

## FILIPE ALVES COELHO

## Impacto da topologia de integração energética sobre o comportamento dinâmico e controlabilidade de um processo

CAMPINAS 2014



#### UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS Faculdade de Engenharia Química

### FILIPE ALVES COELHO

### Impacto da topologia de integração energética sobre o comportamento dinâmico e controlabilidade de um processo

Dissertação de mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. ROGER JOSEF ZEMP

Este exemplar corresponde à versão final da dissertação defendida pelo aluno Filipe Alves Coelho e orientada pelo prof. Dr. Roger Josef Zemp.

Prof. Dr. Roger Josef Zemp - Orientador

CAMPINAS 2014

#### Ficha catalográfica Universidade Estadual de Campinas Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura Rose Meire da Silva - CRB 8/5974

 Coelho, Filipe Alves, 1989-Impacto da topologia de integração energética sobre o comportamento dinâmico e controlabilidade de um processo / Filipe Alves Coelho. – Campinas, SP : [s.n.], 2014.
Orientador: Roger Josef Zemp. Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.
1. Controlabilidade. 2. Trocadores de calor. 3. Integração energética. 4. Simulação de processos. I. Zemp, Roger Josef, 1962-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

#### Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Impacts of heat integration topology on process dynamics and controllability Palavras-chave em inglês: Controllability Heat exchangers Heat integration Computer simulation Área de concentração: Engenharia Química Titulação: Mestre em Engenharia Química Banca examinadora: Roger Josef Zemp [Orientador] Luís Fernando Novazzi Sávio Souza Venâncio Vianna Data de defesa: 19-02-2014 Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

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

#### DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Autor: Filipe Alves Coelho Orientador: Roger Josef Zemp

A Banca Examinadora composta pelos membros abaixo aprovou esta dissertação:

Prof. Dr. Roger Josef Zemp - Orientador

Moren

Prof. Dr. Luís Fernando Novazzi

Prof. D. Sávio Souza Venancio Vianna

Campinas, 19 de fevereiro de 2014.

"The [erosion] empirical formula was known to be uncertain, for the curve did not go directly through the very data points by which it was determined. There was a cloud of points, some twice above, some twice below the fitted curve, so erosions twice those predicted were reasonable from that cause alone. Similar uncertainties surrounded the other constants in the formula, et cetera, et cetera. When using a mathematical model careful attention must be given to the uncertainties in the model."

– Richard Feynman sobre o acidente da Challenger

"Do or do not. There is no try." – Jedi Master Yoda

## Agradecimentos

Gostaria de agradecer aos meus pais o apoio e dedicação incondicionais e sem os quais não teria chegado aonde estou;

à minha namorada Juliana, que esteve ao meu lado ao longo dos últimos anos me apoiando, me incentivando e cuja ternura e amor sempre me acalentaram em momentos difíceis;

ao professor Roger Zemp com o qual tive muitas reuniões enriquecedoras, que me norteou na execução deste trabalho e com quem aprendi muito sobre engenharia de processos;

aos professores Sávio e Luís Novazzi as contribuições que ajudaram a melhorar o trabalho;

aos meus amigos a amizade e os diversos momentos de diversão que tivemos ao longo do mestrado;

à CAPES a bolsa de mestrado.

## Resumo

Com o desenvolvimento da análise *pinch*, foi possível estabelecer metas de consumo de utilidades em processos químicos e posteriormente sintetizar a rede capaz de atender as metas estabelecidas. Em contrapartida, os processos energeticamente integrados atendendo essas metas podem ser difíceis de se controlar e isso motiva estudar a controlabilidade e a dinâmica desses processos. Porém, a literatura vem tratando esses estudos desacoplando a rede do restante do processo e isso pode introduzir erros nos resultados, pois dinâmicas importantes associadas aos reciclos são perdidas. Assim, neste trabalho foi levantada a hipótese de que a análise da controlabilidade de redes de trocadores de calor, assim como o projeto de seus controladores, desprezando-se outros equipamentos de processo como colunas, reatores etc., pode induzir a uma falsa compreensão da dinâmica do processo e levar à síntese de uma rede fora do ótimo entre objetivos econômicos e controlabilidade. Para a execução das simulações, foi construída uma ferramenta computacional em Matlab onde foram implementados os modelos dos trocadores de calor e dos outros equipamentos de processo. Foi proposto um estudo de caso para um processo fictício com cinco topologias de redes de trocadores onde a controlabilidade foi avaliada utilizando-se dois índices em estado estacionário e um índice dinâmico. Observou-se que existe uma tendência de redução na controlabilidade conforme a integração energética aumenta e por isso a topologia que atendia às metas da análise *pinch* foi indicada por todos os índices como tendo a pior controlabilidade. Também foi testada a influência do atraso de transporte e da diferença entre as velocidades das dinâmicas dos equipamentos. A hipótese levantada neste trabalho foi comprovada.

**Palavras-chave:** Controlabilidade, Trocadores de calor, Integração energética e Simulação de processos.

## Abstract

The development of pinch analysis gave a powerful tool for engineers to establish energy targets for chemical processes and, with some extra work, synthesize a heat exchanger network to attain those targets. On the other hand, these heat integrated networks are generally hard to control, motivating several studies on their controllability and dynamics. However, most scientific studies decouples the network from the rest of the process and it can introduce errors in the results, because important dynamics related to recycles are lost. Therefore, it was raised the hypothesis that the controllability analysis of a heat exchanger network, as the design of their controllers, disregarding the other process equipments such as columns, reactors etc., may lead to false comprehension of the process dynamics and make the network synthesis out of the optimum between economic and controllability objectives. To simulate the systems, a computational tool was developed in Matlab, where the models of the heat exchangers and the other equipments were implemented. A case study of a fictitious process was proposed and five heat exchanger topologies were synthesized, with controllability assessed by two steady state indexes and a dynamic one. It was observed that controllability decreases as heat integration increases, therefore, the pinch network was pointed as having the worst controllability. The effects of dead time and difference between dynamic velocities in the equipments were also tested. The hypothesis was proven.

**Keywords:** Controllability, Heat exchangers, Heat integration and Computer simulation.

## Sumário

-	Introdução					
<b>2</b>	Hipótese e objetivos					
	2.1	Hipótese	5			
	2.2	Objetivos	5			
		2.2.1 Gerais	5			
		2.2.2 Específicos	5			
3	Integração de processos e controlabilidade					
	3.1	Integração de processos	7			
		3.1.1 Análise $pinch$	9			
	3.2	Controle de trocadores de calor	14			
	3.3	Controlabilidade de processos	17			
		3.3.1 Métricas de controlabilidade	19			
4	Cor	nceitos aplicados da teoria dos grafos	29			
4 5	Cor Me	aceitos aplicados da teoria dos grafos todologia	29 39			
4 5 6	Cor Me <sup>*</sup> Cor	nceitos aplicados da teoria dos grafos todologia nstrução da ferramenta de simulação	29 39 43			
4 5 6	Con Me Con 6.1	nceitos aplicados da teoria dos grafos todologia nstrução da ferramenta de simulação Modelos matemáticos	29 39 43 43			
4 5 6	Con Me Con 6.1	aceitos aplicados da teoria dos grafos todologia astrução da ferramenta de simulação Modelos matemáticos	29 39 43 43 43			
4 5 6	Con Me Con 6.1	aceitos aplicados da teoria dos grafos todologia astrução da ferramenta de simulação Modelos matemáticos	29 39 43 43 43 43			
4 5 6	Con Me Con 6.1	aceitos aplicados da teoria dos grafos     todologia     astrução da ferramenta de simulação     Modelos matemáticos     6.1.1     Reator     6.1.2     Trocador de calor instantâneo     6.1.3	29 39 43 43 43 43 45 47			
4 5 6	Con Me Con 6.1	aceitos aplicados da teoria dos grafos     todologia     astrução da ferramenta de simulação     Modelos matemáticos     6.1.1     Reator     6.1.2     Trocador de calor instantâneo     6.1.3     Trocador de calor bitubular     6.1.4	29 39 43 43 43 43 45 47 49			
4 5 6	Con Me Con 6.1	aceitos aplicados da teoria dos grafos     todologia     astrução da ferramenta de simulação     Modelos matemáticos     6.1.1     Reator     6.1.2     Trocador de calor instantâneo     6.1.3     Trocador de calor bitubular     6.1.4     Trocador de calor casco e tubo (1-1)     6.1.5	29 39 43 43 43 45 47 49 51			
4 5 6	Con Me Con 6.1	aceitos aplicados da teoria dos grafos     todologia     astrução da ferramenta de simulação     Modelos matemáticos	29 39 43 43 43 45 47 49 51 54			

		6.1.8	Misturador	59		
		6.1.9	Divisor de correntes	61		
		6.1.10	Tubulações	62		
		6.1.11	Flash adiabático	63		
		6.1.12	Válvulas	65		
		6.1.13	Controladores	66		
	6.2	Proprie	edades físicas e regras de mistura	70		
	6.3	Estraté	égias de solução numérica	72		
		6.3.1	Solução dos fluxogramas de processo	72		
		6.3.2	Solução numérica dos modelos	74		
	6.4	Ordem	de precedência	76		
	6.5	Sintaxe	$e e \text{ comandos} \ldots \ldots$	80		
7	Esti	ıdo de	caso: estado estacionário	85		
	7.1	Problem	ma proposto	85		
	7.2	Compo	onentes	86		
	7.3	Dimens	sionamento do processo	87		
	7.4	Resulta	$\operatorname{ados}$	93		
8	Esti	ıdo de	caso: estado transiente	99		
	8.1	Malha	aberta	99		
	8.2	Malha	fechada	104		
	8.3	Influên	cia da dinâmica dos equipamentos de processo	110		
	8.4	Avalia	ção do atraso de transporte	113		
9	Con	clusões	5	121		
Referências Bibliográficas						
$\mathbf{A}$	Ded	ução d	a geometria do trocador casco e tubo	131		
в	$\mathbf{Esp}$	ecificaç	ções dos equipamentos	135		

# CAPÍTULO 1

## Introdução

O progresso econômico e tecnológico modificou radicalmente os processos fabris desde os primórdios da Revolução Industrial. Com o uso do vapor e a expansão das indústrias químicas, associada ao desenvolvimento de novos processos, abriu-se possibilidade para o aumento da escala de produção. Essa revolução necessitou de energia, que na época passava por uma transição da madeira para o carvão e, desde então, o crescimento da demanda de energia impulsionou a diversificação de suas fontes, que no século 19 passou a utilizar o petróleo como uma alternativa de combustível.

Entretanto, a crise do petróleo em 1973 mudou o cenário energético mundial e o barril de petróleo nunca mais ficou abaixo da casa dos 10 dólares (REGNIER, 2007), alcançando o atual preço de US\$ 104,5 (cotação média do mês de janeiro de 2014) (THE..., 2014). A indústria, que também utilizava derivados do petróleo, precisava de uma solução para lidar com a crise energética.

Assim, ainda na década de 70, a área de integração energética ganhou força e com a invenção da tecnologia *pinch* foi possível estabelecer metas de consumo de utilidades e otimizar o uso dos diferentes tipos de utilidades disponíveis. Consequentemente, a indústria passou a dispor de uma ferramenta para identificar gargalos energéticos em plantas já existentes e dimensionar melhor o consumo de plantas novas.

Em plantas industriais, o reaproveitamento da energia e o ajuste das

temperaturas das correntes de processo é feito por meio das redes de trocadores de calor. Em 1983, Linnhoff e Hindmarsh (1983) desenvolveram uma metodologia para síntese de redes de trocadores visando atingir as metas de consumo estabelecidas pela tecnologia *pinch*. A metodologia desenvolvida é relativamente simples, mas pode produzir redes complexas e difíceis de controlar (WESTPHALEN *et al.*, 2003).

Diversas metodologias foram e ainda são propostas para a síntese de redes de trocadores de calor, mas que em geral, priorizam atingir metas de consumo de utilidades e minimização de custos. No entanto, quando o projeto da rede é feito partindo-se de um ponto de vista mais global, levando-se em consideração outros aspectos do processo, diversos critérios igualmente importantes também surgem, como o *layout* da planta, que pode fisicamente inviabilizar a troca térmica entre duas correntes ou a controlabilidade, dado que uma topologia inadequada da rede pode prejudicar a dinâmica do processo.

É preciso deixar claro que no contexto deste trabalho controlabilidade não tem ligação com o tipo de controlador utilizado nos trocadores, mas sim, com o quão fácil uma rede é de se controlar e, assim, controlabilidade é uma característica inerente ao conjunto da topologia da rede e dinâmica dos equipamento que a constituem. Dessa maneira, mensurar a controlabilidade no sentido de utilizá-la como função objetivo para sintetizar uma rede que simultaneamente feche os balanços de energia da correntes, seja fácil de controlar e ainda se aproxime das metas de custos ou utilidades, tem sido o objetivo de vários trabalhos publicados recentemente.

Incluir a controlabilidade na síntese da rede, por outro lado, não é uma tarefa trivial em vista das diversas definições de controlabilidade, e consequentemente, das formas de medi-la. Um dos problemas mais comuns é a medição feita para processos não-lineares com modelos linearizados, o que para alguns casos não apresenta um erro grave, mas os dados obtidos são válidos apenas ao redor do estado estacionário para qual o modelo foi linearizado.

Outro problema que pode prejudicar o estudo da controlabilidade e resultar em processos com dinâmicas discrepantes do projeto é a análise da dinâmica da rede desprezando-se os outros equipamentos de processo, como colunas de destilação, reatores, tanques, etc. Raros são os trabalhos na literatura científica que simultaneamente consideram a controlabilidade e os equipamentos de processo. Ao deixar de lado esses equipamentos, informações sobre possíveis reciclos de energia e massa são perdidas, resultando em um análise incompleta.

Com esta motivação, o presente trabalho visa estudar os efeitos da análise da controlabilidade e da dinâmica de diferentes topologias de redes de trocadores de calor ao se desprezar os equipamentos de processo e os impactos que isso poderia ter durante a operação real do processo.

# CAPÍTULO 2

## Hipótese e objetivos

## 2.1 Hipótese

A análise da controlabilidade de redes de trocadores de calor, assim como o projeto de seus controladores, desprezando-se outros equipamentos de processo como colunas, reatores etc., pode induzir a uma falsa compreensão da dinâmica do processo e levar à síntese de uma rede fora do ótimo entre objetivos econômicos e controlabilidade.

## 2.2 Objetivos

## 2.2.1 Gerais

• Analisar a controlabilidade estacionária de redes de trocadores de calor e sua dinâmica, por meio de simulação, comparando os resultados entre diferentes topologias de rede na ausência e presença de outros equipamentos de processo além dos trocadores.

## 2.2.2 Específicos

• Desenvolver uma ferramenta computacional visando as simulações estacionárias e dinâmicas da rede com e sem os equipamentos de processo.

- Identificar métricas de controlabilidade que possam quantificar as diferenças entre as redes.
- Utilizar um processo simples como estudo de caso e gerar diferentes topologias de redes para avaliar a controlabilidade.
- Identificar os principais argumentos que a literatura aponta como justificativa para a simulação da rede sem os outros equipamentos e testálos a fim de comprovar ou refutar a hipótese levantada.

## Capítulo 3

## Integração de processos e controlabilidade

Este capítulo é dedicado a explicar os conceitos básicos utilizados na execução do trabalho. São discutidas as ideias por trás da integração de processos com ênfase em uma das principais ferramentas utilizadas nesta área, a tecnologia *pinch*. Também são abordados os diferentes conceitos de controlabilidade e algumas métricas aplicadas às redes de trocadores de calor e como é feito o controle desses equipamentos.

## 3.1 Integração de processos

O termo "integração de processos" pode ser utilizado em diversos contextos, abrangendo muitas áreas e aplicações, desde um simples trocador de calor que recupera calor de uma corrente de processo até a integração de um número de unidades de produção em uma refinaria. Uma definição formal desse termo é dada a seguir (CANMETENERGY, 2003):

Toda melhoria feita a sistemas de processos, suas operações unitárias e suas interações, visando maximizar a eficiência do uso de energia, água e matéria-prima. Com o auxílio de ferramentas como a simulação de processos, a integração de processos permite aos engenheiros analisar sistematicamente os processos industriais e as interações que ocorrem entre suas áreas. Dentre as aplicações, pode-se citar (CANMETENERGY, 2003):

- Economia de energia e redução de emissão de poluentes
- Evita gargalos em áreas críticas de um processo
- Otimização de processos em batelada
- Otimização do uso de hidrogênio
- Melhoria no projeto e operação de reatores
- Minimização do uso de água
- Redução do custo de investimento

Nas últimas décadas, o campo de integração de processos recebeu numerosas contribuições e estas podem ser classificadas de acordo com duas grandes *commodities* consumidas e processadas em uma unidade industrial típica: energia e massa. Partindo da perspectiva do recurso integrado, a integração de processos pode ser dividida em integração energética e integração mássica. Dado que os objetivos são análogos, apenas o energético (foco do presente trabalho) será destacado (EL-HALWAGI, 2006):

Integração energética é uma metodologia sistemática que fornece compreensão fundamental da utilização da energia dentro de um processo e emprega essa compreensão na identificação de metas de consumo e otimização da recuperação de energia e sistemas de utilidades.

A seção seguinte faz uma breve revisão sobre a análise *pinch*, a ferramenta mais utilizada na integração energética de processos.

#### 3.1.1 Análise pinch

Para entender do que se trata a análise *pinch* é preciso conhecer alguns conceitos e termos-chave utilizados. Em problemas de integração energética as correntes são caracterizadas em função da variação de temperatura entre a saída e entrada na rede, de modo que correntes que são aquecidas são chamadas de correntes frias e correntes que devem ser resfriadas são chamadas de correntes quentes. Correntes quentes são "fontes" de energia, enquanto correntes frias são "sumidouros" e se respeitadas as limitações impostas pela termodinâmica, correntes quentes podem ser usadas para aquecer correntes frias e economizar energia em plantas industriais.

Uma forma bastante útil de visualizar a quantidade de energia que pode ser recuperada é através do diagrama temperatura-entalpia. A Figura 3.1 mostra um exemplo de um diagrama temperatura-entalpia com uma corrente fria e uma corrente quente. O intervalo onde a corrente quente sobrepõe a corrente fria indica a quantidade de energia que pode ser recuperada, neste caso, 130 kW.

A Figura 3.1 representa o caso limite, pois a diferença de temperatura entre a corrente quente e fria no terminal frio do trocador já é zero, de modo que não é possível recuperar mais calor. Entretanto, esta situação não pode ser atingida na prática, pois uma diferença de temperatura igual a zero levaria ao projeto de um trocador de calor com área infinita (KEMP, 2007).

Uma característica importante deste diagrama é que, uma vez que o interesse é apenas na variação de entalpia das correntes, se mantidas a inclinação da reta e as mesmas temperaturas, uma dada corrente pode ser traçada em qualquer parte do eixo das entalpias que sempre representará a mesma corrente. Na Figura 3.2 a corrente fria é deslocada no eixo das entalpias em relação à corrente quente de modo que a diferença mínima de temperatura,  $\Delta T_{\rm min}$ , não é mais zero, mas positiva e finita (20 °C).

O efeito desse deslocamento é o aumento do consumo de utilidade fria e quente em quantidades iguais e a redução da carga térmica do trocador pela mesma quantidade. Esse arranjo agora pode ser utilizado na prática, pois  $\Delta T_{\min} \neq 0$ . Quanto maior o deslocamento da curva fria, maior o  $\Delta T_{\min}$ e maior o consumo de utilidade.



Figura 3.1: Exemplo de diagrama temperatura-entalpia (KEMP, 2007).



Figura 3.2: Diagrama temperatura-entalpia com  $\Delta T_{\min} = 20$  °C.

Assim, pode-se observar que existe uma correlação entre o valor de  $\Delta T_{\min}$  no trocador e a quantidade total de utilidade no sistema. Isso significa que para um dado  $\Delta T_{\min}$ , uma meta de consumo é estabelecida para a quantidade de utilidade quente e fria que deve ser utilizada se o trocador for projetado corretamente (KEMP, 2007).

Para lidar com múltiplas correntes, as cargas térmicas de todas as correntes devem ser somadas para uma dada faixa de temperaturas. Assim, uma única corrente quente representando todas as correntes quentes e uma única corrente fria representando todas as correntes frias podem ser produzidas no diagrama temperatura-entalpia e serem manipuladas da mesma forma que o problema de duas correntes mostrado nas Figuras 3.1 e 3.2.

