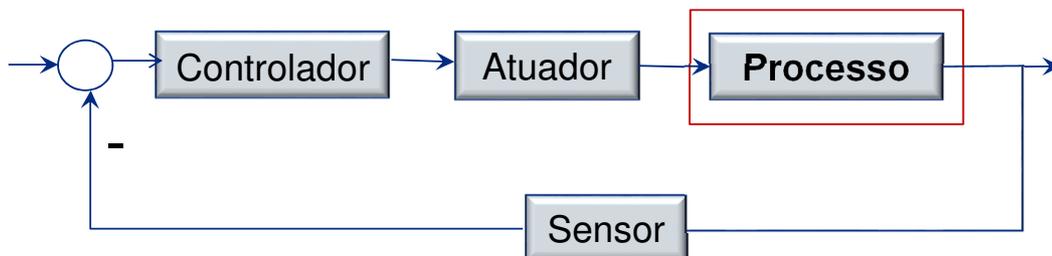


Departamento de Engenharia Química e de Petróleo – UFF

## Modelagem de Processos Técnica de Linearização

Profa. Ninoska Bojorge

Seguindo a malha de controle feedback...



## Dinâmica dos processos

O controle do processo é inerentemente relacionado com o comportamento do mesmo no estado instável (ou seja, “com a resposta transitória”, “dinâmica do processo”)

## Modelagem de Processo

**Modelo matemático** é uma representação dos aspectos essenciais de um sistema, que apresenta conhecimentos deste sistema de uma forma utilizável

**Simulação** é a obtenção da resposta temporal das variáveis de interesse de um modelo, quando se excita suas variáveis de entrada com sinais desejados e se definem os valores das condições iniciais das variáveis dependentes.

## Modelagem de Processo

- O objetivo da **modelagem** é **determinar uma representação** matematicamente tratável para o processo físico/químico.
- A essa representação damos o nome de **modelo**.
- Portanto, um modelo é uma idealização da realidade que retém suas principais características e que é matematicamente tratável.
- A modelagem é uma etapa importante no projeto de sistemas de controle, posto que o êxito dessa tarefa dependerá do modelo criado para o sistema em questão.
- A modelagem matemática de um sistema dinâmico é constituída por um **conjunto de equações diferenciais** (EDO e/ou EDP) que representam a dinâmica do sistema com precisão ou, pelo menos, de uma forma aceitável.

## Métodos para Determinação de Modelos Matemáticos

Existem dois métodos básicos de modelagem:

### 1) Modelagem Teórica (ou Fenomenológica)

Utiliza os princípios da física e da química e/ou biológico para obter as equações diferenciais que regem o processo a ser modelado.

### 2) Modelagem Experimental (ou Empírica)

Usa a observação direta dos dados operacionais do processo para obter as equações diferenciais que o descrevem.

Geralmente, aplica-se uma sinal de entrada conhecido e mede-se a saída correspondente.

## Variáveis de Estado

- As **variáveis de estado** são o conjuntos de variáveis que permitem representar o comportamento dinâmico do sistema.
- O valor deste conjunto de variáveis de estado num determinado instante de tempo é chamado de estado.
- As equações que relacionam as variáveis de estados às perturbações são ditas de equações de estados e são derivadas das equações que resultam da aplicação dos princípios de conservação.

## Grau de Liberdade, $N_L$

$$N_L = N_V - N_E$$

$N_L$  : número de variáveis que podem ser especificadas independentemente.

$N_V$  : número total de variáveis desconhecidas .

$N_E$  : número de equações (diferenciais e algébricas.)

A solução do modelo depende do  $N_L$ :

- $N_L = 0 \rightarrow$  **Sistema determinado**. Solução única. (caso satisfatório)
- $N_L > 0 \rightarrow$  **Sistema sub-determinado**, ou seja  $N_V > N_E$ . Infinita soluções.  $N_L$  podem especificar-se arbitrariamente.
- $N_L < 0 \rightarrow$  **Sistema sobre-determinado**. Têm menos variáveis que equações. Sistema não tem solução.

## Formulação da modelagem

Os princípios teóricos nos quais se baseiam os modelos do processo para sua modelagem dinâmica e de controle de processos são fundamentalmente baseadas nas Leis de Conservação.

## Modelos teóricos de processos

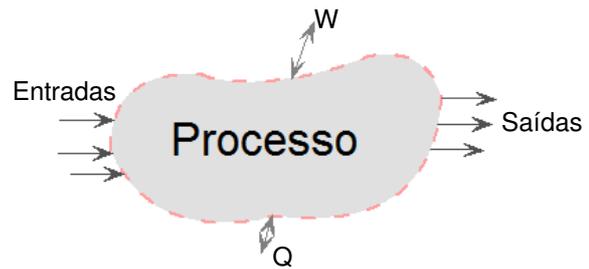
- **Equações de conservação**
  - base fundamental para o desenvolvimento do modelo
  - Conservação de massa, energia & momentum
  - EDOs lineais e não-lineares
- **Relações constitutivas**
  - relações semi-empíricas necessárias para completar o modelo
  - taxas cinéticas, taxas de calor, etc.
  - equações algébricas não lineares
- **Estimação de parâmetros**

necessários para determinar os parâmetros desconhecidos tais como: constantes de velocidade de reação, os coeficientes de transferência de calor, etc., etc.

  - estimação dos valores dos parâmetros que mais se aproximam aos dados disponíveis

## Leis de Conservação

Considere-se um processo, onde tem-se  $n$  entradas e  $n$  saídas e onde as letras  $Q$  e  $W$  representam calor e trabalho realizado pelo sistema, respectivamente.



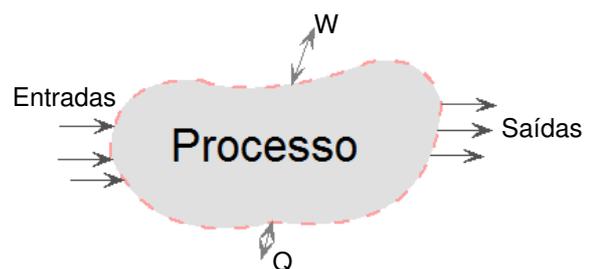
O princípio de conservação estabelece qualquer quantidade acumulada dentro do limite de contorno de um sistema é a diferença entre o que foi adicionado e o que foi retirado do sistema, mais o que foi gerado dentro do sistema.

ou ainda, filosoficamente falando,

"Na natureza nada se cria, nada se perde, tudo se transforma".

## Leis de Conservação

Resumindo:



Acumulado = entra – sai + gerado – consumido

# Leis de Conservação

## ➤ Balanço de Massa Global (massa/tempo)

$$\begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{massa} \\ \text{acumulada} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{massa} \\ \text{entra} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{massa} \\ \text{saída} \end{bmatrix}$$

## ➤ Balanço por Componente (mol/tempo)

$$\begin{bmatrix} \text{Taxa da variação molar} \\ \text{do componente A} \\ \text{no Sistema} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{vazão molar} \\ \text{do componente A} \\ \text{na entrada} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{vazão molar} \\ \text{do componente A} \\ \text{na saída} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \text{velocidade de} \\ \text{formação do} \\ \text{compon. A saí} \end{bmatrix}$$

## ➤ Balanço de Energia (Joule/tempo)

$$\begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{energía} \\ \text{acumulada} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{energía} \\ \text{entrada} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{energía} \\ \text{saída} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{energía} \\ \text{gerada} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Taxa de energía} \\ \text{gasta pelo} \\ \text{trabalho realizado} \end{bmatrix}$$

## ➤ Balanço de Movimento

$$\begin{bmatrix} \text{Taxa da variação} \\ \text{de movimento com} \\ \text{respeito ao tempo} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{taxa movimento} \\ \text{que entra} \\ \text{ao sistema} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{taxa movimento} \\ \text{que saí} \\ \text{do sistema} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \text{taxa de} \\ \text{geração de} \\ \text{movimento} \end{bmatrix}$$

## ➤ Relações constitutivas

13

# Balanço de Massa

ou:

$$\begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{massa} \\ \text{acumulada} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{massa} \\ \text{entrada} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{massa} \\ \text{saída} \end{bmatrix}$$

Em termos matemáticos,

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_e - \dot{m}_s \quad (1.1)$$

$m$  : massa total =  $V \cdot \rho$

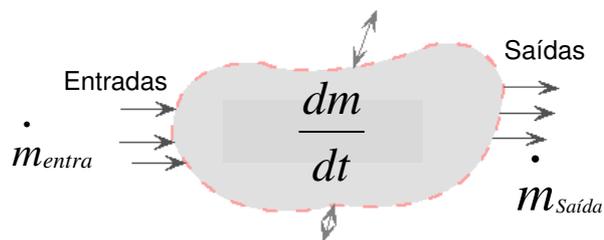
$\dot{m}_e$  : taxa mássica entra =  $F_e \cdot \rho_e$

$\dot{m}_s$  : taxa mássica saí =  $F_s \cdot \rho_s$

$F$  : vazão volumétrica (volume/tempo)

$\rho$  : densidade (massa/volume)

$$\frac{d\rho V}{dt} = F_e \cdot \rho_e - F_s \cdot \rho_s \quad (1.2)$$



14

## Balço por componentes

$$\left[ \begin{array}{l} \text{Taxa da variaço molar} \\ \text{do componente A} \\ \text{no Sistema} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{l} \text{vazão molar} \\ \text{do componente A} \\ \text{na entrada} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{l} \text{vazão molar} \\ \text{do componente A} \\ \text{na saída} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{l} \text{velocidade de} \\ \text{formaço do} \\ \text{compon. A saí} \end{array} \right]$$

$$\frac{dn_A}{dt} = F_e \cdot C_{Ae} - F_s \cdot C_{As} + r_A \cdot V \quad (1.3)$$

sendo  $n_A = C_A \cdot V$

$$r_A = k \cdot [C_A]$$

k : coeficiente cinético , depende da ordem da reação:  
[tempo]<sup>-1</sup>[concentração]<sup>1-n</sup>

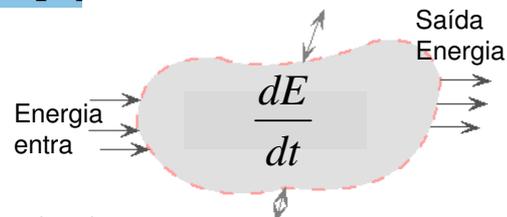
$$\frac{d(C_A V)}{dt} = F_e \cdot C_{Ae} - F_s \cdot C_{As} + k \cdot C_A \cdot V \quad (1.4)$$

