



Universidade Federal de Campina Grande
Centro de Engenharia Elétrica e Informática
Curso de Graduação em Engenharia Elétrica

Lucas de Souza Borges

**Modelo Matemático e Simulação de um Reator Tanque
Agitado Contínuo e um Trocador de Calor**

Campina Grande, Paraíba
Maio de 2014

Lucas de Souza Borges

Modelo Matemático e Simulação de um Reator Tanque Agitado Contínuo e um Trocador de Calor

*Trabalho de Conclusão de Curso submetido à
Unidade Acadêmica de Engenharia Elétrica
Universidade Federal de Campina Grande
como parte dos requisitos necessários para a
obtenção do grau de Bacharel em Ciências no
Domínio da Engenharia Elétrica*

Área de concentração: Controle Analógico, Controle Digital e Modelagem e
Identificação de Sistemas

Orientador:
Professor João Batista Morais dos Santos, Dr.
Campina Grande, Paraíba
Maio de 2014

Lucas de Souza Borges

Modelo Matemático e Simulação de um Reator Tanque Agitado Contínuo e um Trocador de Calor

*Trabalho de Conclusão de Curso submetido à
Unidade Acadêmica de Engenharia Elétrica
Universidade Federal de Campina Grande
como parte dos requisitos necessários para a
obtenção do grau de Bacharel em Ciências no
Domínio da Engenharia Elétrica*

Área de concentração: Controle Analógico, Controle Digital e Modelagem e
Identificação de Sistemas

Aprovado em / /

Professor Avaliador

Universidade Federal de Campina Grande
Avaliador

Professor João Batista Morais dos Santos, Dr.

Universidade Federal de Campina Grande
Orientador, UFCG

Agradecimentos

A Deus, por ter me concedido saúde e força para chegar até aqui.

Aos meus pais, pelo amor e apoio incondicionais dados em todos os momentos da minha vida.

Aos meus irmãos, Maíra e Caio, por serem fonte de conhecimento, amor e admiração.

À minha namorada, que de forma especial me dá amor e carinho para enfrentar qualquer empreitada.

À esta instituição, pela formação a mim concedida.

Ao professor João Batista, pela orientação e imensurável compreensão em todos os momentos.

A todos os grandes amigos que conquistei durante esta jornada na UFCG, especialmente ao Grupo Bala.

A todos aqueles que direta ou indiretamente contribuíram para que este curso chegasse ao fim.

"O momento em que você para de tentar ser uma pessoa melhor, é o momento em que você se torna pior do que já é." - Carroll Bryant

Resumo

Este trabalho trata da dinâmica de dois processos químicos, um Trocador de Calor e um Reator Tanque Agitado Contínuo. O comportamento destes sistemas é determinado utilizando-se soluções matemáticas analíticas, bem como, no caso do reator, utilizando-se uma simulação. O trabalho cria um link entre uma aplicação específica e métodos matemáticos que definem um processo. Os modelos matemáticos são desenvolvidos a partir de princípios físicos e químicos básicos.

Palavras-Chave: Modelagem de sistemas; identificação de sistemas; processos químicos; controle digital; Matlab.

Lista de Figuras

2.1	Representação do reator químico isotérmico. Fonte [4]	3
2.2	Gráfico do fluxo volumétrico e da concentração de A para uma reação sem controle.	15
2.3	Gráfico do fluxo volumétrico e da concentração de A para uma com controlador proporcional.	16
2.4	Resposta do controlador proporcional para uma mudança na temperatura.	17
3.1	Representação do tanque com serpentina de aquecimento	18
3.2	Representação do trocador de calor de casco e tubo. Fonte [4]	22
3.3	Trocador de calor em contracorrente	24

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Objetivos	1
1.2	Organização do Texto	1
2	Dinâmica de um Reator Tanque Agitado Contínuo	2
2.1	Reação Isotérmica de Primeira Ordem	2
2.1.1	Linearização das Equações do Modelo	4
2.1.2	Análise do Modelo	6
2.2	Reações em Equilíbrio	6
2.3	Reações Consecutivas	8
2.4	Reações Não-Isotérmicas	10
2.4.1	Condições para Estabilidade	13
2.5	Simulação	14
3	Dinâmica de um Trocador de Calor	18
3.1	Transferência de Calor a Partir de uma Serpentina de Aquecimento	18
3.2	Trocador de Calor de Casco e Tubo com Condensação de Vapor	21
3.3	Dinâmica de um Trocador De Calor em Contracorrente	23
4	Conclusão e Trabalhos Futuros	25
5	Bibliografia	26
	Anexo	27

1 Introdução

A identificação de sistemas surgiu da necessidade de modelar matematicamente um processo desconhecido baseado apenas na análise de dados obtidos a partir de medições das entradas e saídas. A partir destes modelos matemáticos, pode-se desenvolver métodos de controle para os processos reais.

Neste trabalho serão abordados os modelos matemáticos de um Reator Tanque Agitado Contínuo e de um Trocador de Calor, analisando-se suas dinâmicas e seus principais tipos. Será demonstrado também como simular um controle proporcional para o reator, mostrando suas características e resultados.

1.1 Objetivos

Os objetivos deste trabalho são:

1. Descrever o modelo matemático de um reator tanque agitado contínuo e analisar a sua dinâmica.
2. Descrever o modelo matemático de três tipos de trocadores de calor.
3. Desenvolver uma simulação para o reator químico utilizando o software Matlab.

1.2 Organização do Texto

O texto está organizado da seguinte forma: na seção 2 estão descritas as dinâmicas de um reator tanque agitado contínuo para reações isotérmicas, reações em equilíbrio, reações consecutivas e reações não-isotérmicas, além de ter como último item, a apresentação de uma simulação em Matlab para este processo. O modelo matemático e a análise da dinâmica de um trocador de calor estão mostrados na seção 3. Esta seção compreende a análise de três tipos de trocadores calor. Por fim, na seção 4, encontra-se a conclusão para o trabalho.

2 Dinâmica de um Reator Tanque Agitado Contínuo

Na indústria química, os reatores são a parte mais importante do processo. Neles, matérias-primas são transformadas em produtos a serem utilizados posteriormente. Pode-se encontrar reatores de vários tipos, os quais são classificados da seguinte forma. [4]

1. Com relação ao formato:
 - a) Reatores tubulares (PFR - *plug flow reactor*)
 - b) Tanque com agitador (STR - *stirred tank reactor*)
2. Com relação à produção:
 - a) Em batelada ou descontínuo (*batch reactor*)
 - b) Descontínuo com alimentação (*fed batch reactor*)
 - c) Contínuo com agitação (CSTR - *continuous stirred tank reactor*)

O projeto de um reator deve garantir que a reação ocorra nas condições ideais, aumentando a eficiência (alto rendimento e mínimo custo energético) na obtenção do produto final desejado. Desse modo, é de extrema importância modelar e controlar este processo. Uma das maneiras de monitorar a reação é medir a quantidade da matéria-prima que não reagiu.

Para a modelagem de um CSTR assumiremos o seguinte:

- o reator está sempre cheio, ou seja, o nível é constante.
- o reator é idealmente misturado, não há gradientes de concentração e a concentração do reator é a mesma da concentração de saída.
- a densidade é a mesma durante o processo e independente da concentração dos componentes e da temperatura.

2.1 Reação Isotérmica de Primeira Ordem

Considere o reator da Figura 2.1, no qual a reação acontece à temperatura constante. Seja $F(m^3/s)$ o fluxo do reator, $c_{Ain}(kg/m^3)$ a concentração de entrada e $V(m^3)$ o volume do reator. As concentrações de saída são $c_A(kg/m^3)$ e $c_B(kg/m^3)$.