A Figura 3.3 mostra três correntes separadas, com seus respectivos intervalos de temperatura. Entre  $T_1 \in T_2$ , por exemplo, existem as correntes A e B, e por isso o calor disponível neste intervalo é  $(c_{p,a} + c_{p,b}) (T_2 - T_1)$ , onde  $c_p$  é a capacidade calorífica da corrente. Entre as temperaturas  $T_2 \in T_3$ existe apenas a corrente B, por isso a variação de entalpia é  $(c_{p,b}) (T_3 - T_2)$ . Este procedimento deve ser repetido em todos os intervalos que venham a existir em um diagrama temperatura-entalpia. O resultado do somatório das correntes é mostrado ainda na Figura 3.3, onde é mostrada a corrente composta ou *composite* quente.



Figura 3.3: Formação da curva *composite*. Adaptado de Kemp (2007).

A Figura 3.4 ilustra o resultado das curvas *composite*, com  $\Delta T_{\min} = 10$  °C, para os dados da Tabela 3.1. Assim como os exemplos mostrados

anteriormente, o intervalo onde as duas curvas se sobrepõem representa a quantidade de energia que pode ser recuperada. É importante frisar que para um dado valor de  $\Delta T_{\min}$ , a quantidade de utilidade prevista é a quantidade mínima possível para um dado problema de recuperação de energia (KEMP, 2007).



Figura 3.4: Curvas *composite* referentes aos dados da Tabela 3.1.

Comente /tipe	$a/(\ln W/K)$	Temperaturas/°C	
Corrente/ tipo	$C_p/(KW/K)$	Inicial	Final
1 (fria)	2	20	135
2 (quente)	3	170	60
3 (fria)	4	80	140
4 (quente)	1,5	150	30

Tabela 3.1: Exemplo de quatro correntes para o cálculo de metas de consumo (KEMP, 2007).

Apesar dos problemas de recuperação de energia possuírem muitas correntes, o  $\Delta T_{\rm min}$  normalmente ocorre em um único ponto, o qual recebe o nome de *pinch*. Isso significa que é possível projetar uma rede de trocadores de calor na qual apenas os trocadores localizados no *pinch* necessitam operar com  $\Delta T_{\min}$ .

De fato, o ponto *pinch* pode ser interpretado como um divisor energético do processo. Acima do ponto *pinch* (em termos de temperatura), o processo fecha o balanço de energia utilizando a quantidade mínima de utilidade quente, de modo que calor é recebido da utilidade quente e não há rejeição de energia pelo processo. Essa parte do processo atua como "sumidouro" de energia. Abaixo do *pinch*, por outro lado, o processo fecha o balanço de energia com a quantidade mínima de utilidade fria. Esta parte do processo atua como "fonte" de energia, onde não ocorre entrada de energia, apenas rejeição para a utilidade fria (SMITH, 2005).

O *pinch* também é utilizado para estabelecer regras simples para a síntese de redes de trocadores de calor baseadas nas metas de consumo de energia. Pode-se demonstrar que para alcançar essas metas estabelecidas pelas curvas *composite*, o engenheiro não deve permitir que energia cruze o *pinch* por meio de:

- Trocadores entre correntes de processo
- Uso inapropriado de utilidade (utilidade fria acima do *pinch* ou quente abaixo do *pinch*)

Essas regras são necessárias e suficientes para garantir que as metas serão atingidas, dado que nenhum trocador deve ter uma diferença de temperatura menor que  $\Delta T_{\min}$  (SMITH, 2005). Caso uma dessas regras seja violada, isso implicará em uma penalidade na forma de consumo extra de utilidade.

Apesar de servir como um importante parâmetro para a integração energética, nem todos os problemas possuem um ponto *pinch*. Como é possível observar na Figura 3.5, quanto menor o  $\Delta T_{\min}$ , menor é o consumo de utilidade quente até o limite onde nenhuma utilidade quente é mais necessária (Figura 3.5b). Abaixo desse ponto, o consumo de utilidade fria passa a ser constante. Problemas que apresentam esse comportamento (tanto com utilidade fria, como utilidade quente) são chamados de problemas *threshold* e são bastante comuns na prática (SMITH, 2005).



Figura 3.5: Conforme  $\Delta T_{\min}$  é variado, alguns problemas necessitam apenas de um tipo de utilidade abaixo de um valor limite (*threshold*). Adaptado de Smith (2005).

Informações acerca de algoritmos para cálculo de metas de consumo e síntese de redes com o método *pinch* podem ser encontradas em Smith (2005) e Linnhoff e Hindmarsh (1983).

## 3.2 Controle de trocadores de calor

Trocadores de calor são equipamentos utilizados para efetuar a troca térmica entre fluidos que se encontram em temperaturas diferentes. A depender das condições de processo como temperaturas de operação, tipos de fluidos ou até *layout* do processo, diferentes equipamentos podem ser empregados, como trocadores do tipo bitubular, casco e tubo, placas, torres de resfriamento ou fornos.

O trocador do tipo casco e tubo é um dos trocadores mais utilizados para efetuar troca térmica em processos químicos, apesar de atualmente competir em algumas situações com os trocadores de placas. Alguns motivos para a popularidade são apresentados por Mukherjee (2004):

1. São muito flexíveis em área e podem variar de algumas dezenas de centímetros até mais de mil metros quadrados.

- 2. São mecanicamente robustos, resistindo aos diversos estresses impostos pela fabricação, transporte e condições de operações anormais.
- 3. Podem ser facilmente limpos, tanto mecanicamente, como quimicamente.
- 4. Os componentes mais suscetíveis à falhas, como os tubos, podem ser facilmente trocados.
- 5. Projetos mecânicos e térmicos confiáveis estão amplamente disponíveis.

Para manter as temperaturas das correntes dentro da faixa estipulada em projeto, os trocadores precisam de algum tipo de sistema de controle. Na prática, os trocadores podem ser classificados de duas maneiras para fins de controle: trocadores de utilidade e trocadores entre correntes de processo.

Em um trocador de utilidades uma corrente de utilidade é utilizada para satisfazer o balanço de energia de uma corrente de processo. Enquanto a vazão de uma corrente de processo é definida por demandas do próprio processo, a vazão de utilidade possui maior liberdade, restrita apenas à sua capacidade de produção, dessa maneira, o controle desse equipamento é feito manipulando-se a vazão de utilidade que passa pelo trocador, como mostrado na Figura 3.6. Em geral, o sistema de utilidade de uma planta industrial é construído para absorver grandes perturbações no processo, fazendo este tipo de trocador relativamente fácil de controlar (WESTPHA-LEN *et al.*, 2003).

Ao contrário do trocador de utilidades, o trocador entre correntes de processo economiza energia ao aproveitá-la de uma corrente quente para aquecer uma corrente fria. Neste tipo de trocador, o controle é feito desviandose parte de uma corrente (*bypass*) pelo trocador, controlando assim a temperatura de saída (Figura 3.7). À primeira vista a variável manipulada é a fração da corrente desviada, mas ao considerar a quantidade de energia trocada entre as correntes como a efetiva variável manipulada, pode-se chegar a uma importante conclusão: não é possível controlar ambas as temperaturas de saída no trocador, visto que o calor é retirado de uma corrente e transferido para a outra (DRIEDGER, 1998).



Figura 3.6: Esquema de controle de um trocador utilizando utilidade.



Figura 3.7: Esquema de controle de um trocador utilizando apenas fluidos de processo.

Conforme Westphalen *et al.* (2003), do ponto de vista econômico, o desvio deve ser posicionado na corrente com o maior fluxo de capacidade térmica, pois essa corrente pode lidar melhor com perturbações e o investimento no trocador será menor. Entretanto, segundo Seborg *et al.* (2004), as variáveis manipuladas que mais rapidamente afetam as variáveis controladas devem ser utilizadas na estrutura de controle. Portanto, do ponto de vista de controle, o desvio deve ser colocado no lado da corrente cuja

temperatura será controlada. Vale ressaltar que os esquemas de controle apresentados não são as únicas formas de controlar trocadores e que outras formas podem ser encontradas em Driedger (1998).

È interessante observar que o projeto de um trocador para operar com desvio envolve outro conflito entre projeto econômico e controle. Isto acontece porque ao aumentar a fração da corrente a ser desviada é possível controlar a temperatura do trocador em uma ampla faixa, aumentando a flexibilidade do equipamento. Entretanto, com um desvio maior, a força motriz é reduzida, exigindo um trocador com maior área (LUYBEN, 2011). O engenheiro deve então saber ponderar os dois aspectos de acordo com a necessidade.

## 3.3 Controlabilidade de processos

Ao tentar melhorar a eficiência dos processos químicos, a tendência industrial é de aumentar a integração e, consequentemente, a complexidade da planta, o que faz surgir mais interações entre os equipamentos do processo e dificulta o projeto de sistemas de controle.

Diante deste problema, surgiu a necessidade da integração entre o projeto de um processo e o controle visando identificar decisões que poderiam levar a possíveis problemas na performance dinâmica. Essa integração também pode ser acoplada a uma abordagem simultânea para garantir o bom funcionamento e operação econômica do processo mesmo diante da influência de perturbações e da existência de incertezas (SEFERLIS; GE-ORGIADIS, 2004). Para entender como funciona essa sinergia entre projeto e controle é necessário entender alguns aspectos referentes à operabilidade dos processos, em especial, a controlabilidade.

A operabilidade é uma propriedade do processo que diz respeito a capacidade de controlar e desempenhar as operações em níveis aceitáveis, mesmo com entradas limitadas e incertezas acerca do modelo, usando as variáveis manipuladas disponíveis (SKOGESTAD; POSTLETHWAITE, 1996). A operabilidade engloba os conceitos de permutabilidade, flexibilidade e controlabilidade (YUAN *et al.*, 2011).

Permutabilidade é a habilidade do processo de se mover dinamicamente entre pontos de operação de maneira factível e segura (YUAN *et al.*, 2011) e a flexibilidade, pode ser definida como a capacidade de manter a operação diante de uma faixa de condições incertas do processo (DIMITRIADIS; PISTIKOPOULOS, 1995). Ao contrário desses conceitos, a controlabilidade possui muitas definições. Segue algumas encontradas na literatura:

Por Ziegler e Nichols (1943):

Controlabilidade é a habilidade de um processo em atingir e manter um valor de equilíbrio desejado.

Por Rosenbrock (1970):

Um sistema é dito controlável se é possível alcançar os objetivos específicos de controle. Por extensão, o sistema é tido como mais ou menos controlável de acordo com a facilidade de exercer seu controle.

Atualmente, a definição mais aceita de controlabilidade é (KLAMKA, 2008): Um sistema é dito controlável se para cada condição inicial de suas variáveis de estado  $x_0$  e cada condição  $x_1 \in \mathbb{R}^n$ , existe um tempo finito  $t_1$  e um vetor de entradas  $u(t) \in \mathbb{R}^m$ , com  $t \in [0,t_1]$ , de modo que  $x(t_1,x_0,u) = x_1$ . Em outras palavras, o sistema é dito controlável se ele é capaz de sair de uma dada condição inicial para uma condição final dentro de um tempo finito.

Definições alternativas surgem ao analisar a controlabilidade a partir de diferentes aspectos do processo, como por exemplo, a controlabilidade estrutural. A ideia de controlabilidade estrutural é que um processo é completamente controlável se todas as suas correntes são isoladas evitando propagação de perturbações de uma corrente para outra (HUANG; FAN, 1992). Dessa maneira, a controlabilidade estrutural pode ser avaliada examinando a forma como ocorre a propagação das perturbações na estrutura do processo.

Em uma rede de trocadores, por exemplo, uma perturbação afetará uma variável controlada apenas se existir uma conexão entre a corrente controlada e a corrente que originou a perturbação. Na Figura 3.8 é possível observar duas formas de propagação da perturbação originada na entrada da corrente C2 para a corrente H1. Apenas o caminho P1 é factível, pois o caminho P2 mostra uma propagação impossível do trocador 3 para o trocador 2, visto que a vazão da corrente H2 ocorre apenas no sentido do trocador 2 para o 3.



Figura 3.8: Caminhos P1 e P2 de propagação de perturbação, onde apenas P1 é factível. Adaptado de Shenoy (1995).

Em geral, as metodologias de avaliação da controlabilidade são divididas entre as abordagens baseadas em modelos lineares e modelos não lineares. Segundo Yuan *et al.* (2011), até o ano 2000 a maioria das ferramentas se baseavam no uso de modelos em estado estacionário ou modelos dinâmicos lineares, mas essa tendência tem mudado nos últimos anos com o surgimento de mais ferramentas baseadas em modelos não-lineares. Na sessão a seguir serão apresentadas as métricas de controlabilidade utilizadas neste trabalho.

#### 3.3.1 Métricas de controlabilidade

Assim como a própria definição de controlabilidade, existem diversas maneiras de inferir a controlabilidade de um processo. Aqui serão destacadas três, que foram utilizadas neste trabalho: métrica baseada em número de condicionamento, métrica baseada em controlabilidade estrutural e métrica baseada no controle de mínima energia.

A métrica baseada em número de condicionamento foi proposta por Westphalen *et al.* (2003) e se aproveita de uma já conhecida metodologia de pareamento de variáveis manipuladas/controladas em sistemas MIMO (*Multiple Input - Multiple Output*) baseada no número de condicionamento da matriz de ganhos de um processo (OGUNNAIKE; RAY, 1994). Para uma rede de trocadores, os autores propuseram algumas modificações na metodologia e o resultado foi um índice de controlabilidade de redes de trocadores de calor.

O número de condicionamento é uma medida da sensibilidade de um sistema linear em relação à sua solução. Assim, dado um sistema linear Ax = b, se uma pequena mudança introduzida em b provocar grande mudança na solução x, diz-se que o sistema é mal condicionado e o número de condicionamento é elevado. Se o contrário for verdadeiro, ou seja, se pequenas mudanças em b não provocarem grandes mudanças em x, diz-se que o sistema é bem condicionado e o número de condicionamento é pequeno, com limite inferior igual a 1 (WATKINS, 2002). Observa-se elevados números de condicionamento em sistemas próximos da singularidade e quando o sistema é singular, convenciona-se o número de condicionamento igual a  $\infty$ . O número de condicionamento de um sistema linear Ax = b é calculado conforme a Equação 3.1.

$$\kappa(A) = \|A^{-1}\| \cdot \|A\|$$
(3.1)

onde,  $\|\cdot\|$  corresponde à norma  $\ell_2$  ou norma Euclidiana. A norma é uma medida da magnitude, seja de um escalar, vetor ou matriz e no caso da norma Euclidiana ela é computada conforme Equação 3.2 (HOFFMAN, 2001).

$$||A|| = \left(\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}^{2}\right)^{1/2}$$
(3.2)

Para o cálculo do índice é necessário encontrar o número de condicionamento da matriz de ganhos da rede. A matriz de ganhos de uma rede de trocadores é definida conforme a Equação 3.3.

$$K_{i,j} = \frac{\Delta T_i}{\Delta Q_j} \tag{3.3}$$

onde  $\Delta T_i$  corresponde a variação da temperatura da corrente controlada *i* e  $\Delta Q_j$  a variação da carga térmica do trocador *j*. Como a análise do número
de condicionamento é utilizada para sistemas lineares, seu uso em sistemas não-lineares pressupõe uma linearização das equação ou uma perturbação muito pequena para gerar a matriz de ganhos. Ressalta-se que o resultado só tem validade nas proximidades do estado estacionário analisado.

Em uma dada rede de trocadores de calor, o número possíveis de variáveis manipuladas é igual ao número de trocadores, assim como o número de variáveis controladas é igual ao número de correntes cujas temperaturas serão controladas. Para a situação onde número de trocadores é maior que o número de correntes controladas, a matriz de ganhos K não é quadrada e portanto não é possível calcular o número de condicionamento dessa matriz. Assim, o algoritmo proposto por Westphalen *et al.* (2003) diz que o índice de condicionamento será o menor número de condicionamento encontrado para todas as combinações trocadores manipulados/correntes controladas.

Para os casos onde existam mais de uma sub-rede, o algoritmo determina que o índice final de controlabilidade é o maior dos índices de cada sub-rede. O algoritmo completo é apresentado na Figura 3.9. O Capítulo 4 apresenta uma metodologia para determinação das sub-redes.

Dado os limites do número de condicionamento, o índice está limitado ao intervalo  $[1,\infty[$ , onde 1 é a melhor controlabilidade possível e  $\infty$  indica que a rede não pode ser controlada.

Outra métrica de controlabilidade utilizada neste trabalho é baseada na controlabilidade estrutural proposta por Huang e Fan (1992), que se utiliza do conhecimento do engenheiro para classificar a controlabilidade por meio de três critérios: intensidade das perturbações das variáveis de entrada, nível de precisão de controle das temperaturas de saída e padrões de propagação de perturbações.



Figura 3.9: Algoritmo do índice de controlabilidade segundo Westphalen et al. (2003).

A quantificação das perturbações é feita em cada corrente *i* constituinte da rede. Uma perturbação na temperatura de entrada  $\delta T$  ou uma na capacidade térmica da corrente  $\delta mc_p$  provocam mudanças na carga térmica  $\delta Q$ e essa variação pode ser calculada conforme Equação 3.4 ou 3.5.

$$\delta Q_i = |mc_{p,i}\delta T_i| \tag{3.4}$$

$$\delta Q_i = \left| \delta m c_{p,i} \Delta T_i \right| \tag{3.5}$$

Conforme Huang e Fan (1992), o grau de perturbação pode ser classificado conforme a magnitude de  $\delta Q_i$  da seguinte maneira:

- Perturbação pequena:  $\delta Q \leq 2\% |Q|$
- Perturbação moderada: 2%  $|Q| < \delta Q \leq 5\% \, |Q|$
- Perturbação intensa:  $\delta Q > 5\% \left| Q \right|$

O nível de controle também é levado em conta ao inferir a controlabilidade visto que nem todas as temperaturas de saída das correntes necessitam do mesmo nível de precisão de controle. Os níveis de precisão são classificados de acordo com o desvio em relação à temperatura nominal da corrente  $\delta T$ :

- Baixa precisão de controle:  $\delta T > 5 K$
- Moderada precisão de controle:  $2\mathbf{K} < \delta T \leq 5\mathbf{K}$
- Alta precisão de controle:  $\delta T \leq 2 \mathbf{K}$

O último critério utilizado são os padrões de propagação de perturbações. Perturbações originadas nas entradas da rede se propagam essencialmente no sentido das correntes e a magnitude do efeito em uma saída vai depender da distância entre a entrada da perturbação e a saída. Huang e Fan (1992) classificaram os padrões de propagação em função dessa distância:

- Padrão 1 de propagação: Este padrão é caracterizado por perturbações que se originam a entrada de uma corrente e saem da rede pela mesma corrente ou saem por outra corrente conectada por meio de uma unidade de processo. Assim, este padrão envolve uma corrente ou um par conectado diretamente e representa a menor distância entre uma entrada e uma saída.
- Padrão 2 de propagação: Ocorre quando a propagação de uma perturbação se estende por duas unidades de processo (3 correntes) antes de alcançar a saída de uma corrente.
- Padrão 3 de propagação: Para este padrão de propagação uma perturbação passa através de três unidades (4 correntes) antes de alcançar a saída de uma corrente.
- Padrão 4 de propagação: Quando uma perturbação ocorre em uma entrada e se propaga através de mais de três unidades de processo antes de alcançar uma saída. Quanto maior a distância até a saída, maior a extensão da dissipação. Se não houver nenhuma conexão entre uma entrada e uma saída, esse par entrada/saída também é considerado como padrão 4.

A Figura 3.10 ilustra uma rede de trocadores e os padrões de propagação dessa rede são classificados de acordo com a Tabela 3.2, onde a coluna "Entrada" contém as correntes onde a perturbação ocorreu e "Saída" corresponde às correntes onde a perturbação pode sair.

		Saída				
		H1	H2	H3	C1	C2
	H1	1	2	4	1	3
da	H2	4	1	2	1	1
tra	H3	4	4	1	4	1
En	C1	1	1	3	1	2
	C2	4	1	1	4	1

Tabela 3.2: Padrões de propagação da rede apresentada na Figura 3.10.



Figura 3.10: Exemplo de rede para identificação dos padrões de propagação (HUANG; FAN, 1992).

Para calcular o índice de controlabilidade são atribuídos pesos aos critérios, que são agrupados nos vetores  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{C} \in \mathbf{P}$  (Equação 3.6), respectivamente para os pesos das perturbações, precisão de controle e padrão de propagação. A Tabela 3.3 mostra os pesos para cada critério.

