

JCEC

ISSN 2527-1075

THE JOURNAL OF
ENGINEERING AND EXACT SCIENCES

doi: 10.18540/jcecvl8iss2ppfrancoic2022-01

MODELAGEM E SIMULAÇÃO

PROBLEMAS TÍPICOS DA
ENGENHARIA QUÍMICA PARA
SIMULAÇÃO E ANÁLISE

Notas de Aulas Inovadoras

 **Ivan Carlos Franco**

Modelagem e Simulação

 **Análises**
de processos 

Modelagem e Simulação: Problemas Típicos da Engenharia Química para Simulação e Análise. NOTAS DE AULA INOVADORAS

Modeling and Simulation: Typical Chemical Engineering Problems for Simulation and Analysis. INNOVATIVE CLASS NOTES

Article Info:

Article history: Received 2021-11-20 / Accepted 2022-01-05 / Available online 2022-02-07

doi: 10.18540/jcecvl8iss2ppfrancoic2022-01



Ivan Carlos Franco

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4811-8158>

Centro Universitário FEI, Brasil

E-mail: icfranco@fei.edu.br

Resumo

Modelos matemáticos podem ser utilizados em diversas fases da engenharia, porém para que possamos utilizá-los devemos realizar a simulação computacional e analisar se as saídas dos modelos estão coerentes e dentro do que esperamos para o processo. Para realizar a simulação podemos utilizar simuladores comerciais ou implementar códigos (programar) que representam o sistema estudado em softwares matemáticos como Matlab®, SCILAB ou GNU Octave ou linguagem que possuem bibliotecas matemáticas e científicas como Python. Esta coletânea de Notas de Aulas apresenta diversos problemas típicos da Engenharia Química implementados com o auxílio do Matlab/Simulink®.

Sumário

Importância da simulação computacional	5
Problemas para simular e analisar	7
P1. Tanque com fluxo contínuo	9
P2. Estudo de ordem de reação em reator batelada	11
P3. Reação de oxidação em tanque com aeração	13
P4. Reator semi-batela com resfriamento	15
P5. Reator CSTR isotérmico com reação em série-paralelo.....	17
P6. Reator CSTR não adiabático	19
P7. Reator CSTR não-ideal.....	21
P8. Reator PFR com dispersão axial em regime transiente.....	23
P9. Reator PBR em regime permanente com queda de pressão.....	25
P10. Extração contínua multiestágios em contracorrente	27
P11. Coluna de destilação binária contínua.....	29
P12. Coluna de destilação binária em batelada.....	31
P13. Coluna de absorção em estado estacionário	33
P14. Trocador de calor de duas passagens em regime permanente	35
P15. Tanque de armazenamento com controle de temperatura utilizando vapor.....	37
P16. Controle de temperatura em um tanque de aquecimento de água	39
P17. Controle de nível em tanques em série.....	41
Referências.....	43

Capítulo 1

Importância da simulação computacional

A modelagem e simulação de processos presentes na Engenharia Química atrai a atenção de cientistas e engenheiros por muitas décadas e atualmente é um assunto de grande importância quando se trata de conhecimento de processos unitários de transporte e cinética.

O objetivo da simulação computacional é prever o comportamento de um determinado processo frente a um conjunto de condições operacionais. Ou seja, prever as saídas quando o fluxograma do processo e suas entradas são fornecidas ([Foo et al., 2017](#)).

A simulação de processos é uma disciplina que integra todas as áreas da Engenharia Química. O desenvolvimento de muitos projetos demanda estudos de simulação computacional que vão desde a análise preliminar de viabilidade e projeto conceitual até a operação. A compreensão dos processos presentes na Engenharia Química e sua dinâmica é o resultado mais importante do desenvolvimento de um modelo matemático e essa compreensão pode ser feita combinando teorias básicas de modelagem e a simulação computacional que demonstra os fenômenos de causa e efeito nos modelos ([Luyben, 1996](#); [Ingham et al., 2007](#), [Chaves et al., 2016](#)).

A simulação computacional de sistema de Engenharia Química comprovou sua importância ao conseguir trazer melhorias e eficiência nas operações além de projetar sistemas econômicos com tempo de projeto reduzido ([Volin e Ostrovskii, 2006](#)).

Podemos realizar a simulação e analisar os fenômenos de causa e efeito quer seja em um sistema representado por uma operação unitária como também realizar a simulação de uma planta química. Indiferentemente de qual situação queremos compreender o comportamento, necessitaremos de ferramentas computacionais para esta tarefa. Existem diversos simuladores aplicados a simulação de processos químicos que vão desde simuladores comerciais proprietários como por exemplo ASPEN PLUS®, HYSYS® e PRO/II® bem como simuladores comerciais de código livre como COCO (CAPE-OPEN to CAPE-OPEN), EMSO (Environment for Modeling Simulation and Optimization) e DWSIM. Além dos simuladores comerciais podemos utilizar também alguns softwares matemáticos que nos permite realizar a implementação de algoritmos para a solução do problema. Assim como os simuladores comerciais existem os softwares proprietários como o Matlab® e os de código aberto como o SCILAB e GNU Octave. Uma alternativa que vem ganhando muito espaço para simulação de processos e a implementação dos códigos em Python.

Os softwares comerciais são excelentes ferramentas para o estudo do comportamento de sistemas e, por utilizarem modelos mais complexos e realistas, muitas vezes ao realizar uma simulação o usuário não tem ideia dos modelos que estão presentes por trás da interface. Esse entendimento do modelo utilizado é muito importante na análise da resposta obtida no simulador, pois permite verificar os fenômenos que estão presentes no processo estudado. Essa questão não tira a importância que os simuladores industriais têm no atual cenário que estamos vivendo, o da transformação digital. Os modelos complexos utilizados permitem que as simulações realizadas forneçam com exatidão as respostas esperadas.

Contudo, no ponto de vista educacional, desenvolver algoritmos que resolvam o problema proposto (programar) traz um ganho enorme para o Estudante de Engenharia. Programa desenvolve algumas *soft skills* muito importante e presentes nas novas Diretrizes Curriculares Nacionais (DCN) das Engenharias: a criatividade, o pensamento lógico e a abstração. A ideia desta coletânea de atividades práticas é apresentar diversos modelos de problemas presentes na Engenharia Química e propor algumas análises para o estudo do

Modelagem e Simulação: Problemas Típicos da Engenharia Química para Simulação e Análise.
sistema. Em material complementar serão disponibilizados os modelos de blocos básicos,
desenvolvidos em Matlab/Simulink®, de todos os problemas propostos e a partir desses
modelos de blocos básicos o estudante poderá realizar todas as análises propostas.

Capítulo 2

Problemas para simular e analisar

Neste Capítulo serão apresentados 17 problemas típicos da Engenharia Química para serem simulados e analisados. A ideia não é apresentar as respostas das simulações dos problemas propostos e sim fornecer um material de auxílio para aulas práticas de simulação de processos. Para todos os problemas propostos estão disponíveis os modelos de blocos básicos implementados em Simulink® (Tabela 2.1).

Simulink® é uma interface gráfica do Matlab® utilizada para a construção dos modelos de blocos por meio de operações de clique-e-arraste do mouse que permite modelar, simular e analisar sistemas dinâmicos. O Simulink® fornece um editor gráfico, bibliotecas de blocos personalizáveis e solucionadores para modelagem e simulação de sistemas dinâmicos. A integração do Simulink® com o Matlab® permite incorporar algoritmos desenvolvidos no Matlab® e exportar os resultados da simulação para análise posterior ([MathWorks, 2021](#)).

Tabela 2.1 – Problemas propostos e respectivos modelos de blocos do Matlab/Simulink®

#	Problema	Modelo de blocos
P1	Tanque com fluxo contínuo	TFContinuo.slx
P2	Estudo de ordem de reação em reator batelada	OrdemReaBat.slx
P3	Reação de oxidação em tanque com aeração	OxiReaBat.slx
P4	Reator Semibatelada com resfriamento	ReaSemiBat.slx
P5	Reator CSTR com reação série-paralelo	ReaComplexCSTR.slx
P6	Reator CSTR não adiabático	ReaNAdiCSTR.slx
P7	Reator CSTR não-ideal	ReaNoIdeal.slx
P8	Reator PFR com dispersão axial em regime transiente	ReaPFRTrans.slx
P9	Reator PBR em regime permanente com queda de pressão	ReaPBR.slx
P10	Extração contínua multiestágios em contracorrente	ExtraMult.slx
P11	Coluna de destilação binária contínua	DesBinCon.slx
P12	Coluna de destilação binária em batelada	DesBinBat.slx
P13	Coluna de absorção em estado estacionário	ColAbsor.slx
P14	Trocador de calor de duas passagens em regime permanente	Troca2Fase.slx
P15	Tanque de armazenamento com controle de temperatura utilizando vapor	ControlTemp01.slx
P16	Controle de temperatura em um tanque de aquecimento de água	ControlTemp02.slx
P17	Controle de nível em tanques em série	ControlNivel.slx

P1. Tanque com fluxo contínuo

Descrição do Problema

Problema adaptado de [Ingham et al. \(2007\)](#). No tanque apresentado na Figura P1.1, um líquido entra a uma pressão P_1 através da válvula V-1 e deixa o tanque a uma pressão P_2 por meio da válvula V-2. O tanque opera isotermicamente e podemos ter três situações de operação: 1) aberto para a atmosfera; 2) fechado sem expansão adiabática do gás e; 3) fechado com expansão adiabática do gás.

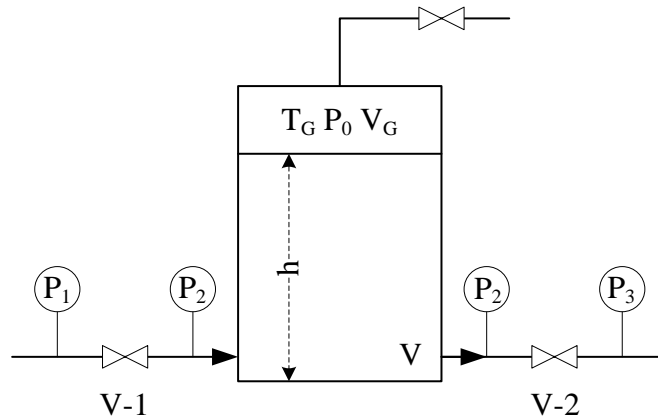


Figura P1 - Tanque operando isotermicamente em condição aberta ou fechada

O sistema pode ser representado pelas equações provenientes do balanço de massa (Eq. P1.1-P1.3).

$$A \frac{dh}{dt} = F_{1(t)} - F_{2(t)} \quad (\text{Eq. P1.1})$$

Sendo:

$$F_{1(t)} = k_1 \sqrt{P_1 - P_2(t)} \quad (\text{Eq. P1.2})$$

$$F_{2(t)} = k_2 \sqrt{P_2(t) - P_3} \quad (\text{Eq. P1.3})$$

Onde: A – área da seção transversal do tanque; F_1, F_2 – vazões de entrada e de saída do tanque; h – nível do tanque; k_1, k_2 – constantes das válvulas V-1 e V-2; P_1 – pressão a montante da válvula V-1; P_2 – pressão total no tanque; P_3 – pressão a jusante da válvula V-2.

Com o intuito de estudar a dinâmica do sistema, os parâmetros para a simulação do problema proposto são apresentados na Tabela P1.1 e podem variar de acordo com a análise requerida.

Tabela P1.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
A	Área da seção transversal do tanque	1,000	m^2
g	Aceleração da gravidade	9,810	m s^{-2}
h_{max}	Nível máximo do tanque	4,000	m
k_1	Constante hidráulica da válvula 1	0,001	$\text{m}^2 \text{kN}^{-0.5} \text{s}^{-1}$
k_2	Constante hidráulica da válvula 2	0,001	$\text{m}^2 \text{kN}^{-0.5} \text{s}^{-1}$
P_0	Pressão no tanque	101,325	kN m^{-2}
P_1	Pressão a montante da válvula 1	110,00	kN m^{-2}
P_3	Pressão a jusante da válvula 2	101,325	kN m^{-2}
T_{G0}	Temperatura inicial do gás dentro do tanque	330,000	K
ρ	Densidade do líquido	1000,000	kg m^{-3}
γ	Coefficiente de expansão adiabática	1,410	—
Condições iniciais			
$h_{(0)} = 3,00 \text{ (m)}$			

Análise do sistema

A1 Levando em considerando o tanque aberto para a atmosfera obtenha as curvas resposta: $h \times t$, $F_1 \times t$ e $F_2 \times t$ (utilizando os valores de simulação apresentados na Tabela 1.1), avalie a linearidade e o comportamento do sistema. Considere: $P_2 = P_0 + \rho gh(t)$.

A2 Levando em consideração as condições utilizadas no item A1 avalie a influência da P_1 nas variáveis h , F_1 e F_2 quando a pressão P_1 passa de $110 \text{ (kN m}^{-2}\text{)}$ para $150 \text{ (kN m}^{-2}\text{)}$ no tempo igual a 1000 s.

A3 Considerando o tanque fechado para a atmosfera, sem expansão adiabática do gás, obtenha as curvas resposta: $h \times t$, $F_1 \times t$ e $F_2 \times t$ (utilizando os valores de simulação apresentados na Tabela 3.1) e avalie o comportamento do sistema.

Sendo: $\frac{P_G V_G}{T_G} = \frac{P_{G0} V_{G0}}{T_{G0}}$, $V_G = A(h_{max} - h(t))$. e $P_2 = P_0 + \rho gh(t)$.

A4 Levando em consideração as condições utilizadas no item A3 avalie a influência da P_1 nas variáveis h , F_1 e F_2 quando a pressão P_1 passa de $110 \text{ (kN m}^{-2}\text{)}$ para $150 \text{ (kN m}^{-2}\text{)}$ no tempo igual a 1000 s.

A5 Utilizando os valores de simulação apresentados na Tabela 3.1, obtenha as curvas respostas: $h \times t$, $F_1 \times t$ e $F_2 \times t$, considerando o tanque fechado com expansão adiabática do gás e avalie o comportamento do sistema.

Sendo: $\frac{T_G}{T_{G0}} = \left(\frac{V_{G0}}{V_G}\right)^{\gamma-1}$, $\frac{P_G V_G}{T_G} = \frac{P_{G0} V_{G0}}{T_{G0}}$, $V_G = A(h_{max} - h(t))$. e $P_2 = P_0 + \rho gh(t)$.

