



Escola
Piloto
presencial



Simulador Dinâmico de Processos Orientado por Equações

– Aula 4 –

Argimiro R. Secchi

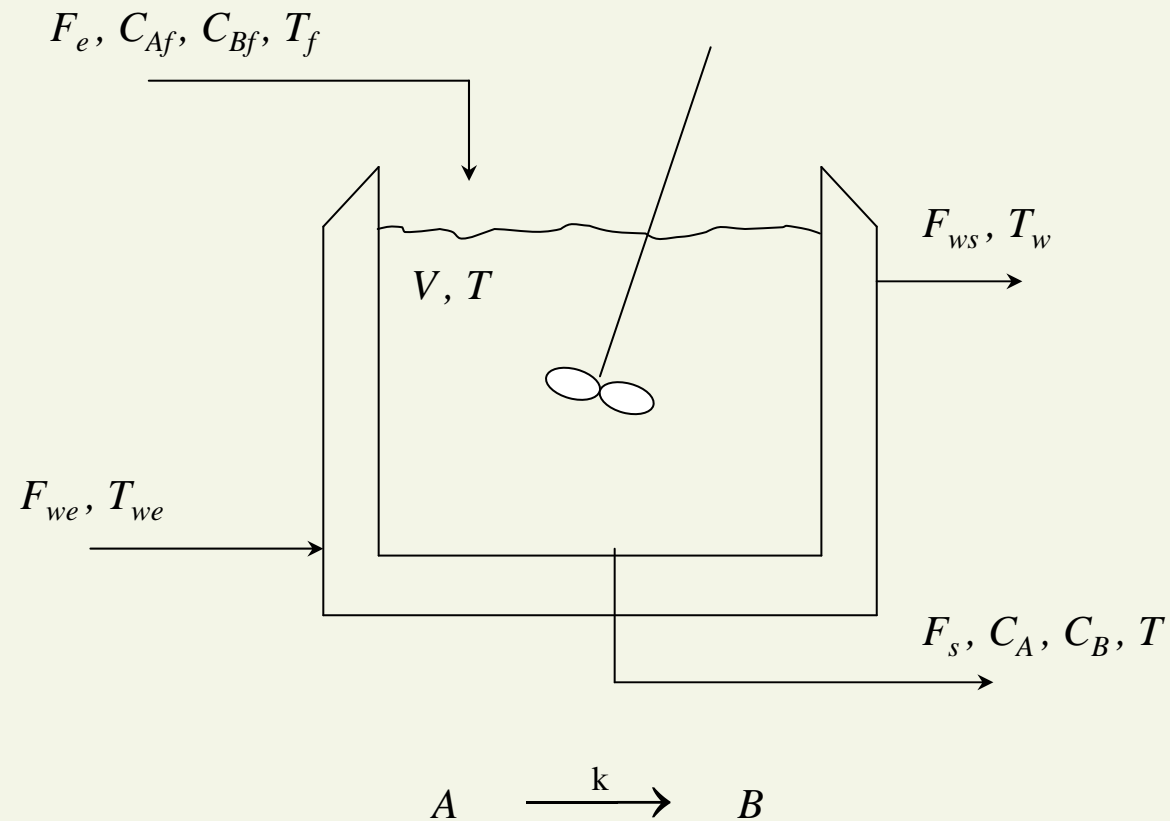


PEQ-COPPE/UFRJ

Janeiro de 2011

Modelo Dinâmico de Reator CSTR

Reator CSTR não-isotérmico



– CSTR: Descrição do Processo –

Em um reator não-isotérmico contínuo de tanque agitado, com diâmetros de 3.2 m, com controle de nível, alimentação do reagente puro à temperatura de 300 K, concentração de 300 kmol/m³ e vazão de 3,5 m³/h, ocorre uma reação de primeira ordem, cujo fator pré-exponencial é de 89 s⁻¹, a energia de ativação vale 6 x 10⁴ kJ/kmol e o calor da reação é de -7000 kJ/kmol. O reator é munido de camisa de troca térmica para controlar a temperatura do reator, com coeficiente global de transferência de calor U=300 kJ/(h.m².K). Para a mistura reacional pode-se considerar massa específica constante de 1000 kg/m³ e calor específico constante de 4 kJ/kg K. A válvula de saída com abertura linear tem uma constante de 2.7 m^{2.5}/h quando totalmente aberta.

– CSTR: Hipóteses do Modelo –

- mistura perfeita no reator e na camisa;
- trabalho transferido pelo agitador desprezível;
- $(-r_A) = k C_A$;
- massa específica constante no reator e na camisa;
- coeficiente global de troca térmica constante;
- calor específico constante no reator e na camisa;
- fluidos incompressíveis;
- perdas de calor para as vizinhanças desprezíveis;
- $\Delta(\text{energia interna}) \approx \Delta(\text{entalpia})$;
- variação de energias potencial e cinética desprezíveis;
- volume da camisa constante;
- parede metálica fina e com capacidade calorífica desprezível.

– CSTR: Modelagem –

Balanco de massa no reator

Global:

$$\begin{aligned}\frac{d(\rho V)}{dt} &= \rho_f F_e - \rho F_s = \rho \frac{dV}{dt} \\ \frac{dV}{dt} &= F_e - F_s\end{aligned}\quad (1)$$

Componente:

$$\begin{aligned}\frac{d(VC_A)}{dt} &= V \frac{dC_A}{dt} + C_A \frac{dV}{dt} = F_e C_{Af} - F_s C_A - V(-r_A) \\ V \frac{dC_A}{dt} &= F_e (C_{Af} - C_A) - (-r_A) V\end{aligned}\quad (2)$$

$$\tau = \frac{V}{F_e}\quad (3)$$

– CSTR: Modelagem –

Balanço de energia no reator:

$$\frac{d}{dt} \left[\rho V \left(\hat{U} + \hat{K} + \hat{\phi} \right) \right] = F_e \rho \left(\hat{U}_f + P_f \hat{V}_f + \frac{v_f^2}{2} + g z_f \right) - F_s \rho \left(\hat{U} + P \hat{V} + \frac{v_s^2}{2} + g z_s \right) + q_r - q - w_s$$

onde $\hat{H} = \hat{U} + P \hat{V}$

$$\frac{d(\rho V \hat{H})}{dt} = \rho V \frac{d\hat{H}}{dt} + \rho \hat{H} \frac{dV}{dt} = F_e \rho \hat{H}_f - F_s \rho \hat{H} + q_r - q$$

$$\rho V \frac{d\hat{H}}{dt} = F_e \rho (\hat{H}_f - \hat{H}) + q_r - q$$

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = F_e \rho C_p (T_f - T) + q_r - q \quad (4)$$

– CSTR: Modelagem –

onde

$$q = U A_t (T - T_w) \quad (5)$$

$$q_r = (-\Delta H_r) V (-r_A) \quad (6)$$

$$(-r_A) = k C_A \quad (7)$$

$$k = k_0 \exp(-E/RT) \quad (8)$$

$$A = \pi D^2/4 \quad (9)$$

$$V = A h \quad (10)$$

$$A_t = A + \pi D h \quad (11)$$

$$F_s = x C v \sqrt{h} \quad (12)$$

$$x = f(h) \quad \text{Controle de nível} \quad (13)$$

$$T_w = f(T) \quad \text{Controle de temperatura} \quad (14)$$

– CSTR: Análise de Consistência –

variáveis	unidades de medida
F_e, F_s	$\text{m}^3 \text{s}^{-1}$
V	m^3
t, τ	s
C_A, C_{Af}	kmol m^{-3}
r_A	$\text{kmol m}^{-3} \text{s}^{-1}$
ρ	kg m^{-3}
C_p	$\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
T, T_f, T_w	K
q_r, q	kJ s^{-1}
U	$\text{kJ m}^{-2} \text{K}^{-1} \text{s}^{-1}$
A_r, A	m^2
h, D	m
C_v	$\text{m}^{2.5} \text{h}^{-1}$
x	—
$\Delta H_r, E$	kJ kmol^{-1}
R	$\text{kJ kmol}^{-1} \text{K}^{-1}$
k, k_0	s^{-1}

