

Universidade Federal de Campina Grande
Centro de Ciências e Tecnologia
Departamento de Engenharia Elétrica

Trabalho de Conclusão de Curso

Trabalho apresentado por: Anderson Pablo Garcia Pereira
Orientador na Universidade: Péricles Resende Barros

Campina Grande – Paraíba
Junho de 2005

Aluno: Anderson Pablo Garcia Pereira
Matrícula: 29621461



Universidade Federal de Campina Grande
Centro de Ciências e Tecnologia
Departamento de Engenharia Elétrica

Disciplina: Projeto de Engenharia Elétrica

Título: Simulação e Controle de Sistemas Químicos

Trabalho apresentado por: Anderson Pablo Garcia Pereira

Orientador: Péricles Rezende Barros

Campina Grande – Paraíba

Junho de 2005



P436s Pereira, Anderson Pablo Garcia.

Avaliação da influência da frequência de amostragem no desempenho do NEURANÁLISE. / Anderson Pablo Garcia Pereira. - Campina Grande - PB: [s.n], 2005.

46 f.

Orientador: Professor Dr. Péricles Rezende Barros.

Trabalho de Conclusão de Curso - Monografia; (Curso de Bacharelado em Engenharia Elétrica) - Universidade Federal de Campina Grande; Centro de Ciências e Tecnologia.

1. Sistemas de Engenharia Química. 2. Equações de continuidade. 3. Equação de energia. 4. Sistema CSTR. 5. Movimento contínuo no tanque de reação. 6. Reator em lote químico. 7. Engenharia química. 8. Coluna de destilação binária. 9. Modelagem matemática - Engenharia Química. I. Barros, Péricles Rezende. II. Título.

CDU:66.01:621.3(043.1)

Elaboração da Ficha Catalográfica:

Johnny Rodrigues Barbosa
Bibliotecário-Documentalista
CRB-15/626

Aluno: Anderson Pablo Garcia Pereira

Matrícula: 29621461

Trabalho de Conclusão de Curso

Julgado em ____ / ____ / ____

Nota: _____

Banca Examinadora:

Orientador Acadêmico

Convidado

Aluno

Campina Grande – Paraíba

SUMÁRIO

Introdução

Leis fundamentais _____ pág. 1

Modelos matemáticos de sistemas _____ pág. 5

Métodos numéricos _____ pág. 23

Conclusão _____ pág. 28

Anexo _____ pág. 28

Programa em Matlab _____ pág. 29

Bibliografia _____ pág. 43

1 Leis Fundamentais

Neste capítulo, algumas leis fundamentais da física e da química serão revisadas, e serão também aplicadas para os sistemas químicos estudados por todo este relatório através dos experimentos e das simulações.

1.1 Equações de Continuidade

1.1.1 Equação de continuidade total:

O princípio da conservação de massa quando aplicado a um sistema dinâmico diz:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Fluxo de massa} \\ \text{entrando no sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Fluxo de massa} \\ \text{saindo do sistema} \end{array} \right] = [\text{Taxa de variação da massa em função do tempo}] \quad (1)$$

A unidade deste sistema será massa por tempo. Somente uma equação de continuidade total pode ser escrito por sistema.

O lado direito da equação 1 será uma derivada parcial $\partial/\partial t$ ou um derivada ordinária d/dt de massa entrando no sistema com respeito a variável independente t .

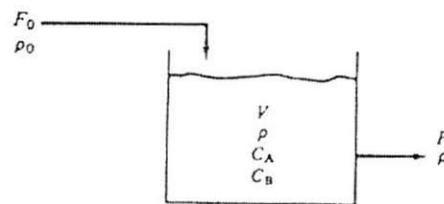


Figure 1: Tanque perfeitamente misturado.

Um líquido A, com vazão e densidade como mostrado na figura (1), entra em um tanque e sai depois de um determinado tempo com uma vazão e densidade diferentes da inicial por um cano localizado na parte inferior.

onde :

F_0 - vazão volumétrica de entrada (m^3/min)

ρ_0 - densidade inicial (kg/m^3)

F - vazão volumétrica de saída (m^3/min)

ρ - densidade final (kg/m^3)

V - volume no tanque (m^3)

Desde que o líquido esteja perfeitamente misturado, a densidade é a mesma em qualquer lugar do tanque, ou seja, não varia com a posição radial ou axial, logo pode-se usar um sistema grande e termos o mesmo resultado e a variável independente ainda será t .

Desde que ρ e V sejam funções somente de t , a equação de continuidade total do sistema acima será:

$$\frac{d(\rho V)}{dt} = F_0 \rho_0 - F \rho \quad (2)$$

em que $\frac{d(\rho V)}{dt}$ é a derivada da massa dentro do sistema em função do tempo. A unidade desta equação é kg/min .

1.1.2 Equação de continuidade por componentes:

Ao contrário da massa, os componentes químicos não são preservados. Se uma reação ocorre dentro de um sistema, o número de moles de um componente individual aumentará se é um produto da reação ou diminuirá se é reagente. Portanto o enésimo componente químico da equação de continuidade do sistema diz:

$$[\text{Fluxo de moles do enésimo componente entrando no sistema}] - [\text{Fluxo de moles do enésimo componente saindo do sistema}] + [\text{Taxa de formação de moles do enésimo componente da reação química}] = [\text{taxa de variação de moles do enésimo componente dentro do sistema}] \quad (3)$$

A unidade deste sistema será número de moles do enésimo componente por unidade de tempo.

Exemplo: Se tivermos um tanque semelhante ao mostrado na figura 1, exceto que uma reação química acontece dentro do tanque, o componente A reage irreversivelmente na taxa k_2 , formando assim o componente B.



Figure 2: Reação química.

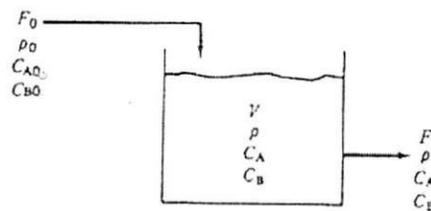


Figure 3: CSTR.

$$\text{Vazão de A entrando no sistema} = F_0 C_{A0}$$

$$\text{Vazão de A saindo do sistema} = F C_A$$

$$\text{Taxa de formação de A na reação} = -VkC_A$$

O sinal negativo vem do fato que A está sendo consumido e não produzido. As unidades de todos estes termos devem ser o mesmo: moles de A por unidade de tempo. Então o termo VkC_A deve ter estas unidades, por exemplo $(\text{m}^3)(\text{min}^{-1})(\text{moles de A}/\text{m}^3)$. Assim as unidades de k nestes sistemas são min^{-1} .

$$\text{Taxa de mudança de A dentro do tanque} = \frac{d(VC_A)}{dt}$$

Combinando todos os dados acima, temos:

$$\frac{d(VC_A)}{dt} = F_0 C_{A0} - F C_A - V k C_A \quad (4)$$

Usa-se então uma derivada ordinária visto que é a única variável independente neste sistema agregado. O lado esquerdo da equação é o termo dinâmico. Os dois primeiros termos no lado direito são os condutores de calor e o último termo de geração.

Visto que o termo é binário (componentes A e B), pode-se escrever uma outra equação de continuidade para o componente B. Seja C_B a concentração de B, teremos:

$$\frac{d(VC_B)}{dt} = F_0 C_{B0} - F C_B + V k C_A \quad (5)$$

Note o sinal de mais antes do termo de geração, logo B está sendo produzido na reação.

1.1.3 Equação de Energia:

A primeira lei da termodinâmica coloca o princípio da conservação de energia. Escrevendo esta equação para qualquer sistemas, teremos:

$$\begin{aligned} & [\text{Fluxo de energia cinética, interna e potencial entrando no sistema por convecção ou difusão}] - \\ & [\text{Fluxo de energia cinética, interna e potencial saindo do sistema por convecção ou difusão}] + \\ & [\text{Calor adicionado ao sistema por condução, radiação ou reação}] - \\ & [\text{Trabalho feito pelo sistema}] = \\ & [\text{Taxa de variação da energia, interna e potencial dentro do sistema}] \end{aligned} \quad (6)$$

1.2 Simulações:

Com todas as leis e equações apresentadas, pode-se entrar agora na etapa de simulação dos sistemas. Para o projeto atual foi desenvolvido uma simulação para cada sistema, mas numa etapa final juntou-se todos os sistemas em apenas dois: os sistemas de malha aberta e os sistemas de malha fechada. Cada um tem sua própria tela de apresentação, contendo a opção de escolha do sistema, gráficos de saída, sinais opcionais para a entrada e ainda a grande vantagem de analisarmos a saída em função da entrada em tempo real.

Logo, no início do desenvolvimento das simulações, é utilizado para cada sistema três arquivos de extensão "m" do Matlab. Um para o sistema de equações, outro para plotar os gráficos de saída e um terceiro com a função ODE23 que era o arquivo responsável para calcular todas as equações diferenciais.

Em um passo seguinte foi criada uma interface gráfica para cada simulação, utilizando o GUIDE do próprio Matlab.

Em uma terceira etapa do projeto deixou-se de lado a função ODE23 do Matlab e iniciou-se o trabalho com métodos de integração. Isto foi feito para cada um dos sistemas em estudo. Por fim dividiu-se os sistemas em dois: um em malha aberta e outro em malha fechada e então foi criados as duas interfaces gráficas, concluído todo o projeto.

Exemplo: Considere agora um sistema macroscópico semelhante ao anterior, exceto que agora ocorrerão reações simultâneas. Neste sistema existirá o elemento A reagindo com B com taxa k_1 e B também reagindo com taxa k_2 produzindo um terceiro componente C.



Figure 4: Reação química.

Assumindo reações de primeira ordem, a equação de continuidade para os componentes A, B, e C são:

$$\frac{d(VC_A)}{dt} = F_0C_{A0} - FC_A - Vk_1C_A \quad (7)$$

$$\frac{d(VC_B)}{dt} = F_0C_{B0} - FC_B + Vk_1C_A - Vk_2C_B \quad (8)$$

$$\frac{d(VC_C)}{dt} = F_0C_{C0} - FC_C + Vk_2C_B \quad (9)$$

Os componentes concentrados são relacionados para a densidade:

$$M_A C_A + M_B C_B + M_C C_C = \rho$$

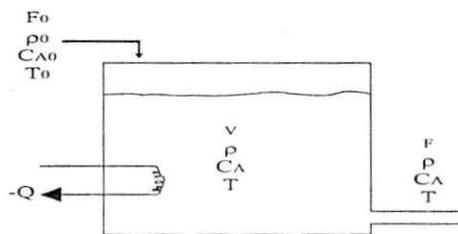


Figure 5: CSTR com uma bobina.

onde M_A e M_B são os pesos moleculares dos componentes A e B respectivamente.

Exemplo: O sistema CSTR (movimento contínuo no tanque de reação) será considerado de novo, mas desta vez com uma bobina dentro do tanque que pode remover ou adicionar calor a reação. Foi usado a convenção normal que é λ negativo para uma reação exotérmica e λ positivo para uma reação endotérmica.

A taxa de geração do calor (energia por tempo) devido a reação é a taxa de consumo de A vezes λ .

$$Q_G = -\lambda V C_A k \quad (10)$$

A taxa de calor removido da reação é $-Q$ (energia pelo tempo). A temperatura inicial é T_0 e a temperatura no reator é T . Escrevendo a equação 16 para este sistema,

$$F_0 \rho_0 (U_0 + K_0 + \phi_0) - F \rho (U + K + \phi) + (Q_G + Q) - (W + FP - F_0 P_0) = \frac{d}{dt} [(U + K + \phi) V \rho] \quad (11)$$

onde:

U =energia interna (energia por unidade de massa)

K =energia cinética (energia por unidade de massa)

ϕ =energia potencial (energia por unidade de massa)

W =trabalho realizado pelo sistema (energia por tempo)

P =pressão do sistema

P_0 =pressão inicial

Note que todos os termos na equação 11 devem ter as mesmas unidades (energia por tempo) assim o termo FP deve usar o fator de conversão apropriado (778 ft*lb_f/Btu na unidade de engenharia inglesa).

No sistema mostrado na figura 6 não existe trabalho realizado, então $W=0$. Se a vazão de entrada e saída não são muito altas, a energia cinética é desprezível. Se a elevação da vazão de entrada e saída são sobre a mesma, a energia potencial é pequena. Assim a equação 18 reduz-se a:

$$\begin{aligned} \frac{d(\rho V U)}{dt} &= F_0 \rho_0 U_0 - F \rho U + Q_G + Q - F \rho \frac{P}{\rho} + F_0 \rho_0 \frac{P_0}{\rho_0} \\ \frac{d(\rho V U)}{dt} &= F_0 \rho_0 (U_0 + P_0 \bar{V}_0) - F \rho (U + P \bar{V}) + Q_G + Q \end{aligned} \quad (12)$$

onde \bar{V} é o volume específico (m³/kg), recíproca da densidade. Entalpia, H ou h , é definida:

$$H \text{ ou } h \equiv U + P \bar{V} \quad (13)$$

Será usado h para a entalpia do líquido e H para a entalpia do vapor. Assim, para o CSTR, equação 12 se torna:

$$\frac{d(\rho V U)}{dt} = F_0 \rho_0 h_0 - F \rho h + Q - \lambda V k C_A \quad (14)$$

Para líquidos, o termo $P\bar{V}$ é desprezível comparado ao termo U e será usado a taxa de mudança no tempo da entalpia do sistema em vez da energia interna do sistema.

$$\frac{d(\rho Vh)}{dt} = F_0\rho_0h_0 - F\rho h + Q - \lambda V k C_A \quad (15)$$

As entalpias são funções da composição, temperatura e pressão, mas antes de tudo da temperatura. Da termodinâmica, a capacidade de calor a pressão contante, C_p , e a volume constante, C_v , são

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right) \quad C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right) \quad (16)$$

Para ilustrar que a energia é antes de tudo influenciada pela temperatura, deixe nos simplificar o problema assumindo que a entalpia do líquido pode ser expressada como um produto da temperatura absoluta e uma média da capacidade de calor C_p (cal/gK) que é constante.

$$h = C_p T$$

Também será assumido que as densidades de todos os líquidos são constantes. Com estas simplificações a equação 15 torna-se:

$$\rho C_p \frac{d(VT)}{dt} = \rho C_p (F_0 T_0 - FT) + Q - \lambda V k C_A \quad (17)$$

O estudo de malha aberta serve apenas para analisarmos a resposta do sistema a determinados valores de entradas. O objetivo principal deste projeto é o estudo mais aprofundado sobre os sistemas, então para isso faremos uma análise do mesmo sistema apresentado na figura (5), só que agora com uma realimentação, um valor de referência e também um controlador para o mesmo.

