

ESTRATÉGIAS DE CONTROLE EM DESTILAÇÃO BATELADA

Este exemplar corresponde à redação
final da tese de mestrado defendida
pela Eng. Ana Maria Frattini Fileti
aprovada pela Comissão Julgadora em
28/02/92.



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

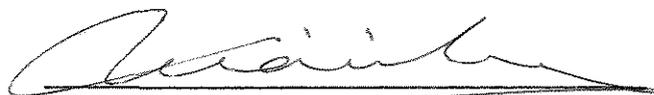
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: SISTEMAS DE PROCESSOS QUÍMICOS E INFORMÁTICA

AUTOR : Ana Maria Frattini Fileti

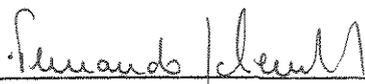
ESTRATÉGIAS DE CONTROLE EM DESTILAÇÃO BATELADA

Tese submetida à comissão de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, como parte dos requisitos necessários para obtenção de grau de mestre em Engenharia Química.

Aprovada por:



Prof. Dr. Mário de Jesus Mendes



Prof. Dr. Fernando Galebeck



Prof. Dr. João A. F. Rocha Pereira

Orientador

Dr. A. Frattini

Ao Maurilio, com carinho,

pela paciência e compreensão durante este período.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira pela orientação e por toda a atenção dispensada.

Aos meus pais, Amaury e Vitória, que, durante toda minha vida, me incentivaram a alcançar meus objetivos profissionais.

Ao Prof. Dr. Sergio Persio Ravagnani pelo apoio prestado na área computacional.

Ao CNPq pelo auxílio financeiro que permitiu a realização deste trabalho.

RESUMO

A operação de uma coluna de destilação em batelada não é comumente automatizada devido a sua complexidade operacional ou à inadequação do método de controle convencional. No presente trabalho, foi desenvolvido um procedimento para simulação de uma destilação em batelada, com múltiplos estágios e componentes, onde foram consideradas as variações do acúmulo de líquido no prato e das vazões molares na coluna. Este simulador mostra o comportamento exato do processo e, usando-se o modelo matemático de uma coluna contínua, o processo é caracterizado considerando-se sua transitoriedade como uma sequência de estados estacionários. Para cada intervalo de tempo pseudo-estacionário é aplicado o Método da Curva de Reação do Processo. Através da combinação dos dois modos de operação de uma destilação em batelada (razão de refluxo constante e composição do destilado constante) foi encontrado um planejamento de refluxo ótimo e, com os métodos de Ziegler-Nichols e Cohen-Coon para ajuste de controladores por retro-alimentação juntamente com a caracterização do processo, foi desenvolvido um sistema de controle digital usando técnicas de Controle Adaptativo. Comprovou-se, então, a eficiência deste sistema através da substancial redução dos custos de operação e economia de energia obtidos pela aplicação do mesmo.

ABSTRACT

Batch distillation operations are not frequently automated due to its operational complexity or the unsuitability of the conventional control methods. In this work a procedure was developed to simulate the operation of multistage, multicomponent batch distillation operations where the hold up and the molar flowrate variations were taken into account. This simulator shows the process exactly behaviour and, using a mathematical model corresponding to continuous distillation, the process is characterized considering the unsteady state as a succession of a finite number of stationary states. For each pseudo-stationary time interval the Process Reaction Curve Method is applied. By combining the two batch distillation operation modes (constant reflux rate and constant distillate composition) it was found an optimum reflux rate policy and with the Ziegler-Nichols and Cohen-Coon feedback controller tuning methods accordingly to the process characterization it was developed a digital control system using Adaptive Control Technics. The control system efficiency was then proved by the large reduction in operation costs and energy savings obtained from the system application.

INDICE

CAPÍTULO 1 - Introdução	1
CAPÍTULO 2 - Estratégias de Controle em Destilação Batelada. Análise da Literatura	6
CAPÍTULO 3 - Coluna de Destilação em Batelada. Modelagem e Simulação	17
3.1 - Introdução	18
3.2 - Apresentação da Coluna	18
3.3 - Cálculo do Perfil Inicial de Composição e Temperatura	21
3.4 - Cálculo do Equilíbrio de Fases	22
3.4.1 - Coeficiente de Fugacidade	23
3.4.2 - Coeficiente de Atividade	26
3.4.3 - Razão de Equilíbrio de Fases	31
3.4.4 - Perfil de Temperatura e Composição	33
3.5 - Cálculo de Entalpias para Balanço de Energia	34
3.6 - Método de Cálculo da Coluna de Destilação em Batelada	37
3.6.1 - Balanços Mássicos	37
3.6.2 - Balanços de Energia	40
3.6.3 - Cálculo das Quantidades de Calor Envolvidas	42
3.6.4 - Acúmulo de Líquido nos Pratos	44
3.6.5 - Método de Integração das Equações Diferenciais	46
3.7 - Escolha do Passo de Integração	48
3.8 - Análise de Desempenho do Programa de Simulação	52

CAPÍTULO 4 - Controle em Destilação Batelada	58
4.1 - Introdução	59
4.2 - Otimização do Processo	59
4.3 - Opções de Controle	69
4.4 - Caracterização do Processo	73
4.5 - Análise da Controlabilidade do Processo	77
4.6 - Controle Adaptativo	82
4.7 - Escolha do Tipo de Controlador	84
4.8 - Ajuste dos Parâmetros do Controlador	85
4.9 - Resultados da Implementação do Controle	89
CAPÍTULO 5 - Conclusões Finais	98
APÊNDICE 1 - Fluxogramas	103
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	106
NOMENCLATURA	111

1. INTRODUÇÃO.

A destilação em batelada é um dos mais antigos processos de separação utilizados na indústria química. Porém, apesar de ter sido considerada ultrapassada pelo surgimento das colunas de destilação contínuas, o significativo crescimento da Química Fina, a necessidade de recuperação de produtos a partir de resíduos industriais e o grande desenvolvimento de sistemas de Controle de Processos por computador renovaram o interesse pelas colunas descontínuas. Seu modo de operação permite que "n" componentes sejam separados em somente uma coluna, enquanto que destilando-se esta mesma mistura de "n" componentes de forma contínua seriam necessárias "n-1" colunas. Nota-se também que a versatilidade de operação deste equipamento é uma qualidade indispensável em situações nas quais a composição da alimentação varia freqüentemente ou quando pequenas quantidades de diferentes misturas são manipuladas.

Por outro lado, verifica-se que o surgimento das simulações digitais de equipamentos de operação unitária, ou de Plantas Químicas como um todo, tornou-se uma ferramenta básica no projeto e controle dos mesmos. Pelo uso de um modelo computacional rigoroso é possível predizer as condições de operação mais econômicas de um processo ou até mesmo seus limites operacionais com absoluta precisão, já que as dificuldades inerentes ao exaustivo cálculo analítico, que exigiam sempre suposições simplificadoras para a resolução do problema, foram superadas pelo aparecimento do cálculo numérico aplicado à computação digital.

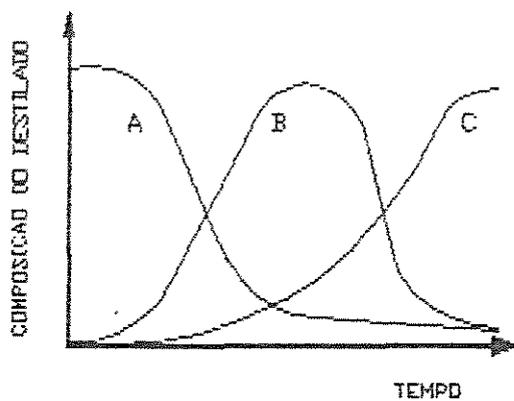
Devido ao grande avanço da informática e conseqüente agilização de cálculos complexos, procurou-se, no presente trabalho, desenvolver um modelo rigoroso de colunas de destilação multicomponente descontínuas que apresentasse resultados exatos dentro de um tempo de simulação computacional inferior ao tempo real de operação do equipamento em estudo, visando sua otimização e seu controle por técnicas de controle adaptativo.

É importante ressaltar que, enquanto a destilação em batelada é governada pelos mesmos princípios de equilíbrio líquido-vapor, hidráulica, e dinâmica das colunas contínuas, seu sistema de controle deve ser substancialmente diferente. Uma destilação comercial deste tipo sofre, normalmente, carregamentos sequenciais de misturas multicomponentes no refeedor, que passam a ser destilados sob condições de refluxo total até que o equilíbrio seja atingido. O produto, rico no componente mais volátil, começa, então, a ser coletado no topo da coluna e sua qualidade depende fortemente da quantidade de material condensado que retorna à mesma. A composição do produto coletado varia com o tempo, ao contrário de uma coluna contínua que apenas obtém um destilado de composição constante e com grande pureza do componente mais volátil (fig. 1.1). Entre a retirada de um componente e outro, há regiões intermediárias de retirada de material fora de especificação. Estas regiões devem ser minimizadas pelo sistema de controle que, por operar o equipamento em regime transiente e devido às mudanças, no topo, de componente

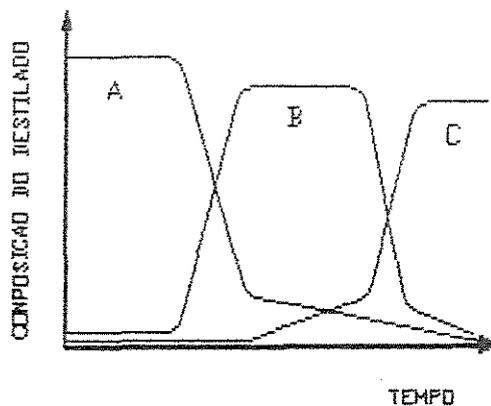
coletado, não pode ser comparado ao sistema de controle de uma coluna contínua.

Destilação em Batelada :

Refluxo Constante



Refluxo Variável



Destilação Contínua :

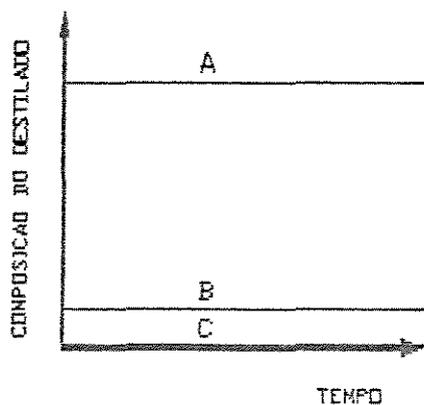


FIG. 1.1 - Destilação da mistura ternária dos componentes A,B e C.

Deste modo, apresentar-se-á um sistema para simulação digital e análise de processos de destilação em batelada, usando-se algoritmos de cálculo rigoroso para a integração das equações diferenciais que descrevem o processo e para o cálculo iterativo de parâmetros do mesmo. Este sistema poderá simular uma coluna de destilação fracionada em batelada que contenha no máximo dez pratos, refulvador e condensador e opere com misturas de até dez componentes. A fim de que o programa computacional fôsse bastante flexível, a geometria dos pratos, as características da mistura a ser destilada, as condições de operação, o passo de integração e a eficiência dos pratos são definidos na entrada de dados deste programa.

Como objetivo principal deste trabalho, tem-se então a análise detalhada dos resultados obtidos da implementação do sistema de controle proposto ao equipamento em estudo, através de simulações do mesmo.

**2. ESTRATÉGIAS DE CONTROLE EM DESTILAÇÃO BATELADA.
ANÁLISE DA LITERATURA.**

A destilação é um dos processos de separação mais utilizados e energeticamente intensivos da indústria química. Para algumas separações, uma redução modesta no tempo total da batelada pode corresponder a uma diminuição significativa nos custos operacionais envolvidos.

Assim sendo, nota-se, na literatura, uma constante preocupação dos pesquisadores com a otimização operacional das colunas de destilação em batelada e, em consequência, a determinação de planos de refluxo ótimo para estas colunas acabou por receber uma atenção considerável por parte dos mesmos.

Converse e Gross [1] maximizaram a quantidade total de destilado de concentração especificada, recolhido em determinado tempo, encontrando um planejamento ótimo para a razão de refluxo através da aplicação do Princípio de Máximo Contínuo de Pontryagin e de cálculos de variância a simulações dinâmicas do processo em estudo. Murty e outros [2] usaram o mesmo modelo e compararam a solução anterior com a solução obtida através de técnicas diferentes de otimização, sendo este trabalho restrito a sistemas binários e com pequeno número de pratos.

Já, Coward [3,4], Robinson [5-7] e Mayur e Jackson [8] minimizaram o tempo de destilação necessário para a produção de determinada quantidade de destilado, de concentração especificada, usando o modelo desenvolvido por Converse e Gross [1], enquanto Price [9] usou um modelo mais complexo.

Todos os trabalhos citados anteriormente consideram o acúmulo molar de líquido no refeedor como sendo dominante, desprezando este acúmulo nos pratos. Egly e outros [10] encontraram a solução do problema para uma coluna multicomponente de fracionamento com acúmulo de líquido e com possibilidade de reação, porém, não são fornecidos maiores detalhes. Hansen e Jorgensen [11], também considerando o acúmulo desprezível e usando o Princípio de Pontryagin e técnicas de colocação para encontrar condições de contorno, divulgaram planejamento ótimo para a razão de refluxo e para o calor fornecido ao refeedor em sistemas binários.

Kerkhof e Vissers [12], ao invés de maximizarem a produção final de destilado para um determinado tempo de destilação ou de minimizarem este tempo para obtenção de determinada quantidade de destilado, utilizaram os lucros como objetivo de otimização.

A maioria dos trabalhos citados acima são restritos a sistemas binários. Além de Egly e outros [10], apenas Robinson [5,6] e Mayur e Jackson [8] trabalharam com sistemas multicomponentes. Entretanto, estes próprios autores ressaltam a dificuldade de se estender o método de otimização a sistemas multicomponentes, já que estes implicam num aumento do número de equações envolvidas.

Outra dificuldade discutida pelos mesmos, para aplicação do método de otimização, é o aumento do esforço computacional em

consequência dos cálculos extremamente exaustivos causados pelo aumento do número de pratos da coluna. Para sanar estes problemas, Diwekar e outros [13] sugerem o uso de um modelo de ordem reduzida baseado na extensão do método "short-cut" normalmente utilizado para colunas contínuas e Kafarov e outros [14] propõem a transformação do sistema inicial em um sistema de dimensões menores.

Confirmando os resultados obtidos pelos pesquisadores citados acima, Yu e Wang [15] afirmam que estes planejamentos de condições operacionais ótimas levam a lucros maiores que os constatados nos modos de operação convencionais, com razão de refluxo ou composição do destilado constante. Ainda com o objetivo de otimizar a operação de destilação batelada, Yu e Zhang [16] divulgaram um estudo recente baseado em outros métodos de otimização, onde o planejamento obtido foi chamado de sub-ótimo por não utilizar cálculos rigorosos.

Trabalhos recentes relacionados no Chemical Abstracts, tais como Yu e outros [17], Britt e Rosen [18] e Jang [19], afirmam que a combinação dos dois modos de operação, a refluxo constante e a composição constante, é suficiente para se otimizar o processo e que a combinação ideal pode ser encontrada através de simulações dinâmicas do mesmo.

Procurando também a otimização do processo, Shinsky [20], pela primeira vez entre os trabalhos citados, propõe a aplicação do controle ótimo em malha fechada e com determinação da

vazão de refluxo ótima através da variação do ponto de ajuste ("set-point") do controlador de composição do destilado, baseado em medida atualizada do fluxo de destilado, como esquematizado na figura 2.1. Embora este ajuste não seja linear, o autor afirma que a relação pode ser aproximada satisfatoriamente por uma simples equação de reta:

$$(x_D)_{SP} = a D + b \quad (2.1)$$

onde $(x_D)_{SP}$ é o ponto de ajuste da composição do destilado, D é o fluxo de destilado e a e b podem ser encontrados através da análise do comportamento do sistema quando operado nos dois modos convencionais.

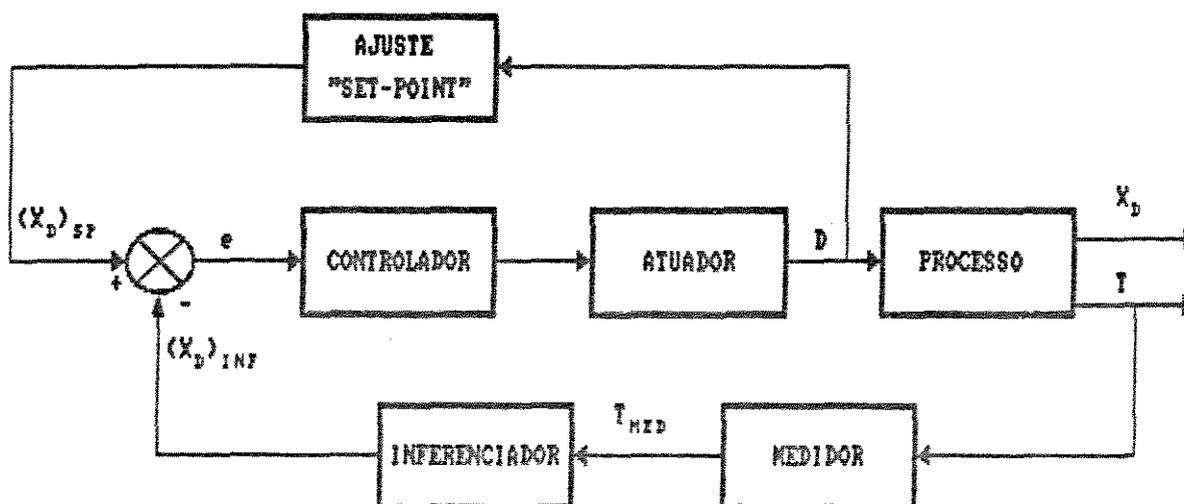


FIG. 2.1 - Diagrama de Blocos do sistema de controle proposto por Shinskey [20].

Relacionadas à figura acima tem-se as variáveis T e $(x_D)_{INF}$ que são, respectivamente, a temperatura do topo da coluna e a composição do destilado, sendo esta última inferida a partir de medidas da temperatura citada.

Bozenhardt [21], implementando também uma malha de controle de composição do destilado, porém operando a coluna da maneira convencional a composição constante, sugere que o método de inferenciação da variável controlada seja baseado em correlação pré-estabelecida em laboratório entre temperatura e pressão do topo e composição do destilado determinada por análises de cromatografia. Esta correlação experimental pode ser, então, colocada num microprocessador, criando-se um "pseudo-analisador", na seguinte forma:

$$\begin{aligned} \% \text{ Comp A} = & a_0 + a_1(T - T_0) + a_2(T - T_0)^2 + a_3(T - T_0)^3 + \\ & + b_0 + b_1(P - P_0) + b_2(P - P_0)^2 + b_3(P - P_0)^3 \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde

- % Comp A = percentagem do componente A no destilado;
- T = temperatura do topo da coluna no instante t atual;
- T_0 = temperatura do topo no instante inicial;
- P = pressão no topo da coluna no instante t atual;
- P_0 = pressão no topo da coluna no instante inicial;
- a e b = coeficientes determinados em laboratório.

Afirma o autor que, de fato, a aplicação desta expressão em um microprocessador, introduzido na malha de controle, torna-se um analisador efetivo, sem os atrasos associados às técnicas de cromatografia gasosa. Obviamente, se a constante de tempo do processo for suficientemente grande (30 minutos ou mais), os resultados das análises cromatográficas podem ser utilizados, intermitentemente, para correção do sinal contínuo gerado pelo "pseudo-analisador".

Entretanto, apesar da variedade de propostas encontradas para se controlar uma coluna de destilação transiente, a configuração mais utilizada é a representada pela figura 2.2, divulgada por Robinson [22], sendo a destilação conduzida a razão de refluxo constante. Neste caso, encontram-se duas malhas de controle, sendo que, na primeira, a variável controlada é a razão de refluxo, manipulando-se a vazão de refluxo L_0 a partir da medição da vazão de destilado. Na segunda malha controla-se o fluxo de vapor do refulvedor, medindo-se a queda de pressão ao longo da coluna e manipulando-se a quantidade de calor fornecida ao refulvedor.

Nota-se, portanto, que não há nenhum tipo de otimização nestes dois últimos trabalhos citados.

Também em revisão ao Chemical Abstracts, encontram-se citações ao controle do equipamento em estudo por computador em Krautstrunk [23] e Yang e outros [24], aos quais, infelizmente, não se teve acesso.

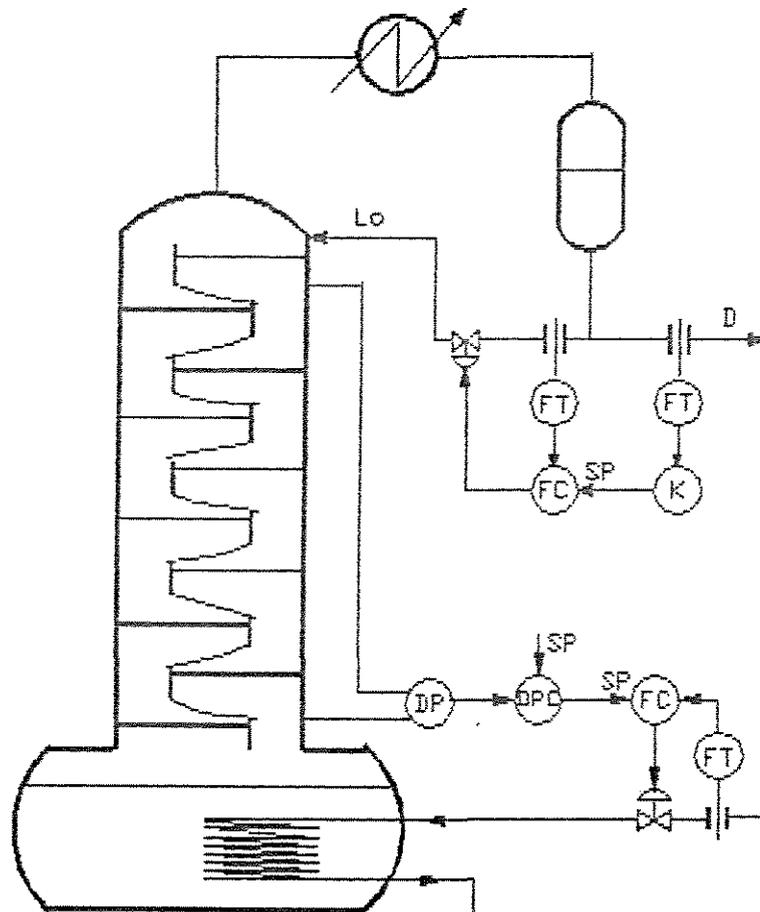


FIG. 2.2 - Controle convencional de uma coluna de destilação em batelada.

Explicitando-se, então, o objetivo geral do controle em destilação batelada como "obtenção da maior quantidade de destilado de pureza média especificada em tempo mínimo", verifica-se a necessidade real de otimização do processo onde se possa minimizar a quantidade de produto obtido fora de especificação ou os rejeitos entre a retirada de um componente e outro no destilado.