– CSTR: Análise de Consistência –

variáveis: $F_e, F_s, V, t, C_A, C_{Af}, r_A, \rho, C_p, T, T_f, T_w, q_r, q, U, A_p, A, h, D, C_v, x, \Delta H_r, E, R, k, k_0, \tau \rightarrow 27$

constantes: $\rho, C_p, U, D, C_v, \Delta H_r, E, R, k_0 \rightarrow 9$

especificações: $t \rightarrow 1$

forças motrizes: $F_e, T_f, C_{Af} \rightarrow 3$

variáveis a determinar: $F_s, V, C_A, r_A, T, T_w, q_r, q, A, A_p, h, x, k, \tau \rightarrow 14$

equações: 14

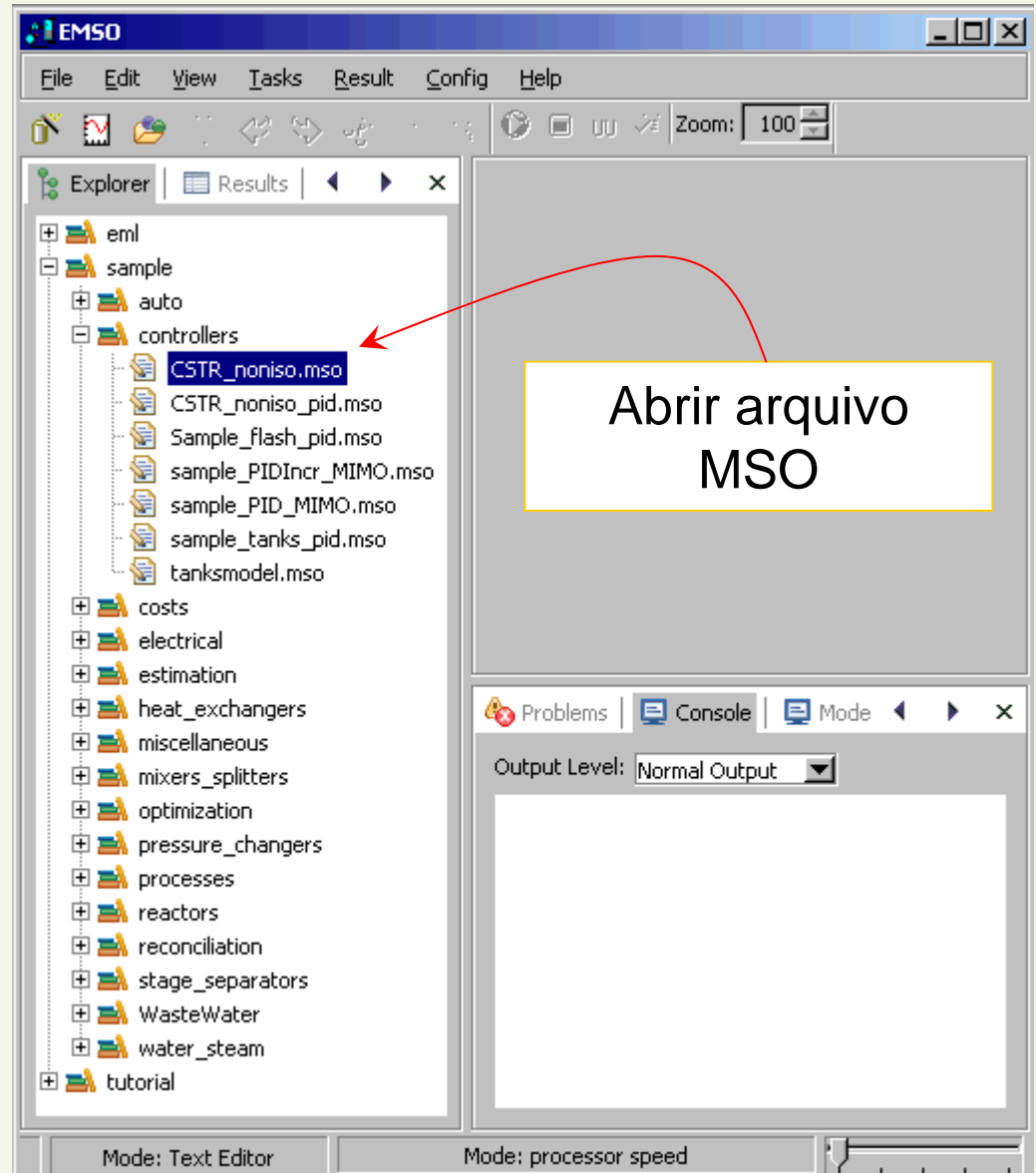
Graus de Liberdade = variáveis – constantes – especificações – forças motrizes – equações = variáveis a determinar – equações = $27 - 9 - 1 - 3 - 14 = 0$

Graus de Liberdade Dinâmicos (índice < 2) = equações diferenciais = 3 \rightarrow

Necessita 3 condições iniciais: $h(0), C_A(0), T(0) \rightarrow 3$

– CSTR: no EMSO –

➤ Executando o EMSO



File Edit View Tasks Result Config Help

Zoom: 100

Explorer

CSTR_noniso.mso

59 q as heat_rate (DisplayUnit='kJ/h');
60 qr as heat_rate (DisplayUnit='kJ/h');
61 in Inlet as stream_cstr;
62 out Outlet as stream_cstr;
63
64 SET
65 A = pi * DA2 / 4;
66
67 EQUATIONS
68
69 "Overall Mass Balance"
70 diff(V) = Inlet.F - Outlet.F;
71
72 "Component Mass Balance"
73 V * diff(Ca) = Inlet.F * (Inlet.Ca - Ca) - (-rA) * V;
74
75 "Average Residence Time"
76 tau * Inlet.F = V;
77
78 "Energy Balance"
79 ro * V * Cp * diff(T) = Inlet.F * ro * Cp * (Inlet.T - T) + qr - q;
80
81 "Heat Transfer Rate"
82 q = U * At * (T - Tw);
83
84 "Reaction Heat Rate"
85 qr = (-Hr) * (-rA) * V;
86
87 "Reaction Rate"
88 -rA = k * Ca;
89
90 "Arrhenius Equation"
91 k = ko * exp(-Ea/(R*T));
92
93 "Geometry"
94 A * h = V;
95 At = A + pi*D*h;
96
97 "Valve Equation"
98 Outlet.F = x * Cv * sqrt(h);
99
100 "Perfect Mixture"
101 Outlet.Ca = Ca;
102 Outlet.T = T;
103
104 end

Análise de Consistência

Results

Output Level: Normal Output

Number of variables: 18
Number of equations: 13
Number of specifications: 5
Degrees of freedom: 0
Structural differential index: 1
Extra Equations: 15
Extra Variables: 0
Dynamic degrees of freedom: 3
Number of initial Conditions: 3

CSTR_no_contr

CSTR1

(P)= ko
(P)= D
(P)= A
(P)= Ea
(P)= R
(P)= ro
(P)= Cp
(P)= U
(P)= Hr
(P)= pi
(X)= At
(X)= Cv
(X)= T
(X)= Tw
(X)= V
(X)= Ca
(X)= h
(X)= tau
(X)= rA
(X)= k
(X)= q
(X)= qr
Inlet
(X)= Ca
(X)= F
(X)= T
Outlet
(X)= Ca
(X)= F
(X)= T

Ready.

Mode: Text Editor

Mode: processor speed

Explorer

- CSIR_noniso.mso
 - using
 - const_valv
 - stream_cstr
 - Ca
 - F
 - T
 - CSIR
 - FEED
 - CSIR1
 - Equations
 - Manipulated Variables
 - Equation 2
 - Feed Stream
 - Equation 4
 - if
 - else
 - Initials
 - Concentration
 - Level
 - Temperature
 - eml
 - sample
 - tutorial

Results

CSIR_no_control 06/

- (p)= R
- (p)= ro
- (p)= Cp
- (p)= U
- (p)= Hr
- (p)= pi
- (p)= Cv
- (p)= At
- (p)= T
- (p)= Tw
- (p)= x
- (p)= v
- (p)= Ca
- (p)= h
- (p)= tau

CSIR_noniso.mso

```

105 # Process with uncontrolled CSIR and multiple steady-states
106 FlowSheet CSIR_no_control
107
108 DEVICES
109 FEED as stream_cstr;
110 CSIR1 as CSIR;
111
112 CONNECTIONS
113 FEED to CSIR1.Inlet;
114
115 SET
116 # CSIR Parameters
117 CSIR1.R = 8.3144 * 'kJ/kmol/K';
118 CSIR1.U = 300 * 'kJ/h/m^2/K';
119 CSIR1.ro = 1000 * 'kg/m^3';
120 CSIR1.Cp = 4 * 'kJ/kg/K';
121 CSIR1.Hr = -7000 * 'kJ/kmol';
122 CSIR1.Ea = 6e4 * 'kJ/kmol';
123 CSIR1.ko = 89 * '1/s';
124 CSIR1.D = 3.2 * 'm';
125 CSIR1.Cv = 2.7 * 'm^2.5/h';
126
127 EQUATIONS
128 "Manipulated Variables"
129 CSIR1.x = 1;
130 CSIR1.Tw = 300 * 'K';
131
132 "Feed Stream"
133 FEED.Ca = 300 * 'kmol/m^3';
134 FEED.F = 3.5 * 'm^3/h';
135
136 # Disturbance
137 if time < 50 * 'h' then
138   "Feed Temperature" FEED.T = 300 * 'K';
139 else
140   "Feed Temperature" FEED.T = 350 * 'K';
141 end
142
143 INITIAL
144 "Concentration" CSIR1.Ca = 50 * 'kmol/m^3';
145 "Level" CSIR1.h = 1.7 * 'm';
146 "Temperature" CSIR1.T = 570 * 'K'; # increase to 580 K to change steady-state
147
148 OPTIONS
149 TimeStep = 1;
150 TimeEnd = 100;
151 TimeUnit = 'h';
152 DAESolver(File = "dassl");
153 end
  