A6 Levando em consideração as condições utilizadas no item A5 avalie a influência da P_1 nas variáveis h , F_1 e F_2 quando a pressão P_1 passa de $110 \text{ (kN m}^{-2}\text{)}$ para $150 \text{ (kN m}^{-2}\text{)}$ no tempo igual a 1000 s.

DICA: Para evitar um número negativo na raiz do cálculo das vazões F_1 e F_2 coloque o condicional $P_2 = P_1$ se $P_2 > P_1$.

Simulação

Na Figura P1.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab®/simulink®, para a simulação do problema proposto.

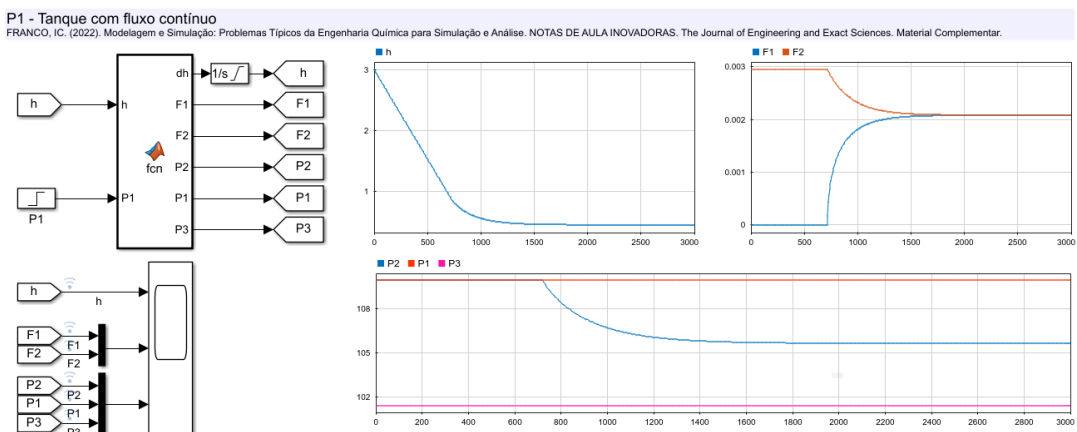


Figura P1.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1.

P2. Estudo de ordem de reação em reator batelada

Descrição do problema

Problema adaptado de [Ingham et al. \(2007\)](#). A reação elementar $A \xrightarrow{k} B$, em fase líquida, homogênea, de ordem n ocorre no reator batelada representado pela Figura P2.1.

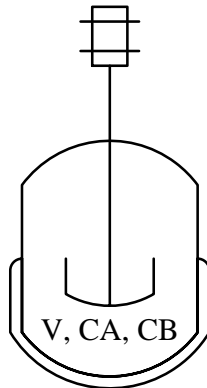


Figura P2.1 – Reator batelada com reação simples de ordem n

O modelo matemático dinâmico que representa as variações dos componentes A e B, com cinética de ordem n, é dado por:

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_{A(t)}^n \quad (\text{Eq. P2.1})$$

$$\frac{dC_B}{dt} = kC_{A(t)}^n \quad (\text{Eq. P2.2})$$

Onde: C_A – concentração do reagente A; C_B – concentração do produto B; k – constante da taxa de reação; n – ordem da reação.

Na Tabela P2.1 são apresentados os parâmetros para a simulação do problema proposto. Os valores podem mudar de acordo com a análise requerida.

Tabela P2.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
C_{A0}	concentração inicial de A	1,00	mol L^{-1}
k	constante da taxa de reação	1,30	$\text{L}^{n-1} \text{mol}^{n-1} \text{s}^{-1}$
n	ordem da reação	1,00	–
Condições iniciais			
$C_A(0) = C_{A0} \text{ (mol m}^{-3}\text{) e } C_B(0) = 0,00 \text{ (mol m}^{-3}\text{)}$			

Análises

- A1** Utilizando os valores apresentados na Tabela P2.1 obtenha as curvas respostas: $C_A \times t$, $C_B \times t$ e $X_A \times t$ e avalie o comportamento do sistema. Sendo a conversão dada por:
- $$X_{A(t)} = \frac{C_{A0} - C_A(t)}{C_{A0}}$$
- A2** A sensibilidade da reação está em função da ordem (n) da reação. Analise o comportamento de $C_{A(t)}$ e de $X_{A(t)}$ quando: $n=0,5$, $n=1$, $n=1,5$ e $n=2$.
- A3** Para uma reação de segunda ordem ($n=2$) analise o comportamento de $C_{A(t)}$ e $X_{A(t)}$ frente a variações na concentração inicial C_{A0} . (Sugestão: uma variação acima e uma variação abaixo do valor de referência, Tab. 3.1).

Dica: Para que não haja problemas numéricos devido ao fato de a concentração assumir um valor negativo (isso ocorre para reações de ordem menor que 1) coloque o condicional $C=0$ se $C<0$.

Simulação

Na Figura P2.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab®/simulink®, para a simulação do problema proposto.

P2 - Estudo da ordem de reação em reator batelada

FRANCO, IC. (2022). Modelagem e Simulação: Problemas Típicos da Engenharia Química para Simulação e Análise. NOTAS DE AULA INOVADORAS. The Journal of Engineering and Exact Sciences. Material Complementar.

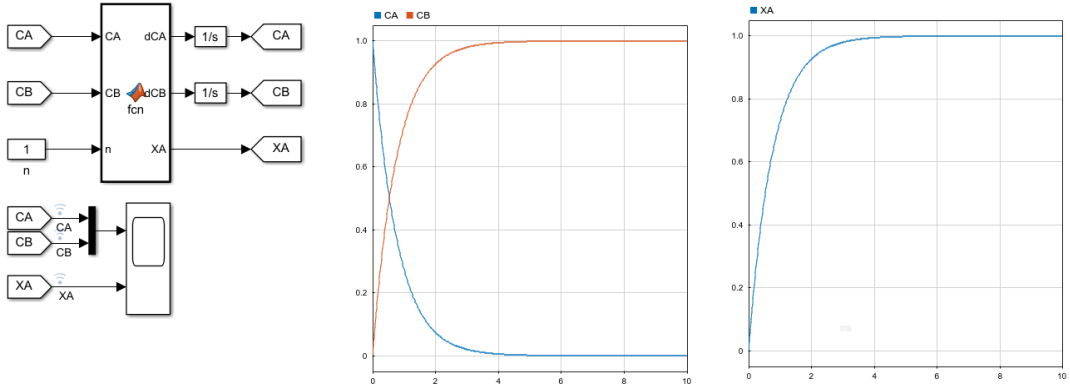


Figura P2.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1.

P3. Reação de oxidação em tanque com aeração

Descrição do problema

Problema adaptado de [Ingham et al. \(2007\)](#). Em um reator batelada aerado (Figura P3.1) ocorre a reação enzimática de segunda ordem $2A + O_2 \rightarrow P$. Considerando que o gás que deixa o reator é ar e que não há a necessidade de um balanço material para a gás na fase gasoso deve-se investigar a influência da taxa de aeração na referida reação de oxidação.

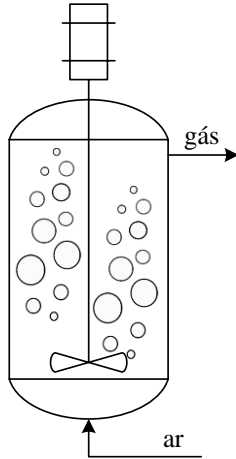


Figura P3.1 – Reator batelada de oxidação enzimática

O sistema pode ser modelado fenomenologicamente pelas Eq. P3.1 a P3.7.

$$V \frac{dC_A}{dt} = r_A V \quad (\text{Eq. P3.1})$$

$$V \frac{dC_O}{dt} = K_L a (C_O^* - C_{O(t)}) V + r_O V \quad (\text{Eq. P3.2})$$

$$V \frac{dC_P}{dt} = r_P V \quad (\text{Eq. P3.3})$$

Sendo:

$$r_A = -k C_{A(t)} C_{O(t)} \quad (\text{Eq. P3.4})$$

$$r_O = \frac{1}{2} r_A \quad (\text{Eq. P3.5})$$

$$r_P = -\frac{1}{2} r_A \quad (\text{Eq. P3.6})$$

$$K_L a = k_t N^3 G^{0,5} \quad (\text{Eq. P3.7})$$

Onde: C_A – concentração do reagente; C_O – concentração de oxigênio dissolvido; C_O^* – concentração de saturação de oxigênio; C_P – concentração do produto; G – taxa de aeração; $K_L a$ – coeficiente de transferência; k – constante da taxa de reação; k_t – constante de correlação de $K_L a$; N – taxa de agitação; r_A , r_O , r_P – taxa de consumo do reagente A, taxa de consumo de oxigênio, taxa de formação de produto; V – volume do reator.

Os parâmetros para a simulação do problema proposto são apresentados na Tabela P3.1. Lembrando que esses valores podem mudar de acordo com a análise requerida.

Tabela P3.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
C_O^*	Concentração de saturação de oxigênio	$0,250 \times 10^{-3}$	kmol m^{-3}
G	Taxa de aeração	$6,000 \times 10^4$	$\text{m}^3 \text{h}^{-1}$
k	Constante da taxa de reação	$2,000 \times 10^3$	$\text{m}^3 \text{kmol}^{-1} \text{h}^{-1}$
k_t	Constante de correlação de $K_L a$	$0,900 \times 10^{-9}$	$\text{h}^{2,5} \text{m}^{-1,5}$
N	Taxa de agitação	$5,000 \times 10^2$	h^{-1}
Condições iniciais			
$C_A(0) = 0,2$ (kmol m^{-3}), $C_O(0) = 0,0$ (kmol m^{-3}) e $C_P(0) = 0,00$ (kmol m^{-3})			

Análises

- A1** Utilizando os valores apresentados na Tabela P3.1 obtenha as curvas respostas: $C_A \times t$, $C_O \times t$, $C_P \times t$ e $r_P \times t$ e avalie o comportamento do sistema.
- A2** Avalie influência da taxa de agitação (N) no sistema (sugestão: acréscimo e decréscimo de 25% em relação ao valor original).
- A3** Avalie influência da taxa de aeração (G) no sistema (sugestão: acréscimo e decréscimo de 25% em relação ao valor original).
- A4** Avalie o comportamento do sistema caso ocorra um problema no agitador e no tempo 5 h a taxa de agitação (N) passa de 500 h^{-1} para 750 h^{-1} .

Dica: Para realizar a análise A4 utilize o bloco step do simulink configurando step time = 5; initial value = 500 e final value = 750.

Simulação

Na Figura P3.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab®/simulink®, para a simulação do problema proposto.

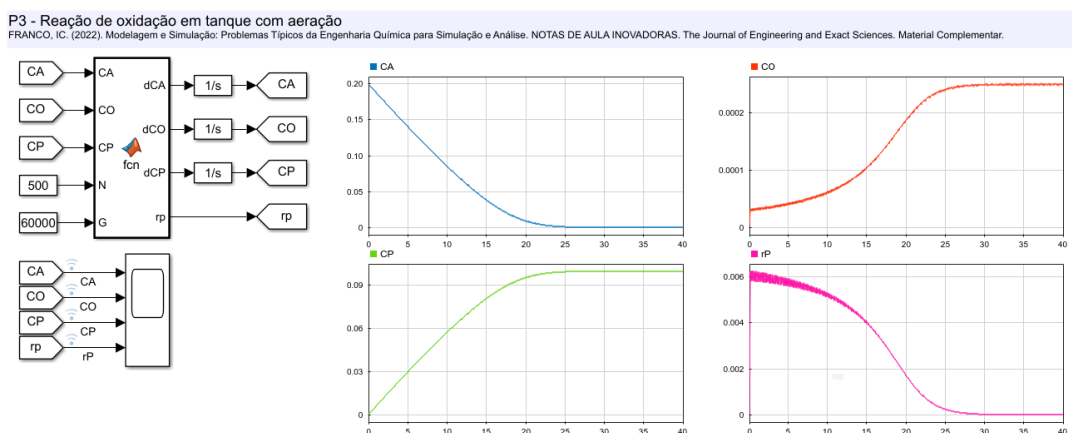


Figura P3.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1.

P4. Reator semi-batela com resfriamento

Descrição do problema

Problema adaptado de [Ingham et al. \(2007\)](#). Para a produção de hexametilenoctetramina, uma solução de amônia é adicionada continuamente a uma solução de formaldeído em um reator semi-batelada (Figura P4.1). A reação é instantânea e altamente exotérmica e ocorre da seguinte forma: $4NH_3 + 6HCHO \rightarrow N_4(CH_2)_6 + 6H_2O$.

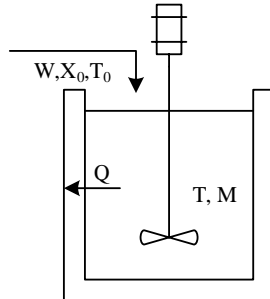


Figura P4.1 – Reator semi-batela para produção de hexametilenoctetramina

O reator pode operar com uma massa máxima de $M_{\max}=10000$ kg, ou seja, ao atingir M_{\max} a vazão de entrada deve ser desligada. A fim de avaliar o efeito térmico no reator, o sistema pode ser representado pelas seguintes equações:

$$\frac{dM}{dt} = W \quad (\text{Eq. P4.1})$$

$$M_{(t)}C_p \frac{dT_R}{dt} = WC_p(T_i - T_{R(t)}) + Wx_0(-\Delta H) - Q \quad (\text{Eq. P4.2})$$

Sendo:

$$Q = UA(T_{R(t)} - T_c) \quad (\text{Eq. P4.3})$$

Onde: A – área de troca térmica; C_p – calor específico; M – massa no reator; T_c – temperatura do fluido refrigerante; T_i – temperatura na alimentação; T_R – temperatura do reator; Q – calor trocado; U – coeficiente global de transferência de calor; W – vazão mássica na alimentação; x_0 – fração mássica de amônia na alimentação; ΔH – calor de reação.

Na Tabela P4.1, são apresentados parâmetros para a simulação do problema proposto. Lembrando que esses valores podem mudar dependendo da análise que se deseja realizar.

