



Simulador Dinâmico de Processos Orientado por Equações

– Aula 4 –

Argimiro R. Secchi

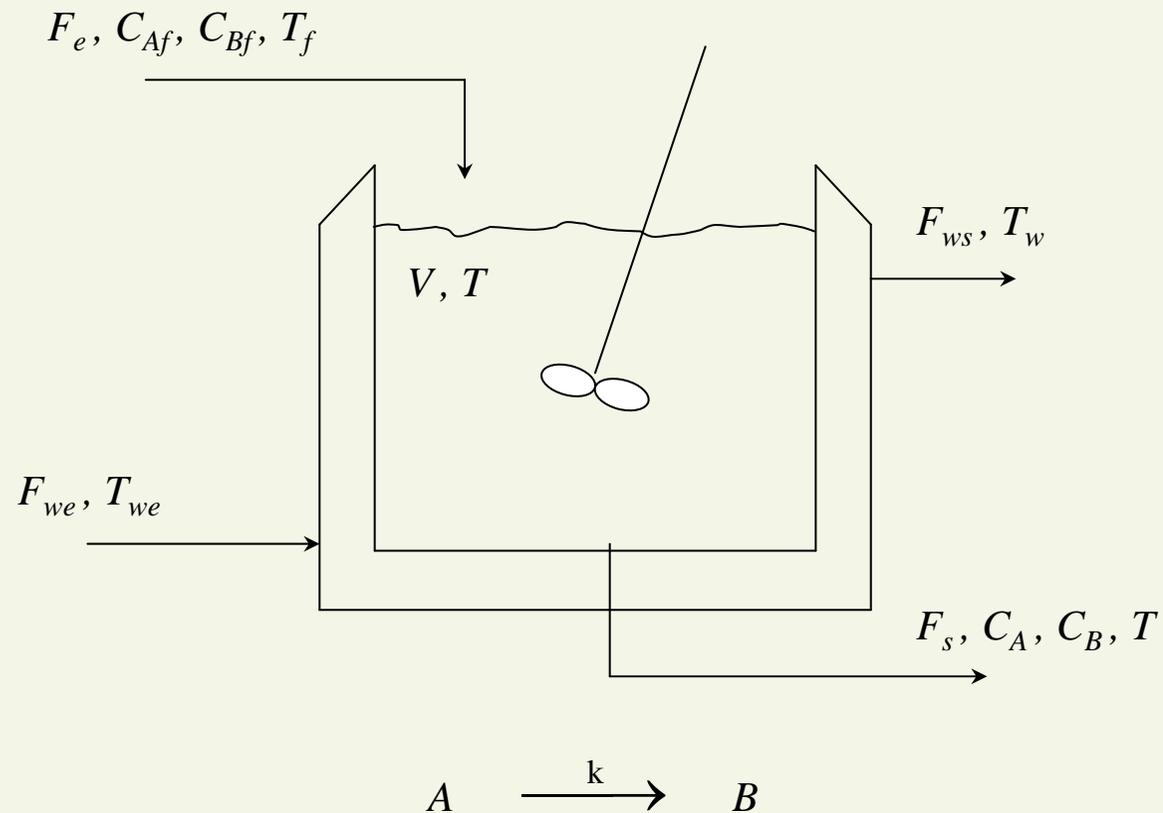


PEQ-COPPE/UFRJ

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:

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

Componente:

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

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

- CSTR: Modelagem -

Balanço de energia no reator:

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

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

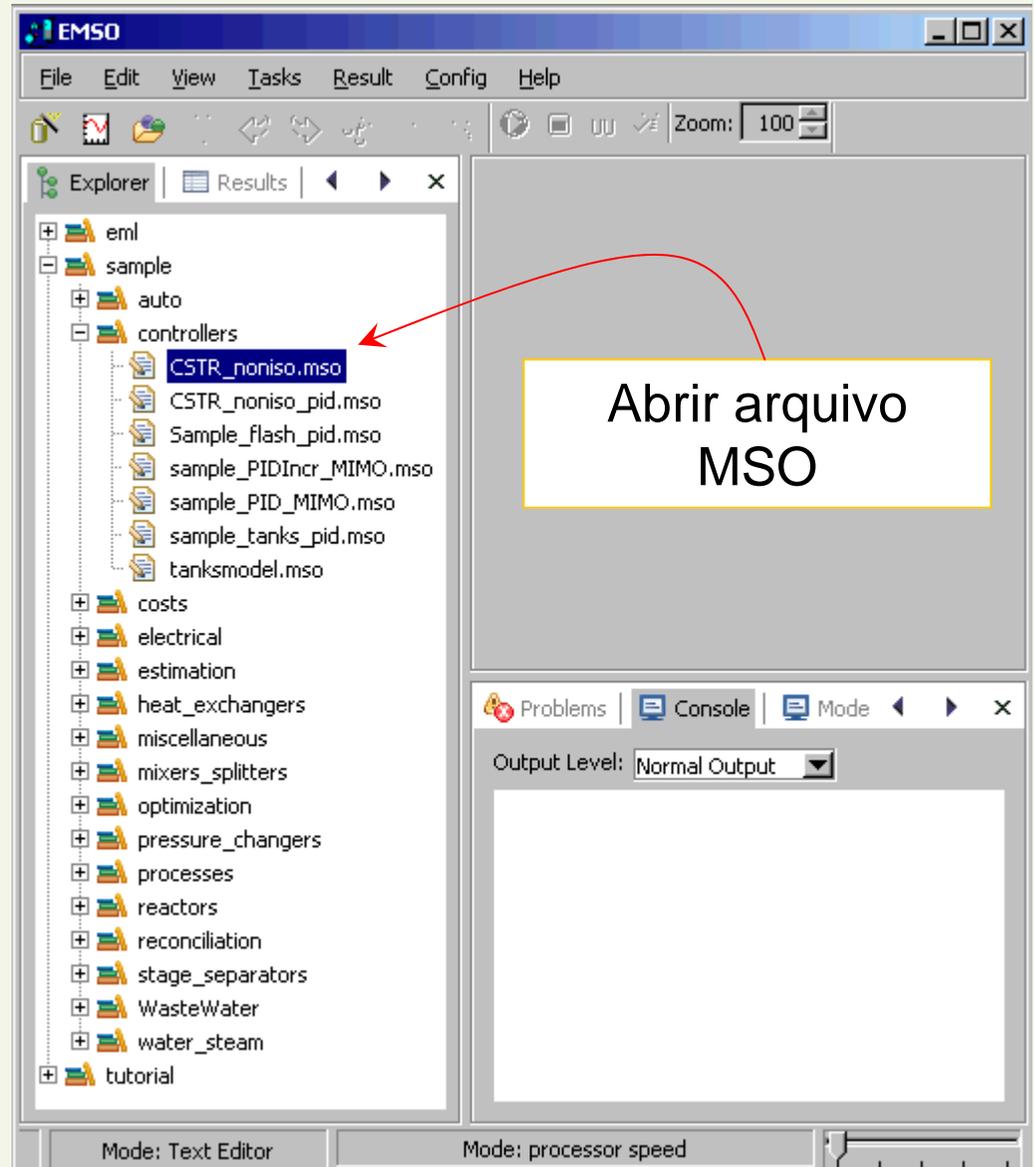
Graus de Liberdade = variáveis – constantes – especificações – forças motrizes – equações = variáveis a determinar – equações = $27 - 9 - 1 - 3 - 14 = 0$

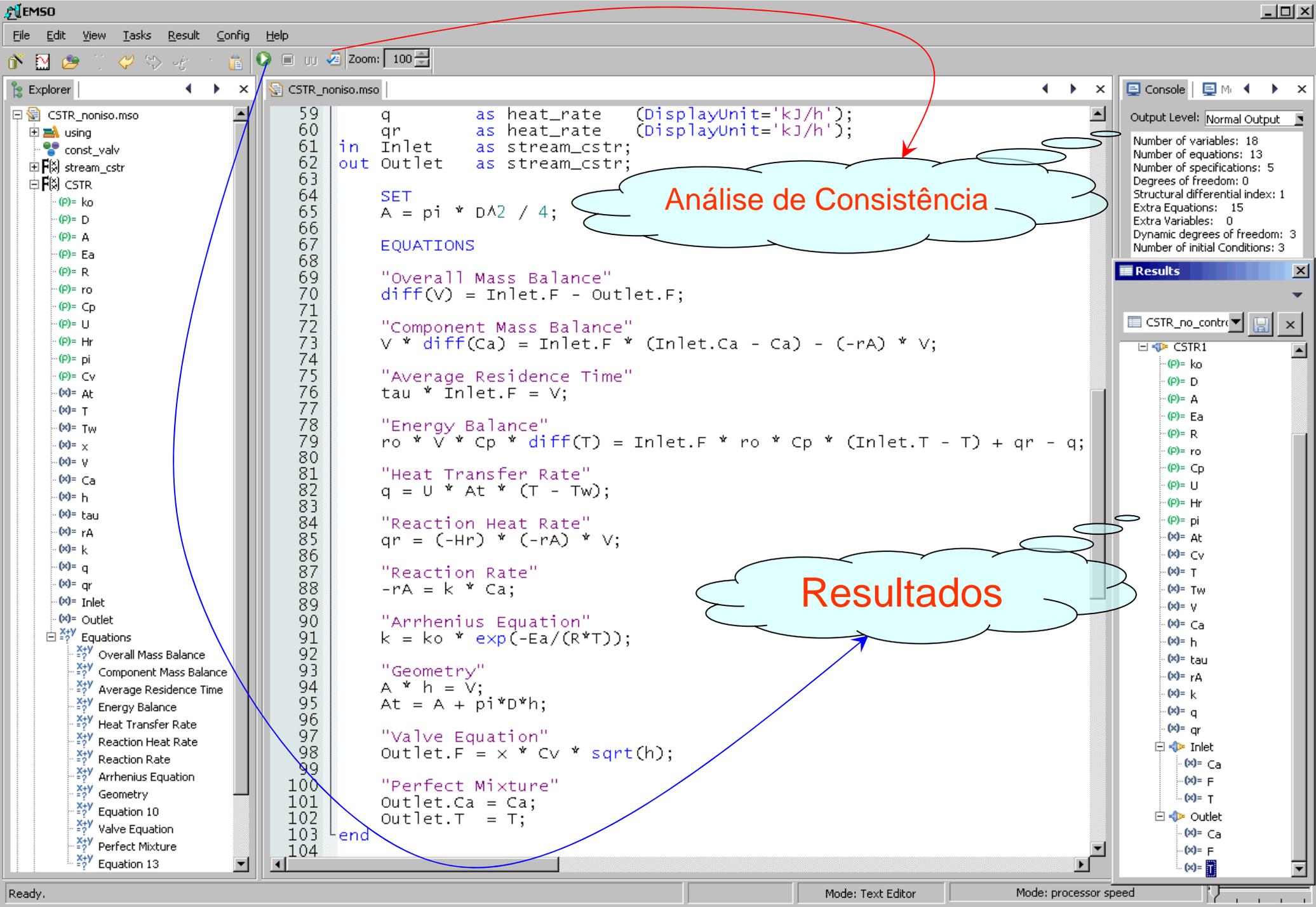
Graus de Liberdade Dinâmicos (índice < 2) = equações diferenciais = 3 \rightarrow