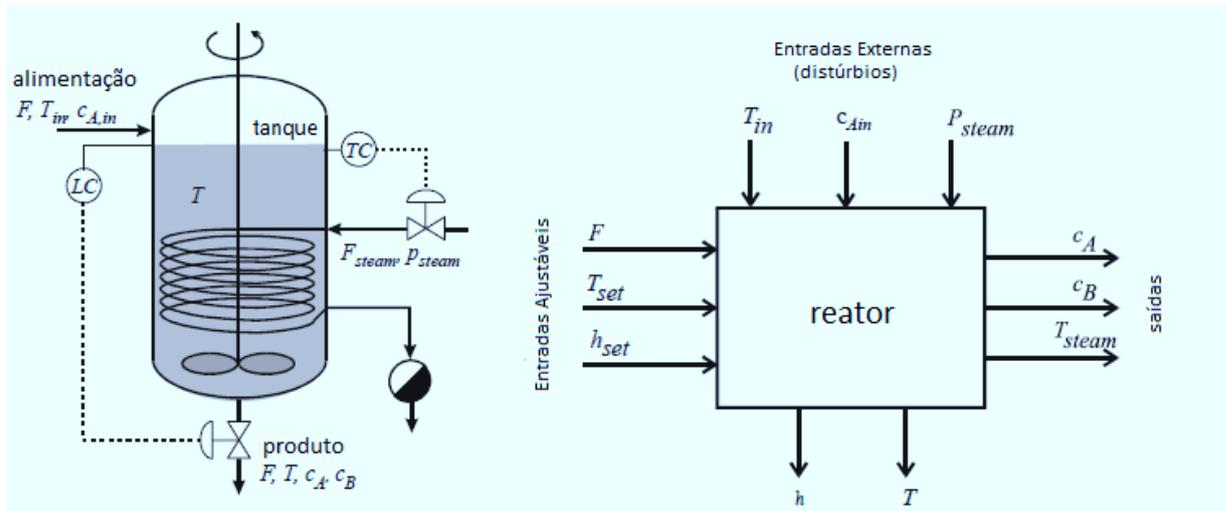


Figura 2.1 – Representação do reator químico isotérmico. Fonte [4]

Assume-se que a reação é de primeira ordem, regida pela equação estequiométrica $A \rightarrow B$, e que acontece a uma taxa constante k_1 , ou seja, $r = k_1 c_A$. Neste caso, não há balanço de energia (reação isotérmica) nem balanço total de massa (fluxo de entrada é igual ao fluxo de saída). Logo, o único balanço a ser feito é dos componentes A e B, o qual é dado por: [4]

$$\left[\begin{array}{c} \text{Taxa de variação} \\ \text{da massa do} \\ \text{componente dentro} \\ \text{do sistema} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{fluxo líquido da} \\ \text{massa do componente} \\ \text{nas fronteiras} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{produção líquida da} \\ \text{massa do componente} \\ \text{através da reação} \\ \text{no sistema} \end{array} \right] \quad (2.1)$$

A soma do balanço de componente deve condizer com o balanço de massa, no entanto, pode haver produção ou consumo do componente durante a reação. Usando a Eq. (2.1), para o componente A com concentração C_A [$mol.m^{-3}$] e um fluxo volumétrico F_v , tem-se:

$$\frac{dVC_A}{dt} = \sum_{i=1}^N F_{v,in,A} C_{in,A} - \sum_{j=1}^M F_{v,out,j} C_A + J_{transfer} + J_{reaction} \quad (2.2)$$

onde N representa o número de fluxos de entrada e M o número de fluxos de saída.

A taxa de reação do componente A é definida como o número de mols do compo-

nente produzidos ou consumidos por unidade de tempo por volume, ou seja:

$$\frac{J_{reaction}}{V} = r_A \quad (2.3)$$

Com isso, como para uma reação temos $J_{transfer} = 0$, pode-se escrever a Eq. (2.2) fazendo:

$$V \frac{dc_A}{dt} = F(c_{Ain} - c_A) - rV = F(c_{Ain} - c_A) - Vk_1c_A \quad (2.4)$$

A derivada do lado esquerdo representa o acúmulo de massa do componente A em kg/s ; o primeiro termo à direita da igualdade representa a diferença entre o fluxo de entrada e de saída do componente A; e o último termo representa o desaparecimento do componente A durante a reação (transformou-se em B).

Por analogia pode-se deduzir a equação que representa o balanço do componente B:

$$V \frac{dc_B}{dt} = -F_{cB} + rV = -F_{cB} + Vk_1c_A \quad (2.5)$$

2.1.1 Linearização das Equações do Modelo

A linearização é baseada na expansão em série de Taylor da função ao redor do ponto de operação. Uma função arbitrária $f(x)$ pode então ser aproximada por: [4]

$$f(x) = f(x_0) + \frac{(x - x_0)}{1!} \left(\frac{df}{dx} \right)_{x_0} + \frac{(x - x_0)^2}{2!} \left(\frac{d^2f}{dx^2} \right)_{x_0} + \dots \quad (2.6)$$

onde x_0 é o ponto de referência. O desvio da variável do processo do ponto de operação pode ser dado por $\delta_x = x - x_0$, na qual δ_x é chamado de variável de desvio. Ignorando os termos de segunda ou maiores ordens da série, podemos aproximar a Eq. (2.6) por:

$$f(x) = f(x_0) + \left(\frac{df}{dx} \right)_{x_0} \delta_x \quad (2.7)$$

A função original é então aproximada pela tangente da sua curva no ponto de operação (derivada). Logo:

$$\frac{dx}{dt} = f(x) = f(x_0) + \left(\frac{df}{dx} \right)_{x_0} \delta_x \quad (2.8)$$

No ponto de operação x_0 , $\delta_x = 0$, assim podemos escrever:

$$\frac{d x_0}{d t} = f(x_0) \quad (2.9)$$

Introduzimos agora uma nova variável $x = x_0 + \delta_x$. Então podemos reescrever a Eq. (2.8):

$$\frac{d(x_0 + \delta_x)}{d t} = \frac{d(x_0)}{d t} + \frac{d(\delta_x)}{d t} = f(x_0) + \left(\frac{d f}{d x} \right)_{x_0} \delta_x \quad (2.10)$$

a qual pode ser reescrita utilizando a Eq. (2.9)

$$\frac{d(\delta_x)}{d t} = \left(\frac{d f}{d x} \right)_{x_0} \delta_x \quad (2.11)$$

Portanto, a linearização e aplicação da transformada de Laplace na Eq. (2.4) resulta em:

$$V s \delta c_A = (c_{Ain} - c_A)_0 \delta F + F_0 \delta c_{Ain} - F_0 \delta c_A - V k_1 \delta c_A \quad (2.12)$$

a qual pode ser rearranjada para:

$$\delta c_A = \frac{K_1}{\tau_A s + 1} \delta F + \frac{K_2}{\tau_A s + 1} \delta c_{Ain} \quad (2.13)$$

onde

$$\tau_A = \frac{V}{F_0 + V k_1} = \frac{\tau_R}{1 + k_1 \tau_R}$$

$\tau_R = V/F_0$, tempo de permanência do material no reator

$$K_1 = \frac{(c_{Ain} - c_A)_0}{F_0 + V k_1} = \frac{(c_{Ain} - c_A)_0 / F_0}{1 + k_1 \tau_R} \quad (2.14)$$

$$K_2 = \frac{F_0}{F_0 + V k_1} = \frac{1}{1 + k_1 \tau_R}$$

Linearizando a Eq. (2.5), tem-se:

$$V s \delta c_B = -F_0 \delta c_B - c_{B0} \delta F + V k_1 \delta c_A \quad (2.15)$$

que pode ser reescrita como:

$$\delta c_B = -\frac{K_3}{\tau_{RS} + 1} \delta F + \frac{K_4}{\tau_{RS} + 1} \delta c_A \quad (2.16)$$

onde

$$\begin{aligned} K_3 &= c_{B0}/F_0 \\ K_4 &= V k_1/F_0 = k_1 \tau_R \end{aligned} \quad (2.17)$$

2.1.2 Análise do Modelo

A partir das Eq. (2.13) e (2.16) pode-se obter as funções de transferência necessárias para analisar o modelo. Na (2.13) é possível observar que a relação entre δc_A e δF é uma função de transferência de primeira ordem com ganho K_1 e constante de tempo τ_A . Da mesma forma, a relação entre δc_A e δc_{Ain} é uma função de transferência de primeira ordem com ganho K_2 e constante de tempo também τ_A . Para reações rápidas (k_1 grande), τ_A tende a $1/k_1$, o que tende a zero, ou seja, a resposta do sistema será instantânea. Além disso, os ganhos K_1 e K_2 se tornam pequenos. Isso significa que as matérias primas são quase instantaneamente transformadas e que o fluxo de entrada e a concentração de entrada não afetam tanto a concentração de saída.

Já a resposta entre δc_B e δc_{Ain} pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\delta c_B}{\delta c_{Ain}} = \frac{\delta c_B}{\delta c_A} \frac{\delta c_A}{\delta c_{Ain}} = \frac{K_2 K_4}{(\tau_{RS} + 1)(\tau_{AS} + 1)} = \frac{\frac{k_1 \tau_R}{1 + k_1 \tau_R}}{(\tau_{RS} + 1)(\tau_{AS} + 1)} \quad (2.18)$$

que é uma função de transferência de segunda ordem com constantes de tempo τ_R (tempo de residência) e τ_A (devido à reação). Desse modo, a resposta é dependente do tempo de residência do material no reator e das características da reação.

