

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE SISTEMAS QUÍMICOS

**DINÂMICA E CONTROLE DE UM SISTEMA DE INTEGRAÇÃO ENERGÉTICA EM
PROCESSOS QUÍMICOS**

Autora: Maria Marta Netto

Orientador: Prof. Dr. João A. F. R. Pereira

Co-Orientadora: Profa. Dra. Teresa M. K. Ravagnani

Tese submetida à comissão de Pós- Graduação da
Faculdade de Engenharia Química - UNICAMP
como parte dos requisitos necessários para
obtenção do Grau de Mestre em Engenharia
Química.

Campinas - SP - Brasil

Dezembro - 1991

À minha mãe,

Ao Bruno e a nossa filha.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. João Alexandre F. R. Pereira pela dedicada orientação e apoio ao desenvolvimento deste trabalho.

A Profa. Dra. Teresa M. K. Ravagnani pela colaboração e incentivo prestados.

A Prof. Dra. Sandra Lúcia da Cruz e ao Prof. Dr. Sérgio P. Ravagnani pelo interesse e amizade presentes.

Aos Amigos do curso, sem os quais este trabalho teria sido muito mais difícil.

A CAPES pela concessão da bolsa para realização deste trabalho.

RESUMO

O presente trabalho apresenta um estudo do comportamento dinâmico de um sistema químico contínuo energeticamente integrado, visando o controle do mesmo.

Um sistema compreendido por um reator CSTR com reação exotérmica e uma coluna de destilação foi utilizado, sendo o calor produzido no processo reacional empregado como fonte de energia para o reator da coluna.

O sistema de controle desenvolvido no estudo foi baseado em técnicas clássicas de análise de controle por realimentação. Um modelo de controle típico para destilação contínua e para o reator foi proposto para a avaliação da dinâmica dos sistemas em malha fechada.

Para a configuração de controle do sistema reator/coluna integrados energeticamente considerou-se as malhas de controle dos processos individuais. A simulação do sistema integrado foi realizada através do processamento simultâneo das duas unidades, após ser imposta uma perturbação no processo reacional. Assim, foi possível observar o comportamento do processo integrado, avaliando o sistema de controle proposto e a aplicabilidade da técnica de integração energética nos sistemas químicos considerados.

ÍNDICE

	pag.
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 - ANÁLISE DA LITERATURA	4
2.1 - INTRODUÇÃO	5
2.2 - ASPECTOS GERAIS	5
2.3 - GENERALIDADES DA DINÂMICA E CONTROLE DE PROCESSOS	12
2.3.1 - Sistema de Controle por Realimentação	18
2.4 - CONCLUSÃO	26
CAPÍTULO 3 - MODELAGEM MATEMÁTICA	27
3.1 - INTRODUÇÃO	28
3.2 - DINÂMICA DE UMA DESTILAÇÃO CONTÍNUA	28
3.2.1 - Hipóteses Simplificadoras do Modelo Matemático	29
3.2.2 - Equações do Balanço de Massa do Modelo Transiente	29
3.2.3 - Equilíbrio Líquido-Vapor	32
3.2.4 - Acúmulo Molar de Líquido no Prato	33
3.2.5 - Equações do Balanço de Energia do Modelo Transiente	34
3.3 - CONTROLE DE UMA DESTILAÇÃO CONTÍNUA	36
3.4 - REATOR CSTR NÃO - ISOTÉRMICO	43
3.4.1 - Apresentação do Modelo	43
3.4.2 - Equações de Balanço de Massa Transiente	44
3.4.3 - Equações de Balanço de Energia Transiente	45
3.5 - CONTROLE DE UM REATOR CSTR	46
3.6 - CONCLUSÃO	48

CAPÍTULO 4 - SIMULAÇÃO E RESULTADOS	50
4.1 - INTRODUÇÃO	51
4.2 - SIMULAÇÃO DO MODELO DE CONTROLE DO BALANÇO MATERIAL DE UMA DESTILAÇÃO CONTÍNUA	51
4.3 - SIMULAÇÃO DO MODELO DA DINÂMICA DE UMA DESTILAÇÃO CONTÍNUA	56
4.3.1 - Apresentação	56
4.3.2 - Dados de Entrada	57
4.4 - SIMULAÇÃO DO MODELO DA DINÂMICA DE UMA DESTILAÇÃO CONTÍNUA COM CONTROLE	64
4.4.1 - Introdução ao Esquema de Controle	64
4.4.2 - Função de Controle do Processo	64
4.4.3 - Ajuste dos Parâmetros do Controlador PI da Coluna	66
4.5 - SIMULAÇÃO DO MODELO DO REATOR CSTR NÃO-ISOTÉRMICO COM CONTROLE	76
4.5.1 - Dinâmica do Modelo em Malha Aberta	76
4.5.2 - Ajuste do Parâmetro do Controlador P do Reator	80
4.6 - SISTEMA REATOR/COLUNA INTEGRADOS ENERGETICAMENTE	86
4.6.1 - Apresentação do Esquema para Integração Energética	86
4.6.2 - Dinâmica do Sistema Reator/Coluna Integrados	86
4.7 - CONCLUSÃO	92
CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES	93
5.1 - CONCLUSÕES	94
5.2 - SUGESTÕES	95

ANEXO 1 - Propriedades Físicas e Termodinâmicas	96
ANEXO 2 - Diagrama do Programa CONTROL.C	100
ANEXO 3 - Diagrama do Programa DINACOL.C	102
ANEXO 4 - Diagrama do Programa REA.C	104
ANEXO 5 - Sistema Reator/Coluna Integrados	106
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	109
NOMENCLATURA	114

CAPÍTULO - 1

INTRODUÇÃO

1- INTRODUÇÃO

Estudos realizados em vários países chegaram à conclusão que grande parte da energia consumida na indústria química é usada na geração de vapor, sendo que a maior parcela deste vapor serve para aquecer os refeedores das colunas de destilação.

Este excessivo consumo de energia característico dos equipamentos de destilação pode ser justificado fundamentalmente pela grande necessidade de aquecimento aliada à baixíssima eficiência termodinâmica apresentada por eles.

Principalmente para os processos de destilação, apesar das técnicas de conservação de energia, tais como integração energética, recompressão de vapor e utilização de configurações complexas, serem reconhecidas como mais eficazes, elas são pouco usadas nos processos químicos tradicionais.

Em virtude do alto custo dos combustíveis provocado pela crise energética das últimas décadas e devido ao enorme consumo de energia concentrado numa única operação industrial, o interesse de pesquisas em técnicas de integração energética entre duas unidades distintas de processamento tem aumentado.

Inicialmente, a maioria dos trabalhos sobre integração energética entre unidades de uma planta química foram direcionados

para a caracterização do estado estacionário. Assim, o estudo do comportamento dinâmico e de controle de tais sistemas oferece uma compreensão mais geral das alternativas de projeto de integração energética e apresenta uma visão mais completa da importância dessa técnica, não só do ponto de vista econômico, mas também tecnológico.

O presente trabalho tem como finalidade desenvolver uma linha de estudo do comportamento dinâmico de dois sistemas químicos contínuos, energeticamente integrados. Especificamente escolheu-se para avaliação, um reator CSTR não-isotérmico com reação exotérmica como fonte de energia para uma coluna de destilação.

Inicialmente as duas unidades foram estudadas separadamente através de modelagem matemática e simulação computacional e em ambas foram empregadas técnicas clássicas de controle de processos para a determinação de uma malha de controle adequada aos propósitos de integração energética objetivados.

Neste estudo serão apresentados os modelos utilizados para simulação dos processos e os resultados obtidos do controle proposto. Tais resultados serão analisados visando sempre uma melhor forma de atender as exigências energéticas da coluna quando o sistema for integrado.

CAPÍTULO - 2
ANÁLISE DA LITERATURA

2 - ANÁLISE DA LITERATURA

2.1 - INTRODUÇÃO

No presente capítulo será apresentada uma revisão dos trabalhos sobre conservação de energia os quais em sua maioria envolvem processos de destilação. A técnica de integração energética em sistemas químicos é destacada e uma síntese dos estudos propostos é feita mostrando evolutivamente a importância de uma análise cada vez mais minuciosa sobre o assunto.

Uma segunda parte envolve fundamentalmente, conceitos sobre controle e dinâmica de processos que são de indispensável importância para a compreensão dos objetivos deste trabalho.

2.2 - ASPECTOS GERAIS

Nas duas últimas décadas o alto custo dos combustíveis, determinou uma linha de estudos voltada à economia de energia nos processos químicos e petroquímicos. Os processos de destilação são responsáveis pela maior parte do consumo energético das plantas industriais, sendo portanto, alvo importante de pesquisadores da área de conservação de energia.

A maioria das técnicas desenvolvidas para fornecerem sistemas de destilação com maior eficiência, segundo Tyreus e Luyben (1976), requerem maior capital de investimento em relação aos modelos convencionais. Esse aumento aparente do custo, pode

ser justificado pela quantidade significativa de energia recuperada, a qual elas proporcionam. Apesar de já serem conhecidas há muito tempo, as várias configurações de conservação de energia nos processos de destilação, só tornaram-se atrativas recentemente e o caminho para o desempenho das mesmas recaem sobre duas categorias principais:

- Métodos de Bombas de Calor e Recompressão de Vapor
- Métodos de Integração Energética ou Múltiplo-Efeito

O método de Bomba de Calor e Recompressão de Vapor consiste em usar o vapor de topo da coluna como fonte de calor para o refeedor da mesma. King (1971), ilustra diversos esquemas onde são aplicados o método. Segundo o autor casos específicos desse assunto são analisados por vários pesquisadores, entre os quais destacam-se Null(1976), Kaiser et al(1977), Shaner(1978) e outros. Cheng e Luyben (1985) fizeram observações sobre o grande trabalho de compressão requerido nesses esquemas com bombas de calor para diferenças consideráveis de temperatura no processo. Devido a esse problema o método não é usado para separações multicomponentes ou sistemas com volatilidades altas.

O método de Integração Energética entre colunas de destilação, resume-se em usar o calor latente do vapor do topo de uma coluna como suprimento para o refeedor de outra coluna de uma mesma configuração. Cheng e Luyben (1985) citaram alguns trabalhos que ilustram o uso de múltiplo-efeito e a eficiência conseguida no seu emprego. Entre outras possibilidades , os

autores destacam a utilização de configurações complexas (pré-fracionadores, colunas com correntes laterais), na economia de energia comparando-as aos modelos convencionais. A principal preocupação do trabalho foi a combinação de integração energética em colunas de destilação com configurações complexas. Onze situações foram exploradas para a separação da mistura BTX (benzeno, tolueno e m-xileno) verificando sempre o consumo energético. Os resultados mostraram uma redução de até 50% no consumo total de energia.

As metodologias empregadas na maioria dos trabalhos a respeito da integração energética entre unidades de um processo, têm-se preocupado, de forma geral, somente em caracterizar o comportamento do estado estacionário. Em complementação a esses estudos, as características dinâmicas e de controle desses sistemas devem ser desenvolvidas também. Tyreus e Luyben (1976) referiram-se a algumas pesquisas sobre sistema de controle, as quais abrangeram o assunto apenas qualitativamente, não havendo nenhum detalhamento da parte quantitativa. Visando a sua importância, ele atentou-se para o estudo extenso da simulação dinâmica e de controle do modelo de destilação múltiplo-efeito com integração energética. O seu trabalho consta da análise de dois sistemas binários específicos, propileno-propano e metanol-água. Em ambos, houve a utilização de duas colunas tal que a primeira operasse com pressão maior do que a segunda. A configuração básica estipulou apenas uma entrada de calor no processo, sendo esse fornecido ao refulvador da coluna de alta pressão. Para cada

sistema foram apresentados esquemas de controle e possíveis arranjos alternativos buscando sempre maior eficiência.

Alguns tipos de perturbações foram aplicadas aos dois sistemas no tempo zero, analisando-se o comportamento dinâmico de variáveis específicas e a controlabilidade, isto é, a facilidade ou dificuldade de controle apresentada por cada arranjo estudado. Os resultados obtidos para o sistema propileno-propano mostraram que o melhor esquema de controle para sistemas com as mesmas características desses, envolvem configurações que devem ser naturalmente desacopladas. Isso pode ser conseguido através do uso de condensadores e refeedores auxiliares, apesar de haver necessidade de maior capital de investimento. No caso do sistema metanol-água, que apresenta produtos de alta pureza e conseqüentemente, alto grau de não-linearidade, o único esquema que efetivamente abrangeu a maior variedade de perturbações, foi a utilização de condensador e refeedor auxiliar, tornando o processo mais flexível e mais facilmente controlável.

As pesquisas universitárias têm-se esforçado em obter uma compreensão mais generalizada para as vantagens e desvantagens das várias alternativas de projeto de integração energética e suas áreas de maior aplicabilidade. Ding e Luyben (1990) expandiram seus estudos da dinâmica e controle para sistemas que apresentam alto grau de complexidade e são altamente interativos. Segundo os autores, o projeto dinâmico e controle desses sistemas mais complexos não receberam a atenção dada ao estado-estacionário, apesar de ser igualmente importante, já que a controlabilidade

desses sistemas não é totalmente garantida. Várias referências de trabalhos são apresentadas, as quais trazem estudos sobre controle de colunas de destilação integradas energeticamente de forma convencional. Apenas três autores interessaram em proporem estudos da combinação de integração energética com configurações complexas, Lenoff e Morari (1982), Takama et al (1982) e Cheng e Luyben (1985). Como apresentado anteriormente o trabalho de Cheng e Luyben (1985) ficou limitado somente à caracterização do estado-estacionário. Em função disso, Ding e Luyben ampliaram o estudo, verificando a dinâmica e controle do sistema complexamente integrado. Os resultados foram obtidos através da simulação dinâmica do modelo do processo. O esquema complexo foi composto de duas colunas, sendo que a primeira funciona como um pré-fracionador da segunda para a separação ternária da mistura BTX com integração energética reversa. Tal esquema utiliza cerca de 50% da energia necessária à configuração convencional proposta. Foram estudadas as separações de alta e baixa pureza e desenvolvidas malhas de controle tanto para configuração convencional quanto para a configuração complexa, sendo feitas comparações quantitativas do comportamento dinâmico.

Apesar da maioria dos trabalhos sobre conservação de energia concentrarem-se nos sistemas de destilação, foram desenvolvidos estudos de integração energética com outras unidades, caracterizando-se principalmente a estabilidade do processo. Georgakis e Worthey (1978) basearam-se na teoria da perturbação (Kato, 1963) para estudarem as modificações ocorridas

na estabilidade de sistemas resultantes de integração energética. Tendo como finalidade facilitar o desenvolvimento de suas análises eles atentaram ao estudo de dois reatores CSTR 's não-isotérmicos integrados energeticamente, com reações simples, exotérmica ou endotérmica e com taxa de reação genérica.

Duas considerações básicas foram necessárias a fim de tornar os resultados obtidos válidos. A primeira assume que uma das unidades requer uma quantidade de energia e a outra a remoção de energia no processamento. A segunda, assume que as características dinâmicas de ambas as unidades, sejam descritas separadamente por duas equações diferenciais (balanço transiente de massa e de energia). As funções do sistema energeticamente integrado, foram expressas em séries de potência expandidas em relação a medida da integração, isto é, o grau de integração utilizada (parcial ou total). Os coeficientes da série expandida estão relacionados diretamente às características dinâmicas do processo inicialmente desconectado e ao novo fenômeno de causa e efeito introduzidos pelo projeto de integração energética. Isto reduz significativamente cálculos excessivos das características dinâmicas para diferentes níveis de integração. Foi mostrado que sob condições seguras, a integração energética pode aumentar a estabilidade do sistema. Para o reator com reação endotérmica, a integração pode torná-lo mais estável se esta aumentar a inclinação de sua curva de remoção de calor e para o reator com reação exotérmica, quando a inclinação de sua curva de remoção de calor aproximar-se de um valor característico. Foram calculados também, valores aproximados para a quantidade crítica de

integração energética a qual desestabiliza o sistema. Embora o estudo feito esteja detalhado para um sistema de dois CSTR's, a teoria aproximada da perturbação proposta, é aplicável a casos de integração energética entre quaisquer unidades de um processo cujas características dinâmicas possam ser representadas por um conjunto de equações diferenciais, onde esteja incluído balanço energético.

Handogo e Luyben (1987) baseados em vários estudos anteriores a respeito de controle de sistemas com integração energética, desenvolveram um trabalho envolvendo a integração de um sistema reator/coluna. Eles utilizaram um reator com reação exotérmica como fonte de energia requerida no retervedor da coluna de destilação. Dois esquemas de integração energética foram estudados, o processo indireto e o direto. Tais esquemas são comumente encontrados nas plantas químicas industriais. No sistema indireto de integração, uma secção geradora de vapor foi empregada no resfriamento do reator e o vapor produzido foi usado como meio de aquecimento para o retervedor. No sistema direto o próprio líquido do reator aqueceu diretamente o retervedor da coluna. Para ambos os esquemas propostos, foram realizados detalhamentos com base na economia do estado estacionário e do comportamento dinâmico. A primeira preocupação desse trabalho foi estudar os efeitos que uma pequena ou grande diferença de temperatura entre o reator e base da coluna poderiam provocar na estabilidade dinâmica do processo. Com isso, verifica-se em qual situação a integração energética não é mais justificável, ou seja

qual a mínima diferença de temperatura permitida no sistema. O segundo aspecto mais explorado foi a comparação entre o projeto em estado estacionário e o comportamento dinâmico dos esquemas direto e indireto. Um sistema de controle foi desenvolvido tanto para os equipamentos separados como para o processo completo. Cinco tipos de perturbações foram introduzidas no conjunto para análise da interação entre os dois processos. Os valores de controlabilidade e escalabilidade, isto é, a máxima porcentagem de mudanças na qual uma válvula de controle atua sem saturar, foram mostrados. Os autores utilizaram sistemas binários de separação e os controladores foram sintonizados em linha, ou seja, um protótipo do sistema foi montado para se obter os resultados.

Mesmo sendo um assunto altamente importante, tanto do ponto de vista econômico como tecnológico, o interesse na integração energética ainda é questionável. A maioria dos trabalhos propostos na literatura, se restringem apenas a apresentarem resultados, os quais não são em primazia suficientes para haver a avaliação adequada das técnicas empregadas. Principalmente, a integração energética entre unidades contínuas, como no trabalho de Handogo e Luyben (1987), não vem sendo desenvolvida intensamente.

2.3 - GENERALIDADES DA DINÂMICA E CONTROLE DE PROCESSOS

Segundo Robinson (1975), controle de processos é talvez o campo da engenharia química na qual os métodos de simulação dinâmica são mais eficazes. O estudo de esquemas de controle para

complexos envolve a solução de equações que geralmente não se resolvem analiticamente. Para a análise dos sistemas de controle é importante concentrar-se no modelo matemático e no "hardware" de cada processo para cada situação em particular. Assim como qualquer outro estudo, a dinâmica e controle de processos têm seus objetivos, tais como:

- Obter uma avaliação para a dinâmica, respostas dependentes do tempo, dos sistemas de engenharia química
- Construir modelos matemáticos realísticos e razoáveis desses sistemas
- Estudar as técnicas para solucionar as equações que descrevem os modelos matemáticos
- Familiarizar-se com as técnicas de controle (teoria de estabilidade, projeto de controladores e de sistemas) e com prática e comércio de equipamentos de controle (o "hardware" que dá o sistema de controle real: sensores, transmissores, controladores, válvulas de controle, etc).

A definição de alguns conceitos básicos e da terminologia usada na dinâmica e controle de processos é importante para se ter uma visão global dos princípios envolvidos no controle de processos. Luyben (1973), faz uma apresentação geral dos conceitos mais usuais, entre os quais se destacam:

Dinâmica: Comportamento de um processo dependente do tempo. O comportamento com ausência de controladores no sistema é chamado de resposta em malha aberta (open-loop).

Variáveis:

a) *Variáveis de entrada:* essas são usualmente classificadas como variáveis manipuladas (entradas que podemos variar para controlar a planta) ou perturbações (entradas que não podemos controlar e nem deixá-las permanecer)

b) *Variáveis de saída:* são as saídas do processos as quais tentamos controlar. Algumas delas são incontroláveis.

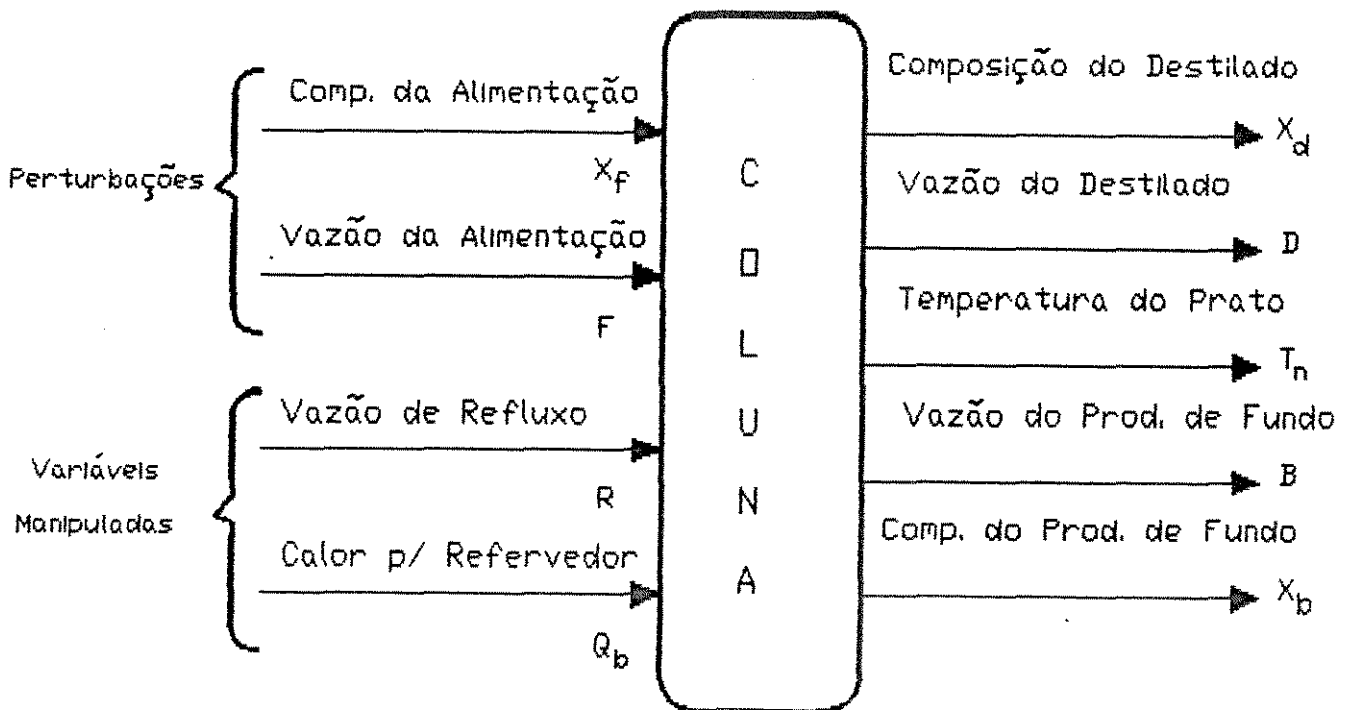


Fig.2.1 - Esquema de um processo de destilação

Para uma coluna de destilação, por exemplo, podem estar incluídas as variáveis de entrada, composição e vazão de alimentação como perturbações, vazão de refluxo e de calor para o refervedor como variáveis manipuladas. Nas variáveis de saída

podem estar as composições e vazões do destilado , produto de fundo e os acúmulos, vazões de vapor e de líquidos dos pratos. Deve-se notar que em uma corrente física estão contidas todas suas propriedades intensivas e extensivas (vazão, composição, temperatura, etc.). A figura 2.1 ilustra o exemplo.

Estratégias de Controle: as estratégias ou métodos de controle são classificadas como:

- *Controle por realimentação (feedback);*
- *Controle por antecipação (feedforward);*

A forma mais tradicional e mais comumente usada para se controlar um processo é através do controle por realimentação (figura 2.2). No controle por realimentação a variável a ser controlada é medida e esse valor é comparado ao valor de referência (o set point para o controlador) e a diferença (ou o erro) é utilizada pelo controlador para mudar a variável manipulada , dirigindo a variável medida (controlada) de volta ao valor desejado. A informação é assim, "realimentada" da variável de saída para uma variável manipulada de entrada.

Uma distinção entre controle por realimentação negativa ou positiva pode ser feita. Seborg (1989), traz como realimentação *negativa* a situação desejável, onde a ação corretiva tomada pelo controlador tende a mover a variável controlada em direção ao valor de referência (o set point). Em contraste a situação onde há realimentação *positiva*, a ação do controlador tende a distanciar a variável controlada do valor de referência. Para outros autores o uso dos termos, realimentação negativa ou positiva podem ser empregados de várias formas diferentes.