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

- CSTR: no EMSO -

➤ Executando o EMSO





- CSTR_noniso.mso
 - using
 - const_valv
 - stream_cstr
 - CSTR
 - ko
 - D
 - A
 - Ea
 - R
 - ro
 - Cp
 - U
 - Hr
 - pi
 - Cv
 - At
 - T
 - Tw
 - x
 - y
 - Ca
 - h
 - tau
 - rA
 - k
 - q
 - qr
 - Inlet
 - Outlet
 - Equations
 - Overall Mass Balance
 - Component Mass Balance
 - Average Residence Time
 - Energy Balance
 - Heat Transfer Rate
 - Reaction Heat Rate
 - Reaction Rate
 - Arrhenius Equation
 - Geometry
 - Equation 10
 - Valve Equation
 - Perfect Mixture
 - Equation 13

```
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 end
104
```

Análise de Consistência

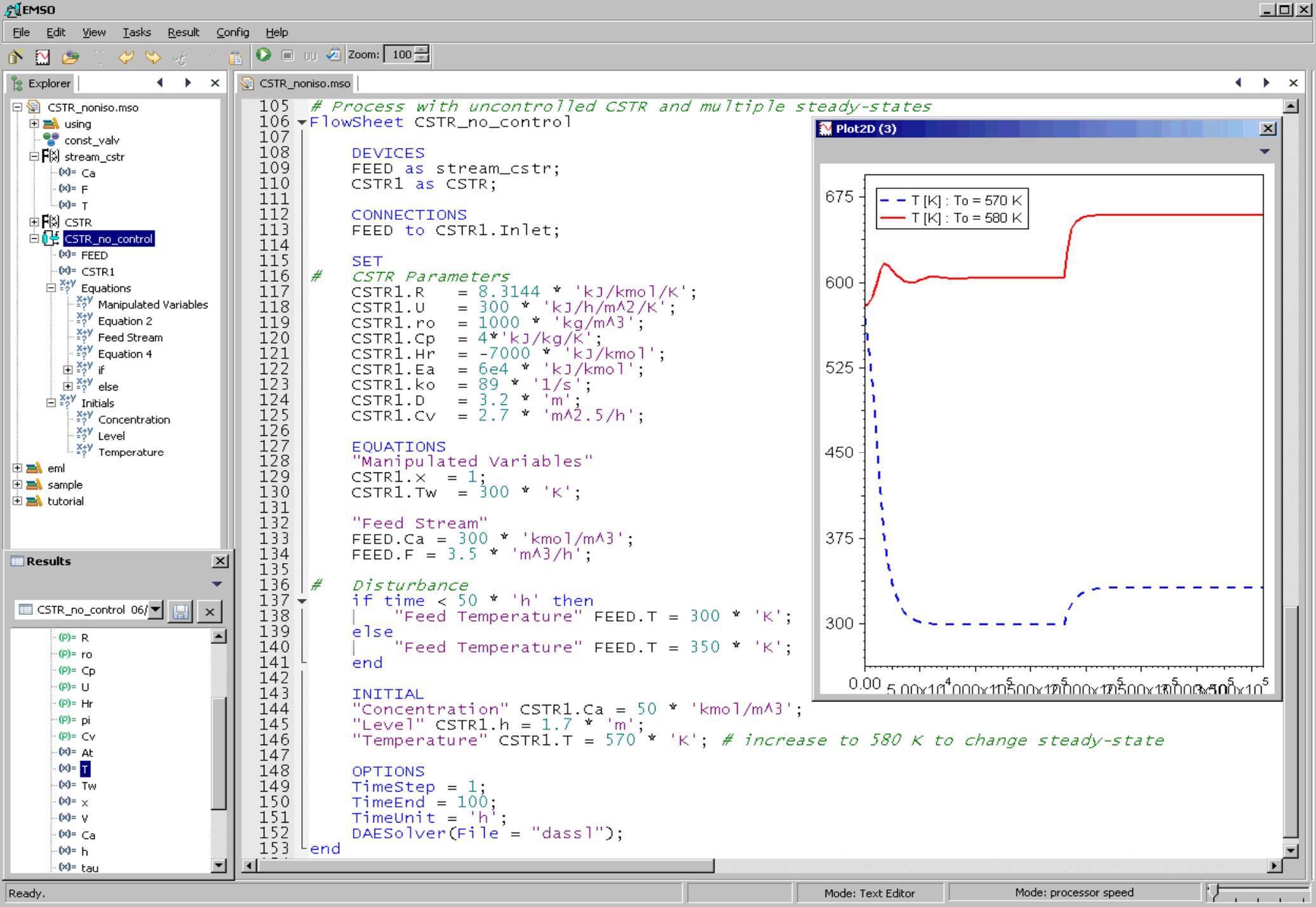
Resultados

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
 - ko
 - D
 - A
 - Ea
 - R
 - ro
 - Cp
 - U
 - Hr
 - pi
 - At
 - Cv
 - T
 - Tw
 - y
 - Ca
 - h
 - tau
 - rA
 - k
 - q
 - qr
 - Inlet
 - Ca
 - F
 - T
 - Outlet
 - Ca
 - F
 - T