```

Plot2D (3)

Legend: T [K] : To = 570 K (dashed blue line), T [K] : To = 580 K (solid red line)

– Checando Unidades de Medida –

The screenshot displays the EMSO software interface. On the left is the Explorer pane showing the project structure for CSTR_noniso.mso, including sections for 'using', 'const_valv', 'stream_cstr', 'CSTR', and 'CSTR_no_control'. The main editor window shows the source code for CSTR_noniso.mso. The code includes parameter declarations for CSTR1.ko, CSTR1.D, and CSTR1.CV, followed by 'EQUATIONS' and 'Manipulated Variables' sections. Two specific lines are circled in red: line 130, 'CSTR1.Tw = 300 * 'm';', and line 134, 'FEED.F = 3.5 * 'm^2/h';'. A red arrow points from the text 'incompatible units' to these circled expressions. At the bottom, the Problems pane shows two warnings: 'CSTR1.Tw [K] and 300*m [m] have incompatible units' and 'FEED.F [m^3/s] and 3.5*(m^2/h) [m^2/s] have incompatible units', both pointing to CSTR_noniso.mso.

```
123 CSTR1.ko = 89 * '1/s';
124 CSTR1.D = 3.2 * 'm';
125 CSTR1.CV = 2.7 * 'm^2.5/h';
126
127 EQUATIONS
128 "Manipulated Variables"
129 CSTR1.x = 1;
130 CSTR1.Tw = 300 * 'm';
131
132 "Feed Stream"
133 FEED.Ca = 300 * 'kmol/m^3';
134 FEED.F = 3.5 * 'm^2/h';
135
```

Problems | Console | Model

0 errors, 2 warnings, 0 infos

Description	File
⚠ CSTR1.Tw [K] and 300*m [m] have incompatible units	CSTR_noniso.mso
⚠ FEED.F [m^3/s] and 3.5*(m^2/h) [m^2/s] have incompatible units	CSTR_noniso.mso

incompatible
units

Sistema de Equações Diferenciais Ordinárias – CSTR não-isotérmico, malha aberta –

$$\frac{dh}{dt} = \frac{F_e}{A} - \frac{x C_v}{A} \sqrt{h} \quad , \quad h(0) = h_0$$

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F_e}{A h} (C_{Af} - C_A) - k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_A \quad , \quad C_A(0) = C_{A0}$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_e}{A h} (T_f - T) + \frac{(-\Delta H_r) k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_A}{\rho C_p} - \frac{U \left(1 + 4 \frac{h}{D} \right) (T - T_w)}{h \rho C_p} \quad , \quad T(0) = T_0$$

$$x = [h, C_A, T]^T \quad \longrightarrow \quad \frac{dx}{dt} = F(t, x) \quad , \quad x(0) = x_0$$

Sistema de Equações Diferenciais Ordinárias

– CSTR não-isotérmico, malha aberta –

Exemplo: executar os flowsheets dos arquivos CSTR_noniso.mso e CSTR_sedo.mso e verificar que os resultados são os mesmos, pois no segundo as equações algébricas foram eliminadas por substituição direta nas equações, reduzindo de 18 equações algébrico-diferenciais para 3 equações diferenciais ordinárias.



Métodos numéricos para resolução de S.E.D.O

$$\frac{dx}{dt} = F(t, x) \quad , \quad x(0) = x_0$$

Solução exata $\rightarrow x(t)$ com $x(0) = x_0$

Solução numérica $\rightarrow \{t_i, u_i\}$ com $u_0 = x_0 \quad i = 0, 1, \dots, N$

Quanto à dependência de valores anteriores da variável dependente:

- (i) Métodos de Passo Simples: quando o valor da variável dependente no final do intervalo depende apenas de valores no próprio intervalo:

$$u_i = g \left[t_i, (t_{i-1}, u_{i-1}) \right] \qquad u_i = g \left[(t_i, u_i), (t_{i-1}, u_{i-1}) \right]$$

- (ii) Métodos de Passos Múltiplos: quando o valor da variável dependente não depende apenas do seu valor no início do intervalo, mas também de intervalos anteriores:

$$u_i = g \left[t_i, (t_{i-1}, u_{i-1}), (t_{i-2}, u_{i-2}), \dots, (t_{i-m}, u_{i-m}) \right]$$

Métodos numéricos para resolução de S.E.D.O

Quanto à dependência do valor atual da variável dependente:

- (i) Métodos explícitos: quando o valor da variável dependente independe do seu valor no final do intervalo (**solução direta**). A estabilidade depende do tamanho do passo:

$$u_i = g \left[t_i, (t_{i-1}, u_{i-1}) \right] \quad \text{Passo simples}$$

$$u_i = g \left[t_i, (t_{i-1}, u_{i-1}), (t_{i-2}, u_{i-2}), \dots, (t_{i-m}, u_{i-m}) \right] \quad \text{Passos múltiplos}$$

- (ii) Métodos implícitos: quando o valor da variável dependente depende do seu valor no final do intervalo (**solução iterativa**). São métodos sempre estáveis:

$$u_i = g \left[(t_i, u_i), (t_{i-1}, u_{i-1}) \right] \quad \text{Passo simples}$$

$$u_i = g \left[(t_i, u_i), (t_{i-1}, u_{i-1}), (t_{i-2}, u_{i-2}), \dots, (t_{i-m}, u_{i-m}) \right] \quad \text{Passos múltiplos}$$

Métodos numéricos para resolução de S.E.D.O

Quanto ao tamanho do passo de integração:

- (i) Métodos de passo fixo: quando $t_i = i \cdot h$, sendo h o intervalo de integração
- (ii) Métodos de passo variável: quando $t_i = t_{i-1} + h_i$, isto é o intervalo de integração h varia com i para controlar o erro da integração.

Quanto à ordem da aproximação:

- (i) Métodos de ordem fixa: quando a ordem da aproximação é mantida fixa
- (ii) Métodos de ordem variável: quando a ordem da aproximação é ajustada para controlar o erro da integração.

Métodos numéricos para resolução de S.E.D.O

Euler explícito: $u_i = u_{i-1} + h \cdot f[t_{i-1}, u_{i-1}]$ $i=1, 2, \dots, n = \frac{t_{\text{final}} - t_0}{h}$ com $u_0 = x_0$

Euler implícito: $u_i = u_{i-1} + h \cdot f[t_i, u_i]$

Crank-Nicolson: $u_i = u_{i-1} + \frac{h}{2} \cdot \{f[t_i, u_i] + f[t_{i-1}, u_{i-1}]\}$

Runge-Kutta: $g_k = h \cdot f\left[t_{i-1} + c_k \cdot h, u_{i-1} + \sum_{j=1}^v (a_{kj} \cdot g_j)\right]$ para $k=1, 2, \dots, v$ estágios

$$u_i = u_{i-1} + \sum_{j=1}^v (w_j \cdot g_j)$$

Adams-Bashforth: $u_i = u_{i-1} + h \cdot \sum_{j=1}^m \beta_{m,j} \cdot f_{i-j}$

Adams-Moulton: $u_i = u_{i-1} + h \cdot \sum_{j=0}^{m-1} \hat{\beta}_{m,j} \cdot f_{i-j}$

BDF: $u_i = \sum_{j=1}^{k_1} a_{i,j} \cdot u_{i-j} + h_i \cdot b_{i,0} \cdot f[t_i, u_i]$

Métodos numéricos para resolução de S.E.D.O

Seleção do método de integração

A estabilidade dos métodos explícitos está garantida se o passo de integração for limitado por:

$$h \leq \frac{p}{|\Re(\lambda_{\max})|}$$

onde p é uma constante que depende do método (Euler = 2) e λ_{\max} é o valor característico do sistema que apresenta a parte real de maior valor em módulo.

