UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA

EQE776 Modelagem e Simulação de Processos

Aula 02. Modelagem matemática (parte 2)

Professor: Roymel Rodríguez Carpio
E-mail: roymel@eq.ufrj.br

Recapitulando

- O modelo matemático;
- Classificação das variáveis em modelos de processos;
- Modelos teóricos e empíricos;
- Equações constitutivas e leis de conservação;

Temas da aula

- Modelos lineares e não lineares;
- Modelos determinísticos e estocásticos;
- Modelos estacionários e dinâmicos;
- Modelos concentrados e distribuídos;
- Adimensionamento de modelos;

Modelos lineares e não lineares

Um modelo é linear quando satisfaz a seguinte propriedade:

Sejam $y^T = [y_1,\ y_2,\ y_3, \dots\ y_n]$ o conjunto de variáveis dependentes,
Sejam $x^T = [x_1,\ x_2,\ x_3, \dots\ x_m]$ o conjunto de variáveis independentes,
Seja, ainda, o modelo matemático explicito na forma:

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2, x_3, \dots\ x_m) \\ f_2(x_1, x_2, x_3, \dots\ x_m) \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, x_3, \dots\ x_m) \end{bmatrix} = f(x)$$

Dados quaisquer escalares α e β,o modelo é linear se :

$$f(\alpha z + \beta w) = \alpha f(z) + \beta f(w)$$

Modelos lineares e não lineares

A definição de modelo linear é extremamente importante porque os modelos lineares, via de regra, permitem a obtenção de soluções analíticas para os problemas de simulação, otimização e estimação de parâmetros.

Exemplo 1

Verifique se os seguintes modelos são lineares ou não lineares:

a) $f(x) = 2x$

b) $g(x) = 3x^2$

$$\left.\begin{aligned} f(\alpha z + \beta w) &= 2(\alpha z + \beta w) \\ \alpha f(z) + \beta f(w) &= \alpha 2z + \beta 2w = 2(\alpha z + \beta w) \end{aligned}\right\} \text{a) Linear}$$

$$\left.\begin{aligned} g(\alpha z + \beta w) &= 3(\alpha z + \beta w)^2 = 3(\alpha^2 z^2 + 2\alpha z \beta w + \beta^2 w^2) \\ \alpha g(z) + \beta g(w) &= \alpha 3z^2 + \beta 3w^2 = 3(\alpha z^2 + \beta w^2) \end{aligned}\right\} \text{b) No linear}$$

Modelos determinísticos e estocásticos

Modelos determinísticos: são aqueles que associam a cada condição de entrada um resultado experimental bem definido.

Modelos estocásticos: associam a cada condição de entrada um conjunto de possíveis resultados, cada qual com certa probabilidade de ocorrer.

Exemplo 2

Imagine um reator em batelada onde acontece a seguinte reação:

$$2A + 3B \rightarrow C$$

Sabe-se que inicialmente são colocados no reator 5 mols de A e 10 mols de B. Determine os moles de C produzidos sabendo que:

a) A conversão da reação é 0,65.

b) A conversão da reação obedece a uma distribuição normal com media 0,65 e desvio padrão 0,01.

Exemplo 2 (solução)

Pela estequiometria da reação e pela quantidade de moles colocados inicialmente de A e B, é possível identificar que A é o reagente limitante. Do mesmo modo identifica-se que por cada 2 mols de A que reagem é formado 1 mol de C.

$$n_{Cf} = n_{Ci} + \frac{n_{Ai} - n_{Af}}{2}$$

$$x = \frac{n_{Ai} - n_{Af}}{n_{Ai}} \rightarrow \left(n_{Ai} - n_{Af}\right) = x\, n_{Ai}$$

$$n_{Cf} = n_{Ci} + \frac{x\, n_{Ai}}{2} = 0 + \frac{x\, n_{Ai}}{2}$$

$$n_{Cf} = \frac{x\, n_{Ai}}{2}$$

Esta equação é aplicável para os dois casos, porém no segundo caso o valor de x não é um valor fixo, pois presenta incerteza.