- Checando Unidades de Medida -

The screenshot shows the EMSO software interface. On the left is a tree view of the model structure for 'CSTR_noniso.mso'. The main window displays the source code for 'CSTR_noniso.mso' with the following content:

```
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
```

Two red circles highlight the units in the code: one around `'m'` in line 130 and another around `'m^2/h'` in line 134. Below the code editor is a 'Problems' window showing the following error messages:

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

The status bar at the bottom indicates 'Ready.', 'Mode: Text Editor', and 'Mode: processor speed'.

incompatible units

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

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

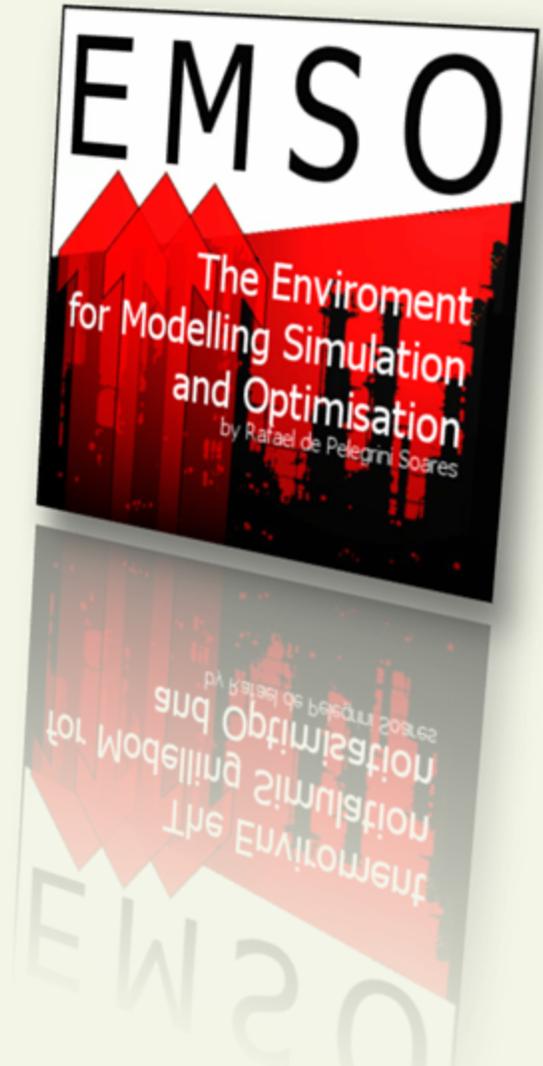
$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F_e}{A h} (C_{Af} - C_A) - k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_A \quad , \quad C_A(0) = C_{A0}$$

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

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

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	{	< 20	não rígido	→	Métodos explícitos
		$\approx 10^3$	rígido		}
		$\approx 10^6$	muito rígido		

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 a 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:

$$x' = Ax + Bu$$

$$y = Cx + Du$$

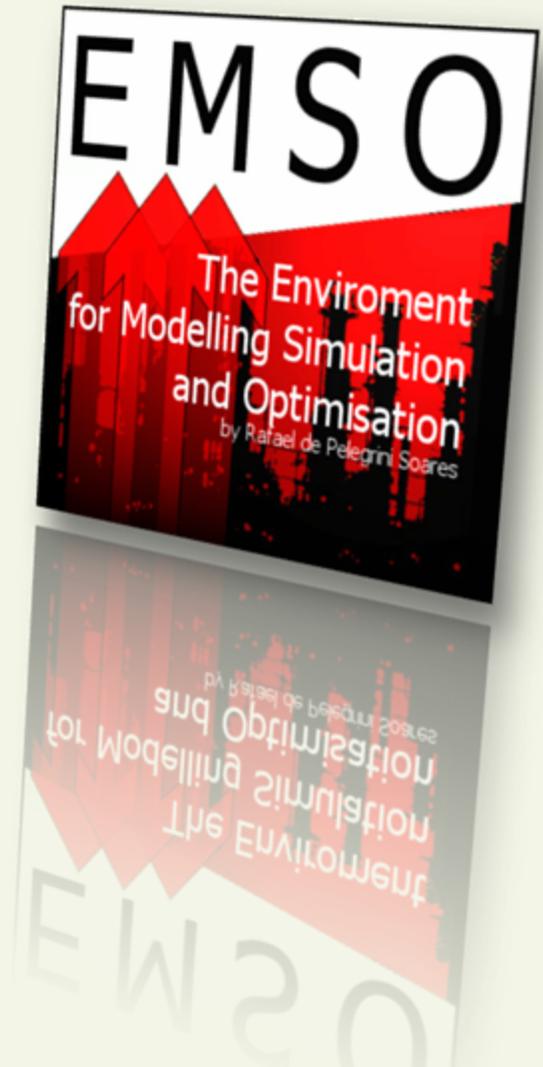
Linearização

Exemplo teste em um modelo linear: solução exata!