O tempo total de integração necessário para acompanhar toda a resposta dinâmica do sistema é dado por:

$$t_{total} \geq \frac{5}{|\Re(\lambda_{\min})|}$$

Métodos numéricos para resolução de S.E.D.O

Seleção do método de integração

Como o número de passos por um método de passo fixo é dado por:

$$N = \frac{t_{total}}{h}$$

Então um método explícito necessita:

$$N > \frac{5}{p} \cdot \frac{|\Re(\lambda_{\max})|}{|\Re(\lambda_{\min})|} = \frac{5}{p} \cdot SR$$

Onde SR é chamado de razão de rigidez (Stiffness Ratio).

SR	$\left\{ \begin{array}{ll} < 20 & \text{não rígido} \\ \approx 10^3 & \text{rígido} \\ \approx 10^6 & \text{muito rígido} \end{array} \right.$	\longrightarrow	Métodos explícitos
		$\left. \vphantom{\begin{array}{l} < 20 \\ \approx 10^3 \\ \approx 10^6 \end{array}} \right\}$	Métodos implícitos

Métodos numéricos para resolução de S.E.D.O

Cálculo da razão de rigidez

$$\frac{dx}{dt} = F(t, x) \quad , \quad x(0) = x_0 \quad \longrightarrow \quad F(x^{ss}) = 0$$

$$J(x^{ss}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial f_3}{\partial x_1} & \frac{\partial f_3}{\partial x_2} & \frac{\partial f_3}{\partial x_3} \end{bmatrix} \quad \longrightarrow \quad |J(x^{ss}) - \lambda I| = 0$$
$$\downarrow$$
$$SR = \frac{|\Re(\lambda_{\max})|}{|\Re(\lambda_{\min})|}$$

Nota: Uma maneira às vezes utilizada para contornar a rigidez do sistema é considerar a parte do sistema que tem a resposta mais rápida como se atingisse *instantaneamente* o estado estacionário final. Esta simplificação é chamada de suposição de estado quase-estacionário (QSSA: *quasi steady-state assumption*).

Linearização

Geração de modelo linearizado em um ponto de operação.

DAE implícita: $F(\tilde{x}', \tilde{x}, t) = 0$

Considerando as especificação como sendo as entradas, $u(t)$, na seção **SPECIFY** do EMSO:

$$F(\hat{x}', \hat{x}, u, t) = 0$$

E identificando as variáveis que aparecem apenas na forma algébrica:

$$F(x', x, y, u, t) = 0$$

Linearização

Tira-se do diferencial de F: $F_{x'} dx' + F_x dx + F_y dy + F_u du = 0$

a relação:
$$\begin{bmatrix} dx' \\ dy \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F_{x'} & F_y \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} F_x & F_u \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dx \\ du \end{bmatrix} \quad (\text{índice} < 2)$$

Que fazendo a partição:

$$- \begin{bmatrix} F_{x'} & F_y \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} F_x & F_u \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}$$

Tem-se o sistema linearizado:

$$x' = A x + B u$$

$$y = C x + D u$$

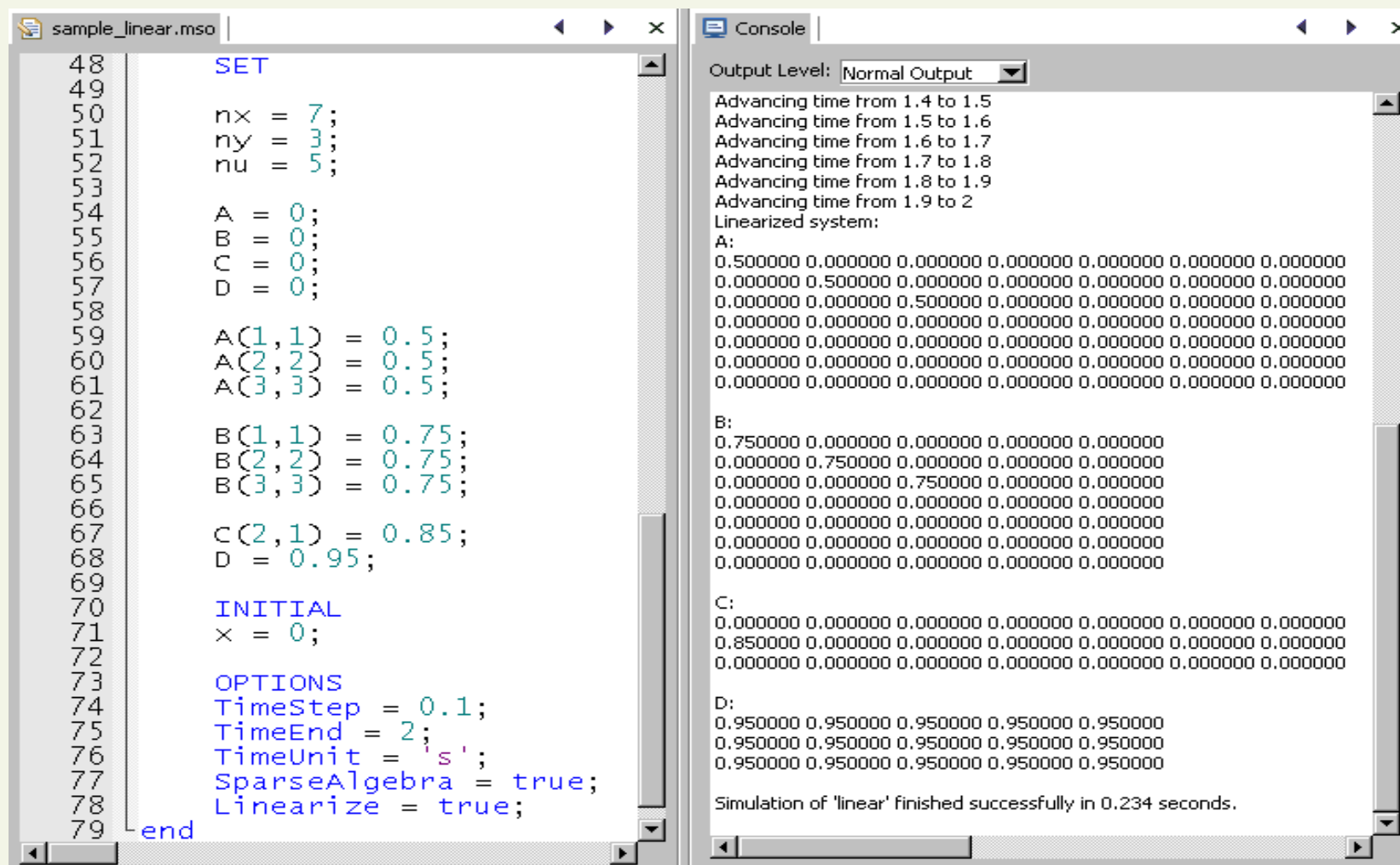
Linearização

Exemplo teste em um modelo linear: solução exata!

```
sample_linear.mso
21
22 using "types";
23
24 FlowSheet linear
25   PARAMETERS
26     nx      as Integer(Default=2);
27     ny      as Integer(Default=2);
28     nu      as Integer(Default=2);
29
30     A(nx,nx) as Real;
31     B(nx,nu) as Real;
32     C(ny,nx) as Real;
33     D(ny,nu) as Real;
34
35   VARIABLES
36     x(nx)   as Real (Brief="State Variables");
37     y(ny)   as Real (Brief="Output Variables");
38     u(nu)   as Real (Brief="Control Variables");
39
40   EQUATIONS
41
42     diff(x)*'s' = sumt(A*x) + sumt(B*u);
43     y           = sumt(C*x) + sumt(D*u);
44
45   SPECIFY
46     u[1:nu] = sin((time/'s' + [1:nu])*'rad');
47
```

Linearização

Verificação dos resultados para o caso de um modelo linear.