Assim sendo, a estrutura de controle convencional descrita em Robinson [22] é adequada apenas para sistemas em que o aumento da razão de refluxo não beneficiariam tanto a separação dos componentes, ou seja, a otimização deste sistema não implicaria em obtenção de lucros significativamente maiores. Entretanto, não é isto o que ocorre na grande maioria dos casos, nos quais, quando se opera com alto fluxo de destilado ou baixa razão de refluxo, se obtém uma separação ruim mas com um tempo menor para o término da batelada e, quando se opera com alta razão de refluxo, a separação melhora porém o tempo aumenta.

Para se atingir esta otimização, no presente trabalho, aproveitar-se-á a sugestão de se encontrar a combinação ideal entre a operação a refluxo constante e a composição constante através de simulações do sistema, ao invés de se utilizar cálculos ríginos e exaustivos para tal. Este planejamento da razão de refluxo encontrado será implementado em malha fechada já que em malha aberta, se houvesse qualquer perturbação na coluna, o plano de refluxo ótimo perderia o sentido e a separação não seria a esperada.

Apesar disto, analisando-se a literatura citada, observou-se que são poucos os trabalhos em que os autores se preocupam com as perturbações que possam ocorrer na prática e, que estes poucos, utilizando malhas de controle por retroalimentação ("feedback"), numa estrutura de controle convencional do tipo analógica, não deram muita importância às não-linearidades do

processo de destilação e, principalmente, não levaram em consideração o fato da destilação em batelada ter um comportamento essencialmente transitório, causando um mau desempenho dos controladores lineares, projetados a partir de valores nominais fixos dos parâmetros do processo.

Visando-se, então, a estabilidade do processo em questão, sugere-se, neste, a utilização de um mecanismo de ajuste dos parâmetros do controlador durante a operação do equipamento ("on-line") através de um microcomputador acoplado ao sistema, ou seja, a implementação de técnicas de Controle Adaptativo.

Segundo Astrom [25], várias aplicações de Controle Adaptativo por retroalimentação surgiram desde meados da década de 1950 e, as primeiras tentativas, implementadas analogicamente, foram bastante dificultadas por problemas de "hardware". No começo da década de 1970, surgiram os primeiros sistemas implementados utilizando-se minicomputadores e, com o advento dos microprocessadores, o número de aplicações aumentou drasticamente devido à redução dos custos envolvidos nesta tecnologia. Por causa disto, estes reguladores adaptativos conquistaram seu lugar no mercado até mesmo para controladores de malha única, onde se tem apenas uma entrada e uma saída. Este mesmo autor afirma que diversas malhas de controle estão, hoje, submetidas ao controle adaptativo, das quais cita aplicações em sistemas de controle de processos industriais, robótica, pilotos automáticos para navegação e em controle de vãos de aviões e mísseis, não

relacionando nenhuma aplicação específica com o equipamento em estudo no presente trabalho.

Finalizando-se esta análise, não poderia deixar de ser dito que as estruturas de controle aqui propostas serão verificadas, exclusivamente, através de simulações do processo em estudo.

**3. COLUNA DE DESTILAÇÃO EM BATELADA.
MODELAGEM E SIMULAÇÃO.**

3.1 - INTRODUÇÃO

A realização de um estudo detalhado da aplicação de técnicas de controle no equipamento em estudo necessita da simulação rigorosa do mesmo, com a finalidade de se obter informações sobre o comportamento das variáveis controlada e manipulada e dos parâmetros do processo, como o ganho e a constante de tempo, além dos perfis de temperatura e composição ao longo da coluna para diversas condições de operação. Para tal, necessita-se, como suporte, dados de equilíbrio de fases, bem como métodos matemáticos para a resolução das equações envolvidas.

No presente capítulo, serão descritos detalhadamente os métodos de predição de propriedades termodinâmicas para obtenção de dados de equilíbrio, a modelagem da coluna através dos balanços de massa e energia e os procedimentos matemáticos necessários para a simulação da mesma.

Serão apresentadas, por fim, análises dos resultados obtidos na destilação simulada de diferentes sistemas sob várias condições de operação do equipamento.

3.2 - APRESENTAÇÃO DA COLUNA

A simulação do equipamento depende das especificações de operação e geometria do mesmo, isto é, do conjunto de parâmetros que definem o sistema em estudo. Além disto, é necessário

explicitar todas as suposições feitas para efeito de sua modelagem matemática.

Para que este conjunto de parâmetros fique bem definido, citam-se abaixo os mais importantes relacionados à geometria e operação, e apresenta-se na figura 3.1 o esquema da coluna de destilação em batelada:

- 1- Número total de estágios;
- 2- Eficiência de separação de cada estágio;
- 3- Pressão de operação da coluna;
- 4- Carga molar inicial;
- 5- Área de cada prato;
- 6- Comprimento do vertedouro;
- 7- Altura do vertedouro;
- 8- Acúmulo molar de líquido no condensador;
- 9- Quantidade de calor fornecida ao refeedor;
- 10- Número de componentes da mistura.

No presente estudo, procurou-se fazer o mínimo possível de suposições para que a simulação apresentasse resultados bem próximos à realidade. Porém, algumas destas suposições são feitas para a agilização dos cálculos já que não influenciavam, de maneira significativa, os resultados obtidos. Estas são as seguintes:

- Acúmulo de vapor no prato desprezível;
- Perda de carga desprezível ao longo da coluna;
- Eficiência de separação constante nos pratos;

- Acúmulo pequeno de líquido no condensador;
- Condensador total;
- Refervedor considerado estágio ideal.

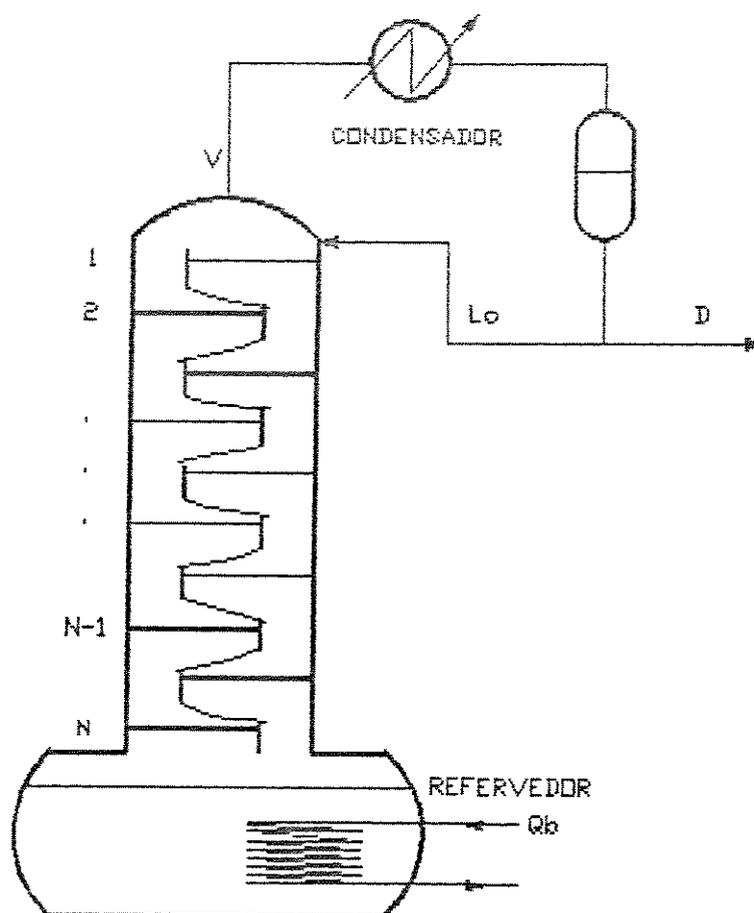


FIG. 3.1 - Representação esquemática de uma coluna de destilação em batelada.

3.3 - CALCULO DO PERFIL INICIAL DE COMPOSIÇÃO E TEMPERATURA

A destilação em batelada tem um comportamento essencialmente transitório durante a maior parte do tempo de operação da coluna, ou seja, não há uma corrente de entrada para compensar a corrente de saída. Porém, há um período transitório, logo após a partida, em que a coluna deve ser conduzida a um estado estacionário, sob condição de refluxo total, até que entre em equilíbrio e os perfis iniciais de composição e temperatura sejam estabelecidos.

Portanto, para a simulação da coluna, o cálculo destas condições iniciais é fundamental para a integração das equações diferenciais envolvidas, e deve ser efetuado da seguinte maneira: Com uma estimativa inicial das frações molares do líquido presente no condensador e supondo-se que o acúmulo de líquido neste estágio seja suficientemente pequeno, iguala-se a composição do vapor no topo da coluna à composição estimada de líquido no condensador. Encontrando-se, então, a temperatura do ponto de orvalho desta mistura gasosa (procedimento a ser descrito na seção 3.4.4), determina-se a razão de equilíbrio entre as fases e, conseqüentemente, a composição do líquido no mesmo estágio que, por sua vez, será igual à composição do vapor no estágio imediatamente inferior. Deste modo continuam-se os cálculos até que a composição do líquido no refeedor seja encontrada e sejam estabelecidos os perfis de composição e temperatura da coluna.

Para se certificar que as composições estejam corretas, faz-se um balanço de massa global para todos os componentes e, se a soma das quantidades molares de determinado componente em todos os estágios da coluna for maior que a quantidade molar do mesmo introduzida na carga, a estimativa inicial da composição deste componente no condensador foi muito alta e deve ser diminuída, ou de maneira contrária até que estes dois valores coincidam (ver figura 1 - apêndice 1).

3.4 - CÁLCULO DO EQUILÍBRIO DE FASES

Dada uma mistura com C componentes e duas fases à mesma temperatura, tem-se a seguinte relação de equilíbrio, para cada componente i , expressa em termos de fugacidades:

$$f_i^V = f_i^L \quad (3.1)$$

As fugacidades tal como definidas pela equação (3.1) teriam pequeno uso prático se não fossem relacionadas com variáveis que pudessem ser determinadas experimentalmente, tais como as frações molares x da fase líquida e y da fase vapor, a temperatura absoluta T e a pressão total P do sistema. Estas relações desejadas, para um sistema qualquer, são alcançadas através da introdução de duas funções auxiliares que representam, respectivamente, a não-idealidade da fase vapor e da fase líquida:

o coeficiente de fugacidade ϕ e o coeficiente de atividade γ .

Nas duas próximas seções, serão descritos os métodos utilizados neste trabalho para predição destes importantes coeficientes, notando-se que as metodologias utilizadas são distintas para a fase líquida e para a fase vapor.

3.4.1 - CÁLCULO DO COEFICIENTE DE FUGACIDADE

A baixa pressão, a fase vapor tem baixa densidade e, na média, as moléculas interagem entre si com menor intensidade que as moléculas da densa fase líquida. Esta é uma simplificação comum para se assumir que toda a não-idealidade, em sistemas líquido-vapor, existe na fase líquida e que a fase vapor pode ser tratada como um gás ideal.

Entretanto, apesar de se obter boas aproximações sob condições favoráveis, a suposição de idealidade da fase vapor ($\phi = 1$) pode conduzir os cálculos de equilíbrio de fases a erros de cinco a dez por cento, mesmo sob condições de pressões moderadas. Portanto, já que no presente trabalho se desejam resultados realísticos, a não-idealidade da fase vapor será considerada.

A fugacidade f_i^V do componente i na fase vapor é relacionada com a fração molar do mesmo componente na fase vapor y_i e com a pressão total P por meio do coeficiente de

fugacidade ϕ_i :

$$\phi_i \equiv \frac{f_i^V}{y_i P} \quad (3.2)$$

ou rearranjando a equação (3.2) :

$$f_i^V = \phi_i y_i P \quad (3.3)$$

Mas, por outro lado, o coeficiente de fugacidade pode ser relacionado com a propriedade volumétrica, \bar{v}_i , da fase vapor através da seguinte equação, proveniente de uma série de manipulações da termodinâmica básica:

$$\ln \phi_i = \frac{1}{R T} \int_0^P \left(\bar{v}_i - \frac{R T}{P} \right) dP \quad (3.4)$$

onde: R = constante universal dos gases;

\bar{v}_i = volume parcial molar do componente i , definido da forma:

$$\bar{v}_i = \left[\frac{\partial V}{\partial n_i} \right]_{T, P, n_j} \quad (3.5)$$

em que V é o volume total que contém n_i moles do componente i e n_j moles do componente $j \neq i$.

Portanto, o problema de se encontrar ϕ_i foi trocado pelo problema de se encontrar \bar{v}_i a partir de uma equação de estado. Na literatura encontram-se diversas relações P-V-T que exprimem, de modo preciso, o comportamento das misturas para determinadas faixas de pressão e temperatura. Entretanto, a equação virial, truncada no segundo termo, prediz, com grande confiabilidade, este comportamento nas condições de baixa a moderada densidade e em sistemas cuja fase vapor não contém componentes que se dimerizam fortemente.

No presente trabalho, as propriedades volumétricas serão calculadas então através da equação virial, uma vez que, a sua utilização é simples devido à existência de regras de mistura bem definidas e os coeficientes binários de fácil acesso na literatura ou facilmente estimados por correlações, como as de Tsonopoulos [26], aqui utilizadas. Deste modo, tem-se que:

$$\frac{P v}{R T} = 1 + \frac{B P}{R T} \quad (3.6)$$

onde v é o volume molar e B o segundo coeficiente virial, calculado pela seguinte regra de mistura:

$$B = \sum_{i=1}^c \sum_{j=1}^c y_i y_j B_{ij} \quad (3.7)$$

onde $B_{ij} = B_{ji}$ são os segundos coeficientes viriais cruzados que

são calculados, através das correlações de Tsonopoulos, em função da temperatura crítica, pressão crítica, volume crítico, fator acêntrico e momento dipolar dos componentes i e j .

Combinando-se as equações (3.4) a (3.7) obtém-se o coeficiente de fugacidade, para determinada pressão e temperatura, em função dos segundos coeficientes viriais puros e cruzados e da composição da fase gasosa:

$$\ln \phi_i = \frac{P}{R T} \left[2 \sum_{j=1}^c y_j B_{ij} - B \right] \quad (3.8)$$

Portanto, a equação (3.8) possibilita o cálculo do coeficiente de fugacidade nos casos em que a equação virial (3.6) for válida.

3.4.2 - CÁLCULO DO COEFICIENTE DE ATIVIDADE

Para a fase líquida, um procedimento análogo ao da fase vapor pode ser realizado através da introdução do coeficiente de atividade γ_i . Este coeficiente, de maneira similar à equação (3.2), relaciona a fugacidade da fase líquida f_i^L com a fração molar x_i e a fugacidade do estado de referência f_i^0 :

$$\gamma_i \equiv \frac{f_i^L}{x_i f_i^0} \quad (3.9)$$

ou reescrevendo a equação (3.9) :

$$f_i^L = \gamma_i x_i f_i^0 \quad (3.10)$$

Para que a equação (3.10) seja bem definida, a fugacidade do estado de referência deve ser especificada. Entretanto, a definição de f_i^0 é arbitrária, já que é governada pela referência adotada por conveniência de manipulação.

O estado de referência escolhido neste trabalho é o do componente i puro, à temperatura e pressão de equilíbrio. Neste estado, a fugacidade de referência do componente i puro é relacionada com a fugacidade de saturação do mesmo, à temperatura T , pela seguinte equação:

$$f_i^0 = f_i^S \exp \left[\int_{P_i^S}^P \frac{v_i}{R T} dP \right] \quad (3.11)$$

onde, para o componente i líquido puro, P_i^S é a pressão de saturação, f_i^S a fugacidade na saturação e v_i o volume molar à temperatura absoluta T de equilíbrio.

O termo exponencial da equação (3.11) é chamado de termo de correção de Poyting [27], que pode ser simplificado, considerando-se que o volume independe da pressão, isto é:

$$\exp \left[\int_{P_i^S}^P \frac{v_i}{R T} dP \right] = \exp \left[\frac{v_i}{R T} (P - P_i^S) \right] \quad (3.12)$$

Entretanto, na maioria dos casos, dado que os termos v_i e $(P - P_i^S)$ são valores pequenos, o termo de correção de Poyting é aproximadamente igual à unidade. Portanto, a equação (3.11) se torna :

$$f_i^0 = f_i^S \quad (3.13)$$

Pela definição do coeficiente de fugacidade, pode-se calcular a fugacidade na saturação pela seguinte equação:

$$f_i^S = \phi_i^S P_i^S \quad (3.14)$$

onde o coeficiente de fugacidade do componente i na saturação ϕ_i^S é calculado através das relações P-V-T, como visto na seção (3.4.1), e a pressão de saturação P_i^S predita através da equação de Antoine:

$$\log P_i^S = A_i - \frac{B_i}{C_i + T} \quad (3.15)$$

onde a temperatura T é dada em K e a pressão de saturação em mmHg.

Definido o cálculo de f_i^0 , apresenta-se, então, o procedimento de predição do coeficiente de atividade propriamente

dito.

Vários métodos existem para o cálculo do coeficiente de atividade, porém, no presente trabalho, adotou-se o modelo UNIQUAC (UNIversal QUASi Chemical) [28] por reproduzir precisamente, de maneira geral, os comportamentos não ideais da fase líquida.

Neste modelo, a expressão para o coeficiente de atividade contém duas partes: a parte combinatorial γ_i^C , devido essencialmente às diferenças de forma e tamanho das moléculas, e a contribuição residual γ_i^R , devido às interações energéticas. Isto pode ser expresso por:

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R \quad (3.16)$$

onde a contribuição combinatorial é dada por:

$$\ln \gamma_i^C = \ln \frac{\Phi_i}{x_i} + 5 q_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} + l_i - \frac{\Phi_i}{x_i} \sum_{j=1}^c x_j l_j \quad (3.17)$$

sendo: $l_i = 5 (r_i - q_i) - (r_i - 1) \quad (3.18)$

$$\theta_i = \frac{q_i x_i}{\sum_{j=1}^c q_j x_j} \quad (3.19)$$

$$e \quad \Phi_i = \frac{r_i x_i}{c \sum_{j=1}^c r_j x_j} \quad (3.20)$$

A parte combinatorial se resume, portanto, na dependência de dois parâmetros relativos aos componentes puros: r_i e q_i , que são, respectivamente, medidas do volume e da área molecular de van der Waals.

A contribuição residual pode ser expressa por:

$$\ln \gamma_i^R = q_i \left[1 - \ln \left(\sum_{j=1}^c \theta_j \tau_{ji} \right) - \sum_{j=1}^c \left(\frac{\theta_j \tau_{ij}}{\sum_{k=1}^c \theta_k \tau_{kj}} \right) \right] \quad (3.21)$$

$$\text{onde:} \quad \tau_{ji} = \exp \left[- \frac{u_{ji} - u_{ii}}{R T} \right] \quad (3.22)$$

$$\text{sendo:} \quad u_{ij} = u_{ji} \quad \text{e} \quad \tau_{ij} \neq \tau_{ji}$$

Portanto, a parte residual depende dos parâmetros binários u_{ij} e do parâmetro puro q_i e o coeficiente de atividade poderá ser calculado a partir das equações (3.16) a (3.22).

3.4.3 - CÁLCULO DA RAZÃO DE EQUILÍBRIO DE FASES

O objetivo deste capítulo é a modelagem e simulação de uma coluna de destilação de pratos em batelada. Como se sabe, a separação de uma mistura através desta operação é alcançada por meio de sucessivos estágios de contato líquido-vapor, tornando necessária a predição de dados de equilíbrio a fim de se obter, em cada estágio, informações da composição de equilíbrio de uma das fases a partir de dados como temperatura, pressão e composição da outra fase.

Como visto nas seções anteriores, no equilíbrio torna-se necessário que a fugacidade do componente i seja a mesma para ambas as fases. Portanto, das equações (3.3) e (3.10), tem-se que:

$$\phi_i y_i P = \gamma_i x_i f_i^0 \quad (3.23)$$

Deste modo, a razão de equilíbrio entre as fases ou fator de separação K_i se torna definido por:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\gamma_i f_i^0}{\phi_i P} \quad (3.24)$$

Portanto, com a predição de γ_i , ϕ_i e f_i^0 , e conhecendo-se a pressão de operação P , obtém-se a razão de equilíbrio e, conseqüentemente, consegue-se relacionar a composição das duas

fases para diversos sistemas, sob inúmeras condições de operação do equipamento, possibilitando assim estudos mais completos do mesmo.

Como na predição dos coeficientes de fugacidade e atividade foram utilizadas regras de mistura que necessitavam do conhecimento das composições, respectivamente, do vapor e do líquido, e o problema em questão é a determinação da composição desconhecida de uma das fases em função da composição conhecida da outra fase, os cálculos se tornam iterativos e foram realizados aqui através do método numérico de convergência de Newton-Raphson.

Entretanto, como o tempo de contato entre as duas fases, por vezes, não é suficiente para o sistema alcançar o equilíbrio em cada estágio, introduz-se uma medida desta não-idealidade: a eficiência de Murphree, considerada constante ao longo do tempo e igual para todos os pratos. Portanto, a fração molar do componente i na fase vapor, y_i , encontrada pela metodologia acima é a fração molar no equilíbrio e passa a ser chamada de y_i^* .

A eficiência de Murphree, em termos percentuais, para o prato j , é definida por:

$$E_j = 100 \frac{y_{i,j} - y_{i,j+1}}{y_{i,j}^* - y_{i,j+1}} \quad (3.25)$$

Sendo esta eficiência um dado de entrada para a simulação e considerando-se o refervedor como único estágio ideal,

determinando-se $y_{i,N+1}$ pelos cálculos de equilíbrio, obtém-se $y_{i,N}$ pela eficiência acima e assim sucessivamente para os estágios j menores que N através da equação (3.25) rearranjada:

$$y_{i,j} = \frac{E_j}{100} (y_{i,j}^* - y_{i,j+1}) + y_{i,j+1} \quad (3.26)$$

3.4.4 - CÁLCULO DO PERFIL DE TEMPERATURA E COMPOSIÇÃO

O conhecimento da temperatura de cada estágio da coluna é fundamental para a realização do balanço energético da mesma. Assim sendo, seu cálculo deve ser realizado com precisão e em função do equilíbrio de fases, admitindo-se que esta temperatura seja a temperatura do ponto de bolha do líquido se a composição conhecida for a da fase líquida ou a temperatura do ponto de orvalho do vapor se a composição conhecida for a da fase vapor.

Deve-se notar que nos métodos de predição dos coeficientes de atividade e de fugacidade o valor da temperatura de operação é utilizado e interfere bastante na razão de equilíbrio das fases. Portanto, na verdade, os cálculos do perfil de temperatura e do perfil de composição estão interligados e devem ser realizados de forma iterativa.