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_N \end{bmatrix}, \mathbf{C} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix}, \mathbf{P} = \begin{bmatrix} p_{1,1} & p_{1,2} & \dots & p_{1,N} \\ p_{2,1} & p_{2,2} & \dots & p_{2,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{N,1} & p_{N,2} & \dots & p_{N,N} \end{bmatrix}$$
(3.6)

Definidos os critérios e os pesos, o índice baseado na controlabilidade estrutural pode ser calculado conforme a Equação 3.7. Este índice está limitado ao intervalo [0,1], onde 0 representa a pior controlabilidade possível, quando todas as correntes estão interconectadas, e um índice 1 indica a melhor controlabilidade possível, quando todas as correntes estão isoladas.

$$I = \frac{\left(\sum_{i=1}^{N} d_{i} \sum_{j=1}^{N} c_{j}\right) - \left(\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} d_{i} p_{i,j} c_{j}\right)}{\left(\sum_{i=1}^{N} d_{i} \sum_{j=1}^{N} c_{j}\right) - \left(\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} d_{i} c_{j}\right)}$$
(3.7)

Critério	Nível	Peso
	Baixo	0
Nível de perturbação	Moderado	$0,\!5$
	Intenso	1
	Baixa	0
Precisão de controle	Moderada	$0,\!5$
	Alta	1
	1	1
Deduže de concesso a	2	0,5
Paurao de propagação	3	$0,\!25$
	4	0

Tabela 3.3: Pesos de cada critério do índice.

Finalmente, o último critério de controlabilidade é o baseado no problema de controle de mínima energia, que segundo (KLAMKA, 2008) está fortemente relacionado ao problema de controlabilidade de um sistema. Dentre os diversos controles possíveis que levam o sistema do estado inicial  $x_0$  para o estado final  $x_1$ , o problema de controle de mínima energia tem por objetivo encontrar um controlador que minimize o índice mostrado na Equação 3.8.

$$J(\mathbf{u}) = \int_0^{t_1} \mathbf{u}^T(t) \mathbf{R} \mathbf{u}(t) dt$$
(3.8)

onde, **u** é o vetor das entradas (variáveis manipuladas) e **R** é uma matriz positiva definida de pesos com dimensões  $m \times m$ .

O índice  $J(\mathbf{u})$  define a energia utilizada no controle no intervalo de tempo  $[0,t_1]$  com a matriz de pesos **R**. Dessa maneira, um processo que possui boa controlabilidade utiliza menos energia para atingir o novo estado estacionário que um processo com controlabilidade inferior. Deve-se mencionar ainda que o índice é um caso especial do índice quadrático de performance e por isso, a existência de uma função de controle que minimiza a energia é garantida.

Dado que diferentes equipamentos possuem diferentes variáveis mani-

#### 3.3. Controlabilidade de processos

puladas, é interessante normaliza-las a fim de evitar que certas variáveis contribuam de forma desproporcional ao valor do índice J. Para isso, podese definir a matriz  $\mathbf{R}$  como mostrada na Equação 3.9, onde  $u_{\max}$  é o valor máximo que a variável manipulada i pode atingir e  $\mathbf{u}$  pode ser definido como um vetor de variáveis desvio, ao invés do valor absoluto da variável.

$$R_{ij} = \begin{cases} u_{\max}^{-2}, \text{ se } i = j\\ 0, \text{ se } i \neq j \end{cases}$$
(3.9)

## CAPÍTULO 4

### Conceitos aplicados da teoria dos grafos

Em capítulos posteriores alguns algoritmos oriundos da teoria dos grafos são utilizados no desenvolvimento de uma ferramenta de simulação e, por isso, faz-se necessário apresentar a terminologia utilizada nesta área. São apresentados os principais conceitos, alguns exemplos da engenharia química e um procedimento para determinação das sub-redes de uma rede de trocadores de calor.

Um processo industrial, e isso inclui as redes de trocadores de calor, pode ter sua conectividade adequadamente representada por um grafo. Os grafos são objetos de estudo da Teoria dos Grafos, uma grande área da análise combinatória, e graças à sua possibilidade de representar um processo, muitas propriedades e algoritmos aplicados aos grafos podem ser estendidos para resolver problemas de simulação de processos. Uma definição formal de grafo é dada por Chartrand e Lesniak (2000) a seguir. A Figura 4.1 mostra um exemplo de um grafo.

Um grafo G é um conjunto não-vazio de objetos chamados vértices junto com um (possivelmente vazio) conjunto de pares não ordenados de distintos vértices de G chamados de arestas.[...] Normalmente os grafos são definidos ou descritos por meio de um diagrama, no qual cada vértice é representado por um ponto ou um pequeno círculo e cada aresta é representada por um segmento de reta ou curva, ligando os pontos correspondentes a dois vértices.



Figura 4.1: Exemplo de um grafo com cinco arestas e cinco vértices.

Para ilustrar como os grafos podem representar os processos industriais, a Figura 4.2 mostra um esquema simplificado de uma planta de isomerização (ANCHEYTA, 2011) e a Figura 4.3, o respectivo grafo, onde é possível observar que os equipamentos são representados por vértices e as correntes, por arestas. O grafo mostrado neste exemplo é chamado de grafo orientado (ou digrafo), em vista das arestas indicarem um sentido. Como as correntes dos processos normalmente seguem apenas um sentido, o termo grafo será utilizado no lugar de grafo orientado ou digrafo.

Para representar de forma eficiente um processo e auxiliar em problemas de simulação, os grafos necessitam de uma forma simples de armazenar as informações sobre suas conexões de modo que possam ser lidas por um programa de computador. Esta forma pode ser obtida através de uma representação matricial, feita de duas maneiras: através de uma matriz de incidência ou uma matriz de adjacência.

A Equação 4.1 mostra a matriz de incidência do grafo da Figura 4.3. As colunas indicam os equipamentos e as linhas, as correntes. Cada +1 em uma dada linha representa uma corrente chegando no equipamento da coluna correspondente e, de forma semelhante, o -1 indica uma corrente saindo. Um espaço em branco ou 0 indica que a corrente não se conecta ao equipamento. Assim, se a corrente 4 sai do equipamento 3 e entra no



Figura 4.2: Esquema simplificado de uma unidade isomerização.



Figura 4.3: Grafo do processo de isomerização.

equipamento 4, a linha 4 deve possuir um -1 na coluna 3 e um +1 na coluna 4. As informações contidas nessa matriz são suficientes para reconstruir completamente o respectivo grafo.

A matriz de adjacência, por sua vez, é uma matriz quadrada onde as linhas e colunas correspondem aos equipamentos. A presença de um 1 na matriz de adjacência indica uma conexão saindo do equipamento correspondente à linha para o equipamento correspondente à coluna. A Equação 4.2 mostra a matriz de adjacência da Figura 4.3. Visto que o elemento  $a_{34} = 1$ , isso significa que existe uma corrente saindo do equipamento representado pela linha 3 para o equipamento representado pela coluna 4.

(4.2)

Apesar da matriz de adjacência ser muito utilizada em algoritmos para encontrar reciclos em grafos (e consequentemente em processos), esta forma de representação contém menos informações que a matriz de incidência, pois as correntes de alimentação e produto, assim como a numeração das correntes que conectam os equipamentos, não são mostradas (CROWE *et al.*, 1971). O esquema mostrado na Figura 4.4 resume as informações contidas nas duas matrizes.



Figura 4.4: Informações contidas nas matrizes de adjacência e incidência.

Outras importantes matrizes que serão utilizados neste trabalho são as potências da matriz de adjacência e a matriz de alcance. A Figura 4.5 mostra um exemplo de um grafo e a Equação 4.3 apresenta sua matriz de adjacência.

Ao se fazer o produto  $A \cdot A$  a matriz resultante é uma matriz quadrada cujos elementos  $a_{ij}$  podem ser interpretados como o número de diferentes caminhos de comprimento 2 entre o equipamento *i* e o equipamento *j* (DEO, 1975). Um caminho é uma sequência de arestas (HENLEY; WILLIAMS, 1973), assim, por exemplo, na matriz  $A^2$  mostrada na Equação 4.4, o elemento  $a_{25}$  indica a existência de duas formas distintas de sair do vértice 2 e chegar no vértice 5 passando por duas arestas: vértice  $2 \rightarrow$  vértice 4  $\rightarrow$  vértice 5 ou vértice 2  $\rightarrow$  vértice 3  $\rightarrow$  vértice 5. A matriz apresentada na Equação 4.4, no entanto, não indica qual o caminho que conecta dois equipamentos, ela indica apenas a quantidade de caminhos possíveis.



Figura 4.5: Exemplo de um grafo.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 0 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$
(4.3)

O resultado apresentado para  $A^2$  pode ser generalizado para  $A^k$ , que é a k-ésima potência da matriz de adjacência e seus elementos  $a_{ij}$  indicam o número de diferentes caminhos entre os vértices  $i \in j$  de comprimento

(número de arestas) k. Assim, os elementos da matriz resultante do somatório  $A + A^2 + A^3 + \ldots + A^k$  indicam o número de diferentes formas de sair do vértice *i* e chegar no vértice *j* passando por um número de arestas igual ou menor que k.

As potências da matriz de adjacência são utilizadas no cálculo da matriz de alcance, que semelhante à matriz de adjacência, indica a existência de uma conexão entre o vértice i e a linha j. A diferença entre essas duas matrizes é que a matriz de alcance não se limita à conexão adjacente entre os vértices, mas generaliza a conexão para caminhos de comprimento menor ou igual à n - 1, onde n é o número de vértices do grafo. A Equação 4.5 mostra o cálculo da matriz de alcance (HARARY *et al.*, 1965).

$$\mathbf{R} = (\mathbf{I} + \mathbf{A})^{n-1} \# \tag{4.5}$$

onde, **R** é a matriz de alcance, **I** é a matriz identidade, **A** é a matriz de adjacência e # indica operação booleana, que na prática corresponde a transformar qualquer elemento inteiro positivo não-nulo na matriz resultante de  $(\mathbf{I} + \mathbf{A})^{n-1}$  em 1 e manter os 0's. A Equação 4.6 ilustra essa transformação em uma matriz.

$$\mathbf{X} \# = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 8 \\ 0 & 0 & 3 \\ 2 & 9 & 0 \end{bmatrix} \# = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$
(4.6)

A matriz de alcance foi utilizada neste trabalho na determinação das sub-redes de uma rede de trocadores de calor. A Figura 4.6 mostra uma rede formada por duas sub-redes: uma constituída pelas correntes H1 e C2 e outra pelas correntes H2 e C1. A representação dessa rede na forma de fluxograma destaca a existência de duas sub-redes (Figura 4.7).

A estratégia utilizada para determinar automaticamente as sub-redes é a transformação de todas as sub-redes em componentes fortes seguida de uma metodologia matricial de determinação de componentes fortes. De forma resumida, componentes fortes são conjuntos de vértices no qual existe ao menos um caminho entre um vértice inicial i e um vértice final j. Na Figura 4.7 observa-se que existe um caminho entre E4 e E3, mas o contrário não existe, portanto, o grafo formado por {E4,E3} não é um componente forte.



Figura 4.6: Exemplo de uma rede com duas sub-redes:  $\{H1,C2\} \in \{H2,C1\}$  (WESTPHALEN *et al.*, 2003).



Figura 4.7: Exemplo da Figura 4.6 na forma de fluxograma.

Para transformar uma sub-rede em um componente forte foi utilizada uma transformação na matriz de adjacência mostrada na Equação 4.7, cujo objetivo é adicionar o sentido inverso às correntes do fluxograma. Após

36

a transformação, a Figura 4.7 se transforma na Figura 4.8, de modo que agora é possível traçar qualquer caminho entre um vértice i e um vértice j.

$$\mathbf{A}_{\rm CF} = \left(\mathbf{A} + \mathbf{A}^{\rm t}\right) \# \tag{4.7}$$



Figura 4.8: Sub-redes após transformação.

Resta agora determinar os componentes fortes. Diversos algoritmos estão disponíveis na literatura para determinação de componentes fortes (incluindo o algortimo de Sargent e Westerberg utilizado no Capítulo 6), mas uma equação em especial (Equação 4.8) é bastante simples de implementar e determina imediatamente os componentes fortes de um grafo (CHRISTOFIDES, 1977).

$$\mathbf{P} = \mathbf{R}_{\rm CF} \circ \mathbf{R}_{\rm CF}^{\rm t} \tag{4.8}$$

Onde,  $\mathbf{R}_{CF}$  é a matriz de alcance da matriz  $\mathbf{A}_{CF}$  e o símbolo  $\circ$  representa o produto de Schur ou produto elemento a elemento.

Para exemplificar, o procedimento será aplicado na rede da Figura 4.6.

As Equações 4.9 à 4.12 mostram	as matrizes resultantes	do procedimento.
--------------------------------	-------------------------	------------------

Pode-se observar que a matriz  $\mathbf{P}$  é simétrica e seus elementos indicam a pertinência de um vértice, ou trocador, a um componente forte, ou seja, uma sub-rede, quando estes forem 1. Dessa maneira, a linha ou coluna E1 indica que uma das sub-redes é formada pelos trocadores, E1, E2 e E5. Da mesma forma, a linha E3 ou linha E4 indicam a pertinência dos trocadores E3 e E4 a outra sub-rede.

# Capítulo 5

### Metodologia

O desenvolvimento deste trabalho foi dividido em três principais etapas: construção da ferramenta de simulação, análise em estado estacionário e análise dinâmica do processo. Como mostrado no Capítulo 3, as métricas de controlabilidade serão: índice baseado em número de condicionamento, índice baseado em controlabilidade estrutural e o índice baseado no controle de mínima energia. A implementação dessas métricas depende da adequabilidade do *software* que será utilizado, assim, a etapa de construção da ferramenta contemplará os seguintes passos:

- Escolha de uma plataforma adequada para simulação e implementação das métricas de controlabilidade
- Escolha dos modelos dos equipamentos necessários à simulação
- Implementação dos modelos e respectivos métodos de solução
- Implementação dos métodos de solução dos fluxogramas

As duas últimas etapas serão realizadas através de um estudo de caso onde será estabelecido um processo para o qual serão sintetizadas diversas topologias de redes. Para a etapa estacionária serão cumpridos os seguintes procedimentos:

- Síntese de um processo fictício
- Determinação das propriedades físico-químicas dos componentes
- Síntese de diferentes topologias de redes
- Avaliação da controlabilidade de cada topologia com e sem os outros equipamentos de processo

Visando comprovar ou refutar a hipótese levantada no trabalho, duas justificativas encontradas na literatura para a simulação de redes de trocadores sem outros equipamentos de processo serão colocadas à prova através de simulações em estado transiente e estacionário:

#### Justificativa 1 (BRENDEL; DHURJATI, 2010)

A dinâmica das operações unitárias fora da rede de trocadores deve ser incorporada [à simulação] se ela não for significativamente lenta em relação à dos trocadores propostos.

#### Justificativa 2 (GLEMMESTAD, 1997)

Considere uma planta integrada onde um sistema de controle separado foi projetado para a rede de trocadores. Considere que o sistema atua de forma perfeita, ou seja, as temperaturas de saída da rede de trocadores são mantidas exatamente em seus valores de *set-points* mesmo quando distúrbios estão presentes. Agora a rede controlada *não* introduzirá nenhuma interação ou *feedback* na planta como um todo.

As análises em estado transiente serão realizadas em malha aberta para avaliação qualitativa da simulação com e sem os outros equipamentos de processo e em malha fechada, com o índice dinâmico e o critério de performance IAE (integral do erro absoluto). Tanto em malha aberta como em malha fechada serão efetuadas perturbações nas correntes e equipamentos para verificar como o sistema se comporta até estabelecer o novo estado estacionário.

40

Por fim, um último teste será feito para verificar os efeitos do desacoplamento temporário que pode ocorrer no controle das temperaturas quando há atrasos de transporte entre os trocadores e as consequências disso para a controlabilidade do processo. Este teste se baseia no trabalho de Novazzi (2007):

Apesar da presença de tempo morto normalmente ser considerada como uma limitação em termos de controle, a demora na resposta devido ao tempo de residência em tubulações que interligam trocadores pode ser benéfico por promover um desacoplamento dinâmico das variáveis, tornando-as independentes temporariamente.

O fluxograma da Figura 5.1 mostra como foram divididas as etapas de execução do trabalho.



Figura 5.1: Resumo das etapas do trabalho.

# CAPÍTULO 6

## Construção da ferramenta de simulação

Para a execução deste trabalho foi necessário buscar a ferramenta adequada para simular a rede de trocadores e que possibilitasse a implementação das técnicas de medição da controlabilidade. Por eliminação, optou-se utilizar o Matlab. As outras opções eliminadas foram o Aspen Plus/Dynamics, cuja utilização de componentes, assim como reações, hipotéticas muitas vezes podem ser de difícil implementação e os modelos dinâmicos dos trocadores são muito simples e o DWSIM, que não possui uma versão dinâmica dos modelos dos equipamentos.

Ao longo deste capítulo são discutidos os modelos matemáticos dos equipamentos utilizados nas simulações, com as respectivas considerações e simplificações e suas estratégias de solução numérica, assim como as metodologias sequencial e global para solução de fluxogramas. São apresentados também as regras de mistura e as propriedades físicas utilizadas.

#### 6.1 Modelos matemáticos

#### 6.1.1 Reator

Reator de mistura perfeita com cinética reversível de primeira ordem em fase líquida. O reator pode operar adiabaticamente ou utilizar uma camisa

para controlar a temperatura de saída (fixando T e desprezando o balanço de energia). O nível é mantido fixando a vazão de saída igual à vazão de entrada. A representação esquemática do reator é mostrada na Figura 6.1 e os balanços de massa e energia, nas Equações 6.1 e 6.2.



Figura 6.1: Representação esquemática do reator.

#### Considerações:

- 1. Mistura perfeita
- 2. Não-isotérmico
- 3. Reação em fase líquida
- 4. Não há troca térmica com o ambiente

Balanço molar

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \frac{F_0\left(x_0 - x\right) + rV}{n} \tag{6.1}$$

#### 6.1. Modelos matemáticos

Balanço de energia

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = \frac{-F_0 c_\mathrm{p} \left(T - T_0\right) + r V \Delta H_r}{n c_\mathrm{p}} \tag{6.2}$$

Nomenclatura:

- V | Volume do reator  $[m^3]$
- x Fração molar do reagente
- T | Temperatura [K]
- F | Vazão molar [mol s<sup>-1</sup>]
- n Número de mols no reator [mol]
- r | Velocidade da reação em relação ao componente 1 [mol m<sup>-3</sup> s<sup>-1</sup>]

 $\Delta H_{\rm r}$  | Entalpia de reação [J mol<sup>-1</sup>]

 $c_{\rm p}$  | Capacidade calorífica à pressão constante [J mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>]

#### 6.1.2 Trocador de calor instantâneo

Trocador de calor que não apresenta dinâmica. No que diz respeito à velocidade de resposta dinâmica, este modelo representa o limite inferior dentre os modelos dos trocadores considerados neste trabalho.

As especificações deste trocador podem ser feitas de duas maneiras: entrando diretamente com a carga térmica (Q) ou apresentando a área (A), o coeficiente global de transferência térmica (U) e a direção dos fluidos, se em contracorrente ou concorrente. A representação esquemática do modelo está apresentada na Figura 6.2. As equações ilustrando o caso concorrente são mostradas nas Equações 6.3 a 6.5. *Considerações:* 

- 1. Troca térmica ocorre instantaneamente
- 2. Não há troca térmica com o ambiente
- 3. Não ocorrem mudanças de fase



Figura 6.2: Representação esquemática do trocador instantâneo.

$$Q = UA_{\rm TC} \frac{(T_{\rm f0} - T_{\rm q0}) - (T_{\rm f} - T_{\rm q})}{\ln \frac{T_{\rm f0} - T_{\rm q0}}{T_{\rm f} - T_{\rm q}}}$$
(6.3)

$$Q = F_{q}c_{p,q}(T_{q} - T_{q0})$$
(6.4)

$$-Q = F_{\rm f} c_{p,\rm f} (T_{\rm f} - T_{\rm f0}) \tag{6.5}$$

Para fins de controle, também foram considerados os desvios em cada lado do trocador. Para isso, foram definidas as variáveis  $f_{d,t} \in f_{d,c}$  como as frações de desvio da corrente do tubo e do casco, respectivamente. Assim, a vazão que passa no trocador é mostrada na Equação 6.6. As temperaturas finais no trocador são calculadas com a Equação 6.7, que representa a mistura da corrente que passou pelo trocador com a corrente desviada.

$$F = (1 - f_{\rm d})F_0 \tag{6.6}$$

$$T = T_0 - (1 - f_d)(T_{\text{trocador}} - T_0) - f_d(T_{\text{desviado}} - T_0)$$
(6.7)

Nomenclatura:

 $Q \mid$  Carga termica [W]

- $A_{\rm TC}$  Área de troca térmica [m<sup>2</sup>]
- $c_p$  | Capacidade térmica à pressão constante [J mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>]
- T Temperatura [K]
- $F \mid \text{Vazão molar [mol s}^{-1}]$
- U | Coeficiente global de transferência térmica [W m<sup>-2</sup> K<sup>-1</sup>]
- $f_d$  | Fração da corrente para o desvio
- f Subscrito para o lado frio
- q Subscrito para o lado quente

#### 6.1.3 Trocador de calor bitubular

O modelo é unidimensional consistindo dos domínios do casco e do tubo e dos desvios. A Figura 6.3 ilustra um esquema do trocador bitubular conconcorrente. As Equações 6.8 e 6.9 representam o modelo matemático do trocador para os lados do casco e tubo, respectivamente. Para inverter a direção do fluido no tubo, basta alterar o sinal do primeiro termo da Equação 6.9.