15

## Balço de Energia

Em sistema de engenharia química, as variações de energia cinética ( $E_K$ ) e potencial ( $E_\phi$ ) são geralmente desprezíveis, e por tanto,

$$\left[ \begin{array}{l} \text{Taxa de} \\ \text{energia} \\ \text{acumulada} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{l} \text{Taxa de} \\ \text{energia} \\ \text{entrada} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{l} \text{Taxa de} \\ \text{energia} \\ \text{saída} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{l} \text{Taxa de} \\ \text{energia} \\ \text{gerada} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{l} \text{Taxa de energia} \\ \text{gasta pelo} \\ \text{trabalho realizado} \end{array} \right]$$



$$\frac{d(\rho VE)}{dt} = \frac{d(U_E + Eke + E\phi_e)\rho V}{dt} \quad (1.5)$$

$$\frac{d(\rho VE)}{dt} = \sum_{i=1}^{nE} F_e \rho_e (U_E + Eke + E\phi_e) - \sum_{i=1}^{nS} F_s \rho_s (U_S + Eks + E\phi_s) + Q - W \quad (1.6)$$

16

## Balanço de Energia

$$\frac{d(\rho VE)}{dt} = \sum_{i=i}^{nE} F_e \rho_e (U_E + E_{ke} + E_{\phi e}) - \sum_{i=i}^{nS} F_s \rho_s (U_S + E_{ks} + E_{\phi s}) + Q - W \quad (1.6)$$

Para os processos e exemplos considerados aqui. É conveniente fazer duas suposições:

1. Variações na energia potencial e energia cinética podem ser desprezíveis, por serem pequenas em comparação com as mudanças na energia interna.
2. A taxa líquida de trabalho pode ser desprezível pois é pequena em comparação com as taxas de transferência e convecção de calor .

$$E \cong U, W \cong 0$$

## Balanço de Energia

Por estas suposições razoáveis, o balanço de energia em Eq. (1.6) pode ser escrita como:

$$\frac{dU_{\text{int}}}{dt} = -\Delta(w\hat{H}) + Q \quad (1.7)$$

$U_{\text{int}}$  = energia interna do sistema

$\hat{H}$  = entalpia por unidade de massa

$w$  = vazão massica

$Q$  = taxa de transf. calor para o sistema

$\Delta$  = representa a diferenca entre as correntes de entrada e saída; assim

$-\Delta(w\hat{H})$  = taxa de entalpia da corrente que entra menos a corrente de saída.

## Balço de Energia

Para Líquido puro, a pressões moderadas ou baixas,

$$U_{int} \approx H$$

$$\hat{U}_{int} = \hat{H}$$

$$d\hat{U}_{int} = d\hat{H} = CdT \quad (1.8)$$

C é a capacidade de calor a pressão constante (assumida como sendo constante). A energia interna total do líquido no tanque é:

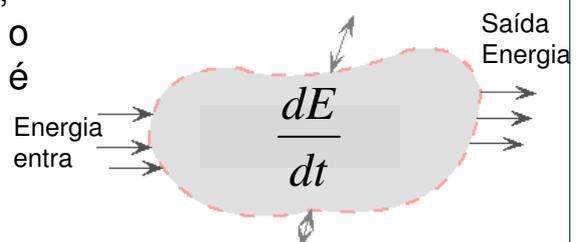
$$U_{int} = \rho V \hat{U}_{int} \quad (1.9)$$

$$\frac{dU_{int}}{dt} = \rho VC \frac{dT}{dt} \quad (1.10)$$

## Balço de Energia (cont.)

Assim, o balanço simplificado de energia , considerando que o calor específico cte e o trabalho mecânico realizado pelo sistema é nulo.

Tem-se que:



$$V\rho C_p \frac{dT}{dt} = F\rho C_p(T_{in} - T) + Vr_Q + UA(Ta - T) \quad (1.11)$$

onde as unidades de cada termo da equação de balanço são unidades de **energia/tempo** (Joule/s). Esta equação pode ser aplicada a reatores batelada, batelada alimentada e contínuos

## Balço de Movimento

- Equações de balanço de movimento são importante em problemas que envolvem escoamento de fluidos.
- Momentum (movimento) é definido como o produto da massa e sua velocidade, tal como afirmado pela segunda lei de Newton, a força de um sistema em movimento é igual á massa pela aceleração, também, é igual a “taxa da variação do movimento”.
- A equação de equilíbrio geral para a transferência de movimento é expressa por:

$$\left[ \begin{array}{l} \text{Taxa da variação} \\ \text{de movimento com} \\ \text{respeito ao tempo} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{l} \text{taxa movimento} \\ \text{que entra} \\ \text{ao sistema} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{l} \text{taxa movimento} \\ \text{que sai} \\ \text{do sistema} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{l} \text{taxa de} \\ \text{geração de} \\ \text{movimento} \end{array} \right]$$

ou

$$\left[ \begin{array}{l} \text{Taxa da variação} \\ \text{de movimento com} \\ \text{respeito ao tempo} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{l} \text{soma de todas} \\ \text{as forças atuando} \\ \text{no sistema} \end{array} \right]$$

Assim:

$$\frac{d(Mv_i)}{dt} = \sum_{i=1}^n F_{ij} \quad (1.12)$$

$v_i$  : velocidade na direção i  
 $F_{ij}$  : j-ésima força atuando na direção i

## Relações constitutivas

Todos os modelos irão incluir uma ou mais equações de equilíbrio. A maioria também vai usar um conjunto de equações constitutivas para definir melhor os termos específicos nas equações de equilíbrio. Relações constitutivas mais comuns incluem:

- relações de propriedade e equações de estado
- transportar as relações de fluxo
- expressões taxa de reação
- expressões de equilíbrio
- relações de fluxo de fluido

## Relações constitutivas

- Equação de estado termodinâmico:

Leis dos gases ideais:  $PV = nRT$

Eq. de van der Waals 
$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V^2}$$

- Equação de estado termodinâmico:

Entalpia : dado  $C_p = A_1 + A_2T$

Líquido:  $h = \int_{T_{ref}}^T C_p dT = C_p(T - T_{ref})$

Vapor:  $H = h + \lambda_v = C_p(T - T_{ref}) + \lambda_v$

$$h = \frac{\sum_{j=1}^{NC} X_j h_j M_j}{\sum_{j=1}^{NC} X_j M_j}$$

$X_j$  : fração molar  
 $M_j$  : peso molecular

## Relações constitutivas

- Equação de equilíbrio termodinâmico:

Lei de Dalton:  $P_i = Y_i \cdot P$  (vapor)

Lei de Raoult  $P_i = X_i \cdot P$  (Líquido)

Equações cinéticas Arrhenius

$$K = K_o \cdot \exp(-E/RT)$$

E: energia de ativação

R: Cte. dos gases

## Relações constitutivas

- Equação de difusão ou de transporte de matéria :

$$N_A = -D_A \frac{d}{dz} C_A$$

- Modelos de transporte convectivo é significativo, coeficientes de transferência de calor e de massa são normalmente utilizados, levando a expressões como:

$$N_A = kc(C_A - C_{Ax})$$

$$Q = hAc(T - T_x)$$

- Expressões de taxa de reações

$$r_A = k_0 e^{-\frac{E_A}{RT}} C_A$$

## Função de Transferência

### Modelagem de Processos: Considerações preliminares

Qualquer descrição de um processo pode ser considerada como seu modelo;

Em termos de propósitos de controle, o modelo deve conter informações que permitam prever as consequências das mudanças das condições operacionais dos processos;

Um modelo pode ser desde uma descrição matemática ou até qualitativa do comportamento de um processo.

## Modelos de Processos

Uma das técnicas mais simples para modelar a dinâmica do escoamento de líquidos em tubos e tanques é através da associação com circuitos elétricos:

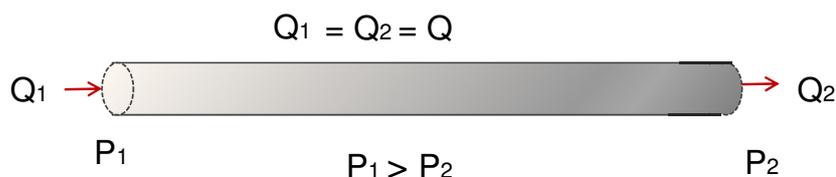
- 1) Resistência Fluídica  $\leftrightarrow$  resistência elétrica
- 2) Capacitância Fluídica  $\leftrightarrow$  capacitância elétrica
- 3) Variação de Pressão  $\leftrightarrow$  tensão elétrica
- 4) Fluxo  $\leftrightarrow$  corrente elétrica

27

## Modelos de Processos

- **Resistência fluídica** – é a resistência a passagem de líquido através de um tubo ou restrição sendo definida por

$$R = \frac{\text{variação de pressão}}{\text{variação de fluxo}}$$



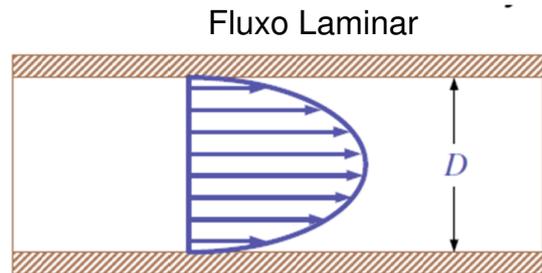
A relação entre a variação de pressão e a variação de fluxo difere para escoamentos laminares e turbulentos

28

## Fluxo Laminar v/s Turbulento

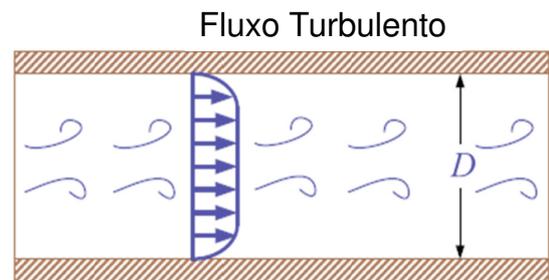
- Fluxo Laminar

Fluxo dominado pela força da viscosidade é denominado fluxo laminar e, o movimento do fluido é caracterizado por linha suave e paralelo



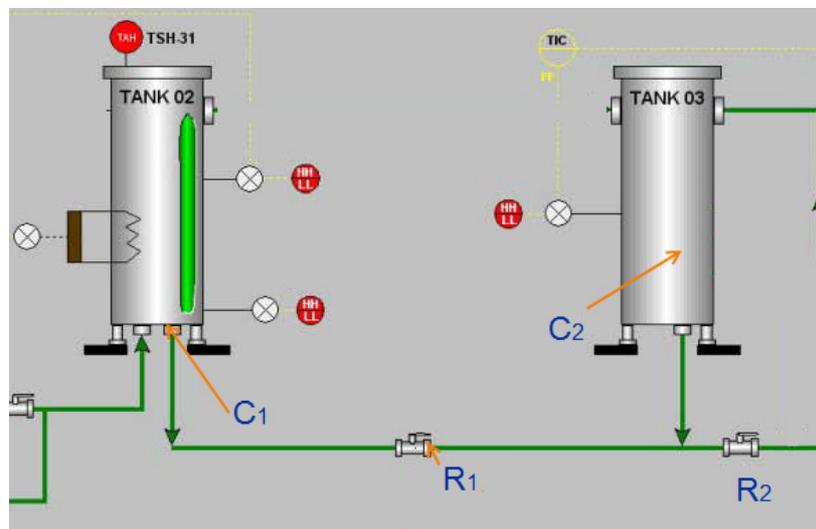
- Fluxo Turbulento

Quando as forças de inércia dominam, o fluxo é chamado de fluxo turbulento e seu movimento é caracterizado por linhas irregulares.