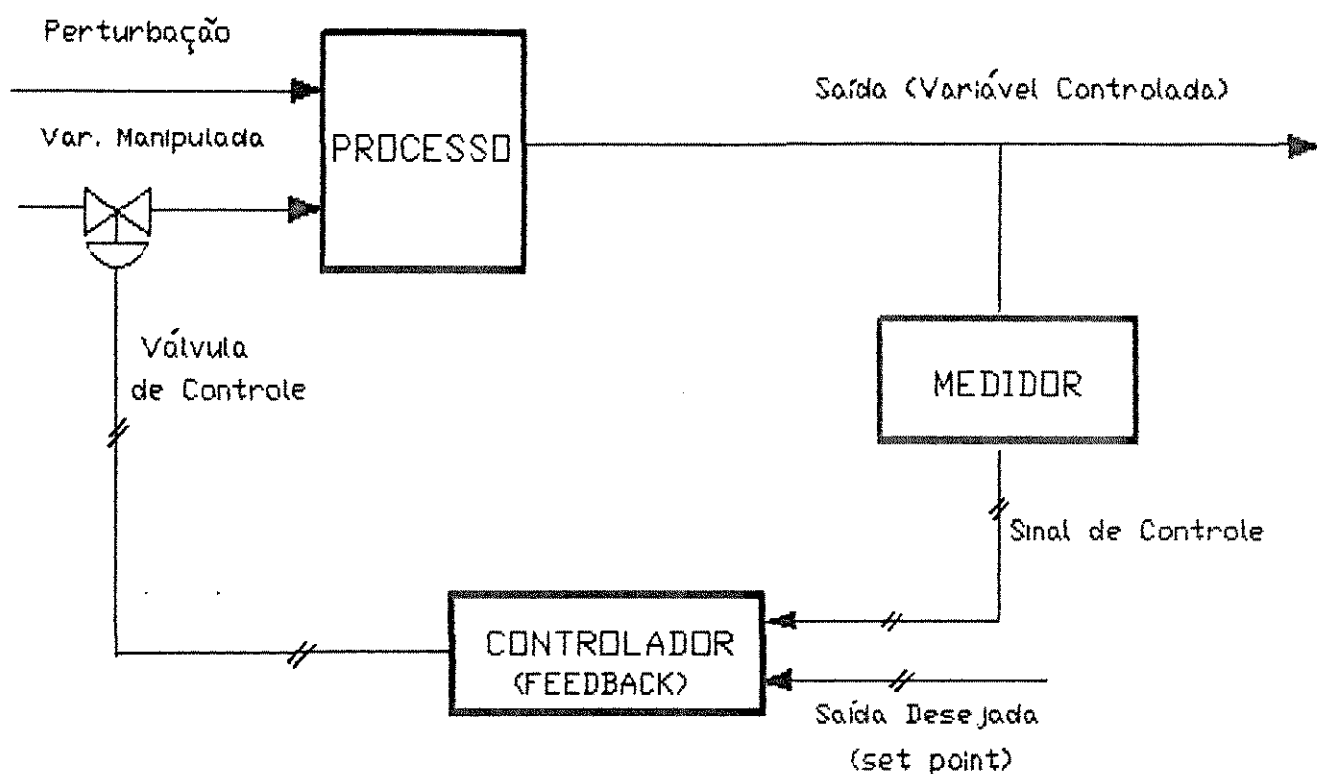


Fig. 2.2 - Esquema de controle por realimentação

Recentemente o uso do controle por antecipação tem se propagado bastante, principalmente na engenharia química. A idéia básica, desse tipo de estratégia de controle é detectar uma perturbação, assim que esta entra no processo e fazer uma mudança apropriada na variável manipulada, tal que a variável de saída seja mantida constante, ou em outro valor de interesse. A ação corretiva é então feita simultaneamente à percepção da perturbação de entrada, sem ter que esperar, a propagação da perturbação por todo o trajeto do processo. O diagrama simplificativo da figura 2.3 ilustra o controle por antecipação:

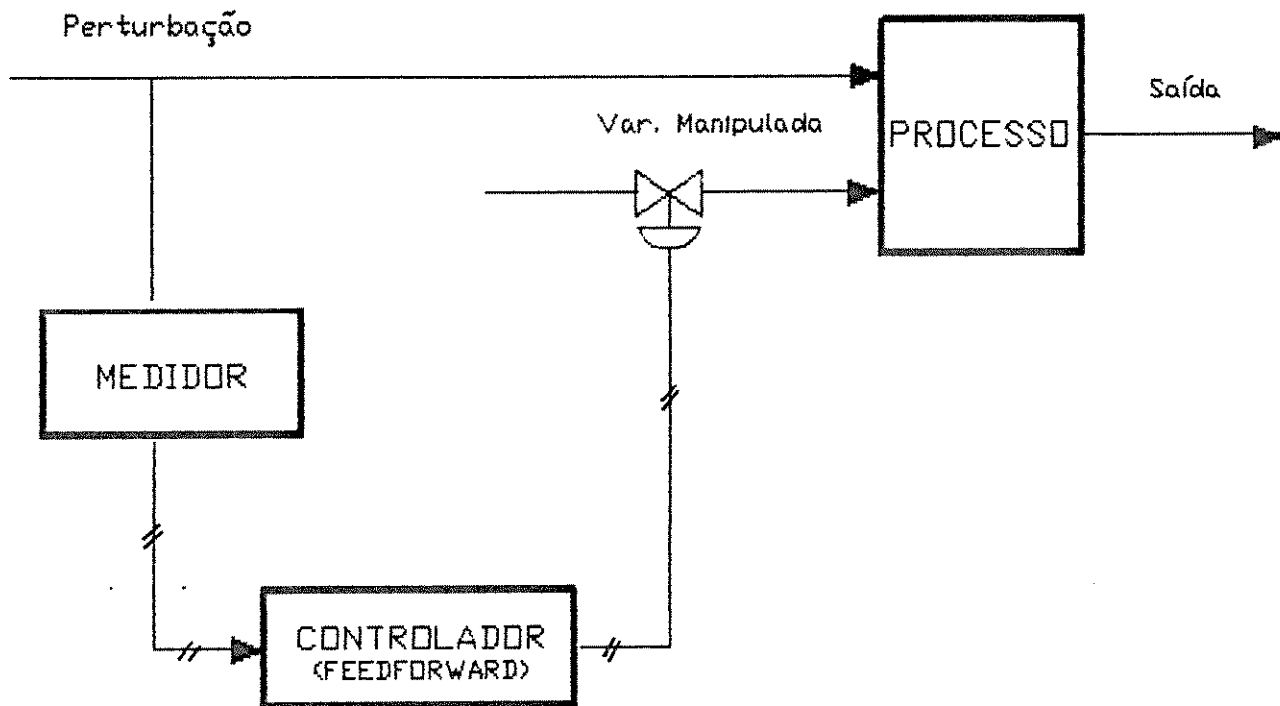


Fig.2.3 - Esquema de controle por antecipação

Nota-se que a variável controlada não é medida. Outro conceito importante dentro da dinâmica e controle de processos é o de estabilidade.

Estabilidade: A maioria dos processos industriais são estáveis sem controle por realimentação. Eles são, então, chamados de estáveis em malha aberta ou auto-reguláveis. Um processo estável em malha aberta retornará ao seu estado estacionário original após uma perturbação transiente (perturbação não mantida). Ao contrário, alguns processos, como reatores químicos com reação exotérmica, são instáveis em malha aberta e portanto extremamente difíceis de serem operados sem controle. O

conceito de estabilidade é relativo. Para os sistemas lineares a noção de estabilidade aparece associada ao efeito de variações dos valores das entradas em torno de um ponto de estacionaridade: *Estabilidade Local*. Para variações das entradas de grande amplitude, o caráter não-linear do sistema passa a ser fundamental, e o conceito de estabilidade é mais amplo.

Uma definição de estabilidade proposta por Seborg (1989) referindo-se à situação ideal onde não há no processo, limites físicos sobre a variável de saída é:

" Um sistema linear é dito estável quando a sua resposta a uma entrada limitada é sempre limitada. " Uma função qualquer do tempo é limitada quando nunca se torna infinita, isto é, sempre tem limites inferiores e superiores para todos os valores de tempo.

Quando um sistema linear está no limite de sua estabilidade, ele oscila e a amplitude da oscilação não decai. Todo processo real pode se tornar instável em malha fechada (closed loop), isto é quando um controlador por realimentação existe no sistema. Assim a compreensão do conceito de estabilidade é vital dentro do estudo de controle por realimentação.

2.3.1 - Sistema de Controle por Realimentação

A unidade básica dos sistemas de controle por realimentação é a malha de controle . Para o projeto da malha de controle é essencial dispor de informações adequadas sobre a dinâmica do processo, que inclui detalhamento matemático (determinação da função transferência) e construção de diagramas de blocos

representativos.

Uma *malha de controle* é um sistema com vários subsistemas como representado na figura 2.4:

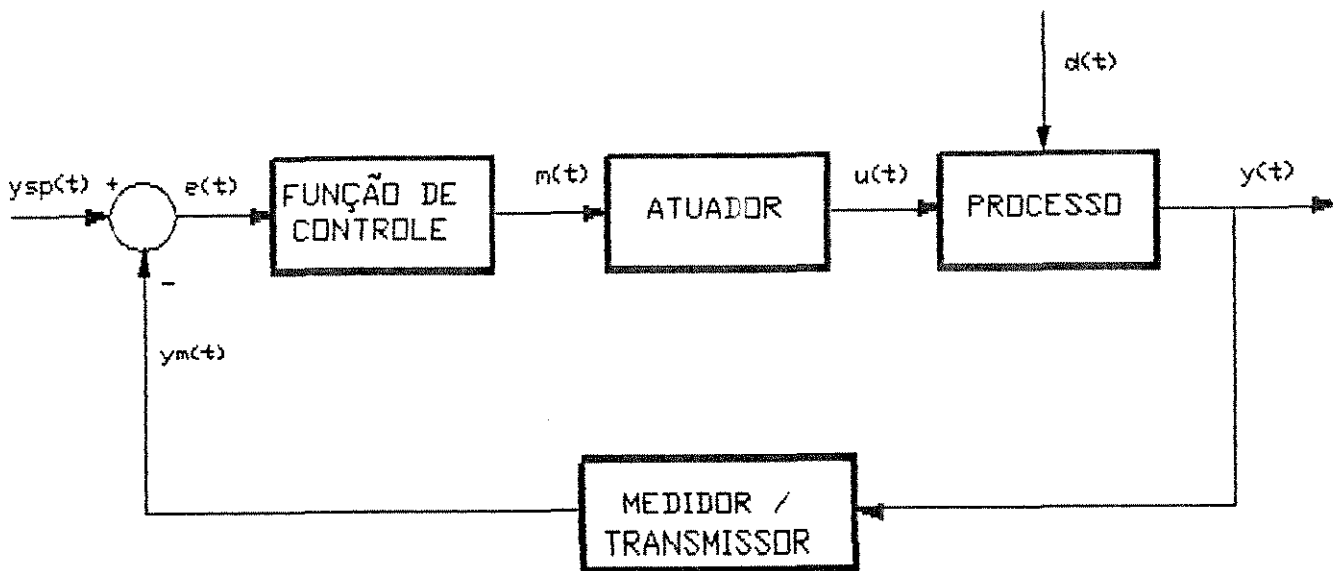


Fig.2.4 - Diagrama representativo de uma malha de controle

Sendo:

$y(t)$ = saída controlada;

$u(t)$ = entrada manipulada;

$d(t)$ = perturbação;

$y_{sp}(t)$ = valor de referência (set point);

A dinâmica e estrutura da malha de controle é determinada pela dinâmica e estrutura de seus componentes.

O exemplo abaixo (Seborg , 1989) ilustra bem, os componentes básicos da malha de controle por realimentação:

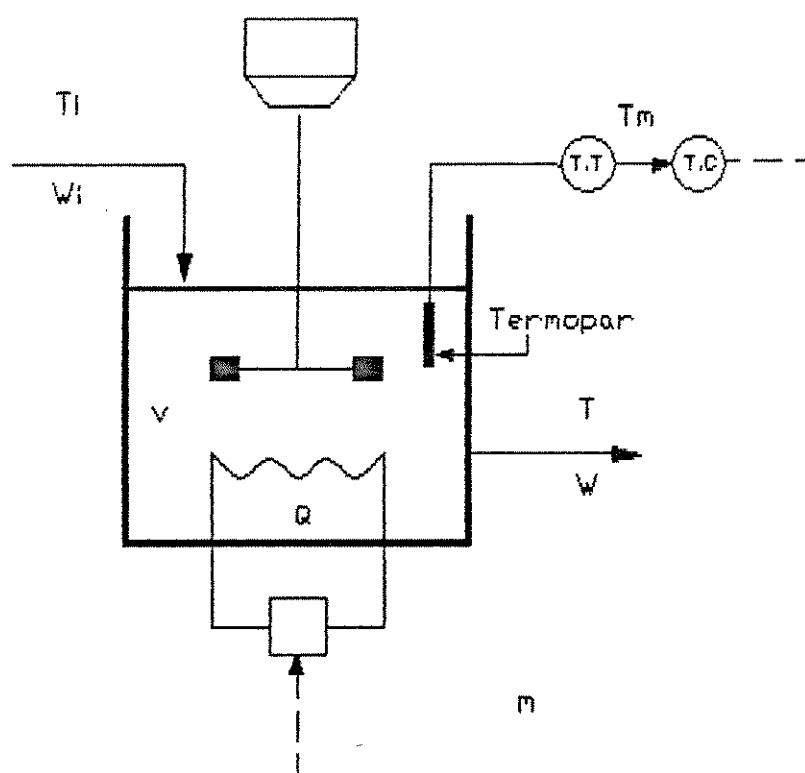


Fig.2.5 - Exemplo de uma malha de controle por realimentação

- O Processo sendo controlado (tanque);
- Sensor e Transmissor;
- Controlador;
- Elemento Final de Controle (atuador);
- Linhas de Transmissão entre Vários Instrumentos;

Pelo diagrama de blocos da malha podemos observar que é o controlador que gera o sinal de controle ($m(t)$), adequado, para levar a saída ($y(t)$), ao valor desejado, usando para isto, o erro ($e(t)$):

$$e(t) = y_{sp}(t) - y(t) \quad (2.1)$$

A função de controle que gera o sinal de controle a partir do erro, pode usar três ações básicas de controle por realimentação:

- Ação Proporcional (P)
- Ação Integral (I)
- Ação Derivativa (D)

Controle proporcional: O controle proporcional tem por objetivo reduzir o sinal do erro, ($e(t)$) a zero, onde a função de controle é:

$$m(t) = m_o + K_c e(t) \quad (2.2)$$

$m(t)$ = sinal de controle para o atuador

m_o = valor do sinal de controle para $e(t) = 0$

K_c = ganho do controlador

Os conceitos chaves atrás do controle proporcional são:

a) O ganho do controlador pode ser ajustado para tornar a saída do controlador adequadamente sensível aos desvios entre valor de referência (set point), e a variável controlada;

b) O sinal de K_c pode ser escolhido de modo que a saída do controlador aumenta (ou diminui) quando o erro aumenta;

O valor do sinal de controle para $e(t) = 0$, pode igualmente ser ajustado de modo que no estado estacionário a saída do atuador (entrada manipulada), tome o valor do estado estacionário.

K_c é normalmente uma grandeza adimensional. Essa situação ocorrerá se $m(t)$ e $e(t)$ puderem ser expressos com as mesmas unidades internas (psi, mA, V ou %). Se o valor do erro for expresso em unidades de engenharia (°C, mol/l, etc), K_c naturalmente não será adimensional.

Controle Integral: A ação integral proporciona uma vantagem importante dentro de controle: a eliminação do desvio permanente (offset) do valor de referência, o qual aparece quando se emprega controle proporcional. Nesse tipo de ação a saída do controlador depende da integral do sinal do erro sobre o tempo:

$$m(t) = m_o + \frac{1}{\tau_i} \int_0^t e(t) dt \quad (2.3)$$

Onde:

τ_i = tempo integral (reset time), [min].

Considerando-se a equação da função de controle acima, observa-se que o processo encontrando-se em estado estacionário, o erro $e(t)$ e a saída do controlador $m(t)$, serão constantes. Caso contrário, a equação implica que a saída do controlador $m(t)$ mudará com o tempo até $e(t) = 0$. Assim, quando a ação integral é

usada, $m(t)$ atingirá um valor no qual obtém-se um desvio permanente nulo, após uma mudança no valor de referência (set point) ou uma perturbação ocorrer no processo.

Embora a eliminação do desvio permanente (offset) seja um importante objetivo de controle, o controlador de ação integral raramente é utilizado independente, mesmo que uma pequena ação de controle ocorra até o sinal de erro ter persistido por algum tempo. Ao contrário da ação proporcional que toma uma ação corretiva assim que o sinal de erro seja detectado.

A ação de controle integral é normalmente empregada em conjunto com a ação proporcional, derivando então o controlador *Proporcional-Integral* (PI), cuja função de controle torna-se:

$$m(t) = m_0 + K_c \left[e(t) + \frac{1}{\tau_i} \int_0^t e(t) dt \right] \quad (2.4)$$

A resposta de um controlador PI a uma variação degrau em $e(t)$ é mostrada abaixo:

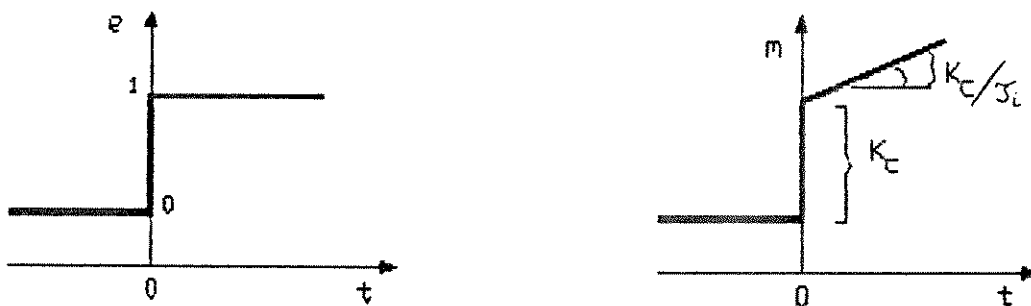
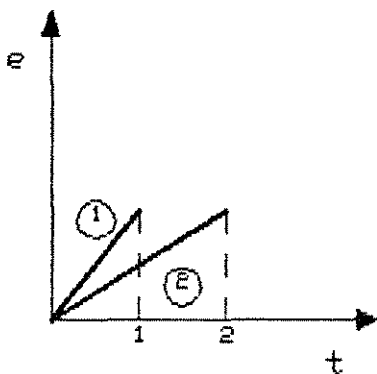


Fig.2.6 - a) - Perturbação Degrau b) - Resposta do Controlador PI

Observa-se que no tempo zero, a saída do controlador muda instantaneamente devido à ação proporcional. Ao fim de um tempo integral igual a τ_i , a contribuição integral repete a contribuição proporcional.

Uma desvantagem do uso da ação integral é que esta, tende a produzir respostas oscilatórias do processo controlado, reduzindo assim a estabilidade do sistema. Uma quantidade limitada de oscilação pode ser tolerada, desde que esteja associada a uma resposta mais rápida.

Controle derivativo: A ação derivativa de controle (rate action) leva em consideração a velocidade de variação do erro. Sua função é antecipar o comportamento futuro do sinal de erro, medindo sua taxa de variação.



$$1- \int e(t) dt = \int_0^1 t dt = 1/2; \quad \frac{de}{dt} = 1$$

$$2- \int e(t) dt = 0.5 \int_0^2 t dt = 1; \quad \frac{de}{dt} = 0.5$$

Assim, para uma ação derivativa ideal temos:

$$m(t) = m_o + \tau_d \frac{de}{dt} \quad (2.5)$$

Onde:

τ_d = tempo derivativo, (unidade temporal).

Nota-se que a saída do controlador $m(t)$, iguala-se ao valor nominal de m_0 quando a derivada do erro $de/dt = 0$, tornando a ação derivativa nula, sendo que por isso essa ação nunca é empregada sozinha ou pura.

A combinação mais usada para esse tipo de ação é o controlador *Proporcional-Integral-Derivativo* (PID) *ideal*, sendo que a ação derivativa opõe-se ao efeito desestabilizador da ação integral. A função de controle para essa combinação torna-se:

$$m(t) = m_0 + K_c \left[e(t) + \frac{1}{\tau_i} \int_0^t e(t) dt + \tau_d \frac{de}{dt} \right] \quad (2.6)$$

Uma desvantagem básica do controlador PID ideal é a de que, se o valor de referência y_{sp} , variar bruscamente, o erro $e(t)$, também varia bruscamente, e o termo de/dt gera um "choque" intenso, no elemento final de controle ou atuador. Para evitar esse problema a ação derivativa é então baseada, comumente apenas no sinal de saída, tendo-se assim a seguinte função de controle:

$$m(t) = m_0 + K_c \left[e(t) + \frac{1}{\tau_i} \int_0^t e(t) dt - \tau_d \frac{dy}{dt} \right] \quad (2.7)$$

Com a definição desses conceitos básicos do controle clássico apresentados nesta seção podemos prosseguir quanto ao estudo dos processos envolvidos neste trabalho.

2.4 - CONCLUSÃO

O principal objetivo do presente trabalho é desenvolver um estudo próprio do comportamento dinâmico de sistemas químicos energeticamente integrados. Para isto, escolheu-se um sistema contínuo específico, compreendendo um reator CSTR e uma coluna de destilação. Com base em referências anteriores foram analisados processos envolvendo separação binária e multicomponente. A utilização do controle envolvido no estudo foi enfatizada em técnicas clássicas de análise e síntese do controle por realimentação (feedback). A descrição mais detalhada do trabalho faz parte de capítulos posteriores, os quais trazem uma visão completa do conjunto estudado.

CAPÍTULO - 3
MODELAGEM MATEMÁTICA

3 - MODELAGEM MATEMÁTICA

3.1 - INTRODUÇÃO

Neste capítulo será apresentada a modelagem matemática de uma coluna de destilação multicomponente em estado transiente e de um reator CSTR, cujos modelos foram utilizados como básicos da simulação do sistema inicialmente separado. Em seguida será descrito um modelo com controle, típico de uma destilação contínua, o qual será simulado posteriormente para verificação da malha de controle proposta, a fim de garantir os requisitos principais do balanço material da coluna. A malha de controle utilizada para o reator CSTR também será mostrada após o equacionamento geral do modelo.

3.2 - DINÂMICA DE UMA DESTILAÇÃO CONTÍNUA

A complexidade de um modelo matemático para representar qualquer processo depende muito das considerações sobre as quais se baseiam o mesmo modelo. O modelo matemático que será apresentado para a coluna de destilação compõe-se de um conjunto de equações básicas do balanço de massa e energia do sistema.

3.2.1 - Hipóteses Simplificadoras do Modelo Matemático

Algumas considerações simplificadoras foram admitidas para o equacionamento do modelo:

- a) A composição ao longo do prato é uniforme e igual à do líquido que verte para o prato localizado imediatamente abaixo
- b) Pressão constante ao longo da coluna
- c) O acúmulo molar do vapor é desprezível
- d) Efeitos térmicos de misturas são desprezíveis
- e) O condensador é total e o retervedor parcial
- f) A alimentação e o refluxo são na forma de líquido saturado

3.2.2 - Equações do Balanço de Massa do Modelo Transiente

Seguindo a representação esquemática mostrada na figura 3.1 para uma coluna destilação com n_t pratos temos o seguinte desenvolvimento:

Para o n -ésimo prato:

- Equação da continuidade global:

$$\frac{dM_n}{dt} = L_{n+1} + V_{n-1} + F_n - V_n - L_n \quad (3.1)$$

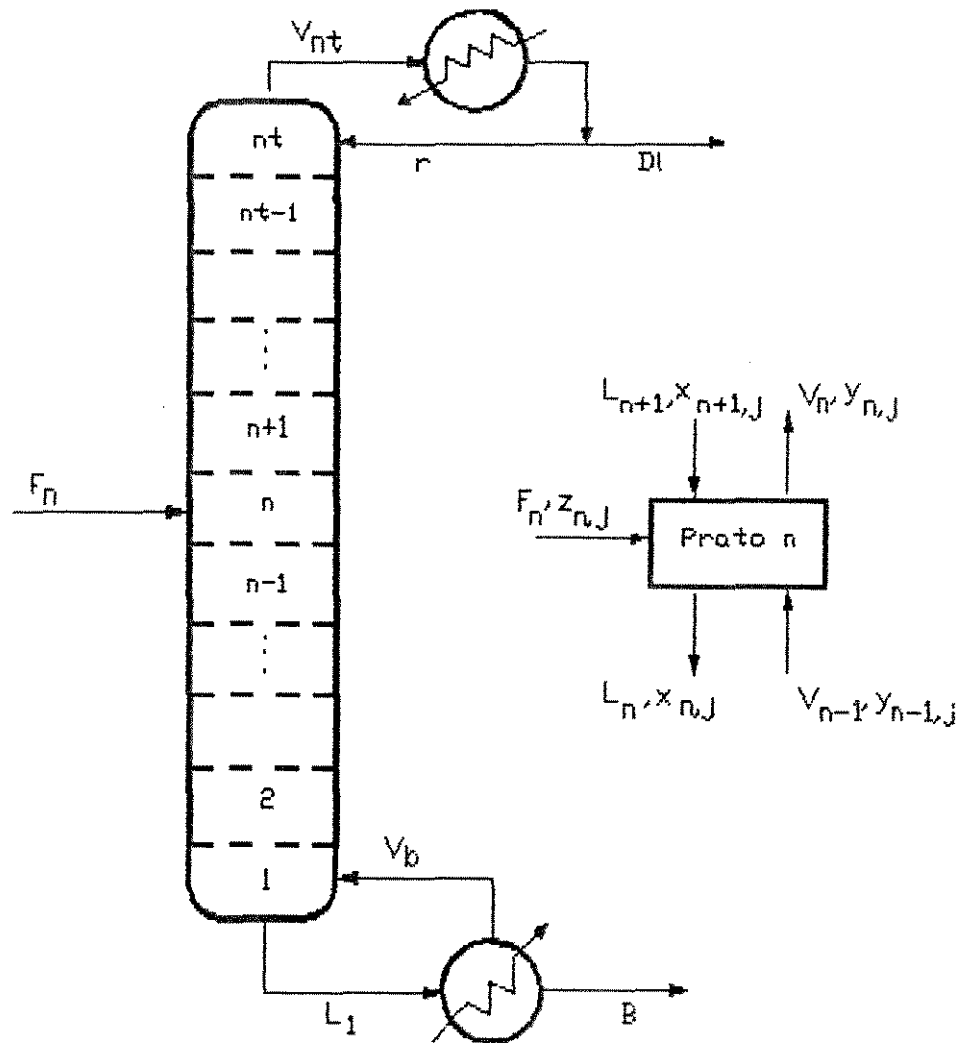


Fig.3.1 - Esquema da coluna de destilação

- Equação da continuidade Parcial (componente j):

$$\frac{dM_n x_{n,j}}{dt} = L_{n+1} x_{n+1,j} + V_{n-1} y_{n-1,j} + F_n z_{n,j} - V_n y_{n,j} - L_n x_{n,j} \quad (3.2)$$

Para o Refervedor:

- Equação da continuidade global:

$$\frac{dM_b}{dt} = L_1 - V_b - B \quad (3.3)$$

- Equação da continuidade Parcial (componente j):

$$\frac{dM_b x_{b,j}}{dt} = L_1 x_{1,j} - V_b y_{b,j} - B x_{b,j} \quad (3.4)$$

Para o Condensador:

- Equação da continuidade global:

$$\frac{dM_d}{dt} = V_{nt} - r - D1 \quad (3.5)$$

- Equação da continuidade Parcial (componente j):

$$\frac{dM_d X_{d,j}}{dt} = V_{nt} y_{nt,j} - (r + D1) x_{d,j} \quad (3.6)$$

3.2.3 - Equilíbrio Líquido-Vapor

Para o cálculo do equilíbrio de fase em cada prato, utilizou-se a equação de eficiência de Murphree calculando-se a composição do vapor que deixa o n-ésimo prato:

$$E_{n,j}^m = \frac{y_{n,j} - y_{n-1,j}}{y_{n,j}^* - y_{n-1,j}} \quad (3.7)$$

Onde $E_{n,j}^m = E^m$, ou seja a eficiência de Murphree é tomada como igual para todos os componentes e em todos os pratos.