O procedimento para o cálculo iterativo em cada estágio, no caso em que a composição do líquido é conhecida, deve ser o seguinte (ver figura 2 - apêndice 1):

Estima-se um valor para a temperatura e calcula-se o coeficiente de atividade e a fugacidade de saturação para cada componente i , como visto na seção 3.4.2. Para a primeira iteração, deve-se considerar a fase gasosa ideal, ou seja, ϕ_i igual à unidade e calcula-se a razão de equilíbrio K_i e a composição da fase gasosa através das equações (3.24) e (3.25). Verifica-se, então, para cada iteração se o somatório de y_i se tornou constante. Se não, modifica-se y_i e volta-se para o cálculo de ϕ_i , de acordo com o procedimento descrito na seção 3.4.1, até que a condição acima seja satisfeita. Se este mesmo somatório de y_i for aproximadamente igual à unidade, a temperatura estimada inicialmente estava correta e encontrou-se a composição da fase vapor. Mas, se o somatório não se aproximou da unidade, deve-se corrigir a temperatura e voltar aos cálculos de ϕ_i e γ_i . Deve ser empregado um método para convergência, como o de Newton-Raphson, aqui utilizado.

3.5 - CÁLCULO DE ENTALPIAS PARA BALANÇO DE ENERGIA

A modelagem realizada no presente trabalho visa a representação fiel da realidade, portanto, todas as variações de energia do processo são levadas em consideração, inclusive a entalpia de excesso na fase líquida.

Para a fase líquida de cada estágio pode-se escrever que:

$$h = h^{\text{ideal}} + h^{\text{E}} \quad (3.27)$$

onde : h = entalpia total molar da fase líquida;

h^{ideal} = entalpia molar ideal;

h^{E} = entalpia molar de excesso.

A entalpia molar ideal pode ser relacionada com a entalpia molar do componente i puro, h_i , da seguinte forma:

$$h^{\text{ideal}} = \sum_{i=1}^c x_i h_i \quad (3.28)$$

Porém, a uma dada pressão, a variação da entalpia de um componente puro com a temperatura, por definição, é dada por:

$$h_i(T) - h_i(T_0) = \int_{T_0}^T C_{p_i}^L dT \quad (3.29)$$

onde $C_{p_i}^L$ é o calor específico molar a pressão constante do componente i líquido e $h_i(T_0)$ é a entalpia molar do componente i líquido puro na temperatura de referência T_0 , termo que normalmente se iguala a zero.

Admitindo-se que o calor específico molar seja constante entre as temperaturas T e T_0 , a entalpia molar do componente i puro líquido será definida por uma equação linearizada da forma:

$$h_i(T) = Cp_i^L (T - T_o) \quad (3.30)$$

A entalpia molar de excesso da fase líquida, indicada na equação (3.27), será determinada usando-se os parâmetros UNIQUAC [28] através da equação (3.31):

$$h^E = -RT \sum_{i=1}^c q_i x_i \frac{\sum_{j=1}^c \theta_j \tau_{ji} \ln \tau_{ji}}{\sum_{j=1}^c \theta_j \tau_{ji}} \quad (3.31)$$

onde θ_j e τ_{ji} são obtidos através das equações (3.19) e (3.22), respectivamente, e q_i é o mesmo parâmetro do componente i puro utilizado na seção (3.4.2).

Desta forma determina-se a entalpia molar da fase líquida a uma certa temperatura para cada estágio e, de maneira análoga, calcula-se a entalpia molar da fase vapor, H . Porém considera-se a mesma como sendo uma mistura ideal, não havendo portanto entalpia de excesso. Assim, tem-se para cada estágio:

$$H = \sum_{i=1}^c y_i H_i \quad (3.32)$$

onde : $H_i(T) = H_i^0 + Cp_i^V (T - T_o)$

Cp_i^V = calor específico molar a pressão constante do componente i vapor, considerado constante entre T e T_o ;

H_i^0 = entalpia molar de vaporização do componente i a T_o .

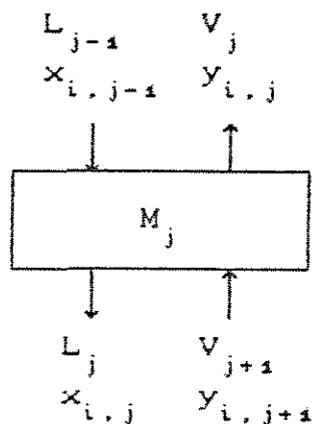
3.6 - MÉTODO DE CÁLCULO DA COLUNA DE DESTILAÇÃO EM BATELADA

Neste item, será descrito o procedimento que permitirá a simulação de uma coluna de destilação em batelada, com N estágios de equilíbrio para a separação de C componentes, utilizando-se os conhecimentos adquiridos nos itens anteriores, onde foram apresentados todos os fundamentos termodinâmicos necessários para a sua realização.

Levando-se em conta todas as suposições relacionadas no item 3.2 e tomando-se como conhecidos os parâmetros enumerados neste mesmo item, além dos parâmetros necessários para o equilíbrio líquido-vapor [29,30], escrevem-se as equações de conservação de massa e de energia para o sistema em estudo.

3.6.1 - BALANÇOS MASSICOS

Seja um estágio j , arbitrário da coluna de destilação, representado pela figura 3.2:



onde :

- V = vazão molar total do vapor;
- L = vazão molar total do líquido;
- x = fração molar do líquido;
- y = fração molar do vapor;
- M = acúmulo molar de líquido ("hold-up");
- N = número de pratos da coluna;
- subscrito j = estágio; j = 0, 1, ..., N+1
- subscrito i = componente; i = 1, 2, ..., C

Portanto, se C é o número total de componentes e N+1 o número total de estágios de equilíbrio, incluindo todos os pratos (1 a N) e o refeedor (N+1), podem ser escritas as seguintes equações diferenciais em relação ao tempo t:

- Condensador (j=0):

$$\frac{d x_{i,0}}{d t} = \frac{V_1}{M_0} (y_{i,1} - x_{i,0}) \quad (3.33)$$

- Pratos:

$$\frac{d M_j}{d t} = L_{j-1} - L_j + V_{j+1} - V_j \quad (3.34)$$

$$\frac{d (M_j x_{i,j})}{d t} = x_{i,j-1} L_{j-1} + y_{i,j+1} V_{j+1} - x_{i,j} L_j - y_{i,j} V_j \quad (3.35)$$

Entretanto, abrindo-se a derivada da equação (3.35) e substituindo-se na mesma a equação (3.34), obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{d x_{i,j}}{d t} &= \frac{V_{j+1}}{M_j} (y_{i,j+1} - x_{i,j}) + \frac{V_j}{M_j} (x_{i,j} - y_{i,j}) + \\ &+ \frac{L_{j-1}}{M_j} (x_{i,j-1} - x_{i,j}) \end{aligned} \quad (3.36)$$

- Refervedor:

$$\frac{d M_{N+1}}{d t} = L_N - V_{N+1} \quad (3.37)$$

$$\frac{d (x_{i,N+1} M_{N+1})}{d t} = x_{i,N} L_N - y_{i,N+1} V_{N+1} \quad (3.38)$$

Do mesmo modo que para a equação (3.36), pode-se obter:

$$\frac{d x_{i,N+1}}{d t} = \frac{V_{N+1}}{M_{N+1}} (x_{i,N+1} - y_{i,N+1}) + \frac{L_N}{M_{N+1}} (x_{i,N} - x_{i,N+1}) \quad (3.39)$$

3.6.2 - BALANÇOS DE ENERGIA

Sejam H_j e h_j as entalpias molares totais do vapor e do líquido, respectivamente, definidas pelas equações (3.32) e (3.27) para o estágio j . Assim, podem ser escritas as seguintes equações de conservação de energia:

$$\frac{d (M_j h_j)}{d t} = L_{j-1} h_{j-1} + V_{j+1} H_{j+1} - L_j h_j - V_j H_j \quad (3.40)$$

Abrindo-se a derivada acima e substituindo-se a equação (3.34), obtém-se:

$$\frac{d h_j}{d t} = \frac{L_{j-1}}{M_j} (h_{j-1} - h_j) + \frac{V_{j+1}}{M_j} (H_{j+1} - h_j) + \frac{V_j}{M_j} (h_j - H_j) \quad (3.41)$$

Observa-se que cada estágio do modelo tem um fluxo de vapor para o estágio acima e um fluxo de líquido para o estágio abaixo e, que, as únicas relações para o cálculo do fluxo de vapor são também equações diferenciais, o que dificulta bastante a resolução destas equações.

Na prática, entretanto, um método de solução conveniente é obtido notando-se que a variação da entalpia por prato se torna pequena quando comparada com as mudanças nos fluxos molares dos mesmos. Assim sendo, a integração apenas das equações de balanço de massa (3.34) e (3.36) fornece a composição da fase líquida e o acúmulo de líquido no prato e, conseqüentemente, a temperatura e entalpia do mesmo. A entalpia obtida no início do intervalo de integração pode ser comparada com a do final deste intervalo, obtendo-se a seguinte aproximação [31]:

$$\frac{d h_j}{d t} = \frac{h_j(t) - h_j(t-\Delta t)}{\Delta t} \quad (3.42)$$

Utilizando-se esta estimativa da variação de entalpia do líquido, pode-se calcular o fluxo molar de vapor que sai do prato j a partir da seguinte equação, proveniente da equação (3.41):

$$V_j = \frac{M_j \frac{d h_j}{d t} + L_{j-1} (h_j - h_{j-1}) + V_{j+1} (h_j - H_{j+1})}{(h_j - H_j)} \quad (3.43)$$

Deve-se notar, ainda, que os fluxos molares L_{j-1} e V_{j+1} devem ser conhecidos, respectivamente, através da equação de Francis (seção 3.6.4) e a partir dos cálculos no prato $j+1$, que quando $j+1$ for o refeedor estará em função do calor fornecido ao mesmo (seção 3.6.3).

3.6.3 - CÁLCULO DAS QUANTIDADES DE CALOR ENVOLVIDAS

Como dito acima, a quantidade de calor fornecida ao refeedor Q_r é bastante importante, já que é esta quem determina os fluxos molares através da coluna e, a quantidade de calor retirada no condensador Q_c deve ser exata para que o vapor saturado seja condensado na forma de líquido saturado, ou seja, deve haver somente perda de calor latente.

Para se efetuar estes cálculos, é necessário que se encontre a entalpia molar (ΔH) de vaporização da mistura líquida no refeedor e de condensação da mistura gasosa no condensador, pois:

$$V_{N+1} = \frac{Q_r}{(\Delta H)_{N+1}} \quad (3.44)$$

e

$$Q_c = V_1 (\Delta H)_0 \quad (3.45)$$

onde:
$$(\Delta H)_0 = \sum_{i=1}^c y_{i,1} \Delta H_i(T_{j,1}) \quad (3.46)$$

e

$$(\Delta H)_{N+1} = \sum_{i=1}^c x_{i,N+1} \Delta H_i(T_{j,N+1}) \quad (3.47)$$

sendo ΔH_i o calor latente molar de vaporização do componente i puro a temperatura $T_{j,i}$.

Para o cálculo de ΔH_i pode-se usar a equação empírica proposta por Watson [32], que estima o calor latente molar de vaporização de um líquido puro em qualquer temperatura a partir de um valor conhecido a outra temperatura T_{ref} :

$$\frac{\Delta H_i(T)}{\Delta H_i(T_{ref})} = \left[\frac{1 - (T/T_{c,i})}{1 - (T_{ref}/T_{c,i})} \right]^{0.38} \quad (3.48)$$

onde $T_{c,i}$ é a temperatura crítica do componente i e $\Delta H_i(T_{ref})$ é calculado através da equação empírica proposta por Riedel [33]:

$$\frac{\Delta H_i(T_{eb_i})}{T_{eb_i}} = 2.17 \frac{\ln P_{c_i} - 1}{0.930 - (T_{eb_i}/T_{c_i})} \quad (3.49)$$

sendo P_{c_i} a pressão crítica do componente i em atmosferas e T_{eb_i} a temperatura normal de ebulição em Kelvin, que será a própria temperatura de referência T_{ref} .

3.6.4 - ACÚMULO DE LÍQUIDO NOS PRATOS

Para o acúmulo de líquido nos pratos adotou-se a equação empírica de Francis [34]:

$$M_j = A_p \rho_j \left[hv + e \left(\frac{L_j}{\rho_j L_v} \right)^{2/3} \right] \quad (3.50)$$

onde: hv = altura do vertedouro em cm;

M_j = acúmulo molar de líquido no estágio j ;

L_j = vazão molar de líquido em moles/min;

ρ_j = massa específica molar da mistura dada por $\sum_{i=1}^c d_i x_i$;

d_i = massa específica molar em moles/cm³ de i puro;

A_p = área do prato em cm²;

L_v = comprimento do vertedouro em cm;

$e = 9.345 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1/3} \text{ min}^{2/3}$.

Para que fiquem bem definidas as dimensões relacionadas à geometria do prato, apresenta-se na figura 3.3 um esquema do mesmo.

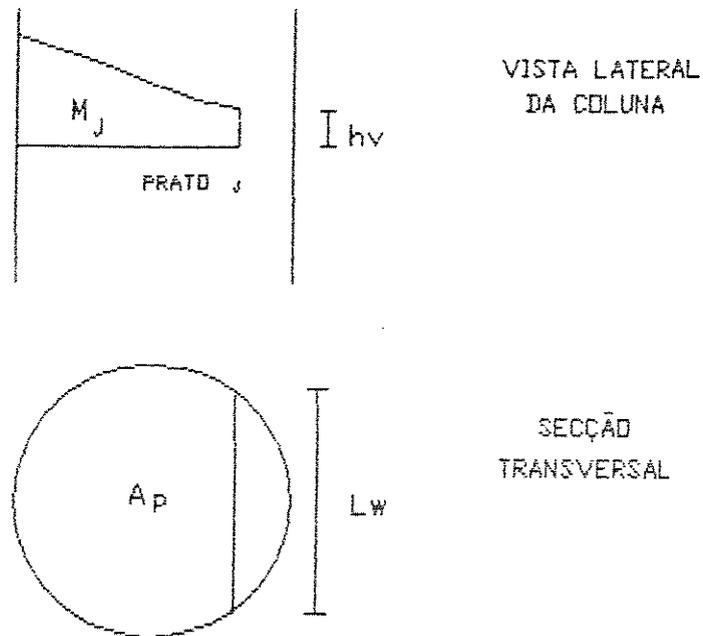


FIG.3.3 - Parâmetros da Equação de Francis.

Como se mostrou na seção (3.6.1), o acúmulo molar de líquido M pode ser calculado pela integração das equações de balanços de massa, portanto pela equação de Francis calcular-se-á o fluxo de líquido:

$$L_j = \rho_j L_w \left[\frac{1}{e} \left(\frac{M_j}{A_p \rho_j} - h_v \right) \right]^{3/2} \quad (3.51)$$

Entretanto, para o início dos cálculos (item 3.3), supõe-se que a vazão de líquido do prato imediatamente acima do refulvedor seja igual à vazão de vapor do refulvedor calculada através da equação (3.44), ou seja:

$$L_j = V_{j+1} \quad \text{com } j = N \quad (3.52)$$

Para os pratos superiores também é válida a equação (3.52) e calcula-se V_{j+1} a partir da equação (3.43) considerando-se que não haja variação de entalpia. Portanto, neste caso, usa-se a equação de Francis para o cálculo do perfil de acúmulo molar inicial na forma da equação (3.50).

3.6.5 - MÉTODO DE INTEGRAÇÃO DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

Observando-se que a modelagem da coluna é composta principalmente de equações diferenciais ordinárias, necessita-se de um método numérico para solução das mesmas. No presente trabalho, o método utilizado foi o de Runge-Kutta de 4.^o ordem, que, no caso de integração das equações de acúmulo molar M do prato j , toma a seguinte forma:

$$M_{j,k+1} = M_{j,k} + \frac{\text{pas}}{6} \left(k_1 + 2 k_2 + 2 k_3 + k_4 \right) \quad (3.53)$$

onde:

$$k_1 = f(t_k, M_{j,k})$$

$$k_2 = f(t_k + 0.5 \text{ pas}, M_{j,k} + 0.5 \text{ pas } k_1)$$

$$k_3 = f(t_k + 0.5 \text{ pas}, M_{j,k} + 0.5 \text{ pas } k_2)$$

$$k_4 = f(t_k + \text{pas}, M_{j,k} + \text{pas } k_3)$$

subscrito k = número da iteração atual
 pas = passo de integração

As funções $f(t, M_j)$, para o caso acima, são definidas pelas equações (3.34) para os pratos e (3.37) para o refeedor, ou seja:

$$f_1(t_k, M_{j,k}) = \frac{d M_j}{d t} \quad (3.54)$$

$$f_2(t_k, M_{N+1,k}) = \frac{d M_{N+1}}{d t} \quad (3.55)$$

Já na integração das equações de balanço de massa do componente i na fase líquida do estágio j , as equações do método escolhido se tornam:

$$x_{i,j,k+1} = x_{i,j,k} + \frac{\text{pas}}{6} \left[k1' + 2 k2' + 2 k3' + k4' \right] \quad (3.56)$$

onde:

$$k1' = f'(t_k, x_{i,j,k})$$

$$k2' = f'(t_k + 0.5 \text{ pas}, x_{i,j,k} + 0.5 \text{ pas } k1')$$

$$k3' = f'(t_k + 0.5 \text{ pas}, x_{i,j,k} + 0.5 \text{ pas } k2')$$

$$k4' = f'(t_k + \text{pas}, x_{i,j,k} + \text{pas } k3')$$

Sendo estas funções $f'(t, x_{i,j})$ definidas por f'_1 para o condensador, f'_2 para os pratos e f'_3 para o refeedor e relacionadas, respectivamente, com as equações (3.33), (3.36) e (3.39):

$$f'_1(t_k, x_{i,j,k}) = \frac{d x_{i,0}}{d t} \quad (3.57)$$

$$f'_2(t_k, x_{i,j,k}) = \frac{d x_{i,j}}{d t} \quad (3.58)$$

$$f'_3(t_k, x_{i,j,k}) = \frac{d x_{i,N+1}}{d t} \quad (3.59)$$

Assim sendo, a cada passo de integração calculam-se por quatro vezes as funções f e f' nas suas diversas formas f_1 , f_2 , f'_1 , f'_2 e f'_3 , obtendo-se a composição da fase líquida e o acúmulo molar de líquido no estágio j para o tempo " t_{pas} ". As variáveis, das quais estas funções são dependentes, devem ser atualizadas pelo cálculo de equilíbrio líquido-vapor ou pelas equações que definem os fluxos molares de vapor (3.43) e de líquido (3.51). Conseqüentemente, também pelo cálculo do equilíbrio e dos fluxos molares, determinam-se a composição da fase vapor e a temperatura dos estágios referentes.

3.7 - ESCOLHA DO PASSO DE INTEGRAÇÃO

Para resolução do sistema de equações diferenciais envolvidas na modelagem da coluna, pelo método de Runge-Kutta, depara-se com o problema da escolha do passo de integração, que é

responsável pela precisão dos cálculos e pelo tempo computacional envolvido na simulação.

Para se ter um exemplo de como encontrar um passo ótimo de integração, estudou-se a destilação em batelada de 100 moles de uma mistura composta de 40% de Metanol e 60% de Etanol, numa coluna de 7 pratos. Neste estudo, a vazão de refluxo L_0 foi fixa em 60% do valor do fluxo molar de vapor V_1 que deixa o prato superior da coluna, ou seja, uma razão de refluxo R de valor 1.5 já que esta é definida como a razão entre L_0 e a vazão de destilado D , cuja soma é dada por V_1 .

Notou-se, pela análise dos resultados desta simulação, que as variáveis de maior interesse, as frações molares no destilado (figura 3.4), não eram muito afetadas com a mudança de passo efetuada de 0,06 para 0,07 minutos.

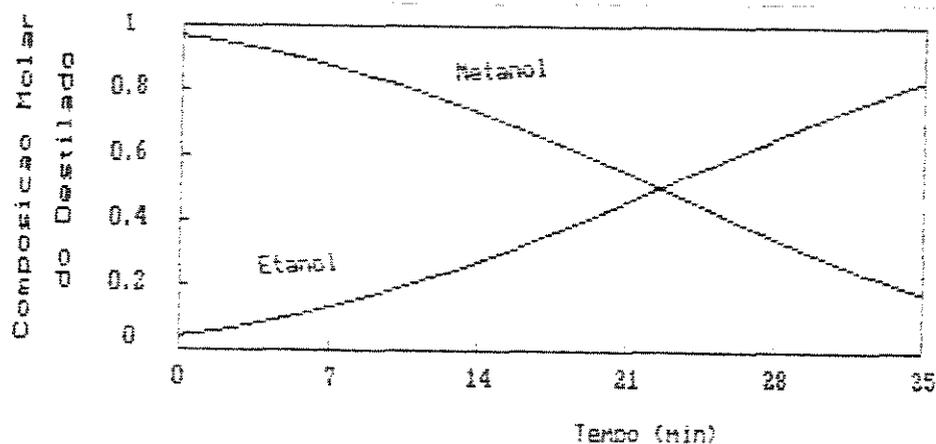


FIG. 3.4 - Composição do destilado para o sistema Metanol-Etanol.