2.2 Reações em Equilíbrio

Consideremos o mesmo reator da Figura 2.1, porém assumindo que a reação agora é uma reação de equilíbrio, $A \leftrightarrow B$, com taxas constantes k_1 , para a reação direta, e k_2 para a reação inversa. Logo, a taxa de reação agora é dada por

$$r = k_1 c_A - k_2 c_B \quad (2.19)$$

A equação (2.4) deve ser modificada para:

$$V \frac{dc_A}{dt} = F(c_{Ain} - c_A) - rV = F(c_{Ain} - c_A) - Vk_1c_A + Vk_2c_B \quad (2.20)$$

e a Eq. (2.5) conforme segue:

$$V \frac{dc_B}{dt} = -F_{cB} + rV = -F_{cB} + Vk_1c_A - Vk_2c_B \quad (2.21)$$

Neste caso, a produção do componente B é diretamente determinada pela conversão do componente A, logo, medir a concentração de saída do componente A é do nosso interesse. Utilizando os mesmos métodos mostrados anteriormente, a linearização das equações (2.20) e (2.21) resulta em:

$$\delta_{c_A} = \frac{K_1}{\tau_{AS} + 1} \delta F + \frac{K_2}{\tau_{AS} + 1} \delta_{c_{Ain}} + \frac{K_3}{\tau_{AS} + 1} \delta_{c_B} \quad (2.22)$$

onde τ_A , K_1 e K_2 são os mesmos da (2.14) e K_3 é dado por:

$$K_3 = \frac{Vk_2}{F_0 + Vk_1} = \frac{k_2\tau_R}{1 + k_1\tau_R} \quad (2.23)$$

e

$$\delta_{c_B} = -\frac{K_4}{\tau_{BS} + 1} \delta F + \frac{K_5}{\tau_{BS} + 1} \delta_{c_A} \quad (2.24)$$

onde as constantes de tempo e ganhos são definidos por:

$$\begin{aligned} \tau_B &= \frac{V}{F_0 + Vk_2} = \frac{\tau_R}{1 + k_2\tau_R} \\ K_4 &= \frac{c_{B0}}{F_0 + Vk_2} = \frac{c_{B0}/F_0}{1 + k_2\tau_R} \\ K_5 &= \frac{Vk_1}{F_0 + vk_2} = \frac{k_1\tau_R}{1 + k_2\tau_R} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Observando a Eq. (2.22) percebe-se que há um termo adicional δ_{c_B} , em comparação a Eq. (2.13). Já a Eq. (2.24) é similar a Eq. (2.16), com τ_R substituindo τ_B . Se $k_2 = 0$, tem-se $\tau_R = \tau_B$, e os ganhos K_4 e K_5 da Eq. (2.25) se tornam iguais aos valores dados na Eq. (2.17).

A resposta entre $\delta_{c_{Ain}}$ e δ_{c_A} agora é diferente, comparada ao caso anterior, já que $\delta_{c_{Ain}}$ também afeta δ_{c_B} através de δ_{c_A} , e δ_{c_B} , por sua vez, afeta δ_{c_A} novamente. O

balanço de componentes tornou-se interativo. Pode-se analisar este fato combinando as Eq. (2.22) e (2.24):

$$[(\tau_A s + 1)(\tau_B s + 1) - K_3 K_5] \delta_{c_A} = [K_1(\tau_B s + 1) - K_3 K_4] \delta F + K_2(\tau_B s + 1) \delta_{c_{Ain}} \quad (2.26)$$

Neste caso, a relação entre c_A e c_{Ain} não é mais uma função de transferência de primeira ordem como anteriormente. Vejamos:

$$\frac{\delta_{c_A}}{\delta_{c_{Ain}}} = \frac{K_2(\tau_B s + 1)}{(\tau_A s + 1)(\tau_B s + 1) - K_3 K_5} \quad (2.27)$$

onde o termo $K_3 K_5$ descreve a interação entre os balanços de componente.

Da mesma forma, a relação entre c_B e c_{Ain} pode ser escrita como:

$$\frac{\delta_{c_B}}{\delta_{c_{Ain}}} = \frac{K_2 K_5}{(\tau_A s + 1)(\tau_B s + 1) - K_3 K_5} \quad (2.28)$$

A relação entre δ_{c_A} e o fluxo F também não é mais a mesma. Anteriormente tínhamos uma função de transferência de primeira ordem com ganho K_1 e constante de tempo τ_A (Eq. 2.13). Da Eq. (2.26) temos:

$$\frac{\delta_{c_A}}{\delta F} = \frac{K_1(\tau_B s + 1) - K_3 K_4}{(\tau_A s + 1)(\tau_B s + 1) - K_2 K_5} \quad (2.29)$$

Como podemos ver, a resposta de c_A que modifica F pode ser negativa quando $K_1 - K_3 K_4 < 0$, o que não acontecerá na realidade.

2.3 Reações Consecutivas

Nas seções anteriores vimos que a otimização da obtenção do componente B poderia ser alcançada maximizando-se a conversão do componente A, o que é equivalente a minimizar a concentração de saída deste componente.

A partir de agora analisaremos as reações consecutivas dadas por:



as quais possuem taxas de reação de primeira ordem descritas a seguir:

$$r_A = -k_1 c_A, \quad r_b = k_1 c_A - k_2 c_B, \quad r_c = k_2 c_B \quad (2.31)$$

As equações para cada componente podem ser escritas como: [4]

$$\begin{aligned} V \frac{dc_A}{dt} &= F(c_{Ain} - c_A) - V k_1 c_A \\ V \frac{dc_B}{dt} &= -F c_B + V k_1 c_A - V k_2 c_B \\ V \frac{dc_C}{dt} &= -F c_C + V k_2 c_B \end{aligned} \quad (2.32)$$

De antemão podemos perceber duas coisas:

- a função de transferência entre c_{Ain} e c_C será de terceira ordem, uma vez que o balanço de cada componente será uma função de transferência de primeira ordem.
- a função de transferência entre F e c_C será uma combinação entre uma função de transferência de primeira, segunda e terceira ordem. O modelo completo dependerá dos valores dos ganhos de cada modelo individual.

Linearizando e aplicando a transformada de Laplace à Eq. (2.32), pode-se obter a função de transferência entre c_C e c_{Ain} :

$$\begin{aligned} \frac{\delta c_C}{\delta c_{Ain}} &= \left(\frac{\delta c_A}{\delta c_{Ain}} \right) \left(\frac{\delta c_B}{\delta c_A} \right) \left(\frac{\delta c_C}{\delta c_B} \right) = \frac{K_2}{(\tau_A s + 1)} \frac{K_5}{(\tau_B s + 1)} \frac{K_6}{(\tau_R s + 1)} \\ &\quad \frac{\frac{k_1 \tau_R}{(1+k_1 \tau_R)} \frac{k_2 \tau_R}{(1+k_2 \tau_R)}}{(\tau_A s + 1)(\tau_B s + 1)(\tau_R s + 1)} \end{aligned} \quad (2.33)$$

onde K_2 , τ_A e τ_R são dados pela Eq. (2.14), K_5 e τ_B são os da Eq. (2.25) e $K_6 = k_2 \tau_R$.

Se B é o componente principal, deve-se saber que este tem uma concentração máxima. Para observar isto, primeiro deve-se analisar as respostas de c_A e c_B em relação a c_{Ain} . A resposta entre c_A e c_{Ain} foi dada pela Eq. (2.13) e continua a mesma para a reação em questão:

$$\delta c_A = \frac{K_1}{\tau_A s + 1} \delta F + \frac{K_2}{\tau_A s + 1} \delta c_{Ain} \quad (2.34)$$

Já a relação entre c_B e c_{Ain} é:

$$\frac{\delta c_B}{\delta c_{Ain}} = \frac{\frac{k_1 \tau_R}{1+k_1 \tau_R} \frac{1}{1+k_2 \tau_R}}{(\tau_{AS} + 1)(\tau_{BS} + 1)} \quad (2.35)$$

2.4 Reações Não-Isotérmicas

Nem sempre os reatores abrigam uma reação em condições isotérmicas. Nestes casos, resfriadores, aquecedores ou até reatores revestidos são utilizados para controlar a temperatura. Os balanços de componentes são agora afetados pela temperatura, já que a taxa de reação é, por sua vez, dependente da temperatura. Consideremos uma reação exotérmica com um calor de reação δH cujo calor excedente é retirado através de uma serpentina com área de transferência de calor A . Mantem-se as suposição das seções anteriores (com exceção da isotermita) e acrescentaremos as seguintes:

- o coeficiente de transferência de calor total U é considerado constante.
- a temperatura no reator é T e a temperatura média na serpentina de resfriamento é T_c .
- a capacidade térmica da serpentina de resfriamento e seu conteúdo podem ser ignorados, uma vez que a capacidade térmica do reator é bem maior.
- a reação considerada é $A \rightarrow B$.
- a taxa de reação é de primeira ordem para o componente A.

A taxa de reação agora é dada por uma equação equivalente a equação de Arrhenius: [5]

$$r = k_0 e^{-E/RT} c_A \quad (2.36)$$

na qual E é a energia de ativação da reação, R é a constante dos gases e k_0 é a constante pré-exponencial. T é a temperatura e c_A é a concentração do componente A.