Tabela P4.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
A	Área de troca térmica	2,00	m ²
C_p	Calor específico	1,00	kcal kg ⁻¹ °C ⁻¹
T_c	Temperatura do fluido refrigerante	25,00	°C
T_i	Temperatura na alimentação	25,00	°C
U	Coefficiente global de transferência de calor	415,00	kcal m ⁻² °min ⁻¹ C ⁻¹
W	Vazão mássica na alimentação	140,00	kg min ⁻¹
x_0	Fração mássica de amônia na alimentação	0,25	—
$-\Delta H$	Entalpia de reação	1100,00	kcal kg ⁻¹
Condições iniciais			
$M(0)=1000,00$ (kg) e $T_R(0)=25,00$ (°C)			

Análises

- A1 Utilizando os valores apresentados na Tabela P4.1 obtenha as curvas respostas: M × t, $T_R \times t$ e Q × t e avalie o comportamento dinâmico do sistema.
- A2 Avalie a influência da área de troca térmica (A) nas variáveis $T_{R(t)}$ e $Q(t)$.
- A3 Avalie a influência da temperatura na alimentação (T_i) nas variáveis $T_{R(t)}$ e $Q(t)$.
- A4 Avalie a influência da composição da solução de amônia da alimentação (x_0) nas variáveis $T_{R(t)}$ e $Q(t)$.
- A5 Avalie a influência da temperatura do fluido refrigerante (T_c) nas variáveis $T_{R(t)}$ e $Q(t)$.

A6 Avalie a influência da vazão mássica (W) nas variáveis $M(t)$, $T_R(t)$ e $Q(t)$.

Dica: Para limitar a massa dentro do reator coloque o condicional $W=0$ se $M>10000$.

Simulação

Na Figura P4.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab®/simulink®, para a simulação do problema proposto.

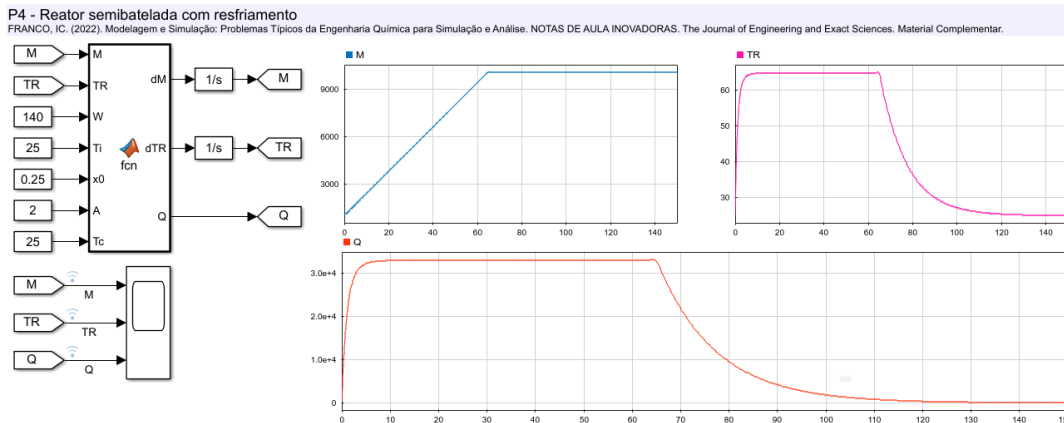
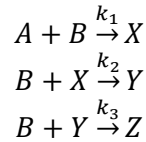


Figura P4.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1.

P5. Reator CSTR isotérmico com reação em série-paralelo

Descrição do problema

Problema adaptado de [Ingham et al. \(2007\)](#). O complexo de reações a seguir ocorre em um reator CSTR que opera isotermicamente (Figura P5.1).



Na reação o produto de interesse é o componente Z e os componentes X e Y são subprodutos.

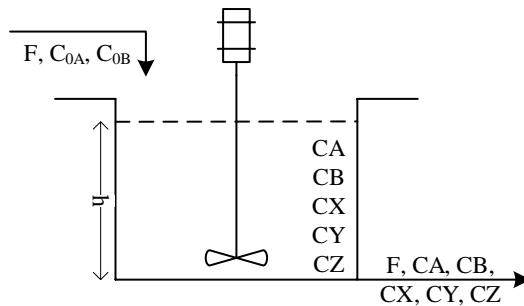


Figura P5.1 – Reator CSTR isotérmico com reações em série-paralelo

O sistema, levando em consideração reações elementares, pode ser representado pelas seguintes equações:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{\tau} (C_{A0} - C_A(t)) - k_1 C_A(t) C_B(t) \quad (\text{Eq. P5.1})$$

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{1}{\tau} (C_{B0} - C_B(t)) - k_1 C_A(t) C_B(t) - k_2 C_B(t) C_X(t) - k_3 C_B(t) C_Y(t) \quad (\text{Eq. P5.2})$$

$$\frac{dC_X}{dt} = \frac{1}{\tau} (C_{X0} - C_X(t)) + k_1 C_A(t) C_B(t) - k_2 C_B(t) C_X(t) \quad (\text{Eq. P5.3})$$

$$\frac{dC_Y}{dt} = \frac{1}{\tau} (C_{Y0} - C_Y(t)) + k_2 C_B(t) C_X(t) - k_3 C_B(t) C_Y(t) \quad (\text{Eq. P5.4})$$

$$\frac{dC_Z}{dt} = \frac{1}{\tau} (C_{Z0} - C_Z(t)) + k_3 C_B(t) C_Y(t) \quad (\text{Eq. P5.5})$$

Onde: C_i – concentração do componente ($i=A, B, X, Y$ e Z); C_{i0} – concentração inicial do componente i ; k_j – constante da taxa de reação ($j=1, \dots, 3$), τ – tempo de residência.

Os parâmetros para a simulação do problema proposto são apresentados na Tabela P5.1 e podem mudar de acordo com a análise requerida.

Tabela P5.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
C_{A0}	Concentração de A na alimentação	0,4000	kmol m^{-3}
C_{B0}	Concentração de B na alimentação	0,6000	kmol m^{-3}
C_{X0}	Concentração de X na alimentação	0,0000	kmol m^{-3}
C_{Y0}	Concentração de Y na alimentação	0,0000	kmol m^{-3}
C_{Z0}	Concentração de Z na alimentação	0,0000	kmol m^{-3}
k_1	Constante da taxa de reação 1	0,0005	$\text{m}^3 \text{kmol}^{-1} \text{s}^{-1}$
k_2	Constante da taxa de reação 2	0,0500	$\text{m}^3 \text{kmol}^{-1} \text{s}^{-1}$
k_3	Constante da taxa de reação 3	0,0200	$\text{m}^3 \text{kmol}^{-1} \text{s}^{-1}$
τ	Tempo de residência	5000,0000	s
Condições iniciais			
$C_A(0) = C_{A0}$ (kmol m^{-3}), $C_B(0) = C_{B0}$ (kmol m^{-3}), $C_X(0) = C_Y(0) = C_Z(0) = 0,00$ (kmol m^{-3})			

Análises

- A1 Utilizando a Tabela P5.1 obtenha as curvas respostas: $C_A \times t$, $C_B \times t$, $C_X \times t$, $C_Y \times t$ e $C_Z \times t$ e avalie o comportamento dinâmico do sistema.
- A2 Avalie a influência das concentrações de alimentação do componente A (C_{A0}) e do componente B (C_{B0}) no comportamento das variáveis C_A , C_B e C_Z .
- A3 Avalie a influência do tempo de residência (τ) no comportamento das variáveis C_A , C_B e C_Z .

Simulação

Na Figura P5.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab®/simulink®, para a simulação do problema proposto.

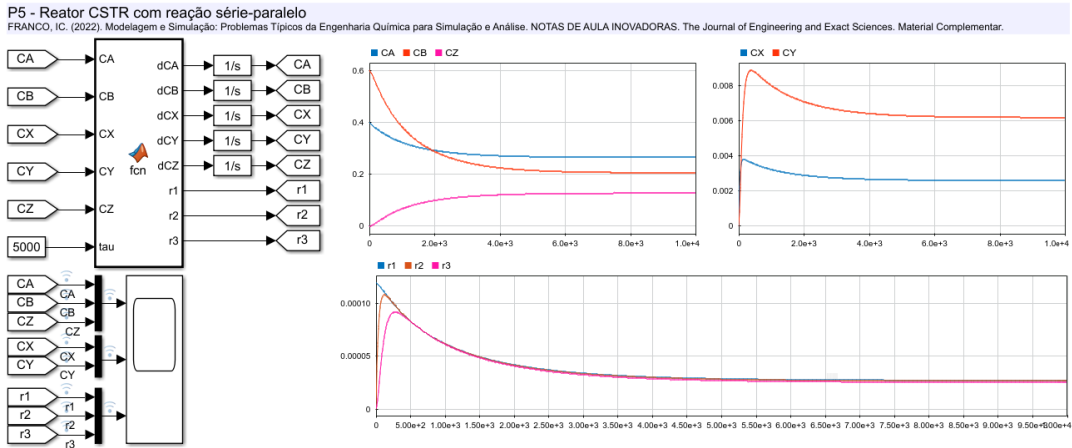


Figura P5.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1.

P6. Reator CSTR não adiabático

Descrição do problema

Problema adaptado de [Bequette \(1998\)](#). Considere um reator CSRT com jaqueta de resfriamento (Figura P6.1) operando de forma não-adiabática onde ocorre a reação exotérmica de primeira ordem $A \rightarrow B$.

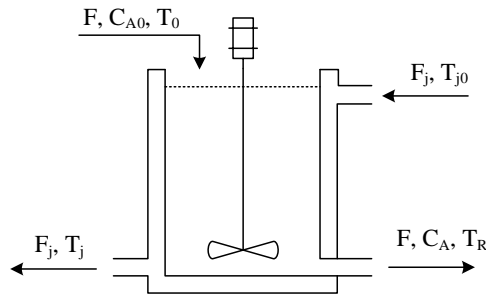


Figura P6.1 – Reator CSTR com jaqueta de resfriamento

A dinâmica do sistema pode ser representada pelos balanços de massa e energia, Eq. P6.1 e Eq. P6.2, respectivamente, a taxa de reação (Eq. P6.3 e P6.4) e o calor removido (Eq. P6.5).

$$V \frac{dC_A}{dt} = FC_{A0} - FC_{A(t)} - r_{A(t)}V \quad (\text{Eq. P6.1})$$

$$V\rho C_p \frac{dT_R}{dt} = F\rho C_p(T_0 - T_{R(t)}) - r_{A(t)}(-\Delta H)V - Q_{rem(t)} \quad (\text{Eq. P6.2})$$

Sendo:

$$r_{A(t)} = k_{(T_R)}C_{A(t)} \quad (\text{Eq. P6.3})$$

$$k_{(T_R)} = k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT_{R(t)}}\right) \quad (\text{Eq. P6.4})$$

$$Q_{rem(t)} = UA(T_{R(t)} - T_j) \quad (\text{Eq. P6.5})$$

Onde: A – área de troca térmica; C_A – concentração do reagente A; C_{A0} – concentração do reagente A na corrente de alimentação; C_p – capacidade calorífica; E_a – energia de ativação; F – vazão volumétrica; k_0 – fator pré-exponencial da taxa de reação; Q_{rem} – calor removido; R – constante universal; T_R – temperatura do reator; T_0 – temperatura na corrente de alimentação do reator; T_j – temperatura na jaqueta de resfriamento; U – coeficiente global de troca térmica; V – volume do reator; ΔH – entalpia de reação; ρ – densidade.

Os parâmetros para a simulação do problema proposto são apresentados na Tabela P6.1 e podem mudar de acordo com a análise requerida.

Tabela P6.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros		Valor	Unidades
Símbolo	Definição		
C_{A0}	Concentração do reagente A na alimentação	10,000	kmol m^{-3}
E_a	Energia de ativação	11843,000	kcal kmol^{-1}
$\tau=V/F$	Tempo de residência	1,000	h
k_0	Fator pré-exponencial da taxa de reação	14825,000	s^{-1}
R	Constante universal	1,987	$\text{kcal kmol}^{-1} \text{K}^{-1}$
T_0	Temperatura da corrente de alimentação	298,000	K
T_j	Temperatura do fluido refrigerante	298,000	K
UA/V	Coefficiente de troca térmica por volume	250,000	$\text{kcal m}^{-3} \text{h}^{-1} \text{K}^{-1}$
ΔH	Entalpia de reação	5215,000	kcal kmol^{-1}
ρC_p	Produto da densidade pela capacidade calorífica	500,000	$\text{kcal m}^{-3} \text{K}^{-1}$
Condições iniciais			
$C_A(0)=C_{A0}$ (kmol m^{-3}) e $T_R(0)=T_0$ (K)			

Análises

A1 Utilizando a Tabela 9.1 obtenha as curvas respostas: $C_A \times t$ e $T_R \times t$ e avalie o comportamento dinâmico do sistema.

- A2** Avalie o comportamento do sistema caso após 4 h ocorrer a interrupção na vazão de água de resfriamento na jaqueta, ou seja, $Q_{rem(t)}=0$.
- A3** Avalie a influência da concentração da corrente de alimentação, C_{A0} , nas variáveis $C_A(t)$ e $T_R(t)$.
- A4** Avalie a influência da temperatura da corrente de alimentação, T_0 , nas variáveis $C_A(t)$ e $T_R(t)$.
- A5** Avalie a influência da temperatura do fluido refrigerante, T_j , nas variáveis $C_A(t)$ e $T_R(t)$.
- Dica:** Para realizar a interrupção da vazão de água de resfriamento coloque o condicional $Q_{rem}=0$ se $t>4$ senão $Q_{rem}=UA(T_R(t)-T_j)$.

Simulação

Na Figura P6.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab®/simulink®, para a simulação do problema proposto.