Para o controle deste sistema foi utilizado um controlador PI (proporcional + integral).

Para simplificação dos cálculos o controlador utilizado foi o Ziegler-Nichols, onde:

$$C_{ZN} = K_p \left[1 + \left(\frac{1}{T_i * S} \right) + T_d * S \right]$$

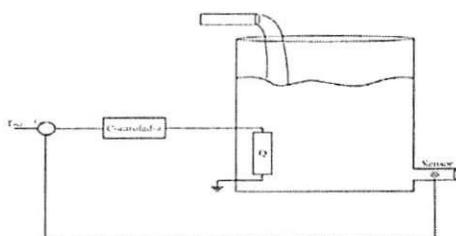


Figure 6: CSTR com realimentação.

2 Modelos matemáticos de sistemas de engenharia química

2.1 Introdução

Este capítulo é voltado para exemplos mais complexos. O capítulo será com sistemas simples e progredirá para processos mais realísticos. Os exemplos mais complexos serão os sistemas não ideal, a coluna de destilação com

multicomponentes e todos com um número muito grande de equações necessárias para uma descrição rigorosa do sistema.

Será impossível incluir neste trabalho modelos matemáticos para todos os tipos de sistemas de engenharia química. Os exemplos cobrem um grande número dos encontrados nas partes dos equipamentos: tanques, reatores de vários tipos e colunas de destilação.

2.2 Série de Isotérmicos, CSTRs com volume contante

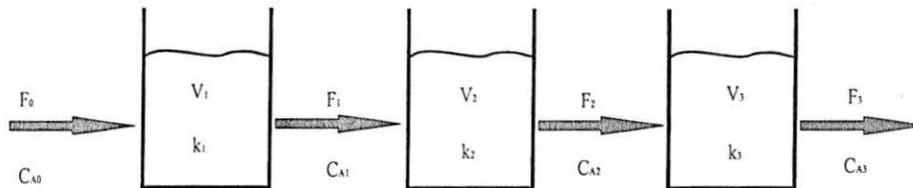


Figure 7: CSTR's em série

O sistema mostrado na figura (7) é uma simples extensão do CSTR considerado no capítulo anterior. O produto B é produzido e o reagente A é consumido em cada um dos três reatores perfeitamente misturados por uma reação de primeira ordem ocorrendo no líquido. Para o momento, vamos assumir que as temperaturas e os volumes são constantes. A densidade é denominada constante em toda a parte do sistema, que é uma mistura binária de A e B.

Com estas hipóteses, tudo está pronto para formular o modelo. Se a densidade e o volume de cada tanque são constantes, a massa total em cada tanque é constante. Assim a equação de continuidade total para o primeiro reator é:

$$\frac{d(\rho V_1)}{dt} = \rho F_0 - \rho F_1 = 0 \quad (18)$$

ou $F_1 = F_0$.

Da mesma forma o balanceamento de massa total nos tanques 2 e 3 serão:

$$F_3 = F_2 = F_1 = F_0 = F \quad (19)$$

onde F é definido como o taxa de transferência (m^3/min).

O objetivo é saber a quantia do reagente A e o produto B em cada tanque, assim as equações de continuidade dos componentes são necessárias. De qualquer forma, visto que o sistema é binário e que é conhecido a massa total do material em cada tanque, somente uma equação de continuidade de componente é necessária. Um dos dois B ou A pode ser usado. Se por acaso escolher arbitrariamente A, as equações que o descrevem em cada tanque serão:

$$\begin{aligned} V_1 \frac{dC_{A1}}{dt} &= F(C_{A0} - C_{A1}) - V_1 k_1 C_{A1} \\ V_2 \frac{dC_{A2}}{dt} &= F(C_{A1} - C_{A2}) - V_2 k_2 C_{A2} \\ V_3 \frac{dC_{A3}}{dt} &= F(C_{A2} - C_{A3}) - V_3 k_3 C_{A3} \end{aligned} \quad (20)$$

(com unidades de $\text{kg} \cdot \text{mol}$ de A/min):

A taxa de reação específica k_n é dada pela equação de Arrhenius

$$k_n = \alpha e^{-\frac{E}{RT_n}} \quad n = 1, 2, 3 \quad (21)$$

Se as temperaturas nos reatores são diferentes, os k serão diferentes.

Os volumes V_n podem ser levados para fora da derivada no tempo porque eles são constantes. Os fluxos são todos iguais a F , mas podem variar com o tempo. A equação de energia não é requerida porque foi assumido uma operação isotérmica.

As três equações diferenciais ordinárias não-lineares dadas nas equações (20) são o modelo matemático do sistema. Os parâmetros que devem ser conhecidos são V_1 , V_2 , V_3 , k_1 , k_2 e k_3 . As variáveis que devem ser

especificadas antes destas equações serem solucionadas são F e C_{A0} . "Especificadas" não significa que elas devem ser constantes. Elas podem ser variáveis no tempo, mas elas devem ser conhecidas ou dadas em função do tempo. As condições iniciais das três concentrações também devem ser conhecidas.

Para continuar deve-se checar o grau de liberdade do sistema. Existem três equações e com os parâmetros especificados, existem somente três incógnitas ou variáveis dependentes: C_{A1} , C_{A2} e C_{A3} .

Quando for utilizado para o projeto do controlador e análise de estabilidade, a versão será a simples. Se a taxa de transferência F é constante e os volumes e as temperaturas são as mesmas nos três tanques, as equações (20) tornam-se:

$$\begin{aligned} \frac{dC_{A1}}{dt} + (k + \frac{1}{\tau})C_{A1} &= \frac{1}{\tau}C_{A0} \\ \frac{dC_{A2}}{dt} + (k + \frac{1}{\tau})C_{A2} &= \frac{1}{\tau}C_{A1} \\ \frac{dC_{A3}}{dt} + (k + \frac{1}{\tau})C_{A3} &= \frac{1}{\tau}C_{A2} \end{aligned} \quad (22)$$

onde $\tau = \frac{V}{F}$ (a unidade é dada em minutos).

Existe somente um termo forçando a função ou variável de entrada, C_{A0} .

2.3 CSTRs com volumes variáveis

Se os exemplos anteriores forem modificados um pouco para permitir que o volume em cada reator varie com o tempo, ambas equações de continuidade (a total e por componentes) serão requeridas para cada reator. Para apresentar os efeitos cinéticos, assumiremos que a reação é agora de n -ésima-ordem no reagente A.

Reator 1:

$$\begin{aligned} \frac{dV_1}{dt} &= F_0 - F_1 \\ \frac{d}{dt}(V_1C_{A1}) &= F_0C_{A0} - F_1C_{A1} - V_1k_1(C_{A1})^n \end{aligned} \quad (23)$$

Reator 2:

$$\begin{aligned} \frac{dV_2}{dt} &= F_1 - F_2 \\ \frac{d}{dt}(V_2C_{A2}) &= F_1C_{A1} - F_2C_{A2} - V_2k_2(C_{A2})^n \end{aligned} \quad (24)$$

Reator 3:

$$\begin{aligned} \frac{dV_3}{dt} &= F_2 - F_3 \\ \frac{d}{dt}(V_3C_{A3}) &= F_2C_{A2} - F_3C_{A3} - V_3k_3(C_{A3})^n \end{aligned} \quad (25)$$

O modelo matemático agora contém seis equações diferenciais não-lineares de primeira ordem. Os parâmetros que devem ser conhecidos são k_1 , k_2 , k_3 e n . As condições iniciais para todas as variáveis dependentes que estão sendo integradas devem ser determinadas: C_{A1} , C_{A2} , C_{A3} , V_1 , V_2 , e V_3 . As condições impostas no início do sistema C_{A0} e F_0 deverão ser dadas.

Novamente deve ser checado o grau de liberdade do sistema. Existem seis equações, mas existem nove incógnitas: C_{A1} , C_{A2} , C_{A3} , V_1 , V_2 , V_3 , F_1 , F_2 e F_3 . Evidentemente este sistema não é suficientemente especificado e a solução não pode ser obtida.

O que tem de errado no nosso modelo? Um bom operador de planta poderá olhar o sistema e ver qual é o problema. Nós não especificamos as vazões de saída dos tanques. Provavelmente uma válvula de controle na saída regula a vazão. Como estas válvulas de controle serão fixadas? Uma configuração comum é ter o nível no tanque controlado pelo fluxo de saída, isto é, um controlador de nível abre a válvula de controle na saída para aumentar o fluxo de saída se o nível no tanque crescer. Assim deve-se ter uma relação entre o volume do tanque e o fluxo.

$$F_1 = f(V_1) \quad F_2 = f(V_2) \quad F_3 = f(V_3) \quad (26)$$

A função f descreverá o controlador do nível controlado e a válvula de controle. Essas três equações reduzem o grau de liberdade a zero.

É válido notar que o terceiro tanque provavelmente é mantido pelo fluxo no tanque F2. O nível no tanque 2 poderá ser controlado por F1, e o nível no tanque 1 por F0.

2.4 CSTR Não-Isotérmico

Nos reatores estudados até aqui, foi apresentado os efeitos das variações nas densidades, variações nos fluxos de entrada e saída e as equações de continuidade (componentes e total). As equações de energia não foram necessárias porque assumiu-se operações isotérmicas. A partir de agora será considerado um sistema em que a temperatura pode variar com o tempo. Uma reação exotérmica e irreversível é realizada em um simples CSTR como apresentado na figura abaixo:

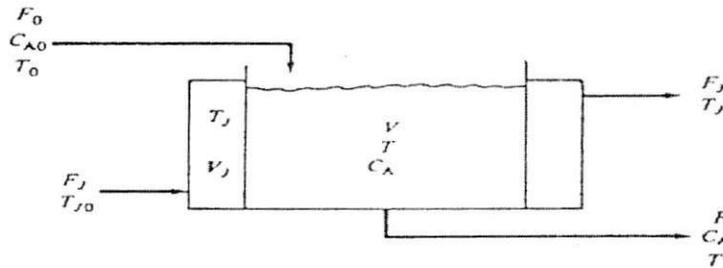


Figure 8: CSTR Não Isotérmico

Despreze as perdas de calor e considere constante a densidade.

Para remover o calor da reação, um revestimento externo de refrigeração cerca o reator. Uma refrigeração com água é adicionado ao revestimento na vazão volumétrica F_j e com um temperatura de T_{j0} . O volume da água no revestimento externo é constante. A massa das paredes do metal é considerada desprezível, assim a inércia térmica do metal não precisa ser considerada. Esta é frequentemente uma boa suposição porque a capacidade de calor do aço é uma ordem de magnitude menor que a da água.

2.4.1 Revestimento de refrigeração perfeitamente misturado

Assume-se então que a temperatura em todo o revestimento é T_j . A transferência de calor entre o processo na temperatura T e o revestimento de refrigeração na temperatura T_j é descrito por um coeficiente de transferência de calor global.

$$Q = U * A_H(T - T_j) \quad (27)$$

onde:

Q = taxa da transferência de calor

U = coeficiente de transferência de calor global

A_H = área da transferência de calor

Em geral a área da transferência de calor pode variar com o preenchimento no reator, caso alguma área não seja completamente coberta com massa do líquido em reação.

As equações que descrevem o sistema são:

Continuidade total no reator:

$$\frac{dV}{dt} = F_0 - F \quad (28)$$

Continuidade do componente A:

$$\frac{d(VC_A)}{dt} = F_0C_{A0} - FC_A - Vk(C_A)^n \quad (29)$$

Equação de energia no reator:

$$\rho \frac{d(Vh)}{dt} = \rho(F_0h_0 - Fh) - \lambda V k(C_A)^n - UA_H(T - T_j) \quad (30)$$

Equação de energia no revestimento:

$$\rho_j V_j \frac{dh_j}{dt} = F_j \rho_j (h_{j0} - h_j) + UA_H(T - T_j) \quad (31)$$

onde:

ρ_j = densidade da água utilizada para a refrigeração;

h = entalpia do líquido em processo;

h_j = entalpia do líquido utilizado para a refrigeração.

A relação hidráulica entre o volume no reator e a vazão de saída do reator também é necessária. Um controlador de nível é considerado a fim de mudar a vazão de saída e elevar ou diminuir o volume no tanque. A vazão na saída é fechada quando o volume cai para um valor mínimo.

$$F = k_v(V - V_{\min}) \quad (32)$$

O controlador de nível é um controlador proporcional com realimentação.

Finalmente, será necessário dados da entalpia para relacionarmos os h 's da composição e temperatura. Vamos assumir as simples formas:

$$h = C_p T \quad h_j = C_j T_j \quad (33)$$

onde: C_p = capacidade de calor do líquido em processo

C_j = capacidade de calor da água para a refrigeração

Usando as equações acima e a relação de Arrhenius para k , as cinco equações que descrevem o sistema são:

$$\frac{dV}{dt} = F_0 - F \quad (34)$$

$$\frac{d(VC_A)}{dt} = F_0C_{A0} - FC_A - V(C_A)^n \alpha e^{-\frac{E}{RT}} \quad (35)$$

$$\rho C_p \frac{d(VT)}{dt} = \rho C_p (F_0 T_0 - FT) - \lambda V (C_A)^n \alpha e^{-\frac{E}{RT}} - UA_H(T - T_j) \quad (36)$$

$$\rho_j V_j C_j \frac{dT_j}{dt} = F_j \rho_j C_j (T_{j0} - T_j) + UA_H(T - T_j) \quad (37)$$

$$F = K_v(V - V_{\min}) \quad (38)$$

Se for checado o grau de liberdade, será notório a existência de cinco equações e cinco incógnitas: V , F , C_A , T e T_j . Para isso, deve-se ter condições iniciais para estas cinco variáveis dependentes. Os valores iniciais são T_0 , F_0 , C_{A0} e F_j . Os parâmetros que devem ser conhecidos são n , α , E , R , ρ , C_p , U , A_H , ρ_j , V_j , C_j , T_{j0} e V_{\min} . Se a área de transferência de calor varia com a quantidade de volume no reator, será incluído uma outra variável, mas será incluído também uma outra equação; a relação entre a área e a quantidade de volume no tanque em contato com a refrigeração. Se o reator é um plano vertical cilindrico com diâmetro D e se a refrigeração é somente em torno da altura e não em torno da base, tem-se:

$$A_H = \frac{4}{D} V \quad (39)$$

Será assumido então que o coeficiente de transferência de calor global U é constante.