Exemplo 2 (solução)

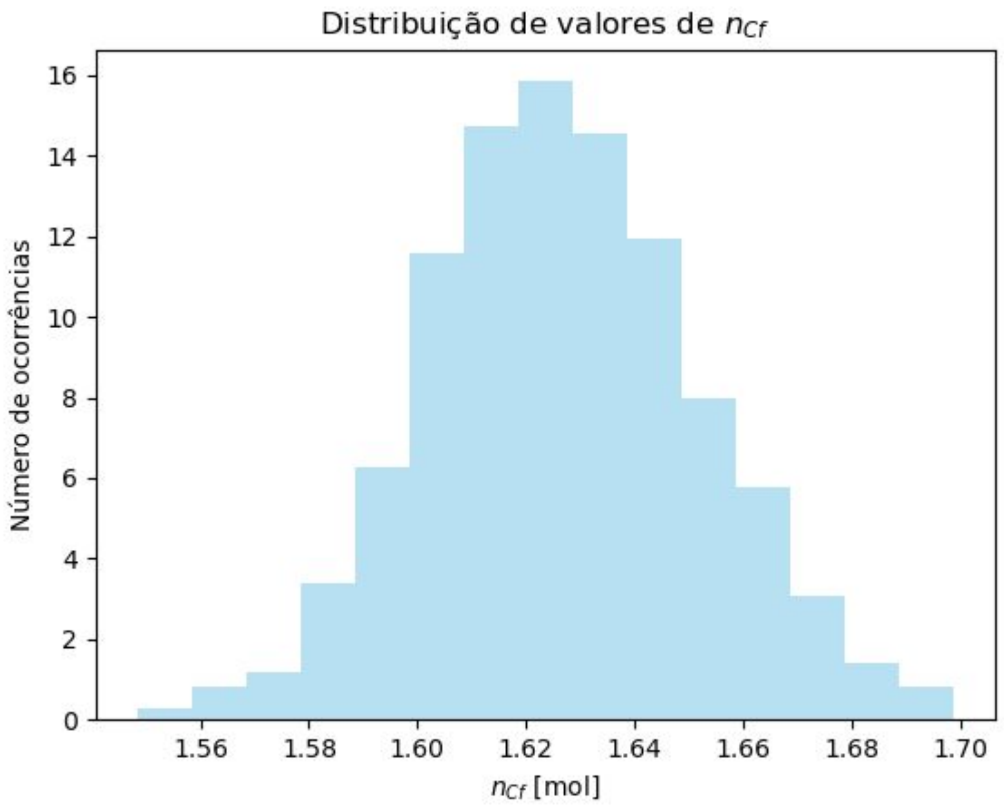
Modelo determinístico:

$$n_{Cf} = \frac{x\, n_{Ai}}{2} = \frac{0,65*5}{2} = 1,625 \text{ mol}$$

Modelo estocástico:

$$n_{Cf} = \frac{\mathrm{E}(x)\, n_{Ai}}{2}$$

Ver solução em Python!



Modelos estacionários e dinâmicos

Modelo estacionário: O modelo é chamado de estacionário quando as variáveis não mudam no tempo. São descritos por sistemas de equações algébricas. O desenvolvimento de projetos de máquinas e equipamentos em geral parte do pressuposto do comportamento estacionário, para que seja possível determinar as dimensões ótimas do equipamento e a condição ótima de operação.

Modelo dinâmico: O modelo é dito dinâmico quando uma ou mais variáveis do modelo mudam no tempo. São descritos por sistemas de equações algébrico-diferenciais. Aplicações em controle de processos, por exemplo, requerem estruturas dinâmicas para análise, uma vez que se procura detectar e corrigir problemas que possam ocorrer com o processo ao longo do tempo.