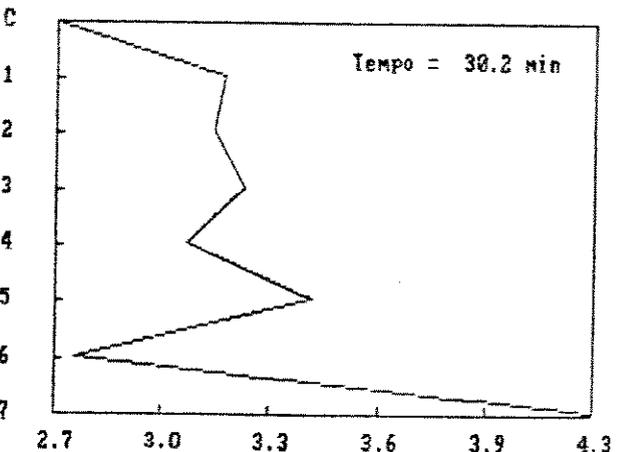
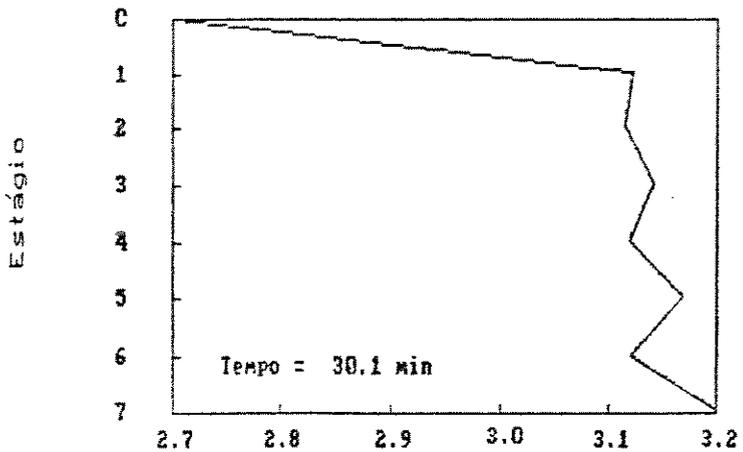
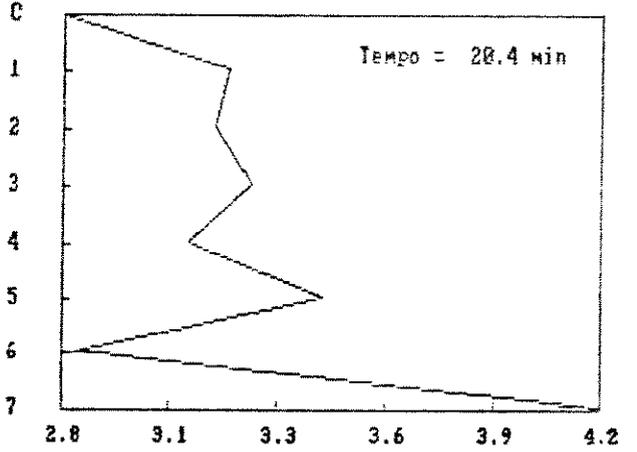
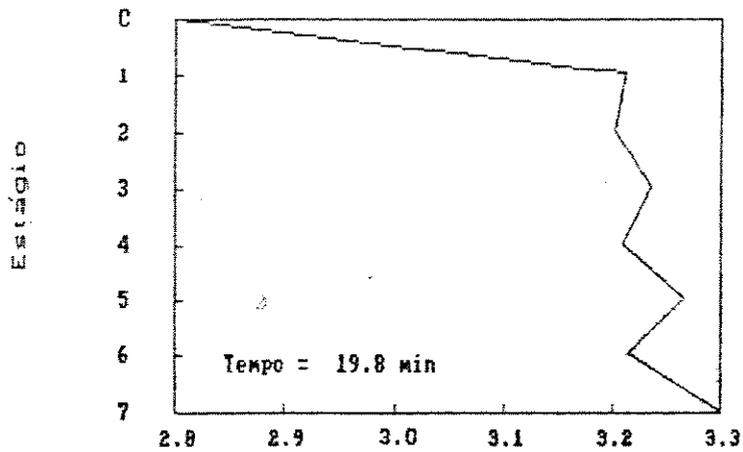
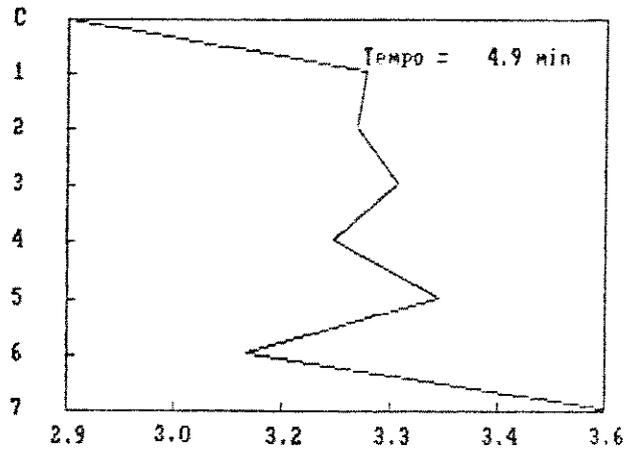
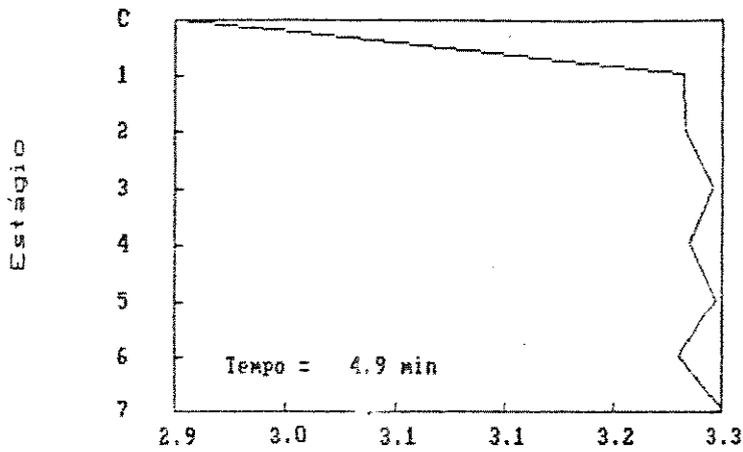
Entretanto, as figuras 3.5 ($\text{pas}=0,06$ min) e 3.6 ($\text{pas}=0,07$ min) mostram que, para o passo menor, o perfil de vazões

molares de líquido na coluna se situa numa estreita faixa de valores, enquanto que para o passo maior esta faixa se amplia cada vez mais com o passar do tempo, tornando bastante discrepantes os valores da vazão para pratos subsequentes. Pode-se notar ainda que este fato ocorre principalmente nos pratos inferiores, onde foram observados tempos de residência de líquido menores, ou seja, quanto mais o valor do passo se aproxima do tempo de residência de líquido no prato, maior é o erro proveniente do método de integração.

Verificou-se ainda que, para passos maiores que 0,07 minutos, este fato se agravou, indicando que um pequeno aumento no passo alteraria consideravelmente a precisão dos cálculos e poderia conduzir à divergência do método.

Portanto, para este sistema estudado, encontrou-se como passo ótimo de integração o valor correspondente a 0,07 minutos. Porém, este resultado não pode ser generalizado, já que mudanças nos principais parâmetros físicos e químicos como volatilidade relativa dos compostos envolvidos, número de pratos da coluna, acúmulo de líquido nos pratos e no condensador, carga molar no refulvedor e taxa de calor fornecido ao mesmo podem fazer variar consideravelmente o valor ótimo encontrado.

Deste modo, para cada sistema em estudo, é importante que se encontre o passo ótimo de integração, a fim de se atingir a precisão desejada para os resultados, dentro do menor tempo computacional possível.



Vazão de Líquido (moles/min)

Vazão de Líquido (moles/min)

FIG. 3.5 - Simulação do sistema Metanol-Etanol (passo=0,06 min).

FIG. 3.6 - Simulação do sistema Metanol-Etanol (passo=0,07 min).

3.8 - ANÁLISE DE DESEMPENHO DO PROGRAMA DE SIMULAÇÃO

Dois exemplos foram escolhidos para ilustrar o desempenho do algoritmo proposto e a versatilidade do mesmo. Para que se pudesse medir a precisão dos resultados obtidos destas simulações, o primeiro exemplo foi baseado no mesmo conjunto de dados apresentado por Domenech e Enjalbert [35] na realização de alguns testes experimentais para comparação com resultados de suas simulações.

São relatados dois ensaios para o mesmo sistema Ciclo-hexano - Tolueno, destilado em batelada numa coluna de 4 pratos, com geometria tal que o acúmulo de líquido em cada prato se aproximasse de 2,5 moles. A eficiência de separação para cada estágio foi fixa em 75%, a pressão de operação em 1 atm, a quantidade de calor fornecida ao refulvedor em 42000 cal/min e a carga inicial do mesmo em 200 moles, sendo 55% de Ciclo-hexano no ensaio A (razão de refluxo $R = 4$) e 30% no ensaio B ($R = 5$).

Os resultados obtidos por Domenech e Enjalbert [35], para o ensaio A, estão representados pela figura 3.7 e os obtidos a partir de nossa simulação pela figura 3.8.

Para que melhor se visualize a grandeza das diferenças numéricas ocorridas, colocam-se estes resultados em forma de tabela (tab. 1), com apresentação do desvio relativo encontrado entre os dados experimentais da literatura e nossa simulação.

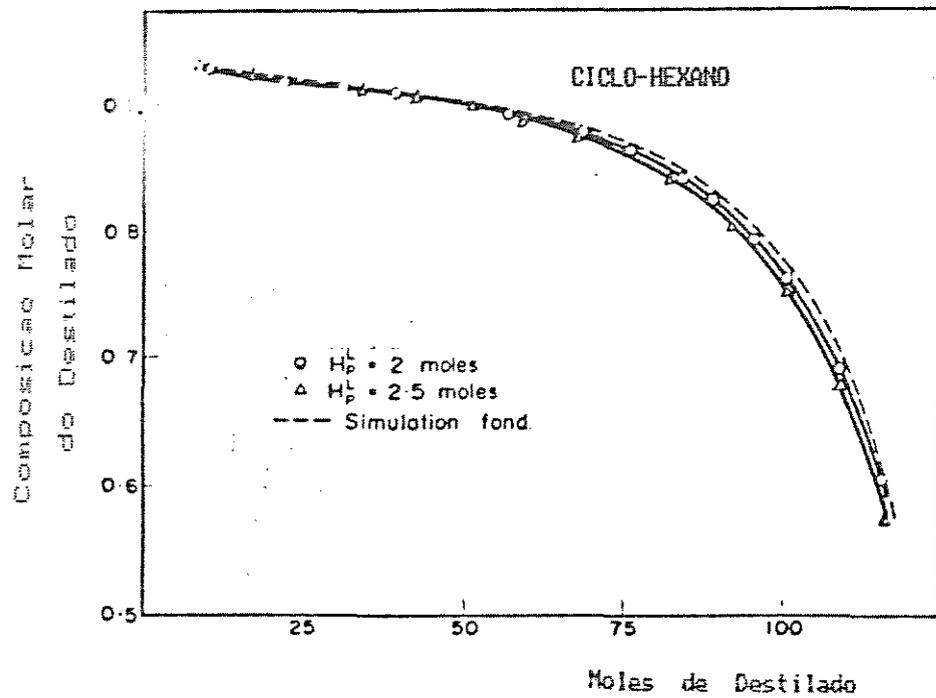


FIG. 3.7 - Resultados obtidos por Domenech e Enjalbert para o sistema Ciclo-hexano - Tolueno Censaio A).

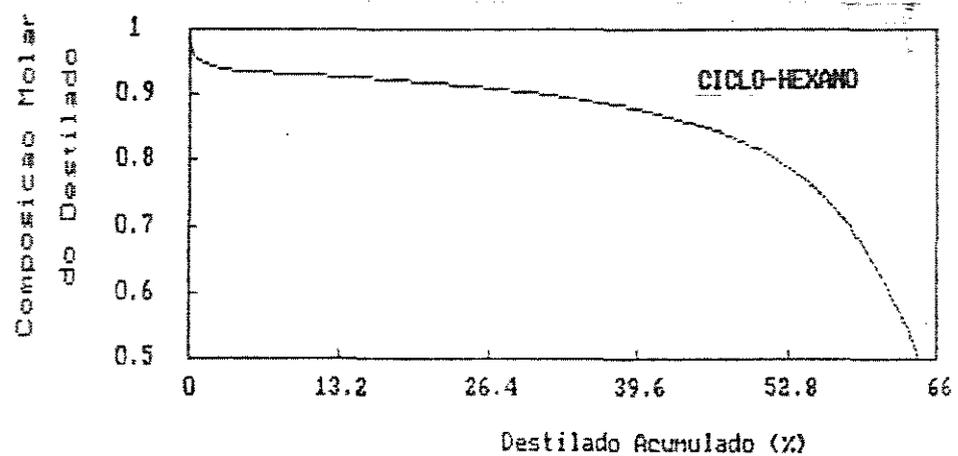


FIG. 3.8 - Resultados da simulação do sistema Ciclo-hexano - Tolueno Censaio A).

Destilado acumulado		Fração molar de Ciclohexano no destilado		Desvio Relativo (%)
Moles	(%)	Experim.	Simulação	
7,5	4,0	0,93	0,93	0,0
16,3	8,6	0,92	0,93	1,1
33,8	17,8	0,91	0,92	1,1
42,5	22,4	0,91	0,91	0,0
51,3	27,0	0,90	0,91	1,1
58,8	31,0	0,88	0,90	2,3
68,8	36,3	0,88	0,89	1,1
83,1	43,8	0,84	0,86	2,4
93,8	49,4	0,80	0,82	2,5
101,3	53,4	0,75	0,78	4,0
110,0	58,0	0,68	0,70	2,9
117,5	62,0	0,57	0,59	3,5

Tabela 3.1 - Comparação dos resultados da simulação com resultados experimentais de literatura (Ensaio A).

Do mesmo modo que para o ensaio A, são apresentados os resultados experimentais na figura 3.9 e os simulados na figura 3.10 para o ensaio B e os desvios relativos na tabela 3.2.

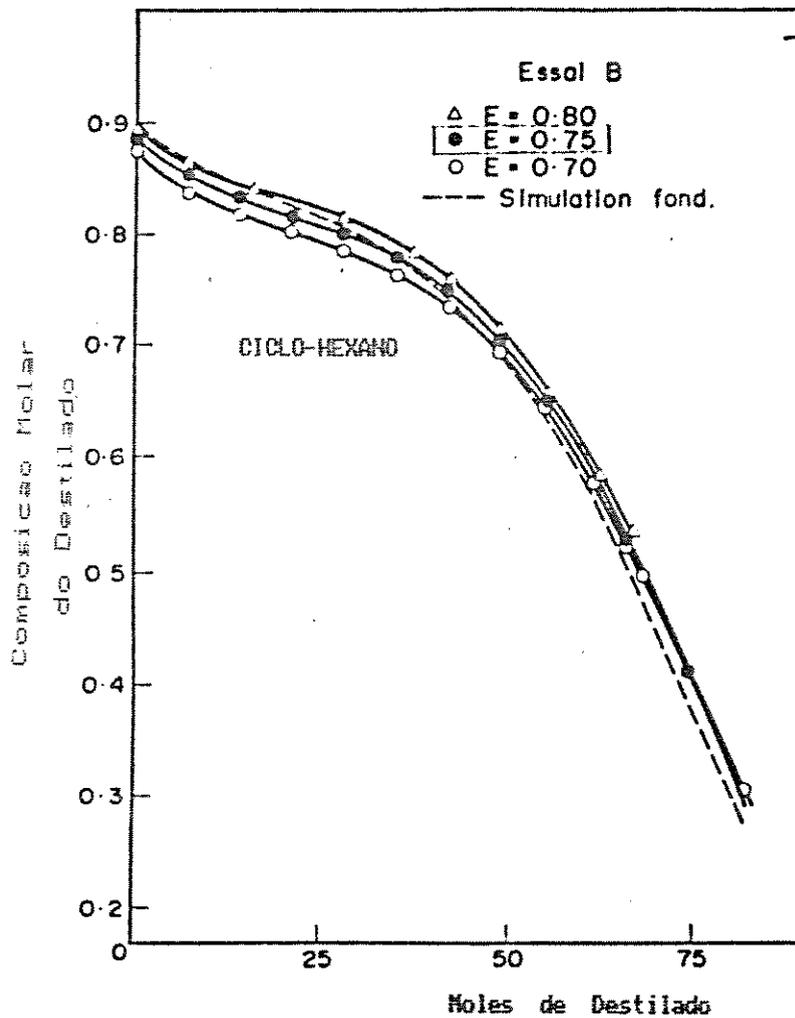


FIG. 3.9 - Resultados obtidos por Domenech e Enjalbert para o sistema Ciclo-hexano - Tolueno (ensaio B).

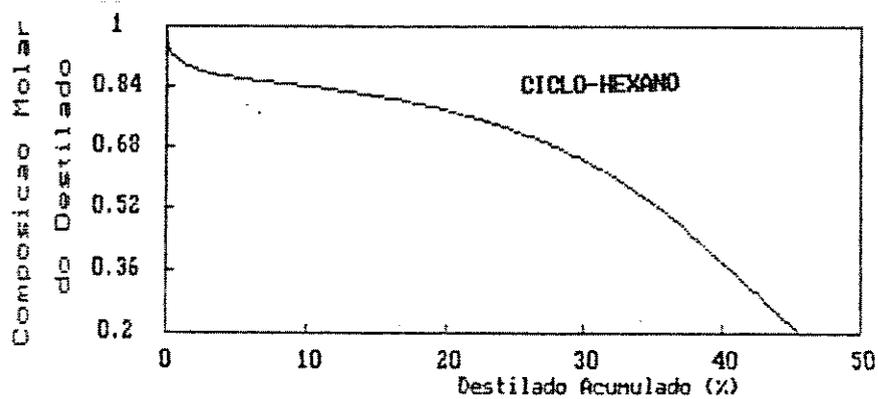


FIG. 3.10 - Resultados da simulação do sistema Ciclo-hexano - Tolueno (ensaio B).

Destilado acumulado		Fração molar de Ciclohexano no destilado		Desvio Relativo (%)
Moles	(%)	Experim.	Simulação	
0,0	0,0	0,89	0,95	6,7
6,9	3,6	0,86	0,87	1,2
13,7	7,2	0,84	0,85	1,2
21,1	11,1	0,82	0,83	1,2
27,5	14,5	0,80	0,81	1,3
34,8	18,4	0,78	0,79	1,3
41,7	22,0	0,75	0,75	0,0
48,5	25,6	0,70	0,71	1,4
55,4	29,2	0,65	0,65	0,0
66,2	34,9	0,53	0,53	0,0
74,5	39,3	0,41	0,40	- 2,4

Tabela 3.2 - Comparação dos resultados da simulação com resultados experimentais de literatura (Ensaio B).

Pode-se concluir, portanto, a partir dos dados das tabelas 3.1 e 3.2, que o sistema computacional aqui desenvolvido para simulação de uma coluna de destilação em batelada representa de maneira precisa a realidade, posto que o maior desvio relativo encontrado situa-se em torno de 7% , sendo este inteiramente aceitável para modelagens de sistemas envolvendo transferência de massa.

Para que se exemplifique também um sistema multicomponente, o segundo caso a ser apresentado se constitui no sistema ternário Metanol - Etanol - Água destilado em uma coluna de 7 pratos com eficiência de separação de 100 %. A carga inicial do refeedor é de 100 moles, dos quais 30 % são de Metanol, 60 % de Etanol e 10 % de água. O calor fornecido ao refeedor é mantido constante em 45500 cal/min e a razão de refluxo em 3.

Os resultados obtidos estão sob a forma de gráfico representados pela figura abaixo.

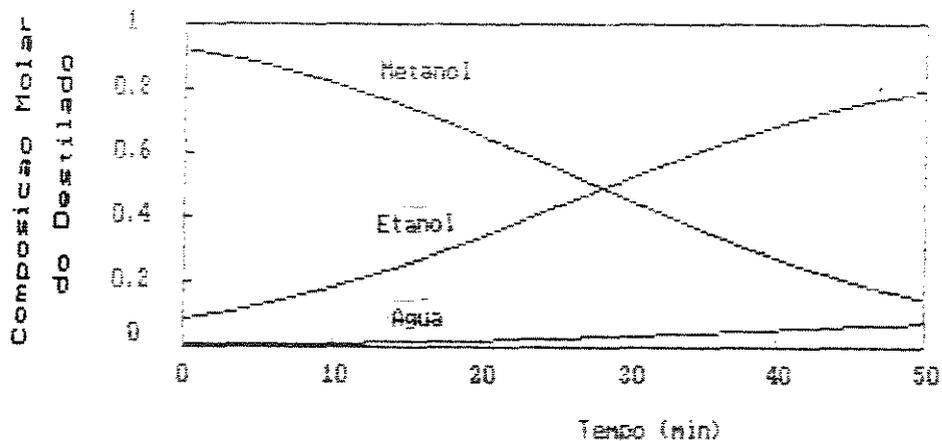


FIG. 3.11 - Resultados da simulação do sistema Metanol - Etanol - Água.

Provada, então, a capacidade do programa de simulação desenvolvido em reproduzir resultados experimentais, parte-se para a utilização do mesmo no projeto do sistema de controle.

4. CONTROLE EM DESTILAÇÃO BATELADA.

4.1 - INTRODUÇÃO

Como anteriormente definido ao longo do capítulo 2, o objetivo geral do controle em destilação batelada é a obtenção da maior quantidade de destilado de pureza média especificada em tempo mínimo.

Com este objetivo em mente e utilizando-se o programa de simulação desenvolvido, descrito no capítulo 3, poder-se-á analisar a resposta do processo em estudo quando submetido à estratégia de controle proposta neste trabalho, que consta inicialmente de uma otimização do processo e posterior implementação de técnicas de Controle Adaptativo.

Para que tal análise possa ser feita, e a estratégia proposta justificada, é necessário que este capítulo trate também da estimação dos parâmetros do processo ou caracterização do mesmo no decorrer da destilação em batelada.

4.2 - OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO

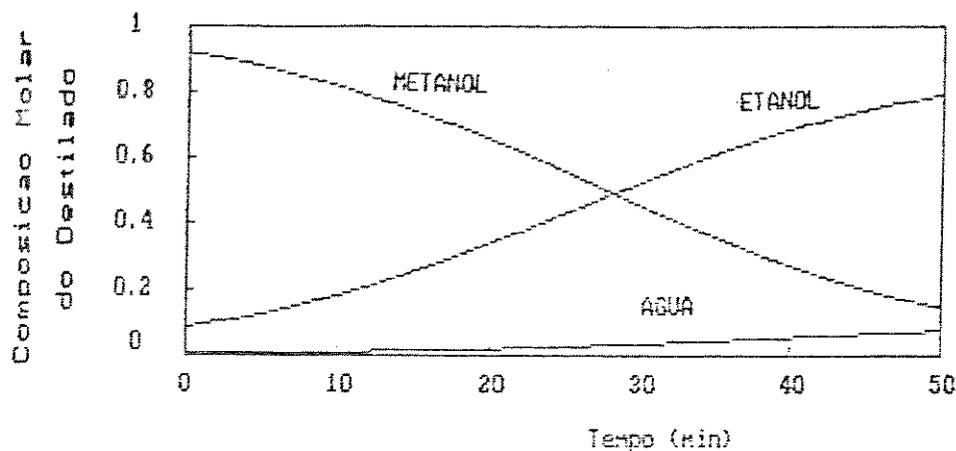
A função primordial de uma coluna de destilação, como dito anteriormente, é separar entre si dois ou mais compostos até um nível de pureza imposto pelas especificações de mercado, se os produtos obtidos já se destinam aos mesmos, ou pelo ambiente circundante à coluna, se os produtos por ela gerados se destinarem à alimentação de processos subsequentes.

A pureza final destes produtos, vista sob o enfoque da engenharia de controle, é função basicamente dos dois balanços aplicáveis, o balanço de massa e o de energia, representados aqui pelo programa de simulação desenvolvido.

Nota-se, através de simulações, que a manipulação das variáveis independentes do processo permite não só alterar a composição dos produtos obtidos mas, possibilita, também, a busca de um estado operacional que, analisado sob determinados critérios, possa ser considerado ótimo.

