

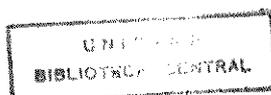
**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA  
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: SISTEMAS DE PROCESSOS  
QUÍMICOS E INFORMÁTICA**

**DINÂMICA E CONTROLE DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO  
- APLICAÇÃO A SISTEMAS DE ELEVADA PUREZA**

Autor: Luiz Márcio Poiani  
Orientador: Mário de Jesus Mendes

**Tese apresentada à Faculdade de Engenharia  
Química como parte dos requisitos exigidos  
para obtenção do título de Doutor em Enge-  
nharia Química.**

**CAMPINAS-SP-BRASIL  
DEZEMBRO-1993**



UNIDADE	78C
N.º CHAMADA:	P754d
V.	Ex.
TOMBO BC/	28206
PROC.	667/96
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	13/08/96
N.º GPD	

CM-00091118-4

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

P754d Poiani, Luiz Márcio  
Dinâmica e controle de colunas de destilação -  
aplicação a sistemas de elevada pureza / Luiz Márcio  
Poiani.--Campinas, SP: [s.n.], 1993.

Orientador: Mário de Jesus Mendes.  
Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas  
Faculdade de Engenharia Química.

1. Simulação (Computadores). 2. Modelos matemáticos. 3. Integração numérica. 4. Dinâmica. 5. Teoria do controle. 6. Destilação. I. Mendes, Mário de Jesus. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

para meus pais  
Luiz e Rachel,  
para minha esposa e filhos  
Maria de Lourdes, Camila, Patrícia e Júnior,  
pelo esforço, sacrifício e compreensão

## AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Mário de Jesus Mendes, pela efetiva orientação, constante estímulo e oportunidades oferecidas.

Ao Prof. Dr. Maurizio Rovaglio e aos colegas e amigos do Dipartimento di Ingegneria Chimica - Politecnico di Milano - Itália, pela contribuição no desenvolvimento deste trabalho.

À CAPES/PICD, pelo financiamento de bolsa e projetos de pesquisa relacionados com este trabalho.

Ao Departamento de Sistemas Químicos da Faculdade de Engenharia Química da Universidade de Campinas.

Ao Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos.

## RESUMO

Este trabalho se propõe a estudar a modelagem matemática, a simulação e o controle de colunas de destilação de elevada pureza.

Analisa-se inicialmente os aspectos fenomenológicos do comportamento dinâmico de colunas, objetivando-se desenvolver um modelo que contenha todas as informações fenomenológicas principais e que ao mesmo tempo seja suficientemente flexível, confiável e de real significado prático.

Estuda-se a seguir a simulação do comportamento dinâmico de colunas, com concentração de impureza no produto de topo variando de  $10^3$  a  $10^6$  ppm. Utiliza-se como exemplo aplicativo o sistema metanol-água.

Com base nos resultados discute-se o potencial do modelo para ser usado na análise de sistemas de controle de colunas de elevada pureza, procurando-se explorar diferentes aspectos da teoria do controle: seleção da configuração de controle dual mais adequado, análise dinâmica das iterações (método da matriz dos ganhos), controle dual ideal x real (atraso), controle não linear (função desacopladora) e controle antecipativo-retroativo.

## ABSTRACT

The main objective of the present study is the mathematical modelling, simulation and control of distillation columns processing high-purity overhead products.

The phenomenological aspects of the dynamic behavior of columns are analysed at first to obtain a model which takes into account the main variables, being also flexible, reliable and practical.

The next step is the simulation of the dynamic behavior of columns with overhead impurities in the range of  $10^3$  to  $10^6$  ppm. Methyl alcohol system was selected as an illustrative case.

The potential of the model in the analysis of control systems is discussed, with emphasis in several aspects of the control theory: selecting the most adequate dual control theory: dynamic analysis of interactions (gain matrix methods), ideal versus real dual control (delay), non-linear control (decoupling function) and forward-feedback control.

## ÍNDICE

Resumo	
"Abstract"	
Lista de Figuras	
Lista de Símbolos	
	página
<b>1. INTRODUÇÃO</b>	
1.1. Dinâmica e controle de colunas de destilação de alta pureza	1
1.2. Objetivos gerais	2
1.3. Organização da tese	4
<b>2. MODELAGEM DINÂMICA DA COLUNA</b>	
2.1. Modelos estacionários e dinâmicos de processos químicos: uma história paralela	5
2.2. Estrutura do modelo dinâmico . Aspectos fenomenológicos	11
2.2.1. Modelo do prato a uma constante de tempo	11
2.2.2. Modelo do prato a duas constantes de tempo	14
2.2.3. Modelo do prato a três constantes de tempo	16
2.2.4. Modelo do refeedor	18
2.2.5. Modelo do condensador	22
2.2.6. Graus de liberdade de uma coluna de destilação	25
2.3. Estrutura do modelo termodinâmico	
Determinação da constante de equilíbrio e entalpias das fases líquido e vapor	27
2.3.1. Cálculo do coeficiente de fugacidade	27
2.3.2. Cálculo do coeficiente de atividade	28
2.3.3. Cálculo da fugacidade no estado padrão de um componente condensável	31
2.3.4. Cálculo da constante de equilíbrio líquido-vapor	33

2.3.5. Cálculo da entalpia das fases líquido e vapor	36
2.3.6. Cálculo de um parâmetro de eficiência do prato	36
2.3.6.1. Modelos de eficiência do prato	37
2.3.6.2. Modelo de eficiência global de prato segundo Murphree	38
2.4. Estrutura do modelo hidráulico Fluidodinâmica dos pratos	39
2.4.1. Introdução	39
2.4.2. Correlações geométricas	40
2.4.3. Correlações fluidodinamicas	41
<b>3. SIMULAÇÃO DINÂMICA DA COLUNA EM MALHA ABERTA</b>	
3.1. Introdução	44
3.2. Solução das equações do modelo	44
3.3. Avaliação do 'R.H.S.' das equações diferenciais ordinárias	45
3.3.1. Estimativa das variáveis termodinâmicas	46
3.3.2. Estimativa das variáveis hidráulicas	47
3.3.3. Procedimento de cálculo completo para estimativa dos 'RHSs'	48
3.4. Método de Integração. Aspectos numéricos	50
3.4.1. Sistemas rígidos	50
3.4.2. Seleção de um método numérico. Programa de cálculo	51
3.4.3. Estrutura do programa	54
3.5. Confronto entre os modelos desenvolvidos Análise comparativa da resposta dinâmica em malha aberta	55
3.5.1. Análise da coerência interna do modelo	60
3.5.1.1. Caso 1: Respostas a variações na vazão molar de alimentação Variações no balanço material	60
3.5.1.2. Caso 2: Respostas a variações na entalpia de alimentação Variação no balanço energético	65

3.5.1.3. Caso 3: Análise do comportamento do modelo para diferentes geometrias do refeedor e tambor de refluxo. Variação no balanço energético	67
3.5.2. Análise comparativa entre os modelos desenvolvidos	70
3.5.2.1. Confronto entre os diversos modelos, sem modificar as especificações dos pratos	71
3.5.2.2. Confronto entre os diversos modelos, modificando especificações dos pratos	77
3.5.2.3. Confronto entre modelos com simplificações no balanço energético	81
3.6. Influência do tipo de contato considerado. Consideração dos modelos de pratos: valvulado, perfurado e com campânula	83
3.7. Influência da não idealidade do contato líquido-vapor. Consideração do modelo de eficiência de pratos segundo Murphree	91
3.8. Análise do comportamento dinâmico em malha aberta	93
3.8.1. Análise quanto à variável perturbada	94
3.8.2. Efeitos do grau de pureza e volatilidade relativa	107
3.8.3. Análise da linearidade do sistema	110
3.9. Validação do modelo dinâmico usando resultados da literatura	114
<b>4. DINÂMICA EM MALHA FECHADA. CONTROLE.</b>	
4.1. O problema do controle de colunas de destilação de alta pureza	118
4.2. Sistemas de controle no domínio do tempo	119
4.2.1. Configuração de controle multimalha. Emparelhamento: variável manipulada x variável controlada	120
4.3. Projeto de sistemas de controle de composição em colunas de destilação. Aplicação à destilação metanol-água	126
4.3.1. Caso 1 : Controle de composição no topo (malha de controle L- $X_D$ )	127
4.3.2. Caso 2 : Controle de composição no topo (malha de controle D- $X_D$ )	132
4.3.3. Caso 3 : Controle de composição no fundo (malha de controle $T_j$ - $Q_1$ )	133

4.3.4. Caso 4 : Controle de composição no fundo(malha de controle $X_B-Q_1$ )	139
4.3.5. Caso 5 : Controle dual LV	142
4.4. Projeto de sistemas de controle multimalha. Interação e desacoplamento	146
4.4.1. A matriz dos ganhos relativos e a interação entre malhas	146
4.4.2. Desacoplamento entre as malhas	156
4.5. Controle dual LV em presença de tempo morto	161
4.6. Outras técnicas de controle avançado	163
5. CONCLUSÕES	178
6. RECOMENDAÇÕES PARA FUTUROS TRABALHOS	181
BIBLIOGRAFIA	184
Apêndice A - Fluidodinâmica do prato	
A.1. Correlações geométricas	194
A.1.1. Relações comuns a todas as geometrias	
A.1.2. Geometria 'cross-flow' simples	
A.1.3. Geometria 'split-flow'	
A.1.4. Prato perfurado	
A.1.5. Prato com campânula	
A.1.6. Prato valvulado	
A.2. Correlações fluidodinâmicas	197
A.2.1. Correlações fluidodinâmicas para pratos perfurados	
A.2.2. Correlações fluidodinâmicas para pratos com campânula	
A.2.3. Correlações fluidodinâmicas para prato a válvula: modelo Glitsch-Ballast V <sub>1</sub> e V <sub>4</sub> .	

A.2.4. Correlações fluidodinâmicas para pratos a válvula. Modelo Nencetti -  
Nardini - Zanelli

Apêndice B - Correlações para o segundo coeficiente virial	212
Apêndice C - Equações para os coeficientes de atividade	215
C.1. Equação UNIQUAC.	
C.2. Equação de Wilson.	
C.3. Equação NRTL.	
Apêndice D - Estimativa automática dos parâmetros de sintonia do controlador	217
Apêndice E - Refervedor e condensador - Desenvolvimento das equações dos modelos	219
Apêndice F - Método de Gear	224
Apêndice G - Cálculo das entalpias	228
Apêndice H - Desacoplador parcial. Unidade 'Lead / Lag'	231

**LISTA DE FIGURAS**

<b>página</b>		<b>Figura</b>
3	1.1	Diagrama esquemático da coluna de destilação
7	2.1	Programa em regime estacionário para plantas químicas. 'Flowsheeting - Simulation '
8	2.2	Paralelo na modelagem estacionária/dinâmica de plantas químicas
9	2.3	Enfoques utilizados na modelagem em regime estacionário de colunas de destilação
10	2.4	Analogia no desenvolvimento: modelo estacionário x dinâmico de colunas de destilação
12	2.5	Esquema do prato para o modelo a uma constante de tempo
16	2.6	Esquema do prato para o modelo a duas constantes de tempo
17	2.7	Esquema do prato para o modelo a três constantes de tempo
19	2.8	Diagrama esquemático do refeedor 'Kettle'
23	2.9	Diagrama esquemático do sistema condensador - tambor de refluxo
57	3.1	Diagrama esquemático da coluna de destilação com condensador total
61	3.1a	Temperatura do refeedor x tempo para uma variação de 15% na vazão de alimentação
62	3.1b	Temperatura no prato nº 5 x tempo para uma variação de 15% na vazão de alimentação
62	3.1c	Vazão molar de líquido no prato nº 5 x tempo para uma variação de 15% na vazão de alimentação
63	3.1d	Vazão molar de vapor no prato nº 5 x tempo para uma variação de 15% na vazão de alimentação
63	3.1e	Temperatura do prato nº 28 x tempo para uma variação de 15% na vazão de alimentação
64	3.1f	Vazão molar de líquido no prato nº 28 x tempo para uma variação de 15% na vazão de alimentação
64	3.1g	Vazão molar de vapor no prato nº 28 x tempo para uma variação de 15% na vazão de alimentação

- 65 3.1h Temperatura do condensador x tempo para uma variação de 15% na vazão de alimentação
- 66 3.2a Temperatura do prato nº 5 x tempo para uma variação de 10% na entalpia de alimentação
- 66 3.2b Temperatura do prato nº 28 x tempo para uma variação de 10% na entalpia de alimentação
- 67 3.2c Evolução do perfil 'hold up' molar de líquido na coluna para uma variação de - 10% na entalpia de alimentação
- 68 3.3a Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para variações na geometria do sistema condensador + tambor de refluxo de topo
- 69 3.3b Fração molar do metanol no destilado x tempo para variações na geometria do sistema condensador + tambor de refluxo de topo
- 69 3.3c Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para variações na geometria do refeedor
- 70 3.3d Fração molar do metanol no destilado x tempo para variações na geometria do refeedor
- 71 3.4a Fração molar metanol no produto de fundo (coluna  $C_1$ ) x tempo para uma variação de + 30% na vazão de alimentação
- 72 3.4b Fração molar metanol no destilado (coluna  $C_1$ ) x tempo para uma variação de + 30% na vazão de alimentação
- 72 3.4c Fração molar metanol no produto de fundo (coluna  $C_2$ ) x tempo para uma variação de + 30% na vazão de alimentação
- 73 3.4d Fração molar metanol no destilado (coluna  $C_2$ ) x tempo para uma variação de + 30% na vazão de alimentação
- 73 3.4e Vazão molar de líquido no prato nº 5 (coluna  $C_1$ ) x tempo para uma variação de + 30% na vazão de alimentação
- 74 3.4f Vazão molar de líquido no prato nº 28 (coluna  $C_1$ ) x tempo para uma variação de + 30% na vazão de alimentação
- 74 3.4g Vazão molar de líquido no prato nº 5 (coluna  $C_2$ ) x tempo para uma variação de + 30% na vazão de alimentação
- 75 3.4h Vazão molar de líquido no prato nº 28 (coluna  $C_2$ ) x tempo para uma variação de + 30% na vazão de alimentação

78	3.5a	Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de -30 °C na temperatura de alimentação
78	3.5b	'Holdup' molar do líquido no prato nº 5 x tempo para uma variação de -30 °C na temperatura de alimentação
79	3.6a	Temperatura do refeedor x tempo para uma variação de -30 °C na temperatura de alimentação
80	3.6b	Vazão molar de líquido no refeedor x tempo para uma variação de -30 °C na temperatura de alimentação
82	3.7a	Temperatura do refeedor x tempo para uma variação de -5 % na vazão de alimentação
82	3.7b	Pressão do refeedor x tempo para uma variação de -5 % na vazão de alimentação
86	3.8a	'Holdup' molar líquido x tempo para quatro pratos com 'cross flow' (CF)
86	3.8b	Vazão molar de líquido x tempo para quatro pratos com 'cross flow' (CF)
87	3.8c	'Holdup' molar líquido x tempo para pratos perfurados com 'cross flow' e 'split flow'
87	3.8d	Perda de carga x tempo para pratos perfurados com 'cross flow' e 'split flow'
88	3.8e	'Holdup' molar líquido x tempo para pratos campânulas com 'cross flow' e 'split flow'
88	3.8f	Perda de carga x tempo para pratos campânulas com 'cross flow' e 'split flow'
89	3.8g	'Holdup' molar líquido x tempo para pratos a válvula (segundo Nencetti) com 'cross flow' e 'split flow'
89	3.8h	Perda de carga x tempo para pratos a válvula (segundo Nencetti) com 'cross flow' e 'split flow'
90	3.8i	'Holdup' molar líquido x tempo para pratos a válvula (segundo Glitsch) com 'cross flow' e 'split flow'
90	3.8j	Perda de carga x tempo para pratos a válvula (segundo Glitsch) com 'cross flow' e 'split flow'
92	3.9a	Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para estágios teóricos e reais

- 93 3.9b Fração molar do metanol no destilado x tempo para estágios teóricos e reais
- 95 3.10 Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de -10% na entalpia da alimentação
- 96 3.11a Pressão no condensador x tempo para uma variação de + 15% na vazão de alimentação
- 96 3.11b Pressão no refeedor x tempo para uma variação de + 15% na vazão de alimentação
- 97 3.12a Vazão molar de vapor no refeedor x tempo para uma variação de + 10% na taxa de calor cedida ao refeedor
- 98 3.12b Temperatura no refeedor x tempo para uma variação de + 10% na taxa de calor cedida ao refeedor
- 98 3.12c Temperatura no condensador x tempo para uma variação de + 10% na taxa de calor cedida ao refeedor
- 99 3.12d Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de + 10% na taxa de calor cedida ao refeedor
- 100 3.13a Temperatura do prato nº 5 x tempo para uma variação de + 10% na vazão de refluxo de topo
- 100 3.13b Fração molar do metanol no prato nº 5 x tempo para uma variação de + 10% na vazão de refluxo de topo
- 101 3.14a Temperatura do prato nº 5 x tempo para uma variação de -7,5% na composição do metanol da alimentação
- 102 3.14b Temperatura do prato nº 28 x tempo para uma variação de -7,5% na composição do metanol da alimentação
- 102 3.14c Fração molar do metanol no prato nº 5 x tempo para uma variação de -7,5% na composição do metanol da alimentação
- 103 3.14d Fração molar do metanol no prato nº 28 x tempo para uma variação de -7,5% na composição do metanol da alimentação
- 103 3.14e Pressão no condensador x tempo para uma variação de -7,5% na composição do metanol da alimentação
- 104 3.14f Fração molar do metanol no condensador x tempo para uma variação de -7,5% na composição do metanol da alimentação
- 104 3.14g Temperatura do condensador x tempo para uma variação de -7,5% na composição do metanol da alimentação

- 105 3.15a Temperatura no condensador x tempo para uma variação de +5% na temperatura da água de refrigeração
- 106 3.15b Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de +5% na temperatura da água de refrigeração
- 106 3.15c Vazão de refluxo no topo da coluna x tempo para uma variação de +5% na temperatura da água de refrigeração
- 107 3.16a Fração molar do + volátil no destilado x tempo para uma variação de -5% na taxa de calor cedida ao refeedor da coluna com grau de impureza no topo = 10.000 ppm
- 108 3.16b Fração molar do - volátil no destilado x tempo para uma variação de -5% na taxa de calor cedida ao refeedor da coluna com grau de impureza no topo = 1.000 ppm
- 108 3.16c Fração molar do - volátil no destilado x tempo para uma variação de +5% na taxa de calor cedida ao refeedor da coluna com grau de impureza no topo = 1.000 ppm
- 109 3.16d Fração molar do + volátil no produto de fundo x tempo para uma variação de -5% na taxa de calor cedida ao refeedor da coluna com grau de impureza no topo = 10.000 ppm
- 109 3.16e Fração molar do + volátil no produto de fundo x tempo para uma variação de +5% na vazão de refluxo (topo) da coluna com grau de impureza no topo = 1.000 ppm
- 111 3.17a Fração molar do + volátil no produto de fundo x tempo para variações  $\pm 3\%$  e de  $\pm 6\%$  na composição molar da alimentação
- 111 3.17b Pressão no prato nº 28 x tempo para variações de 3% e 6% na composição molar da alimentação
- 112 3.17c Temperatura no refeedor x tempo para variações de 3% e 6% na composição molar da alimentação
- 112 3.17d Fração molar do + volátil no produto de fundo x tempo para variações de 3% e 6% na composição molar da alimentação
- 113 3.17e Pressão no prato nº 28 x tempo para variações de 3% e 6% na vazão molar da alimentação
- 113 3.17f Temperatura no refeedor x tempo para variações de 3% e 6% na vazão molar da alimentação
- 116 3.18a Temperatura x estágios da coluna
- 116 3.18b Fração molar do metanol x estágios da coluna

- 117 3.18c Variação percentual (em relação ao estacionário) da fração molar de metanol no destilado ( $X_D$ ) e fundo ( $X_B$ ) x tempo para uma variação de + 2% na vazão de refluxo de topo
- 122 4.1a Diagrama esquemático da coluna de destilação visando o controle.
- 123 4.1b Configuração de controle LV
- 125 4.1c Configuração de controle DV
- 131 4.2a Fração molar do metanol no destilado x tempo para variações de + 10% na vazão molar da alimentação. Controle de topo:  $L_{X_D}$
- 132 4.2b Fração molar do metanol no destilado x tempo para variações de + 10% na vazão molar da alimentação. Controle de topo:  $D_{X_D}$
- 134 4.3a Transiente de temperatura x número do para uma variação de +20% na vazão molar de alimentação
- 135 4.3b Temperatura no prato nº 2 x tempo para uma variação de 2% na potência térmica do refeedor
- 135 4.3c Temperatura no prato nº 3 x tempo para uma variação de 2% na potência térmica do refeedor
- 136 4.3d Temperatura no prato nº 4 x tempo para uma variação de 2% na potência térmica do refeedor
- 138 4.4a Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de + 10% na vazão molar da alimentação. Controle de fundo:  $T_3 - Q_1$
- 138 4.4b Temperatura no prato nº 3 x tempo para uma variação de + 10% na vazão molar da alimentação. Controle de fundo:  $T_3 - Q_1$
- 139 4.4c Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de + 10% na vazão molar da alimentação. Controlador ( $T_3 - Q_1$ ) projetado para diferentes variações (2 e 8%) na taxa de calor cedida ao refeedor
- 140 4.5a Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de - 2,5% na composição molar do metanol da alimentação. Controlador ( $X_B - Q_1$ ), ação de controle PID
- 141 4.5b Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de - 2,5% na composição molar do metanol da alimentação. Controlador ( $X_B - Q_1$ ), ação de controle PI.

- 141 4.5c Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de - 2,5% na composição molar do metanol da alimentação. Controlador ( $X_B - Q_1$ ), ação de controle PI.
- 144 4.6a Configuração do controle dual ideal
- 145 4.6b Fração molar do metanol no destilado x tempo para os casos:  
A - variação de +2,5% na composição molar do metanol na alimentação  
B - variação de -5% na vazão molar da alimentação e de +2,5% na composição molar do metanol e  
C - variação de +5% na vazão molar da alimentação e de -2,5% na composição molar do metanol na alimentação.
- 146 4.6c Fração molar do metanol no destilado x tempo para as variações A, B e C , definidas na Figura 4.6b, com controle dual (ideal).
- 149 4.7a Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação simultânea +10% na vazão molar da alimentação e -5% na fração molar do metanol na alimentação.
- 150 4.7b Vazão molar de vapor ( $V_1$ ) na saída do refeedor para a coluna x tempo (condições da Figura 4.7a)
- 150 4.7c Pressão no condensador x tempo (condições da Figura 4.7a)
- 152 4.8a Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação degrau de +2% na vazão de refluxo da coluna. Análise dinâmica da interação.
- 153 4.8b Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação em degrau de +2% na taxa de calor fornecida ao refeedor. Análise dinâmica da interação
- 154 4.8c Matriz dinâmica do ganho relativo para a coluna C1.
- 154 4.8d Matriz dinâmica do ganho relativo para a coluna C2.
- 155 4.8e Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de +10% na vazão molar de alimentação. Grau de interação
- 156 4.8f Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de +10% na vazão molar de alimentação. Grau de interação
- 159 4.9 Configuração do controle dual com desacoplamento parcial
- 160 4.10 Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de +2% na taxa de calor cedida ao refeedor. Desacoplamento parcial.

- 160 4.10a Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de +2.5% na composição do metanol na corrente de alimentação.
- 162 4.11a Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de +2,5% na composição molar do metanol da alimentação. Controle dual sem e com inclusão de tempo morto em ambas as malhas de topo e fundo.
- 163 4.11b Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de +2,5% na composição molar do metanol da alimentação. Controle dual com inclusão de tempo morto somente na malha de topo.
- 166 4.12a Configuração do controle com antecipação pura
- 168 4.12b Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de -10% na vazão molar da alimentação. Controle com antecipação pura
- 168 4.12c Vazão molar de vapor no refeedor x tempo para uma variação de -10% na vazão molar da alimentação. Controle com antecipação pura
- 169 4.12d Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de -10% na vazão molar da alimentação. Controle com antecipação pura
- 169 4.12e Vazão molar de líquido no condensador x tempo para uma variação de -10% na vazão molar da alimentação. Controle com antecipação pura
- 170 4.12f Carga térmica no refeedor (adimensional) x tempo para uma variação de -10% na vazão molar da alimentação. Controle com antecipação pura
- 172 4.13a Configuração do controle misto antecipação-retroação
- 173 4.13b 'Set-point' da malha de controle de temperatura do prato nº 3 x tempo para uma variação de +10% na vazão molar da alimentação. Controle misto antecipação x retroação
- 173 4.13c Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de +10% na vazão molar da alimentação. Configurações de controle:  
A: Controle dual real  
B: Controle dual real com desacoplamento parcial  
C: Controle misto antecipação-retroação
- 174 4.13d Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de +10% na vazão molar da alimentação. Configuração de controle A, B e C

- 175 4.13e 'Set-point' da malha de controle de temperatura do prato nº 3 x tempo para uma variação de +2.5% na composição molar do metanol da alimentação. Controle misto antecipação-retroação
- 175 4.13f Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de +2.5% na composição molar do metanol da alimentação. Configuração de controle A, B e C
- 176 4.13g Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de +2.5% na composição molar do metanol da alimentação. Configuração de controle A, B e C
- 177 4.14 Carga térmica no refeedor x tempo para as operações controladas:  
i - controle em retroação com variação de +10% na vazão molar da alimentação  
ii - controle misto retroação-antecipação com variação de +10% na vazão molar da alimentação  
iii - controle misto retroação-antecipação com variação simultânea de -5% na composição do mais volátil e de +10% na vazão molar da corrente de alimentação
- 208 A-1 Grandezas geométricas referentes ao prato 'cross-flow'
- 209 A-2 Grandezas geométricas referentes ao prato 'split-flow'
- 209 A-3 Simbologia do prato perfurado
- 210 A-4 Sustentação do prato
- 210 A-5 Diagrama esquemático do prato perfurado
- 211 A-6 Simbologia do prato com campânula

## LISTA DE SÍMBOLOS

$A_a$	área ativa, [m <sup>2</sup> ]
$A_c$	área calma, [m <sup>2</sup> ]
$A_d$	área do 'downcomer', [m <sup>2</sup> ]
$A_{da}$	área mínima entre $A_d$ e $A_i$ , [m <sup>2</sup> ]
$A_{dc}$	área do 'downcomer' central, [m <sup>2</sup> ]
$A_d'$	área mínima entre $A_{dc}$ e $A_i$ , [m <sup>2</sup> ]
$A_i$	secção de entrada no prato, conduto de carga lateral, [m <sup>2</sup> ]
$A_n$	área nominal disponível para a passagem da corrente vapor, [m <sup>2</sup> ]
$A_n'$	área nominal disponível para a passagem da corrente vapor no prato 'split-flow' com alimentação central, [m <sup>2</sup> ]
$A_n''$	área nominal disponível para a passagem da corrente vapor no prato 'split-flow' com dupla alimentação lateral, [m <sup>2</sup> ]
$A_r$	área significativa para a perda de carga na campânula, [m <sup>2</sup> ]
$A_{r2}$	secção cilíndrica de passagem do espelho a campânula, [m <sup>2</sup> ]
$A_{r3}$	secção circular compreendida entre o espelho e a campânula, [m <sup>2</sup> ]
$A_t$	secção da coluna, [m <sup>2</sup> ]
$A_o$	área dos orifícios, [m <sup>2</sup> ]
$A_2$	área de referência para o cálculo do "holdup" líquido no prato 'split-flow', [m <sup>2</sup> ]
$C_d$	fator do gradiente líquido, [adim]
$C_F$	constante de 'flooding', adim

$\rho^l$	densidade molar do líquido, [kmol/m <sup>3</sup> ]
$\underline{\rho}^l$	densidade do líquido, [kg/m <sup>3</sup> ]
$\rho^v$	densidade molar do vapor, [kmol/m <sup>3</sup> ]
$\underline{\rho}^v$	densidade do vapor, [kg/m <sup>3</sup> ]
$\underline{C}_o$	coeficiente de orifício, adim
D	vazão da corrente de destilado de topo, [kmol/min]
B	vazão do produto de fundo, [kmol/min]
$W_r$	vazão do fluido de aquecimento, [kmol/min]
$W_c$	vazão do fluido de refrigeração, [kmol/min]
$d_{cp}$	diâmetro externo da campânula, [m]
$d_f$	diâmetro do orifício, [m]
$\Delta$	gradiente de líquido no prato, [m]
$\Delta''$	gradiente de líquido no prato 'split-flow' com alimentação central, [m]
$E_n$	função energia interna para o "holdup" molar de líquido no prato n, [kcal]
$E_n^d$	função energia interna para o "holdup" molar de líquido no 'downcomer' do prato n, [kcal]
$E_n^*$	função energia interna para o "holdup" molar de vapor no prato n, [kcal]
f	fator de atrito, adim
$F_f$	coeficiente de flooding, adim
$F_l$	grau de flooding, adim
g	aceleração da gravidade, [m/s <sup>2</sup> ]
HV	entalpia molar na fase vapor, [kcal/kmol]
HL	entalpia molar na fase líquida, [kcal/kmol]
HF	entalpia molar da alimentação, [kcal/kmol]

$h_c$	altura de líquido no conduto lateral, [m]
$h_c'$	altura de líquido no conduto central, prato 'split-flow', [m]
$h_c''$	altura de líquido no conduto lateral, prato 'split-flow', [m]
$h_{cm}$	altura do espelho, [m]
$h_{cp}$	altura da campânula, [m]
$h_D$	perda de carga de vapor no prato seco, como altura de líquido claro, [m]
$h_F$	altura da espuma no prato, [m]
$h_G$	perda de carga global do vapor no prato, como altura de líquido claro, [m]
$h_i$	altura entre a sessão de entrada no prato e o conduto de carga, [m]
$h_L$	perda de carga do vapor devido ao 'holdup' líquido no prato, como altura de líquido claro, [m]
$h_R$	perda de carga residual do vapor, como altura de líquido claro, [m]
$h_S$	distância entre o prato e o nível superior da abertura das campânulas
$h_{SC}$	distância entre o prato e o nível inferior da abertura das campânulas
$h_W$	altura do vertedouro, [m]
$h_{ow}$	altura da crista de líquido claro sobre o vertedouro lateral, [m]
$h'_{ow}$	altura da crista de líquido claro sobre o vertedouro central, [m]
$h_2$	perda de carga do líquido na entrada do prato (condutor lateral), como altura de líquido claro, [m]
$h_2'$	perda de carga do líquido na entrada do prato (condutor central), como altura de líquido claro, [m]
$l_f$	distância entre duas campânulas adjacentes na mesma linha, [m]
$L'$	vazão volumétrica líquida (Apêndice A), [m <sup>3</sup> /s]
$L_n$	vazão molar líquido no prato n, [kmol/min]

- $L_n^d$  vazão molar líquido no downcomer n, [kmol/min]
- $L_{NS}$  vazão de refluxo de topo [kmol/min]
- log logaritmo na base 10
- $M_{i,n}$  "holdup" molar, fase líquido, do componente i no prato n, [kmol]
- $M_{i,n}^d$  "holdup" molar, fase líquido, do componente i no 'downcomer' n, [kmol]
- $M_{i,n}^*$  "holdup" molar, fase vapor, do componente i no prato n, [kmol]
- $n_c$  número de campânulas no prato, adim
- $n_f$  número de aberturas por campânula, adim
- $n_p$  número médio de passagem do fluido entre as campânulas, adim
- $n_r$  número de linhas de campânulas normais ao fluxo de líquido, adim
- $n_v$  número de válvulas no prato, adim
- $p_f$  passo do orifício, [m]
- $p_{f,d}$  passo diagonal entre os orifícios, [m]
- $P_c$  perda de carga do vapor devido a passagem na campânula, como altura de líquido claro, [m]
- $P_f$  perda de carga do vapor na saída da abertura, como altura de líquido claro, [m]
- $P_1$  perda de carga do vapor devido ao "holdup" molar de líquido no prato, como altura de líquido claro, [m]
- $P_1''$  perda de carga do vapor, devido ao "holdup" molar de líquido, no prato 'split flow' com dupla alimentação lateral, como altura de líquido claro, [m]
- $P_v$  perda de carga do vapor devido a passagem na válvula, como altura de líquido claro, [m]
- R razão de refluxo, adim.
- Re parte real do número complexo
- $s_c$  espessura da campânula, [m]

$S_{pi}$	espessura do prato, [m]
$S_{pt}, t_s$	espaçamento entre os pratos, [m]
$S_t$	largura da sustentação do prato, [m]
$S_v$	espessura da válvula, [m]
SF	fator do sistema
$t_r$	tempo de residência no 'downcomer', [s]
$t_{rl}$	tempo limite de residência no 'downcomer', [s]
$T_s$	tensão superficial, [N/m <sup>2</sup> ]
$U_n$	retirada lateral de líquido no prato n, [kmol/min]
$v_f$	velocidade de 'flooding' do vapor, relativo a área nominal, [m/s]
$v_n$	velocidade do vapor na $A_n$ , [m/s]
$v_o$	velocidade do vapor nos orifícios, [m/s]
$v_{ol}$	velocidade limite do vapor nos orifícios, [m/s]
$V'$	vazão volumétrica vapor (Apêndice A), [m <sup>3</sup> /s]
$V_n$	vazão molar vapor na saída do prato n, [kmol/min]
$V_n^*$	vazão molar total de vapor entrando no prato n+1, [kmol/min]
$X_B$	fração molar do componente mais volátil no produto de fundo [adim]
$X_D$	fração molar do componente mais volátil no produto de topo [adim]
W	comprimento do vertedouro lateral, [m]
$W_n$	retirada lateral de vapor no prato n, [kmol/min]
$W_{eff}$	comprimento efetivo do vertedouro, [m]
$W_2$	comprimento do vertedouro central, [m]
$Z_c$	largura da zona de calma, [m]

- $Z_g$  comprimento do prato, [m]
- $Z_p$  largura média do prato para o fluxo líquido, [m]
- $\beta$  ângulo, corda de comprimento  $W$ , [rad]
- $f$  fator de aeração, adim
- $\nu$  viscosidade da corrente de vapor, [kg/ms]

## 1 - INTRODUÇÃO

A obtenção de produtos puros e ultrapuros, em graus especificados internacionalmente, constitui uma das situações problema da indústria química nacional. Os produtos puros, utilizados em variados processos de síntese, são em grande parte importados.

Para se conseguir o grau de pureza necessário nos processos de síntese são utilizados, além de colunas de destilação, outras etapas de separação, como a cromatografia através da filtragem molecular para obter alta pureza. A coluna de destilação é contudo, o equipamento fundamental nesses processos.

A eficiente condução da destilação em colunas de alta pureza exige o recurso a um sistema eficiente de controle da coluna.

### 1.1 - Dinâmica e controle de colunas de destilação de alta pureza.

A implantação de sistemas eficientes de controle parte, normalmente, de um estudo das características dinâmicas do processo, por via experimental ou pelo uso da simulação dinâmica. A necessidade de um grau de pureza elevado com um consumo mínimo de energia conduz ao desenvolvimento de modelos dinâmicos de ordem superior, o mais completo possível, onde se tenha uma exata correspondência entre as posições das variáveis de estado no modelo e na coluna (correspondência de posição nos pratos e periféricos).

O crescente interesse no desenvolvimentos de modelos dinâmicos rigorosos e sua aplicação no projeto de controladores não lineares resulta da combinação de tres fatores: a incrível evolução tecnológica dos computadores, instrumentos em grau de fornecer uma potência de cálculo ainda desconhecida e a um custo sempre mais acessível; o desenvolvimento de eficientes algoritmos numéricos para resolver o sistema de equações algébricas diferenciais, geralmente de grandes dimensões e "stiff", que são típicas dos modelos dinâmicos dos processos; a notável contribuição de caracterizações precisas de propriedades termodinâmicas, com maior disponibilidade e confiabilidade de bancos de dados.

Os objetivos que a simulação dinâmica se propõe, são seguramente numerosos. O recente desenvolvimento e interesse da pesquisa neste campo define hoje por um lado novas e melhores estratégias na utilização de sistema de controle tradicionais, e por outro delinea o desenvolvimento emergente de novos sistemas de condução das unidades industriais sob a ação de computadores "on-line", em grau de modificar os 'set-points' do equipamento em tempo real, para responder as variadas exigências operativas e econômicas, garantindo assim ao processo, um controle do tipo adaptativo. Isso comporta um sempre maior esforço referente a necessidade de descrição do comportamento dinâmico dos equipamentos e das unidades que compõem o vasto quadro de sistemas controlados da indústria química.

Procedimentos de "shutdown" e de "startup", problemas de confiabilidade, segurança e controle constituem os aspectos mais evidentes da necessidade de modelos dinâmicos rigorosos, de não menor importância são contudo problemas de operacionalidade, de supervisão e/ou gestão que resultam elementos chaves na definição econômica do equipamento. Assim, no caso de pesquisa de uma estratégia ótima de controle, realizada com sistemas tradicionais, é de fundamental importância a possibilidade de simular o comportamento do equipamento na presença de diversas malhas, permitindo assim uma imediata análise dos resultados e um confronto entre as possíveis escolhas. Ressalta-se a consequente racionalização da análise através de variáveis em tempo real no processo, em comparação com funções, não menos familiares, como as de transferências, frequência, etc., que revestem a sua importância principal na fase de definição do projeto do sistema de controle do processo químico. A análise do problema via funções de transferência, campo de domínio da dinâmica clássica linear, apresenta um sério problema de validade (por definição) em estreito intervalo ao redor das condições estacionárias (sistema linear ou linearizado).

A utilização dessas funções pode ser avaliada, caso a caso, através de um possível instrumento não linear de validação do resultado de tais generalizações.

Também a construção de Sistemas Especialistas com escopo Supervisório ou mais geral do Controle Adaptativo necessitam do conhecimento do processo via modelo dinâmico, fonte de investigação e orientação do sistema e definindo as junções entre os dados de entrada (variáveis de projeto) e as configurações de processo. Em outras palavras, o modelo dinâmico é capaz de fornecer ao operador o conhecimento de base necessário para operar a escolha do "Controle Ótimo" sobre a "base de dados" registrada.

## 1.2 - Objetivos gerais

O presente trabalho objetiva contribuir ao desenvolvimento de um modelo geral para a Simulação Dinâmica de Colunas de Destilação (Simulador Dinâmico Generalizado), área de pesquisa pertencente a Dinâmica de Unidades Industriais, assim como apresentar e discutir resultados sobre o Controle de Colunas de Destilação de Alta Pureza, utilizando como exemplo aplicativo o sistema metanol-água.

O motivo da escolha de Colunas de Destilação de Alta Pureza, dentro de uma ótica mais generalizada da Dinâmica de Unidades, é devido à oportunidade única de análise conjunta e contemporaneamente de problemas termodinâmicos, fluidodinâmicos e numéricos, fortemente interligados e constituindo um problema chave no campo da engenharia química. A coluna de destilação considerada no desenvolvimento do modelo é esquematizada na Figura 1.1. O refeedor é do tipo Kettle e o condensador para uma maior generalidade do modelo é considerado do tipo parcial. A condensação total para o sistema aplicativo metanol-água é obtida para a situação em que a vazão de retirada de vapor  $W_{NS}$  é nula. No desenvolvimento do modelo cada prato da coluna considera a possibilidade de uma

retirada de produto na fase líquida e outra na fase vapor, uma alimentação na fase líquida, vapor, ou ambas e uma entrada ou saída de calor.

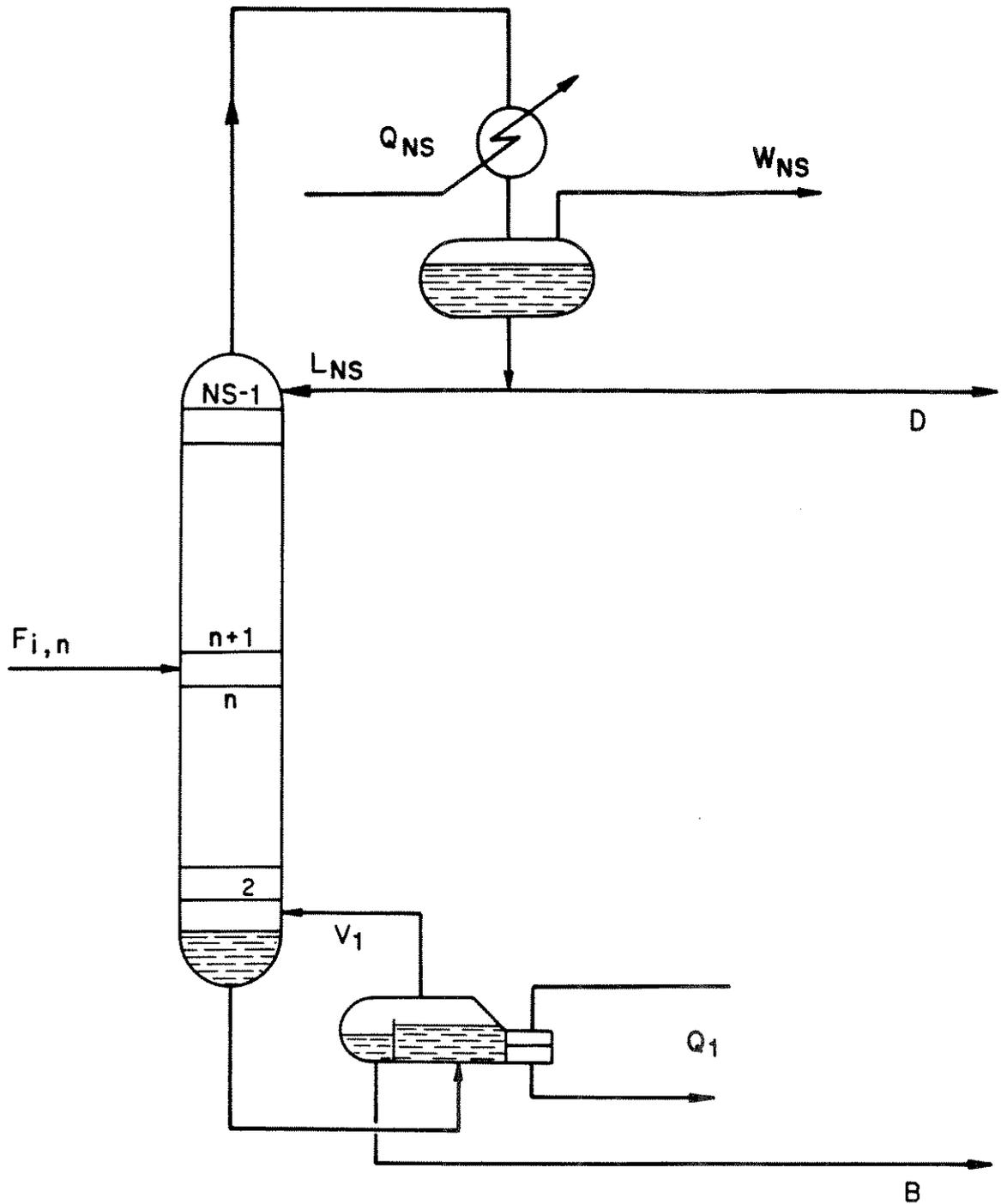


Fig. 1.1 - Diagrama esquemático da coluna de destilação

A escolha do sistema metanol-água, como exemplo aplicativo do modelo dinâmico desenvolvido, fundamenta-se no fato desse sistema constituir um típico exemplo dos problemas esperados na destilação de alta pureza e bastante clássico na literatura: Mounteziaris J.T. et al (1988), Georgiou A. et al (1988), Tyreus B.D.(1975), Al-Elg A.H. et al (1989), Alsop A.W. et al(1990) e L. Lang et al (1990) .

Especificamente, no caso brasileiro, a relevância econômica e estratégica desse produto é ainda maior: face as características peculiares da matriz energética nacional, o metanol pode se constituir, durante a entressafra da cana de açúcar, em substituto do etanol produzido por via fermentativa, mantendo as boas características do combustível no que se refere à poluição ambiental

### 1.3 - Organização da tese

Estruturada em três capítulos principais:

- o capítulo dois apresenta o desenvolvimento do modelo dinâmico da coluna em seus aspectos fenomenológicos .Ênfase especial é dada à introdução crescente de termos capacitivos materiais ao modelo dos pratos da coluna. O refeedor é do tipo Kettle e o condensador pode ser do tipo total ou parcial. No desenvolvimento dos modelos desses dois tipos de trocadores de calor são eliminadas hipóteses simplificadoras bastante usuais na literatura, objetivando assim aumentar a capacidade descritiva do modelo global da coluna.
- o capítulo três busca, em uma etapa inicial, um enquadramento da problemática geral conexa com o algoritmo de GEAR para integração do conjunto de equações diferenciais-algébricas que descrevem o comportamento dinâmico de colunas de destilação. Tal problemática é de enorme interesse no campo da modelagem dos processos químicos em regime transiente. Numa segunda etapa apresenta um confronto autocrítico entre as diversas respostas dos modelos desenvolvidos, introduzindo ou eliminando hipóteses simplificativas com relativo aumento ou diminuição do grau de complexidade na descrição fenomenológica do processo, objetivando assim definir "o melhor" modelo, que contenha todas as informações fenomenológicas principais e que ao mesmo tempo seja suficientemente elástico, confiável e de real significado prático. Numa terceira etapa estuda-se a simulação do comportamento dinâmico de colunas, com concentração de impureza no produto de topo variando de  $10^3$  a  $10^6$  ppm.
- o capítulo quatro aplica o modelo dinâmico desenvolvido ao problema do controle da coluna de alta pureza, procurando explorar diferentes aspectos da teoria do controle: seleção da configuração adequada de controle dual (utilização conjunta de informações em regime estacionário e dinâmico), análise dinâmica de interações (método da matriz dos ganhos relativos), controle dual ideal x real (com inclusão de um tempo de atraso), controlador não linear (função desacopladora entre as malhas topo/fundo) e outras técnicas de controle avançado (ação combinada antecipação + retroação).

## 2 - MODELAGEM DINÂMICA DA COLUNA

Nos últimos anos, a dinâmica de colunas de destilação tem sido tema de pesquisa de numerosos autores; contudo um claro confronto entre as suas diversas possibilidades modelísticas objetivando uma análise comparativa da representatividade das equações utilizadas no reconhecimento da realidade do processo, não se encontra na literatura.

A pesquisa dessa autoconsistência do modelo se traduz em uma profunda análise do significado dos termos capacitivos que aparecem nas equações dos balanços materiais e térmicos, referentes aos estágios da coluna, e seus efeitos na determinação da forma, dimensão e escala da resposta dinâmica obtida em função das diferentes perturbações impostas com particular atenção a dinâmica da composição e do fracionamento (ou dinâmica lenta), na qual os termos capacitivos apresentam maior efeito.

A precisão da capacidade descritiva do modelo também é fundamental nos casos de "dinâmica veloz", como aqueles controlados pela fluidodinâmica do sistema. Como consequência, a hidráulica do prato merece particular atenção na definição do modelo, visto o transitório hidráulico ser muito mais veloz que o transitório de composição e comportando uma menor constante de tempo do sistema.

### 2.1 - Modelos estacionários e dinâmicos de processos químicos : uma história paralela.

Os objetivos da modelagem dinâmica, assunto deste capítulo, resultam perfeitamente coerentes com os objetivos e finalidades típicas da modelagem estacionária. Muitas vezes, (Ranzi,1988) a análise dinâmica é estendida a situações que por sua própria natureza não permitem uma correta descrição com modelos do tipo estacionário. Dessa forma, parece interessante começar por evidenciar a estreita analogia entre as linhas de pesquisas desenvolvidas nos últimos vinte anos no campo dinâmico e depois identificá-las e reconhece-las no campo da simulação estacionária, para plantas químicas em geral como para colunas de destilação.

A figura 2.1 apresenta esquematicamente as diferenças existentes entre os "Programas de Flowsheeting", como TISFLO (De Leeuw den Bouter e Swenker, 1974), SPEED UP (Perkins et al, 1982), DIGMA (Pierucci et al, 1975), destinados a cálculos estequiométricos dos esquemas de processo na fase preliminar do projeto e aqueles mais rigorosos, os ditos "Programas Gerais de Simulação", largamente utilizados no projeto dos equipamentos e na verificação das condições de operação das plantas químicas. Os primeiros, por sua natureza simplificada, reconduzem o problema à resolução de um único sistema de equações algébricas, característica dos modelos a parâmetros concentrados,

permitem inversão entre variáveis dependentes e independentes facilitando a resolução de problemas de projeto, de gerenciamento, ou mais geral de otimização.

Os programas de simulação mais difundidos na literatura, como o PROCESS (1982) o ASPEN (1981), de caracterização típica de modelos com parâmetros distribuídos e utilizando-se de aproximações modulares, não apresentam uma análoga flexibilidade no confronto dos problemas de projeto e otimização. Somente nos tempos mais recentes a simulação de grandes fluxogramas de processo com a presença de correntes de reciclo conduziram a introdução de oportunos promotores de convergência (Pierucci et al, 1982, Westerberg, 1979, Evans, 1982), que transformam localmente os modelos "rigorosos" em modelos evolutivos simplificados objetivando eliminar ou pelo menos reduzir o limite de aplicabilidade do programa de simulação ao problema de individualização da condição ótima. (Ranzi et al, 1988).

Analisando do ponto de vista da Figura 2.2, torna-se fácil classificar os diversos programas de simulação dinâmica e reconhecer pela continuidade lógica, a existência de duas classes de programa, que encontram a sua correspondência e analogia respectivamente nos programas de "Flowsheeting" e de "Simulação". Importante observar que os primeiros programas rigorosos de simulação dinâmica surgem cerca de um decênio após os mais simplificados, como também em seu desenvolvimento são utilizadas as mesmas aproximações globais (Holl et al, 1987) ou sequenciais (Hillestad e Hertzberg, 1986) já utilizadas em campo estacionário. Parece-nos também bastante razoável prever que no próximo decênio, também em campo dinâmico os programas de simulação dinâmica de plantas químicas partindo de modelos "rigorosos", estarão em grau de gerar modelos evolutivos locais do tipo simplificado e com rápida velocidade de convergência da simulação.

Também no setor particular das colunas de destilação o desenvolvimento de modelos estacionários e a interpretação dessa evolução apresentam estreita analogia com o desenvolvimento de modelos dinâmicos. Assim na Figura 2.3 apresenta-se um quadro sintético das diversas aproximações utilizadas na modelagem de colunas de destilação em campo estacionário, partindo de métodos "short cut" para chegar aos métodos mais atuais ditos "rigorosos" e amplamente utilizados. Os motivos desta evolução é atribuir-se a sempre melhor caracterização do equilíbrio líquido-vapor e a maior disponibilidade e confiabilidade dos bancos de dados físico-químicos. Ressalte-se também que a transição dos programas simplificados para os programas rigorosos com aproximação global (Naphtali e Sandholm, 1971; Boston e Sullivan, 1972; Ishii e Otto, 1973; Buzzi Ferraris, 1981) só foi possível devido a crescente potência de cálculo dos computadores, bem como do desenvolvimento de eficientes técnicas numéricas para resolução dos sistemas de equações algébricas não lineares. A Figura 2.4 apresenta analogia entre o que ocorreu na simulação estacionária e o que está acontecendo na simulação dinâmica de colunas de destilação.

Compreende-se assim, que os estágios limitantes no desenvolvimento desses modelos são resultantes, não somente da disponibilidade de adequada potência de cálculo, mas sobretudo da capacidade de integrar numericamente o sistema de equações algébrico-diferenciais, característico do modelo de colunas de destilação.

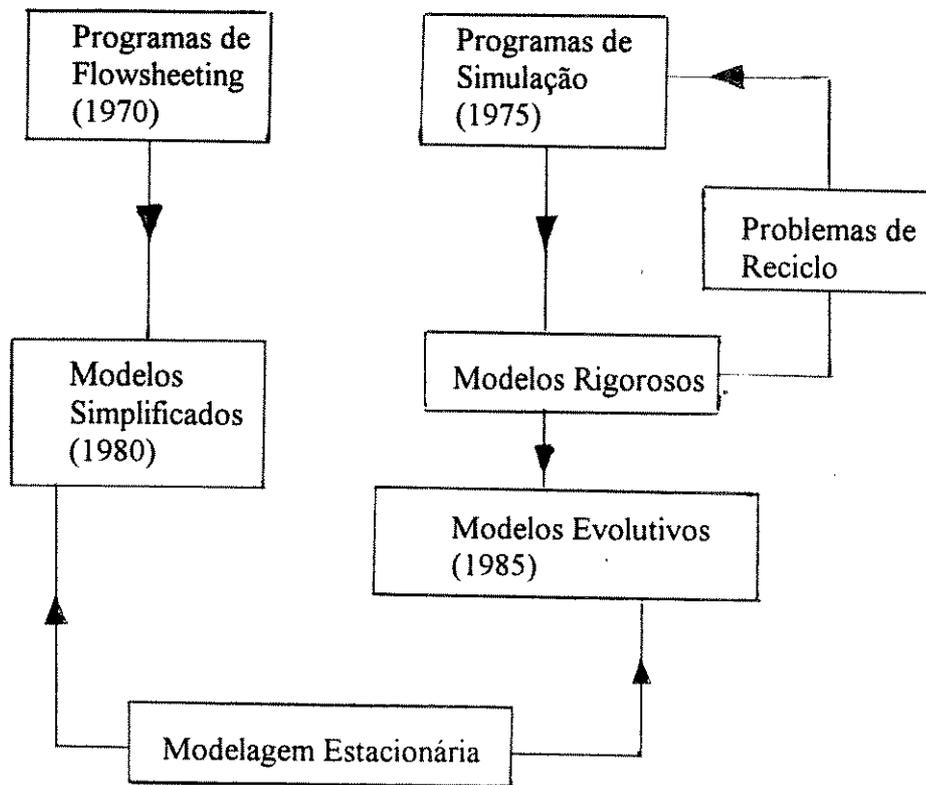


Fig. 2.1 - Programas em regime estacionário para plantas químicas  
"Flowsheeting - Simulation"

<b>Condição Estacionária</b>		<b>Condição Dinâmica</b>	
I- Programas Simplificados:		I- Programas Simplificados:	
		- compiladores para problemas dinâmicos: (ACSL, DACSL, DASP...1975)	
-flowsheeting: (TISFLO...1974), (DIGMA...1975), (SPEED...1982,1985).		- simuladores dinâmicos simplificados: (SPEED UP, QUASILIN, TISFLO, BOSS.. ...1980)	
		- programas educacionais: (BEDSOCK...1980).	
		- projeto de sistemas de controle: (CONSYD.....1986)	
II- Programas Rigorosos de Simulação Estática:		II- Programas Rigorosos de Simulação Dinâmica:	
aproximações modulares	aproximações globais	aproximações modulares (Hillestad, 1986)	aproximações globais (Marquardt, 1986)
modelos evolutivos		modelos simplificados	

Fig. 2.2 - Paralelo na modelagem estacionária/dinâmica de plantas químicas

## Colunas de Destilação - Condição Estacionária

### I- Métodos Simplificados:

#### -Short-Cut:

Mc Cabe Thiele	1925
Fenske Underwood	1932
Gilliland	1940
Erbar Maddox	1961

### II- Métodos Rigorosos:

#### -Decomposição:

Wang Henke	1966
Holland	1966

#### -Global:

Naphtali Sandholm	1971
Boston e Sullivan	1972
Ishii e Otto	1973

#### -Programas Gerais:

ASPEN	1972
PROCESS	1973
PRIMASIMULA	1980

melhor caracterização do equilíbrio líquido/vapor devido a  
----->  
disponibilidade dos bancos de dados físico-químicos.

fatores evolutivos do  
desenvolvimento de  
métodos aproximados  
para métodos rigorosos.

eficientes métodos numéricos para resolução dos sistemas  
----->  
de equações algébricas não lineares.

crescente avanço da potência de cálculo  
----->  
dos computadores.

Fig. 2.3: Enfoques utilizados na modelagem em regime estacionário de colunas de destilação.

## I- Modelo Estacionário

solução short-cut (1950)	método de decomposição (1960)	método global (1970)
--------------------------------	-------------------------------------	----------------------------

metodologia de cálculo para o sistema

----->  
de equações algébricas da coluna

## II-Modelo Dinâmico

A-Evolução do grau de descrição fenomenológica do modelo

- modelos simplificados

- modelos rigorosos

integração com métodos  
explícitos

- Mah (1962)  
- Holland (1966)  
- Luyben (1965)

integração com métodos  
semi-implícitos

- Rosebrock (1962)  
- Distefano (1968)

integração com métodos  
explícitos (Euler, R.K.)

- Brambila (1975)  
- Odloack (1977)  
- Poiani-Mendes (1984)

integração com métodos  
implícitos

- Boston (1982)  
- Gallun - Holland (1982)  
- Gani (1985)  
- Ranzi et al (1985)  
- Cuille Reklaitis (1986)

B - Evolução do algoritmo de integração numérica:

Euler (1750)  
Runge Kutta (1900)

Rosebrock (1962)  
Michelsen (1970)

Gear (1972)  
Petzold (1982)

metodologias para a integração numérica do

----->  
sistema de equações diferenciais da coluna

Fig. 2.4 - Analogia no desenvolvimento: modelo estacionário x dinâmico de colunas de destilação

## 2.2 - Estrutura do modelo dinâmico.

### Aspectos fenomenológicos.

Com base nas considerações anteriores serão aqui desenvolvidos diferentes modelos com diferentes graus de complexidade e de capacidade descritiva, com ênfase especial à introdução de diferentes termos capacitivos materiais que intervêm na dinâmica dos estágios de separação das colunas de destilação e procurando conjuntamente analisar a sua eficácia e importância relativa.

#### 2.2.1 - Modelo do prato a uma constante de tempo

Uma representação esquemática de um típico prato de colunas é apresentada na fig. 2.5. Na figura são indicados os fluxos materiais e térmicos, como também as principais variáveis necessárias para descrever o sistema. Cada prato considera uma retirada líquida e vapor, uma alimentação na fase líquida, vapor ou mistura de ambas e uma entrada ou saída de calor.

Na formulação do modelo são assumidas as seguintes hipóteses simplificativas para cada prato:

- (I) as fases líquido e vapor estão perfeitamente misturadas e em condições de equilíbrio químico.
- (II) o 'holdup' molar do líquido no 'downcomer' é considerado desprezível;
- (III) despreza-se o termo capacitivo devido ao acúmulo de vapor no estágio, ou seja o 'holdup' molar do vapor é desprezível comparado com o 'holdup' molar do líquido.

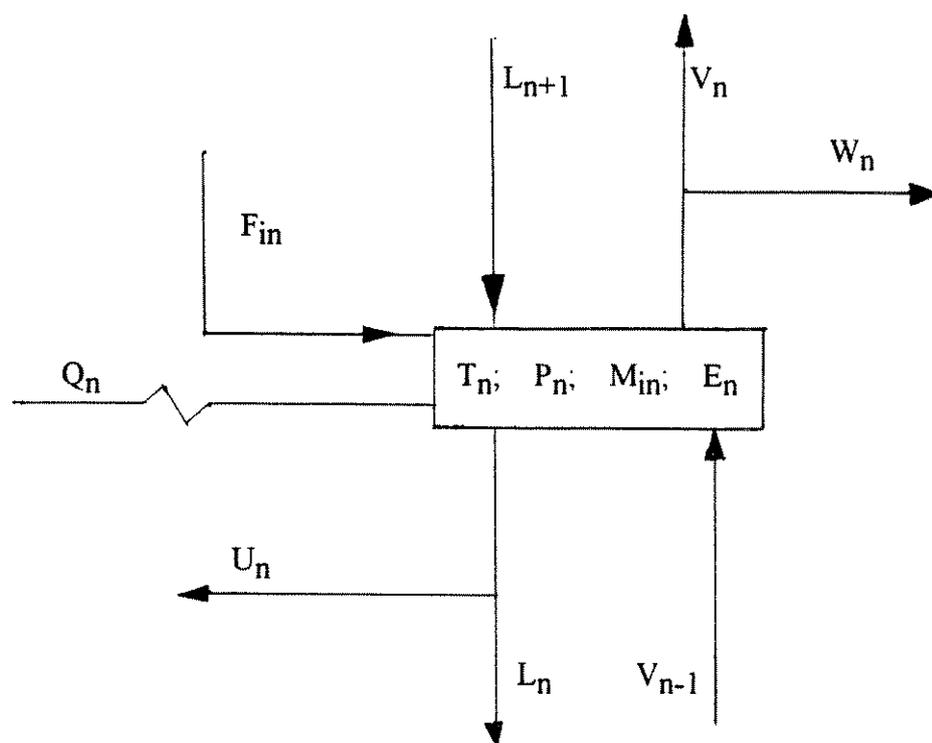


Fig. 2.5 - Esquema do prato para o modelo a uma constante de tempo.

Se for NC o número de componentes considerados, o modelo dinâmico da figura 2.5 é constituído por  $(2NC + 5)$  equações, a saber  $(NC+1)$  equações diferenciais e  $(NC+4)$  equações algébricas:

- NC Balanços Materiais

$$\frac{dM_{i,n}}{dt} = L_{n+1} \frac{M_{i,n+1}}{\sum_i M_{i,n+1}} - (U_n + L_n) \frac{M_{i,n}}{\sum_i M_{i,n}} - Y_{i,n}(V_n + W_n) + V_{i,n-1} + F_{i,n} \quad (2.1)$$

- 1 Balanço de Energia

$$\frac{dE_n}{dt} = HV_{n-1}V_{n-1} - HV_n(V_n + W_n) - HL_n(L_n + U_n) + HL_{n+1}L_{n+1} + HF_n \sum_i F_{i,n} + Q_n \quad (2.2)$$

- NC Relações de Equilíbrio Líquido-Vapor

$$Y_{i,n} = K_{i,n}(T_n; P_n; \frac{M_{i,n}}{\sum_i M_{i,n}}; Y_{i,n}) \frac{M_{i,n}}{\sum_i M_{i,n}} \quad (2.3)$$

## - 2 Relações Fluidodinâmica

$$\sum_i M_{i,n} = f(L_n, V_n, \text{geometria}) \quad (2.4)$$

$$P_n = P_{n+1} + \Delta P_{n+1}(L_n, V_n, \text{geometria}) \quad (2.5)$$

## - 1 Definição da Função Energia Interna

$$E_n = HL_n \sum_i M_{i,n} \quad (2.6)$$

## - 1 Equação do ponto de bolha

$$\sum_i Y_{i,n} = 1 \quad (2.7)$$

As relações fluidodinâmicas (2.4) e (2.5) traduzem o efeito de parâmetros dos pratos, tais como área ativa, área do 'downcomer', 'holdup' molar e queda de pressão, na previsão do comportamento dinâmico do prato. As correlações utilizadas na determinação das variáveis hidráulicas são muitas vezes empíricas e são apresentadas no Apêndice A.

A relação (2.6) encontra a sua justificativa formal assumindo que para a fase líquida a capacidade calorífica a volume constante e aquela a pressão constante são iguais e portanto a energia interna pode ser substituída pela entalpia. As entalpias molares das fases líquida (HL), vapor (HV) e da alimentação (HF), bem como a relação de equilíbrio (K) entre as fases líquido-vapor são definidas no modelo termodinâmico.

As relações escritas para o prato da Figura 2.5 se aplicam identicamente a todos os pratos da coluna; condensador e refeedor necessitam de um tratamento separado.

Se não contarmos as variáveis  $L_{i,n+1}$  e  $V_{i,n-1}$  que são saídas, respectivamente, dos pratos (n+1) e (n-1), o modelo do prato contém (3NC+9) variáveis.

$M_{i,n}$ : 'holdup' molar, fase líquida, componente i no prato n;	NC
$Y_{i,n}$ : fração molar do componente i na fase vapor no prato	NC

$V_n$ : vazão de vapor total na saída do prato n;	1
$T_n$ : temperatura do prato n;	1
$L_n$ : vazão de líquido total na saída do prato n;	1
$E_n$ : energia interna do prato n;	1
$P_n$ : pressão no prato n;	1
$U_n$ : retirada líquido do prato n;	1
$W_n$ : retirada vapor do prato n;	1
$F_{i,n}$ : vazão de alimentação do componente i no prato n;	NC
$HF_n$ : entalpia da alimentação no prato n;	1
$Q_n$ : calor retirado ou fornecido ao prato n.	1

O número de graus de liberdade do prato, ou o número de variáveis que devem ser especificadas, para que a operação do prato assim definido seja matematicamente consistente e solucionável é dado por:

$$(3NC+9)-(2NC+5) = NC+4.$$

Portanto,  $NC+4$  variáveis podem ser especificadas independentemente no projeto, tais como:

- vazão molar para cada componente ( $F_{i,n}$ ) da alimentação	NC
- entalpia da alimentação ( $HF_n$ )	1
- calor retirado ou fornecido ( $Q_n$ )	1
- vazão de retirada de líquido do prato n ( $U_n$ )	1
- vazão de retirada de vapor do prato n ( $W_n$ )	1

Na descrição da estrutura de base deste primeiro modelo ressalte-se que se for válido o comportamento ideal de ambas as fases, o sistema pode ser reduzido a  $(NC + 5)$  equações através da substituição da equação (2.3) na equação (2.1) e eliminando a variável  $Y_{i,n}$  do sistema global.

### 2.2.2 - Modelo do prato a duas constantes de tempo

Esse modelo pode ser obtido do anterior através da eliminação da segunda hipótese simplificativa mencionada, isto é, introduzindo o termo de capacidade devido a presença do downcomer no prato. Esse novo elemento não modifica diretamente a dinâmica do contato líquido-vapor e sua relativa taxa de transferência de massa, mas resulta na introdução de um tempo de atraso para a composição, temperatura e vazão da fase líquida na coluna, influenciando desta forma a evolução dinâmica do fenômeno global. Todas as outras hipóteses simplificativas anteriormente descritas são conservadas. Para este modelo a representação esquemática do estágio é apresentada na Figura 2.6. A descrição do 'downcomer' requer a introdução de  $(NC + 3)$  novas equações:

- NC Balanços Materiais

$$\frac{dM_{i,n}^d}{dt} = L_n \frac{M_{i,n}}{\sum_i M_{i,n}} - L_n^d \frac{M_{i,n}^d}{\sum_i M_{i,n}^d} \quad (2.8)$$

- 1 Balanço de Energia

$$\frac{dE_n^d}{dt} = HL_n L_n - HL_n^d L_n^d \quad (2.9)$$

- 1 Relação Fluidodinâmica

$$\sum_i M_{i,n}^d = (A_d \cdot h_c \cdot \rho^d)_n \quad (2.10)$$

- 1 Definição da Função Energia Interna

$$E_n^d = HL_n^d \sum_i M_{i,n}^d \quad (2.11)$$

A equação (2.10) representa a congruência interna de volume no 'downcomer'. Ela requer a determinação da perda de carga devido ao fluxo de líquido através da secção de saída do 'downcomer' conjuntamente com a perda de carga do vapor no prato superior.

Desta forma, (NC+1) equações diferenciais e 2 equações algébricas, assim como (NC + 3) novas variáveis, são adicionadas ao modelo do prato a uma constante de tempo:

$M_{i,n}$ = 'holdup' molar, fase líquida, componente i, 'downcomer' do prato n;	NC
$T_n$ = temperatura, 'downcomer' do prato n;	1
$L_n$ = vazão, fase líquida, na saída do 'downcomer' do prato n;	1
$E_n$ = energia interna no 'downcomer' do prato n;	1

O número de equações e variáveis adicionadas ao modelo a uma constante de tempo, são iguais, ou seja (NC+3), desta forma os graus de liberdade que devem ser especificados para que o sistema assim definido seja matematicamente consistente e solucionável são os mesmos descritos no modelo a uma constante de tempo.

Para efeito de modularidade no programa geral, preferiu-se manter a estrutura de bloco para cada prato; por essa razão faz-se referência a este modelo como constituído de (3NC+8) equações diferenciais e algébricas.