Analogamente ao balanço de componente com N entradas e M saídas da Eq. (2.2), o balanço de energia do sistema pode ser descrito por:

$$\frac{dE}{dt} = \sum_{i=1}^N F_{m,in,i} \hat{E}_{in,i} - \sum_{j=1}^M F_{m,out,j} \hat{E}_{out,j} + Q + W \quad (2.37)$$

E é a energia total, que é igual a soma da energia interna U , cinética K_E e potencial P_E . \hat{E} é a energia total por unidade de massa.

$$E = U + K_E + P_E \quad (2.38)$$

Do lado direito da equação (2.37) temos o calor convectivo de entrada e saída, o fluxo líquido de calor Q que entra no sistema, com:

$$Q = Q_{\text{condução}} + Q_{\text{radiação}} + Q_{\text{elétrico}} \quad (2.39)$$

e a quantidade líquida de trabalho que atua no sistema:

$$W = W_s + W + E \quad (2.40)$$

onde:

W_s trabalho mecânico aplicado, J/s

W_E energia de expansão, J/s

Podemos fazer algumas simplificações:

- $K_E \approx 0$
porque a velocidade dos fluxos são pequenas, ou seja, a contribuição da energia cinética pode ser ignorada.
- $P_E \approx 0$
porque as diferenças de altura são pequenas, ou seja, a contribuição da energia potencial pode ser ignorada.

Com essas simplificações ficamos apenas com o balanço de energia interna. Da termodinâmica sabemos que a entalpia H é a soma da energia interna e do produto PV . Usando isto, temos: [4]

$$\frac{dU}{dt} = \frac{dm\hat{H}}{dt} - \frac{dPV}{dt} = \sum_{i=1}^N F_{m,in,i} \hat{H}_{in,i} - \sum_{j=1}^M F_{m,out,j} \hat{H}_{out,j} + Q + W \quad (2.41)$$

Para muitos líquidos, devido à pequena diferença de pressão, tem-se $d(P/\rho)/dt \approx 0$.

Finalmente, o balanço de energia é dado por:

$$\frac{dm\hat{H}}{dt} = \sum_{i=1}^N F_{m,in,i} \hat{H}_{in,i}(C, T) - \sum_{j=1}^M F_{m,out,j} \hat{H}_{out,j}(C, T) + Q + W \quad (2.42)$$

com a entalpia H sendo função da temperatura T e da composição C .

Considerando um reator com apenas um fluxo de entrada e saída, e sem transferência de trabalho W , tem-se:

$$\frac{dH(C, T)}{dt} = F_{m,in,i} \hat{H}_{in,i}(C, T) - F_{m,out,j} \hat{H}_{out,j}(C, T) + Q \quad (2.43)$$

Utilizando as equações de dependência de temperatura e composição, além dos balanços de componentes e termo de resfriamento, podemos reescrever o balanço de energia para o reator da seguinte forma:

$$\rho V c_P \frac{dT}{dt} = F \rho c_P (T_{in} - T) + rV \Delta H - UA(T - T_c) \quad (2.44)$$

onde o lado esquerdo da equação representa a acumulação temporária de energia no reator, (J/s), o primeiro termo do lado direito da igualdade representa o calor que entra no reator, o segundo termo representa a energia gerada devido à reação e o último termo é o calor retirado do reator. Na Eq. (2.44) assume-se que a temperatura de referência é igual a zero.

Combinando a Eq. (2.4) com a Eq. (2.36) temos:

$$V \frac{dc_A}{dt} = F(c_{Ain} - c_A) - V_r \quad (2.45)$$

Geralmente, a concentração final de c_A é controlada pela alimentação F do reator, enquanto que a temperatura T é controlada pelo fluxo de água da bobina de resfriamento, ou seja, controlando-se a temperatura T_c .

A linearização da Eq. (2.45) resulta em:

$$\delta c_A = \frac{K_1 \delta F}{\tau_{RS} + 1} + \frac{\delta c_{Ain}}{\tau_{RS} + 1} - \frac{\tau_R \delta r}{\tau_{RS} + 1} \quad (2.46)$$

com

$$\tau_R = V/F_0, K_1 = (c_{Ain} - c_A)_0/F_0 \quad (2.47)$$

Linearizando as equações (2.36) e (2.44), tem-se:

$$\delta T = \frac{-K_2 \delta F}{\tau_T s + 1} + \frac{K_3 \delta T_{in}}{\tau_T s + 1} + \frac{K_4 \delta r}{\tau_T s + 1} + \frac{K_5 \delta T_c}{\tau_T s + 1} \quad (2.48)$$

com

$$\begin{aligned} \tau_T &= \tau_R / (1 + UA / F_0 \rho c_p) \\ K_2 &= \frac{(T - T_{in}) / F_0}{1 + (UA / F_0 \rho c_p)} \\ K_3 &= \frac{1}{1 + (UA / F_0 \rho c_p)} \\ K_4 &= \frac{V \Delta H / F_0 \rho c_p}{1 + (UA / F_0 \rho c_p)} \\ K_5 &= \frac{UA / F_0 \rho c_p}{1 + (UA / F_0 \rho c_p)} \end{aligned} \quad (2.49)$$

A Eq. (2.36) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \delta r &= r_1 \delta c_A + r_2 \delta T \\ r_1 &= \left(\frac{\partial r}{\partial c_A} \right)_0 = r_0 / c_{A0} \\ r_2 &= \left(\frac{\partial r}{\partial T} \right)_0 = E r_0 / RT^2 \end{aligned} \quad (2.50)$$

na qual r_0 é a taxa de reação de regime permanente.

2.4.1 Condições para Estabilidade

Podemos determinar as condições para estabilidade do reator assumindo que não existem perturbações no sistema, ou seja, $\delta F = 0$, $\delta c_{Ain} = 0$, $\delta T_c = 0$ e $\delta T_{in} = 0$.

As equações (2.46), (2.48) e (2.50) podem ser reescritas como:

$$\begin{aligned} (\tau_R s + 1 + r_1 \tau_R) \delta c_A &= -r_2 \tau_R \delta T \\ (\tau_T s + 1 - K) 4 r_2 \delta T &= K_4 r_1 \delta c_A \end{aligned} \quad (2.51)$$

o que resulta na equação característica: [4]

$$\tau_T \tau_R s^2 + (\tau_R - r_2 \tau_R K_4 + \tau_T + r_1 \tau_T \tau_R) s + (r_1 \tau_R - r_2 K_4 + 1) = 0 \quad (2.52)$$

A primeira condição de estabilidade (estabilidade estática) requer:

$$r_1\tau_R - r_2K_4 + 1 > 0 \quad (2.53)$$

Substituindo os parâmetros e combinando com a versão estática da Eq. (2.45) ficamos com:

$$\frac{c_{Ain}}{c_{A0}} > \frac{F_0(c_{Ain} - c_{A0})\Delta H}{(F_0\rho c_p + UA)} \frac{E}{RT_0^2} \quad (2.54)$$

A condição de estabilidade dinâmica é:

$$\tau_R - r_2\tau_R K_4 + \tau_T + r_1\tau_T\tau_R > 0 \quad (2.55)$$

Mais uma vez, substituindo os parâmetros e combinando com a versão estática da Eq. (2.45), temos:

$$\frac{c_{Ain}}{c_{A0}} \frac{F_0\rho c_p}{(F_0\rho c_p + UA)} + 1 > \frac{F_0(c_{Ain0} - c_{A0})\Delta H}{(F_0\rho c_p + UA)} \frac{E}{RT_0^2} \quad (2.56)$$

Percebe-se que se a Eq. (2.54) é satisfeita, a Eq. (2.56) também é satisfeita. Se a Eq. (2.54) não é satisfeita, o sistema é instável. Neste caso seu comportamento pode ser caracterizado por uma função exponencial crescente no tempo.

2.5 Simulação

Agora, examinar-se-a como fazer uma simples simulação de um controlador para um CSTR. O controle da concentração de saída será feito através do fluxo volumétrico de entrada.

No entanto, primeiramente ira ser analisada a simulação sem o uso de um controlador. Logo após, será adicionado um controlador proporcional simples e, por fim, será observada a sua resposta para uma mudança na temperatura, a qual altera a taxa de reação. Os códigos fonte das simulações encontram-se no anexo.

Considerando um tanque com volume igual a 100 l e taxa de fluxo volumétrico igual a 20 m³/s. A concentração de entrada será igual a 2 kg/m³. Para estas condições, como pode-se observar na Figura 2.2, utilizando a Eq. (2.4) sem nenhum controlador, a concentração de saída do componente A é muito alta, o que não e desejado.