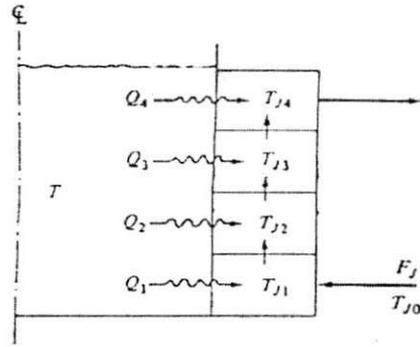


Figure 9: Modelo com revestimento agregado

2.4.2 Modelo de revestimento agregado

Uma outra alternativa é quebrar o revestimento do volume em partes definidas como mostra a figura (9):

Uma equação de energia é necessária para cada trecho do revestimento. Assumindo que se tem quatro trechos de revestimento para a área de transferência de calor, será obtido então quatro equações de energia:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{4}\rho_j V_j C_j \frac{dT_{j1}}{dt} &= F_j \rho_j C_j (T_{j0} - T_{j1}) + \frac{1}{4} U A_H (T - T_{j1}) \\
 \frac{1}{4}\rho_j V_j C_j \frac{dT_{j2}}{dt} &= F_j \rho_j C_j (T_{j1} - T_{j2}) + \frac{1}{4} U A_H (T - T_{j2}) \\
 \frac{1}{4}\rho_j V_j C_j \frac{dT_{j3}}{dt} &= F_j \rho_j C_j (T_{j2} - T_{j3}) + \frac{1}{4} U A_H (T - T_{j3}) \\
 \frac{1}{4}\rho_j V_j C_j \frac{dT_{j4}}{dt} &= F_j \rho_j C_j (T_{j3} - T_{j4}) + \frac{1}{4} U A_H (T - T_{j4})
 \end{aligned} \tag{40}$$

2.4.3 Parede de metal (capacitância)

Em alguns reatores, os recipientes com alta pressão, as massas da parede de metal e os efeitos da temperatura devem ser considerados. Para ser rigoroso, a equação de energia para esta parede seria uma equação diferencial parcial no tempo. Sendo menos rigoroso, é usado frequentemente uma aproximação para agregar a massa do metal e assumir o metal está a uma temperatura T_M . Esta hipótese é muito boa quando a parede não é tão densa e a condutividade de temperatura do metal é grande.

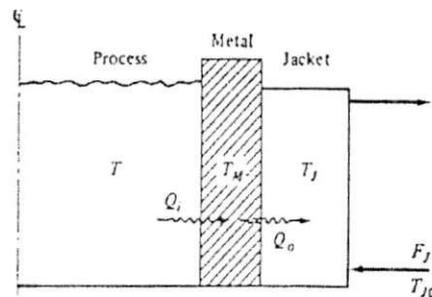


Figure 10: Modelo com metal agregado

As três equações de energia para o processo são:

$$\begin{aligned}
 \rho C_p \frac{d(VT)}{dt} &= \rho C_p (F_0 T_0 - FT) - \lambda V (C_A)^n \alpha e^{-\frac{E}{RT}} - h_i A_i (T - T_M) \\
 \rho_M V_M C_M \frac{d(T_M)}{dt} &= h_i A_i (T - T_M) - h_0 A_0 (T_M - T_j) \\
 \rho_j V_j C_j \frac{d(T_j)}{dt} &= F_j \rho_j C_j (T_{j0} - T_j) + h_0 A_0 (T_M - T_j)
 \end{aligned} \tag{41}$$

onde:

h_i = coeficiente de transferência de calor entrando na película

h_0 = coeficiente de transferência de calor saindo da película

ρ_M = densidade da parede do metal

C_M = capacidade de calor da parede do metal

V_M = volume da parede do metal

A_i = área da transferência de calor entrando

A_0 = área da transferência de calor saindo

2.5 Vaporizador com componentes simples

Sistemas com líquido em ebulição representa uma das muitas operações em processos de engenharia química e está entre os mais difíceis de modelar. Para escrever este sistema rigorosamente, equações de conservação têm que ser escritas para ambas as fases (líquido e vapor). As equações usadas para descrever a taxa de ebulição deveria ser fisicamente lógica e matematicamente conveniente para a solução.

Considere o vaporizador mostrado na figura 11.

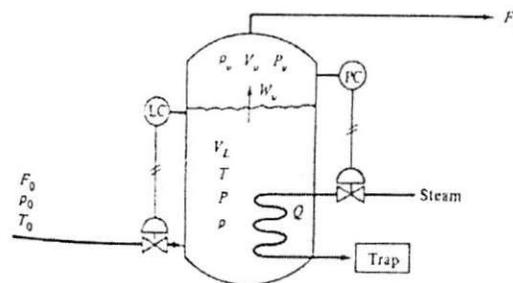


Figure 11: Vaporizador LPG

Será assumido que o Liquefied petroleum gas (LPG) é um componente puro: propano.

O líquido no tanque é assumido perfeitamente misturado. Calor é adicionado a uma taxa Q a fim de manter uma pressão desejada no tanque por vaporização do líquido a uma taxa W_v (massa por tempo). O calor perdido e a massa da parede do tanque é considerada desprezível. O gás é atraído ao topo do tanque a uma vazão volumétrica F_v . F_v é a perturbação.

2.5.1 A. Modelo fixo (estado estacionário)

$$Q = \rho_v F_v (H_v - h_0) \quad (42)$$

onde:

H_v = entalpia de vapor deixando o tanque (cal/g)

h_0 = entalpia de entrada do líquido (cal/g)

2.5.2 B. Modelo dinâmico da fase do líquido

Um pouco mais de realidade no modelo é obtido se for assumido que o volume da fase do vapor é pequeno o suficiente para fazer a dinâmica desprezível. Se somente alguns moles de líquido vaporizar para mudar a pressão na fase de vapor, a pressão do vapor é igual a pressão do líquido a alguma temperatura ($P = P_v$ e $W_v = \rho_v F_v$). Uma equação de energia para a fase do líquido fornece a temperatura (como uma função do tempo), e a relação da pressão-vapor fornece a pressão no vaporizador naquela temperatura.

Uma equação de estado para o vapor é necessária para calcularmos a densidade ρ_v da pressão ou temperatura. A lei dos gás perfeito é usada.

O líquido é assumido incompressível e assim $C_v = C_p$ e a energia interna é $C_p T$. A entalpia do vapor deixando o vaporizador é assumido se de forma simples: $C_p T + \lambda_v$.

Equação de continuidade total:

$$\rho \frac{dV_L}{dt} = \rho_0 F_0 - \rho_v F_v \quad (43)$$

Equação de energia:

$$C_p \rho \frac{d(V_L T)}{dt} = \rho_0 C_p F_0 T_0 - \rho_v F_v (C_p T + \lambda_v) + Q \quad (44)$$

Equação de estado:

$$\rho_v = \frac{MP}{RT} \quad (45)$$

Pressão do vapor:

$$\ln P = \frac{A}{T} + B \quad (46)$$

As incógnitas das equações acima são Q , F_0 , P , V_L , ρ_v e T .

2.5.3 C. Modelo dinâmico para o líquido e o vapor:

Se a dinâmica da fase de vapor não pode ser desprezível, as equações de continuidade total e a de energia devem ser escrita também para o gás no tanque. O vapor saindo do tanque, ρ_v e F_v , não será igual dinamicamente a taxa de vaporização W_v .

O problema chave agora é encontrar uma simples expressão para a taxa de ebulição W_v . Através de simulações encontrou-se um tipo de equação para a transferência de massa que pode ser convenientemente empregada.

$$W_v = K_{MT}(P - P_v) \quad (47)$$

onde K_{MT} é o pseudo-coeficiente da transferência de massa.

Naturalmente em equilíbrio (não em estado estacionário) $P = P_v$. Se for assumido que o líquido e o vapor estão em equilíbrio, nós estamos dizendo que K_{MT} é muito grande. Quando as equações são solucionadas em um computador, vários valores de K_{MT} podem ser usados para testar os efeitos de desequilíbrio.

As equações descritas para o sistema são:

Fase do líquido Continuidade total:

$$\rho \frac{dV_L}{dt} = \rho_0 F_0 - W_v \quad (48)$$

Energia:

$$\rho \frac{d(V_L U_L)}{dt} = \rho_0 F_0 h_0 - W_v H_L + Q \quad (49)$$

Pressão do vapor:

$$P = e^{A/T+B} \quad (50)$$

Fase do vapor Continuidade total:

$$\frac{d(V_v \rho_v)}{dt} = W_v - \rho_v F_v \quad (51)$$

Energia:

$$\frac{d(V_v \rho_v U_v)}{dt} = W_v H_L - \rho_v F_v H_v \quad (52)$$

Estado:

$$\rho_v = \frac{M P_v}{R T_v} \quad (53)$$

onde:

U_L = energia interna do líquido na temperatura T

H_L = entalpia de vapor de ebulição do líquido

U_v = energia interna do vapor na temperatura T_v

H_v = entalpia da fase do vapor

Algumas propriedades são necessárias para relacionar as entalpias com as temperaturas. Desta forma dez variáveis: Q , F_0 , V_L , W_v , T , V_v , ρ_v , T_v , P e P_v , aparecerão. Se for observado que não se tem todas as equações necessárias para a solução do problema, poderá ser obtida mais uma equação.

Tem-se então que:

$$V_t = V_L + V_v$$

onde: V_t = volume total do tanque

2.5.4 D. Modelo para o equilíbrio térmico:

O caso anterior produz algo rigoroso a respeito do que se pode supor. Portanto um modelo final, não muito rigoroso, mas usualmente adequado, é o que tem o equilíbrio de temperatura entre o líquido e o vapor em todo o tempo, ou seja, $T = T_v$. Isso elimina a necessidade de um equilíbrio de energia para a fase do vapor. A sensibilidade de calor do vapor é usualmente reduzida comparada com os efeitos do calor latente.

Se a simples relação da entalpia pode ser usada, a equação (49) torna-se:

$$\rho C_p \frac{d(V_L T)}{dt} = \rho_0 F_0 C_p T_0 - W_v (C_p T + \lambda_v) + Q \quad (54)$$

O simples modelo discutido acima (tal como os casos A e B) são usualmente bons para sistemas com vazões contínuas onde as mudanças no retardamento e temperatura do líquido e vapor não são muito grandes. Modelos podem requerer modelos rigorosos (casos C e D) por causa das grandes variações das principais variáveis.

2.6 Multicomponentes no vaporizador

Observe agora os sistemas líquido-vapor com mais de um componente. Um líquido corrente em alta temperatura e pressão "movimentado" para dentro de um tanque, isto é, a pressão é reduzida quando o fluxo passa pela válvula na entrada do tanque. Esta repentina expansão é irreversível e ocorre à entalpia constante. Se for uma expansão reversível, a entropia (não entalpia) será conservada.

O gás é atraído ao topo do tanque através do controle da válvula em uma posição fixada pelo controlador de pressão. O líquido virá ao fundo do tanque através do controle de nível.

A densidade de vapor no tanque é uma função da temperatura, composição e pressão. Se a lei do gás perfeito pode ser usada, então:

$$\rho_v = \frac{M_v^{av} P}{R T} \quad (55)$$

onde M_v^{av} é a média do peso molecular do gás.

$$M_v^{av} = \sum_{j=1}^{NC} M_j y_j \quad (56)$$

onde M_j é o peso molecular da componente j th.

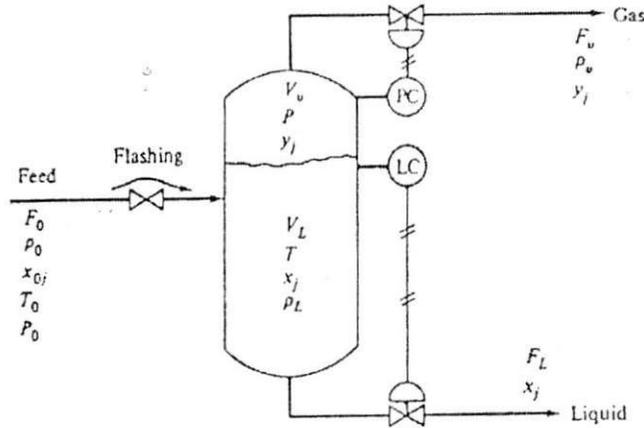


Figure 12: Tanque controlado

2.6.1 Modelo estacionário:

O modelo mais simples deste sistema é o que se despreza completamente a dinâmica. A pressão é assumida constante. O estado estacionário total, as equações de continuidade dos componentes e o balanço de energia do estado estacionário são usados. As fases de vapor e líquido são assumidos estar em equilíbrio.

Continuidade total:

$$\rho_0 F_0 = \rho_v F_v + \rho_L F_L \quad (57)$$

Componentes de continuidade:

$$\frac{\rho_0 F_0}{M_0^{av}} x_{oj} = \frac{\rho_v F_v}{M_v^{av}} y_j + \frac{\rho_L F_L}{M_L^{av}} x_j \quad (58)$$

Equilíbrio líquido-vapor:

$$y_j = f_{(x_j, T, P)} \quad (59)$$

Equação de energia:

$$h_0 \rho_0 F_0 = H \rho_v F_v + h \rho_L F_L \quad (60)$$

Propriedades térmicas:

$$h_0 = f_{(x_{0j}, T_0)} \quad h = f_{(x_j, T)} \quad H = f_{(y_j, T, P)} \quad (61)$$

O número de variáveis do sistema são $9 + 2(NC - 1)$: $\rho_v, F_v, M_v^{av}, y_1, y_2, \dots, y_{NC-1}, \rho_L, F_L, M_L^{av}, x_1, x_2, \dots, x_{NC-1}, T, h$ e H . A pressão P e todas as propriedades da alimentação são dadas. Existem $NC-1$ componentes balanceados (58).