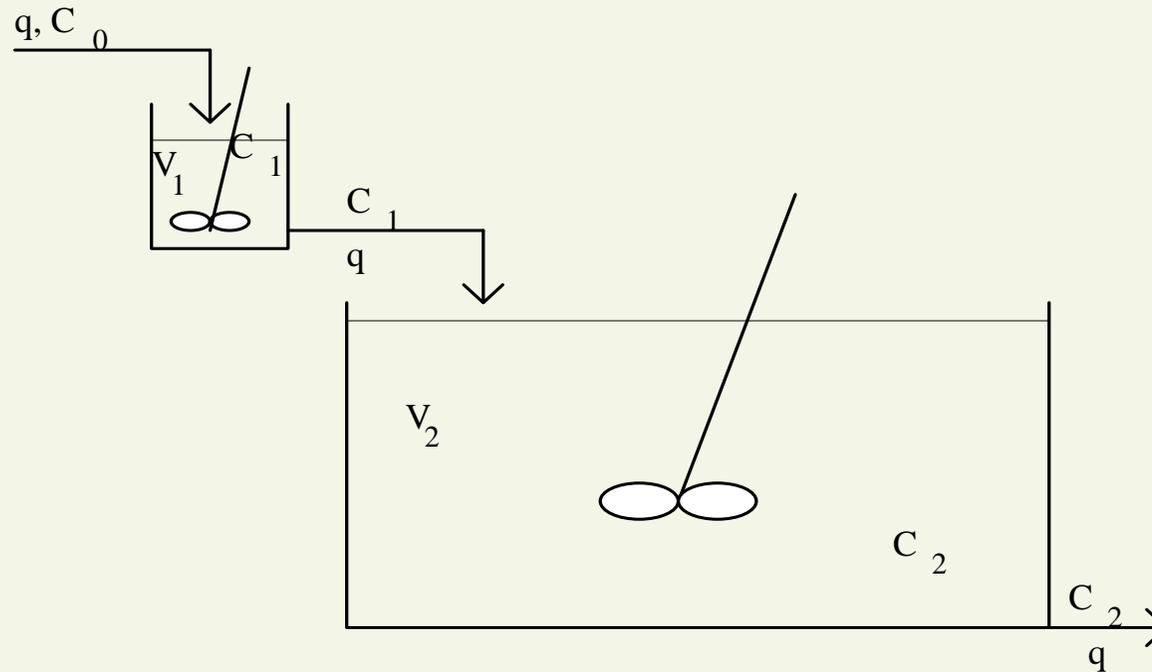
```
sample_linear.mso
21
22 using "types";
23
24 FlowSheet linear
25   PARAMETERS
26     nx      as Integer(Default=2);
27     ny      as Integer(Default=2);
28     nu      as Integer(Default=2);
29
30     A(nx,nx) as Real;
31     B(nx,nu) as Real;
32     C(ny,nx) as Real;
33     D(ny,nu) as Real;
34
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
```


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



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

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

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:

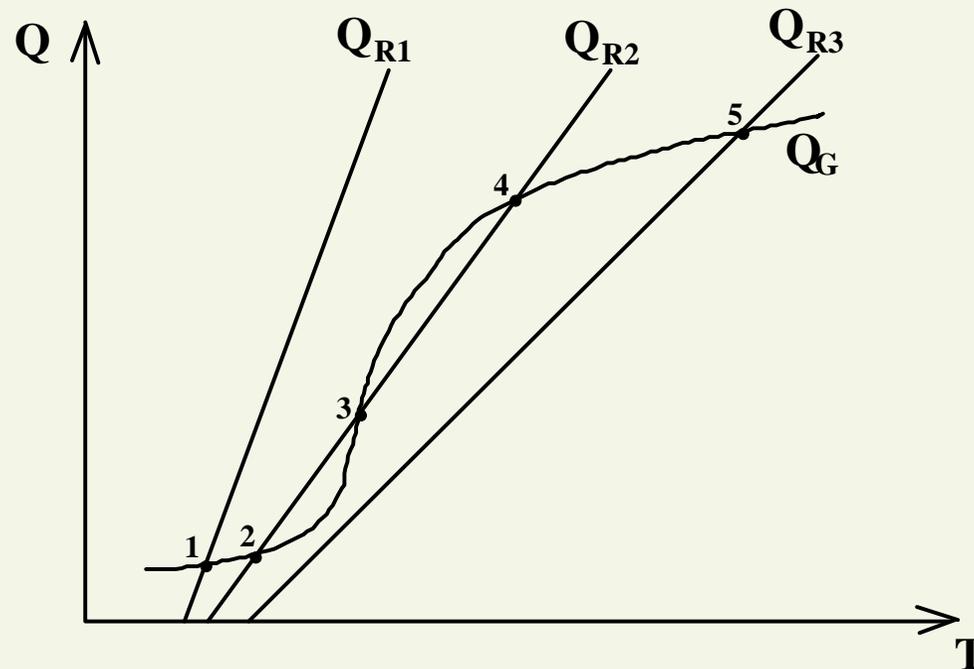
$$Q_R(T) = Q_G(T)$$

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

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

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

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



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

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

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

→ 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

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

$$DF = \left[\frac{\partial F}{\partial x} \quad \frac{\partial F}{\partial p} \right] \quad \text{derivada de Frechet}$$

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:

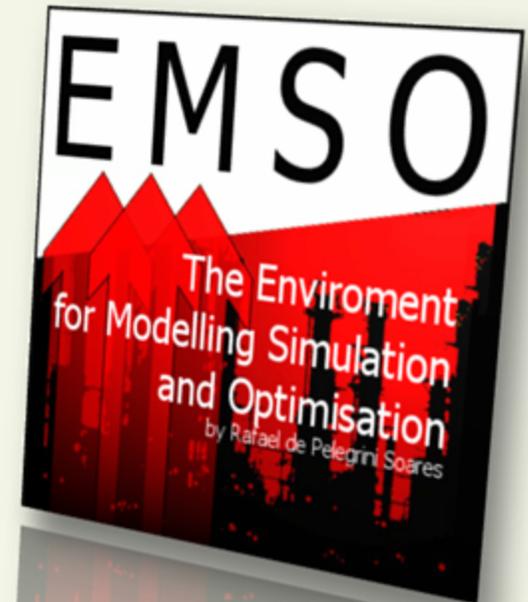
- Regular se $\frac{\partial F(x_o, p_o)}{\partial x}$ for não-singular
- Ponto limite se $\frac{\partial F(x_o, p_o)}{\partial x}$ for singular e DF tiver $\text{rank} = n$ \longrightarrow reparametrização
- Bifurcação se $\frac{\partial F(x_o, p_o)}{\partial x}$ for singular e DF tiver $\text{rank}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

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

Multiplicidade de Estados Estacionários

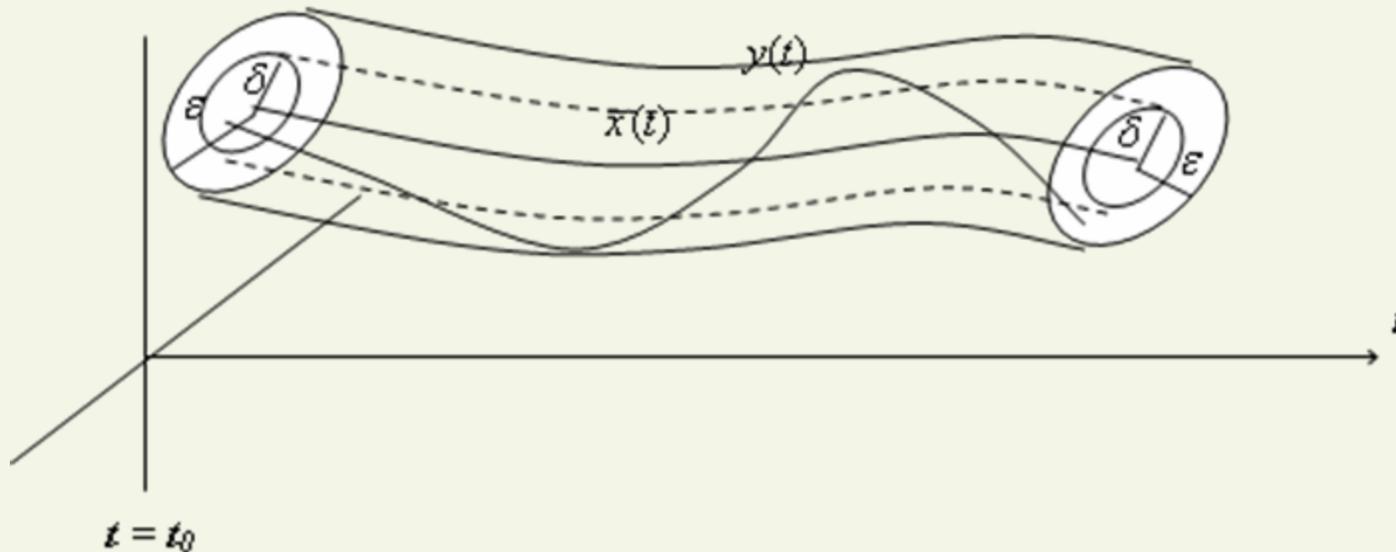
Exemplo: a) executar o flowsheet do arquivo CSTR_noniso.mso com a condição inicial de 578 K e compare com o resultado mudando a condição inicial para 579 K; b) obter os três estados estacionários usando o arquivo CSTR_sea.mso mudando a estimativa inicial para T e C_A (na seção **GUESS**). Na pasta CSTR_nla 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 $T = 332,72 \text{ K}$



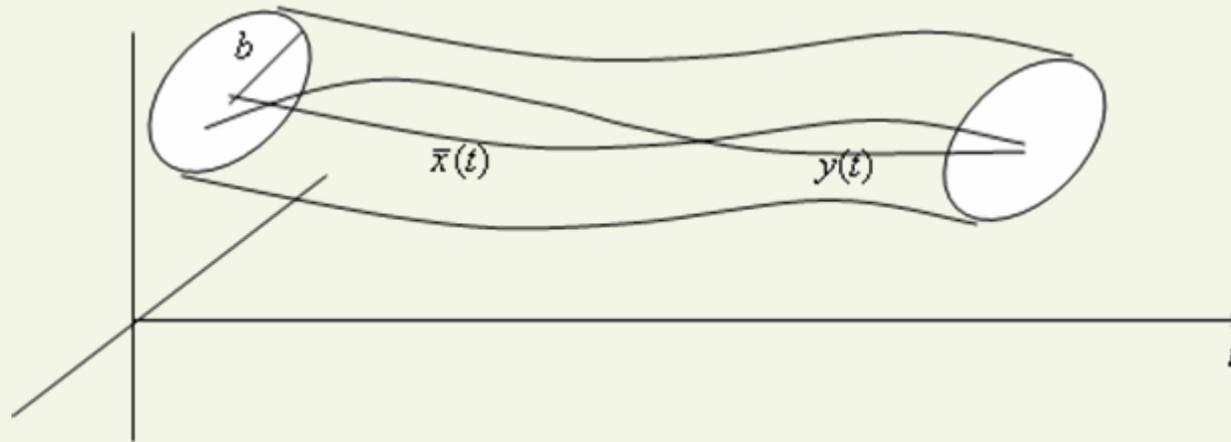
Análise de Estabilidade

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 $J(x^*) = A$:

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

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

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

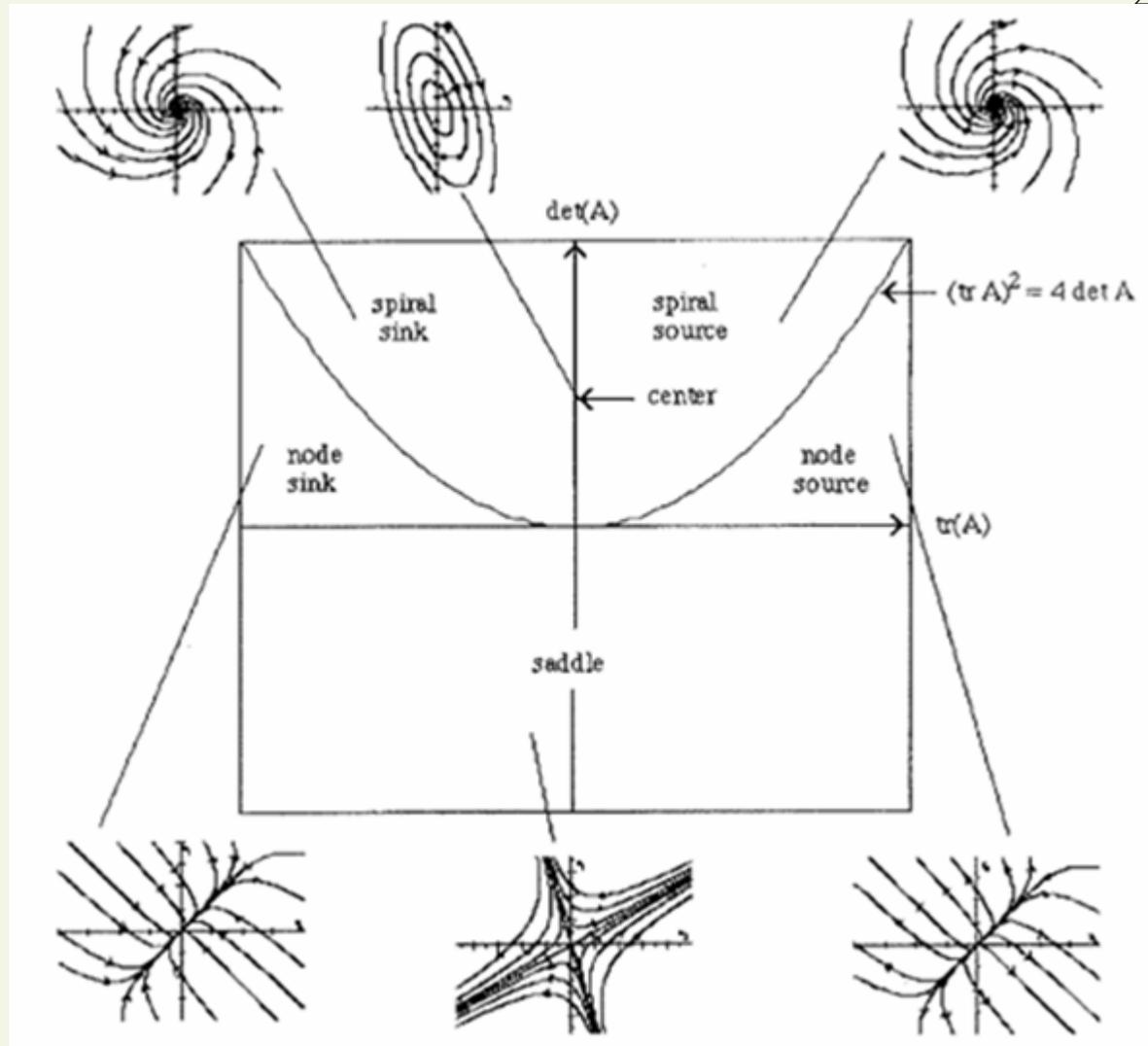
⇒ x^* é um ponto tipo nó estável ou atrator ou sumidouro se todos os valores característicos têm parte real < 0 .