Figura 6.3: Representação esquemática do trocador bitubular com destaque para um elemento de discretização.

#### Considerações:

1. Coeficiente global constante uniforme ao longo do trocador

- 2. Não há troca térmica com o ambiente
- 3. Parede do tubo com espessura desprezível
- 4. Não ocorrem mudanças de fase

Lado do casco

$$\frac{\partial T_{\rm c}}{\partial t} = -v_{\rm c} \frac{\partial T_{\rm c}}{\partial z} + \frac{U \cdot A_{\rm TC}}{\rho_{\rm c} \cdot V_{\rm c} \cdot c_{p,\rm c}} (T_{\rm t} - T_{\rm c})$$
(6.8)

Lado do tubo

$$\frac{\partial T_{\rm t}}{\partial t} = -v_{\rm t} \frac{\partial T_{\rm t}}{\partial z} + \frac{U \cdot A_{\rm TC}}{\rho_{\rm t} \cdot V_{\rm t} \cdot c_{p,\rm t}} (T_{\rm c} - T_{\rm t})$$
(6.9)

O coeficiente global foi calculado conforme a Equação 6.10 e os coeficientes de transferência de cada lado foram calculados conforme as correlações apresentadas em 6.11 e 6.12 (PERRY *et al.*, 1999).

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_{\rm c}} + \frac{1}{h_{\rm t}} \tag{6.10}$$

Correlação de Dittus-Boelter

$$h_{\rm t} = \left(\frac{k_{\rm t}}{D_{\rm t}}\right) 0.0243 \cdot Re^{0.8} Pr^{1/3} \tag{6.11}$$

Correlação de Monrad e Pelton

$$h_{\rm c} = \left(\frac{k_{\rm c}}{D_{\rm c} - D_{\rm t}}\right) 0.02 \cdot Re^{0.8} Pr^{1/3} \left(\frac{D_{\rm c}}{D_{\rm t}}\right)^{0.53} \tag{6.12}$$

#### 6.1. Modelos matemáticos

Nomenclatura:

- $Re \mid$  Número de Reynolds
- $Pr \mid$  Número de Prandtl
- h Coeficiente convectivo [W m<sup>-2</sup> K<sup>-1</sup>]
- k Coeficiente de condução térmica [W m<sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>]
- T Temperaturas no lado do casco e do tubo [K]
- v | Velocidade no lado do casco e do tubo [m s<sup>-1</sup>]
- V | Volume no lado do casco e do tubo [m<sup>3</sup>]
- $\rho$  | Densidade no lado do casco e do tubo [mol m<sup>-3</sup>]
- $c_{\rm p}$  | Capacidade calorífica no lado do casco e do tubo [J mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>]
- U Coeficiente global de transferência da calor [W m<sup>-2</sup> K<sup>-1</sup>]
- $A_{\rm TC}$  | Área de troca térmica [m<sup>2</sup>]
  - c Subscrito para o lado do casco
  - t Subscrito para o lado do tubo

#### 6.1.4 Trocador de calor casco e tubo (1-1)

Modelo do trocador casco e tubo com apenas um passe no casco e um passe no tubo. Matematicamente o modelo se assemelha ao modelo do trocador bitubular acrescido dos cabeçotes e do modelo para o coeficiente convectivo adequado para o lado do casco.

*Considerações:* 

- 1. Coeficiente global constante ao longo do trocador
- 2. Velocidade constante dos fluidos ao longo dos tubos e do casco
- 3. Mistura perfeita nos cabeçotes
- 4. Não há troca térmica com o ambiente
- 5. Parede dos tubos com espessura desprezível
- 6. Não ocorrem mudanças de fase



Figura 6.4: Representação esquemática do trocador casco e tubo (1-1), com destaque para a direção dos fluidos e um elemento de discretização.

Lado do casco

$$\frac{\partial T_{\rm c}}{\partial t} = -v_{\rm c} \frac{\partial T_{\rm c}}{\partial z} + \frac{U \cdot A_{\rm TC}}{\rho_{\rm c} \cdot V_{\rm c} \cdot c_{p,\rm c}} (T_{\rm t} - T_{\rm c})$$
(6.13)

Lado do tubo

$$\frac{\partial T_{\rm t}}{\partial t} = -v_{\rm t} \frac{\partial T_{\rm t}}{\partial z} + \frac{U \cdot A_{\rm TC}}{\rho_{\rm t} \cdot V_{\rm t} \cdot c_{p,\rm t}} (T_{\rm c} - T_{\rm t}) \tag{6.14}$$

Cabeçotes

$$\frac{dT_{\rm h}}{dt} = \frac{F}{\rho \cdot V_{\rm h}} (T_0 - T_{\rm h}) \tag{6.15}$$

O coeficiente convectivo para o lado dos tubos é calculado utilizando a correlação de Dittus-Boelter, apresentado anteriormente na Equação 6.11. Para o lado do casco foi considerado o método de Kern, introduzido no Seção 6.1.5, referente ao modelo do trocador casco e tubo com dois passes nos tubos.

Os dados acerca da geometria do trocador(espaçamento de chicanas, comprimento, diâmetro do casco e dos tubos e *pitch* dos tubos) são mostrados no Apêndice A.

Nomenclatura:

- T | Temperatura [K]
- v | Velocidade [m s<sup>-1</sup>]
- V | Volume [m<sup>3</sup>]
- $\rho$  | Densidade [mol m<sup>-3</sup>]
- $c_p$  Capacidade calorífica [J mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>]
- U | Coeficiente global de transferência da calor [W m<sup>-2</sup> K<sup>-1</sup>]

 $A_{\rm TC}$  | Área de troca térmica [m<sup>2</sup>]

c Subscrito para o lado do casco

t Subscrito para o lado do tubo

h Subscrito para o cabeçote

#### 6.1.5 Trocador de calor casco e tubo (1-2)

Modelo do trocador casco e tubo com dois passes no tubo. O modelo utilizado é uma simplificação do modelo de quatro passes encontrado em Silebi e Schiesser (1992). Assim como os modelos anteriores, cada lado do trocador possui um desvio para controlar a temperatura de saída. Assim como o trocador casco e tubo com apenas um passe no tubo, dados acerca da geometria do equipamento são detalhados no Apêndice A.

 $Consideraç \tilde{o} es:$ 

- 1. Coeficiente global constante ao longo do trocador
- 2. Velocidade constante dos fluidos ao longo dos tubos e do casco
- 3. Os dois passes do tubo possuem o mesmo número de tubos com a mesma área transversal
- 4. Mistura perfeita nos cabeçotes

- 5. Não há troca térmica com o ambiente
- 6. Parede dos tubos com espessura desprezível
- 7. Não ocorrem mudanças de fase





Lado do tubo (passe 1)

$$\frac{\partial T_{\rm p1}}{\partial t} = -v_{\rm t} \frac{\partial T_{\rm p1}}{\partial z} + \frac{U \cdot A_{\rm TC}}{2\rho_{\rm t} \cdot V_{\rm t} \cdot c_{p,\rm t}} (T_{\rm c} - T_{\rm p1}) \tag{6.16}$$

Lado do tubo (passe 2)

$$\frac{\partial T_{\rm p2}}{\partial t} = v_{\rm t} \frac{\partial T_{\rm p2}}{\partial z} + \frac{U \cdot A_{\rm TC}}{2\rho_{\rm t} \cdot V_{\rm t} \cdot c_{p,\rm t}} (T_{\rm c} - T_{\rm p2}) \tag{6.17}$$

Lado do casco

$$\frac{\partial T_{\rm c}}{\partial t} = -v_{\rm c} \frac{\partial T_{\rm c}}{\partial z} + \frac{U \cdot A_{\rm TC}}{\rho_{\rm c} \cdot V_{\rm c} \cdot c_{p,{\rm c}}} (T_{\rm p1} + T_{\rm p2} - 2T_{\rm c})$$
(6.18)

#### 6.1. Modelos matemáticos

Cabeçotes

$$\frac{dT_{\rm h}}{dt} = \frac{F}{\rho \cdot V_{\rm h}} (T_0 - T_{\rm h}) \tag{6.19}$$

O coeficiente convectivo para o lado do casco foi calculado pelo método de Kern, que dentre os principais métodos é um dos mais utilizados para o cálculo preliminar (SINNOTT, 2005). O procedimento é dado a seguir:

Cálculo da área de escoamento transversal do lado do casco

$$A_{\rm c} = \frac{(p_{\rm t} - D_{\rm t})D_{\rm c}l_{\rm B}}{p_{\rm t}}$$
(6.20)

Cálculo da velocidade linear no casco

$$v_{\rm s} = \frac{F_{\rm c}}{\rho_{\rm c} A_{\rm c}} \tag{6.21}$$

Cálculo do diâmetro equivalente para o arranjo triangular

$$D_{\rm eq} = \frac{1.10}{d_{\rm e,t}} \left( p_{\rm t}^2 - 0.917 D_{\rm t}^2 \right)$$
(6.22)

Cálculo do coeficiente convectivo para o lado do casco (HEWITT $et\ al.,$ 1994)

$$h_{\rm c} = \left(\frac{k_{\rm c}}{D_{\rm eq}}\right) 0,36Re^{0.55}Pr^{1/3} \tag{6.23}$$

O coeficiente convectivo para o lado dos tubos é o mesmo apresentado para o trocador bitubular (Equação 6.11).

#### Nomenclatura:

- $Re \mid$  Número de Reynolds
- Pr | Número de Prandtl
- D | Diâmetro [m]

h	Coefficiente convectivo $[W m^{-2} K^{-1}]$
k	Coeficiente de condução térmica $[W m^{-1} K^{-1}]$
T	Temperatura [K]
v	Velocidade $[m \ s^{-1}]$
V	Volume [m <sup>3</sup> ]
$\rho$	Densidade $[mol m^{-3}]$
$c_p$	Capacidade calorífica $[J \mod^{-1} K^{-1}]$
Ū	Coeficiente global de transferência da calor $[W m^{-2} K^{-1}]$
$A_{\rm TC}$	Área de troca térmica $[m^2]$
$p_{ m t}$	Pitch do tubo [m]
$l_{\rm B}$	Espaçamento entre chicanas [m]
с	Subscrito para o lado do casco
p1	Subscrito para o lado do tubo no primeiro passe
p2	Subscrito para o lado do tubo no segundo passe
h	Subscrito para o cabeçote
eq	Subscrito para o diâmetro equivalente

#### 6.1.6 Trocador de utilidades

O modelo do trocador de utilidades utiliza o modelo do trocador casco e tubo (1-2) com uma utilidade (água fria ou vapor) para resfriar ou aquecer uma corrente de processo. A utilidade fria é água disponível à 10 °C, cujas propriedades médias consideradas são mostradas na Tabela 6.1. As considerações do trocador de utilidade com água são as mesmas do trocador casco e tubo (1-2).

Propriedade	Unidade	Valor
Capacidade calorífica	$J/(mol \cdot K)$	$7,593 \times 10^{4}$
Viscosidade	Pa·s	$5,\!326 imes10^{-4}$
Condutividade térmica	$W/(m \cdot K)$	$0,\!6492$
Densidade (líquido)	$mol/m^3$	54126

Tabela 6.1: Tabela de propriedades da água fria.

A utilidade quente, por sua vez, é vapor saturado alocado no casco do trocador. Por se tratar de vapor condensando, o modelo despreza as equações do lado do casco e fixa a temperatura de acordo com a pressão imposta. Assim, dada uma pressão no lado do casco, a temperatura correspondente é calculada de acordo com a expressão para a pressão de saturação da água (Equação 6.24) que é válida no intervalo de 0-200 °C (SMITH *et al.*, 2007).

$$\ln(P^{\text{sat}}/kPa) = 16,3872 - \frac{3885,70}{T/^{\circ}\text{C} + 230,170}$$
(6.24)

Um redução na pressão do vapor em um trocador real poderia levar ao superaquecimento do vapor e portanto o uso de calor sensível na troca térmica. Para evitar isso, na prática, são utilizados purgadores que permitem apenas a passagem de condensado, bloqueando a passagem quando apenas vapor está presente no trocador e garantido a troca térmica com calor latente. Dessa maneira, as considerações para o modelo do trocador utilizando vapor são:

#### Considerações:

- 1. Perfil constante de temperatura no lado da utilidade
- 2. Não existe formação de vapor superaquecido no trocador
- 3. Coeficiente convectivo constante no lado do vapor

O coeficiente convectivo foi fixado em  $h = 5700 \,\mathrm{Wm^{-2} K^{-1}}$ , valor típico utilizado na simulação de refervedores com condensação no lado do casco (SMITH, 2005), pois em geral a resistência à transferência de calor ocorre no lado onde não está acontecendo a condensação.

#### 6.1.7 Coluna de destilação

A coluna de destilação consiste de um modelo de equilíbrio binário com pressão constante, englobando um tambor de condensação, os estágios teóricos e um tambor de refluxo. Ao entrar na coluna, a corrente de alimentação passa por um *flash* adiabático para separar as fases líquida e vapor. As vazões de vapor constantes entre os pratos podem ser justificadas neste modelo em função das entalpias de vaporização dos componentes que são semelhantes e não haver variação de entalpia do líquido entre os estágios, em vista da capacidade calorífica da mistura depender apenas da composição (DIMIAN, 2003). Considerando ainda que o *hold-up* do líquido é constante, as vazões de líquido também são mantidas constantes dentro de um sessão (esgotamento ou retificação).

#### Considerações:

- 1. Variação de entalpia nos estágios desprezível
- 2. Separação binária
- 3. Vazões de vapor e líquido constantes entre os pratos
- 4. Pressão constante
- 5. Hold-up constante nos estágios
- 6. Volatilidade relativa constante
- 7. Eficiência de 100% nos estágios teóricos
- 8. Mistura perfeita em todos os estágios
- 9. Condensador total

Condensador

$$M_1 \frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} = V_r y_2 - Dx_1 - L_r x_1 \tag{6.25}$$

Sessão de retificação

$$M_{i}\frac{\mathrm{d}x_{i}}{\mathrm{d}t} = V_{\mathrm{r}}(y_{i+1} - y_{i}) + L_{\mathrm{r}}(x_{i-1} - x_{i})$$
(6.26)


Figura 6.6: Representação esquemática da coluna de destilação

Estágio de alimentação

$$M_{i}\frac{\mathrm{d}x_{i}}{\mathrm{d}t} = V_{\mathrm{e}}y_{i+1} - V_{\mathrm{r}}y_{i} + L_{\mathrm{r}}x_{i-1} + L_{\mathrm{e}}x_{i} + Fz$$
(6.27)

Sessão de esgotamento

$$M_{i}\frac{\mathrm{d}x_{i}}{\mathrm{d}t} = V_{\mathrm{e}}(y_{i+1} - y_{i}) + L_{\mathrm{e}}(x_{i-1} - x_{i})$$
(6.28)

Refervedor

$$M_n \frac{\mathrm{d}x_n}{\mathrm{d}t} = L_\mathrm{e} x_{n-1} - B x_n - V_\mathrm{e} y_n \tag{6.29}$$

Vazões nas sessões de retificação e esgotamento

$$L_{\rm r} = \left(\frac{R}{R+1}\right) V_{\rm r} \tag{6.30}$$

$$V_{\rm r} = V_{\rm e} + f_{\rm v} \cdot F \tag{6.31}$$

$$L_e = L_r + (1 - f_v)F (6.32)$$

$$V_{\rm e} = \frac{Q_{\rm r}}{\Delta H_{\rm v}} \tag{6.33}$$

A volatilidade relativa foi calculada na temperatura média entre as temperaturas de saturação para uma dada pressão de operação da coluna. A relação entre a composição na fase vapor e a fase líquida é dada pela Equação 6.34.

$$y = \frac{\alpha x}{1 + \alpha x - x} \tag{6.34}$$

As temperaturas das correntes de topo e fundo foram estimadas utilizando um procedimento de bolha T visto que a corrente de topo é condensada completamente (condensador total). A Equação 6.35 mostra o equacionamento para determinação da temperatura.

$$f(T) = x \cdot P_1^{\text{sat}} + (1 - x) \cdot P_2^{\text{sat}} - P = 0$$
(6.35)

Quando especificadas a composição e a vazão de topo a Equação 6.36, utilizada para calcular a razão mínima de refluxo (MCCABE *et al.*, 1993), fornece a estimativa inicial para o cálculo da razão de refluxo. Através de um balanço de massa na coluna e balanço de energia no refervedor, também é possível encontrar o valor de  $Q_{\rm r}$ .

$$R_{\min} = \frac{1}{\alpha - 1} \left( \frac{x_{\rm d}}{x_{\rm f}} - \alpha \frac{1 - x_{\rm d}}{1 - x_{\rm f}} \right)$$
(6.36)

#### 6.1. Modelos matemáticos

Nomenclatura:

- $\alpha$  Volatilidade relativa
- P | Pressão total da coluna [Pa]
- D | Vazão de destilado [mol s<sup>-1</sup>]
- B | Vazão de produto de fundo [mol s<sup>-1</sup>]
- L | Vazão de líquido da coluna [mol s<sup>-1</sup>]
- V | Vazão de vapor da coluna [mol s<sup>-1</sup>]
- x Fração molar do componente 1
- T | Temperatura [K]
- F | Vazão molar da alimentação [mol s<sup>-1</sup>]
- M | Número total de mols do estágio (hold-up) [mol]
- R Razão de refluxo
- $f_{\rm v}$  | Fração de vapor
- z Fração molar do componente 1 na alimentação
- $Q_{\rm r}$  | Carga térmica do refervedor [W]
- $\Delta H_{\rm v}$  | Entalpia de vaporização da mistura [J mol<sup>-1</sup>]
- n | Número de estágios
- $P^{\text{sat}}$  | Pressão de saturação [Pa]
- d Subscrito para destilado
- f Subscrito para alimentação
- e Subscrito para a sessão de esgotamento
- r Subscrito para a sessão de retificação

## 6.1.8 Misturador

Utilizado para misturar adiabaticamente e instantaneamente duas ou mais correntes. A vazão e a temperatura final são decorrentes dos balanços de massa (Equação 6.37) e energia (Equações 6.38 a 6.41), respectivamente. Para evitar problemas com diferentes pressões de entrada, estas devem possuir a mesma pressão, que será a igual a pressão de saída, a não ser quando especificada outra pressão (e esta será utilizada nos cálculos). O procedimento de mistura é feito com duas correntes por vez, até que todas as correntes tenham sido misturadas. Um esquema do misturador é mostrado na Figura 6.7. Considerações:

1. Mistura perfeita no equipamento



Figura 6.7: Esquema do misturador.

Balanço molar

$$xF = \sum_{i=1}^{n} x_i F_i \tag{6.37}$$

Balanço de energia

$$H = \sum_{i=1}^{n} H_i \tag{6.38}$$

$$H = f_{\rm v} H_{\rm V} + (1 - f_{\rm v}) H_{\rm L}$$
(6.39)

$$H_L = \sum_{i} x_i c_{p,L,i} (T - T_{ref})$$
(6.40)

$$H_{V} = \sum_{i} x_{i} c_{p,L,i} (T_{vap} - T_{ref}) + \Delta H_{vap} + \sum_{i} x_{i} c_{p,V,i} (T - T_{vap})$$
(6.41)

60

Nomenclatura:

x	Fração molar
T	Temperatura [K]
F	Vazão molar [mol $s^{-1}$ ]
Н	Entalpia específica $[J \text{ mol}^{-1}]$
$\Delta H_{\rm vap}$	Entalpia de vaporização $[J \text{ mol}^{-1}]$
$f_{\rm v}$	Fração de vapor
$c_{\mathrm{p}}$	Capacidade calorífica à pressão constante $[J \text{ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}]$
ref	Subscrito para condição de referência
vap	Subscrito para vaporização
V	Subscrito para vapor
L	Subscrito para líquido

## 6.1.9 Divisor de correntes

O divisor de correntes divide uma corrente de entrada em duas ou mais correntes de saída de acordo com a fração de divisão (Equação 6.42). Todas as outras entras variáveis (temperatura, composição e pressão) são as mesmas da corrente de entrada. Um esquema do divisor de correntes é mostrada na Figura 6.8.