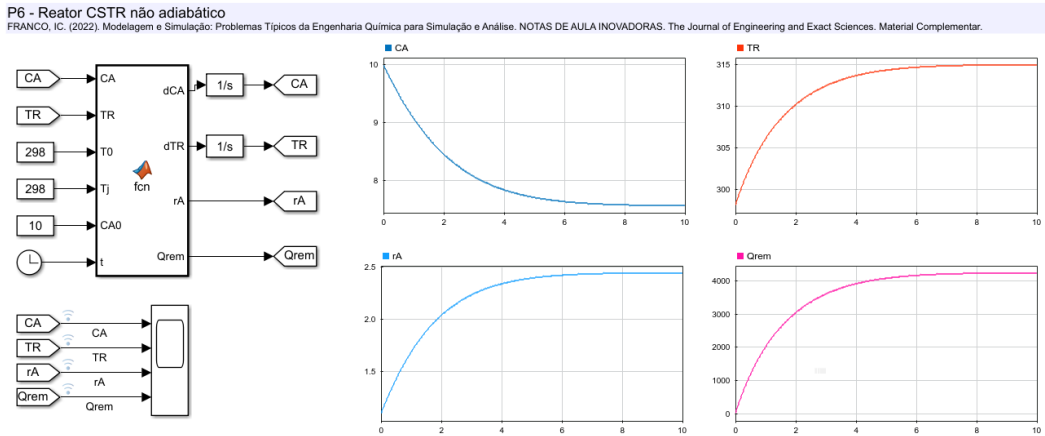


Figura P6.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1.

P7. Reator CSTR não-ideal

Descrição do problema

Problema adaptado de [Ingham et al. \(2007\)](#). A Figura P7.1 representa um reator de mistura não-ideal onde ocorre a reação de primeira ordem $A \rightarrow B$. Quando trabalhamos com CSTR ideal desconsideramos as variações espaciais que podem ocorrer na temperatura e na concentração. Contudo, em um CSTR não-ideal (real) surgem zonas mortas ou pontos onde a mistura reacional está sobre efeito de uma agitação maior. Esses fatores fazem com que o reagente deixe o reator sem reagir ([Fogler, 2006](#); [Foment et al., 2011](#)). O volume do reator é representado pelos volumes V_1 (perfeitamente misturado) e V_2 (volume morto).

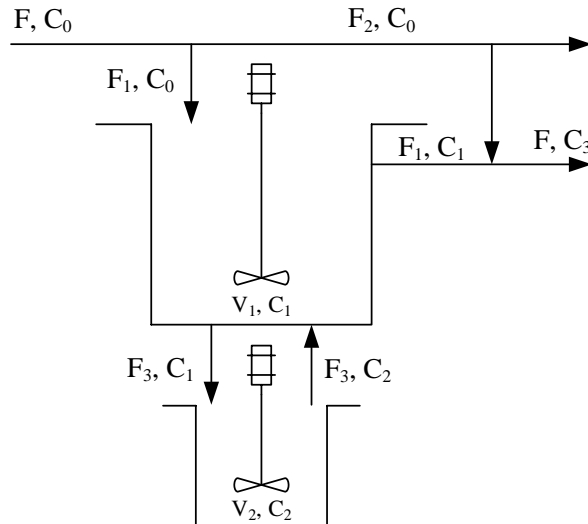


Figura P7.1 – Reator de mistura não-ideal com volume morto

O sistema apresentado pode ser descrito pelas Eq. P7.1 a P7.10.

$$V_1 \frac{dC_1}{dt} = F_1(C_0 - C_1(t)) + F_3(C_2(t) - C_1(t)) - kC_1(t)V_1 \quad (\text{Eq. P7.1})$$

$$V_2 \frac{dC_2}{dt} = F_3(C_1(t) - C_2(t)) - kC_2(t)V_2 \quad (\text{Eq. P7.2})$$

$$V \frac{dC_4}{dt} = F(C_0 - C_4(t)) - kC_4(t)V \quad (\text{Eq. P7.3})$$

Sendo:

$$V_1 = (1 - f_2)V \quad (\text{Eq. P7.4})$$

$$V_2 = f_2V \quad (\text{Eq. P7.5})$$

$$F_1 = (1 - f_1)F \quad (\text{Eq. P7.6})$$

$$F_2 = f_1F \quad (\text{Eq. P7.7})$$

$$F_3 = \alpha F \quad (\text{Eq. P7.8})$$

$$FC_3 = F_1C_1(t) + F_2C_0 \quad (\text{Eq. P7.9})$$

$$X_{i(t)} = \frac{C_0 - C_{i(t)}}{C_0} \quad (\text{Eq. P7.10})$$

Onde: C_0 – concentração na alimentação; C_1 – concentração na zona ativa; C_2 – concentração na zona morta; C_3 – concentração na saída do reator; C_4 – concentração no tanque ideal; F – vazão total; f_1 – fração de derivação do fluxo para o tanque ideal; F_2 – derivação do fluxo; f_2 – fração do volume morto; F_3 – vazão de mudança da zona morta; k – constante da taxa de reação; V – volume total do reator; V_1 – volume da parte ideal do reator; V_2 – volume morto do reator; α – fração do fluxo da zona morta; X_i – conversão do componente A no ponto i ($i=1, \dots, 4$)

Na Tabela P7.1 são apresentados os parâmetros para a simulação do problema proposto podendo mudar de acordo com a análise requerida.

Tabela P7.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
C0	Concentração na alimentação	1,00	kmol m ⁻³
F	Vazão total	1,00	m ³ min ⁻¹
f ₁	Fração da derivação do fluxo para o tanque ideal	0,50	–
f ₂	Fração do volume morto	0,25	–
k	Constante da taxa de reação	0,10	min ⁻¹
V	Volume do reator	10,00	m ³
α	Fração do fluxo na zona morta	5,00	–
Condições iniciais			
C ₁ (0)= C ₂ (0)=C ₄ (0)=0,00 (kmol m ⁻³)			

Análises

- A1** Utilizando a Tabela P7.1 obtenha as curvas respostas: C₁ × t, C₂ × t, C₃ × t e C₄ × t e avalie o comportamento dinâmico do sistema.
- A2** Avalie o efeito da fração de derivação de fluxo (f₁) nas conversões X_{3(t)} e X_{4(t)}.
- A3** Avalie o efeito da fração de derivação de fluxo (f₂) nas conversões X_{3(t)} e X_{4(t)}.

Simulação

Na Figura P7.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab[®]/simulink[®], para a simulação do problema proposto.

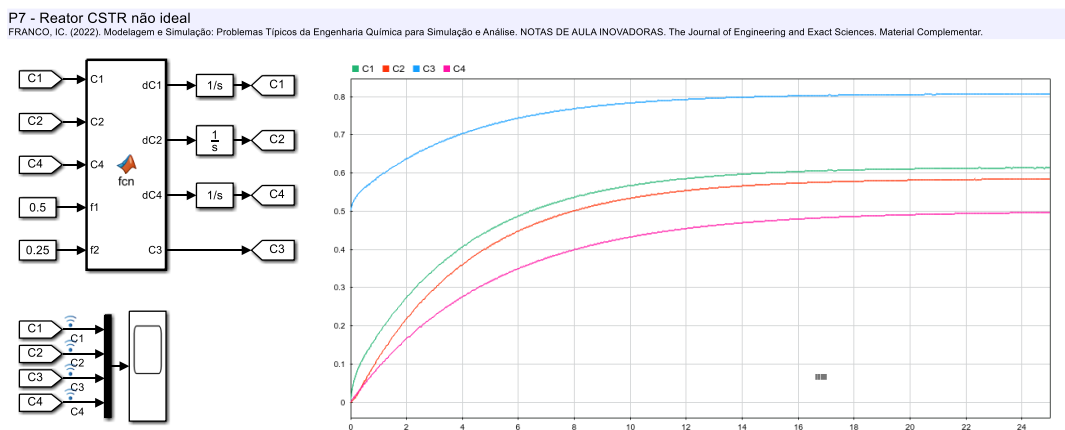


Figura P7.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1.

P8. Reator PFR com dispersão axial em regime transiente

Descrição do problema

Problema adaptado de [Ingham et al. \(2007\)](#). Um reator tubular, isotérmico e não ideal onde ocorre a reação de primeira ordem em fase líquida $A \rightarrow B$ é apresentado na Figura 7.1.

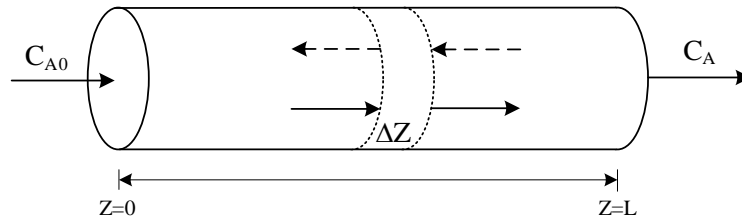


Figura 7.1 – Reator tubular isotérmico

O modelo de dispersão axial em regime permanente que representa o comportamento do sistema é dado por:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -u \frac{\partial C_A}{\partial z} + D \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} + r_A \quad (\text{Eq. P7.1})$$

$$-r_A = kC_{A(t,z)} \quad (\text{Eq. P7.2})$$

O problema envolve duas variáveis independentes o tempo (t) e o comprimento do reator z. O comprimento do reator pode ser resolvido aplicando o método das diferenças finitas com N segmentos de comprimento Δz . Assim para um segmento n teremos o modelo discretizado representado pelas Eq. P7.3 e P7.4.

$$\frac{dC_{A,n}}{dt} = u \left(\frac{C_{A,n-1} - C_{A,n}}{\Delta z} \right) + D \left(\frac{C_{A,n-1} - 2C_{A,n} + C_{A,n+1}}{\Delta z^2} \right) - kC_{A,n} \quad (\text{Eq. P7.3})$$

$$\Delta z = \frac{L}{n} \quad (\text{Eq. P7.4})$$

Onde: C_{A0} – concentração inicial de A no segmento $n=1$; C_n – concentração no segmento de n; D – difusividade mássica axial efetiva; k – constante da taxa de reação; L – comprimento total do reator; n – número de segmentos, u – velocidade do fluxo; Δz – comprimento do segmento.

Os parâmetros para a simulação do problema proposto são apresentados na Tabela P7.1 e podem mudar de acordo com a análise requerida.

Tabela P7.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
C_{A0}	Concentração inicial de A no segmento $n=0$	1,00	mol m^{-3}
D	Difusividade axial efetiva	1,00	$\text{m}^2 \text{h}^{-1}$
k	Constante da taxa de reação	0,03	h^{-1}
L	Comprimento total do reator	10,00	m
n	Número de segmentos de comprimento Δz	5,00	—
u	Velocidade do fluxo	1,00	m h^{-1}
Condições iniciais			
$C_{A,1 \dots n}(0) = 0,00 = (\text{kmol m}^{-3})$			

Análises

- A1** Utilizando a Tabela P7.1 obtenha as curvas respostas: $C_{A(z)} \times t$ e $C_{A(\infty)} \times z$ e avalie o comportamento dinâmico do sistema.
- A2** Sendo $X_{A(\infty,z)} = \frac{C_{A0} - C_{A(\infty,z)}}{C_{A0}}$ obtenha a curva resposta $X_{A(\infty)} \times z$.
- A3** Avalie a influência da concentração inicial, C_{A0} , nas variáveis $C_{A(t,z)}$ e $X_{A(\infty,z)}$
- A4** Avalie a influência da velocidade do fluxo, u, nas variáveis $C_{A(t,z)}$ e $X_{A(\infty,z)}$

Simulação

Na Figura P8.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab[®]/simulink[®], para a simulação do problema proposto.

P8 - Reator PFR com dispersão axial em regime transiente

FRANCO, IC. (2022). Modelagem e Simulação: Problemas Típicos da Engenharia Química para Simulação e Análise. NOTAS DE AULA INOVADORAS. The Journal of Engineering and Exact Sciences. Material Complementar.

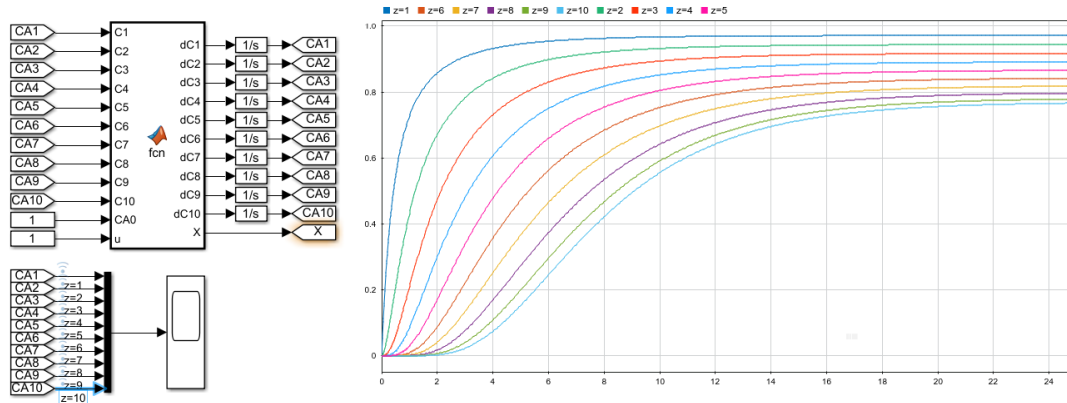


Figura P8.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1.

P9. Reator PBR em regime permanente com queda de pressão

Descrição do problema

Problema adaptado de [Fogler \(2006\)](#). A hidrodesmetilação do tolueno ocorre no reator de leito fixo operando à 640 °C conforme a reação: $C_6H_5CH_3 + H_2 \rightarrow C_6H_6 + CH_4$ (Figura P9.1). A alimentação consiste em 30 % de tolueno, 45 % de hidrogênio e 25 % de inertes.