Uma relação apropriada foi usada para determinar o valor de $y_{n,j}^*$, a qual é uma função de:

$$y_{n,j}^* = f(x_{n,j}, P_n, T_n)$$

Assim, assumindo-se que a fase vapor comporta-se como ideal, a pressão do componente j, na fase vapor é igual a pressão total vezes a fração molar do componente j, na fase vapor y_j (Lei de Dalton):

$$P_j = P y_j \quad (3.8)$$

A fase líquida é considerada como ideal sendo válida então a lei de Raoult:

$$P = \sum_{j=1}^J x_{n,j} P_j^0 \quad (3.9)$$

E $y_{n,j}^*$ é dada por:

$$y_{n,j}^* = \frac{x_{n,j} P_j^\circ}{P} \quad (3.10)$$

A pressão de vapor P_j° do componente j puro é dada pela equação abaixo na forma:

$$\ln(P_j^\circ) = \frac{A_j}{T} + B_j \quad (3.11)$$

Onde as constantes A_j e B_j são calculados por:

$$A_j = \frac{T_1 T_2}{(T_1 - T_2)} \ln \frac{P_2}{P_1} \quad (3.12)$$

$$B_j = \ln P_2 - \frac{A_j}{T_2} \quad (3.13)$$

3.2.4 - Acúmulo Molar de Líquido no Prato

O acúmulo molar de líquido no prato é representado pela equação de Francis (Van Winkle (1967)), onde a constante numérica é dada para tornar consistente as unidades empregadas:

$$M_n = A_p \left[\left[\frac{Lv}{999 Wl} \right]^{2/3} + Wh \right] \frac{Mw_n}{\rho_n} \quad (3.14)$$

onde:

A_p = área do prato, [in²]

L_v = vazão volumétrica de líquido, [ft³/h]

Wl = comprimento do vertedouro, [in]

Wh = altura do vertedouro, [in]

ρ_n = massa específica da mistura, [lb/ft³]

Mw_n = peso molecular da mistura, [lb/lbmol]

3.2.5 - Equações do Balanço de Energia do Modelo Transiente

Várias simplificações são comumente feitas a respeito dos modelos dinâmicos da coluna de destilação. Entre elas, a utilização de uma forma algébrica para a equação de energia. Embora alguns autores como McCune e Gallier (1973) e Doukas (1978), tenham encontrado dificuldades ao fazerem tal simplificação, essa forma pode ser usada. Segundo Fuentes e Luyben (1982), a justificativa para essa consideração, é que a taxa de transferência de energia é geralmente muito mais rápida do que a taxa de variação da composição ou do acúmulo líquido em um dado prato.

Assim, para o desenvolvimento das equações do balanço de energia, foi utilizado o modelo 1, apresentado no trabalho de Fuentes e Luyben (1982). Desta forma temos:

Para o n-ésimo prato:

$$\frac{dM_n h_n}{dt} = L_{n+1} h_{n+1} + V_{n-1} H_{n-1} + F_n h_{fn} - V_n H_n - L_n h_n \quad (3.15)$$

Para o refeedor (parcial):

$$\frac{dM_b h_b}{dt} = L_1 h_1 - V_b H_b - B h_b + Q_b \quad (3.16)$$

Para esse modelo a derivada da entalpia é tomada como igual a zero e a vazão de vapor, V_n pode ser calculada na forma algébrica mais simples:

- No n-ésimo prato:

$$V_n = \frac{[L_{n+1} h_{n+1} + V_{n-1} H_{n-1} - L_n h_n]}{H_n} \quad (3.17)$$

- No refeedor:

$$V_b = \frac{[Q_b - L_1 (h_b - h_1)]}{H_b - h_b} \quad (3.18)$$

3.3 - CONTROLE DE UMA DESTILAÇÃO CONTÍNUA

O controle de uma destilação contínua pode ser considerado em duas partes separadas, as quais estão interrelacionadas: o controle do balanço material e o controle da composição ou da qualidade do produto. Robinson (1975) e Buckley et al (1985), fazem uma introdução sobre os objetivos e requisitos necessários para o controle do balanço material e da composição. São eles:

1- A vazão de alimentação deve ser controlada para minimizar distúrbios, antes deles alcançarem a coluna

2- O sistema de controle deve proporcionar a soma média das correntes dos produtos, para ser exatamente igual a vazão média da alimentação. Isso mantém a coluna em balanço (equilíbrio)

3- O acúmulo na coluna e os balanços líquidos no topo e na base, devem ser mantidos entre um valor limite máximo e mínimo.

Assim:

- O sistema do retervedor deve ser controlado para manter constante o nível na base da coluna

- O sistema do condensador deve ser controlado para manter constante o nível no topo da coluna (tanque de refluxo)

4- Para uma destilação binária, deve-se manter a concentração de um componente, tanto no topo como na base em um valor específico. Em colunas multicomponentes sujeitas a mudanças na composição da alimentação, não é possível manter exatamente constante, as composições nas saídas da coluna (topo e fundo)

Na maioria dos casos, o balanço material é controlado pelos

chamados controladores de nível de líquidos ou controladores de pressão.

Tanto os sistemas de controle do balanço de massa ou de composição, devem funcionar satisfatoriamente face às possíveis perturbações, tais como:

- Na vazão de alimentação
- Na composição da alimentação
- Nas condições térmicas da alimentação
- Nas correntes de aquecimento e resfriamento dos equipamentos de ebulição e condensação respectivamente

A figura 3.2 mostra um esquema de controle para os requisitos do balanço material da coluna. Este esquema é talvez o mais simples a ser considerado para uma coluna de destilação no qual não existe interação entre os laços de controle do topo e da base.

Outro esquema típico de controle para uma coluna de destilação é apresentado na figura 3.3. Nele é considerado o controle do balanço material, onde há a incorporação de um laço de controle por antecipação (feedforward), da medida da vazão de alimentação em razão ao controle da vazão de refluxo. O ponto de ajuste do controlador da vazão de refluxo (set point), está relacionado à vazão de alimentação por um valor adequado, o qual garante que a vazão de refluxo não caia a um valor mínimo se a alimentação parar.

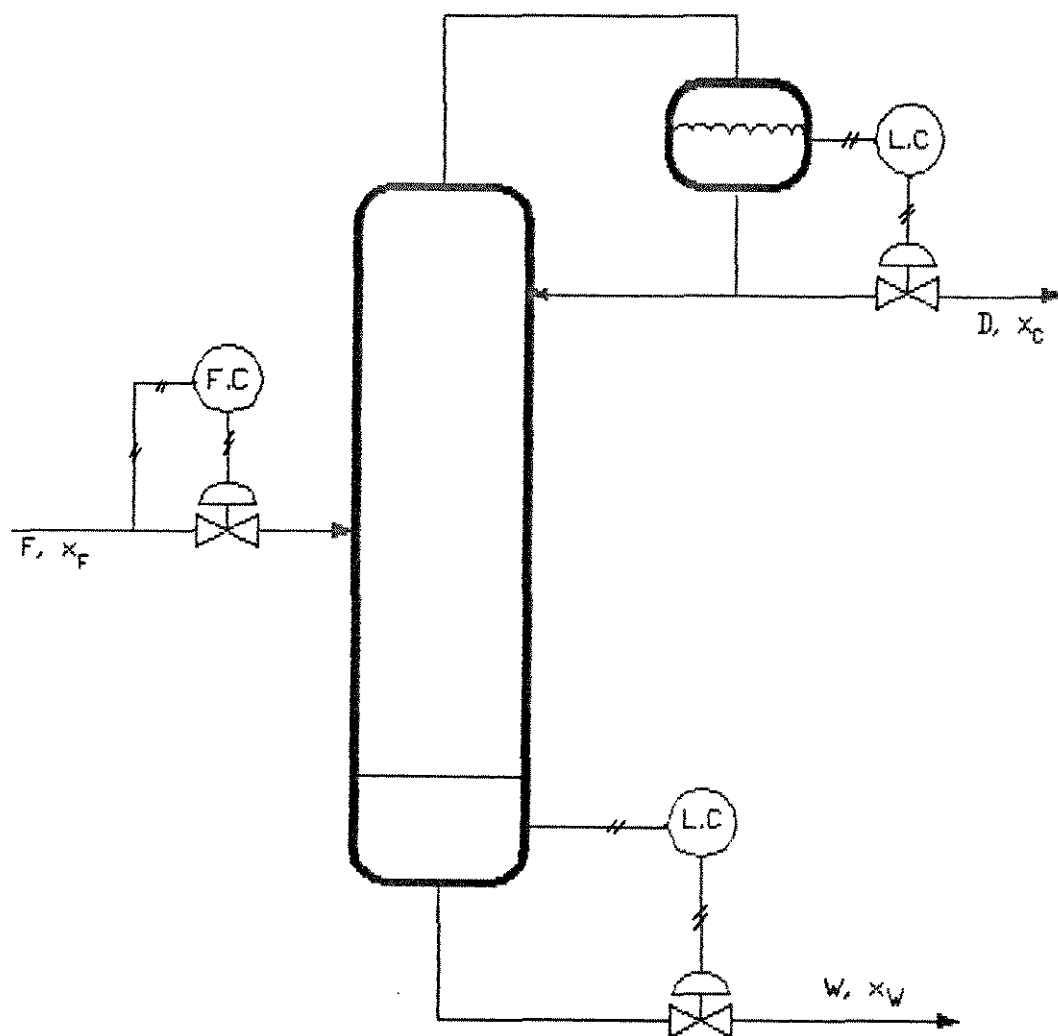


Fig.3.2 - Esquema de controle do balanço material de uma destilação contínua

Um balanço material é considerado para representar o esquema da figura 3.3. As seguintes considerações foram feitas para o modelo:

- 1- A coluna possui N pratos ideais e os dados de equilíbrio estão representados por volatilidades relativas constantes
- 2- A coluna é numerada do topo à base
- 3- A alimentação é líquido saturado
- 4- A vazão de vapor é constante para cada prato das seções de enriquecimento e esgotamento
- 4- O tanque de refluxo é de mistura perfeita e o acúmulo líquido neste, encontra-se no seu ponto de ebulição
- 5- Os controladores de vazões são instantâneos
- 6- As quedas de pressões são iguais para todas as válvulas de controle
- 7- Os acúmulos molares são funções da vazão de refluxo

A vazão líquida em cada prato está relacionada ao acúmulo molar sobre cada prato. Uma relação simples foi usada para prever os acúmulos (Robinson, 1975):

$$M = A + C L \quad (3.19)$$

Onde: A e C são constantes.

O modelo para o processo é composto de equações de balanço de massa global e parcial e das equações de controle que foram utilizadas para descreverem a malha de controle. A figura 3.4

apresenta o diagrama de blocos da modelagem empregada.

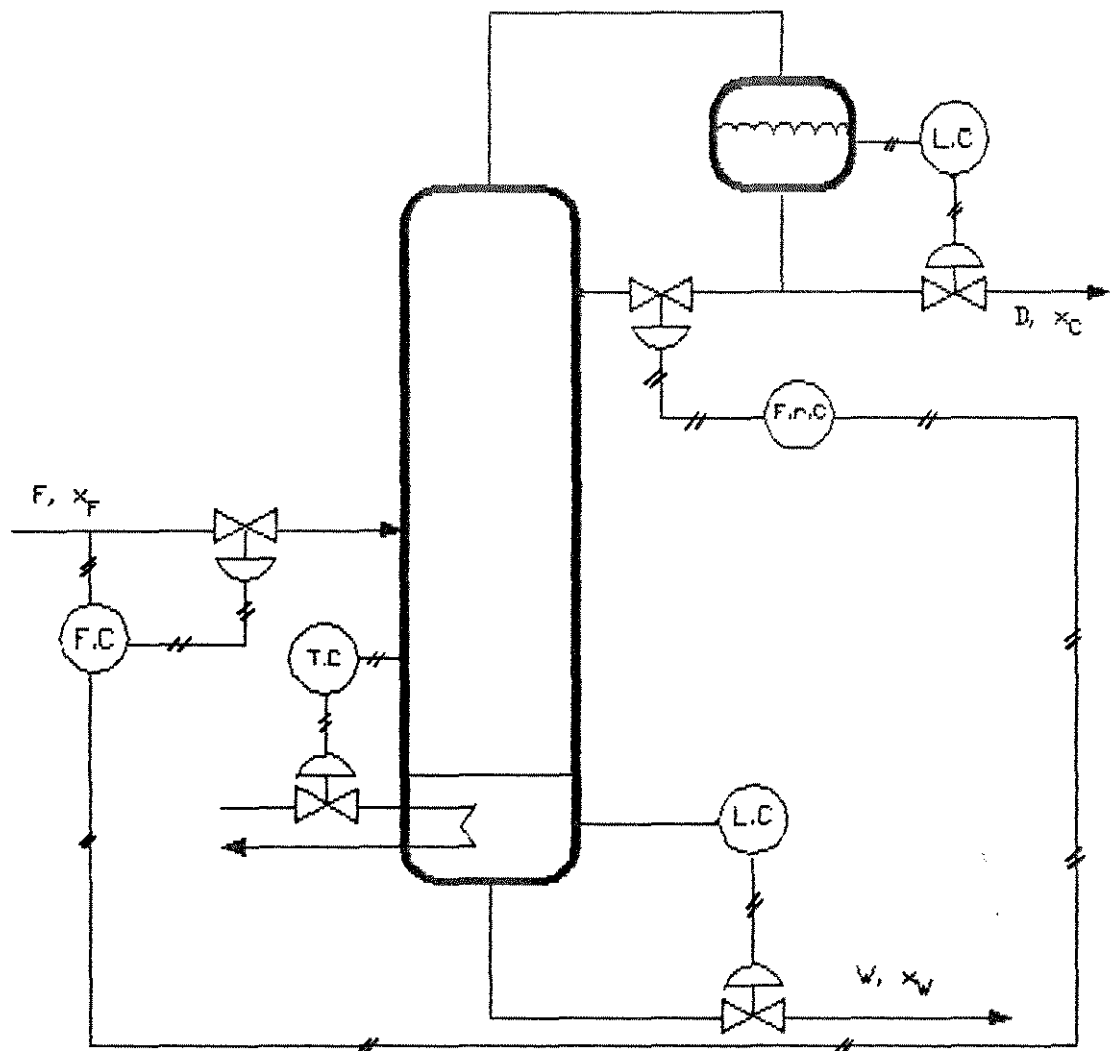


Fig.3.3. - Esquema de controle típico dos principais requisitos do balanço material da coluna

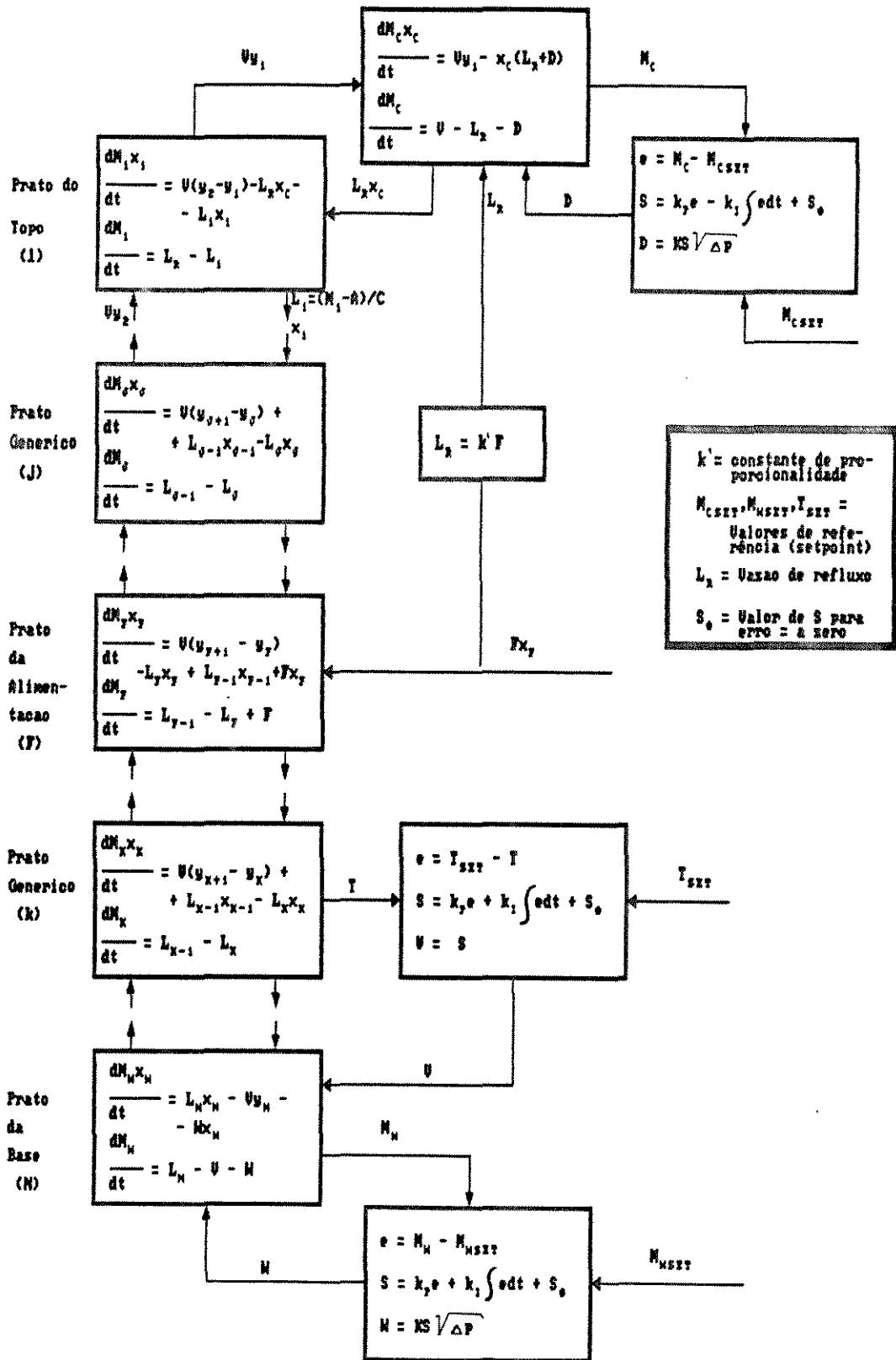


Fig.3.4. - Diagrama de blocos do modelo matemático que inclui as malhas de controle.

Nos blocos que representam o controle, temos controladores de ação proporcional-integral (PI), cuja função geral é:

$$S = K_p e - K_I \int e dt + S_0 \quad (3.20)$$

Onde: K_p = ganho do controlador proporcional;

$K_I = 1/\tau_i$ (τ_i = tempo integral);

A equação (3.20) é equivalente a equação (2.4).

Para representar os elementos finais de controle (válvulas controle) temos:

$$D = K S \sqrt{\Delta p} \quad (3.21)$$

$$W = K S \sqrt{\Delta p} \quad (3.22)$$

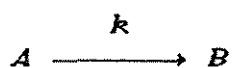
Onde D e W são as vazões de destilado e produto de fundo respectivamente, K é uma constante de unidades $[\text{kg}^{1/2} \text{h}^{-1} \text{psi}^{-1}]$, Δp é a queda de pressão através das válvulas de controle e S é a saída do controlador dada pela equação (3.20).

O modelo do processo, figura 3.4, foi simulado independentemente do modelo apresentado para a dinâmica de uma coluna de destilação no princípio deste capítulo (Equações (3.1) a (3.18)). No capítulo seguinte, o qual trata da simulação de processos, a exposição do sistema geral utilizado para a integração energética torna claro a distinção entre os modelos.

3.4 - REATOR CSTR NÃO - ISOTÉRMICO

3.4.1 - Apresentação do Modelo

O modelo matemático usado para o reator CSTR não-isotérmico, considera uma reação de ordem n em relação ao reagente limite A , irreversível e exotérmica:



A figura 3.5 mostra esquematicamente o sistema a ser exposto:

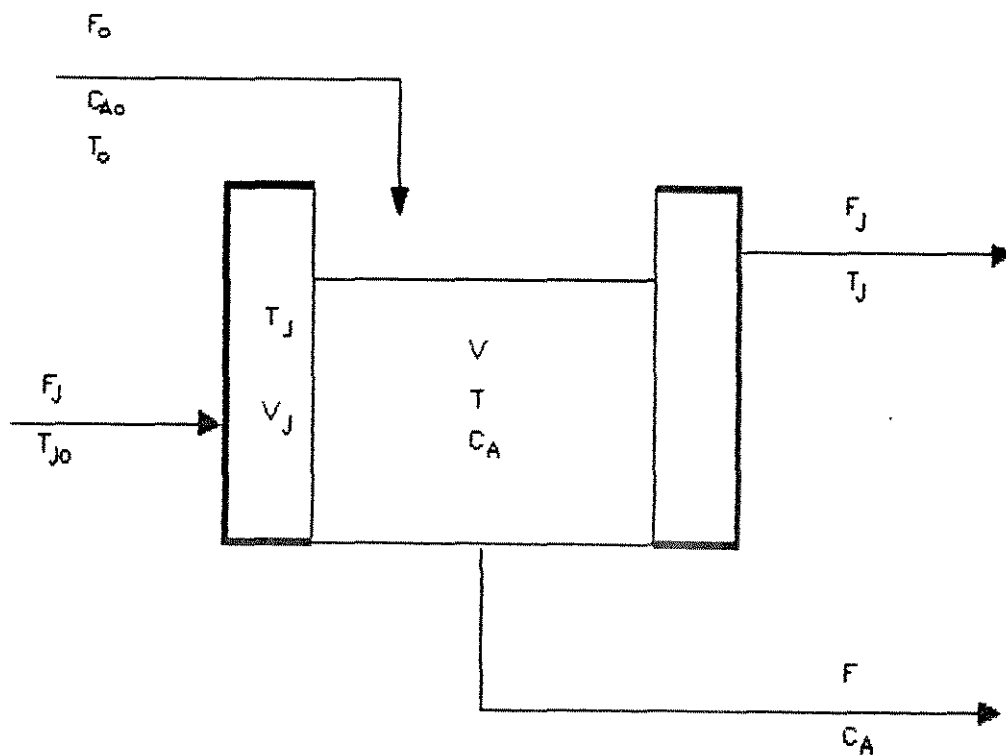


Fig.3.5. - Esquema do Reator CSTR

Serão assumidas algumas hipóteses simplificadoras, tais como:

- a) Perdas de calor desprezíveis
- b) Propriedades físicas constantes
- c) O calor da reação é removido através de uma jaqueta de resfriamento
- d) O volume de líquido na jaqueta, V_j , é constante

3.4.2 - Equações de Balanço de Massa Transiente

As equações que descrevem o balanço de massa do reator CSTR, segundo o esquema da figura 3.5, são:

- Equação da continuidade (total)

$$\frac{dV}{dt} = F_o - F \quad (3.23)$$

- Equação da continuidade (parcial)

$$\frac{d(V C_A)}{dt} = F_o C_{Ao} - F C_A - V k C_A^n \quad (3.24)$$

3.4.3 - Equações do Balanço de Energia Transiente

O balanço de energia é apresentado para o reator onde ocorre reação exotérmica e para a jaqueta, a qual remove o calor produzido. Partindo - se da equação geral de energia e fazendo várias simplificações podemos usar as derivadas temporais das entalpias ao invés da energia interna do sistema. Foi considerado também que o coeficiente global de transferência de calor, U é constante. Assim temos:

- Equação da energia para o Reator

$$\rho \frac{d(Vh)}{dt} = \rho (F_o h_o) - \lambda V k C_A^n - UA_H (T - T_j) \quad (3.25)$$

- Equação da energia para a Jaqueta

$$\rho_j V_j \frac{d(h_j)}{dt} = F_j \rho_j (h_{jo} - h_j) + UA_H (T - T_j) \quad (3.26)$$

As entalpias estão relacionadas à temperatura nas formas singulares:

$$h_j = C_j T_j \quad (3.27)$$

$$h = C_p T \quad (3.28)$$

Onde:

C_j = capacidade calorífica do líquido de resfriamento,
[Btu/(lbm R)];

C_p = capacidade calorífica do líquido do processo,
[Btu/(lbm R)];

Substituindo as equações (3.28) e (3.27) nas equações de energia para o reator e para a jaqueta respectivamente temos:

$$\frac{d(VT)}{dt} = F_o T_o - F T - \frac{\lambda V k C_A^n}{\rho C_p} - \frac{UA_H}{\rho C_p} (T - T_j) \quad (3.29)$$

$$\frac{d(T_j)}{dt} = \frac{F_j (T_{jo} - T_j)}{V_j} + \frac{UA_H}{\rho_j V_j C_j} (T - T_j) \quad (3.30)$$

A dependência da constante da taxa da reação com a temperatura é descrita pela a equação de Arrhenius:

$$k = \alpha e^{(-E/RT)} \quad (3.31)$$

Onde:

α = fator pré-exponencial da equação de Arrhenius, [h^{-1}];

E = energia de ativação, [Btu/lbmoles];

R = constante dos gases, [Btu/(lbmoles R)];

3.5 - CONTROLE DE UM REATOR CSTR

Os processos de reatores químicos com reação exotérmica são instáveis em malha aberta (open-loop unstable). Esses processos são extremamente difíceis de se operar sem controle. Para o nosso reator CSTR não-isotérmico foi utilizado um controlador de realimentação (feedback) de ação proporcional, como na figura 3.6.