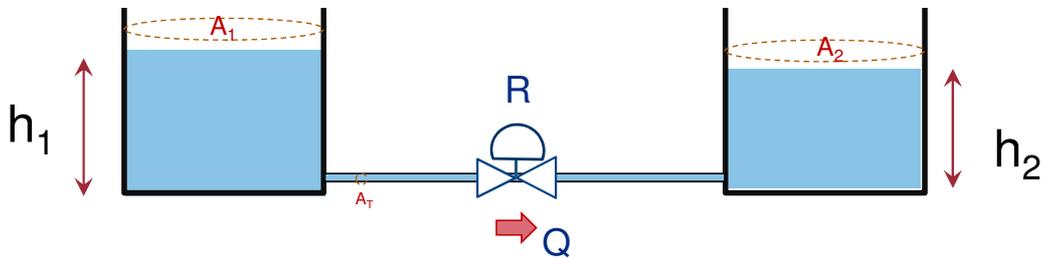
## Modelos de Processos

- Resistência fluídica – também definida em termo da diferencia de alturas de colunas de água em tanques acoplados, pois a pressão na saída do tanque é proporcional a altura da coluna de líquido.



# Resistência de sistemas de nível de líquido

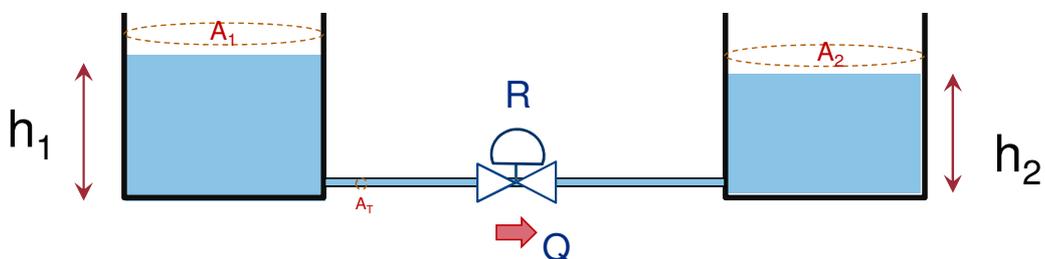
Considere o fluxo através de um tubo curto conectando dois tanques como mostrado na figura abaixo:



onde  $h_1$  é a altura (ou nível) do primeiro tanque,  $h_2$  é a altura do segundo tanque,  $R$  é a resistência no fluxo do líquido e  $Q$  é a vazão. E  $A_i$  área da seção transversal do respectivo tanque.

# Resistência de sistemas de nível de líquido

A resistência para o fluxo de líquido na tubulação é definida como a variação na diferença do nível necessária para causar uma mudança na taxa do fluxo.



$$\text{Resistência} = \frac{\text{mudança na diferença de nível}}{\text{mudança na taxa de fluxo}} = \frac{m}{m^3 / s}$$

$$R = \frac{\Delta(H_1 - H_2)}{\Delta Q} = \frac{m}{m^3 / s}$$

## Resistência em Fluxo Laminar

- Para o fluxo laminar, a relação entre a vazão em estado estacionário e a altura em estado estacionário é dada por:

$$Q = k_1 H$$

onde  $Q$  = vazão no estado estacionário, [m<sup>3</sup>/s]

$K_1$  = constante, [m<sup>2</sup>/s]

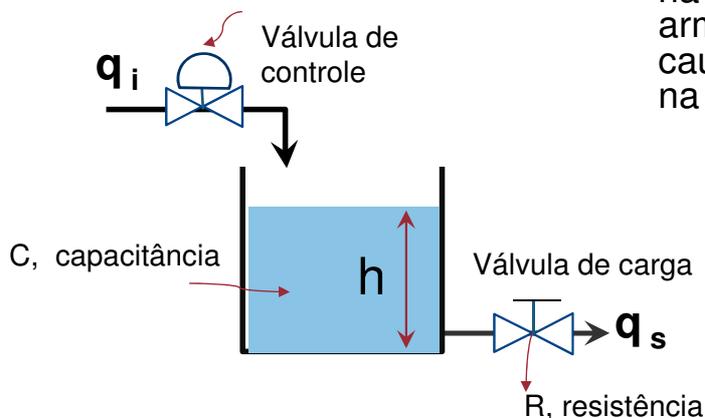
$H$  = altura no estado-estacionário, [m].

A resistência,  $R_1$  :

$$R_1 = \frac{dH}{dQ}$$

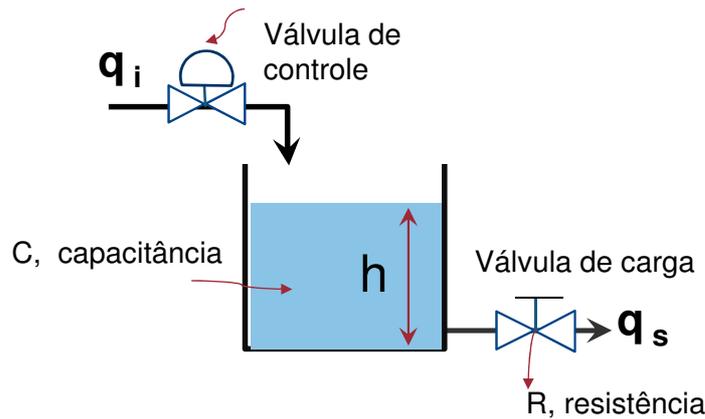
## Capacitância em Sistemas Nível de Líquido

- A capacitância de um tanque é definida como sendo a mudança na quantidade de líquido armazenada necessária para causar uma mudança de unidade na altura.



$$\text{Capacitância} = \frac{\text{Mudança do vol. líquido estocado}}{\text{Mudança na altura}} = \frac{m^3}{m} \text{ ou } m^2$$

## Capacitância em Sistemas Nível de Líquido



Taxa na variação do volume do líquido no tanque = fluxo entra – fluxo sai

$$\frac{dV}{dt} = q_i - q_o$$

$$\frac{d(A \times h)}{dt} = q_i - q_o$$

## Modelos de Processos

- Por simplicidade suporemos que a diferença de pressão é causada pela diferença das colunas de líquidos nos dois tanques.
- Desta forma, pode-se redefinir a resistência pela relação:

$$R = \frac{dH}{dQ}$$

- Quando o escoamento é laminar, a relação em regime permanente entre  $H$  e  $Q$  é linear:

$$R_1 = \frac{dH}{dQ}, \quad Q = K_v H \Rightarrow R_1 = \frac{1}{K_v}$$

onde  $K_v$  é uma constante (em  $m^2/s$ ) que depende das dimensões da tubulação.

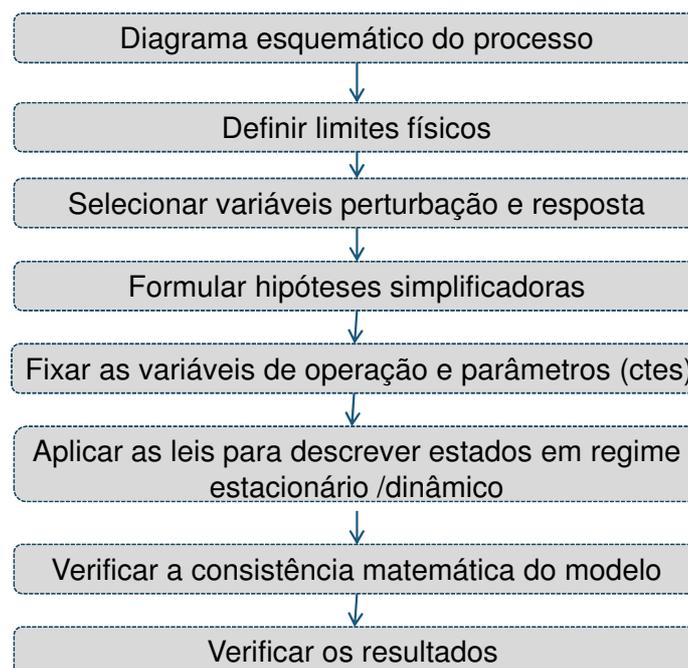
# Metodologia de Modelagem

A modelagem de processos pode ser realizada de duas formas:

- Metodologia Fenomenológica (Leis fundamentais de física e química),
- Metodologia Empírica (informação contida nas variáveis de processo registradas ao longo do tempo) .

das quais nenhuma destas metodologias é autocontida e simplesmente foram definidas de forma diferentes levando em consideração a ênfase que se dá à fonte primária de informação ou conhecimento.

## Metodologia de Modelagem Fenomenológica



## Modelagem Dinâmica de Processos

Para obter as equações dinâmicas de um processo, os seguintes passos devem ser seguidos:

- 1) Definição das variáveis significativas (de entrada e de saída);
- 2) Escrever as **relações sistêmica (relações de equilíbrio ou de compatibilidade inter-elementos)**;
- 3) Escrever as **relações constitutivas para cada elemento (são puramente empíricas)** ; e
- 4) Combinar as relações obtidas, obtendo as **equações dinâmicas**.

## Modelagem Dinâmica de Processos

### Exemplo 1

- **Sistemas de nível de líquido** são aqueles que envolvem o fluxo de fluidos e o seu armazenamento em tanques.

