

## DESENVOLVIMENTO DE SIMULAÇÕES EM AMBIENTES COMPUTACIONAIS DE LICENÇA GRATUITA PARA SUPORTE AO ENSINO DE ENGENHARIA QUÍMICA: EXEMPLO DE UM CSTR ISOTÉRMICO.

Ana Flávia Baliski Pereira (PIBIC/CNPq), Caliane Bastos Borba Costa (Orientador), e-mail: anaflaviabalisk@gmail.com.

Universidade Estadual de Maringá / Centro de Tecnologia /Maringá, PR.

**Área e subárea do conhecimento: Processos Industriais de Engenharia Química.**

**Palavras-chave:** simulação, software, licença gratuita.

### Resumo:

As simulações de processos permitem uma maior compreensão dos mesmos. Por outro lado, os programas comerciais de simulação de processos têm se tornado cada vez mais caros e de mais difícil acesso quando se tem em conta limitações de orçamento. Pensando nisso, esse trabalho, que faz parte de um projeto de Iniciação Científica que tem como objetivo o incentivo ao uso de ferramentas gratuitas de simulação em atividades fim da universidade, busca explorar, particularmente para o caso de um CSTR isotérmico, o uso do *Scilab*, ambiente computacional de licença gratuita utilizado para simulação dinâmica de processos. Para o exemplo em questão, foi feita a modelagem matemática do sistema e o seu código de programação foi elaborado de modo a explorar as influências de algumas perturbações no seu comportamento. Os resultados mostraram como esse sistema se comporta frente a perturbações na taxa de diluição, o que evidencia a relevância do projeto para aplicação no ensino de Engenharia Química podendo atuar como suporte aos acadêmicos nas disciplinas de Operações Unitárias e Análise, Simulação e Controle de Processos.

### Introdução

A representação dos processos através de equações matemáticas é conhecida como modelagem de processos. A simulação de processos utiliza modelos matemáticos com o objetivo de testar diversas possibilidades de configuração e/ou condições operacionais, buscando um processo ótimo ou prevendo o comportamento de sistemas em diferentes condições operacionais (BEQUETTE, 2003).

O avanço computacional abriu caminho para o surgimento de soluções de engenharia baseadas em modelos complexos, não restritos a processos estacionários, mas incluindo o uso de simuladores comerciais dinâmicos

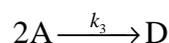
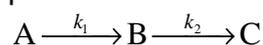
aplicáveis a níveis industriais, além do desenvolvimento de *softwares* de licença gratuita utilizados para simulação.

Esse trabalho apresenta um dos casos de estudo desenvolvidos em um projeto de Iniciação Científica, que realizou simulações estáticas e dinâmicas, em *softwares* gratuitos, e que foi responsável pela elaboração de um material digital, com descrições, orientações e indicações de situações interessantes de serem aplicadas, para servir como suporte ao ensino de Engenharia Química.

Assim, em concordância com o intuito do projeto mencionado, o trabalho em questão apresenta o caso de um reator contínuo perfeitamente agitado (CSTR) isotérmico e reação de van de Vusse, sujeito a perturbações geradas pelo usuário. O objetivo desse caso é analisar como algumas alterações no valor da taxa de diluição alteram o comportamento desse sistema.

### Materiais e métodos

A reação de Van de Vusse é descrita pelo seguinte esquema, em que B é o produto de interesse.



O sistema reacional de van de Vusse tem algumas características especiais: o ganho de estado estacionário muda de sinal conforme o ponto de operação e isso representa um problema para que controladores clássicos (lineares) sejam utilizados para estabilizar o sistema de modo satisfatório.

As equações do modelo para esse sistema reacional foram desenvolvidas, assumindo que só haja A na alimentação do CSTR e que a densidade e o volume sejam constantes. As Equações 1 e 2 descrevem o balanço material para os componentes A e B.