Pode-se então calcular o fluxo volumétrico que resultasse na concentração dese-

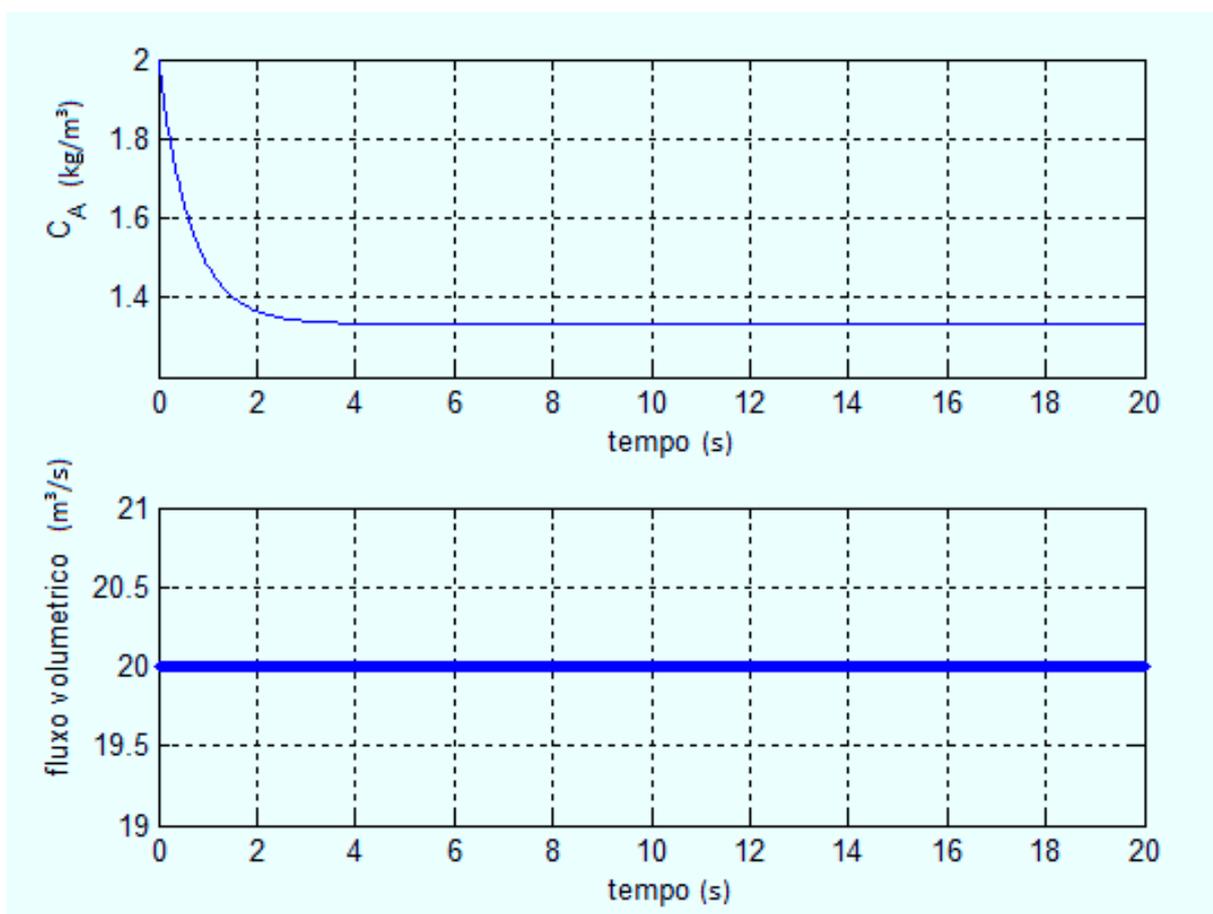


Figura 2.2 – Gráfico do fluxo volumétrico e da concentração de A para uma reação sem controle.

jada do componente A. No entanto, este cálculo funcionaria apenas para estas condições específicas. Caso o reator esquente ou esfrie, o valor do fluxo calculado não mais resultará na concentração final de A desejada, uma vez que a taxa de reação iria variar.

Logo, precisa-se implementar um controlador que efetivamente controle a concentração de saída da reação, variando apenas o fluxo volumétrico. Para atingir-se o valor de concentração desejado, utilizou-se um simples controlador proporcional, ou seja, ajustando o fluxo com um ganho proporcional à diferença entre a concentração desejada e a concentração instantânea. Obviamente, a escolha do ganho irá impactar bastante no resultado do controle. Se for muito baixo, a concentração desejada só será atingida depois de um longo tempo, e se for alto demais, o controlador pode tornar-se instável. A escolha do ganho ideal foi feita pelo método da tentativa e erro.

Foi escolhida uma concentração de saída para A igual a 0,5mol/L, o que corresponde a uma transformação de 75% da concentração inicial do componente.

O fluxo volumétrico é variado da seguinte forma:

$$v_o = v_o + k * erro \quad (2.57)$$

onde v_o é o fluxo volumétrico e k é o ganho do controlador.

Na Figura 2.3 pode-se ver o resultado desta simulação.

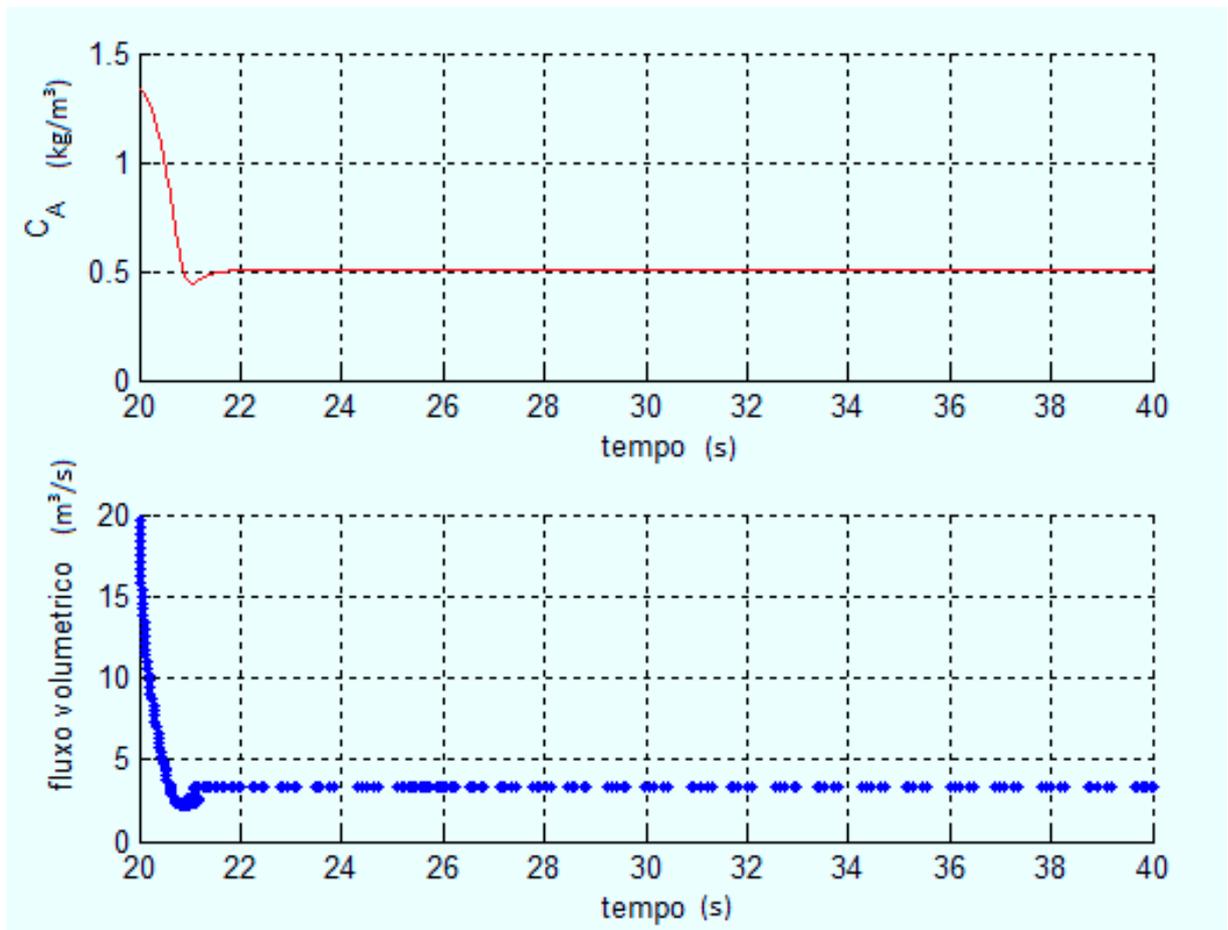


Figura 2.3 – Gráfico do fluxo volumétrico e da concentração de A para uma com controlador proporcional.