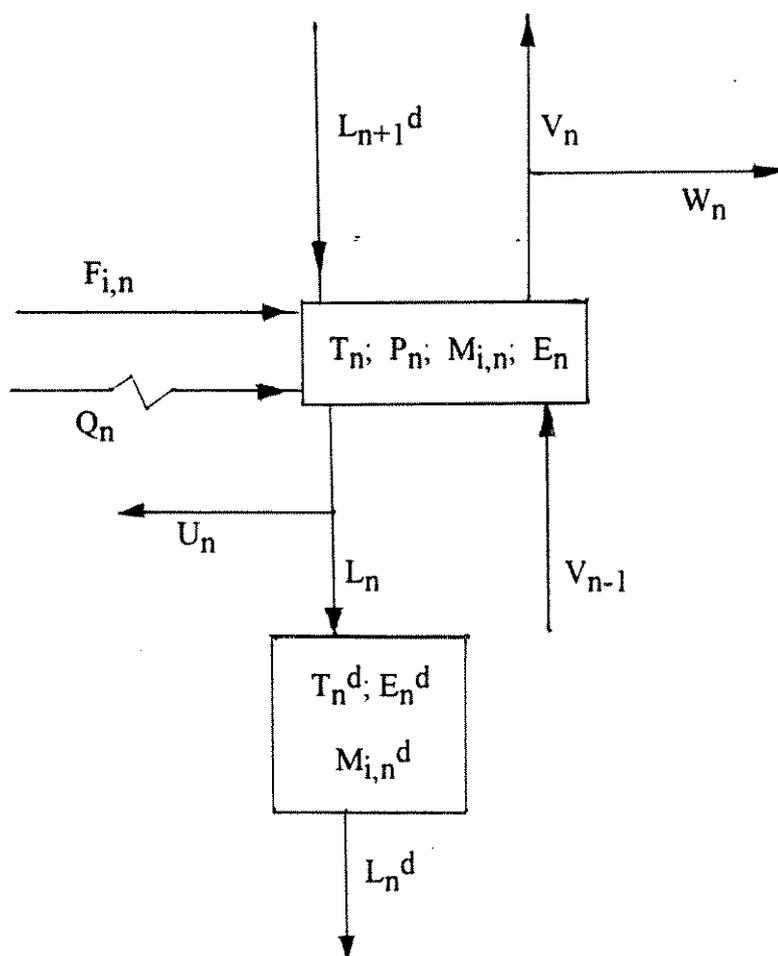


Fig. 2.6 - Esquema do prato para o modelo a duas constantes de tempo.

### 2.2.3 - Modelo do prato a três constantes de tempo

É ainda possível aumentar a capacidade descritiva do modelo eliminando a hipótese simplificativa que despreza o "holdup" vapor no prato. Isso implica na definição de um termo capacitivo caracterizando o acúmulo de vapor no prato. Essa capacidade é devido a presença de espuma no seio da fase líquida e do vapor presente entre dois estágios sucessivos.

O diagrama esquemático da Figura 2.7 caracteriza os três termos capacitivos e evidencia os diversos fluxos materiais e térmicos em questão.

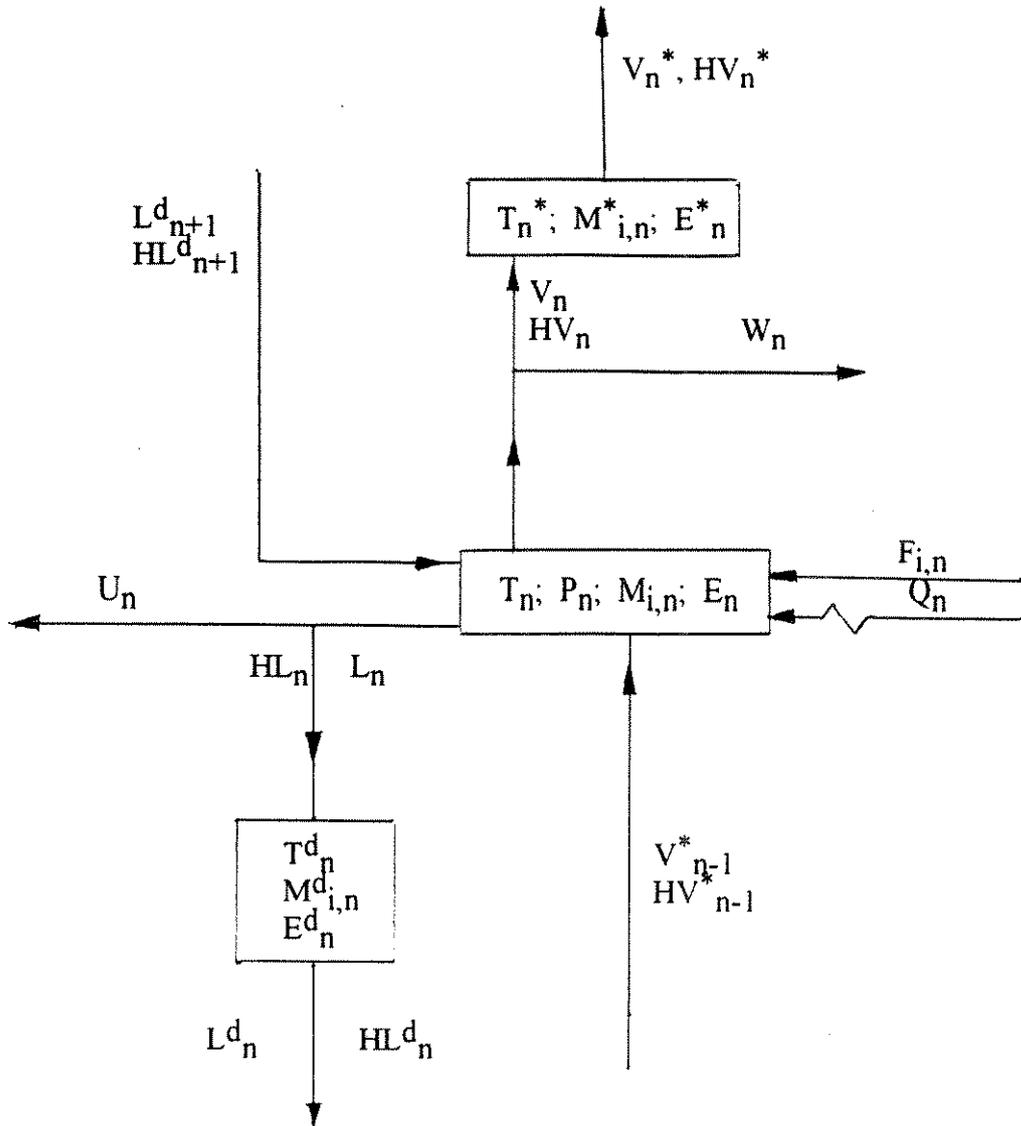


Fig. 2.7 - Esquema do prato para o modelo a três constantes de tempo.

Seguindo o mesmo procedimento já adotado para o desenvolvimento do modelo a duas constantes de tempo, a introdução do "holdup" do vapor requer (NC+3) novas variáveis e equações para cada estágio:

- NC Balanços Materiais

$$\frac{dM_{i,n}^*}{dt} = V_{i,n} - V_n^* \frac{M_{i,n}^*}{\sum_l M_{i,n}^*} \quad (2.12)$$

- 1 Balanço de Energia

$$\frac{dE_n^*}{dt} = HV_n V_n - HV_n^* V_n^* \quad (2.13)$$

- 1 Relação Fluidodinâmica

$$\sum_i M_{i,n}^* = (t_s - h_L) A_n \rho^l \quad (2.14)$$

- 1 Definição da Função Energia Interna

$$E_n^* = HV_n^* \sum_i M_{i,n}^* \quad (2.15)$$

Semelhante ao caso da equação (2.10), a relação fluidodinâmica equação (2.14) é proposta em termos de congruência volumétrica,  $t_s$  representa o espaço entre os pratos e  $h_L$  a altura equivalente de líquido clarificado no prato, facilmente derivado da equação (2.4).

Dessa forma o número total de equações desse modelo é (4NC + 11), e analogamente ao modelo anterior não ocorre alteração na variação do sistema visto o número de equações e variáveis adicionadas serem iguais.

Em face da pequena influência do "holdup" da fase vapor presente no prato (Biardi, F. et al, 1989), optou-se pela modificação desse modelo, introduzindo somente duas novas variáveis e equações, o "holdup" global de vapor no prato e a vazão total de vapor saindo do prato. Isto significa que a fase vapor é mantida em condições de equilíbrio (temperatura e composição) com o líquido que deixa o prato n. Por esta razão a equação (2.12) é reconduzida a um simples balanço material global:

$$\sum_i \frac{dM_{i,n}^*}{dt} = V_n - V_n^* \quad (2.12)$$

A relação fluidodinâmica (2.14) permanece praticamente inalterada. Assim, procurando-se manter a modularidade e estrutura flexível de blocos, faz-se referência a este modelo como constituído de (3NC+10) equações diferenciais e algébricas

## 2.2.4 - Modelo do refervedor

Neste trabalho é desenvolvida a modelagem dinâmica de um refervedor do tipo "Kettle" (a modelagem de refervedores do tipo termosifão vertical é dada por Raman, 1985), representado esquematicamente na Figura 2.8. No interior do refervedor Kettle individualizam-se dois volumes de controle, nos quais efetuam-se os balanços materiais e energéticos que permitem a descrição macroscópica do fenômeno em exame.

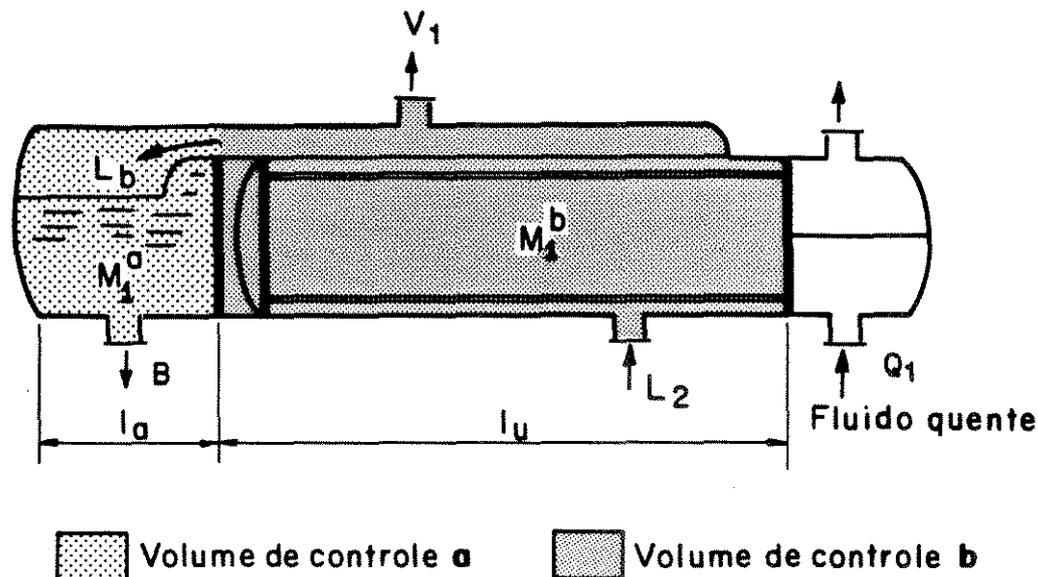


Fig. 2.8: Diagrama esquemático do refeedor 'Kettle'

O modelo proposto considera conhecida a geometria do refeedor e perfeitamente caracterizadas as variáveis da corrente de entrada: vazão, composição e entalpia da alimentação, prevista ser líquido no ponto de bolha, proveniente do primeiro prato da coluna.

A capacidade molar de líquido no interior do refeedor é indicada com a expressão 'holdup' e representada na Figura 2.8 pelo holdup  $M_1^a$  (volume de controle A) e  $M_1^b$  (volume de controle B).

As hipóteses consideradas no desenvolvimento do modelo são as seguintes:

- os 'holdups' ( $M_1^a$  e  $M_1^b$ ) constituem uma fase homogênea líquida. O volume ocupado pelo vapor é desprezível;
- o sistema mantém-se perfeitamente misturado;
- o vapor que sai do refeedor está em equilíbrio termodinâmico com o líquido da secção b. A hipótese formulada do equilíbrio termodinâmico é justificada visto o

tempo de permanência do fluido no refeedor, quando comparado com o prato, ser nitidamente superior;

- todas as partes do refeedor são consideradas perfeitamente adiabáticas em relação ao ambiente.

O modelo dinâmico do refeedor contém 3NC+7 equações nos volumes de controle a e b,

**a) volume de controle b:**

- NC balanços parciais molares :

$$\frac{dM_{i,1}^b}{dt} = L_{i,2} - L_b \cdot \frac{M_{i,1}^b}{\sum_i M_{i,1}^b} - Y_{i,1} \cdot V_1 \quad (2.16)$$

- 1 balanço de energia :

$$\frac{dE_1^b}{dt} = HL_2 \cdot \sum_i L_{i,2} - HV_1 \cdot V_1 - L_b \cdot HL_b + Q_1 \quad (2.17)$$

- NC relações de equilíbrio líquido-vapor :

$$Y_{i,1} = K_{i,1} \left( T_1, P_1, \frac{M_{i,1}^b}{\sum_i M_{i,1}^b} \right) \cdot \frac{M_{i,1}^b}{\sum_i M_{i,1}^b} \quad (2.18)$$

- 1 correlação hidráulica :

$$\sum_i M_{i,1}^b = f(L_b, \text{geometria}) \quad (2.19)$$

- 1 definição da função energia interna :

$$E_1^b = HL_b \cdot \sum_i M_{i,1}^b \quad (2.20)$$

- 1 equação do ponto de bolha :

$$\sum_i Y_{i,1} = 1 \quad (2.21)$$

- 1 equação do balanço da quantidade de movimento :

$$P_1 = P_2 + \Delta P_2(L_2, V_2, \text{geometria}) + \Delta P_f(V_1, \text{geometria}) \quad (2.22)$$

**b) volume de controle a :**

- NC balanços parciais molares :

$$\frac{dM_{i,1}^a}{dt} = L_{i,b} - B \frac{M_{i,1}^a}{\sum M_{i,a}^a} \quad (2.23)$$

- 1 equação do balanço de energia

$$\frac{dE_1^a}{dt} = HL_b L_b - HL_B B \quad (2.24)$$

- 1 definição da função energia interna

$$E_1^a = HL_B \sum M_{i,1}^a \quad (2.25)$$

O 'holdup' molar de líquido no volume de controle b está conceitualmente ligado a altura do líquido no refeedor, podendo-se exprimi-lo como a soma de moles contida no volume definido pela altura do vertedouro do refeedor (volume livre do refeedor ocupado pelo líquido) e pelo volume de líquido acima desta altura (computado pela relação de Francis, Treybal-1981). Essa somatória é representada pela correlação hidráulica 2.19 e descrita no apêndice E.

A equação 2.22 relaciona a pressão no refeedor ( $P_1$ ) com a pressão no primeiro prato ( $P_2$ ) da coluna,  $\Delta P_2$  representa a queda total de pressão no prato e  $\Delta P_1$  a perda de carga por atrito na tubulação de saída de vapor, do refeedor para o fundo da coluna (Apêndice E).

A introdução de um termo capacitivo que considera o 'holdup' molar de líquido no espaço de saída após o vertedouro, volume de controle a, é feita prevendo uma eventual regulação da vazão de saída de líquido do refeedor.

Para cada equação são associadas variáveis escritas em correspondência. Desta forma o modelo contém 5NC+13 variáveis :

- 'holdup', fase líquido, do componente i (volume de controle b) $M_{i,1}^b$ (kmol)	-----	NC
- energia interna $E_1^b$ (kcal)	-----	1
- vazão molar do componente i na corrente de alimentação do sistema $L_{2,1}$ (kmol/min)	-----	NC
- vazão molar líquido na saída do volume de controle b, $L_b$ (kmol/min)	-----	1
- vazão molar do vapor $V_1$ (kmol/min)	-----	1
- fração molar do componente i na fase vapor $Y_{i,1}$ (adim)	-----	NC
- temperatura do sistema (equilíbrio líquido-vapor) $T_1^b$ (K)	-----	1
- pressão no sistema $P_1$ (atm)	-----	1
- constante de equilíbrio $K_{i,j}$ ( adim)	-----	NC

- entalpia da corrente de alimentação do sistema	$HL_2$ (kcal/mol)	-----	1
- entalpia molar da corrente $V_1$ , $HV_1$ (kcal/kmol)		-----	1
- entalpia molar da corrente $L_b$ , $HL_b$ (kcal/kmol)		-----	1
- pressão no primeiro prato da coluna $P_2$ (atm)		-----	1
- taxa de calor fornecido ao refeedor $Q_1$ (kcal/min)		-----	1
- 'holdup', fase líquido, do componente 1, (volume de controle A) $M_{i,1}^a$ (kmol)		-----	NC
- vazão molar de líquido $B$ (kmol/min)		-----	1
- energia interna, $E_1^a$ (kcal/min)		-----	1
- temperatura no volume de controle de controle a $T_1^a$ (K)		-----	1

O número total de variáveis pode ser reduzido, visto que :

- do modelo termodinâmico e propriedades físicas tem-se,  $HL_b$ ;  $HV_1$ ;  $HL_2$ ;  $K_{ij}$ ; ou seja NC + 3 variáveis,

- das especificações de projeto e geometria do refeedor-coluna tem-se,  $L_{2,1}$ ;  $\Delta P_2$ ;  $\Delta P_f$  ou seja NC + 2 variáveis.

Desta forma o modelo é reduzido para :  
 ( 5NC + 13 ) - ( 2NC + 5 ) = 3NC + 9 variáveis.

Como o modelo apresenta 3NC + 7 equações, o refeedor isoladamente, tal como definido, apresenta dois graus de liberdade, podendo-se especificar por exemplo :

- a taxa de calor fornecida ao refeedor  $Q_1$
- a vazão molar do produto de fundo B.

### 2.2.5 - Modelo do condensador

Não obstante o exemplo aplicativo de destilação de alta pureza estudado no presente trabalho (sistema metanol-água) utilizar um condensador total, Figura 3.1, objetivando uma maior generalidade do modelo dinâmico do condensador, apresenta-se aqui a modelagem dinâmica do sistema condensador-tambor de refluxo (Figura 2.9) com condensação parcial. A situação de condensação total é simulada pelo presente modelo considerando-se nula a vazão molar do vapor ( $W_{ns}$ ) que sai do condensador e a igualdade entre as composições molares de entrada ( $Y_{i,ns-1}$ ) e saída ( $X_{i,ns}$ ) do condensador. Seguindo convenção adotada no modelo, calor fornecido ao sistema é considerado com o sinal positivo e calor retirado do sistema é negativo.

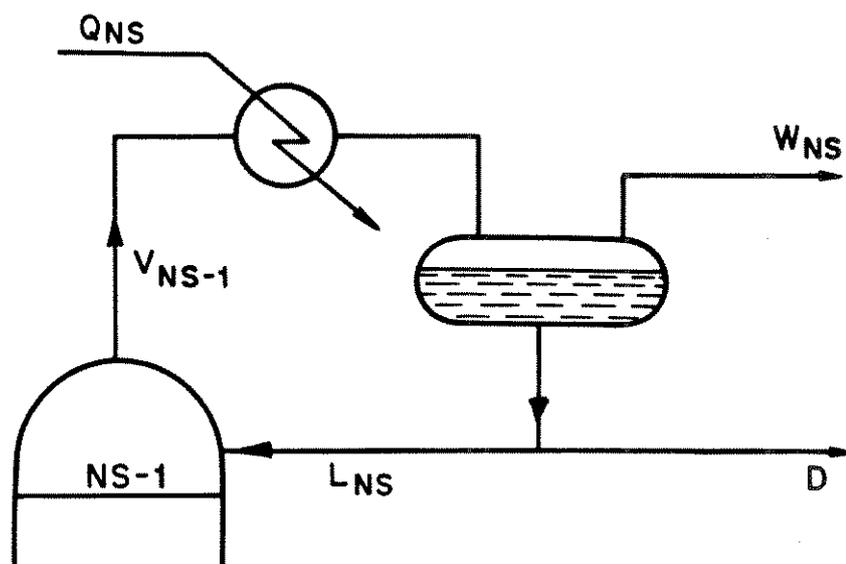


Fig. 2.9 Diagrama esquemático sistema condensador - tambor de refluxo

Na formulação do modelo do condensador as seguintes hipóteses simplificadoras são efetuadas:

- o sistema condensador - tambor de refluxo de topo é considerado conjuntamente representando assim o último estágio de equilíbrio na coluna (estágio NS);
- o acúmulo de massa no condensador propriamente dito é desprezível,
- o sistema mantém-se perfeitamente misturado;
- o conjunto condensador-tambor de refluxo é considerado perfeitamente adiabático em relação ao ambiente,

O modelo contém  $2NC + 3$  equações :

- NC balanço material por componente:

$$\frac{dM_{i,ns}}{dt} = -(L_{ns} + D) \frac{M_{i,ns}}{\sum_i M_{i,ns}} - Y_{i,ns} \cdot W_{ns} + V_{i,ns-1} \quad (2.26)$$

- 1 balanço global de energia:

$$\frac{dE_{ns}}{dt} = HV_{ns-1} \cdot V_{ns-1} - HV_{ns} \cdot W_{ns} - HL_{ns} \cdot (L_{ns} + D) + Q_{ns} \quad (2.27)$$

- NC relações de equilíbrio:

$$Y_{i,ns} = K_{i,ns} \left( T_{ns}, P_{ns}, \frac{M_{i,ns}}{\sum_i M_{i,ns}} \right) \cdot \frac{M_{i,ns}}{\sum_i M_{i,ns}} \quad (2.28)$$

- 1 definição da função energia interna:

$$E_{ns} = HL_{ns} \cdot \sum_i M_{i,ns} \quad (2.29)$$

- 1 equação do ponto de bolha:

$$\sum_i Y_{i,1} = 1 \quad (2.30)$$

Em termos globais o modelo é constituído de  $4NC + 10$  variáveis:

- holdup parcial molar $M_{i,ns}$ (kmol)	-----	NC
- energia interna $E_{ns}$ (kcal)	-----	1
- vazão molar de destilado D (kmol/min)	-----	1
- vazão de refluxo $L_{ns}$ (kmol/min)	-----	1
- fração molar do componente i na fase vapor $Y_{i,ns}$ (adim)	-----	NC
- vazão molar de retirada de vapor $W_{ns}$ (kmol/min)	-----	1
- vazão molar do componente i na corrente de vapor, $V_{i,ns-1}$ proveniente do estágio NS-1 (kmol/min)	-----	NC
- constante de equilíbrio $K_{i,ns}$ (adim)	-----	NC
- temperatura do sistema (equilíbrio líquido-vapor) $T_{ns}$ (K)	-----	1
- pressão do sistema $P_{ns}$ (atm)	-----	1
- entalpia molar da corrente $V_{ns-1}$ (kcal/kmol)	-----	1
- entalpia molar da corrente $W_{ns}$ (kcal/kmol)	-----	1
- entalpia molar do destilado D (kcal/kmol)	-----	1

- taxa de calor retirada pelo fluido de resfriamento  $Q_{ns}$  (kcal/min) ----- 1

O número total de variáveis pode ser reduzido:

- do modelo termodinâmico e propriedades físicas tem-se,  $K_{i,ns}$ ;  $HV_{ns-1}$ ,  $HV_{ns}$ ,  $HL_{ns}$ , ou seja  $NC + 3$  variáveis,
- das especificações de projeto, considerando o condensador isoladamente,  $V_{i,ns-1}$  é conhecido ou seja  $NC$  variáveis.

Desta forma o número de variáveis do modelo fica reduzido a :

$$(4NC + 10) - (2NC + 3) = 2NC + 7 \text{ variáveis.}$$

Como o modelo apresenta  $2NC + 3$  equações, restam quatro variáveis a serem especificadas, de modo que o sistema seja matematicamente consistente e solucionável, ou seja o condensador tal como definido tem quatro graus de liberdade, a saber:

- vazão molar de refluxo de topo  $L_{ns}$ ,
- vazão molar da retirada de vapor  $W_{ns}$ ,
- vazão molar de destilado  $D$  e
- taxa de calor retirada  $Q_{ns}$  pelo fluido de resfriamento.

### 2.2.6 - Graus de liberdade de uma coluna de destilação.

Considera-se o modelo de coluna esquematizado na Figura 1.1, com uma corrente de alimentação; duas retiradas de produto no topo, uma na forma líquido ( $D$ ) e outra na forma vapor ( $W_{ns}$ ); uma retirada na forma líquido no fundo ( $B$ ); ausência de retiradas laterais nas secções de esgotamento e enriquecimento da coluna e com os pratos da coluna operando adiabaticamente.

O número total de equações que descrevem o comportamento dinâmico da coluna é dado por  $2NS.NC + 5NS + NC$ , ou seja ;

- pratos -----  $(NS - 2)(2NS + 5)$ ,
- refeedor -----  $3NC + 7$ ,
- condensador -----  $2NC + 3$ .

O número total de variáveis é  $2NS.NC + 5NS + 2NC + 6$ , a saber :

- $M_{i,1}^a$	-----	NC,
- $M_{i,n}^b$	-----	NC,
- $M_{i,n}$	-----	(NS - 2)NC,
- $M_{i,ns}$	-----	NC,
- $Y_{i,n}$	-----	(NS - 1)NC,
- $Y_{i,ns}$	-----	NC,
- $E_1^a$	-----	1,
- $E_1^b$	-----	1,
- $E_n$	-----	NS - 2,
- $E_{ns}$	-----	1,
- $T_1^a$	-----	1,
- $T_1^b$	-----	1,
- $T_n$	-----	NS - 2,
- $T_{ns}$	-----	1
- $P_n$	-----	NS,
- $L_n$	-----	NS - 1,
- $B$	-----	1,
- $D$	-----	1,
- $V_n$	-----	NS - 1,
- $W_{ns}$	-----	1,
- $F_{i,n}$	-----	NC,
- $HF_n$	-----	1,
- $Q_1$	-----	1,
- $Q_{ns}$	-----	1.

O número de graus de liberdade da coluna é então:

$$G_L = 2NSNC + 5NS + 2NC + 6 - 2NSNC - 5NS - NC = NC + 6.$$

Isto é, necessita-se especificar os valores de  $NC + 6$  variáveis de forma que o modelo da coluna seja matematicamente consistente e solucionável, os quais são especificados a seguir:

- **Especificações das perturbações** -  $NC + 1$  variáveis representam as principais perturbações da coluna:  $NC$  correspondente as vazões molares dos componentes ( $F_{i,n}$ ) e 1 correspondente a entalpia da alimentação ( $HF_n$ ). Seus valores na alimentação são especificados pelas condições externas a coluna.

- **Especificações dos objetivos de controle** - Podendo-se então manter cinco objetivos de controle, desde que há cinco graus de liberdade restantes. A operação controlada da coluna requer que as seguintes variáveis sejam mantidas nos valores desejados:

1. Composição da corrente de destilado,  $X_D$ .
2. Composição da corrente de fundo,  $X_B$ .
3. 'Holdup' molar de líquido no tambor de refluxo,  $M_{ns}$ .

4. 'Holdup' molar de líquido no refeedor,  $M_1^a$ .

5. Pressão no condensador,  $P_{ns}$ .

Ressalte-se que essas cinco especificações dos objetivos de controle podem variar, dependendo do particular objetivo operacional da coluna.

### 2.3 - Estrutura do modelo termodinâmico.

#### Determinação da constante de equilíbrio e entalpias das fases líquido e vapor.

O critério termodinâmico que deve ser satisfeito para o equilíbrio entre uma fase vapor e uma fase líquida, na mesma temperatura e pressão, é dado pelo sistema (NC equações) :

$$f_i^v = f_i^l \text{ para } i = 1, 2, \dots, NC \quad (2.31)$$

onde

$f_i^v$  = fugacidade do componente  $i$  na fase vapor,

$f_i^l$  = fugacidade do componente  $i$  na fase líquida e

$NC$  = número de componentes.

Para o cálculo do equilíbrio de fases de um sistema com  $NC$  componentes tem-se as seguintes variáveis :  $T$ ,  $P$ ,  $NC-1$  frações molares na fase líquida e  $NC-1$  frações molares na fase vapor, ou seja um total de  $2 \cdot NC$  variáveis:

Portanto, especificadas  $NC$  variáveis, as  $NC$  variáveis restantes podem ser determinadas pela resolução do sistema de equações de equilíbrio (2.31).

As equações (2.31) são de pouca utilização prática, a menos que as fugacidades possam ser relacionadas com quantidades acessíveis experimentalmente ( $X$ ,  $Y$ ,  $T$ ,  $P$ ). Essa relação é obtida através da introdução de duas funções auxiliares, o coeficiente de fugacidade  $\psi_i$ , e o coeficiente de atividade  $\gamma_i$ . Diferentes metodologias [Prausnitz et al (1980), Fredenslund et al (1977)] podem ser utilizadas para determinação destes coeficientes. Os métodos aqui utilizados são descritos a seguir.

#### 2.3.1 - Cálculo do coeficiente de fugacidade

Para um componente  $i$  na fase vapor o coeficiente de fugacidade é definido por:

$$\psi_i = \frac{f_i^V}{Y_i P} \quad (2.32)$$

Utilizando a equação virial de estado, truncada após o segundo termo, obtém-se Prausnitz et al (1980):

$$\ln \psi_i = \frac{P}{RT} (2 \sum_j Y_j B_{ij} - B), \quad (2.33)$$

com

$$B = \sum_i \sum_j Y_i Y_j B_{ij}; i e j = 1, 2, \dots, NC, \quad (2.34)$$

onde

$B_{ij}$  representa a interação entre as moléculas dos componentes  $i$  e  $j$ .

A dificuldade na utilização da equação (2.33) é quanto à possível ausência na literatura dos parâmetros necessários para sua resolução, principalmente quando ácidos carboxílicos estão presentes no sistema a ser estudado, neste caso os coeficientes de fugacidade devem ser calculados através da teoria química, [Poiani et al (1984)]. Para fluidos a pressões mais altas, normalmente utiliza-se a equação de estado de Redlich-Kwong [Prausnitz et al (1980)], ao invés da virial. A pressão em que se passa de uma para outra depende da substância e da temperatura do sistema.

Na utilização da equação (2.34) torna-se necessário a determinação do coeficiente virial  $B_{ij}$ , o qual por sua vez é função da temperatura. Uma correlação bastante simples e muito utilizada é a modificação apresentada por Tsonopoulos (1974) à correlação de Pitzer e Curl (Prausnitz et al - 1980). Uma segunda correlação, mais generalizada do que a de Tsonopoulos, foi apresentada por Hayden e O'Connell (1975).

A comparação entre valores experimentais e previstos para algumas substâncias puras, através das duas correlações, foi feita por Tsonopoulos (1974), que concluiu por ligeira superioridade de sua correlação. Portanto, para misturas não associadas ou fracamente associadas, como é o caso da mistura metanol-água, utilizou-se aqui a simples correlação de Tsonopoulos.

Estas duas correlações, juntamente com a correlação de Pitzer e Curl estão apresentadas no apêndice B.

### 2.3.2 - Cálculo do coeficiente de atividade

O coeficiente de atividade para um componente  $i$  na fase líquida é definido por:

$$\gamma_i = \frac{f_i^L}{f_i^{OL} X_i} \quad (2.35)$$

Esta equação relaciona a fugacidade do componente  $i$  na fase líquida,  $f_i^L$ , com a fração molar,  $X_i$ , e a fugacidade no estado de referência  $f_i^{OL}$ .

Os coeficientes de atividade estão diretamente relacionados com a energia molar em excesso de Gibbs,  $g^E$ , definida por (Smith - Van Ness, 1959):

$$g^E = R.T. \sum_i X_i \ln \gamma_i, \quad (2.36)$$

ou utilizando um modelo matemático, baseado em considerações moleculares que expresse a energia em excesso de Gibbs, em função da composição:

$$\ln \gamma_i = \frac{1}{RT} \frac{\partial (n_i g^E)}{\partial n_i} \quad T, P, n_{j \neq i}, \quad (2.37)$$

onde  $n_i$  é o número de moles do componente  $i$ , sendo:

$$n_t = \sum_j n_j \quad \text{e} \quad X_i = \frac{n_i}{n_t} \quad (2.38)$$

Dentre os modelos existentes na literatura que apresentam a vantagem de previsão do equilíbrio líquido-vapor multicomponente utilizando somente informações experimentais de sistemas binários, os mais utilizados, Prausnitz (1980), são o de Wilson, NRTL e, UNIQUAC.

O modelo UNIQUAC de Abrams, modificado por Anderson (Anderson et al -1978), dado abaixo, é um dos modelos que apresenta menores desvios no cálculo do equilíbrio e será aqui utilizado.

$$\ln \gamma_i = \ln \frac{\phi_i}{X_i} + \left( \frac{Z_e}{2} \right) q_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} + l_i - \frac{\phi_i}{X_i} \sum_j X_j l_j - q_i \ln \left( \sum_j \theta_j \tau_{j,i} \right) + q_i - q_i \sum_j \frac{\theta_j \tau_{i,j}}{\sum_k \theta_k \tau_{k,j}} \quad (2.39)$$

onde

$$\tau_{j,i} = \exp \left( -\frac{a_{j,i}}{T} \right) \quad \text{e} \quad \tau_{i,j} = \exp \left( -\frac{a_{i,j}}{T} \right) \quad (2.40)$$

$$l_j = \frac{Z_e}{2} (r_j - q_j) - (r_j - 1) \quad (2.41)$$

$$\phi_i = \frac{r_i X_i}{\sum_j r_j X_j} \quad (2.42)$$

$$\theta_i = \frac{q_i X_i}{\sum_j q_j X_j} \quad \text{e} \quad \theta_i = \frac{q_i X_i}{\sum_j q_j X_j} \quad (2.43)$$

Os parâmetros  $r$ ,  $q$ ,  $q'$  e  $Z_e$  são constantes relacionadas com a estrutura molecular dos componentes puros e são listados por Prausnitz (1980).

Os parâmetros binários  $a_{j,i}$  e  $a_{i,j}$  são ajustáveis a partir de dados experimentais e são funções da temperatura. Normalmente, contudo, devido a inexistência na literatura de correlações que exprimem a variação desse parâmetro com a temperatura, essa dependência é desprezada.

Na ausência de parâmetros binários  $a_{i,j}$  e  $a_{j,i}$  na literatura, mas existindo dados experimentais disponíveis dos pares binários (por exemplo dados de equilíbrio líquido-vapor, azeotrópicos, coeficientes de atividade a diluição infinita, etc) é possível estimar-se  $a_{i,j}$  e  $a_{j,i}$  através, por exemplo, do princípio da máxima verossimilhança (Prausnitz-1980).

Na ausência de  $a_{i,j}$  e  $a_{j,i}$  e também de dados experimentais, para soluções não eletrolíticas e pressões não elevadas os mesmos podem ser estimados através do conceito de contribuições de grupo.

Estimativas de propriedades termodinâmicas de misturas líquidas através de contribuições de grupos foram inicialmente sugeridas por Langmuir(1970), Deal(1973) e finalmente Wilson-Deal(1975) que aplicaram o método de contribuição de grupos na determinação do coeficiente de atividade. Baseados nestas idéias, Fredenslund(1977) e co-autores desenvolveram o método UNIFAC (Functional - group activity-coefficients). A dificuldade encontrada na utilização do Método UNIFAC é que a cada determinação do coeficiente de atividade tem-se que relacionar os diferentes grupos funcionais para cada componente da mistura, o que acaba gerando um tempo excessivo de computação, para o cálculo do equilíbrio. Isto pode ser evitado utilizando-se o método UNIFAC apenas para a determinação dos parâmetros binários dos modelos UNIQUAC ou WILSON, e subsequente utilização destes modelos para toda a faixa de temperatura e composição ( Poiani et al 1984).

Essa determinação é feita, se todos os parâmetros de interação de grupos forem disponíveis na literatura (Fredenslund, 1977), através do cálculo do coeficiente de atividade do componente  $i$  à diluição infinita no componente  $j$ , para todos os pares  $i$ - $j$  na mistura multicomponente, a duas temperaturas; a temperatura de saturação do menos volátil e a de saturação do mais volátil.

Com estes coeficientes de atividade à diluição infinita obtém-se os parâmetros  $\tau_{i,j}$  da equação (2.40), através da seguinte linearização com a temperatura, Fredenslund (1977):

$$\tau_{j,i} = A_{j,i}^{(0)} + A_{j,i}^{(1)}T \quad (2.44)$$

Os parâmetros binários  $A_{j,i}^{(0)}$  e  $A_{j,i}^{(1)}$  serão os novos parâmetros binários UNIQUAC obtidos do método UNIFAC, Poiani et al (1984).

A descrição dos modelos UNIQUAC, Wilson e NRTL encontra-se no Apêndice C.

### 2.3.3 - Cálculo da fugacidade no estado padrão de um componente condensável

O coeficiente de atividade fica completamente definido somente se a fugacidade no estado padrão,  $f_i^{OL}$ , estiver claramente definida. A definição de  $f_i^{OL}$  é arbitrária e ditada por conveniência.

Para misturas a baixas pressões e longe das condições críticas os coeficientes de atividade podem ser considerados independentes da pressão. Nestas condições é comum adotar-se como referência o componente puro  $i$  a temperatura e pressão do equilíbrio, ou seja:

$$f_i^{OL} = f_i^S \exp \int_{P_i^S}^P \frac{V_i^L}{RT} dP, \quad (2.45)$$

onde

$$f_i^S = \phi_i^S P_i^S; \quad (2.46)$$

$\phi_i^S$  = coeficiente de fugacidade do componente  $i$  nas condições de saturação

$P_i^S$  = pressão de saturação.

Supondo-se que os volumes parciais molares dos componentes líquidos sejam função apenas da temperatura,  $\bar{v}_i^L = v_i^L$ , tem-se:

$$f_i^{OL} = \psi_i^S \exp\left(\frac{P - P_i^S}{RT}\right) v_i^L \quad (2.47)$$

Para a determinação de  $\phi_i^S$  utilizou-se a equação virial de estado e para a pressão de vapor,  $P_i^S$ , utilizou-se a equação de Antoine.

O volume  $v_i^v$  foi calculado através da equação de Rackett modificada por Spencer e Danner [Prausnitz, J.M. et al (1980)]. Essa equação, juntamente com a equação de pressão de vapor, é apresentada a seguir:

Equação de Antoine

$$\ln P = A + \frac{B}{T + C} \quad (2.48)$$

Equação de Rackett's modificada por Spencer e Danner

$$v = \frac{R \cdot T_c}{P_c} \cdot \tau_a^\tau, \quad (2.49)$$

com

$$\tau = 1 + (1 - T/T_c)^{2.7} \text{ para } T/T_c \leq 0.75 ; \quad (2.50)$$

$$\tau = 1.60 + 0.00693026 (T/T_c - 0.655)^{-1} \text{ para } T/T_c \geq 0.75. \quad (2.51)$$

Os parâmetros necessários para as equações acima encontram-se em Prausnitz et al (1980).

Uma alternativa para a determinação de  $f_i^{OL}$  consiste em considerar como estado de referência a fugacidade do componente líquido puro  $i$  a temperatura do sistema, corrigida a pressão zero (para efeito de nomenclatura,  $f_i^{PO}$ ).

Prausnitz obteve correlações para a fugacidade no estado padrão a pressão zero e numa faixa de temperatura de 300 K a 600 K utilizando os melhores dados de pressão de vapor disponíveis na literatura para fluidos puros. A correlação gerada é da forma:

$$\ln f_i^{PO} = C_{1i} + \frac{C_{2i}}{T} + C_{3i}T + C_{4i} \ln T + C_{5i}T^2, \quad (2.52)$$

onde os valores  $C_{1i}$ ,  $C_{2i}$ ,  $C_{3i}$ ,  $C_{4i}$  e  $C_{5i}$ , constantes para cada fluido estão listados por Prausnitz (1980).

A relação entre  $f_i^{OL}$  e  $f_i^{PO}$  é obtida através do fator de correção de Poyting, ou para efeito de nomenclatura, apenas por:

$$f_i^{OL} = f_i^{PO} (\text{Poy}), \quad (2.53)$$

com:

$$Poy = e^{\frac{P.v_i}{RT}} \quad (2.54)$$

### 2.3.4 - Cálculo da constante de equilíbrio líquido-vapor.

As relações termodinâmicas descritas anteriormente são convenientemente representadas nas equações do modelo da coluna através do coeficiente de distribuição ou constante de equilíbrio,  $K_i$ , definida por:

$$K_i = \left( \frac{Y_i}{X_i} \right)_{\text{equilíbrio}}, \quad i = 1, 2, \dots, \text{NC}; \quad (2.55)$$

ou, utilizando as equações de coeficiente de fugacidade, equação (2.32), e coeficiente de atividade, (2.35):

$$K_i = \frac{Y_i}{X_i} = \frac{\gamma_i f_i^{OL}}{P \psi_i} \quad , \quad i = 1, 2, \dots, \text{NC} \quad (2.56)$$

Um bom procedimento de cálculo da constante de equilíbrio deve apresentar razoável precisão e rapidez de convergência. A precisão dos resultados é fortemente dependente da precisão dos dados experimentais utilizados na obtenção dos parâmetros das correlações termodinâmicas.

Giordano et al (1984), através da integração da equação da coexistência, estudaram a consistência termodinâmica de dados experimentais do equilíbrio líquido-vapor, para diferentes sistemas existentes na literatura. Os dados considerados consistentes foram utilizados no ajuste de correlações para os coeficientes de atividades através do método da máxima verossimilhança. Os modelos testados foram: UNIQUAC, NRTL (2 e 3 parâmetros), Wilson (2 e 3 parâmetros), Van Laar, Margules (2 e 3 parâmetros), Redlich-Kister (2, 3, 4 e 5 parâmetros).

As equações UNIQUAC, Van Laar e Redlich-Kister (4 parâmetros) foram as que melhor representaram os dados experimentais. Dessas três equações, no entanto, a que conduziu a menores desvios nos cálculos de equilíbrio foi a UNIQUAC.

Nesse sentido, para o cálculo do coeficiente de atividade em todas as situações aqui estudadas utilizou-se a equação UNIQUAC, com parâmetros binários considerados independentes da temperatura.

As Tabelas 2.1 e 2.2 apresentam um exemplo de cálculo de equilíbrio para o sistema binário metanol-água, mais precisamente, o cálculo da temperatura e da composição no ponto de bolha e subsequente comparação entre esses valores previstos e os experimentais

utilizando dois procedimentos de convergência, o de "Newton-Raphson", e o da "Regula-Falsi", além de duas alternativas diferentes para se estimar a fugacidade no estado padrão, a primeira utilizando a correlação de Antoine para a pressão de vapor e a segunda através da correlação gerada por Prausnitz.

Analisando os resultados das Tabelas 2.1 e 2.2 conclui-se que:

- os desvios entre os valores calculados e experimentais estão dentro da faixa de erro experimental;
- os dois métodos de convergência são basicamente equivalentes com uma ligeira superioridade para o Newton-Raphson quanto à rapidez de convergência;
- as duas alternativas de definição da fugacidade no estado padrão são também equivalentes, com pequena superioridade quando se utiliza a correlação de Antoine para a pressão de vapor.

Observou-se também que, para valores iniciais longe da solução, o método Regula-Falsi mostrou ser bastante inferior ao método de Newton-Raphson, quanto à rapidez de convergência.

Visando uma possível redução no tempo de computação, fator importante na análise dinâmica da coluna verificou-se o erro introduzido quando a tolerância de convergência (na variável S, correspondente a somatória das frações molares na fase gasosa) é reduzida.

Inicialmente reduziu-se esta tolerância para  $10^{-3}$ , o que mostrou ser inadequado (aumentou-se o desvio médio de "Y" e de "T" em cerca de 100%). Reduzindo-se para  $10^{-4}$ , a precisão dos resultados praticamente permanece dentro da faixa de erros experimentais (o aumento no desvio médio de "Y" e de "T" foi muito pequeno); por outro lado o tempo de computação (nº de iterações necessárias) demonstrou ser igual àquele consumido para a tolerância de  $10^{-5}$ , o que nos levou a fixar a tolerância de convergência para o cálculo do equilíbrio em  $10^{-5}$ .

As propriedades utilizadas dos componentes puros e as constantes das diferentes correlações encontram-se nas seguintes referências: Prausnitz et al (1980), Fredenslund et al (1977), Tsonopoulos (1974), Hayden et al (1975).

Tabela 2.1 - Cálculo do ponto de bolha para o sistema binário metanol (1) - água (2) a  
P = 760 mmHg.

Procedimentos de convergência:

(a) Newton - Raphson e (b) Regula - Falsi

dados experimentais	desvio médio Y(1)	desvio máximo Y(1)	desvio médio T(C)	desvio máximo T(C)	média de iterações necessárias
Van Zandijcke F. et al. (1974)	0.0076 (a)	0.0329 (a)	0.64 (a)	1.28 (a)	3 (a)
	0.0078 (b)	0.0331 (b)	0.65 (b)	1.29 (b)	4 (b)
Verhoeve L. et al. (1973)	0.0064 (a)	0.0093 (a)	0.21 (a)	0.40 (a)	3 (a)
	0.0067 (b)	0.0097 (b)	0.23 (b)	0.43 (b)	5 (b)
Maripuri V.O. et al. (1972)	0.0067 (a)	0.0218 (a)	0.31 (a)	0.80 (a)	3 (a)
	0.0069 (b)	0.0219 (b)	0.32 (b)	0.82 (b)	4 (b)
Kohoutova J. et al. (1970)	0.0097 (a)	0.0495 (a)	0.58 (a)	1.87 (a)	3 (a)
	0.0098 (b)	0.0499 (b)	0.60 (b)	1.91 (b)	5 (b)
Blackford D.S. et al. (1965)	0.0138 (a)	0.0400 (a)	1.26 (a)	4.62 (a)	4 (a)
	0.0141 (b)	0.0403 (b)	1.30 (b)	4.65 (b)	5 (b)

Tabela 2.2 - Cálculo do ponto de bolha para o sistema binário metanol(1) - água (2) a  
P = 760 mmHg.

Procedimento de cálculo da fugacidade no estado padrão:

(a) equação 2.47 e (b) equação 2.52.

dados experimentais	desvio médio Y(1)	desvio máximo Y(1)	desvio médio T(C)	desvio máximo T(C)	média de iterações necessárias
Van Zandijcke F. et al. (1974)	0.0076 (a)	0.0329 (a)	0.64 (a)	1.28 (a)	3 (a)
	0.0085 (b)	0.0367 (b)	0.69 (b)	1.49 (b)	3 (b)
Verhoeve L. et al. (1973)	0.0064 (a)	0.0093 (a)	0.21 (a)	0.40 (a)	3 (a)
	0.0072 (b)	0.0105 (b)	0.24 (b)	0.46 (b)	3 (b)
Maripuri V.O. et al. (1972)	0.0067 (a)	0.0218 (a)	0.31 (a)	0.80 (a)	3 (a)
	0.0078 (b)	0.0253 (b)	0.36 (b)	0.94 (b)	3 (b)
Kohoutova J. et al. (1970)	0.0097 (a)	0.0495 (a)	0.58 (a)	1.87 (a)	3 (a)
	0.0105 (b)	0.0560 (b)	0.62 (b)	2.04 (b)	3 (b)
Blackford D.S. et al. (1965)	0.0138 (a)	0.0400 (a)	1.26 (a)	4.62 (a)	3 (a)
	0.0159 (b)	0.0461 (b)	1.40 (b)	4.98 (b)	3 (b)

### 2.3.5 - Cálculo da entalpia das fases líquido e vapor.

A entalpia da fase vapor é dada por :

$$HV_n = HV_n^I + \overline{\Delta H} \quad (2.57)$$

onde  $HV_n^I$  é a entalpia da mistura de vapor ideal e  $\overline{\Delta H}$  corresponde a correção de entalpia para o vapor a temperatura  $T_n$  e pressão  $P_n$  em relação ao vapor ideal a mesma temperatura e composição. O procedimento utilizado (Prausnitz - 1980), encontra-se no Apêndice G.

A entalpia da fase líquida é dada por :

$$HL_n = HL_n^I + \sum_{i=1}^{NC} X_{i,n} \cdot \overline{\Delta h}_i \quad (2.58)$$

onde  $X_{i,n} \overline{\Delta h}_i$  representa a entalpia residual do componente  $i$  na mistura líquida. Analogamente o procedimento utilizado (Prausnitz - 1980), encontra-se descrito no Apêndice G.

### 2.3.6 - Cálculo de um parâmetro de eficiência do prato.

Quando a fase vapor borbulha numa fase líquida, que está sobre o prato da coluna de destilação, os componentes mais voláteis da fase líquida tendem a passar para a fase vapor e, os menos voláteis da fase vapor tendem a passar para a fase líquida. Se o equilíbrio entre o vapor que sai do prato com o líquido do mesmo fosse atingido, a fase vapor adquiriria a máxima concentração ( $Y_{i,j}^*$ ) do componente  $i$  sobre o prato  $j$  considerado, entretanto, isto raramente ocorre e, então, o vapor não consegue atingir essa composição, adquirindo uma composição intermediária, menor, ( $Y_{i,j}$ ). Desta forma a eficiência pode ser definida como uma fração da variação da composição entre a entrada e a saída do vapor no prato, em relação à variação que seria obtido se o equilíbrio fosse atingido. Se o equilíbrio fosse atingido a variação da composição do vapor de um componente  $i$  entre a entrada e saída de um prato  $j$  da coluna de destilação seria ( $Y_{i,j}^* - Y_{i,j-1}$ ) onde  $Y_{i,j}^*$  representa a fração molar do componente  $i$  fase vapor, que estaria em equilíbrio com a fase líquida e  $Y_{i,j-1}$  a fração molar do componente  $i$  na fase vapor proveniente do prato  $j-1$ . Mas, na realidade a variação de composição da fase vapor ao atravessar o prato é dada por ( $Y_{i,j} - Y_{i,j-1}$ ) onde  $Y_{i,j}$  representa a fração molar do componente  $i$  que realmente sai do prato  $j$ .

Portanto a eficiência (Holland-1974) assim definida toma a forma:

$$\varepsilon_{i,j}^v = \frac{Y_{i,j} - Y_{i,j-1}}{Y_{i,j}^* - Y_{i,j-1}} \quad (2.59)$$

O sobrescrito v refere-se a fase vapor; poderia se definir uma eficiência para a fase líquida de modo análogo ao que foi feito para a fase gasosa.

### 2.3.6.1 - Modelos de eficiência do prato.

Os modelos de eficiência podem ser caracterizados sob tres aspectos diferentes.

#### A - Do ponto de vista do vapor que borbulha no líquido através do prato :

O vapor que entra na parte inferior do prato j, possui uma composição  $Y_{i,j-1}$  homogênea, isto é igual em todos os pontos debaixo do prato. Porém o vapor que borbulha perto do vertedor de entrada, encontra uma composição de líquido diferente da composição encontrada pelo vapor que borbulha perto do vertedor de saída. À medida que o líquido se aproxima da saída, mais massa ele troca com o vapor, logo os gradientes de concentração irão mudando, e também irá variar o fluxo de massa. Como consequência, as composições da fase vapor serão diferentes nos diversos pontos do prato e, por conseguinte a eficiência variará.

Pode-se então definir uma eficiência local ou eficiência de ponto, que varia ao longo do prato:

$$(\varepsilon_{i,j})_{og} = \frac{Y_{i,j} - Y_{i,j-1}}{Y_{i,j}^* - Y_{i,j-1}} \quad (2.60)$$

onde :  $(\varepsilon_{i,j})_{og}$  representa a eficiência de Murphree local;

$Y_{i,j}$  a fração molar do componente i em um determinado ponto do prato j ;

$Y_{i,j-1}$  a fração molar do componente i proveniente do prato j-1 ;

$Y_{i,j}^*$  a fração molar do componente i que estaria em em equilíbrio com o líquido nesse mesmo ponto.

#### B - Do ponto de vista do prato :

O vapor que sai do prato e atinge o prato superior aquele considerado possui uma composição resultante da mistura de várias porções de vapor emergentes de diferentes pontos e, com composições diferentes, portanto apresentando uma composição média. Se fosse utilizado esse valor na fórmula de eficiência de Murphree, obter-se-ia a eficiência global de prato :

$$(\varepsilon_{i,j})_{mv} = \frac{Y_{i,j} - Y_{i,j-1}}{Y_{i,j}^* - Y_{i,j-1}} \quad (2.61)$$

Nesta eficiência,  $Y_{i,j}^*$  é a composição que teria o vapor se estivesse em equilíbrio com o líquido que deixa o prato no vertedouro ( $X_{i,j}$ ).

### C - Do ponto de vista da coluna :

O terceiro tipo de eficiência é a eficiência global da coluna, definida por :

$$E_0 = \frac{N_{ei}}{N_{er}} \quad (2.62)$$

onde :  $N_{ei}$  representa o número de estágios ideais ou teóricos,  
 $N_{er}$  o número de estágios reais para se obter a mesma separação.

#### 2.3.6.2 - Modelo de eficiência global de prato segundo Murphree.

A eficiência conforme definida nos modelos anteriores pode ser calculada com base nas informações fluidodinâmicas, através de uma correta e aprofundada interpretação do fenômeno de transferência de massa em micro-escala do contato líquido-vapor (Biardi et al - 1987), do tipo de prato, das propriedades físicas e químicas da mistura, etc. A extrapolação da correlação obtida, também em campo dinâmico, é ainda hoje prematura, visto a descrição fluidodinâmica atualmente a disposição na literatura ser do tipo estático e portanto com claro limite de validade para aplicação a fenômenos com evolução temporal. Se por um lado tal descrição permite uma aplicação direta na modelagem do comportamento dinâmico de colunas ( perdas de carga, 'holdups', etc ... ) de forma satisfatória e com vínculo de 2ª ordem com o resto do modelo; por outro a dependência da eficiência com o tratamento fluidodinâmico é bastante significativa (como será visto no item 3.7). O valor assumido para a eficiência será neste trabalho considerado constante no tempo e igual para todos os componentes da mistura e implementado na modelagem dinâmica da coluna através da eficiência global de prato, ou seja, o modelo de eficiência caracterizado a partir do ponto de vista do prato.

Considerando uma descrição real do prato a equação (2.3) de equilíbrio líquido-vapor deve ser modificada para:

$$Y_{i,j} = \varepsilon_{i,j} \cdot K_{i,j} \cdot \frac{M_{i,j}}{\sum_i M_{i,j}} + (1 - \varepsilon_{i,j}) \cdot Y_{i,j-1} \quad (2.3')$$

onde  $\varepsilon_{i,j}$  representa a eficiência global de prato segundo Murphree (Holland-1974) do componente i no prato n referida a fase vapor e definida pela relação :

$$\varepsilon_{i,j} = \frac{Y_{i,j} - Y_{i,j-1}}{K_{i,j} \cdot X_{i,j} - Y_{i,j-1}} \quad (2.61)$$

que substituída em (2.3) fornece (2.3')

A segunda modificação que deve ser feita no modelo para consideração da eficiência é quanto a equação do ponto de bolha (2.7), que continua a ser válida, mas somente nas condições de interface, onde as fases líquido-vapor estão em equilíbrio ( Prausnitz et al - 1980), sendo modificada para :

$$\sum_i K_{i,n} \cdot X_{i,n} - 1 = 0 \quad (2.7')$$

onde  $K_{i,n}$  deve ser calculada na temperatura e pressão do estágio considerado e, se dependente da composição, na composição de interface entre a fase gasosa ( $K_{i,n} \cdot X_{i,n}$ ) diferente do valor de concentração "bulk" determinada pela equação (2.3').

## 2.4 - Estrutura do modelo hidráulico. Fluidodinâmica dos pratos.

### 2.4.1 - Introdução

Neste trabalho é dada uma ênfase particular à fluidodinâmica dos dispositivos de contato (pratos ou bandejas) em colunas de destilação, devido a importância que ela reveste na previsão do comportamento dinâmico da coluna. As correlações que serão utilizadas encontram-se desenvolvidas para as condições estacionárias e serão aqui assumidas como válidas também para o regime dinâmico. Inicialmente serão apresentadas as correlações geométricas, as quais objetivam definir as características geométricas principais dos pratos, e a seguir são desenvolvidas as correlações fluidodinâmicas específicas para cada tipo de prato.

Os três tipos de pratos mais difundidos- campânulas, perfurados e valvulados serão estudados. Esses pratos representam os dispositivos de contato líquido-vapor projetados na tentativa de se alcançar as condições de equilíbrio na transferência de massa, gerando uma fase vapor descontínua dispersa em uma fase líquida contínua, objetivando uma maior superfície possível por unidade de volume de vapor. A combinação do projeto do dispositivo com as condições operativas e com as características do sistema não está em grau de produzir o equilíbrio, isto significa dizer que a eficiência do prato, segundo Murphree (Holland-1974), deve ser considerada inferior a 100%.

#### Prato com campânula

A campânula foi por muitos anos o dispositivo padrão de contato líquido-vapor na destilação fracionada, tendo sido muito utilizado durante o desenvolvimento inicial dessas unidades. Recentes estudos dos princípios básicos envolvidos no processo da destilação conduzem a uma menor utilização desse tipo de prato em novas instalações, contudo é possível encontrar ainda hoje numerosas colunas que operam com tal tipo de prato.

O prato com campânula pode operar com baixas vazões líquido e vapor porque o líquido e a espuma são mantidas no prato a uma altura próxima a do vertedouro. Todos os

pratos possuem orifícios de descarga para a retirada de líquido quando a coluna não está operando.

Para vazões de vapor muito baixas pode ocorrer gotejamento pelos furos e a altura do líquido será inferior a altura do vertedouro.

### **Pratos perfurados**

O prato perfurado representa o dispositivo de contato mais econômico, pois consiste exclusivamente das perfurações na chapa e portanto apresenta um custo de construção bastante inferior quando comparado aos pratos com campânula e aos valvulados.

Quanto à eficiência, o prato perfurado tem uma capacidade maior em relação ao prato com campânula, mas apresenta sérios inconvenientes se for operado com vazão vapor inferior àquela de projeto. Para cada prato existe uma velocidade limite de operacionalidade da corrente de vapor; para valores inferiores a este limite o prato começa a gotejar. Isto limita muito a utilização desse tipo de prato para serviços que requerem certa flexibilidade em relação a variações na vazão do vapor.

### **Pratos valvulados**

Em função do limite de operacionalidade dos pratos perfurados convencionais para baixas cargas, foram desenvolvidos dispositivos que permitem, para estas vazões, fixar, dentro de certos limites, a área disponível para o fluxo de vapor. Estes dispositivos podem ser válvulas colocadas acima dos orifícios e fixadas a chapas por meio de guias, as quais se erguem ao aumentar a vazão do vapor e se fecham quando a carga diminui.

## **2.4.2 - Correlações geométricas**

A modelagem dinâmica da coluna de destilação em desenvolvimento neste trabalho considera duas geometrias diferentes de prato, a primeira chamada de "cross flow" (fig. A.1) e a segunda "split flow" (fig. A.2), figuras estas constantes do Apêndice A. Para cada uma dessas geometrias tem-se específicas correlações ditas geométricas, as quais permitem a caracterização de significativos parâmetros do prato utilizados no cálculo da perda de carga no mesmo.

Apresenta-se no Apêndice A.1.1 as relações comuns a ambas as geometrias, nos Apêndices A.1.2 e A.1.3 aquelas específicas para alguma geometria, nos Apêndices: de A.1.4 a A.1.6 aquelas peculiares de cada dispositivo de contato. Para obter uma completa descrição geométrica do prato é necessário utilizar a correlação do Apêndice A.1.1

associada àquelas definida em A.1.2 e A.1.3 e particularizadas para cada tipo de prato por A.1.4, A.1.5 e A.1.6.

### 2.4.3 - Correlações fluidodinâmicas

As correlações fluidodinâmicas, para geometria seja 'cross flow' seja 'split flow', permitem relacionar de forma bastante rigorosa a perda de carga e o holdup molar de líquido com as vazões volumétricas das fases líquido, vapor e com a geometria do prato :

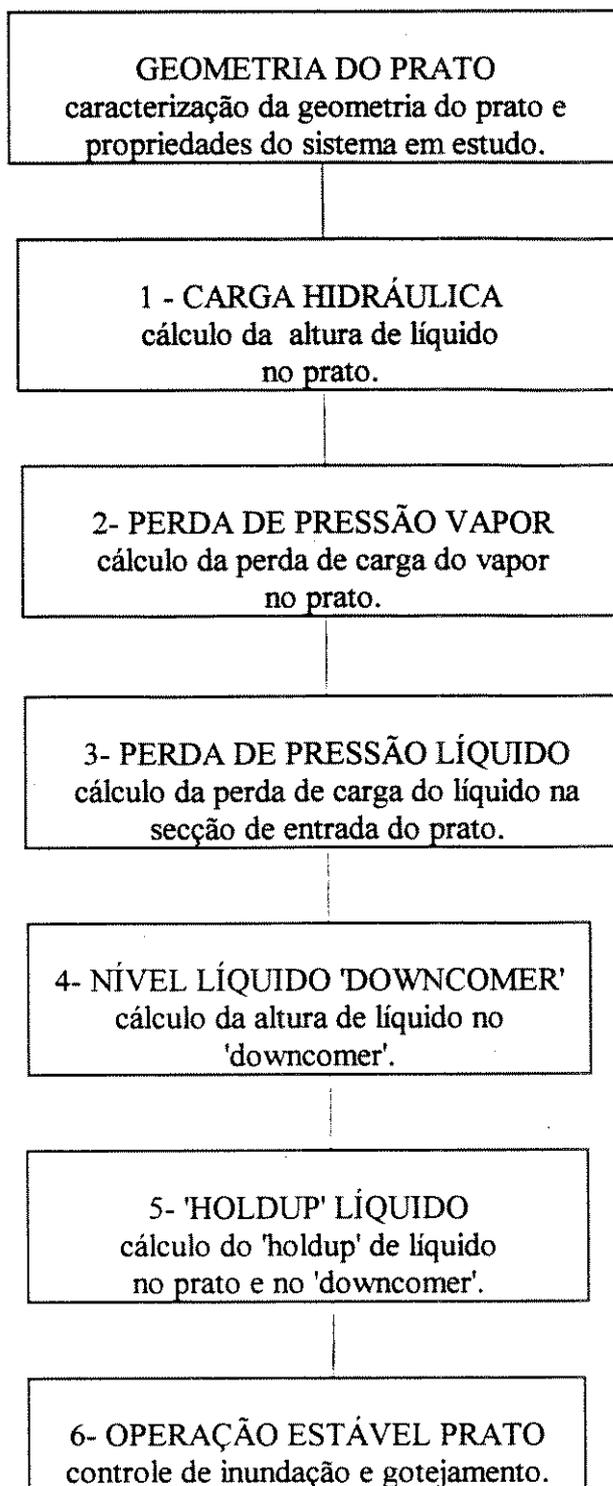
$$\sum_i M_{i,n} = f(L_n, V_n, geometria) \quad (2.4)$$

$$P_n = P_{n+1} + \Delta P_{n+1}(L_n, V_n, geometria) \quad (2.5)$$

Assente-se que, para o caso 'split flow' considera-se uma vazão líquido reduzida a metade porque a grandeza geométrica estimada no apêndice A.1.3 refere-se à metade do prato. Para os pratos 'split flow' torna-se necessário especificar se o prato é com uma única alimentação central ou se é do tipo de prato com duas alimentações laterais.

A utilização das equações 2.4 e 2.5 permitem concluir, a níveis de modelagem, que as vazões de líquido e vapor no prato são definidas por uma "congruência volumétrica" na coluna, ou seja, o diâmetro do prato é aquele que "acomoda" as taxas de fluxos ( $L_n$ ,  $V_n$ ) com o layout do prato (perfurado, valvulado, câmpanula) e a queda de pressão com garantias de operação estável (sem inundação e segurança contra 'weeping' e arraste excessivo).

De uma forma geral a consideração dos aspectos fluidodinâmicos na previsão do comportamento dinâmico da coluna segue o seguinte fluxograma de cálculos:



Numerosos métodos são encontrados na literatura para cada etapa de cálculo do fluxograma anterior.

As correlações básicas aqui utilizadas em cada etapa de cálculo, para os tipos de pratos: perfurados, com campânula e valvulados (método Ballast/Glitsch e método Nencetti) são apresentadas respectivamente no Apêndice A.

A seguir listam-se as opções implementadas no programa quanto a escolha do dispositivo de contato líquido-vapor a ser modelado, bem como as referências bibliográficas onde se encontram as equações utilizadas.

**- Pratos perfurados:**

Treybal (1980), Van Winkle (1967)

**- Pratos com campânula:**

a) com passo triangular equilátero

b) com passo triangular não equilátero

c) com passo quadrado

Davies (1947)

Nencetti et al. (1966, 1967) e

Treybal (1980)

**- Pratos valvulados:**

a) Ballast  $V_1 e V_4$

Glitsch (1986)

b) válvulas circulares

Nencetti et al. (1967) e

Nencetti et al. (1967).

### 3 - SIMULAÇÃO DINÂMICA DA COLUNA EM MALHA ABERTA

#### 3.1 - Introdução

Independentemente do modelo do prato (A, B ou C) desenvolvido no capítulo anterior, o modelo dinâmico global da coluna é constituído por um sistema de equações diferenciais e algébricas, de grande dimensão. Devido a natureza intrínseca do fenómeno de separação que ocorre nas colunas de destilação, o espectro das constantes de tempo associada às equações do modelo é muito grande (é só pensar por exemplo na elevada capacidade do retervedor e do acumulador de refluxo em relação a pequena quantidade de líquido presente nos pratos e respectivos condutos de saídas). Em tais casos o sistema de equações é chamado de "stiff" e o resultado é uma grande dificuldade de integração, vinculada a problemas de estabilidade dos possíveis algoritmos de integração. Seja por essa característica, seja pela presença simultânea de equações diferenciais e algébricas, o uso de métodos de integração do tipo implícito é fortemente recomendada (Gallun e Holland, 1982; Feng et al., 1984, Gani et al., 1986, Rovaglio et al., 1990).

Todos os tempos de cálculo a serem citados neste trabalho referem-se ao uso de computadores do tipo VAX/730. Uma classificação dos métodos de integração e dos relativos programas de cálculo atualmente disponíveis no mercado é reportada na Tabela 3.1.

**Tabela 3.1: Métodos de Integração Numérica**

métodos explícitos	Euler (1750) Runge-Kutta (1900)
método semi-implícito	Rosembrock (1966) Villadsen e Michelsen (1978)
métodos implícitos	Gear (1972): DGear, IMSL Petzold (1982): DASL Hindmarsh (1980-1984): ODEPACK LSODE, LSODI, LSODES, LSOIBT

#### 3.2 - Solução das equações do modelo.

A solução do problema dinâmico envolve:

- (1) Escolher um método de integração para resolução do conjunto de equações diferenciais ordinárias ( $ODE_S$ ), utilizando equações algébricas para estimar o segundo membro (RHS) das  $ODE_S$ ,
- (2) Fornecer os valores iniciais para todas as variáveis "diferenciais" dependentes,

isto é  $M_{i,n}$  e  $E_n$  para todos os estágios ( NS ) e componentes ( NC ) da coluna.