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F}{V} (C_{Af} - C_A) - k_1 C_A - k_3 C_A^2 \quad (1)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = -\frac{F}{V} C_B + k_1 C_A - k_2 C_B \quad (2)$$

Se o interesse está em determinar  $C_A$  e  $C_B$ , precisa-se apenas resolver essas equações (note que essas equações não possuem  $C_C$  ou  $C_D$ ).

Para obter a representação do sistema em espaço de estados, segundo a Equação 3 (em que o subscrito s indica estado estacionário e  $C_{Afs}$  representa concentração da alimentação no estado estacionário), foi preciso fazer a linearização de algumas equações.

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}} &= \begin{bmatrix} -\frac{F_s}{V} - k_1 - 2k_3 C_{As} & 0 \\ k_1 & -\frac{F_s}{V} - k_2 \end{bmatrix} \mathbf{x} + \begin{bmatrix} C_{Afs} - C_{As} \\ -C_{Bs} \end{bmatrix} u \\ \mathbf{y} &= [0 \quad 1] \mathbf{x} \end{aligned} \quad (3)$$

Com o código desenvolvido, podem ser gerados os gráficos de como os valores de  $C_{As}$  e  $C_{Bs}$  variam com a velocidade espacial de operação. Esses gráficos são úteis para que o usuário consiga avaliar, para o sistema especificado pelos parâmetros estipulados por ele, qual valor de velocidade espacial (taxa de diluição) que leva ao máximo da concentração de B.

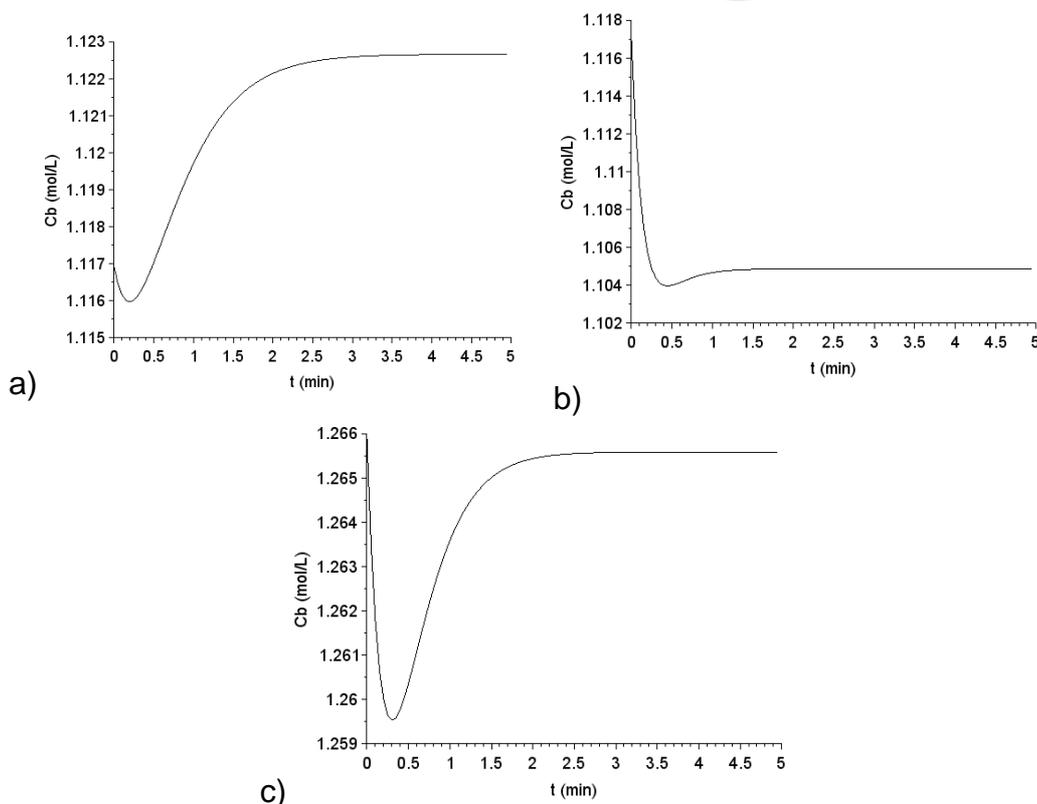
Para demonstrar as características especiais de um sistema reacional de van der Vusse, é interessante apresentar o comportamento dinâmico do sistema, estando ele operando em velocidade espacial ótima (que leva à máxima concentração de B), menor do que a ótima e maior do que a ótima. A dinâmica desse sistema foi simulada nessas três diferentes situações a fim de obter como a concentração de B, que é o produto de interesse, varia ao longo do tempo de acordo com diferentes perturbações aplicadas no valor da taxa de diluição. Como exemplo, a simulação foi executada utilizando os mesmos valores daqueles utilizados no exemplo do Módulo 7 resolvido no livro do Bequette (2003). Esses valores são:  $k_1 = 5/6 \text{ min}^{-1}$ ;  $k_2 = 5/3 \text{ min}^{-1}$ ;  $k_3 = 1/6 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$ ;  $C_{Afs} = 10 \text{ mol/L}$ .