Exemplo 3

Um tanque de mistura é alimentado por duas correntes, tendo uma única corrente de saída. Pela primeira corrente de entrada é fornecido o componente **A** puro, enquanto que o componente **B** puro é alimentado na segunda corrente de entrada. Ambas correntes de alimentação tem uma vazão de 2 m^3/h. Sabe-se que a densidade são as seguintes: ρ_A = 1200 kg/m^3 e ρ_B = 800 kg/m^3. Inicialmente tanque encontra-se totalmente cheio, contendo 500 kg de cada componente.

Realize a modelagem e simulação desse equipamento considerando:

a) Regime dinâmico
b) Regime estacionário

Exemplo 3 (solução)

Modelo dinâmico:

$$\frac{dm_A}{dt} = Fin_A - Fout_A = Qin_A\ \rho_A - Fout\ x_A$$

$$\frac{dm_B}{dt} = Fin_B - Fout_B = Qin_B\ \rho_B - Fout\ x_B$$

$$M = m_A + m_B$$

$$\frac{dM}{dt} = 0 = Qin_A\ \rho_A + Qin_B\ \rho_B - Fout$$

$$x_A = \frac{m_A}{M}$$

$$x_B = \frac{m_B}{M}$$

Ver simulação em EMSO!

Exemplo 3 (solução)

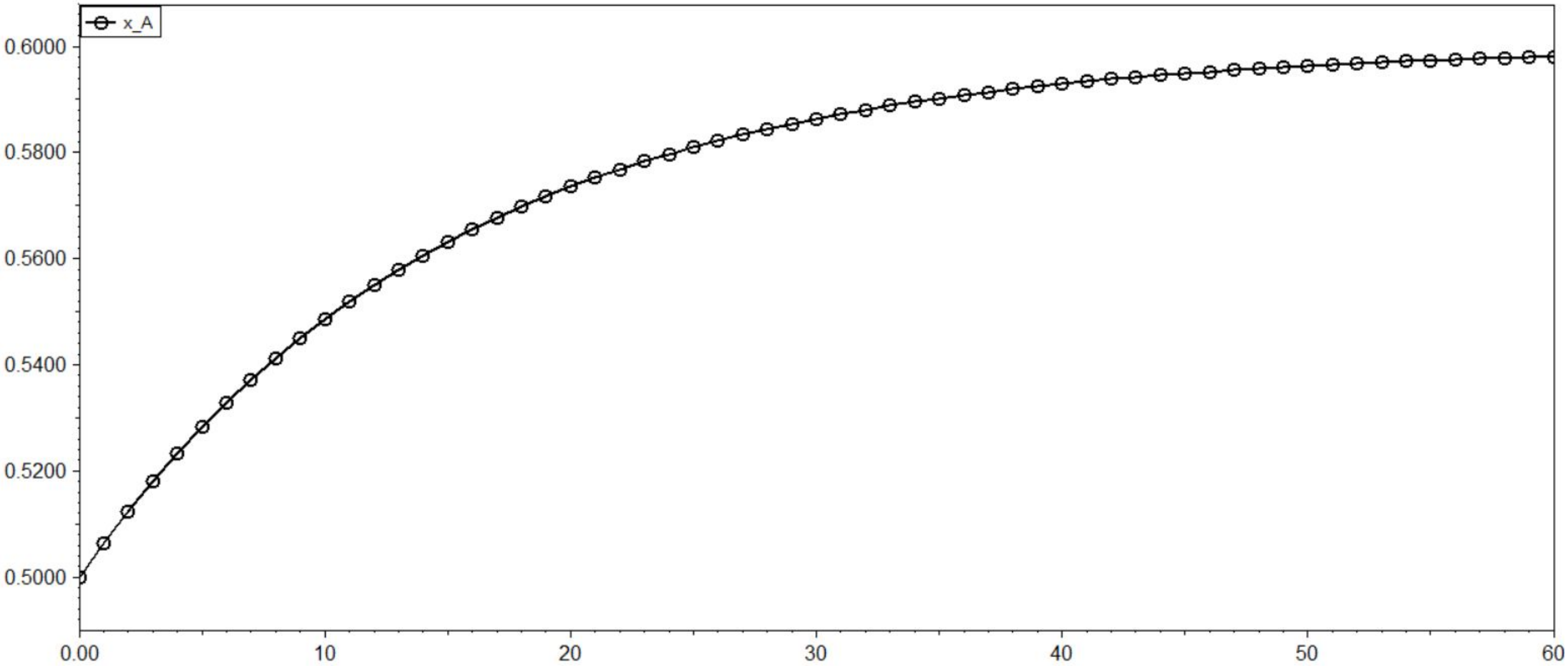
Modelo dinâmico:

```
using "types";

Model TK_mixer_din

    PARAMETERS
    rho_A as positive (Unit='kg/m^3');
    rho_B as positive (Unit='kg/m^3');

    VARIABLES
    Qin_A as positive (Unit='m^3/h');
    Qin_B as positive (Unit='m^3/h');
    Fout  as positive (Unit='kg/h');
    m_A as positive (Unit='kg');
    m_B as positive (Unit='kg');
    M as positive (Unit='kg');
    x_A as fraction;
    x_B as fraction;

    EQUATIONS

    diff(m_A) = Qin_A*rho_A - Fout*x_A;
    diff(m_B) = Qin_B*rho_B - Fout*x_B;

    M = m_A + m_B;
    0*'kg/h' = Qin_A*rho_A + Qin_B*rho_B - Fout ;

    x_A = m_A/M;
    x_B = m_B/M;

end
```

```
FlowSheet Misturador_din

    DEVICES
    Mixer as TK_mixer_din;

    SET
    Mixer.rho_A = 1200*'kg/m^3';
    Mixer.rho_B = 800*'kg/m^3';

    SPECIFY
    Mixer.Qin_A = 2*'m^3/h';
    Mixer.Qin_B = 2*'m^3/h';


    INITIAL
    Mixer.m_A = 500*'kg';
    Mixer.m_B = 500*'kg';

    OPTIONS
    Dynamic = true;
    TimeUnit = 'min';
    TimeStart = 0;
    TimeStep = 1;
    TimeEnd = 60;

end
```