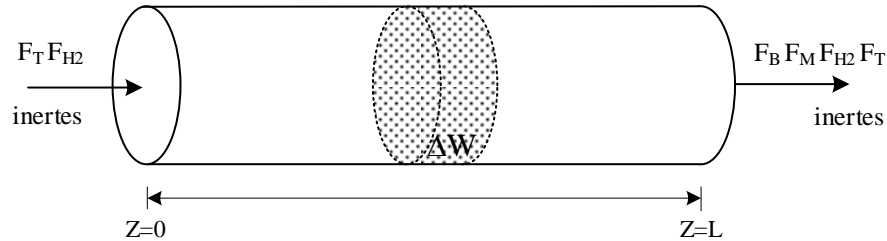


Figura P9.1 – Reator tubular de leito fixo

O sistema pode ser representado pelo seguinte sistema de equações:

$$\frac{dX}{dW} = -\frac{r'_T}{F_{T0}} \quad (\text{Eq. P9.1})$$

Sendo:

$$r'_T = -\frac{kP_{H_2(W)}P_{T(W)}}{1+K_B P_{B(W)}+K_T P_{T(W)}} \quad (\text{Eq. P9.2})$$

$$P_{T(W)} = P_{T0}(1 - X(W))y(W) \quad (\text{Eq. P9.3})$$

$$P_{H_2(W)} = (\Theta_{H_2} - X(W))y(W) \quad (\text{Eq. P9.4})$$

$$P_{B(W)} = P_{T0}X(W)y(W) \quad (\text{Eq. P9.5})$$

$$y(W) = (1 - \alpha W)^{0,5} \quad (\text{Eq. P9.6})$$

Onde: F_{T0} – vazão molar de alimentação de tolueno; k – constante da taxa de reação; K_B – constante de equilíbrio (benzeno); K_T – constante de equilíbrio (tolueno); P_B – pressão parcial do beneno; P_{H_2} – pressão parcial do hidrogênio; P_T – pressão parcial do tolueno; r'_T – taxa de reação; W – massa de catalisador; X – conversão; y – queda de pressão; α – parâmetro da queda de pressão; Θ_{H_2} – parâmetro de relação de concentração.

Para a simulação do problema proposto são apresentados os parâmetros na Tabela P9.1 e podem mudar de acordo com a análise requerida.

Tabela P9.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
F_{T0}	Vazão molar de tolueno na alimentação	$5,000 \times 10^1$	mol min^{-1}
k	Constante da taxa de reação	$8,700 \times 10^{-4}$	$\text{mol atm}^{-2} \text{kg}_{\text{cat}}^{-1} \text{min}^{-1}$
K_B	Constante de equilíbrio (benzeno)	$1,390 \times 10^0$	atm^{-1}
K_T	Constante de equilíbrio (tolueno)	$1,038 \times 10^0$	atm^{-1}
P_0	Pressão inicial	$4,000 \times 10^1$	atm
W	Massa total de catalisador	$1,000 \times 10^4$	kg_{cat}
α	Parâmetro da queda de pressão	$9,800 \times 10^{-5}$	kg_{cat}
Θ_{H_2}	Parâmetro de relação de concentração	$1,500 \times 10^0$	–
Condições iniciais			
	$X(0)=0$		

Análises

- A1** Utilizando a Tabela P9.1 obtenha as curvas respostas: $X \times W$, $y \times W$, $P_B \times W$, $P_{H_2} \times W$, $P_T \times W$ e $r'_T \times W$ e avalie o comportamento do sistema.
- A2** Avalie o efeito da pressão inicial (P_0) nas pressões parciais (P_B , P_{H_2} e P_T) e na conversão (X).

A3 Caso não houvesse a queda de pressão (ou seja, $y=1$) qual seria o efeito nas pressões parciais (PB, PH2 e PT) e na conversão (X)?

A4 O parâmetro de relação de concentração (Θ_{H2}) é dado por $\Theta_{H2} = \frac{\% H2(alimentação)}{\% Tol(alimentação)}$.
Avalie o efeito desta relação nas pressões parciais (PB, PH2 e PT) e na conversão (X).

Simulação

Na Figura P9.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab®/simulink®, para a simulação do problema proposto.

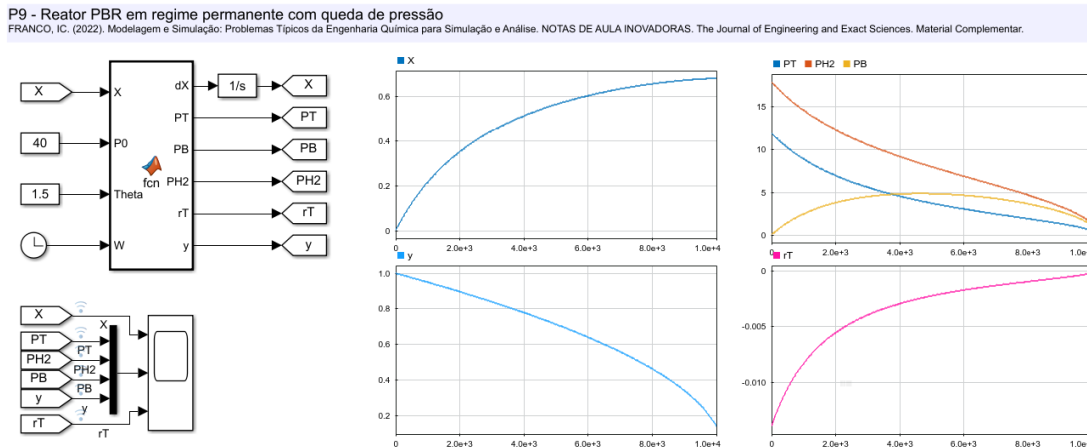


Figura P9.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1.

P10. Extração contínua multiestágios em contracorrente

Descrição do problema

Problema adaptado de [Ingham et al. \(2007\)](#). Um sistema de extração líquido-líquido de multiestágio onde a fase x é extraída do sistema pela fase y em contracorrente é apresentado na Figura P10.1

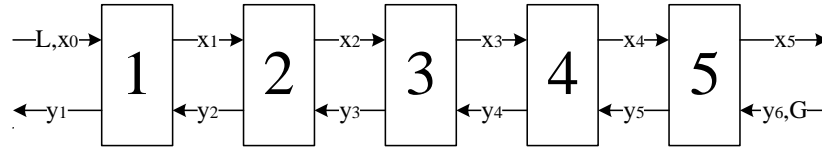


Figura 10.1 – Sistema de extração multiestágio

O sistema pode ser modelado como sendo um sistema cascata em equilíbrio e é representado pelo balanço de massa (Eq. P10.1 e P10.2)

$$V_x \frac{dx_n}{dt} = L(x_{n-1} - x_n) - Q_n \quad (\text{Eq. P10.1})$$

$$V_y \frac{dy_n}{dt} = G(y_{n+1} - y_n) + Q_n \quad (\text{Eq. P10.2})$$

A taxa de transferência de massa e a concentração de equilíbrio são dadas pelas Eq. P10.3 e Eq. P10.4, respectivamente.

$$Q_n = k(x_n - x_n^*) \quad (\text{Eq. P10.3})$$

$$x_n^* = \frac{y_n}{K_{eq}} \quad (\text{Eq. P10.4})$$

Onde: G – vazão volumétrica da fase y; k – constante de transferência de massa; L – vazão volumétrica da fase x; K_{eq} – constante de equilíbrio de fase; n – número de estágios; V_L – volume da fase x; V_G – volume da fase y; x_n – concentração da fase x no estágio n; x_n^* – concentração de equilíbrio no estágio n; y_n – concentração da fase y no estágio n.

Na Tabela P10.1 são apresentados os parâmetros para a simulação do problema proposto sendo que esses valores podem mudar de acordo com a análise requerida.

Tabela P10.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
G	Vazão volumétrica da fase y	3,00	m ³ h ⁻¹
k	Constante de transferência de massa	50,00	m ³ h ⁻¹
L	Vazão volumétrica da fase x	1,00	m ³ h ⁻¹
K_{eq}	Constante de equilíbrio	0,80	—
n	Número de estágios	5,00	—
V_x	Volume da fase x	2,00	m ³
V_y	Volume da fase y	2,00	m ³
x_0	Concentração da fase x na entrada do estágio 1	1,00	kg m ⁻³
y_6	Concentração da fase y na entrada do estágio 5	0,00	kg m ⁻³
Condições iniciais			
$x_{1,\dots,5} = 0,00$ (kg m ⁻³) e $y_{1,\dots,5} = 0,00$ (kg m ⁻³)			

Análises

- A1** Obtenha as curvas respostas: $x_{n(t)} \times t$ e $y_{n(t)} \times t$, utilizando os valores da Tabela 13.1, e avalie o comportamento dinâmico do sistema.
- A2** Sabendo que a fração de extração pode ser representada por $X_n = \frac{x_{n-1} - x_n}{x_n}$ obtenha a curva de fração de extração em função dos estágios.
- A3** Avalie a influência da vazão da fase x (L) na concentração da fase x nos estágios 1 e 5.
- A4** Avalie a influência da vazão da fase y (G) na concentração da fase x nos estágios 1 e 5.

Simulação

Na Figura P10.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab®/simulink®, para a simulação do problema proposto.

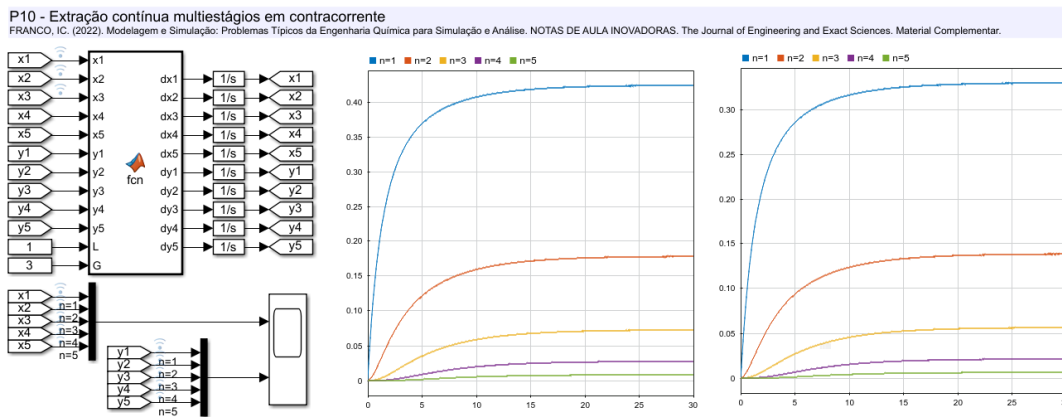


Figura P10.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1.

P11. Coluna de destilação binária contínua

Descrição do problema

Problema adaptado de [Ingham et al. \(2007\)](#). A coluna de destilação representada na Figura P10.1 foi abordada por [Luyben \(1996\)](#). A coluna opera de forma contínua e possui 8 pratos, um condensador e um refeedor e a alimentação é realizada no prato 5.

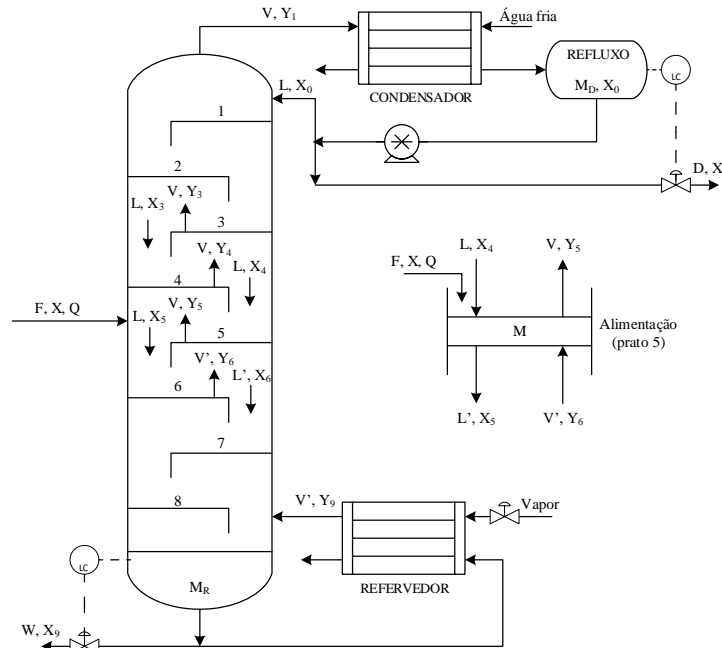


Figura 14.1 – Coluna de destilação binária contínua

A coluna é alimentada com líquido saturado e pode ser modelada realizando um balanço de massa no condensador (Eq. P11.1), na alimentação (Eq. P11.2), nos pratos acima da alimentação (Eq. P11.3), nos pratos abaixo da alimentação (Eq. P11.4) e no refeedor (Eq. P11.5) e o equilíbrio líquido vapor é dado pela Eq. P11.6.

$$M_0 \frac{dx_0}{dt} = Vy_1(t) - (L + D)x_0(t) \quad (\text{Eq. P11.1})$$

$$M_p \frac{dx_f}{dt} = Lx_{f-1}(t) - L'x_f(t) + V'y_{f+1}(t) - Vy_f(t) + Fx \quad (\text{Eq. P11.2})$$

$$M_p \frac{dx_n}{dt} = L(x_{n-1}(t) - x_n(t)) + V(y_{n+1}(t) - y_n(t)) \quad (\text{Eq. P11.3})$$

$$M_p \frac{dx_n}{dt} = L'(x_{n-1}(t) - x_n(t)) + V'(y_{n+1}(t) - y_n(t)) \quad (\text{Eq. P11.4})$$

$$M_R \frac{dx_R}{dt} = L'x_N(t) - Wx_W(t) - V'y_R(t) \quad (\text{Eq. P11.5})$$

$$y_n(t) = \frac{\alpha x_n(t)}{1 + (\alpha - 1)x_n(t)} \quad (\text{Eq. P11.6})$$

Sendo:

$$L = RD \quad (\text{Eq. P11.7})$$

$$V = D(R + 1) \quad (\text{Eq. P11.8})$$

$$L' = F + qF \quad (\text{Eq. P11.9})$$

$$V = V' - (1 - q)F \quad (\text{Eq. P11.10})$$

$$W = L' - V' \quad (\text{Eq. P11.11})$$

Onde: D – taxa de destilado; F – vazão de alimentação; L – vazão de líquido; M₀ – material retido no tambor de destilado; M_p – material retido nos pratos; M_R – material retido no refeedor; q – qualidade térmica da alimentação; R – taxa de refluxo; V – vazão de vapor; x – composição na alimentação; x₀ – fração molar no condensador; x_n – fração molar no prato n (n=1, ..., 8); x_R – fração molar no refeedor (R=9), α = volatilidade relativa.

OBS: Para líquido saturado na alimentação tem-se $q=1$ e N é o prato de fundo da coluna.

Na Tabela P11.1, são apresentados os parâmetros para a simulação do problema proposto. Lembrando que esses valores podem mudar dependendo da análise que se deseja realizar.