The screenshot displays two windows from a software application. The left window, titled 'sample_linear.mso', contains a model definition script. The right window, titled 'Console', shows the output of the simulation, including time advancement steps and the linearized system matrices A, B, C, and D.

```
48 SET
49
50 nx = 7;
51 ny = 3;
52 nu = 5;
53
54 A = 0;
55 B = 0;
56 C = 0;
57 D = 0;
58
59 A(1,1) = 0.5;
60 A(2,2) = 0.5;
61 A(3,3) = 0.5;
62
63 B(1,1) = 0.75;
64 B(2,2) = 0.75;
65 B(3,3) = 0.75;
66
67 C(2,1) = 0.85;
68 D = 0.95;
69
70 INITIAL
71 x = 0;
72
73 OPTIONS
74 TimeStep = 0.1;
75 TimeEnd = 2;
76 TimeUnit = 's';
77 SparseAlgebra = true;
78 Linearize = true;
79 end
```

Console Output:

Output Level: Normal Output

Advancing time from 1.4 to 1.5
Advancing time from 1.5 to 1.6
Advancing time from 1.6 to 1.7
Advancing time from 1.7 to 1.8
Advancing time from 1.8 to 1.9
Advancing time from 1.9 to 2
Linearized system:

A:

0.500000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.500000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000	0.500000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

B:

0.750000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.750000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000	0.750000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

C:

0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.850000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

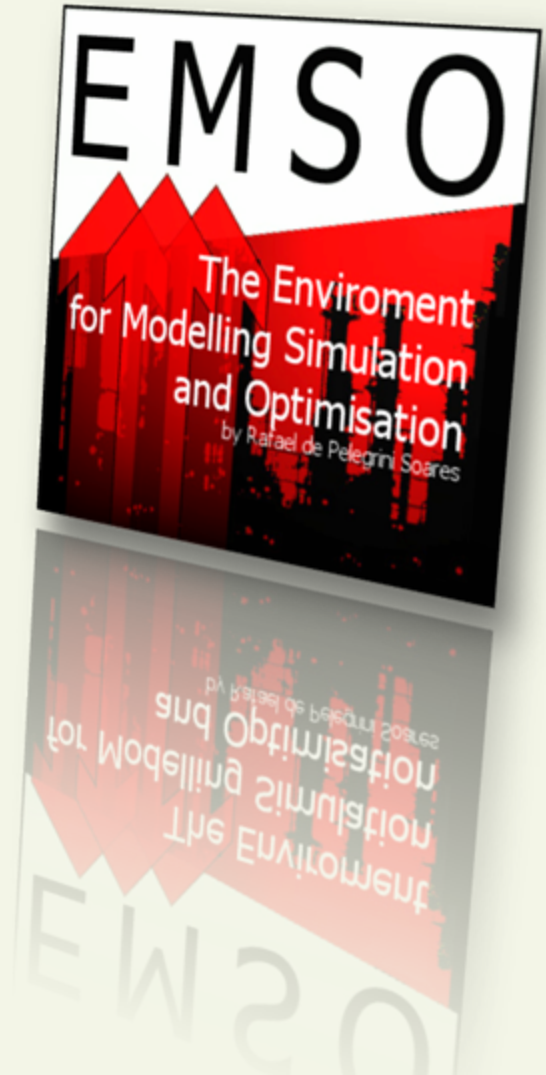
D:

0.950000	0.950000	0.950000	0.950000	0.950000	0.950000	0.950000
0.950000	0.950000	0.950000	0.950000	0.950000	0.950000	0.950000
0.950000	0.950000	0.950000	0.950000	0.950000	0.950000	0.950000

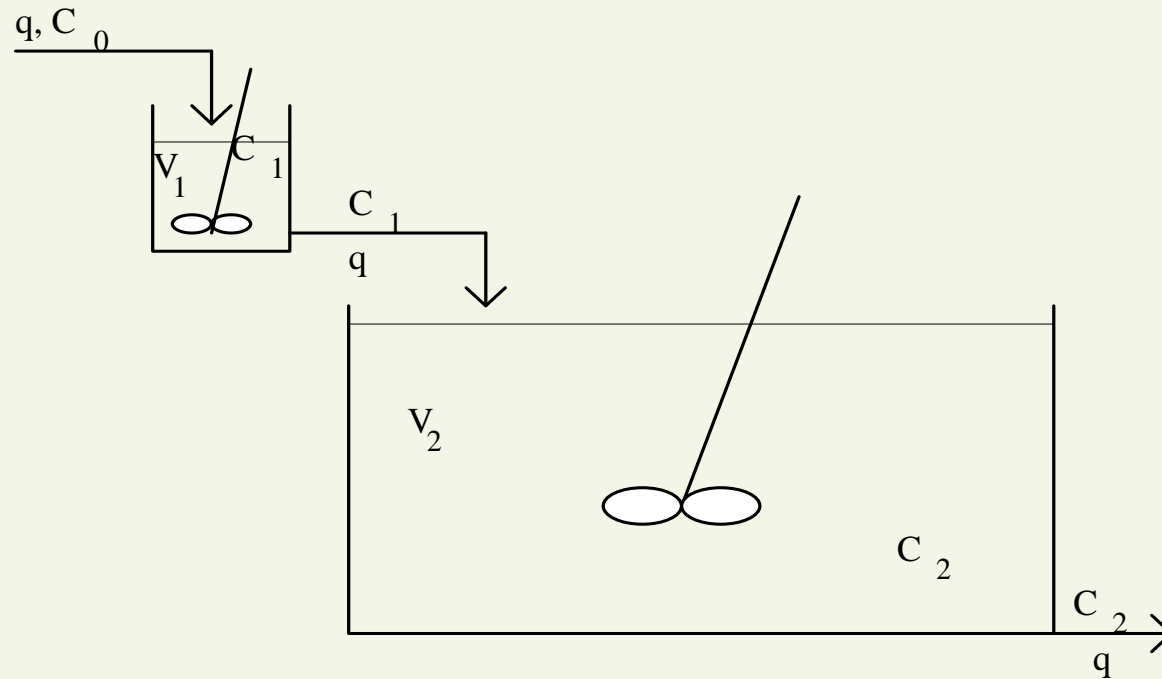
Simulation of 'linear' finished successfully in 0.234 seconds.

Sistema de Equações Diferenciais Ordinárias – CSTR não-isotérmico: linearização –

Exemplo: executar o flowsheet do arquivo CSTR_linearize.mso com a opção **Linearize = true** e calcular os valores característicos da matriz Jacobiana (matriz A). Fazer o mesmo com o valor de C_p 10 vezes menor, i.e., $0,4 \text{ kJ} / (\text{kg K})$. Comparar a razão entre o maior e o menor valor característico em módulo. Analise também no MATLAB os exemplos dos arquivos run_cstr.m e run_cstr_qssa.m da pasta CSTR_ode.



Exemplo QSSA



$$\frac{dy_1(\tau)}{d\tau} = [1 - y_1(\tau)] - Da \cdot y_1(\tau) \quad \text{com } y_1(0) = 0$$

$$\frac{dy_2(\tau)}{d\tau} = \frac{1}{r} [y_1(\tau) - y_2(\tau)] - Da \cdot y_2(\tau) \quad \text{com } y_2(0) = 0$$

Exemplo QSSA

Exemplo: execute no MATLAB os arquivos run_tank12.m (sistema completo) e run_tank_ss.m (considerando o primeiro reator em estado quase-estacionário) da pasta tanks e discuta os resultados.

Analizando um Modelo Dinâmico

- Multiplicidade de estados estacionários
- Estabilidade
- Comportamentos dinâmicos complexos (ciclos limites, atratores estranhos)
- Sensibilidade paramétrica e às entradas

Multiplicidade de Estados Estacionários

Para o exemplo do reator CSTR, no estado estacionário:

$$\frac{1}{\tau}(T - T_f) + \frac{U A_t}{\rho V C_P}(T - T_w) = \frac{(-\Delta H_r) k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_{Af}}{\rho C_P \left(1 + \tau k_0 e^{-\frac{E}{RT}} \right)}$$

$$C_A = \frac{C_{Af}}{\left(1 + \tau k_0 e^{-\frac{E}{RT}} \right)}$$

$$\tau = \frac{V}{F_e}$$

Multiplicidade de Estados Estacionários

Reescrevendo a equação do balanço de energia na forma:

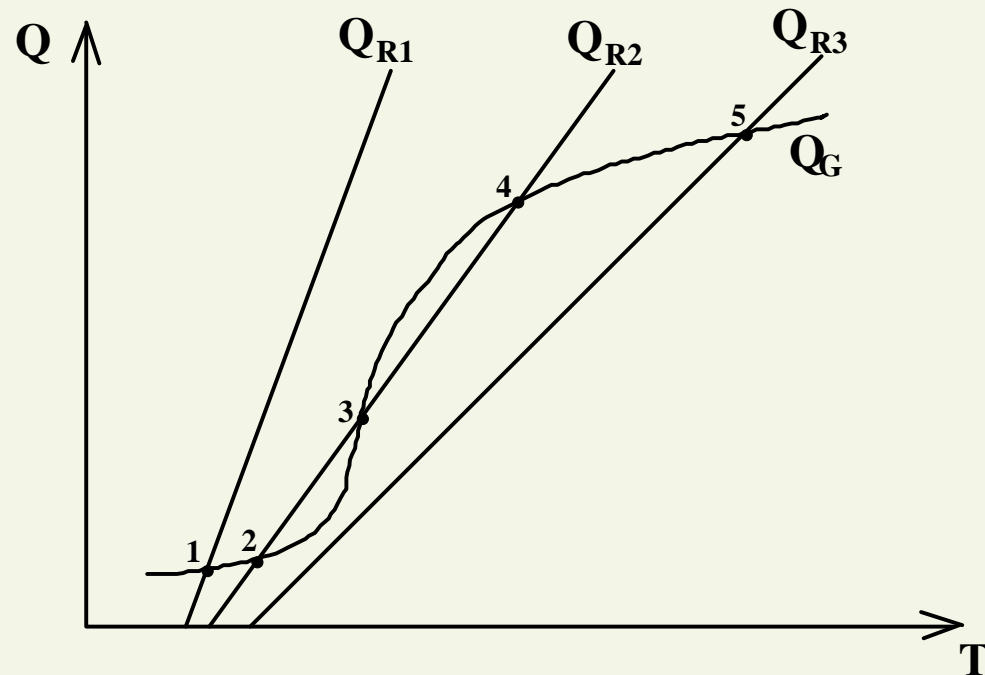
$$Q_R(T) = Q_G(T)$$

$$Q_R(T) = aT - b$$

$$a = \frac{1}{\tau} + \frac{U A_t}{\rho V C_P}$$

$$b = \frac{T_f}{\tau} + \frac{U A_t T_w}{\rho V C_P}$$

$$Q_G(T) = \frac{(-\Delta H_r) k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_{Af}}{\rho C_P \left(1 + \tau k_0 e^{-\frac{E}{RT}} \right)}$$



estável:

$$\frac{dQ_R}{dT} > \frac{dQ_G}{dT}$$

instável:

$$\frac{dQ_R}{dT} < \frac{dQ_G}{dT}$$

Métodos numéricos para resolução de E.A.

$$\frac{dx}{dt} = F(t, x) \quad \longrightarrow \quad F(x) = 0$$

Substituições sucessivas: $F(x) = 0 \quad \longrightarrow \quad x = G(x)$

$$x^{(k+1)} = G(x^{(k)}) \quad , k = 0, 1, 2, \dots$$

Newton-Raphson: $x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha [J(x^{(m)})]^{-1} F(x^{(k)}) \quad , k = 0, 1, 2, \dots$

$$J_{ij}(x^{(k)}) = \frac{\partial F_i(x^{(k)})}{\partial x_j} \cong \frac{F_i(x^{(k)} + \delta_j e_j) - F_i(x^{(k)})}{\delta_j}$$

$$\delta_j = \sqrt{\varepsilon} \cdot \max(|x_j^{(k)}|, \varepsilon_{abs}, 100\sqrt{\varepsilon})$$

$$m \leq k \text{ e } 0 < \alpha \leq 1$$

Métodos numéricos para resolução de E.A.

Continuação homotópica: $H(x; p) = (1 - p) F(x) + p G(x) = 0$, $0 \leq p \leq 1$

$$G(x) = J(x^{(0)})(x - x^{(0)}) \quad \text{homotopia afim}$$

$$G(x) = F(x) - F(x^{(0)}) \quad \text{homotopia de Newton}$$

→ Pode se obter múltiplas soluções variando continuamente o parâmetro p

Continuação paramétrica: $F[x(s); p(s)] = 0$

Onde s é alguma parametrização, como por exemplo o comprimento de arco do caminho gerado

$$\frac{\partial F}{\partial x} \dot{x}(s) + \frac{\partial F}{\partial p} \dot{p}(s) = 0 \quad , \quad \dot{x} = \frac{dx}{ds} \quad \text{e} \quad \dot{p} = \frac{dp}{ds}$$

$$DF = \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x} & \frac{\partial F}{\partial p} \end{bmatrix} \quad \text{derivada de Frechet}$$

Métodos numéricos para resolução de E.A.

Para a continuação paramétrica necessita-se de algoritmos para realizar continuação em caminhos regulares, pontos limites (ou *turning points*) e pontos de bifurcação e suas ramificações:

Um ponto (x_o, p_o) é:

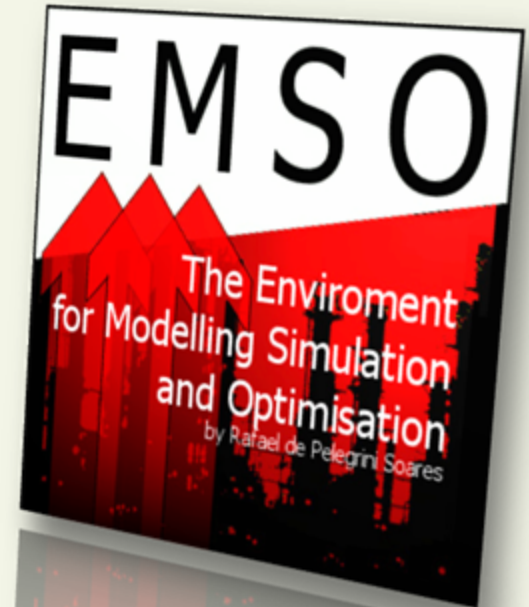
- Regular se $\frac{\partial F(x_o, p_o)}{\partial x}$ for não-singular
- Ponto limite se $\frac{\partial F(x_o, p_o)}{\partial x}$ for singular e DF tiver rank = n \longrightarrow reparametrização
- Bifurcação se $\frac{\partial F(x_o, p_o)}{\partial x}$ for singular e DF tiver rank < n

Software recomendado para continuação paramétrica (construção de diagramas de bifurcação) \longrightarrow AUTO-DAE

Multiplicidade de Estados Estacionários

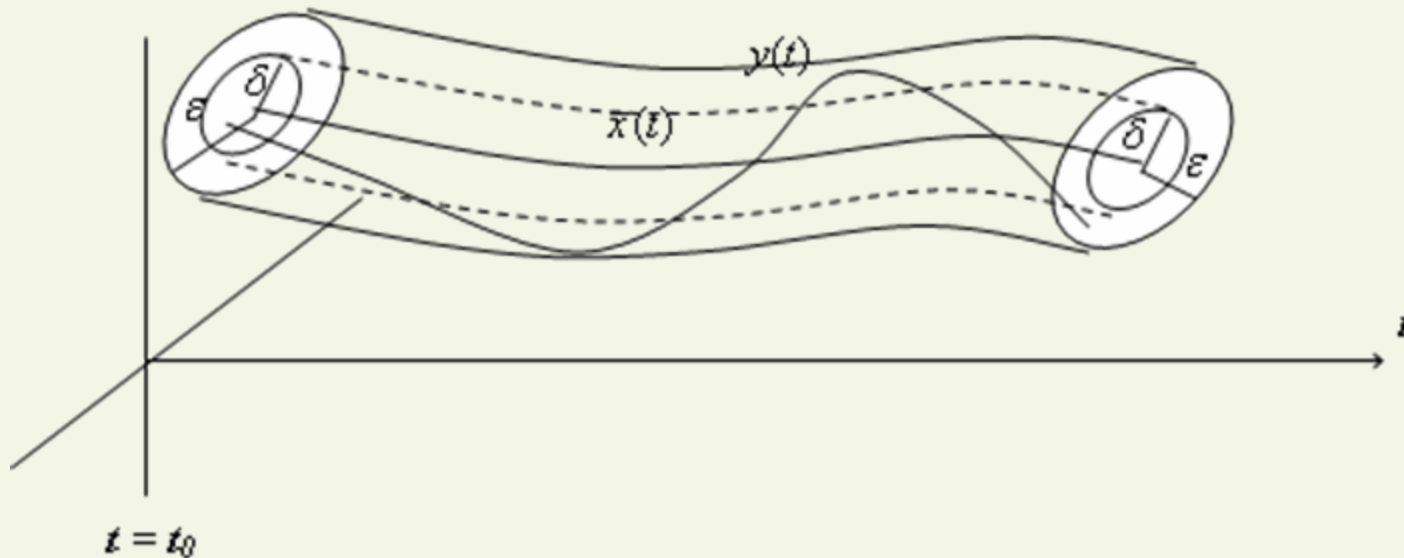
Exemplo: a) executar o flowsheet do arquivo CSTR_noniso.mso com a condição inicial de 578 K e compare com o resultado mudando a condição inicial para 579 K; b) obter os três estados estacionários usando o arquivo CSTR_sea.mso mudando a estimativa inicial para T e C_A (na seção **GUESS**). Na pasta CSTR_nla o mesmo pode ser feito no MATLAB com os métodos de Newton-Raphson e substituições sucessivas (run_fcstr.m, run_f2cstr.m).