Existem um total de NC equações em equilíbrio. Então, pode-se dizer que existem NC equações como na equação 59.

2.6.2 Modelo prático

Um modelo prático pode ser desenvolvido se for ignorado a dinâmica na fase do vapor considerando o equilíbrio com o líquido. As equações são escritas somente para a fase do líquido.

Continuidade total:

$$\frac{d(V_L \rho_L)}{dt} = \rho_0 F_0 - \rho_v F_v - \rho_L F_L \quad (62)$$

Continuidade nos componentes:

$$\frac{d\left(\frac{V_L \rho_L x_j}{M_L^{av}}\right)}{dt} = \frac{\rho_0 F_0}{M_0^{av}} x_{0j} - \frac{\rho_v F_v}{M_v^{av}} y_j - \frac{\rho_L F_L}{M_L^{av}} x_j \quad (63)$$

Energia:

$$\frac{d(V_L \rho_L h)}{dt} = \rho_0 F_0 h_0 - \rho_v F_v H - \rho_L F_L h \quad (64)$$

As equações de equilíbrio líquido-vapor (59), as três relações de entalpia (61), a equação de densidade (55), a equação de peso molecular (56), são todas necessárias. O número total de equações é $2NC + 9$, que é igual ao número total de variáveis: $P_v, V_L, \rho_v, F_v, M_v^{av}, y_1, y_2, \dots, y_{NC-1}, \rho_L, F_L, M_L^{av}, x_1, x_2, \dots, x_{NC-1}, T, h$ e H . Guarde em mente que todas as propriedades dos valores iniciais, são dadas: $F_0, \rho_0, h_0, x_{0j}, M_0^{av}$.

2.7 Grupo de reatores

Embora a maioria dos processos de engenharia química tenham tradicionalmente sido operado em um tipo contínuo, muitos processos em lote ainda são usados na produção de volumes pequenos, especialmente químicos e farmacêuticos. O reator em lote químico tem vantagens sobre os reatores contínuos para algumas reações (primeiramente aquelas com velocidades lentas e constantes). O amplo uso dos controle digitais dos processos tem permitido automação e otimização e os feito mais eficientes.

Consideremos o reator mostrado na figura a seguir:

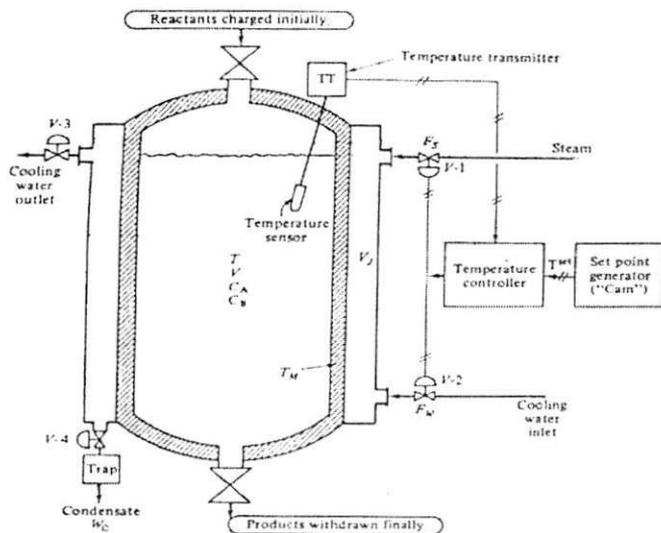


Figure 13: Reator em lote

O reagente é carregado dentro do vasilhame. O vapor é alimentado para o revestimento a fim de levar a massa da reação a uma temperatura desejada. Então a água deve ser adicionada ao revestimento para remover o calor exotérmico da reação e fazer a temperatura do reator seguir a temperatura de referência.

O produto que pretende-se fazer é o componente B. Se nós deixarmos a reação ir adiante, grande quantidade de B reagirá para formar o não desejado C. Se pararmos a reação prematuramente, pouca quantidade de A terá reagido, isto é, a produção e a conversão será baixa. Portanto existe um ótimo tempo quando deve ser parada reação.

Se a dependência com a temperatura da reação específica com as taxas, são as mesmas, a reação deveria estar na mais alta temperatura possível para minimizar o tempo. Esta temperatura máxima será o limite imposto por algumas restrições: pressão de trabalho do equipamento, indesejáveis degradações futuras e polimerização dos produtos ou reagentes, etc.

Deve -se observar com muito cuidado o valor das taxas de reações para que não haja perda do reagente B.

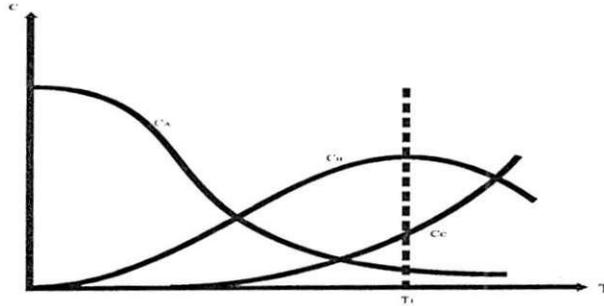


Figure 14: Concentrações x Temperatura

Depois desses comentários, deve-se derivar um modelo matemático para este processo. Assuma que a densidade da reação no líquido é constante. A equação de continuidade total para a reação, depois dos reagentes serem inseridos e o ciclo iniciado, é:

$$\frac{d(\rho V)}{dt} = 0 \quad (65)$$

Não existe fluxo entrando e nem saindo. Visto que ρ é constante, $\frac{dV}{dt} = 0$. Portanto o volume do líquido no reator é constante.

Componente de continuidade para A:

$$V \frac{dC_A}{dt} = -V k_1 C_A \quad (66)$$

Componente de continuidade para B:

$$V \frac{dC_B}{dt} = V k_1 C_A - V k_2 C_B \quad (67)$$

Equações cinéticas:

$$k_1 = \alpha_1 e^{-\frac{E_1}{RT}} \quad k_2 = \alpha_2 e^{-\frac{E_2}{RT}} \quad (68)$$

Equação de energia para o processo: Sabemos que a equação de entalpia simples é: $h = C_p T$, então:

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = -\lambda_1 V k_1 C_A - \lambda_2 V k_2 C_B - h_i A_i (T - T_M) \quad (69)$$

Equação de energia para a parede de metal:

$$\rho_M V_M C_M \frac{dT_M}{dt} = h_0 A_0 (T_J - T_M) - h_i A_i (T_M - T) \quad (70)$$

onde λ_1 e λ_2 são os calores exotérmicos da reação para as duas reações.

Note que quando o reator é aquecido com vapor, T_J é maior do que T_M e T_M é maior do que T . Quando resfriado com água, a temperatura diferencial tem o sinal oposto.

Quando o resfriamento é requerido, o controlador de temperatura fecha a válvula de vaporização e abre a válvula de resfriamento, mas isso durante um tempo suficiente para o reator chegar a temperatura de referência. A válvula V3 deve ser aberta e a válvula V4 deve ser fechada toda hora que o resfriamento com água é adicionado.

2.7.1 Fase de aquecimento:

Continuidade total:

$$V_J \frac{d\rho_J}{dt} = F_S \rho_S - W_c \quad (71)$$

onde

ρ_J = densidade de vaporização no revestimento

V_J = volume do revestimento

ρ_S = densidade do vapor de entrada

W_c = taxa da condensação do vapor (massa por tempo)

Equação de energia para a vaporização:

$$V_J \frac{d(U_J \rho_J)}{dt} = F_S \rho_S - h_0 A_0 (T_J - T_M) - W_c h_c \quad (72)$$

onde:

U_J = energia interna de vaporização no revestimento

H_S = entalpia da vaporização de entrada

h_c = entalpia do líquido condensado

As mudanças na energia interna pode usualmente ser desprezível quando comparada com os efeitos do calor latente. Assim uma simples equação algébrica de energia pode ser usada:

$$W_c = \frac{h_0 A_0 (T_J - T_M)}{H_S - h_c} \quad (73)$$

A equação de estado para a vaporização pode ser usada para calcular a temperatura T_J e a pressão P_J da densidade ρ_J . Por exemplo, se a lei dos gases perfeitos e uma simples equação pressão-vapor podem ser usados, então:

$$\rho_J = \frac{M}{RT_J} \exp\left(\frac{A_w}{T_J} + B_w\right) \quad (74)$$

onde:

M = peso molecular do vapor = 8

A_w e B_w = constantes pressão-vapor para a água

A equação 74 pode ser solucionada por T_J se ρ_J é conhecida (da equação 71). Uma vez que T_J é conhecida, P_J pode ser calculada da equação vapor-pressão.

Se a massa do metal que envolve o revestimento é significativa, uma equação de energia é requerida para ele. Para este caso assume-se desprezível.

Na maioria dos reatores revestidos ou aquecidos com vapor o volume ocupado é muito pequeno comparado ao fluxo volumétrico da vaporização. Portanto a resposta dinâmica do revestimento é muito rápida, e uma simples equação algébrica balanceada de massa e energia podem ser usadas. A taxa do fluxo de vapor é ajustado para ser igual a taxa do fluxo condensado, que é calculado interativamente calculando a relação entre a transferência de calor ($Q = UA\Delta T$) e a equação do fluxo na válvula para a pressão no revestimento e o fluxo condensado.

2.7.2 Fase de resfriamento:

Durante o período em que o resfriamento com água está fluindo no revestimento, somente uma equação de energia é requerida se for assumido que o revestimento está perfeitamente inserido.

$$\rho_J V_J C_J \frac{dT_J}{dt} = F_w C_J \rho_J (T_{J0} - T_J) + h_0 A_0 (T_M + T_J) \quad (75)$$

onde:

T_J = temperatura da água no resfriamento do revestimento

ρ_J = densidade da água

C_J = capacidade de calor da água

T_{J0} = temperatura de entrada da água

Checando o grau de liberdade do sistema durante o aquecimento, será obtida sete variáveis (C_A , C_B , T , T_M , T_J , ρ_J , e W_c) e sete equações (66, 67, 69, 70, 71, 73, 74). Durante o estágio de resfriamento será usada a equação 75 ao invés das equações 71, 73, 74), mas tem-se somente T_J ao invés de T_J , ρ_J , e W_c .

2.8 Reator com transferência de massa

Como demonstrado em discussões anteriores sobre cinética, algumas vezes as reações químicas possuem limitações na transferência de massa. A transferência de massa se torna limitada quando os componentes devem ser movidos de uma fase para outra fase, antes ou depois da reação. Como um exemplo do fenômeno, considere o reator mostrado na figura abaixo (reator com líquido e gás borbulhante).

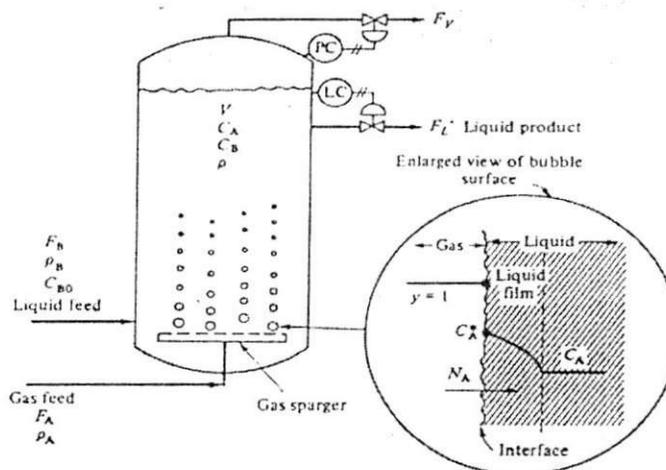
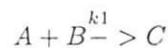


Figure 15: Reator líquido-gás com borbulhamento

O reagente A é alimentado com um gás através de um distribuidor que está na base do mesmo. A reação química ocorre entre A e B na fase do líquido para formar um líquido de produto C. O reagente A deve dissolver no líquido antes de reagir.



Se a taxa de transferência de massa do gás A para o líquido é lenta, a concentração de A no líquido será baixa já que este é consumido pela reação tão rápido quanto ele chega. Assim a transferência de massa no reator é limitada.

Se a taxa de transferência de massa do gás para o líquido é rápida, a concentração do reagente A crescerá para algum valor ditado pelas condições da reação no estado estacionário e o equilíbrio da solubilidade de A no líquido. A taxa de reação química é limitada no reator.

Note que na região limitada da transferência de massa que aumenta ou reduz a concentração de B fará pouca diferença na velocidade da reação (ou produtividade no reator) porque a concentração de A no líquido também é pequena. Da mesma forma adicionando temperatura ao reator não daremos nenhum acréscimo exponencial na velocidade da reação. A velocidade da reação talvez diminua com o acréscimo da temperatura porque decrescerá o equilíbrio de solubilidade na interface líquido-gás.

A partir de agora será descrito alguns destes fenômenos quantitativamente. Por simplicidade, será assumido o sistema isotérmico, pressão constante, volume constante, condições de densidade constante e a fase do líquido

perfeitamente misturada. O gás que alimenta o sistema é assumido um componente de A puro, que dá um equilíbrio na concentração de A constante na interface líquido-gás de C_A (que mudará se a pressão e a temperatura não forem constante). A área total da transferência de massa do borbulhamento é A_{MT} e dependerá da taxa (F_A) de alimentação do gás. Um coeficiente da transferência de massa constante k_L é usado para dar o fluxo de A dentro do líquido através da película do líquido como uma função da direção da força.

$$N_A = k_L(C_A^* - C_A) \quad (76)$$

A transferência de massa é usualmente limitada pela difusão através da película do líquido estagnado, pois dificulta a propagação.

Será assumido uma dinâmica na fase de vapor rápida e que algum gás não reagente é expelido para o topo do reator.

$$F_v = F_A - \frac{A_{MT}N_A M_A}{\rho_A} \quad (77)$$

Componente de continuidade para A:

$$V \frac{dC_A}{dt} = A_{MT}N_A - F_L C_A - V k C_A C_B \quad (78)$$

Componente de continuidade para B:

$$V \frac{dC_B}{dt} = F_B C_{B0} - F_L C_B - V k C_A C_B \quad (79)$$

Continuidade total:

$$\frac{d(\rho V)}{dt} = 0 = F_B \rho_B + M_A N_A A_{MT} - F_L \rho \quad (80)$$

As variáveis são N_A , C_A , C_B , F_v e F_L . As funções determinadas são F_A , F_B , e C_{B0} .