Considerações:

- 1. Não há troca térmica com o ambiente
- 2. Mistura perfeita no equipamento

Divisão da vazão molar

$$F_n = f_n F \tag{6.42}$$



Figura 6.8: Esquema do divisor de correntes

#### Nomenclatura:

- $F \mid \text{Vazão molar [mol s}^{-1}]$
- f | Fração na qual será dividida a corrente de entrada

## 6.1.10 Tubulações

Apesar de *softwares*, como o Aspen, utilizarem tubulações para o cálculo da queda de pressão, neste trabalho as tubulações têm apenas o papel de calcular o atraso de transporte. O modelo para o atraso de temperatura (Equação 6.43) foi obtido da literatura (OGUNNAIKE; RAY, 1994) e o atraso da composição (Equação 6.44) foi obtido por extensão.

Considerações:

- 1. Não há troca térmica com o ambiente
- 2. Fluido incompressível

Atraso da temperatura

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -v \frac{\partial T}{\partial z} \tag{6.43}$$



Figura 6.9: Representação esquemática da tubulação.

Atraso da composição

$$\frac{\partial x}{\partial t} = -v\frac{\partial x}{\partial z} \tag{6.44}$$

A velocidade na tubulação, quando não especificado outra, é fixada em 1.5 m/s, velocidade usual para fluidos de processo em tubulações segundo Branan (2002).

Nomenclatura:

- $x \mid$  Fração molar
- T | Temperatura [K]
- v | Velocidade do fluido [m s<sup>-1</sup>]

## 6.1.11 Flash adiabático

O *flash* adiabático não é utilizado como uma operação unitária nas simulações, mas está incorporado em diversos equipamentos, principalmente para determinar a fase que se encontra o fluido para computar suas propriedades. A modelagem do *flash* foi feita por meio da equação de Rachford-Rice (Equação 6.45) (PERRY *et al.*, 1999). A representação esquemática do *flash* está apresentada na Figura 6.10.



Figura 6.10: Representação esquemática do flash adiabático.

$$f\{n_V\} = \sum_i \frac{z_i(1-K_i)}{1+\frac{n_V}{n_T}(K_i-1)} = 0$$
(6.45)

Sabendo que  $K_i$  é calculado de acordo com a Equação 6.46.

$$K_i = \frac{P_i^{sat}}{P} \tag{6.46}$$

Com o valor de  $n_V$  é possível calcular as composições nas fases líquida e vapor com as Equações 6.47 e 6.48.

$$x_i = \frac{z_i}{1 + \frac{n_V}{n_T}(K_i - 1)} \tag{6.47}$$

$$y_i = \frac{K_i z_i}{1 + \frac{n_V}{n_T} (K_i - 1)} \tag{6.48}$$

Entretanto, antes de executar o conjunto de equações mostrado acima é efetuado um teste para saber se o fluido está na região de duas fases, calculando para isso, as pressões de bolha e orvalho e verificando se a pressão em que se encontra a corrente cai nessa região, como mostrado na Equação 6.49.

$$\frac{1}{\frac{z}{P_1^{\text{sat}}} + \frac{(1-z)}{P_2^{\text{sat}}}} < P < zP_1^{\text{sat}} + (1-z)P_2^{\text{sat}}$$
(6.49)

Caso ela fique abaixo da primeira condição (pressão de orvalho) automaticamente a fração de vapor é calculada como unitária. Caso contrário, se a pressão ficar acima da pressão de bolha, a fração de vapor é zero (SMITH *et al.*, 2007).

#### Nomenclatura:

- K Constante de distribuição de fase
- $P^{sat}$  | Pressão de saturação [Pa]
- P | Pressão [Pa]
- $n_{\rm V}$  | Número de mols da fase vapor [mol]
- $n_{\rm T}$  | Número de mols total [mol]
- z | Fração molar total
- x | Fração molar na fase líquida
- y | Fração molar na fase gasosa

### 6.1.12 Válvulas

O modelo da válvula considerado não é utilizado diretamente como uma operação unitária nas simulações, mas está embutido em diversos equipamentos para evitar mudanças súbitas de vazão, que não corresponderiam ao comportamento real de válvulas de controle. O modelo para a dinâmica de primeira ordem de uma válvula ideal é apresentado na Equação 6.50.

Considerações:

- 1. Vazão proporcional à abertura da válvula
- 2. Dinâmica de primeira ordem

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\tau} \left( y - y_{\mathrm{f}} \right) \tag{6.50}$$

Com 0 < y < 1. Supondo a vazão proporcional à abertura da válvula de modo que  $F=a\cdot y,$  tem-se

$$\frac{1}{a}\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\tau}\left(\frac{F}{a} - \frac{F_{\mathrm{f}}}{a}\right) \tag{6.51}$$

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\tau} \left(F - F_{\mathrm{f}}\right) \tag{6.52}$$

Dessa forma, de acordo com a Equação 6.52, dado um valor para  $\tau$ , não é necessário dimensionar a válvula, bastando apenas impor um limite superior para a vazão correspondente à abertura total da válvula.

Segundo EMERSON (1998), as válvulas podem ter constante de tempo na faixa de 0,2-12 s. Para visualizar melhor o efeito da atuação das válvulas foi escolhida uma constante de tempo de 12 s para todas as válvulas neste trabalho.

Nomenclatura:

- y | Abertura da válvula
- $F \mid Vazão [mol/s]$
- $\tau$  | Constante de tempo da válvula [s]
- f Subscrito para o valor final da variável

#### 6.1.13 Controladores

O único controlador utilizado neste trabalho é o controlador PI (Equação 6.53).

$$u(t) = K_p \left[ e(t) + \frac{1}{\tau_i} \int_0^t e(\tau) d\tau \right]$$
(6.53)

A determinação das constantes  $K_p \in \tau_i$  é realizada com o método de sintonia de Åström-Hägglund (método da autosintonia), pois este método é mais adequado quando a razão atraso de transporte/constante de tempo é pequena (menor que 0,28) (YU, 2006). O método da autosintonia consiste em utilizar um relé de magnitude h para induzir oscilações sustentadas no processo e através delas obter os parâmetros críticos,  $K_c \in P_c$  que são a constante proporcional e o período críticos, respectivamente. A forma usual na qual este método é aplicado é mostrada abaixo e a resposta de um sistema é mostrada na Figura 6.11.

- 1. Levar o sistema para o estado estacionário;
- 2. Efetuar uma perturbação no sistema e ligar o relé;
- 3. Toda vez que a variável controlada cruzar o *set-point*, o relé muda para a posição oposta.



Figura 6.11: Resposta na forma oscilação sustentada do processo.

Entretanto, o método da autosintonia, como apresentado, tende a falhar quando o sinal oriundo da variável controlada está sujeita à ruído, pois nas proximidades do *set-point* cruzamentos aleatórios poderiam ocorrer, levando à mudanças aleatórias na posição do relé. Para evitar esse problema pode-se adicionar histerese ao relé que mudaria sua posição de acordo com uma faixa de valores, ao invés do cruzamento com o *set-point*.

Neste trabalho, o relé com histerese foi implementado não por motivos de ruído (que estão completamente ausentes durantes as simulações), mas por motivos numéricos, visto que a dinâmica de alguns equipamentos é muito rápida e isso faz a mudança da posição do relé mudar muitas vezes, forçando o método de integração a reduzir excessivamente o tamanho do passo e muitas vezes provocando até problemas de memória (em função do passo muito pequeno).

O resumo de como o procedimento funciona é apresentado a seguir e a resposta de um sistema ao relé com histerese é mostrada na Figura 6.12.

- 1. Levar o sistema para o estado estacionário;
- 2. Efetuar uma perturbação no sistema e ligar o relé;
- 3. Assim que a variável controlada ficar acima do valor set-point + n, o relé muda para a posição oposta;
- 4. Assim que a variável controlada ficar abaixo do valor *set-point n*, o relé muda para a posição oposta.

Neste trabalho valor de n foi fixado em 0,05% do valor do *set-point*. Uma aproximação para o parâmetro  $K_c$  para o relé com histerese é obtido com a Equação 6.54 (MCMILLAN, 2001), onde h é a amplitude da variável manipulada, n é o valor absoluto em relação ao *set-point* para o qual o relé muda de posição e a é a amplitude da variável controlada, como ilustrado na Figura 6.12.

$$K_c = \frac{4h}{\pi\sqrt{a^2 - n^2}} \tag{6.54}$$

Para calcular o período da oscilação foi implementada uma estratégia de integração numérica por partes com auxílio de uma ferramenta de detecção de eventos do Matlab. Durante a sintonia, assim que integrador detecta



Figura 6.12: Resposta do processo usando relé com histerese.

que a variável controlada ultrapassou o valor |set-point + n|, a integração numérica é interrompida, os valores armazenados e o relé tem sua posição alterada. O integrador então continua a partir do ponto interrompido anteriormente. O tempo entre dois trechos de integração equivale ao período crítico  $P_c$ .

Finalmente, foram considerados os parâmetros de Tyreus-Luyben para o cálculo das constantes do controlador, visto que estes apresentam menor tendência a oscilar e menor *overshoot* que os parâmetros de Ziegler-Nichols e são mais adequados a processos químicos (SEBORG *et al.*, 2004). A Tabela 6.2 mostra os parâmetros de Tyreus-Luyben.

Tabela 6.2: Constantes do controlador com os parâmetros de Tyreus-Luyben.

Constantes	Valor
$K_p$	$K_{c}/0,32$
$ au_{ m i}$	$2,2P_c$

Nomenclatura:

- e | Erro (*set-point* variável controlada)
- $K_p \mid \text{Constante proporcional}$
- $\tau_{\rm i}$  | Tempo integral
- a | Amplitude da variável controlada
- h | Amplitude da variável manipulada
- n | Valor em relação ao set-point para o qual o relé muda de posição
- c | Subscrito para variável crítica

## 6.2 Propriedades físicas e regras de mistura

As propriedades físicas necessárias para a simulação dos equipamentos são a massa molar, pressão de saturação, viscosidade, capacidade calorífica, entalpia de vaporização à 273,15 K, condutividade térmica e densidade dos fluidos. As regras de mistura consideradas são para fluidos ideais e as equações são válidas, em sua maioria, apenas para fluidos com uma única fase. Para os casos onde múltiplas fases estão presentes, o programa emite um erro e interrompe a execução. A lista de regras de mistura está mostrada abaixo assim como a equação para a pressão de saturação.

#### • Viscosidade

Líquidos - Equação de Arrhenius (VISWANATH et al., 2007):

$$\log \eta_{\rm m} = x_1 \log \eta_1 + x_2 \log \eta_2 \tag{6.55}$$

*Gases* - Equação de Wilke com aproximação de Herning and Zipperer (POLING *et al.*, 2001):

$$\eta_{\rm m} = \frac{x_1 \eta_1}{x_1 + x_2 \phi_{12}} + \frac{x_2 \eta_2}{x_2 + x_1 \phi_{21}} \tag{6.56}$$

$$\phi_{ij} = \left(\frac{M_j}{M_i}\right)^{1/2} = \phi_{ji}^{-1} \tag{6.57}$$

Nomenclatura:

- $x \mid$  Fração molar
- $\eta$  | Viscosidade [Pa s]
- M | Massa molecular
- m | Subscrito para mistura
- Capacidade calorífica (FELDER; ROUSSEAU, 2005)

$$c_{\mathrm{p,m}} = \sum_{i} x_i c_{\mathrm{p},i} \tag{6.58}$$

Nomenclatura:

- $x \mid$  Fração molar
- $c_{\rm p}$  | Capacidade calorífica à pressão constante [J mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>]
- m | Subscrito para mistura

#### • Densidade

Líquidos - Lei de Amagat (adaptada para líquidos por TAYLOR e KOOIJMAN (2006))

$$\frac{1}{\rho_m} = \sum_i \frac{x_i}{\rho_i} \tag{6.59}$$

Gases - Lei dos gases ideais

$$\rho_{\rm m} = \frac{P}{RT} \tag{6.60}$$

Nomenclatura:

- x | Fração molar
- $\rho$  | Densidade [mol m<sup>-3</sup>]
- P | Pressão [Pa]
- T | Temperatura [K]
- R Constante universal dos gases [J mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>]
- m Subscrito para mistura

• Condutividade térmica (TAYLOR; KOOIJMAN, 2006)

$$\lambda_{\rm m} = \sum_{i} x_i \lambda_i \tag{6.61}$$

Nomenclatura:

- $x \mid$  Fração molar
- $\lambda$  | Condutividade térmica [W m<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>]

m Subscrito para mistura

• Pressão de saturação

$$\ln P^{\rm sat} = a + \frac{b}{T} \tag{6.62}$$

Nomenclatura:

 $P^{\rm sat} \mid$  Pressão de saturação [Pa]

a,  $b \mid$  Constantes do componente

T | Temperatura [K]

## 6.3 Estratégias de solução numérica

### 6.3.1 Solução dos fluxogramas de processo

Visando otimizar a solução do fluxograma em estado estacionário, foi usada a estratégia sequencial com o método de Wegstein para convergência das variáveis de abertura (*tear*), dessa maneira, como será apresentado mais adiante, foi possível implementar diferentes estratégias de solução numérica para cada equipamento.

A solução numérica do fluxograma em estado transiente foi baseada na estratégia global, na qual todas as equações são resolvidas simultaneamente (DIMIAN, 2003). Nessa estratégia, cada equipamento do fluxograma é responsável por obter do *solver* suas respectivas variáveis de estado, capturar as correntes de entrada e gerar as derivadas de suas variáveis de estado, assim como as correntes de saída para o equipamento seguinte.

Neste trabalho, para reduzir a complexidade dos problemas, as vazões são fixadas pelos balanços de massa e independem das pressões, que também são fixadas nos equipamentos. Como também é suposto que nenhum dos equipamentos apresenta acúmulo, em cada passo do integrador, quando ocorrem reciclos, é necessário realizar um procedimento de iterativo com abertura de correntes para calcular as vazões das correntes que fazem parte do reciclo. Para otimizar a execução, os equipamentos são executados na ordem proposta pela ordem de precedência utilizada no estado estacionário. A Figura 6.13 ilustra o esquema de execução processo em estado estacionário e a Figura 6.14, em estado transiente.



Figura 6.13: Esquema do funcionamento do programa desenvolvido para executar o fluxograma em estado estacionário.



Figura 6.14: Esquema do funcionamento do programa desenvolvido para executar o fluxograma em estado transiente.

## 6.3.2 Solução numérica dos modelos

No estado estacionário, em função da estratégia sequencial, o sistema de equações de cada equipamento é resolvido de forma individual, simplifi-

cando a solução do fluxograma como um todo. Neste trabalho, os tipos de sistemas de equações dos modelos dos equipamentos são Equações Diferenciais Parciais (EDP), Equações Diferenciais Ordinárias (EDO), Equações Não-Lineares (ENL) e Equações Lineares (EL).

Para solução dos modelos compostos por EDPs foi utilizada discretização por diferenças finitas, de modo a transformá-las em EDOs (SI-LEBI; SCHIESSER, 1992). A discretização foi feita conforme mostrada nas Equações 6.63 e 6.64, que são discretizações para frente e para trás de primeira ordem, respectivamente.

Discretização para frente

$$\frac{df(x_i)}{dx} = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{\Delta x}$$
(6.63)

Discretização para trás

$$\frac{\mathrm{d}f(x_i)}{\mathrm{d}x} = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{\Delta x} \tag{6.64}$$

No estado estacionário, os modelos do reator, coluna de destilação e misturador são ENLs e são resolvidos por meio do comando *fsolve* do Matlab. O algoritmo padrão utilizado por esse comando é um método modificado de Powell (MATHWORKS, 2013) do tipo *dogleg*, que é baseado em região de confiança, que, em geral, apresenta robustez em sua execução, encontrando o mínimo desejado mesmo quando a estimativa inicial não é boa (PRESS *et al.*, 2007). O trocador instantâneo, quando especificados o coeficiente global e a área, também resulta em uma ENL, mas este foi resolvido pelo método da seção áurea, uma modificação do método da bisseção, implementado pelo comando *fminbnd*.

Para solucionar as ELs (trocador bitubular e casco e tubo) foi utilizado o método da eliminação de Gauss. Finalmente, o *flash* adiabático foi resolvido analiticamente e por isso não foi necessária utilização de métodos numéricos.

No estado transiente foi utilizado o método de integração numérica implícita para EDOs com rigidez implementado por meio do comando *ode15s*.

Este método é adequado uma vez que a presença de perturbações e o acoplamento das equações diferenciais torna o sistema rígido, dificultando a integração numérica por algoritmos como o de Runge-Kutta. O algoritmo é uma variação das BDFs (*Backward Differentiation Formulas*) e também é usado para resolver equações algébrico-diferenciais (SHAMPINE *et al.*, 1999).

## 6.4 Ordem de precedência

Na abordagem sequencial cada unidade de um fluxograma é calculada sequencialmente a partir de suas especificações e correntes de entrada. Uma questão que surge nessa abordagem é a ordem de precedência, ou seja, a ordem na qual as unidades serão executadas. Na ausência de reciclos, as unidades podem ser calculadas de forma serial, uma após a outra, iniciando pela que possui apenas correntes de alimentação conhecidas. Ao menos uma unidade deste tipo deve existir, caso contrário, existiria um reciclo (CROWE *et al.*, 1971).

Processos podem ser compostos simultaneamente por partes seriais e partes com reciclo, o que dificulta a determinação da procedência de cálculo. Dentre os algoritmos disponíveis na literatura, destaca-se o algoritmo de Sargent e Westerberg (DUFF; REID, 1978), que tem fundamentação na teoria dos grafos e é utilizado nesta área para identificação de componentes fortes (ver Capítulo 4). Como reciclos são componentes fortes, o algoritmo trata cada reciclo como se fosse uma única unidade e determina a ordem de precedência do fluxograma modificado, como mostrado na Figura 6.15.

O algoritmo de Sargent e Westerberg está ilustrado no fluxograma da Figura 6.16. Um exemplo do uso deste algoritmo na determinação da ordem de cálculo e particionamento de um fluxograma de um processo químico pode ser encontrado em Biegler *et al.* (1999).

Entretanto, ainda falta determinar a ordem de precedência das unidades que formam o reciclo. Isso pode ser feito "quebrando", ou abrindo, o reciclo e transformando-o em um processo serial, onde a corrente "quebrada", chamada de corrente de abertura, é calculada executando-se a sequência do reciclo de forma iterada até sua convergência.



Figura 6.15: Determinação da ordem de precedência.



Figura 6.16: Fluxograma do algoritmo de Sargent e Westerberg.

Para determinação das correntes de abertura, foi usado neste trabalho o algoritmo *ciclor* (PERLINGEIRO, 2005). Com a transformação dos reciclos em processos seriais, a ordem final de execução pode ser determinada como mostra a Figura 6.17. O algoritmo para determinação das correntes de abertura está ilustrado no fluxograma da Figura 6.18.



Figura 6.17: Abertura de uma corrente de reciclo.



Figura 6.18: Fluxograma do algoritmo *ciclor*.

## 6.5 Sintaxe e comandos

A utilização da ferramenta desenvolvida é baseada em uma sintaxe que se aproveita da linguagem utilizada no Matlab e seus diversos tipos de variáveis, como células e estruturas. A quantidade mínima de informação necessária para executar a simulação de um fluxograma é resumida em cinco variáveis: *incidence*, que contém a matriz de incidência; *streams*, que contém informações das correntes; *units*, que contém informações dos equipamentos; *components*, que contém informações dos componentes e *order* que é a ordem de precedência. Essas variáveis podem ser declaradas em um *script* do Matlab ou diretamente na linha de comando.

A vantagem de estruturar o programa baseado nas cinco variáveis que descrevem o processo é a flexibilidade de lidar com a informação, permitindo a criação de comandos que automatizam tarefas e *scripts* que utilizam estruturas de repetição e condicionais (*if, for, while,...*), além de todos os comandos disponíveis no Matlab. A Tabela 6.3 exemplifica alguns comandos desenvolvidos para a ferramenta.