Tabela P11.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
F	Vazão de alimentação da coluna	1000,00	kmol h ⁻¹
M ₀	Material retido no tambor de destilado	200,00	kmol
M _P	Material retido nos pratos	50,00	kmol
M _R	Material retido no refervedor	400,00	kmol
q	Qualidade térmica da alimentação	1,00	–
R	Taxa de refluxo	2,25	–
t _s	Tempo de simulação	10,00	h
V'	Vazão de vapor no refervedor	1575,00	kmol h ⁻¹
x	Composição na alimentação	0,50	–
α	Volatilidade relativa	2,46	–

Condições iniciais	
$x_0, \dots, x_9(0)$	= 0,00

Análises

- A1 Utilizando a Tabela P11.1 obtenha as curvas respostas: $x_n \times t$, avalie o comportamento dinâmico do sistema e determine o tempo para que a coluna entre em regime permanente.
- A2 Avalie a influência da vazão de alimentação, F, na composição de líquido no prato de topo, no prato de fundo e no prato de alimentação.
- A3 Avalie a influência da composição de alimentação, x, na composição de líquido no prato de topo, no prato de fundo e no prato de alimentação.
- A4 Avalie a influência da razão de refluxo, R, na composição de líquido no prato de topo, no prato de fundo e no prato de alimentação.

Simulação

Na Figura P11.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab®/simulink®, para a simulação do problema proposto.

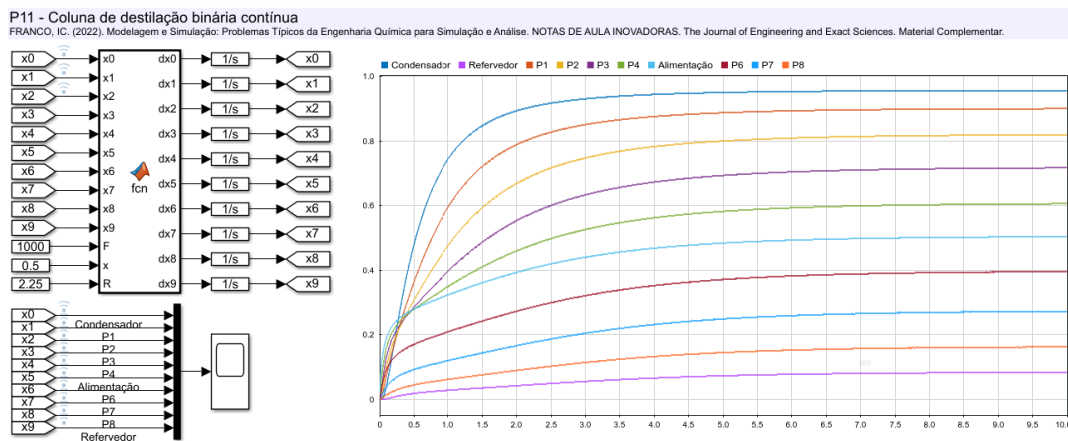


Figura P11.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1.

P12. Coluna de destilação binária em batelada

Descrição do problema

Problema adaptado de [Ingham et al. \(2007\)](#). Uma destilação batelada é um processo dinâmico complexo, com exceção da geometria tudo varia com o tempo. A coluna composta por 7 pratos, refeedor e condensador, representada na Figura P12.1, foi abordada por [Luyben \(1996\)](#).

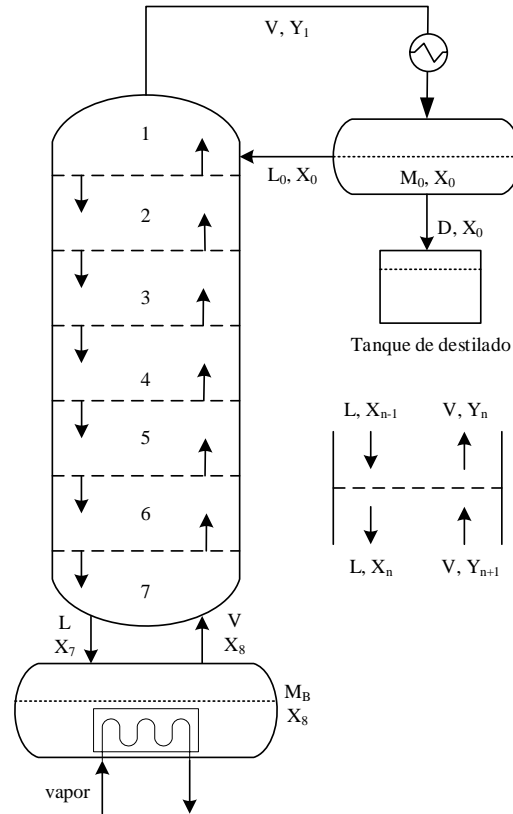


Figura P12.1 – Coluna de destilação binária em batelada

A coluna pode ser modelada realizando um balanço de massa para o componente mais volátil aplicado nos pratos n (Eq. P12.1), no refeedor (Eq. P12.2 e P12.3) e no condensador e tanque de refluxo (Eq. P12.4). A taxa de destilado, a vazão de líquido e o equilíbrio são dados pelas Eq. P12.5, P12.6 e P12.7, respectivamente.

$$M \frac{dx_n}{dt} = L(x_{n-1}(t) - x_n(t)) + V(y_{n+1}(t) - y_n(t)) \quad (\text{Eq. P12.1})$$

$$\frac{dM_B}{dt} = L - V \quad (\text{Eq. P12.2})$$

$$M_B(t) \frac{dx_B}{dt} = Lx_7(t) - Vy_8(t) \quad (\text{Eq. P12.3})$$

$$M_0 \frac{dx_0}{dt} = Vy_1(t) - (L + D)x_0(t) \quad (\text{Eq. P12.4})$$

$$D = \frac{V}{R+1} \quad (\text{Eq. P12.5})$$

$$L = V - D \quad (\text{Eq. P12.6})$$

$$y_n(t) = \frac{\alpha x_n(t)}{1 + (\alpha - 1)x_n(t)} \quad (\text{Eq. P12.7})$$

Onde: D – taxa de destilado; L – vazão de líquido; M – material retido dentro da coluna; M_B – material retido no refeedor; M_0 – material retido no condensador; R – taxa de refluxo; V – vazão de vapor; x – fração molar da fase líquida; y – fração molar da fase vapor; α – volatilidade relativa.

Na Tabela P12.1, são apresentados os parâmetros para a simulação do problema proposto. Lembrando que esses valores podem mudar dependendo da análise que se deseja realizar.

Tabela P12.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
M	Material retido dentro da coluna	20,00	kmol h ⁻¹
M ₀	Material retido dentro do tanque de refluxo	100,00	kmol h ⁻¹
V	Vazão de vapor	10,00	kmol h ⁻¹
α	Volatilidade relativa	3,50	—
Condições iniciais			
$x_0(0)=0,9, x_1,\dots,7(0)=0,0, x_8(0)=0,8, M_B(0)=2500$ (kmol h ⁻¹)			

Análises

- A1 Utilizando a Tabela P12.1 obtenha as curvas respostas: $x_n \times t$, avalie o comportamento dinâmico do sistema. Comece levando em consideração que a coluna opere com refluxo total ($R=1,0 \times 10^{10}$) e aos poucos vá mudando a taxa de refluxo. Utilize um condicional para reduzir a taxa de refluxo para 0.25 em $t=75$ e para 1, 5 e 50 em tempos após 75.
- A2 Utilizando a condição de refuxo total ($R=1,0 \times 10^{10}$) determine o estado estacionário do sistema e analise a influência da taxa de refluxo nas frações molares da fase líquida (x_n)

Simulação

Na Figura P12.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab®/simulink®, para a simulação do problema proposto.

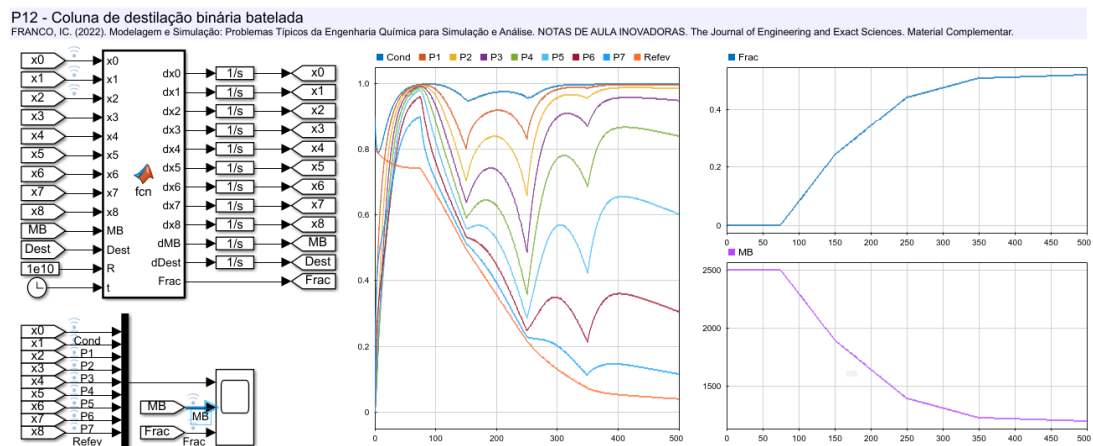


Figura P12.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1. Com $R=0,25$ em $t \geq 75$, $R=1,0$ em $t \geq 150$, $R=5,0$ em $t \geq 250$ e $R=50$ em $t \geq 350$

P13. Coluna de absorção em estado estacionário

Descrição do problema

Problema adaptado de [Ingham et al. \(2007\)](#). A Figura P13.1 representa um sistema de recuperação de amônia em água estudada por [Backhurst e Harker \(1990\)](#). A amônia é recuperada de uma mistura de gás ar-amônia por absorção em água, usando uma coluna empacotada em contracorrente. A absorção é acompanhada pela evolução de calor que provoca um aumento na temperatura da água e, portanto, uma mudança no equilíbrio.

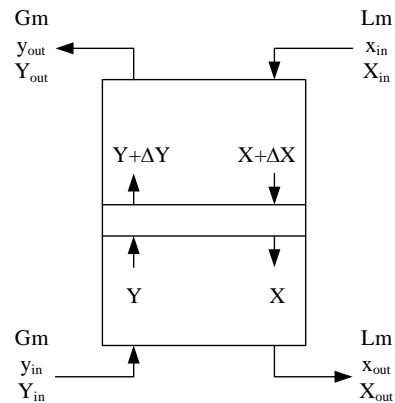


Figura P13.1 – Coluna de destilação binária em batelada

O sistema é modelado com dispersão axial e pode ser representado pelas equações que representam a variação molar da fase gasosa (Eq. P13.1), a variação molar da fase líquida (Eq. P13.2), a variação da temperatura (Eq. P13.3) ao longo da coluna de absorção e a relação de equilíbrio (Eq. P13.4)

$$\frac{dY}{dZ} = \frac{K_G a (y - y_e)}{L_m} \quad (\text{Eq. P13.1})$$

$$\frac{dX}{dZ} = \frac{K_G a (y - y_e)}{G_m} \quad (\text{Eq. P13.2})$$

$$\frac{dT}{dZ} = \frac{K_G a (y - y_e) \Delta H_{abs}}{L_m C_p} \quad (\text{Eq. P13.3})$$

$$y_e = \frac{K(T)x}{P_T} \quad (\text{Eq. P13.4})$$

Sendo:

$$K(T) = a + bT_{(Z)} + cT_{(Z)}^2 \quad (\text{Eq. P13.5})$$

$$x = \frac{X_{(Z)}}{1 + X_{(Z)}} \quad (\text{Eq. P13.6})$$

$$y = \frac{Y_{(Z)}}{1 + Y_{(Z)}} \quad (\text{Eq. P13.7})$$

Onde: C_p – calor específico; G_m – fluxo molar de ar; K – constante de equilíbrio; $K_G a$ – coeficiente global de transferência de massa; L_m – fluxo molar de água pura; P_T – pressão do sistema; T – temperatura do líquido; X – taxa molar da fase líquida; x – fração molar da fase líquida; Y – taxa molar da fase gasosa; y – fração molar na fase gasosa; y_e – relação de equilíbrio; ΔH_{abs} – entalpia de absorção

Os valores para a simulação do problema proposto são apresentados na Tabela P13.1. Lembrando que esses valores podem mudar dependendo da análise que se deseja realizar.

Tabela P13.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
a	Parâmetro da constante de equilíbrio	3,0100	–
b	Parâmetro da constante de equilíbrio	-0,1227	–
c	Parâmetro da constante de equilíbrio	0,0059	–
C_p	Calor específico	75,312	$\text{kJ kmol}^{-1} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$
G_m	Fluxo molar de ar	0,0530	$\text{kmol m}^{-1} \text{ s}^{-1}$

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
K_{Ga}	Coeficiente global de transferência de massa	0,1130	$\text{kmol m}^{-3} \text{s}^{-1}$
L_m	Fluxo molar de água pura	0,1080	$\text{kmol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
P_T	Pressão do sistema	101,3300	kN m^{-2}
Z	Comprimento da absorvedora	10,0000	m
ΔH_{abs}	Entalpia de absorção	36200,0000	kJ kmol^{-1}
Condições iniciais			
$Y(0)=0,00263 \text{ kmol}_{\text{NH}_3} \text{ kmol}_{\text{ar}}^{-1}$, $X(0)=0,0 \text{ kmol}_{\text{NH}_3} \text{ kmol}_{\text{H}_2\text{O}}^{-1}$, $T(0)=20,00 \text{ }^\circ\text{C}$			

Análises

- A1** Utilizando a Tabela P13.1 obtenha as curvas respostas: $Y \times Z$, $X \times Z$ e $T \times Z$ avalie o comportamento do sistema.
- A2** Avalie o efeito da variação do fluxo molar de água (L_m) na taxa molar da fase gasosa (Y), na taxa molar da fase líquida (X) e na temperatura (T).
- A3** Avalie o efeito da variação do fluxo molar de ar (G_m) na taxa molar da fase gasosa (Y), na taxa molar da fase líquida (X) e na temperatura (T).

Simulação

Na Figura P13.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab[®]/simulink[®], para a simulação do problema proposto.

