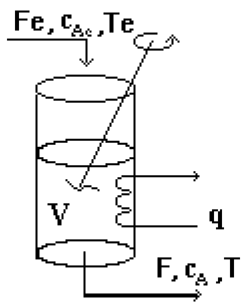
O reator tanque agitado contínuo, CSTR (*continuous stirred tank reactor*), é o processo mais utilizado para exemplificar os temas a serem desenvolvidos no estudo que estamos iniciando. Ele apresenta diversas características comuns à maior parte dos processos, tais como múltiplas entradas e saídas e não linearidades, mas, ao mesmo tempo, pode ser representado através de um modelo matemático de dimensões reduzidas, isto é, um modelo simples. É por esse motivo que vamos considerar como exemplo um reator cstr com as seguintes características:

- é processada uma reação exotérmica de primeira ordem $A \xrightarrow{k} B$ $\Delta H \langle 0$

- as propriedades do meio reacional são constantes.

- a lei do resfriamento de Newton explica a troca térmica com um meio de refrigeração.

- a lei de Arrhenius explica a dependência do coeficiente da taxa de reação com a temperatura.



1.1.1 Modelo matemático

Além das já enunciadas, outras considerações foram adotadas para a obtenção do modelo apresentado a seguir (este modelo será desenvolvido mais adiante)

$$\frac{dV(t)}{dt} = F_e(t) - F(t) \qquad V(0) = V_0$$

$$\frac{dc_A(t)}{dt} = \frac{F_e(t)}{V(t)} \cdot c_{A_e}(t) - \frac{F(t)}{V(t)} \cdot c_A(t) - k_0 \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T(t)}} \cdot c_A(t) \qquad c_A(0) = c_{A_0}$$

$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{F_e(t)}{V(t)} \cdot T_e(t) - \frac{F(t)}{V(t)} \cdot T(t) + \frac{(-\Delta H)}{\rho \cdot c_p} \cdot k_0 \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T(t)}} \cdot c_A(t) -$$

$$- \frac{U(t) \cdot A_t(t)}{\rho \cdot c_p \cdot V(t)} \cdot \left[T(t) - T_q(t)\right] \qquad T(0) = T_0$$

Trata-se de um **sistema de equações diferenciais ordinárias não lineares**. Os parâmetros são **constantes no tempo** e **no espaço**.

1.1.2 Estados estacionários

Num estado estacionário **as variáveis não variam com o tempo**, o que matematicamente é conseguido fazendo $\frac{dV}{dt} = \frac{dc_A}{dt} = \frac{dT}{dt} = 0$.

O resultado desta operação é um **sistema de equações algébricas não lineares**.

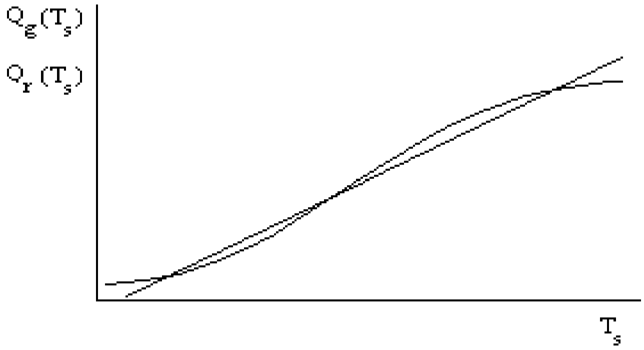
Usando o sub-índice "s" para indicar estado estacionário, explicitando $c_{A_s} = f(T_s)$, na 2^a equação do sistema de equações algébricas, substituindo na 3^a e reordenando termos vem:

$$(-\Delta H) \cdot k_0 e^{-\frac{E}{R \cdot T_s}} \frac{F_s \cdot c_{A_{e_s}}}{\frac{F_s}{V_s} + k_0 \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T_s}}} = F_s \cdot \rho \cdot c_p \cdot \left(T_s - T_{e_s}\right) + U_s \cdot A_t \cdot \left(T_s - T_{q_s}\right)$$

Isto pode ser expresso de forma compacta como

$$Q_g(T_s) = Q_r(T_s)$$

As formas gerais destas funções estão representadas graficamente a seguir. A interseção das curvas satisfaz a equação anterior, indicando até três temperaturas (pontos) de estado estacionário. Esta **multiplicidade** é uma característica dos **sistemas não lineares**.



1.1.3 Linearização

Considerando volume constante, $F = F_e$.

$$\frac{dc_A}{dt} = \left[-\frac{F}{V} - k_0 e^{-\frac{E}{RT}}\right]_s \left(c_A - c_{A_s}\right) + \left[-\frac{E}{RT^2} k_0 e^{-\frac{E}{RT}} c_A\right]_s \left(T - T_s\right) +$$

$$\left[\frac{c_{A_e} - c_A}{V}\right]_s \left(F - F_s\right) + \left[\frac{F}{V}\right]_s \left(c_{A_e} - c_{A_{e_s}}\right)$$

$$\frac{dT}{dt} = \left[\frac{(-\Delta H)}{\rho c_p} k_0 e^{-\frac{E}{RT}}\right]_s \left(c_A - c_{A_s}\right) + \left[-\frac{F}{V} + \frac{E}{RT^2}\frac{(-\Delta H)}{\rho c_p} k_0 e^{-\frac{E}{RT}} c_A - \frac{UA_t}{\rho c_p V}\right]_s \left(T - T_s\right) +$$

$$\left[\frac{T_e - T}{V}\right]_s \left(F - F_s\right) + \left[\frac{-A_t\left(T - T_q\right)}{\rho c_p V}\right]_s \left(U - U_s\right) + \left[\frac{F}{V}\right]_s \left(T_e - T_{e_s}\right) + \left[\frac{UA_t}{\rho c_p V}\right]_s \left(T_q - T_{q_s}\right)$$