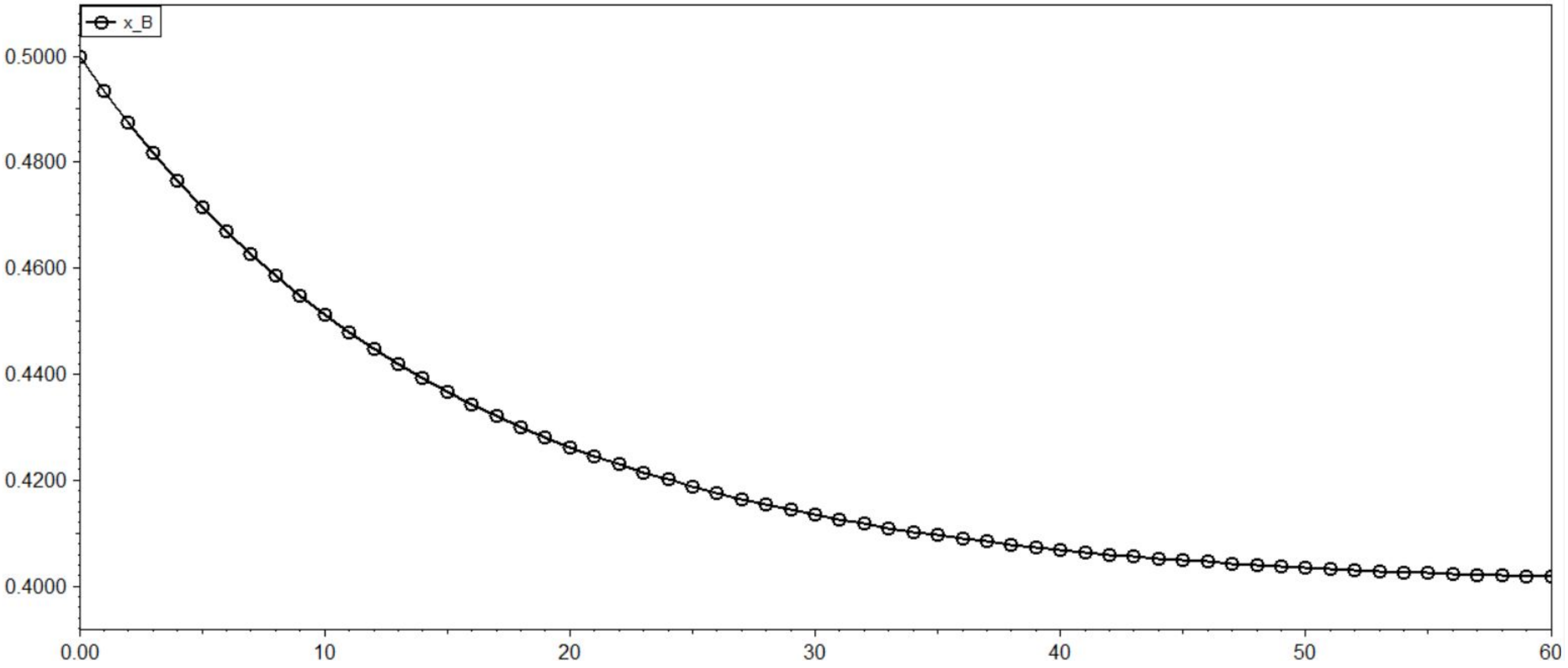
Exemplo 3 (solução)