Conhecidos os valores iniciais de  $M_{i,n}$  e  $E_n$  (  $i = 1, \dots, NC$  ;  $n = 1, \dots, NS$  ) para  $t = t_{\text{início}} = t_0$  o procedimento de cálculo passo por passo para a solução é o seguinte :

- (i) determinação do segundo membro das equações diferenciais (R.H.S.):  
avaliar RHS das ODE<sub>s</sub> utilizando o procedimento de cálculo descrito na secção 3.3. A estimativa no tempo  $t$  dos parâmetros de definição do conjunto de funções algébricas do segundo membro das ODEs é feita através dos modelos termodinâmico e hidráulico.
- (ii) determina-se novos valores de  $M_{i,n}$  e  $E_n$  para  $t = t_{n+1}$  utilizando o método de integração descrito na secção (3.4). Utilização de metodologia proposta por Gear.
- (iii) repete-se os passos (i) e (ii) até  $t_{\text{final}}$  ter sido obtido.

O valor  $t_{\text{final}}$  depende: (A) do período de integração a ser alcançado ou (B) de condições especiais de parada. Para o caso A, o valor de  $t_{\text{final}}$  é especificado e portanto a integração é bloqueada quando este valor é alcançado. Condições especiais de parada, caso B, pode incluir um teste nos valores das RHS das ODE<sub>s</sub>, por exemplo:

$$\left| (RHS_i^{t_{n+1}} - RHS_i^{t_n}) \right| \leq \xi \quad i = 1, 2, \dots, ND \quad \text{onde,}$$

ND é o número de ODE<sub>s</sub> e (  $\xi$  ) a tolerância do integrador.

### 3.3 - Avaliação do "RHS" das equações diferenciais ordinárias

O problema é definido como:

Dados as variáveis  $M_{i,n}$  e  $E_n$ ,  $i = 1, 2, \dots, NC$ ,  $n = 1, 2, \dots, NS$  e todas as variáveis especificadas, necessita-se avaliar o RHS das ODE<sub>s</sub> (1) e (2).

A decomposição do problema em duas partes envolve o seguinte conjunto de variáveis:

- (a) variáveis termodinâmicas e
- (b) variáveis hidráulicas.

### 3.3.1 - Estimativa das variáveis termodinâmicas.

Conhecidos  $X_{i,n}$  e  $HL_n$  a partir de:

$$X_{i,n} = \frac{M_{i,n}}{\sum_i^{NC} M_{i,n}} \quad i = 1,2,\dots,NC; \quad n = 1,2,\dots,NS \quad (3.1)$$

$$HL_n = \frac{E_n}{\sum_{i=1}^{NC} M_{i,n}} \quad i = 1,2,\dots,NC; \quad n = 1,2,\dots,NS \quad (2.6)$$

determina-se  $K_{i,n}, Y_{i,n}^*, Y_{i,n}, T_n, P_n$ . O procedimento de cálculo válido para todos os estágios é apresentado a seguir de uma forma generalizada:

- I Assume-se estimativa inicial de temperatura ( $T_n$ ) e pressão ( $P_n$ );
- II Determina-se  $(HL_n)_{calc}$ , conhecidos ( $T_n; P_n; X_{i,n}$  com  $n = 1, \dots, NC$ );
- III Se  $|(HL_n)_{calc} - HL_n| < ERROR 1$  passa-se ao V;
- IV Corrige-se a  $T_n$  e retorna-se ao passo II;

V Dados,  $T_n, P_n$  e  $X_{i,n}$ ,  $i = 1, 2, \dots, NC$ , calculam-se os coeficientes de fugacidade ( $\psi_i$ ) atividade ( $\gamma_i$ ) e a fugacidade no estado padrão ( $f_i^{OL}$ ) utilizando-se o modelo termodinâmico desenvolvido no item 2.3. Com  $(\gamma_i, f_i^{OL}, P$  e  $\psi_i)_n$  conhecidos calculam-se as constantes de equilíbrio  $K_{i,n}$ , definidas por:

$$K_{i,n} = (\gamma_i \cdot f_i^{OL} / P \cdot \psi_i)_n,$$

conhecidos  $X_{i,n}, K_{i,n}$ , determina-se  $Y_{i,n}^*$  pela relação  $Y_{i,n}^* = K_{i,n} \cdot X_{i,n}$ ;

$$VI \quad \text{determina-se } SUM = \sum_{i=1}^{NC} Y_{i,n}^*$$

se  $|SUM - 1,0| \leq ERROR 2$ , ir para (VIII). Caso contrário, continua-se.

VII Corrige-se  $P_n$  e retorna-se ao passo II

VIII Dado  $\epsilon_{i,n}, Y_{i,n}^*, Y_{i,n-1}$ , calcula-se  $Y_{i,n}$  (equação 2.3):

$$Y_{i,n} = \varepsilon_{i,n} K_{i,n} \left( T_n, P_n, \frac{M_{i,n}}{\sum_i M_{i,n}}, Y_{i,n} \right) \frac{M_{i,n}}{\sum_i M_{i,n}} + (1 - \varepsilon_{i,n-1}) Y_{i,n-1}$$

VIII Calcula-se  $HV_n$

$$HV_n = HV_n(P_n, T_n, Y_{i,n}).$$

O procedimento de cálculo envolve duas malhas de interação:

- (a) uma malha externa para a pressão, e
- (b) uma malha interna para a temperatura

Os métodos de Newton-Raphson e o da Secante são usados na correção da pressão e temperatura respectivamente. Usualmente cinco interações são necessárias para satisfazer os valores de ERROR 1 ( $10^{-5}$ ) e ERROR 2 ( $10^{-6}$ ).

As equações utilizadas para o cálculo de  $HL_n$  e  $HV_n$  estão descritas no apêndice G.

A baixas pressões o tratamento termodinâmico do sistema metanol-água é simplificado, visto que a hipótese de idealidade da fase gasosa é aceitável. Para baixas pressões  $\psi_i = 1$  (coeficiente de fugacidade unitário) e as entalpias de excesso das fases vapor e líquido são desprezíveis (Poiani et al - 1984).

### 3.3.2. Estimativa das variáveis hidráulicas.

O efeito de parâmetros do prato tais como: área de fluxo no canal de saída, altura do vertedouro, dispositivo (tipos) de contato líquido-vapor, área ativa do prato; sobre a queda de pressão na coluna e vazões do líquido e vapor, torna a consideração da hidráulica do prato um importante fator no estudo da dinâmica de colunas.

O modelo requer as seguintes informações de entrada:

- (i) 'holdup' líquido molar total para cada estágio
- (ii) pressão em cada estágio
- (iii) densidade e peso molecular do líquido e vapor em cada estágio
- (iv) detalhes da geometria do prato.

O procedimento de cálculo generalizado para o modelo hidráulico é dado por:

- (i) a partir de  $P_n$ , com  $n = 2 \dots \dots NS-1$ , determina-se a queda total de pressão entre os pratos

$$[h_{Gn} = g \cdot \rho_n' (P_{n-1} - P_n)].$$

(ii) define-se o modelo de prato a ser dimensionado (modelo a uma, duas ou três constantes de tempo) e dispositivo de contato (geometria e tipo de prato).

(iii) iniciando as cálculos a partir do primeiro prato da coluna resolve-se iterativamente o conjunto de equações (apêndice A):

$$(A_n - A_d)h_L\rho^l + A_d h_c\rho^l = \sum_{i=1}^{NC} M_{i,n} + \sum_{i=1}^{NC} M_{i,n}^d \quad (\text{A.43})$$

$$h_G = h_D + h_L + h_R \quad (\text{A.34})$$

determinando-se  $L_n$  e  $V_n$  para cada prato.

(iv) verifica-se as condições de flooding (Apêndice A):

- determina-se a velocidade limite de flooding,  $F_1$  definida como a razão entre a velocidade do vapor referida a área nominal e a velocidade limite. Todas as condições de funcionamento em que ( $F_1$ ) mantém-se inferior a 0.8 ou 0.85 são aceitáveis.

(v) verifica-se as condições de gotejamento:

- se a velocidade do vapor for muito baixa parte da corrente líquida gotejará pelos orifícios do prato. A velocidade limite  $V_{01}$  do vapor no orifício é definida em particular no Apêndice A.

### 3.3.3 - Procedimento de cálculo completo para estimativa dos 'RHS<sub>s</sub>'.

Conhecidos:

(i) estimativa inicial de  $M_{i,n}$  e  $E_n$  para  $i = 1, 2, \dots, NC$  e  $n = 1, 2, \dots, NS$  e

(ii) valores de todas as variáveis especificadas,

os passos básicos envolvidos no procedimento de cálculo para estimativa do RHS das ODE<sub>s</sub> são descritos a seguir:

(1) Com  $HL_n$  e  $X_{i,n}$  conhecidos resolve-se o problema termodinâmico do equilíbrio líquido vapor, para  $n = 1, \dots, NS$ .

(2) Determina-se  $\rho_{ns}^l$ ,  $\rho_{ns}^v$ , respectivamente densidades das fases líquida e gasosa com  $i=1, \dots, NC$  e  $n = 1, \dots, NS$ . As seguintes equações são usadas com este propósito:

- o volume molar do líquido é calculado usando a equação de Rackett, modificada por Spencer e Danner (1972), ( equação 2.49 do modelo termodinâmico):

$$\rho_{i,n}^l = \frac{1}{v_{i,n}^l} = \frac{Pc_i}{Tc_i \cdot R \cdot Z_{i,n}^{r_i}} \quad (2.49)$$

- o volume molar do vapor é calculado usando a equação de virial truncada no segundo termo (equação 3.4), com o segundo coeficiente virial  $B_n$  podendo ser calculado, por exemplo, pela correlação de Tsonopoulos (Apêndice B):

$$\rho_{i,n}^v = \frac{1}{v_{i,n}^v} = \frac{1}{(B_n + R \cdot T_n / P_n)} \quad (3.4)$$

- conhecidos  $\rho_{i,n}^v$  e  $\rho_{i,n}^l$  tem-se :

$$\rho_n^l = \sum_{i=1}^{NC} \rho_{i,n}^l X_{i,n} \quad (3.5)$$

$$\rho_n^v = \sum_{i=1}^{NC} \rho_{i,n}^v Y_{i,n} \quad (3.6)$$

- especificamente para baixas pressões a fase vapor do sistema metanol-água apresenta comportamento ideal.

(3) Utilizando o modelo hidráulico determina-se para os pratos (Apêndice A):

(i) as taxas de vazões e líquido  $L_n$  e  $V_n$ .

(ii) condições de 'weeping'.

(iii) condições de 'flooding'.

(6) Se a condensação for total,  $W_{ns} = 0$  e o líquido na saída do condensador tem a mesma composição do vapor proveniente do último prato, ou seja  $X_{i,ns} = Y_{i,ns-1}$ , e a pressão é dada pela pressão do ponto de bolha do líquido na temperatura do condensador  $P_{ns} = P_{BP}(T_{ns}, Y_{i,ns-1})$  com  $i = 1, 2, \dots, NC$ . Se a condensação for parcial o conjunto condensador + tambor de refluxo de topo é considerado um estágio de equilíbrio e  $P_{ns}$  determinada pela equação do ponto de bolha (equação 2.30). Conhecido  $P_{ns}$  a vazão do vapor  $W_{ns}$  é dada pelo modelo da válvula de controle, equação E.6.3 (Apêndice E).

### 3.4 - Método de integração. Aspectos numéricos

O problema de selecionar um algoritmo de integração adequado para a simulação de colunas de destilação tem sido muito estudado na literatura. Mah et al (1962) discutiram a estabilidade e erros característicos de um método bastante utilizado quando aplicado a sistemas de destilação contínua multicomponente. Basicamente, as equações eram linearizadas e os parâmetros destas equações assumidos constantes através de cada incremento de tempo, sendo reavaliados a cada novo incremento no tempo. Distefano et al (1968) estudaram uma série de métodos numéricos objetivando a simulação da destilação em batelada concluindo que a dificuldade encontrada na utilização dos algoritmos (todos os algoritmos utilizados eram explícitos), referia-se a estabilidade numérica associada com estes algoritmos. Para manter a estabilidade foi necessário utilizar pequenos passos de integração, o que aumentava muito o tempo de computação. De nossa experiência (Poiani e Mendes - 1985) na simulação dinâmica de uma coluna de destilação multicomponente a base de etanol e água, utilizando métodos explícitos, encontrou-se um tempo excessivo de cálculo: 15 minutos de CPU para simular 160 minutos de operação (o computador utilizado, um CYBER-170).

Esta é uma indicação de que as constantes de tempo associadas às equações do modelo são bastante diferentes (sistemas stiff). Nestas circunstâncias algoritmos explícitos não são indicados, e outros métodos projetados especificamente para sistemas stiff deverão ser utilizados. Tyreus et al (1975) estudaram os auto-valores de equações linearizadas que descrevem a dinâmica de colunas de destilação binária. Eles verificaram que colunas com alta pureza dos produtos ou baixa volatilidade relativa não somente exibiam respostas lentas, como também modelos matemáticos muito "stiff". Observaram também que mesmo com a exclusão das equações do modelo hidráulico a rigidez ('stiffness') não era reduzida.

#### 3.4.1 - Sistemas rígidos

Um conjunto de ODE<sub>s</sub> representa um sistema rígido, "stiff", se as constantes tempo,  $\tau_i$ , definidas por:

$$\tau_i = \frac{1}{|R_e(\lambda_i)|} \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.7)$$

forem largamente espaçadas e a razão entre a maior e a menor constante de tempo for maior que  $10^4$ . Os  $\lambda_i$  na equação anterior são os auto-valores da matriz Jacobiana J, definida por

$$J = \frac{\partial f}{\partial y} = \left( \frac{\partial f_i}{\partial y_j} \right) \quad i = 1, 2, \dots, N; \quad j = 1, 2, \dots, N \quad \text{onde} \quad (3.8)$$

$N$  é o número total de equações, e  $f$  e  $y$  são vetores de dimensão  $N > 1$ , do sistema de equações diferenciais ordinárias dadas por:

$$\frac{d}{dt}y_i^{(t)} = f_i(y_1^{(t)}, y_2^{(t)} \dots y_n^{(t)}, t) \quad (3.9)$$

### 3.4.2 - Seleção de um método numérico. Programa de cálculo.

Existe uma vasta literatura sobre métodos de integração de sistemas de EDO do tipo stiff: Gear C.W. (1971), Byrne et al (1977, 1981), Hindmarsh A.C. (1976, 1983), Einsenstat S.C. et al (1977), Rose D.J. (1972). Para os propósitos deste trabalho a metodologia apresentada por Gear e constante do código ODEPACK (Hindmarsh 1983) será aqui utilizada; seus aspectos principais serão discutidos na sequência. Em torno de 1970, Gear partindo de uma fórmula do tipo BDF ('Backward Difference Formulas'), desenvolveu o programa DIFSUB e posteriormente o programa STIFF. Hindmarsh em seguida generalizou este código aumentando a sua versatilidade e facilidade de uso chegando ao programa GEAR que é o código mais recomendado (Ranzi E. et al -1988).

De uma forma global, o método de Gear é constituído de um conjunto de subrotinas para a solução numérica de sistemas de equações diferenciais, a partir de um valor inicial. É particularmente aplicado a sistemas stiff mas pode ser utilizado de uma forma generalizada. O método de Gear encontra-se documentado de uma forma bastante detalhada em Gear (1971) e Hindmarsh (1983). O apêndice F apresenta um breve sumário deste método.

O primeiro aspecto do programa GEAR é a sua capacidade de manipular de uma forma eficiente os problemas stiff. Nesse pacote, o incremento  $h$  é restrito a pequenos valores por exigência de precisão, somente onde a solução é relativamente ativa (Gear-1971). Por definição o problema não é stiff em tais regiões e a precisão é encontrada a um custo mínimo permitindo variações de  $h$  e da ordem do método. Em regiões de stiffness, onde a solução é inativa, o método de Gear tem a propriedade de 'stiff stability'. Essa propriedade necessita, entre outras coisas, que o método seja implícito e que o sistema de equações algébricas não linear seja resolvido a cada passo.

Dessa forma recorre-se a métodos implícitos, que estimam os valores de primeira tentativa da variável a ser integrada utilizando equações explícitas, ditas preditores, e depois convergindo à solução através de equações implícitas, ditas corretores. Esses métodos conhecidos por métodos LMS (Linear Multistep Methods), são dotados de critérios para otimizar a escolha seja da ordem do método seja do tamanho do passo de integração.

Os métodos implícitos reconduzem a integração do sistema diferencial à solução de um sistema de equações algébricas não lineares, portanto, uma eventual estimativa aproximada da matriz Jacobiana não prejudica a convergência do sistema.

Os métodos multipasso linear apresentam a forma básica:

$$Y_n = \sum_{j=1}^{k_1} \alpha_j \cdot Y_{n-j} + h \sum_{j=0}^{k_2} \beta_j \cdot Y'_{n-j} \quad (3.10)$$

onde,

$$Y_k \cong Y(t_k) \quad (3.11)$$

$$Y'_k = f(Y_k, t_k) \cong Y'(t_k) \quad (3.12)$$

$h$  é tamanho do passo =  $t_{k+1} - t_k$ ,

$k_1$  e  $k_2$  ordem dos polinômios que aproximam respectivamente as funções  $Y_i$  e  $Y'_i$ .

No caso de uma fórmula de diferenciação regressiva (BDF) de ordem  $q$ ,  $k_1 = q$  e  $k_2 = 0$ . Os BDFs são assim chamados porque são considerados como uma fórmula de aproximação para  $Y'_n$  em termos de  $Y_n, Y_{n-1}, \dots, Y_{n-q}$ .  $\alpha_j$  e  $\beta_j$  são constantes associadas com o método e  $\beta_0 > 0$ . Isto significa que a equação 3.10 é uma equação implícita para  $Y_n$  e generalizadamente constitui um sistema algébrico não linear que deve ser resolvido para cada passo. O fato da ordem de um dado método ser  $q$ , significa que  $Y_n$  difere da solução correta do sistema de ODE por um erro de truncamento local dado por  $O(h^{q+1})$ , isto para pequenos valores de  $h$ .

Se a equação (3.10) é escrita na forma (com  $k_1 \leq 6$  e  $k_2 = 0$ ):

$$g(Y_n) \cong Y_n - h \beta_0 f(Y_n, t_n) - \sum_1^{k_1} \alpha_j \cdot Y_{n-j} = 0 \quad (3.13)$$

então o sistema não linear  $g(Y_n) = 0$ , pode ser resolvido, por exemplo pelo método de Newton:

$$Y_n(m+1) = Y_n(m) - P_n^{-1}(m) \cdot g(Y_n(m)) \quad (3.14)$$

$$\text{onde, } P_n(m) = \left. \frac{\partial g}{\partial y} \right|_{y_n(m)} = I - h \cdot \beta_0 \cdot \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{y_n(m)} \quad (3.15)$$

Na prática, Gear(1971) recomenda utilizar os elementos  $P_n(m)$ , da matriz  $N \times M$ , calculados no ponto inicial, ou seja :

$$P_n(m) = P_n = I - h \cdot \beta_0 J ; \quad \text{com } J = \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{y_n(0)} \quad (3.16)$$

A matriz Jacobiana completa  $J$  pode ser calculada por aproximações com diferença finita. Para uma matriz em faixa ou diagonal, o cálculo por diferença finita difere daquele para matriz completa quanto ao número de avaliações das funções  $f$  auxiliares:

$$W = M_L + M_U + 1 \text{ (para a matriz em faixa) e não } N \text{ (matriz completa),} \quad (3.17)$$

onde  $M_L$  e  $M_U$  são as larguras superior e inferior da faixa, incluindo a diagonal principal. O cálculo de  $J$  é como segue. Se  $e_j$  representa o  $j$ ésimo vetor unitário padrão, então o  $(i,j)$  elemento  $J_{i,j}$  do Jacobiano  $J$  pode ser aproximado por:

$$[f_i(y + r e_j) - f_i(y)] / r, \quad (3.18)$$

para pequenos incrementos de  $r$ .

O procedimento de cálculo, passo a passo, para resolver um conjunto de ODEs na forma:

$$y' = f(y,t)$$

ou, mais especificamente dado pela equação (3.9), e sendo conhecidos os valores iniciais do vetor

$$y(t_0) = y_0,$$

e um conjunto de equações algébricas definindo  $f$ , é exemplificado a seguir:

- (1) seleciona-se o tamanho de passo  $h = t_{k+1} - t_k$
- (2) estima-se valor inicial  $Y_n(0)$  para solução pelo método de Newton do sistema não linear dado pela equação (3.13)
- (3) determina-se  $Y'_n = Y_n(m)$  usando as equações algébricas de definição de  $f$ . A primeira estimativa para  $m$  é zero.
- (4) determina-se a matriz Jacobiana,  $J$  ou  $P_n(m)$  a partir dos valores conhecidos de  $Y_n(m)$ , através da fórmula de diferença finita.
- (5) utiliza-se a equação (3.13) para determinar  $h \cdot f(Y_n(m), t_n)$  e determinar  $F_n(m) \equiv h \cdot f(Y_n(m), t_n) - h Y'_n$
- (6) determina-se o residual  $P_n^{-1} F_n(m)$
- (7) testa-se a convergência. Se a convergência é encontrada mova-se para (10). Caso contrário continua-se.
- (8) estima-se novo valor de  $Y_n$  e  $Y'_n$  a partir de:

$$Y_{n+1}(m) = Y_n(m) + (P_n^{-1} F(m))$$

$$h.Y_n' = h.Y_n'(m) + P_n^{-1} F(m)$$

(9) retorna-se ao passo (5) e repete-se os cálculos

(10) seleciona-se novo valor para h e retorna-se a (2).

Adotou-se um procedimento de no máximo três interações serem permitidas no "loop" envolvendo os passos (5) até (9). Se a convergência não for encontrada, h é reduzido e o procedimento de cálculo é repetido a partir de (2), ou seja se após três iterações a convergência não for alcançada primeiro diminui-se o tamanho do passo, para depois reavaliar a matriz jacobiana.

### 3.4.3 - Estrutura do programa

Um programa no computador, baseado no modelo dinâmico desenvolvido, foi escrito em linguagem Fortran 77 H. Todas as simulações efetuadas neste trabalho foram efetuadas com o programa desenvolvido. Cada módulo representa uma subrotina diferente. Uma breve descrição dessas subrotinas, bem como o fluxograma básico do programa desenvolvido é apresentada a seguir:

DRIVE: essa é a rotina que aciona o método de GEAR utilizado. Ela é chamada a cada valor de saída de t.

STIFF: esta é o núcleo da rotina de integração. Ela executa o cálculo a cada passo associado ao controle do erro.

COSET: ajusta os coeficientes para uso no núcleo do integrador.

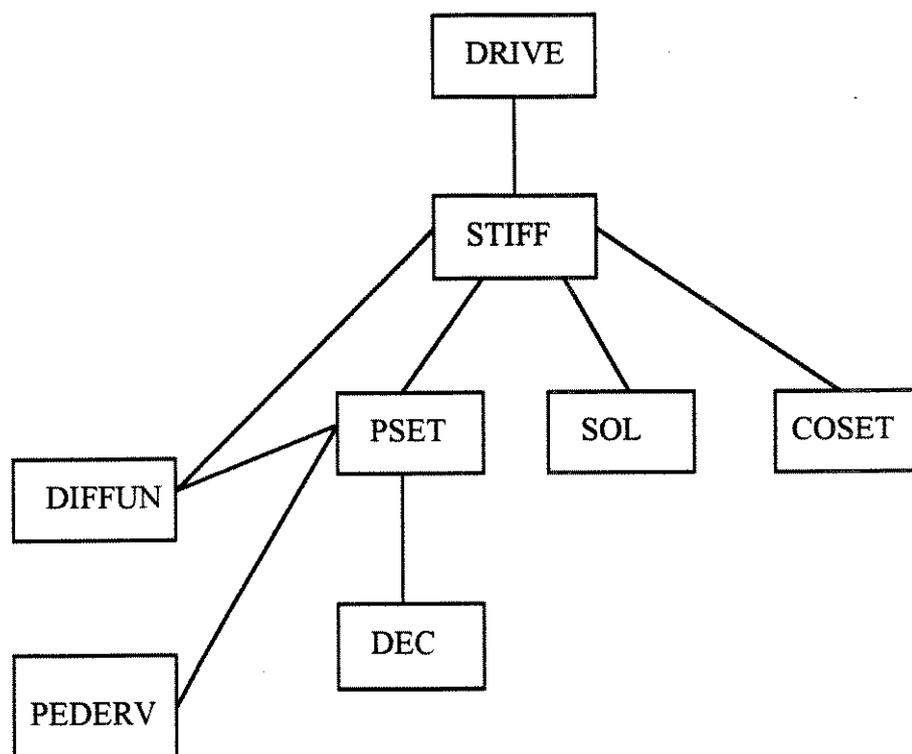
PSET: calcula a matriz jacobiana.

DEC: efetua a decomposição LU da matriz.

SOL: resolve o sistema linear  $AX = B$  após a DEC ter sido chamada para matriz A.

PEDERV: calcula analiticamente a matriz jacobiana  $N \times N$ . Essa rotina é usada somente quando a matriz jacobiana não é determinada por PSET.

DIFFUN: calcula o valor da função, isto é, R.H.S. das ODEs. Esta subrotina utiliza o procedimento de cálculo descrito na seção 3.3.3.



### 3.5 - Confronto entre os modelos desenvolvidos.

#### Análise comparativa da resposta dinâmica em malha aberta

Inicialmente objetiva-se um confronto e discussão referentes às respostas obtidas dos diversos modelos. Os modelos em comparação são aqueles do Capítulo 2 acrescidos de variações que são deduzidas por simples modificações e que apresentam interessante auxílio no estudo de diferentes hipóteses simplificativas usualmente encontradas na literatura.

Por comodidade de representação os diversos modelos serão classificados no seu significado básico e identificados por uma letra de referência:

**Modelo A:** é o modelo a uma constante de tempo, o qual prevê somente um termo capacitivo principal ligado à zona ativa do prato ( $2NC+5$  equações por prato, onde  $NC$  é o número de componentes).

**Modelo A0:** onde não existe acúmulo no prato e o 'holdup' no prato é considerado constante ( $2NC+4$  equações por estágio).

**Modelo A1:** considera-se a presença de um 'holdup' global formado pela fase líquida no prato adicionada do líquido no 'downcomer' ( $2NC+5$  equações por prato).

**Modelo B:** é o modelo a duas constante de tempo distintas, um termo capacitivo adicional devido a presença do 'downcomer' ( $3NC+8$  equações por estágio).

**Modelo C:** é o modelo com três constantes de tempo: 2 termos capacitivos devido ao 'holdup' de líquido (no prato e 'downcomer') e 1 termo capacitivo devido a presença de um 'holdup' de vapor entre dois estágios sucessivos. Este modelo pode ser em parte reduzido assumindo uma evolução temporal desprezível na temperatura e composição do vapor, considerado sempre em condições de equilíbrio.

Diversos exemplos de simulação serão analisados com referência aos modelos citados, utilizando como aplicativo o sistema de destilação de alta pureza metanol-água.

Objetivando a análise dos modelos, serão utilizadas neste trabalho duas configurações básicas de colunas de destilação para o sistema metanol-água. A primeira de moderada pureza (concentração de impureza, água, no produto de topo de 10000 ppm) e a segunda de alta pureza (concentração de impureza, água, no produto de topo de 1000 ppm), para efeitos de nomenclatura denominadas respectivamente colunas C1 e C2. A Tabela 3.2 apresenta a geometria das colunas C1 e C2 e dados de operação em regime estacionário, sem qualquer perturbação.

A estrutura da coluna considerada, esquematizada na Figura 3.1, é do tipo de pratos perfurados. No topo da coluna há um condensador total. Do condensador o líquido é refluxado para a coluna, onde ele percorre os pratos perfurados e desce pelos 'downcomers' num arranjo do tipo 'cross-flow'. A alimentação é introduzida em um prato apropriado, conforme a configuração da coluna. Escolheu-se uma coluna com apenas uma alimentação e sem retiradas laterais objetivando tornar mais claras as análises das respostas às perturbações. O refeedor considerado é do tipo Kettle localizado no fundo da coluna de onde o produto de fundo é retirado.

O modelo dinâmico da coluna desenvolvido no capítulo anterior necessita, além da completa caracterização da alimentação conforme análise apresentada no item 2.2.6, da especificação de cinco variáveis restantes, as quais serão aqui definidas através de equações de especificação de válvulas de controle adicionadas ao modelo dinâmico da coluna. As válvulas são adicionadas prevendo, dentro de uma operação controlada da coluna, manipular vazões com o objetivo de manter as cinco variáveis controladas nos respectivos set-points.

Desta forma ao conjunto das equações do modelo dinâmico da coluna são adicionadas as equações descritas no apêndice E, equações E3.2, E6.4, E6.2, E6.1, E3.1 especificando-se assim respectivamente as variáveis (manipuladas)  $Q_1$ ,  $Q_{ns}$ ,  $L_{ns}$ , D e B.

Para o refeedor considera-se igualdade de temperatura e pressão entre os volumes de controle 'a' e 'b'; logo as composições molares nessas duas secções são consideradas sem distinção. As constantes das válvulas ( $CV_1, CV_2, CV_3, CV_4, CV_5$ ) são mantidas constantes em seu valor estacionário e na simulação em malha aberta as frações ( $F_1, F_2, F_3, F_4, F_5$ ) de abertura das válvulas são mantidas constantes (no valor 0.5), ou seja:

$$\frac{dF_1}{dt} = \frac{dF_2}{dt} = \frac{dF_3}{dt} = \frac{dF_4}{dt} = \frac{dF_5}{dt} = 0 \quad (3.19)$$

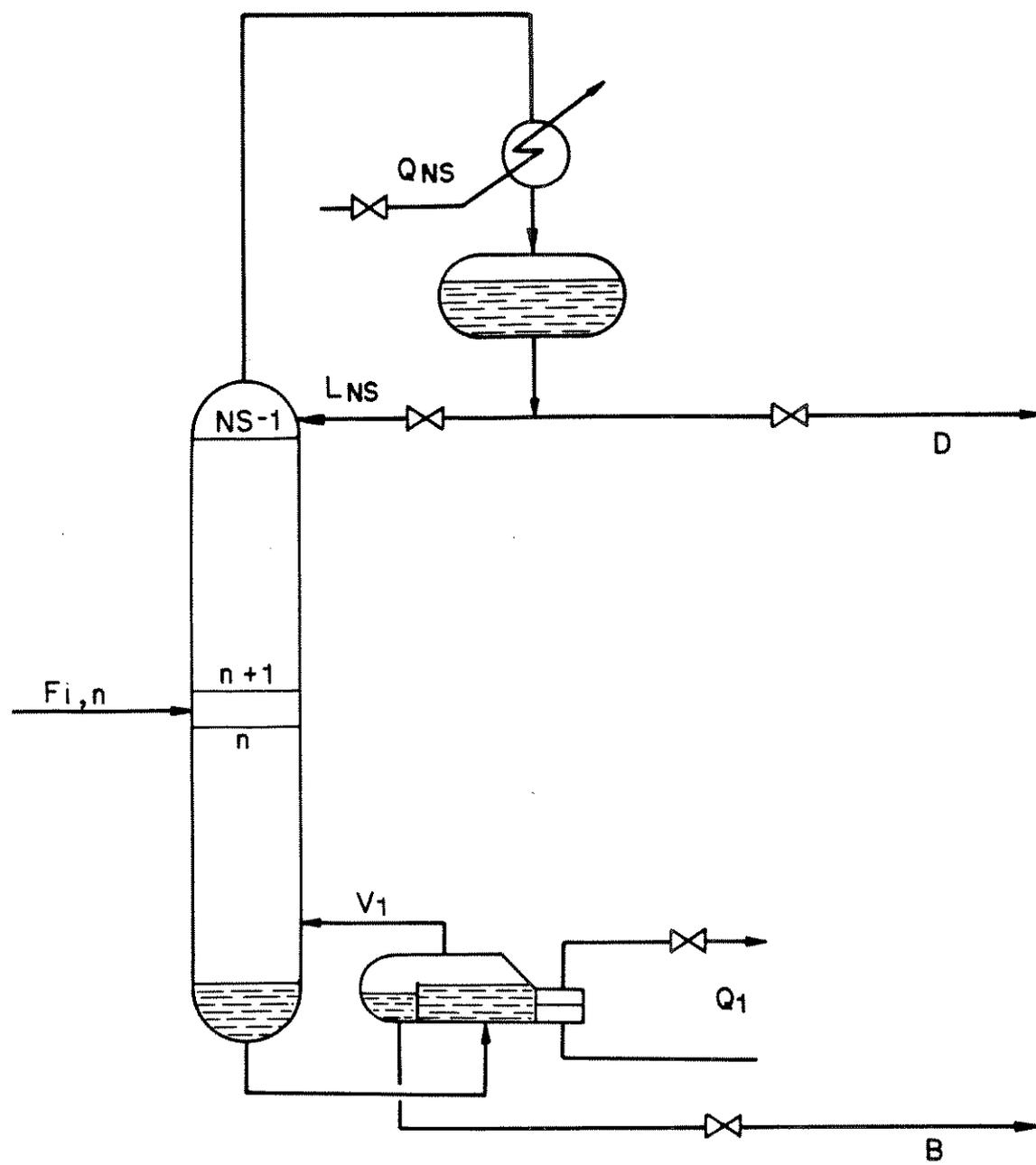


Fig. 3.1 - Diagrama esquemático da coluna com condensador total

Tabela 3.2 - Dados de operação e geometria das colunas C1 e C2.

Especificações	Coluna C1	Coluna C2
<b>- geometria do prato</b>		
pratos perfurados (cross flow)	30	37
diâmetro da coluna (m)	2.10	2.60
espaço entre os pratos (m)	0.61	0.61
diâmetro dos furos (m)	0.005	0.005
passo (equilátero) (m)	0.015	0.015
altura do vertedouro (m)	0.05	0.05
largura do vertedouro (m)	1.47	1.82
altura da secção de entrada no prato (m)	0.039	0.039
<b>- eficiência do prato</b>	0.60	0.60
<b>- geometria do condensador</b>		
diâmetro tambor de refluxo(m)	2.3	2.3
comprimento do tambor de refluxo (m)	3.5	3.5
temperatura de entrada do fluido refrigerante (K)	295.16	295.16
área de troca térmica (m <sup>2</sup> )	1500.	1500.
calor específico do fluido refrigerante (kcal / kmol.K)	1.	1.
coeficiente global de troca térmica (kcal / min / m <sup>2</sup> / K)	390.	390.
altura do condensador (m)	2.	2.
<b>- geometria do refeedor (tipo Kettle)</b>		
volume livre (m <sup>3</sup> )	1.0	1.2
diâmetro (m)	2.5	2.7
comprimento (m)	6.0	6.4
temperatura de entrada do fluido quente (K)	410.	410.
área de troca térmica (m <sup>2</sup> )	500.	550.
calor específico fluido quente (kcal / kmol / K)	0.45	0.45
coeficiente global de troca térmica (kcal / m <sup>2</sup> / min / K)	550.	550.
<b>- alimentação</b>		
posição do prato de alimentação	18	18
vazão (kmol/min)	11.55	11.55
temperatura (°C)	70.2	70.2
composição (fração molar):		
metanol	0.584	0.584
água	0.416	0.416
<b>- destilado</b>		
vazão(kmol/min)	6.52	6.30
grau de impureza no topo (água- ppm)	10.000	1.000
pressão (atm)	1.09	1.09
<b>- refluxo de topo</b>		
vazão (kmol/min)	9.13	10.08

- constantes de válvula ( Kmol/(min atm <sup>0.5</sup> ))		
CV <sub>1</sub> , produto de fundo L <sub>1</sub>	18.	18.
CV <sub>2</sub> , fluido de aquecimento W <sub>r</sub>	250.	250.
CV <sub>3</sub> , fluido de resfriamento W	260.	260.
CV <sub>5</sub> , destilado D	29.	28.
CV <sub>6</sub> , refluxo de topo R.D	43.	46.

Como descrito no segundo capítulo, a modelagem dinâmica requer um conjunto de condições iniciais em número semelhante ao conjunto de equações diferenciais do modelo a ser considerado. Estas condições iniciais foram obtidas aqui através de um programa de simulação estacionária para as configurações das colunas C1 e C2 constantes da tabela 3.2 (AIChE 'Equipment Testing Procedure - Tray Distillation Columns', AIChE, N.Y. (1980) .

Em trabalho anterior (Poiani et al -1985) foi feita uma comparação de diferentes métodos numéricos para a simulação do regime estacionário de colunas de destilação. O exemplo aplicativo utilizado foi o sistema multicomponente a base de etanol-água. Diversos métodos em regime estacionário foram analisados:

-um método de resolução simultânea global do conjunto de equações do modelo (Método Naphtali-Sandholm). As equações do balanço de massa, energia e equilíbrio foram agrupadas por estágios e linearizadas, gerando uma matriz tridiagonal, que era resolvida através do método de convergência de Newton-Raphson,

-um método, chamado naquele trabalho de Alternativo (em relação ao de Naphtali-Sandholm), que considerava o modelo de estágios de equilíbrio e sua formulação era baseada na sequência das diferentes decisões, a serem tomadas no agrupamento das equações do modelo, propostas por Friday-Smith (o método do ponto de bolha era utilizado para gerar os perfis de temperatura e vazão molar de vapor nos estágios,

-o método de Wang-Henke(1966), diferenciando-se dos anteriores pela aplicação do balanço de massa global em cada estágio e utilização do algoritmo da matriz tridiagonal de Thomas, apresentado por Lapidus (1962), na resolução do conjunto de equações dos balanços de massa dos componentes.

Dos resultados observou-se um comportamento semelhante para os perfis obtidos pelos tres métodos. Contudo, um critério significativo de distinção entre os métodos citados dizia respeito ao tempo dispendido nos cálculos. O método de Naphtali-Sandholm demonstrou apresentar convergência mais rápida, com um menor tempo de CPU. Neste escopo, utilizou-se aqui o método de Naphtali-Sandholm na determinação das condições iniciais estacionárias das colunas C<sub>1</sub> e C<sub>2</sub> processando o sistema metanol-água e especificadas na tabela 3.2.A convergência é obtida para uma tolerância especificada de 2.5E-06.

A simulação em regime estacionário das colunas C<sub>1</sub> e C<sub>2</sub> necessitam aproximadamente de 10 a 15 segundos, para definição das condições estáticas da coluna

(temperatura, composições e vazões para as fases líquido e vapor, de todos os estágios e taxas de calor do refervedor e condensador).

Na simulação em regime dinâmico utilizando o Modelo A, o tempo aproximado de cálculo necessário para descrever a evolução temporal das colunas C1 e C2 (tabela 3.2) é de 150 a 300 segundos ( VAX - 730).

Estes tempos de CPU são adequados e aceitáveis para desenvolver, comparar e escolher entre diferentes modelos.

### **3.5.1 - Análise da coerência interna do modelo.**

Inicialmente objetiva-se uma análise da coerência interna do modelo. Para isso utilizando-se sempre o modelo A e a configuração da coluna C1, três casos foram analisados:

**Caso 1-**Variação no balanço material. Respostas preditivas do modelo para uma variação de  $\pm 15\%$  na vazão de alimentação.

**Caso 2-**Variação no balanço energético. Respostas preditivas do modelo para uma variação de  $\pm 10\%$  na entalpia da corrente de alimentação.

**Caso 3-**Análise do comportamento do modelo para diferentes geometrias do refervedor e tambor de refluxo de topo. Distúrbio no balanço energético.

As variações em referimento neste trabalho, quando não especificadas de outra forma, são do tipo linear em rampa entre 10 e 30 minutos, impondo inteira variação em 20 minutos.

No intervalo de tempo de 0 a 10 minutos a simulação dinâmica é retida numericamente nas condições do estado estacionário da coluna, isto é, sem aplicar ao sistema qualquer variação real (o início da variação para todas as simulações deste trabalho ocorre a partir do instante 10 minutos). Esse procedimento, objetiva simular um falso transiente (Biardi et al 1987), originado ou pelo algoritmo numérico ou por uma não igualdade entre os perfis estáticos gerados pelo método numérico de Naphtali-Sandholm utilizado na resolução do modelo estacionário e aqueles gerados pelo algoritmo numérico, método de Gear, utilizado no modelo dinâmico entre 0 e 10 minutos ( período de tempo em que não é imposta nenhuma variação ao modelo).

#### **3.5.1.1 - Caso 1: Respostas a variações da vazão molar de alimentação.**

##### **Variações no balanço material.**

Nesse caso foram determinadas as respostas dinâmicas fornecidas pelo modelo, relativas a variações na vazão molar de alimentação de  $\pm 15\%$ .

As Figuras 3.1 (a-h) apresentam as respostas em regime dinâmico do refeedor, pratos 5 e 28 e condensador para a coluna C1.

Uma análise dessas respostas demonstra que, para uma variação de + 15% na alimentação, efeitos mais acentuados na coluna ocorrem na secção inferior, ou seja, na secção de esgotamento, como, coerentemente, era de se esperar, enquanto que a diminuição na alimentação (-15%) repercute em todo o comportamento da coluna, necessitando de um maior tempo para alcançar o novo estado em regime estacionário. Das figuras anteriores é possível deduzir que a condição estacionária final é alcançada após cerca de 250 min. de operação. Ressalte-se que esta situação é analisada mantendo-se o calor fornecido ao refeedor constante. De uma forma geral todas as variações parecem estar coerentes com a variação efetuada. Nota-se a resposta inversa presente no transiente da vazão líquida.

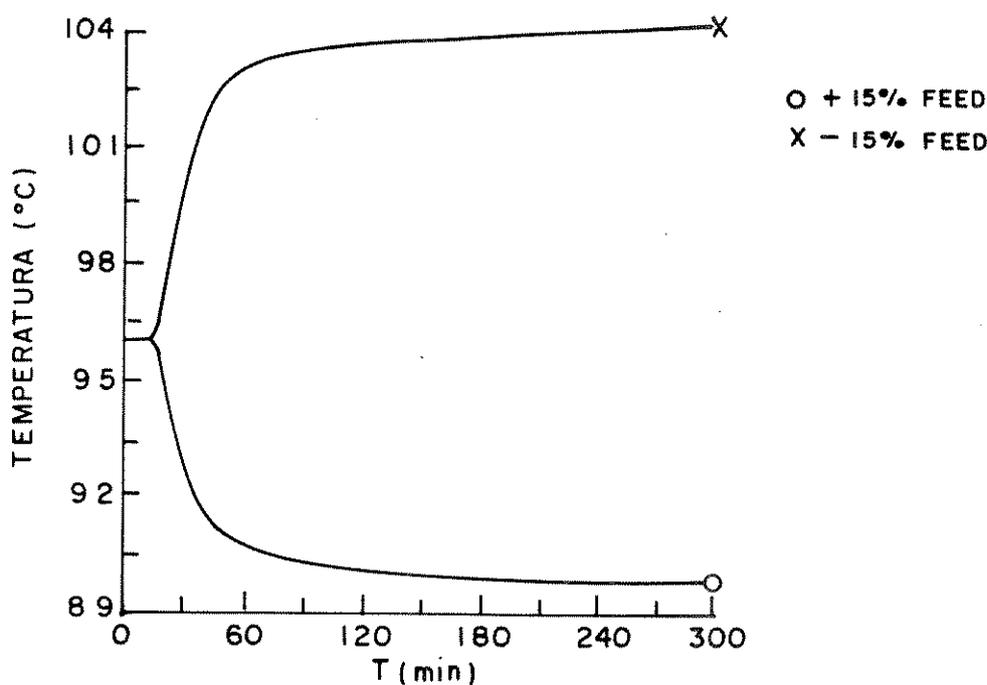


Fig. 3.1a - Temperatura do refeedor x tempo para uma variação de  $\pm 15\%$  na vazão de alimentação.

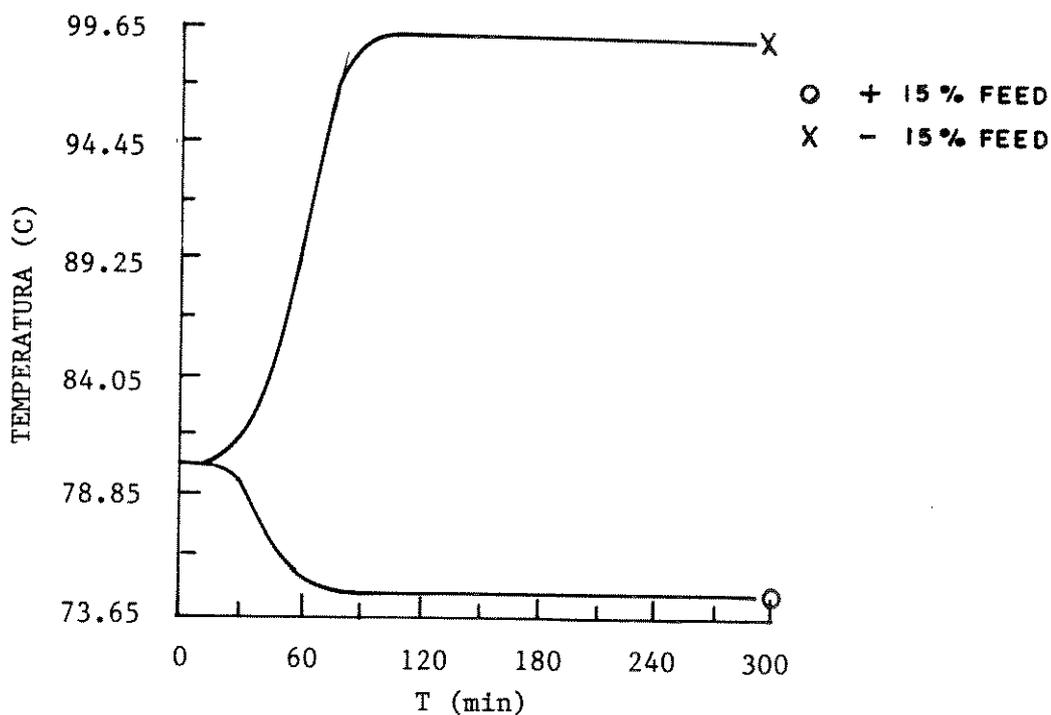


Fig. 3.1b - Temperatura no prato n° 5 x tempo para uma variação de  $\pm 15\%$  na vazão de alimentação

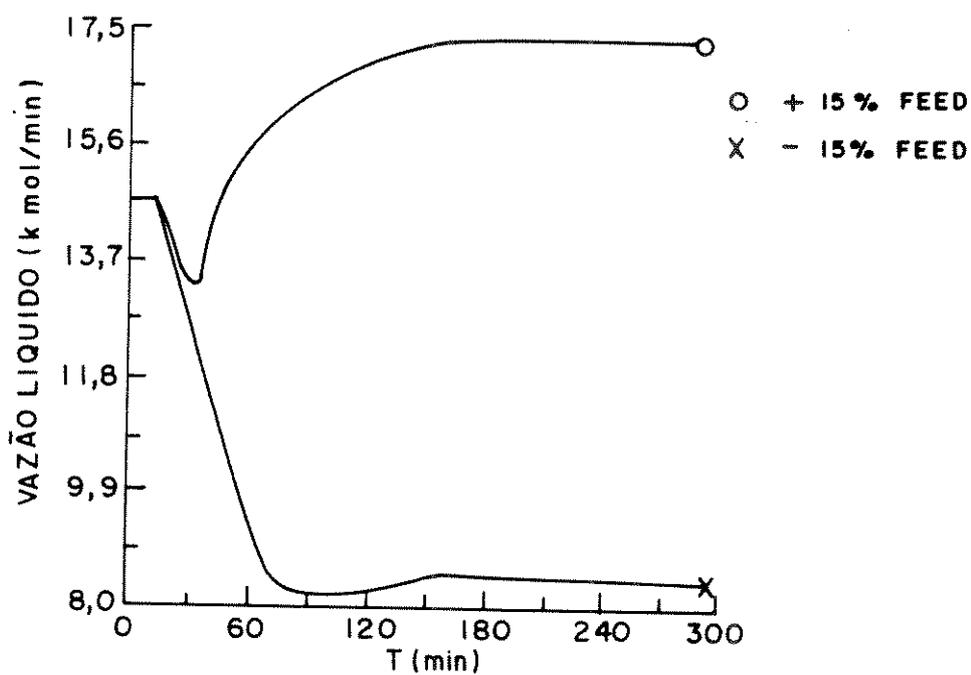


Fig. 3.1c - Vazão molar de líquido no prato n° 5 x tempo para uma variação de  $\pm 15\%$  na vazão de alimentação

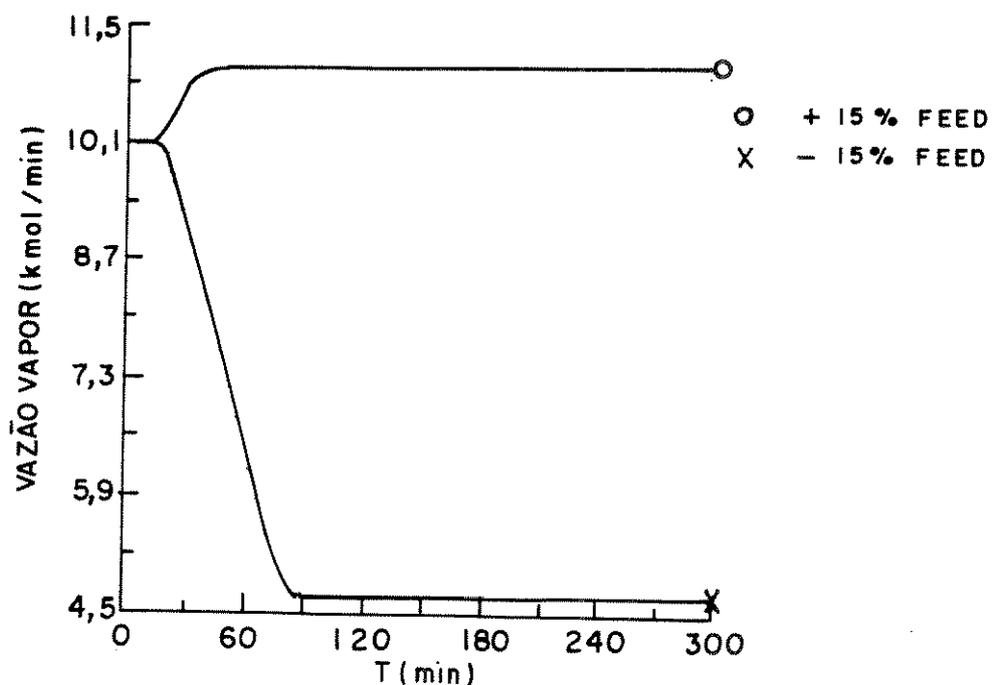


Fig. 3.1d - Vazão molar de vapor no prato nº 5 x tempo para uma variação de  $\pm 15\%$  na vazão de alimentação

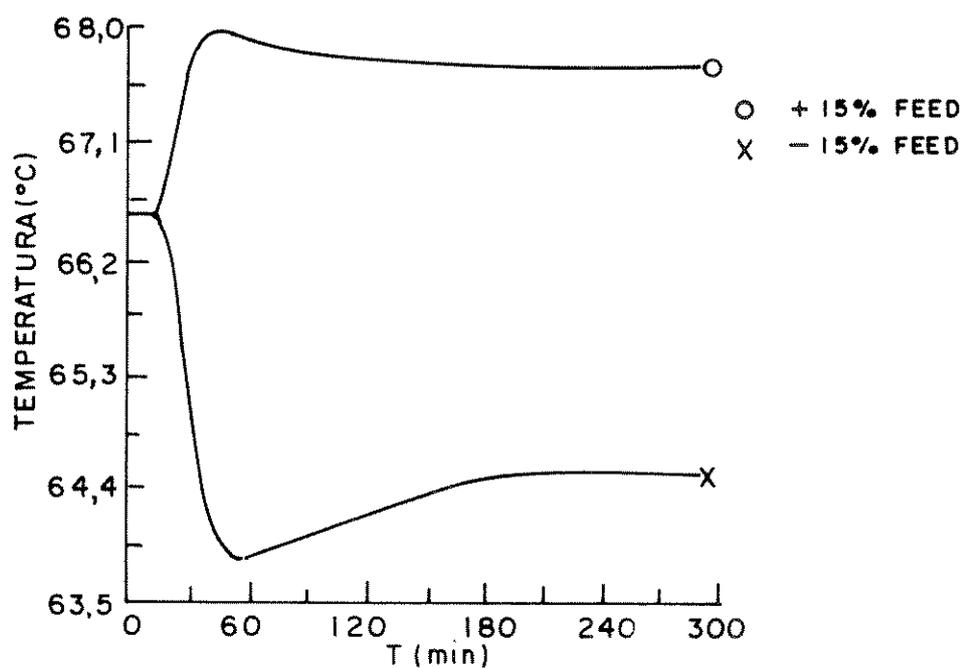


Fig. 3.1e - Temperatura do prato nº 28 x tempo para uma variação de  $\pm 15\%$  na vazão de alimentação

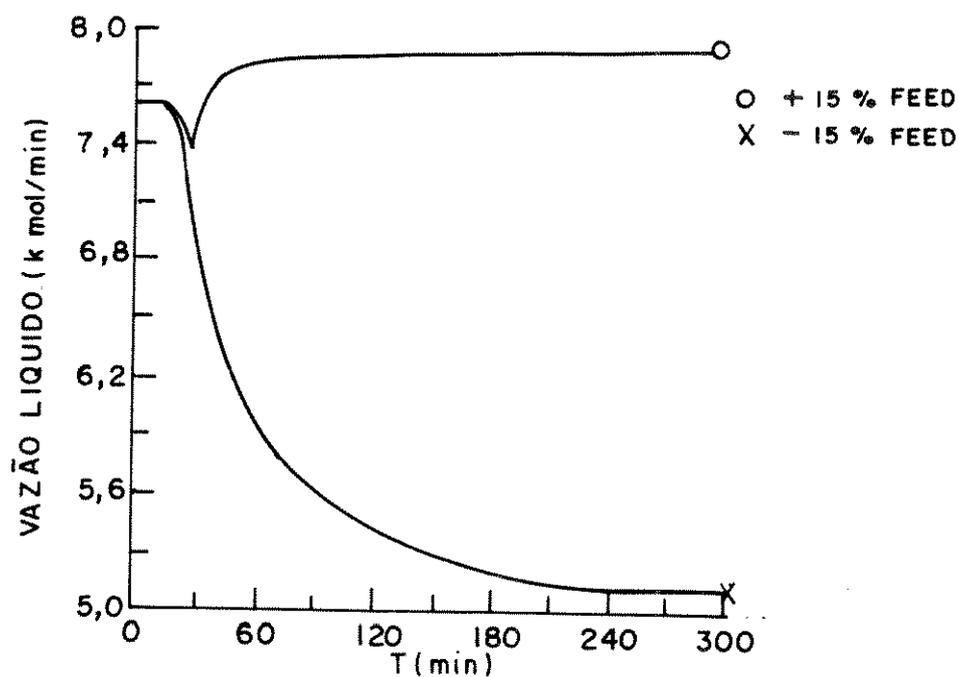


Fig. 3.1f - Vazão molar de líquido no prato nº 28 x tempo para uma variação de  $\pm 15\%$  na vazão de alimentação

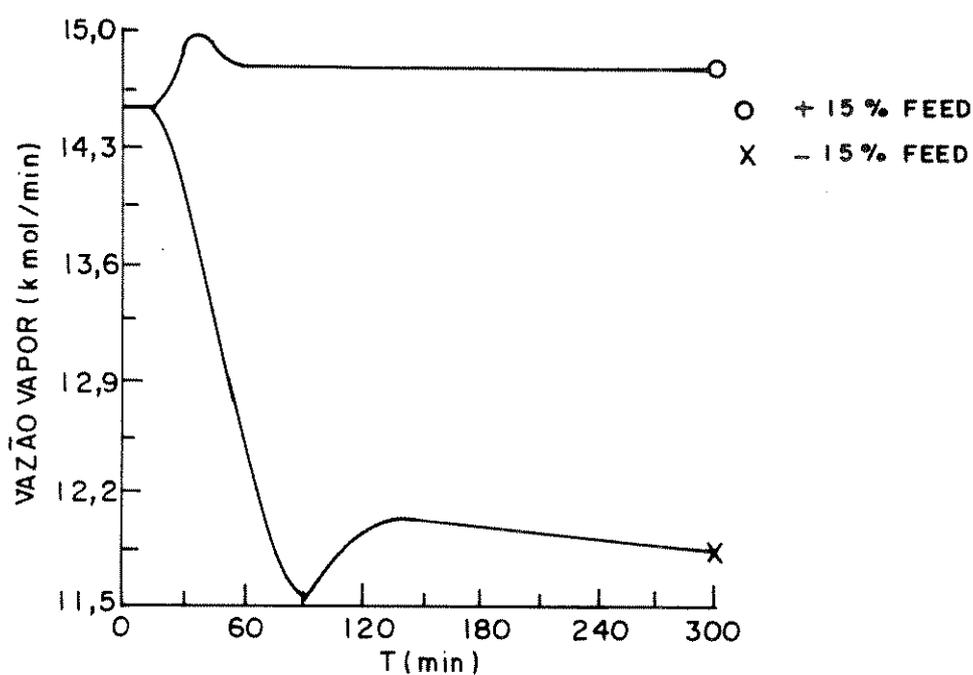


Fig. 3.1g - Vazão molar de vapor no prato nº 28 x tempo para uma variação de  $\pm 15\%$  na vazão de alimentação

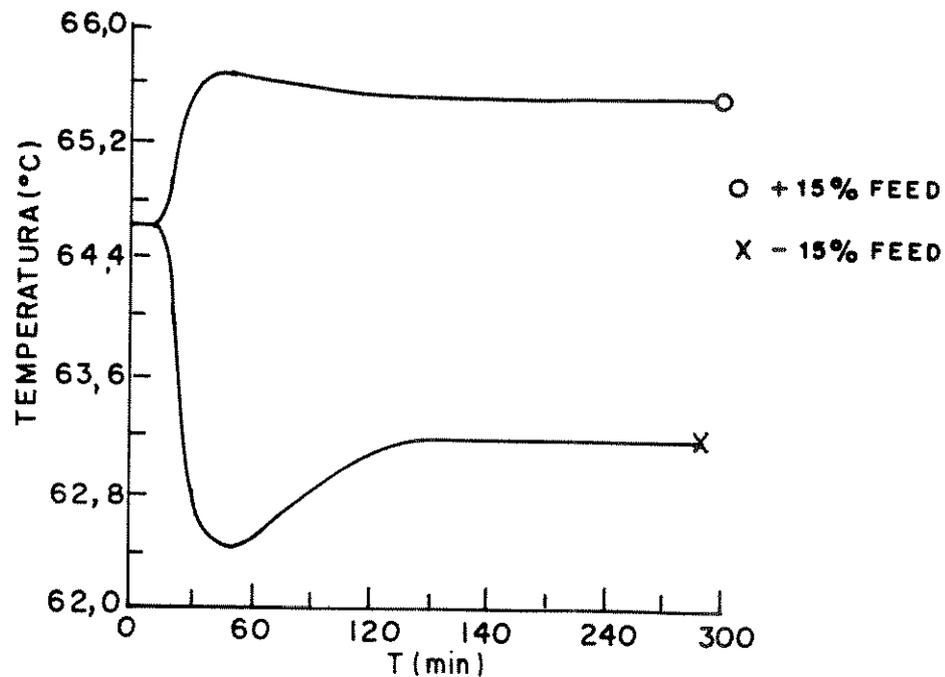


Fig. 3.1h - Temperatura do condensador x tempo para uma variação de  $\pm 15\%$  na vazão de alimentação

### 3.5.1.2 - Caso 2: Respostas a variações na entalpia da alimentação. Variação no balanço energético.

Nesse caso, sempre utilizando o modelo A, as variações analisadas são aumento/redução de mesma intensidade (10%) na entalpia da alimentação o que corresponde respectivamente a um aquecimento/resfriamento de aproximadamente  $30^{\circ}\text{C}$  na corrente de alimentação. Essas variações, são do tipo linear em rampa entre 10 e 30 minutos.

As Figuras 3.2.(a-b) apresentam o perfil de temperatura nos estágios 5 e 28 da coluna C1.

A evolução temporal do perfil de 'holdup' molar de líquido na coluna para uma variação de - 10% na entalpia da corrente de alimentação é apresentada na Figura 3.2-c.

Coerentemente, as diferenças de temperatura são mais acentuadas na secção inferior da coluna. É de ressaltar que o 'holdup' molar para essa mesma secção da coluna apresenta resposta inversa.

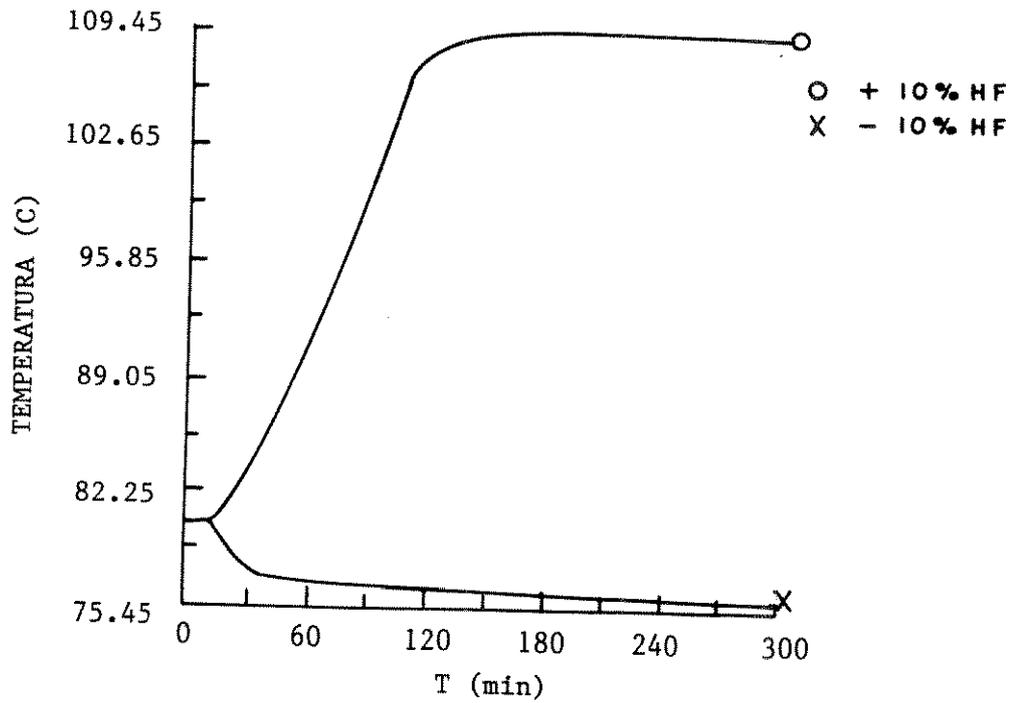


Fig. 3.2a - Temperatura do prato nº 5 x tempo para uma variação de  $\pm 10\%$  na entalpia de alimentação

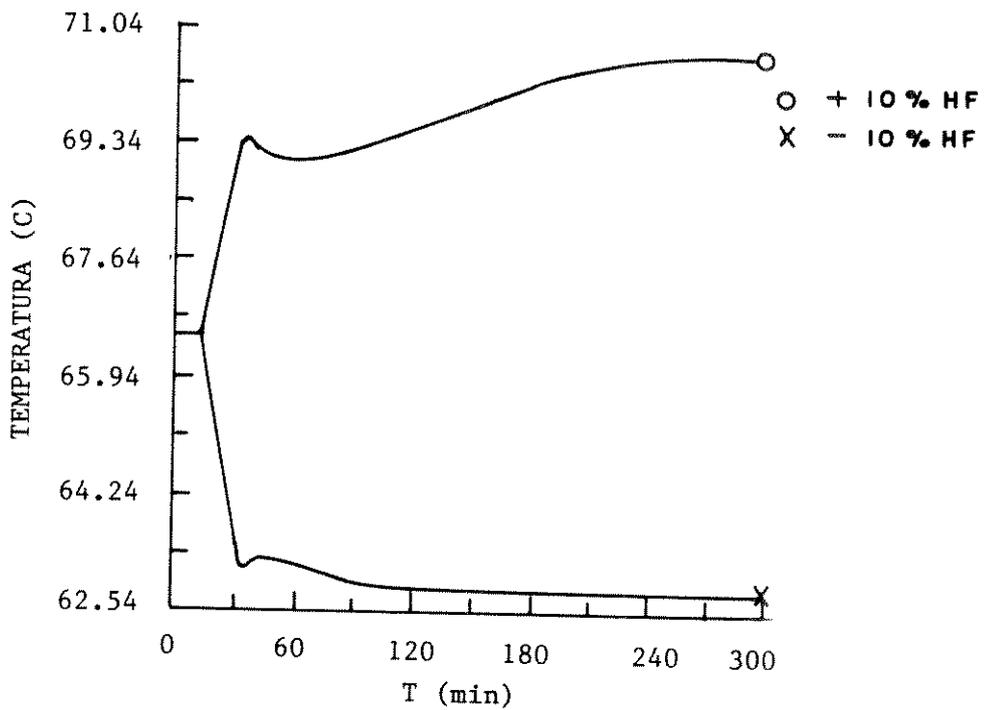


Fig. 3.2b - Temperatura do prato nº 28 x tempo para uma variação de  $\pm 10\%$  na entalpia de alimentação

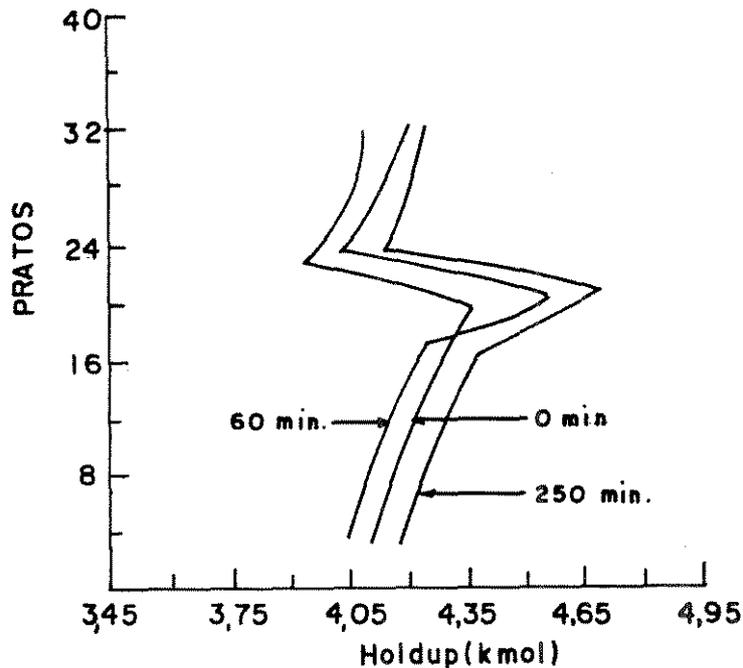


Fig. 3.2c - Evolução do perfil holdup molar de líquido na coluna para uma variação de -10% na entalpia de alimentação.

### 3.5.1.3 - Caso 3: Análise do comportamento do modelo para diferentes geometrias do refeedor e tambor de refluxo de topo. Variação no balanço energético.

Ainda com objetivo de uma análise de coerência do modelo, as Figuras 3.3 (a-b) apresentam o comportamento do componente mais volátil (metanol) respectivamente nos produtos de fundo e topo da coluna C1, para diferentes dimensões do tambor (acumulador) de refluxo de topo. A variação imposta é uma redução de 10% na entalpia da corrente de alimentação.

Especificamente as quatro situações reportadas nas Figuras 3.3a-b referem-se a variações no volume do tambor de refluxo obtidas dividindo-se por 2 e multiplicando por um fator 2 e 10 o valor original da Tabela 3.2.

Análise semelhante é apresentada nas Figuras 3.3 (c-d) com referência a variação de volume do refeedor. Novamente a variação imposta é uma redução de 10% na entalpia da corrente de alimentação.