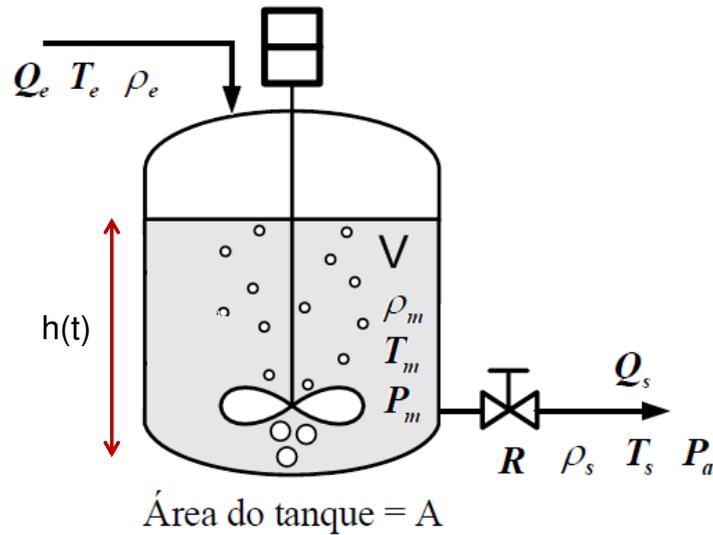
Exemplo típico: um tanque com vazão de entrada e vazão de saída, sendo esse último modulado por uma válvula (Sistema Real).

### Modelamento Físico

- Pode-se imaginar para o sistema físico real o modelo físico mostrado a seguir:

# Modelagem Dinâmica de Processos

## Exemplo 1: Sistemas de Nível de Líquido



Modelamento físico do sistema do nível

41

# Modelagem Dinâmica de Processos

## Exemplo 1 Sistemas de Nível de Líquido

Obtenção das Equações Dinâmicas

- Variáveis utilizadas: Vazão,  $Q(t)$  e Nível,  $h(t)$ .
- Equação de Sistema - balanço de massa

$$m = \rho_m Ah$$

$$\frac{dm}{dt} = \cancel{\rho_m} A \frac{dh}{dt} = \cancel{\rho_e} Q_e - \cancel{\rho_s} Q_s$$

Assumindo que:

- A massa específica do fluido é constante, isto é,  $\rho_m = \rho_e = \rho_s$ ;
- As dilatações térmicas do tanque são desprezíveis, portanto, sua área é constante. Então:

$$\frac{dh}{dt} = \frac{Q_{ent} - Q_{sai}}{A}$$

42

## Modelagem Dinâmica de Processos

**Equação Constitutiva - vazão de saída através da válvula** como função da **perda de pressão**:

- Para escoamento laminar:  $Q_s = K_v \Delta P = K_v (P_m - P_a)$
- Para escoamento turbulento:  $Q_s = K_v \sqrt{\Delta P} = K_v \sqrt{(P_m - P_a)}$

onde o parâmetro  $K_v$  é uma cte característica da válvula

Porém, sabendo que:  $P_m = P_a + \rho gh$

- Para escoamento laminar:  $Q_s = K_v \rho gh$
- Para escoamento turbulento:  $Q_s = CK_v \sqrt{\rho gh}$

## Modelagem Dinâmica de Processos

- **Equação Dinâmica - introduzindo a equação constitutiva** na equação de sistema, temos:

- Para escoamento laminar: 
$$\frac{dh}{dt} = \frac{Q_e - K_v \rho gh}{A}$$

- Para escoamento turbulento: 
$$\frac{dh}{dt} = \frac{Q_e - K_v \sqrt{\rho gh}}{A}$$

- Parâmetro do sistema:  $K_v$ ,  $\rho$ ,  $g$  e  $A$ ;
- Variáveis externas a serem fornecida em função do tempo para que a equação tenha solução:  $Q_e(t)$ ;
- Incógnita:  $h(t)$ ;
- Condição inicial:  $h(0)$ ; e
- Caso se tome  $dh(t)/dt = 0$ , tem-se o modelo estacionário.

## Conversão entre modelos não lineais e lineais



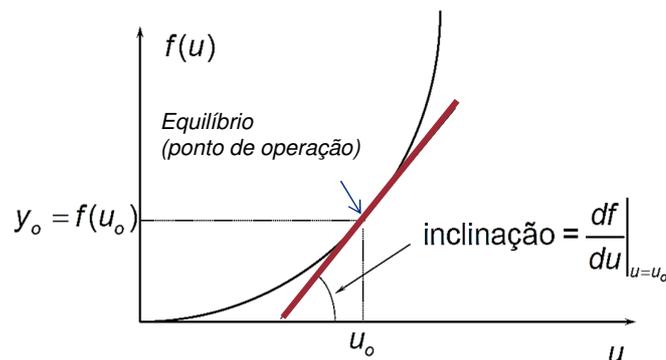
## Linearização de Modelos não lineares

- Até agora, temos enfatizado modelos lineares que podem ser transformados em modelos FT.
- Mas a maioria dos processos físicos e modelos da engenharia química são modelos não-lineares.
  - Durante um pequeno intervalo nas condições de operação, o comportamento pode ser aproximadamente linear.
  - Conclusão: aproximações lineares podem ser úteis.
- A aproximação de modelos lineares podem ser obtidas analiticamente através da técnica chamada de "linearização", baseada na série de Taylor de uma função não-linear sobre um ponto de operação especificado.

## Linearização de Modelos não lineares

- Uma boa aproximação se obtém-se perto de um determinado ponto de operação.
- O Ganho e a constante de tempo podem mudar com o ponto de operação.

Considere um modelo dinâmico **não linear**, relacionando 2 variáveis do processo,  $u$  e  $y$ :  $\frac{dy}{dt} = f(y, u)$



47

## Linearização de Modelos não lineares

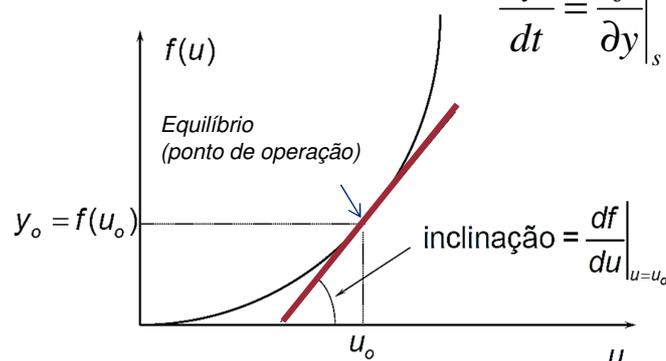
$$\frac{dy}{dt} = f(y, u) \quad (1)$$

**Expansão da Série de Taylor:**

$$f(y, u) \cong f(\bar{y}, \bar{u}) + \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\bar{y}, \bar{u}} (y - \bar{y}) + \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{\bar{y}, \bar{u}} (u - \bar{u}) \quad (2)$$

Substituindo e subtraindo a equação do estado de equilíbrio, o modelo dinâmico **linearizado** é:

$$\frac{dy'}{dt} = \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_s y' + \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_s u' \quad (3)$$



48

# Linearização de Modelos não lineares

Aproximação Linear da Expansão de Série de Taylor para **uma** variável,

Série de Taylor

$$y(t) = g(x(t))$$

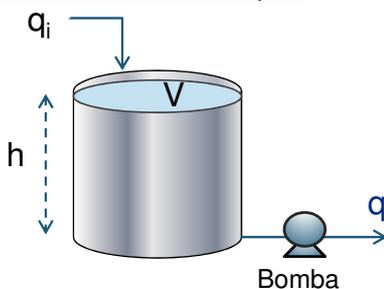
$$y = g(x) = g(x_0) + \left. \frac{dg}{dx} \right|_{x=x_0} \frac{(x-x_0)}{1!} + \left. \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} \right|_{x=x_0} \frac{(x-x_0)^2}{2!} + \dots$$

Aproximação Linear da Expansão de Série de Taylor para **mais de uma** variável, truncada para primeira ordem:

$$y(t) = g(x_{1o}, x_{2o}, \dots, x_{no}) + \left. \frac{\partial g}{\partial x_1} \right|_{x=x_0} \cdot (x_1 - x_{1o}) + \left. \frac{\partial g}{\partial x_2} \right|_{x=x_0} \cdot (x_2 - x_{2o}) + \dots + \left. \frac{\partial g}{\partial x_n} \right|_{x=x_0} \cdot (x_n - x_{no})$$

A expansão em Serie de Taylor em torno do ponto de operação  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , é útil para se obter uma aproximação linear da função não linear

## Exemplo 2: Nivel de tanque



$q$ : vazão de saída,  
 $q_i$ : vazão de entrada (perturbação)  
 $h$ : nível do tanque (VC)

$$A \frac{dh}{dt} = q_i - q \quad (2.1)$$

Solução: aplicando T.L em eq. 2.1

$$AsH(s) = q_i(s) - q(s) \quad (\text{expressa em var. desvios})$$

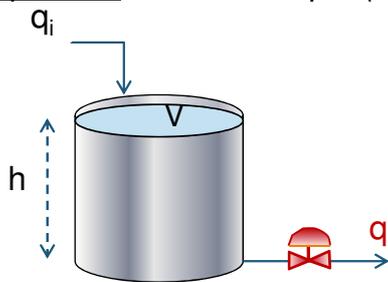
Supondo " $q$ " é constante, de modo que  $\Delta q = 0$ , obtém-se:

$$AsH(s) = q_i(s), \rightarrow \frac{H(s)}{Q_i(s)} = \frac{1}{As}$$

Integrador puro (rampa), para a mudança de grau de  $q_i$

Mas, se  $q$  fosse manipulada por uma **válvula de controle**, então...