A listagem no final do capítulo é um exemplo da "linguagem" usada na ferramenta. Neste exemplo são simuladas duas correntes que trocam calor entre si através de um trocador casco e tubo e um trocador de utilidade. Também foi introduzida uma perturbação na temperatura da corrente de entrada de uma das correntes de 50 °C para 55 °C no instante 500 s. Essa perturbação será visível apenas quando a simulação for executada no estado transiente, com o comando *dynamics*. Dado que nessa listagem a variável *order* não foi especificada, a ferramenta detecta sua ausência e automaticamente calcula a ordem de precedência.

Tabela 6.3: Lista dos principais comandos utilizados na ferramenta.

Comando	Ação
steady	Resolve o fluxograma para o estado estacionário
dynamics	Resolve o fluxograma para o estado transiente
tune	Efetua a sintonia dos controladores PI das unida-
	des
refine	Refina a solução para o intervalo e passo de tempo
	estipulado na variável intTime
$check\_mass\_balance$	Verifica o balanço de massa global e das unidades
check_energy_balance	Verifica o balanço de energia global e das unidades
delunits	Elimina uma unidade, mas mantém as suas cor-
	rentes de entrada e saída
indexcondition	Calcula o índice de controlabilidade baseado no
	número de condicionamento
indexfuzzy	Calcula o índice de controlabilidade baseado na
	controlabilidade estrutural
indexenergy	Calcula o índice de controlabilidade baseado no
	controle de mínima energia
hx2utility	Substitui um trocador de calor entre correntes por
	dois trocadores de utilidade
silence	Suprime a exibição de mensagens e avisos do pro-
	grama
dyn_events	Executa pertubações/modificações no fluxograma
	durante a execução no estado transiente

```
% Matriz de incidência
incidence = [1 0; -1 1; 0 -1; 1 0; -1 0];
% Inicialização das correntes
for i = 1:5
   streams(i).tag = ['S' num2str(i)];
   streams(i).label = ['S' num2str(i)];
end
% Corrente quente
streams(1).T = 50 + 273.15; % Temperatura
streams(1).P = 1.013e5; % Pressão
streams(1).x = 1;
                            % Composição
streams(1).F = 10;
                            % Vazão molar
% Corrente fria
streams(4).T = 5 + 273.15;
streams(4).P = 1.013e5;
streams(4).x = 0;
streams(4).F = 10;
% Trocador casco e tubo
units(1).type = 'hxst';
                         % Indica qual o tipo de unidade
units(1).tag = 'E1';
                         % Identificação utilizada pelo programa
units(1).label = 'casco_tubo'; % 'Apelido' da unidade
units(1).spec.n = 20;
                        % Número de pontos de discretização
units(1).spec.A = 22.6; % Área do trocador
% Trocador de utilidade
units(2).type = 'utility';
units(2).tag = 'E2';
units(2).label = 'utilidade';
units(2).spec.Q = -2.50E4; % Carga térmica do trocador
% Propriedades
```

```
components(1).MW = 80;
                              % Massa molar
components(1).VPA = 22.4925;
                              % Const. A da eq. da pressão de sat.
components(1).VPB = -3643.08; % Const. B da eq. da pressão de sat.
components(1).CPL = 220.7;
                              % Cp da fase líquida
components(1).CPG = 161.9;
                              % Cp da fase gasosa
components(1).DS = 6955;
                              % Densidade da fase líquida
components(1).VIL = 2.394E-4; % Viscosidade da fase líquida
components(1).VIG = 7.544E-6; % Viscosidade da fase gasosa
components(1).DHV = 1.8E4; % Entalpia de vaporização à 273,15K
components(1).TCG = 0.0185;
                              % Condut. térmica da fase gasosa
components(1).TCL = 0.1019;
                              % Condut. térmica da fase líquida
components(2).MW = 80;
components(2).VPA = 21.7415;
components(2).VPB = -3182.28;
components(2).CPL = 191.2;
components(2).CPG = 136.3;
components(2).DS = 7659;
components(2).VIL = 1.764E-4;
components(2).VIG = 8.053E-6;
components(2).DHV = 1E4;
components(2).TCG = 0.0968;
components(2).TCL = 0.0204;
% Introduz uma perturbação na temperatura da corrente de entrada
dyn_events = {'if t>500, streams(1).T = 55 + 273.15; end'};
% Resolve o fluxograma em estado estacionário
steady
% Sintoniza os controladores dos trocadores
tune
intTime = 0:0.1:1000; % Tempo de integração
dynamics % Resolve o fluxograma em estado transiente
```

O capítulo a seguir mostra a aplicação da ferramenta desenvolvida em um estudo de caso para avaliação da controlabilidade de diversas topologias de redes e o impacto da ausência e presença de outros equipamentos de processo na simulação, tanto em estado estacionário como em estado transiente.

# capítulo 7

## Estudo de caso: estado estacionário

## 7.1 Problema proposto

Um processo deve produzir um produto B com uma taxa de 180 kmol/h com pureza de no mínimo 95 % a partir da reação exotérmica apresentada na Equação 7.1. O reagente A está disponível a uma taxa de 360 kmol/h com temperatura de 20 °C. A cinética da reação é dada na Equação 7.2.

$$A \to B \ (\Delta H_r = -2 \times 10^4 \,\text{J/mol})$$

$$(7.1)$$

$$r = -800 \exp\left(-\frac{15000}{RT}\right) \cdot x \tag{7.2}$$

onde, r é a taxa de reação [mol m<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>], R é a constante universal dos gases [J mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>], T é a temperatura [K] e x é a fração molar do reagente.

O reator opera adiabaticamente na fase líquida com temperatura da corrente de entrada de 90 °C e a conversão deve ser de no mínimo 50 %. O produto deve ser separado em uma coluna de destilação, sendo retirado no topo e levado para armazenamento com temperatura final de 20 °C.

## 7.2 Componentes

Neste estudo de caso foram considerados dois componentes fictícios (A e B) cujas propriedades estão apresentadas na Tabela 7.1.

Propriedade	Unidade	А	В
Massa molecular	-	80	80
Capacidade calorífica (líquido)	$J/(mol \cdot K)$	220,7	191,2
Capacidade calorífica (gás)	$J/(mol \cdot K)$	161,9	136,3
Viscosidade (líquido)	Pa·s	$2,394 \cdot 10^{-4}$	$1,764 \cdot 10^{-4}$
Viscosidade (gás)	Pa·s	$7,544 \cdot 10^{-6}$	$8,053 \cdot 10^{-6}$
Condutividade térmica (líquido)	$W/(m^2K)$	0,1019	0,0968
Condutividade térmica (gás)	$W/(m^2K)$	0,0185	0,0204
Entalpia de vaporização à $273,15\mathrm{K}$	J/mol	$1,8.10^{4}$	$1 \cdot 10^{4}$
Densidade (líquido)	$ m mol/m^3$	6955	7659

Tabela 7.1: Tabela de propriedades dos componentes.

A pressão de saturação (Figura 7.1) foi descrita através da relação apresentada na Equação 6.62 e os parâmetros para cada componente são apresentados na Tabela 7.2.



Figura 7.1: Pressão de vapor dos componentes A e B.

Parâmetro	А	В
a	$22,\!4925$	21,7415
b	-3643,08	-3182,28

Tabela 7.2: Parâmetros ajustados para a equação da pressão de saturação.

## 7.3 Dimensionamento do processo

Dadas as condições de operação do reator, o volume foi calculado como sendo de  $10 \text{ m}^3$  e a temperatura de operação de aproximadamente 138,5 °C. Para garantir o meio reacional sempre em fase líquida a pressão do reator foi fixada em  $10,13 \times 10^6$  Pa.

Para o efluente do reator com composição de 0,5, a coluna foi dimensionada com 40 estágios, razão de refluxo de 1,76 e carga térmica no refervedor de 1915,4 kW. A temperatura de entrada da coluna foi fixada em  $45 \,^{\circ}$ C, para fins de simulação, visto que esta temperatura é intermediária entre as temperaturas de orvalho e bolha do efluente do reator, permitindo observar melhor os efeitos da variação da temperatura na coluna. A pressão da coluna é atmosférica, visto que altas pressões dificultam a separação de A e B.

Dimensionados o reator e a coluna, o passo seguinte é a síntese das redes de trocadores de calor. As Figuras 7.2 e 7.3 ilustram respectivamente o fluxograma do processo e o diagrama *grid* sem integração, ou seja, utilizando apenas utilidade, chamado aqui de esquema A.

Os esquemas B, C e D são integrações energéticas parciais (por aproveitarem menos energia que a rede projetada pelo método pinch) e estão ilustradas nas Figuras 7.4 até 7.9, com os respectivos fluxogramas de processo e os diagramas grid.

Finalmente, o último esquema de integração, esquema E, foi projetado pelo método *pinch* e se trata de um problema *threshold*. O  $\Delta T_{\min}$  considerado foi de 20 °C e é possível observar nas Figuras 7.10 e 7.11 que não existe consumo de utilidade quente. As temperaturas do ponto *pinch* são 138,5 °C e 118,5 °C.

O Apêndice B apresenta mais detalhes do projeto e da geometria dos equipamentos utilizados nos esquemas.



Figura 7.2: Fluxograma do esquema de integração A.



Figura 7.3: Diagrama grid do esquema A.



Figura 7.4: Fluxograma do esquema de integração B.



Figura 7.5: Diagrama grid do esquema B.



Figura 7.6: Fluxograma do esquema de integração C.



Figura 7.7: Diagrama grid do esquema C.



Figura 7.8: Fluxograma do esquema de integração D.



Figura 7.9: Diagrama grid do esquema D.



Figura 7.10: Fluxograma do esquema de integração E.



Figura 7.11: Diagrama grid do esquema E.
#### 7.4 Resultados

As primeiras análises da controlabilidade das topologias propostas nos esquemas de A até E e o impacto da simulação com e sem os equipamentos pode ser observadas nas Figuras 7.12 e 7.13, onde estão resumidos os índices baseados em número de condicionamento e controlabilidade estrutural, respectivamente. Os resultados da Figura 7.13 foram calculados a partir da classificação proposta pela Tabela 7.3, gerada a partir de observações feitas acerca do comportamento do processo por meio do esquema A.



Figura 7.12: Índice baseado em número de condicionamento dos esquemas, com destaque para o consumo total de utilidades.

Observa-se que a controlabilidade com os equipamentos de processo é, em geral, pior que a controlabilidade medida sem os equipamentos, piorando, segundo ambos os índices, à medida que a integração energética aumenta. Isto era esperado, já que o aumento da recuperação de energia necessariamente implica no uso de mais trocadores entre correntes de processo, que naturalmente pioram a controlabilidade da rede.



Figura 7.13: Índice baseado em controlabilidade estrutural dos esquemas, com destaque para o consumo total de utilidades.

Tabela 7.3: Classificação das correntes de acordo com o índice de controlabilidade estrutural.

Corrente	Nível de controle	Nível de perturbação
H1	Moderado	Intensa
H2	Baixo	Moderada
C1	Alto	Moderada
C2	Alto	Moderada

Além do fator empírico que nos indica que o uso de trocadores entre correntes piora a controlabilidade do processo, é possível explicar matematicamente o comportamento dos índices. No caso do índice baseado em número de condicionamento, isso é consequência do aumento do número de elementos não-nulos fora da diagonal principal das matrizes de ganhos estáticos, o que pode provocar o aumento do número de condicionamento. Quanto mais integrado o processo, mais "conexões" se formam entre os

#### 7.4. Resultados

equipamentos e maior é a chance de outras correntes, além das controladas, sofrerem mudanças em função da mudança da carga térmica de um trocador, aumentando assim, a quantidade de elementos não-nulos fora da diagonal principal.

O índice baseado em controlabilidade estrutural funciona, de uma certa maneira, de forma semelhante ao índice baseado em número de condicionamento. Definidos os valores das intensidades das perturbações e nível de controle das correntes, a única diferença no cálculo do índice entre duas redes de trocadores é a respectiva matriz de padrões de propagação. Assim, quanto maior mais integrado o processo, maior a probabilidade de uma perturbação sair de uma corrente e atingir diretamente outra, aumentando assim as chances de ocorrem padrões tipo 1, que possuem o maior peso na matriz de padrões de propagações e por isso penalizam mais o índice final.

Apesar de ambos os índices serem consequência do quanto uma perturbação pode se propagar, a diferença fundamental entre os dois índices reside na forma como essa propagação é avaliada: no índice baseado em número de condicionamento o ganho entre um trocador e uma corrente pode mudar em função do tipo do equipamento, carga térmica e outros fatores que possam afetar o desempenho do trocador, enquanto o índice baseado em controlabilidade estrutural o nível de propagação é função apenas do número de trocadores entre as correntes.

A diferença na natureza dos índices se tornou bastante evidente ao longo da execução deste trabalho, pois em diversos momentos foram necessárias modificações e reprojetos dos trocadores, que sempre afetavam o índice de condicionamento, enquanto o índice de controlabilidade estrutural sempre se manteve inalterado. Apesar deste último ser mais fácil de ser computado, a falta de sensibilidade pode ser um problema caso o engenheiro queira avaliar o impacto de um trocador na controlabilidade do processo.

Quanto aos resultados apresentados nas Figuras 7.12, é bastante evidente a diferença entre o índice do esquema E ao fazer a simulação com e sem os equipamentos de processo. Enquanto os resultados sem os equipamentos apontam uma diferença de aproximadamente uma unidade entre o índice do esquema E e os índices dos esquemas integrados B, C e D, com os equipamentos essa diferença foi 7. Apesar de não ficar muito claro se essa diferença é de fato significativa, pois o índice baseado em número de condicionamento não possui limite superior, esses resultados já são evidências de que a simulação com os equipamentos pode apresentar resultados diferentes da simulação sem os equipamentos de processo.

O impacto desses resultados vai além de um simples interesse acadêmico. Em um determinado processo, a diferença entre os resultados pode ser ainda maior que a observada no esquema E e simulando apenas a rede de trocadores, um engenheiro poderia ser levado a acreditar que diferença no índice é pequena para as outras topologias e a escolha econômica faria sentido, o que na realidade não se comprova quando a simulação é feita com o fluxograma completo. Assim, quanto mais integrado o processo, mais atenção deve ser dada para a ocorrência de possíveis discrepâncias na medição da controlabilidade da rede com e sem os equipamentos de processo com índice baseado em número de condicionamento.

Outro dado interessante é o resultado referente ao esquema A. Sem os equipamentos, o índice é 1, o melhor índice de controlabilidade possível, que ocorre quando os trocadores podem atuar sem causar interferências em outras correntes controladas. Com os equipamentos, por outro lado, o índice não é muito diferente em relação aos outros esquemas, mostrando que mesmo integrando energeticamente o processo, é possível, até certo ponto, manter os mesmos níveis de controlabilidade.

Os resultados da Figura 7.13 mostram que o índice baseado em controlabilidade estrutural concorda parcialmente todos os resultados do índice baseado em número de condicionamento. O esquema A, por exemplo, apresenta um índice 30% pior quando a controlabilidade é avaliado com os equipamentos. Além disso, apesar de não apresentar uma diferença tão grande o esquema E foi novamente apontado como a topologia com pior controlabilidade entre as topologias avaliadas.

Ao contrário do resultado da Figura 7.12, o esquema E não mostrou discrepâncias tão grandes ao simular o fluxograma com e sem os equipamentos de processo, o que levanta a dúvida sobre a confiabilidade das metodologias, pois não é possível de fato saber se o índice baseado em número de condicionamento é sensível demais ou o índice baseado em controlabilidade estrutural não é sensível o suficiente para identificar redes realmente difíceis de controlar.

Finalmente, outro ponto que pode ser relevante sobre esse índice é a

#### 7.4. Resultados

forma como ele é normalizado. Na Equação 3.7, o termo

$$\sum_{i=1}^{N} d_i \sum_{j=1}^{N} c_j$$

equivale ao valor máximo que pode ocorrer no índice, correspondendo ao caso onde todas as correntes do processo estão diretamente conectadas. Isso não é possível na prática porque duas correntes quentes, ou duas frias, não podem (ou devem) trocar calor entre si, de modo que o valor máximo do índice não corresponde à realidade. Isso reflete em índices mais próximos de 1, já que o termo é maior que o valor máximo real, e leva a uma falsa sensação de que as redes estão mais próximas da melhor controlabilidade possível. Infelizmente a solução para o pior índice só pode ser encontrada por meio de uma avaliação combinatorial, que leva tempo e tira o propósito central do índice, que é sua simplicidade de cálculo.

A partir destes resultados, pode-se comentar a justificativa 2 apresentada no Capítulo 5. Analisando a justificativa como proposta, de fato uma rede perfeitamente controlada não teria nenhuma interação com o processo e nenhum efeito de *feedback* para a rede. O problema dessa justificativa é que nem todo trocador é controlado em um processo, visto os custos da instalação de tubulações para desvios, válvulas de controle, sintonia dos controladores, entre outros. Assim, sem o controle de um ou mais trocadores, a rede ficaria suscetível às perturbações oriundas do processo, o que seria agravado caso o processo seja altamente integrada, como visto nos resultados apresentados. Além disso, a própria existência de um controle perfeito não é factível, o que torna este argumento fraco para justificar a simulação apenas dos trocadores de um processo integrado.

# CAPÍTULO 8

## Estudo de caso: estado transiente

#### 8.1 Malha aberta

Para efetuar as análises em malha aberta, as diferentes topologias foram submetidas a distúrbios na temperatura da corrente de alimentação conforme a Figura 8.1 e simuladas por 20 000 s ou aproximadamente 333 min. Essa perturbação foi escolhida em função do seu potencial de perturbar todas as correntes e equipamentos do processo.

As respostas das correntes à perturbação estão ilustradas nas Figuras 8.2 a 8.6. As correntes podem ser identificadas nas ilustrações dos correspondentes esquemas no capítulo anterior, mas de forma resumida, a corrente C1 é a corrente que entra no reator, H1 é a corrente que sai do reator e entra na coluna, C2 é a corrente do produto final no topo da coluna e H2 é a corrente de fundo da coluna.



Figura 8.1: Perturbação na temperatura da alimentação.



Figura 8.2: Efeito na temperatura das correntes do esquema A.



Figura 8.3: Efeito na temperatura das correntes do esquema B.



Figura 8.4: Efeito na temperatura das correntes do esquema C.



Figura 8.5: Efeito na temperatura das correntes do esquema D.



Figura 8.6: Efeito na temperatura das correntes do esquema E.

O resultado mais importante a ser observado é a rejeição das perturbações em função da inércia do processo. Trocadores que possuem maior volume tendem a dissipar naturalmente as perturbações, especialmente os trocadores de utilidades, que estão conectados a apenas uma corrente de processo.

A corrente H1, por exemplo, revela o efeito dessa inércia. A topologia com a maior variação na temperatura dessa corrente é o esquema E, com até 5,5 °C de variação. A segunda maior variação é do esquema B, com 3,7 °C. Essas duas topologias têm em comum reciclos de grandes quantidades de energia e pequenos trocadores de utilidades, de modo que grandes variações de temperatura têm dificuldade de se dispersar nos equipamentos e passam com facilidade para a coluna de destilação. Os outros esquemas, que possuem um trocador de utilidade antes da coluna, reduzem a passagem de perturbações e a maior variação observada foi de 1,1 °C.

Esse efeito também pode ser observado na corrente C1. Nos esquemas A e C, que utilizam apenas utilidade para aquecer a entrada do reator, o degrau de 10 °C na alimentação foi reduzido a apenas 2 °C e o formato da perturbação se manteve intacto. Nos esquemas B e E, os reciclos de energia promoveram uma retropropagação das perturbações e o efeito final da temperatura é um somatório das dinâmicas dos trocadores e do reator. O mesmo efeito, porém, não aconteceu no esquema D, visto que antes do reator existe um trocador de utilidade com área e carga térmicas maiores que o trocador E2, que promove o reciclo de energia, e por isso a perturbação é absorvida e a dinâmica da temperatura de C1 observada na Figura 8.5 se assemelha à dinâmica dos esquemas A e C.

Huang e Fan (1992) levaram em consideração esse efeito ao desenvolverem o índice baseado em controlabilidade estrutural, ao atribuir pesos menores (que aproximam o índice da melhor controlabilidade) às perturbações que passam por mais trocadores para sair de uma corrente até outra. Entretanto, os resultados em malha aberta mostraram que o volume do trocador pode ser um fator tão importante quanto o número de trocadores no estudo da dissipação das perturbações.

O último detalhe a ser observado nos resultados em malha aberta é a diferença no pico de temperatura na corrente H2 entre os esquemas B e E. Apesar da variação de temperatura na entrada da coluna ser parecida, a corrente H2 no esquema B apresentou um pico de 4,4 °C, enquanto no

esquema E a variação foi de 9,1 °C. Além do efeito da retropropagação da perturbação, essa diferença se deve principalmente à variação na composição do topo da coluna, ocasionada pela maior diferença de temperaturas que atingiram o reator e provocaram mudanças na conversão do reagente. Consequentemente, a composição do topo para o esquema B apresentou uma queda para 80% em B (que possui menor  $c_p$ ) e para o esquema E a queda foi para 60%. Obviamente, tal efeito não seria observado em simulações cuja rede de trocadores é simulada de forma desacoplada do restante do processo.