Pode-se concluir das respostas obtidas, Figuras 3.3 (a-d), que após determinado valor crítico do volume do acumulador de topo ou refeedor, acréscimos superiores resultam em uma diminuição da rapidez de resposta da coluna (aumento da constante de

tempo da coluna). Nessa condição crítica, a constante de tempo do condensador ou do refeedor passa a ser dominante. Ressalte-se também que, a análise destas figuras caracteriza o potencial do modelo para ser utilizado no projeto ótimo dos equipamentos periféricos da unidade coluna de destilação.

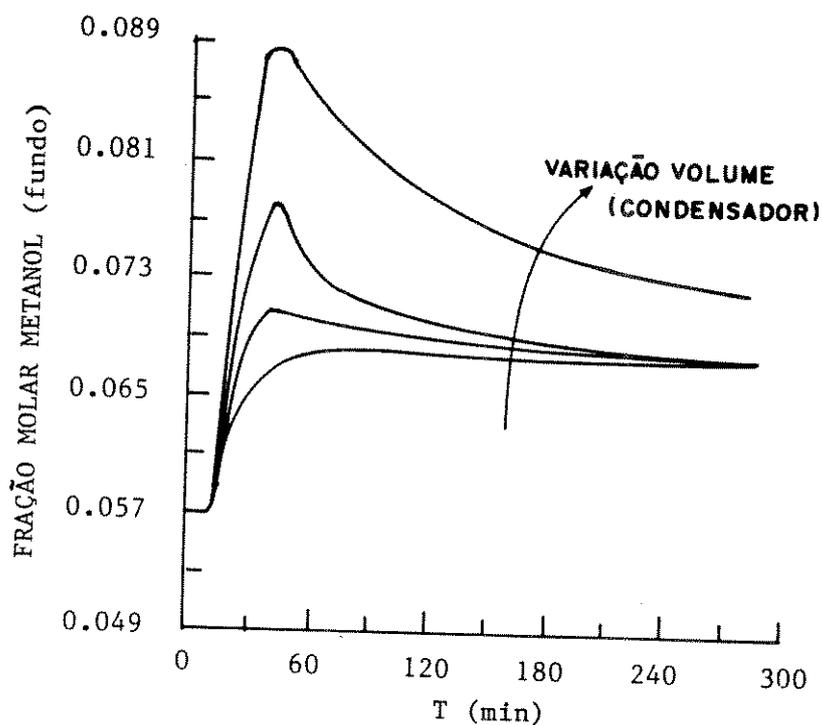


Fig. 3.3a - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para variações na geometria do sistema condensador + tambor de refluxo de topo.

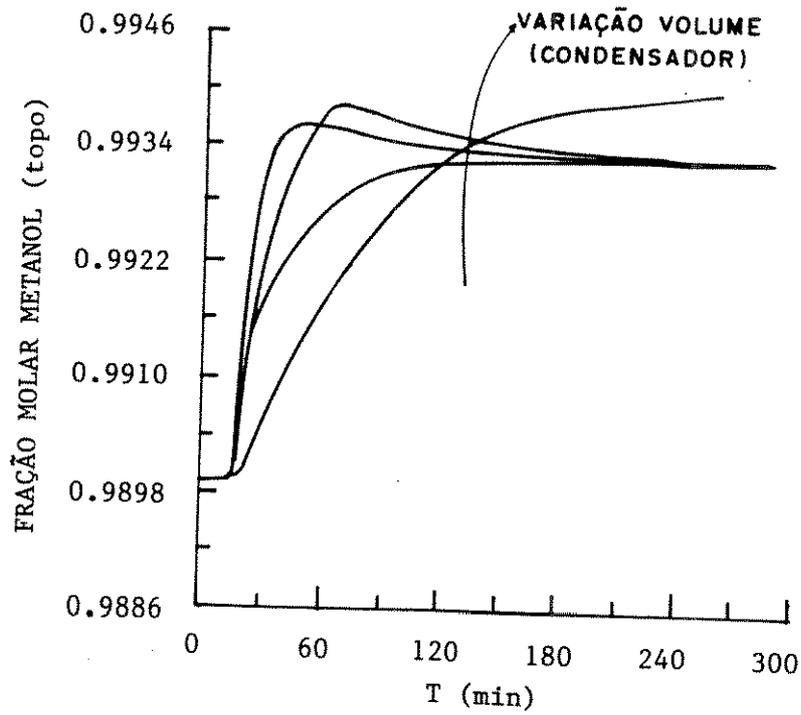


Fig. 3.3b - Fração molar do metanol no destilado x tempo para variações na geometria do sistema condensador + tambor de refluxo de topo

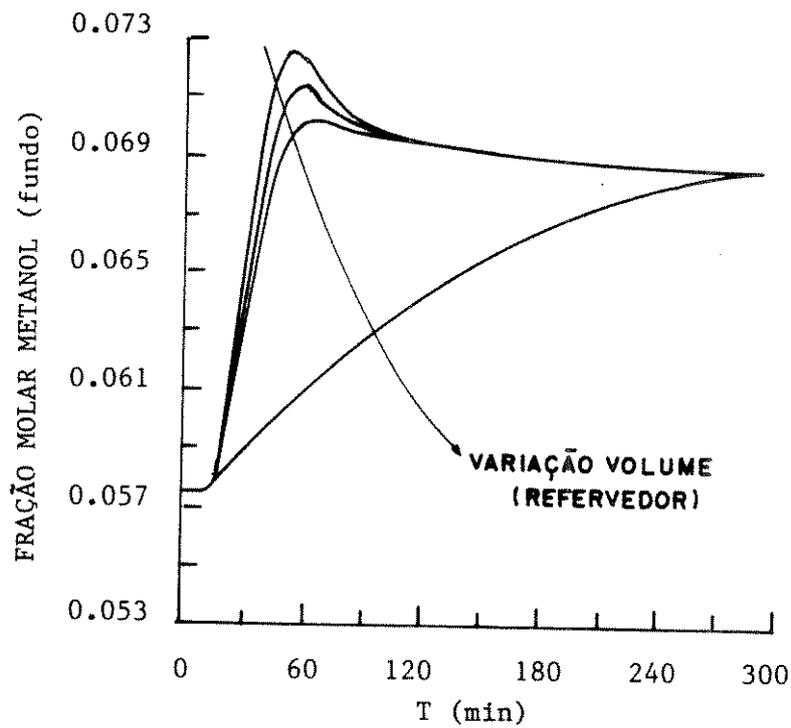


Fig. 3.3c - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para variações na geometria do refervedor

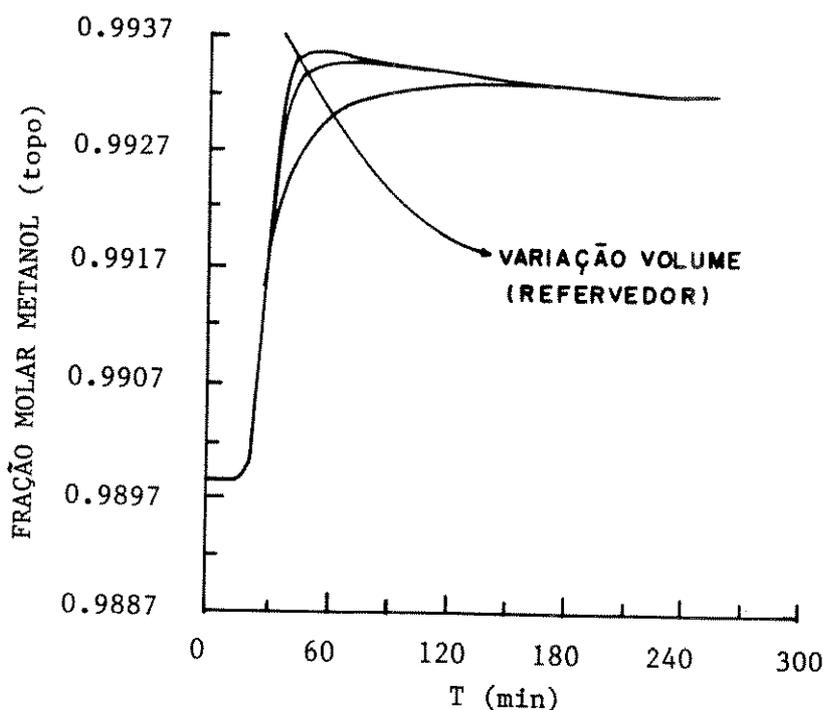


Fig. 3.3d - Fração molar do metanol no destilado x tempo para variações na geometria do refeedador

### 3.5.2 - Análise Comparativa entre os Modelos Desenvolvidos.

A seguir apresenta-se análise, discussão e confronto entre a capacidade preditiva dos modelos a uma, duas e três constantes de tempo, respectivamente modelos A, B e C, acrescidos de variações do modelo A, ou seja modelos A0 e A1, para duas colunas C1 e C2, com diferentes graus de pureza do produto.

Objetivando então, o confronto entre os modelos listados, dois estudos de casos serão considerados: o primeiro busca um confronto entre os diversos modelos; utilizando as configurações das colunas C1 e C2 e sem modificar as especificações dos pratos constantes da Tabela 3.2; o segundo busca esse confronto, somente que agora acentuando modificações na geometria da coluna C1, procurando desta forma aumentar a importância relativa do 'downcomer' dos pratos.

### 3.5.2.1 - Caso 1: Confronto entre os diversos modelos, sem modificar especificações dos pratos.

Respostas preditivas da fração molar do metanol nas correntes de fundo (resíduo) e topo (destilado) e vazão molar líquido para os pratos intermediários (5 e 28) das colunas C1 e C2. Variação na vazão molar da corrente de alimentação (+30%).

As Figuras 3.4(a-b) e 3.4(c-d) apresentam a fração molar do metanol no fundo e topo, respectivamente para as colunas C1 e C2.

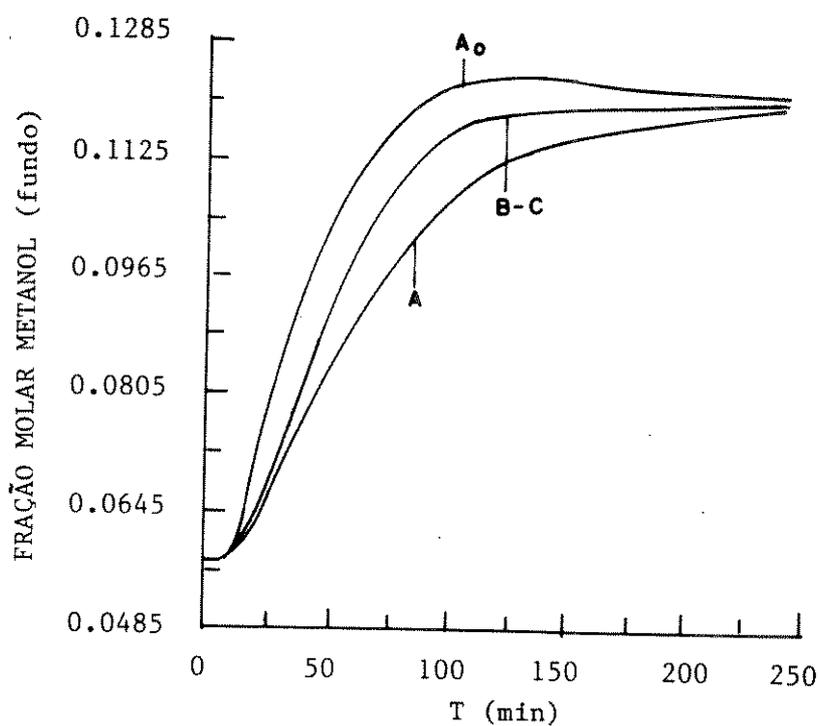


Fig. 3.4a - Fração molar metanol no produto de fundo (coluna C1) x tempo para uma variação de +30% na vazão de alimentação.

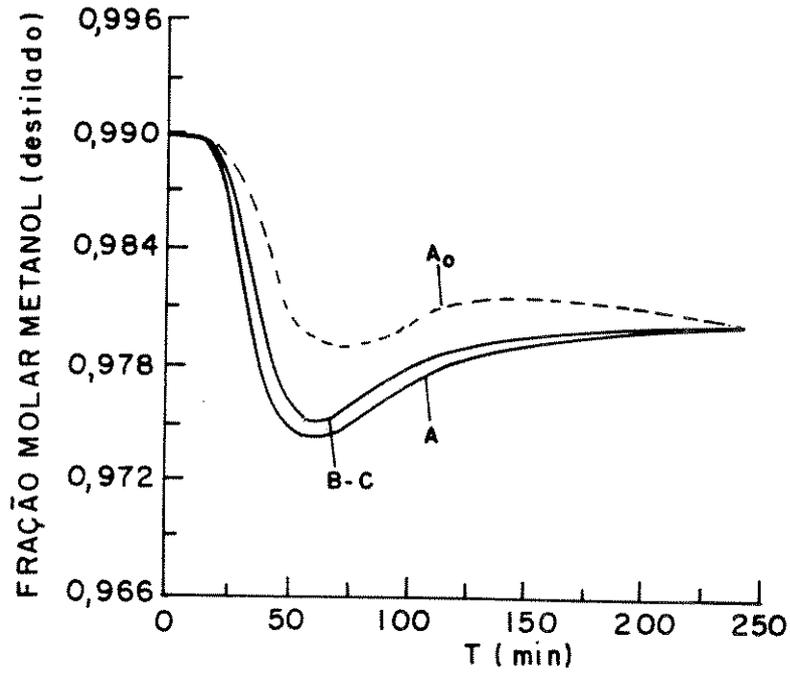


Fig. 3.4b - Fração molar metanol no destilado (coluna C1) x tempo para uma variação de +30% na vazão de alimentação.

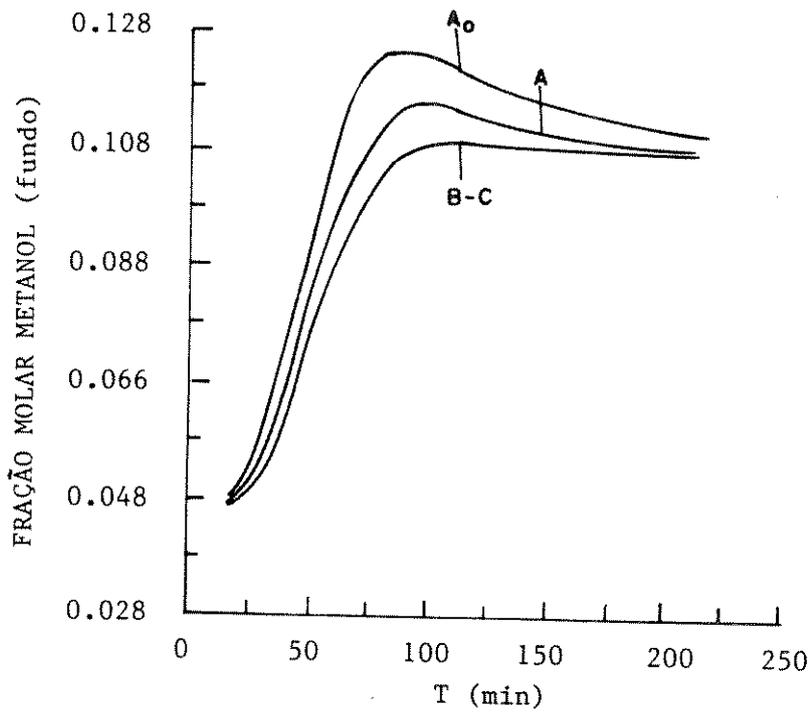


Fig. 3.4c - Fração molar metanol no produto de fundo (coluna C2) x tempo para uma variação de +30% na vazão de alimentação.

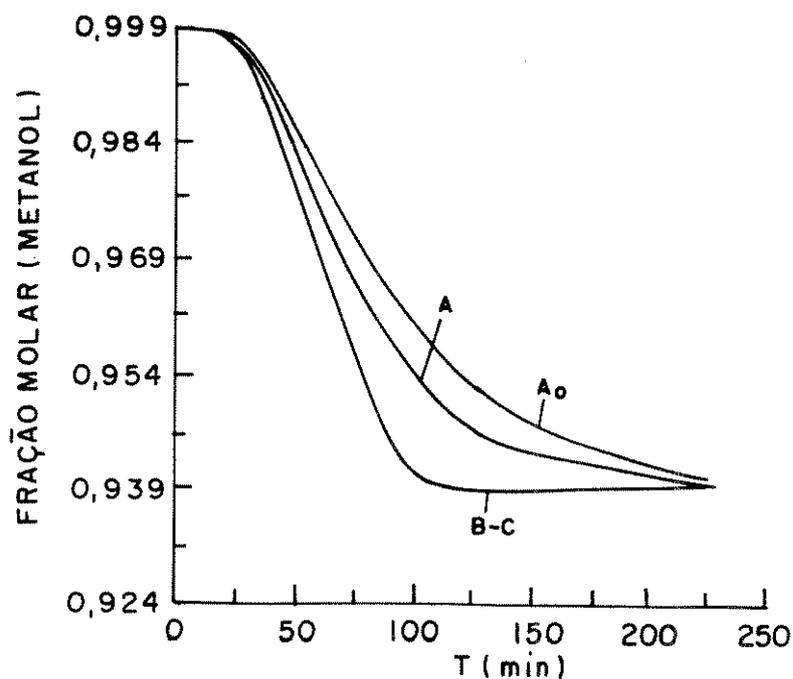


Fig. 3.4d - Fração molar metanol no destilado (coluna C2) x tempo para uma variação de +30% na vazão de alimentação.

As Figuras 3.4(e-f) e 3.4(g-h) apresentam a vazão molar de líquido nos pratos intermediários das colunas C1 e C2, para uma variação de +30% na vazão de alimentação.

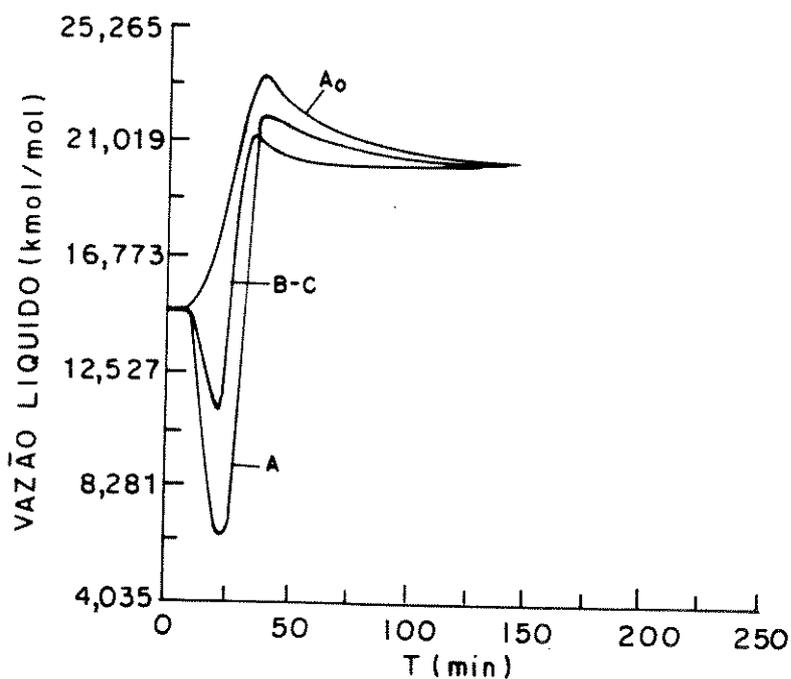


Fig. 3.4e - Vazão molar de líquido no prato nº 5 (coluna C1) x tempo para uma variação de +30% na vazão de alimentação.

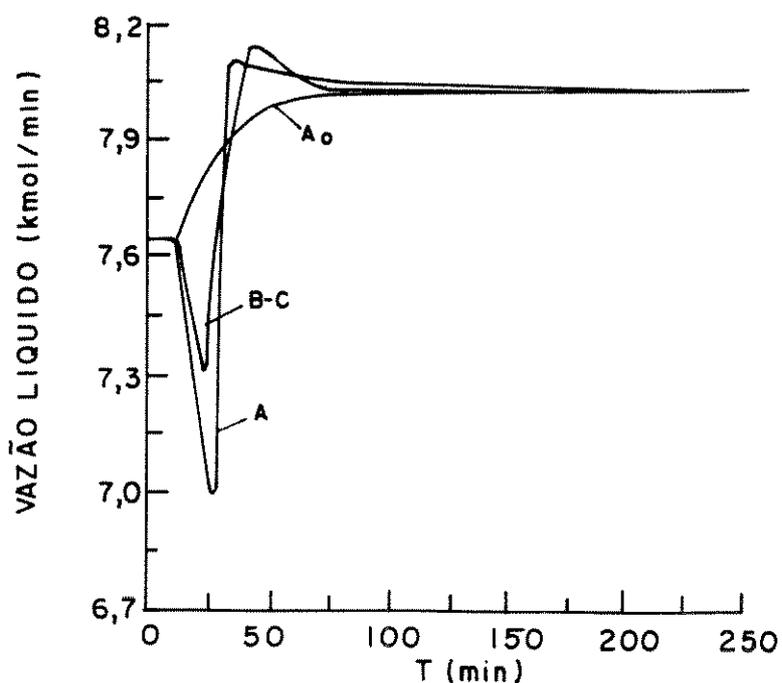


Fig. 3.4f - Vazão molar de líquido no prato nº 28 (coluna C1) x tempo para uma variação de + 30% na vazão de alimentação.

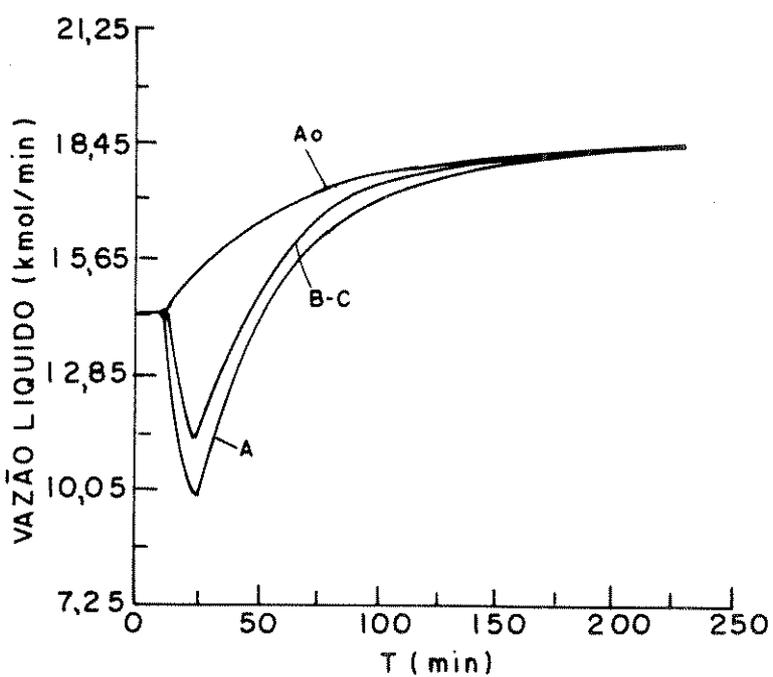


Fig. 3.4g - Vazão molar de líquido no prato nº 5 (coluna C2) x tempo para uma variação de + 30% na vazão de alimentação.

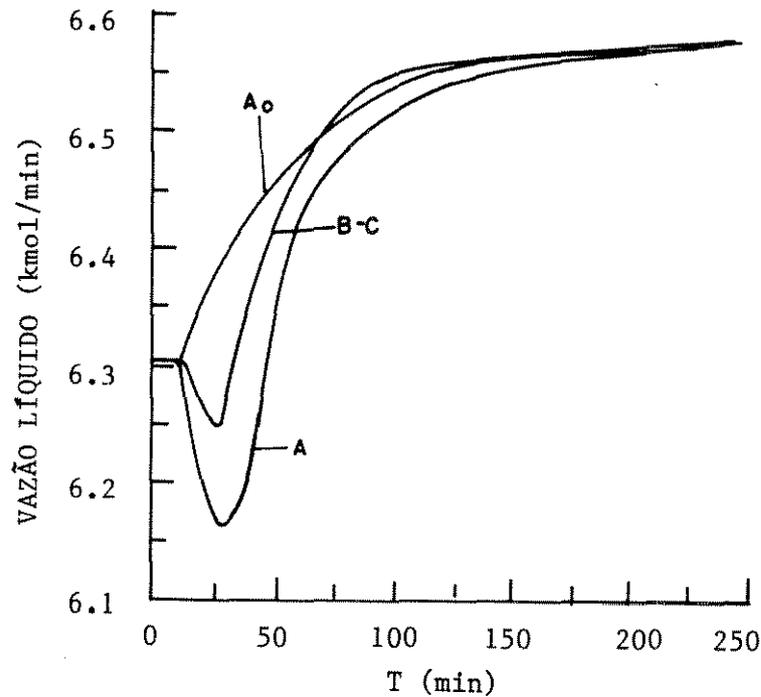


Fig. 3.4h - Vazão molar de líquido no prato nº 28 (coluna C2) x tempo para uma variação de + 30% na vazão de alimentação.

A Tabela 3.3 resume o número de equações (NE), o tempo de calculo - CPU(s) VAX / 730 e a razão ( $\lambda_{ij}$ ) de "stiffness" (definida como a razão entre o máximo e o mínimo dos auto valores do sistema global ) para os diferente modelos.

**Tabela 3.3 - Algumas características dos modelos**

Modelo	Coluna C1				Coluna C2			
	$A_0$	A	B	C	$A_0$	A	B	C
NE	240	270	420	480	296	333	518	592
CPU(s)	183	225	548	604	253	311	756.5	835
$\lambda_{ij}$	221.000	228.000	245.000	237.000	269.000	273.000	281.000	277.000

De todos esses perfis é possível concluir de uma forma generalizada que, dentro das condições do processo em estudo, os quatro modelos considerados (A,  $A_0$ , B, C) atingem assintoticamente os mesmos valores em regime. Agora, quanto à evolução temporal do transiente, acentuadas diferenças existem entre os modelos, desde diferentes previsões quanto à caracterização das respostas inversas (variável vazão líquido) ou mesmo situação extrema de não previsão da inversa (modelo  $A_0$ ), fato que para uma operação controlada da coluna, o modelo  $A_0$  poderia conduzir a uma situação de "caos" do sistema de controle.

Da Tabela 3.3 parece evidente que a introdução do 'downcomer' (modelo B) e do 'holdup' vapor (modelo C) não variam praticamente a razão de 'stiffness'. Isto significa que o incremento do tempo de cálculo registrado passando do modelo A para o modelo C é devido mais ao aumento das dimensões do sistema de equações do que propriamente a rigidez matemática.

Do exame das Figuras 3.4 (a-h) pode-se fazer as seguintes observações:

- existe acentuada variação entre as respostas do modelo A e os restantes e considerando a pequena redução no tempo de cálculo gerada por este modelo, não parece conveniente a hipótese de introduzir um "holdup" constante nos pratos da coluna.
- existe praticamente coincidência entre as respostas dos modelos B e C e é previsível que tal consideração seja facilmente generalizada para toda a coluna visto a clara resposta do sistema.
- os modelos B e C reduzem a resposta inversa prevista do modelo A; este fato pode ser explicado através do efeito de "smoothing" do conduto de descarga, claramente registrado nas Figuras 3.4(e-f).
- o modelo A apresenta um atraso, quando comparado com o B, em atingir a nova condição de regime.
- o aumento do grau de pureza do produto (coluna C1 para C2) parece aumentar o atraso de A em relação a B (para atingir as novas condições de regime), bem como acentua o desvio no comportamento da resposta inversa dos modelos.

Como resultado de todas as considerações precedentes, parece-nos conveniente restringir a atenção somente aos modelos A e B. Considerando ainda a acentuada diferença destes modelos quanto ao tempo de cálculo necessário para a simulação torna-se pois necessário verificar a real necessidade de aplicação de um modelo mais completo, com um maior grau de descrição fenomenológica do processo. Naturalmente a diferença existente entre as respostas do modelo A e do modelo B serão mais evidentes quanto maior for o número de 'downcomers' presentes na coluna ou quanto maior for o tempo de residência do fluido nos 'downcomers'. Dentro de tais considerações o próximo exemplo procurará definir a escolha do melhor modelo a ser utilizado na sequência deste trabalho.

### 3.5.2.2 - Caso 2 : Confronto entre os diversos modelos, modificando especificações dos pratos.

Respostas preditivas dos modelos, variando-se a geometria da coluna C1 (diminuindo o 'holdup' dos pratos e aumentando o 'holdup' do 'downcomer'). Variação na entalpia da corrente de alimentação (resfriamento em cercas de 30 C).

Neste caso a geometria da coluna C1 é modificada segundo as dimensões características listadas na Tabela 3.4.

**Tabela 3.4 - Principais modificações geométricas relativas a coluna C1**

espaço entre os pratos (m)	1.5
largura do vertedouro (m)	1.62
altura da secção de entrada no prato (m)	0.02
diâmetro do tambor de refluxo (m)	1.4
comprimento do tambor de refluxo (m)	1.3
volume livre do refervedor (m <sup>3</sup> )	0.45

Todas essas modificações objetivam aumentar a importância relativa do 'downcomer'; reduzindo o 'holdup' dos pratos, do refervedor e do condensador enquanto é aumentado o 'holdup' do 'downcomer'. O tipo de perturbação imposta para o estudo deste caso é um resfriamento da corrente de alimentação de cerca de 30 °C.

Como pode ser observado das Figuras 3.5 (a-b) existe acentuada diferença de resposta entre o modelo A e o modelo B nessas condições. Nota-se também o atraso do modelo A em relação a curva de resposta do modelo B. Também do 'holdup' em um prato intermediário da secção inferior da coluna pode-se observar que o modelo B, como já citado anteriormente, reduz a resposta inversa do sistema. Esta redução na resposta inversa se traduz por alcançar em tempo menor a nova configuração de regime. Contudo, não obstante se considerar uma situação geométrica modificada, o tempo característico de evolução e de regime não são marcadamente diferentes para os dois modelos. Para confirmar as impressões obtidas e para melhor compreender as diferentes capacidade material em jogo, introduz-se neste confronto também um modelo A1. O modelo A1 deriva do modelo A, e em relação a este apresenta como diferença o fato de considerar o 'holdup' de líquido global no prato como sendo dado pelo 'holdup' da zona ativa do prato mais o 'holdup' do 'downcomer', ou seja apresenta um único termo de capacidade somente que maior que aquele do modelo A.

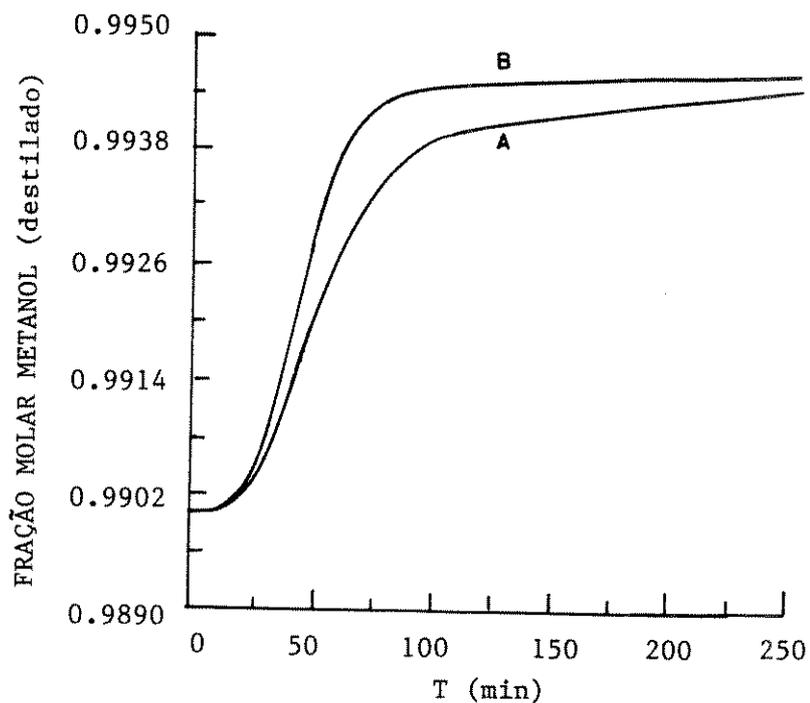


Fig. 3.5a - Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de  $-30^{\circ}\text{C}$  na temperatura de alimentação.

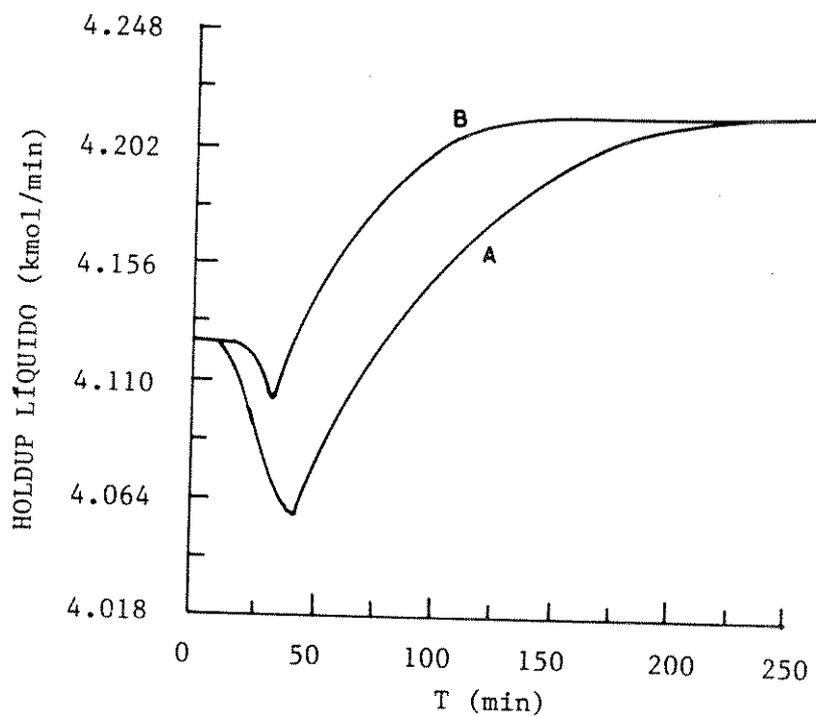


Fig.3.5b - Holdup molar do líquido no prato n x tempo para uma variação de  $-30^{\circ}\text{C}$  na temperatura de alimentação.

As Figuras 3.6 (a-b) apresentam o confronto entre as respostas dos três modelos (A, A1 e B). De imediato confirma-se que quanto maior o 'holdup' maior o atraso na resposta da coluna, coerente com o modelo do 'holdup' líquido global. Nota-se que, no início os modelos A1 e B apresentam o mesmo tipo de andamento. Porém no tempo o modelo A1, em função de sua maior e único termo de capacidade, apresenta um maior retardo do que A e B.

O comportamento do sistema parece estar consistente com uma consideração geral de rigidez do modelo. De fato, cada prato é simulado em termos de somente uma capacidade ou uma única constante de tempo para o modelo A, de duas constantes de tempo para o modelo B e para o modelo A1 é simulado com somente uma única constante de tempo mas esta correspondente a soma das duas do modelo B.

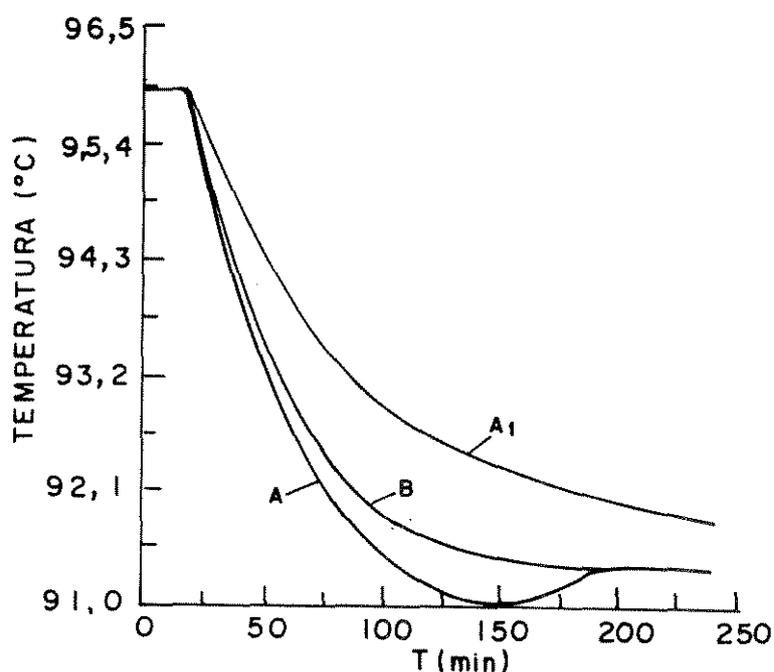


Fig. 3.6a - Temperatura do reator x tempo para uma variação de  $-30^{\circ}\text{C}$  na temperatura de alimentação.

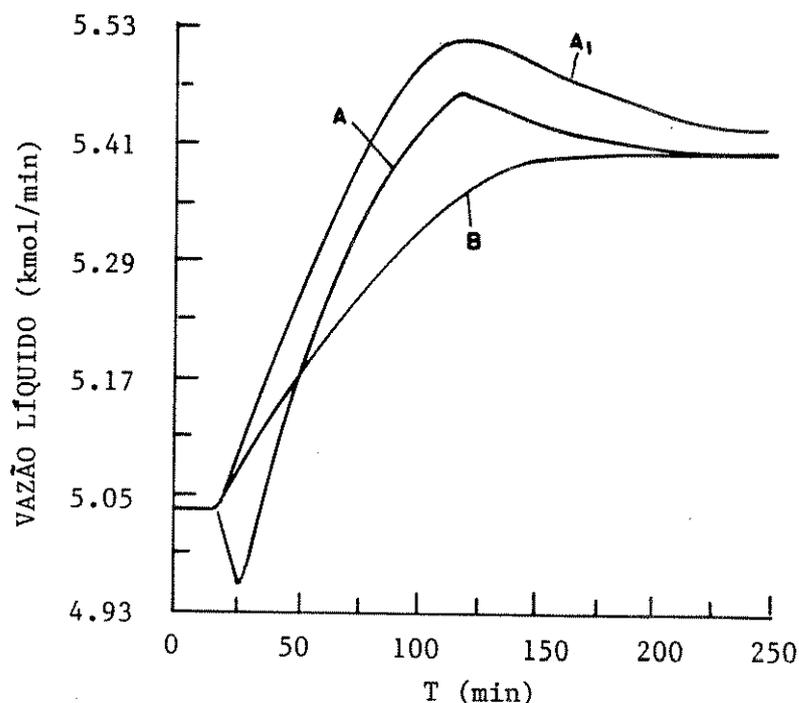


Fig. 3.6b - Vazão molar de líquido no refeedor x tempo para uma variação de  $-30^{\circ}\text{C}$  na temperatura de alimentação.

Como consideração final, depois de toda a análise precedente, pode-se concluir que o modelo A é mais simples e comporta um menor tempo de cálculo quando comparado com o modelo B.

A utilização do modelo B torna-se conveniente em geral em uma fase preliminar da simulação e/ou projeto, ou ainda nos casos de acentuada importância do downcomer, objetivando corrigir ou confirmar a indicação preliminar do modelo A.

Após a abordagem dos diferentes termos capacitivos materiais e tendo-se selecionado o modelo A como o mais recomendado para o presente trabalho, seja pelo seu menor tempo de cálculo, seja por considerações geométricas, seja pela modesta importância do 'downcomer', seja pelo número de pratos na coluna (30), pode-se ainda estudar variações desse modelo para simplificações dos termos referentes ao balanço energético da coluna.

### 3.5.2.3. Confronto entre modelos com simplificações no balanço energético

Mc Avoy T.J. et al (1986) sugerem a alternativa de considerar o balanço entálpico, instantaneamente em regime, possibilitando assim a transformação da equação diferencial (2.2), balanço de energia, em equação algébrica. Segundo essa linha, dois modelos simplificados podem ser obtidos do modelo A ( modelo a uma constante de tempo), que, para efeitos de nomenclatura, serão aqui denominados de modelos S1 e S2:

**Modelo S1** : considera desprezível a derivada da energia total para todos os estágios ou seja o balanço entálpico é tomado instantaneamente em regime. A equação (2.2) assume a forma algébrica:

$$HV_{n-1} \cdot V_{n-1} + HL_{n+1} \cdot L_{n+1} + HF_n \sum_i F_{i,n} - HV_n(V_n + W_n) - HL_n(U_n + L_n) = 0 \quad (2.2')$$

Desta forma, a definição de energia (equação 2.6) resulta supérflua e não é introduzida no modelo; o simples estágio é constituído por 2NC + 4 equações. O algoritmo de resolução é análogo aos modelos anteriores.

**Modelo S2** : considera desprezível a derivada da energia total somente nos pratos. Para os pratos o modelo é constituído de 2NC + 4 equações para cada estágio, coincidindo com as do modelo S1. O condensador e o refeedor são descritos mediante o modelo completo descritos nos itens 2.2.4 e 2.2.5.

Uma simples comparação entre modelos (**modelo A, modelo S1 e modelo S2**) é apresentada nas Figuras 3.7 (a-b). Esses resultados referem-se a destilação da mistura metanol/água processada na coluna C1. A variação considerada é uma redução na vazão da alimentação de 5%. O confronto proposto mostra claramente a importância de uma correta determinação da evolução temporal da entalpia ao longo da coluna.

Mesmo quando se considera o balanço energético diferencial somente no condensador e no refeedor, continua a existir um acentuado desvio em relação ao modelo completo proposto como confrontos. Observa-se também que a inclinação inicial das curvas de respostas analisadas, Figuras 3.7 (a-b), é fortemente influenciada pela presença do termo derivativo do balanço energético. Relembre-se que esta inclinação inicial é de enorme importância sobretudo no projeto e/ou verificação do sistema de controle da coluna (Stephanopoulos, 1984).

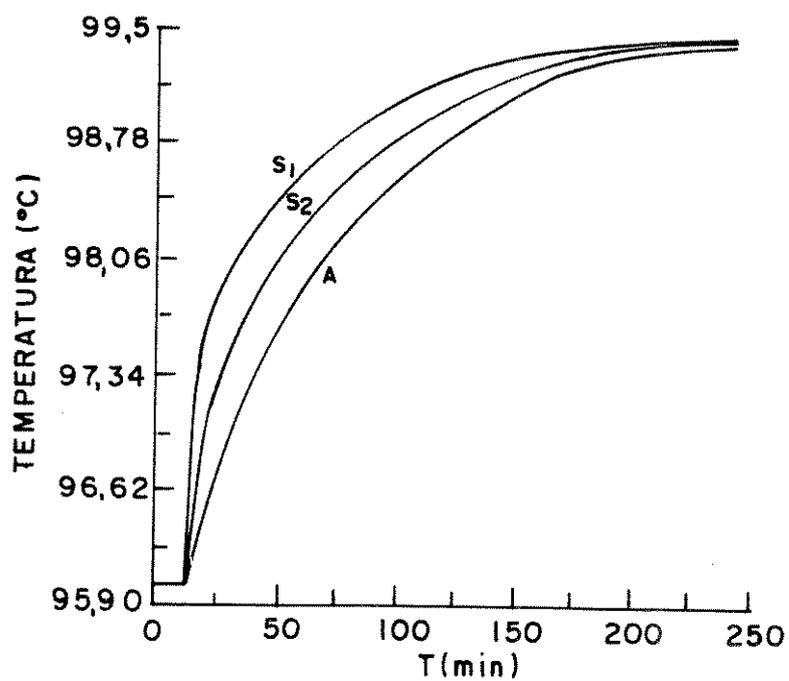


Fig. 3.7a - Temperatura do refervedor x tempo para uma variação de -5% na vazão de alimentação.

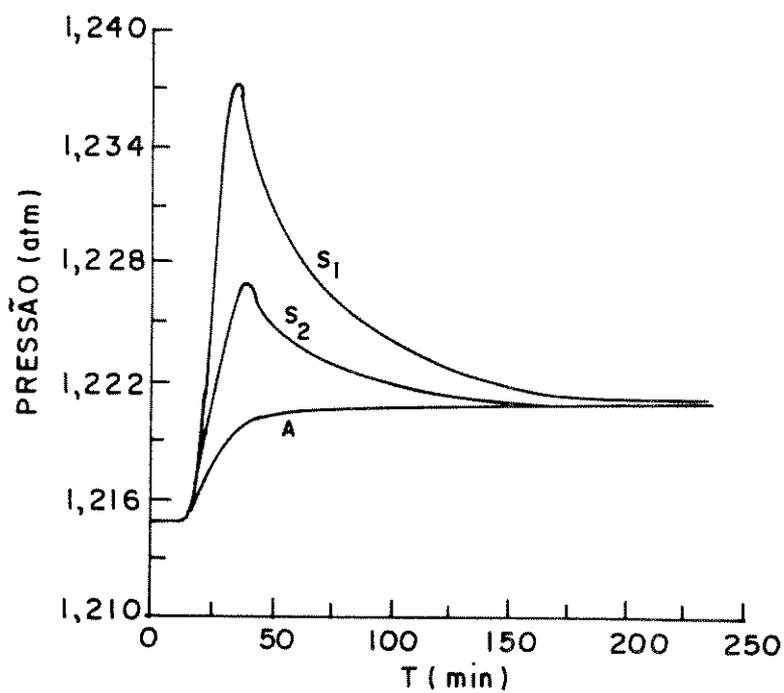


Fig. 3.7b - Pressão do refervedor x tempo para uma variação de -5% na vazão de alimentação.

### 3.6 - Influência do tipo de contato considerado. Consideração dos modelos de pratos: valvulado, perfurado e com campânula.

Para avaliar o comportamento dinâmico dos diversos pratos, restringiu-se a aplicação do modelo a um sistema constituído de um único estágio. O estágio é considerado adiabático, operando a uma pressão constante e alimentado por duas correntes, uma líquida e outra vapor das quais são conhecidas a temperatura, a vazão e a composição. Os pratos foram dimensionados (Smith, B.D.- 1963) para iguais: diâmetro, área dos orifícios e área ativa, mantendo constante a altura do vertedouro e a abertura de entrada no prato do fluxo líquido. Em todas as simulações é aplicada uma perturbação do tipo degrau no instante  $t = 0$ , reduzindo-se em 20% a vazão molar da corrente líquida entrando no prato.

Os quatro tipos de pratos utilizados como exemplo aplicativo do programa construído, bem como as grandezas geométricas relativas são reportados a seguir:

- prato perfurado 'cross flow' e 'split flow',  
Tabela 3.5;
- prato com campânula e arranjo com passo equilátero 'cross flow' e 'split flow',  
Tabela 3.6;
- prato valvulado  $V_1$  'cross flow' e 'split flow', definido pela correlação de Glitsch,  
Tabela 3.7;
- prato valvulado  $V_1$  'cross flow' e 'split flow', definido com a correlação de Nencetti Nardini e Zanelli, Tabela 3.8.

**Tabela 3.5: pratos perfurados**

geometria do prato	cross-flow	split-flow
diâmetro do prato (m)	1.170	1.170
altura do vertedouro (m)	0.040	0.040
largura do vertedouro lateral (m)	0.819	0.666
largura do vertedouro central (m)	-	1.165
altura abertura de carga (m)	0.039	0.039
espaçamento entre os pratos (m)	0.400	0.400
diâmetro dos orifícios (m)	0.005	0.005
passo (equilátero)	0.015	0.015
espessura do prato (m)	0.003	0.003
área ativa (m <sup>2</sup> )	0.608	0.608
eficiência (adim)	1.00	1.00

**Tabela 3.6 pratos com campânula**

geometria do prato	cross flow	split flow
diâmetro do prato (m)	1.170	1.170
altura do vertedouro (m)	0.040	0.040
largura do vertedouro lateral (m)	0.819	0.666
largura do vertedouro central (m)	-	1.165
altura abertura de carga (m)	0.039	0.039
espaçamento entre os pratos (m)	0.400	0.400
número de campânulas	20	20
passo (equilátero)	0,176	0.176
diâmetro da cápsula (m)	0,102	0.102
altura da cápsula (m)	0,067	0.067
diâmetro externo (m)	0,069	0,069
altura (m)	0,057	0.057
espessura da campânula (m)	0,003	0.003
número de aberturas por campânula	20	20
distância da abertura do prato (m)	0,013	0.013
abertura abaixo da cápsula (m)	0,004	0.004
eficiência	1.00	1.00

**Tabela 3.7: Prato valvulado Glitsch**

geometria do prato	cross-flow Glitsch	split flow
diâmetro do prato (m)	1.170	1.170
altura do vertedouro (m)	0.040	0.040
largura do vertedouro central (m)	-	1.165
largura do vertedouro lateral (m)	0.819	0.666
altura abertura de carga (m)	0.039	0.039
espaçamento entre os pratos (m)	0.400	0.400
número de válvulas	52	52
espessura da válvula (m)	0,0015	0,0015
densidade do metal da válvula (Kg/m <sup>3</sup> )	8009	8009
espessura do prato (m)	0,002	0,002
área ativa (m <sup>2</sup> )	0,608	0,608
eficiência	1.00	1.00

**Tabela 3.8: prato valvulado Nencetti**

geometria do prato	cross flow	split flow
diâmetro do prato (m)	1.170	1.170
altura do vertedouro (m)	0.040	0.040
largura do vertedouro lateral (m)	0.819	0.666
largura do vertedouro central (m)	-	1.165
altura da abertura de carga (m)	0.039	0.039
espaçamento entre os pratos (m)	0.400	0.400
número de válvulas	52	52
diâmetro da válvula (m)	0,039	0,039
diâmetro do orifício (m)	0,038	0,038
espessura da válvula (m)	0,0015	0,0015
densidade do metal da válvula Kg/m <sup>3</sup>	8009	8009
espessura do prato (m)	0,002	0,002
área ativa (m <sup>2</sup> )	0,608	0,608
eficiência	1.00	1.00

As Figuras 3.8(a-b) apresentam o confronto entre os 'holdup molar' e a vazão molar de líquido para os quatro pratos 'cross flow'. Não foi possível apresentar em uma única figura a comparação entre as perdas de carga visto que a diferença entre as mesmas tornava o gráfico insignificante do ponto de vista dinâmico. As Figuras 3.8(c-j) mostram o 'holdup' molar e a perda de carga para cada prato separadamente.

Da Figura 3.8a relativa aos 'holdups' observa-se que os pratos perfurados apresentam menor 'holdup', seguido do prato valvulado segundo Nencetti, do prato com campânula e por fim com o maior 'holdup' o valvulado segundo Glitsch. Assente-se que o tempo característico da dinâmica de um prato está estritamente ligado ao valor assumido do 'holdup'. neste sentido a Figura 3.8b relativa a vazão líquida mostra que os quatro pratos simulados apresentam constante de tempo diferente para atingir a nova condição estacionária. Coerentemente com os valores dos 'holdups' obtidos o prato perfurado atinge o regime num menor tempo, vindo depois o valvulado segundo Nencetti, aquele com campânula e por último o valvulado segundo a correlação de Glitsch. A mesma consideração é válida para o 'holdup', onde maiores tempos para se atingir o regime estão em correspondência com mais altos valores de 'holdup'.

O confronto entre a geometria 'cross flow' e 'split flow', Figuras 3.8 (c-j), mostra que todos os pratos 'split flow' apresentam 'holdup' e perda de carga inferior aos correspondentes pratos 'cross flow'. Analogamente a Figura 3.8a, a um 'holdup' menor corresponde um menor tempo de evolução em regime, o que permite concluir que os pratos 'split flow' atingem mais rapidamente a nova condição estacionária. Este resultado pode ser generalizado para todas as situações estudadas (diferentes capacidade material do prato: diferentes diâmetros do prato e vazões molares de líquido e vapor).

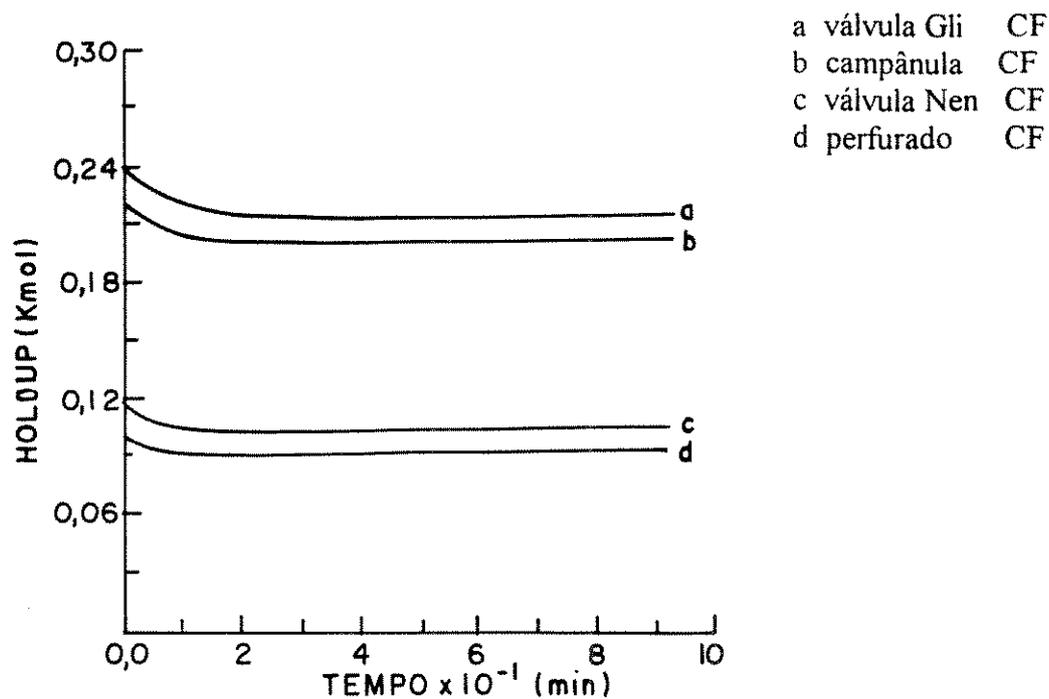


Fig. 3.8a - Holdup molar do líquido x tempo para quatro pratos com 'cross flow' (CF).

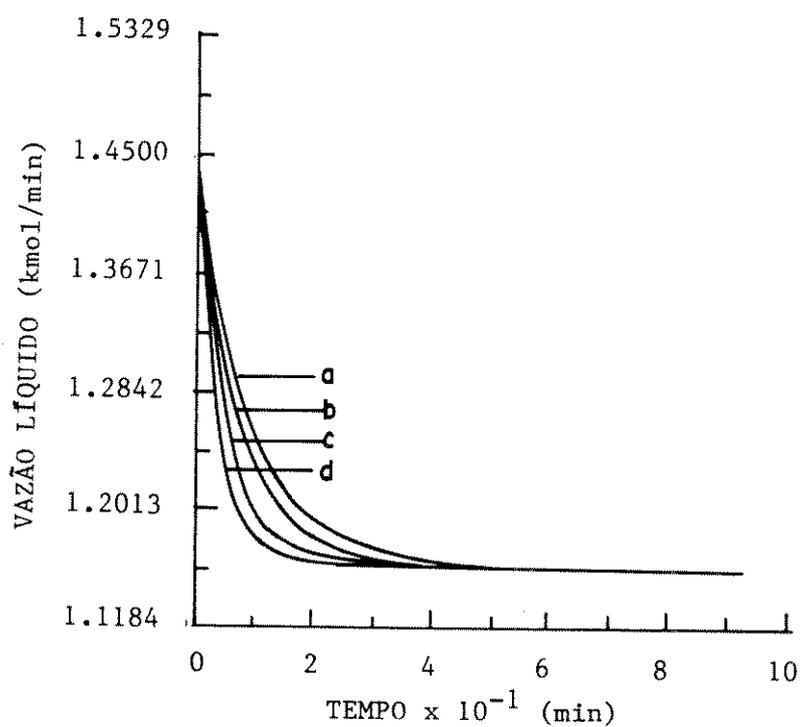


Fig. 3.8b - Vazão líquido x tempo para quatro pratos com cross flow (CF)

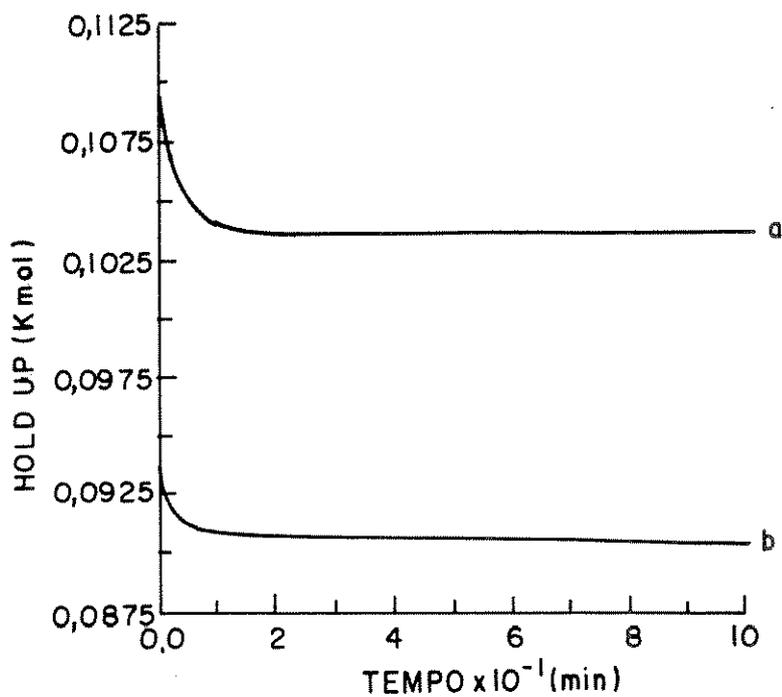


Fig. 3.8c - Holdup molar do líquido x tempo para pratos perfurados 'cross flow e split flow'.

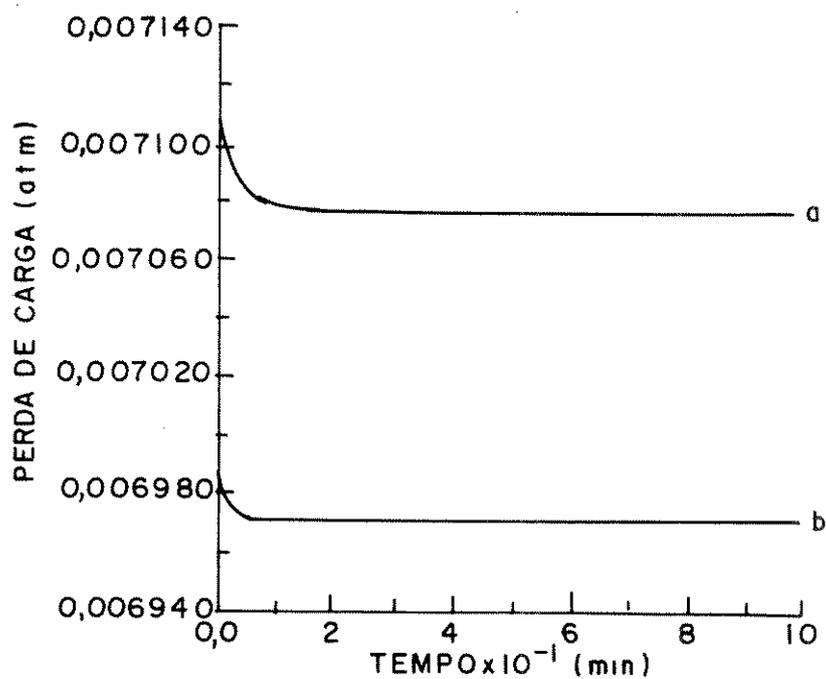


Fig. 3.8d - Perda de carga x tempo para pratos perfurados cross flow e split flow.

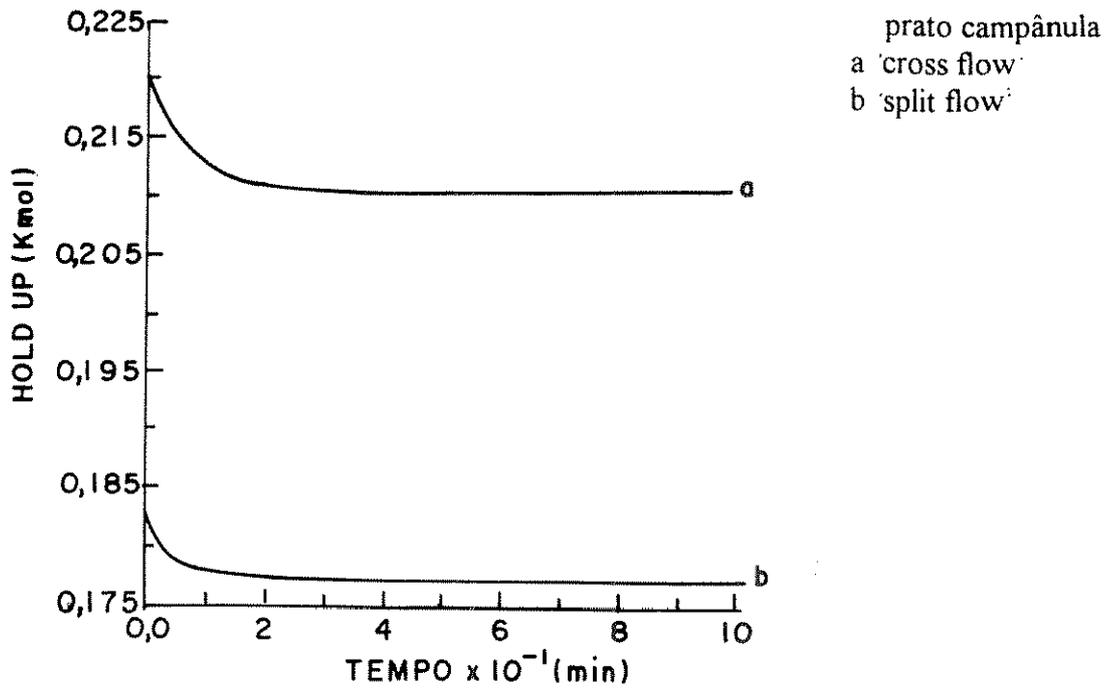


Fig. 3.8e - Holdup molar do líquido x tempo para pratos com campânulas 'cross flow' e 'split flow':

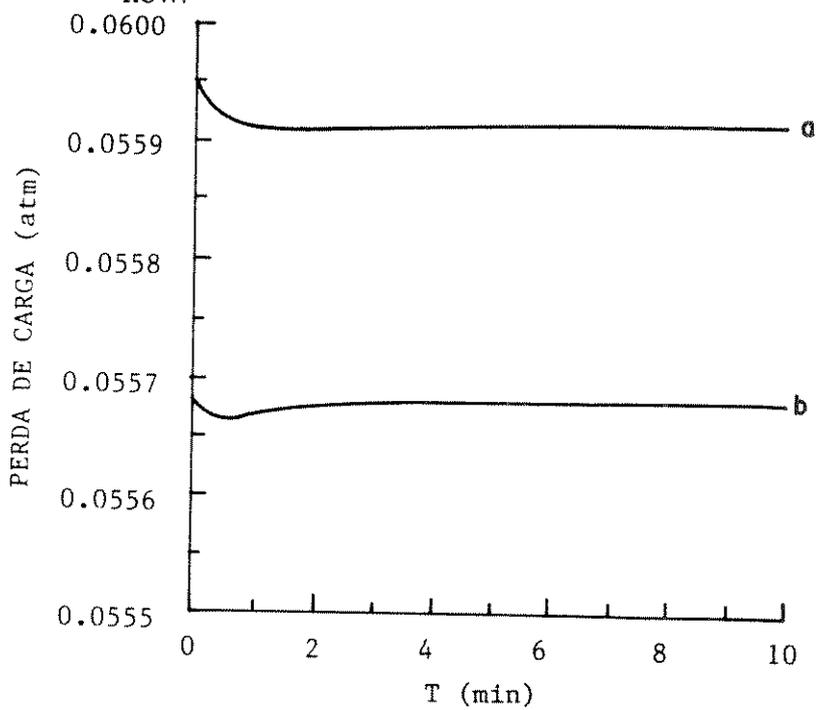


Fig. 3.8f - Perda de carga x tempo para pratos com campânula 'cross flow' e 'split flow':

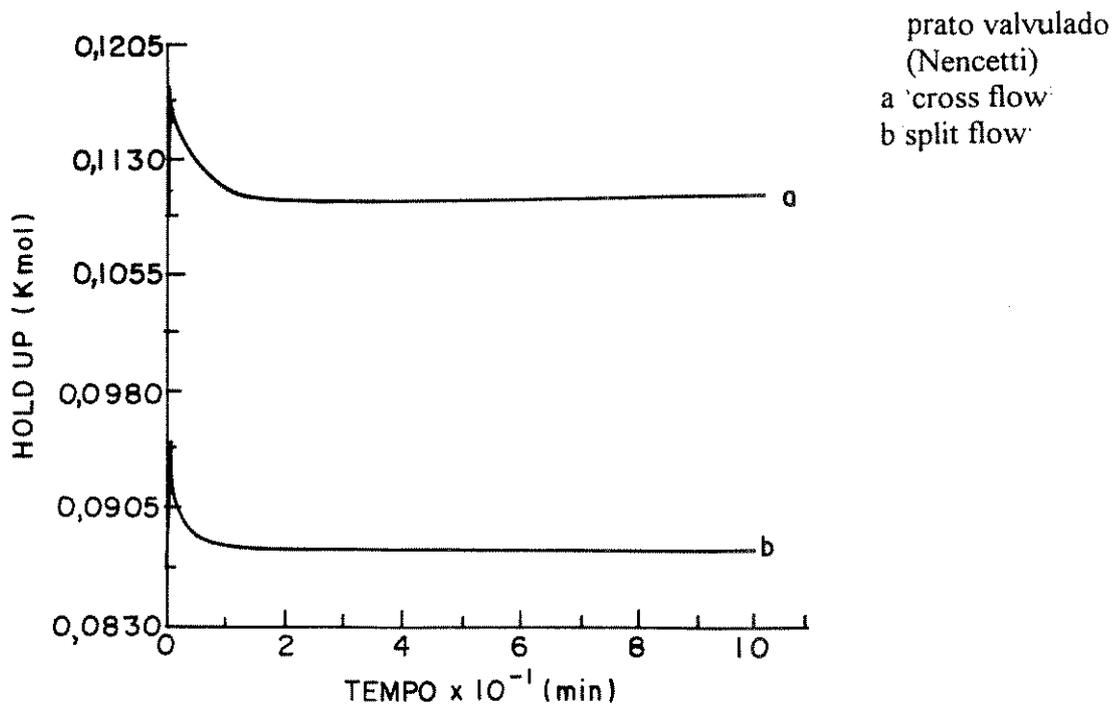


Fig. 3.8g - Holdup molar do líquido x tempo para pratos a válvula (segundo Nencetti) com 'cross flow' e 'split flow'.

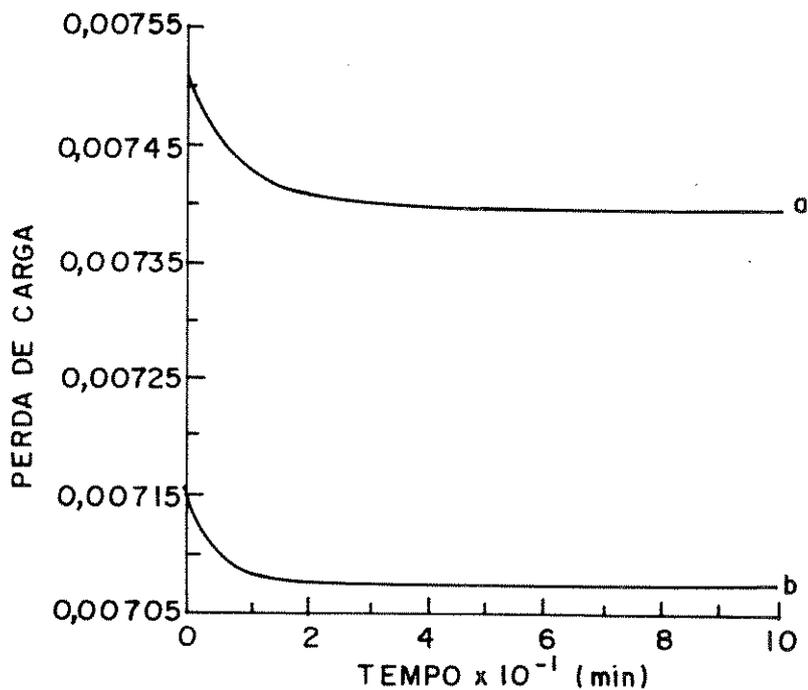


Fig. 3.8h - Perda de carga x tempo para pratos a válvula (segundo Nencetti) com 'cross flow' e 'split flow'.