Exemplo 2b: Nível no tanque (válvula de controle)



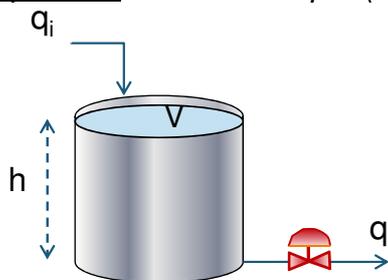
**Caso a)** A vazão de saída,  $q$ , é uma função linear da resistência da válvula e  $h$ , temos:

$$q = \frac{1}{R_v} h \quad R_v: \text{resistência linear na linha da saída}$$

$$A \frac{dh}{dt} = q_i - \frac{1}{R_v} h \quad (2.2) \quad \text{EDO linear}$$

Logo, aplica-se a T.L em eq. 2.2 para obter a função de transferência

Exemplo 2b: Nível no tanque (válvula de controle)



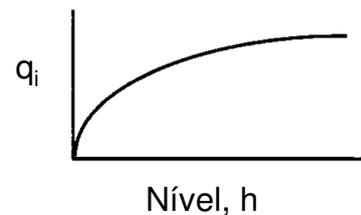
**Caso b)** A vazão de saída é função do  $K_v$  e  $h$

$$q = K_v \sqrt{P - P_{atm}} \quad P_{atm} : \text{pressão ambiente}$$

$$P = p_{atm} + \rho g h$$

$$q = K_v^* \sqrt{h}$$

elemento não linear



$$A \frac{dh}{dt} = q_i - K_v \sqrt{\rho g h} = q_i - K_v^* \sqrt{h} \quad (2.3) \quad \text{EDO NÃO Linear}$$

Caso b) A vazão de saída é função do  $K_v$  e  $h$  .... Cont.

$$A \frac{dh}{dt} = q_i - K_v \sqrt{\rho g h} = q_i - K_v^* \sqrt{h} \quad (2.3)$$

Linearizando o termo anterior não linear, e substituindo  $\bar{h}$ , tem-se:

$$f(q(h)) = \bar{q} + \left( \frac{K_v^*}{2\sqrt{\bar{h}}} \right) \hat{h} \quad (2.4)$$

$$A \frac{dh}{dt} = q_i - \left( \bar{q} + \left( \frac{K_v^*}{2\sqrt{\bar{h}}} \right) \hat{h} \right) \quad (2.5)$$

Logo, a equação (2.3) em estado de equilíbrio é:

$$0 = \bar{q}_i - K_v^* \sqrt{\bar{h}} \quad (2.6)$$

Caso b) A vazão de saída é função do  $K_v$  e  $h$  .... Cont.

Subtraindo (2.6) de (2.5) e fazendo  $\hat{q}_i = q_i - \bar{q}_i$ , notando que  $\frac{dh}{dt} = \frac{d\hat{h}}{dt}$  resulta o modelo linearizado:

$$A \frac{d\hat{h}}{dt} = \hat{q}_i - \left( \frac{K_v^*}{2\sqrt{\bar{h}}} \right) \hat{h} \quad (2.7)$$

## Exemplo 2b. contin.

Assim, a EDO linearizada será:

$$A \frac{d\hat{h}}{dt} = \hat{q}_i - \left( \frac{K_v}{2\sqrt{\bar{h}}} \right) \hat{h}$$

$$A \frac{d\hat{h}}{dt} + \left( \frac{K_v}{2\sqrt{\bar{h}}} \right) \hat{h} = \hat{q}_i$$

$$\frac{2A\sqrt{\bar{h}}}{K_v} \frac{d\hat{h}}{dt} + \hat{h} = \left( \frac{2\sqrt{\bar{h}}}{K_v} \right) \hat{q}_i$$

$$\tau \frac{d\hat{h}}{dt} + \hat{h} = K_P \hat{q}_i$$

Logo, aplica-se TL ....contin.

## Propriedades da Função de Transferência dos Modelos

### 1. Ganho em estado de equilíbrio

A FT em estado de equilíbrio pode ser usado para calcular a resposta (saída) no estado estacionário devido a uma mudança de estado na entrada. Por exemplo, suponha que conhecemos dois estados estacionários para a entrada,  $u$ , e da saída,  $y$ . Então, podemos calcular o ganho em estado estacionário,  $K$ , a partir da entrada,  $u$ , e da saída,  $y$ . Logo, podemos calcular o ganho em estado de equilíbrio,  $K$ , como:

$$K = \frac{\bar{y}_2 - \bar{y}_1}{\bar{u}_2 - \bar{u}_1} \quad (7.1)$$

Para um sistema linear,  $K$  é uma constante. Mas, para um sistema não-linear,  $K$  vai depender da condição operacional  $(\bar{u}, \bar{y})$ .

## Calculo do ganho do Processo, K

Se um modelo FT tem um ganho em estado estacionário, então :

$$K = \lim_{s \rightarrow 0} G(s) \quad (7.2)$$

- Este importante resultado é consequência do Teorema do Valor Final

Nota: Alguns modelos de FT não têm ganho em estado de equilíbrio  
(Exemplo: processo integrador).

## Ordem do Modelo da Função de Transferência

Considere EDO linear geral de ordem n, :

$$a_n \frac{d^n y}{dt^n} + a_{n-1} \frac{dy^{n-1}}{dt^{n-1}} + \dots + a_1 \frac{dy}{dt} + a_0 y = b_m \frac{d^m u}{dt^m} + b_{m-1} \frac{d^{m-1} u}{dt^{m-1}} + \dots + b_1 \frac{du}{dt} + b_0 u \quad (7.3)$$

Aplicando TL, e assumindo que as condições iniciais são zero.  
Reordenando, resulta na seguinte FT:

$$G(s) = \frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{\sum_{i=0}^m b_i s^i}{\sum_{i=0}^n a_i s^i} \quad (7.4)$$

## Definição

A ordem da FT é definida para ser a **ordem do polinômio do denominador**.

obs.: A ordem da FT do denominador é igual á ordem da EDO.

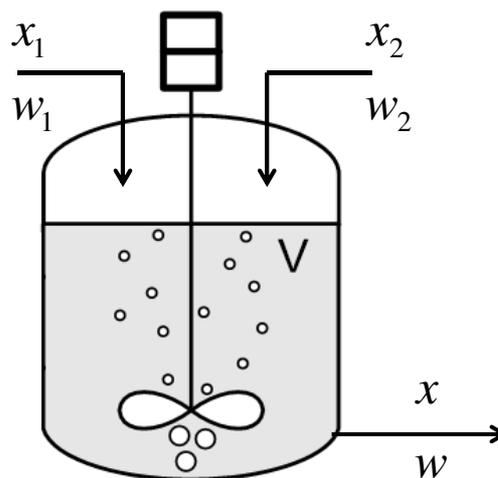
### Viabilidade Física:

Para qualquer sistema físico,  $n \geq m$  em (7.4). Caso contrário, o sistema de resposta a uma entrada degrau será um impulso. (Isso não pode acontecer)

*Exemplo:*

$$a_0 y = b_1 \frac{du}{dt} + b_0 u \quad \text{e mudança degrau em } u$$

### Exemplo 3 : Processo de mistura em tanque agitado



Suposições:

- **balanço de massa em estado transiente para o sistema de mistura:**

$$\begin{bmatrix} \text{Taxa de massa} \\ \text{acumulada} \\ \text{no tanque} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{massa} \\ \text{entra} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{massa} \\ \text{sai} \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

ou

$$\frac{d(V\rho)}{dt} = w_1 + w_2 - w \quad (3.2)$$

onde  $w_1$ ,  $w_2$ , e  $w$  são taxa mássica.

- **balanço por componentes**

$$\frac{d(V\rho x)}{dt} = w_1 x_1 + w_2 x_2 - wx \quad (3.3)$$

Logo, eqs (3.2) e (3.3) em estado de equilíbrio

$$0 = \bar{w}_1 + \bar{w}_2 - \bar{w} \quad (3.4)$$

$$0 = \bar{w}_1 \bar{x}_1 + \bar{w}_2 \bar{x}_2 - \bar{w} \bar{x} \quad (3.5)$$

### Exemplo 3 : Processo de mistura no tanque agitado...cont.

Para  $\rho$  constante, Eqs. 3-2 e 3-3, temos:

$$\rho \frac{dV}{dt} = w_1 + w_2 - w \quad (3.6)$$

$$\frac{\rho d(Vx)}{dt} = w_1 x_1 + w_2 x_2 - wx \quad (3.7)$$

$$\frac{\rho d(Vx)}{dt} = w_1 x_1 + w_2 x_2 - wx \quad (3.8)$$

Simplificado a eq. 3.8 através da expansão do termo acumulação com a "regra da cadeia" para a diferenciação de um produto:

$$\rho \frac{d(Vx)}{dt} = \rho V \frac{dx}{dt} + \rho x \frac{dV}{dt} \quad (3.9)$$

Substituindo a (3.9) em (3.8) temos:

$$\rho V \frac{dx}{dt} + \rho x \frac{dV}{dt} = w_1 x_1 + w_2 x_2 - wx \quad (3.10)$$

Substituição o balanço de massa em (3.6) de  $\rho dV/dt$  em (3.10) dá:

$$\rho V \frac{dx}{dt} + x(w_1 + w_2 - w) = w_1 x_1 + w_2 x_2 - wx \quad (3.11)$$

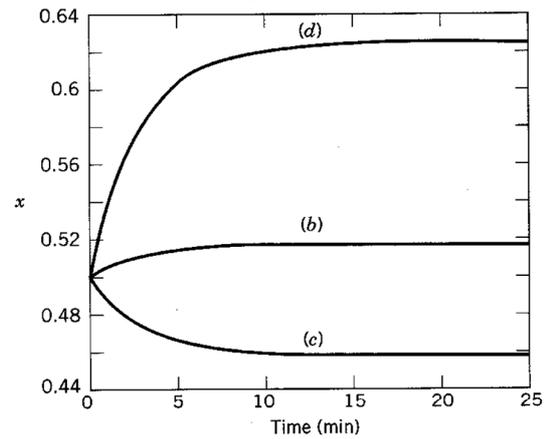
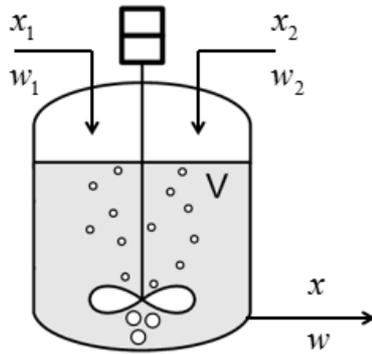
### Exemplo 3 : Processo de mistura no tanque agitado...cont.