Modelo dinâmico:



Exemplo 3 (solução)

Modelo dinâmico:



Exemplo 3 (solução)

Modelo estacionário:

$$0 = Fin_A - Fout_A = Qin_A \ \rho_A - Fout \ x_A$$

$$0 = Fin_B - Fout_B = Qin_B \ \rho_B - Fout \ x_B$$

$$0 = Qin_A \ \rho_A + Qin_B \ \rho_B - Fout$$

Ver simulação em EMSO!

Exemplo 3 (solução)

Modelo estacionário:

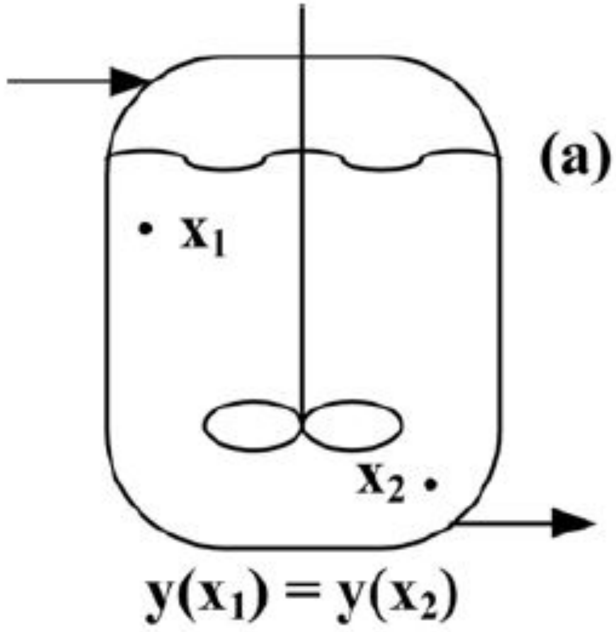
```
Model TK_mixer_ss

    PARAMETERS
    rho_A as positive (Unit='kg/m^3');
    rho_B as positive (Unit='kg/m^3');

    VARIABLES
    Qin_A as positive (Unit='m^3/h');
    Qin_B as positive (Unit='m^3/h');
    Fout  as positive (Unit='kg/h');
    x_A as fraction;
    x_B as fraction;

    EQUATIONS

    0*'kg/h' = Qin_A*rho_A - Fout*x_A;
    0*'kg/h' = Qin_B*rho_B - Fout*x_B;
    0*'kg/h' = Qin_A*rho_A + Qin_B*rho_B - Fout;

end
```

```
FlowSheet Misturador_ss

    DEVICES
    Mixer as TK_mixer_ss;

    SET
    Mixer.rho_A = 1200*'kg/m^3';
    Mixer.rho_B = 800*'kg/m^3';

    SPECIFY
    Mixer.Qin_A = 2*'m^3/h';
    Mixer.Qin_B = 2*'m^3/h';

    OPTIONS
    Dynamic = false;

end
```