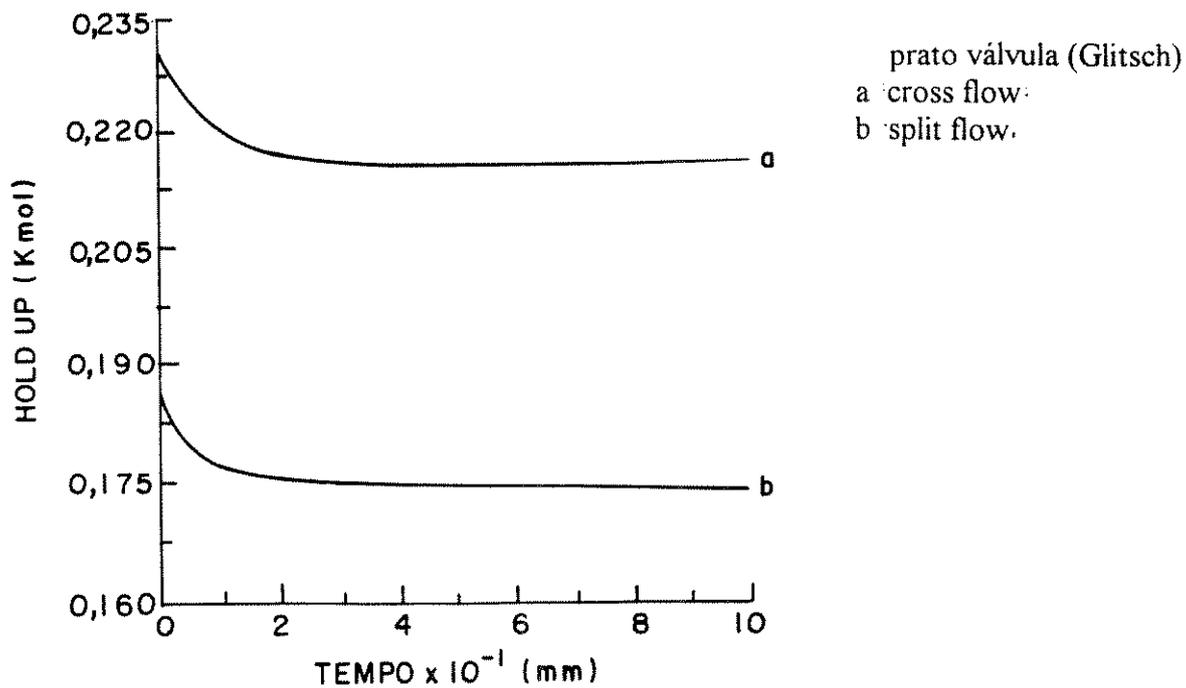


Fig. 3.8i - Holdup fase líquido x tempo para pratos a válvula (segundo Glitsch) com cross flow e split flow:

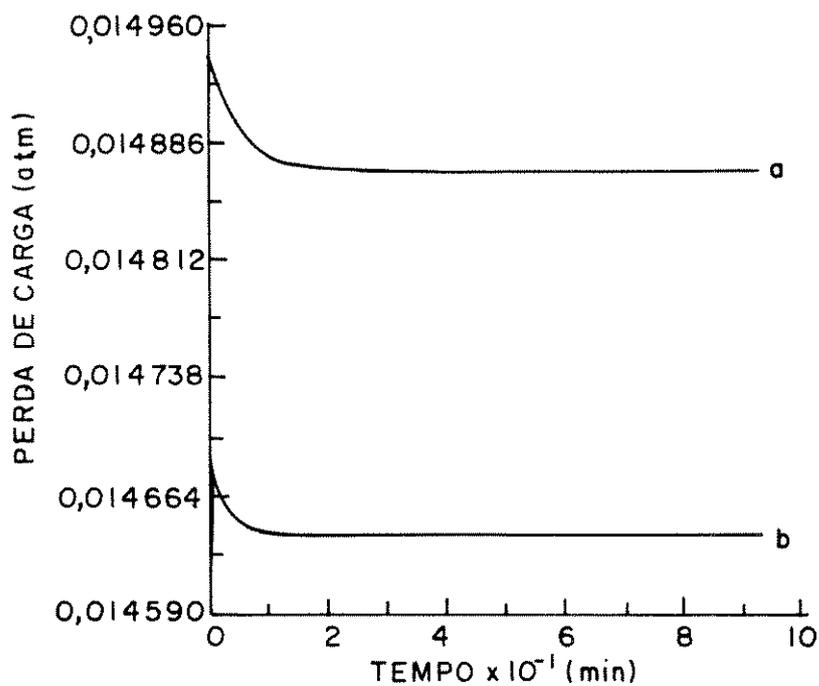


Fig. 3.8j - Perda de carga x tempo para pratos a válvula (segundo Glitsch) com cross flow e split flow:

### 3.7 - Influência da não idealidade do contato líquido-vapor. Consideração do modelo de eficiência de pratos, segundo Murphree.

Objetiva-se neste item discutir e verificar a importância da introdução de um parâmetro de eficiência na descrição do contato líquido-vapor, e a sua influência no comportamento dinâmico de colunas de destilação.

Como descrito no item 2.3, a utilização do modelo de Murphree para eficiência de prato, requer que a equação de equilíbrio líquido-vapor (2.3) seja modificada para:

$$Y_{i,n} = \varepsilon_{i,n} K_{i,n} \frac{M_{i,n}}{\sum_i M_{i,n}} + (1 - \varepsilon_{i,n}) Y_{i,n-1} \quad (2.3')$$

onde  $\varepsilon_{i,n}$  representa a eficiência segundo Murphree (Holland-1966) do componente  $i$  no prato  $n$  referida a fase vapor e definida pela seguinte relação:

$$\varepsilon_{i,n} = \frac{Y_{i,n} - Y_{i,n-1}}{K_{i,n} X_{i,n} - Y_{i,n-1}}$$

que substituída na equação (2.3) fornece (2.3').

O sistema utilizado para exemplificação do comportamento dinâmico da coluna na presença de estágios reais é o sistema metanol-água. Em um primeiro exemplo uma coluna teórica com 18 estágios ideais é comparada dinamicamente com a coluna real com 30 estágios e eficiência 0,6 constante e igual para todos os componentes e estágios da coluna C1 (Tabela 3.2). Para evitar que diferenças no perfil de pressão influenciem a comparação, modifica-se neste caso a correlação fluidodinâmica para o cálculo da perda de carga, de modo que a variação de pressão seja igual e uniformemente distribuída nas duas colunas. A Figura 3.9a mostra a fração molar do metanol no destilado impondo uma perturbação simultânea do tipo rampa: aumento de 5% na vazão e de 3% na fração molar do metanol na corrente de alimentação, em 20 minutos a partir de  $t = 10$  min..

Como era de se esperar a coluna de 30 pratos responde mais lentamente em relação à de 18, visto a sua capacidade ser maior e portanto maior a sua constante de tempo característica.

Na figura 3.9b a coluna com 18 pratos teóricos é comparada com a coluna de 30 pratos reais assumindo dois valores para a eficiência global do prato (0.60 e 0.65). A variação é a mesma do caso anterior. Do caso estudado pode-se evidenciar alguns fatos:

- Com os valores de eficiência iguais a 0.60 para todos os pratos e componentes, é possível obter praticamente igualdade de resposta entre o modelo a prato real e teórico quanto a composição final em regime do fundo da coluna, entre os modelos com prato teórico e prato real. Ao contrário, a composição final do destilado apresenta uma diferença considerável

(Fig. 3.9b). Para obter uma melhor igualdade de resultados do valor final desta variável é necessário tomar-se uma eficiência de 0.65. Esta simulação demonstra a sensibilidade paramétrica do modelo quanto a esta grandeza. Parece evidente que a pureza do destilado é sobre-estimada no caso de colunas com pratos teóricos.

- Conclui-se também que a possível utilização do modelo de eficiência de Murphee, objetivando para efeitos de modelagem dinâmica reduzir uma coluna a prato real para pratos teóricos, não implica necessariamente em igualdade das respostas (em termos de constante de tempo e dinâmica qualitativa) dos perfis em regime transiente.

Das considerações precedentes pode-se concluir que, visto a ambiguidade e a dificuldade de reduzir-se a coluna com pratos reais a uma coluna com pratos teóricos através do conceito de eficiência de colunas e visto a sensibilidade do comportamento dinâmico a variações dos valores de eficiência, recomenda-se a utilização do modelo a estágios reais para a simulação dinâmica das colunas de destilação. O claro limite que deverá ser superado neste modelo é quanto a valores constantes de eficiência que por sua vez sabe-se estar intrinsecamente correlacionada com a fluidodinâmica do sistema e portanto com a sua variação no tempo.

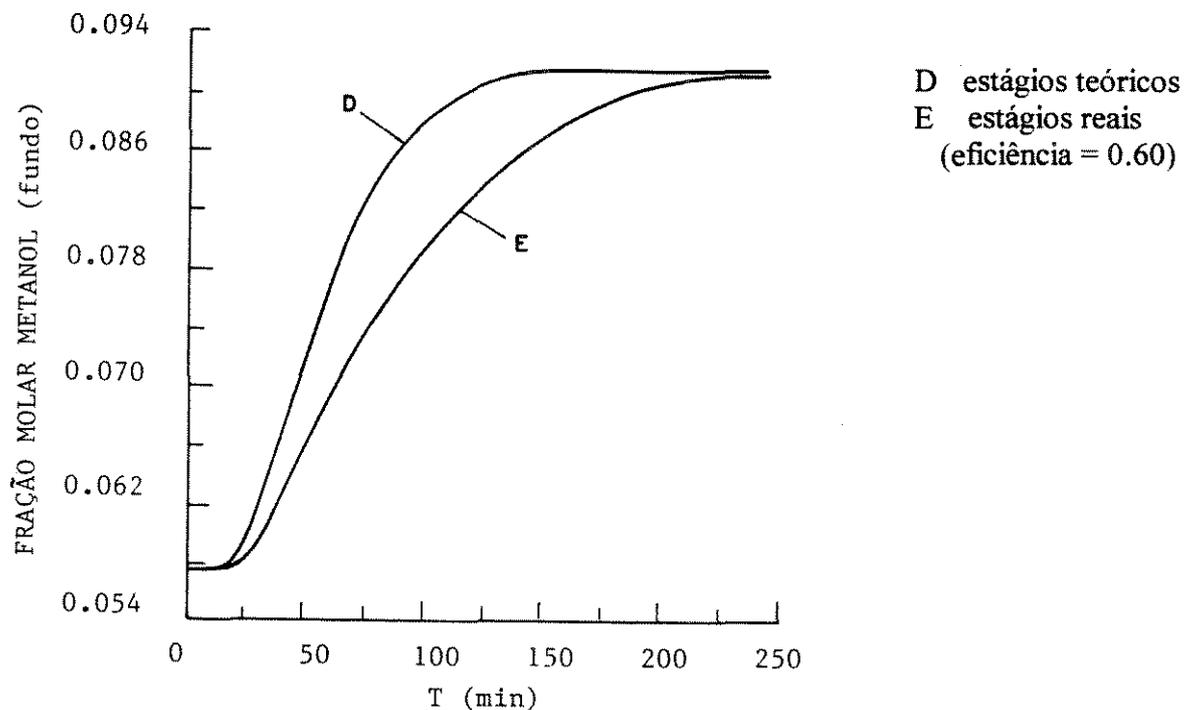


Fig. 3.9a - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para estágios teóricos e reais.

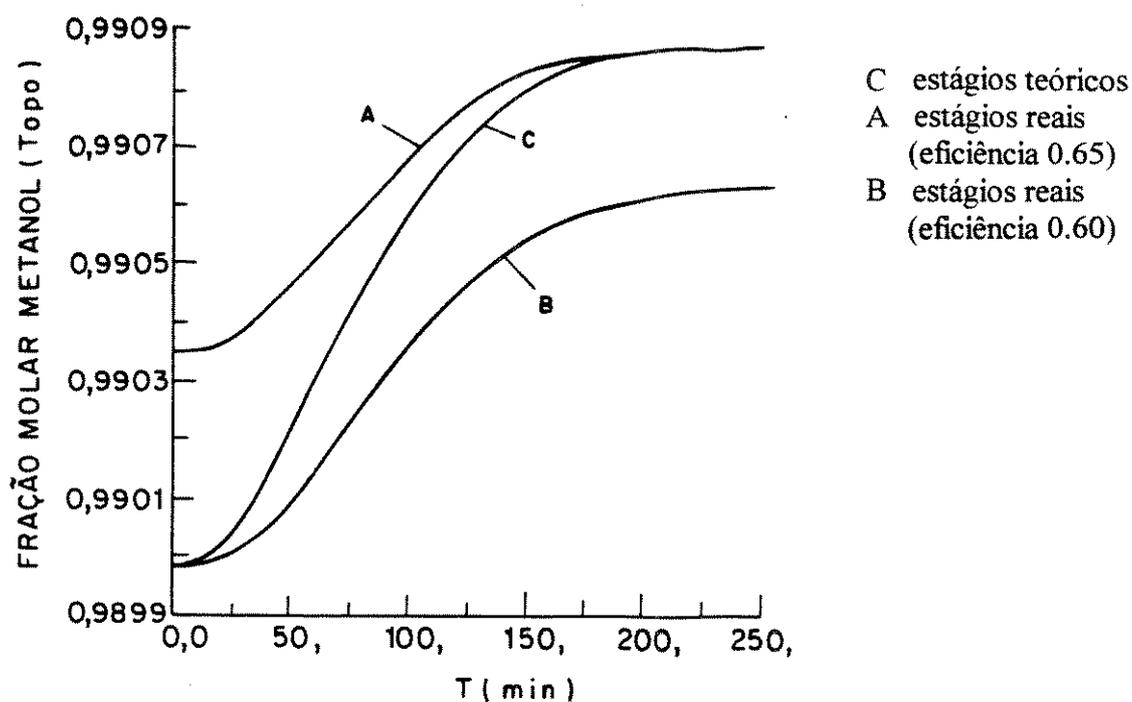


Fig. 3.9b - Fração molar do metanol no destilado x tempo para estágios teóricos e reais.

### 3.8 - Análise do comportamento dinâmico em malha aberta

O comportamento dinâmico de colunas de destilação, com concentração de impureza no produto de topo variando de  $10^3$  a  $10^6$  ppm, é estudado via simulação digital do modelo A definido no Capítulo 2.

As respostas dinâmicas do sistema em malha aberta são exploradas e analisadas para diferentes situações:

- variações no grau de pureza do produto.
- variações em diferentes variáveis do processo,
- variações nas volatilidades relativas (efeitos da volatilidade relativa) e
- variações de intensidade e sentido da perturbação (linearidade do sistema)

A análise quanto ao grau de pureza do produto é efetuada para as duas colunas C1 e C2, especificadas na Tabela 3.2. Todas as análises restantes serão efetuadas para a coluna C1. A escolha da coluna C1 é devido apenas ao menor tempo de cálculo exigido (Tabela 3.3), procurando assim racionalizar o trabalho de análise.

A análise quanto à variável perturbada objetiva verificar a capacidade preditiva do modelo para variações em diferentes variáveis do processo:

- Temperatura do fluido refrigerante,
- Vazão molar de alimentação,
- Composição molar da alimentação,
- Taxa de calor cedido ao refeedor e
- Vazão de refluxo.

A análise quanto a variações de diferentes intensidades e sentidos, objetiva verificar a provável não linearidade do sistema como também a velocidade de resposta do sistema para reduções na intensidade das variações. Como já citado no capítulo anterior, as variações quando não especificadas, são consideradas do tipo linear (rampa) entre 10 e 30 minutos, impondo inteira variação em 20 minutos. O motivo da variação iniciar no tempo de 10 minutos é segurar inicialmente a simulação dinâmica, por dez minutos, nas condições do regime estacionário, não ocorrendo nenhuma variação real nestes dez minutos, esta é uma boa norma (como já citado anteriormente) para verificar se os resultados da simulação estática e dinâmica são coerentes.

A análise quanto aos efeitos da volatilidade relativa permite caracterizar a diferença no comportamento dinâmico de diferentes sistemas (com diferentes volatilidade,  $\alpha=2$  e  $\alpha=4$ ), em função por exemplo da pureza do produto, da velocidade e linearidade da resposta.

De uma forma geral as respostas dinâmicas que serão apresentadas nas análises a seguir, fornecem-nos uma melhor compreensão e um discernimento dos problemas esperados no controle de colunas de alta pureza.

### 3.8.1 - Análise quanto a variável perturbada

#### - Entalpia de alimentação

Analisa-se os efeitos de uma diminuição na entalpia de alimentação, correspondendo a uma redução de cerca de 30 °C. Na realidade trata-se de um afastamento da alimentação (líquido saturado) de sua temperatura de ebulição, ou seja um subresfriamento de 30 °C.

Tal variação coerentemente com o fato da coluna estar mais fria (Fig. 3.2(a-b)), comportará um aumento da pureza de topo (Fig. 3.5a) e um aumento da perda do componente mais volátil no fundo da coluna (Fig. 3.10).

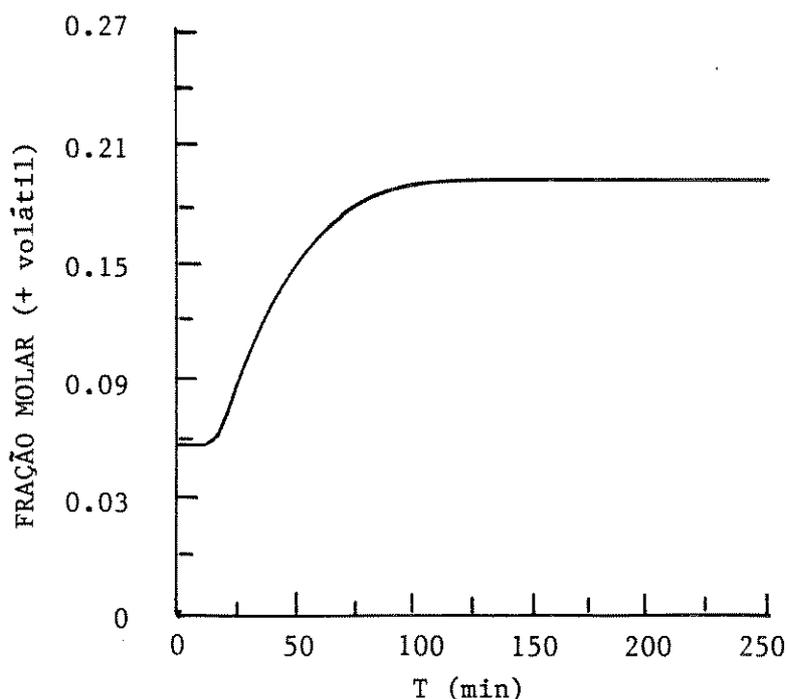


Fig. 3.10 - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de - 10% na entalpia de alimentação.

#### - Vazão de alimentação

A vazão de alimentação é aumentada de 30% e estuda-se a resposta da pressão e temperatura do refeedor e condensador.

Aumentando-se a vazão de alimentação ocorre uma diminuição da pureza de topo (Fig. 3.4b), e como era de se esperar ocorre um aumento da temperatura do condensador (Fig. 3.1h). O efeito do aumento de temperatura sobrepuja o efeito da redução de pureza no topo e a pressão no condensador aumenta, conforme mostra a Figura 3.11a.

No refeedor, ao contrário do condensador, o aumento da fração molar do mais volátil (Fig. 3.4a) supera o efeito do aumento de pressão (Fig. 3.11b) no fundo e aumento de temperatura na secção de enriquecimento da coluna (Fig. 3.1e). Consequentemente, a temperatura do refeedor e da secção de fundo da coluna diminui, conforme pode ser visto respectivamente nas Fig. 3.1a e Fig. 3.1b.

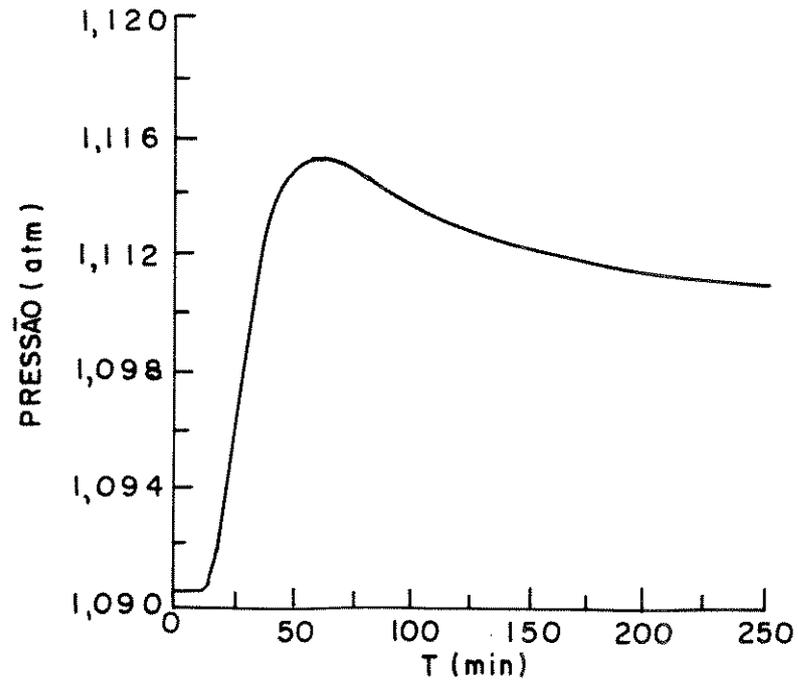


Fig. 3.11a - Pressão no condensador x tempo para uma variação de + 15% na vazão de alimentação.

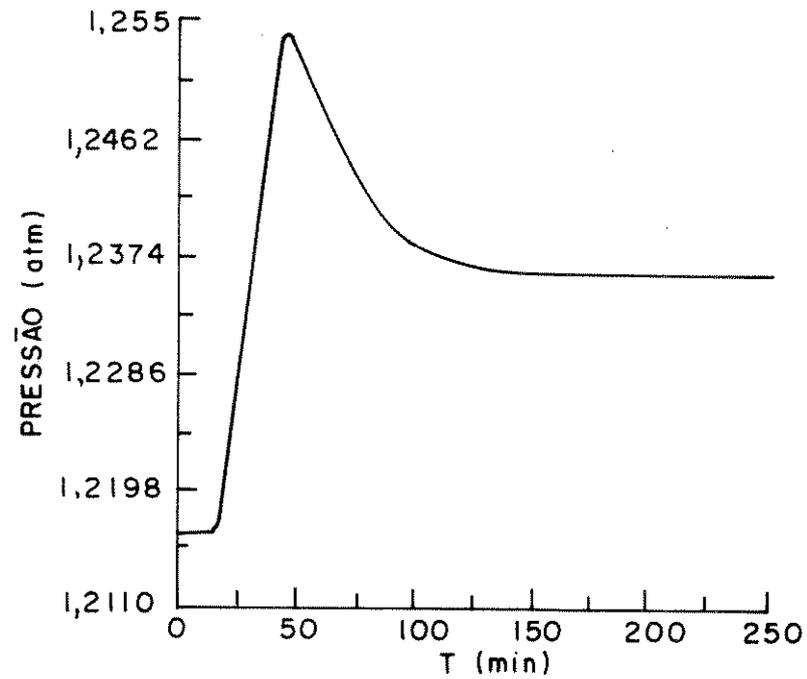


Fig. 3.11b - Pressão no refrervedor x tempo para uma variação de + 15% na vazão de alimentação.

### - Calor fornecido ao refeedor

A situação analisada é um aumento de 10% na taxa de calor fornecida ao refeedor.

O aumento da taxa de calor cedido ao refeedor provoca inicialmente um aumento da vazão de vapor que deixa o refeedor (Fig. 3.12a), a composição do mesmo fica mais pesada, aumentando assim a temperatura (Fig. 3.12b). O aumento da temperatura provoca uma diminuição na taxa de calor recebida pelo líquido no refeedor, gerando assim uma redução no vapor gerado para a secção de esgotamento da coluna (Fig. 3.12a). O vapor mais pesado alcançando o topo da coluna provoca um aumento na temperatura de condensação (Fig. 3.12c) implicando em uma redução na pureza do produto de topo (Fig. 3.12d).

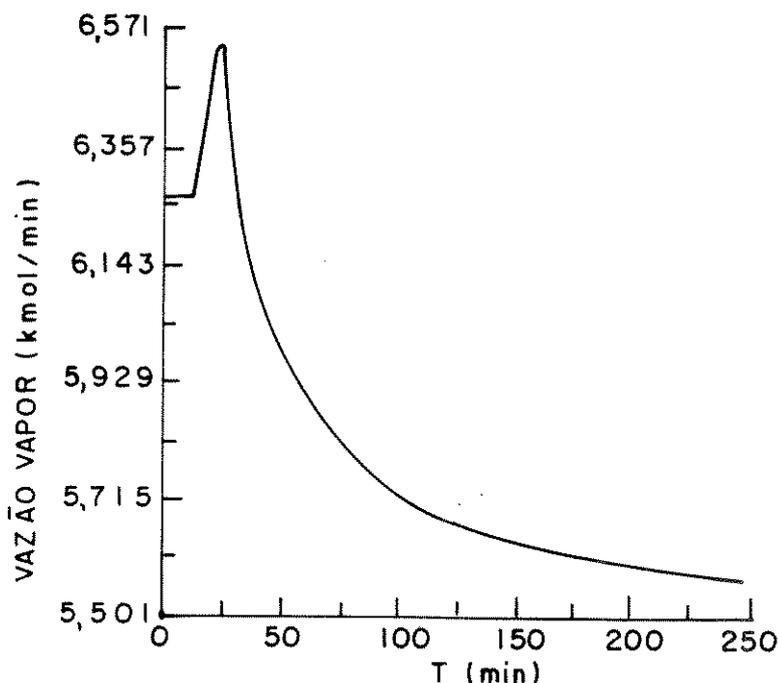


Fig. 3.12a - Vazão molar de vapor no refeedor x tempo para uma variação de + 10% na taxa de calor cedida ao refeedor.

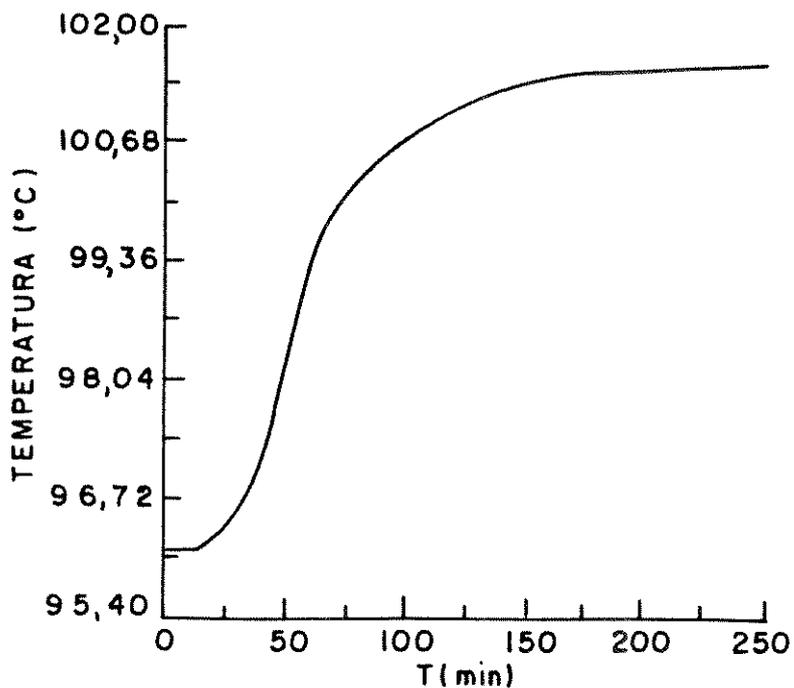


Fig. 3.12b - Temperatura no refeedor x tempo para uma variação de + 10% na taxa de calor cedida ao refeedor.

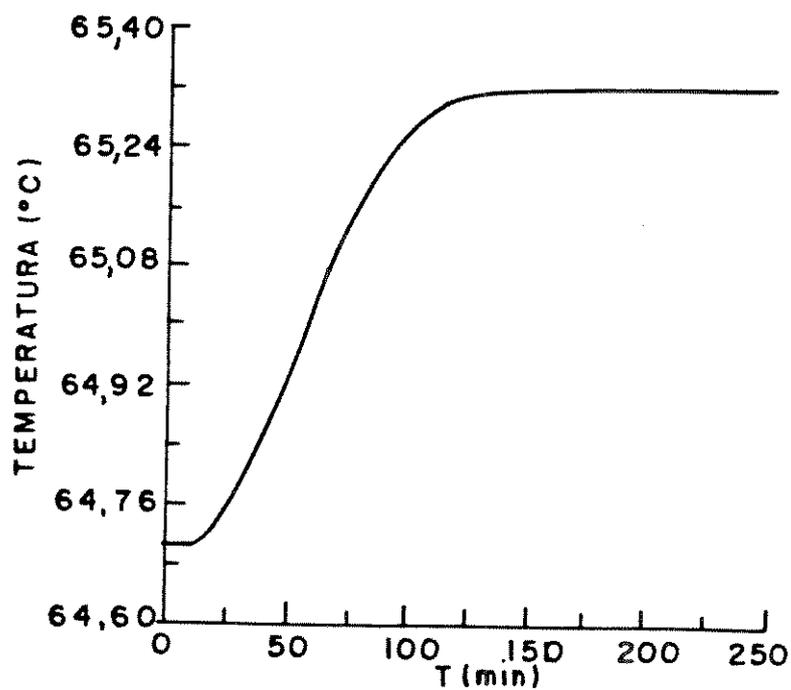


Fig. 3.12c - Temperatura no condensador x tempo para uma variação de + 10% na taxa de calor cedida ao refeedor.

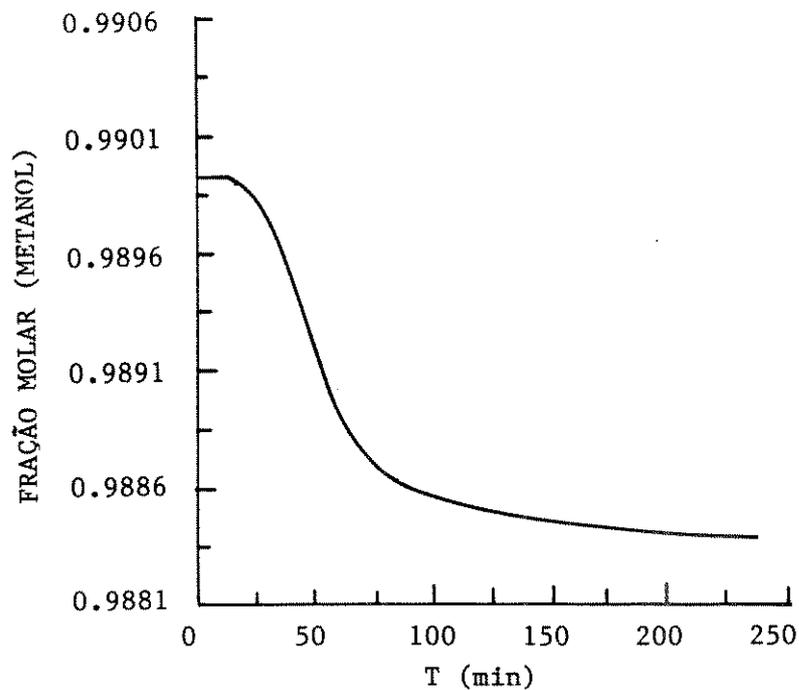


Fig. 3.12d - Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de +10% na taxa de calor cedida ao refeedor.

Fig. 3.12d - Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de +10% na taxa de calor cedida ao refeedor.

**- Vazão de refluxo no topo da coluna.**

A variação é um aumento de 10% na vazão de refluxo de topo que retorna a coluna.

Aumentando a vazão de refluxo, a coluna fica mais fria, ocorrendo uma diminuição da temperatura (Fig. 3.13a). O aumento do grau de pureza no condensador é acompanhado também de um aumento de pureza nos pratos da coluna (Fig. 3.13b), pois esses passam a receber uma maior quantidade de líquido de composição leve proveniente do condensador.

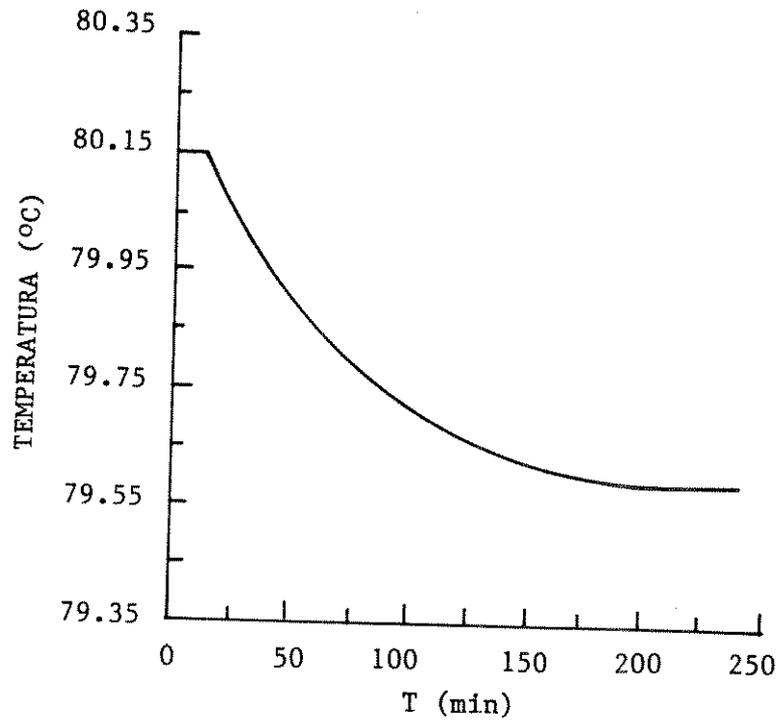


Fig. 3.13a - Temperatura do prato nº 5 x tempo para uma variação de + 10% na vazão de refluxo de topo.

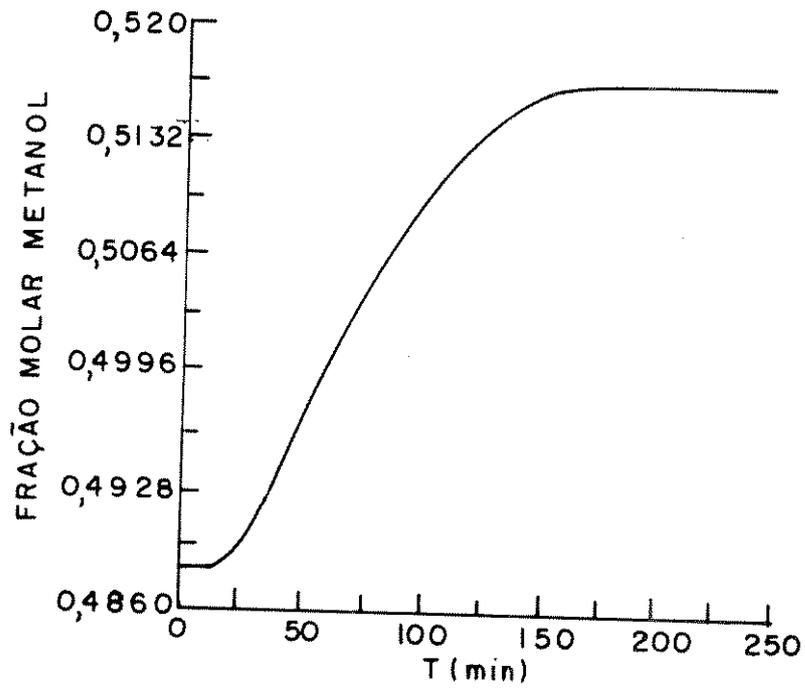


Fig. 3.13b - Fração molar do metanol no prato nº 5 x tempo para uma variação de + 10% na vazão de refluxo de topo.

### - Composição da alimentação

A variável do processo em estudo é a composição da alimentação. Uma variação bastante comum em colunas industriais é o empobrecimento da corrente de alimentação quanto ao componente mais volátil.

Para o sistema metanol-água estudou-se uma redução de 7,5% na composição do metanol na corrente de alimentação da coluna.

A alimentação se tornando mais pesada gera um acréscimo em sua temperatura de bolha aumentando a temperatura do prato de alimentação. A coluna recebendo uma maior quantidade de líquido pesado no prato da alimentação apresenta um aumento de temperatura nas duas secções (Fig. 3.14a e Fig. 3.14b) e conseqüente redução do grau de pureza (Fig. 3.14c e Fig. 3.14d). Dessas figuras, observa-se que variações na composição da alimentação são sentidas mais rapidamente na secção de fundo da coluna.

Com a coluna mais pesada a pressão do condensador diminui (Fig. 3.14e). A influência da mudança de composição (Fig. 3.14f) é maior do que a influência da redução de pressão e a temperatura no condensador aumenta (Fig. 3.14g).

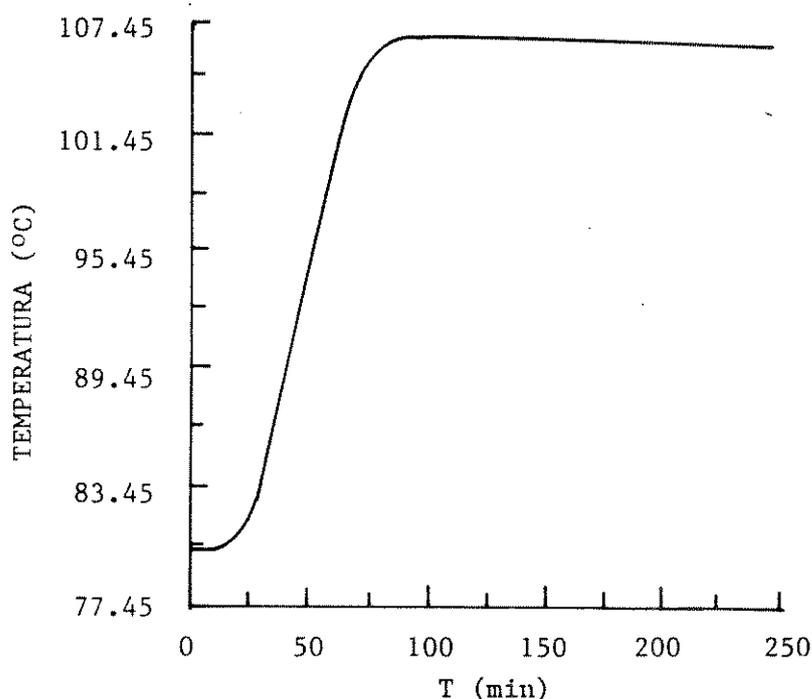


Fig. 3.14a - Temperatura no prato nº 5 x tempo para uma variação de - 7,5% na composição do metanol da alimentação.

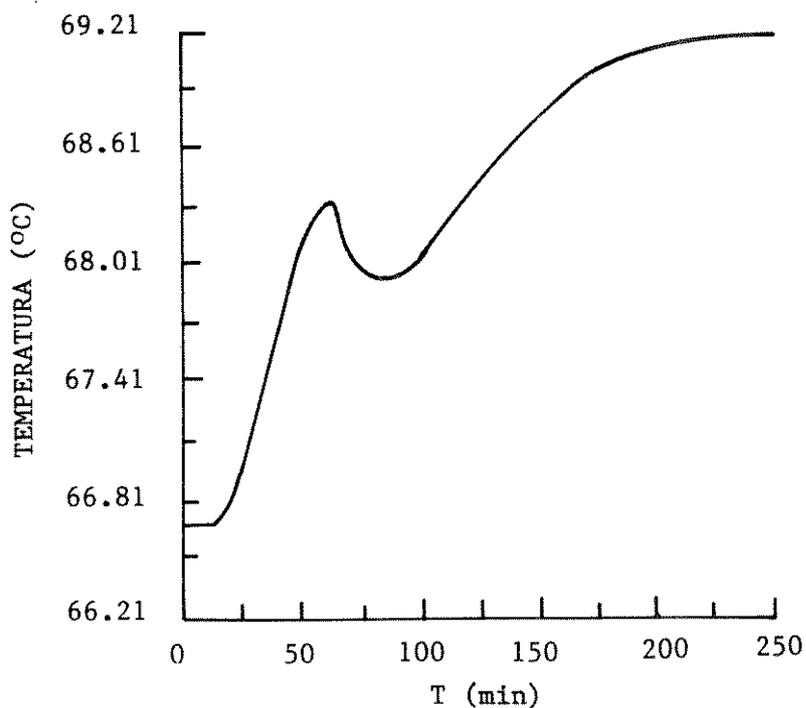


Fig. 3.14b - Temperatura no prato nº 28 x tempo para uma variação de - 7,5% na composição do metanol da alimentação.

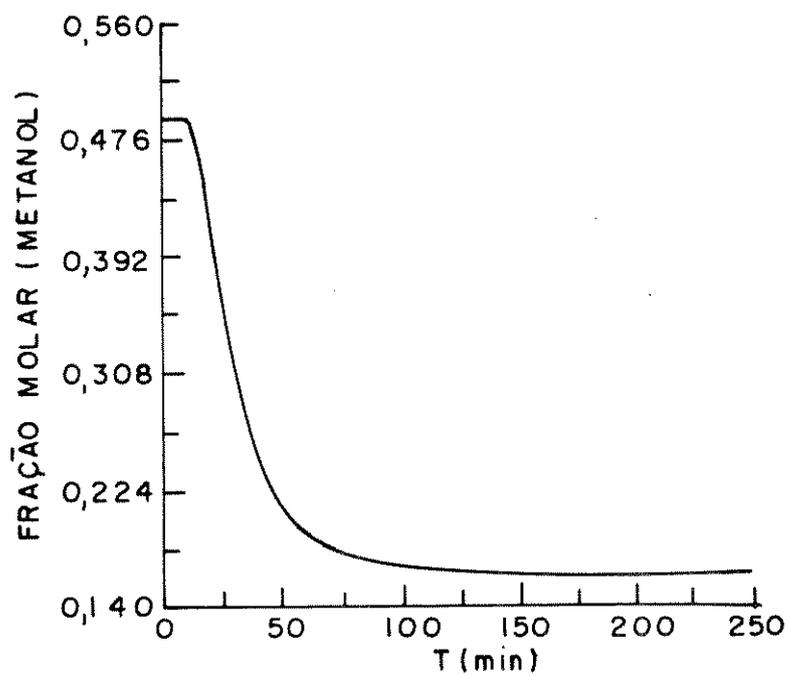


Fig. 3.14c - Fração molar do metanol no prato nº 5 x tempo para uma variação de - 7,5% na composição do metanol da alimentação.

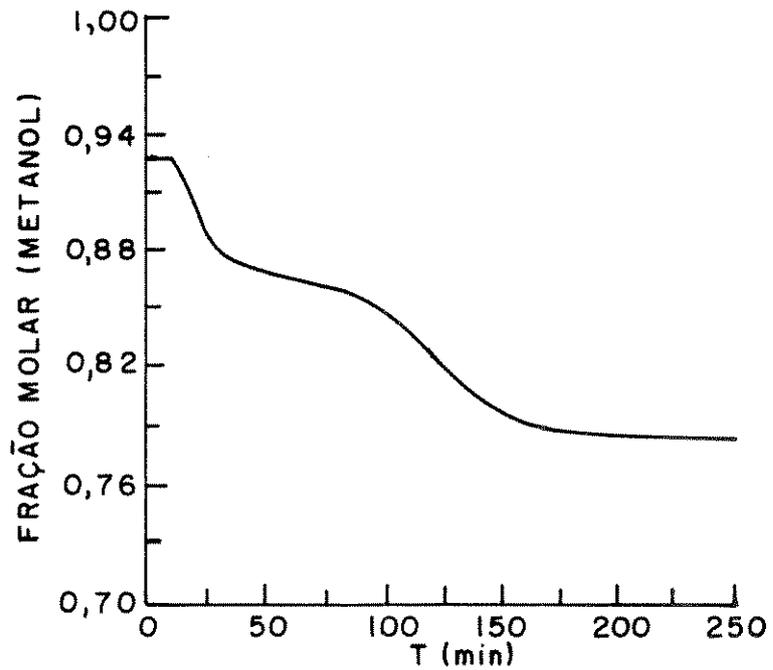


Fig. 3.14d - Fração molar do metanol no prato nº 28 x tempo para uma variação de - 7,5% na composição do metanol da alimentação.

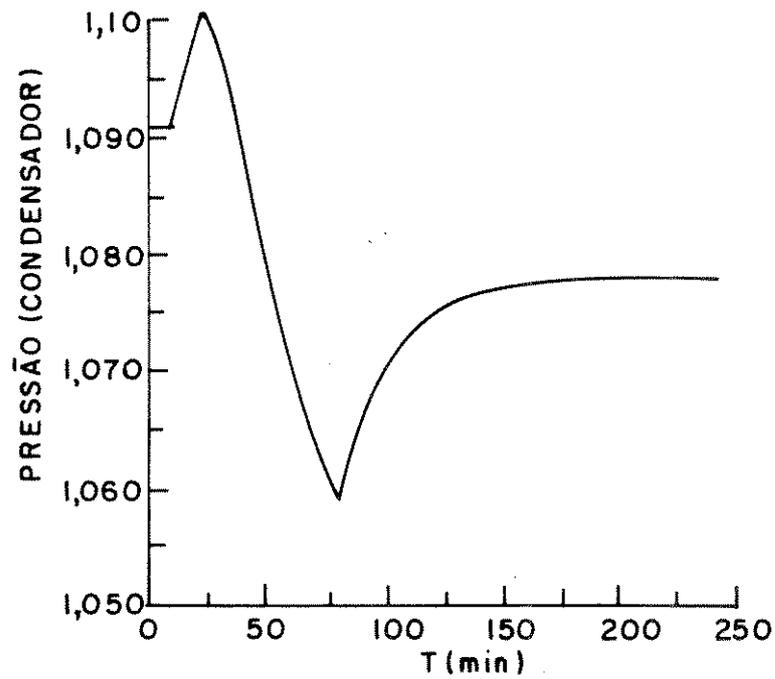


Fig. 3.14e - Pressão no condensador x tempo para uma variação de - 7,5% na composição do metanol da alimentação.

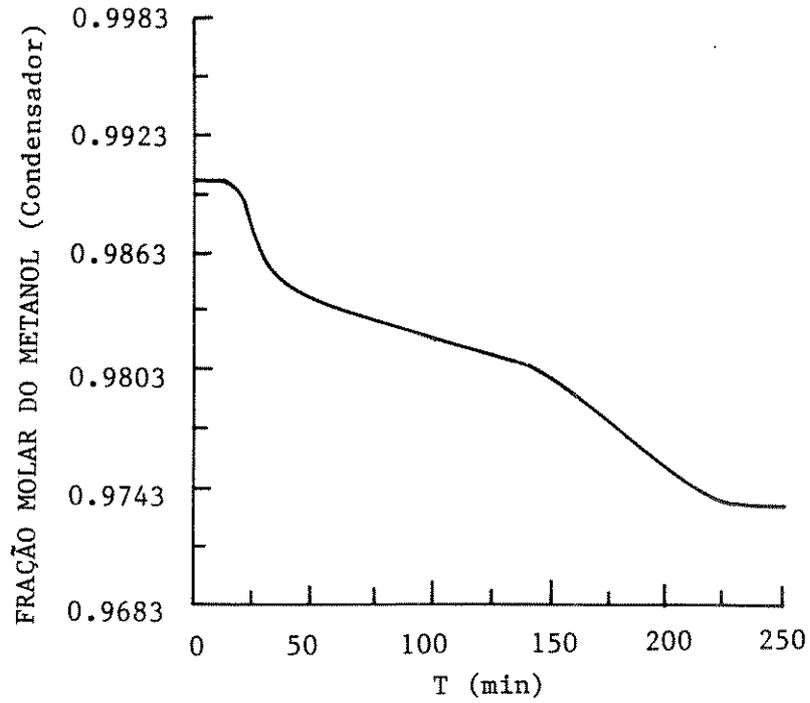


Fig. 3.14f - Fração molar do metanol no condensador x tempo para uma variação de - 7,5% na composição do metanol da alimentação.

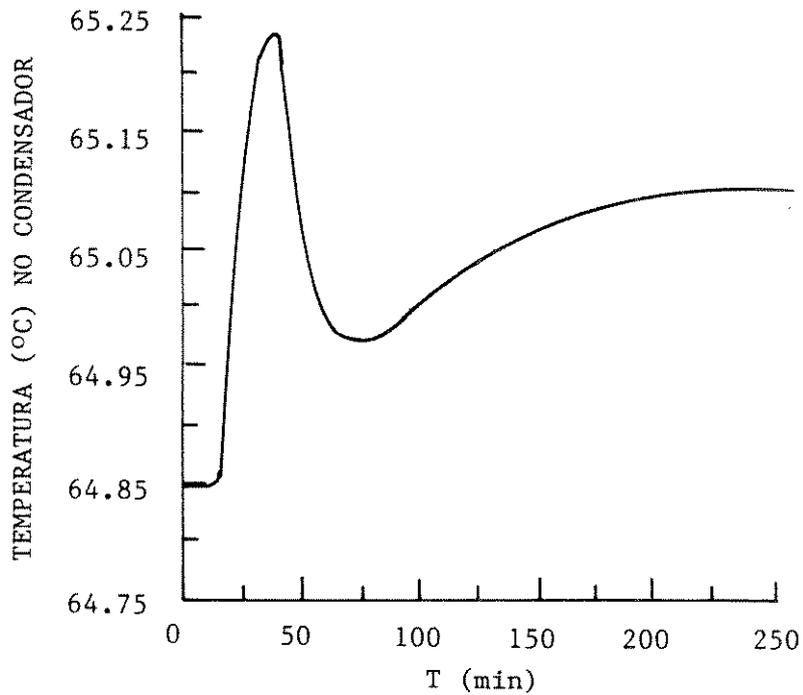


Fig. 3.14g - Temperatura no condensador x tempo para uma variação de - 7,5% na composição do metanol da alimentação.

### - Temperatura da água de refrigeração

A variação analisada é um aumento de 5% na temperatura da água de refrigeração.

O aumento na temperatura da água de refrigeração diminui a taxa de condensação. A diminuição da taxa de condensação provoca um aumento da temperatura do condensador (Fig. 3.15a) e conseqüente redução do grau de pureza do destilado (Fig. 3.15b) e vazão de refluxo da coluna (Fig. 3.15c).

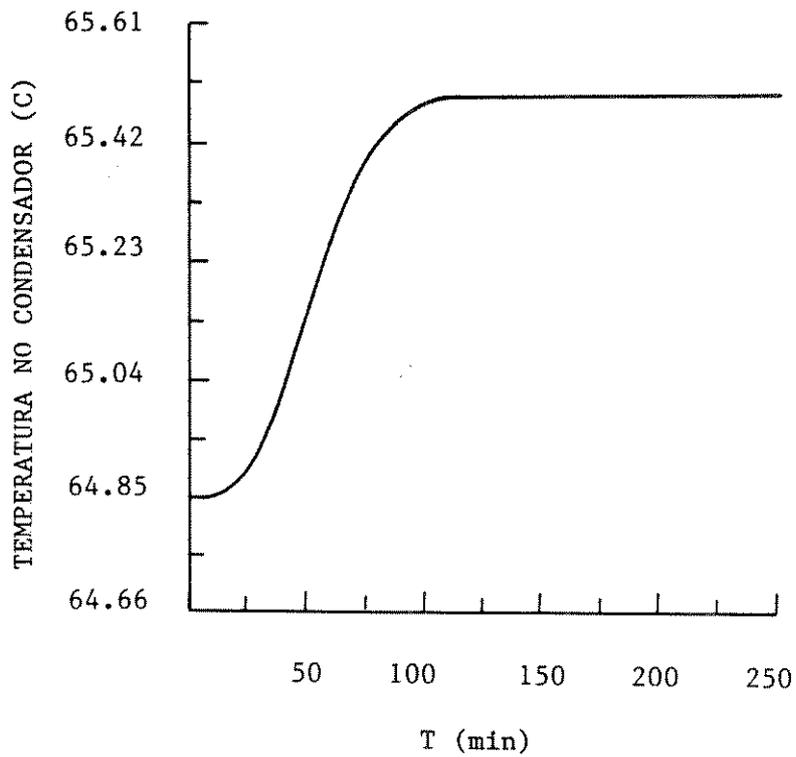


Fig. 3.15a - Temperatura no condensador x tempo para uma variação de +5% na temperatura da água de refrigeração.

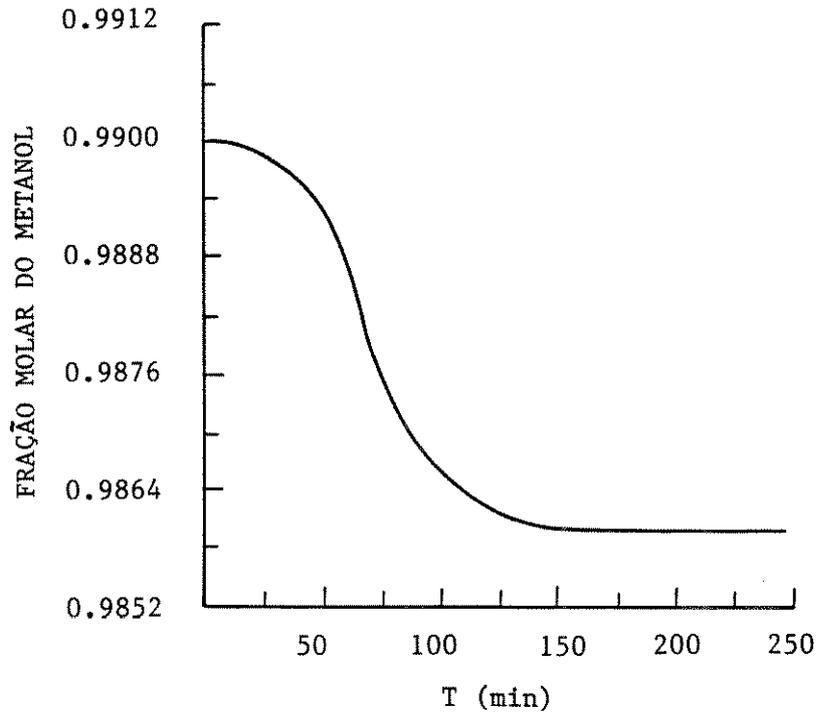


Fig. 3.15b - Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de +5% na temperatura da água de refrigeração.

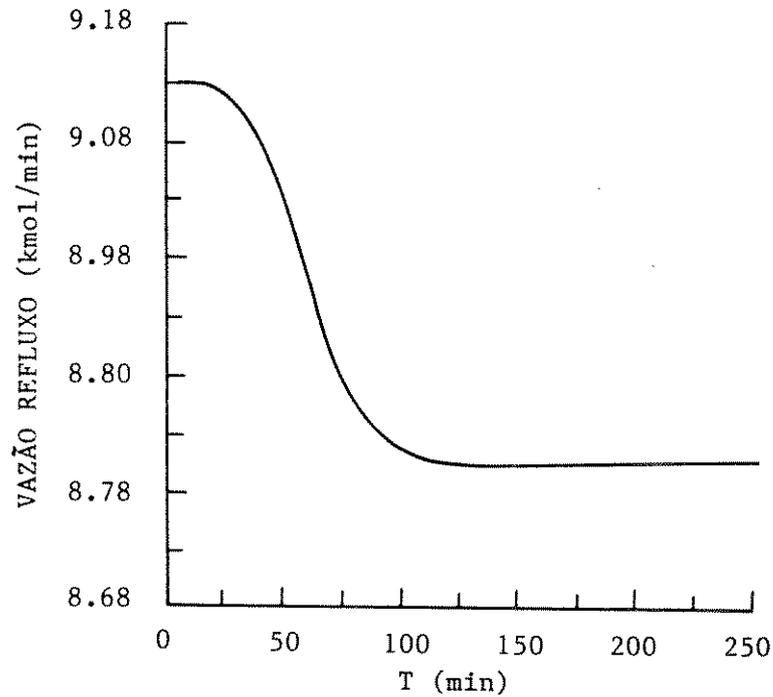


Fig. 3.15c - Vazão de refluxo no topo da coluna x tempo para uma variação de +5% na temperatura da água de refrigeração.

### 3.8.2 - Efeitos do grau de pureza e volatilidade relativa.

Simplificações no modelo termodinâmico foram efetuadas neste item objetivando estudar o efeito do grau de pureza do destilado e da volatilidade relativa no comportamento dinâmico da coluna.

Essa análise é efetuada para as duas colunas C1 e C2, respectivamente com concentração de 10.000 ppm e 1.000 ppm de impureza no destilado e estudada para dois valores de volatilidade relativa ( $\alpha = 2$  e  $\alpha = 4$ ).

As Figuras 3.16a e 3.16b apresentam a variação na composição do destilado das colunas C1 e C2 para uma redução de 5% na taxa de calor fornecida ao refeedor.

A resposta da coluna C2 para um aumento de 5% na taxa de calor do refeedor é registrado na Figura 3.16c.

As Figuras 3.16d apresentam o comportamento da fração molar do mais volátil no produto de fundo da coluna C1 para uma redução de 5% na taxa de calor fornecida ao refeedor. A Figura 3.16e mostra o transiente da fração molar do + volátil no fundo da coluna C2, para um aumento de 5% na vazão de refluxo que retorna a coluna (variação no balanço material da coluna).

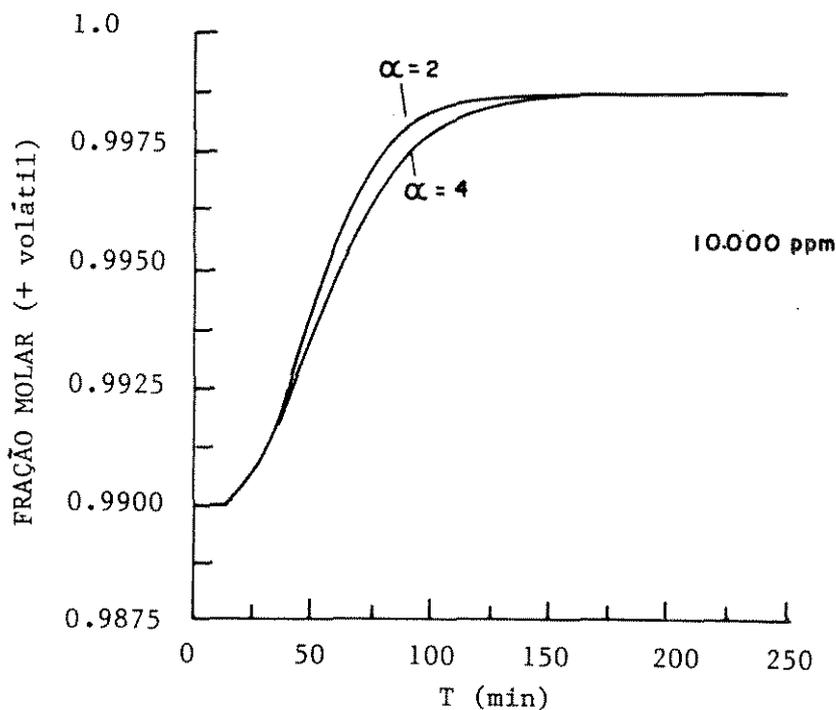


Fig. 3.16a - Fração molar do + volátil no destilado x tempo para uma variação de -5% na taxa de calor cedida ao refeedor da coluna com grau de impureza no topo = 10.000 ppm.

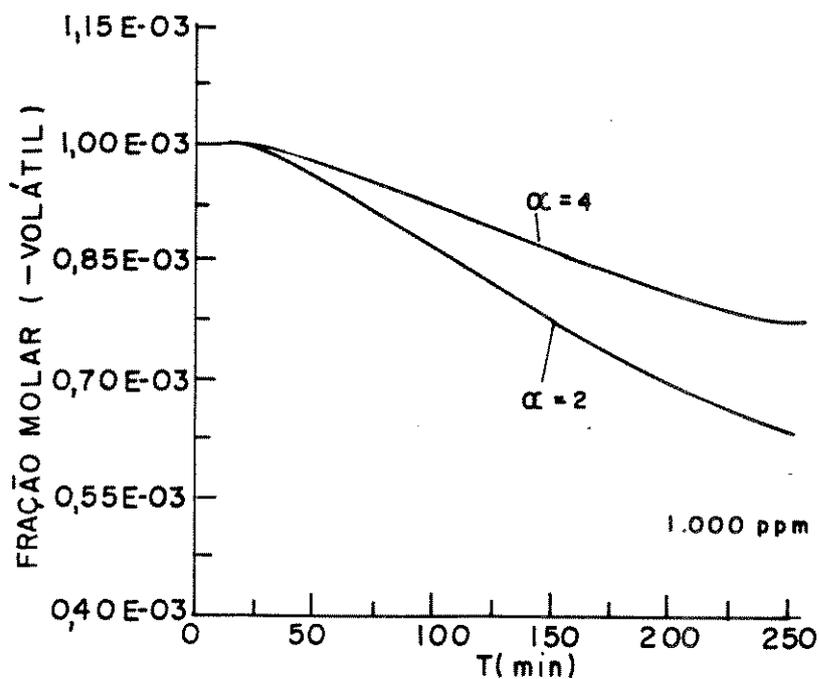


Fig. 3.16b - Fração molar do - volátil no destilado x tempo para uma variação de -5% na taxa de calor cedida ao refeedor da coluna com grau de impureza no topo = 1.000 ppm.

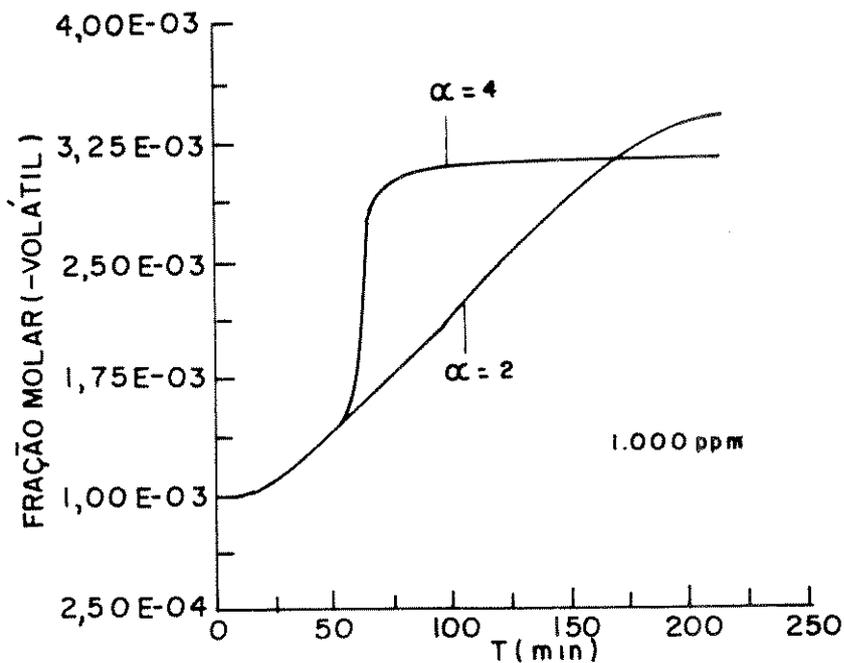


Fig. 3.16c - Fração molar do - volátil no destilado x tempo para uma variação de +5% na taxa de calor cedida ao refeedor da coluna com grau de impureza no topo = 1.000 ppm.

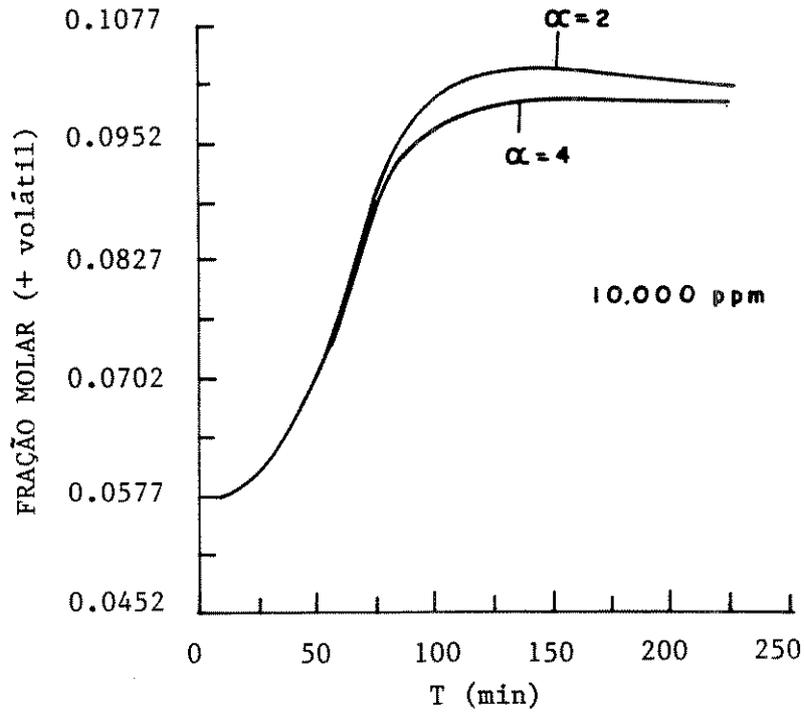


Fig. 3.16d - Fração molar do + volátil no produto de fundo x tempo para uma variação de -5% na taxa de calor cedida ao refeedor da coluna com grau de impureza no topo = 10.000 ppm.

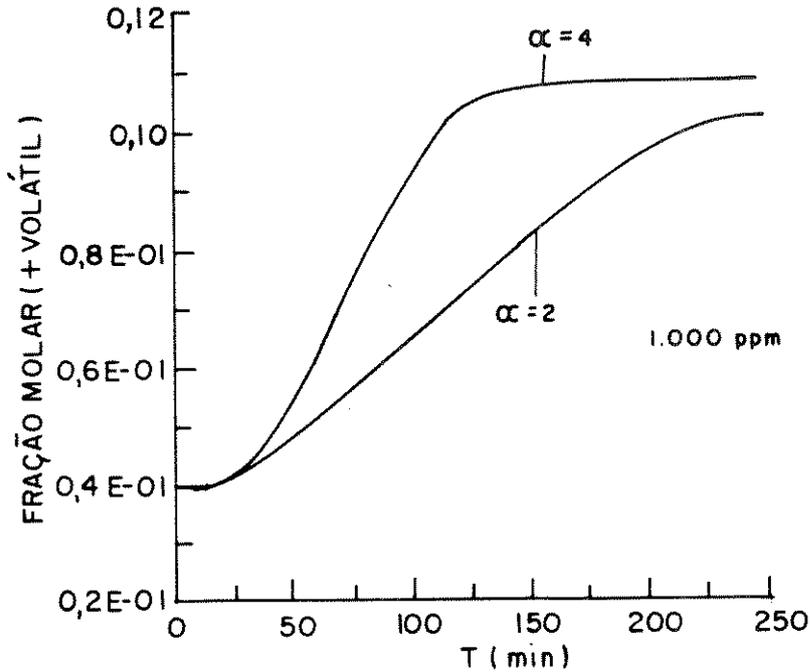


Fig. 3.16e - Fração molar do + volátil no produto de fundo x tempo para uma variação de +5% na vazão de refluxo (topo) da coluna com grau de impureza no topo = 1.000 ppm.