2.9 Coluna de destilação binária ideal

A coluna de destilação é provavelmente o mais popular e importante processo estudado nas literaturas de engenharia química depois do CSTR. A destilação é usada em muitos processos químicos para separar e purificar o produto usado.

Muitas colunas lidam com muitas alimentações. Mas muitas podem ser aproximadas por misturas binária. Para este exemplo, de qualquer forma, será feita muitas suposições adicionais e idealizações que são algumas vezes válidas mas muito frequentemente são somente aproximações grotescas.

Inicialmente será assumido um sistema binário (dois componentes). O vapor deixando a bandeja está em equilíbrio com o líquido da bandeja. Isto significa a simples relação de equilíbrio do líquido e do vapor, podendo ser usado a seguinte equação:

$$y_n = \frac{\alpha x_n}{1 + (\alpha - 1)x_n} \quad (81)$$

onde:

x_n = composição do líquido na nth bandeja

y_n = composição do vapor na nth bandeja

α = volatilidade relativa

Uma única fonte alimenta com líquido saturado (em ponto de ebulição) a bandeja N_F . Veja a figura. A taxa da alimentação do fluxo é F (mol/min) e a composição é z (fração molar mais componente volátil). O vapor elevado é totalmente condensado no condensador e o refluxo volta ao tanque. O conteúdo do tanque é assumido ser perfeitamente misturado com composição x_D . O líquido no tanque está no ponto de ebulição. O que é retido pelo condensador é transferido para uma coluna na bandeja N_T na velocidade R . Aquilo que foi destilado com a elevação é removido a uma velocidade D .

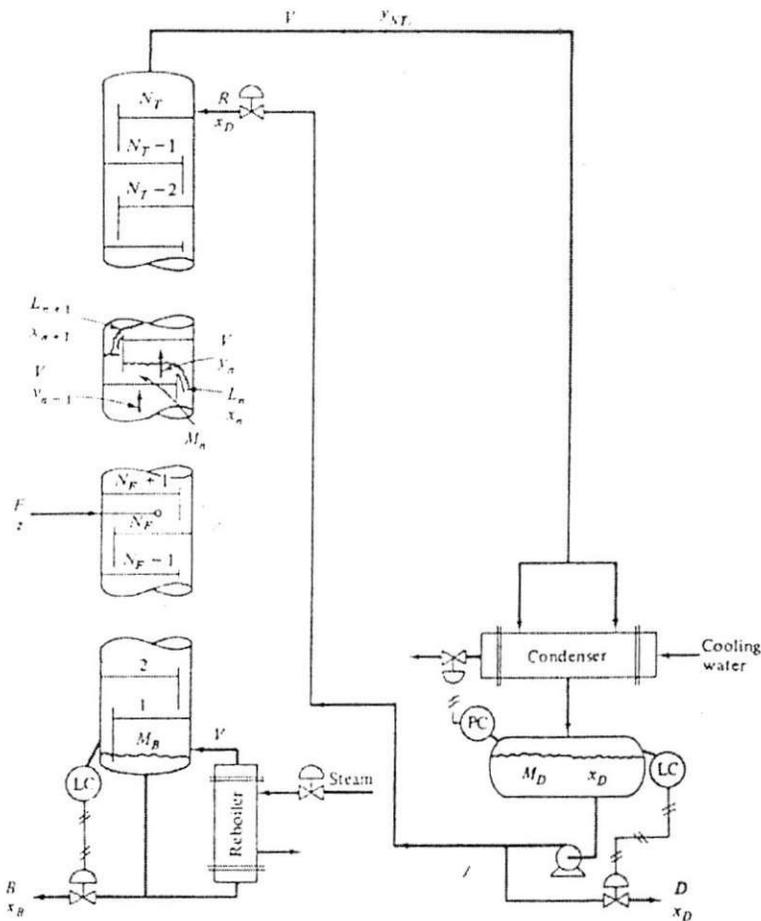


Figure 16: Coluna de destilação binária

Despreza-se qualquer atraso na linha de vapor vindo do topo da coluna para o refluxo e o refluxo na linha de retorno para o o topo da bandeja. Note que y_{N_T} não é igual, dinamicamente, a x_D . Os dois são iguais somente no estado estacionário.

Na base da coluna os líquidos são removidos a uma velocidade B e com uma composição x_B . A composição do vapor deixando a base da coluna e entrando na bandeja 1 é y_B .

Na base da coluna, o líquido produzido é removido a uma taxa B e com uma composição x_B . Um novo vapor é gerado a uma taxa V pelo refeedor. O líquido da base da coluna através do tubo na vertical da menor densidade de líquido-vapor misturado no tubo refeedor. Assume-se que o líquido no refeedor e na base da coluna são perfeitamente misturados e temos a mesma composição x_B e um volume de matéria total M_B (moles). A taxa de circulação através do refeedor é muito alta, esta suposição é usualmente boa. A composição de vapor deixando a base da coluna e entrando na bandeja 1 é y_B . A mesma está em equilíbrio com o líquido com composição x_B .

A coluna contém um total de N_T bandejas. O volume de líquido em cada bandeja é M_n . O líquido em cada bandeja é assumido ser perfeitamente misturado com composição x_n . O volume de vapor é assumida ser desprezível emr toda parte do sistema. Embora o volume do vapor seja largo, o número de moles é usualmente pequeno porque a densidade do vapor é menor do que a densidade do líquido. Esta suposição cancela a alta pressão na coluna.

Se o calor da vaporização dos dois componentes são os mesmos, toda hora que um mole de vapor condensa, evapora um mole do líquido. O calor perdido entre as colunas e a mudança de temperatura de bandeja para

bandeja são consideradas desprezíveis. Esta suposição significa que a velocidade do vapor e do líquido é constante nas seções de retificação e esvaziamento sob as condições de estado estacionário.

De qualquer forma, o interesse é a condição dinâmica. A suposição acima, inclui vapor desprezível na saída, significando que a velocidade de vapor através das bandejas das colunas é a mesma, dinamicamente ou no estado estacionário.

$$V = V_1 = V_2 = V_3 = \dots = V_{NT}$$

Vale lembrar que estes V's são necessariamente constantes com o tempo. A ebulição pode ser manipulada dinamicamente.

A velocidade do líquido em toda a parte da coluna não será a mesma dinamicamente. Eles dependerão do mecanismo do fluido na bandeja. Frequentemente uma simples equação de Francis é usada para relacionar a saída do líquido na bandeja (M_n) com a velocidade do fluxo deixando a bandeja (L_n).

$$F_L = 3.33L_w(h_{0w})^{1.5} \quad (82)$$

onde:

F_L = velocidade do fluxo do líquido

L_w = comprimento do obstáculo

h_{0w} = altura do nível sobre o obstáculo

Uma função simples de relação entre o volume do líquido e a taxa do líquido será assumido:

$$M_n = f(L_n)$$

Finalmente, despreza-se a dinâmica do condensador e do refeedor. Em coluna de escala comercial, a resposta dinâmica desta troca de calor é usulamente muito mais rápida do que a resposta da própria coluna. Em alguns sistemas, a dinâmica destes equipamentos periféricos são importantes e devem ser incluídos no modelo.

Com todas estas suposições em mente, as equações para descrever o sistema ficam prontas para serem escritas. Adotando a convenção usual, nossa equação de continuidade total será escrita em termos de moles por unidade de tempo. Isto é autêntico porque nenhuma reação química é assumida ocorrer na coluna.

Condensador e refluxo no tanque Continuidade Total:

$$\frac{dM_D}{dt} = V - R - D \quad (83)$$

Componente de continuidade (mais componente volátil):

$$\frac{d(M_D x_D)}{dt} = V y_{NT} - (R + D)x_D \quad (84)$$

Topo da bandeja ($n=N_T$) Continuidade Total:

$$\frac{dM_{NT}}{dt} = R - L_{NT} \quad (85)$$

Componente de continuidade:

$$\frac{d(M_{NT} x_{NT})}{dt} = R x_D - L_{NT} x_{NT} + V y_{NT-1} - V y_{NT} \quad (86)$$

Próximo ao topo da bandeja ($n=N_T - 1$)

Continuidade total:

$$\frac{dM_{NT-1}}{dt} = L_{NT} - L_{NT-1} \quad (87)$$

Componente de continuidade:

$$\frac{d(M_{NT-1}x_{NT-1})}{dt} = L_{NT}x_{NT} - L_{NT-1}x_{NT-1} + Vy_{NT-2} - Vy_{NT-1} \quad (88)$$

enésima bandeja

Continuidade total:

$$\frac{dM_n}{dt} = L_{n+1} - L_n \quad (89)$$

Componente de continuidade:

$$\frac{d(M_n x_n)}{dt} = L_{n+1}x_{n+1} - L_n x_n + Vy_{n-1} - Vy_n \quad (90)$$

Entrada da bandeja ($n = N_F$)

Continuidade total:

$$\frac{dM_{NF}}{dt} = L_{NF+1} - L_{NF} + F \quad (91)$$

Componente de continuidade:

$$\frac{d(M_{NF}x_{NF})}{dt} = L_{NF+1}x_{NF+1} - L_{NF}x_{NF} + Vy_{NF-1} - Vy_{NF} + Fz \quad (92)$$

Primeira bandeja

Continuidade total:

$$\frac{dM_1}{dt} = L_2 - L_1 \quad (93)$$

Componente de continuidade:

$$\frac{d(M_1 x_1)}{dt} = L_2 x_2 - L_1 x_1 + Vy_B - Vy_1 \quad (94)$$

Refervedor e coluna base

Continuidade total:

$$\frac{dM_B}{dt} = L_1 - V - B \quad (95)$$

Componente de continuidade:

$$\frac{d(M_B x_B)}{dt} = L_1 x_1 - Vy_B - Bx_B \quad (96)$$

Cada bandeja e a coluna base tem equações de equilíbrio (81). Cada bandeja também tem uma equação hidráulica ($M_n = f(L_n)$). Nós também necessitamos de duas equações representando o nível do controlador na coluna base e o refluxo do tanque apresentado na figura.

$$D = f_1(M_D) \quad B = f_2(M_B) \quad (97)$$

Agora examine o grau de liberdade do sistema. A taxa de alimentação F e a composição z são dadas inicialmente.

Número de variáveis:

Composição nas bandejas (x_n e y_n)	= $2N_T$
Fluxo do líquido nas bandejas (L_n)	= N_T
Volume de líquido nas bandejas (M_n)	= N_T
Composição no tanque do refluxo (x_D)	= 1
Fluxo no tanque do refluxo (R e D)	= 2
Volume do tanque do refluxo (M_d)	= 1
Composições da base (x_B e y_B)	= 2
Fluxos na base (V e B)	= 2
Volume na base (M_B)	= 1

O total é $4N_T+9$

Número de equações:

Continuidade de componentes na bandeja	= N_T (90)
Continuidade total na bandeja	= N_T (89)
Equilíbrio (bandejas mais base)	= N_T+1 (81)
Hidráulica	= N_T
Níveis dos controladores	= 2 (97)
Continuidade de componentes no tanque de refluxo	= 1 (84)
Continuidade total no tanque de refluxo	= 1 (83)
Continuidade de componentes na base	= 1 (96)
Continuidade total da base	= 1 (95)

O total é $4N_T+7$

Conclui-se então que o sistema é sub-especificado para duas equações. Do ponto de vista da engenharia de controle isto significa que existem somente duas variáveis que podem ser controladas. As duas variáveis que devem ser de certo modo especificadas são o refluxo R e o vapor da ebulição V (ou calor de entrada para o reboiler). Elas podem estar sendo alimentadas contantemente (sistema de malha aberto), ou elas podem estar variando de acordo com dois controladores para tentar alimentar outras duas variáveis. Na simulação digital desta coluna, será assumido que o controlador com realimentação ajuste R e V para controlar as composições do topo e da base (x_D e x_B).

$$R = f_1(x_D) \quad V = f_2(x_B) \quad (98)$$

3 Métodos Numéricos

3.0.1 Introdução

A simulação digital é uma poderosa ferramenta para solucionar as equações descritas nos sistemas de engenharia química. As duas principais dificuldades são:

- 1) soluções de equações algébricas não lineares simultaneas (usualmente é feito por algum método iterativo);
- 2) integração numérica de equações diferenciais ordinárias (usando equações diferenciais finitas discretas para aproximar a uma equação diferencial contínua).

A precisão e a estabilidade numérica são afetadas pelas equações diferenciais finitas (ou método de integração) empregadas. Muitos algoritmos tem sido propostos na literatura. Alguns trabalham melhor em alguns problemas do que outros. Na verdade, não existe algum algoritmo que trabalhe bem para todos os problemas. Entretanto, discutir-se-á em seguida, que o simples algoritmo de Euler de primeira ordem é o melhor para uma grande quantidade de aplicações de engenharia.

Em teoria, estes pacotes feitos facilitam a engenharia e solucionam problemas. Na prática, entretanto, estas linguagens de simulação de simulação tem utilidades limitadas.

3.0.2 Métodos de convergência interativa

O problema chave é encontrar um método para fazer a convergência ser rápida. Existem muitas técnicas. Alguns métodos que convergem rapidamente para algumas equações divergirão para outras equações.

Será então discutido um pouco dos métodos mais simples e os mais usados. Para o começo, as simulações dinâmicas iniciarão com estados estacionários convergentes. Em cada instante de tempo, as variáveis mudam muito pouco de seus valores que tinham no tempo anterior. Assim, nós sempre estaremos perto da correta solução.

Por esta razão, o método das simples convergências são muito adequados para as simulações dinâmicas.

O problema é melhor entendido se for considerado um exemplo. Um dos cálculos mais comuns é o do ponto de ebulição de equilíbrio do líquido-vapor.

Exemplo: Será dado a pressão P e a composição x do líquido. O que se quer, é encontrar a temperatura do ponto de ebulição e a composição do vapor. Para simplificação, deixe-nos assumir um sistema binário de componentes 1 e 2. O componente 1 é o mais volátil, e a fração de moles do componente 1 no líquido é x e no vapor é y . Assuma também que o sistema é ideal: leis de Raoult's e Dalton's serão aplicadas.