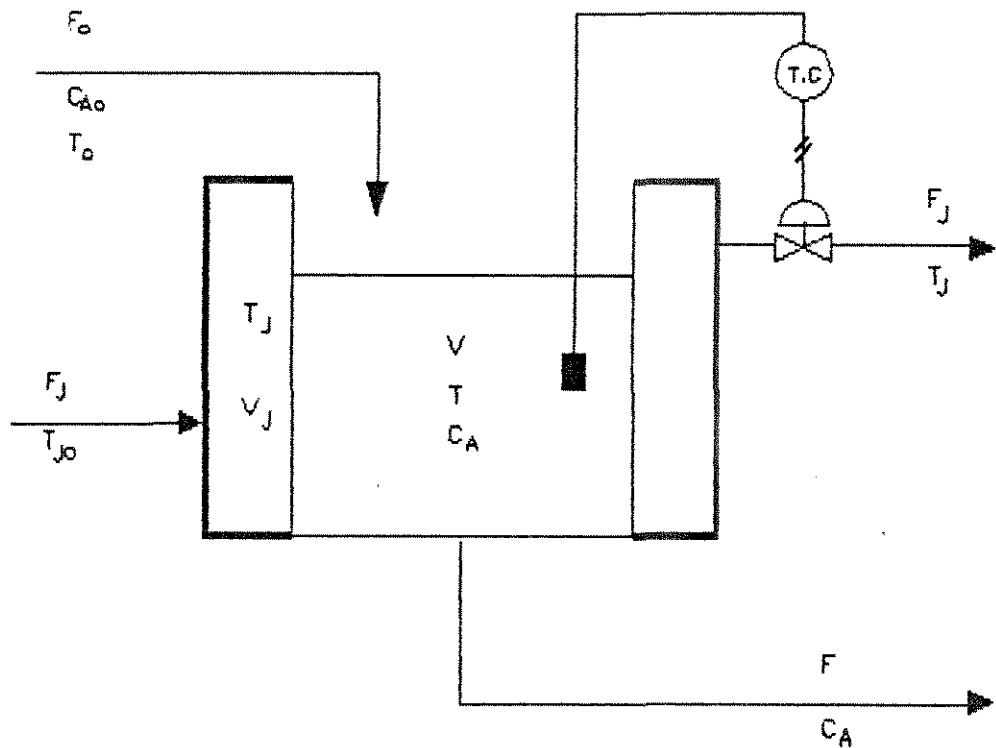


Fig.3.6. Esquema de controle para o Reator CSTR não-isotérmico

A função de controle que rege o processo é dada por:

$$F_j = F_{jo} - K_c (T_{set} - T) \quad (3.30)$$

Onde T_{set} = valor de referência ou ponto de ajuste para o controlador de temperatura

T = valor da temperatura do processo reacional

F_j = vazão do líquido de resfriamento

F_{jo} = vazão do líquido de resfriamento para erro zero

Temos então, que a vazão do líquido de resfriamento da jaqueta se modifica, quando a temperatura do reator varia.

O controlador de temperatura deverá manter o valor da temperatura do reator, no seu valor desejado e dependendo do tipo de perturbação imposta, o sistema poderá apresentar um novo estado estacionário. Portanto, deve-se analisar as consequências do tipo de controle e certificar-se que houve uma conversão mínima (maior ou igual ao valor desejado).

3.6 - CONCLUSÃO

Neste capítulo foram apresentadas as equações diferenciais pertencentes ao modelo matemático dos processos de destilação e de reação. O modelo dinâmico para a destilação contínua tem como principais componentes as equações de cálculo das vazões de vapor

nos pratos, dada pela equação do balanço de energia. A entrada do calor na coluna é computada justamente, na equação para cálculo da vazão de vapor que deixa o reator. Isso é importante para definição da malha de controle que será necessária no sistema integrado.

A malha de controle apresentada para as necessidades do balanço material da coluna tem em sua simplicidade a forma mais comum de caracterizar um sistema de destilação, o qual não leva em consideração mudanças exteriores de energia. Temos um modelo em que as vazões de vapor são iguais em todos os pratos e o valor dessas é dado por um controlador de temperatura.

Para o reator CSTR não-isotérmico foi mostrado também, uma malha de controle composta de um controlador de temperatura. Através desse, é possível garantir que o reator, após sofrer uma perturbação positiva em relação ao aumento de calor, conseguirá produzir a quantidade de energia necessária ao bom desempenho da coluna, quando os dois processos estiverem conectados.

O maior detalhamento dos dois processos se dará na parte de simulação no capítulo posterior.

CAPÍTULO - 4
SIMULAÇÃO E RESULTADOS

4 - SIMULAÇÃO E RESULTADOS

4.1 - INTRODUÇÃO

Neste capítulo serão apresentadas as simulações correspondentes aos modelos matemáticos desenvolvidos no capítulo anterior.

Os programas que serão apresentados foram desenvolvidos em linguagem turbo C e o computador utilizado foi um micro da linha PC XT com co-processador aritmético 8087.

Para a resolução numérica dos sistemas de equações diferenciais foi empregado o método de integração de Euler para todos os casos propostos.

Os resultados das simulações dos processos individuais de destilação e reação serão apresentados. A integração energética dos dois processos será descrita sequencialmente à análise do comportamento dinâmico das malhas de controle dos mesmos.

4.2 - SIMULAÇÃO DO MODELO DE CONTROLE DO BALANÇO MATERIAL DE UMA DESTILAÇÃO CONTÍNUA

A simulação do modelo mostrado na figura 3.4 foi realizada utilizando-se uma separação binária. Para o sistema de equações diferenciais do balanço de massa foi empregado o método de integração de EULER com passo igual a 0,002 [h] e para o cálculo

do equilíbrio no prato, o método de NEWTON-RAPHSON. Com base no conjunto de equações apresentado (Fig.3.4), foi desenvolvido um programa de computador, CONTROL, cujo diagrama simplificado de cálculo consta no Anexo 2.

Os dados da coluna a serem fixados são:

- Número de pratos na coluna
- Localização da alimentação
- Composição, temperatura e vazão da alimentação
- Razão de refluxo

A tabela 4.1 apresenta os dados iniciais e condições operacionais necessários à simulação do processo.

Os valores das constantes para o cálculo da relação hidrodinâmica entre a vazão de líquido e o acúmulo molar sobre cada prato são dados:

$$A = 5,0 \text{ [mol]}$$

$$C = 0,1 \text{ [h]}$$

Assim a equação (3.10) torna-se:

$$L = \frac{(M - 5,0)}{0,1} \quad (4.1)$$

O perfil inicial de temperatura é constante, isto é, todos os pratos apresentam uniformidade térmica e os dados iniciais de composição e os acúmulos molares líquidos em cada prato são dados por Robinson (1975).

Tabela 4.1 - Condições iniciais para cálculo do programa CONTROL

Número de Pratos	6
Alimentação	
- estágio	4
- temperatura(K)	300
- composição (equimolar)	0,5
- vazão molar (mol/h)	100
Razão de Refluxo	2,0
Pressão (mmHg)	800
Pressões de Vapor dos Componentes (mmHg)	$p_1^o = \exp(8,0 - 300/T)$ $p_2^o = \exp(7,0 - 300/T)$
Temperatura, T (K)	
Vazão de Destilado (mol/h)	50
Vazão de Produto de Fundo (mol/h)	50
Vazão de Vapor (mol/h)	100

Os valores dos parâmetros dos controladores também dados por Robinson (1975) são:

$$K_P = 5,0 \text{ [psi}^{1/2} \text{ Kg}^{-1/2} \text{]}$$

$$K_I = 5,0 \text{ [(psi}^{1/2} \text{ Kg}^{-1/2} \text{) / h]}$$

$$M_{CSET} = 10,0 \text{ mol}$$

$$M_{WSET} = 15,0 \text{ mol}$$

$$T_{SET} = \text{Temperatura do prato 5 (Estado Estacionário)}$$

Após os cálculos iniciais dos perfis do estado estacionário, simulou-se o modelo para uma perturbação degrau no processo de 10% de redução na vazão de alimentação.

Os resultados obtidos são mostrados nas figuras 4.1 e 4.2.

O objetivo do sistema de controle proposto é manter constante o balanço material na coluna após ocorrer uma perturbação no processo. Os controladores de níveis mantêm em equilíbrio o topo e a base. O controlador de temperatura do prato abaixo da alimentação mantém a vazão de vapor ao longo da coluna, em um valor estável.

Na figura 4.1 temos o perfil de temperatura para todos os estágios da coluna e para os sistemas do refeedor e condensador. Em duas horas de simulação o processo retorna ao estado estacionário inicial em resposta ao controle empregado de ação proporcional integral.

A figura 4.2 apresenta as variações de vazão do destilado, produto de fundo e vazão de vapor ao longo do tempo de simulação. Inicialmente ocorre uma resposta oscilatória, a qual é maior para a vazão de produto de fundo, até ser atingido o equilíbrio. Tais oscilações não provocam maiores distúrbios nas respostas das outras variáveis do processo como observado para a temperatura na figura 4.1.

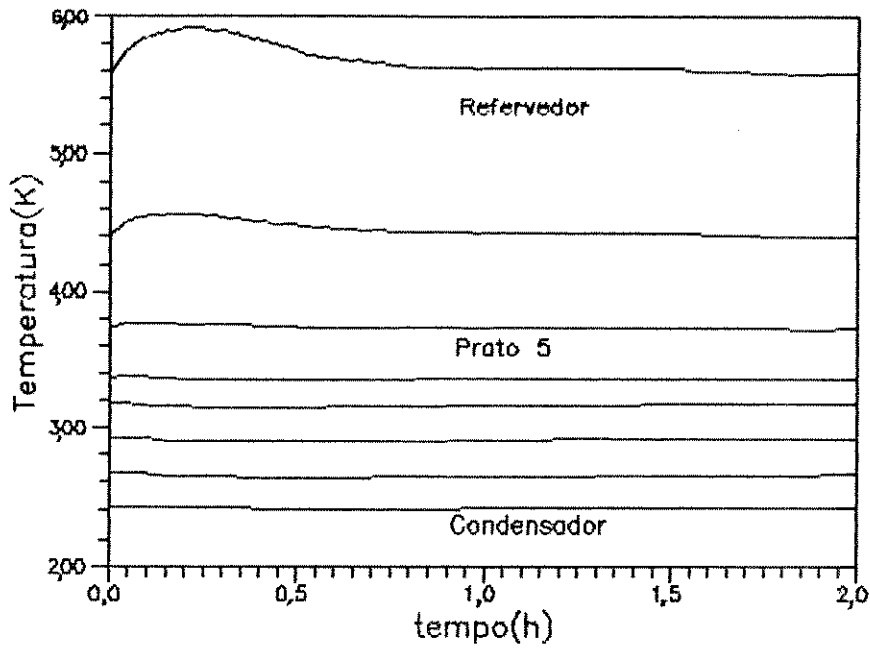


Fig.4.1 - Temperatura ao longo da coluna em resposta a perturbação de degrau de -10% na vazão de alimentação

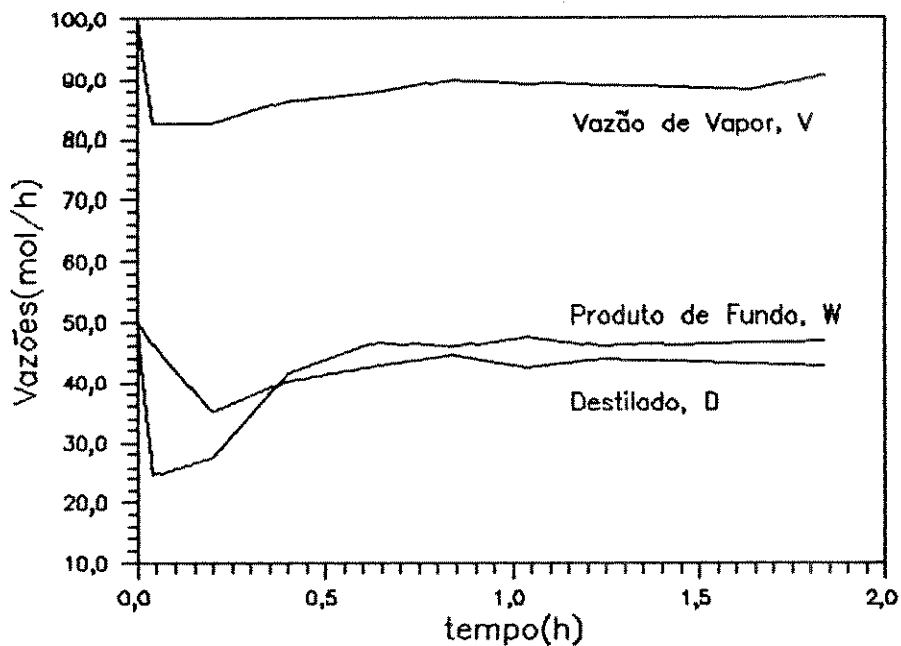


Fig.4.2 - Comportamento das variáveis manipuladas após a perturbação de degrau de -10% na vazão de alimentação

4.3 - SIMULAÇÃO DO MODELO DA DINÂMICA DE UMA DESTILAÇÃO CONTÍNUA

4.3.1 - Apresentação

Através do modelo matemático da dinâmica de uma coluna de destilação multicomponente representado pelo conjunto de equações (3.1) a (3.18) foi desenvolvido um programa, DINACOL, cuja sequência de cálculo é ilustrada em diagrama de blocos no Anexo 3.

Além do corpo principal de cálculo este programa apresenta as seguintes sub-rotinas:

- HIDRO : Calcula o acúmulo molar de líquido do prato - Equação de Francis (3.14).
- EQUIL : Calcula o equilíbrio líquido - vapor, através das equações (3.7) a (3.13) pelo método de NEWTON-RAPHSON. Determina as frações de vapor dos componentes e a temperatura do prato.
- ENTALV : Calcula a entalpia do vapor de cada componente e da mistura.
- ENTALL : Calcula a entalpia do líquido de cada componente e da mistura.
- PM : Calcula o peso molecular de mistura em cada prato.
- DENSI : Calcula a massa específica de mistura em cada prato.

Este programa tem por finalidade solucionar o problema do estado transiente envolvendo tanto balanço de massa como o de energia. Uma execução inicial do programa é necessária para que se possa determinar os dados do estado estacionário dos sistemas em estudo.

Vários dados da coluna são fixados para a solução do sistema de equações, além dos perfis de composição dos componentes e de vazões de líquido, sendo os principais:

- Número de pratos na coluna
- Vazão, composição e temperatura da alimentação
- Pressão de operação da coluna
- Eficiência de Murphree
- Razão de refluxo
- Características geométricas do prato
- Energia fornecida ao refeedor

A obtenção dos perfis iniciais de composição, temperatura e de vazões será descrita no item seguinte e os dados de projeto da coluna foram baseados no trabalho de Handogo e Luyben (1987).

4.3.2 - Dados de Entrada

A partir da simulação de uma coluna de destilação multicomponente em estado estacionário foi determinado um primeiro conjunto de frações molares, de temperatura e vazão para a solução do estado transiente.

O programa utilizado para esta simulação foi o DESTIL.FOR, o

qual calcula através das condições previamente estabelecidas pelo usuário, o perfil de composição da fase líquida e vapor, temperatura e vazão de vapor e de líquido para cada estágio da coluna de destilação, como também as cargas energéticas do refeedor e condensador.

O programa é baseado no método de TOMICH (1970), utilizando o método de Broyden (1965) para a solução do sistema de equações não lineares. A entrada de dados é feita através de arquivo e um relatório detalhado a respeito das variáveis calculadas é fornecido também via arquivo criado no decorrer da execução do programa. O fornecimento destes dados devem ser na sequência indicada abaixo:

- Número de componentes do sistema (máximo de 10)
- Nome dos componentes do sistema
- Número de estágios de equilíbrio incluindo refeedor e condensador (máximo de 25)
- Número de alimentações e saídas laterais
- Tipo de condensador (1- total , 2- parcial)
- Número máximo de iterações
- Localização da alimentação (número do estágio)
- Vazão de refluxo
- Fração de recuperação da alimentação total no destilado
- Pressão do sistema (KPa)
- Tolerância para a convergência do método Broyden
- Para a alimentação fornecer:

- Vazão molar de líquido
- Vazão molar de vapor
- Entalpia molar da fase líquida
- Entalpia molar da fase vapor
- As frações molares de todos os componentes
- Para cada componente fornecer:
 - Coeficientes do polinômio cúbico (4 coeficientes) para a entalpia molar de líquido em função da temperatura
 - Coeficientes do polinômio cúbico (4 coeficientes) para a entalpia molar de vapor em função da temperatura
 - Coeficientes para a correlação do valor de K em função da temperatura para uma solução ideal (T em Kelvin e P em KPa)
- Equação de K:

$$\ln (K*P) = A + B/T + C*T \quad (4.2)$$

- Estimativas de temperatura e vazão de vapor (em Kmoles/h) para o topo e a base

A tabela 4.2 apresenta os parâmetros de projeto e condições operacionais da coluna de destilação empregados nas simulações deste trabalho.

Tabela 4.2 - Condições de operação e características geométricas da Coluna

Número de pratos	20
Razão de refluxo	1,37
Eficiência de Murphree	1,0
Pressão (psia)	74,73
Energia para o refeedor (Btu/h)	$5,6 \times 10^6$
Diâmetro da coluna (ft)	5,0
Comprimento do vertedor (ft)	4,0
Altura do vertedor (in)	2,0
Alimentação	
Estágio	11
Vazão molar (lbmol/h)	522,77
Temperatura (°F)	154,53
Composição	n-Butano - 0,5 n-Pentano - 0,5
Destilado:	
Vazão molar (lbmol/h)	261,39
Temperatura (°F)	125,88
Composição	n-Butano - 0,99 n-Pentano - 0,01
Produto de Fundo:	
Vazão molar (lbmol/h)	261,39
Temperatura (°F)	200
Composição	n-Butano - 0,01 n-Pentano - 0,99

Os resultados obtidos da simulação do programa DESTIL.FOR foram empregados em conjunto com os dados da tabela 4.2 na simulação do programa do regime transiente (DINACOL). O passo de integração utilizado foi igual a 0.2 seg..

Como existe uma pequena diferença entre o modelo estacionário e o modelo dinâmico, devido ao método numérico utilizado, o programa do regime transiente foi executado sem que fosse alterada quaisquer das condições de operação da coluna, até que os perfis de composição e de vazões não sofressem alterações significativas. Desta forma são obtidos os perfis iniciais de composição, temperatura e vazões dos sistemas em estudo.

As propriedades físicas dos componentes puros e de mistura para o cálculo não só do equilíbrio líquido-vapor, como também das demais funções termodinâmicas necessárias para a simulação da coluna em regime transiente são listadas no Anexo 1.

Inicialmente a simulação do modelo da dinâmica da coluna de destilação contínua foi realizada para uma separação binária do sistema n-butano e n-pentano. Posteriormente o programa foi simulado para uma separação ternária, sendo o sistema composto com mais um componente com propriedades semelhantes ao do sistema binário (i-butano, n-butano, n-pentano).

O comportamento da coluna foi observado, após ser imposta no processo uma perturbação degrau de +20% na energia fornecida ao refeedor. A resposta em malha aberta é mostrada nas Figuras 4.3 e 4.4, após 10 min de operação da coluna, para as variáveis temperatura do 6º prato e composição do destilado e produto de

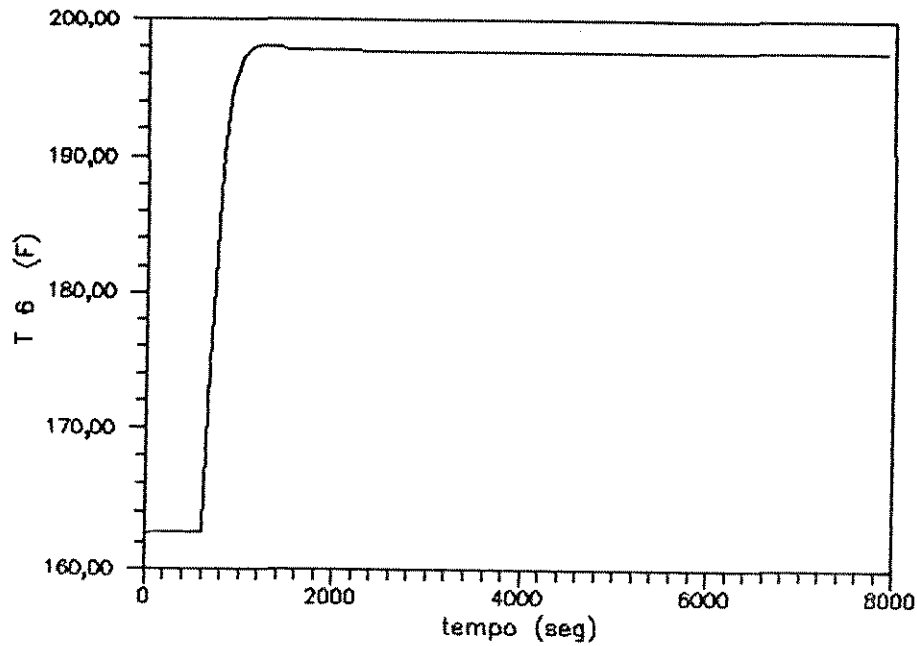


Fig.4.3 - Resposta da temperatura do prato 6 para a perturbação degrau de +20% em Q_c após 10 min. de operação da coluna em malha aberta.

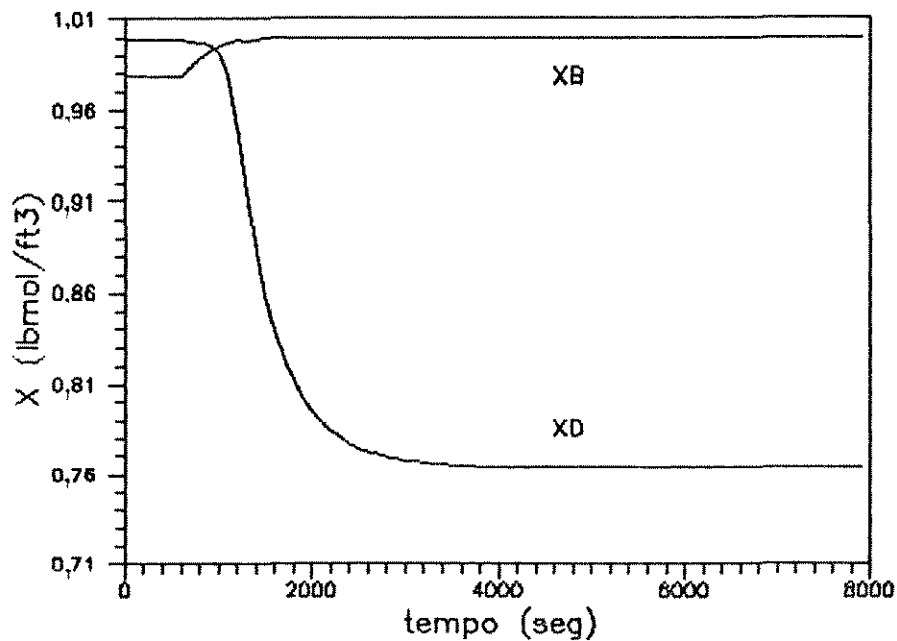


Fig.4.4 - Resposta das composições de destilado e produto de fundo do sistema $n-C_4$ $n-C_5$ para perturbação de +20% em Q_c após 10 min. de operação da coluna em malha aberta.

fundo.

Em ambas as respostas o sistema em regime permanente, após sofrer a perturbação, reage até atingir um novo estado estacionário, não ocorrendo oscilações ao longo do tempo de simulação.

Na figura 4.3, para o aumento de 20% da energia fornecida ao refulvedor, a pureza do destilado diminui bastante em benefício da pureza do produto de fundo.

Em consequência do aumento de energia, podemos observar pela figura 4.4, que a temperatura dos estágios da seção de esgotamento aumenta rapidamente e atinge o valor da temperatura da base do sistema em estado estacionário ($\cong 200$ °F).

Como apresentado no item anterior, para a coluna de destilação contínua manter-se em equilíbrio é necessário a implementação de uma malha de controle a qual assegure o balanço material e energético do processo quando ocorrer alguma perturbação.

No item seguinte será descrita uma malha de controle para o estudo do comportamento da coluna frente a possíveis perturbações degenerativas do sistema em estado estacionário.

4.4 - SIMULAÇÃO DO MODELO DA DINÂMICA DE UMA DESTILAÇÃO CONTÍNUA COM CONTROLE

4.4.1 - Introdução ao Esquema de Controle

Um esquema simplificado de controle foi adaptado ao modelo da dinâmica de uma destilação contínua (figura 4.5), apresentado no item anterior. O objetivo deste esquema é manter constante a temperatura de um prato intermediário da seção de esgotamento da coluna. A variável manipulada foi a quantidade de energia fornecida ao refulvedor, como é ilustrado na figura 4.5. A energia fornecida ao refulvedor da coluna foi escolhida como variável manipulada com o propósito de estudar posteriormente o sistema integrado energeticamente.

4.4.2 - Função de Controle do Processo

Dinamicamente, o controle de um prato intermediário da seção de esgotamento de uma coluna contínua, pode ser feito adequadamente, através de um controlador por realimentação convencional, para manipular a entrada de calor no refulvedor. A razão de refluxo deve ser mantida constante ou estar relacionada com a vazão de alimentação.