Redefinindo constantes é variáveis, este sistema pode ser escrito da seguinte forma,

$$\frac{dx_1}{dt} = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + b_{11}u_1 + b_{12}u_2 + b_{13}u_3 + b_{14}u_4 + b_{15}u_5$$

$$\frac{dx_2}{dt} = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + b_{21}u_1 + b_{22}u_2 + b_{23}u_3 + b_{24}u_4 + b_{25}u_5$$

Ou, utilizando notação matricial,

$$\dot{\underline{x}} = \underline{\underline{A}}.x + \underline{\underline{B}}.\underline{u}$$

As matrizes - $\underline{\underline{A}}$ por exemplo - estão caracterizadas por **escalares** e **vetores**, chamados **valores característicos** (autovalores) **vetores característicos** (autovetores) e **valores singulares**.

1.1.4 Funções de transferência

As **funções de transferência** são **representações entrada/saída** em um **domínio transformado** da variável independente. No caso do CSTR, o vínculo entre a variável de saída "x_1" e a de entrada "u_1" é representado pela seguinte equação:

$$x_1(s) = \frac{b_{11}s + [b_{21}a_{12} - b_{11}a_{22}]}{s^2 - [a_{11} + a_{22}]s + [a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}]} u_1(s) = G_{11}(s)u_1(s)$$

Devido ao uso de **computadores digitais**, são de grande importância os modelos que representam o comportamento dinâmico dos sistemas em determinados **tempos discretos de amostragem**.

Neste caso as funções de transferência são representadas em termos das variáveis “z” , resultado da **transformada Z**, que é um caso particular da **transformada de Laplace** quando aplicada a variáveis independentes discretas. São as **funções de transferência pulso**.

$$G(z) = \frac{b_0 + b_1 z^{-1} + \ldots + b_{m-1} z^{-m+1} + b_m z^{-m}}{a_0 + a_1 z^{-1} + \ldots + a_{n-1} z^{-n+1} + a_n z^{-n}}$$

Outro tipo de **representação entrada/saída** é no **domínio do tempo**. No caso do tempo contínuo resulta a **integral de convolução,**

$$y(t) = \int_0^t g(t - \tau)\, u(\tau) d\tau$$

e, no caso do tempo discreto, o **somatório de convolução,**

$$y(k) = \sum_{i=0}^{k} h(k - i)\, u(i)$$

1.1.5 Análise

Analisar significa decompor nas partes constituintes e, no nosso contexto, o exame de cada parte constituinte, procurando conhecer a sua natureza.

Partes constituintes dos sistemas são, por exemplo, **pólos**; **zeros**; **ganhos estáticos** (**valores característicos, valores singulares**). A sua natureza determina, por exemplo, a **estabilidade**; a forma das respostas a **entradas típicas**; a forma da **resposta freqüencial.**

O estudo da resposta a entradas típicas, quando no domínio transformado, requer, em geral, o retorno ao domínio "tempo", o que se consegue calculando a **inversa** da "função transformada".

$$x_1(t) = L^{-1}\left[G_{11}(s)u_1(s)\right]$$

1.1.6 Estado

O **estado** de um sistema é um **conjunto de informações** num dado instante de tempo que, junto com o conhecimento das futuras perturbações, permite conhecer o futuro comportamento.

c_A e T são variáveis de estado para o CSTR (é normal indicá-las com a letra "x")

Os modelos de equações diferenciais ordinárias não lineares ficam expressos da forma

$$\dot{\underline{x}} = \underline{f}(\underline{x}, \underline{u})$$

ou, no caso discreto no tempo, as equações de diferenças finitas,

$$\underline{x}(k+1) = \underline{f}\left[\underline{x}(k), \underline{u}(k)\right]$$

Na forma linear

$$\dot{\underline{x}} = \underline{\underline{A}}.\underline{x} + \underline{\underline{B}}.\underline{u}$$

ou

$$\underline{x}(k+1) = \underline{\underline{A}}.\underline{x}(k) + \underline{\underline{B}}.\underline{u}(k)$$

A solução geral destas equações é:

$$\underline{x}(t) = e^{\underline{\underline{A}}(t-t_0)}\,\underline{x}(t_0) + \int_{t_0}^{t} e^{\underline{\underline{A}}(t-\tau)}\,\underline{\underline{B}}\,\underline{u}(\tau)\,d\tau$$

ou

$$\underline{x}(k) = \underline{\underline{A}}^{k}\ \underline{x}_0 + \sum_{i=0}^{k-1} \underline{\underline{A}}^{k\text{-}i\text{-}1}\ \underline{\underline{B}}\ \underline{u}(i)$$

A análise desta equação (trata-se de um sistema de equações expresso na forma matricial) permite determinar o **efeito** dos elementos que a constituem **sobre o comportamento dinâmico** das variáveis de estado, $\underline{x}(t)$.

Se esses elementos podem ser associados às **partes que formam o sistema real** modelado, podem-se inferir quais as **características físicas** desse sistema que **determinam um eventual comportamento** e, se necessário, ver uma forma de **alterá-lo**.