Dessas respostas em malha aberta pode-se concluir:

- respostas extremamente lentas da coluna são previstas a medida que se aumenta o grau de pureza do produto.
- há pequena diferença no comportamento dinâmico de sistemas com diferentes volatilidades relativas ( $\alpha = 2$  e  $\alpha = 4$ ) quando o nível de pureza do destilado (10.000ppm) é moderado (Figuras 3.16a e 3.16d).
- quando a pureza é aumentada (coluna C2) as respostas dinâmicas apresentam acentuadas diferenças para diferentes volatilidades relativas (Figuras 3.16b, 3.16c e 3.16e).
- para sistemas com volatilidade relativa alta a resposta em muitos casos é mais rápida e altamente não linear (Fig. 3.16c e 3.16e).
- a resposta dinâmica mais rápida para volatilidade relativa maiores requer um sistema de controle também rápido para evitar assim grandes variações na pureza do produto.

### 3.8.3 - Análise da linearidade do sistema

Estudou-se a resposta da destilação (coluna-C1), com grau de impureza no destilado na faixa de 1%, para perturbações com diferentes intensidade e direção. Buscou-se uma análise do grau de linearidade do sistema.

A Figura 3.17a apresenta o transiente da fração molar do componente mais volátil no produto de fundo da coluna, para variações, de diferentes intensidades e direções ( $\pm 3\%$ ,  $\pm 6\%$ ), na composição molar da alimentação. Para as mesmas variações anteriores, a Figura 3.17b apresenta o transiente da pressão para o prato número 28 da coluna e a Figura 3.17c mostra o comportamento da temperatura no refeedor,.

Analogamente, a Figura 3.17d apresenta o transiente da fração molar do componente mais volátil no produto de fundo da coluna, para as variações ( $\pm 3\%$ ,  $\pm 6\%$ ) na vazão molar da alimentação. Para as mesmas variações, as Figuras 3.17e e 3.17f apresentam o transiente da pressão no prato número 28 e da temperatura no refeedor, respectivamente.

Estudando-se a variável composição (Fig. 3.17a) verifica-se que para pequenas variações ( $\pm 3\%$ ) na composição da alimentação, a variação positiva (+3%) cresce lentamente e monotonicamente enquanto a resposta à variação negativa (-3%) também é monotônica somente que apresentando uma menor constante de tempo. Para variações maiores ( $\pm 6\%$ ) a resposta apresenta comportamento não monotônico. O comportamento quanto a intensidade da variação é totalmente diferente (fig. 3.17a) para as duas variações positivas (+3% e +6%) ou negativas (-3% e -6%). Portanto para variações na composição da alimentação pode-se concluir que a variável composição apresenta comportamento não linear quanto a intensidade e sentido da perturbação.

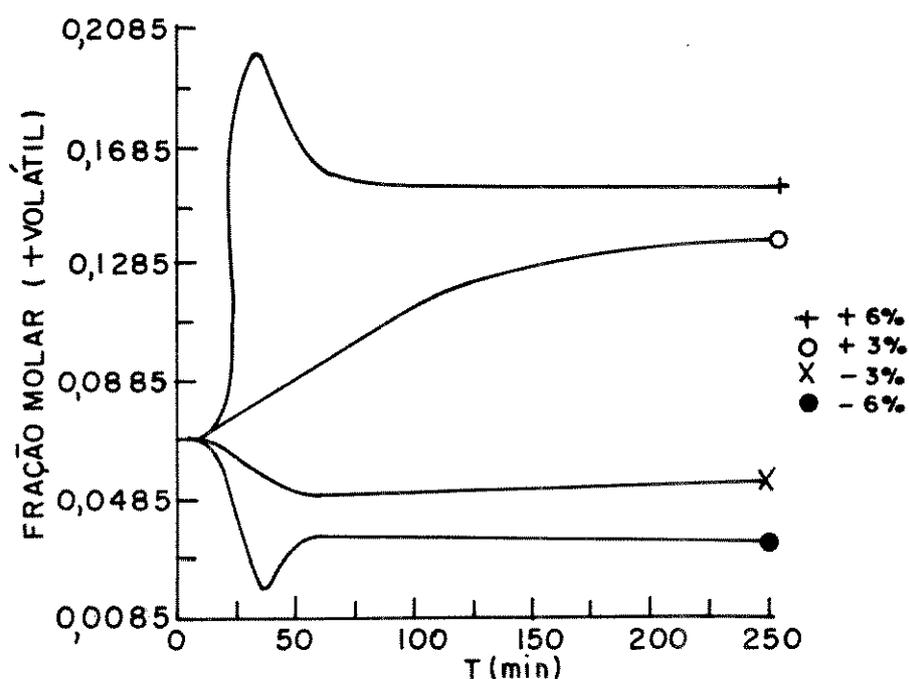


Fig. 3.17a - Fração molar do + volátil no produto de fundo x tempo para variações de  $\pm 3\%$  e  $\pm 6\%$  na composição molar da alimentação.

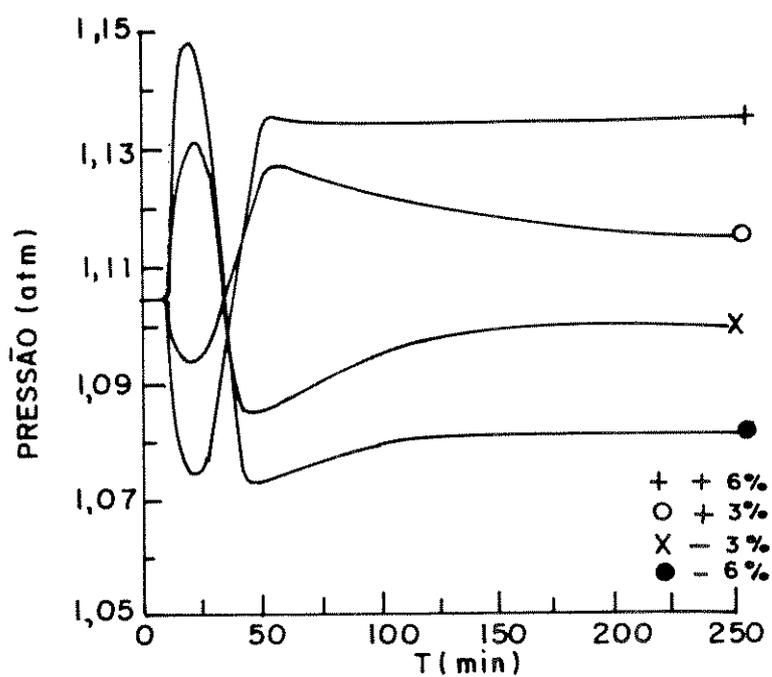


Fig. 3.17b - Pressão no prato nº 28 x tempo para variações de  $\pm 3\%$  e  $\pm 6\%$  na composição molar da alimentação.

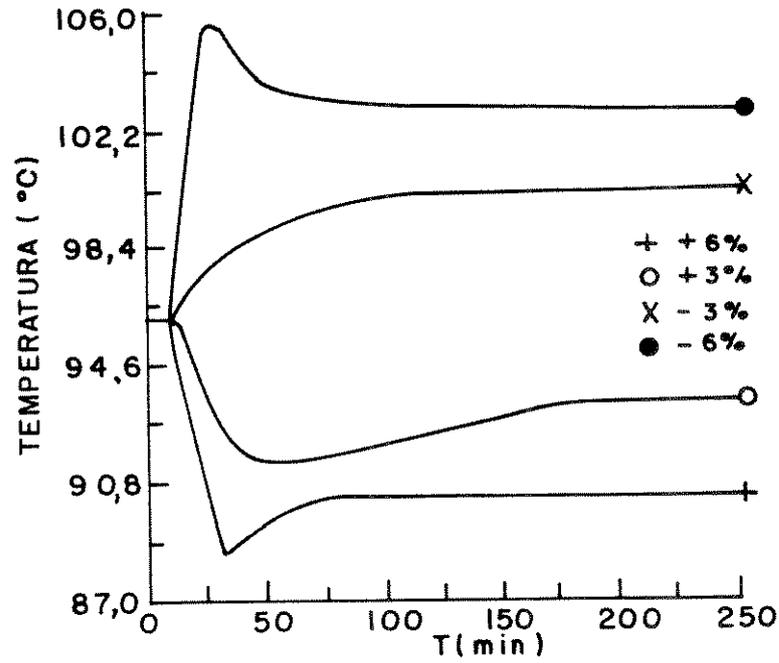


Fig. 3.17c - Temperatura no refeedor x tempo para variações de  $\pm 3\%$  e  $\pm 6\%$  na composição molar da alimentação.

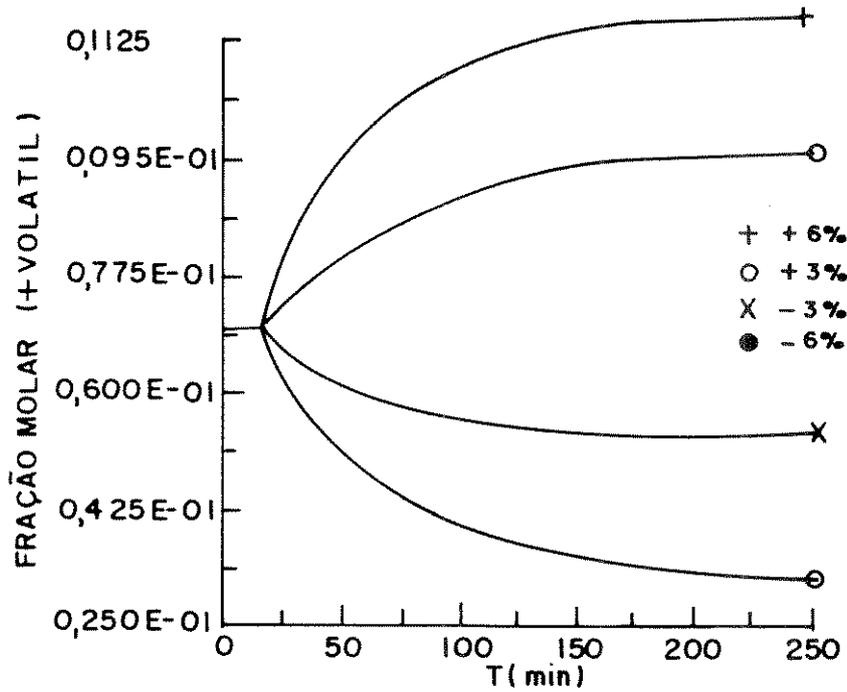


Fig. 3.17d - Fração molar do + volátil no produto de fundo x tempo para variações de  $\pm 3\%$  e  $\pm 6\%$  na vazão molar da alimentação.

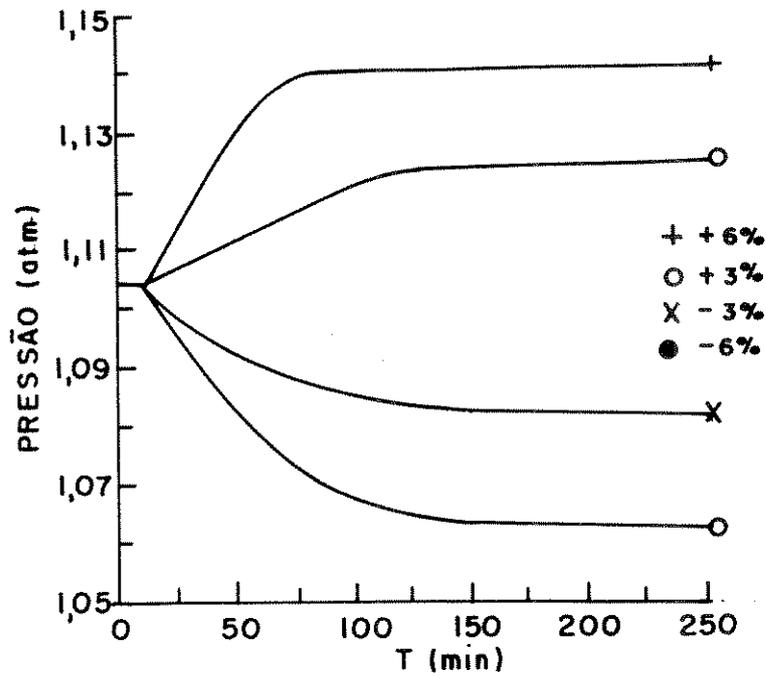


Fig. 3.17e - Pressão no prato nº 28 x tempo para variações de  $\pm 3\%$  e  $\pm 6\%$  na vazão molar da alimentação.

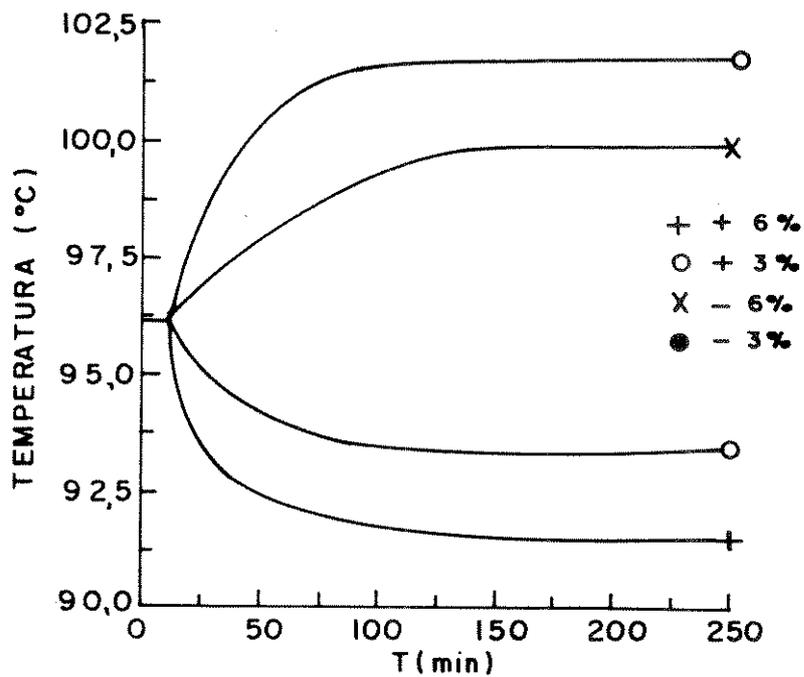


Fig. 3.17f - Temperatura no refeedor x tempo para variações de  $\pm 3\%$  e  $\pm 6\%$  na vazão molar da alimentação.

Para variações na vazão de alimentação e fixando novamente a atenção na variável composição (Fig. 3.17d) nota-se que as variações positivas e negativas determinaram respostas bastante simétricas para a variável em estudo (composição do mais volátil no produto de fundo). Comparando-se ainda a resposta às duas variações positivas de diferentes intensidades (3% e 6%), nota-se que a primeira é aproximadamente a metade da segunda, o que caracteriza a linearidade da variável. Portanto, para variações na vazão molar da alimentação conclui-se que a variável composição apresenta um comportamento linear quanto à intensidade e sentido da variação.

Em análise semelhante, tem-se por um lado que as variáveis pressão (Fig. 3.17b) e temperatura (Fig. 3.17c) apresentam comportamento não linear quanto à intensidade e sentido da variação na composição da alimentação e por outro lado tem-se que essas mesmas variáveis (Fig. 3.17e e Fig. 3.17f) apresentam comportamento linear quanto a intensidade e sentido da variação na vazão molar da alimentação.

Dessas duas observações conclui-se que a linearidade quanto à intensidade e sentido da perturbação é função não somente da variável que está sendo analisada como também da variável que foi perturbada. Portanto, não se pode dizer a priori qual variável observada possui comportamento linear, o que ressalta a importância de um modelo não linear para a simulação da coluna.

Os resultados (Fig. 3.17a a Fig. 3.17f) mostram ainda que o sistema responde mais lentamente à medida que a intensidade da variação é reduzida. Isso permite explicar porque a constante de tempo predita por análise linear é maior do que aquela determinada por simulação não linear (visto que a análise linear é baseada em pequenas variações (respostas mais lentas)).

De uma forma global, pode-se concluir do estudo da influência de diferentes variações no comportamento da coluna, que se tem tantos efeitos superpostos e simultâneos que é extremamente difícil prever qualitativamente uma resposta sem o auxílio da simulação. O comportamento de cada variável produz efeitos de maior ou menor intensidade no comportamento das outras variáveis. A forma como ocorre a interação entre as variáveis, e qual o efeito de maior influência no comportamento de determinadas variáveis em estudos, é tão complexa que se torna impossível definir regras genéricas para prever o comportamento qualitativo das respostas. Isto é, generalizações não podem ser efetuadas e cada perturbação deverá ser analisada caso a caso, através da simulação, objetivando não só uma análise qualitativa como também quantitativa do efeito de cada perturbação sobre a dinâmica da coluna.

### **3.9 - Validação do modelo dinâmico usando resultados da literatura**

Objetivando a comparação do modelo com resultados da literatura foram realizadas duas provas comparativas.

#### **Prova 1 - Resposta em malha aberta. Valores finais em regime estacionário.**

O proposto da primeira prova é uma comparação das condições finais de novo regime estacionário obtidas através do modelo dinâmico, com resultados experimentais da literatura (AIChE - Research Committee, "Final Annual Report" University of Delaware - 1978).

O sistema estudado é o metanol-água e as especificações da coluna, da referência citada, são dadas na tabela 3.9 .

Tab.3.9 - Especificações da coluna AIChE (1978)

<b>- geometria do prato</b>	
pratos valvulados '(cross flow)'	20
diâmetro da coluna (m)	1.676
espaço entre os pratos (m)	0.610
área dos orifícios (m <sup>2</sup> )	0.306
altura do vertedouro (mm)	50
comprimento do vertedouro (m)	1.09
altura da secção de entrada no prato (m)	0.04
eficiência do prato (Murphree)	0.70
<b>- dados do processo</b>	
<b>-alimentação</b>	
vazão (kg / h)	18144
temperatura (C)	70.2
% em massa do metanol	71.43
% em massa da água	28.57
pressão (kPa)	308
<b>- destilado</b>	
vazão (kg / h)	12972
impureza ( ppm - água )	80
<b>- refeedor</b>	
vazão (kg / h vapor)	13517
temperatura (C) / pressão (kPa)	126 / 239
<b>- condensador</b>	
vazão (m <sup>3</sup> / h água)	704
temperatura(C) entrada / saída	29.6 / 39.6
razão de refluxo	1.0

Esta prova é particularmente importante quanto à aceitabilidade de parâmetros e correlações utilizadas no modelo, como eficiência, valores de equilíbrio líquido-vapor, pressão vapor, correlações de entalpia, perda de carga, faixa de operação estável, etc...

As Figuras 3.18a e 3.18b mostram respectivamente os perfis de temperatura (K) e fração molar do metanol ao longo da coluna.

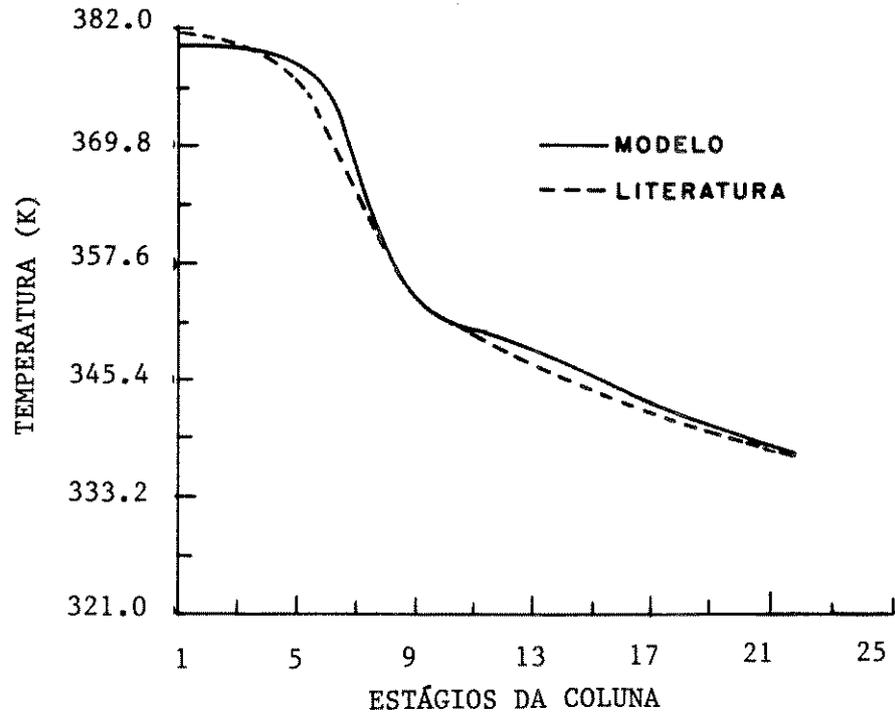


Fig. 3.18a - Temperatura x estágios da coluna.

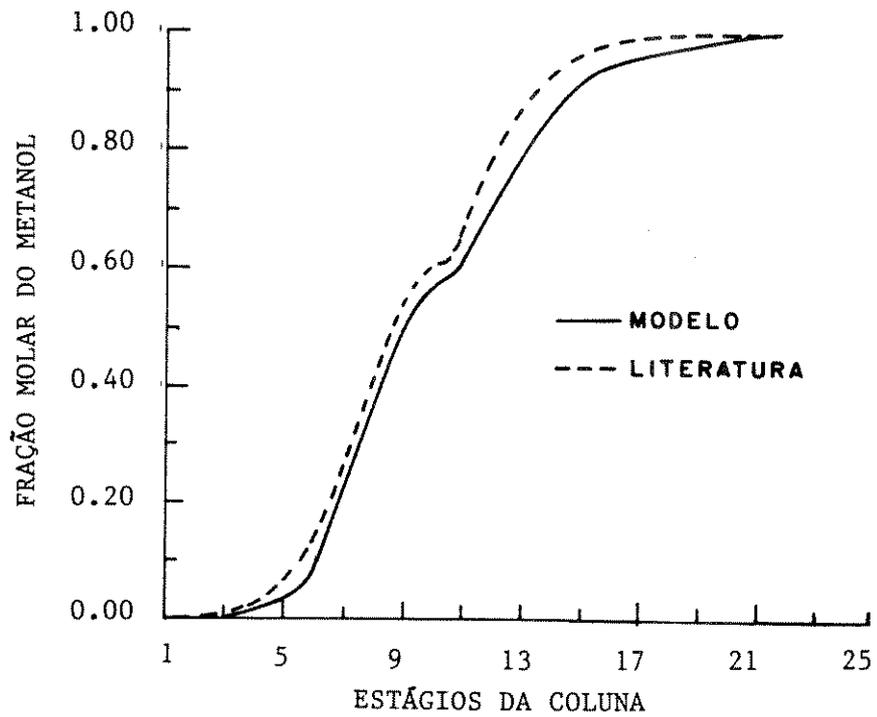


Fig. 3.18b - Fração molar do metanol x estágios da coluna.

## Prova 2 - Resposta em malha aberta. Evolução temporal das composições topo/fundo.

Para verificar a adequação do modelo à resultados em regime dinâmico existentes na literatura, Luyben et al. (1988) estuda-se o transiente das composições de topo e fundo para uma variação de + 2% na vazão de refluxo de topo. O sistema estudado é o metanol-água e utiliza-se a configuração de coluna da referência acima citada (Luyben et al.). Esta configuração de coluna é a mesma utilizada por Chiang (1985), a eficiência dos pratos é de 75%, a hidráulica dos pratos é calculada pela relação de Francis e a queda de pressão, utilizando o mesmo procedimento de Luyben, foi considerada desprezível.

A Figura 3.18c mostra a evolução temporal (variação percentual em relação ao estacionário) das composições de metanol no topo ( $X_D$ ) e fundo ( $X_B$ ) da coluna. Para objetivos de controle são de maior relevância as variáveis que realmente são monitoradas e controladas na planta.

As figuras 3.18a, 3.18b e 3.18c demonstram a boa concordância entre os resultados do modelo e da literatura. Pode-se considerar assim o comportamento do modelo bastante satisfatório e perfeitamente adequado para ser utilizado no estudo de colunas de destilação de elevada pureza.

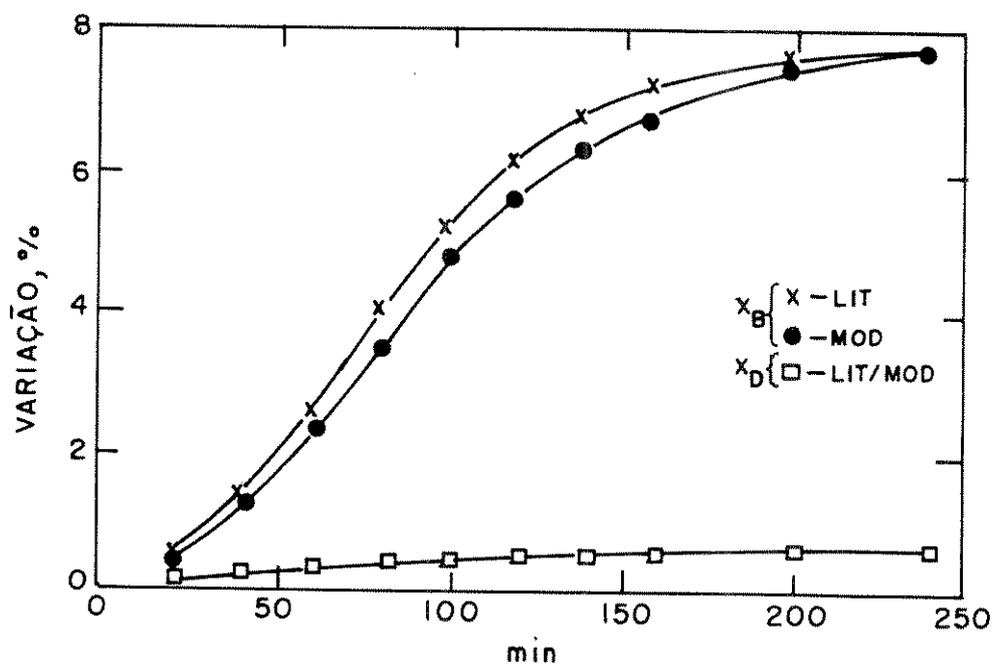


Fig. 3.18c - Variação percentual (em relação ao estacionário) da fração molar de metanol no destilado ( $X_D$ ) e fundo ( $X_B$ ) x tempo para uma variação de + 2% na vazão de refluxo de topo.

## 4 - DINÂMICA EM MALHA FECHADA - CONTROLE

### 4.1 - O problema do controle de colunas de destilação de alta pureza

A destilação é uma das mais usuais operações unitárias da indústria química e provavelmente a mais estudada do ponto de vista do controle. Contudo, o controle de composição no topo e no fundo (controle dual) de colunas de destilação tem-se demonstrado de difícil implementação prática (Skogestad e Lundstrom, 1990). O controle de composição em um único ponto da coluna (uma composição controlada com um controlador feedback e a outra não controlada) é muito comum, enquanto que o controle em dois pontos (controle feedback em ambas as composições) raramente é utilizado (Skogestad S. et al, 1990). Uma razão para isto é que a sintonia "on-line" das duas malhas de controle de composição apresenta forte interação, e em colunas de destilação essa sintonia é muito difícil (Wood R. K. et al, 1973). Utilizando a destilação de alta pureza como exemplo, inúmeros autores estudaram o controle robusto de plantas mal-condicionadas, investigando as causas para o mal condicionamento e suas implicações no projeto e desempenho de sistemas de controle. Boyd (1975) utilizou um esquema de controle diferencial, para manter a pureza de topo em cerca de 10 ppm em uma separação benzeno/tolueno. Tyreus (1976) encontrou dificuldades para controlar a pureza de topo em cerca de 1000 ppm na separação metanol/água, isto em face do comportamento da coluna ser altamente não linear. Fuentes e Luyben (1983) exploraram a dinâmica e o controle de colunas para diferentes grau de pureza do produto, utilizando dois modelos do processo; um modelo linear e outro não linear. O modelo não linear apresentava um tempo excessivo de cálculo. Hipóteses simplificadoras foram efetuadas no modelo não linear: considerações de idealidade no tratamento termodinâmico do equilíbrio líquido-vapor e não consideração da fluidodinâmica do prato. McDonald e Mc Avoy (1987) aplicaram um algoritmo de controle preditivo desenvolvido pela Shell Oil Co., no estudo da destilação de alta pureza. As dificuldades na obtenção de um modelo representativo do processo para sistemas altamente não lineares foram apresentadas. Mountziaris e Georgiou (1988) utilizaram propriedades do estado estacionário na síntese de estruturas de controle multivariável da coluna. O controlador assim projetado era uma função não linear das concentrações de topo e fundo da coluna. Skogestad, Morari e Doyle (1988) demonstraram que as composições dos produtos de topo e fundo na destilação de alta pureza são muito sensíveis a variações nos fluxos externos (alto ganho nesta direção), mas fortemente insensíveis a manipulações nos fluxos internos (baixo ganho nesta direção). Skogestad e Morari (1988) estudaram a destilação de alta pureza usando a vazão de refluxo (L) e a taxa de vapor no refeedor (V) como entradas manipuladas para controle respectivamente das composições de topo e fundo da coluna. A maior dificuldade encontrada referia-se à obtenção de um modelo de função de transferência linear para as colunas em estudo, que se demonstraram fortemente não lineares e complexas. O efeito da não linearidade foi por eles minimizado utilizando as composições de topo e fundo expressas na forma logarítmica,  $Y_D = \ln(1-y_D)$  e  $X_B = \ln x_B$ . Georgiou, Georgakis e Luyben (1988) compararam o rendimento de controladores de modelo interno tipo DMC (Cutler, 1983) e IMC (Garcia e Morari, 1982) com estruturas multivariáveis convencionais de controladores do tipo PI. Alsop e Edgar (1990), utilizando

regressão não linear, desenvolveram formas especiais de modelos empíricos, de baixa ordem, no controle de alta pureza. Amaral et al (1990) analisaram e discutiram algoritmos de controle adaptativo para colunas de destilação de alta pureza. Dos algoritmos de controle desenvolvidos o controle preditivo generalizado foi o que apresentou melhor comportamento (menor sobrelevação e menor tempo de estabilização). Rovaglio et al. (1990) utilizando um modelo geral para a simulação dinâmica de colunas com operação controlada, reproduziram tendências operacionais de algumas variáveis monitoradas em uma coluna industrial. A qualidade do comportamento reproduzido os incentivaram a estender o uso do modelo no projeto de estratégias de controle do tipo antecipativo.

O controle topo/fundo (dual) para colunas de alta pureza é um problema de controle interativo, altamente não linear e mal condicionado (Ranzi et al, 1988). Essa combinação de características resulta em um interessante problema de projeto de controladores multivariáveis. Uma aproximação para resolver este problema, na sequência do trabalho apresentado por Rovaglio et al. (1990), utiliza a teoria do controle linear na síntese do controlador não linear, através de um modelo dinâmico rigoroso, quando disponível.

Este último capítulo caminha justamente neste sentido, procurando estender a teoria e metodologia relativa ao controle linear de processos, ao controle não linear, através do instrumento de simulação dinâmica desenvolvido nos capítulos anteriores. Como será explorado a seguir, algumas extensões resultam simples, outras requerem particular adaptação para serem válidas também no domínio do tempo.

## 4.2 - Sistemas de controle no domínio do tempo

Para investigar o comportamento de um processo químico, as variáveis de saída do processo variam com o tempo devido a influência de variações nas variáveis de entrada (variáveis manipuladas, variáveis perturbadas) e, conseqüentemente projetar o controlador adequado, pode-se utilizar duas diferentes aproximações:

- a. Aproximação experimental: nesse caso a unidade, ou o equipamento a ser controlado, está fisicamente disponível. Conseqüentemente, através de apropriadas variações nas variáveis de entrada, é possível conhecer e compreender a evolução dinâmica do processo, medindo e registrando o efeito dessas variações nas variáveis de saída do processo. Esse procedimento resulta muito custoso e comporta um grande dispêndio de energia, recursos e tempo, visto que o campo de provas necessário para documentar uma boa experimentação é muito vasto.
- b. Aproximação teórica ou modelística: frequentemente é necessário projetar o sistema de controle antes que o equipamento seja construído. Em tais casos, não é certamente possível aplicar um procedimento do tipo experimental, havendo assim a necessidade de outro instrumento que permita compreender o comportamento dinâmico do sistema. Para isto, normalmente, é proposto um modelo matemático, constituído de equações diferenciais e algébricas, e cuja solução permite interpretar teoricamente a resposta do

processo em relação a variações nas variáveis de entrada. A teoria mais consolidada faz referência a sistemas de equações diferenciais obtidas através de uma linearização em torno das condições estacionárias e resolvidas no domínio das transformadas de Laplace. Essas constituem seguramente um interessante instrumento matemático que permite a solução analítica sem necessariamente recorrer a complicados algoritmos matemáticos e sem dispor de custosos instrumentos de cálculo.

O inconveniente maior da teoria linear é essencialmente o limite imposto pelo desenvolvimento linear em torno das condições estacionárias, e a relativa dificuldade de extensão dos resultados obtidos para um campo mais vasto de condições operativas.

Graças ao advento de novas gerações de computadores, com um custo cada vez mais baixo, o desenvolvimento de modelos dinâmicos com maior capacidade de descrição fenomenológica do processo permite validar, ou corrigir, os resultados preliminares, obtidos em termos lineares simplificados, extendendo-os também ao campo não linear. Estes modelos, além de apresentar-se como rigorosos, seguramente mais confiáveis em um vasto campo operativo, são aplicados e resolvidos diretamente no domínio do tempo, possibilitando assim uma compreensão mais direta dos diversos fenômenos em jogo e dando um maior espaço à definição das condições ótimas de regulação e controle da coluna.

#### 4.2.1 - Configuração de controle multimalha.

##### **Emparelhamento: variável manipulada x variável controlada**

A seleção de uma configuração (estrutura) de controle apropriada constitui importante decisão no projeto de sistemas de controle.

De uma forma geral, a otimização de uma coluna operada com alto grau de pureza dos produtos em relação ao consumo de energia necessita de um controle de composição nas correntes de topo e fundo da coluna, o controle dito 'dual' ou ainda controle de composição em dois pontos. Embora muitas das colunas industriais sejam operadas com controle de composição em um ponto, o controle dual apresenta grande potencial de economia de energia (Skogestad et al, 1990).

A maioria das colunas de destilação com produto de topo e fundo, considerando por exemplo a coluna da Fig. 4.1a, do ponto de vista da teoria do controle apresenta 5 possíveis variáveis manipuladas ( $B$ ,  $D$ ,  $Q_{ns}$ ,  $L_{ns}$ ,  $Q_1$ ) e 5 possíveis variáveis controladas (nível de líquido no refeedor, nível de líquido no acumulador de refluxo, pressão e composição de topo e de fundo), constituindo um sistema  $5 \times 5$  (Shinskey, 1989). O projeto do controlador deve ser baseado em todas as informações disponíveis (modelo do processo, dispositivos de medida e perturbações esperadas) e deve manipular todas as 5 entradas de forma a manter as 5 saídas dentro dos valores desejados. Na prática poucas colunas são controladas através do sistema completo ( $5 \times 5$ ) de controle. Sistemas descentralizados com controladores "single-loop" são usados, pois apresentam maior tolerância a falhas, maior facilidade de entendimento pelo pessoal de operação e menor sensibilidade à operação da planta. As

malhas de controle de nível (topo e fundo) e pressão por apresentarem uma dinâmica rápida quando comparada com a dinâmica de composição são consideradas como levando a um controle perfeito, e portanto não são normalmente consideradas com um maior detalhamento crítico. Assim, o problema do controle de composição fica reduzido ao sistema  $2 \times 2$ .

Como exemplo de análise considere-se a estrutura convencional (Shinsky F.G., 1989, McAvoy T.J., 1983) apresentada na figura 4.1b, onde a pressão é controlada por manipulação indireta da corrente  $V_{ns-1}$  (vazão de vapor na saída do prato de topo), o nível do topo (acumulador de refluxo) com o destilado D e nível do refeedor da coluna com o fluxo B. Essa configuração, chamada de LV, recebe esta nomenclatura devido ao refluxo L e ao vapor V constituírem as variáveis manipuladas a serem usadas no controle das composições  $X_D$  e  $X_B$ .

Para a regulação dos controles de nível (topo e fundo) e pressão de topo recomenda-se (Luyben W.L., 1981), a utilização de um controle em cascata, (Fig. 4.1b), para compensar eventuais alterações nos fluxos molares. A dinâmica do controlador secundário (C.S.) é muito mais rápida do que aquela do controlador primário (C.P.). Consequentemente, o atraso de fase da malha secundária (C.S.) será menor do que na malha primária (C.P.). Isto permite a utilização de ganhos elevados no controlador secundário (geralmente um controlador do tipo proporcional) permitindo assim uma regulação mais efetiva (Ray, 1983), das perturbações ocorridas na malha secundária, sem prejudicar a estabilidade do sistema de controle. Dessa forma, a dinâmica dos controladores secundários não serão consideradas neste trabalho, ou seja, para efeitos de simulação e controle da coluna, as restrições de controle serão definidas pelas malhas primárias.

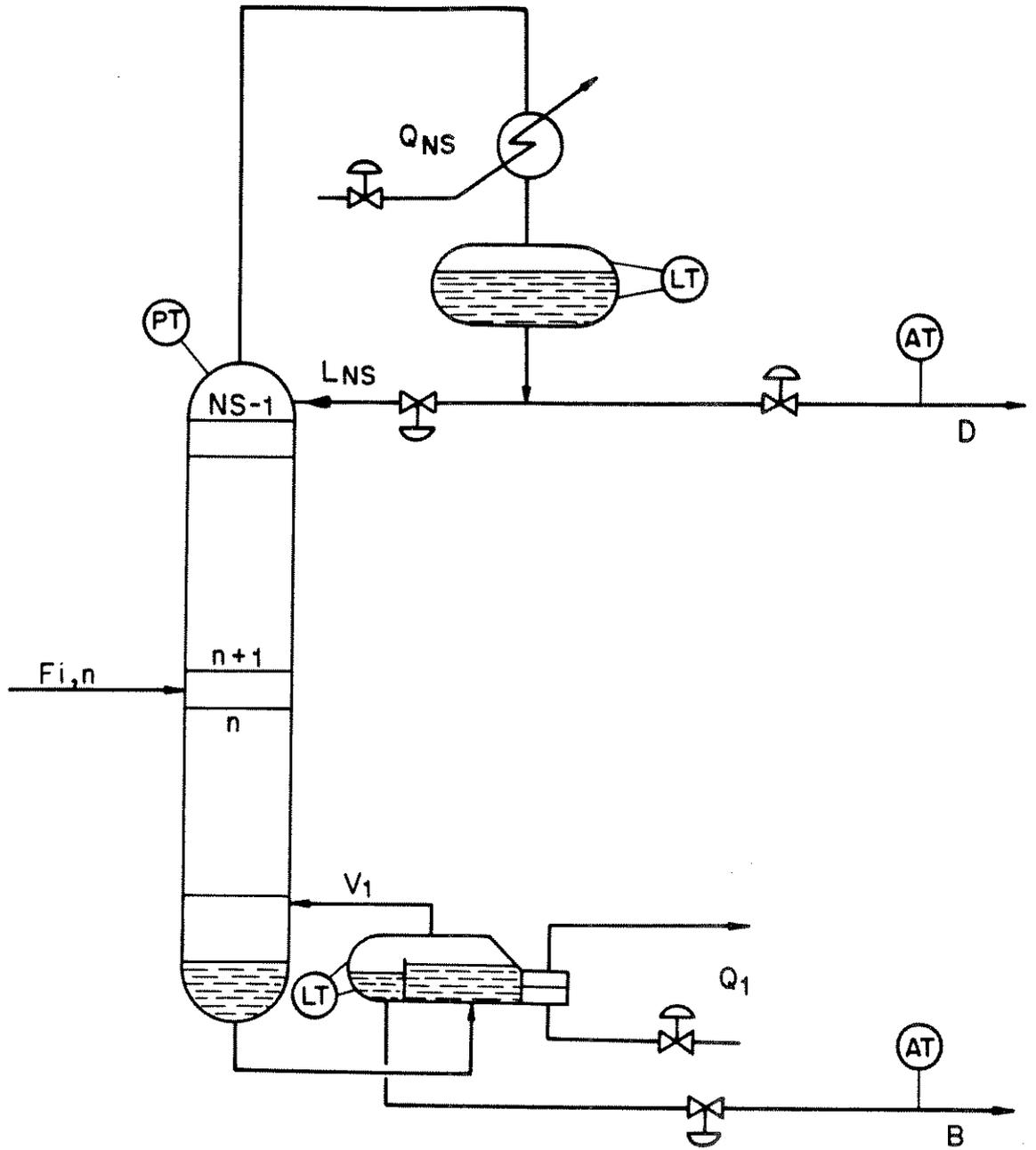


Fig. 4.1a - Diagrama esquemático da coluna de destilação visando o controle.

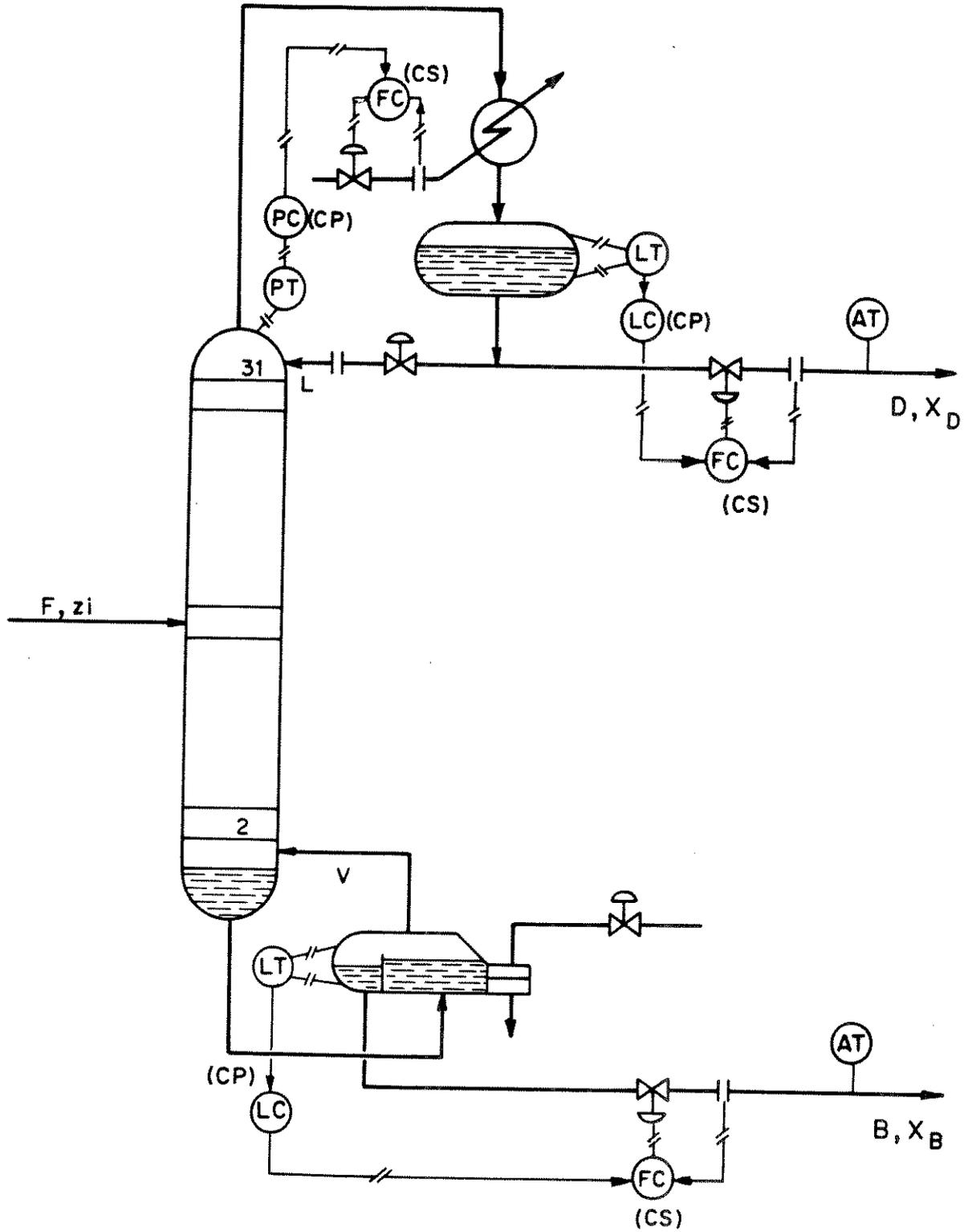


Fig. 4.1b - Configuração de controle LV.

Outra configuração possível é obtida se L é usado para controle do nível no acumulador ao invés de D. Segundo Skogestad et al (1990), nessa configuração, chamada de "DV"(Fig 4.1c) as composições são pouco sensíveis a variações na taxa de calor fornecida ou na vazão de refluxo de topo, enquanto a configuração LV seria mais sensível a tais variações.

Para o controle de composição no fundo, as duas alternativas clássicas seriam:

- configuração ( $X_B - Q_1$ ); controle da composição do produto de fundo,  $X_B$ , via manipulação do calor fornecido ao refeedor e
- configuração ( $T_j - Q_1$ ); controle da pureza no fundo via manipulação da potencia térmica fornecida ao refeedor em função da temperatura medida em um prato da secção inferior da coluna.

A questão colocada é, qual estratégia de controle deve ser utilizada? Dado este conjunto de soluções possíveis, qual a melhor configuração para a coluna considerada? Duas considerações são utilizadas na seleção: a sensibilidade no estado estacionário (McCune et al, 1973; Shinsky et al, 1989; Luyben et al, 1981; Poiani et al, 1984) e a estabilidade dinâmica da configuração de controle da composição. A sensibilidade em regime estacionário, obtida através de um programa de simulação estacionária da coluna, e a estabilidade dinâmica, obtida através de um programa de simulação dinâmica da coluna, são duas medidas do desempenho da malha de controle.

A sensibilidade no estado estacionário é uma quantificação do efeito na variável controlada gerado por uma variação na variável manipulada após o estado estacionário ter sido alcançado. Utilizando o procedimento de McCune et al (1973), a sensibilidade no estado estacionário de uma malha de controle pode ser determinada pelo cálculo do ganho relativo da variável controlada em relação a variável manipulada. O ganho relativo pode ser definido como a variação da variável controlada ( $\Delta C$ ) dividido pela variação relativa da variável manipulada ( $\Delta M/M$ ). Utilizando variações normalizadas nas variáveis manipuladas, comparações podem ser efetuadas entre variações equivalentes nas variáveis manipuladas dos balanços materiais e energéticos.

A estabilidade dinâmica é uma medida da velocidade com que a variável controlada responde a uma variação na variável manipulada.

A resposta às duas perguntas colocadas e a aplicação dessas ferramentas de seleção, bem como a síntese e o projeto dos esquemas de controle de composição serão desenvolvidas a seguir.

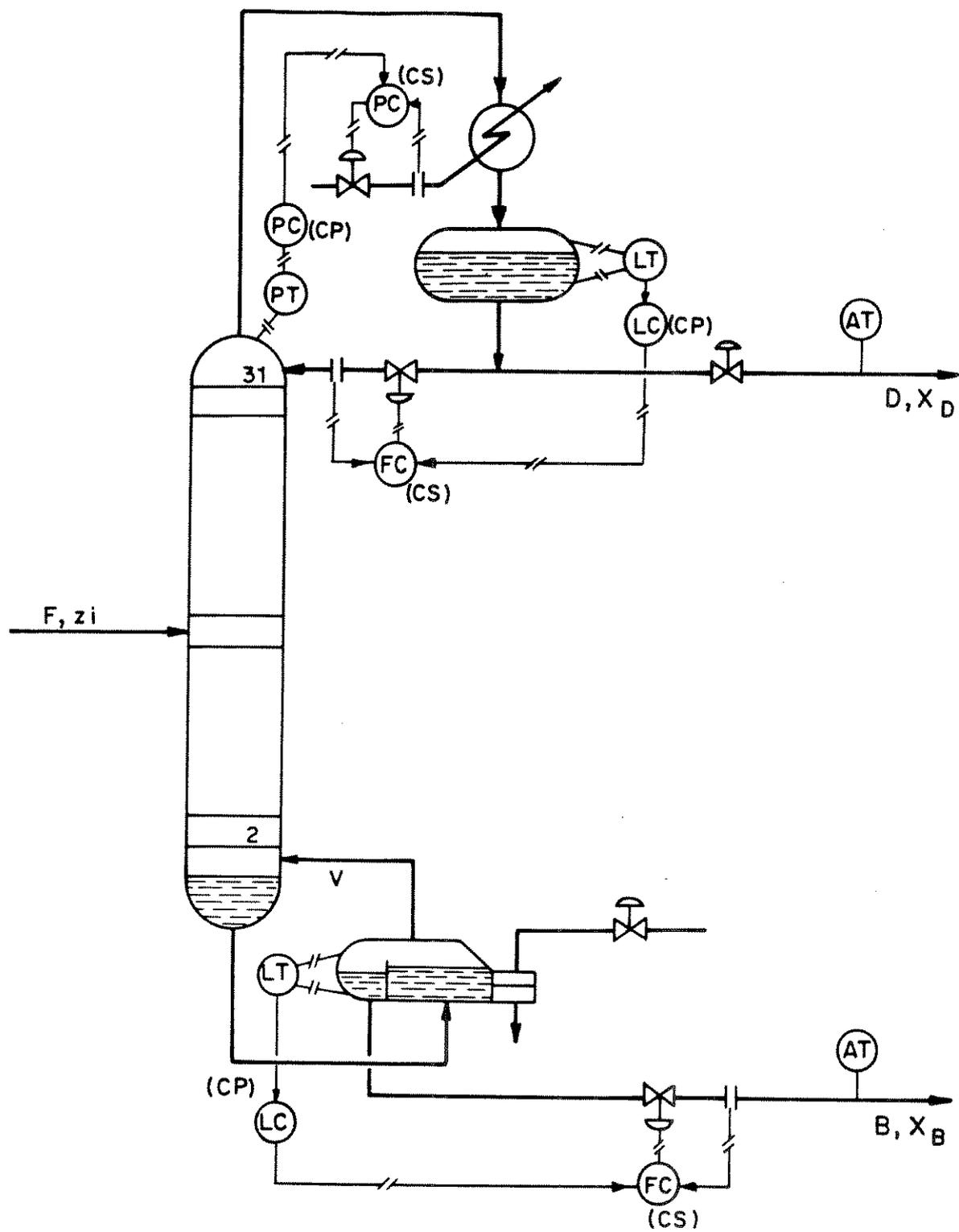


Fig. 4.1c - Configuração de controle DV.

### 4.3 - Projeto de sistemas de controle de composição em colunas de destilação. Aplicação à destilação metanol-água.

Objetivando-se implementar uma estratégia de controle de composição multimalha por realimentação, ao sistema principal de equações do modelo são adicionadas o conjunto das relações de controle (4.1), válidas para cada malha:

$$\mathbf{m}_{(t)} = \mathbf{m}^0 + \mathbf{K}_C \left\{ (\mathbf{y} - \mathbf{y}_{set}) + \frac{1}{\tau_I} \int_0^t (\mathbf{y} - \mathbf{y}_{set}) + \tau_D \frac{d(\mathbf{y} - \mathbf{y}_{set})}{dt} \right\}, \quad (4.1)$$

onde  $\mathbf{m}$  é o vetor das variáveis manipuladas,  $\mathbf{m}^0$  é o vetor de referência das variáveis manipuladas,  $\mathbf{y}$  é o vetor dos valores correntes das variáveis controladas,  $\mathbf{y}_{set}$  é o vetor dos valores impostos as variáveis controladas que determinam a ação de controle;  $\mathbf{K}_C$ ,  $\tau_I$ ,  $\tau_D$  são respectivamente os vetores que contém a constante proporcional, o tempo integral e o tempo derivativo dos controladores.

No projeto de um esquema de controle de composição, através dos casos a seguir 1, 2, 3 e 4 discute-se o emparelhamento entre variáveis manipuladas e controladas objetivando a ação controlada das composições de topo e fundo da coluna. Nestes quatro casos estudados a configuração da coluna utilizada é a coluna C1 especificada na tabela 3.2. Das conclusões retiradas do estudo desses quatro casos define-se a seguir uma estrutura para o controle dual da coluna.

Caso 1: Controle de composição no topo (malha de controle L- $X_D$ ) com os níveis de topo e fundo sendo perfeitamente controlados por D e B respectivamente e a pressão perfeitamente controlada pela taxa de condensação no condensador; a vazão de vapor para o refeedor é mantida constante, ou seja o fundo da coluna é mantido em malha aberta.

Caso 2: Controle de composição no topo (malha de controle D- $X_D$ ) com os níveis de topo e fundo sendo perfeitamente controlados por L e B respectivamente e a pressão perfeitamente controlada pela taxa de condensação no condensador; a vazão de vapor para o refeedor é mantida constante, analogamente o fundo da coluna é mantido em malha aberta.

Caso 3: Controle de composição no fundo (malha de controle  $T_j$ - $Q_1$ ) de uma forma inferencial, ou seja controle de temperatura em um prato da secção de fundo da coluna através de manipulação da potencia térmica fornecida ao refeedor. Tal como em 1 e 2 os níveis de topo e fundo e a pressão são supostos perfeitamente controlados, o topo da coluna é mantido em malha aberta.

Caso 4: Controle de composição no fundo (malha de controle  $X_B-Q_1$ ) de uma forma direta, utilizando-se de um analisador de concentração em linha para determinação de  $X_B$ . Analogamente ao caso anterior, os níveis de topo e fundo e a pressão são supostos perfeitamente controlados e o topo da coluna é mantido em malha aberta.

#### 4.3.1 - Caso 1 : Controle de composição no topo (malha de controle L- $X_D$ )

Usando a malha de controle de topo L- $X_D$  (Fig. 4.1b) a composição do destilado  $X_D$ , é controlada por manipulação da vazão de refluxo, L, na coluna, o que torna necessário uma análise direta de composição. O instrumento de medida de concentração em linha, mais frequentemente usado é o cromatógrafo em fase gasosa. A deficiência dos analisadores em linha é o sistema de amostragem. A localização do sensor (Tsai et al 1986) de amostra é crítica. Muitas vezes, o lugar mais conveniente para colocar o sensor de amostra é na saída da bomba de refluxo (após o acumulador de condensado). Contudo, antes que a composição nesta linha varie, a composição da massa do líquido no acumulador de refluxo deve variar. Portanto, a localização do ponto de amostragem no acumulador de refluxo ou em qualquer corrente de saída do acumulador resultará em um considerável atraso de tempo. Para condensação total, o ponto de amostragem ideal com relação a dinâmica do processo é na linha do processo que sai do condensador.

No projeto do controlador feedback as duas questões colocadas são: como selecionar o tipo do controlador feedback, PI ou PID, e como ajustar os parâmetros do controlador selecionado  $K_c$ ,  $\tau_I$ ,  $\tau_D$ , respectivamente ganho, tempo integral e tempo derivativo de tal forma a se obter a resposta desejada para o processo controlado.

Para decidir quais valores escolher para os parâmetros do controlador (problema de "tuning") pode-se usar regras semi-empíricas; dentre essas uma das mais difundidas é o método da curva de reação, desenvolvido por Cohen e Coon (1953), baseado na análise da resposta do sistema quando é imposto uma pequena variação na saída do controlador.

Cohen e Coon observaram que a maior parte dos processos apresenta uma curva de reação sigmoideal que pode ser adequadamente aproximada por um sistema de primeira ordem com tempo morto.

$$G_{(s)} = \frac{Y(s)}{m(s)} = \frac{K_p e^{-t_d s}}{\tau s + 1} \quad (4.2)$$

onde Y é a variável controlada e m é a variável manipulada.  $K_p$ ,  $\tau$  e  $t_d$  são respectivamente o ganho estacionário, a constante de tempo do sistema e o tempo de atraso. Os valores destes parâmetros são facilmente determinados através da resposta do sistema:

- o ganho estacionário é a razão entre a variação de composição e o degrau imposto na vazão de refluxo, ou seja:  $K_p = (\text{saída no "estacionário"}/\text{entrada no "estacionário"})$ ,

- a constante de tempo do sistema é calculada por  $\tau = \frac{B}{S}$ , onde S é a inclinação da curva de resposta sigmoidal no ponto de inflexão e B a saída em "regime estacionário" e

- o tempo de atraso  $t_d$  é determinado calculando-se a intersecção da tangente a curva de resposta sigmoidal no ponto de inflexão, com o eixo referencial do tempo.

Na determinação dos parâmetros do controlador, Cohen e Coon usaram uma combinação de vários critérios:

- razão de decaimento,
- offset mínimo,
- integral do erro quadrático, ISE mínimo,

resultando nas regras apresentadas na Tabela 4.1. Desta tabela se pode notar que:

- a) o ganho de um controlador PI, quando comparado com um controlador P, é mais baixo. Isto é devido ao fato que a ação integral torna o sistema mais sensível e portanto o ganho deve ser mais conservativo.
- b) o efeito estabilizante da contribuição derivativa permite usar no controlador PID um ganho  $K_C$  mais elevado.

**Tabela 4.1 - Regras de Cohen Coon**

Controlador	$K_c$	$\tau_I$	$\tau_D$
P	$\frac{1}{K_p} \frac{\tau}{t_d} \left(1 + \frac{t_d}{3\tau}\right)$		
PI	$\frac{1}{K_p} \frac{\tau}{t_d} \left(0,9 + \frac{t_d}{12\tau}\right)$	$\left(\frac{30 + 3t_d / \tau}{9 + 20t_d / \tau}\right) t_d$	
PID	$\frac{1}{K_p} \frac{\tau}{t_d} \left(\frac{4}{3} + \frac{t_d}{4\tau}\right)$	$\left(\frac{32 + 6t_d / \tau}{13 + 8t_d / \tau}\right) t_d$	$\frac{4}{11 + 2t_d / \tau} t_d$

O método proposto por Cohen-Coon, e muito usado na literatura, para identificar os parâmetros do modelo da curva de reação revela-se moroso e muito difícil de aplicação, principalmente na presença de ruídos.

Para evitar estes problemas sugere-se aqui o seguinte procedimento:

- a curva de reação é aproximada por uma função do tipo

$$y - y_{\text{set}} = \alpha \cdot \exp\left(-\frac{\beta}{t}\right), \text{ onde} \quad (4.3)$$

$y$  : variável controlada,  
 $y_{\text{set}}$  : valor inicial (referência) da variável controlada,  
 $t$  : tempo (variável independente),  
 $\alpha, \beta$ : parâmetros de interpolação.

- os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  são estimados por regressão não linear (Apêndice D).
- a partir da função (4.3), o ponto de inflexão é determinado analiticamente, da condição da segunda derivada ser nula, permitindo assim aplicar o método de Cohen-Coon com uma maior precisão (Apêndice D).

A Tabela 4.2 mostra a curva de reação experimental; variação de  $X_D$  para uma variação do atuador da válvula correspondente um degrau de 2% em L, comparada com a função (4.3) ajustada.

**Tabela 4.2 - Curva de reação x modelo interpolante  
(Variação de  $X_D$  para uma variação de 2% em L)**

<b>Tempo (min)</b>	<b>Modelo Dinâmico</b>	<b>Valores Interpolados</b>
0.0000000E+00	0.9893810	0.9893810
3.1622767E-02	0.9893810	0.9893810
6.3245535E-02	0.9893810	0.9893810
0.2129460	0.9893810	0.9893808
0.3626464	0.9893810	0.9893808
1.023652	0.9893810	0.9893803
1.684657	0.9893810	0.9893804
4.393889	0.9893810	0.9893804
7.103121	0.9893810	0.9893804
9.999999	0.9893810	0.9893817
10.34785	0.9893810	0.9893819
10.69570	0.9893820	0.9893810
12.04472	0.9893882	0.9893811
13.39375	0.9893988	0.9893860
17.35986	0.9894894	0.9895064
21.32597	0.9896165	0.9897114
28.46062	0.9899663	0.9900429
30.00000	0.9900436	0.9901015
30.98024	0.9900928	0.9901366
31.96048	0.9901420	0.9901701
35.45327	0.9902914	0.9902771
38.94605	0.9904241	0.9903679
45.90479	0.9905941	0.9905121
52.86332	0.9907264	0.9906211
66.65736	0.9908535	0.9907731
80.45139	0.9909520	0.9908746
103.4029	0.9910169	0.9909846
126.3544	0.9910699	0.9910550
156.3544	0.9910979	0.9911162
186.3544	0.9911199	0.9911577
216.3544	0.9911456	0.9911878
246.3544	0.9911486	0.9912105
250.0000	0.9911440	0.9912129

A Tabela 4.3 apresenta os ajustes dos parâmetros dos três controladores: proporcional (P), proporcional-integral (PI) e proporcional-integral-derivativo (PID), para a malha de topo (L- $X_D$ ), de acordo com as regras da Tabela 4.1.

**Tabela 4.3 - Sintonia dos controladores (Cohen-Coon)**

controlador	P	PI	PID
$K_p$	-271.08	-236.37	-354.62
$\tau_I$		13.22	11.86
$\tau_D$			1.80

As respostas do sistema, caso 1 malha de controle L- $X_D$ , utilizando controladores PI e PID, com parâmetros de sintonia da Tabela 4.3, são apresentadas na Figura 4.2a, para uma variação (do tipo rampa por 20 min. a partir de  $t = 10$  min.) de 10% na vazão molar da alimentação.

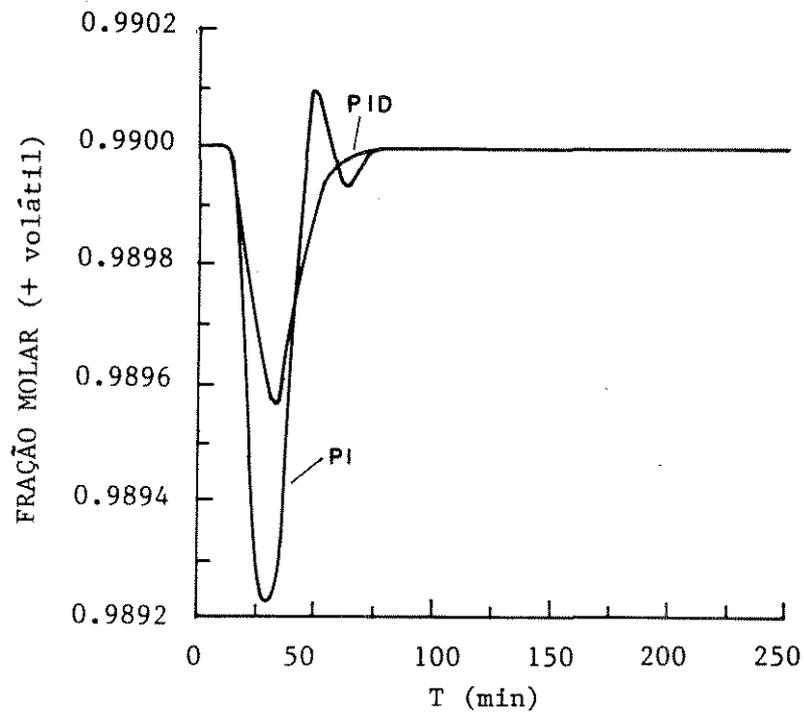


Fig. 4.2a - Fração molar do metanol no destilado x tempo para variações de + 10% na vazão molar da alimentação. Controle de topo: L- $X_D$ .

Observa-se nesta Figura que o controlador PID apresenta um melhor desempenho, menor sobre-elevação e maior estabilidade.

### 4.3.2 - Caso 2: Controle de composição no topo (malha de controle D- $X_D$ )

A Tabela 4.4 apresenta os parâmetros dos controladores PI e PID para a malha ( $X_D$  - D), determinados pelo método de Cohen-Coon. A curva de reação, determinada pelo método exposto acima, para esta malha corresponde ao transitório de composição de topo ( $X_D$ ), variável controlada, para uma variação do atuador da válvula correspondente a um degrau de 2% na vazão de destilado (variação na fração de abertura da válvula de destilado, variável manipulada). A localização do analisador de composição ( $X_D$ ) segue considerações do caso 1.

**Tabela 4.4 - Parâmetros de ajuste do controlador ( $X_D$  - D)**

controlador	PI	PID
$K_p$	341.59	512.49
$\tau_I$	20.59	18.47
$\tau_D$	-	2.81

As respostas do sistema, utilizando controladores PI e PID, com os parâmetros de sintonia constantes na tabela 4.4 são apresentadas na Figura 4.2b, onde para efeito comparativo com a malha  $X_D$  - L, usou-se igualmente um aumento de 10% na vazão molar da alimentação.

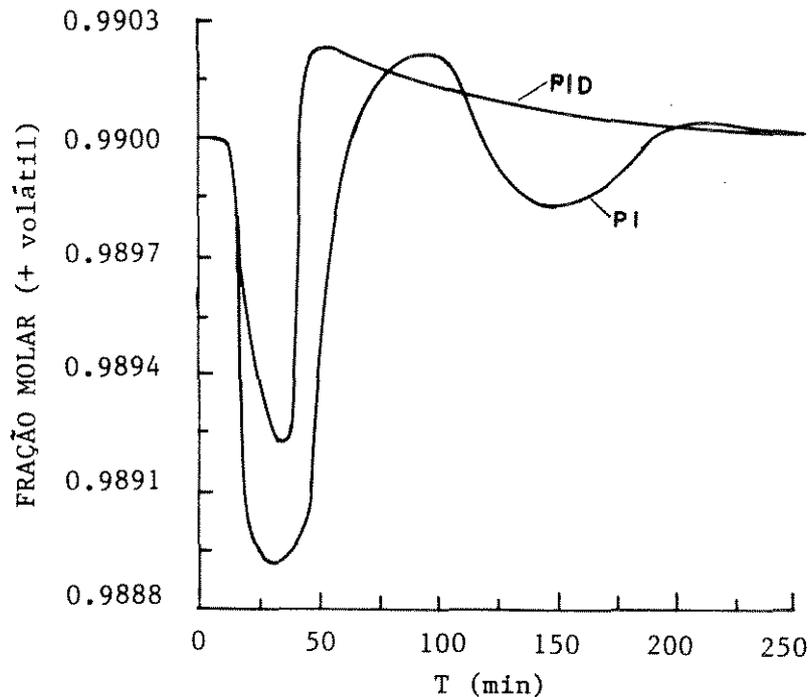


Fig. 4.2b - Fração molar do metanol no destilado x tempo para variações de + 10% na vazão molar da alimentação. Controle de topo: D- $X_D$ .

Nota-se também na Figura 4.2b o melhor desempenho do controlador PID, apresentando melhores resultados para controle do topo da coluna.

Na Tabela 4.5 é feita uma comparação de sensibilidade (McCune - 1973) para as duas estratégias de controle " $X_D - D$ " e " $X_D - L$ ". Estes resultados foram obtidos utilizando-se a simulação em regime estacionário da coluna.

**Tabela 4.5 - Sensibilidade em regime estático.**

estratégia de controle	sensibilidade $\left( \frac{\Delta x}{\Delta M / M} \right)$
$X_D - D$	3.71
$X_D - L$	17.63

As sensibilidades da Tabela 4.5 demonstram que as composições são mais sensíveis a manipulações da vazão de refluxo na coluna do que na vazão de destilado ( $X_D - D$ ), o que justifica um melhor desempenho da malha ( $X_D - L$ ).

O outro parâmetro no estudo do desempenho do controlador é a estabilidade dinâmica. Análise nesse sentido pode ser efetuada comparando-se as Figuras 4.2a, malha ( $X_D - L$ ) e 4.2b, malha ( $X_D - D$ ) quanto, por exemplo, a ação do controlador PID.