A equação que descreve a função de controle é:

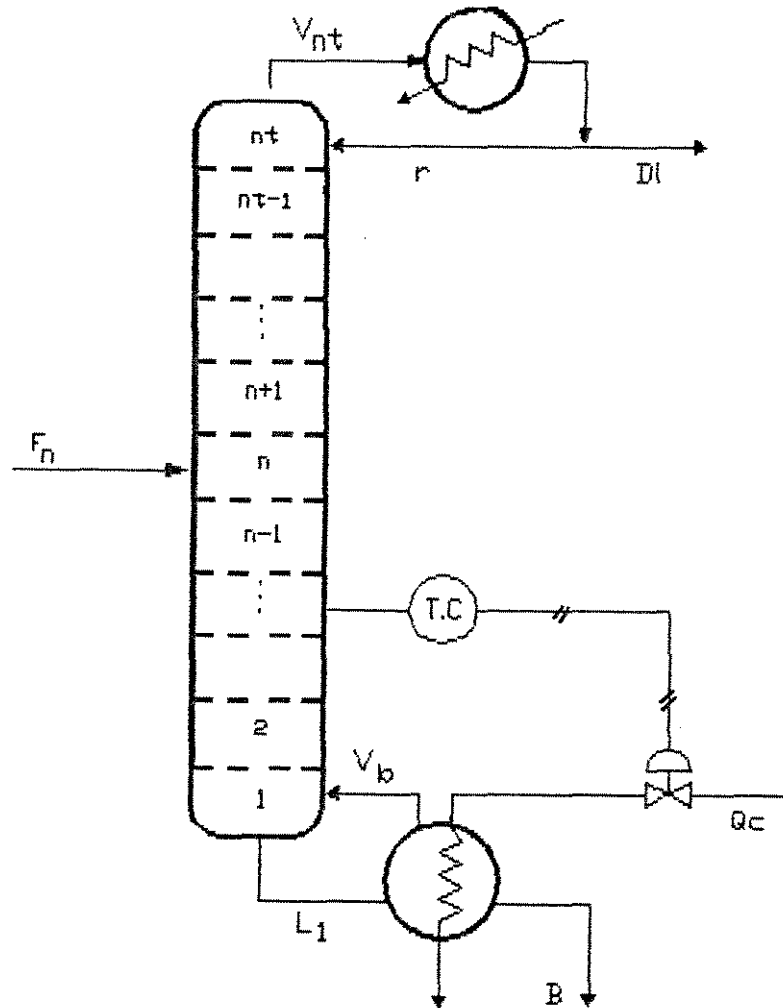


Fig.4.5 - Esquema de Controle do Modelo Dinâmico da Coluna

$$Q_c = Q_{c0} + K_p (T_{set} - T_n) + K_I \int (T_{set} - T_n) dt \quad (4.3)$$

Onde:

Q_c = valor do calor para o refervedor dado pelo controlador

Q_{c0} = valor do calor para o refervedor para erro igual a

zero ($T_{set} = T_n$)

T_{set} = valor de referência ou ponto de ajuste para o controlador de temperatura do prato da coluna

T_n = valor da variável controlada

A temperatura do sexto prato foi usada como variável controlada do processo ($T_n = T_6$).

Os parâmetros do controlador foram ajustados pelo método de Ziegler-Nichols (1942). O procedimento de cálculo dos valores dos parâmetros do controlador de temperatura usado para a coluna é detalhado no item seguinte.

4.4.3 - Ajuste dos Parâmetros do Controlador PI da Coluna

Método da Ciclagem Contínua

Os métodos de sintonização por tentativa e erro, podem ser considerados como uma variação do método da ciclagem contínua publicado por Ziegler e Nichols (1942). Este método clássico e aproximado é provavelmente o melhor para a sintonização de controladores PID.

Alguns processos sob a ação do controle proporcional, apresentam um valor limite do ganho proporcional, $K_{p, \text{lim}}$, acima do qual a malha de controle é instável. Para $K_p = K_{p, \text{lim}}$ a resposta da malha de controle a um degrau é oscilatória, não-amortecida, com período T_p .

O método de ciclagem contínua consiste em determinar os

valores de K_p , \lim e T_p .

Aplicação do Método

Os passos para a utilização do método são:

- 1- Inicialmente elimina-se a ação integral e a derivativa de controle, colocando τ_i no seu valor máximo e τ_d no seu valor mínimo
- 2- Com um valor pequeno de K_p , ($K_p = 0,5$, p.ex.), passar o controlador para automático
- 3- Aumentar o valor de K_p progressivamente até que seja atingido um valor para o qual, por ação de uma ligeira variação do valor de referência ou de uma perturbação, o processo passe a exibir uma resposta oscilatória não amortecida.
- 4- Registrar este valor limite de K_p e a partir da resposta medir o período de oscilação, T_p .

Para a aplicação desse método de sintonização foi imposta ao processo uma perturbação degrau de +20% na entrada de energia fornecida ao refeedor e o modelo da dinâmica da coluna de destilação foi simulado com os mesmos dados e o sistema da tabela 4.2. A resposta em malha fechada foi analisada para cada variação do valor de K_p . Os resultados obtidos estão mostrados nas figuras 4.6 a 4.15.

Inicialmente a simulação foi realizada com um valor pequeno do parâmetro K_p (figura 4.6), como orientado na aplicação do método empregado. Nas figuras 4.7 e 4.8 podemos observar a reação do sistema quando variamos progressivamente o valor de K_p . Para tais valores a resposta é oscilatória, porém o sistema continua apresentando regiões de estabilidade o que nos indica que o valor de $K_{p,lim}$ ainda não foi atingido. Na figura 4.9 a resposta do sistema é toda oscilatória ao longo do tempo de simulação e em média essas oscilações apresentam amplitudes e período constantes.

Aumentando-se mais o valor de K_p , nota-se nas figuras 4.10 e 4.11, que as oscilações ocorrem em todo o tempo de simulação, entretanto o período e a amplitude das mesmas, não são regulares indicando que a região do $K_{p,lim}$ foi ultrapassada.

As figuras 4.12 e 4.13 exemplificam um conjunto de valores de K_p , relativamente altos. Para esses valores o sistema com controle apresenta-se bastante instável com oscilações bruscas de alta amplitude. Esses valores são considerados também, como fora da região do $K_{p,lim}$.

A partir da análise dos resultados, considerou-se que para $K_p = 0,9$, as oscilações se mantiveram relativamente constantes, assim este valor de K_p foi registrado como $K_{p,lim}$. O período T_p , pode ser determinado através da figura 4.9., medindo-se o tempo entre os picos de duas oscilações consecutivas e iguais, sendo o seu valor igual a 400 segundos ou 6.67 minutos.

A partir da determinação dos valores limites, $K_{p,lim}$ e T_p , utilizou-se as relações de sintonização de parâmetros de

Ziegler-Nichols da tabela 4.3 (Seborg, 1989), para determinar os valores ótimos de K_p e τ_i .

Tabela 4.3 - Valores dos parâmetros do controlador a serem determinados pelo método de Ziegler-Nichols

Controlador	K_p	τ_i	τ_d
P	$0,5 K_{p, \text{lim}}$	—	—
PI	$0,45 K_{p, \text{lim}}$	$T_p / 1,2$	—
PID	$0,6 K_{p, \text{lim}}$	$T_p / 2$	$T_p / 8$

Os parâmetros ótimos do controlador PI da coluna determinados pela tabela 4.3 são:

$$K_p = 0,405 \quad [\text{Btu}/^\circ\text{C h}]$$

$$\tau_i = 5,56 \text{ min}$$

O valor de K_I na equação (4.3) é:

$$K_I = \frac{K_p}{\tau_i} = 4,374 \quad [\text{Btu}/^\circ\text{C h}^2]$$

A figura 4.14, mostra a resposta do processo com o controlador sintonizado, ao degrau de +20% na energia fornecida ao

refervedor da coluna no tempo zero, para uma separação binária (n-Butano e n-Pentano) e a figura 4.15 para uma separação ternária (i-Butano, n-Butano e n-Pentano). Após 1000 segundos (ou 16 min) de execução para o sistema binário e 2200 segundos (ou 37 min) para o sistema ternário, o erro é eliminado e o processo retorna ao regime estacionário original. Com os mesmos parâmetros utilizados observamos que o sistema ternário demora mais tempo para se estabilizar ou seja ele é dinamicamente mais lento do que o sistema binário.

Esta diferença no tempo de resposta apresentado pelo sistema ternário pode aumentar proporcionalmente para sistemas com mais componentes. Assim os parâmetros ótimos do controlador determinados para o sistema binário podem não satisfazer adequadamente as exigências de um sistema multicomponente, mesmo utilizando a mesma coluna.