Depois de cancelar termos comuns e reorganizando (3.6) e (3-11), uma forma do modelo mais conveniente é obtida:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{1}{\rho} (w_1 + w_2 - w) \quad (3.12)$$

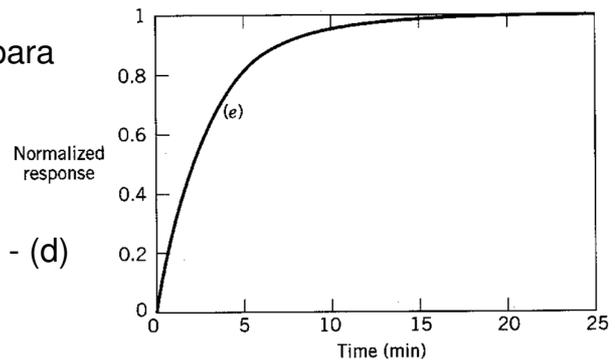
$$\frac{dx}{dt} = \frac{w_1}{V\rho} (x_1 - x) + \frac{w_2}{V\rho} (x_2 - x) \quad (3.13)$$

### Exemplo 3 : Processo de mistura no tanque agitado...cont.



Existe uma resposta da composição do processo de mistura no tanque agitado para mudanças em:

- b) vazão  $w_1$
- c) vazão  $w_2$
- d) vazão  $w_1$  e composição  $x_1$
- e) resposta normalizada para a parte (b) - (d)



## Processos de Aquecimento em Tanque Agitado

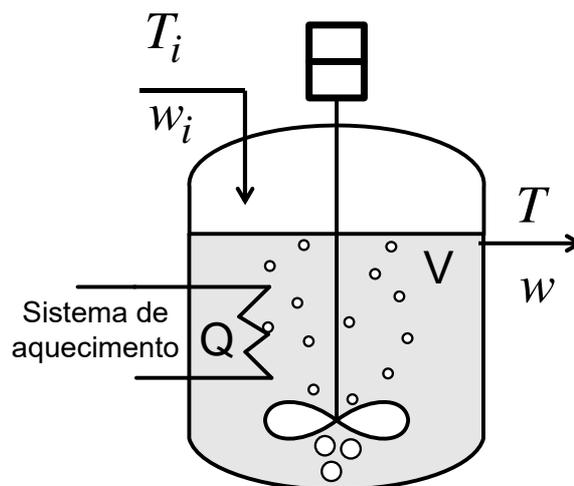


Figura 4- Processo de um tanque agitado com aquecimento a V constante.

## Processo de Aquecimento em tanque agitado ...cont

Suposições:

1. Mistura perfeita; assim, a temperatura de saída,  $T$ , é também  $\cong$  temperatura do conteúdo no tanque.
2.  $V_{\text{liquido}}$  é constante, porque as taxas de fluxo de entrada e saída são iguais.
3. A densidade  $\rho$  e a capacidade de calor  $C$  do líquido são assumidas constantes. Assim, a sua dependência da temperatura é desprezível.
4. As perdas de calor são desprezíveis.

## Obtenção das Equações Dinâmicas

- **Variáveis utilizadas:**

- Temperatura:  $T(t)$  [°C]
- Quantidade de calor armazenado em um corpo:  $q(t)$  [kcal]
- Fluxo de calor:  $Q(t)$  [kcal/s]

- **Relações de Sistema:**

- Quando dois corpos com temperaturas diferentes são postos em contato, fluirá calor do mais quente para o mais frio, até que as temperaturas do dois se igualem.

o modelo dinâmico, assumindo  $V_{liq.}$  e vazões constantes:

$$V\rho C \frac{dT}{dt} = wC(T_i - T) + Q \quad (1)$$

Suponha que a condições iniciais do processo em estado de equilíbrio :

$$T(0) = \bar{T}, T_i(0) = \bar{T}_i, Q(0) = \bar{Q} \quad (2)$$

onde  $\bar{T}$  = valor em estado de equilíbrio da  $T$ , etc. Para as condições em estado de equilíbrio:

$$0 = wC(\bar{T}_i - \bar{T}) + \bar{Q} \quad (3)$$

Subtraindo (3) de (1):

$$V\rho C \frac{dT}{dt} = wC[(T_i - \bar{T}_i) - (T - \bar{T})] + (Q - \bar{Q}) \quad (4)$$

mas,

$$\frac{dT}{dt} = \frac{d(T - \bar{T})}{dt} \quad \text{porque } \bar{T} \text{ é uma constante} \quad (5)$$

Assim, substituindo em eq(4) obtem-se,

$$V\rho C \frac{dT'}{dt} = wC(T'_i - T') + Q' \quad (6)$$

onde:

$$T' = T - \bar{T}, T'_i = T_i - \bar{T}_i, Q' = Q - \bar{Q} \quad (7)$$

“variáveis desvios”, também chamada como “variáveis de perturbação”.

Aplicando  $\mathcal{TL}$  em (6) :

$$V\rho C[sT'(s) - T'(t=0)] = wC[T'_i(s) - T'(s)] + Q'(s) \quad (8)$$

ou, 
$$V\rho C[sT'(s) - T'(0)] = wC[T'_i(s) + T'(s)] + Q'(s)$$

Avaliando  $T'(t=0)$ .

Por definição,  $T' = T - \bar{T}$ . Assim em,  $t = 0$ ,

$$T'(0) = T(0) - \bar{T} \quad (9)$$

Mas como assumiu-se que a condição inicial do processo era que inicialmente estava em estado estacionário, i.e.  $T(0) = \bar{T}$ , decorre de (9) que:

$$T'(0) = 0.$$

Nota: A vantagem de utilizar variáveis de desvio é que o termo condição inicial torna-se zero. Isto simplifica a análise posterior.

Reordenando (8) para resolver para  $T'(s)$ :

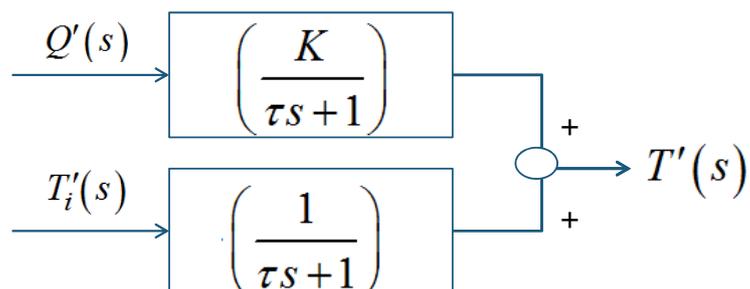
$$T'(s) = \left( \frac{K}{\tau s + 1} \right) Q'(s) + \left( \frac{1}{\tau s + 1} \right) T_i'(s) \quad (10)$$

onde

$$K = \frac{1}{wC} \quad \text{e} \quad \tau = \frac{V\rho}{w}$$

ou

$$T'(s) = G_1(s)Q'(s) + G_2(s)T_i'(s) \quad (11)$$



Assim,

$$T'(s) = G_1(s)Q'(s) + G_2(s)T'_i(s) \quad (11)$$

A função de transferência entre  $Q'$  e  $T'$  :

Suponha que  $T_i$  é uma constante no estado de equilíbrio. ou seja,

$$T_i(t) = \bar{T}_i \Rightarrow T'_i(t) = 0 \Rightarrow T'_i(s) = 0.$$

Então, podemos substituir em (10) e reordenando a FT desejada:

$$\boxed{\frac{T'(s)}{Q'(s)} = \frac{K}{\tau s + 1}} \quad (12)$$

A função de transferência entre  $T'$  e  $T'_i$  :

Suponha-se  $Q$  é uma constante no estado de equilíbrio:

$$Q(t) = \bar{Q} \Rightarrow Q'(t) = 0 \Rightarrow Q'(s) = 0$$

Assim, reordenando

$$\boxed{\frac{T'(s)}{T'_i(s)} = \frac{1}{\tau s + 1}} \quad (13)$$

Obs:

1. As FT das eqs (12) e (13) mostram o efeito *individual de*  $Q$  e  $T_i$  sobre  $T$ .

Qual seria a resposta para mudanças *simultâneas* em  $Q$  e  $T_i$  ?

### Resposta:

- Da eq.(10), a mesma FT é válida para mudanças simultâneas

$$T'(s) = \left( \frac{K}{\tau s + 1} \right) Q'(s) + \left( \frac{1}{\tau s + 1} \right) T_i'(s) \quad (10)$$

- Note que eq (10) mostra os efeitos das mudanças tanto em  $Q$  como em  $T_i$  e são *aditivos*. Isso sempre ocorre para, os modelos dinâmicos lineares (como FT) porque o princípio da superposição é válido.
2. O modelo FT nos permite determinar a resposta de saída a qualquer mudança na entrada.
  3. Emprega-se as variáveis de desvio para eliminar as condições iniciais dos modelos em FT.

### **Graus de liberdade para o Análise do Modelo do tanque agitado :**

3 parâmetros:	$V, \rho, C$
4 variáveis:	$T, T_i, w, Q$
1 equação:	Eq. 10

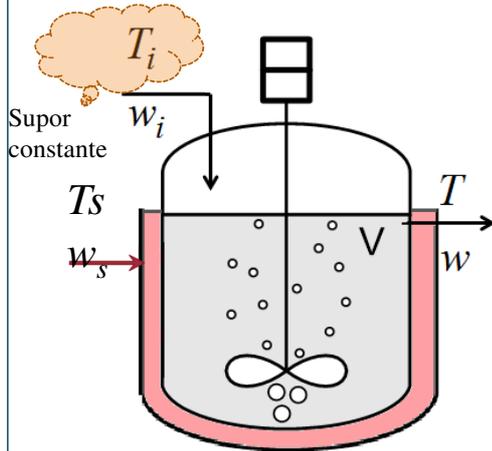
Assim, os graus de liberdade são  $N_L = 4 - 1 = 3$  As variáveis de processo são classificadas :

1 variável saída:	$T$
3 variáveis entradas:	$T_i, w, Q$

Para efeitos de controle de temperatura, é razoável classificar as três entradas como:

2 variáveis de perturbação:	$T_i, w$
1 variável manipulada:	$Q$

## Exemplo 5- CSTR Endotérmico



aquecimento com vapor :

$$Q = w_s \Delta H_v$$

$$V \rho C \frac{dT}{dt} = wC(T_i - T) + w_s \Delta H_v \quad (1)$$

$$0 = wC(T_i - \bar{T}) + \bar{w}_s \Delta H_v \quad (2)$$

Subtraindo (2) de (1)

$$V \rho C \frac{dT}{dt} = wC(\bar{T} - T) + (w_s - \bar{w}_s) \Delta H_v \quad (3)$$

dividindo por  $wC$ , temos:

$$\frac{V \rho}{w} \frac{dT}{dt} = \bar{T} - T + \frac{\Delta H_v}{wC} (w_s - \bar{w}_s) \quad (4)$$