$$x_A = 0{,}60$$
$$x_B = 0{,}40$$

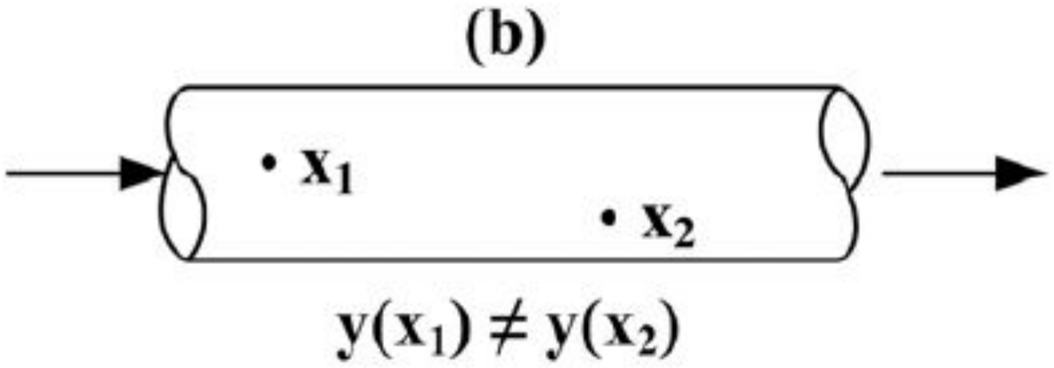
Modelos concentrados e distribuídos

Modelo concentrado: As variações espaciais são desprezíveis, pelo que as propriedades não mudam com a posição. Geralmente são constituídos por equações algébricas ou equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, cuja solução numérica é mais simples. Exemplo: reator de tanque agitado contínuo (CSTR).



Modelos concentrados e distribuídos

Modelo distribuído: As variações espaciais são importantes e não podem ser desprezadas. Nesse caso há heterogeneidade espacial. Geralmente estão formados por equações diferenciais parciais, cuja resolução requer o uso de procedimentos numéricos bastante específicos. Exemplo: reator tubular de fluxo pistão (PFR)



Adimensionamento de modelos

O adimensionamento de variáveis e equações de modelos tem os seguintes objetivos básicos:

- Simplificar a notação.
- Dar um significado às variáveis que não seja atrelado a um determinado sistema de unidades.
- Introduzir grupamentos adimensionais relevantes.
- Facilitar, em alguns casos, a implementação de métodos numéricos para a resolução das equações.

Deve facilitar a análise do modelo, e os grupos adimensionais criados devem dar uma ideia mais clara de ordens de grandeza entre os termos presentes em uma dada equação.

Adimensionamento de modelos

<u>Princípios gerais</u>:

- Se o efeito da variação de uma certa quantidade deve ser analisado, esta quantidade não deve aparecer em variável adimensional alguma, deve aparecer em apenas um parâmetro adimensional.
- As variáveis dependentes adimensionais devem estar aproximadamente na faixa entre zero e um, e os parâmetros adimensionais devem mostrar as magnitudes relativas dos vários termos das equações.
- A menos que se pretenda variar uma dimensão física, as variáveis independentes adimensionais devem estar contidas em intervalos finitos fixos (frequentemente e convenientemente nos intervalos [0,1], [-π,π] ou similares).

Dúvidas?

Recados importantes

- Próxima aula: Modelagem e simulação de reator CSTR não isotérmico

- Os slides desta aula estarão disponíveis no Classroom da disciplina.

“Ensinar não é transferir conhecimento, mas criar as possibilidades para a sua própria produção ou a sua construção.”

Paulo Freire