A fim de se fazer um estudo sobre estas condições ótimas de operação, é necessário que se estabeleçam algumas considerações a respeito do modo operacional de uma coluna em batelada. Como se sabe, existem duas maneiras clássicas de se conduzir uma destilação deste tipo: a razão de refluxo constante, com composição de topo variável, e a composição constante, com refluxo variável.

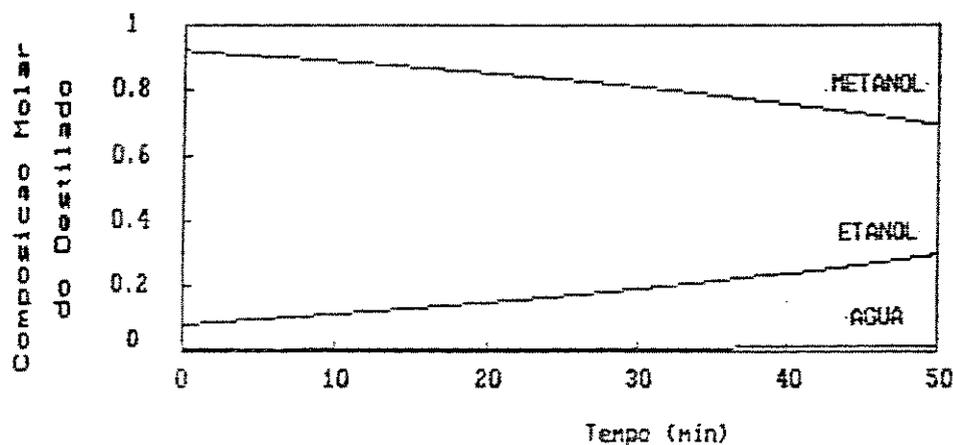
Quando se opera a razão de refluxo constante, se esta razão R entre a vazão que retorna à coluna L_0 e o fluxo de destilado D assumir um valor baixo, significa que um tempo menor será necessário para o fim da batelada, compensando a má separação obtida. De maneira adversa, se o valor de R for alto, a separação melhora porém o tempo da batelada aumenta. Para se ilustrar este fato, fez-se a simulação do sistema ternário descrito no final do capítulo 3, para uma razão de refluxo baixa (figura 4.1) e para uma razão de refluxo alta (figura 4.2).



Tempo total da batelada : 50 minutos

Metanol recuperado dentro de especificação : 68 %

FIG. 4.1 - Sistema Metanol-Etanol-Água com $R = 3$.



Tempo total da batelada : 120 minutos

Metanol recuperado dentro de especificação : 74 %

FIG. 4.2 - Sistema Metanol-Etanol-Água com $R = 9$.

Por outro lado, se o objetivo for manter a composição do destilado fixa, a razão ou vazão de refluxo deve seguir um planejamento ideal para que isto ocorra. Este segundo modo de operação tem elevada importância e, se não é o mais comum, é devido às dificuldades de operação e controle encontrados. Portanto, o esforço principal deste trabalho ficará concentrado em facilitar este tipo específico de operação.

Deve-se notar que, para a destilação em coluna contínua, se as condições de projeto do equipamento permanecerem inalteradas, fixando-se a razão de refluxo, a composição do topo não se altera. Enquanto isso, numa coluna descontínua, devido ao comportamento essencialmente transitório dos processos em batelada, tem-se uma mudança constante na composição do refeedor à medida em que o produto de topo vai sendo coletado.

Para que se encontre então este planejamento ideal, a destilação em batelada será considerada como uma sucessão de estados estacionários de uma coluna contínua.

Tomando-se como exemplo o sistema binário Metanol(1)-Etanol(2) sendo destilado em uma coluna contínua de 7 pratos, com aquecimento constante no refeedor de 48000 cal/min, e com pureza desejada de 90% de Metanol no topo, vê-se pela figura 4.3 que a vazão de refluxo pode ser facilmente relacionada com a composição molar do refeedor através de equações lineares.

Assim sendo, através desta série de simulações de uma coluna contínua, variando-se apenas a composição molar do

refervedor, encontram-se, a partir de regressões lineares, as seguintes equações específicas para este sistema:

$$L_o = 5,0970 - 3,5141 x_{1,N+1} \quad x_{1,N+1} < 0,1573 \quad (4.1)$$

$$L_o = 5,9029 - 8,6371 x_{1,N+1} \quad x_{1,N+1} \geq 0,1573 \quad (4.2)$$

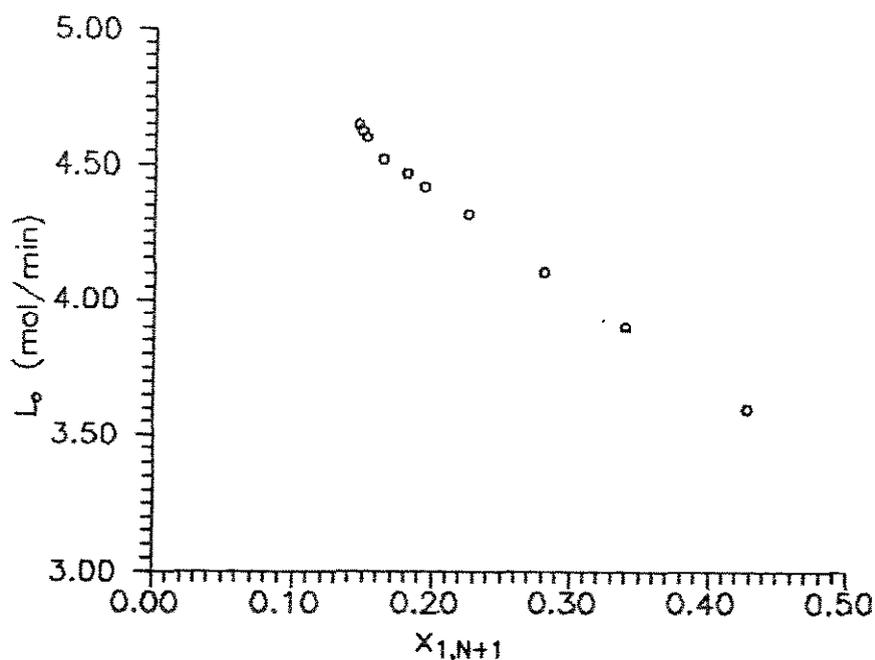


FIG. 4.3 - Variação da vazão de refluxo em função da composição do fervedor para o sistema Metanol-Etanol.

Conhecendo-se, então, a dependência da vazão de refluxo com a composição do fervedor, obtém-se, a partir de medidas desta composição, o planejamento necessário (fig. 4.4) para se garantir a pureza desejada no topo da coluna descontínua (fig. 4.5), desde que não ocorra nenhum distúrbio nas condições operacionais do sistema e enquanto houver Metanol na mesma.

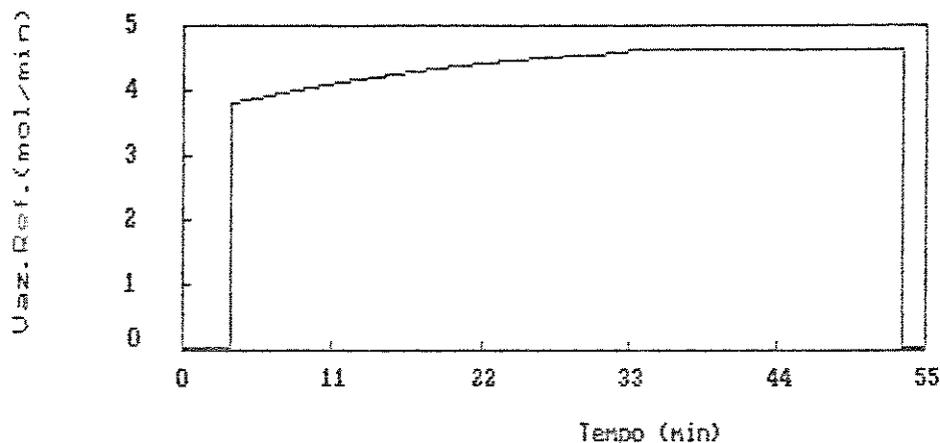
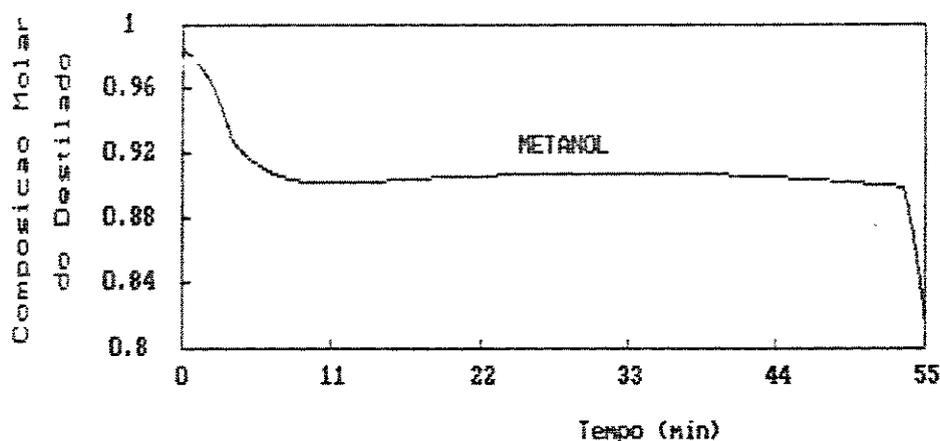


FIG. 4.4 - Variação da vazão de refluxo para que a fração molar de Metanol no topo se mantenha em 0,9.



Tempo total da batelada : 57.90 minutos

Metanol recuperado dentro de especificação : 62.29 %

FIG. 4.5 - Resultado encontrado da implementação do planejamento da vazão de refluxo para o sistema Metanol-Etanol.

Definidas as duas maneiras convencionais de operação da coluna em batelada, deve-se notar que nenhuma otimização foi imposta ainda ao sistema.

É claro que segurança e obtenção de produtos dentro de especificação devem ser os dois principais objetivos de uma planta química ou de uma operação unitária dentro da mesma. Uma vez encontrados estes objetivos, a próxima meta é tornar a operação da planta ou do equipamento mais lucrativa. Se estes forem contínuos, devido às mudanças indesejadas das condições que afetam a operação (como o fenômeno da incrustação em trocadores de calor) deve-se ser capaz de manipular algumas variáveis operacionais do processo de maneira que o lucro seja sempre maximizado.

Já nas operações em batelada, as mudanças são constantes e intrínsecas ao processo. No caso particular em estudo, a destilação, verificou-se que a composição do refeedor varia constantemente com a retirada de produto no topo. Encontra-se, então, específica para cada sistema a destilar, uma função que relacione a vazão de refluxo com a composição do refeedor para tornar a composição do destilado constante. Porém, à medida em que a fração molar do componente mais volátil vai diminuindo no refeedor, a vazão de refluxo aumenta e, conseqüentemente, um tempo maior será necessário para que se destile todo o carregamento inicial. Apesar de assim se obter a maior quantidade possível de produto dentro de especificação, isto implica num

gasto maior de energia e daí surge a questão da lucratividade: será que este dispendioso gasto de energia não tira os méritos da grande quantidade de produto dentro de especificação obtida ?

Para que se pudesse responder a esta pergunta, fez-se um estudo particular para o mesmo sistema Metanol-Etanol anteriormente citado.

A proposta é de que ao invés de se efetuarem mudanças contínuas na vazão de refluxo com a aplicação a cada instante das equações 4.1 e 4.2, se faça apenas a aplicação destas de tempos em tempos, de modo que se obtenha não uma composição de destilado fixa no valor desejado, mas sim uma composição com pequena variação em torno deste valor médio, ou seja, uma combinação dos dois modos de operação, como sugerido por trabalhos recentes descritos no capítulo 2.

Efetuaram-se várias simulações, nas quais as correções da vazão de refluxo pelas equações 4.1 e 4.2 foram feitas em diferentes intervalos de tempo Δt e das quais procurou-se observar o gasto de energia e a quantidade de Metanol obtido acima de especificação. Considerando-se um preço hipotético para o Metanol com 90% de pureza de Cr\$200,00 por litro e para a energia elétrica de Cr\$30,00 por kW.h, e impondo-se que o lucro seja apenas a diferença entre o valor total obtido do Metanol vendido e o valor total do gasto de energia na destilação e que somente o componente mais volátil tenha valor comercial, relacionam-se os resultados na tabela 4.1.

Δt (min)	Metanol obtido		Energia gasta		Lucro (Cr\$)
	(l)	(Cr\$)	(kW.h)	(Cr\$)	
0,05	1,512	302,40	3,230	96,90	205,50
0,50	1,511	302,20	3,174	95,22	206,98
1,00	1,510	302,00	3,108	93,24	208,76
1,50	1,510	302,00	3,046	91,38	210,62
2,00	1,508	301,60	2,960	88,80	212,80
2,50	1,432	286,40	2,890	86,70	199,70
3,00	1,352	270,40	2,790	83,70	186,70
4,00	1,213	242,60	2,589	77,67	164,93
5,00	1,036	207,20	2,218	66,54	140,66

Tab. 4.1 - Resultados de simulações para otimização do sistema Metanol-Etanol.

Observando-se a tabela acima, nota-se que o lucro passa por um valor máximo quando o ajuste da vazão de refluxo é feito de dois em dois minutos (fig. 4.6). Portanto, esta maneira operacional permitirá que se encontre um estado ótimo, já que, sob o critério adotado, este estado é tal que maximize os lucros obtidos no processo.

Aplicando-se esta proposta de otimização na simulação do mesmo sistema Metanol-Etanol e não havendo nenhum distúrbio nas condições nominais do processo, obtém-se os resultados representados na figura 4.7.

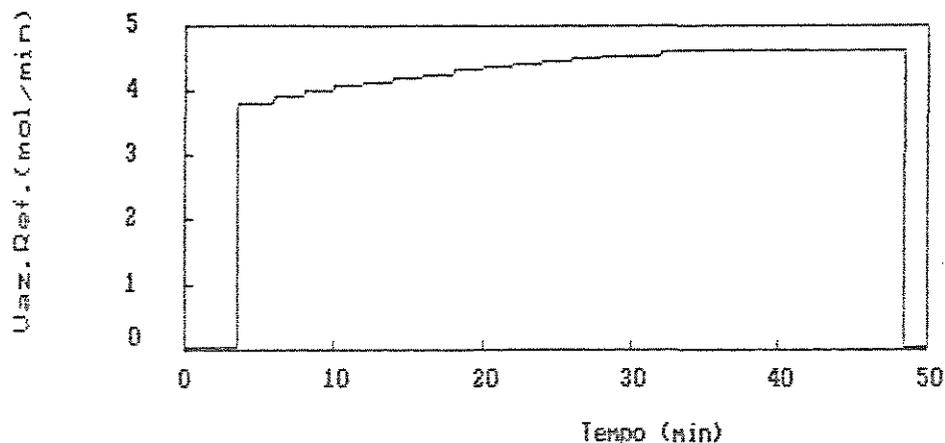
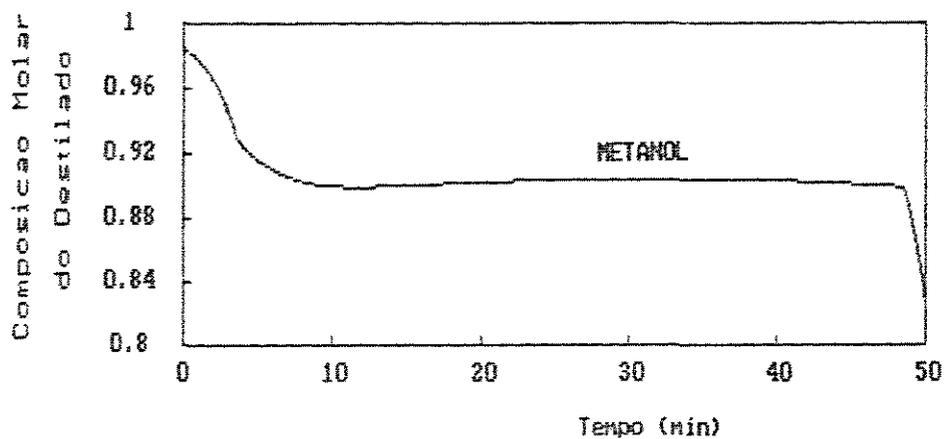


FIG. 4.6 - Variação da vazão de refluxo para que a fração molar de Metanol no destilado seja de 0,9 , segundo critérios de otimização.



Tempo total da batelada : 59,05 minutos

Metanol recuperado dentro de especificação : 62,05 %

Lucro : Cr\$ 212,80

FIG. 4.7 - Resultado obtido da implementação do planejamento ótimo da vazão de refluxo para o sistema Metanol-Etanol.

4.3 - OPÇÕES DE CONTROLE

A primeira questão que poderia surgir no começo deste item é "por que utilizar sistemas de controle mais complexos se os resultados obtidos do planejamento ótimo da vazão de refluxo foram tão satisfatórios?". A resposta é simples: porque o sistema está operando em malha aberta, ou seja, não há correções para qualquer distúrbio que possa ocorrer na prática, provocando certamente um desvio na variável de interesse.

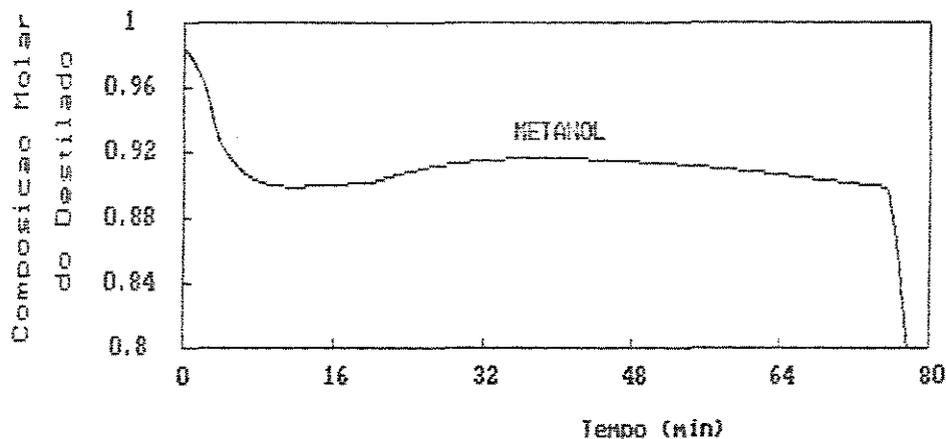
Isto pode ser facilmente verificado através da comparação das figuras 4.7 e 4.8, obtidas da simulação do sistema Metanol-Etanol com aplicação do planejamento ótimo da vazão de refluxo, porém, estando a última submetida a uma perturbação na quantidade de calor fornecida ao retervedor Q_r , que passa de 48000 a 40000 cal/min no instante em que a destilação ultrapassa os 20 minutos.

Nota-se, portanto, que o planejamento ótimo perdera o sentido já que fora programado para a destilação com calor fixo no retervedor de 48000 cal/min, havendo perdas nos lucros apesar do aumento da pureza do Metanol obtido.

Provada então a necessidade de se operar em malha fechada, a segunda questão que poderia surgir é "por que o uso de controlador adaptativo?".

Deve-se esclarecer, em primeiro lugar, que o controle proposto no presente trabalho é do tipo monovariável (SISO) e por

retro-alimentação ("feedback"), onde a variável controlada é a composição do destilado e a manipulada é a vazão de refluxo, apenas acrescido de um mecanismo de ajuste dos parâmetros do mesmo.



Tempo total da batelada : 81,10 minutos

Metanol recuperado dentro de especificação : 62,62 %

Lucro : Cr\$ 185,63

FIG. 4.8 - Resultado de uma perturbação em degrau em Q_r na destilação do sistema Metanol-Etanol sob planejamento ótimo.

A explicação provém do simples fato do controlador convencional, com parâmetros constantes, ser sintonizado para obtenção de um bom desempenho ao redor de um determinado estado estacionário. Como então utilizar estes parâmetros fixos em um controlador aplicado a um sistema totalmente transitório (ver item 4.5) como a destilação em batelada ?

Poder-se-á verificar, entretanto, no item 4.4 que trata da caracterização do processo, em qualquer instante da destilação em batelada, geralmente se tem um pequeno tempo morto, o que possibilita também o uso de controladores "Bang-bang". Estes controladores nada mais são do que simples controladores proporcionais com um ganho suficientemente alto para que o atuador opere sempre em seus valores limites, ou seja, no caso de uma válvula, esta se encontrará totalmente aberta ou totalmente fechada.

Porém, sendo este tipo de controlador bastante primitivo, normalmente causa um desgaste muito rápido do atuador. Entretanto, sua implementação foi simulada e apresentada nas figuras 4.9 e 4.10, onde se pode notar as variações bruscas da variável manipulada.

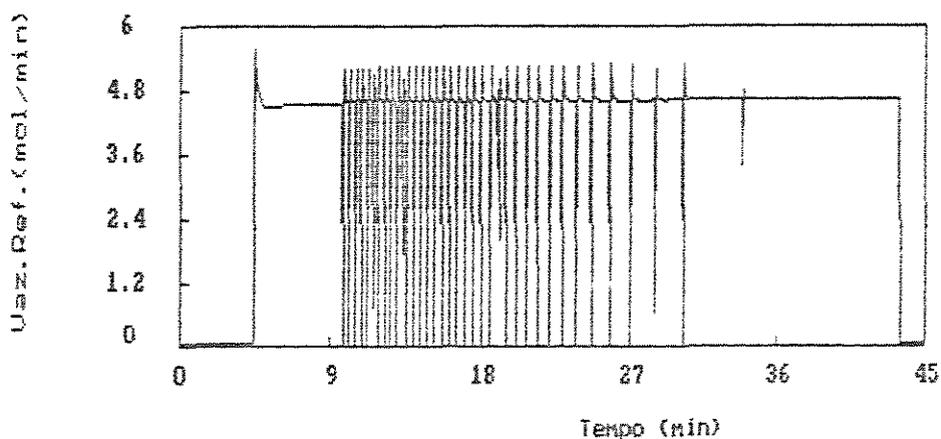
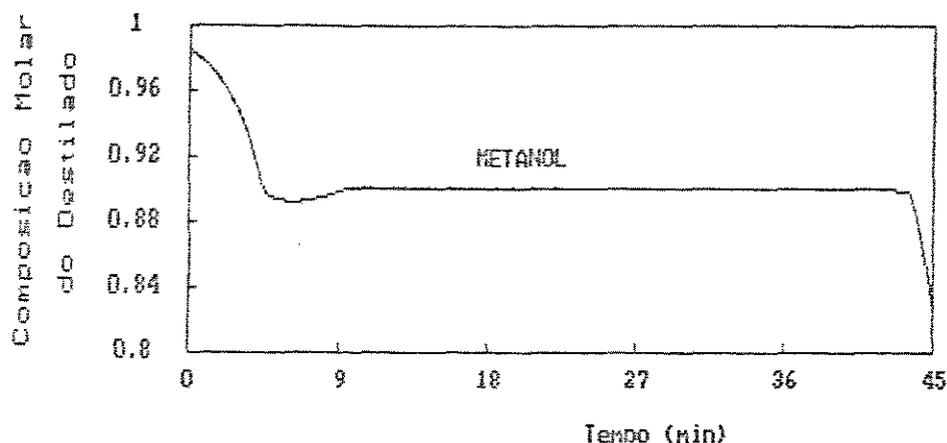


FIG. 4.9 - Comportamento da vazão de refluxo para o sistema Metanol-Etanol submetido a um controlador "Bang-bang".