Observa-se que o controlador diminui rapidamente o fluxo de entrada, de maneira que o tempo de residência do componente aumenta, resultando numa maior quantidade de A transformado e, conseqüentemente, menor concentração deste componente.

Supondo que o sistema está sujeito a uma mudança de temperatura. Considere que o reator esfria, fazendo com que a taxa de reação caia repentinamente pela metade. A concentração de saída, claro, aumentaria, uma vez que os componentes não estão reagindo tao rápido quanto antes. O controlador, por sua vez, deve então diminuir ainda mais o fluxo de entrada para aumentar o tempo de residência. O resultado encontra-se na Figura 2.4.

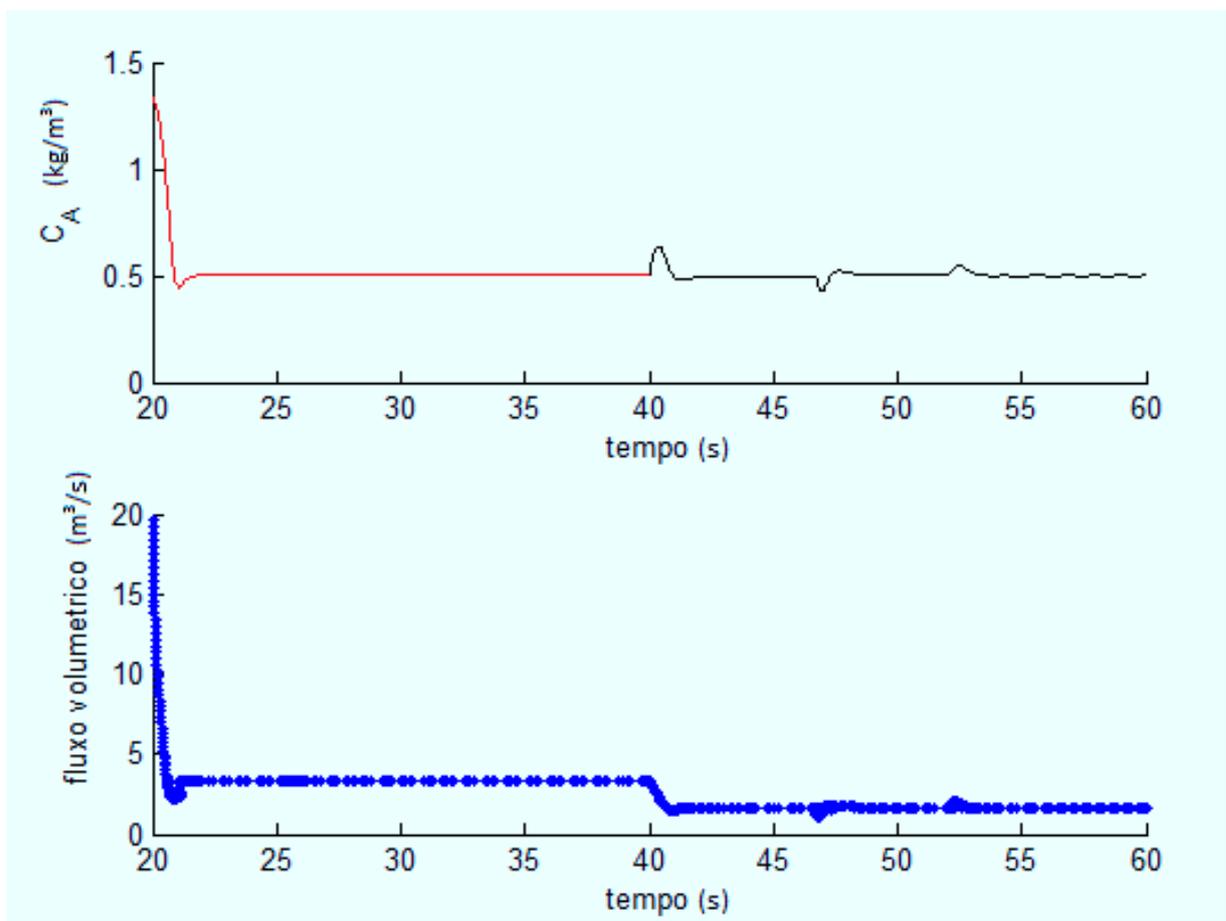


Figura 2.4 – Resposta do controlador proporcional para uma mudança na temperatura.

Como esperado, a concentração inicialmente aumenta e em seguida o controlador diminui o fluxo volumétrico. Nota-se também que o controlador conseguiu manter a concentração de saída desejada, mesmo a taxa de reação mudando devido à mudança na temperatura. Os desvios que constam no gráfico da concentração final se devem aos erros numéricos na resolução da EDO pelo *software* Matlab.

3 Dinâmica de um Trocador de Calor

Trocadores de calor são dispositivos mecânicos projetados para transferir energia térmica de um fluido para outro. Em alguns casos, uma parede sólida pode separar os fluidos e prevenir que eles misturem-se. Em outros, os fluidos estão em contato direto um com o outro. Nos trocadores de calor mais eficientes, a área de superfície da parede entre os fluidos é maximizada, enquanto que é a resistência de fluxo do fluido é diminuída o máximo possível.

Nesta seção serão analisados diferentes tipos de trocadores de calor e seus comportamentos dinâmicos. O primeiro tipo é o de casco e tubo, onde o vapor condensa dentro dos tubos e o conteúdo de um reator químico deve ser aquecido. O segundo tipo a ser analisado também é o de casco e tubo, no entanto, o vapor condensa fora dos tubos e o líquido a ser aquecido corre dentro deles. Finalmente, o último tipo de trocador a ser analisado é o trocador de calor em contracorrente.

3.1 Transferência de Calor a Partir de uma Serpentina de Aquecimento

Analisemos o tanque da Figura 3.1. Neste caso, assume-se que o calor é transferido da serpentina para o conteúdo do tanque. A análise para a operação inversa é similar.

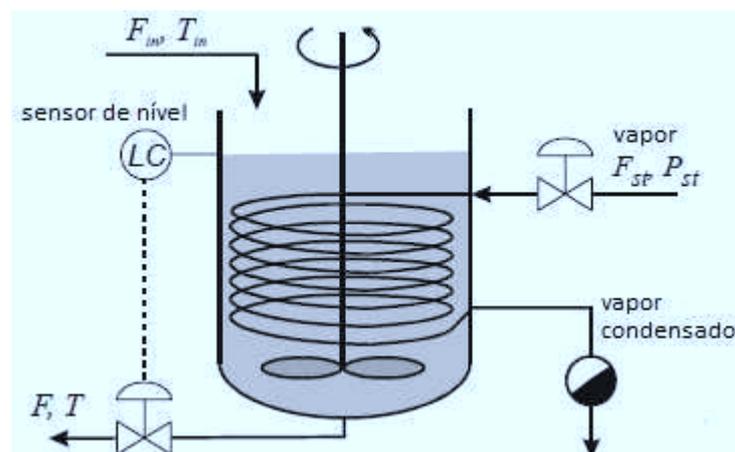


Figura 3.1 – Representação do tanque com serpentina de aquecimento

Para simplificarmos a análise devemos fazer algumas suposições:

- o tanque tem uma temperatura uniforme T .
- o volume do fluido no tanque é constante, ou seja, os fluxos de entrada e saída são iguais.
- o vapor condensa dentro da serpentina, portanto uma temperatura de condensação uniforme T_s pode ser assumida.
- o coeficiente de transferência de calor dentro e fora da serpentina é constante, ou seja, o coeficiente de transferência de calor total também é constante.
- a capacidade térmica da serpentina ($M_{\text{serpentina}}c_{p,\text{serpentina}}$) é pequena comparada à capacidade térmica do líquido e portanto, pode ser ignorada.
- a dinâmica no lado do vapor pode ser ignorada, ou seja, a temperatura do vapor reage instantaneamente à mudanças na fonte de calor.