Nota-se destas Figuras que o controlador  $X_D - L$  apresenta um melhor desempenho que o controlador  $X_D - D$ , com diminuição nos valores de pico (respectivamente 0,05% e 0,10% em porcentagem de variação máxima de  $X_D$ ) bem como um menor comportamento oscilatório e menor tempo de estabilização (respectivamente 50 min. e 100 min.).

Conclui-se então pela manipulação da vazão de refluxo (controlador  $X_D - L$ ) em detrimento da manipulação da vazão de destilado (controlador  $X_D - D$ ) como estratégia de controle de composição do destilado, dentro do projeto de controle dual topo/fundo da coluna.

#### 4.3.3 - Caso 3 - Controle de composição no fundo (malha de controle $T_j - Q_1$ )

Como nesse caso o controle de composição é feito de uma forma inferencial via controle de temperatura em um prato, é necessário decidir qual a melhor posição para a medição de temperatura. Essa escolha é feita com base na variação de temperatura na coluna, resultante de uma variação genérica. A Figura 4.3a mostra o transiente do perfil de temperatura (temperatura relativa ao tempo relativa ao prato) após um aumento na vazão molar da alimentação em 20%. Dessa Figura pode-se observar que as principais variações de temperatura estão localizadas no fundo da coluna (pratos de 2 a 4). Ressalte-se que, para efeitos de nomenclatura o índice 1 refere-se ao refeedor (estágio 1), portanto na realidade

o primeiro prato da coluna, propriamente dito, é o prato número 2 (estágio 2). Logo, para a escolha da melhor posição do sensor, será suficiente concentrar a atenção nesses pratos da secção de fundo.

As Figuras 4.3(b, c, d) apresentam o transitório de temperatura respectivamente para os pratos 2, 3 e 4 da coluna, considerando :

- a) uma variação em degrau que aumenta a potência térmica do refulvedor em 2% de 8.275 kW a 8.441 kW (variação na fração de abertura da válvula do fluido de aquecimento)
- b) uma variação em degrau que diminui a potência térmica do refulvedor em 2% de 8.275 kW a 8.109 kW (variação na fração de abertura da válvula do fluido de aquecimento)

Das respostas obtidas observa-se que entre as posições mais sensíveis, o terceiro prato parece ser a melhor posição para instalar o sensor de temperatura. De fato, ele apresenta uma alta sensibilidade e ao mesmo tempo, um comportamento simétrico em relação a variável manipulada.

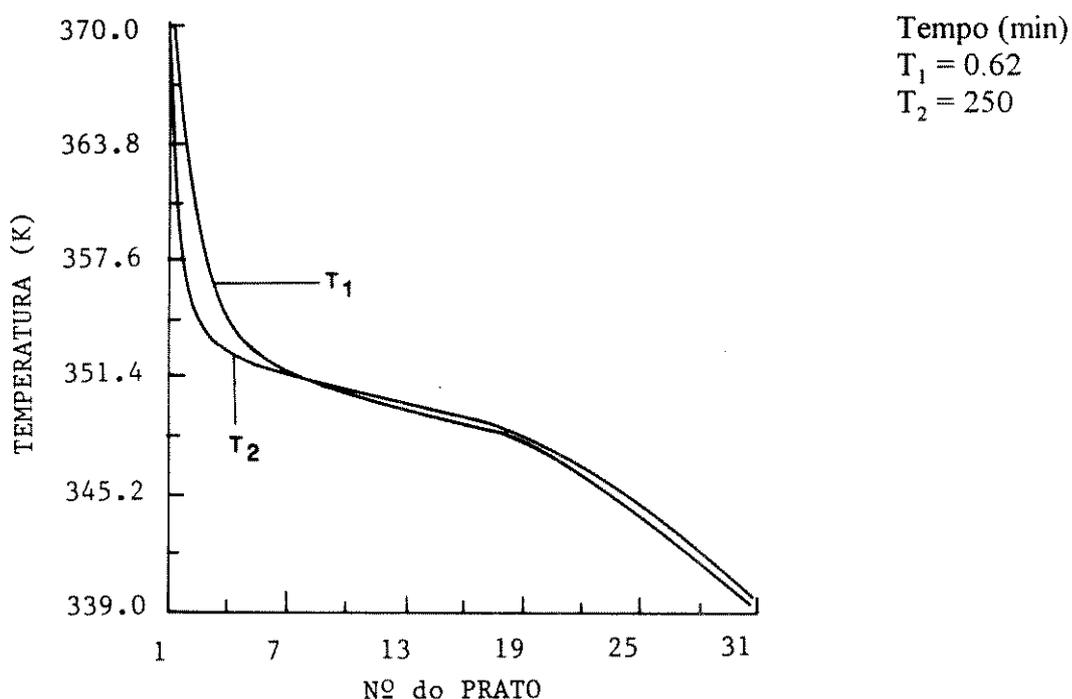


Fig. 4.3a - Transiente de temperatura x número de prato para uma variação de + 20% na vazão molar de alimentação.

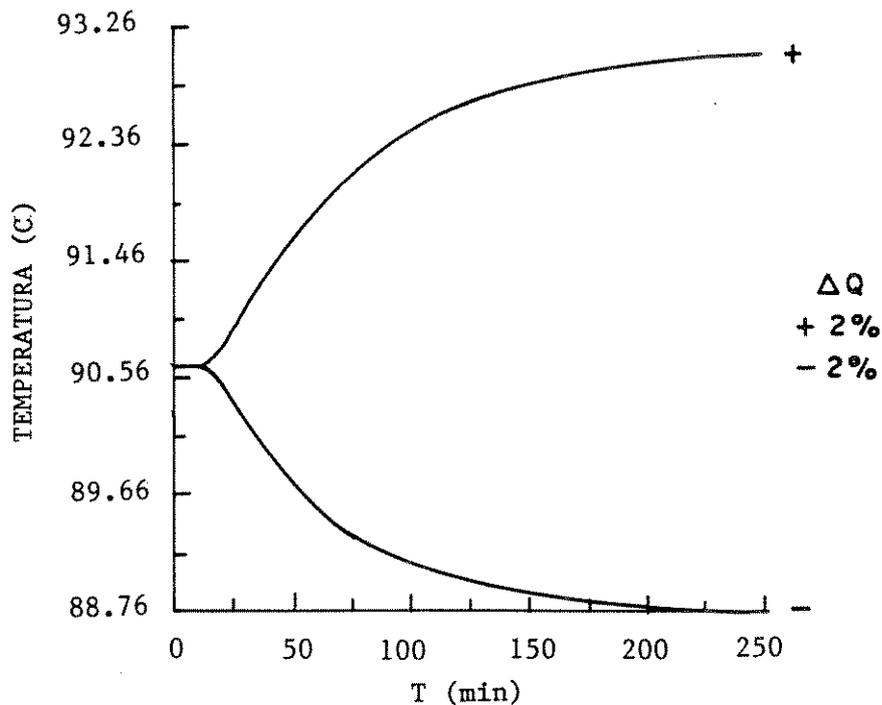


Fig. 4.3b - Temperatura no prato n° 2 x tempo para uma variação de  $\pm 2\%$  na potência térmica do refervedor.

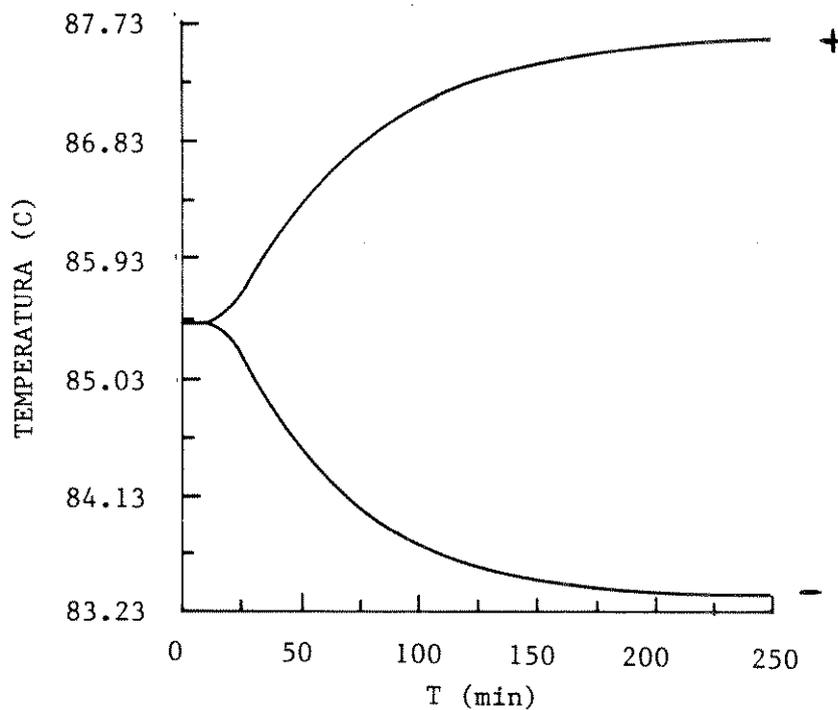


Fig. 4.3c - Temperatura no prato n° 3 x tempo para uma variação de  $\pm 2\%$  na potência térmica do refervedor.

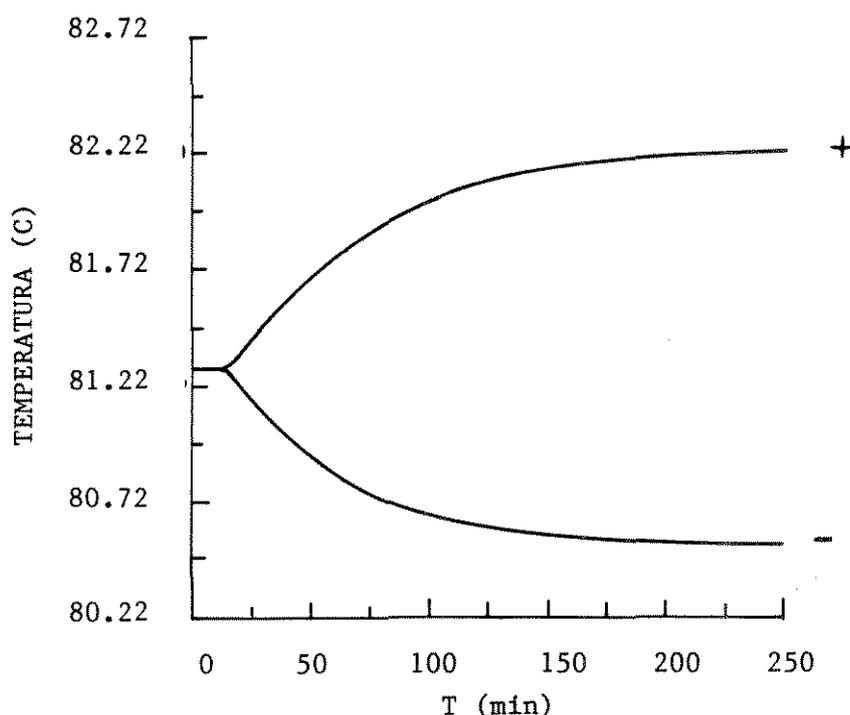


Fig. 4.3d - Temperatura no prato nº 4 x tempo para uma variação de  $\pm 2\%$  na potência térmica do refeedor.

Escolhido o prato e seguindo o método de Cohen e Coon com ajuste dos parâmetros pelo método citado (operando on-line), a Tabela 4.6 apresenta a sintonia dos controladores P, PI e PID para a malha da secção inferior da coluna controlador  $T_3 - Q_1$  (variação de  $\pm 2\%$  em  $Q_1$ )

**Tabela 4.6 - Parâmetros de Ajuste do Controlador ( $T_3 - Q_1$ )**

Controlador	$K_p$	$\tau_I$	$\tau_D$
P	-268.20	-	-
PI	-234.62	13.07	-
PID	-351.37	10.69	2.15

As respostas do sistema para uma variação de  $+ 10\%$  na vazão molar da alimentação e com os parâmetros do controlador da Tabela 4.6 são apresentadas nas figuras 4.4a e 4.4b. O comportamento em malha aberta é confrontado com a evolução temporal do processo quando é inserido o controlador projetado. Como observação de caráter geral, pode-se observar nestas figuras que o sistema se demonstra estável; com a variável temperatura sendo controlada dentro dos objetivos da ação do controlador, contudo, da figura 4.4a, nota-se que o controle inferencial da composição não é plenamente atingido, havendo um 'off-set' na composição. Este off-set é devido ao sistema de controle ser intrinsecamente multivariável e considerando ainda o fato da pressão na coluna não ser mantida constante,

visto que o topo da coluna (controle de pressão por manipulação da taxa de calor retirada no condensador) encontra-se em malha aberta, portanto se a dinâmica de pressão da coluna não for considerada o controle da temperatura não implica necessariamente no controle da composição de uma forma inferencial.

Interessante observar que essa estratégia de controle é bastante usual na literatura, e ainda com os controladores sendo projetados através de modelos simplificados do processo, isto é, modelos que não consideram a dinâmica de pressão na coluna, não sendo detectado portanto 'off-set' no controle de composição no fundo da coluna e conduzindo a situações controladas que não refletem a realidade do processo. Modelos mais simples são incapazes de prever esse comportamento. Logo, esse é um forte indício da robustez e potencial do modelo desenvolvido.

Os comportamentos dos controladores PI e PID para esse caso, são praticamente semelhantes (Fig. 4.4a e 4.4b).

A Figura 4.4c apresenta uma análise comparativa do desempenho do controlador PID quando a sintonia dos parâmetros do controlador é feita para diferentes valores de variação da taxa de calor fornecida ao refeedor ( 2 e 8%, respectivamente). Observa-se da Figura 4.4c o melhor desempenho do controlador com ajuste dos parâmetros para pequenas variações (2%) da variável manipulada, não apresentando oscilação e reduzindo o problema de estabilidade da resposta, o que confirma a teoria de Cohen e Coon recomendando que a sintonia dos parâmetros seja desenvolvida para pequenas variações (Stephanopoulos - 1984). A resposta controlada da coluna, utilizando parâmetros do controlador sintonizados a partir de variações inferiores a 2% (1 e 0,5%), praticamente foram coincidentes.

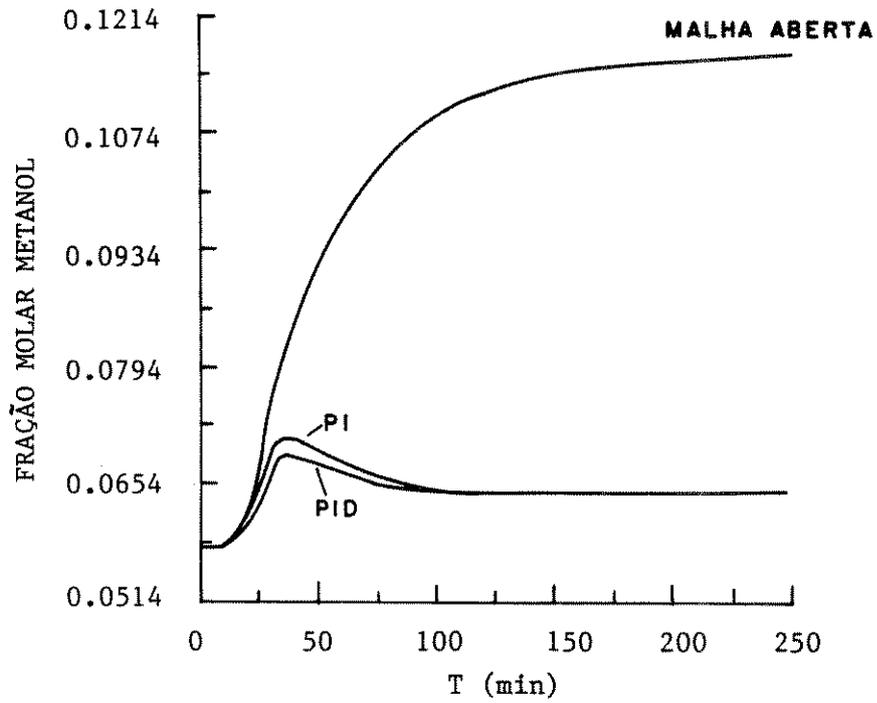


Fig. 4.4a - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de + 10% na vazão molar da alimentação. Controle de fundo:  $T_3-Q_1$ .

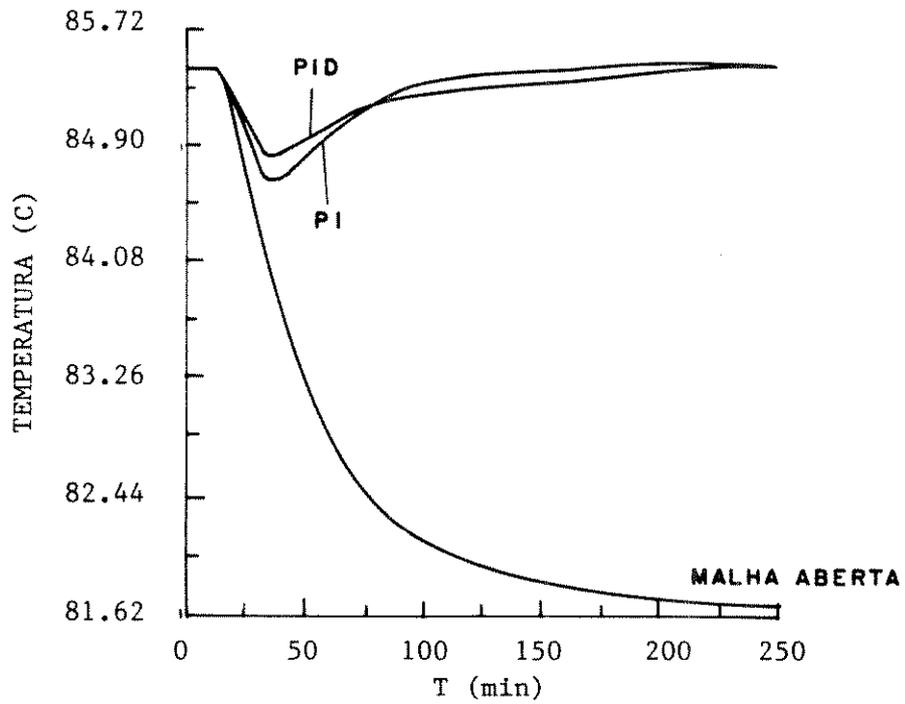


Fig. 4.4b - Temperatura no prato nº 3 x tempo para uma variação de + 10% na vazão molar da alimentação. Controle de fundo:  $T_3-Q_1$ .

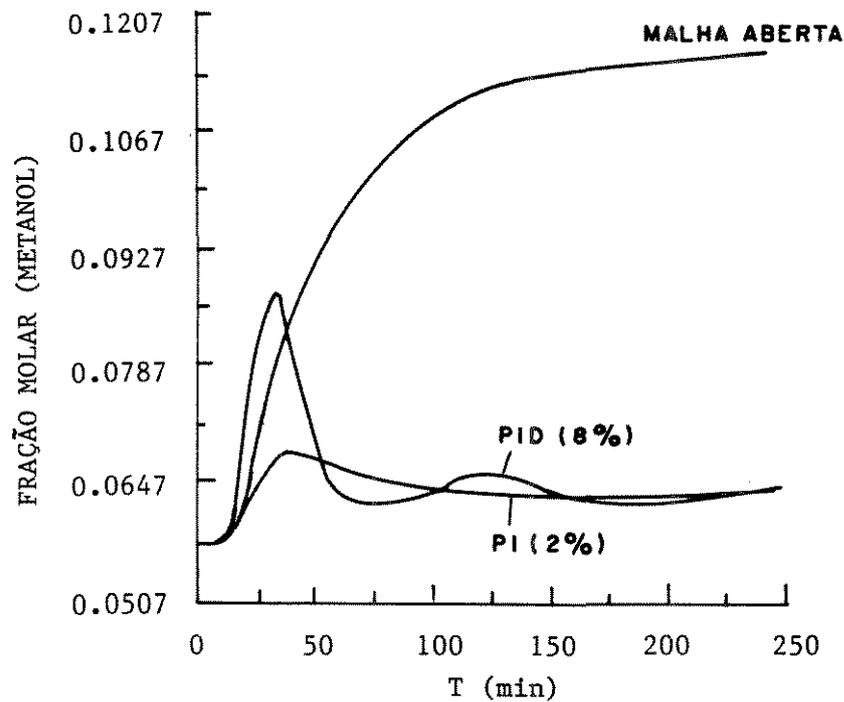


Fig. 4.4c - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de + 10% na vazão molar da alimentação. Controlador ( $T_3-Q_1$ ) projetado para diferentes variações (2 e 8%) na taxa de calor cedida ao refeedor.

#### 4.3.4 - Caso 4 : Controle de composição no fundo (malha de controle $X_B-Q_1$ )

A sintonização dos controladores P, PI e PID para a malha da secção inferior da coluna, malha de controle  $X_B - Q_1$ , utilizando a metodologia e procedimento automático dos exemplos anteriores, é apresentada na Tabela 4.7, a variação considerada é um aumento do tipo degrau na fração de abertura da válvula do fluido de aquecimento correspondente a um aumento na potência térmica do refeedor de 2%, de 8.275 para 8.441 Kw.

Tabela 4.7 - Parâmetros de Ajuste do Controlador ( $X_B - Q_1$ )

Controlador	$K_p$	$\tau_I$	$\tau_D$
P	220.4	-	-
PI	192.2	8.6	-
PID	288.4	7.5	1.8

As respostas do sistema, malha  $X_B - Q_1$  utilizando controladores PI e PID com os parâmetros de ajuste da Tabela 4.7, para uma variação de - 2,5% na composição do mais volátil na corrente de alimentação, são apresentadas nas Figuras 4.5(a-b-c) (a variação quando não especificada é sempre do tipo rampa por 20 minutos a partir de  $t = 10$  min.).

Observa-se da Figura 4.5a que o objetivo da ação de controle para o controlador PID é alcançado. A composição no fundo da coluna é mantida constante em seu valor nas condições de regime estacionário após aproximadamente 120 minutos da ação da carga (-2,5% na composição do metanol da alimentação).

Para o controlador PI, Figura 4.5b, nota-se a princípio uma tendência de oscilação do controlador em torno do 'set-point', sendo que, ao fim de 250 min, a variável controlada não atingiu ainda o seu valor final em regime. Na Figura 4.5c observa-se a estabilidade da ação do controle, com a fração molar do metanol na corrente de fundo da coluna atingindo o valor desejado após aproximadamente 700 min. da ação da carga.

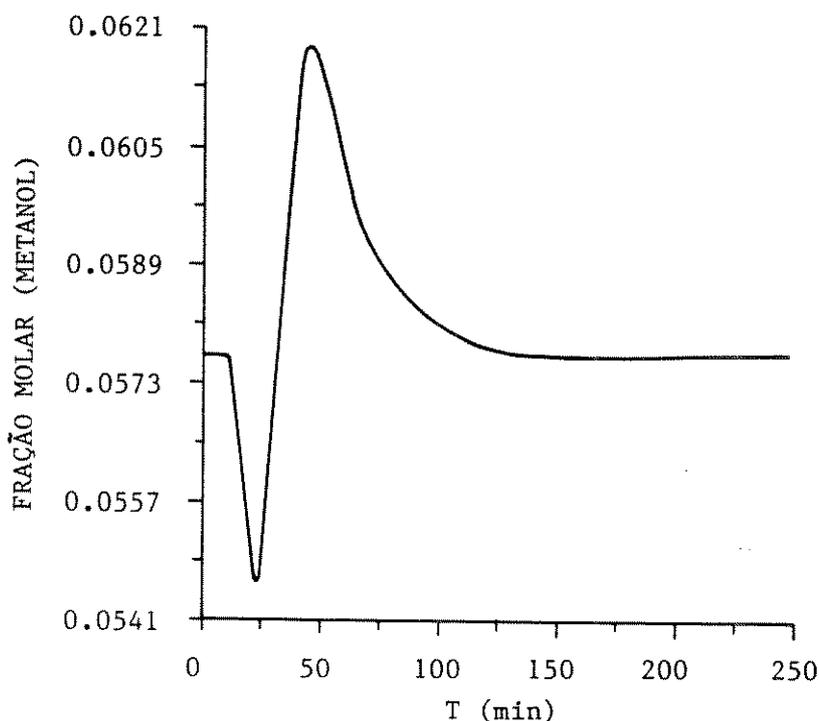


Fig. 4.5a - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de -2,5% na composição molar do metanol da alimentação. Controlador ( $X_B-Q_1$ ), ação de controle PID.

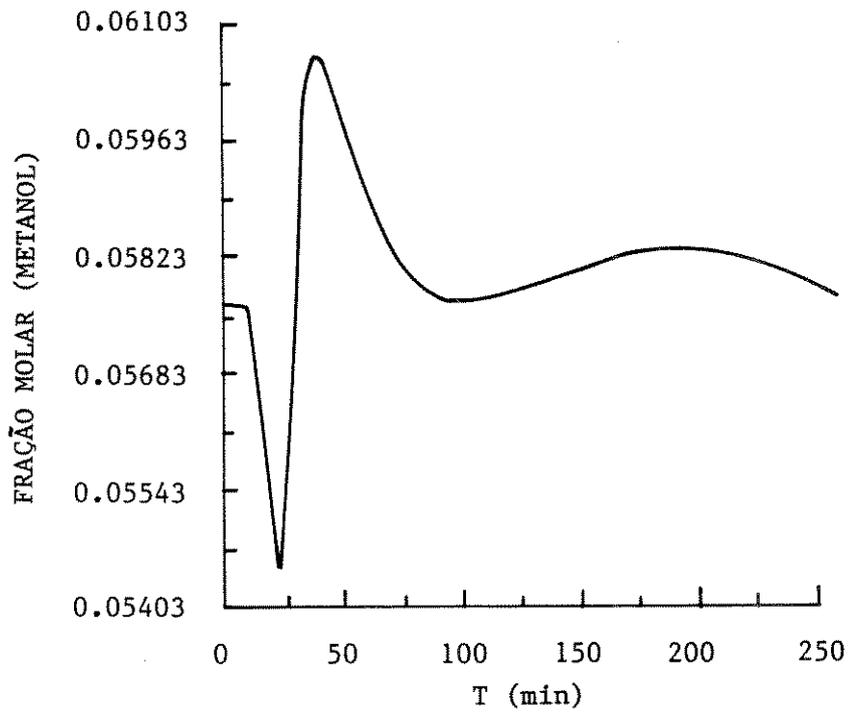


Fig. 4.5b - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de -2,5% na composição molar do metanol da alimentação. Controlador ( $X_B-Q_1$ ), ação de controle PI .

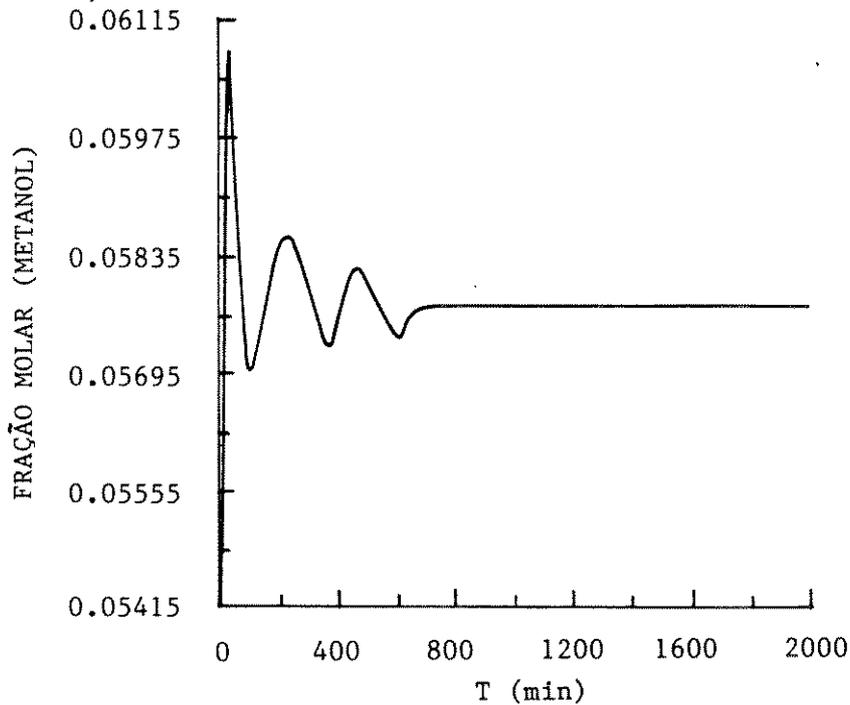


Fig. 4.5c - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de -2,5% na composição molar do metanol da alimentação. Controlador ( $X_B-Q_1$ ), ação de controle PI .

Esses resultados demonstram o melhor desempenho, para a secção de fundo da coluna do controlador ( $X_B - Q_1$ ) quando comparado com o controlador ( $T_3 - Q_1$ ) do caso 3, apresentando um menor comportamento oscilatório e menor tempo de estabilização. O principal inconveniente da utilização do controle direto de composição é quanto ao tempo de atraso nos analisadores de composição, assunto esse que será discutido na sequência desse trabalho.

#### 4.3.5 - Controle dual LV

Do desempenho das malhas de controle analisadas, conclui-se que sistema de controle de composição dual para a coluna metanol/água (Coluna  $C_1$  - Tabela 3.2) utilizará na secção de topo uma malha ( $X_D - L$ ) e na secção de fundo uma malha ( $X_B - Q_1$ ), definindo assim uma configuração de controle dual LV. A figura 4.6a apresenta a estrutura de controle dual assim definida. Considera-se inicialmente essa estrutura de controle dual como sendo do tipo ideal (Nisenfeld A.E. e Seemann R.C., 1981) pois não considera:

- tempo morto na medição das composições;
- grau de interação entre as malhas;
- admite-se ainda que os níveis de topo e fundo e a pressão da coluna são perfeitamente controlados.

As Figuras 4.6(b-c) apresentam a resposta do sistema (fundo/topo) para essa configuração de controle, à ação de diferentes variações:

- A - variação de + 2,5% na composição molar do metanol na alimentação,
- B - variação simultânea de - 5% na vazão molar da alimentação e de + 2,5% na composição molar do metanol e
- C - variação simultânea de + 5% na vazão molar e - 2,5% na composição molar do metanol na alimentação.

Os controladores utilizados são sempre do tipo PID com os valores dos parâmetros dados nas Tabelas 4.3 e 4.7.

Para a configuração do controle dual ideal da Figura 4.6a as Figuras 4.6(b-c) mostram as respostas da composição do metanol. Observa-se que a resposta no topo é mais lenta (aproximadamente 150 min.) do que no fundo da coluna (100 min.), e de caráter oscilatório mais acentuado (curvas A e C). Esse fato é devido a interação entre as diferentes malhas, grau de interação que não foi considerado dentro do enfoque da teoria clássica do controle utilizada no projeto dos controladores multimalha. O enfoque clássico tem como inconveniente:

- a abordagem monovariável não leva em conta a interação entre as malhas. Assim, quando o sistema é inerentemente multivariável, as malhas não funcionam adequadamente;

- exige uma constante atenção do operador para conseguir trabalhar próximo as especificações dos produtos e restrições do sistema. Caso contrário, é necessário trabalhar com uma margem de segurança bastante grande, o que implica em menor eficiência do processo;

Por essas razões, como já se viu, normalmente uma ou mais malhas são colocadas em manual para evitar a desestabilização do conjunto.

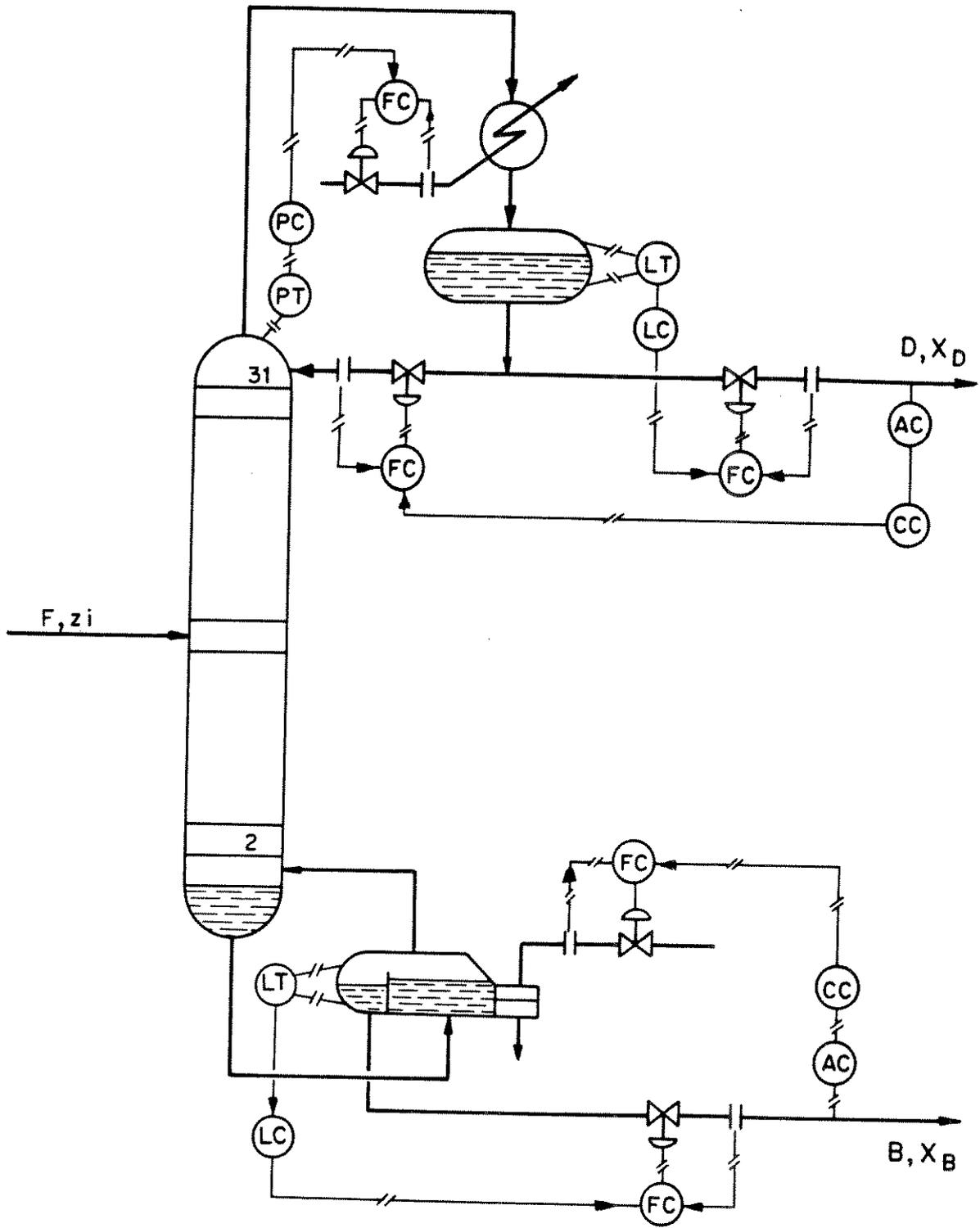


Fig. 4.6a - Configuração do controle dual ideal.

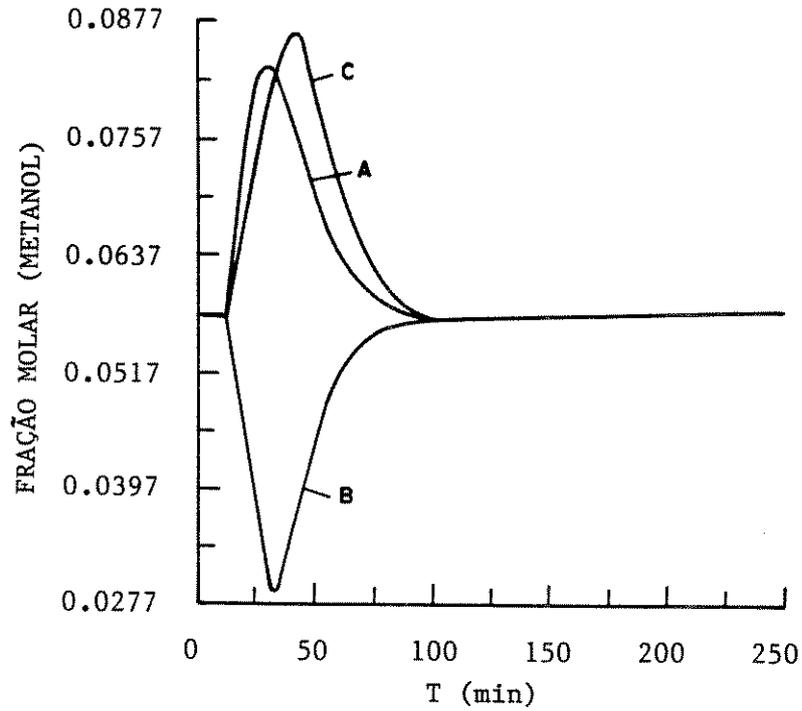


Fig. 4.6b - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para os casos:  
 A - variação de + 2,5% na composição molar do metanol na alimentação,  
 B - variação simultânea de - 5% na vazão molar da alimentação e de + 2,5% na composição molar do metanol e  
 C - variação simultânea de + 5% na vazão molar e - 2,5% na composição molar do metanol na alimentação.

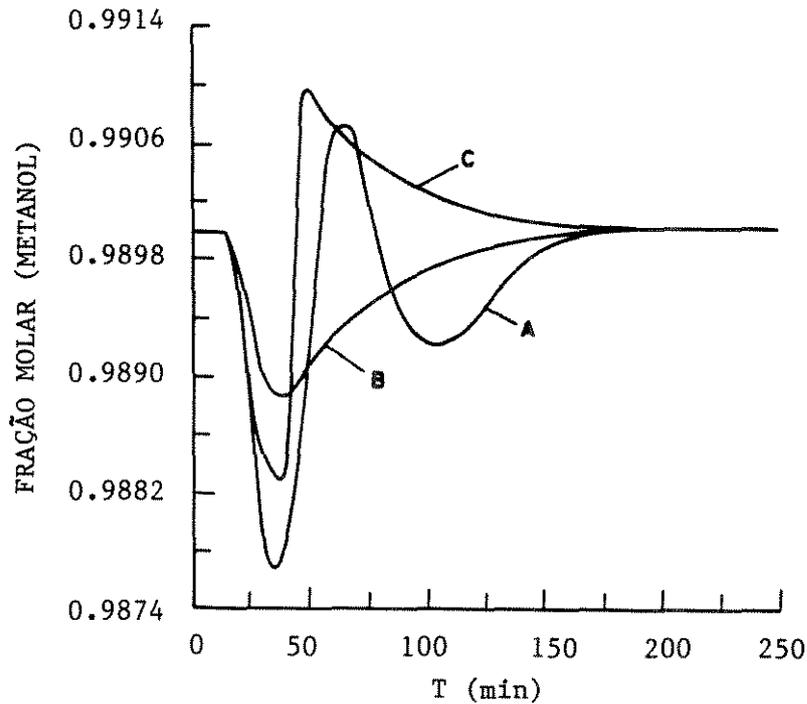


Fig. 4.6c - Fração molar do metanol no destilado x tempo para os casos A, B e C, definidos na Figura 4.6.b, com controle dual (ideal).

Praticamente, as malhas de controle em operação nas colunas de destilação no Brasil seguem a filosofia de controle clássico, onde se enfoca o controle das variáveis do processo individualmente. Cada malha controla apenas uma variável, sem se preocupar com as demais malhas. Essa filosofia de controle, tem alguns aspectos positivos em termos práticos:

- é facilmente entendida pelo pessoal de operação, manutenção, engenharia, etc,
- a partida e sintonia dessas malhas são relativamente simples e padronizadas.

O projeto do sistema de controle multimalha, tendo em consideração o grau de interação e o tempo morto nas medidas é objeto do próximo item.

#### **4.4-Projeto do sistema de controle multi-malha. Interação e desacoplamento.**

##### **4.4.1 - A matriz dos ganhos relativos e a interação entre malhas**

A aproximação certamente mais utilizada para o cálculo da interação entre as malhas de controle é o método da "Matriz dos Ganhos Relativos" (RGA) proposto por Bristol

(1966). A principal vantagem desse método é que a sua utilização é particularmente simples requerendo apenas o cálculo do ganho do processo em regime estacionário. O ganho relativo entre a variável controlada  $y_i$  e a variável manipulada  $m_j$  é representado com o símbolo  $\phi_{ij}$ . Esta quantidade adimensional é matematicamente definida por:

$$\phi_{ij} = \frac{\left(\frac{\delta y_i}{\delta m_j}\right)_m}{\left(\frac{\delta y_i}{\delta m_j}\right)_y} \quad (4.4)$$

A derivada parcial do numerador é determinada para todas as variáveis manipuladas, exceto  $m_j$ , mantidas constantes. Analogamente, a derivada parcial do denominador é obtida mantendo-se constante todas as variáveis controladas exceto  $y_i$ . Esse estado pode ser caracterizado fechando-se todas as malhas de controle do sistema, exceto  $i - j$ . Embora o método da Matriz dos Ganhos Relativos forneça informações úteis, ele despreza a evolução dinâmica do processo, podendo em determinados casos demonstrar-se contra-producente, principalmente nas situações em que as características dinâmicas apresentam-se de fundamental importância na determinação da configuração correta de controle. Consequentemente, foram propostas por diversos autores outras medidas do grau de interação das malhas de controle, as quais consideram as características dinâmicas do processo: Witcher e McAvoy (1977), Tung e Edgar (1981), Gagnepain e Seborg (1982). Todos concordam essencialmente na definição de uma "Matriz Dinâmica do Ganho Relativo" que inclui tanto a análise do tipo estacionário, como as características dinâmicas do processo. Contudo, todos os exemplos reportados nos artigos precedentes referem-se à aplicação no domínio de Laplace ou a modelos dinâmicos simplificados e linearizados. No presente trabalho, tal análise será efetuada utilizando-se o modelo rigoroso desenvolvido no domínio do tempo. Isso permite evitar as simplificações citadas, que como já dito, em muitos casos agem de forma negativa na capacidade preditiva do modelo e em sua confiabilidade na definição de uma política de controle.

Para ilustrar a metodologia usada será utilizada a coluna metanol-água, coluna C1, reportada no Capítulo 3. A configuração de controle é aquela da figura 4.6a. O objetivo do controle é manter a composição do metanol nas correntes de destilado e fundo nas condições nominais de projeto (condições de regime estacionário). As condições operativas principais, assim como as informações de caráter geométrico foram apresentadas na Tabela 3.2.

Do ponto de vista do controle, tem-se 5 entradas (vazão do fluido refrigerante, vazão do destilado e do produto de fundo, vazão de refluxo e potência térmica no refeedor) e 5 saídas controladas (níveis no topo e fundo, pressão, composição topo e fundo). O sistema de controle multi-malha é constituído de três controladores PI e dois PID, sendo:

- controladores PID para o controle de composição dos produtos de topo e fundo. Como analisado anteriormente a ação derivativa é recomendada para aumentar a velocidade de resposta e aumentar a robustez.

- controladores PI para os níveis do acumulador de condensado, fundo da coluna e pressão de topo aplicados para evitar 'off-set' das variáveis controladas em relação aos valores dos 'set-points' (Stephanopoulos, 1984).

O projeto separado de cada malha admite que as raízes da equação característica de cada malha, (Ray, 1983), assumem somente valores reais ou com parte real negativa. Tais raízes são porém diferentes das raízes da equação característica para o sistema global com todas as malhas de controle inseridas. Desse modo, não é possível garantir a estabilidade do sistema quando as diversas malhas de controle são projetadas separadamente e depois operam conjuntamente para constituir uma só estrutura de controle, tornando-se necessária uma análise do comportamento dinâmico do sistema global, para poder verificar a presença de eventuais instabilidades.

Para por em evidência a interação entre malhas na coluna em análise, foi feita a simulação dinâmica da coluna para diferentes situações de controle, e para uma variação simultânea de +10% na vazão de alimentação e de -5% na fração molar da alimentação (tipo rampa por 20 minutos a partir do instante 10 minutos). As Figuras 4.7.a-c mostram a evolução temporal de algumas variáveis do processo para as seguintes situações de controle:

- (A) sem nenhum tipo de controle (resposta em malha aberta da coluna);
- (B) com somente a malha de controle ( $X_D$ -L) fechada;
- (C) com as malhas de controle de pressão (topo), nível (topo) e concentração no destilado fechadas;
- (D) com as malhas de controle de pressão (topo), nível (topo e fundo) e concentração (destilado e fundo) fechadas (controle total).

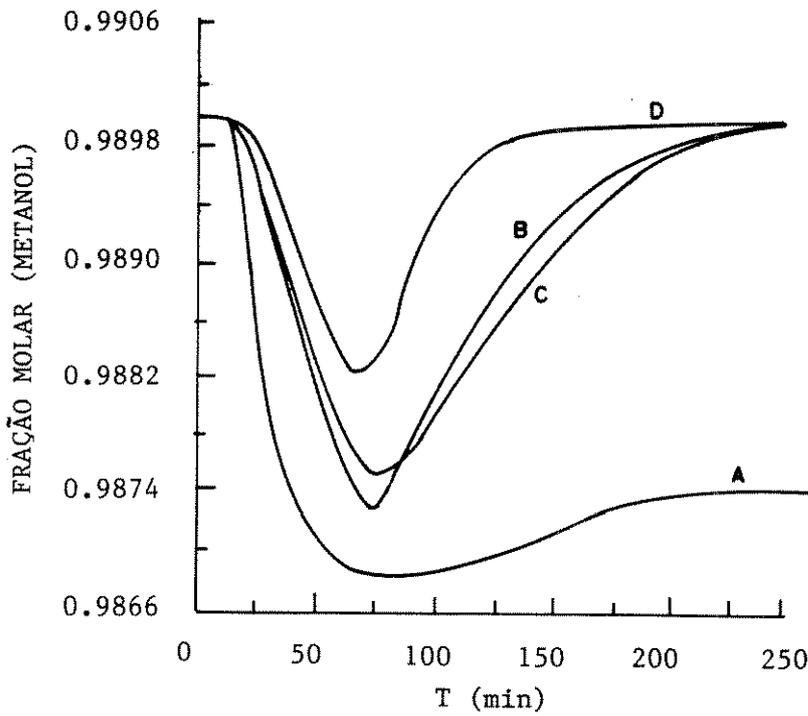


Fig. 4.7a - Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação simultânea de + 10% na vazão molar da alimentação e - 5% na fração molar do metanol na alimentação.

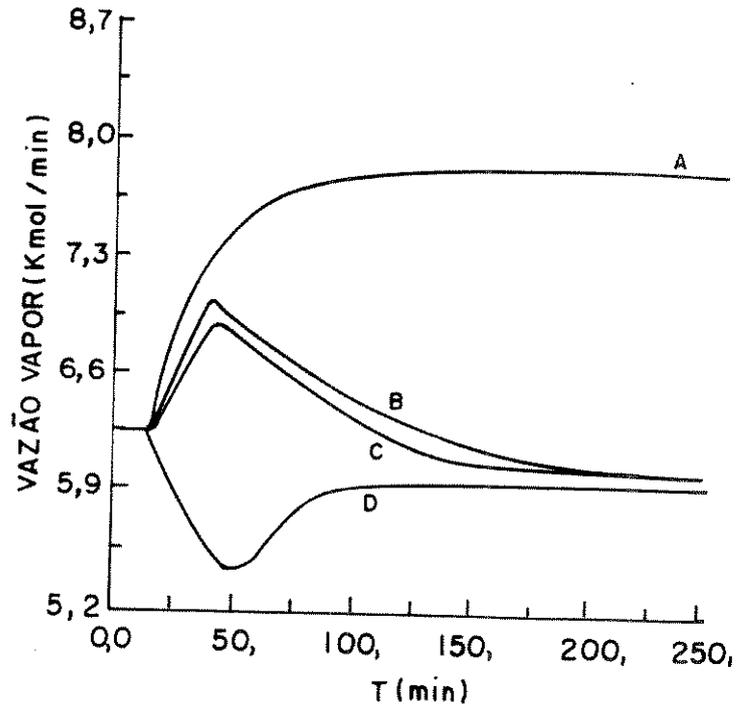


Fig. 4.7b - Vazão molar de vapor na saída do refeedor para a coluna ( $V_1$ ) x tempo (condições da Figura 4.7a)

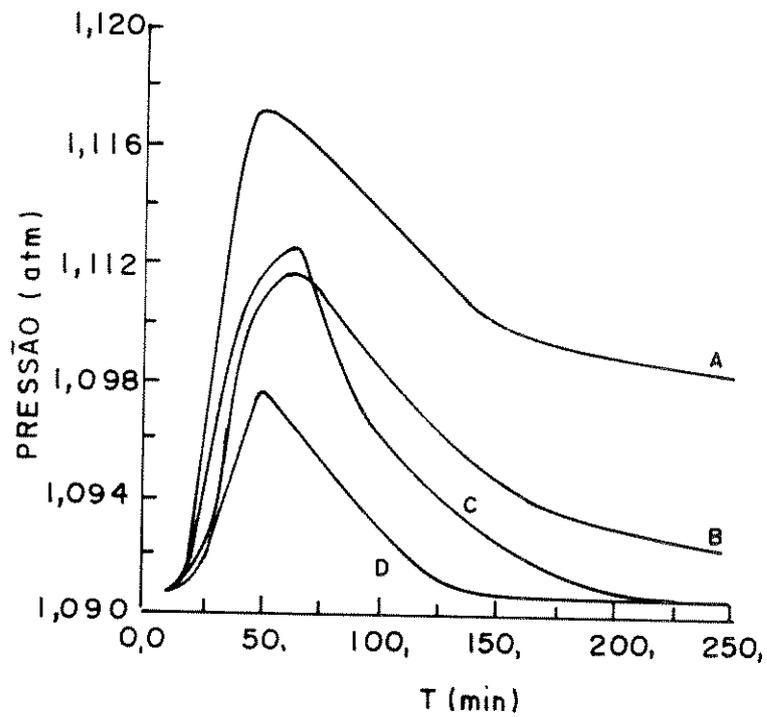


Fig. 4.7c - Pressão no condensador x tempo (condições da Figura 4.7a).

Dessas Figuras pode-se concluir que:

- com todas as malhas de controle ativas no sistema, o processo se comporta como perfeitamente estável, na medida que uma variação limitada nas variáveis de entrada provoca uma variação limitada na variável de saída (Stephanopoulos, 1984);
- o controle dual, com ação derivativa, tem um evidente efeito estabilizante no sistema;
- enquanto que o comportamento dinâmico da coluna para as situações B e C é praticamente o mesmo, ele difere consideravelmente em relação a situação D. Pode-se pois concluir que o fechamento da malha de controle de pressão e nível no topo não tem grande influência sobre a dinâmica do sistema, enquanto que as malhas de controle de composição de topo e fundo levam a uma forte interação na resposta da coluna.

Para analisar o grau de interação entre as malhas de composição topo/fundo recorre-se como se disse, à correspondente Matriz Dinâmica do Ganho Relativo (RDA). Utilizando o modelo rigoroso de simulação, esta matriz pode ser calculada da seguinte maneira:

- (a) impor uma pequena variação em degrau na variável manipulada  $m_j$  mantendo todas as outras variáveis manipuladas constantes e com todas as malhas abertas. Memorizar o correspondente transitório da variável controlada  $y_i$ .
- (b) levar o sistema a condição estacionária de partida e impor uma variação do mesmo valor na variável manipulada  $m_j$  mantendo constantes todas as variáveis controladas, exceto  $y_i$ , ou seja, fechando todas as malhas de controle (exceto  $i - j$ ) Registrar o transitório da variável controlada  $Y_i$ .
- (c) calcular em cada instante a relação:

$$\phi_{i,j} = \frac{\left( \frac{y_i - y_i^{set}}{\Delta m_j} \right)}{\left( \frac{y_i - y_i^{set}}{\Delta m_j} \right)} = \frac{(y_i - y_i^{set})_{todas.as.malhas.abertas}}{(y_i - y_i^{set})_{todas.as.malhas.fechadas,exceto\ i-j}} \quad (4.5)$$

onde  $y_i^{set}$  é o valor do set point da variável controlada e  $\phi_{i,j}$  constitui o ganho relativo de tais variáveis calculadas em função do tempo.

As Figuras 4.8(a-b) mostram a resposta da coluna para a configuração de controle dual definida anteriormente. Em cada transitório a variação agindo no sistema é um pequeno degrau de +2% na variável manipulada em exame, no instante 10 minutos.

Dessa forma, para a Figura 4.8a, onde a variação é um aumento em degrau na fração de abertura da válvula, correspondente a uma variação de +2% na vazão de refluxo do topo da coluna, as respostas A e B correspondem aos casos em que se tem:

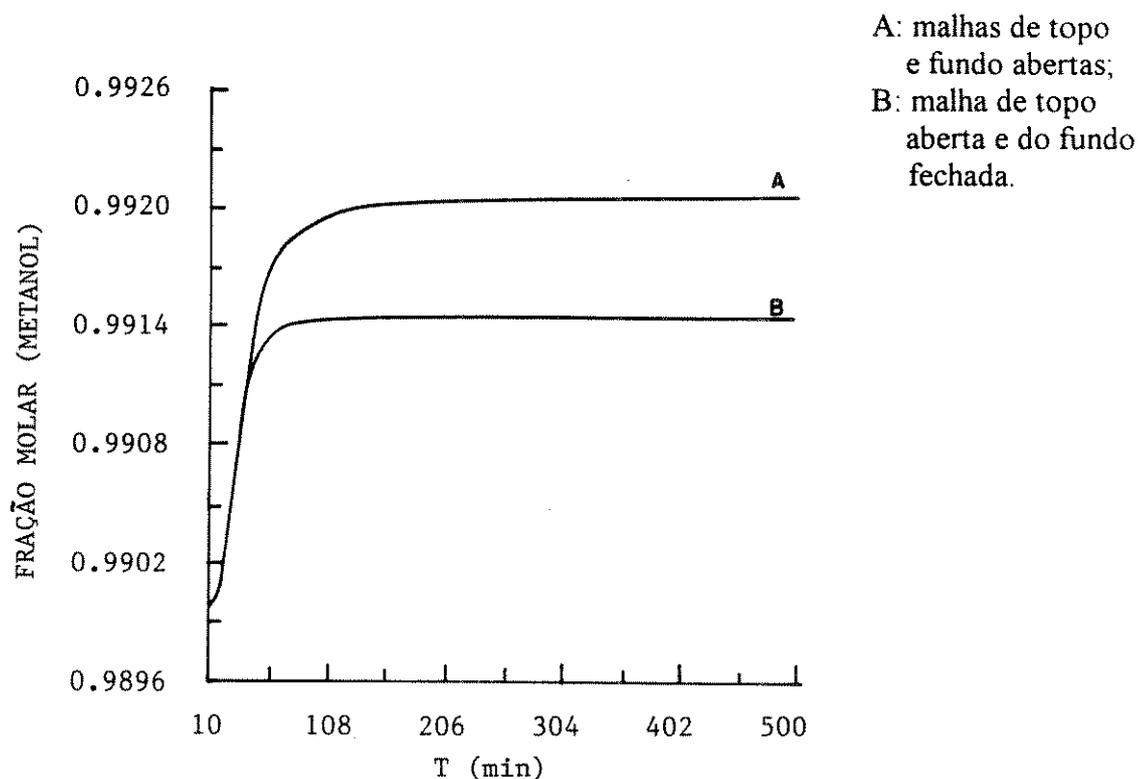


Fig. 4.8a - Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação degrau na fração de abertura da válvula, correspondente a uma variação de + 2% na vazão de refluxo da coluna. Análise dinâmica da interação.

Analogamente, para a Figura 4.8b (degrau de + 2 % na taxa de calor fornecida ao refeedor) tem-se:

C: malhas de topo e fundo abertas;

D: malha de topo fechada e do fundo aberta.

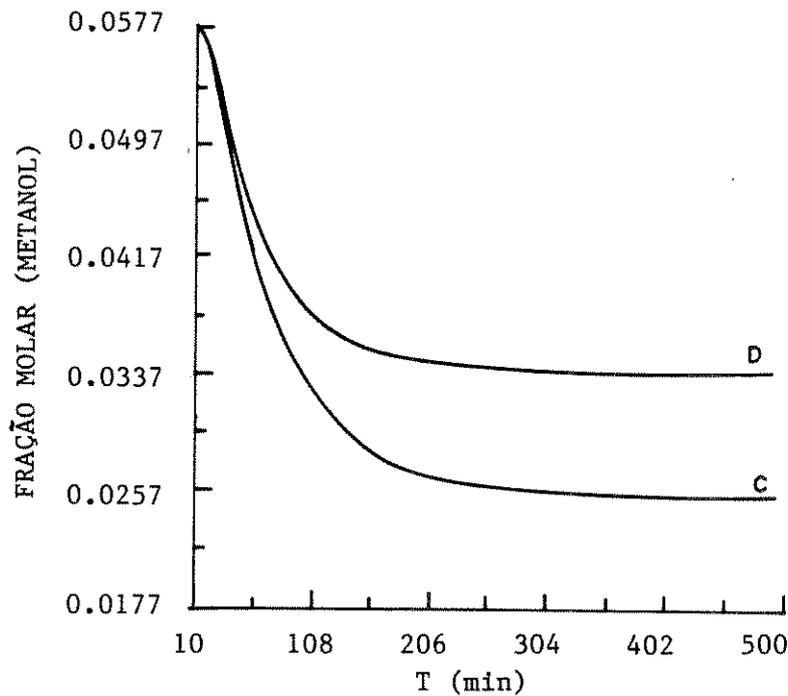


Fig. 4.8b - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação degrau na fração de abertura da válvula, correspondente a um degrau de + 2 % na taxa de calor fornecida ao refeedor. Análise dinâmica da interação.

Das Figuras 4.8(a-b) é possível calcular o ganho relativo em função do tempo, segundo a equação (4.5). A Figura 4.8c (curvas E e F) apresenta a evolução temporal da matriz RDA para a coluna  $C_1$ . O ganho relativo, que inicialmente é pequeno, após cerca de 200 minutos atinge um valor elevado e constante. A curva E para manipulação de 2% na taxa de calor cedida ao refeedor e a curva F para manipulação de 2% na vazão de refluxo.

É interessante observar o comportamento do grau de interação (utilizando como parâmetro de medição a matriz RDA), à medida que a pureza do destilado é aumentada. Neste sentido, a figura 4.8d mostra a evolução temporal da matriz RDA para a coluna de maior pureza, coluna C2 (Tabela 3.2).

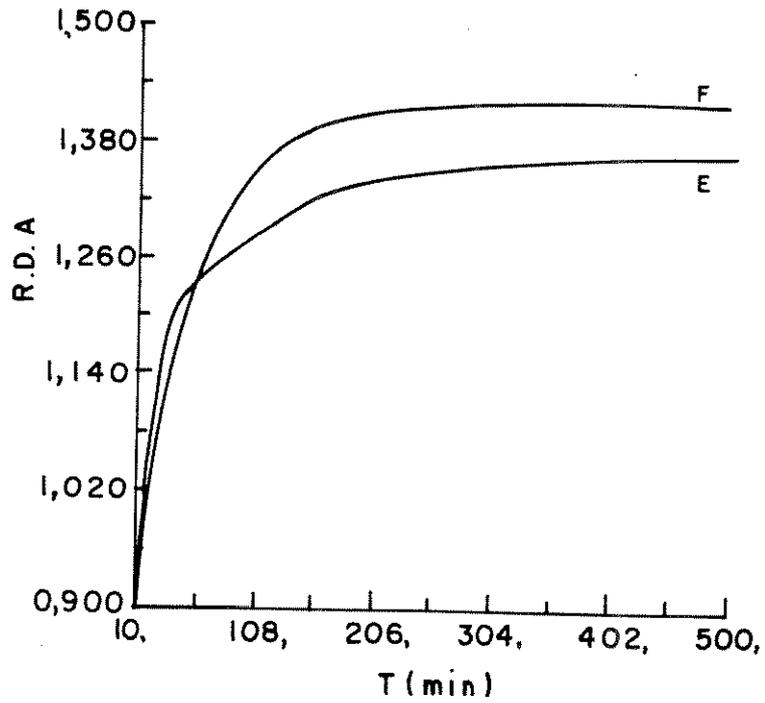


Fig. 4.8c - Matriz dinâmica do ganho relativo para coluna C<sub>1</sub>.

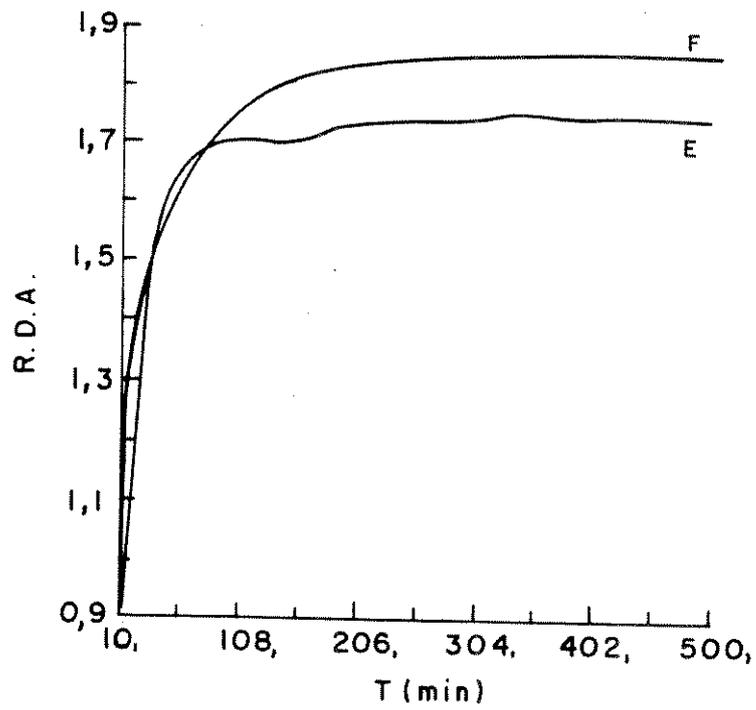


Fig. 4.8d - Matriz dinâmica do ganho relativo para a coluna C<sub>2</sub>.

Das Figuras 4.8(c-d) conclui-se que a interação no controle dual ideal, entre as malhas de controle de composição no topo e fundo da coluna, aumenta com o grau de pureza do produto.

A interação entre malhas de controle, estudada através dos Ganhos Relativos, pode ser evidenciada de várias outras maneiras. Assim, por exemplo, a figura 4.8e mostra a resposta da composição de fundo, a um aumento de 10% na vazão da alimentação, para duas configurações de controle (com os níveis do refeedor e do tambor de refluxo e pressão da coluna sendo perfeitamente controlados, respectivamente por  $D$ ,  $B$  e  $Q_{ns}$ ):

- (i) controle LV com as duas malhas fechadas;
- (ii) malha de topo aberta e malha ( $X_B-Q_1$ ) de fundo fechada.

Analogamente e com as mesmas considerações a Figura 4.8f mostra a variação da composição de topo para duas situações diferentes de controle e para a mesma variação de +10% na vazão da alimentação:

- (i) controle LV com as duas malhas fechadas;
- (ii) malha de fundo aberta e malha ( $X_D-L$ ) de topo fechada.

Como se pode observar por estas Figuras, a resposta do sistema depende da configuração do controle (duas malhas x uma malha operando), o que demonstra a existência de uma forte interação entre as malhas de controle de composição, confirmando as conclusões obtidas anteriormente.

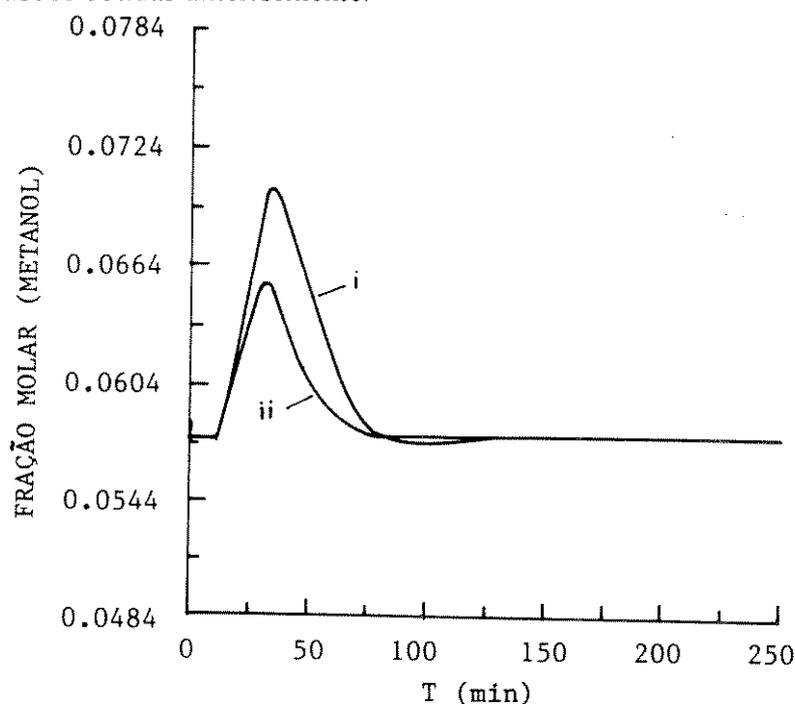


Fig. 4.8e - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de +10% na vazão molar de alimentação. Grau de interação.

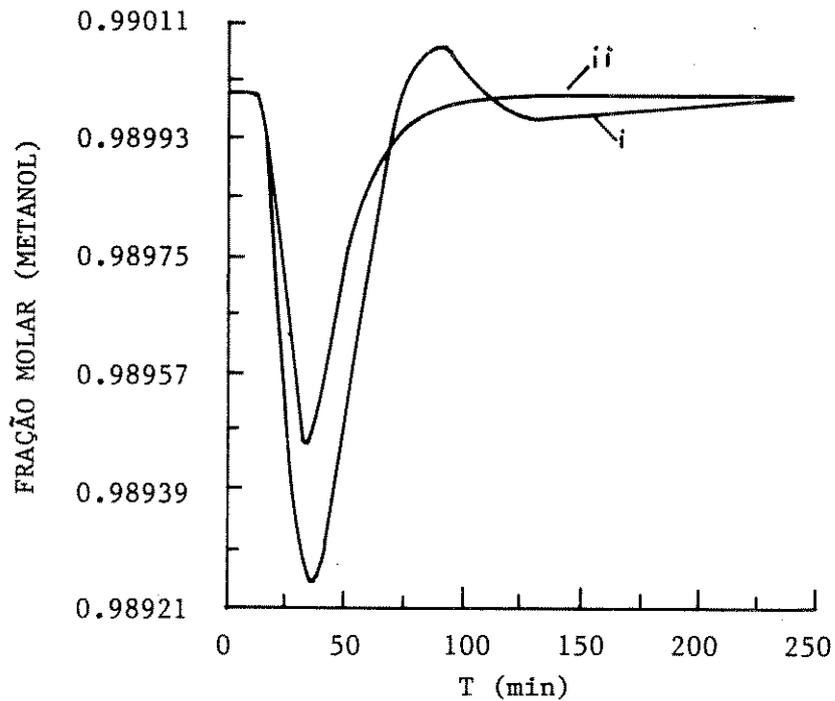


Fig. 4.8f - Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de + 10% na vazão molar de alimentação. Grau de interação.

#### 4.4.2 - Desacoplamento entre as malhas

A interação observada entre as malhas de topo e fundo da coluna é devido ao fato de que a ação de regulação da malha de topo desregula a saída da malha de fundo, esta por sua vez toma uma ação de controle para compensar a variação em sua saída controlada, gerando ao mesmo tempo uma variação na saída da malha de topo, esta interação entre malhas é uma característica típica dos sistemas de controle multivariável. Uma maneira de se reduzir a interação entre malhas consiste em adicionar ao esquema de controle os chamados desacopladores, que como descritos em Seborg et al (1988) podem ser considerados como controladores feedforward simples, na medida em que a variável manipulada de uma malha aparece como perturbação para a outra malha.