As pressões parciais dos dois componentes (P_1 e P_2) no líquido e na fase são:

No líquido:

$$P_1 = xP_1^s \quad P_2 = (1-x)P_2^s \quad (99)$$

No vapor:

$$P_i = yP \quad P_2 = (1-y)P \quad (100)$$

onde P_j^s = pressão de vapor do componente j que é uma função da temperatura

$$\ln P_1^s = \frac{A_1}{T} + B_1 \quad \ln P_2^s = \frac{A_2}{T} + B_2 \quad (101)$$

As equações parciais da pressão nas fases do líquido e do vapor são dadas por:

$$P = xP_1^s + (1-x)P_2^s \quad (102)$$

$$y = \frac{xP_1^s}{P} \quad (103)$$

O problema de convergência é encontrar o valor da temperatura que satisfará (102). O procedimento é como a seguir:

- 1) Supor uma temperatura para T .
- 2) Calcular pressão do vapor dos componentes 1 e 2 da (101).
- 3) Calcular a pressão total P^{calc} usando a (102).

$$P^{calc} = xP_{1(T)}^s + (1-x)P_{2(T)}^s \quad (104)$$

4) Compare P^{calc} com a atual pressão dada, P . Se está suficientemente perto a P (possivelmente um critério de convergência de 10^{-6}), a suposição está correta. A composição de vapor pode ser calculada de (103).

5) Se P^{calc} é maior do que P , a suposta temperatura foi também alta e assim deve-se fazer uma outra suposição menor para T . Se P^{calc} é menor do que P , nós deveremos supor um T maior.

Método de Newton-Raphson Este método é provavelmente o mais popular método de convergência. É de certa forma o mais complicado visto que requer a avaliação de uma derivada. Também pode levar a problemas de estabilidade se a suposição inicial for pobre e se a função é altamente não linear.

Newton-Raphson soma aproveitando a inclinação da função para atingir o valor correto. Aproveitando o problema do ponto de ebulição como um exemplo específico, vamos definir a função $f(T)$:

$$f(T) = P_{(T)}^{calc} - P \quad (105)$$

O objetivo é encontrar o valor de T para assim se fazer $f(T)$ igual a zero; isto é, deseja-se encontrar a raiz de $f(T)$. Suponha um valor de temperatura T_0 . Então avalie a função em T_0 , $f(T_0)$. Depois avalie a inclinação da função em T_0 , $f'(T_0) = (df/dT)_{(T_0)}$. Então da geometria mostrada na figura a seguir nós pode-se ver que na figura 4.2 tem-se que:

$$f'(T_0) = \left(\frac{df}{dT} \right)_{(T_0)} = \frac{-f(T_0)}{T_1 - T_0} \quad (106)$$

Colocando T_1 em evidência, temos:

$$T_1 = T_0 - \frac{f(T_0)}{f'(T_0)} \quad (107)$$

T_1 na equação (107) é a nova suposição da temperatura. Se na curva $f(T)$ for traçado uma reta passando por T_1 , nós convergiremos para a solução correta através de interações.

Deduzindo a equação (107), nós chegamos ao algoritmo a seguir:

$$T_{n+1} = T_n - \frac{f_n}{f'_n} \quad (108)$$

onde:

T_{n+1} = valor posterior da temperatura

T_n = valor anterior da temperatura

f_n = valor de $f(T)$ em $T = T_n$

f'_n = valor da derivada de f , $\frac{df}{dT}$, em $T = T_n$

A técnica requer a avaliação de f' , a derivada da função $f(T)$ para a respectiva temperatura.

3.0.3 Integração numérica das equações diferenciais

Como discutido na introdução deste capítulo, a solução das equações diferenciais (ODEs) no computador digital envolve integração numérica.

Os problemas de precisão, estabilidade numérica, e velocidade de algum método de integração numérica deve ser guardada em mente quando resolver ODEs.

Precisa-se estudar a integração numérica de ODEs de primeira ordem somente. Algumas equações de alta ordem, supondo derivadas com N-th ordem, pode ser reduzido para N ODEs de primeira ordem. Por exemplo, suponha que nós temos uma ODE de terceira ordem:

$$\frac{d^3x}{dt^3} + a_2 \frac{d^2x}{dt^2} + a_1 \frac{dx}{dt} + a_0x = b_1m \quad (109)$$

Pode-se então definir novas variáveis

$$x_1 = x \quad x_2 = \frac{dx}{dt} \quad x_3 = \frac{d^2x}{dt^2} \quad (110)$$

A equação(109) torna-se:

$$\frac{dx_3}{dt} + a_2x_3 + a_1x_2 + a_0x_1 = b_1m$$

Assim nós temos três equações de primeira ordem para solucionar:

$$\frac{dx_1}{dt} = x_2 \quad (111)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = x_3 \quad (112)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = -a_2x_3 - a_1x_2 - a_0x_1 + b_1m \quad (113)$$

Algoritmo de integração numérica explícita Dois métodos populares que serão apresentados e facilmente usados são os descritos a seguir: Euler e Runge Kutta de quarta ordem. Existem literalmente milhares de outros algoritmos. Muitos deles são muito complexos, difíceis de programar e frequentemente é muito ineficientes para problemas reais de engenharia química.

Algoritmo de Euler O mais simples esquema de integração numérica (e o mais usado) é Euler, Ilustrado na figura 4.7. Suponha que nós desejamos solucionar a ODE

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t) \tag{114}$$

onde $f(x,t)$, é em geral, uma função não linear. Nós precisamos conhecer a condição inicial de x . Usualmente é igual a zero.

$$x(0) = x_0 \quad \text{em} \quad t = 0 \tag{115}$$

Agora se avançar no tempo com um passo pequeno Δt para $t = t_1 = \Delta t$, pode-se estimar do novo valor de x em $t = \Delta t$, de uma extrapolação usando o inicial vezes a variação de x (a derivada de x em $t=0$). O novo valor de $x(x_1)$ é aproximadamente igual ao velho valor de $x(x_0)$ mais o produto da derivada de x vezes o tamanho do passo.

$$x(\Delta t) = x(0) + \left(\frac{dx}{dt}\right)_{t=0} \Delta t \tag{116}$$

$$x_1 = x_0 + f(x_0,0) \Delta t \tag{117}$$

Se o tamanho do passo (intervalo de integração) é bastante pequeno, esta estimação de x_1 estará muito perto de corrigir o valor.

Para um outro Δt para $t=t_2=2\Delta t$, nós estimamos $x(2\Delta t) \equiv x_2$ de

$$x(2\Delta t) = x(\Delta t) + \left(\frac{dx}{dt}\right)_{t=\Delta t} \Delta t \tag{118}$$

$$x_2 = x_1 + f(x_1,t_1) \Delta t$$

Generalizando para $(n+1)$ st passos no tempo,

$$x_{n+1} = x_n + f(x_n,t_n) \Delta t = x_n + \left(\frac{dx}{dt}\right)_{(x_n,t_n)} \Delta t \tag{119}$$

$$t_{n+1} = t_n + \Delta t \tag{120}$$

A integração de Euler é extremamente simples para programar, como será ilustrado no exemplo 4.3. A simplicidade é mantida, mesmo que o número de ODE cresça e as derivadas tornem-se mais complexas e não lineares.

Se nós temos duas equações diferenciais simultaneamente unidas para integrar numericamente

$$\frac{dx_1}{dt} = f_1(x_1,x_2,t) \quad \frac{dx_2}{dt} = f_2(x_1,x_2,t) \tag{121}$$

o algoritmo da integração de Euler será

$$x_{1,n+1} = x_{1n} + \Delta t f_1(x_{1n},x_{2n},t_n) \tag{122}$$

$$x_{2,n+1} = x_{2n} + \Delta t f_2(x_{1n},x_{2n},t_n) \tag{123}$$

Note que somente uma derivada é requerida por ODE em cada ponto do tempo. Se nós tínhamos um número fixo N de equações diferenciais, nós teremos N equações como nas equações (122) e (123).

Passos pequenos devem ser tomados ($\Delta t < 0.1$) se uma curva precisa de $x(t)$ é desejada. Certamente passos largos podem ser tomados, mas a solução não será precisa. De qualquer forma, se o tamanho do passo é feito maior do que 2, a solução é numericamente instável. O sistema físico ou o processo não será instável. O que será instável é o algoritmo de integração numérica neste tamanho de passo para a ODE dada. O algoritmo de Euler tem a propriedade de que se o passo é bastante pequeno para alcançar uma razoável precisão (quatro ou cinco figuras significantes), a solução é estável.

Algoritmo Runge-Kutta de quarta-ordem: O algoritmo Runge-Kutta de quarta ordem é largamente usado na engenharia química. Para a ODE dada na equação (114) o algoritmo de Runge-Kutta é:

$$\begin{aligned}k_1 &= \Delta t f(x_n, t_n) \\k_2 &= \Delta t f(x_n + 1/2 k_1, t_n + 1/2 \Delta t) \\k_3 &= \Delta t f(x_n + 1/2 k_2, t_n + 1/2 \Delta t) \\k_4 &= \Delta t f(x_n + k_3, t_n + \Delta t) \\x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\end{aligned}$$

Para duas ODEs de primeira ordem, teremos:

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= f_1(x_1, x_2, t) \\ \frac{dx_2}{dt} &= f_2(x_1, x_2, t)\end{aligned}$$

com o algoritmo de quarta ordem Runge-Kutta, quatro k's são avaliados para cada ODE.

$$\begin{aligned}k_{11} &= \Delta t f_1(x_{n1}, x_{n2}, t_n) \\k_{12} &= \Delta t f_2(x_{n1}, x_{n2}, t_n) \\k_{21} &= \Delta t f_1(x_{n1} + 1/2 k_{11}, x_{n2} + 1/2 k_{12}, t_n + 1/2 \Delta t) \\k_{22} &= \Delta t f_2(x_{n1} + 1/2 k_{11}, x_{n2} + 1/2 k_{12}, t_n + 1/2 \Delta t) \\k_{31} &= \Delta t f_1(x_{n1} + 1/2 k_{21}, x_{n2} + 1/2 k_{22}, t_n + 1/2 \Delta t) \\k_{32} &= \Delta t f_2(x_{n1} + 1/2 k_{21}, x_{n2} + 1/2 k_{22}, t_n + 1/2 \Delta t) \\k_{41} &= \Delta t f_1(x_{n1} + k_{31}, x_{n2} + k_{32}, t_n + \Delta t) \\k_{42} &= \Delta t f_2(x_{n1} + k_{31}, x_{n2} + k_{32}, t_n + \Delta t)\end{aligned}$$

Então o novo valor de x_1 e x_2 são calculados:

$$x_{n+1,1} = x_{n1} + 1/6(k_{11} + 2k_{21} + 2k_{31} + k_{41}) \quad (124)$$

$$x_{n+1,2} = x_{n2} + 1/6(k_{12} + 2k_{22} + 2k_{32} + k_{42}) \quad (125)$$

Note que quatro derivadas são requeridas por ODE em cada passo do tempo. Desta forma o tempo requerido pelo computador para executar Euler com um passo de tamanho 0.05 será aproximadamente o mesmo do tempo requerido para executar Runge-Kutta com passo de tamanho 0.2.

Pode-se extrair algumas conclusões muito importante sobre os dois algoritmos considerados acima:

1. Se uma precisão na integração é solicitada, o Runge-Kutta de quarta ordem é superior a Euler. Para alguns tempos de cálculo (com o tamanho do passo usado em Runge-Kutta é quatro vezes o usado em Euler) o Runge-Kutta é mais preciso.

2. Se a precisão não é solicitada para ODE particular, Euler é superior a Runge-Kutta. Visto que Runge-Kutta requer a avaliação de quatro derivadas comparada com somente uma para Euler, o algoritmo de Euler executará quase quatro vezes mais rápido.

4 Conclusão

Através deste projeto pudemos desenvolver dois sistemas de simulações que poderão ser utilizados como exemplos em aulas da graduação ensinando o desenvolvimento de modelagens e controladores.

O projeto fez uma abordagem suscinta sobre leis fundamentais de química e física e também aplicações específicas para a engenharia química. Através destas abordagens foi possível desenvolver dois programas simuladores. Os programas possuem uma interface gráfica com o usuário e através dele será possível escolher o sinal de entrada, o nível do off-set e ainda qual sistema deseja-se simular. O programa em si, possui equações diferenciais, métodos numéricos para resolução destas equações e ainda algumas lógicas de programação.

Todo o trabalho realizado neste projeto pode ser desenvolvido de tal forma que a linguagem de programação utilizada seja o C++ ou ainda o JAVA e através deles possa ter aplicações mais realistas.

5 Anexo

Neste anexo encontramos as telas das simulações para os sistemas em malha aberta e também para os sistemas em malha fechada.

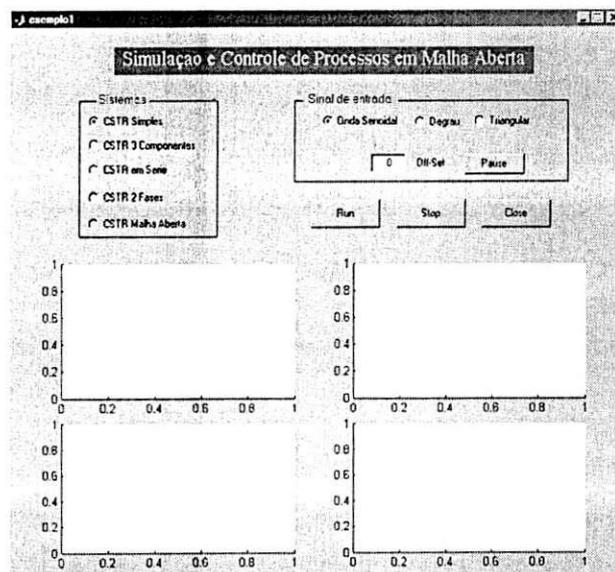


Figure 17: Simulação de sistemas em malha aberta.