⇒ 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

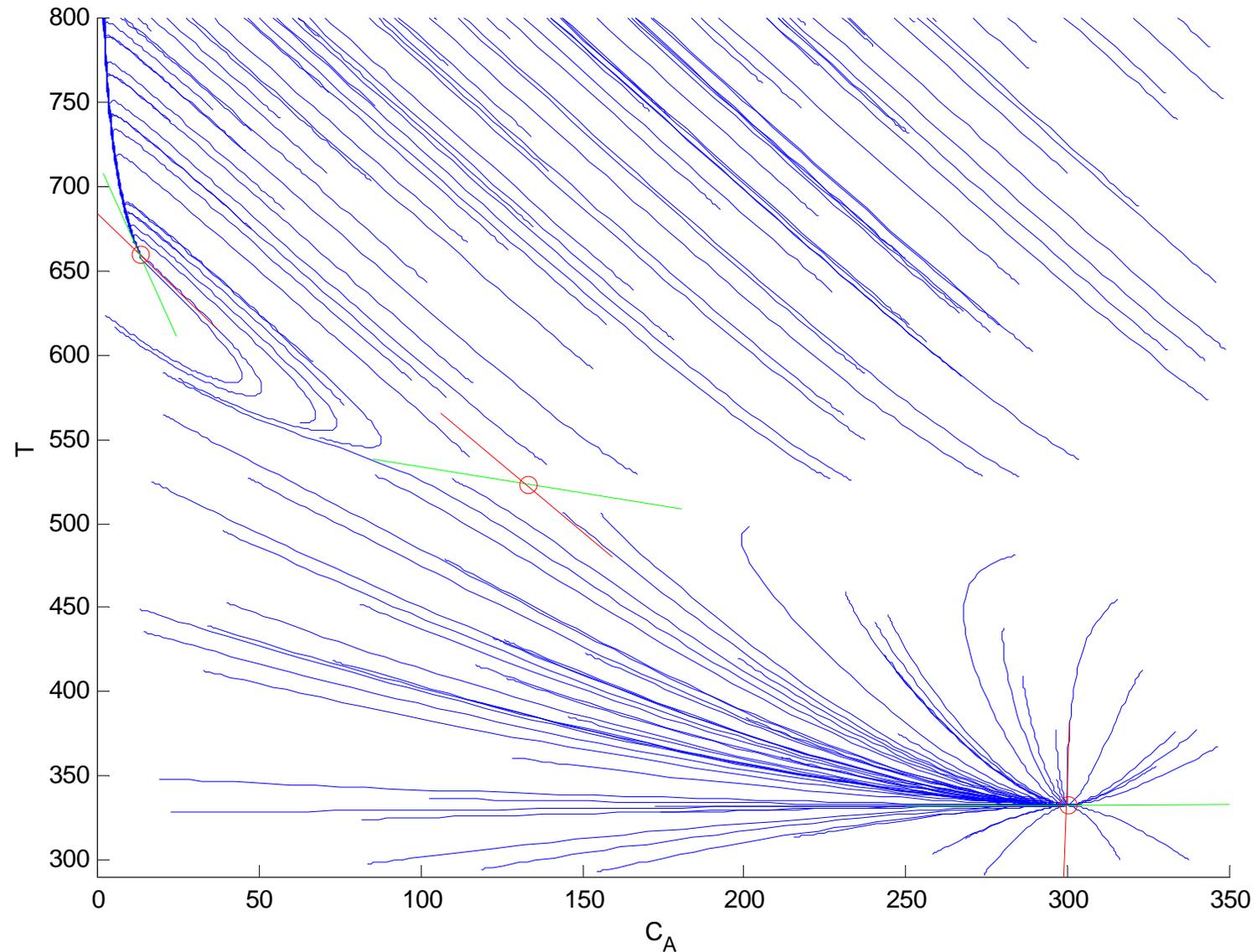
$$J(132.87, 523.01) = \begin{bmatrix} -1.6260 \times 10^{-4} & -3.1753 \times 10^{-4} \\ 1.5852 \times 10^{-4} & 4.4509 \times 10^{-4} \end{bmatrix} \quad \lambda = \begin{bmatrix} -6.3659 \times 10^{-5} \\ 3.4614 \times 10^{-4} \end{bmatrix}$$

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

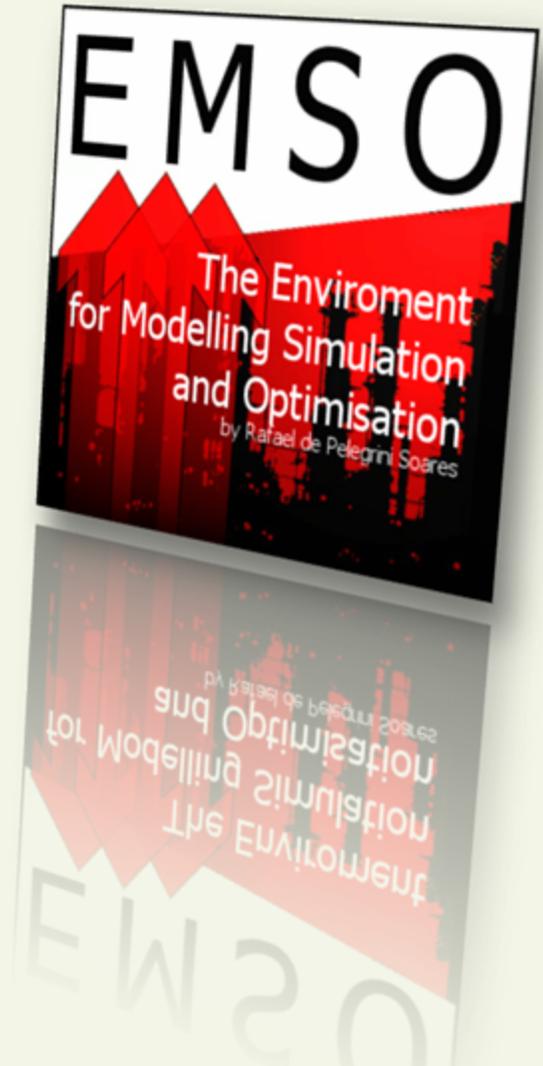


Exercícios

- 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