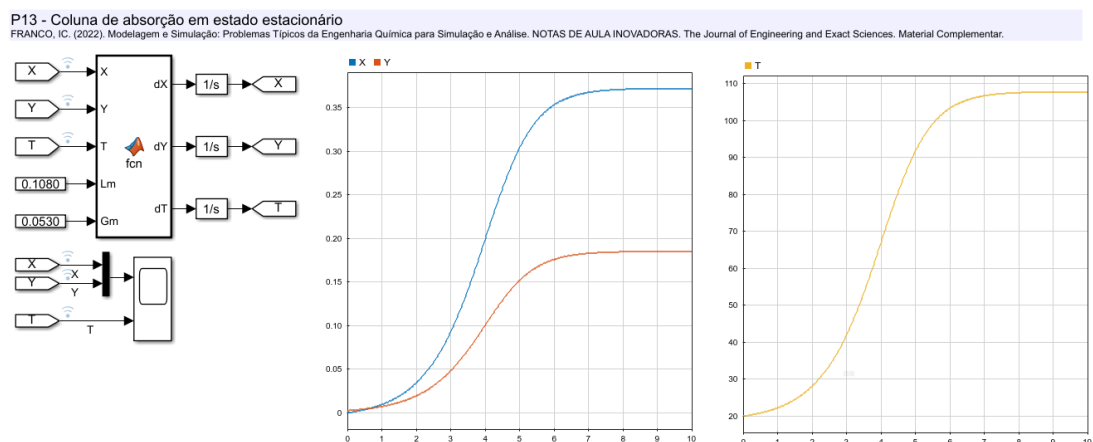


Figura P13.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1. Onde $Z=0$ é o topo da absorvedora e $Z=10$ é o fundo da absorvedora

P14. Trocador de calor de duas passagens em regime permanente

Descrição do problema

Problema adaptado de [Backhurst et al. \(1974\)](#), [Walas \(1991\)](#) e [Ingham et al. \(2007\)](#). Uma corrente de água para fins alimentícios passa por um trocador de calor de duas passagens (Figura P14.1) para elevar sua temperatura. Na primeira passagem temos os fluidos quentes e frios em na mesma direção (concorrentes) e na segunda passagem temos o fluido frio em contracorrente com o fluido quente fazendo com que metade da área de troca térmica está em fluxo concorrente e outra metade em fluxo contracorrente.

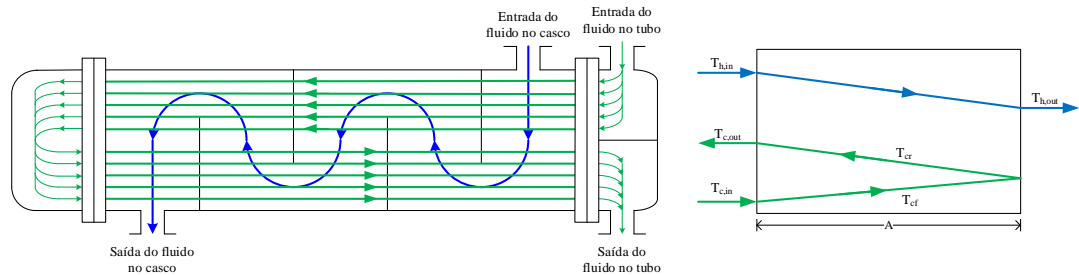


Figura P14.1 – Trocador de calor de duas passagens

O modelo de parâmetros distribuídos que representa o sistema é dado pelas Eq. P14.1 a P14.3.

$$W_h C_{ph} \frac{dT_h}{dL} = -\frac{U(T_h(t) - T_{cf}(t))}{2} - \frac{U(T_h(t) - T_{cr}(t))}{2} \quad (\text{Eq. 17.1})$$

$$W_c C_{pc} \frac{dT_{cf}}{dL} = \frac{U(T_h(t) - T_{cf}(t))}{2} \quad (\text{Eq. 17.2})$$

$$W_c C_{pc} \frac{dT_{cr}}{dL} = -\frac{U(T_h(t) - T_{cr}(t))}{2} \quad (\text{Eq. 17.3})$$

Onde: C_p – calor específico da água; T_{cf} – temperatura do fluido frio concorrente; T_{cr} – temperatura do fluido frio contracorrente; T_h – temperatura do fluido quente no casco do trocador; U – coeficiente global de troca térmica; W_c – vazão mássica de fluido frio; W_h – vazão mássica de fluido quente.

Na Tabela P14.1, são apresentados os parâmetros para a simulação do problema proposto. Lembrando que esses valores podem mudar dependendo da análise que se deseja realizar.

Tabela 14.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
C_p	Capacidade calorífica da água	4,18	$\text{kJ kg}^{-1} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$
U	Coefficiente global de troca térmica	1,50	$\text{kJ h}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$
W_h	Vazão mássica de fluido quente	8,50	kg s^{-1}
W_c	Vazão mássica de fluido frio	4,17	kg s^{-1}
Condições iniciais			
$T_h(0)=80,00 \text{ (} ^\circ\text{C)}, T_{cf}(0)=50,00 \text{ (} ^\circ\text{C)} \text{ e } T_{cr}(0)=70,00 \text{ (} ^\circ\text{C)}$			

Análises

- A1** Utilizando a Tabela P14.1 obtenha as curvas respostas: $T_h \times A$, $T_{cf} \times A$ e $T_{cr} \times A$ e avalie o comportamento do sistema e determine o comprimento do trocador de calor.
- A2** Avalie a influência da vazão mássica de fluido quente, W_h , no comportamento do sistema.
- A3** Avalie a influência da vazão mássica de fluido quente, W_c , no comportamento do sistema.
- A4** Avalie a influência da variação da temperatura do fluido quente na entrada do trocador $T_h(0)$, no comportamento do sistema.

A5 Levando em consideração que a capacidade calorífica da água varie com a temperatura da seguinte forma: $C_p(T) = a + bT + cT^2 + dT^3$ (kcal kg⁻¹ °C⁻¹), avalie o comportamento do sistema frente a esta consideração. Sendo: $a=3,913 \times 10^{-1}$, $b=3,459 \times 10^{-2}$, $c=1,045 \times 10^{-4}$, $d=1,048 \times 10^{-7}$.

DICA: Para a determinação do comprimento do trocador coloque o condicional: STOP se $T_{cf} > T_{cr}$.

Simulação

Na Figura P14.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab[®]/simulink[®], para a simulação do problema proposto.

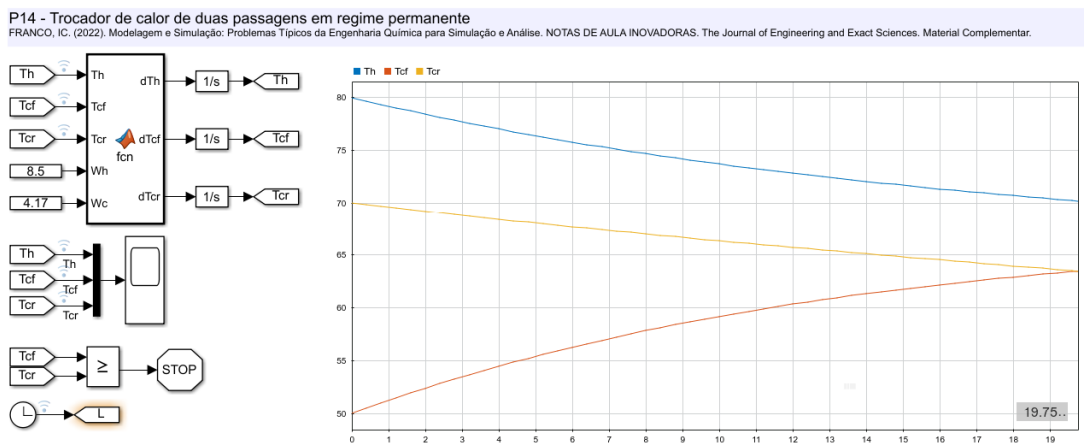


Figura P14.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1.

P15. Tanque de armazenamento com controle de temperatura utilizando vapor

Descrição do problema

Problema adaptado de [Ingham et al. \(2007\)](#). No tanque de armazenamento representado na Figura P15.1 é realizado o controle de temperatura de um determinado líquido que posteriormente será utilizado em outra fase de um processo. A temperatura do líquido é medida por um sensor de temperatura (termopar) que está acoplado a um poço de temperatura (bainha) ocasionando assim um atraso na medição e o agente de controle é vapor que passa por uma serpentina.

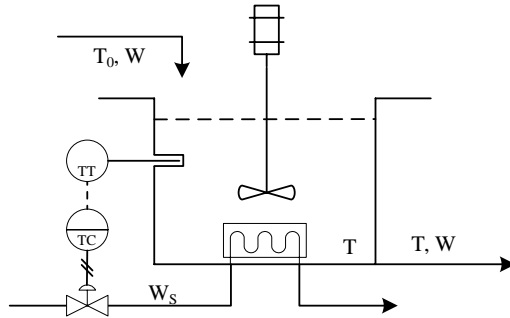


Figura P15.1 – Sistema de controle feedback utilizando vapor como agente de controle

Levando em consideração que o nível do tanque seja constante, a dinâmica do sistema pode ser representada pelas equações resultantes do balanço de energia no tanque (Eq. P15.1) no sensor (Eq. P15.2) e na bainha (Eq. P15.3). Para o controle de temperatura será utilizado um controlador Proporcional-Integral (PI) e a temperatura do tanque será controlada por meio da manipulação direta da vazão de vapor, assim temos a variável controlada sendo a temperatura do tanque (T) e variável manipulada sendo a vazão de vapor (W_s), representada pelas Eq. P15.4 e P15.5.

$$mC_p \frac{dT}{dt} = WC_p(T_0 - T(t)) + W_s \lambda \quad (\text{Eq. P15.1})$$

$$\frac{dT_S}{st} = \frac{T_B(t) - T_S(t)}{\tau_S} \quad (\text{Eq. P15.2})$$

$$\frac{dT_B}{dt} = \frac{T(t) - T_B(t)}{\tau_B} \quad (\text{Eq. P15.3})$$

Sendo:

$$W_s = W_{S0} + K_C e(t) + \frac{K_C}{\tau_i} \int e(t) dt \quad (\text{Eq. P15.4})$$

$$e(t) = T_{SP} - T_S(t) \quad (\text{Eq. P15.5})$$

Onde: C_p – calor específico do fluido; K_C – ganho proporcional; m – massa no tanque; T_B – temperatura da bainha; T_S – temperatura do sensor; T – temperatura do fluido dentro do tanque; T_{SP} – valor de referência (set-point); W – vazão mássica na alimentação; W_s – vazão mássica de vapor; W_{S0} – vazão mássica de vapor no estado estacionário; λ – calor latente de vaporização; τ_B – constante de tempo da bainha; τ_i – constante de tempo integral; τ_S – constante de tempo do sensor.

Os parâmetros para a simulação do problema proposto são apresentados na Tabela P15.1. Lembrando que esses valores podem mudar dependendo da análise que se deseja realizar.

Tabela P15.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
C_p	Calor específico do líquido	1,00	kcal kg ⁻¹ °C ⁻¹
K_C	Ganho proporcional	1,00	kg min ⁻¹ °C ⁻¹
m	Massa de líquido no tanque	50,00	kg
T_0	Temperatura do líquido na alimentação	20,00	°C
T_{SP}	Setpoint (temperatura de referência)	40,00	°C
W	Vazão mássica na alimentação	250,00	kg min ⁻¹

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
W_{s0}	Vazão mássica inicial de vapor	5,00	kg min ⁻¹
λ	Calor latente de vaporização	537,00	kcal kg ⁻¹
τ_B	Constante de tempo da bainha	0,30	min
τ_i	Constante de tempo integral	5,00	min
τ_S	Constante de tempo do sensor	0,10	min

Condições iniciais			
$T_B(0)=T_S(0)=T(0)=T_0$			

Análises

- A1 Utilizando a Tabela P15.1 obtenha as curvas respostas: $T \times t$, $T_B \times t$ e $T_S \times t$ e avalie o comportamento dinâmico do sistema sem o controlador ($K_C=0$)
- A2 Utilizando a Tabela P15.1 obtenha as curvas respostas: $T \times t$, $T_B \times t$ e $T_S \times t$ e avalie o comportamento dinâmico do sistema com controlador.
- A3 Avalie a influência do ganho proporcional no sistema de controle.
- A4 Avalie a variável controlada ($T(t)$) e a variável manipulada (W_s) quando no tempo igual a 30 min ocorre uma perturbação na temperatura de entrada (T_0).
- A5 Avalie a variável controlada ($T(t)$) e a variável manipulada (W_s) quando no tempo igual a 30 min ocorre uma perturbação na vazão de alimentação (W).
- A6 Avalie a variável controlada ($T(t)$) e a variável manipulada (W_s) quando no tempo igual a 30 min ocorre uma perturbação no setpoint e 5 °C.

Simulação

Na Figura P15.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab[®]/simulink[®], para a simulação do problema proposto.

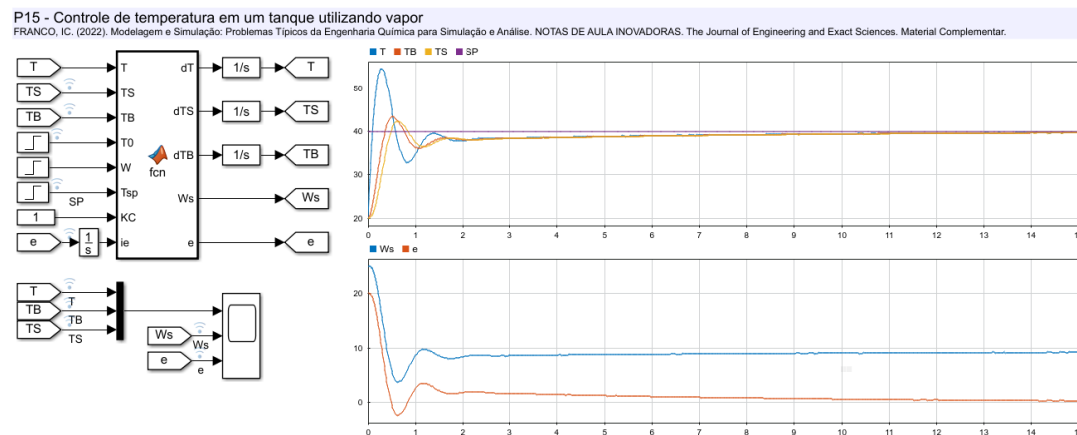


Figura P15.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A2.