77

Definição de variáveis de desvio (do set point)

$$\hat{T} = T - \bar{T}$$

$\bar{T}$  é a temperatura desejada de operação

$$\hat{w}_s = w_s - \bar{w}_s$$

$\bar{w}_s$  do regime operacional (equilíbrio)

$$\frac{\rho V}{w} \frac{d\hat{T}}{dt} = -\hat{T} + \frac{\Delta H_v}{wC} \hat{w}_s \quad \text{note que} \quad \frac{\Delta H_v}{wC} = K_p \quad \text{e} \quad \frac{\rho V}{w} = \tau_1$$

$$\text{note qdo} \quad \frac{d\hat{T}}{dt} = 0 \quad \rightarrow \quad \hat{T} = K_p \hat{w}_s$$

$$\tau_1 \frac{d\hat{T}}{dt} = -\hat{T} + K_p \hat{w}_s \quad : \text{EDO linear}$$

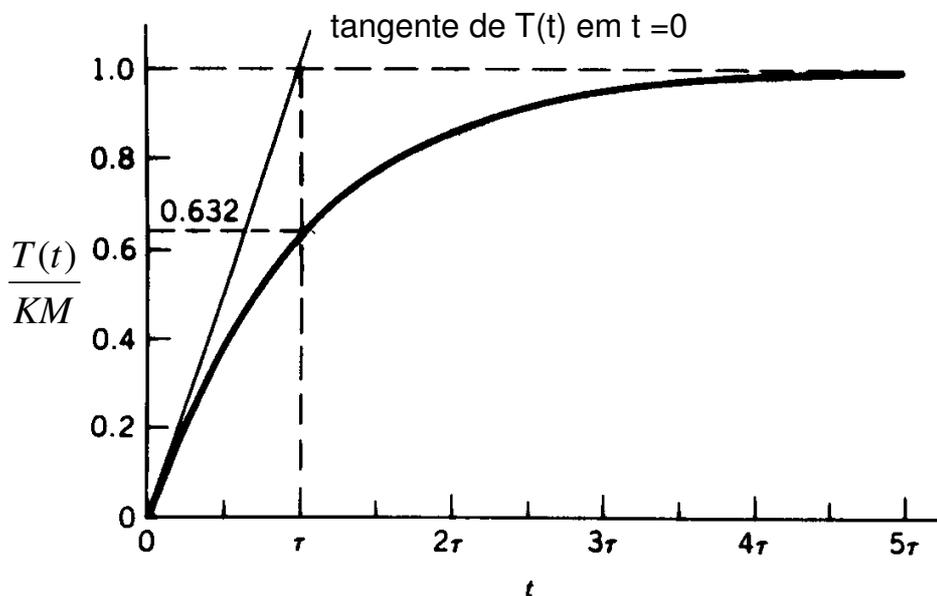
A solução geral de uma EDO linear: soma de exponenciais. Supondo  $\hat{w} = 1$  (resposta para o degrau unitário)

$$T(t) = K_p \left( 1 - e^{-\frac{t}{\tau_1}} \right) \quad (6)$$

78

A resposta para um sistema de Primeira Ordem e obtenção gráfica da constante de tempo  $\tau$

$$T(t) = K \left( 1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \right)$$



79

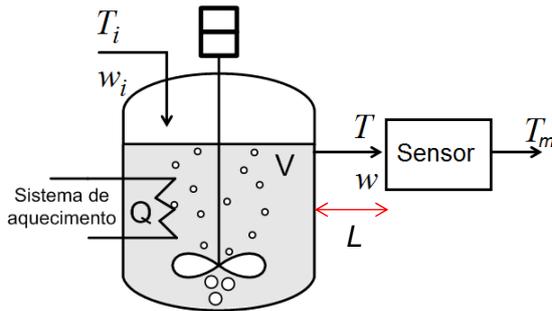
## Tempo morto

- O tempo morto puro ( $t_m$  ou  $\theta$ ) é uma quantidade finita de tempo que o líquido leva para se mover da saída do reservatório ao ponto onde está o sensor.
- Em geral, nos equipamentos que modelamos por parâmetros distribuídos, *i. e.*, a variável do processo é distribuída por todo o equipamento. As funções de transferência para tais sistemas geralmente contêm no mínimo, um termo de tempo morto, o qual só para simplificar cálculos, desconsideramos.
- Uma estimativa de aproximação do tempo morto é realizada utilizando a aproximação de Padé de primeira ordem, dada por

$$e^{-\theta s} \approx \frac{1 - \frac{\theta}{2}s}{1 + \frac{\theta}{2}s}$$

80

**Exemplo 6 :** Se o sensor de temperatura é instalado na corrente de saída do tanque aquecido (atraso de transporte)



$$\text{Tempo morto: } \theta = \frac{L}{w} = \frac{A \cdot L}{f}$$

$w$  = velocidade do fluido, m/s

$L$  = comprimento ou distância, m

$A$  = área transversal da tubulação, m<sup>2</sup>

$f$  = fluxo volumétrico, m<sup>3</sup>/s

$$\text{Tanque: } G_1 = \frac{T(s)}{U(s)} = \frac{K_1}{1 + \tau_1 s}$$

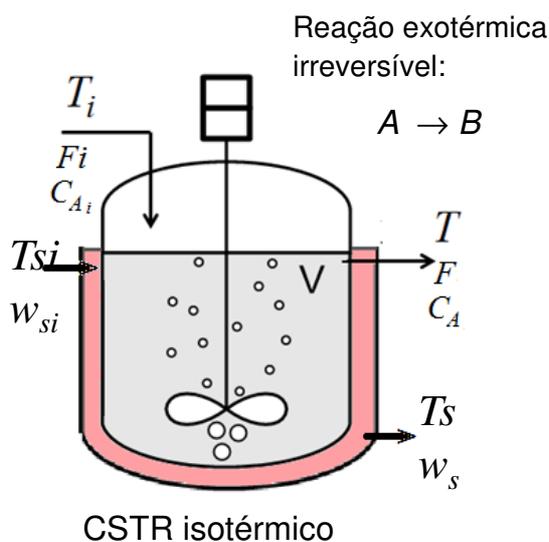
$$\text{Sensor: } G_H = \frac{T_m(s)}{T(s)} = \frac{K_H e^{-\theta s}}{1 + \tau_H s}$$

Função transferência global :

$$\frac{T_m}{U} = \frac{T_m}{T} \cdot \frac{T}{U} = G_H \cdot G_1 = \frac{K_1 K_H e^{-\theta s}}{(1 + \tau_1 s)(1 + \tau_H s)}$$

81

## 7. Modelos com Reações



Suposições:

- Volume constante da mistura reacional
- Operação num reator isotérmico (T cte)
- Reator bem misturado
- Reação é considerada de primeira ordem com respeito a A

Solução:

- Balanço global

$$\frac{dV}{dt} = F_i - F = 0$$

$$\therefore F_i = F$$

82

## 7. Modelos com Reações

Balço por componente:

$$V \frac{dC_A}{dt} = F_i \cdot C_{Ai} - F \cdot C_A - V r_A$$

$$r = k C_A = k_0 e^{-E/RT} C_A$$

Dado que a  $T = \text{cte}$  podemos assumir que a cte de reação é constante, então:

$$V \frac{dC_A}{dt} = F_i \cdot C_{Ai} - F \cdot C_A - V k C_A$$

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F_i}{V} \cdot C_{Ai} - \frac{F}{V} \cdot C_A - k C_A$$

## 7. Modelos com Reações

Em resumo:

Eq. de estado

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F}{V} C_{A0} - \frac{F}{V} C_A - k C_A$$

Variável de estado

$C_A$

Var. de entrada { Manipulada  
perturbação

$F$

$C_{A0}$

Agora se supomos, o balanço por componentes em termos do produto, temos

$$\frac{dC_B}{dt} = -\frac{F}{V} \cdot C_B + k C_A$$

Vcs podem continuar e resolver!!

## 8. Reações Biológicas

- Reações biológicas que envolvem microrganismos e de enzimas catalisadoras estão presentes e desempenham um papel crucial no mundo natural.
- Sem tais biorreações, plantas e vida animal, como a conhecemos, simplesmente não poderiam existir.
- Biorreações também fornecem a base para a produção de uma ampla variedade de produtos nas indústrias farmacêuticas e médicas e de alimentos.
- Importantes processos industriais que envolvem biorreações incluem processos de fermentação e tratamento de águas residuais.
- Os engenheiros químicos estão fortemente envolvidos com os processos bioquímicos e biomédicos.

## 8. Bioreações

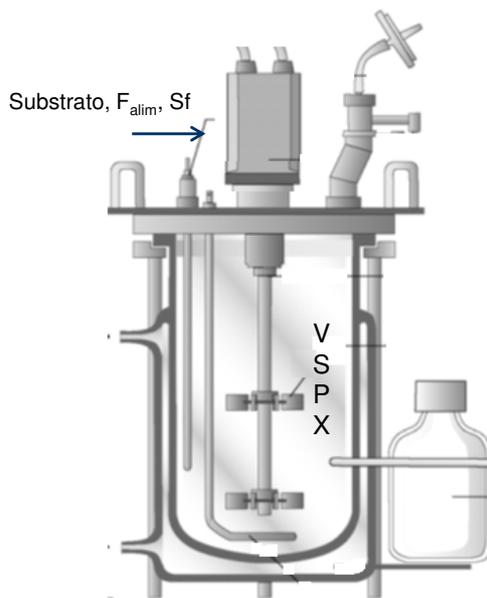
- Normalmente são realizados num reator descontínuo ou descontínuo com alimentação.
- Fed-batch é sinônimo de semi-batelada ou batelada alimentada.
- Reatores Fed-batch são amplamente utilizados na indústria de alimentos, farmacêutica e outros processos industriais.

*substrato* <sup>*células*</sup> → *mais células + produtos*

$$Y_{XS} = \frac{\text{massa de células formadas}}{\text{massa substrato consumido}} \quad (8.1)$$

$$Y_{pS} = \frac{\text{massa de produto formada}}{\text{massa substrato consumido}} \quad (8.2)$$

## Bioreator Batelada alimentada (Fed-Batch)



Bioreator Fed-batch para uma bioreação.