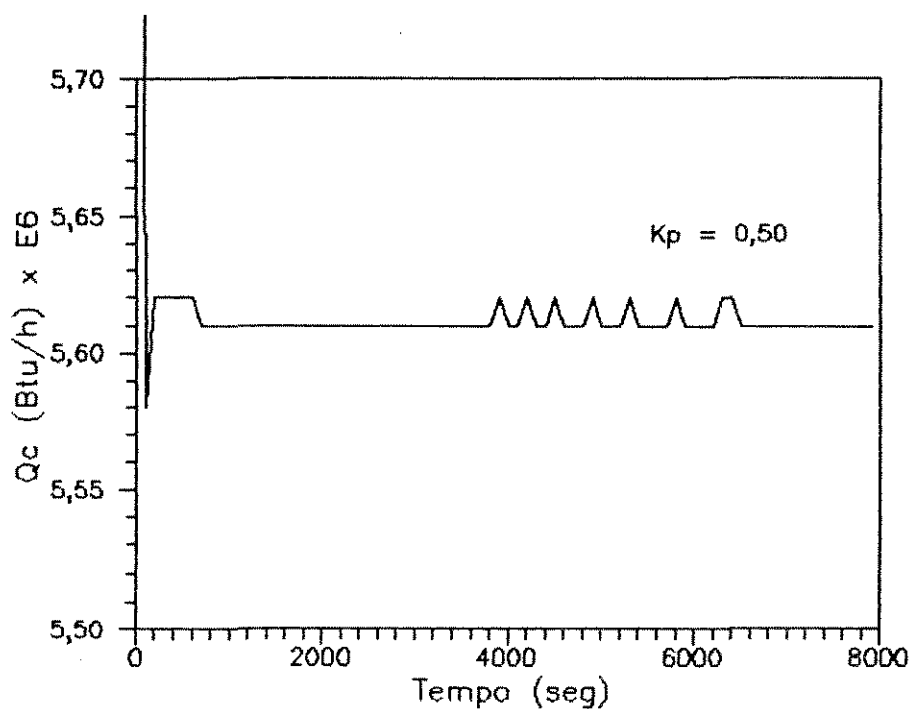


Fig. 4.6 - Resposta do controlador de temperatura da coluna para

$$K_p = 0,5 \quad (K_p < K_{p,lim})$$

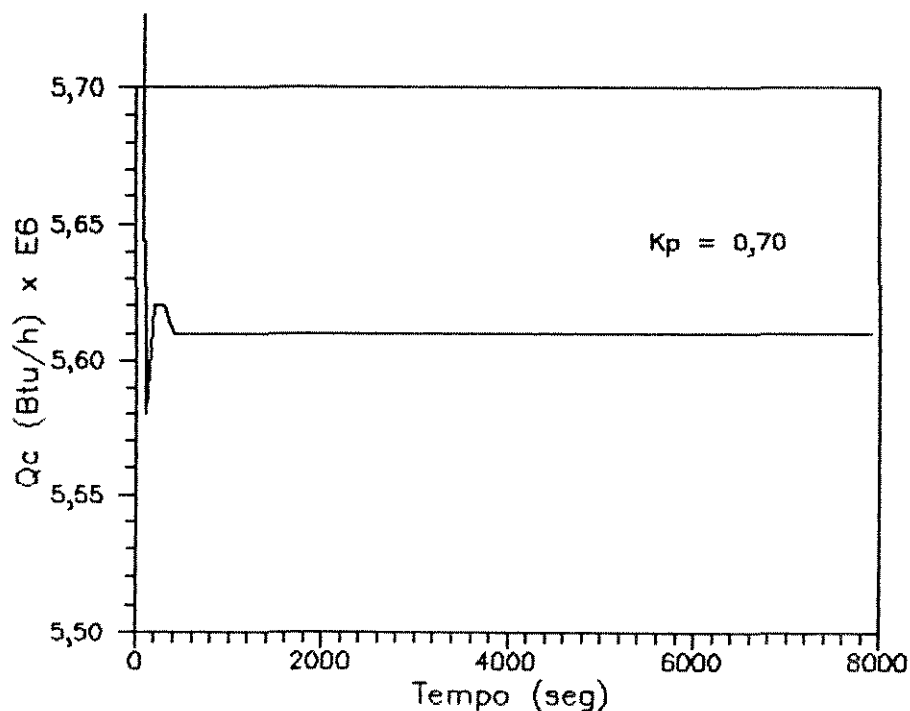


Fig. 4.7 - Resposta do controlador de temperatura da coluna para

$$K_p = 0,7 \quad (K_p < K_{p,lim})$$

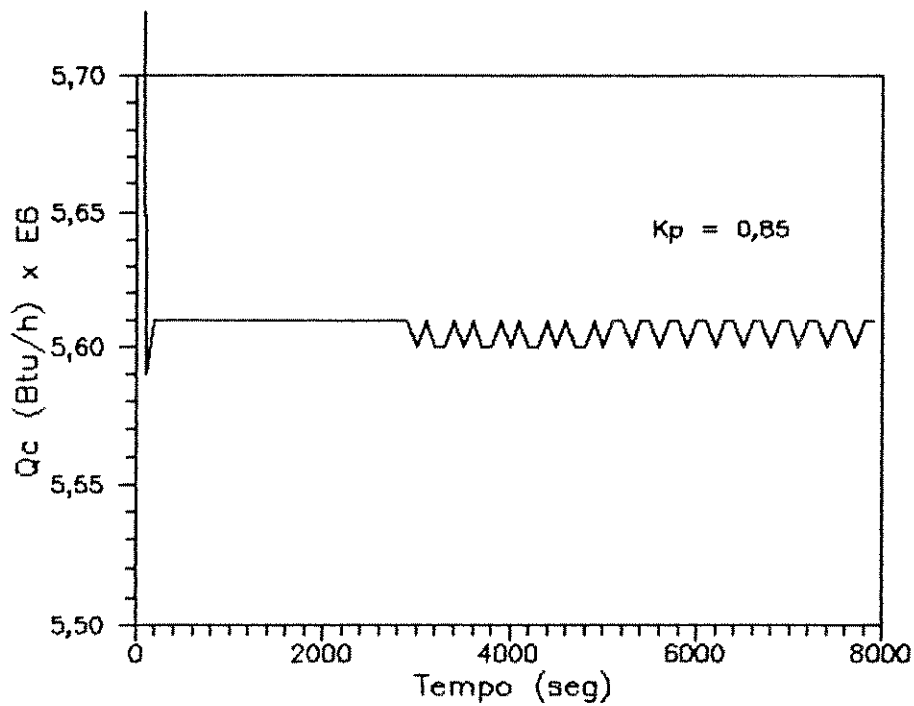


Fig.4.8- Resposta do controlador de temperatura da coluna para

$$K_p = 0,85 < K_p < K_{p,lim} >$$

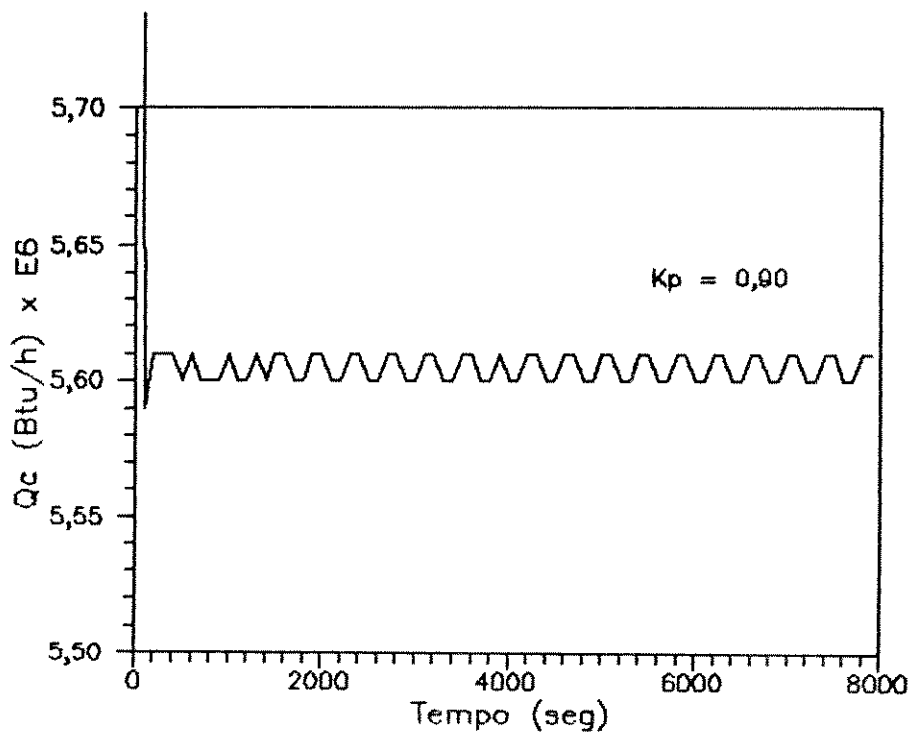


Fig.4.9 - Resposta do controlador de temperatura da coluna para

$$K_p = 0,9 < K_p = K_{p,lim} >$$

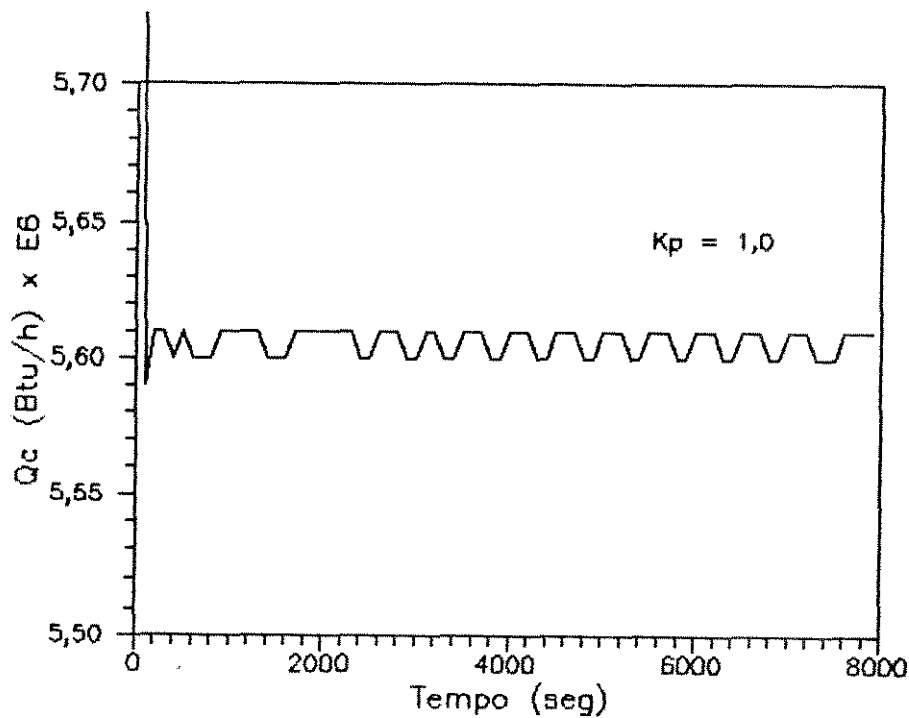


Fig.4.10 - Resposta do controlador de temperatura da coluna para

$$K_p = 1,0 \text{ (} K_p > K_{p,lim} \text{)}$$

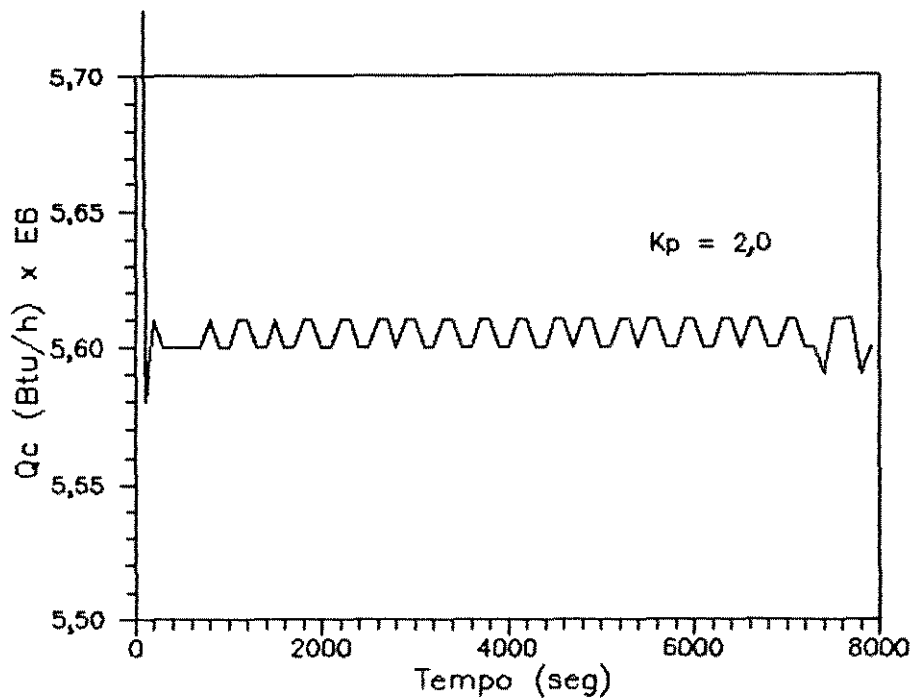


Fig.4.11 - Resposta do controlador de temperatura da coluna para

$$K_p = 2,0 \text{ (} K_p > K_{p,lim} \text{)}$$

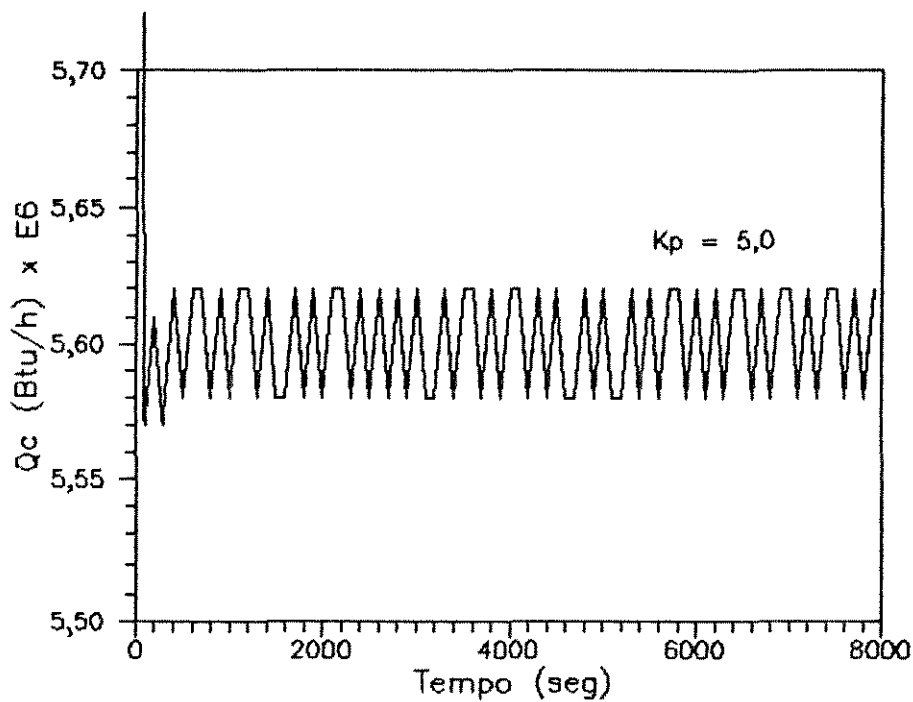


Fig.4.12 - Resposta do controlador de temperatura da coluna para

$$K_p = 5,0 \left(K_p > K_{p,lim} \right)$$

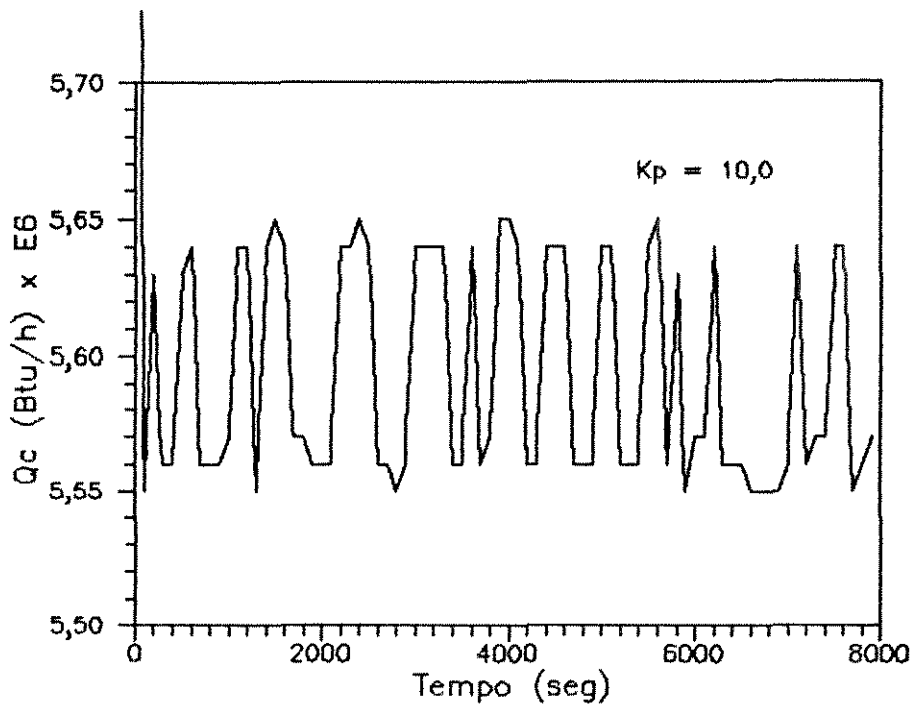


Fig.4.13 - Resposta do controlador de temperatura da coluna para

$$K_p = 10,0 \left(K_p > K_{p,lim} \right)$$

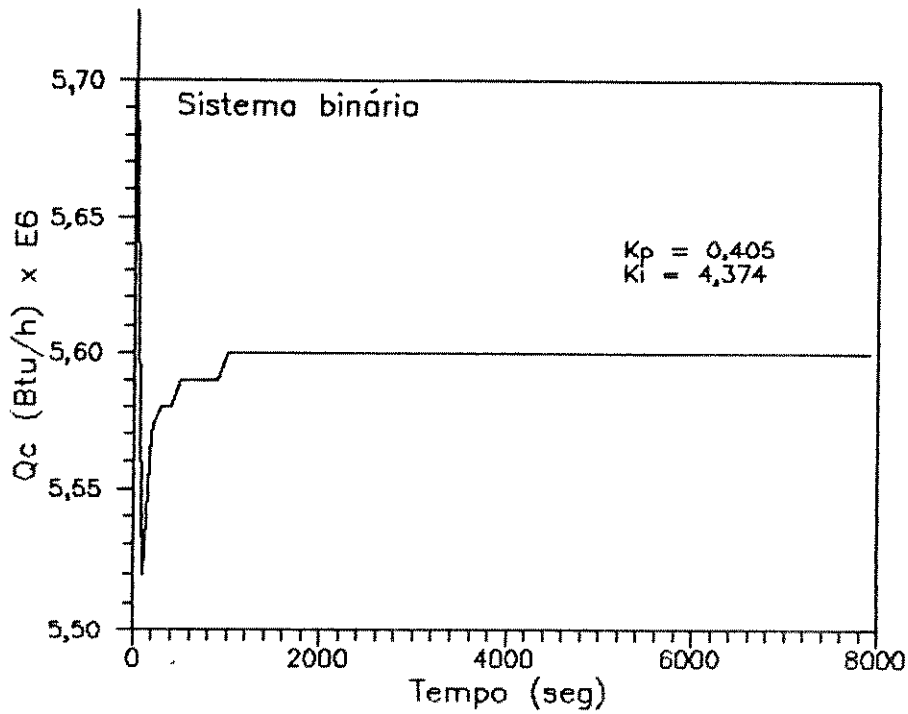


Fig.4.14 - Resposta do controlador de temperatura da coluna para

$K_p = 0,405$ e $\tau_i = 5,56$ min para o sistema $n-C_4$ $n-C_5$

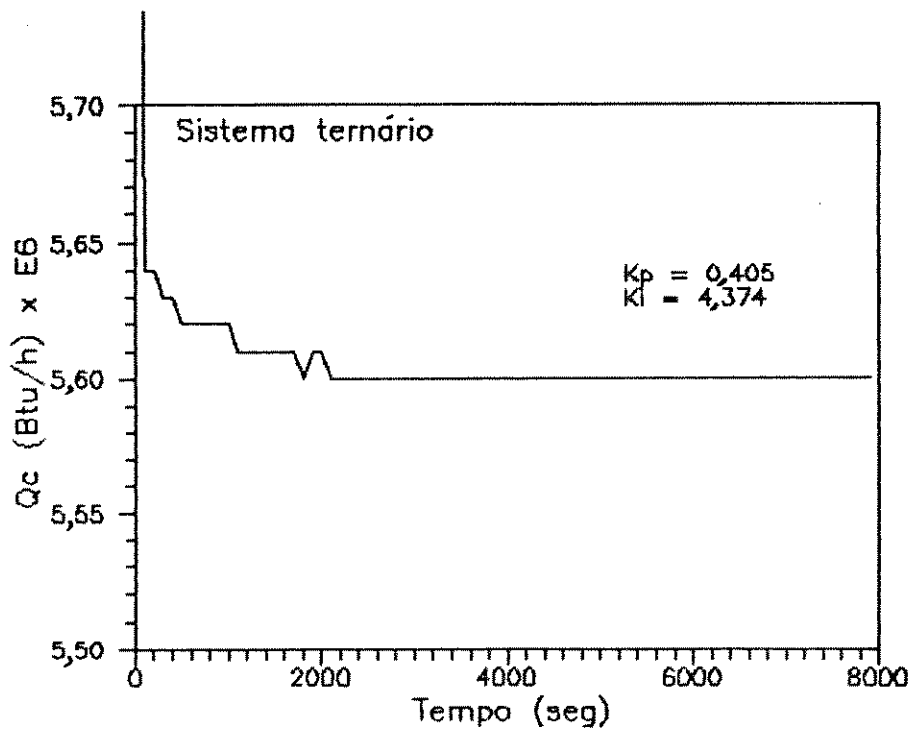


Fig.4.15 - Resposta do controlador de temperatura da coluna para

$K_p = 0,450$ e $\tau_i = 5,56$ min para o sistema $i-C_4$ $n-C_4$ $n-C_5$

4.5 - SIMULAÇÃO DO MODELO DO REATOR CSTR NÃO - ISOTÉRMICO COM CONTROLE

4.5.1 - Dinâmica do Modelo em Malha Aberta

Para a simulação do modelo apresentado para o reator CSTR não-isotérmico, considerou-se um processo reacional com cinética de 1° ordem e volume constante. O reator é do tipo cilíndrico vertical, sendo a relação entre a altura e o diâmetro igual a 2.

Para solucionar o conjunto de equações que representam a modelagem matemática desse processo (equações (3.23) a (3.32)), foi desenvolvido um programa , REA, esquematizado em diagrama de blocos no Anexo 4.

Os valores dos principais parâmetros necessários à simulação e execução do programa foram baseados no trabalho de Handogo e Luyben (1987) e são listados na tabela 4.4. Tanto para a coluna como para o reator foram usadas unidades inglesas de medida, em concordância com as referências citadas.

A reação exotérmica produz uma taxa de energia de $5,6 \times 10^6$ Btu/h sob condições de estado estacionário. Inicialmente o processo foi simulado para uma perturbação de +10% na concentração de reagente limite , C_{A0} , da alimentação. A resposta em malha aberta é mostrada nas figuras 4.16, 4.17 e 4.18, onde pode-se observar o comportamento dinâmico das variáveis temperatura, concentração e taxa de energia liberada pela reação.

Tabela 4.4 - Parâmetros de Projeto e Condições Iniciais para o Reator CSTR Não-Isotérmico

PARÂMETROS DO REATOR	
Volume, $V(\text{ft}^3)$	1337,2
Vazão, $F(\text{ft}^3/\text{h})$	1114,2
Volume da Jaqueta, $V_j(\text{ft}^3)$	27,27
Vazão de Líquido de Resf., $F_j(\text{ft}^3/\text{h})$	354,10
Temperatura da Alimentação, $T_o(^{\circ}\text{F})$	330,0
Conc. da Alimentação, $C_{Ao}(\text{Lbmol}/\text{ft}^3)$	0,50
Temp. do Líq. de Resfriamento, $T_{jo}(^{\circ}\text{F})$	80,0
Coef. Global de Trans. de Calor, $U(\text{Btu}/\text{hft}^2\text{R})$	150,0
Calor Esp. do Líq. de Resfr., $C_j(\text{Btu}/\text{lb}^{\circ}\text{F})$	1,0
Calor Esp. do Líq. do Processo, $C_p(\text{Btu}/\text{lb}^{\circ}\text{F})$	0,75
Massa Esp. do Líq. de Resfr., $\rho_j(\text{lb}/\text{ft}^3)$	62,3
Massa Esp. do Líq. do Processo, $\rho(\text{lb}/\text{ft}^3)$	50,0
CONDIÇÕES BÁSICAS DO ESTADO ESTACIONÁRIO	
Temperatura do Produto, $T(^{\circ}\text{F})$	400,0
Concentração do Produto, $C_A(\text{lbmol}/\text{ft}^3)$	0,245
Fator Pré- Exponencial, $\alpha(\text{h}^{-1})$	$4,0 \times 10^{15}$
Energia de Ativação, $E(\text{Btu}/\text{lbmol})$	30000,0
Calor de Reação, $\lambda(\text{Btu}/\text{lbmol})$	-30000,0

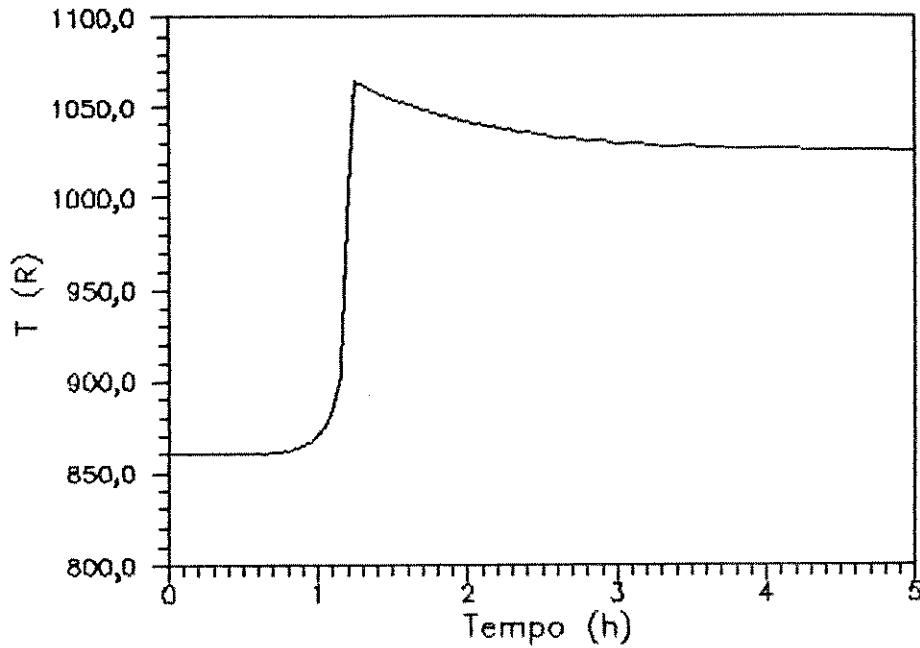


Fig.4.16 - Resposta da temperatura do reator para perturbação degrau de +10% em C_{Ao} após 30 min. de operação do sistema em malha aberta.

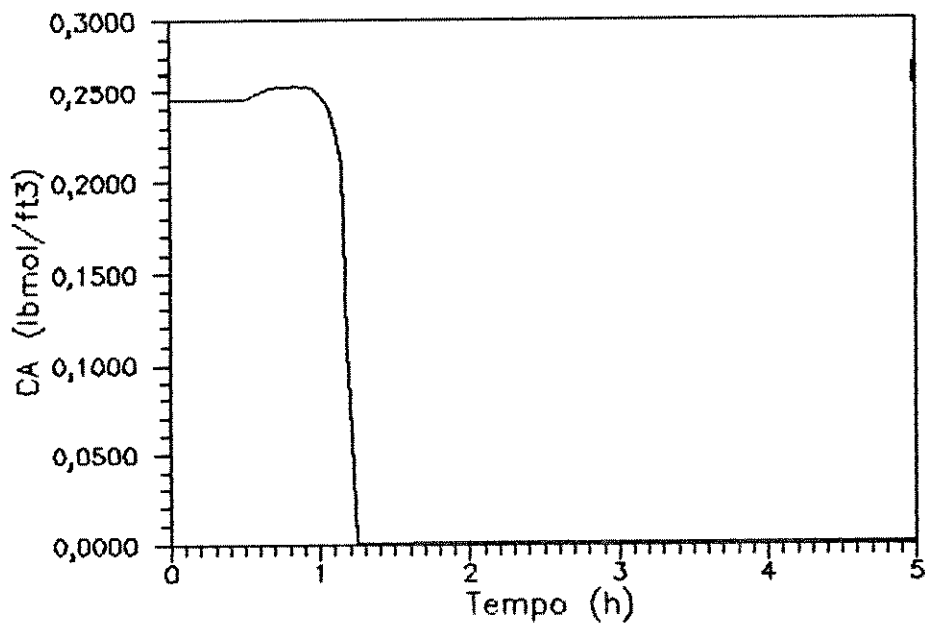


Fig.4.17 - Resposta da concentração do reator para a perturbação degrau de +10% em C_{Ao} após 30 min. de operação do sistema em malha aberta

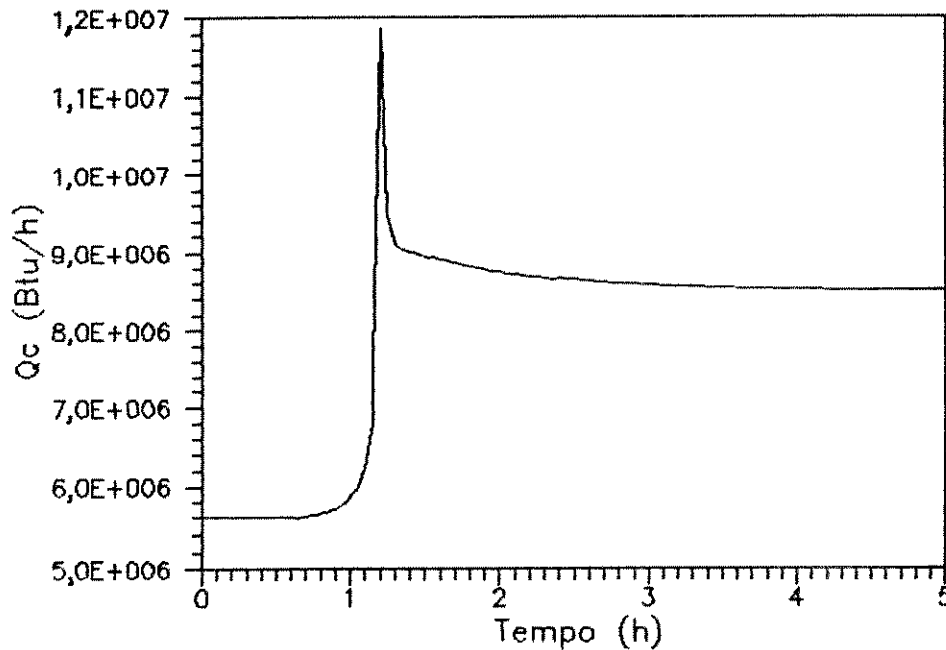


Fig.4.18 - Resposta da taxa de energia removida do processo reacional para perturbação degrau de + 10% em C_{Ao} após 30 min de operação do sistema em malha aberta.

O sistema foi perturbado após 30 minutos de operação e apresentou um atraso de resposta de aproximadamente 20 minutos.

Na figura 4.17, com um aumento na concentração de A na alimentação, o sistema reage inicialmente com um aumento na concentração de A na saída. Após 1 hora de simulação a concentração de A na saída se anula.

Nas figuras 4.16 e 4.18 as respostas das variáveis temperatura e calor gerado no processo, oscilam em um valor máximo diminuindo até atingirem um novo estado estacionário após duas horas de simulação, sendo que para o calor gerado a variação sofrida é mais acentuada.

No próximo item será analisado o parâmetro do controlador de temperatura para o reator e o comportamento do processo em malha fechada.

4.5.2 - Ajuste do Parâmetro do Controlador P do Reator

Inicialmente, como comentado no item anterior, o programa REA foi simulado sem controle. Para analisar o comportamento do sistema em malha fechada foi necessário determinar o parâmetro do controlador P dado pela função de controle na equação (3.32).

Para o modelo de controle da coluna de destilação foi empregado o método de ciclagem contínua e os parâmetros de Ziegler-Nichols para ajuste de controladores PID.

Para o reator CSTR, não foi utilizado tal método. Segundo Seborg (1989), esse procedimento não é aplicável a processos que são instáveis em malha aberta, já que esses processos são tipicamente instáveis tanto para altos e baixos valores de K_c , mas são estáveis num intervalo intermediário de valores, ou seja entre dois extremos onde $K_c = K_{\max}$ e $K_c = K_{\min}$.

O modelo do reator CSTR não-isotérmico, apresenta não linearidade devido ao termo exponencial da equação da velocidade específica da reação, dada por Arrhenius (Equação (3.31)). Se o modelo do processo não é linear uma teoria avançada de estabilidade pode ser usada para análise do processo (Vidyasagor (1978)).

O estudo da controlabilidade e do tipo de controle para reatores com reação exotérmica tem sido tema de vários trabalhos. Cheung e Luyben (1979), estudaram o comportamento de um controlador PD para reatores de várias capacidades. Nesse trabalho foram apresentados resultados da sintonização dos parâmetros

do controlador utilizado e os valores ótimos são apresentados na figura 4.19 (a e b). Tais resultados foram testados para o nosso reator CSTR não-isotérmico.

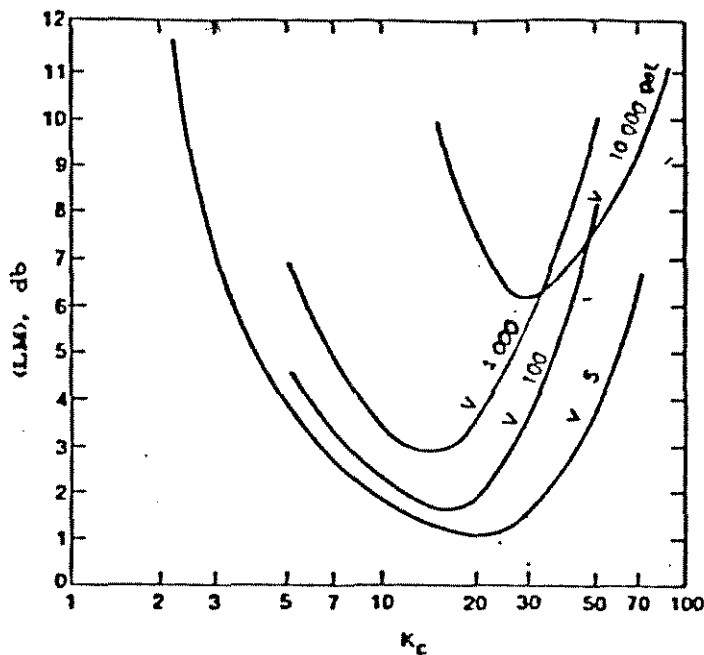
A simulação do programa REA foi realizada para uma perturbação degrau de +10% na concentração da alimentação, após 30 minutos de operação do sistema. A resposta em malha fechada foi obtida e analisada para alguns valores de K_c do controlador proporcional. Os resultados obtidos foram colocados na forma gráfica para as variáveis F_j (variável manipulada), T (variável controlada) e para Q_c e são mostrados nas figuras 4.20, 4.21 e 4.22.

Considerando que o controlador de temperatura tem por objetivo manter constante o valor da temperatura da reação no seu valor de referência (set point), e a conversão do sistema em seu valor do estado estacionário, temos que com um aumento ou queda em C_{Ao} , o valor de C_A na saída do reator tenderá a um valor maior ou menor do que o seu no estado estacionário. Se ao contrário desejássemos manter constantes no processo a temperatura T e C_A , uma perturbação em C_{Ao} levaria a uma conversão tal que satisfizesse tal condição. Para garantir uma conversão mínima seria necessário, então que o valor da temperatura de referência para o controlador variasse ao longo do tempo.

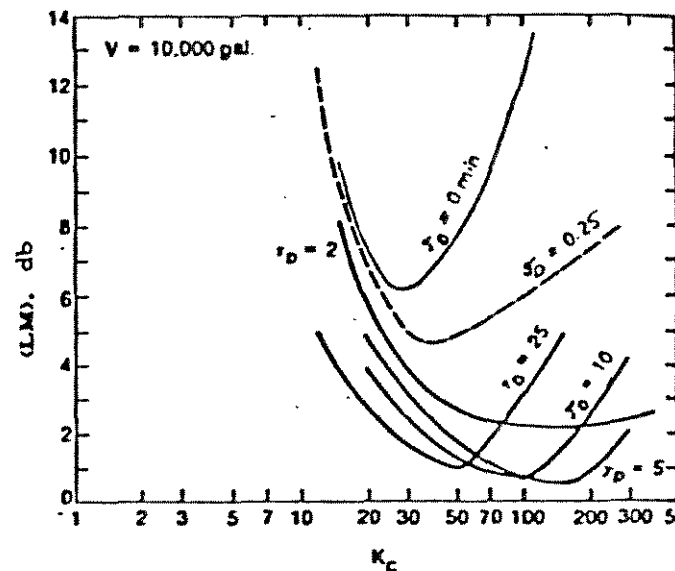
Usando apenas controlador de ação proporcional o K_c ótimo é 30 e o K_{max} é 239 (figura 4.19 - a). Na figura 4.19 - b, o valor ótimo de K_c é 130 e o valor de K_{max} é 6650, utilizando controlador PD, com ação derivativa ($\tau_d = 2 \text{ min}$). Podemos

observar que esses valores dos parâmetros proporcionam uma região de estabilidade para o reator bastante ampla. Os valores de $K_c = 30$ e 130 e seus respectivos máximos foram testados para o controlador de temperatura do reator de ação proporcional como comentado anteriormente, sem a ação derivativa.

Nas figuras que apresentam os resultados podemos observar que o valor de $K_c = 30$ é oscilatório em relação aos K_c 's acima desse valor. Para valores acima de $K_c = 130$ a resposta do sistema perturbado não varia muito entre si, isto é o valor do desvio permanente não é bem diferenciado, mesmo usando os extremos dos valores do parâmetro do controlador (os K_{max}).



a) - Resposta da malha fechada do controlador P do reator



b) - Resposta da malha fechada do controlador PD do reator

Fig. 4.19 - Resultados do estudo de Cheung e Luyben (1979)

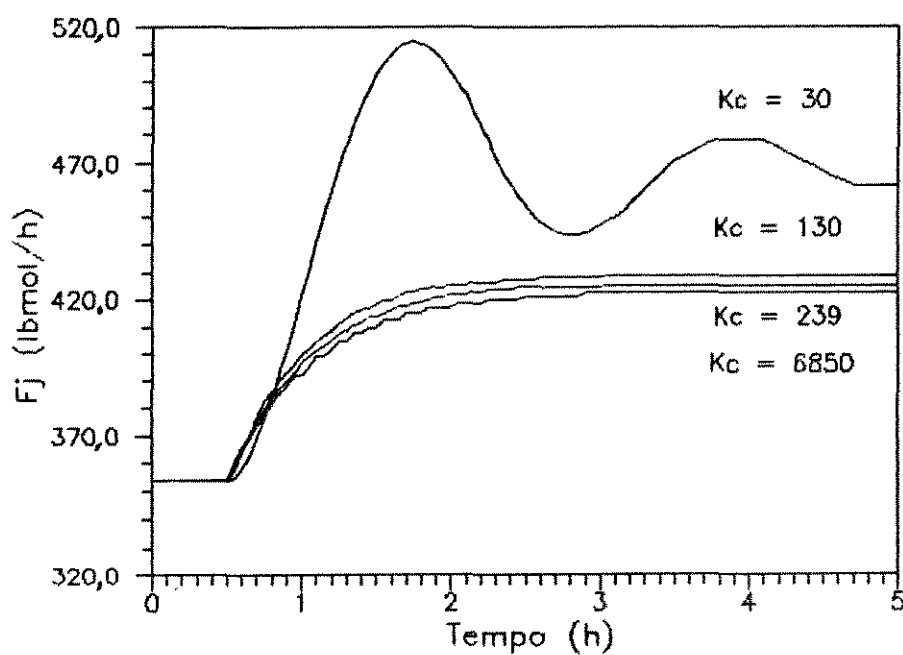


Fig.4.20 - Resposta do sistema em malha fechada da variável manipulada, ao degrau de +10% em C_{A0}

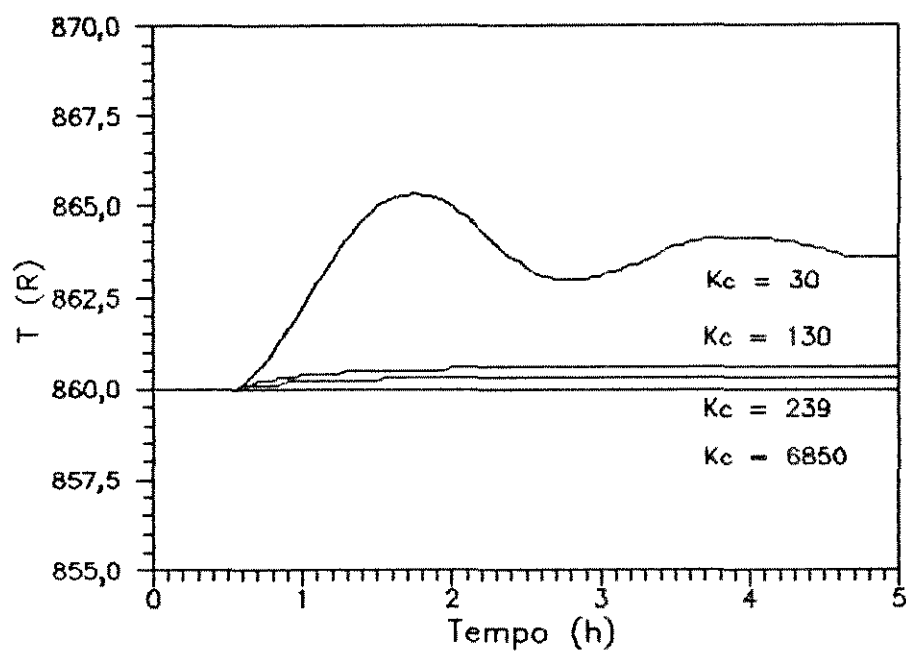


Fig.4.21 - Resposta do sistema em malha fechada da variável controlada do reator, ao degrau de +10% em C_{A0}

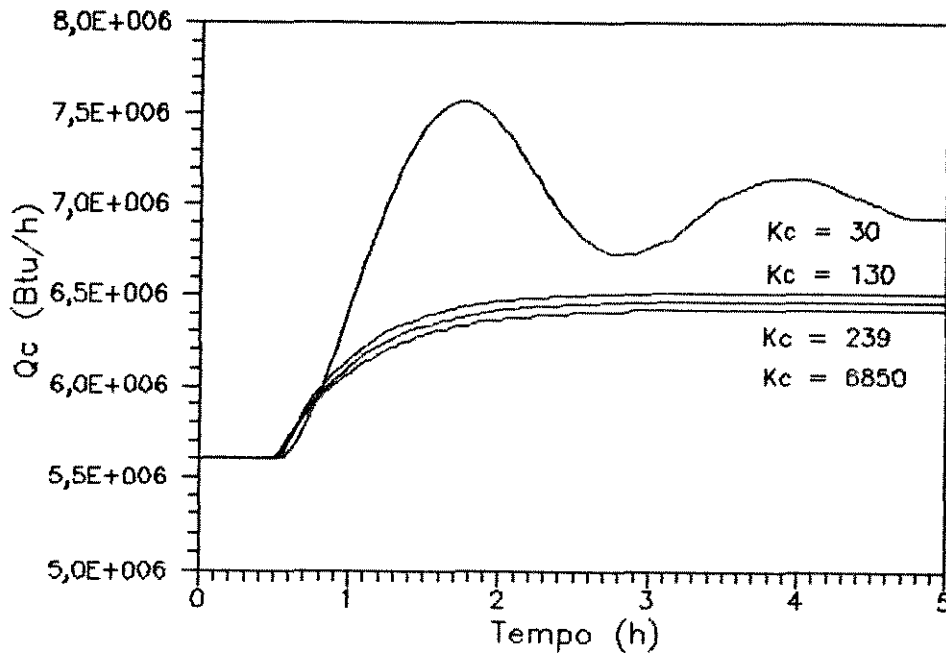


Fig.4.22 - Resposta da taxa de energia removida do processo reacional do sistema em malha fechada

Somente ação proporcional foi testada para o controle de temperatura do reator, portanto não houve a eliminação do desvio permanente e o sistema estabilizou-se em um novo estado estacionário. Entretanto, o atraso de resposta apresentado pelo sistema em malha aberta (figuras 4.16 a 4.18), não foi observado quando apenas controle proporcional foi empregado. Isto diminui o tempo de resposta do sistema em malha fechada permitindo uma análise mais fácil da dinâmica do processo.