P16. Controle de temperatura em um tanque de aquecimento de água

Descrição do problema

Problema adaptado de [Ingham et al. \(2007\)](#). Na Figura P16.1 é apresentado um sistema de controle feedback para controlar a temperatura da água em um tanque de fluxo contínuo por meio da adição de calor proveniente de um aquecedor.

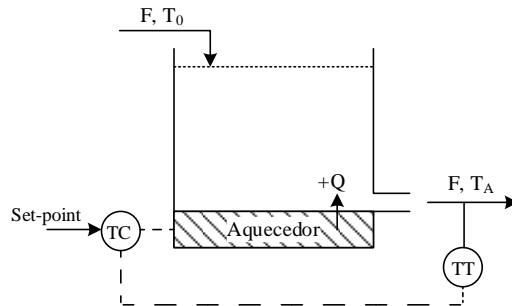


Figura P16.1 – Sistema de controle feedback utilizando vapor como agente de controle

Considerado que o nível do tanque permaneça constante, podemos representar a dinâmica do sistema pelas equações resultantes do balanço de energia no tanque (Eq. P16.1 e P16.2). O controle de temperatura da água no tanque (T) é feito por um controlador Proporcional-Integral (PI) e a variável manipulada é a quantidade de calor adicionado ao sistema (Q_c) que é representada pelas Eq. P16.3 e P16.4.

$$V\rho C_p \frac{dT_A}{dt} = F\rho C_p (T_0 - T_{A(t)}) + Q_c(t) \quad (\text{Eq. P16.1})$$

$$\frac{dQ_c}{dt} = \frac{Q_c - Q_c(t)}{\tau_Q} \quad (\text{Eq. P16.2})$$

Sendo:

$$Q_c = Q_0 + K_C e(t) + \frac{K_C}{\tau_I} \int e(t) dt \quad (\text{Eq. P16.3})$$

$$e(t) = T_{SP} - T_{A(t)} \quad (\text{Eq. P16.4})$$

Onde: C_p – calor específico; e – desvio da variável controlada em relação ao valor de referência (setpoint); F – vazão volumétrica; K_C – constante de ganho proporcional; Q – taxa de calor adicionado ao sistema; Q_c – taxa de calor controlada adicionada ao sistema; Q_0 – taxa de calor no estado estacionário; T_0 – temperatura na entrada do tanque; T_A – temperatura da água; T_{SP} – temperatura de referência (setpoint); V – volume do tanque; ρ – densidade da água; τ_I – constante de tempo integral; τ_Q – constante de tempo do aquecedor.

Os parâmetros para a simulação do problema proposto são apresentados na Tabela P16.1. Lembrando que esses valores podem mudar dependendo da análise que se deseja realizar.

Tabela P16.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
C_p	Calor específico do líquido	1,00	kcal kg ⁻¹ °C ⁻¹
F	Vazão volumétrica	600,00	m ³ h ⁻¹
K_C	Constante de ganho proporcional	5,00	kcal °C ⁻¹
Q_0	Taxa de calor no estado estacionário	300,00	kcal h ⁻¹
T_0	Temperatura na entrada do tanque	20,00	°C
T_{SP}	Temperatura de referência (setpoint)	80,00	°C
V	Volume do tanque	100,00	m ³
ρ	Densidade da água	1,00	kg m ⁻³
τ_I	Constante de tempo integral	0,10	h
τ_Q	Constante de tempo do aquecedor	0,10	h
Condições iniciais			
$T_A(0)=T_0$ (°C) e $Q_c(0)=Q_0$ (kcal h ⁻¹)			

Análises

- A1 Utilizando a Tabela P16.1 obtenha as curvas respostas: $T_A \times t$, $Q \times t$, $Q_C \times t$ e $e \times t$, e avalie o comportamento dinâmico do sistema.
- A2 Ao desconectar o controlador ($K_C=0$) qual será a temperatura da água quando o sistema atingir o estado estacionário?
- A3 Avalie a influência da constante de ganho proporcional (K_C) no sistema de controle.
- A4 Avalie a influência da temperatura na entrada do tanque (T_0) na dinâmica do sistema.
- A5 Avalie a influência da vazão de alimentação (F) na dinâmica do sistema.

Simulação

Na Figura P16.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab[®]/simulink[®], para a simulação do problema proposto.

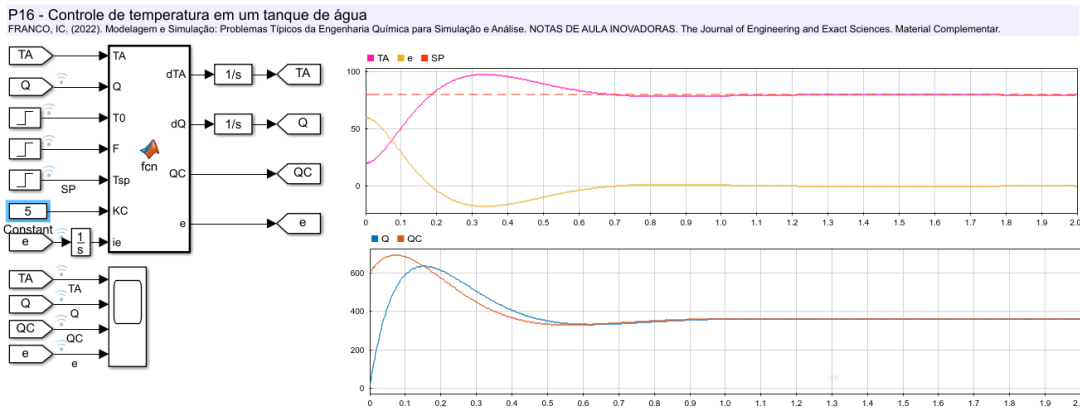


Figura P16.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1.

P17. Controle de nível em tanques em série

Descrição do problema

Problema adaptado de [Ingham et al. \(2007\)](#). No sistema de dois tanques dispostos em série apresentado na Figura P17.1 existe um sistema de controle feedback para que o nível do tanque T-102 seja controlado permanecendo em seu valor de referência (setpoint). O controle baseia-se na regulação do fluxo de entrada do tanque T-101 tendo como consequência um atraso considerável no sistema.

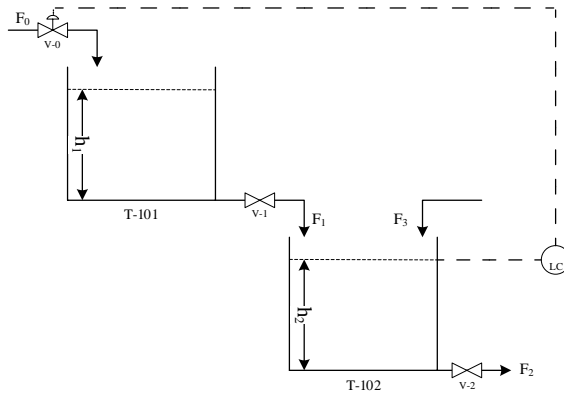


Figura P17.1 – Sistema de controle feedback para tanques em série

Podemos representar a dinâmica do sistema pelas equações resultantes do balanço de massa nos tanques T-101 e T-102 (Eq. P17.1 a P17.4). O controle do nível do tanque T-102 pode ser feito por um controlador Proporcional (P) (Eq. P7.5) atuando na vazão de alimentação do tanque T-101 e o sistema sofre uma perturbação frequente ocasionada pela corrente F3.

$$A_1 \frac{dh_1}{dt} = F_0 - F_1(t) \quad (\text{Eq. P17.1})$$

$$A_2 \frac{dh_2}{dt} = F_1(t) + F_3 - F_2(t) \quad (\text{Eq. P17.2})$$

Sendo:

$$F_1(t) = K_1 \sqrt{h_1(t)} \quad (\text{Eq. P17.3})$$

$$F_2(t) = K_2 \sqrt{h_2(t)} \quad (\text{Eq. P17.4})$$

$$F_0 = F_{0s} + K_C (h_{2SP} - h_2(t)) \quad (\text{Eq. P17.5})$$

Onde: A_1 e A_2 – área da seção transversal dos tanques T-101 e T-102; e – desvio da variável controlada em relação ao valor de referência (setpoint); F_0 – Vazão na alimentação do tanque T-101; F_{0s} – vazão na alimentação do tanque T-101 no estado estacionário; F_1 – vazão de saída do tanque T-101; F_2 – vazão de saída do tanque T-102; h_1 e h_2 – nível dos tanques T-101 e T-102; K_1 e K_2 – constante hidráulica das válvulas V-1 e V-2; K_C – constante de ganho proporcional.

Na Tabela P17.1 são apresentados os parâmetros para a simulação do problema proposto. Lembrando que esses valores podem mudar dependendo da análise que se deseja realizar.

Tabela P17.1 – Valores dos parâmetros e condições iniciais para a simulação

Parâmetros			
Símbolo	Definição	Valor	Unidades
A_1	Área da seção transversal do tanque T-101	4,00	m^2
A_2	Área da seção transversal do tanque T-102	3,00	m^2
F_{0s}	Vazão de alimentação no tanque T-101	3,00	$\text{m}^3 \text{h}^{-1}$
F_3	Perturbação no sistema	1,00	$\text{m}^3 \text{h}^{-1}$
$h_{1\text{max}}$	Nível máximo do tanque T-101	10,0	m
$h_{2\text{max}}$	Nível máximo do tanque T-102	6,00	m
K_1	Constante hidráulica da válvula V-1	1,35	$\text{m}^3 \text{h}^{-1} \text{m}^{-0,5}$
K_2	Constante hidráulica da válvula V-2	2,10	$\text{m}^3 \text{h}^{-1} \text{m}^{-0,5}$
K_C	Constante de ganho proporcional	1,00	$\text{m}^2 \text{h}^{-1}$
Condições iniciais			
$h_1(0)=0,0$ (m) e $h_2(0)=0,0$ (m)			

Análises

- A1 Utilizando a Tabela P17.1 obtenha as curvas respostas: $h_1 \times t$, $h_2 \times t$ e $F_0 \times t$ e avalie o comportamento dinâmico do sistema.
- A2 Ao desconectar o controlador ($K_C=0$) qual será o nível dos tanques quando o sistema atingir o estado estacionário?
- A3 Avalie a influência da constante de ganho proporcional (K_C) no sistema de controle.
- A4 Avalie o comportamento do sistema quando a perturbação (F_3) passa de $1,0 \text{ (m}^3 \text{ h}^{-1}\text{)}$ para $2,0 \text{ (m}^3 \text{ h}^{-1}\text{)}$ em $t=70 \text{ (h)}$.

Simulação

Na Figura P17.2 é apresentado o diagrama básico, desenvolvido em Matlab[®]/simulink[®], para a simulação do problema proposto.

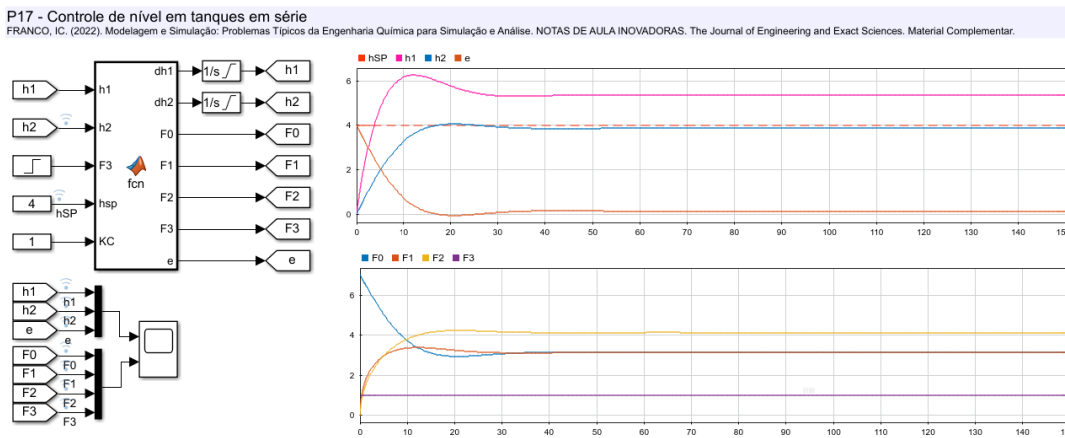


Figura P17.2 – Modelo de blocos que representa o problema proposto com a simulação da análise A1.

Referências

- Backhurst, J. R., Harker, J. H. (1990). **Chemical Engineering Volume 5**. Pergamon.
- Backhurst, J.R., Harker, J. H., Porter, J. E. (1974). **Problems in Heat and Mass Transfer**. Edward Arnold.
- Bequette, B. W. (1998). **Process Dynamics Modeling, Analysis, and Simulation**. Pratic Hall.
- Chaves, I. D. G., López, J. R. G., Zapata, J. L. G., Robayo, A. L., Niño, G. R. (2016). **Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering**. Springer International Publishing.
- Fogler, H. S. (2006). **Elements of Chemical Reaction Engineering**. Prentice Hall International.
- Foo, D. C.Y., Chemmangattuvalappil, N., Ng, D. K. S., Elyas, R., Chen, C-L., Elms, R. D., Lee, H-Y, Chien, I-L., Chong, S., Chong, C. H. (2017). **Chemical Engineering Process Simulation**. Elsevier.
- Froment, G. F.; Bischoff, K. B.; De Wilde, J. (2011). **Chemical Reactor Analysis and Desing**. John Wiley & Sons, Inc.
- Ingham, J., Dunn, I. J., Heinzle, E., Prenosil, J. E., Snape, J. B. (2007). **Chemical Engineering Dynamics: An Introduction to Modelling and Computer Simulation**. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co.
- Luyben, W. L. (1996). **Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers**.The McGraw-Hill Companies.
- MathWorks. (2021). **Simulink® Getting Started Guide**. The MathWorks, Inc.
- Volin, Y. M., Ostrovskii, G; M. (2006). Three phases in the development of computer simulation of chemical engineering systems. **Foundations of Chemical Engineering**, 40(3), 281–290.
- Walas, S. M. (1991). **Modeling with Differential Equations in Chemical Engineering**. Butterworth.



THE JOURNAL OF ENGINEERING
AND EXACT SCIENCES

ISSN 2527-1075