Equação de Monod

$$r_g = \mu X \quad (8.3)$$

Taxa específica de crescimento

$$\mu = \mu_{\max} \frac{S}{K_s + S} \quad (8.4)$$

- Suposições

1. A fase de crescimento exponencial de células é de interesse.
2. O reator em batelada alimentada é perfeitamente misturado.
3. Efeitos de calor são pequenos para que o funcionamento do reator isotérmico pode ser assumido.
4. A densidade do líquido é constante.
5. O mosto no biorreator consiste de material líquido, mais sólido, a massa de células. Esta mistura heterogênea pode ser aproximada como um líquido homogêneo.
6. A taxa de crescimento das células  $r_g$  é dada pela equação de Monod (8.3) e (8.4).

- Suposições ... cont.

7. A taxa de formação de produto por unidade de volume,  $r_p$ , pode ser expresso como:

$$r_p = Y_{P/X} r_g \quad (8.5)$$

onde o coeficiente de rendimento  $Y_{P/X}$  é definido como:

$$Y_{P/X} = \frac{\text{massa de produto formada}}{\text{massa nova células formadas}} \quad (8.6)$$

8. A corrente de alimentação é estéril e, portanto, não contém células.

- De modo geral, cada balanço

$$\begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{massa} \\ \text{acumulada} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{massa} \\ \text{entra} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{massa} \\ \text{saída} \end{bmatrix}$$

## Balanço por componentes

- Células:  $\frac{d(XV)}{dt} = V r_g \quad (8.7)$

- Produto:  $\frac{d(PV)}{dt} = V r_p \quad (8.8)$

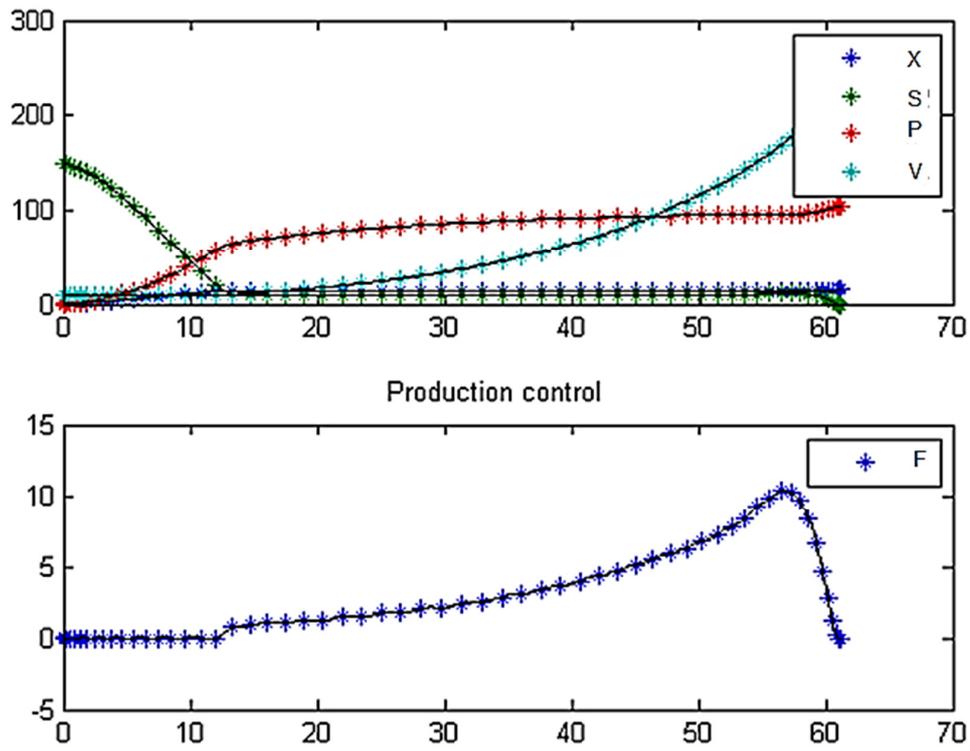
- Substrato:

$$\frac{d(SV)}{dt} = F S_f - \frac{1}{Y_{X/S}} V r_g - \frac{1}{Y_{P/S}} V r_p \quad (8.9)$$

- Balanço Global

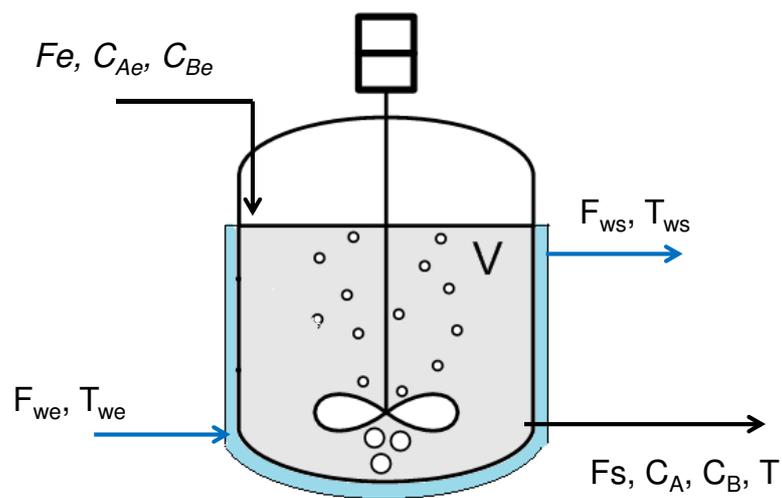
$$\frac{d(V)}{dt} = F \quad (8.10)$$

## Plot



91

## Reator CSTR não-isotérmico



92

Em um reator não isotérmico contínuo de tanque agitado, geralmente são dados do problema:

- Geometria do reator, i.e, diâmetro do tanque conhecido
- A alimentação do reagente puro à determinada temperatura de alimentação, com determinada concentração e vazão volumétrica,
- No reator acontece uma reação de primeira ordem, segunda ordem, etc,
- Calor da reação conhecido.
- O reator é munido de camisa de troca térmica para controlar a temperatura do reator, com coeficiente global de transferência de calor  $U$  conhecido.
- Para a mistura reacional pode-se considerar massa específica constante e calor específico constante
- Se conhece a característica da válvula na linha de manipulação: como abertura linear, abertura rápida ou de igual porcentagem, ( $K_v$  e  $\tau_v$ ).

**Dadas as seguintes hipóteses:**

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

## Balço de massa no reator

Global:

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

Componente:

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

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

Como exercício: determinar a FT que relaciona  $C_A$  com  $C_{Af}$

95

## Balço de energia no reator:

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

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

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

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

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

Como exercício: determinar a FT que relaciona T com  $T_f$  e Q supondo a const de reação como  $K = A e^{-E_a/(RT)}$  ∴ A e  $E_a$  são ctes.

96

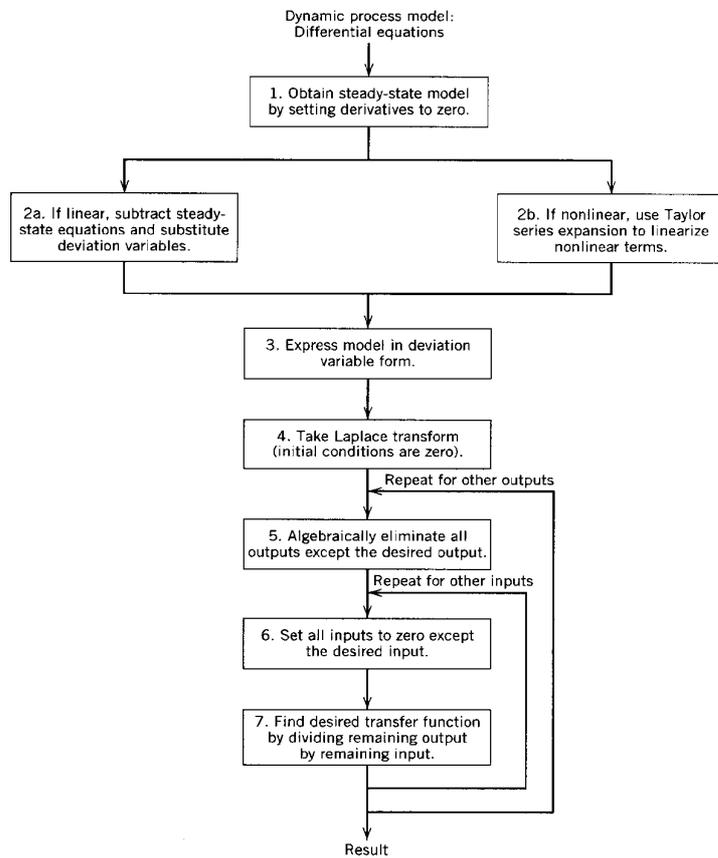


Figure 4.5 Procedure for developing transfer function models.

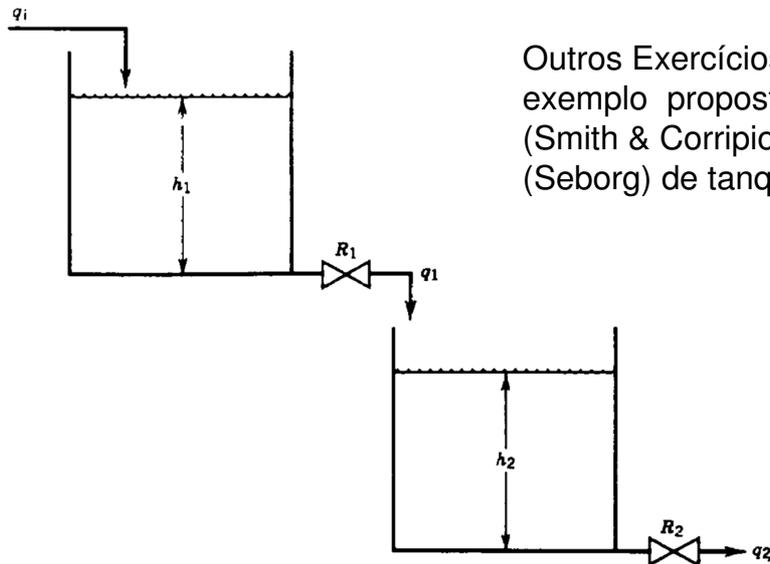


Figure 4.3. Schematic diagram of two liquid surge tanks in series.

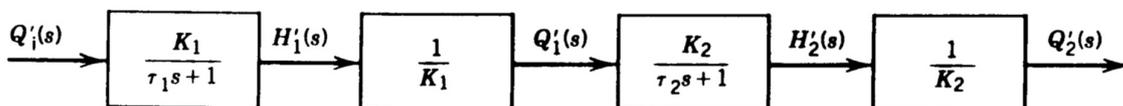


Figure 4.4. Input-output model for two liquid surge tanks in series.