#### 8.2 Malha fechada

Ao contrário do procedimento utilizado em malha aberta, não foi possível efetuar perturbações na temperatura da corrente de entrada em função da atuação dos controladores que rapidamente levavam as temperaturas para o *set-point*. Dessa maneira, perturbações na temperatura oriundas da corrente de entrada eram eliminadas antes de se propagarem pela rede.

Para contornar este problema, foi efetuada uma perturbação na composição da corrente de alimentação conforme a Figura 8.7. Este tipo de perturbação simultaneamente altera os  $c_p$ s das correntes, temperatura do reator e temperaturas da coluna de destilação, permitindo observar a atuação de todos os controladores simultaneamente. O primeiro estudo feito com o processo em malha fechada foi a comparação do índice de controle de mínima energia e o erro quadrático ISE entre os esquemas. Os resultados estão nas Figuras 8.8 e 8.9.



Figura 8.7: Perturbação na composição da alimentação.



Figura 8.8: Índice baseado no controle de mínima energia das topologias.



Figura 8.9: Integral do erro quadrático das topologias (escala logarítmica).

Com os equipamentos, verifica-se que o índice tem uma tendência em aumentar do esquema A até o esquema E, onde este último apresentou o maior valor. A tendência da Figura 8.8 se assemelha aos resultados observados na Figura 7.12, referentes ao índice baseado em número de condicionamento, reforçando a ideia de que a controlabilidade dos esquemas A até D não são tão diferentes entre si. A Figura 8.9 também mostra uma tendência semelhante, mas muito mais acentuada para o esquema E, sendo necessário inclusive normalização logarítmica para poder visualizar numa escala adequada os valores.

A simulação sem os equipamentos mostrou um resultado muito diferente. Visto que não existem conexões entre as correntes, a informação sobre a perturbação rapidamente se perde e apenas o primeiro trocador ou o segundo atuam para dissipar os efeitos remanescentes da mudança do  $c_p$ da corrente de alimentação. Isso refletiu no índice baseado em controle de mínima energia e no ISE, que apresentaram valores visivelmente menores.

As Figuras 8.10 a 8.14 mostram as variáveis manipuladas dos trocadores com o equipamentos. Os gráficos das temperaturas não foram gerados por-

#### 8.2. Malha fechada

que as variações das temperaturas são muito pequenas e não acrescentam informação às discussões. A única exceção diz respeito às temperaturas correspondentes ao esquema E, mas mesmo estas foram corrigidas rapidamente depois que a perturbação na composição acabou.

Observando a Figura 8.14, pode-se explicar o resultado do esquema E. Ele apresentou um valor elevado para o ISE em função do trocador de utilidade fria E3, pois a variável manipulada deste trocador saturou por aproximadamente 56 min, devido a uma queda na temperatura da corrente oriunda do trocador E2. Como esta foi a única topologia que apresentou saturação na variável manipulada e consequentemente não conseguiu atingir as temperaturas finais adequadas, há uma grande chance que esta topologia não consiga sair do estado estacionário para o qual ela foi projetada para um novo, caracterizando assim uma deficiência na controlabilidade.



Figura 8.10: Atuação das variáveis manipuladas do esquema A.



Figura 8.11: Atuação das variáveis manipuladas do esquema B.



Figura 8.12: Atuação das variáveis manipuladas do esquema C.



Figura 8.13: Atuação das variáveis manipuladas do esquema D.



Figura 8.14: Atuação das variáveis manipuladas do esquema E.

Quanto à medição da controlabilidade utilizando o índice de controle de mínima energia, é interessante que a análise seja feita sempre com um índice de performance como o ISE, pois como observado no esquema E, alguns trocadores podem saturar e, ao contrário deste exemplo, um trocador que esteja operando muito próximo do limite de operação, poderia saturar sem se deslocar muito em relação ao valor do estado estacionário. Nesses casos, o índice pode apresentar baixos valores, mas o ISE denunciaria a dificuldade de controle.

# 8.3 Influência da dinâmica dos equipamentos de processo

Para verificar a justificativa 1, o *hold-up* da coluna de destilação e o volume do reator foram multiplicados por um fator  $\alpha$  e os efeitos no índice e no ISE foram comparados com os valores da simulação sem os equipamentos. As Figuras 8.15 a 8.19 mostram os resultados.



Figura 8.15: Efeito do volume nos equipamentos de processos para o esquema A.



Figura 8.16: Efeito do volume nos equipamentos de processos para o esquema B.



Figura 8.17: Efeito do volume nos equipamentos de processos para o esquema C.



Figura 8.18: Efeito do volume nos equipamentos de processos para o esquema D.



Figura 8.19: Efeito do volume nos equipamentos de processos para o esquema E.

Está bastante claro com os resultados apresentados, que a diferença entre as velocidades dos equipamentos de processo e os trocadores contribui para a controlabilidade do processo. No limite quando  $\alpha \to \infty$ , os valores do índices e do ISE tendem para o valores quando a simulação é feita sem os equipamentos de processo. Assim, é possível afirmar que quando a dinâmica dos trocadores é suficientemente mais rápida que a dinâmica dos equipamentos, a simulação da rede de trocadores pode ser feita desacoplada do restante do processo, comprovando, portanto, a justificativa 1.

Esse fenômeno possui explicação simples. Isso acontece em função da constante de tempo dos equipamentos que aumenta com o aumento do *hold-up* do reator e da coluna, permitindo os trocadores corrigirem as temperaturas sem interferir demasiadamente no funcionamento dos outros equipamentos de processo.

Apesar de comprovada a justificava 1, com os resultados aqui obtidos, não é possível estabelecer um ponto divisor claro a partir do qual há significativa interferência na medida da controlabilidade oriundas dos efeitos dinâmicos dos equipamentos de processo. Diferentes processos apresentarão respostas diferentes em função da topologia da rede e da dinâmica dos equipamentos que o constituem e, por isso, caberá ao engenheiro responsável decidir, ou pelo menos avaliar, se a dinâmica dos equipamentos contribui negativamente para a avaliação da dinâmica e controlabilidade do processo.

#### 8.4 Avaliação do atraso de transporte

O último efeito que se supõe afetar a controlabilidade de um processo integrado é a existência de atrasos de transporte entre os trocadores de calor. Da literatura, sabe-se que o atraso de transporte pode afetar negativamente o controle em malha fechada, mas não há informações sobre como isso pode afetar o controle dos trocadores de um processo integrado energeticamente.

Em todas as simulações foi mantida a razão de 1 ponto de discretização/metro de tubulação, pois esse valor é suficiente para manter o formato da perturbação praticamente intacto na saída da tubulação. O comprimento das tubulações foi variado de 10 m até 1850 m, correspondendo a atrasos no intervalo de 7 s até aproximadamente 20 min, considerando a velocidade do fluido de 1,5 m/s. A Figura 8.20 a posição das tubulações e as Figuras 8.22 a 8.25 ilustram os resultados dos esquemas.



Figura 8.20: Posição das tubulações nos esquemas.

Inicialmente foi proposto colocar tubulações separando todos os trocadores de calor e avaliar os efeitos referentes ao tamanho das tubulações. Entretanto, limitações em termos de memória RAM impediram aumentar demasiadamente o comprimento das tubulações.

Para evitar o problema com memória, apenas uma tubulação foi posicionada em cada corrente de abertura do processo, pois foi observado que possíveis efeitos na dinâmica só afetariam a dinâmica se houvesse um reciclo de energia. Em processos seriais o único efeito é o atraso da perturbação entre dois trocadores adjacentes, sem afetar a dinâmica ou controlabilidade do processo, como mostrado na Figura 8.21, onde uma tubulação foi posicionada entre o reator e o trocador E2.



Figura 8.21: Efeito do atraso de transporte no esquema A.



Figura 8.22: Efeito do atraso de transporte no esquema B.



Figura 8.23: Efeito do atraso de transporte no esquema C.



Figura 8.24: Efeito do atraso de transporte no esquema D.



Figura 8.25: Efeito do atraso de transporte no esquema E.

Dentre os resultados, os esquemas B, D e E apresentaram um padrão consistente de aumento no índice conforme o comprimento da tubulação aumentava, entretanto, o ISE do esquema D não apresentou a mesma tendência de crescimento como os esquemas B e E. O esquema C, por sua vez, aparenta possuir um máximo para o índice entre 650 m e 850 m, mas o ISE se mostrou praticamente constante para todos os comprimentos de tubulação.

Para tentar compreender melhor o que está acontecendo, as Figuras 8.26 e 8.27 ilustram o perfil das temperaturas das correntes de saída (corrente controlada) e do efluente do reator (corrente quente de entrada do trocador), assim como a atuação da variável manipulada do trocador E1 do esquema B. Nestas figuras estão destacados também os instantes em que as perturbações ocorreram.

Ao reduzir a composição do reagente na corrente de alimentação (C1), o  $c_p$  dessa corrente também foi reduzido e se a outra temperatura de entrada do trocador for mantida constante, a tendência é que a corrente C1 saia com uma temperatura maior. É nesse instante que o atraso de transporte faz a diferença, pois uma concentração mais baixa de reagente modifica a conversão no reator, provocando uma redução na temperatura de saída. Se o atraso for pequeno, essa temperatura mais baixa do reator compensa rapidamente o aumento em função da variação do  $c_p$  no trocador e o controlador não precisa atuar muito para corrigir a temperatura. Se o atraso for grande, o controlador terá de atuar mais intensamente para compensar apenas o efeito da redução do  $c_p$ . O mesmo ocorre quando a composição é trazida novamente para 100%.

Essa explicação é válida apenas para o sistema reator-trocador em um reciclo de energia com reação exotérmica, ou seja, se o sistema possuir topologia de trocadores diferentes, com diferentes dinâmicas nos equipamentos o resultado pode ser variado.

Por fim, deve-se notar a escala muito pequena do primeiro gráfico da Figura 8.26, indicativo de que mesmo o efeito da tubulação sendo perceptível na variável manipulada, o controlador consegue manter a temperatura da corrente controlada próxima do *set-point*.



Figura 8.26: Temperaturas das correntes controlada e de entrada no trocador E1 do esquema B (em preto, ocorrência das perturbações).



Figura 8.27: Variável manipulada do trocador E1 do esquema B.

Visto que os efeitos podem ser diversos, é necessária uma investigação mais aprofundada, com outros processos e diante de outras perturbações para estabelecer uma explicação definitiva para os efeitos provocados pelo atraso de transporte em processos integrados e poder, talvez, antecipar os efeitos de forma mais sistemática.

# Capítulo 9

### Conclusões

Processos químicos são, em geral, sistemas com dinâmica não linear que estão sujeitos a consideráveis incertezas e variações durante seu projeto e operação. Eles são normalmente projetados para operar em torno de um estado estacionário determinado através de critérios econômicos, que eventualmente pode variar em função do processamento de diferentes matériasprimas ou produtos com especificações diferentes. Assim, conhecer as limitações na inferência da controlabilidade de processos integrados é de fundamental importância para evitar problemas como produtos fora de especificação ou consumo desnecessário de energia.

Neste trabalho foi proposta a análise da controlabilidade de um processo com diferentes níveis de integração e a influência de efetuar a simulação com e sem os equipamentos de processo. Para realizar as simulações dos equipamentos (trocadores de calor, reator, coluna, misturador entre outros) foi desenvolvido um pequeno "simulador" em Matlab junto com as adequadas estratégias de resolução dos fluxogramas. Foi observada uma boa flexibilidade na linguagem do "simulador" que permite, entre outras coisas, automatizar diversas análises que em outros simuladores não seria possível.

Foram implementadas três métricas de controlabilidade: índice baseado em número de condicionamento, índice baseado em controlabilidade estrutural e índice baseado em controle de mínima energia. Os dois primeiros são utilizados na simulação estacionária do processo e o último, na simulação dinâmica. O índice baseado em número de condicionamento se mostrou sensível às cargas térmicas dos trocadores, deixando claro que a controlabilidade das redes é função da quantidade de utilidade empregada no processo. O índice baseado em controlabilidade estrutural não possui sensibilidade às cargas térmicas dos trocadores, mas é mais simples de ser calculado. Os resultados obtidos com o índice baseado em controle de mínima energia se mostraram semelhantes aos obtidos com o baseado em número de condicionamento.

De uma forma geral, os índices indicaram que o aumento da integração energética pode prejudicar a controlabilidade, mas em certas situações é possível que algumas topologias de redes de trocadores reduzam a quantidade de utilidade praticamente sem afeta-la. Esses resultados foram apontados pelos índices baseado em número de condicionamento e controle de mínima energia.

No estudo de caso proposto, o esquema E, gerado a partir da análise *pinch* apresentou a pior controlabilidade dentre todas as topologias testadas em todos os índices. Além disso, uma análise dos resultados dinâmicos mostrou que em certas situações, a topologia não era capaz de corrigir algumas perturbações, com o potencial de impedir o processo de ir para um novo estado estacionário, indicando, portanto, uma deficiência séria na controlabilidade.

Provavelmente a melhor topologia seja a do esquema B, pois ela não apresentou grandes problemas na controlabilidade e é a segunda melhor topologia em economia de energia. Porém algumas modificações poderiam ser necessárias na prática, como o acréscimo de um trocador de utilidade antes do reator para fornecer a energia necessária durante a partida do processo e um trocador de utilidade fria com área maior antes da coluna de destilação, visto que durante a partida do processo o trocador 2 não estaria completamente operante.

Nota-se que as modificações propostas no esquema B levando em consideração a partida do processo, removem a integração energética em um instante inicial da partida do processo, para somente com o tempo chegarse efetivamente à topologia do esquema B. Para o engenheiro responsável pelo projeto, talvez seja interessante conhecer a controlabilidade da planta durante essa transição.

Na execução deste trabalho ficou clara que a análise da controlabilidade

com um único índice não fornece informação completa sobre o processo. Cada índice neste trabalho contribuiu independentemente para reforçar ou levantar dúvidas sobre certos aspectos da controlabilidade do estudo de caso. Além da avaliação com os índices, uma análise qualitativa do processo (a forma como ele rejeita perturbações, o comportamento das variáveis manipuladas, entre outras) pode fornecer conhecimento da dinâmica que somente com os índices não seria possível obter. Notou-se ainda que o índice baseado em controle de mínima energia deve ser utilizado em conjunto com um índice de performance do controlador como o ISE, pois em certas ocasiões a falta de controlabilidade fica evidenciada neste último.

Foi possível verificar que a justificativa 2 (simulação sem os equipamentos de processo é justificada se os controladores forem perfeitos) é fraca, pois nem todo trocador é controlado em um processo e sem o controle de um ou mais trocadores, a rede ficaria suscetível às perturbações oriundas do processo, o que seria agravado caso o processo seja altamente integrado, como visto nos resultados apresentados.

Os resultados em malha aberta mostraram que reciclos de energia podem introduzir efeitos de retropropagação de perturbações, ou seja, as perturbações podem sair de um equipamento e voltar para ele se existir um reciclo. Outro resultado importante é que se o trocador possuir um volume grande, as perturbações são parcialmente dissipadas de forma natural e esse efeito é benéfico no controle do equipamento.

Quanto ao atraso de transporte, foi observada forte ligação entre a topologia e dinâmica do processo com os possíveis efeitos na controlabilidade. No estudo de caso, algumas topologias pioraram a controlabilidade com o aumento do atraso de transporte, enquanto outra apresentou um máximo. Portanto, os efeitos dependem do processo em questão e não é possível afirmar com certeza, de forma antecipada, de que modo o atraso de transporte afeta um processo integrado. Estudos mais aprofundados são necessários para estabelecer uma teoria consistente.

A avaliação da velocidade da dinâmica dos equipamentos de processo mostrou que quanto maior for a diferença em relação à dinâmica dos trocadores, menor é a diferença entre simular e avaliar a controlabilidade com e sem os equipamentos de processo, comprovando dessa maneira a justificativa 1. Assim, este trabalho demonstrou a hipótese levantada, que simular a rede de trocadores de calor de um processo integrado energeticamente desprezando equipamentos como reatores, colunas, etc., de fato introduz desvios na medição da controlabilidade, mas esses desvios são minimizados se a dinâmica dos equipamentos for suficientemente lenta em relação à dinâmica dos trocadores de calor.

### **Referências Bibliográficas**

ANCHEYTA, J. Modeling and simulation of catalytic reactors for petroleum refining. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2011.

BIEGLER, L. T.; GROSSMANN, I. E.; WESTERBERG, A. W. *Systematic methods of chemical process design*. Nova Jersey: Prentice-Hall, 1999.

BRANAN, C. R. Rules of thumb for chemical engineers. 3<sup>a</sup>. ed. [S.l.]: GPP, 2002.

BRENDEL, R. J.; DHURJATI, P. S. Design Methodology for Screening Dynamic Characteristics of Candidate Heat-Integrated Flowsheets. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 49, n. 20, p. 9877–9886, 2010.

CANMETENERGY. *Pinch Analysis*: For the efficient use of energy, water and hydrogen. Canadá: Natural Resources Canada, 2003. Disponível em: <a href="http://www.nrcan.gc.ca/sites/www.nrcan.gc.ca/files/canmetenergy-/files/pubs/2009-052\_PM-FAC\_404-DEPLOI\_e.pdf">http://www.nrcan.gc.ca/sites/www.nrcan.gc.ca/files/canmetenergy-/files/pubs/2009-052\_PM-FAC\_404-DEPLOI\_e.pdf</a>>. Acesso em: 15 de julho de 2013.

CHARTRAND, G.; LESNIAK, L. *Graphs and digraphs.* 3<sup>a</sup>. ed. [S.l.]: Chapman and Hall/CRC, 2000.

CHRISTOFIDES, N. *Graph theory*: An algorithmic approach. [S.l.]: Academic Press, 1977.

CROWE, C.; HAMIELEC, A.; HOFFMAN, T.; JOHNSON, A.; WOODS, D. *Chemical plant simulation*: An introduction to computer-aided steady-state process analysis. [S.l.]: Prentice-Hall, 1971.

DEO, N. Graph theory with applications to engineering and computer science. [S.l.]: Prentice-Hall, 1975.

DIMIAN, A. C. Integrated design and simulation of chemical processes. [S.l.]: Elsevier, 2003.

DIMITRIADIS, V. D.; PISTIKOPOULOS, E. N. Flexibility analysis of dynamic systems. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 34, n. 12, p. 4451–4462, 1995.

DRIEDGER, W. C. Controlling shell and tube exchangers. *Hydrocarbon* processing, Gulf, v. 75, n. 3, p. 111–132, 1998.

DUFF, I.; REID, J. An implementation of tarjan's algorithm for the block triangularization of a matrix. *ACM Transactions on Mathematical Software*, v. 4, n. 2, p. 137–147, 1978.

EL-HALWAGI, M. M. Process integration. San Diego: Elsevier, 2006.

EMERSON: Control valve dynamic specification. 1998. Disponível em: <a href="http://www2.emersonprocess.com/siteadmincenter-/PM%20PSS%20Services%20Documents/Consulting%20Services-/valvsp30.pdf">http://www2.emersonprocess.com/siteadmincenter-/PM%20PSS%20Services%20Documents/Consulting%20Services-/valvsp30.pdf</a>>. Acesso em: 10 de novembro de 2013.

FELDER, R.; ROUSSEAU, R. *Elementary principles of chemical processes.* 3<sup>a</sup>. ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2005.

GLEMMESTAD, B. Optimal operation of integrated processes: Studies on heat recovery systems. 149 p. Tese (Doutorado) — Universidade Norueguesa de Ciência e Tecnologia, Porsgrunn, 1997.

HARARY, F.; NORMAN, R. Z.; CARTWRIGHT, D. *Structural models*: An introduction to the theory of directed graphs. Nova Iorque: John Wiley & Sons, 1965.

HENLEY, E. J.; WILLIAMS, R. *Graph theory in modern engineering*. Nova Iorque: Academic Press, 1973.

HEWITT, G. F.; SHIRES, G. L.; BATT, T. R. Process heat transfer. [S.l.]: CRC Press, 1994.

HOFFMAN, J. D. Numerical methods for Engineers and Scientists. 2<sup>a</sup>. ed. [S.l.]: Marcel Dekker, 2001.

HUANG, Y.; FAN, L. Distributed strategy for integration of process design and control. *Computers & Chemical Engineering*, v. 16, n. 5, p. 496–522, 1992.