## Resultados e Discussão

Os gráficos das respostas dinâmicas para as três situações mencionadas na seção anterior, frente a pequenas perturbações na taxa de diluição, estão apresentados na Figura 1. Ao Analisar os gráficos da Figura 1 e escrever as funções de transferência correspondentes a cada situação (a partir da Equação 3), pode-se observar que o sistema operando em velocidade espacial menor do que a ótima (Figura 1a) tem um zero positivo, o que é característico de sistemas que apresentam resposta inversa. Um sistema com resposta inversa é aquele em que a resposta a um sinal de entrada parte inicialmente no sentido contrário àquele em que finalmente vai se estabelecer, e é exatamente isso que se observa na Figura 1a. Este tipo de sistema é o resultado de uma determinada combinação de subsistemas envolvendo ganhos e constantes de tempo diferentes. No caso analisado, tem-se um sistema resultante de dois sistemas de primeira ordem combinados, sujeito a uma perturbação degrau. Ainda, na função de transferência dessa situação, nota-se que o ganho é positivo, o que está de acordo com a resposta dinâmica observada.

A Figura 1b (sistema operando em velocidade espacial maior do que a ótima) apresenta um zero negativo, com a mesma magnitude daquele obtido na situação anterior. Como o zero é negativo, não se observa resposta inversa (embora tenha partido do mesmo valor de estado estacionário para a concentração de B). Ademais, o ganho é negativo e, de fato, a Figura 1b é característica de um sistema sem resposta inversa e com ganho negativo.

Quando se opera na condição ótima (Figura 1c), não há mudança na concentração de B no novo estado estacionário, em relação ao estado estacionário anterior, o que é consistente com o fato de a função de transferência apresentar um ganho igual a zero.



**Figura 1:** a) Resposta a uma perturbação de 1,75% na taxa de diluição para uma operação com taxa de diluição menor do que a ótima; b) Resposta a uma perturbação de 3,48% na taxa de diluição para uma operação com taxa de diluição maior do que a ótima; c) Resposta a uma perturbação de 3,48% na taxa de diluição para uma operação com taxa de diluição ótima.

## Conclusões

O estudo de caso desenvolvido foi bem explorado, de modo que, para as modificações realizadas pelo usuário, gráficos ilustrativos da resposta dinâmica/perfil estacionário são exibidos, permitindo ao usuário a verificação do comportamento desse sistema. Por utilizar um *software* gratuito, o uso de simulação para análise dessa operação em específico independe de recursos para aquisição de programas comerciais e estimula o emprego de ferramentas computacionais nas atividades de ensino.

## Agradecimentos

As autoras agradecem a UEM e o CNPq, que tornaram possível a existência e o desenvolvimento desse projeto.

## Referências

BEQUETTE, B. W. **Process Control: Modeling, Design and Simulation**. Prentice Hall International Series in Physical and Chemical Engineering Sciences, 2003.