O balanço de energia pode ser então escrito como: [4]

$$\rho V c_p \frac{dT}{dt} = F \rho c_p (T_{in} - T) + UA(T_s - T) \quad (3.1)$$

na qual o termo do lado esquerdo da igualdade é a acumulação de energia, o primeiro termo do lado direito é a energia transportada pelo fluxo do fluido e o último termo é a energia transferida pela serpentina. Utilizaremos a seguinte nomenclatura:

ρ densidade do fluido, kg/m^3

V volume do fluido no tanque, m^3

c_p calor específico do fluido, $J/kg.K$

F fluxo através do tanque, m^3/s

T_{in} temperatura de entrada do fluido, K

UA produto entre o coeficiente de transferência de calor total e a área, W/K

Normalmente, a variável de interesse é a temperatura T que afeta o fluxo F e a temperatura de entrada T_{in} . Esta relação pode ser obtida através da linearização e aplicação da transformada de Laplace na Eq. (3.1) como segue:

$$\delta T = \frac{K_1}{\tau_T s + 1} \delta T_s + \frac{K_2}{\tau_T s + 1} \delta T_{in} - \frac{K_3}{\tau_T s + 1} \delta F \quad (3.2)$$

na qual

$$\begin{aligned}\tau_T &= \frac{\rho V c_p}{\rho F_0 c_p + UA} \\ K_1 &= \frac{UA}{\rho F_0 c_p + UA} < 1 \\ K_2 &= \frac{\rho F_0 c_p}{\rho F_0 c_p + UA} < 1 \\ K_3 &= \frac{\rho c_p (T_{in0} - T_0)}{\rho F_0 c_p + UA}\end{aligned}\tag{3.3}$$

onde o índice '0' indica o valor da variável em estado permanente.

Como visto na Eq. (3.2), a temperatura irá determinar repostas de primeira ordem. A Eq. (3.3) nos faz perceber que o ganho para mudanças de temperatura, seja na temperatura de entrada ou na temperatura do vapor, é sempre menor que um.

Vale salientar que a relação entre a temperatura do tanque e a variável de entrada não será mais a mesma, caso a capacidade térmica da serpentina seja levada em conta.

Considera-se que a condução radial de calor através da parede é ideal e que a condução axial pode ser ignorada. Além disso, a temperatura da parede pode ser caracterizada por uma temperatura média T_w , o que é bastante razoável, uma vez que a condução de calor é relativamente rápida quando comparada a transferência de calor. A Eq. (3.1) pode ser modificada para:

$$\rho V c_p \frac{dT}{dt} = F \rho c_p (T_{in} - T) + \alpha_0 A_0 (T_w - T)\tag{3.4}$$

onde $\alpha_0 A_0$ é o produto entre o coeficiente de transferência de calor e a área na parte externa da serpentina, e T_w é a temperatura da parede da serpentina. Desse modo, podemos escrever o balanço de energia para a parede como:

$$M_w c_{pw} \frac{dT_w}{dt} = \alpha_i A_i (T_s - T_w) - \alpha_0 A_0 (T_w - T)\tag{3.5}$$

onde o índice 'w' significa parede.

As equações (3.4) e (3.5) formam o modelo do trocador de calor considerando-se a capacidade térmica da parede da serpentina. Aplicando a transformada de Laplace e linearizando ambas, ficamos com:

$$\begin{aligned}\delta T &= \frac{K_1}{\tau_T s + 1} \delta T_w + \frac{K_2}{\tau_T s + 1} \delta T_{in} - \frac{K_3}{\tau_T s + 1} \delta F \\ \delta T_w &= \frac{K_4}{\tau_w s + 1} \delta T_s + \frac{K_5}{\tau_w s + 1} \delta T\end{aligned}\quad (3.6)$$

na qual as constantes de tempo e os ganhos são definidos por:

$$\begin{aligned}\tau_T &= \frac{\rho V c_p}{\rho F_0 c_p + \alpha_0 A_0} & \tau_w &= \frac{M_w c_{pw}}{\alpha_i A_i + \alpha_0 A_0} \\ K_1 &= \frac{\alpha_0 A_0}{\rho F_0 c_p + \alpha_0 A_0} & K_4 &= \alpha_i A_i \alpha_i A_i + \alpha_0 A_0 \\ K_2 &= \frac{\rho F_0 c_p}{\rho F_0 c_p + \alpha_0 A_0} & K_5 &= \alpha_0 A_0 \alpha_i A_i + \alpha_0 A_0 \\ K_3 &= \frac{\rho c_p (T_{in0} - T_0)}{\rho F_0 c_p + \alpha_0 A_0}\end{aligned}\quad (3.7)$$

$$\begin{aligned}\delta T &= \frac{K_1 K_4}{(\tau_T s + 1)(\tau_w s + 1) - K_1 K_5} \delta T_s + \frac{K_2 (\tau_w s + 1)}{(\tau_T s + 1)(\tau_w s + 1) - K_1 K_5} \delta T_{in} \\ &\quad - \frac{K_3 (\tau_w s + 1)}{(\tau_T s + 1)(\tau_w s + 1) - K_1 K_5} \delta F\end{aligned}\quad (3.8)$$

Na Eq. (3.8) podemos ver que a resposta de δT em relação à temperatura do vapor δT_s é de segunda ordem.

3.2 Trocador de Calor de Casco e Tubo com Condensação de Vapor

Na Fig. 3.2 está representado um trocador de calor de casco e tubo no qual o vapor condensa na parte de fora dos tubos e o fluido está passando dentro deles.

Antes de desenvolver-se as equações do modelo, algumas suposições são feitas:

- a temperatura do vapor T_s fora do tubo é uniforme
- o fluxo do fluido através do tubo é do tipo pistão e ideal, ou seja, há um gradiente de temperatura axial e não radial
- as propriedades físicas, como densidade e calor específico, são constantes

- o coeficiente de transferência de calor α é constante
- a dinâmica do vapor pode ser ignorada, isto é, a temperatura do vapor reage instantaneamente à mudanças na fonte de vapor
- a condução radial de calor através da parede do tubo é ideal e a condução axial pode ser ignorada

Assume-se que a capacidade térmica da parede ($M_w c_w$) não pode ser ignorada em relação à capacidade térmica do líquido ($M_f c_f$). Logo, o balanço de energia para uma seção da parede em cada ponto z pode ser escrita como: [4]

$$M_w c_w \frac{\partial T_w}{\partial t} = \alpha_s A_s (T_s - T_w) - \alpha_f A_f (T_w - T) \quad (3.9)$$

na qual:

A_f área de transferência de calor por unidade de comprimento no lado do fluido, m

A_s área de transferência de calor por unidade de comprimento no lado do vapor, m

c_w calor específico da parede, $J/kg.K$

M_w massa dos tubos por unidade de comprimento, kg/m

T temperatura do fluido, K

T_w temperatura da parede, K

α_s coeficiente de transferência de calor no lado do vapor, $W/m^2.K$

α_f coeficiente de transferência de calor no lado do fluido, $W/m^2.K$

O termo do lado esquerdo da Eq. (3.9) representa a acumulação de energia, o primeiro termo do lado direito da igualdade é a transferência de calor do vapor condensado para a parede e o último termo é a transferência de calor da parede para o fluido

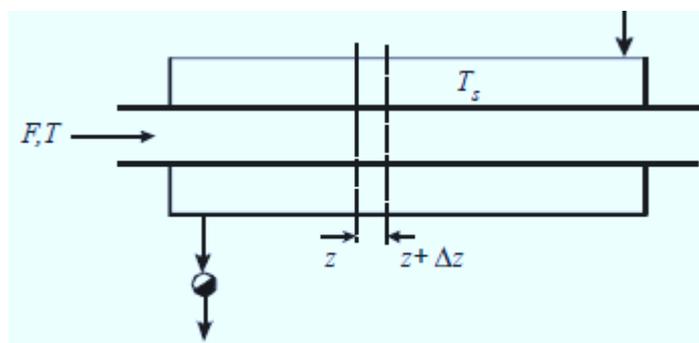


Figura 3.2 – Representação do trocador de calor de casco e tubo. Fonte [4]

a ser aquecido.

O balanço de energia para o fluido é dado por:

$$M_f c_f \frac{\partial T}{\partial t} + F c_f \frac{\partial T}{\partial z} = \alpha_f A_f (T_w - T) \quad (3.10)$$

onde:

M_f massa do líquido por unidade de comprimento, kg/m

c_f calor específico do fluido, $J/kg.K$

F fluxo de massa do fluido, kg/s

Mais uma vez, o primeiro termo representa o acúmulo de energia, o segundo representa o transporte de energia devido ao fluxo e o último termo é o fluxo de energia da parede para o fluido.

As equações (3.9) e (3.10) podem ser escritas de uma maneira mais simples se introduzirmos constantes de tempo τ e a velocidade do fluido v como segue:

$$\begin{aligned} \tau_f &= \frac{M_f c_f}{\alpha_f A_f} & \tau_{wf} &= \frac{M_w c_w}{\alpha_f A_f} \\ \tau_{ws} &= \frac{M_w c_w}{\alpha_s A_s} & v &= \frac{F}{M_f} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Desse modo, os balanços de energia resultam em:

$$\tau_{ws} \frac{\partial T_w}{\partial t} = T_s - T_w - \frac{\tau_{ws}}{\tau_{wf}} (T_w - T) \quad (3.12)$$

e

$$\tau_f \frac{\partial T}{\partial t} + v \tau_f \frac{\partial T}{\partial z} = T_w - T \quad (3.13)$$

3.3 Dinâmica de um Trocador De Calor em Contracorrente

No trocador em contracorrente da Fig. 3.3, um fluido resfria enquanto que o outro aquece.