Tempo total da batelada : 48.10 minutos

Metanol recuperado dentro de especificação : 60.71 %

Lucro : Cr\$ 214,54

Fig. 4.10- Variação da composição do destilado sob controle "Bang-bang" (sistema Metanol-Etanol com $K_c=300000$).

Sendo o controlador "Bang-bang" a única alternativa para o controle adaptativo no caso em estudo, deve-se descartar esta proposta rudimentar, já que um mau funcionamento do elemento final de controle põe a perder todo o sistema implementado com o objetivo de controlar um equipamento qualquer.

Visto que são muitas as facilidades hoje encontradas para a implementação de controle por computador, onde a adaptação do controlador é facilmente executada, deve-se partir, sem receios, para técnicas recentes de controle.

4.4 - CARACTERIZAÇÃO DO PROCESSO

Escolhido o uso do controlador adaptativo, parte-se então para o reconhecimento do processo, ou seja, a estimação de seus parâmetros para o estabelecimento das funções de transferência da coluna e posterior mecanismo de ajuste do controlador. Assim como no item 4.2, considera-se aqui a destilação em batelada como uma sequência de destilações contínuas para que se possa utilizar o Método da Curva de Reação do Processo, desenvolvido por Cohen e Coon [36], para cada intervalo estacionário.

Considerando o sistema de controle por retro-alimentação, para cada estado pseudo-estacionário, representado pela figura 4.11, onde o controlador fora desconectado do elemento final de controle, introduz-se uma variação em degrau, de amplitude A , à saída do controlador e observa-se o comportamento da variável controlada fração molar de Metanol no destilado $x_{1,0}$ em relação ao tempo (fig. 4.12), ou seja, a curva de reação do processo.

Cohen e Coon [36] observaram que a resposta da maioria dos processos químicos a esta variação em degrau tomava uma forma sigmoidal, que poderia ser adequadamente aproximada pela resposta de um sistema de primeira ordem com tempo morto, aproximação esta que se utilizará para representar a resposta de cada intervalo pseudo-estacionário da destilação em batelada.

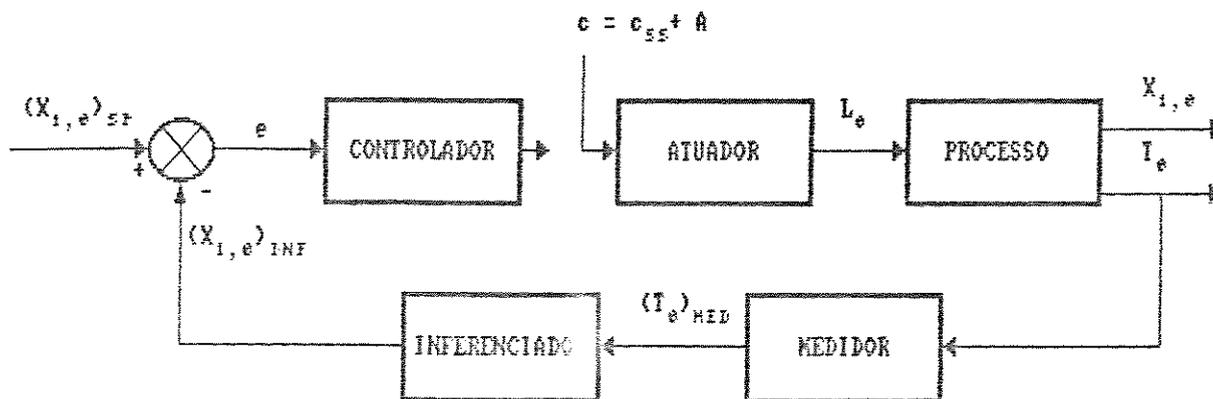


FIG. 4.11- Sistema de controle para destilação estacionária com controlador desconectado do atuador para determinação da curva de reação do processo.

Como no programa de simulação desenvolvido não se considerou a dinâmica do atuador, do medidor e do inferenciador, a função de transferência em malha aberta obtida da figura 4.12 é a do processo propriamente dita e, no domínio de Laplace, pode ser representada por:

$$G_p(s) = \frac{K_p e^{-t_d s}}{\tau_p s + 1} \quad (4.3)$$

- onde
- $K_p = B/A =$ ganho estático do processo;
 - $\tau_p = B/S =$ constante de tempo do processo;
 - $S =$ inclinação da curva de reação no ponto de inflexão;
 - $t_d =$ tempo morto do processo.

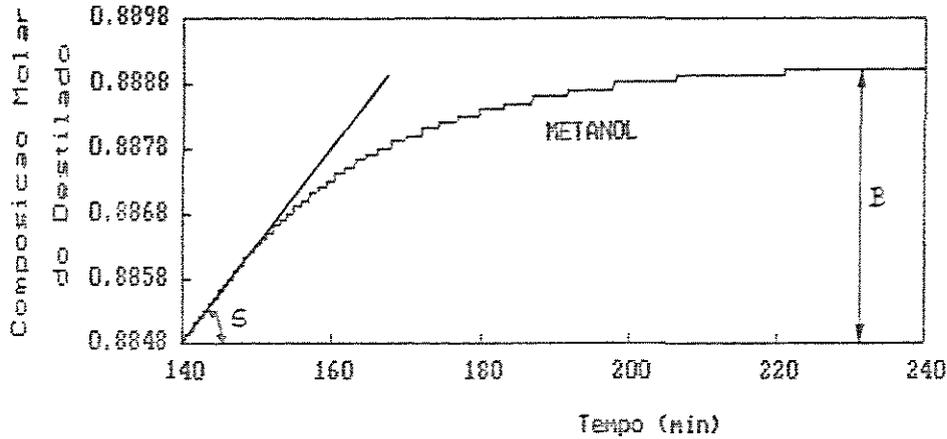


FIG. 4.12- Curva de Reação do processo de destilação contínua para o sistema Metanol-Etanol quando $x_{1,8} = 0,267$.

Os resultados encontrados das simulações para o sistema Metanol-Etanol, submetido à perturbação em degrau de amplitude 0,02 mol/min na variável manipulada vazão de refluxo L_0 , estão relacionados na tabela 4.2. Deve-se lembrar que a coluna possui 7 pratos e, portanto, $x_{1,8}$ se refere à fração molar de Metanol no refeedor que é de 60% na carga.

Deste modo, caracterizou-se o processo e todas suas variações no decorrer da destilação em batelada, tornando possível a elaboração de um mecanismo especial de ajuste do controlador para o sistema em estudo, através de medidas da temperatura do refeedor e inferenciação da composição molar do mesmo.

Apesar de ter sido estudado um sistema particular, este procedimento pode ser facilmente aplicado à qualquer outra mistura, inclusive em sistemas multicomponentes com composição

especificada para mais de um de seus componentes, sendo a variável controlada a fração molar do destilado do componente mais volátil presente no refeedor.

$x_{1,e}$	K_p (min/mol)	τ_p (min)	t_d (min)
0.428	0.1100	24.1838	1.1729
0.412	0.1450	22.5525	0.7989
0.397	0.1550	23.1857	0.6629
0.362	0.1800	23.8656	0.6119
0.330	0.1900	25.0623	0.4420
0.309	0.2050	25.5076	0.4080
0.293	0.2100	25.7038	0.3910
0.267	0.2150	27.5755	0.4590
0.252	0.2250	27.3842	0.2967
0.242	0.2200	28.2640	0.3570
0.225	0.2300	28.5171	0.4250
0.214	0.2250	28.2132	0.2890
0.200	0.2400	28.9651	0.3914
0.186	0.2350	29.1744	0.3740
0.163	0.2650	30.5351	0.3050
0.153	0.2500	29.5345	0.2890

Tab. 4.2 - Variação dos parâmetros do processo de destilação em batelada do sistema Metanol(1)-Etanol(2).

4.5 - ANÁLISE DA CONTROLABILIDADE DO PROCESSO

Feita a caracterização do processo através de simulações, nota-se a constante transformação dos parâmetros que descrevem o mesmo. Esta transitoriedade certamente afeta todo o projeto do sistema de controle e, portanto, é conveniente que se faça um estudo sobre a controlabilidade do processo.

Para cumprir este objetivo, utiliza-se o conceito de Índice de Controlabilidade, α , que é a relação entre o tempo morto t_d e a constante de tempo τ_p de um processo de primeira ordem. Sabe-se que o tempo morto é a principal fonte de efeitos desestabilizadores em sistemas de controle de processos químicos e, assim sendo, quanto mais este se aproxima da constante de tempo do processo ou a ultrapassa ($\alpha \geq 1$), maior será a probabilidade do sistema se tornar instável em malha fechada. Nestes casos, o ajuste correto do controlador se torna uma ferramenta crucial para o bom desempenho do mesmo.

Utilizando-se, mais uma vez, o sistema binário Metanol(1)-Etanol(2) para exemplificar, parte-se da tabela 4.2 para a análise de α e obtém-se a curva representada pela figura 4.13. Observa-se que o sistema torna-se menos susceptível às instabilidades à medida em que o componente mais volátil (1) vai ficando escasso no reservador ($x_{1,0} \rightarrow 0$) e, portanto, a região mais crítica é a do começo da batelada, quando realmente se têm grandes vazões de destilado e menores constantes de tempo para o

processo, o que implica que o sistema muda rapidamente diante de qualquer perturbação que possa ocorrer.

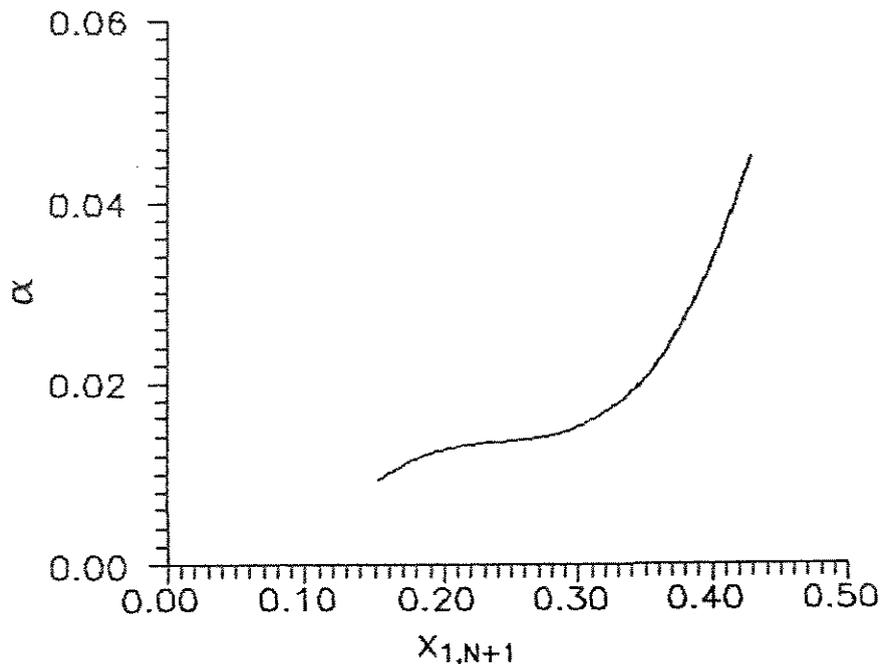


FIG. 4.13- Variação do índice de controlabilidade para o sistema Metanol-Etanol.

Para confirmar este estudo feito em malha aberta, fez-se também a análise em malha fechada, considerando-se o controlador do tipo proporcional, através de técnicas de Resposta em Frequência. Para isto, utiliza-se o Critério de Estabilidade de Bode que diz que uma malha de controle por retro-alimentação, cuja função de transferência em malha aberta seja dada pela equação (4.4), poderá tornar-se instável se houver uma frequência de cruzamento ω_c tal que a defasagem ϕ entre as ondas de entrada (perturbação senoidal no ponto de ajuste) e de saída

(comportamento da variável controlada) atinja -180° e, se, neste instante, a razão AR entre as amplitudes destas ondas for maior que a unidade.

$$G_{MA}(s) = \frac{K e^{-t_d s}}{\tau_p s + 1} \quad (4.4)$$

sendo K = ganho da malha = $K_p K_c$;

K_c = ganho do controlador (mol/min).

Sabendo-se que o sistema torna-se oscilatório, com oscilações constantes, em malha fechada quando s for um número imaginário puro e utilizando-se números complexos, nota-se que AR é dada pelo módulo de $G_{MA}(s)$ quando s for o número imaginário puro $j\omega$ e ϕ é o argumento de $G_{MA}(j\omega)$. Portanto, para uma função de transferência em malha aberta representada pela equação 4.4, tem-se que:

$$AR = |G_{MA}(j\omega)| = \frac{K}{\sqrt{1 + (\omega \tau_p)^2}} \quad (4.5)$$

e

$$\phi = \angle G_{MA}(j\omega) = -\frac{t_d \omega 180}{\pi} - \arctg(\omega \tau_p) \quad (4.6)$$

onde ω é a frequência da onda senoidal de perturbação em rad/min.

Substituindo-se, então, o valor crítico de $\phi = -180^\circ$ na equação (4.6), obtém-se a frequência de cruzamento resolvendo-se iterativamente a seguinte equação:

$$180 = \frac{t_d \omega_c}{\pi} + \arctg(\omega_c \tau_p) \quad (4.7)$$

Para este valor de ω_c , se a razão de amplitude AR for maior que a unidade o sistema será instável. Portanto, pode-se encontrar um valor limite para K fazendo-se AR igual à unidade na equação (4.5):

$$K_{lim} = \sqrt{1 + (\omega_c \tau_p)^2} \quad (4.8)$$

Como K representa o ganho da malha dado pela multiplicação dos ganhos do processo K_p e do controlador K_c , pode-se encontrar um ganho limite para o controlador proporcional considerado, já que se conhece K_p (tab. 4.2).

$$K_{c_{lim}} = \frac{K_{lim}}{K_p} \quad (4.9)$$

Substituindo-se os valores de τ_p e t_d da tabela 4.2, na equação (4.7), obtém-se os valores de ω_c para os diferentes intervalos pseudo-estacionários da destilação em batelada do sistema Metanol-Etanol e o que se observa é que o sistema atinge a

defasagem de -180° para valores de frequência menores na perturbação senoidal quando do início da batelada, ou seja, confirma-se que os instantes críticos são os iniciais. Estes valores de ω_c são utilizados para o cálculo do ganho limite do controlador e ambos estão relacionados na tabela 4.3.

$x_{1.8}$	ω_c (rad/min)	K_{lim}	Kc_{lim} (mol/min)
0,428	1,3651	33,0284	300,2586
0,412	1,9940	44,9814	310,2169
0,397	2,3967	55,5788	358,5727
0,362	2,5935	61,9031	343,9059
0,330	3,5791	89,7050	472,1317
0,309	3,8748	98,8416	482,1542
0,293	4,0420	103,8995	494,7596
0,267	3,4451	95,0069	441,8925
0,252	5,3174	145,6154	647,1794
0,242	4,4224	124,9987	568,1759
0,225	3,7182	106,0365	461,0281
0,214	5,4578	153,9839	684,3730
0,200	4,0351	116,8824	487,0099
0,186	4,2217	123,1696	524,1259
0,163	5,1541	157,3837	593,9008
0,153	5,4568	161,1655	644,6621

Tab.4.3 - Análise da resposta em frequência para o sistema Metanol-Etanol.

Portanto, para esta região crítica, os limites do ganho do controlador são mais baixos (tab. 4.3) e têm que ser respeitados para que o sistema de controle não atinja a instabilidade.

4.6 - CONTROLE ADAPTATIVO

Adaptativo é o nome que se dá ao sistema de controle que ajusta seus parâmetros automaticamente, de maneira a compensar as variações das características do processo a ser controlado.

Como dito no capítulo 2, a maioria dos processos químicos não são lineares e os modelos linearizados que são usados para o projeto dos controladores lineares dependem fortemente do estado estacionário em torno do qual o processo foi linearizado. É óbvio, portanto, que se este estado estacionário muda, alteram-se também os valores mais adequados para os parâmetros do controlador. Além disso, muitos processos químicos são intrinsecamente transientes, isto é, suas características mudam com o passar do tempo e causam um desempenho ruim do controlador linear. Estes são os motivos que levaram ao uso do controlador adaptativo para a destilação batelada.

Vários tipos de sistemas de controle adaptativo existem e estes diferem entre si apenas pela maneira com que os parâmetros do controlador são ajustados. Nota-se que, do modo que se fez a caracterização do processo, pode-se dizer que o processo fica

sendo bem conhecido em função da variável auxiliar fração molar do componente mais volátil no refeedor. Conseqüentemente, medindo-se o valor desta variável auxiliar no decorrer do processo, pode-se esquematizar ou programar a adaptação dos parâmetros do controlador. Isto implica no uso do Controle Adaptativo Programável, mostrado no diagrama de blocos representado na figura 4.14.

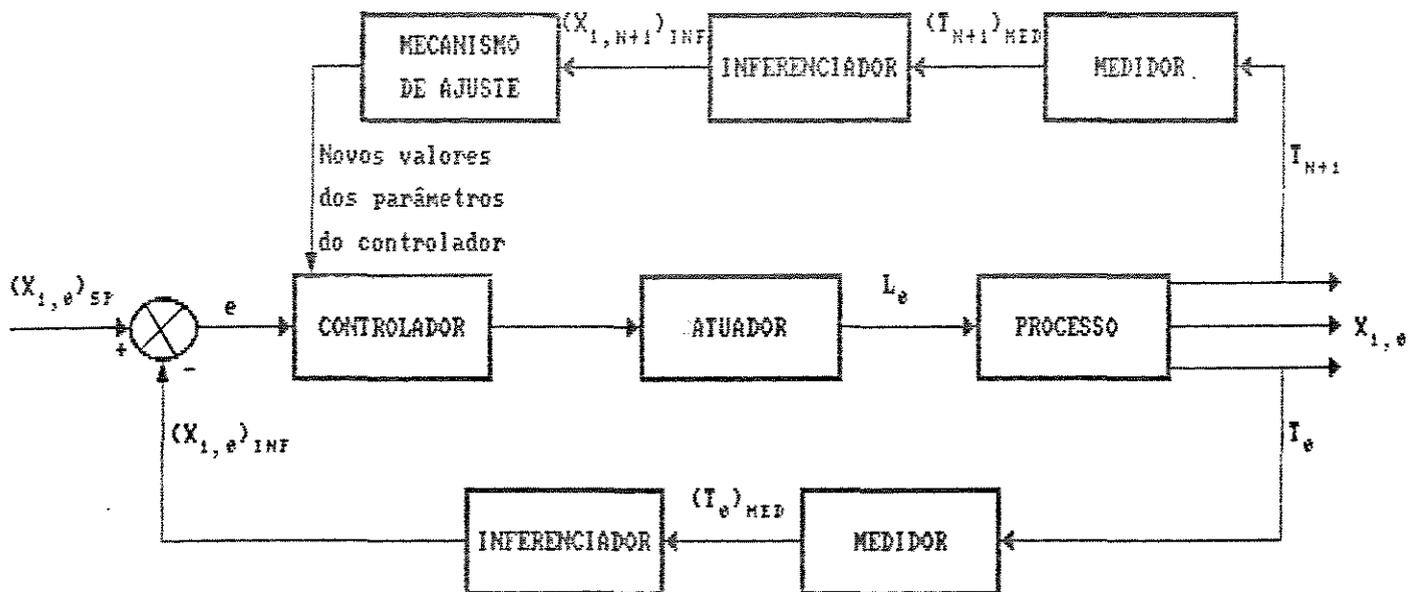


FIG. 4.14- Sistema de Controle Adaptativo Programável aplicado à destilação em batelada.

Nota-se que este tipo de controle adaptativo é composto de duas malhas. A malha interna é uma malha comum de controle por retro-alimentação e a externa inclui o mecanismo de ajuste dos parâmetros do controlador, sendo comparável ao controle antecipativo.

Como já mencionado anteriormente, no simulador proposto negligenciou-se a dinâmica do atuador, dos medidores e inferenciadores e, portanto, será dada atenção exclusiva ao controlador e ao mecanismo de ajuste do mesmo.

4.7 - ESCOLHA DO TIPO DO CONTROLADOR

Antes de se optar por um critério ou outro para o ajuste do controlador, deve-se decidir que tipo de controlador por retro-alimentação será utilizado.

A recomendação encontrada na literatura [36,37] é que se use o controlador PID para processos lentos (τ_p grande) onde o índice de controlabilidade ultrapasse o valor de 0,25, ou seja, o tempo morto seja maior que um quarto da constante de tempo do processo. Se esta condição não ocorrer, o uso do controlador PI é o mais indicado para o controle de composição ou temperatura.

Verificando-se na figura 4.13 os valores do índice de controlabilidade, nota-se que estes não ultrapassam o valor limite de 0.25 e, portanto, optou-se pelo controlador PI. Para cada estado pseudo-estacionário tem-se, então, o controlador representado por:

$$L_o(t) = L_o(x_{1,N+1}) + K_c [e(t) + 1/\tau_i (\int_0^t e(t) dt)] \quad (4.10)$$

onde $L_o^{óximo}(x_{1,N+1})$ é obtido do procedimento de otimização e, no sistema estudado, é dado pela utilização das equações 4.1 e 4.2 em intervalos de tempo de dois minutos, τ_I é a constante de tempo integral e $e(t)$ a diferença entre o valor desejado da variável controlada $(x_{1,0})_{SP}$ e o valor da mesma variável inferenciada $(x_{1,0})_{INF}$.

Entretanto, como a proposta é o uso de um microcomputador acoplado ao sistema de destilação, utiliza-se uma aproximação digital deste controlador clássico:

$$(L_o)_{it} = (L_o)_{it}^{óximo} + Kc \left[e_{it} + \frac{t_a}{\tau_I} \sum_{k=0}^{it} e_k \right] \quad (4.11)$$

sendo t_a o tempo de amostragem do controlador digital e o subscrito it refere-se à iteração atual de controle.

4.8 - AJUSTE DOS PARÂMETROS DO CONTROLADOR

Uma vez escolhido o tipo do controlador a ser utilizado, parte-se para a resolução do problema da sintonização do mesmo. Como dito anteriormente, não haverá uma sintonização fixa, mas sim um mecanismo que permita a adaptação dos parâmetros diante das constantes variações do processo.