A adição de ação integral e derivativa na função de controle, para eliminação do desvio permanente não foi realizada. Como apresentado pelos autores Cheung e Luyben (1979) no seu trabalho , o estudo da controlabilidade para o reator CSTR não-isotérmico e o seu comportamento em malha fechada requer a

aplicação de critérios de estabilidade apropriados que levam em consideração a função transferência do processo.

Neste trabalho o sistema foi simulado apenas para perturbação positiva, a qual proporcionou um desvio permanente positivo dos valores das variáveis analisadas (figuras 4.20 a 4.22). Isto é importante no caso da variável Q_c , energia removida pela jaqueta de resfriamento que será utilizada quando o sistema reator/coluna forem integrados.

4.6 - SISTEMA REATOR/COLUNA INTEGRADOS ENERGETICAMENTE

4.6.1 - Apresentação do Esquema para Integração Energética

Baseado no estudo dos modelos da coluna de destilação contínua e do reator CSTR não-isotérmico, podemos apresentar um esquema de integração energética dos dois processos. A figura 4.23 ilustra o sistema integrado através de uma malha de controle simplificada, envolvendo apenas dois controladores de temperatura analisados anteriormente para os processos separados.

A simulação do sistema integrado foi realizada, utilizando-se o comando "System" (turbo C), através do qual consegue-se o processamento das duas unidades simultaneamente por interfaciamento dos programas computacionais desenvolvidos. A interface das duas unidades é realizada através de arquivo de dados criado durante o tempo de processamento (INTERFAC), como é ilustrado no diagrama de blocos do Anexo 5.

Na integração realizada o reator atua como fonte de energia para a coluna. Estando o sistema acoplado, no estado estacionário, toda a energia produzida no processo reacional é utilizada no refeedor da coluna.

4.6.2 - Dinâmica do Sistema Reator/Coluna Integrados

Os mesmos parâmetros dos controladores de temperatura da coluna de destilação e do reator CSTR foram considerados para o

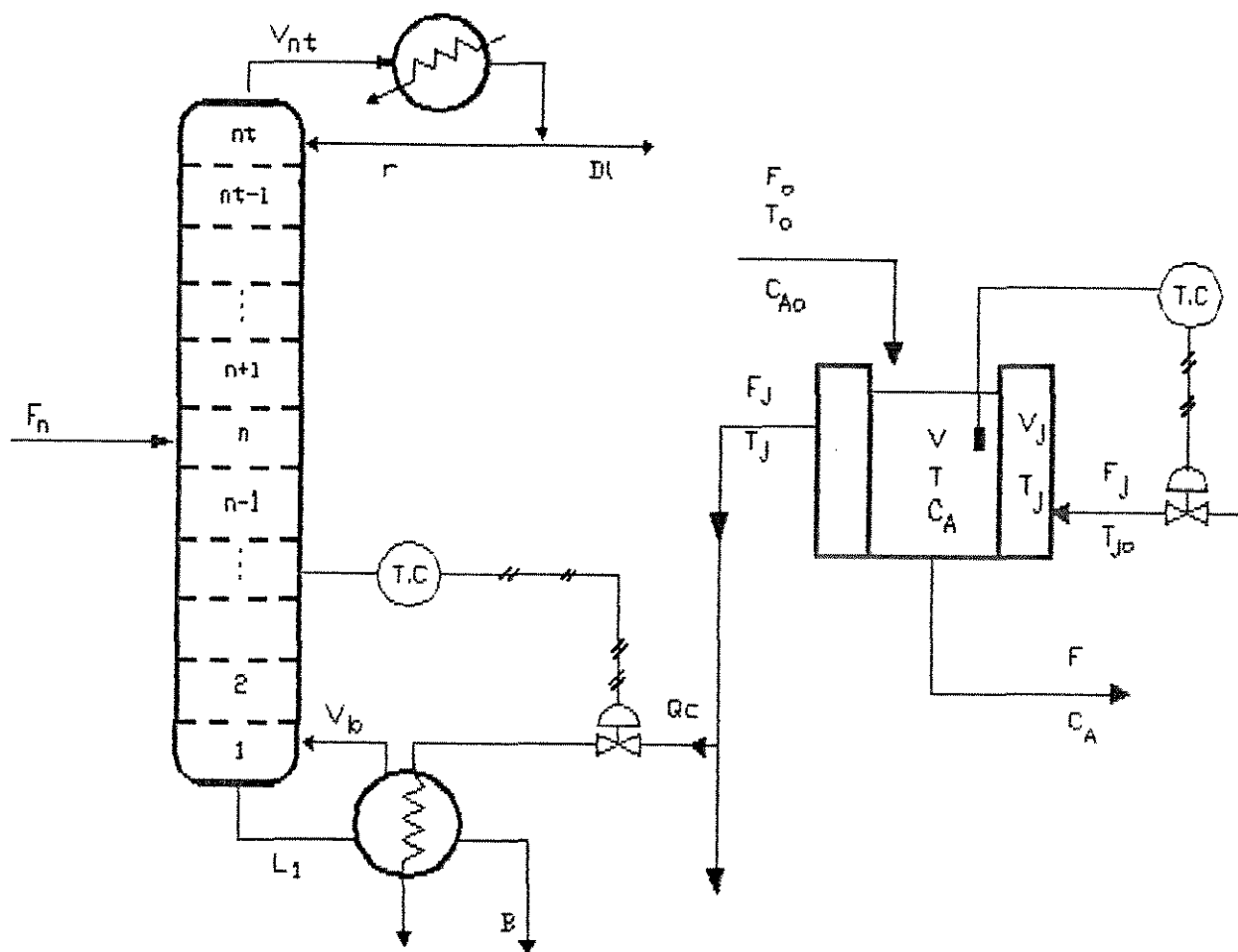


Fig. 4.23 - Esquema do sistema reator/coluna integrados energeticamente

sistema integrado.

O sistema foi simulado, perturbando-se o processo reacional. As respostas foram obtidas para uma separação binária e para uma separação ternária já utilizadas nas simulações anteriores.

Uma perturbação degrau de + 10% na concentração de A na alimentação do reator foi dada, a fim de verificar o comportamento dinâmico das duas unidades integradas. A resposta do sistema é mostrada nas figuras 4.24 a 4.27, sendo a variável analisada a

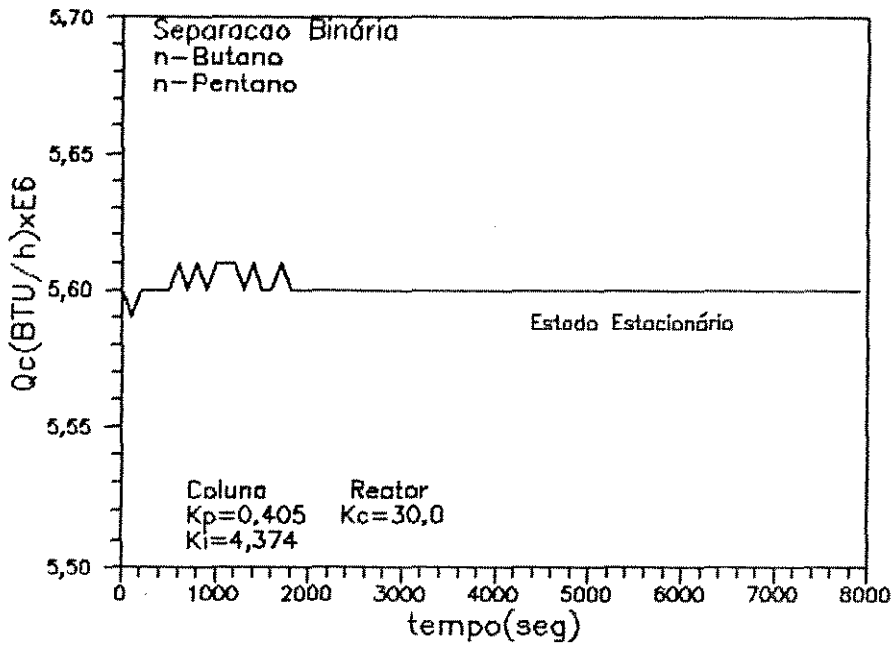


Fig.4.24 - Resposta da taxa de energia para o refeedor da coluna do sistema integrado para uma separação binária.
($K_c = 30$)

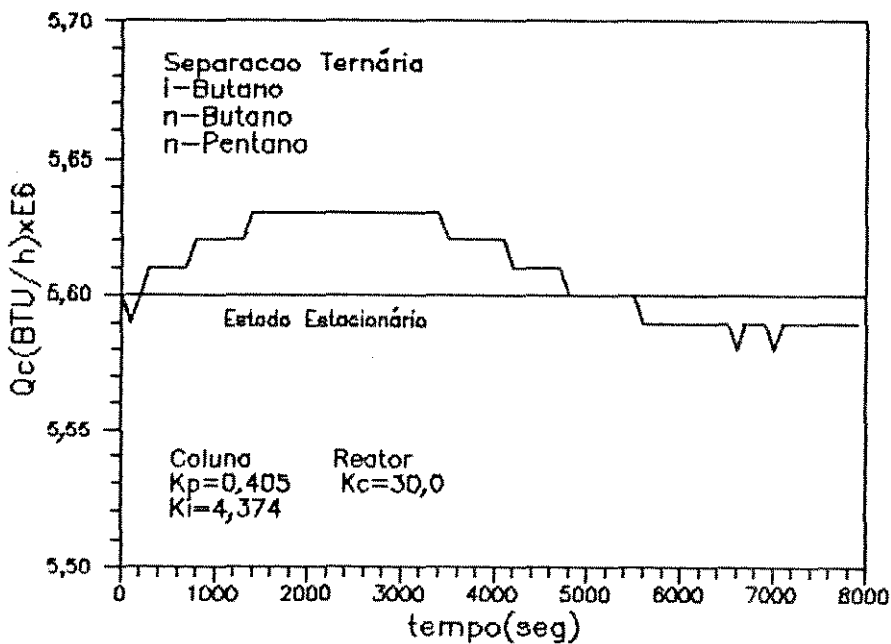


Fig.4.25 - Resposta da taxa de energia para o refeedor da coluna do sistema integrado para uma separação ternária.
($K_c = 30$)

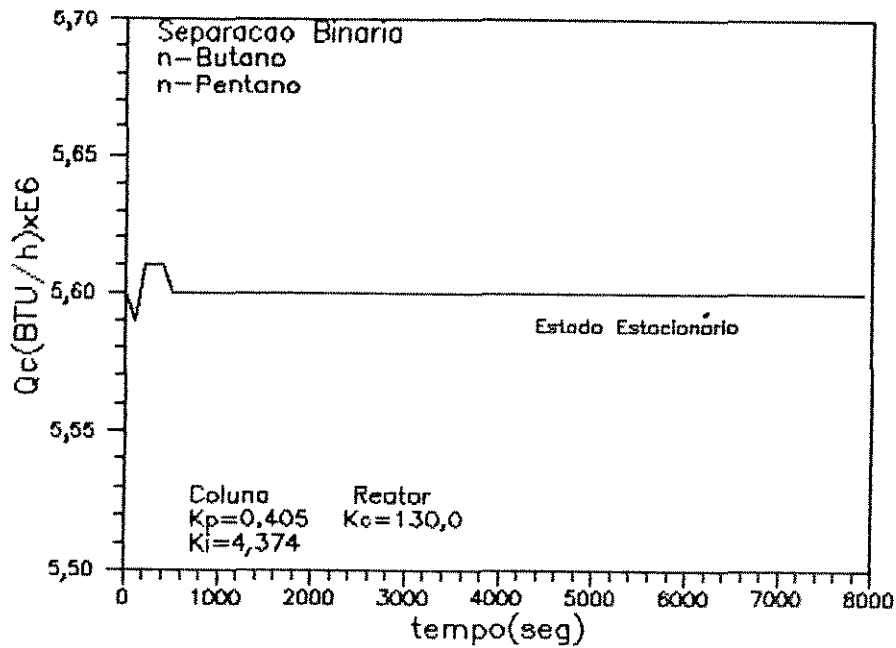


Fig.4.26 - Resposta da taxa de energia para o refeedor da coluna do sistema integrado para uma separação binária.

($K_c = 130$)

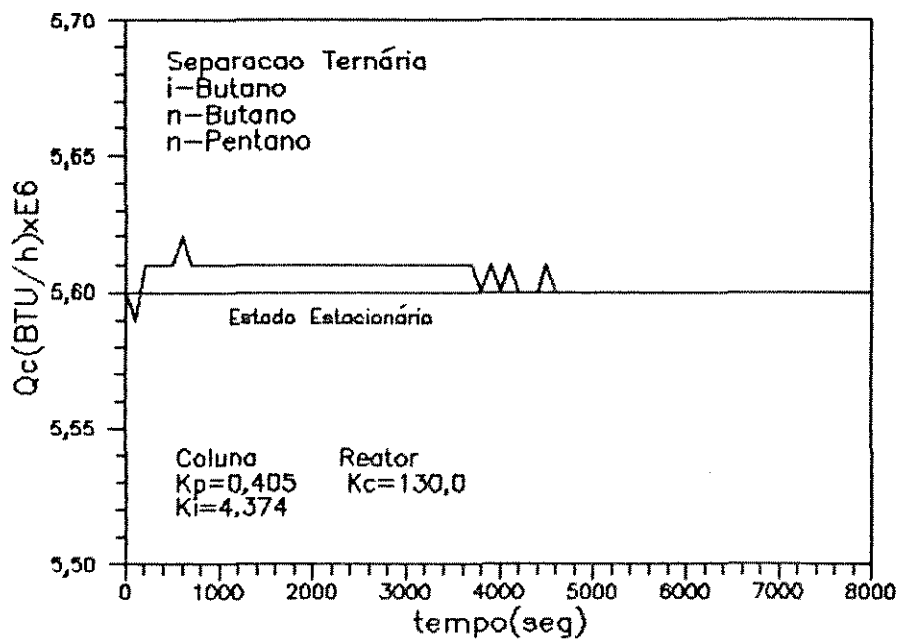


Fig.4.27 - Resposta da taxa de energia para o refeedor da coluna do sistema integrado para uma separação ternária.

($K_c = 130$)

energia aproveitada pela coluna, que é também a resposta do controlador de temperatura do prato intermediário da coluna.

Para o controlador proporcional da temperatura do reator foram utilizados os parâmetros ótimos testados anteriormente, $K_c = 30$ (figuras 4.24 e 4.25) e $K_c = 130$ (figuras 4.26 e 4.27).

Na figura 4.24, para uma separação binária o controlador de temperatura da coluna responde a perturbação imposta ao sistema integrado em 1800 segundos (30 min), quando o processo retorna ao seu estado estacionário. O mesmo não ocorre para a separação ternária, figura 4.25, onde o controlador de temperatura da coluna não consegue eliminar totalmente o desvio permanente do processo. A resposta continua oscilatória em torno do estado estacionário após 4800 segundos (80 min) de simulação.

Para $K_c = 30$, a resposta da taxa de energia removida do processo reacional (figura 4.22) necessitou aproximadamente de 4 horas de simulação para se estabilizar. Portanto, no tempo de simulação considerado para o sistema integrado (8000 seg. ou 2,2 horas) o processo reacional apresenta - se instável e o controlador de temperatura da coluna aumenta o tempo para estabilizar o processo de destilação.

Para $K_c = 130$, o tempo de estabilização do processo reacional é inferior a 2,0 horas de simulação (figura 4.22). A resposta do controlador de temperatura da coluna do sistema integrado apresentou-se relativamente mais rápida, como ilustrada nas figuras 4.26 e 4.27.

Utilizando-se para o sistema integrado o parâmetro do

controlador de temperatura do reator o valor de $K_c = 130$, foi possível retirar o desvio permanente do processo de destilação para uma separação ternária. Entretanto o tempo de resposta do sistema para a separação ternária foi excessivamente alto em relação ao tempo apresentado para a separação binária ($\cong 9$ vezes maior). Isto representa uma deficiência no controlador da coluna, quando o processo integrado é simulado para separações multicomponentes, como comentado na seção 4.4.3. Assim, com sistema binário o processo integrado é dinamicamente melhor do que para o sistema ternário já que o ajuste de parâmetros do controlador de temperatura da coluna foi realizado para uma separação binária.

Deve-se ressaltar novamente que apenas um tipo de perturbação foi empregada para a análise do comportamento dinâmico do sistema. A perturbação estudada foi imposta no processo reacional para verificar a variação da quantidade de energia removida, a qual seria utilizada no refeedor da coluna. Como a perturbação dada foi positiva o reator produz uma quantidade de energia superior às necessidades da coluna, facilitando a ação de controle para que a mesma mantenha-se em equilíbrio.

Perturbações negativas não foram testadas para o processo reacional, mas sabe-se que devido a não linearidade desse processo a resposta do sistema pode diferenciar significativamente da resposta apresentada para uma perturbação positiva.

Não foi verificado o caso em que a energia fornecida pelo reator é insuficiente para a coluna garantir suas exigências

energéticas. Tal procedimento necessitaria da adição de auxiliares (condensador ou refeedor) para suprirem as possíveis deficiências do controle.

4.7 - CONCLUSÃO

No presente capítulo foram apresentados os principais resultados obtidos das simulações dos modelos matemáticos propostos para os dois sistemas contínuos em estudos.

Para cada sistema individual foi proposta uma malha de controle baseada em técnicas simples e convencionais de controle de processos. Tais técnicas mostraram-se válidas para aplicação neste estudo, já que forneceram resultados convenientes para a análise dos dois sistemas.

Apesar da simplicidade aparente do controle empregado foi possível através desse verificar a integração energética das duas unidades operacionais. Com a utilização de recursos computacionais de linguagem e programação foi possível a análise do comportamento dinâmico do sistema reator/coluna integrados.

CAPÍTULO - 5
CONCLUSÕES E SUGESTÕES

5 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES

5.1 - CONCLUSÕES

Através da apresentação e análise dos resultados podemos concluir que:

- A aplicação de técnicas convencionais de controle por realimentação nos processos estudados forneceu resultados importantes para a análise da dinâmica dos sistemas em malha fechada de processos com integração energética.

- Com a utilização do método de Ziegler-Nichols foi possível determinar os parâmetros do controlador de temperatura empregado no sistema de destilação. No entanto deve-se deixar claro que os valores de $K_{p,lim}$ e de T_p obtidos por este método não fornecem, por si só, informações sobre a função transferência do processo.

- Os valores utilizados para o parâmetro do controlador de temperatura do reator permitiram avaliar a importância do estudo mais aprofundado de tais processos que apresentam instabilidade em malha aberta.

- Através da simulação do esquema de controle proposto para o sistema reator/coluna integrados foi possível analisar o comportamento dinâmico dos dois processos em conjunto e verificar a eficiência da malha de controle empregada.

- O aproveitamento pela coluna de destilação, do calor produzido no processo reacional, representa uma enorme conquista em termos de conservação de energia, tornando válido o estudo cada

vez mais dedicado da técnica de integração energética em processos químicos com alto consumo energético.

5.2 - SUGESTÕES

Suportadas pelos resultados obtidos e as conclusões consequentes do trabalho realizado, podemos apresentar algumas recomendações para o prosseguimento da linha de pesquisa:

1- Pode-se adotar outros métodos de integração dos sistemas de equações diferenciais utilizados nos processos de destilação e reação para verificar melhorias no tempo de computação.

2- A utilização de um modelo mais completo para a equação de balanço de energia do processo de destilação pode fornecer resposta mais realística do sistema.

3- Podem ser avaliados métodos de sintonização de controladores mais rígidos, para a apreciação mais eficiente de algumas malhas de controle que tendem a apresentar alto grau de oscilação.

4- Outros tipos de perturbações podem ser estudadas para a uma melhor análise e avaliação das malhas de controle de ambos os processos utilizados.

5- Uma malha de controle mais completa para o sistema reator/coluna integrados pode ser proposta na tentativa de otimizar o sistema de controle e conseqüentemente garantir que as deficiências , principalmente energéticas do processo sejam eliminadas.

ANEXO 1

Propriedades Físicas e Termodinâmicas

Neste anexo serão apresentadas todas as propriedades físicas e termodinâmicas utilizadas nas simulações da coluna de destilação contínua do programa DINACOL, para os componentes puros dos sistemas binário e ternário.

Para cálculo da pressão de vapor de componentes puros dada pela equação (3.11), foi necessário primeiramente o cálculo das constantes A_j e B_j (Equações (3.12) e (3.13)). A tabela A3.1 ilustra os parâmetros suficientes empregados no cálculo.

Tabela A3.1 - Pressões de Vapor em Função da Temperatura

Substância	Peso Molecular	P_j^o (atm)	T(°C)
iso-Butano	58,12	2,0	7,5
		5,0	39,0
		10,0	66,8
n-Butano	58,12	2,0	18,8
		5,0	50,0
		10,0	79,5
n-Pentano	72,15	2,0	58,0
		5,0	92,4
		10,0	124,7

Os valores dados na tabela A3.1 foram retirados das referências McCABE (1985) e PERRY and CHILTON (1973) .

A entalpia das fases líquida e vapor para o componente i é calculada por:

Fase Líquida:

$$h_i = C_l * T \quad (\text{A3.1})$$

Fase Vapor:

$$H_i = C_v * T + \Delta H_{\text{vapi}} \quad (\text{A3.2})$$

Onde C_l e C_v são respectivamente as capacidades caloríficas do líquido e do vapor.

ΔH_{vapi} é a entalpia de vaporização do componente i à temperatura de ebulição.

Na tabela A3.2 estão apresentados os valores para o cálculo das entalpias.

No cálculo das entalpias de fases não foi considerado o calor de mistura. Assim temos:

$$h = \sum_{i=1}^{NC} x_i h_i \quad (\text{A3.3})$$

$$H = \sum_{i=1}^{NC} y_i H_i \quad (\text{A3.4})$$

Tabela A3.2 - Constantes para Cálculo das Entalpias

Substância	C_L (Btu/lb°F)	C_V (Btu/lb°F)	T (°F)	ΔH_{vap} (Btu/lb)
iso-Butano	0,549	0,4	10,94	157,6383
n-Butano	0,549	0,4	31,10	165,7536
n-Pentano	0,512	0,4	96,98	153,6788

As referências utilizadas na tabela A3.2 são também do PERRY and CHILTON (1973) e do Databank (CHEMCAD II Ver.2.20).

As massas específicas dos componentes puros são constantes e foram obtidas das mesmas referências anteriores.