Soluções: 1) $C_A = 13,13 \text{ kmol/m}^3$ e $T = 659,46 \text{ K}$
2) $C_A = 132,87 \text{ kmol/m}^3$ e $T = 523,01 \text{ K}$
3) $C_A = 299,86 \text{ kmol/m}^3$ e $T = 332,72 \text{ K}$



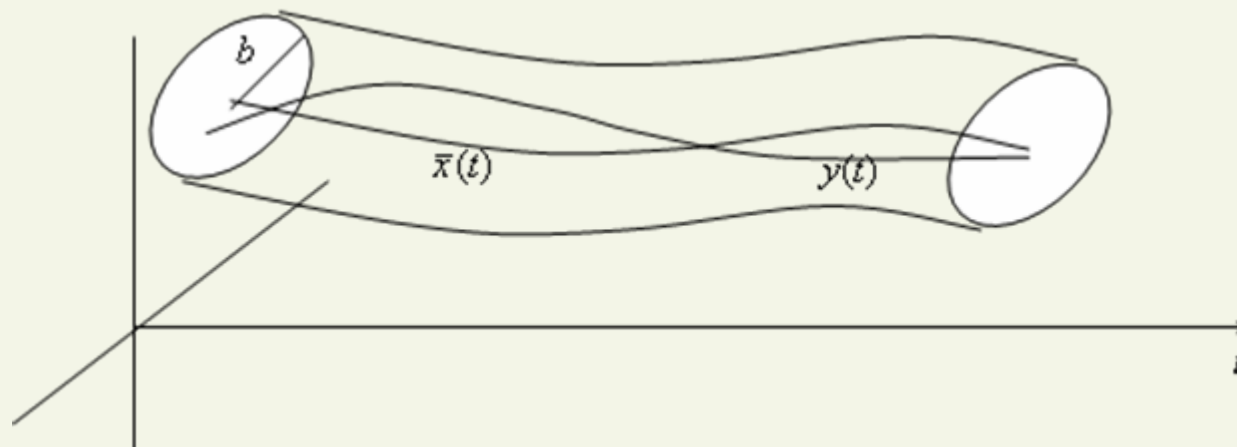
Análise de Estabilidade

Estabilidade de Liapunov: $\bar{x}(t)$ é dito ser estável (ou Liapunov estável) se, dado $\varepsilon > 0$, existe um $\delta = \delta(\varepsilon) > 0$, tal que, para qualquer outra solução, $y(t)$, de $\frac{dx}{dt} = F(x)$ satisfazendo $|\bar{x}(t_0) - y(t_0)| < \delta$, então $|\bar{x}(t) - y(t)| < \varepsilon$ para $t > t_0$.



Análise de Estabilidade

Estabilidade assintótica: $\bar{x}(t)$ é dito ser estável assintoticamente se ele é Liapunov estável e existe uma constante $b > 0$ tal que, se $|\bar{x}(t_0) - y(t_0)| < b$ então $\lim_{t \rightarrow \infty} |\bar{x}(t) - y(t)| = 0$



Definindo as variáveis desvio: $y(t) = x(t) - \bar{x}(t) \longrightarrow \frac{dx}{dt} = \frac{d\bar{x}}{dt} + \frac{dy}{dt} = F(\bar{x}(t) + y)$

Expandindo em série de Taylor: $\frac{dx}{dt} = F(x) = F(\bar{x}(t)) + \frac{\partial F[\bar{x}(t)]}{\partial x} \cdot y + O(\|y\|^2)$

Linearização: $\frac{dy}{dt} = J[\bar{x}(t)] \cdot y = A(t) \cdot y$

Análise de Estabilidade

Para um ponto de equilíbrio $\bar{x}(t) = x^*$, a sua estabilidade está caracterizada pelos valores característicos da matriz Jacobiana $J(x^*) = A$:

$\Rightarrow x^*$ é um ponto fixo hiperbólico se nenhum dos valores característicos de $J(x^*)$ têm parte real zero.

$\Rightarrow x^*$ é um centro se os valores característicos são puramente imaginários (diferente de zero e parte real igual a zero). Ponto fixo não-hiperbólico.

$\Rightarrow x^*$ é um ponto sela, instável, se alguns dos valores característicos têm parte real > 0 e os demais têm parte real < 0 .

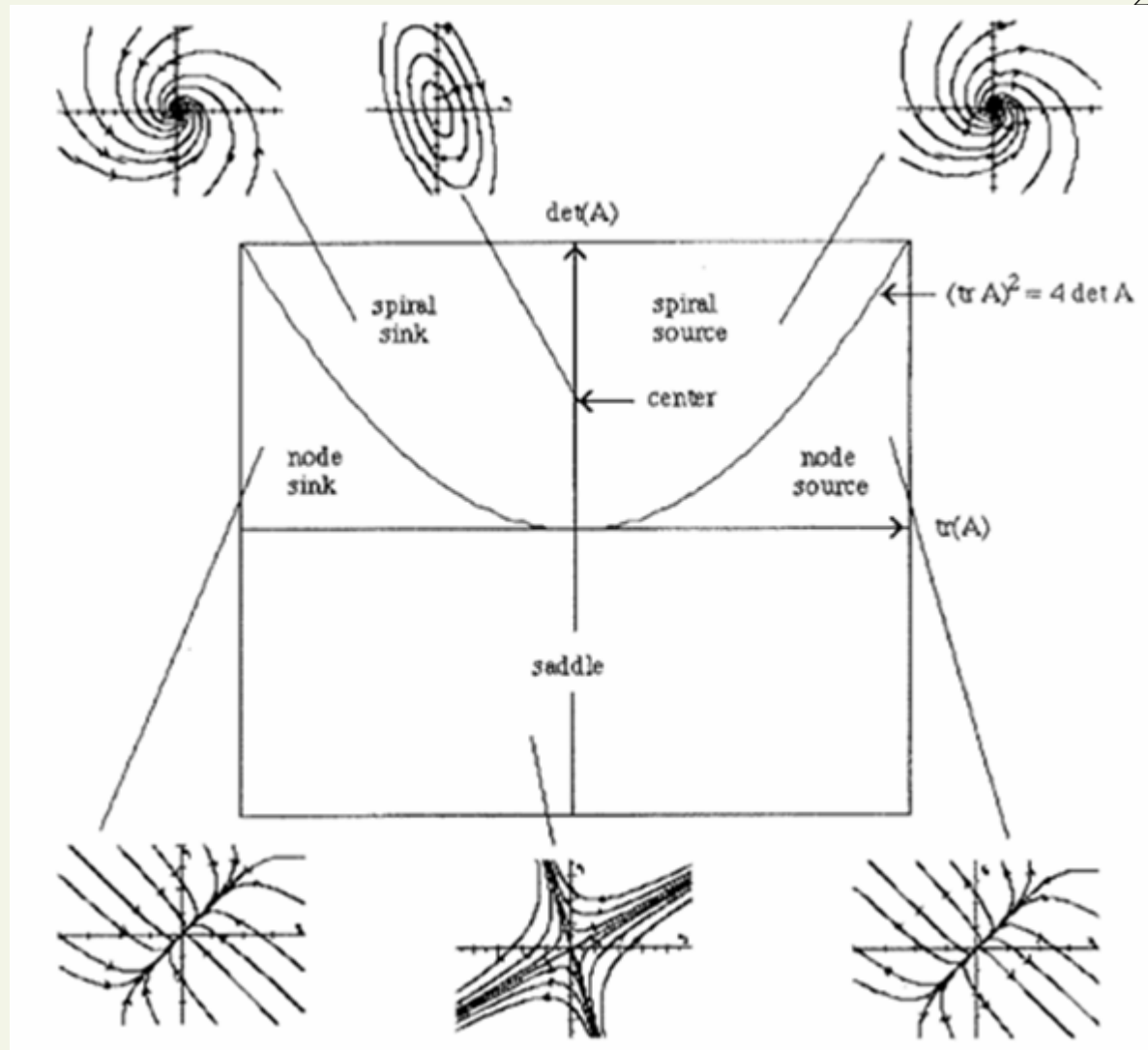
$\Rightarrow x^*$ é um ponto tipo nó estável ou atrator ou sumidouro se todos os valores característicos têm parte real < 0 .

$\Rightarrow x^*$ é um ponto tipo nó instável ou repulsor ou fonte se pelo menos um valor característico tem parte real > 0 .