Fica claro, diante do diagrama de blocos da figura 4.14, que a variável-chave para o sistema proposto é a temperatura ou

composição do refervedor, ou seja, é ela quem vai descrever a situação atual do processo (tabela 4.2). O problema agora é escolher um critério que permita relacionar esta variável-chave com os mais adequados valores para os parâmetros do controlador. Para isto, primeiro utilizaram-se regras semi-empíricas comprovadas na prática por Cohen e Coon [36] baseadas nas curvas de reação do processo (item 4.4):

$$K_c = \frac{1}{K_p} \frac{\tau_p}{t_d} \left[0,9 + \frac{t_d}{12 \tau_p} \right] \quad (4.12)$$

$$\tau_I = t_d \frac{30 + 3 t_d / \tau_p}{9 + 20 t_d / \tau_p} \quad (4.13)$$

Com a aplicação destas equações aos dados da tabela 4.2 de caracterização do processo, consegue-se encontrar a dependência dos parâmetros do controlador com a variável auxiliar $x_{1,N+1}$, como se pode verificar nas figuras 4.15 e 4.16, de onde se obtêm os ajustes das curvas que serão implementadas no "Mecanismo de Ajuste" do diagrama da figura 4.14:

$$\tau_I = -4,379 + 67,823 x_{1,N+1} - 272,628 (x_{1,N+1})^2 + 364,04 (x_{1,N+1})^3 \quad (4.14)$$

$$K_c = - 649,629 x_{1,N+1} + 458,344 \quad (4.15)$$

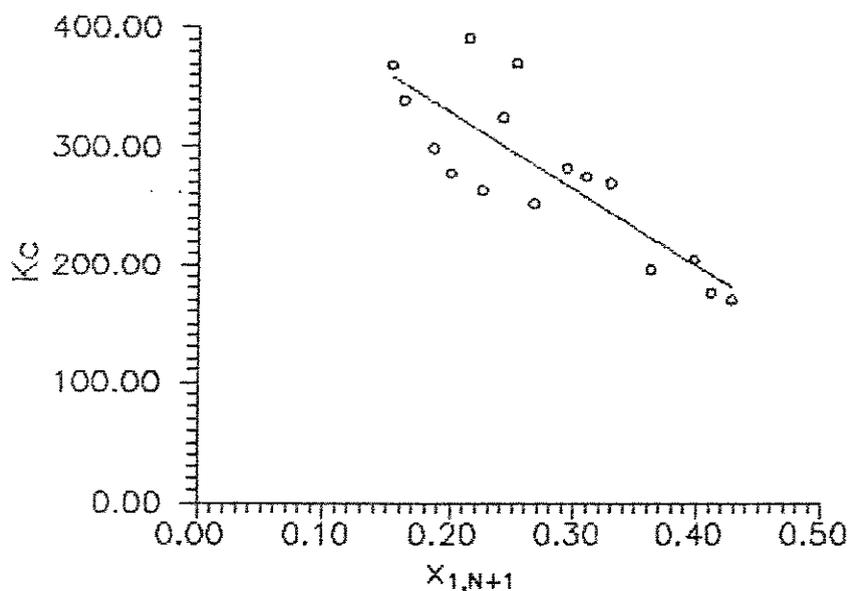


FIG. 4.15- Ajuste do ganho do controlador através das regras de Cohen e Coon.

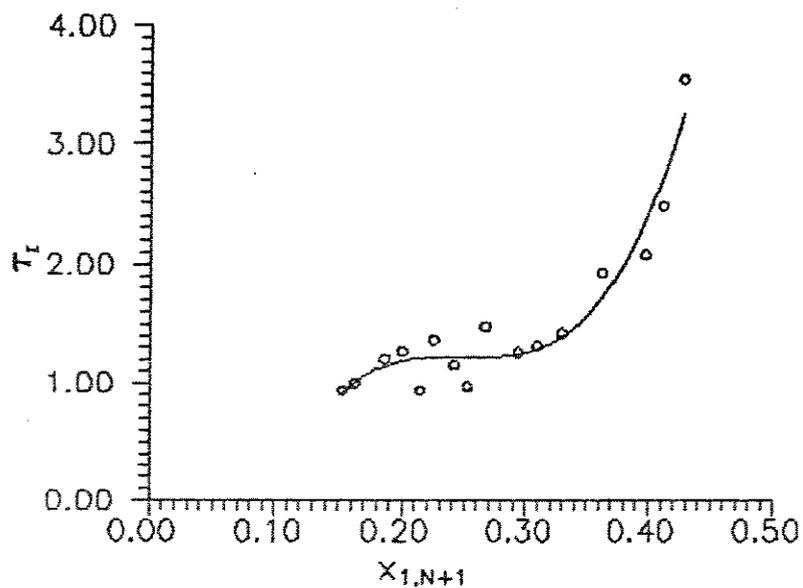


FIG. 4.16- Ajuste da constante de tempo integral do controlador através das regras de Cohen e Coon.

Em segundo lugar, aproveitou-se o estudo da controlabilidade do processo feito através da análise da resposta em frequência no item 4.5 e, utilizando-se dados do ganho limite do controlador e da frequência de cruzamento da tabela 4.3, aplicou-se um método de sintonização alternativo desenvolvido por Ziegler e Nichols [36]. Estes, através de inúmeras observações experimentais e usando alguns critérios fixos de desempenho, obtiveram as seguintes relações para o controlador PI :

$$K_c = \frac{K_{c_{lim}}}{2,2} \quad (4.16)$$

$$\tau_I = \frac{2 \pi}{\omega_c 1,2} \quad (4.17)$$

Estas equações foram então aplicadas ao sistema Metanol-Etanol, resultando num ajuste um pouco diferente para os parâmetros do controlador:

$$\tau_I = - 4,894 + 74,76 x_{1,N+1} - 301,475 (x_{1,N+1})^2 + 403,175 (x_{1,N+1})^3 \quad (4.18)$$

$$K_c = - 512,769 x_{1,N+1} + 364,068 \quad (4.19)$$

Estas equações de adaptação para o controlador, tanto pelo Método de Cohen e Coon quanto por Ziegler e Nichols foram implementadas no simulador juntamente com a lei de controle escolhida, podendo-se optar por qualquer um dos dois métodos.

4.9 - RESULTADOS DA IMPLEMENTAÇÃO DO CONTROLE

Como exemplo clássico adotou-se mais uma vez o sistema Metanol(1)-Etanol(2) destilado em coluna de 7 pratos com calor fornecido ao refulvedor de 48000 cal/min, sujeito a perturbações. A carga no refulvedor é de 100 moles da mistura de 60% de Metanol e o objetivo é a obtenção deste componente com pureza de 90% com maior margem de lucro possível.

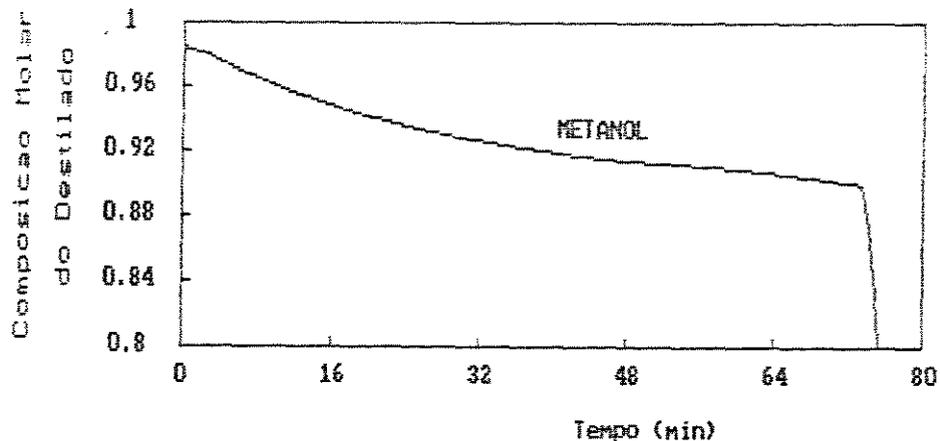
Para tanto, implementou-se no simulador o planejamento ótimo para a vazão de refluxo (variável manipulada), paralelamente ao sistema de controle adaptativo. Deste modo, pode-se notar alguns pequenos detalhes bastante relevantes a serem definidos:

- Em que instante deve-se iniciar o planejamento ótimo;
- No período transitório do começo da destilação, onde o sistema passa de refluxo total a refluxo controlado, a pureza do componente mais volátil no destilado será superior à desejada, podendo causar a saturação da componente integral do controlador. Deve-se prevenir este fato;
- Qual dos dois mecanismos de ajuste apresenta melhor resultado.

Estes três pontos, apesar de pequenos detalhes, são de crucial importância para o bom desempenho do sistema de controle.

Por exemplo, se se deseja testar apenas o planejamento ótimo, sem controle, não se pode esquecer que no início da batelada a destilação é conduzida com refluxo total até que encontre um estado estacionário onde são estabelecidos os acúmulos

de líquido nos pratos e as vazões ao longo da coluna. Depois de alcançado este estado, tem-se uma fase em que a destilação deve ter uma vazão de refluxo fixa até que atinja o valor de referência ("set-point") para a variável de interesse e, somente após este período, é que se deve iniciar a variação ótima do refluxo. Se isto não for levado em consideração, a fração molar do componente mais volátil pode não se fixar no valor desejado (comparar as figuras 4.7 e 4.17), elevando a pureza média obtida mas diminuindo, em muito, os lucros desde que esta pureza maior não seja o objetivo do equipamento.



Tempo total da batelada : 78.05 minutos

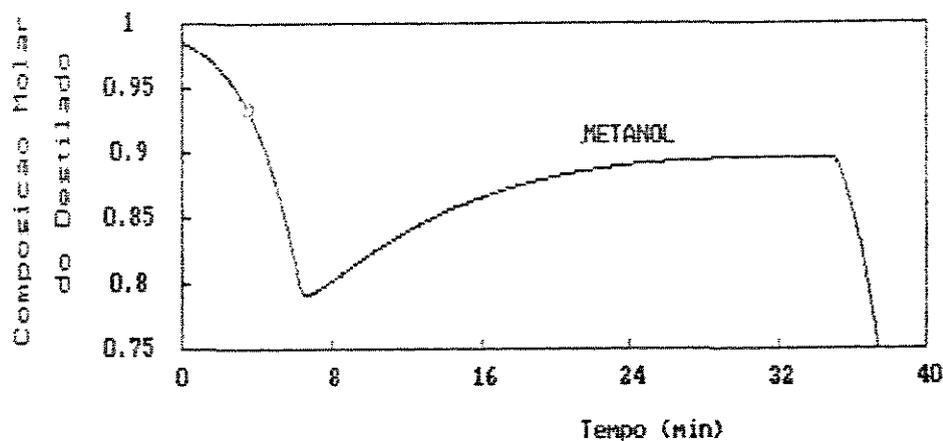
Metanol recuperado dentro de especificação : 62,40 %

Lucro : Cr\$ 172,63

FIG. 4.17- Resultado obtido da implementação do planejamento ótimo da vazão de refluxo desde o início da batelada.

Esta mudança pode ser considerada como uma perturbação e, mais uma vez, nota-se a insegurança de se operar em malha aberta, pois sob a ação de um controlador isto não ocorreria.

Quanto à segunda questão levantada, observa-se bem, através dos resultados obtidos da implementação do planejamento ótimo submetido à ação do controlador PI adaptativo (fig. 4.18), que o lucro está bem abaixo do esperado e o motivo pode ser visto na figura 4.19, onde nota-se a demora da variável manipulada para responder à queda sofrida pela variável controlada.



Tempo total da batelada : 39.33 minutos

Metanol recuperado dentro de especificação : 41,54 %

Lucro : Cr\$ 136.02

FIG. 4.18- Resultado da ação do controle adaptativo com saturação do termo integral.

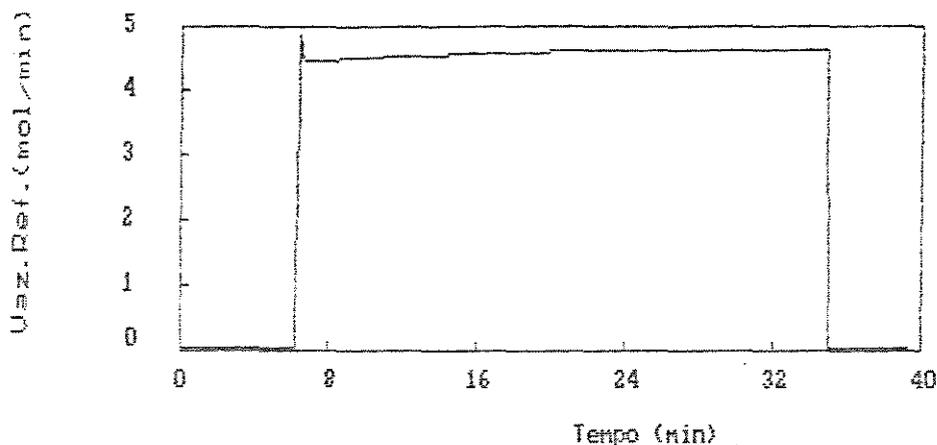
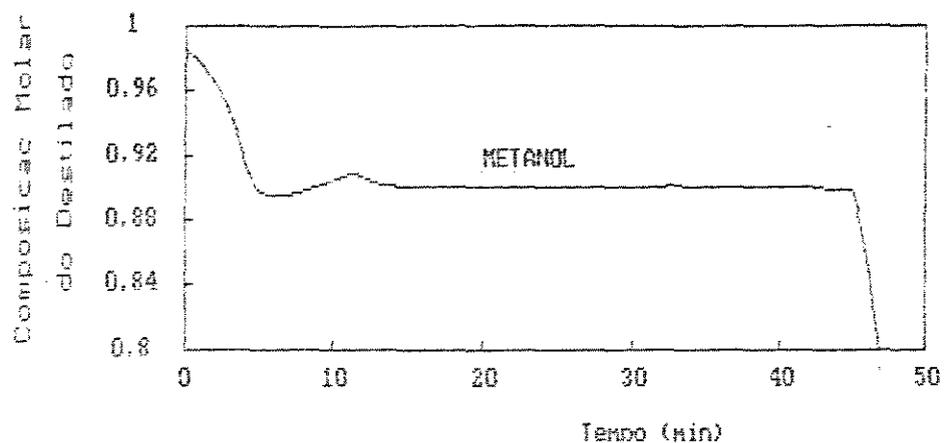


FIG. 4.19 - Variação da variável manipulada do sistema de controle ocorrendo saturação integral.

Este fato pode ser explicado pelos grandes erros negativos do início da destilação que são somados no termo integral do controlador. Enquanto esta significativa soma negativa não for compensada por grandes erros positivos, o controlador continua enviando sinais para que a variável manipulada permaneça em seu limite mínimo, ou seja, ocorre a saturação do termo integral.

A maneira mais prática de se evitar a ocorrência desta saturação inicial é começar a integração somente quando o erro estiver em torno de 1%. Na figura 4.20 pode-se verificar o bom resultado desta proposta em contrapartida à figura 4.18.

Confirmando realmente que o problema estava na integração, a figura 4.21 mostra que, deste último modo, o controlador responde rapidamente à mudança de sinal do erro.



Tempo total da batelada : 49,55 minutos

Metanol recuperado dentro de especificação : 60,98 %

Lucro : Cr\$ 212,95

FIG. 4.20 - Resultado da implementação do controle adaptativo com prevenção para saturação do termo integral do controlador.

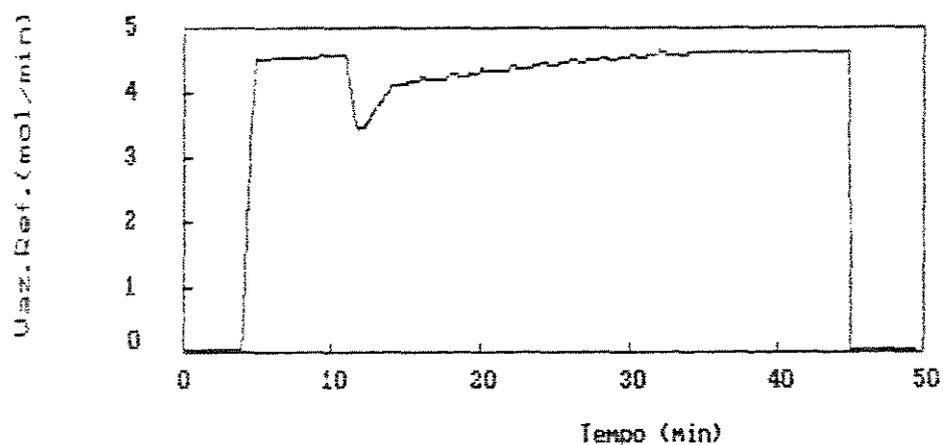
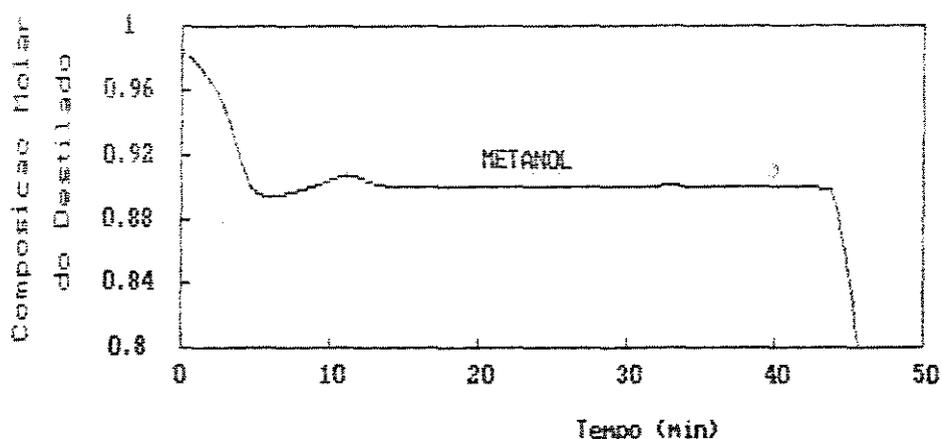


FIG. 4.21 - Variação da variável manipulada do sistema de controle com prevenção de saturação.

Resolvidos, então, estes dois pontos, parte-se para a escolha do mecanismo de ajuste mais adequado para o sistema em estudo. Esta escolha será feita através da análise dos resultados do uso de cada um deles.

Na figura 4.20, o ajuste utilizado foi o de Cohen e Coon e, na 4.22, o de Ziegler e Nichols. Pode-se notar que, apesar das equações de ajuste destes dois métodos resultarem bem parecidas, o método de Ziegler e Nichols foi o que teve melhor desempenho, resultando num aumento de um ponto percentual nos lucros.



Tempo total da batelada : 48,40 minutos

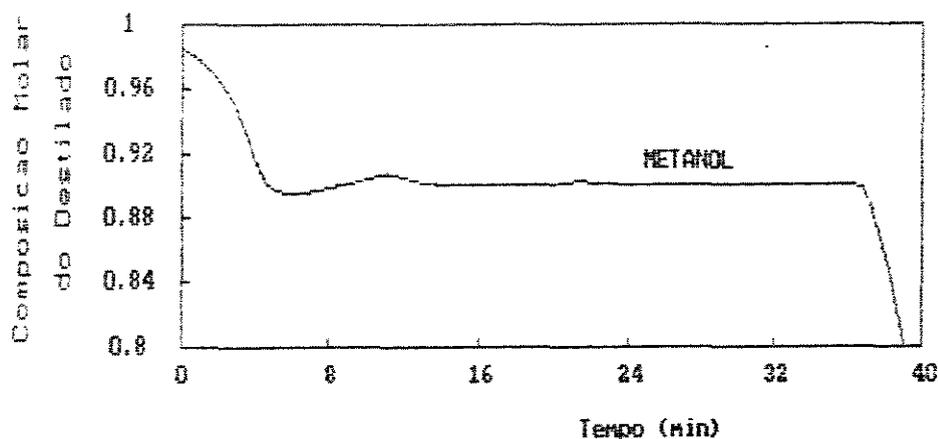
Metanol obtido dentro de especificação : 60,87 %

Lucro : 214,82

FIG. 4.22- Resultado da implementação do controle adaptativo com prevenção para saturação e mecanismo de ajuste de Ziegler e Nichols.

Ainda dentro deste item de resultados da implementação, deve ser mostrada a reação do sistema de controle diante de perturbações que não a perturbação sofrida inicialmente.

Com este objetivo, foi provocada uma perturbação em degrau na quantidade de calor fornecida ao refulvedor, que passa de 48000 a 40000 cal/min no instante de tempo 20 minutos. Esta mesma perturbação fora provocada no sistema submetido apenas ao planejamento ótimo (figura 4.8) e, portanto, pode-se notar a diferença entre as operações em malha aberta e fechada comparando-se esta figura à figura 4.23 abaixo.



Tempo total da batelada : 42,75 minutos

Metanol obtido dentro de especificação : 59,28 %

Lucro : Cr\$ 228.28

FIG. 4.23- Resultado de uma perturbação em degrau em Q_r sob a ação do controlador.

Nota-se, então, que a variável controlada praticamente não sofre mudanças com esta alteração. Isto ocorre porque o sistema de controle responde adequadamente à perturbação, diminuindo a vazão de refluxo (figura 4.24). Esta diminuição era realmente a esperada, já que a queda no calor do refeedor faz com que uma menor quantidade de componentes menos voláteis seja conduzida ao topo da coluna e, portanto, uma menor vazão de refluxo é requerida para enriquecer a fração molar do componente mais volátil.

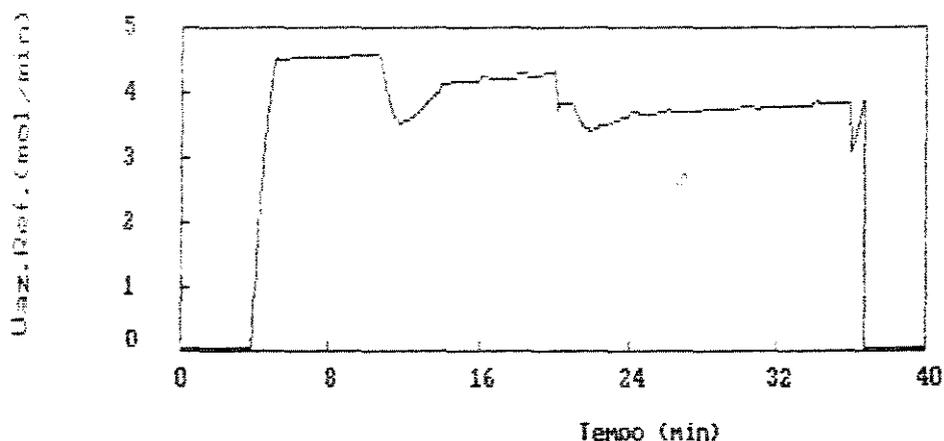
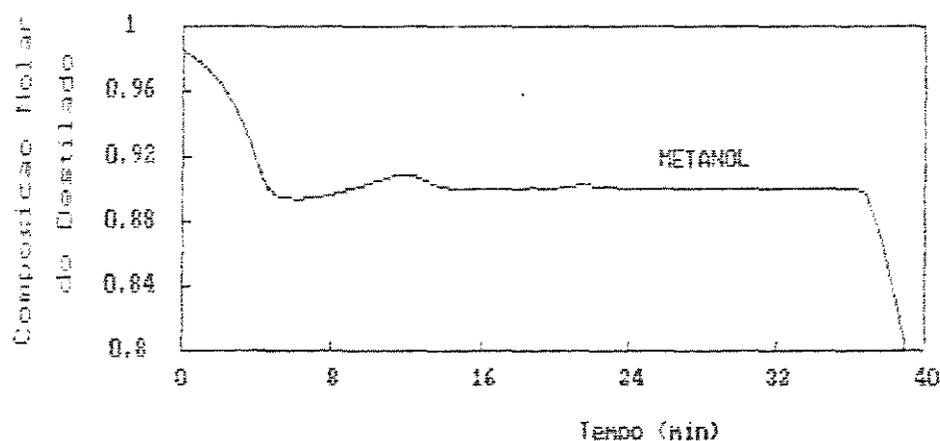


FIG. 4.24- Comportamento da variável manipulada frente a uma perturbação em degrau em Q_r .