KEMP, I. C. *Pinch analysis and process integration*: A user guide on process integration for the efficient use of energy. 2<sup>a</sup>. ed. [S.l.]: Elsevier, 2007.

KLAMKA, J. Controllability of dynamical systems. *Matematyka Stosowana*, n. 9, p. 57–75, 2008.

LINNHOFF, B.; HINDMARSH, E. The pinch design method for heat exchanger networks. *Chemical Engineering Science*, v. 38, n. 5, p. 745–763, 1983.

LUYBEN, W. L. Heat-exchanger bypass control. Industrial & Engineering Chemistry Research, v. 50, n. 2, p. 965–973, 2011. ISSN 0888-5885.

MATHWORKS. Help do Matlab para o termo 'fsolve'. [S.l.: s.n.], 2013.

MCCABE, W. L.; SMITH, J. C.; HARRIOTT, P. Unit operations of chemical engineering. 5<sup>a</sup>. ed. [S.l.]: McGraw-Hill, 1993.

MCMILLAN, G. K. Good tuning: A pocket guide. [S.l.]: ISA, 2001.

MUKHERJEE, R. Practical thermal design of shell-and-tube heat exchangers. Nova Iorque: Begell House, 2004.

NOVAZZI, L. F. *Dinâmica e controle de redes de trocadores de calor*. 145 p. Tese (Doutorado) — Unicamp, Campinas, 2007.

OGUNNAIKE, B. A.; RAY, H. H. *Process dynamics, modeling and control.* Nova Iorque: Oxford University Press, 1994.

PERLINGEIRO, C. A. G. *Engenharia de processos*: Análise, simulação, otimização e síntese de processos químicos. São Paulo: Editora Blucher, 2005.

PERRY, R.; GREEN, D.; MALONEY, J. Perry's chemical engeneers' handbook. 7<sup>a</sup>. ed. [S.l.]: McGraw-Hill, 1999.

POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J.; J.P.O'CONNELL. The properties of gases and liquids. 5<sup>a</sup>. ed. [S.l.]: McGraw-Hill, 2001.

PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. *Numerical recipes*: Art of scientific computing. 3<sup>a</sup>. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007.

REGNIER, E. Oil and energy price volatility. *Energy Economics*, n. 29, p. 405–427, 2007.

ROSENBROCK, H. H. State-space and multivariable theory. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1970.

SEBORG, D. E.; MELLICHAMP, D. A.; EDGAR, T. F.; DOYLE, F. J. *Process dynamics and control.* 2<sup>a</sup>. ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2004.

SEFERLIS, P.; GEORGIADIS, M. C. The integration of process design and control. Amsterdã: Elsevier, 2004.

SHAMPINE, L. F.; REICHELT, M. W.; KIERZENKA, J. A. Solving index-1 daes in matlab and simulink. *SIAM Review*, v. 41, n. 3, p. 538–552, 1999.

SHENOY, U. V. *Heat Exchanger Network Synthesis*: Process optimization by energy and resource analysis. [S.l.]: Gulf Publishing, 1995.

SILEBI, C. A.; SCHIESSER, W. E. *Dynamic modeling of transport process systems*. San Diego: Academic Press, 1992.

SINNOTT, R. K. *Chemical engineering design.* 4<sup>a</sup>. ed. Massachusetts: Elsevier, 2005.

SKOGESTAD, S.; POSTLETHWAITE, I. *Multivariable feedback control*: Analysis and design. 1<sup>a</sup>. ed. Chichester: John Wiley & Sons, 1996.

SMITH, J.; NESS, H. V.; ABBOTT, M. Introdução à termodinâmica da engenharia química. [S.l.]: LTC, 2007.

SMITH, R. Chemical Process Design and Integration. [S.I.]: John Wiley & Sons, 2005.

TAYLOR, R.; KOOIJMAN, H. The ChemSep book. 2<sup>a</sup>. ed. [S.l.: s.n.], 2006.
THE World Bank: World bank commodities price data (the pink sheet). 2014. Disponível em: <a href="http://siteresources.worldbank-.org/INTPROSPECTS/Resources/334934-1111002388669/829392-1389028647906/Pnk">http://siteresources.worldbank-.org/INTPROSPECTS/Resources/334934-1111002388669/829392-1389028647906/Pnk 0114.pdf></a>. Acesso em: 18 de janeiro de 2014.

TUBULAR EXCHANGER MANUFACTURERS ASSOCIATION. *RCB-9.12*: Minimum inside depth. Nova Iorque, 1999. 302 p.

VISWANATH, D.; GHOSH, T.; PRASAD, D.; DUTT, N.; RANI, K. *Viscosity of liquids*: Theory, estimation, experiment and data. [S.l.]: Springer, 2007.

WATKINS, D. S. Fundamentals of matrix computations. 2<sup>a</sup>. ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2002.

WESTPHALEN, D. L.; YOUNG, B. R.; SVRCEK, W. Y. A controllability index for heat exchanger networks. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 42, n. 20, p. 4659–4667, 2003.

YU, C. C. Autotuning of PID controllers: A relay feedback approach. [S.l.]: Springer, 2006.

YUAN, Z.; CHEN, B.; ZHAO, J. An overview on controllability analysis of chemical processes. *AIChE Journal*, v. 57, n. 5, p. 1185–1201, 2011.

ZIEGLER, J. G.; NICHOLS, N. B. An overview on controllability analysis of chemical processes. *Trans A.S.M.E.*, v. 65, p. 433–444, 1943.

## APÊNDICE A

## Dedução da geometria do trocador casco e tubo

O trocador do tipo casco e tubo possui, em geral, uma geometria mais complexa que o trocador bitubular necessitando, portanto, de um maior detalhamento ao elaborar seu projeto. Felizmente, diversas recomendações acerca de sua geometria podem facilitar esta tarefa e como o presente trabalho não foca nos aspectos do projeto dos trocadores, aqui será deduzida uma maneira rápida de estimar a geometria desse trocador apenas com a informação de sua área e fixando alguns parâmetros.

Dado que apenas a área do trocador é conhecida inicialmente, pode-se partir de sua equação para deduzir o restante das informações do trocador. A Equação A.1 mostra como a área de troca térmica pode ser calculada a partir do número de tubos  $N_{\rm t}$ , diâmetro externo do tubo  $D_{\rm e,t}$  e comprimento do trocador L.

$$A_{\rm TC} = N_{\rm t} \pi D_{\rm e,t} L \tag{A.1}$$

Neste trabalho o diâmetro externo do tubo foi fixado em  $D_{\rm e,t} = 3/4$ " = 0,02 m, pois diâmetros dessa ordem permitem a construção de trocadores mais compactos e baratos (SINNOTT, 2005). O comprimento do casco (e do tubo), por sua vez, foi mantido como  $L = 8 \cdot D_{\rm i,c}$ , visto que a literatura afirma que esse valor está dentro de uma faixa ótima para o comprimento

(SINNOTT, 2005). Assim, na Equação A.1 resta apenas o número de tubos e o diâmetro interno do casco como variáveis desconhecidas. Para calcular essas variáveis é necessário informação sobre o arranjo do tubos dentro do trocador.

Para proporcionar maior turbulência e promover melhor troca térmica, os tubos foram dispostos em um arranjo triangular, que está ilustrado na Figura A.1 juntamente com a distância entre os centros dos tubos (*pitch*). A área ocupada por esse triângulo equilátero contém a área de metade de um tubo e dessa forma é possível deduzir que a área ocupada por um tubo em uma sessão transversal do casco é aquela fornecida pela Equação A.2, onde  $p_t$  é o *pitch*, obtido pela Equação A.3.



Figura A.1: *Pitch* do tubo

$$A_{\rm tubo} = 2 \cdot \left(\frac{1}{2}bh\right) = \frac{\sqrt{3}}{2}p_{\rm t}^2 \tag{A.2}$$

$$p_{\rm t} = 1.25 D_{\rm e,t}$$
 (A.3)

De acordo com Branan (2002) um procedimento para estimar o diâmetro do casco é feito calculando-se o diâmetro cuja área é ocupada por todos os tubos mais o diâmetro de dois tubos, conforme mostrado na Equação A.4. Entretanto, ao isolar e substituir  $N_t$  na Equação A.1, o resultado seria uma equação de terceiro grau com, possivelmente, mais de uma raiz positiva. Para contornar esse problema, o segundo termo da Equação A.4 será desprezado, visto que sua ordem de grandeza é menor que o primeiro termo.

$$D_{\rm i,c} = \sqrt{\frac{4}{\pi} N_{\rm t} A_{\rm tubo}} + 2D_{\rm e,t} \tag{A.4}$$

Assim, efetuando as substituições necessárias na Equação A.1, o diâmetro interno do casco pode ser facilmente calculado com Equação A.5.

$$D_{\rm i,c} = \left[\frac{\sqrt{3}}{2,56\pi^2} A_{\rm TC} D_{\rm e,t}\right]^{1/3} \approx 0.1111 A_{\rm TC}^{1/3} \tag{A.5}$$

Com o diâmetro do casco é possível calcular o espaçamento entre as chicanas. A literatura (MUKHERJEE, 2004) afirma que existe uma faixa de razões entre o espaçamento de chicanas e diâmetro interno do casco que fornece a melhor conversão entre queda de pressão no trocador e a transferência de calor. Essa razão normalmente é entre 0,3 e 0,6, portanto, neste trabalho o espaçamento entre as chicanas é dado pela Equação A.6, utilizando um valor intermediário.

$$l_{\rm B} = 0.5 D_{\rm i,c}$$
 (A.6)

Finalmente, o último componente a ser dimensionado é o volume dos cabeçotes do trocador. Segundo o TEMA (1999), a área do prato que divide o cabeçote deve ser no mínimo 1,3 vezes a área transversal de escoamento dos tubos de um trocador com um único passe nos tubos. Dessa maneira, definidas as dimensões do prato na Figura A.2 e sabendo que  $L_{\rm h}$  é a profundidade do cabeçote, o volume total pode ser calculado com a Equação A.7.

$$V_{\rm h} = A_{\rm h} \cdot L_{\rm h} = \left[\frac{\pi D_{\rm i,c}^2}{4}\right] \cdot \left[\frac{1,3A_{\rm t}}{D_{\rm i,c}}\right] \approx 1,021D_{\rm i,c}A_{\rm t} \tag{A.7}$$

Onde  $A_{\rm h}$  é a área transversal do cabeçote e  $A_{\rm t}$  é a área transversal total de escoamento nos tubos.



Figura A.2: Dimensões do cabeçote para um trocador com dois passes no tubo.

## APÊNDICE **B**

## Especificações dos equipamentos

Neste capítulo são apresentadas as especificações dos equipamentos simulados nos cinco esquemas de integração energética. Os únicos equipamentos em comum aos cinco esquemas são o reator e a coluna de destilação, cujas especificações são mostradas a seguir. Os trocadores entre correntes de processo tiveram suas frações de desvio dimensionadas de modo que fosse possível uma variação de  $\pm 10$  °C em relação ao *set-point*.

Reator					
Volume	$10\mathrm{m}^3$				
Temperatura de operação	$138,5^{\circ}\mathrm{C}$				
Pressão de operação	$10130\mathrm{kPa}$				
Coluna de destilação					
Número de estágios	40				
Hold- $up$ dos estágios	$100\mathrm{mol}$				
Pressão	$101300\mathrm{Pa}$				
Razão de refluxo	1,7550				
Carga térmica do refervedor	$1915,4\mathrm{kW}$				
Estágio de alimentação	$20^{0}$				
Volatilidade relativa	0,5063				

Esquema A					
$\mathbf{E1}$	$\mathbf{E2}$	$\mathbf{E3}$	$\mathbf{E4}$		
casco e tubo $(1-2)$	casco e tubo $(1-2)$	casco e tubo $(1-2)$	casco e tubo $(1-2)$		
Vapor à 106,4 °C	Água fria	Água fria	Vapor à 100 °C		
$94,\!87$	$210,\!3$	105,2	$52,\!52$		
1544,9	1926,7	$184,\!56$	$353,\!81$		
$392,\!3$	$67,\!51$	$52,\!12$	307,2		
199	338	213	134		
$0,\!5$	$0,\!65$	$0,\!52$	$0,\!41$		
1,91	$1,\!91$	$1,\!91$	1,91		
$3,\!98$	$5,\!20$	$4,\!13$	$3,\!27$		
$1,266  imes 10^5  \mathrm{Pa}$	$194,4{ m m}^3{ m h}^{-1}$	$59,58{ m m}^3{ m h}^{-1}$	$1,013  imes 10^5  \mathrm{Pa}$		
0,25	0,32	$0,\!26$	$0,\!20$		
$2,767  imes 10^4$	-1,477	-1,155	$2,225 \times 10^4$		
627,2	-0,0224	-0,014	447,3		
	E1           casco e tubo (1-2)           Vapor à 106,4 °C           94,87           1544,9           392,3           199           0,5           1,91           3,98           1,266 × 10 <sup>5</sup> Pa           0,25           2,767 × 10 <sup>4</sup> 627,2	Esquema AE1E2casco e tubo (1-2)casco e tubo (1-2)Vapor à 106,4 °CÁgua fria94,87210,31544,91926,7392,367,511993380,50,651,911,913,985,201,266 × 10 <sup>5</sup> Pa194,4 m <sup>3</sup> h <sup>-1</sup> 0,250,322,767 × 10 <sup>4</sup> -1,477627,2-0,0224	Esquema AE1E2E3casco e tubo (1-2)casco e tubo (1-2)casco e tubo (1-2)Vapor à 106,4 °CÁgua friaÁgua fria94,87210,3105,21544,91926,7184,56392,367,5152,121993382130,50,650,521,911,911,913,985,204,131,266 × 10 <sup>5</sup> Pa194,4 m <sup>3</sup> h <sup>-1</sup> 59,58 m <sup>3</sup> h <sup>-1</sup> 0,250,320,262,767 × 10 <sup>4</sup> -1,477-1,155627,2-0,0224-0,014		

Esquema B					
Nome	$\mathbf{E1}$	$\mathbf{E2}$	$\mathbf{E3}$	$\mathbf{E4}$	
Tipo	casco e tubo $(1-1)$	casco e tubo $(1-2)$	casco e tubo $(1-2)$	casco e tubo $(1-2)$	
Utilidade	-	Água fria	Água fria	Vapor à 100 °C	
$ m \acute{A}rea/m^2$	$574,\!4$	115,7	105,2	$52,\!52$	
Carga térmica/kW	1544,9	381,76	$184,\!56$	$353,\!81$	
Coeficiente global/( $Wm^{-2}K^{-1}$ )	$67,\!94$	40,25	$52,\!12$	307,2	
Número de tubos	600	227	213	134	
Diâmetro do casco/m	$1,\!20$	$0,\!53$	$0,\!52$	$0,\!41$	
Diâmetro do tubo/cm	$1,\!91$	$1,\!91$	$1,\!91$	$1,\!91$	
$\operatorname{Comprimento/m}$	16	4,26	$4,\!13$	$3,\!27$	
Variável manipulada no Set-point	fração de 0,1 (casco)	$39,77{ m m}^3{ m h}^{-1}$	$59,58{ m m}^3{ m h}^{-1}$	$1,013  imes 10^5  \mathrm{Pa}$	
Espaçamento entre chicanas/m	$_{0,1}$	$0,\!27$	0,26	$0,\!20$	
Parâmetros do controlador					
$K_p$	$-6,5505 \times 10^{-2}$	$-1,3612 \times 10^{-1}$	$-1,\!155$	$2,225 \times 10^4$	
$K_i(K_p/ au_i)$	$-8,1743 \times 10^{-4}$	$-1,4808 \times 10^{-3}$	-0,014	$447,\!3$	

Esquema C					
Nome	$\mathbf{E1}$	$\mathbf{E2}$	$\mathbf{E3}$	$\mathbf{E4}$	
Tipo	casco e tubo $(1-2)$	bitubular	casco e tubo $(1-2)$	casco e tubo $(1-2)$	
Utilidade	Vapor à 106,4 °C	-	Água fria	Água fria	
$ m \acute{A}rea/m^2$	$94,\!87$	$52,\!30$	210,3	105,2	
Carga térmica/kW	1544,9	$353,\!81$	$1572,\!8$	184,57	
Coeficiente global/( $Wm^{-2}K^{-1}$ )	$392,\!3$	204,3	$60,\!80$	$52,\!12$	
Número de tubos	199	1	338	213	
Diâmetro do casco/m	$0,\!5$	$0,\!2$	$0,\!65$	$0,\!52$	
Diâmetro do tubo/cm	$1,\!91$	15	$1,\!91$	1,91	
$\operatorname{Comprimento/m}$	$3,\!98$	111,0	$5,\!20$	$4,\!13$	
Variável manipulada no Set-point	$1,266  imes 10^5  \mathrm{Pa}$	fração de 0,5 (tubo)	$150,8{ m m}^3{ m h}^{-1}$	$59,58{ m m}^3{ m h}^{-1}$	
Espaçamento entre chicanas/m	$0,\!25$	-	$0,\!33$	0,26	
Parâmetros do controlador					
$K_p$	$2,767 \times 10^4$	-0,1753	-1,4768	$-1,\!155$	
$K_i(K_p/ au_i)$	$627,\!2$	-0,0044	-0,0242	-0,014	

Esquema D					
Nome	$\mathbf{E1}$	$\mathbf{E2}$	$\mathbf{E3}$	$\mathbf{E4}$	$\mathbf{E5}$
Tipo	casco e tubo $(1-2)$	bitubular	casco e tubo $(1-1)$	casco e tubo $(1-2)$	casco e tubo $(1-2)$
Utilidade	Vapor à $113^{\rm o}{\rm C}$	-	-	Água fria	Água fria
$ m \acute{A}rea/m^2$	$122,\!6$	10,02	467,4	210,3	105,2
Carga térmica/kW	$956,\!93$	587, 97	$353,\!81$	$984,\!88$	$184,\!57$
Coeficiente global/( $Wm^{-2}K^{-1}$ )	191,2	$651,\! 6$	48,56	$45,\!47$	$52,\!12$
Número de tubos	512	1	600	338	213
Diâmetro do casco/m	$0,\!8$	$_{0,2}$	0,92	$0,\!65$	0,52
Diâmetro do tubo/cm	1,91	10	1,91	1,91	1,91
Comprimento/m	2	31,9	13,0	$5,\!20$	$4,\!13$
Variável manipulada no Set-point	$1,596  imes 10^5  \mathrm{Pa}$	-	fração de $0,3$ (tubo)	$82,26{ m m}^3{ m h}^{-1}$	$59,58{ m m}^3{ m h}^{-1}$
Espaçamento entre chicanas/m	$0,\!4$	-	0,2	0,32	0,26
Parâmetros do controlador					
$K_p$	$3,\!0699  imes 10^4$	-	$3,\!0699  imes 10^4$	-0,8469	$-1,\!155$
$K_i(K_p^{-}/ au_i)$	488,04	-	$3{,}0699\times10^4$	-0,0135	-0,014

Esquema E					
Nome	$\mathbf{E1}$	$\mathbf{E2}$	$\mathbf{E3}$	$\mathbf{E4}$	
Tipo	casco e tubo $(1-2)$	casco e tubo $(1-1)$	casco e tubo $(1-2)$	casco e tubo $(1-2)$	
Utilidade	-	-	Água fria	-	
$ m \acute{A}rea/m^2$	290,1	2969	$5,\!506$	105,2	
Carga térmica/kW	$353,\!84$	1544,9	$27,\!92$	184,55	
Coeficiente global/( $Wm^{-2}K^{-1}$ )	45,76	$22,\!59$	$71,\!93$	$52,\!12$	
Número de tubos	419	3500	46	213	
Diâmetro do casco/m	0,72	$1,\!8$	$0,\!24$	$0,\!52$	
Diâmetro do tubo/cm	$1,\!91$	$1,\!91$	$1,\!91$	$1,\!91$	
$\operatorname{Comprimento/m}$	5,78	$14,\!2$	$1,\!00$	$4,\!13$	
Variável manipulada no Set-point	fração de 0,5 (tubo)	fração de $0,1$ (casco)	$15,07{ m m}^3{ m h}^{-1}$	$59,\!57\mathrm{Pa}$	
Espaçamento entre chicanas/m	0,36	$0,\!20$	$0,\!12$	0,26	
Parâmetros do controlador					
$K_p$	$-7,559  imes 10^{-2}$	$-5,967 \times 10^{-2}$	-1,191	$-1,\!155$	
$K_i(K_p/ au_i)$	$-2,124 \times 10^{-3}$	$-1,165 \times 10^{-3}$	-0,0403	-0,014	