ANEXO 2

Programa CONTROL.C

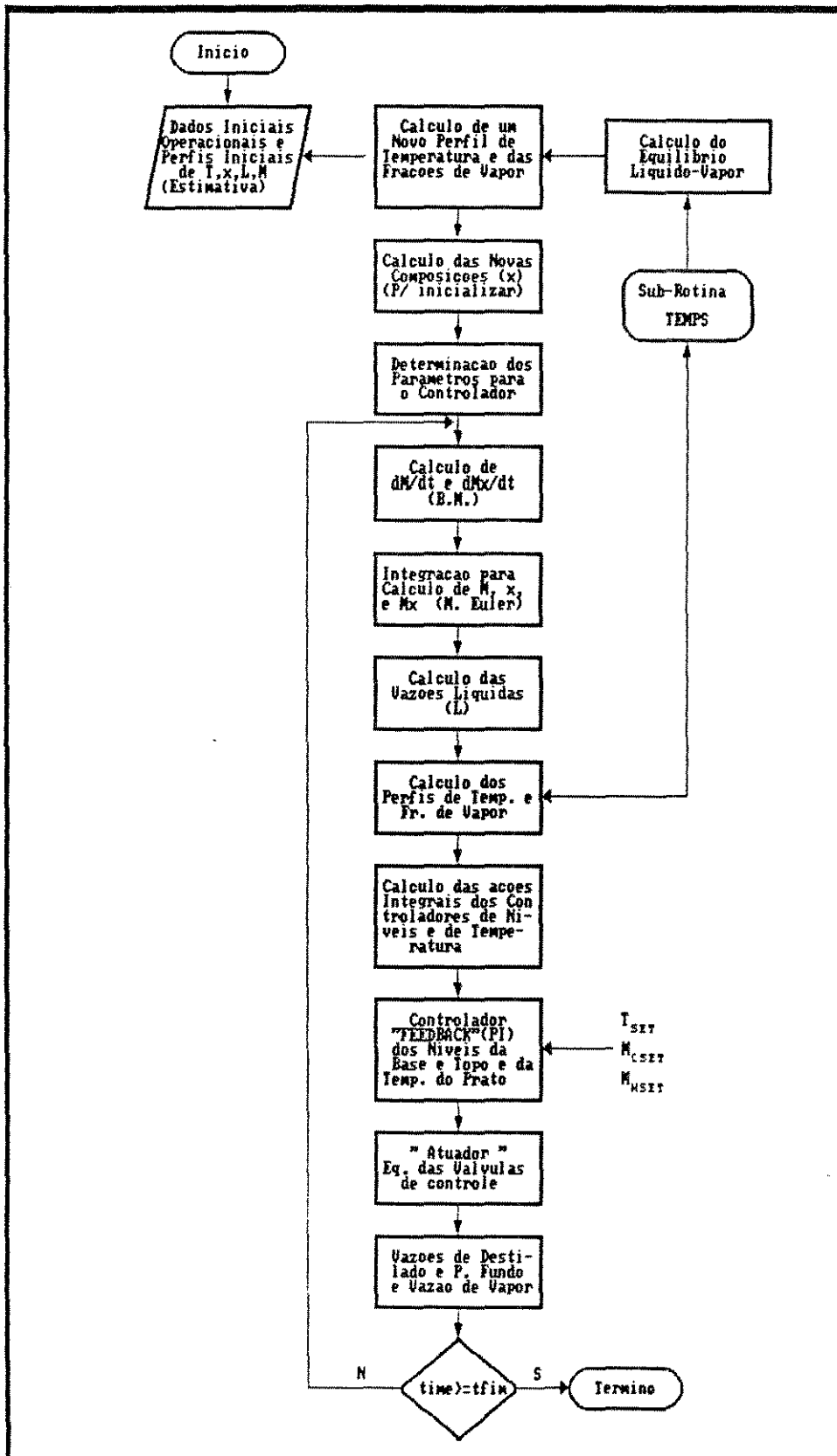


Fig. A.2.1 - Diagrama de blocos do programa CONTROL.C

ANEXO 3

Programa DINACOL. C

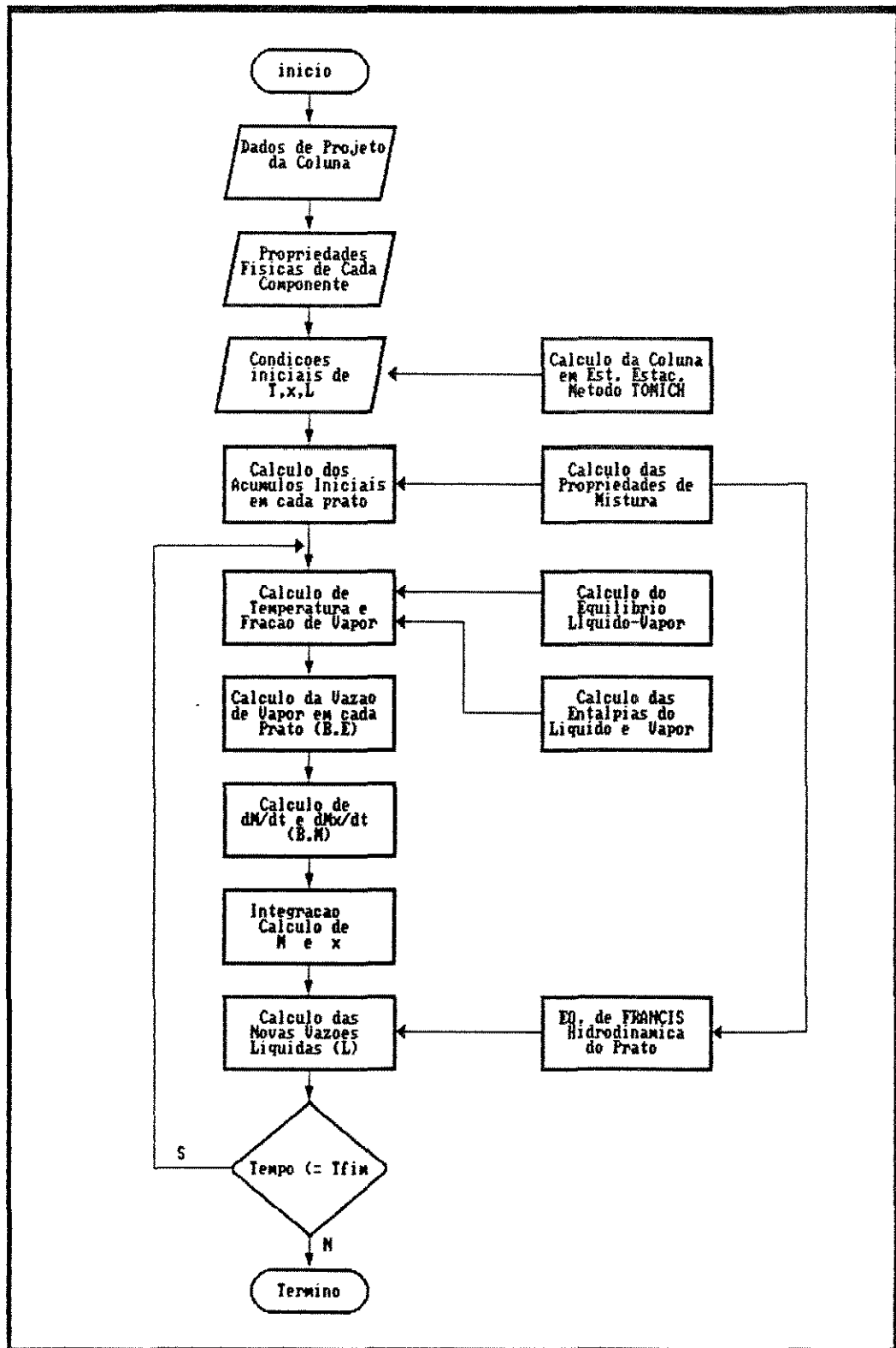


Fig.A.3.1 - Diagrama de blocos do programa DINACOL.C

ANEXO 4

Programa REA. C

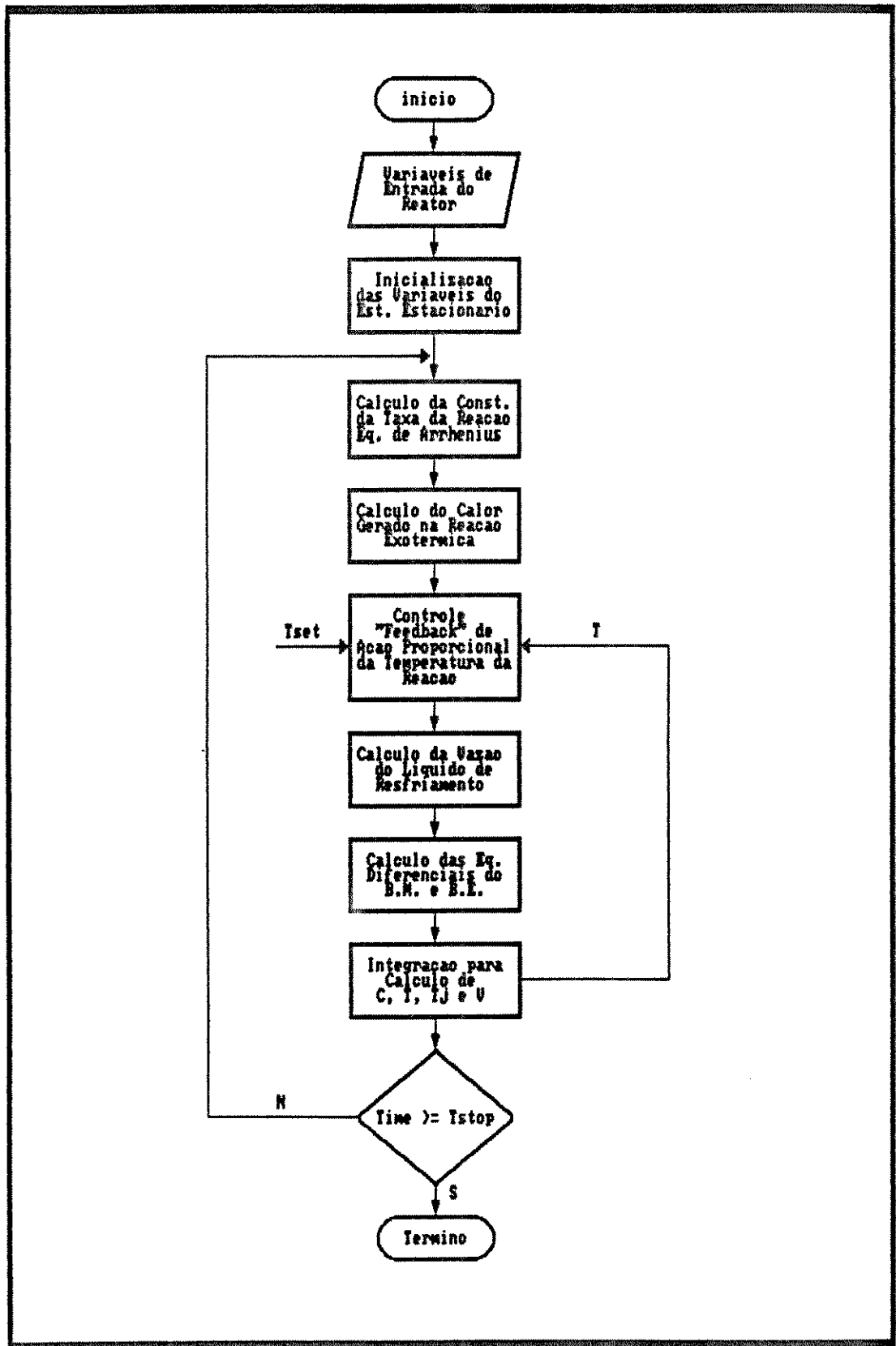


Fig.A.4.1 - Diagrama de blocos do programa REA.C

ANEXO 5

Sistema REATOR/COLUNA Integrados

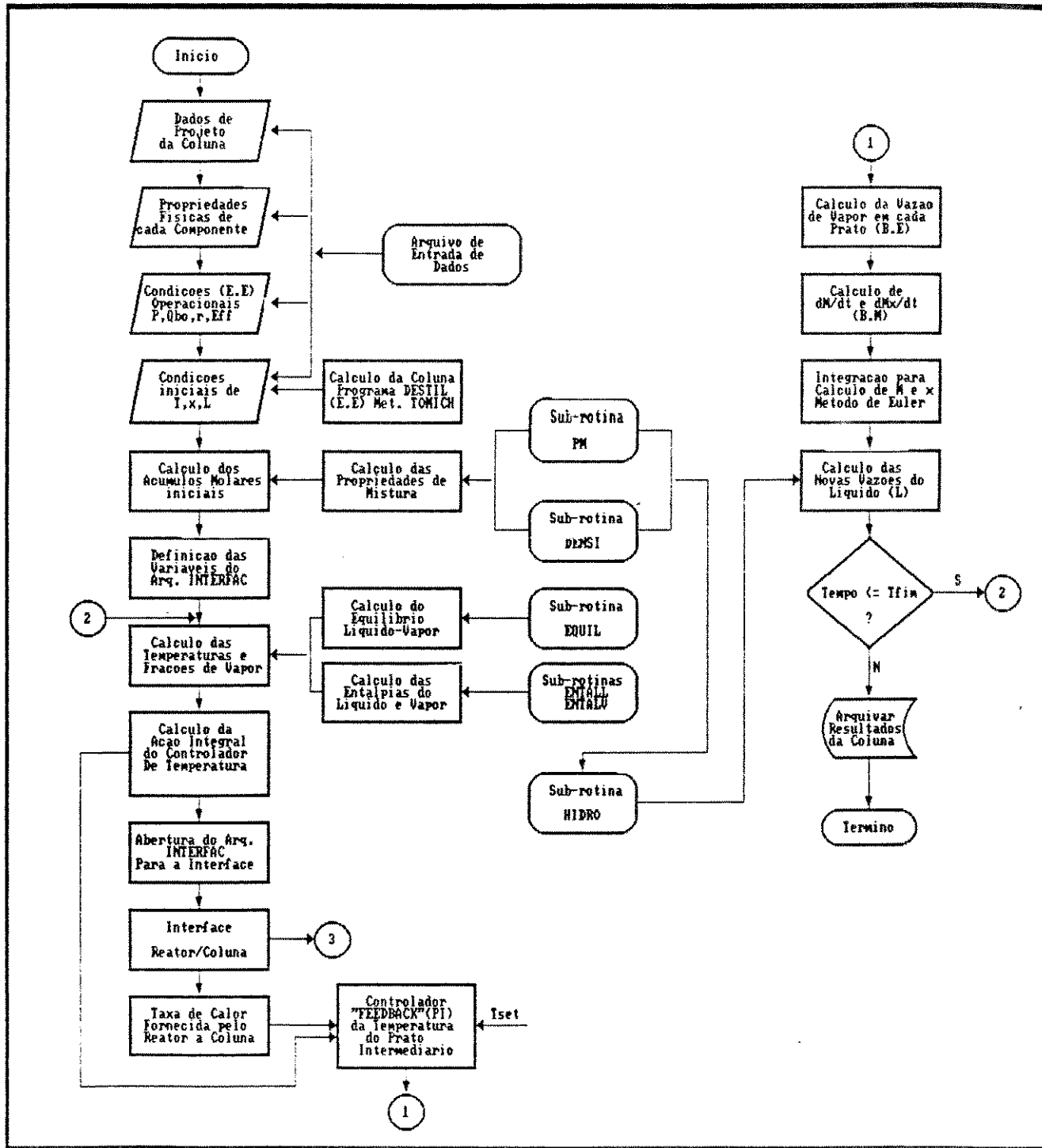


Fig.A.5.1 - Diagrama de blocos do sistema reator/coluna integrados

Parte I - Coluna

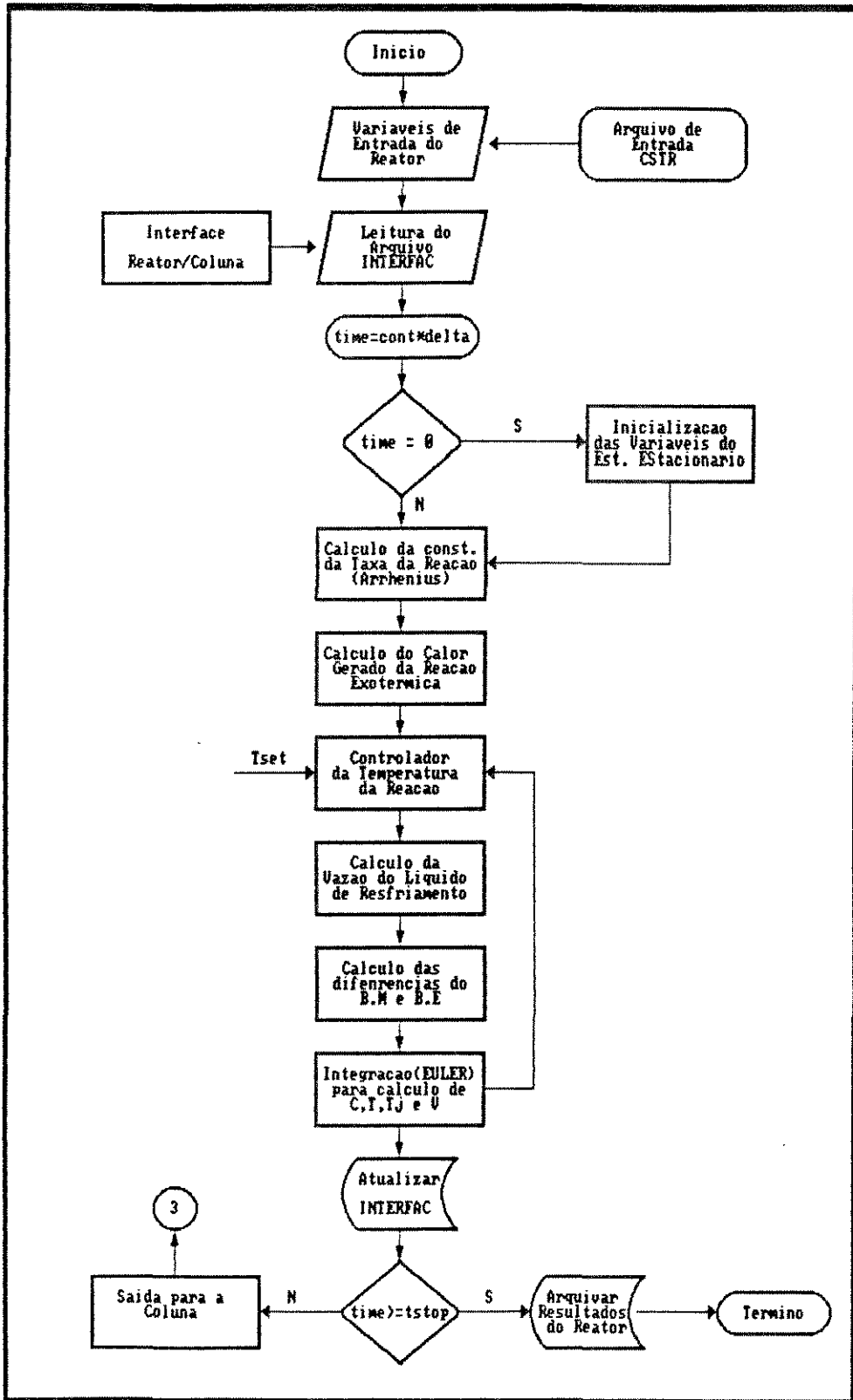


Fig.A.5.2 - Diagrama de blocos do sistema reator/coluna integrados

Parte II - Reator

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BROYDEN, C. G., A Class of Methods for Solving Non-Linear Simultaneous Equations, Mathematics of Computation, Vol. 19, pp. 577-593, 1965.
- BUCKLEY, P. S. et al , Design of Distillation Column Control Systems, Edward Arnold, New York, 1985.
- CHENG, H. C. and LUYBEN, W. L., Heat-Integrated Distillation Columns for Ternary Separations, Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 24, p. 707, 1985.
- CHEUNG, T. F. and LUYBEN, W. L., PD Control Improves Reactor Stability, Hydrocarbon Process, Vol. 58, No. 9 , pp. 215-218, 1979.
- DING, S. S. and LUYBEN, W. L., Control of a Heat-Integrated Complex Distillation Configuration, In. Eng. Chem. Res., Vol. 29, pp. 1240-1249, 1990.
- DOUKAS, N. and LUYBEN, W. L., Instrum. Technol., Vol. 25, p. 43. 1978.
- FUENTES, C. and LUYBEN, W. L., Comparison of Energy Models for Distillation Columns, Ind. Eng. Chem. Fundam., Vol. 21, No. 3, pp. 323-325, 1982.

GEORGAKIS, C. and WORTHEY, D. J., On Dynamical Methods of Heat Integration Design, AIChE Journal, Vol. 24, No. 6, pp. 976-984, 1978.

HANDOGO, R. and LUYBEN, W. L., Design and Control of a Heat-Integrated Reactor/Column Process, Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 26, pp. 531-538, 1987.

KING, C. J., Separation Processes, McGraw-Hill, New York, 1971.

LENOFF, A. M. and MORARI, M., Design of Resilient Process Plants-I: Process Design Under Consideration of Dynamic Aspects, Chem. Eng. Sci., Vol. 37, p. 245, 1982.

LUYBEN, W. L. and MELCIC, M., Effect of Temperature Measurement and Heat Removal Lags on Stability of Open-Loop Unstable Reactors, Hydrocarbon Processing, Vol. 57, No. 3, pp. 115-117, 1978.

LUYBEN, W. L., Process Modelling, Simulation and Control for Chemical Engineers, McGraw-Hill, New York, 1983.

MCCABE, W. L. et al., Unit Operations of Chemical Engineering, 4th. edição, McGraw-Hill Book Company, New York, 1985.

MCCUNE, L. C. and GALLIER, P. W., ISA Trans., p. 12, 1973.

-
- PERRY, R. H. and CHILTON, C. H., Chemical Engineers' Handbook, 5th. edição, McGraw-Hill, New York, 1973.
- ROBINSON, E. R., Time Dependent Chemical Process, John Wiley, New York, 1975.
- SEBORG, D. E. at al, Process Dynamics and Control, John Wiley, New York, 1989.
- SHINSKEY, F. G., Distillation Control, McGraw-Hill, New York, 1977.
- TAKAMA, N. at al, Optimal Design of a Processing System, Chem. Eng. Prog., Vol. 78, N. 9, p. 83, 1982.
- TYREUS, B. D. and LUYBEN, W. L., Controlling Heat Integrated Distillation Columns, Chem. Eng. Prog., Vol. 72, No. 9, pp. 59-66, 1976.
- TOMICH, J. F., A New Simulation Method for Equilibrium Stage Processes, AIChE Journal, Vol. 16, No. 2, pp. 229-232, 1970.
- VIDYASAGOR, M. , Non-linear Systems Analysis, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1978.

ZIEGLER, J. G. and N. B. NICHOLS, Optimal Settings for Automatic Controllers, Trans. ASME, Vol. 64, p. 759, 1942.

NOMENCLATURA

NOMENCLATURA

- A_p = Área do prato, [in²]
- A_H = Área de transferência de calor, [ft²]
- A = Constante da equação (3.19)
- A_j = Constante dada pela equação (3.12)
- B_j = Constante dada pela equação (3.13)
- B = Vazão molar de produto de fundo, [lbmol/h]
- C = Constante da equação (3.19)
- C_j = Capacidade calorífica do líquido de resfriamento, [Btu/lb°F]
- C_p = Capacidade calorífica do líquido reacional, [Btu/lb°F]
- C_v = Capacidade calorífica de vapor, [Btu/lb°F]
- C_l = Capacidade calorífica de líquido, [Btu/lb°F]
- C_{AO} = Concentração molar de reagente limitante na alimentação do reator, [Lbmol/ft³]
- C_A = Concentração molar de reagente limitante na corrente de produto do reator, [lbmol/ft³]
- D = Vazão molar de líquido no destilado da coluna, [Kmol/h]
- Dl = Vazão molar de líquido no destilado da coluna, [lbmol/h]
- E = Energia de ativação, [Btu/lbmol]
- E^m = Eficiência de Murphree, [%]
- e = Sinal do erro para o controlador
- F_n = Vazão molar da alimentação da coluna, [lbmol/h]
- F_o = Vazão volumétrica da alimentação do reator, [ft³/h]
- F_j = Vazão volumétrica do líquido de resfriamento do reator, [ft³/h]
- h_n = Entalpia molar de líquido da mistura no prato n da coluna, [Btu/lbmol]

- H_n = Entalpia molar de vapor da mistura no prato n da coluna, [Btu/lbmol]
- k = Velocidade específica da taxa da reação, [h⁻¹]
- K_c = Ganho do controlador proporcional do reator
- K_p = Ganho do controlador proporcional da coluna
- $K_{p,lim}$ = Valor limite do ganho do controlador proporcional
- $K_I = K_p / \tau_i$, representa ação integral do controlador PI
- L_n = Vazão molar de líquido que deixa o prato n , [lbmol/h]
- L_v = Vazão volumétrica de líquido, [ft³/h]
- L_R = Vazão molar do refluxo, [lbmol/h]
- M_n = Acúmulo molar de líquido no prato n , [lbmol]
- Mw_n = Peso molecular de mistura
- m = Sinal de saída do controlador por realimentação
- m_o = Sinal de saída do controlador por realimentação para erro igual zero
- P = Pressão de operação da coluna, [psia ou atm]
- P_n = Pressão no prato n , [psia ou atm]
- P_j^o = Pressão de vapor do componente j
- P_j = Pressão parcial do componente j
- Q_c = Taxa de energia removida pela jaqueta do reator, ou taxa de energia utilizada no refeedor da coluna, [Btu/h]
- r = Vazão de refluxo, [lbmol/h]
- R = Constante dos gases ideais, [Btu/lbmol R]
- S = Sinal de saída dos controladores, equação (3.20)
- S_o = Sinal de S para erro igual a zero
- t = Variável tempo [h,seg]
- T = Temperatura, [°F, °C, R, K]
- T_j = Temperatura da saída do líquido de resfriamento, [R]
- T_p = Período do sistema em malha fechada quando $K_p = K_{p,lim}$

- U = Coeficiente global de transferência de calor, [Btu/h ft²R]
 V = Volume do reator, [ft³]
 V_n = Vazão molar de vapor que deixa o prato n , [lbmol/h]
 V_j = Volume de líquido da jaqueta de resfriamento do reator, [ft³]
 $x_{n,j}$ = Fração molar do componente j na fase líquida, [lbmol/ft³]
 x_f = Fração molar do componente mais volátil na alimentação
 x_c = Fração molar do componente mais volátil no destilado
 x_w = Fração molar do componente mais volátil no produto de fundo
 $y_{n,j}$ = Fração molar do componente j na fase vapor, [lbmol/ft³]
 W = Vazão molar de produto de fundo, [Kmol/h]
 Wh = Altura do vertedouro, [in]
 Wl = Comprimento do vertedouro, [ft]
 $z_{n,j}$ = Fração molar na alimentação da coluna, [lbmol/ft³]

LETRAS GREGAS

- α = Fator pré-exponencial da equação de Arrhenius, [h⁻¹]
 ΔP = Queda de pressão através das válvulas de controle
 ΔH_{vapi} = Entalpia de vaporização do componente i à temperatura de ebulição, [Btu/lb]
 λ = Calor de reação, [Btu/lbmol]
 τ_i = Tempo integral, [min.]
 τ_d = Tempo derivativo, [min.]
 ρ = Massa específica do líquido da alimentação e do produto, [lb/ft³]
 ρ_j = Massa específica do líquido de resfriamento do reator, [lb/ft³]