Pode-se escrever equações equivalentes à Eq. (3.10) para cada fluido. Caso seja ignorada a capacidade térmica da parede dos tubos, seria obtido um conjunto de duas equações para resolver. As respostas das temperaturas de saída dos dois fluidos consistiriam da soma de funções exponenciais, as quais indicam modelos de ordem alta. Podemos, entretanto, discutir uma solução aproximada para o conjunto de soluções.

A aproximação é obtida escrevendo o conjunto de equações como segue:

$$\begin{aligned}
 M_{f1}c_{f1}\frac{\partial T_1}{\partial t} + F_1c_{f1}\frac{\partial T_1}{\partial z} &= UA(T_2 - T_1) \\
 M_{f2}c_{f2}\frac{\partial T_2}{\partial t} - F_2c_{f2}\frac{\partial T_2}{\partial z} &= UA(T_1 - T_2)
 \end{aligned}
 \tag{3.14}$$

onde o índice '1' é referente ao fluido dentro dos tubos e o índice '2' é referente ao fluido fora dos tubos.

Percebe-se que uma equação tem o termo $+\partial T/\partial z$ e a outra tem um termo $-\partial T/\partial z$, já que um fluido está aquecendo e o outro resfriando.

Uma aproximação adicional pode ser feita utilizando-se a média aritmética da temperatura:

$$T_i = \frac{T_{i,in} + T_{i,out}}{2} \quad i = 1, 2 \tag{3.15}$$

Substituindo a Eq. (3.15) na Eq. (3.14), a função de transferência entre a temperatura de saída de um fluido e a temperatura de entrada do outro pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta T_{2,out}}{\delta T_{1,in}} &= \frac{4\tau_1/\tau_{R1}}{(\tau_1s + 2\tau_1/\tau_{R1} + 1)(\tau_2s + 2\tau_2/\tau_{R2} + 1) - 1} \\
 \tau_1 &= M_{f1}c_{f1}/UA, \quad \tau_2 = M_{f2}c_{f2}/UA \\
 \tau_{R1} &= M_{f1}/F_1, \quad \tau_{R2} = M_{f2}/F_2
 \end{aligned}
 \tag{3.16}$$

Nota-se que τ_R é o tempo de permanência do líquido no trocador de calor. Vê-se também que a aproximação é de segunda ordem. Quando um fluido tem a sua temperatura aumentada, a temperatura de saída do outro fluido também começa a aumentar. Esta aproximação pode tornar-se mais precisa caso seja incorporada a capacidade térmica

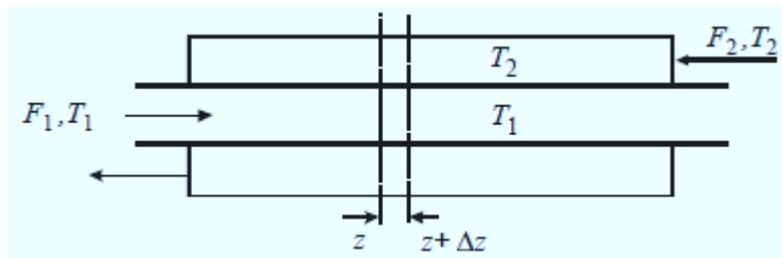


Figura 3.3 – Trocador de calor em contracorrente

mica das paredes dos tubos, em partes iguais, nas capacidades térmicas dos fluidos.

Soluções analíticas de equações diferenciais parcial são geralmente difíceis. No entanto, existem aproximações numéricas bem precisas nos dias de hoje que podem ser usadas para resolver este tipo de equação onde é preciso encontrar a resposta de uma variável de um processo que modifica uma variável de outro.

4 Conclusão e Trabalhos Futuros

Neste trabalho foram abordados os modelos matemáticos de um Reator Tanque Agitado Contínuo e de um Trocador de Calor, analisando-se suas dinâmicas e seus principais tipos. Foi ainda demonstrado como simular um controle proporcional para o reator, mostrando suas características e respostas. O ganho deste controlador foi obtido através do método de tentativa e erro.

Em trabalhos futuros também pode ser feita a simulação do controle de um CSTR no ambiente do Simulink, uma vez que esta ferramenta proporciona melhores respostas em relação à resolução da equação diferencial do sistema. Pode-se ainda implementar, para este processo, outros tipos de controlador, como PI ou PID.

Para o autor, a simulação desenvolvida cumpriu o seu principal objetivo, que era demonstrar, de forma simples, como funciona o controle de um reator tanque agitado contínuo.

Fica também proposto para trabalhos futuros, fazer a simulação e controle do trocador de calor.

5 Bibliografia

[1] Dobos, L., Jäschke, J., Abonyi, J., Skogestad, S. (2009). Dynamic Model and Control of Heat Exchanger Networks. Hungarian Journal of Industrial Chemistry, pp. 37-49.

[2] G., K. N., B., D. P., Abhijit, T. (Abril de 2012). Modeling and Simulation Study of the CSTR for Complex Reaction by Using Polymath. Research Journal of Chemical Sciences, pp. 79-85.

[3] Matlab in Chemical Engineering at CMU. (s.d.). Acesso em 5 de Maio de 2014, disponível em <http://matlab.cheme.cmu.edu>

[4] Roffel, B., Betlem, B. (2006). Process Dynamics and Control - Modeling for Control and Prediction. Chichester: John Wiley Sons Ltda.

[5] Willis, D. M. (Abril de 1999). Continuous Stirred Tank Reactor Models. New Castle, Inglaterra.

[6] Misiti, T., Ehrenberger, C., Deonarain, D., Mang, G. (6 de Setembro de 2006). Heat Exchanger Model. The Michigan Dynamics Process Open Book. Michigan.

Anexo

Código da simulação de controle proporcional de um Reator Tanque Agitado Contínuo

```
%%%%%%%%%%  
% % % % %  
% Simulação de controle proporcional de %  
% um Reator Tanque Agitado Contínuo %  
% % % % %  
%%%%%%%%%  
  
function main  
  
close all , clc , clear all  
  
V = 100; % volume do CSTR  
vo = 20; % taxa de fluxo volumétrico  
Cain = 2;  
Ca0 = 2;  
tspan = linspace(0,20,20*60); % solução para cada segundo  
  
function dCadt = cstr(t,Ca)  
    % A → B  
    ra = -0.1*Ca;  
    dCadt = Cain - Ca + ra*V/vo ;  
end  
  
[t ,Ca] = ode45(@cstr ,tspan ,Ca0);  
  
figure (1);
```

```
subplot(2,1,1)
plot(t,Ca), grid
xlabel('tempo')
ylabel('C_A')
```

```
subplot(2,1,2)
plot(tspan,vo,'b.'), grid
xlabel('tempo')
ylabel('fluxo volumetrico')
```

```
function vo_in = controller(t,Ca)
    % simples controlador proporcional que ajusta o fluxo
    % volumétrico em um valor proporcional ao desvio entre
    % a concentração desejada e a momentânea

    setpoint = 0.5; % concentração de saída desejada
    error = setpoint - Ca;

    gain = 0.5;
    vo = vo + gain*error;

    % Estas condições impedem que vo se torne zero ou negativo
    % Assume-se também que o fluxo volumétrico máximo é 40.
    if vo < 0.001;
        vo = 0.001
    elseif vo > 40
        vo = 40;
    end

    % plota-se o gráfico do fluxo volumétrico aqui para que possamos
    % ver como essa variável muda a cada iteração.
    figure(2);
    subplot(2,1,2); hold on
    plot(t,vo,'b.'), grid
```

```

        xlabel('tempo')
        ylabel('fluxo volumetrico')
        vo_in = vo;
    end

function dCadt = controlled_cstr(t,Ca)
    % A -> B
    ra = -0.1*Ca;

    % fluxo volumétrico
    vo = controller(t,Ca);
    dCadt = Cain - Ca + ra*V/vo ;
end

```

```

tspan = linspace(20,40,20*60);
init = Ca(end); % começa no fim da última integração

```

```

[t2,Ca2] = ode45(@controlled_cstr,tspan,init);
subplot(2,1,1); hold on
plot(t2,Ca2,'r-'),grid
xlabel('tempo')
ylabel('C_A')

```

```

function dCadt = controlled_cstr_temperature(t,Ca)
    % A -> B
    ra = -0.05*Ca;
    vo = controller(t,Ca);
    dCadt = Cain - Ca + ra*V/vo ;
end

```

```

tspan = linspace(40,60,20*60);
init = Ca2(end); % começa no fim da última integração

```

```

[t3,Ca3] = ode45(@controlled_cstr_temperature,tspan,init);

```

```
subplot(2,1,1); hold on, grid  
plot(t3,Ca3,'k-')
```

```
end
```