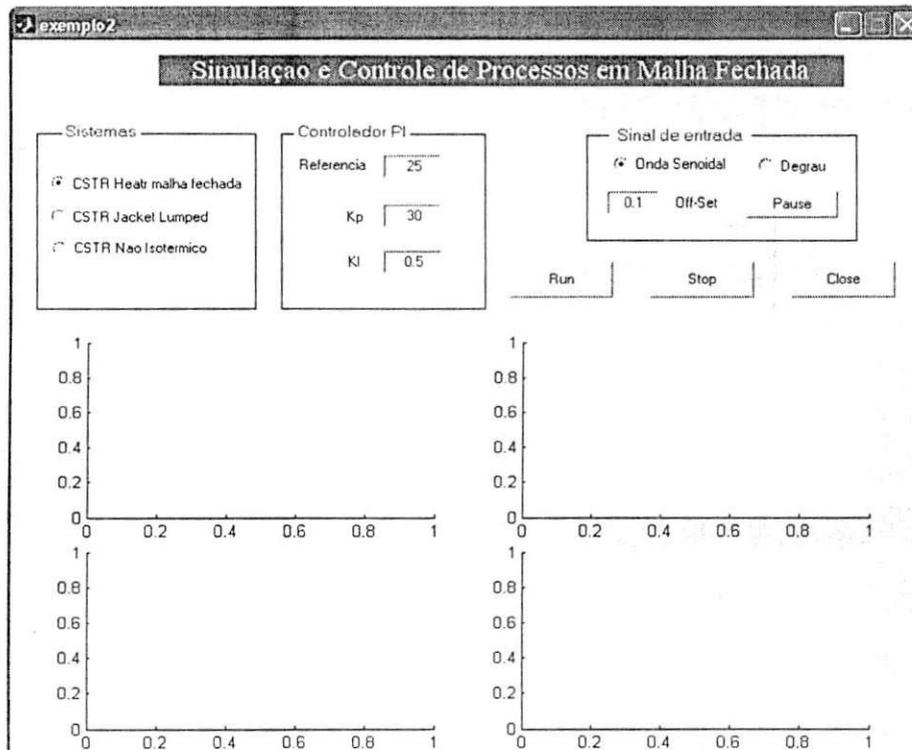


Figure 18: Simulação de sistemas em malha fechada.

6 Programa: Sistema em Malha Fechada

```
function varargout = exemplo2(varargin)
% Last Modified by GUIDE v2.5 06-Oct-2004 22:09:59
% Begin initialization code - DO NOT EDIT
gui_Singleton = 1;
gui_State = struct('gui_Name', mfilename, ...
'gui_Singleton', gui_Singleton, ...
'gui_OpeningFcn', @exemplo2_OpeningFcn, ...
'gui_OutputFcn', @exemplo2_OutputFcn, ...
'gui_LayoutFcn', [] , ...
'gui_Callback', []);
if nargin & isstr(varargin{1})
gui_State.gui_Callback = str2func(varargin{1});
end
if nargout
[varargout{1:nargout}] = gui_mainfcn(gui_State, varargin{:});
else
gui_mainfcn(gui_State, varargin{:});
end
% End initialization code - DO NOT EDIT
% — Executes just before exemplo2 is made visible.
function exemplo2_OpeningFcn(hObject, eventdata, handles, varargin)
% Choose default command line output for exemplo2
handles.output = hObject;
```

```

% Update handles structure
guidata(hObject, handles);
% — Outputs from this function are returned to the command line.
function varargout = exemplo2_OutputFcn(hObject, eventdata, handles)
varargout{1} = handles.output;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function senoide_Callback(hObject, eventdata, handles)
set(handles.senoide, 'Value', 1);
set(handles.degrau, 'Value', 0);
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function degrau_Callback(hObject, eventdata, handles)
set(handles.senoide, 'Value', 0);
set(handles.degrau, 'Value', 1);
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Valor do off-set para o sinal de entrada
function delta_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc
set(hObject,'BackgroundColor','white');
else
set(hObject,'BackgroundColor',get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'));
end
function delta_Callback(hObject, eventdata, handles)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function referencia_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc
set(hObject,'BackgroundColor','white');
else
set(hObject,'BackgroundColor',get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'));
end
function referencia_Callback(hObject, eventdata, handles)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function kp_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc
set(hObject,'BackgroundColor','white');
else
set(hObject,'BackgroundColor',get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'));
end
function kp_Callback(hObject, eventdata, handles)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function ki_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc
set(hObject,'BackgroundColor','white');
else
set(hObject,'BackgroundColor',get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'));
end
function ki_Callback(hObject, eventdata, handles)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function cstr_mf_Callback(hObject, eventdata, handles)
set(handles.cstr_mf, 'Value', 1);
set(handles.cstr_j_l, 'Value', 0);
set(handles.cstr_n_isotermico, 'Value', 0);
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function cstr_j_l_Callback(hObject, eventdata, handles)
set(handles.cstr_mf, 'Value', 0);

```

```

set(handles.cstr_j_l, 'Value', 1);
set(handles.cstr_n_isotermico, 'Value', 0);
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function cstr_n_isotermico_Callback(hObject, eventdata, handles)
set(handles.cstr_mf, 'Value', 0);
set(handles.cstr_j_l, 'Value', 0);
set(handles.cstr_n_isotermico, 'Value', 1);
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function coluna_destilacao_Callback(hObject, eventdata, handles)
set(handles.cstr_mf, 'Value', 0);
set(handles.cstr_j_l, 'Value', 0);
set(handles.cstr_n_isotermico, 'Value', 0);
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function vaporizador_Callback(hObject, eventdata, handles)
set(handles.cstr_mf, 'Value', 0);
set(handles.cstr_j_l, 'Value', 0);
set(handles.cstr_n_isotermico, 'Value', 0);
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function run_Callback(hObject, eventdata, handles)
%
sistema1 = get(handles.cstr_mf, 'Value');
if sistema1 < 0 % inicio do sistema 1
%
sinal1 = get(handles.senoide, 'Value');
if sinal1 < 0
global pausar;
global parar;
global delta;
% eixo do sinal de entrada
axes(handles.axes1);
h = plot([0 10],[ -3 3], 'EraseMode', 'none');
axis([0 10 -3 3])
%
t = 0;
parar = 0;
pos = 1;
time1 = [];
data1 = [];
dados1 = [];
%dados2 = [];
delta1 = 0.05; % Delta do metodo de Euler
% Definição das constantes
F0 = 1; % velocidade volumetrica entrada (m3/min)
Ca0 = 2; % concentração inicial da componente A (moles/V)
Cp = 1; % calor especifico
L = 1; % constante
F = 1; % velocidade volumetrica de saida (m3/min)
V = 3; % volume dentro do tanque (m3)
k = 0.5; % velocidade de reação (m/min)
p = 1.5;
T0 = 25; % temperatura inicial do sistema
% Definição de constantes para o controlador
eint = 0;
delta = 0;

```

```

Tref = 25;
kp = 30;
ki = 0.5;
T = 45;
% eixo da temperatura no sistema
axes(handles.axes2)
m = plot([0 10],[0 50],'EraseMode','none');
axis([0 10 0 50]);
legend('Temperatura final do sistema')
while parar < 100
if pausar == 200
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','delta');
delta = str2double(get(obj,'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','referencia');
Tref = str2double(get(obj,'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','kp');
kp = str2double(get(obj,'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','ki');
ki = str2double(get(obj,'String'));
end
time1(pos) = t;
y = sin(2*t) + delta;
data1(pos) = y;
set(h,'XData',time1,'YData',data1)
if t < 10
i=[t-9 t];
set(handles.axes1,'Xlim',[i]);
end
% Equações para o controlador PI
e = Tref - T; % calculo do erro
u = 2 + kp*(e + eint/ki); % saída do controlador
Q = u;
% Calculo das derivadas
T0 = y;
dT = 1/V*[F0*T0 - F*T + Q/p*Cp] - L*k*Ca0/p*Cp;
dados1(pos) = T;
set(m,'XData',time1,'YData',dados1)
T = T + dT*delta1;
t = t + delta1;
eint = eint + e*delta1;
pos = pos + 1;
drawnow
pause(0.5)
end
end
%
sinal2 = get(handles.degrau, 'Value');
if sinal2 < 0
global pausar;
global parar;

```

```

global delta;
% eixo do sinal de entrada
axes(handles.axes1);
h = plot([0 10],[-3 3],'EraseMode','none');
axis([0 10 -3 3])
%
t = 0;
parar = 0;
pos = 1;
time1 = [];
data1 = [];
dados1=[];
delta1 = 0.05; % Delta do metodo de Euler
% Definição das constantes
F0 = 1; % velocidade volumetrica entrada (m3/min)
Ca0 = 2; % concentração inicial da componente A (moles/V)
Cp = 1; % calor especifico
L = 1; % constante
F = 1; % velocidade volumetrica de saida (m3/min)
V = 3; % volume dentro do tanque (m3)
k = 0.5; % velocidade de reação (m/min)
p = 1.5;
T0 = 25; % temperatura inicial do sistema
% Definição de constantes para o controlador
eint = 0;
delta = 2;
Tref = 25;
kp = 30;
ki = 0.5;
T = 45;
% eixo da temperatura no sistema
axes(handles.axes2)
m = plot([0 10],[0 50],'EraseMode','none');
axis([0 10 0 50]);
legend('Temperatura final do sistema')
while parar < 100
if pausar == 200
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','delta');
delta = str2double(get(obj,'String'));
obj = findobj(hf,'Tag','referencia');
Tref = str2double(get(obj,'String'));
obj = findobj(hf,'Tag','kp');
kp = str2double(get(obj,'String'));
obj = findobj(hf,'Tag','ki');
ki = str2double(get(obj,'String'));
end
time1(pos) = t;
y = delta;
data1(pos) = y;
set(h,'XData',time1,'YData',data1)
if t < 10
i=[t-9 t];
set(handles.axes1,'Xlim',[i]);

```

```

end
% Equações para o controlador PI
e = Tref - T; % calculo do erro
u = 2 + kp*(e + eint/ki); % saida do controlador
Q = u;
% Calculo das derivadas
T0 = y;
dT = 1/V*[F0*T0 - F*T + Q/p*Cp] - L*k*Ca0/p*Cp;
dados1(pos) = T;
set(m,'XData',time1,'YData',dados1)
T = T + dT*delta1;
t = t + delta1;
eint = eint + e*delta1;
pos = pos + 1;
drawnow
pause(0.5)
end
end
%
end
% Fim do Sistema 1
%
% Inicio do Sistema Jacket Lumped
sistema2 = get(handles.cstr_j-1, 'Value');
if sistema2 < 0 % inicio do sistema 1
%
sinal1 = get(handles.senoide, 'Value');
if sinal1 < 0
global pausar;
global parar;
global delta;
% eixo do sinal de entrada
axes(handles.axes1);
h = plot([0 10],[-3 3],'EraseMode','none');
axis([0 10 -3 3])
legend('Sinal de entrada')
%
t = 0;
parar = 0;
pos = 1;
time1 = [];
data1 = [];
dados1=[];
dados2=[];
dados3=[];
delta1 = 0.05; % Delta do metodo de Euler
% Constantes do sistema
T0 = 18; % temperatura inicial do liquido (°C)
F0 = 1e-3; % fluxo entrando no reator 1 (m³/min)
Ca0 = 3; % concentração inicial do sistema (moles/V)
Fj = 0.01e-3; % fluxo entrando na refrigeração (m³/min)
n = 1;
k = 0.5; % velocidade de reação no tanque
p = 3; % densidade do liquido

```

```

Cp = 1; % capacidade calorifica no tanque
U = 0.4; % coeficiente da transferencia de calor
Ah = 1; % area da transferencia de calor
pj = 1.5; % densidade da agua na refrigeraçao
Vj = 5e-3; % volume de agua na refrigeraçao
Cj = 1; % capacidade calorifica na refrigeraçao
Tj0 = 20; % temperatura da agua na refrigeraçao
D = 0.5; % diametro do tanque
V = 2;
% Definicao de constantes para o controlador
eint = 0;
delta = 0;
Vmin = 1; % volume minimo no tanque
kp = 30;
ki = 0.5;
T = 45;
% Definicao dos eixos
axes(handles.axes2)
m = plot([0 10],[0 50],'EraseMode','none');
axis([0 10 0 50]);
legend('Volume')
axes(handles.axes3)
l = plot([0 10],[0 50],'EraseMode','none');
axis([0 10 0 50]);
legend('Concentracao de A')
axes(handles.axes4)
o = plot([0 10],[0 50],'EraseMode','none');
axis([0 10 0 50]);
legend('Temperatura final')
while parar < 100
if pausar == 200
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','delta');
delta = str2double(get(obj,'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','referencia');
V = str2double(get(obj,'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','kp');
kp = str2double(get(obj,'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','ki');
ki = str2double(get(obj,'String'));
end
time1(pos) = t;
y = sin(2*t) + delta;
data1(pos) = y;
set(h,'XData',time1,'YData',data1)
if t < 10
i=[t-9 t];
set(handles.axes1,'Xlim',[i]);
set(handles.axes2,'Xlim',[i]);
set(handles.axes3,'Xlim',[i]);
set(handles.axes4,'Xlim',[i]);

```

```

end
% Equações para o controlador PI
e = V - Vmin; % calculo do erro
u = 2 + kp*(e + eint/ki); % saida do controlador
F = u;
% Calculo das derivadas
F0 = y;
dV = F0 - F;
dCa = [F0*Ca0 - Tj2*Ca - [V*(Ca)^n]*k - dV*Ca]/V;
dT = [F0*T0 - Tj2*T]/V - [(Ca^n)*k]/p*Cp - [U*Ah*(T-Tj1)]/p*Cp*V;
dTj1 = [4*Fj*(Tj0-Tj1)]/Vj + [U*Ah*(T-Tj1)]/pj*Vj*Cj;
dTj2 = [4*Fj*(Tj1-Tj2)]/Vj + [U*Ah*(T-Tj2)]/pj*Vj*Cj;
dTj3 = [4*Fj*(Tj2-Tj3)]/Vj + [U*Ah*(T-Tj3)]/pj*Vj*Cj;
dTj4 = [4*Fj*(Tj3-x(7))]/Vj + [U*Ah*(x(3)-x(7))]/pj*Vj*Cj;
dados1(pos) = V;
dados2(pos) = Ca;
dados3(pos) = T;
%dados4(pos) = F;
set(m,'XData',time1,'YData',dados1)
set(l,'XData',time1,'YData',dados2)
set(o,'XData',time1,'YData',dados3)
%set(p,'XData',time1,'YData',dados4)
% Metodo de Euler aplicado as equacoes
V = V + dV*delta1;
Ca = Ca + dCa*delta1;
T = T + dT*delta1;
Tj1 = Tj1 + dTj1*delta1;
Tj2 = Tj2 + dTj2*delta1;
Tj3 = Tj3 + dTj3*delta1;
Tj4 = Tj4 + dTj4*delta1;
%%%%%%%%%%
t = t + delta1;
eint = eint + e*delta1;
pos = pos + 1;
drawnow
pause(0.5)
end
end
%
sinal2 = get(handles.degrau, 'Value');
if sinal2 < 0
global pausar;
global parar;
global delta;
% eixo do sinal de entrada
axes(handles.axes1);
h = plot([0 10],[-3 3],'EraseMode','none');
axis([0 10 -3 3])
legend('Sinal de entrada')
%
t = 0;
parar = 0;
pos = 1;
time1 = [];