Análise de Estabilidade

Para um sistema linear de segunda ordem:

$$\det(A - \lambda I) = \lambda^2 - \text{tr}(A) \cdot \lambda + \det(A) = 0 \longrightarrow \lambda = \frac{\text{tr}(A) \pm \sqrt{\text{tr}(A)^2 - 4 \det(A)}}{2}$$



Análise de Estabilidade

Para o exemplo do reator CSTR, considerando volume constante:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F_e}{V} (C_{Af} - C_A) - k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_A, \quad C_A(0) = C_{A0}$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_e}{V} (T_f - T) + \frac{(-\Delta H_r) k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_A}{\rho C_p} - \frac{UA_t (T - T_w)}{V \rho C_p}, \quad T(0) = T_0$$

$$J(C_A, T) = \begin{bmatrix} -\frac{F_e}{V} - k_0 e^{-\frac{E}{RT}} & -\frac{E}{RT^2} k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_A \\ \frac{(-\Delta H_r) k_0 e^{-\frac{E}{RT}}}{\rho C_p} & -\frac{F_e}{V} + \frac{E}{RT^2} \frac{(-\Delta H_r) k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_A}{\rho C_p} - \frac{UA_t}{V \rho C_p} \end{bmatrix}$$

Análise de Estabilidade

1) Nó estável

$$J(13.13, 659.46) = \begin{bmatrix} -1.6458 \times 10^{-3} & -3.4282 \times 10^{-4} \\ 2.7542 \times 10^{-3} & 4.8934 \times 10^{-4} \end{bmatrix} \quad \lambda = \begin{bmatrix} -1.0205 \times 10^{-3} \\ -1.3604 \times 10^{-4} \end{bmatrix}$$

2) Ponto sela, instável

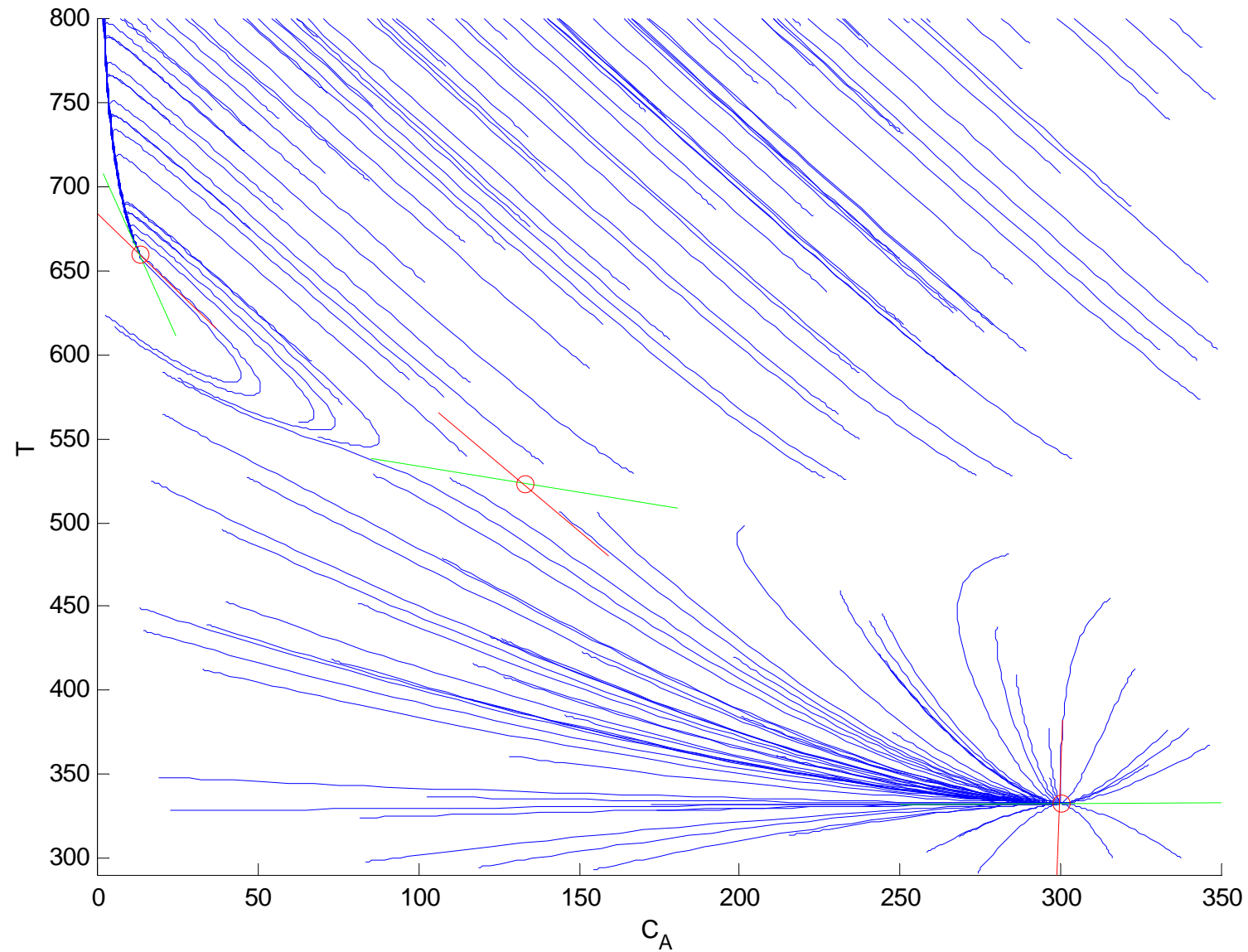
$$J(132.87, 523.01) = \begin{bmatrix} -1.6260 \times 10^{-4} & -3.1753 \times 10^{-4} \\ 1.5852 \times 10^{-4} & 4.4509 \times 10^{-4} \end{bmatrix} \quad \lambda = \begin{bmatrix} -6.3659 \times 10^{-5} \\ 3.4614 \times 10^{-4} \end{bmatrix}$$

3) Nó estável

$$J(299.86, 332.72) = \begin{bmatrix} -7.2050 \times 10^{-5} & -6.6220 \times 10^{-7} \\ 5.9285 \times 10^{-8} & -1.0944 \times 10^{-4} \end{bmatrix} \quad \lambda = \begin{bmatrix} -7.2051 \times 10^{-5} \\ -1.0944 \times 10^{-4} \end{bmatrix}$$

Análise de Estabilidade

arquivo: CSTR_nla/traj_cstr.m



Exercícios

- 1) Usando o arquivo CSTR_noniso.mso com uma abertura de válvula de 90% ($x = 0,9$), verifique se ocorre a existência de multiplicidade de soluções e compare o comportamento do reator com o caso original;
- 2) Apresentar os resultados dos exemplos dos slides 27 e o caso (a) do slide 36.

CSTR não-isotérmico com controle

Exemplo: executar o flowsheet do arquivo CSTR_noniso_pid.mso e analisar os efeitos dos parâmetros dos controladores.



Bibliografia

- Davis, M. E., "Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers", John Wiley & Sons, 1984.
- Denn, M., "Process Modeling", Longman, New York, 1986.
- Brenan, K. E., Campbell, S. L. & Petzold, L. R., "Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential Algebraic Equations", North-Holland, 1989.
- Luyben, W. L., "Process Modeling, Simulation, and Control for Chemical Engineers", McGraw-Hill, 1990.
- Silebi, C.A. & Schiesser, W.E., "Dynamic Modeling of Transport Process Systems", Academic Press, Inc., 1992.
- Ogunnaike, B.A. & Ray, W.H., "Process Dynamics, Modeling, and Control", Oxford Univ. Press, New York, 1994.
- Rice, R.G. & Do, D.D., "Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers", John Wiley & Sons, 1995.
- Bequette, B.W., "Process Dynamics: Modeling, Analysis, and Simulation", Prentice Hall, 1998.
- Fogler, H.S., "Elementos de Engenharia de Reações Químicas", Prentice Hall, 1999.

Agradecimentos especiais

Prof. Rafael de Pelegrini Soares, D.Sc.
Eng. Gerson Balbuena Bicca, M.Sc.
Eng. Euclides Almeida Neto, M.Sc.
Eng. Eduardo Moreira de Lemos, M.Sc.
Eng. Marco Antônio Müller

Pela preparação de parte do material do curso.



Pelo apoio ao Projeto ALSOC.

... obrigado pela sua atenção!



<http://www.enq.ufrgs.br/alsoc>



Lab. de Modelagem, Simulação e Controle de Processos

- Fone: +55-21-2562-8301
- E-mail: arge@peq.coppe.ufrj.br
- http://www.peq.coppe.ufrj.br/Areas/Modelagem_e_simulacao.html