Deve-se chamar atenção, em última análise, para o fato de que na simulação é possível fazer com que o controlador atue em intervalos de tempo da ordem do passo de integração ($\cong 3$ segundos), porém, este tempo de atuação e amostragem é bastante pequeno quando se refere ao controle por microcomputador acoplado

ao equipamento real. Assim, seguindo-se conselhos práticos de técnicas de controle em tempo real, aumentou-se este tempo para 12 segundos e os resultados são apresentados na figura 4.25.



Tempo total da batelada : 42,00 minutos

Metanol recuperado dentro de especificação : 59,21 %

Lucro : Cr\$ 222,21

FIG. 4.25 - Resultado de uma perturbação em degrau em Q_r sob a ação do controlador atuando a cada 12 segundos.

Confirma-se, então, que o controlador é robusto também nestas condições e que a estratégia proposta para o controle de colunas em batelada tem fundamentos, já que foram apresentados bons resultados para o exemplo em questão.

5. CONCLUSÕES FINAIS

Embora diversas conclusões e comentários tenham sido efetuados paralelamente à obtenção dos resultados nos capítulos anteriores, achou-se por bem fazer uma síntese destes resultados com a finalidade de facilitar a análise crítica global dos mesmos.

Um estudo completo de uma coluna de destilação em batelada convencional, para o desenvolvimento de um simulador, foi realizado ao longo do capítulo 3 e a comparação dos resultados obtidos por este simulador e dados de literatura provou coerência entre os mesmos apesar das hipóteses simplificadoras consideradas.

Além disto, no capítulo 4, quando se caracterizou o processo, verificou-se que todas as complexidades esperadas, como atrasos de transporte e constantes de tempo e ganhos variáveis, se manifestaram na dinâmica da coluna, comprovando a eficiência do simulador desenvolvido quando operado sob condições adequadas do passo de integração utilizado no método numérico aplicado na resolução das equações do modelo.

Pode-se verificar, entretanto, que a primeira e, talvez, a mais importante dificuldade relativa ao projeto do sistema de controle proposto foi apresentada pela estimação adequada dos parâmetros do processo. Esta tarefa, aqui sugerida de maneira "off-line", exigiu bastante tempo e esforço computacional já que para cada estado pseudo-estacionário da destilação em batelada fez-se a simulação de uma coluna contínua imposta às mesmas condições de geometria e operação da primeira naquele instante.

Apesar da facilidade de cálculos após o resultado destas simulações, uma sugestão para trabalhos futuros seria fazer a atualização do processo "on-line" em resposta a perturbações no processo com conseqüente alteração dos parâmetros.

Porém, mudando-se o processo de estimação, o controlador adaptativo programável não mais poderia ser utilizado, implicando em uma mudança de tipo do controlador adaptativo para o auto-ajustável ("self-tunning").

Estas mudanças todas resultariam numa generalização e maior elaboração do sistema de controle, que passaria a ter cálculos bastante complexos em contrapartida ao sistema aqui desenvolvido, que apenas necessita do simulador e de um sistema computacional de ajuste de curvas para o seu projeto.

De qualquer modo, a caracterização do processo confirmou a expectativa de que as colunas em batelada seriam um ambiente extremamente adequado à engenharia de controle, com a manifestação simultânea das mais complexas características inerentes a um processo.

Sabe-se, entretanto, que para se ter sucesso na automação de qualquer planta industrial, é necessário que se conheça bem os princípios básicos da engenharia de processos. Notou-se, então, que o contato obrigatório com os princípios de fenômenos de transporte presentes na coluna de destilação, bem como a modelagem dinâmica da coluna para o desenvolvimento do programa de simulação, levou a um íntimo conhecimento do processo

a ser controlado, facilitando bastante o surgimento de uma proposta de controle e otimização adequada.

Esta proposta, como verificado no capítulo 4 para o sistema Metanol-Etanol, teve excelentes resultados frente à perturbações no processo e, para o caso de outros componentes, desde que a metodologia aqui descrita para se projetar o sistema de controle de uma coluna de destilação em batelada seja adequadamente acompanhada, devem-se obter resultados tão satisfatórios quanto os então obtidos.

Deve-se ressaltar que esta metodologia pode ser também aplicada a sistemas multicomponentes, onde se encontraria sequencialmente um planejamento ótimo da vazão de refluxo para cada componente de interesse e se aplicaria o método de caracterização do processo para cada diferente fase da destilação, sempre se referindo ao componente mais volátil presente no refeedor.

Pode-se notar também que a lei de controle considerada foi a aproximação digital do familiar PI analógico e que este controlador tem uma estrutura determinada, isto é, função de transferência conhecida.

Porém, também como sugestão para trabalhos posteriores, pode-se fazer uso da flexibilidade computacional oferecida pelos controladores digitais e optar por um tipo diferente de controlador por retroalimentação. Para tanto, sugerem-se dois métodos de determinação destes algoritmos de controle digital

direto por computador (DDC) : Deadbeat e Dahlin [36].

Conclui-se, por fim, que sem muita complexidade conseguiu-se obter bons resultados em áreas pouco exploradas em Engenharia Química: processos transientes e controle adaptativo.

APÉNDICE 1.

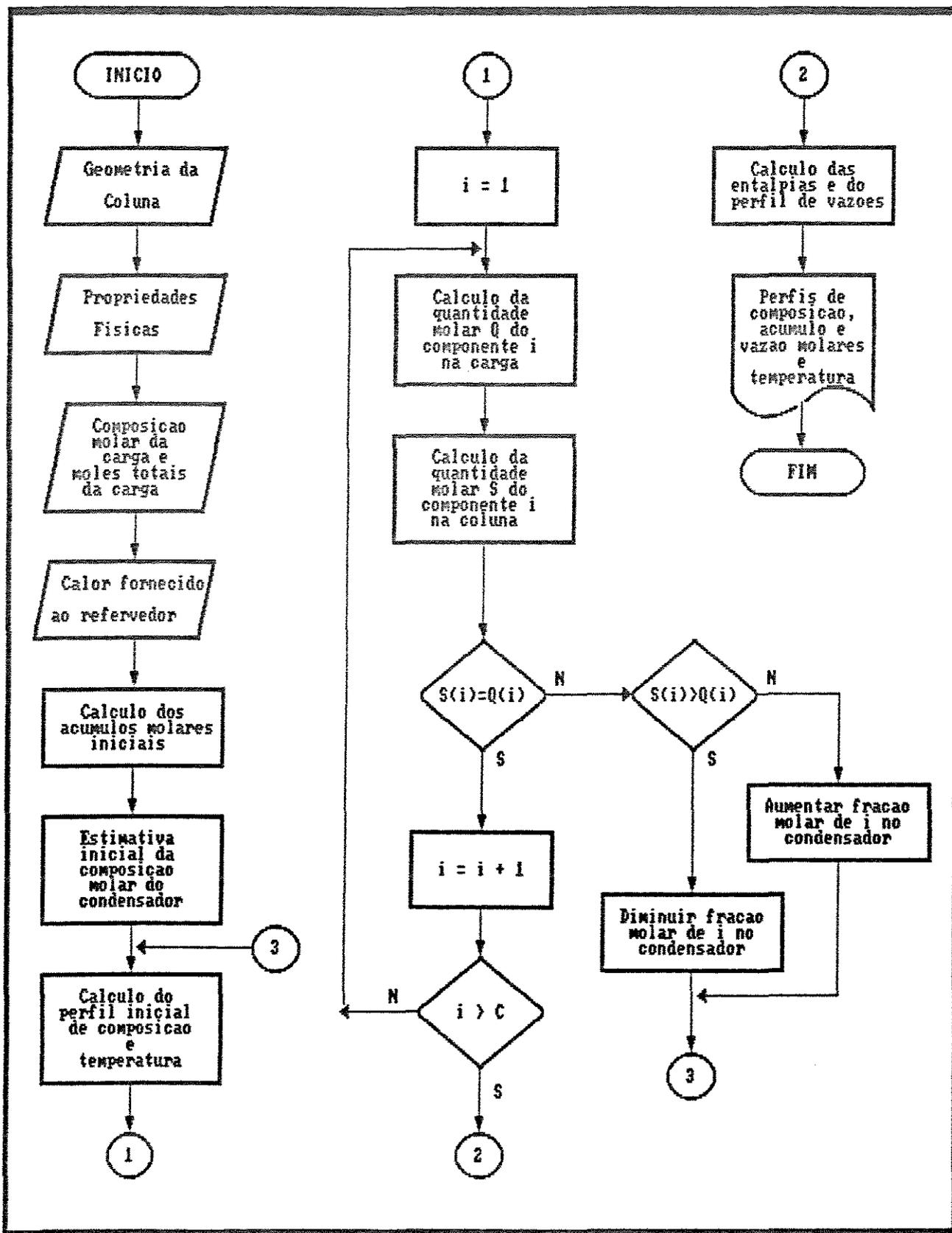


FIG. 1 - CALCULO DOS PERFIS INICIAIS DA COLUNA

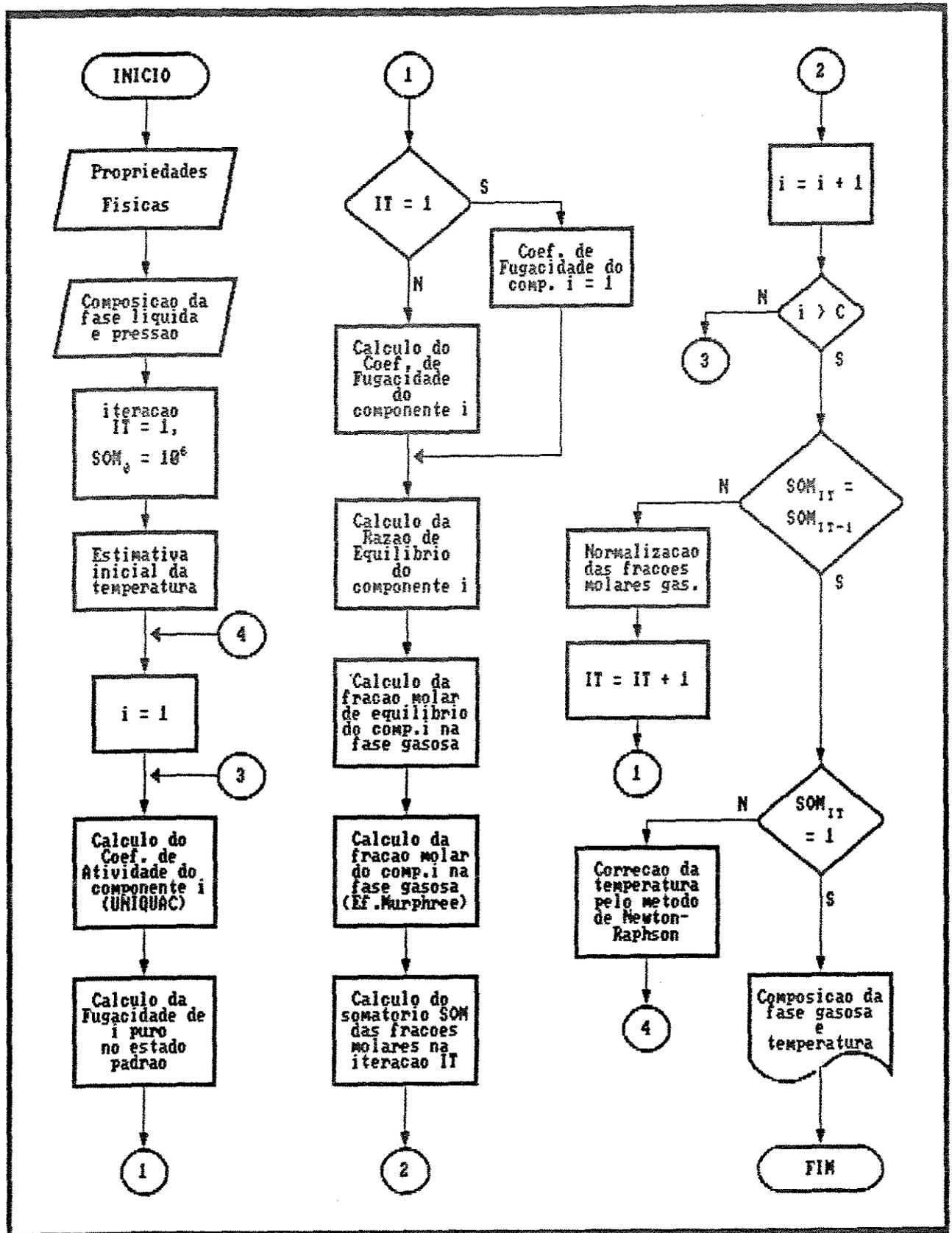


FIG. 2 - CALCULO DE TEMPERATURA E COMPOSICAO DA FASE GASOSA PARA O ESTAGIO J

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.

- 1 - Converse, A. O.; Gross, G. D.
Ind. Engng Chem., Fundam **2**, 217 (1963).
- 2 - Murty, B. S. N.; Gangiah, K.; Husain, A.
Chem. Engng J. **19**, 201 (1980).
- 3 - Coward, I.
Chem. Engng Sci. **22**, 503 (1967).
- 4 - Coward, I.
Chem. Engng Sci. **22**, 1881 (1967).
- 5 - Robinson, E. R.
Chem. Engng Sci. **24**, 1661 (1969).
- 6 - Robinson, E. R.
Chem. Engng Sci. **25**, 921 (1970).
- 7 - Robinson, E. R.
Chem. Engng J. **2**, 135 (1971).
- 8 - Mayur, D. N.; Jackson, R.
Chem. Engng J. **2**, 150 (1971).
- 9 - Price, P. C.
Chem. Engng Symp. Ser. **23**, 96 (1967).
- 10 - Egly, H.; Ruby, V.; Seid, B.
Comput. chem. Engng **3**, 169 (1979).
- 11 - Hansen, T. T.; Jorgensen, S. B.
Chem. Engng J. **33**, 151 (1986).
- 12 - Kerkhof, L. H. J.; Vissers, H. J. M.
Chem. Engng Sci. **3**, 961 (1978).

-
- 13 - Diwekar, U. M.; Malik, R. K.; Madhavan, K. P.
Comput. chem. Engng **11**, 629 (1987).
- 14 - Kafarov, V. V.; Vetokhin, V. N.; Rozhkov, A. M.
Dokl. Akad. Nauk. SSSR **267**, 881 (1982).
- 15 - Yu, G.; Wang, Y.
Huagong Xuebao **1986** (1), 30.
- 16 - Yu, G.; Zhang, Z.
Shiyou Huagong **19** (9), 616 (1990).
- 17 - Yu, G.; Yang, Z.; Bai, P.; Mo, Z.
Huagong Xuebao **40** (3), 271 (1989).
- 18 - Britt, H. I.; Rosen, J. B.
Can. Chem. News **41** (8), 22 (1989).
- 19 - Jang, M. J.
Avail. Univ. Microfilms. Int. No. DA9026755
Diss. Abstr. Int. B 1990, **51** (5), 2491.
- 20 - Shinskey, F. G.
"Process Control Systems - Application, Design and Tuning"
New York, McGraw-Hill, 1979.
- 21 - Bozenhardt, H.
InTech **34** (3), 43 (1987).
- 22 - Robinson, E. R.
"Microcomputers in the Process Industry"
Ellis Horwood Ltda., England, 1985.
- 23 - Krautstrunk, J.
Chem.-Tech. **11** (10), 1143 (1982).

-
- 24 - Yang, Z.; Lu, Z.; Mo, Z.; Wu, S.; Yu, G.
Shiyou Huagong **16** (7), 485 (1987).
- 25 - Åstrom, K. J.; Wittenmark, B.
"Adaptive Control"
Addison-Wesley Publishing Company, 1989.
- 26 - Tsonopoulos, C.
AIChE Journal **20** (1974), 263.
- 27 - Prausnitz, J.; Anderson, T. ; Greens, E. ; Eckert, C.;
Hsieh, R.; O'Connell, J.
"Computer Calculations for Multicomponent Vapour-Liquid and
Liquid-Liquid Equilibria"
Prentice-Hall International Series, 1980.
- 28 - Fredenslund, A.; Gmehling, J.; Rasmussen, P.
"Vapour-Liquid Equilibria Using UNIFAC - a Group
Contribution Method"
Elsevier Scientific Publishing Company, 1977.
- 29 - Reid, R. C.; Prausnitz, J.; Sherwood, T. K.
"The Properties of Gases and Liquids"
McGraw-Hill, 3rd Edition.
- 30 - Gmehling, J.; Onken, U.
"Vapour-Liquid Equilibrium Data Collection"
Dechema Chemistry Data Series, 1977.
- 31 - Doukas, N; Luyben, W. L.
Instrum. Technol. **25** (1978), 43.

-
- 32 - Watson, K. M.
Ind. Eng. Chem. 35, 398 (1943).
- 33 - Riedel, L.
Chem. Ing. Tech. 26, 679 (1954)
- 34 - Smith, B. D.
"Design of Equilibrium Stage Processes"
New York, McGraw-Hill, Inc. 1963.
- 35 - Domenech, S.; Guiglion G.; Enjalbert M.
Chem. Engng. Sci. 29, 1529 (1974).
- 36 - Stephanopoulos, G.
"Chemical Process Control"
Prentice-Hall, Inc. 1984
- 37 - Smith, C. A.; Corripio, A. B.
"Principles and Practice of Automatic Process Control"
John Wiley & Sons, Inc. 1985.

NOMENCLATURA.

- A = amplitude
 AR = razão de amplitudes
 A_i, B_i, C_i = constantes da equação de Antoine
 A_p = área do prato
 B = segundo coeficiente virial (cap. 3) ou amplitude da curva de reação do processo (cap. 4)
 $B_{i,j}$ = segundo coeficiente virial cruzado
 C = número de componentes
 c = sinal de saída do controlador
 c_{ss} = sinal de saída do controlador no estado estacionário
 Cp_i^L = calor específico molar a pressão constante do componente i líquido
 Cp_i^V = calor específico molar a pressão constante do componente i vapor
 D = vazão de destilado
 E_j = eficiência de Murphree no estágio j
 e = diferença entre o valor inferenciado e o de ajuste da variável de controle
 f_i^V = fugacidade do componente i na fase vapor
 f_i^L = fugacidade do componente i na fase líquida
 f_i^S = fugacidade do componente i na saturação
 f_i^0 = fugacidade do componente i no estado de referência
 f, f' = funções do método de integração definidas por balanços mássicos
 $G_p(s)$ = função de transferência do processo
 $G_{MA}(s)$ = função de transferência do sistema em malha aberta
 h_v = altura do vertedouro
 h_j = entalpia total molar da fase líquida no estágio j
 h^E = entalpia molar de excesso
 h^{ideal} = entalpia molar ideal
 h_i = entalpia molar do componente i puro líquido

- H_j = entalpia total molar da fase vapor no estágio j
 H_i = entalpia molar do componente i puro no estado gasoso
 H_i^0 = entalpia molar de vaporização do componente i na temperatura de referência
 ΔH = entalpia molar de vaporização
 ΔH_i = calor latente de vaporização do componente i puro
 $k_1, k_2, k_3, k_4, k_1', k_2', k_3', k_4'$ = constantes do método de integração
 K_i = razão de equilíbrio do componente i
 K_c = ganho do controlador
 K_p = ganho do processo
 K = ganho total da malha aberta
 L_v = comprimento do vertedouro
 L_j = vazão molar total do líquido no estágio j
 L_o = vazão de refluxo
 M_j = acúmulo molar de líquido no estágio j
 n_i = número de moles do componente i
 N = número de pratos
 P = pressão absoluta do sistema
 P_i^S = pressão do componente i na saturação
 P_{c_i} = pressão crítica do componente i
 pas = passo de integração
 q_i = área molecular de van der Waals (UNIQUAC)
 Q_c = quantidade de calor retirada no condensador
 Q_r = quantidade de calor fornecida ao refeedor
 r_i = volume molecular de van der Waals (UNIQUAC)
 R = constante universal dos gases ideais (cap.3) ou razão de refluxo (cap.4)
 S = inclinação da curva de reação do processo
 t = tempo
 Δt = intervalo de tempo de otimização
 t_d = tempo morto do processo
 T = temperatura absoluta do sistema

T_{c_i} = temperatura crítica do componente i
 T_o = temperatura de referência
 T_{eb_i} = temperatura normal de ebulição do componente i
 $u_{i,j}$ = parâmetro binário energético (UNIQUAC)
 V_j = vazão molar total de vapor no estágio j
 V = volume total da mistura
 v = volume molar total da mistura
 v_i = volume molar do componente i
 \bar{v}_i = volume parcial molar do componente i
 x_i = fração molar do componente i na fase líquida
 $x_{i,j}$ = fração molar do componente i na fase líquida do estágio j
 y_i = fração molar do componente i na fase vapor
 $y_{i,j}$ = fração molar do componente i na fase vapor do estágio j

LETRAS GREGAS

α = índice de controlabilidade
 ϕ = defasagem
 ϕ_i = coeficiente de fugacidade do componente i
 ϕ_i^S = coeficiente de fugacidade do componente i na saturação
 γ_i = coeficiente de atividade do componente i
 γ_i^R = contribuição residual do coeficiente de atividade do componente i (UNIQUAC)
 γ_i^C = contribuição combinatorial do coeficiente de atividade do componente i (UNIQUAC)
 τ_p = constante de tempo do processo
 τ_I = constante de tempo integral do controlador
 ω = frequência da onda senoidal de perturbação
 ω_c = frequência de cruzamento

SUBSCRITOS

i = componente

j = componente ou estágio

k = componente ou iteração

it = iteração

INF = valor inferenciado

MED = valor medido

SP = valor do ponto de ajuste

SS = valor no estado estacionário

lim = valor limite