```

```

data1 = [];
dados1=[];
dados2=[];
dados3=[];
delta1 = 0.05; % Delta do metodo de Euler
% Constantes do sistema
T0 = 18; % temperatura inicial do liquido (°C)
F0 = 1e-3; % fluxo entrando no reator 1 (m3/min)
Ca0 = 3; % concentraçao inicial do sistema (moles/V)
Fj = 0.01e-3; % fluxo entrando na refrigeraçao (m3/min)
n = 1;
k = 0.5; % velocidade de reaçao no tanque
p = 3; % densidade do liquido
Cp = 1; % capacidade calorifica no tanque
U = 0.4; % coeficiente da transferencia de calor
Ah = 1; % area da transferencia de calor
pj = 1.5; % densidade da agua na refrigeraçao
Vj = 5e-3; % volume de agua na refrigeraçao
Cj = 1; % capacidade calorifica na refrigeraçao
Tj0 = 20; % temperatura da agua na refrigeraçao
D = 0.5; % diametro do tanque
% Definicao de constantes para o controlador
eint = 0;
delta = 0;
Vmin = 1; % volume minimo no tanque
kp = 30;
ki = 0.5;
T = 45;
% Definicao dos eixos
axes(handles.axes2)
m = plot([0 10],[0 50],'EraseMode','none');
axis([0 10 0 50]);
legend('Volume')
axes(handles.axes3)
l = plot([0 10],[0 50],'EraseMode','none');
axis([0 10 0 50]);
legend('Concentracao de A')
axes(handles.axes4)
o = plot([0 10],[0 50],'EraseMode','none');
axis([0 10 0 50]);
legend('Temperatura final')
while parar < 100
if pausar == 200
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','delta');
delta = str2double(get(obj,'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','referencia');
Tref = str2double(get(obj,'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','kp');
kp = str2double(get(obj,'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','ki');

```

```

ki = str2double(get(obj,'String'));
end
time1(pos) = t;
y = delta;
set(h,'XData',time1,'YData',data1)
if t < 10
i=[t-9 t];
set(handles.axes1,'Xlim',[i]);
set(handles.axes2,'Xlim',[i]);
set(handles.axes3,'Xlim',[i]);
set(handles.axes4,'Xlim',[i]);
end
% Equações para o controlador PI
e = V - Vmin; % calculo do erro
u = 2 + kp*(e + eint/ki); % saida do controlador
F = u;
% Calculo das derivadas
F0 = y;
dV = F0 - F;
dCa = [F0*Ca0 - Tj2*Ca - [V*(Ca)^n]*k - dV*Ca]/V;
dT = [F0*T0 - Tj2*T]/V - [(Ca^n)*k]/p*Cp - [U*Ah*(T-Tj1)]/p*Cp*V;
dTj1 = [4*Fj*(Tj0-Tj1)]/Vj + [U*Ah*(T-Tj1)]/pj*Vj*Cj;
dTj2 = [4*Fj*(Tj1-Tj2)]/Vj + [U*Ah*(T-Tj2)]/pj*Vj*Cj;
dTj3 = [4*Fj*(Tj2-Tj3)]/Vj + [U*Ah*(T-Tj3)]/pj*Vj*Cj;
dTj4 = [4*Fj*(Tj3-x(7))]/Vj + [U*Ah*(x(3)-x(7))]/pj*Vj*Cj;
dados1(pos) = V;
dados2(pos) = Ca;
dados3(pos) = T;
%dados4(pos) = F;
set(m,'XData',time1,'YData',dados1)
set(l,'XData',time1,'YData',dados2)
set(o,'XData',time1,'YData',dados3)
%set(p,'XData',time1,'YData',dados4)
% Metodo de Euler aplicado as equacoes
V = V + dV*delta1;
Ca = Ca + dCa*delta1;
T = T + dT*delta1;
Tj1 = Tj1 + dTj1*delta1;
Tj2 = Tj2 + dTj2*delta1;
Tj3 = Tj3 + dTj3*delta1;
Tj4 = Tj4 + dTj4*delta1;
%%%%%%%%%%%%%%
t = t + delta1;
eint = eint + e*delta1;
pos = pos + 1;
drawnow
pause(0.5)
end
end
%
end
% Fim do Sistema Jacket Lumped
% Inicio do Sistema Nao Isotermico
sistema3 = get(handles.cstr_n_isotermico, 'Value');

```

```

if sistema3 < 0 % inicio do sistema 1
%
sinal1 = get(handles.senoide, 'Value');
if sinal1 < 0
global pausar;
global parar;
global delta;
% eixo do sinal de entrada
axes(handles.axes1);
h = plot([0 10],[-3 3], 'EraseMode', 'none');
axis([0 10 -3 3])
legend('Sinal de entrada')
%
t = 0;
parar = 0;
pos = 1;
time1 = [];
data1 = [];
dados1 = [];
dados2 = [];
dados3 = [];
delta1 = 0.05; % Delta do metodo de Euler
% Constantes do sistema
T0 = 18; % temperatura inicial do liquido (°C)
F0 = 1e-3; % fluxo entrando no reator 1 (m³/min)
Ca0 = 3; % concentraçao inicial do sistema (moles/V)
Fj = 0.01e-3; % fluxo entrando na refrigeraçao (m³/min)
n = 1;
k = 0.05; % velocidade de reaçao no tanque
p = 3; % densidade do liquido
Cp = 1; % capacidade calorifica no tanque
U = 0.4; % coeficiente da transferencia de calor
Ah = 1; % area da transferencia de calor
pj = 1.5; % densidade da agua na refrigeraçao
Vj = 5e-3; % volume de agua na refrigeraçao
Cj = 1; % capacidade calorifica na refrigeraçao
Tj0 = 20; % temperatura da agua na refrigeraçao
D = 0.5; % diametro do tanque
V = 2;
% Definiçao de constantes para o controlador
eint = 0;
delta = 0;
Vmin = 1; % volume minimo no tanque
kp = 30;
ki = 0.5;
% Definiçao dos eixos
axes(handles.axes2)
m = plot([0 10],[0 50], 'EraseMode', 'none');
axis([0 10 0 50]);
legend('Volume')
axes(handles.axes3)
l = plot([0 10],[0 50], 'EraseMode', 'none');
axis([0 10 0 50]);
legend('Concentraçao de A')

```

```

axes(handles.axes4)
o = plot([0 10],[0 50], 'EraseMode', 'none');
axis([0 10 0 50]);
legend('Temperatura final')
while parar i 100
if pausar == 200
hf = gcf;
obj = findobj(hf, 'Tag', 'delta');
delta = str2double(get(obj, 'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf, 'Tag', 'referencia');
V = str2double(get(obj, 'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf, 'Tag', 'kp');
kp = str2double(get(obj, 'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf, 'Tag', 'ki');
ki = str2double(get(obj, 'String'));
end
time1(pos) = t;
y = sin(2*t) + delta;
data1(pos) = y;
set(h, 'XData', time1, 'YData', data1)
if t i 10
i=[t-9 t];
set(handles.axes1, 'Xlim', [i]);
set(handles.axes2, 'Xlim', [i]);
set(handles.axes3, 'Xlim', [i]);
set(handles.axes4, 'Xlim', [i]);
end
% Equações para o controlador PI
e = V - Vmin; % calculo do erro
u = 2 + kp*(e + eint/ki); % saída do controlador
F = u;
% Calculo das derivadas
F0 = y;
dV = F0 - F;
dCa = [F0*Ca0 - F*Ca - V*(Ca)^n*k - dV*Ca]/V;
dT = [(F0*T0 - F*T) - (V*(Ca)^n*k)/p*Cp - (U*Ah*(T-Tj))/p*Cp - dV*T]/V;
dTj = (Fj*(Tj0 - Tj))/Vj + (U*Ah*(T - Tj))/(pj*Vj*Cj);
dados1(pos) = V;
dados2(pos) = Ca;
dados3(pos) = T;
%dados4(pos) = F;
set(m, 'XData', time1, 'YData', dados1)
set(l, 'XData', time1, 'YData', dados2)
set(o, 'XData', time1, 'YData', dados3)
%set(p, 'XData', time1, 'YData', dados4)
% Metodo de Euler aplicado as equacoes
V = V + dV*delta1;
Ca = Ca + dCa*delta1;
T = T + dT*delta1;
Tj = Tj + dTj*delta1;
%%%%%%%%%%

```

```

t = t + delta1;
eint = eint + e*delta1;
pos = pos + 1;
drawnow
pause(0.5)
end
end
%
sinal2 = get(handles.degrau, 'Value');
if sinal2 < 0
global pausar;
global parar;
global delta;
% eixo do sinal de entrada
axes(handles.axes1);
h = plot([0 10],[-3 3],'EraseMode','none');
axis([0 10 -3 3])
legend('Sinal de entrada')
%
t = 0;
parar = 0;
pos = 1;
time1 = [];
data1 = [];
dados1=[];
dados2=[];
dados3=[];
delta1 = 0.05; % Delta do metodo de Euler
% Constantes do sistema
T0 = 18; % temperatura inicial do liquido (°C)
F0 = 1e-3; % fluxo entrando no reator 1 (m³/min)
Ca0 = 3; % concentração inicial do sistema (moles/V)
Fj = 0.01e-3; % fluxo entrando na refrigeração (m³/min)
n = 1;
k = 0.05; % velocidade de reação no tanque
p = 3; % densidade do liquido
Cp = 1; % capacidade calorifica no tanque
U = 0.4; % coeficiente da transferencia de calor
Ah = 1; % area da transferencia de calor
pj = 1.5; % densidade da agua na refrigeração
Vj = 5e-3; % volume de agua na refrigeração
Cj = 1; % capacidade calorifica na refrigeração
Tj0 = 20; % temperatura da agua na refrigeração
D = 0.5; % diametro do tanque
V = 2;
% Definicão de constantes para o controlador
eint = 0;
delta = 0;
Vmin = 1; % volume minimo no tanque
kp = 30;
ki = 0.5;
% Definicão dos eixos
axes(handles.axes2)
m = plot([0 10],[0 50],'EraseMode','none');

```

```

axis([0 10 0 50]);
legend('Volume')
axes(handles.axes3)
l = plot([0 10],[0 50],'EraseMode','none');
axis([0 10 0 50]);
legend('Concentracao de A')
axes(handles.axes4)
o = plot([0 10],[0 50],'EraseMode','none');
axis([0 10 0 50]);
legend('Temperatura final')
while parar < 100
if pausar == 200
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','delta');
delta = str2double(get(obj,'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','referencia');
Tref = str2double(get(obj,'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','kp');
kp = str2double(get(obj,'String'));
hf = gcf;
obj = findobj(hf,'Tag','ki');
ki = str2double(get(obj,'String'));
end
time1(pos) = t;
y = delta;
data1(pos) = y;
set(h,'XData',time1,'YData',data1)
if t < 10
i=[t-9 t];
set(handles.axes1,'Xlim',[i]);
set(handles.axes2,'Xlim',[i]);
set(handles.axes3,'Xlim',[i]);
set(handles.axes4,'Xlim',[i]);
end
% Equações para o controlador PI
e = V - Vmin; % calculo do erro
u = 2 + kp*(e + eint/ki); % saida do controlador
F = u;
% Calculo das derivadas
F0 = y;
dV = F0 - F;
dCa = [F0*Ca0 - F*Ca - V*(Ca)^n*k - dV*Ca]/V;
dT = [(F0*T0 - F*T) - (V*(Ca)^n*k)/p*Cp - (U*Ah*(T-Tj))/p*Cp - dV*T]/V;
dTj = (Fj*(Tj0 - Tj))/Vj + (U*Ah*(T - Tj))/(pj*Vj*Cj);
dados1(pos) = V;
dados2(pos) = Ca;
dados3(pos) = T;
%dados4(pos) = F;
set(m,'XData',time1,'YData',dados1)
set(l,'XData',time1,'YData',dados2)
set(o,'XData',time1,'YData',dados3)
%set(p,'XData',time1,'YData',dados4)

```

```

% Metodo de Euler aplicado as equações
V = V + dV*delta1;
Ca = Ca + dCa*delta1;
T = T + dT*delta1;
Tj = Tj + dTj*delta1;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
t = t + delta1;
eint = eint + e*delta1;
pos = pos + 1;
drawnow
pause(0.5)
end
end
%
end
% Fim do Sistema Nao Isotermico
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function stop_Callback(hObject, eventdata, handles)
global parar;
parar=200;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function pause_Callback(hObject, eventdata, handles)
global pausar;
pause(1)
pausar=200;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function close_Callback(hObject, eventdata, handles)
close(handles.figure2)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

```

7 Bibliografia

William Luyben
 Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineer
 McGraw - Hill

Élia Yathie Matsumoto
 Matlab 6.5 - Fundamentos de Programação
 Editora Érica

Kotani, A. M.; Sousa, R. L.; Ucci, W.
 Lógica de programação: Os primeiros passos
 Editora Érica

Manzano, J. A. N. G.; Oliveira, J. F.
 Algoritmos: Lógica para Desenvolvimento de Programação
 Editora Érica

Astrom K. and B. Wittenmark
 Computer Controlled Systems, Theory and Design
 Prentice Hall International
 3rd edition - 1997