A forma mais simples de um desacoplador é a unidade lead-lag. Rovaglio et al (1990) sugerem para reduzir a interação entre as malhas de topo e fundo no controle dual LV a seguinte função desacopladora derivada de uma estrutura lead-lag (Apêndice H):

$$\delta Q_1 = K_d(\tau_2/\tau_1 \delta L_{(t)} + 1/\tau_1(1-\tau_2/\tau_1) \int_0^T \delta L_{(t)} \exp((t-T)/\tau_1) dt \quad (4.6)$$

onde  $\tau_1$  é a constante de atraso (lag) e  $\tau_2$  representa a constante de tempo de antecipação (lead). Esta função utiliza a variação da vazão de refluxo  $\delta L$  como entrada e fornece como saída a quantidade que é necessário variar a potência térmica  $\delta Q_1$  do refeedor instante por instante, para cancelar o efeito da presença da malha de controle de topo ( $X_D-L$ ). Este elemento dinâmico é chamado de desacoplador em uma direção ("one-way" ou parcial) e pode "cancelar" os efeitos de uma malha de controle sobre a outra, mas não vice-versa. Uma representação esquemática do sistema de controle incluindo o desacoplador é apresentada na Figura 4.9. Utilizando a técnica da Matriz Dinâmica do Ganho Relativo, a função de desacoplamento pode ser identificada (parâmetros  $K_d, \tau_1, \tau_2$ ) impondo que a curva "D" da figura 4.8b se sobreponha a curva "C" da mesma Figura. Isto significa obter um valor de ganho relativo sempre igual a 1 e portanto, teoricamente, um desacoplamento ideal. Na prática desvios do modelo não permitem obter "em campo" tais situações ideais.

Selecionado o tipo do desacoplador, função 4.6, o valor de seus parâmetros internos são ajustados por regressão não linear (Himmelblau M. et al, 1985), de tal forma a minimizar:

$$L = \int_0^{\infty} (\phi_{i,j} - 1)^2 dt. \quad (4.7)$$

A Figura 4.10 mostra um exemplo possível de desacoplamento entre as malhas de controle do topo e fundo da coluna. Os correspondentes valores dos parâmetros da função desacopladora são respectivamente:  $K_d = 10^3 \text{ kcal.kmol}^{-1}$ ,  $\tau_1 = 2.7 \text{ min}$  e  $\tau_2 = 0.8 \text{ min}$ .

A curva "E" da Figura 4.10 é obtida impondo, como anteriormente, uma variação em degrau, no instante 10 min, na fração de abertura da válvula do fluido de aquecimento correspondente a uma variação na potência térmica do refeedor de + 2%, enquanto sobre o sistema age o controle de composição no topo da coluna e o desacoplador. A Figura 4.10 demonstra que, a influência do controlador de composição do topo, no valor final da composição no fundo da coluna é reduzida com a presença do desacoplador, reduzindo assim a interação topo/fundo e com o ganho relativo assumindo valores muito próximos de 1. Posteriores aperfeiçoamentos do comportamento do desacoplador, durante o transitório dinâmico, pode ser obtido através de um maior refinamento da constante de tempo  $\tau_1$  e  $\tau_2$ .

A análise feita no item 4.3, a propósito da sintonização dos controladores, sugere ainda um método simples de reduzir a interação entre malhas, sem recorrer à introdução de desacopladores.

Com efeito, suponhamos que se pretende reduzir a interação da malha de topo sobre a malha de fundo. Isso pode ser conseguido se a sintonização do controlador da malha de fundo for baseada em uma curva de reação do processo obtida com a malha de topo fechada. Adaptando este procedimento, o controlador PID da malha de fundo da

configuração LV foi resintonizado pelo método de Cohen-Coon. A curva C da Figura 4.10a mostra a resposta da composição do metanol no fundo da coluna, com o controlador assim sintonizado, ou seja tendo em consideração a interação da malha de topo sobre a malha de fundo. Esta resposta é comparada na Figura 4.10a com duas simulações diferentes, a primeira (curva A) representa a resposta controlada do fundo da coluna sem considerar o desacoplador parcial definido pela função 4.6, e a segunda (curva B) a resposta com a presença do desacoplador parcial entre as malhas de topo e fundo. Como se observa, o controlador (curva C) apresenta um maior desempenho (menor sobre-elevação) quando comparado com o controlador sintonizado sem considerar a interação (curva A) e um menor desempenho quando comparado com a estrutura de controle que considera o elemento desacoplador parcial. É claro, contudo, que o desacoplamento obtido pode ainda ser considerado como insatisfatório, dentro do grau de pureza desejado da coluna.

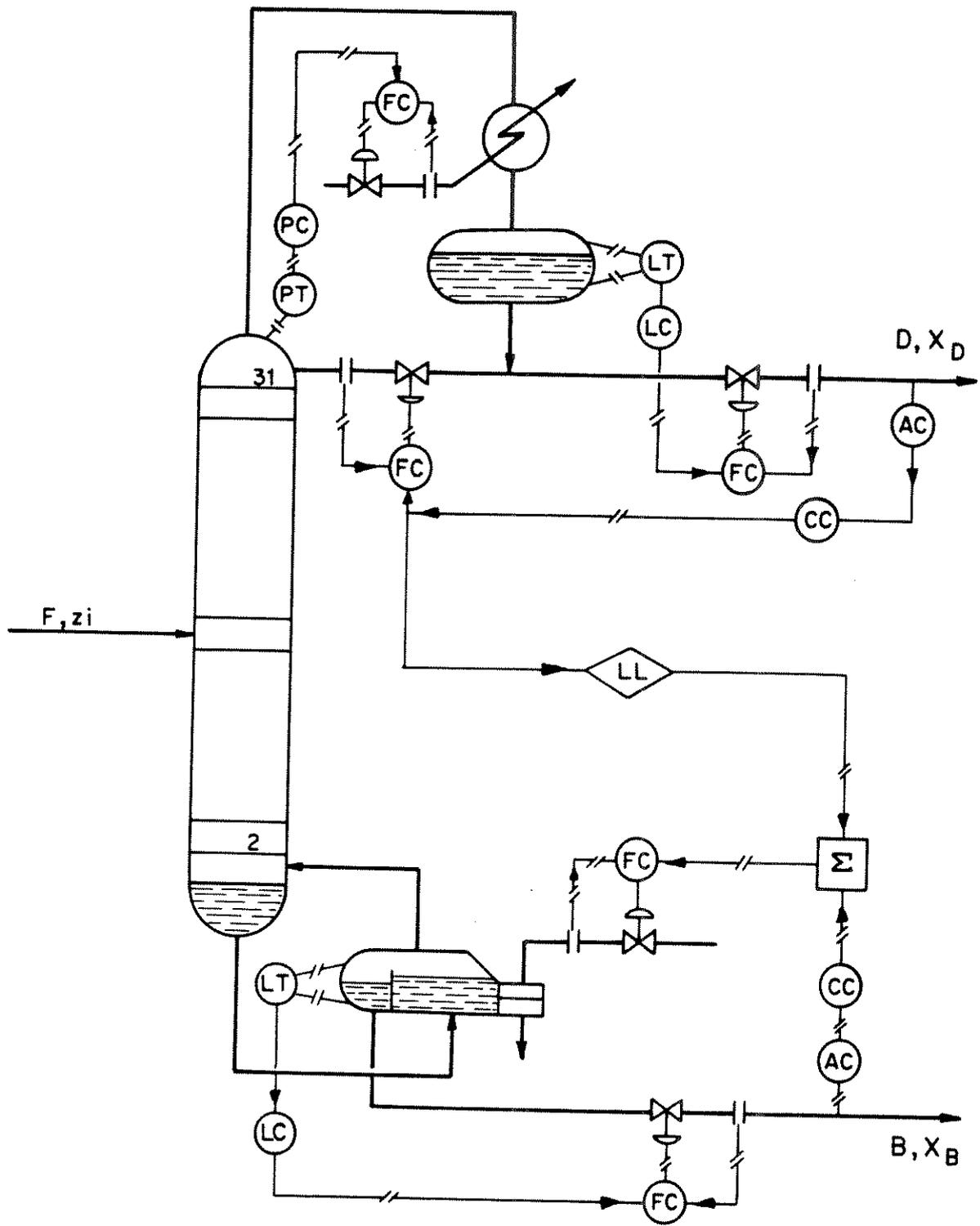


Fig. 4.9 - Configuração do controle dual com desacoplamento parcial.

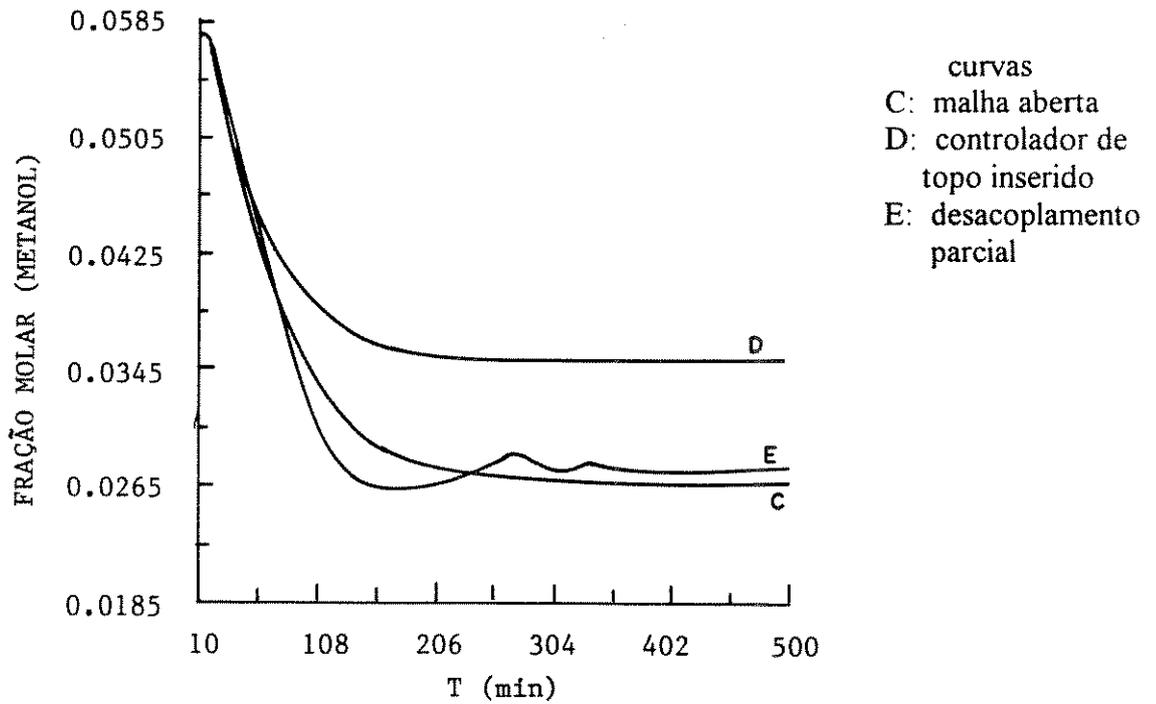


Fig. 4.10 - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de +2% na taxa de calor cedida ao refeedor. Desacoplamento parcial.

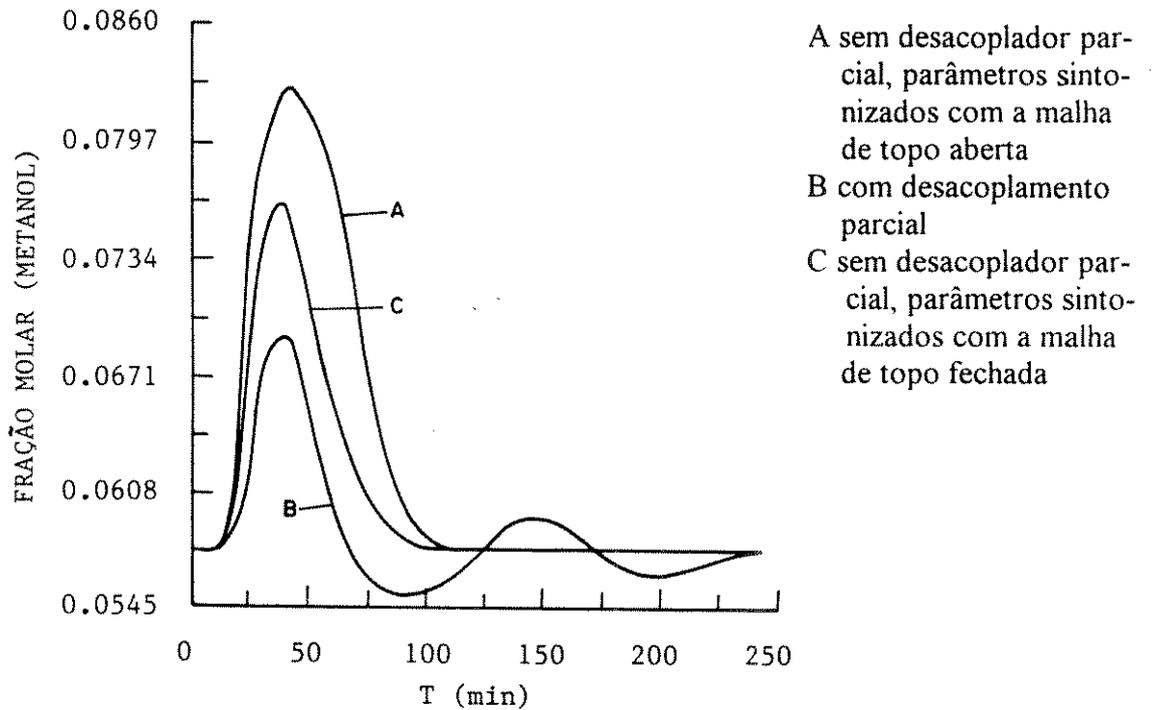


Fig. 4.10a - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de +2.5% na composição do metanol na corrente de alimentação.

#### 4.5 - Controle dual LV em presença de tempo morto

O tempo morto é um elemento importante na modelagem matemática de processos químicos, apresentando enorme influência no projeto dos controladores. A presença de tempo morto pode muito facilmente desestabilizar o comportamento dinâmico do sistema controlado (Stephanopoulos, 1985). Este ítem busca a inclusão do tempo morto, ao controle dual LV aplicado à destilação metanol-água.

A consideração de um tempo morto é bastante útil para a configuração de controle dual aqui estudada, onde tem-se analisadores de composição nas malhas de topo ( $X_D-L$ ) e fundo ( $X_B-Q_1$ ) da coluna. Esses instrumentos, além de apresentarem um alto custo e difícil manutenção apresentam normalmente um tempo morto elevado, Harriot (1974).

De uma maneira geral a inclusão de um tempo morto é interessante quando o atraso dentro da malha é significativo a ponto de comprometer o desempenho da malha regulatória normal. Basicamente, a estratégia é deslocar o tempo morto para fora da malha, fazendo com que o controlador possa ser ajustado como se não houvesse tempo morto e, portanto, melhorando o comportamento da malha.

A Figura 4.11a apresenta a resposta do controle dual com inclusão de tempo morto (curva i), o tempo morto considerado é de 2 minutos para as malhas de topo e fundo, e sem inclusão de tempo morto (curva ii), para uma variação de +2,5% na composição do metanol na corrente de alimentação da coluna  $C_1$ . Com um tempo morto de 2 minutos a Tabela 4.8 apresenta os parâmetros de sintonia para os controladores de topo e fundo da coluna. Como mostra a Figura 4.11a, a introdução de um tempo de atraso nas malhas de controle de composição no topo e no fundo degrada significativamente o desempenho do sistema de controle dual (curva i), quando comparado com o controle na ausência de tempo morto (curva ii).

A Figura 4.11b mostra a resposta do controle dual para duas situações, a primeira considera um tempo morto de 2 minutos (curva i) somente em um ponto, ou seja para a malha de topo da coluna e a segunda sem inclusão do tempo morto em ambas as malhas (curva ii), para a mesma variação da Figura anterior.

Análise comparativa entre as Figuras 4.11(a-b) demonstram o melhor desempenho do controlador, maior estabilidade, quando o tempo morto é considerado somente na malha de controle de topo da coluna (curva i - Fig. 4.11b), o que demonstra a dificuldade de controle associada a malha ( $X_B-Q_1$ ).

Tabela 4.8 Parâmetros de ajuste dos controladores de topo e fundo com um tempo morto de dois minutos.

controlador	PID	malha de topo	malha de fundo
$K_p$		-11.82	823.78
$\tau_i$		0.40	2.55
$\tau_D$		0.06	2.82

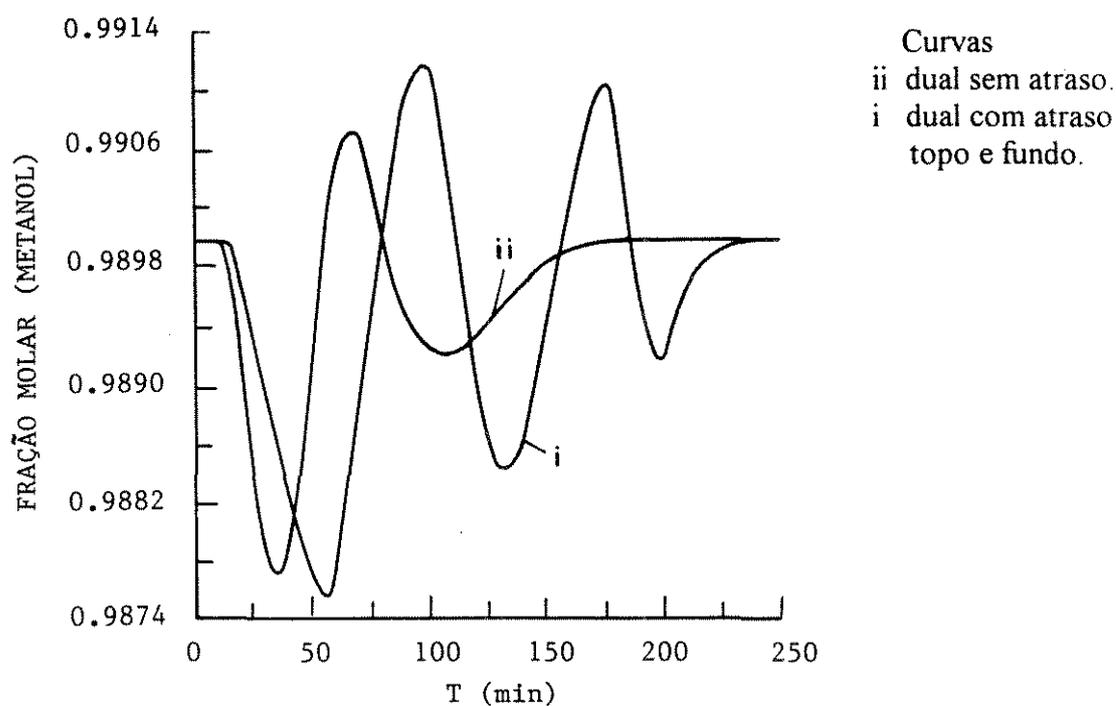


Fig. 4.11a - Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de +2,5% na composição molar do metanol da alimentação. Controle dual sem e com inclusão de tempo morto em ambas as malhas topo e fundo.

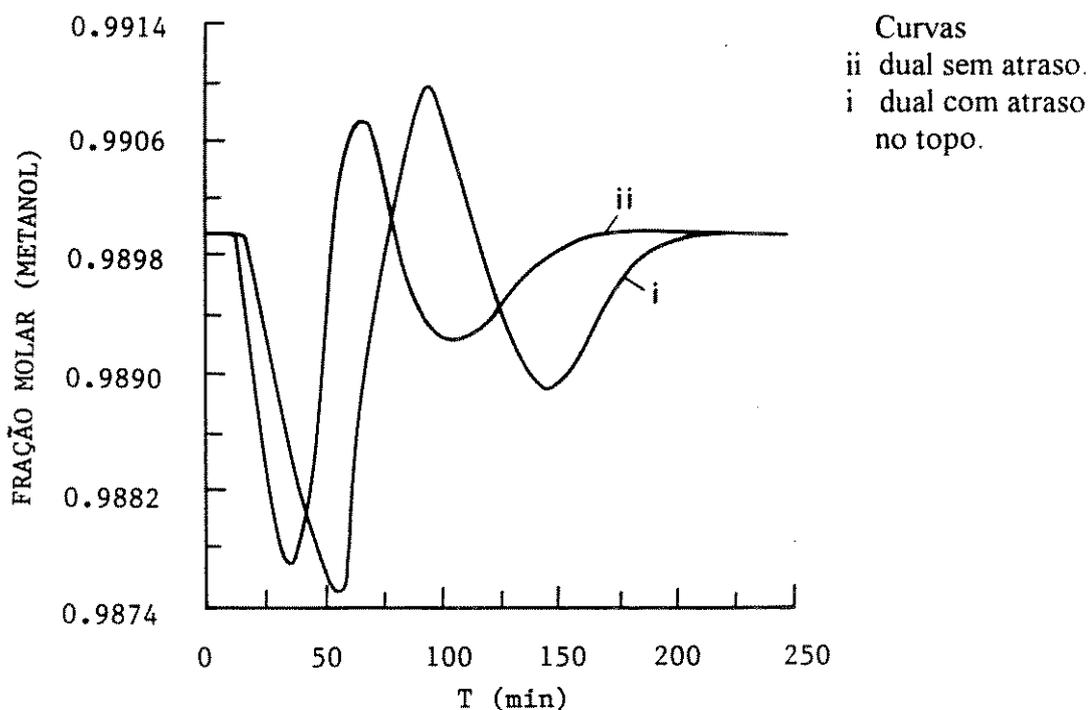


Fig. 4.11b - Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de +2,5% na composição molar do metanol da alimentação. Controle dual com inclusão de tempo morto somente na malha topo.

#### 4.5 - Outras técnicas de controle avançado

A análise feita anteriormente revela as dificuldades associadas ao controle dual LV clássico, dificuldades estas que se traduzem por um desempenho pouco satisfatório do sistema de controle. Os métodos clássicos de desacoplamento permitem melhorar a situação, dentro de determinados limites, mas como se viu, a resposta das variáveis  $X_D$  e  $X_B$  apresentam sobre-elevação e uma dinâmica pouco adequada aos objetivos da operação da coluna de alta pureza. Ressalte-se ainda, o fraco desempenho do controle dual, quando é considerado a inclusão de um tempo morto de 2 minutos nas malhas de topo e fundo da coluna. Um maior desempenho do controle dual é obtido quando não é considerado tempo morto na malha de fundo da coluna., acentuando desta forma maiores dificuldades associadas a estabilidade da malha de controle ( $X_B-Q_1$ ).

Objetivando melhorar esta particular estratégia de controle dual, outras técnicas, ditas de controle avançado tem sido propostas, entre elas o Controle Antecipativo (Rovaglio et al, 1986) e o chamado "Model Predictive Control" (Garcia et al, 1989).

O princípio básico da técnica aqui utilizada pode ser formulado, do ponto de vista da teoria do controle, pela imposição ao sistema de equações de especificação de controle adicionais, do tipo:

$$g(y, t) = 0. \quad (4.8)$$

Contudo, a imposição ao sistema de condições do tipo (4.8) é, teoricamente inviável pois o sistema de controle dual implementado já esgotou como vimos, todos os graus de liberdade da coluna.

Deste modo, se desejamos viabilizar o uso de condições adicionais do tipo (4.8) torna-se necessário introduzir variáveis adicionais no sistema de controle. Estas variáveis adicionais podem ser ou os "set-points" das malhas (definindo assim trajetórias de referência), ou até mesmo variáveis manipuladas, considerando-se que a variação destas variáveis pode ser resultante da contribuição de dois termos, um devido a realimentação na malha, e um outro termo adicional imposto de forma a satisfazer condições do tipo (4.8).

Em termos de implementação, as condições (4.8) podem ser, por exemplo, simplesmente do tipo:

$$X_B = \text{constante}, \quad (4.9)$$

o que, teoricamente, garantiria um controle perfeito. Rovaglio et al (1992), discutem os problemas associados a resolução numérica de modelos com restrições do tipo (4.8) ou (4.9).

Neste ítem são apresentadas, através do estudo de alguns casos, as vantagens potenciais do método de controle antecipativo, bem como as suas restrições práticas.

Procurando exemplificar a aplicação do modelo de simulação para os propósitos do controle antecipativo, procurar-se-á ilustrar inicialmente um exemplo típico de controle com antecipação dita pura, para a coluna metanol-água. A seguir, será desenvolvido um sistema de controle do tipo misto, antecipação-retroação, onde serão analisadas e discutidas a resposta de tal sistema para diferentes condições operacionais da destilação metanol-água de alta pureza.

Na Figura 4.12a é apresentada uma representação esquemática do controle com antecipação pura que regula a potência térmica fornecida ao refulvador dentro dos objetivos do controle dual de composição. Através de um rigoroso modelo de simulação e de um computador de processo é possível prever o comportamento do sistema em relação ao tipo de perturbação ou seja, as principais perturbações são medidas e introduzidas no computador e então o programa calcula o valor exato da variável manipulada que cancela o efeito da perturbação no processo.

A Figura 4.12a, ilustra uma situação ideal, em que conhecidos o tipo da perturbação e o objetivo do controle (composição do metanol no produto de fundo constante), se determina, através do modelo dinâmico, o transiente da variável manipulada (potência

fornecida ao refulvedor x tempo), adicionando-se ao modelo a equação adicional de especificação do controle ( $X_B =$  valor especificado). A variação da potência térmica obtida pelo modelo constitui a relação de controle antecipativa necessária para cancelar o efeito da perturbação na coluna.

Note-se que o "controlador por antecipação" apresentado na Figura 4.12a tem simplesmente a função de implementar a curva  $Q_1(t)$  calculada.

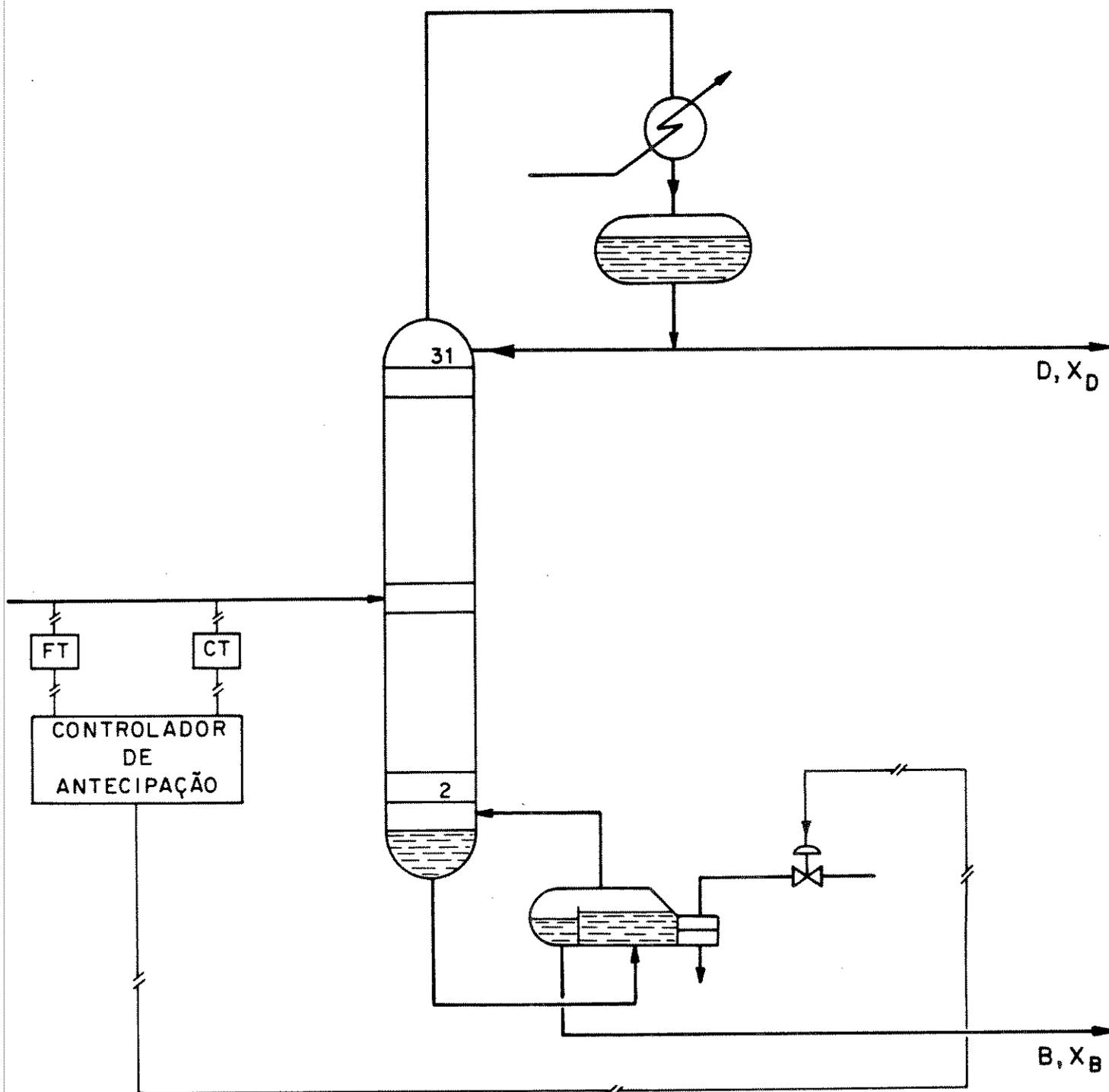


Fig. 4.12a - Configuração de controle com antecipação pura.

As figuras 4.12(b-c-d-e) mostram respectivamente as respostas do fundo (fração molar de metanol e vazão molar de vapor) e topo (fração molar metanol e vazão molar de líquido) para a coluna, com controle de antecipação pura, da Figura 4.12a; quando é imposto uma variação da vazão molar da alimentação de -10% em 20 minutos a partir do instante 10 min. Como é observado na Figura 4.12b, este sistema permite atingir perfeitamente o objetivo do controle imposto ( $X_B$ =constante).

O principal problema relacionado a este tipo de controle é o seguinte:

-se por um lado a composição do fundo resulta bem controlada, por outro pode-se observar que existe uma grande variação nas variáveis de topo, figuras 4.12(d-e), com a resposta do sistema resultando muito lenta, após 300 minutos o sistema não atingiu ainda a nova condição estacionária. O transiente da potência térmica necessária neste caso é reportado na figura 4.12f, onde seu valor é normalizado em relação a um fluxo entálpico de referência(dados nas condições de líquido a 50 C) 529 kW. Nota-se desta figura, a elevada variação da potência térmica no refeedor, necessária para a coluna absorver uma variação de 10% na vazão (Kmol/min) da alimentação. Muitas vezes o fluido quente, utilizado no refeedor, é uma corrente reciclada de outra parte do processo e, como tal, introduz uma certa rigidez no sistema, não permitindo fácil definição (a cada instante) da potência térmica necessária no refeedor. Ressalte-se ainda, que para este caso, o fluido quente pode estar sujeito a variações do processo que são ignoradas do sistema de controle em antecipação puro.

-além disso, a situação considerada é restritiva, pois pressupõe o conhecimento de variação da perturbação e a lei  $Q_1(t)$  obtida é válida apenas para essa variação específica.

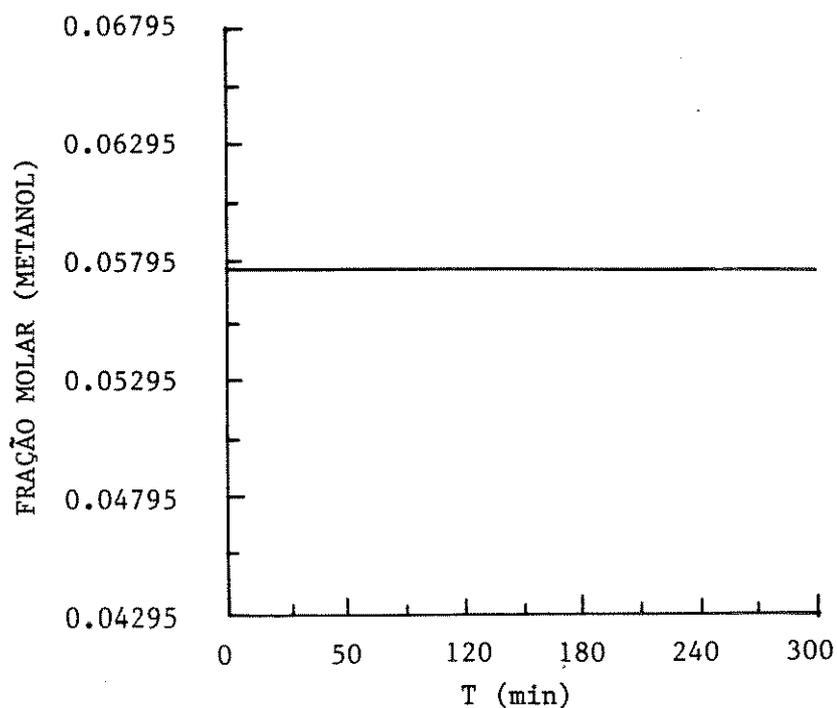


Fig. 4.12b - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de - 10% na vazão molar da alimentação. Controle com antecipação pura.

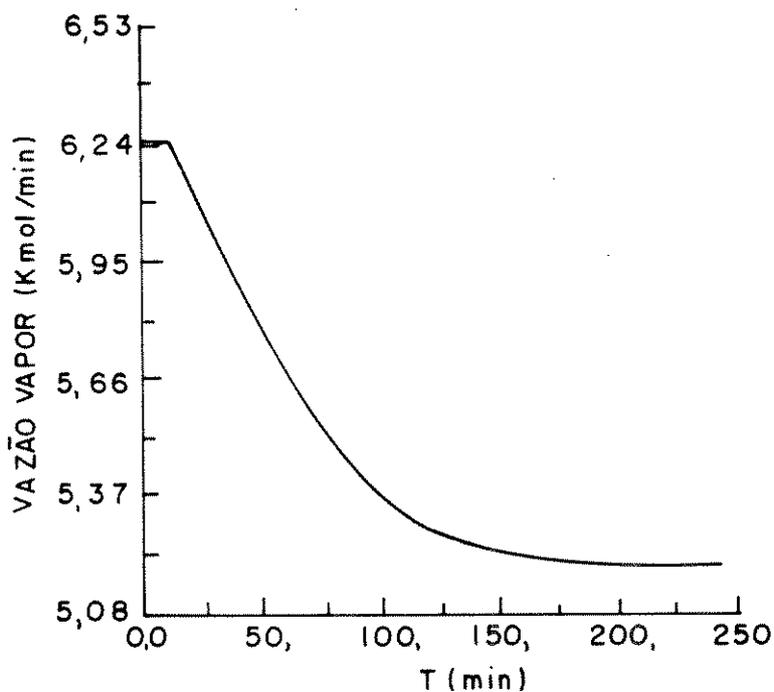


Fig. 4.12c - Vazão molar de vapor no reboiler x tempo para uma variação de - 10% na vazão molar da alimentação. Controle com antecipação pura.

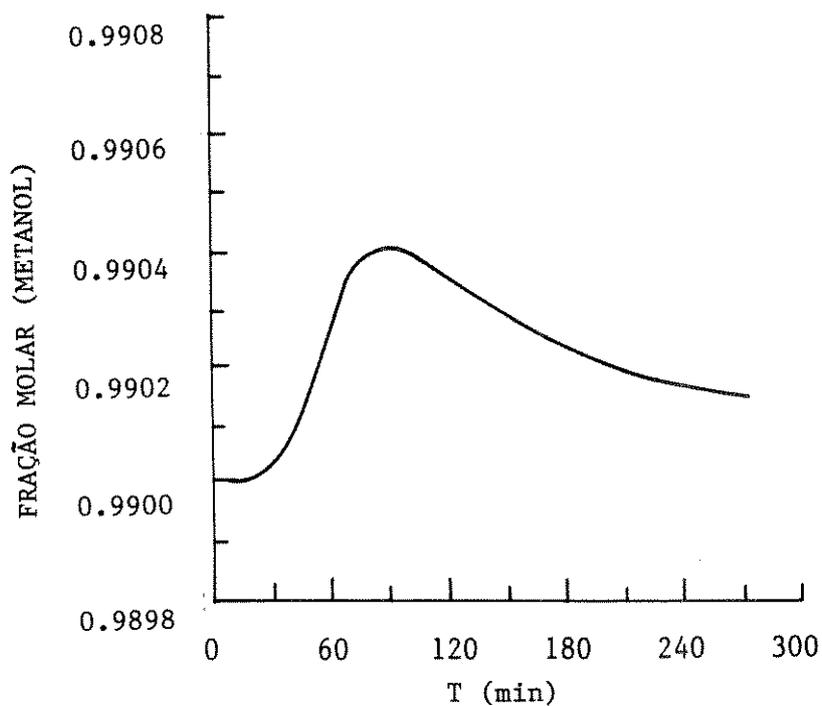


Fig. 4.12d - Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de - 10% na vazão molar da alimentação. Controle com antecipação pura.

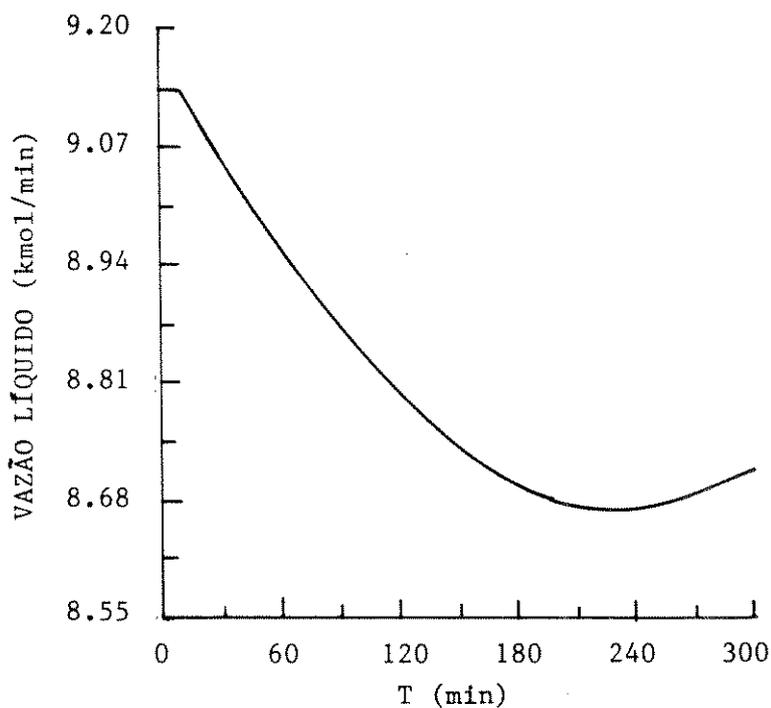


Fig. 4.12e - Vazão molar de líquido no condensador x tempo para uma variação de - 10% na vazão molar da alimentação. Controle com antecipação pura.

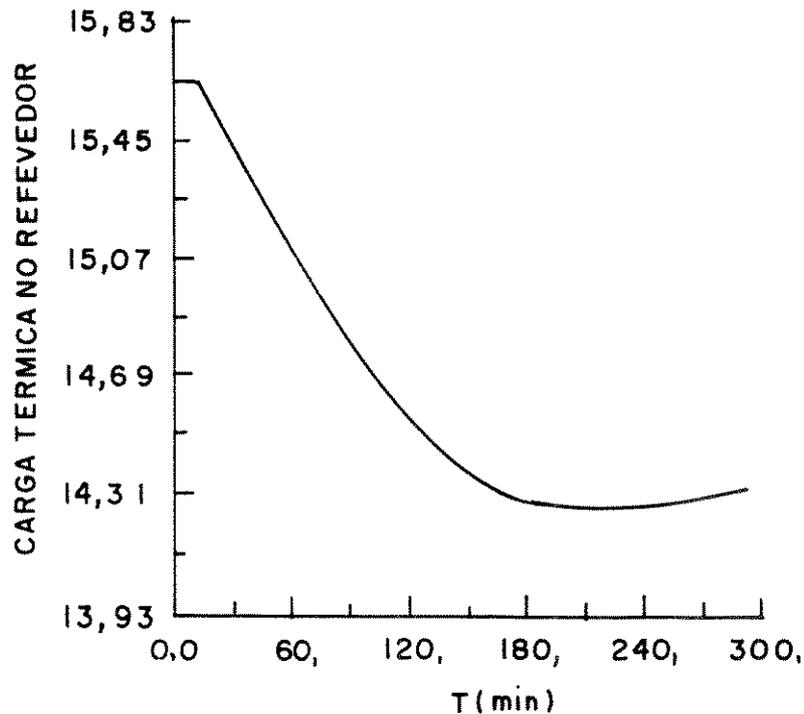


Fig. 4.12f - Carga térmica no refeedor (adimensional) x tempo para uma variação de - 10% na vazão molar da alimentação. Controle com antecipação pura.

De uma forma geral, pode-se concluir que, o controle por antecipação possui um potencial para o controle perfeito, porém apresenta problemas intrínsecos à sua estrutura, em particular:

- requer a identificação de todas as variações agindo no sistema, bem como a sua medição, o que nem sempre é possível,
- qualquer variação nos parâmetros do processo (como por exemplo uma redução do coeficiente de troca térmica devido a problemas de incrustação) que não possa ser corretamente modelada, não pode ser corretamente compensada pelo controle por antecipação.

O controle por retroação não apresenta este tipo de problema, contudo em determinados objetivos do controle o seu desempenho não é muito satisfatório.

É de se esperar, portanto, que um controle combinado (antecipação + retroação) possa apresentar a qualidade superior do primeiro combinada com a insensibilidade do segundo quanto às imprecisões e incertezas do modelo. De fato, cada desvio causado por deficiências do controle em antecipação serão corrigidas pelo controle em retroação.

A figura 4.13a mostra um sistema de controle misto antecipação-retroação para a coluna em estudo. Cinco são as malhas de retroação incluídas no sistema: pressão de topo

(vazão do refrigerante como variável manipulada), nível do acumulador (vazão de destilado como variável manipulada), composição do destilado (vazão de refluxo como variável manipulada), nível de líquido no refeedor (vazão do produto de fundo como variável manipulada) e temperatura no prato nº 3 (potência térmica no refeedor como variável manipulada).

Como já mencionado, toda estratégia de controle antecipativo está relacionada com perturbações específicas agindo no sistema e especificamente monitoradas. Usualmente estas perturbações são definidas através das mais frequentes variações que determinam frequentes off-set nos objetivos do controle. A análise efetuada é restrita a duas principais variações, definidas e medidas, sobre as seguintes variáveis de entrada na coluna:

- Caso 1, variação na vazão de alimentação e
- Caso 2, variação na composição de alimentação.

O Caso 1 analisa o comportamento dinâmico do sistema quando uma variação do tipo rampa aumenta a vazão da alimentação de 10% em 20 minutos a partir do instante 10 minutos. O comportamento da coluna é comparado para as seguintes estruturas de controle:

A- controle (retroativo) dual de composição topo/fundo com inclusão do tempo morto de 2 minutos para cada malha de composição, este esquema de controle é usualmente chamado de "controle dual real", isto devido a consideração do tempo morto nas malhas (Shinskey, 1989).

B- controle dual real com desacoplamento parcial (Fig. 4.9) e

C- controle misto antecipação-retroação (Fig. 4.13a).

Para o controle misto antecipação-retroação a função objetivo de controle pode ser formulada como segue: calcular o 'set-point' da malha de temperatura necessário para manter a composição do produto de fundo dentro das especificações desejadas. Este objetivo de controle permite combinar a estratégia de controle antecipativo com o específico esquema "feedback". Desta forma é possível aumentar as exigências de especificação sem diminuir a robustez e o desempenho do esquema de controle implementado. A Figura 4.13b apresenta o 'set-point' da malha de temperatura necessário para manter a composição do metanol na corrente de fundo dentro da especificação desejada.

As Figuras 4.13(c-d) apresentam a dinâmica de composição no topo e fundo para as três estruturas de controles descritas (A, B e C):

- A - Controle dual real,
- B - Controle dual real com desacoplamento parcial e
- C - Controle misto antecipação x retroação.

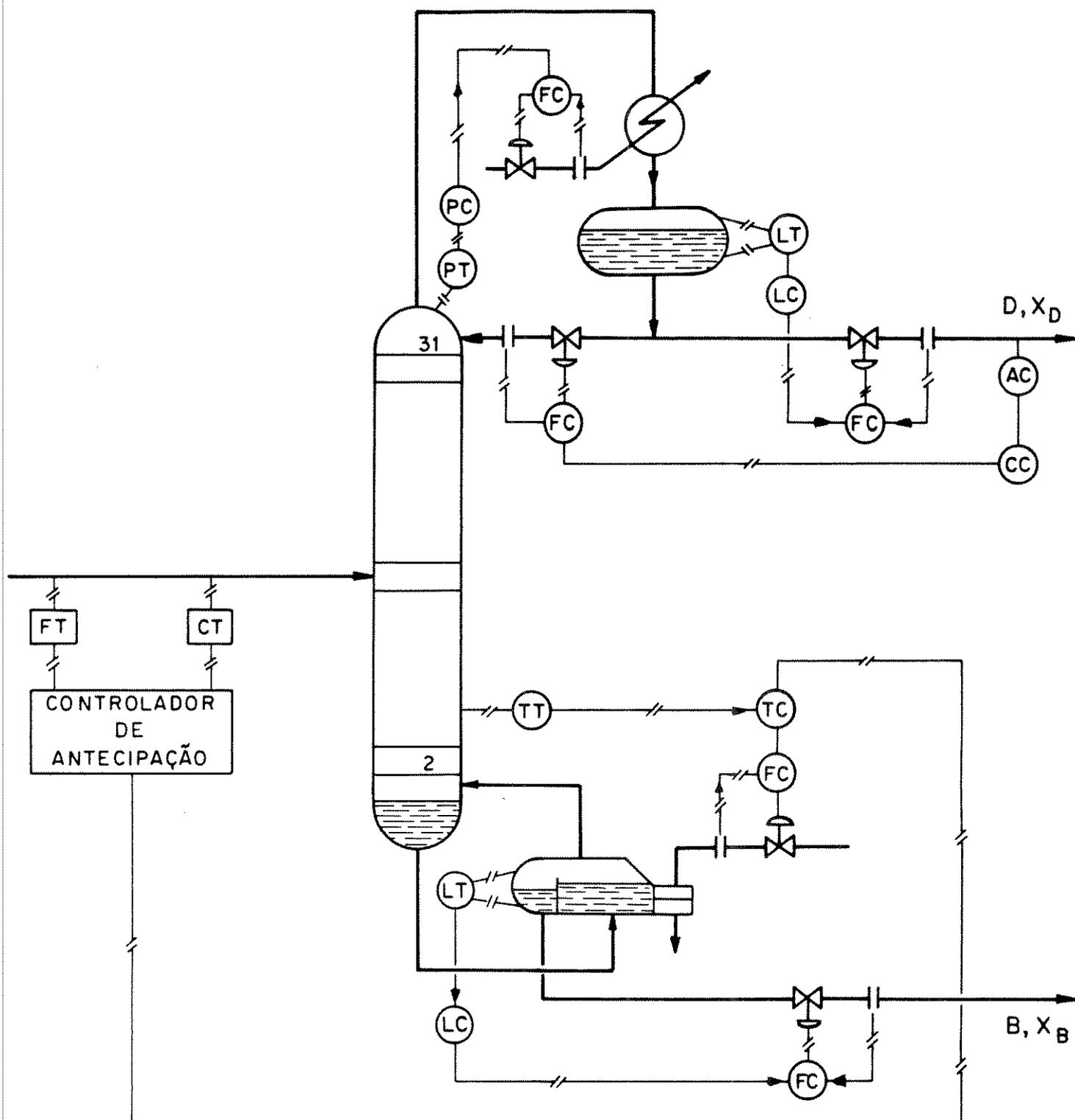


Fig. 4.13a - Configuração do controle misto antecipação x retroação.

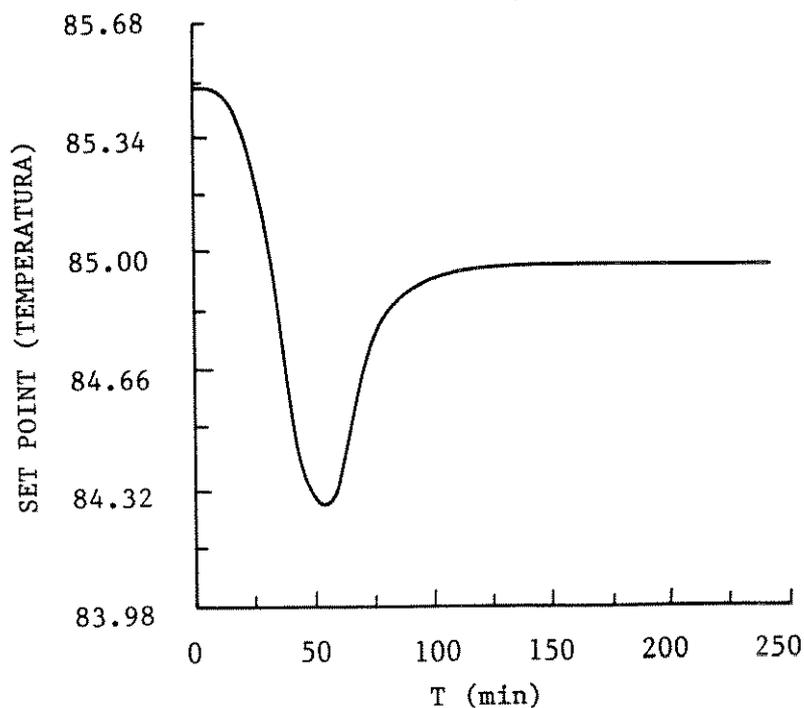


Fig. 4.13b - 'Set-point' da malha de controle de temperatura do prato nº 3 x tempo para uma variação de + 10% na vazão molar da alimentação. Controle misto antecipação x retroação.

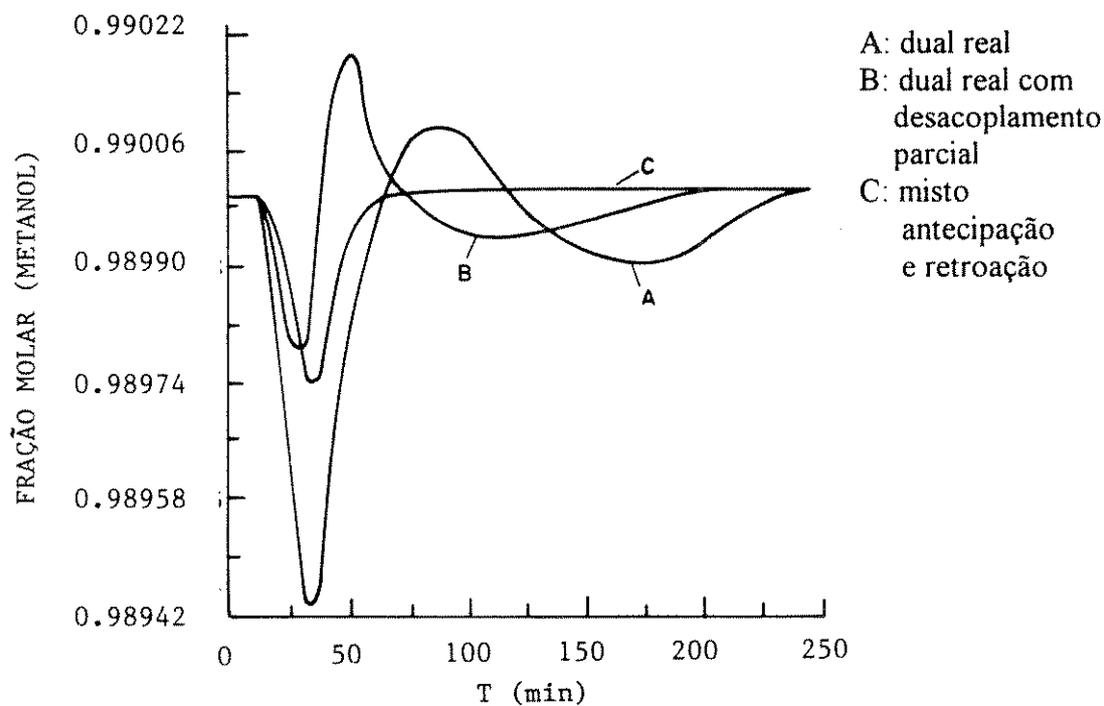


Fig. 4.13c - Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de + 10% na vazão molar da alimentação. Configuração de controle A, B e C.

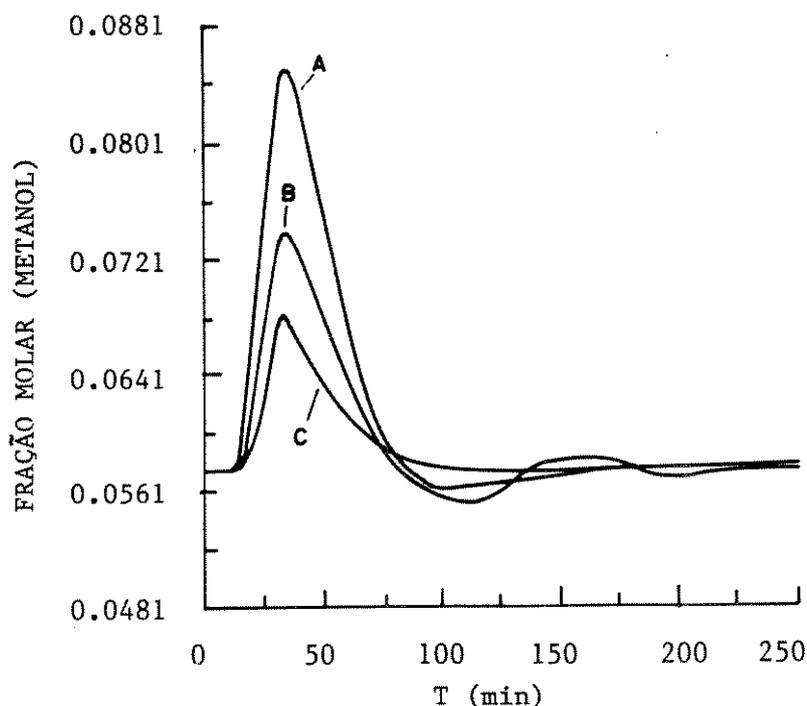


Fig. 4.13d - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de + 10% na vazão molar da alimentação. Configuração de controle A, B e C.

Analogamente, o caso 2 analisa o comportamento dinâmico do sistema para uma variação do tipo rampa que aumenta a fração molar do metanol na corrente de alimentação de 2,5% em 20 minutos a partir do instante 10 minutos. A Figura 4.13e apresenta o set-point da malha de temperatura e as Figuras 4.13(f-g) mostram a resposta da coluna para as três estruturas de controle do exemplo anterior (respectivamente curvas A, B e C).

Observa-se das Figuras 4.13(b-g) e 4.13(f-g), que dentre os sistemas de controle analisados, apresenta melhor desempenho, o sistema de controle misto antecipação-retroação (curva C). A comparação do dual real com (curva B) e sem (curva A) desacoplamento parcial mostra o melhor comportamento do primeiro, com uma menor oscilação da resposta e menor sobre-elevação..

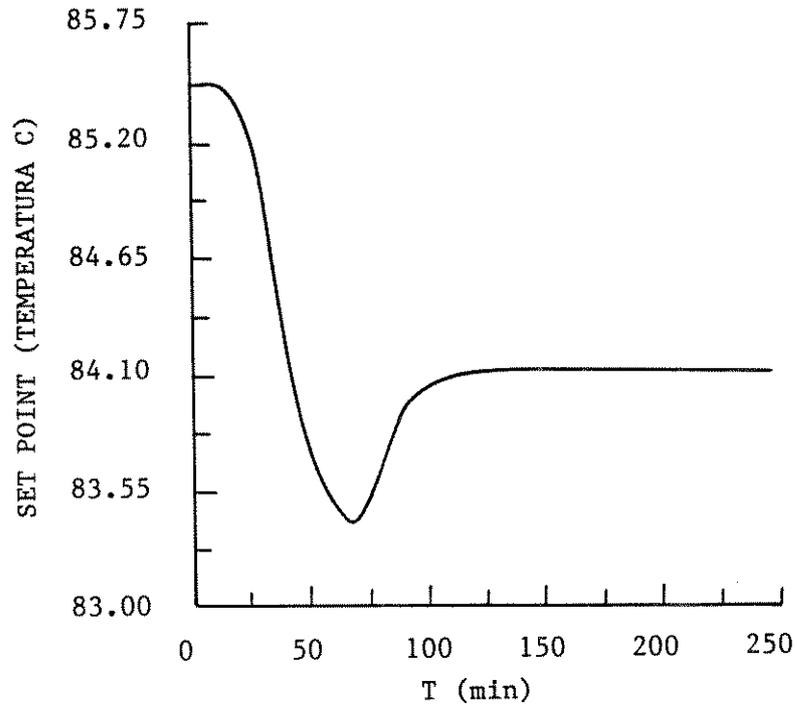


Fig. 4.13e - 'Set-point' da malha de controle de temperatura do prato nº 3 x tempo para uma variação de +2,5% na composição molar do metanol da alimentação. Controle misto antecipação-retroação.

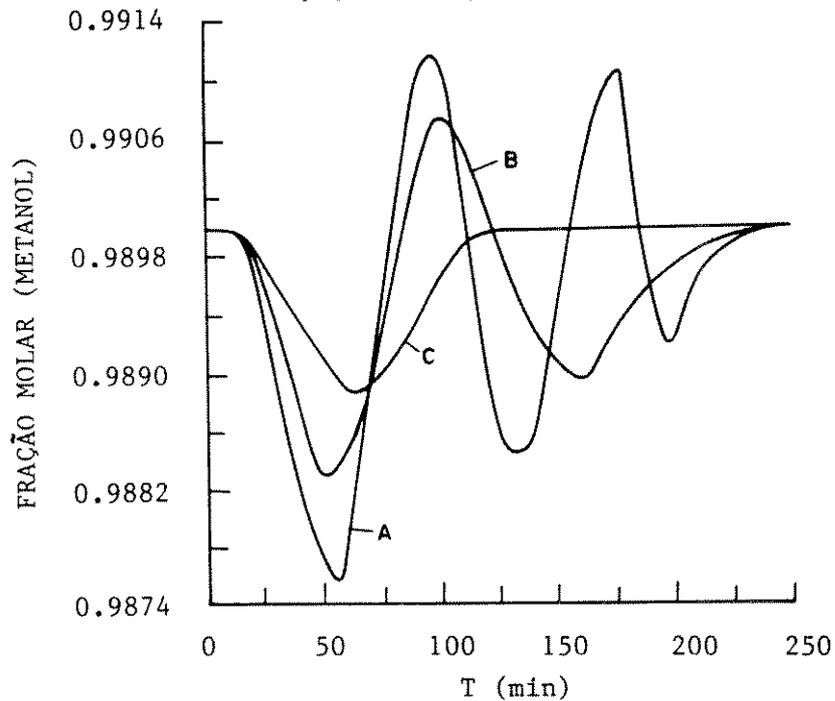


Fig. 4.13f - Fração molar do metanol no destilado x tempo para uma variação de +2,5% na composição molar do metanol da alimentação. Configuração de controle A, B e C.

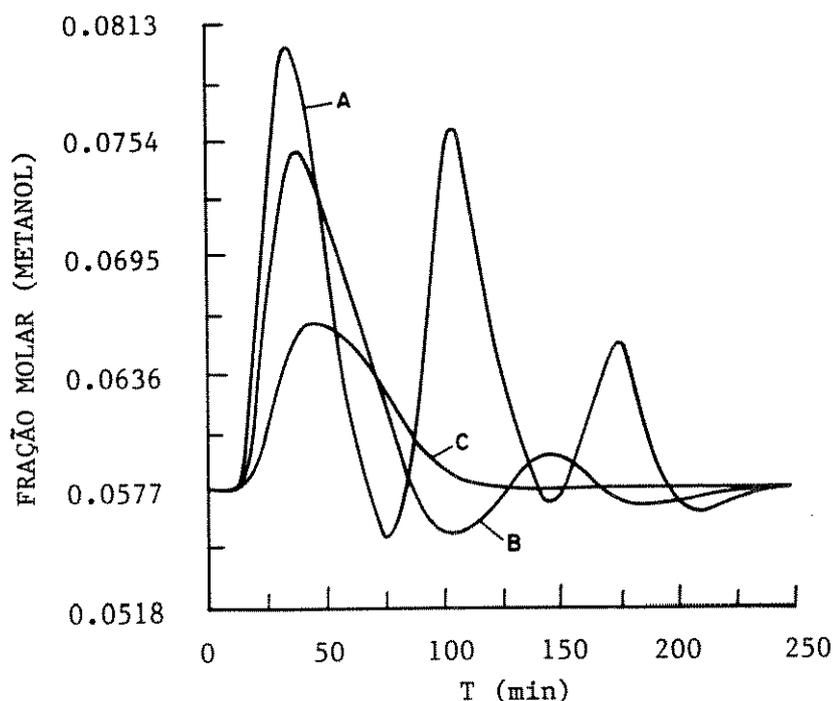


Fig. 4.13g - Fração molar do metanol no produto de fundo x tempo para uma variação de +2,5% na composição molar do metanol da alimentação. Configuração de controle A, B e C.

Para concluir, a Figura 4.14 confronta a evolução temporal da potência térmica (valor normalizado em relação a um fluxo entálpico de referência, dados nas condições de líquido a 50 C) fornecida ao refeedor para as seguintes situações:

- (i) controle em retroação com variação de +10% na vazão molar da alimentação,
- (ii) controle misto retroação-antecipação com variação de + 10% na vazão molar da alimentação,
- (iii) controle misto retroação-antecipação com variação simultânea de -5% na composição do mais volátil e +10% na vazão molar da corrente de alimentação.

O confronto entre a curva (i) e a curva (ii) mostra que praticamente existe o mesmo tipo de variação de potência térmica nos dois casos e que o controle em antecipação não implica consumos maiores de energia. Por outro lado, as curvas (ii) e (iii) representam as diversas direções de variação da potência térmica necessária nos dois casos considerados. Isto de certa forma fornece uma idéia global da carga térmica necessária para fazer frente as novas condições de processamento, bem como se será possível, com este tipo de

controlador, integrar termicamente a coluna (caso por exemplo da utilização de corrente quente do processo) ou se será necessário recorrer a nova corrente quente.

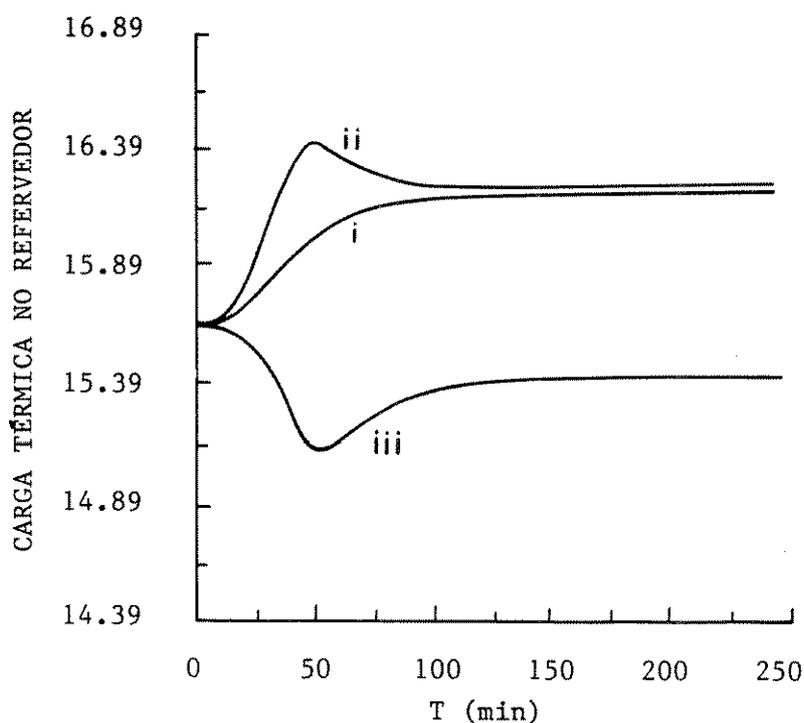


Fig. 4.14 - Carga térmica no revededor tempo para as operações controladas:

- i - controle em retroação com variação de +10% na vazão molar da alimentação
- ii - controle misto retroação-antecipação com variação de +10% na vazão molar da alimentação
- iii - controle misto retroação-antecipação com variação simultânea de -5% na composição do mais volátil e +10% na vazão molar da corrente de alimentação.

## 5 - CONCLUSÕES

A análise do trabalho, dentro de uma ótica global, permite concluir que a modelagem dinâmica constitui uma importante ferramenta para fornecer ao calculador do processo a base de conhecimento necessária para operar a escolha sobre a base de dados registrada.

Os estudos para a definição de um modelo que apresente informações fenomenológicas principais e tratamento numérico na forma elástica, estável e "consultável" em tempo modesto, permitiram concluir:

### 1. Quanto à capacidade preditiva dos modelos a uma (A), duas (B) e três (C) constantes de tempo:

- o modelo (A) a uma constante de tempo é o mais simples e considerando o tempo de cálculo comporta um menor custo comparativamente com o modelo (B). O modelo B somente deve ser utilizado numa fase inicial do projeto da coluna com objetivos específicos de corrigir ou confirmar a indicação preliminar de A.
- existe praticamente coincidência entre as respostas dos modelos (B) e (C), donde se conclui que o termo capacitivo devido a presença de um "holdup" molar vapor entre dois estágios sucessivos é perfeitamente desprezível (nas condições empregadas neste trabalho).

### 2. Quanto ao 'holdup' de energia ser considerado desprezível no prato.

- Quando o balanço entálpico é considerado instantaneamente em regime, com as equações tomando a forma algébrica, observou-se um acentuado desvio em relação ao modelo (A), modelo a uma constante de tempo, proposto para confronto. A inclinação inicial da curva de resposta é totalmente influenciada pela presença do termo derivativo do balanço energético e portanto não é recomendado considerar-se o "holdup" de energia no prato desprezível.

### 3. Quanto a consideração de uma eficiência global do prato. Utilização do modelo de Murphree para a não idealidade do contato líquido-vapor.

- dos resultados simulados concluiu-se pela sensibilidade paramétrica do modelo em relação a este parâmetro.
- a pureza do destilado é sobre-estimada na modelagem de colunas com pratos teóricos.
- a comparação dos modelos com prato real e ideal, demonstrou um desvio maior quanto a composição do destilado de topo.
- necessidade do desenvolvimento de um modelo de eficiência que não seja baseado apenas nas condições estacionárias da coluna.

#### 4. Quanto ao procedimento para integração do sistema de equações algébricas e diferenciais ordinárias:

- utilização do método de Gear, fortemente recomendado para sistemas de equações diferenciais do tipo 'stiff'. Embora o procedimento do método seja tedioso, o resultado final é relativamente simples e fácil de ser aplicado.
- o método de Gear transforma a integração do sistema diferencial em um problema de solução de um sistema de equações algébricas não lineares, portanto uma estimativa aproximada da matriz Jacobiana não prejudica a convergência do sistema.
- convergência obtida, em todos os casos simulados, para um número pré-fixado de três iterações internas na fase corrector do método de Newton-Raphson para resolução do sistema algébrico dado por (F.7), apêndice F, se após três iterações a convergência não for obtida deve-se primeiro diminuir o tamanho do passo para depois reavaliar a matriz jacobiana.
- a utilização do vetor de Nordsieck permite variação simultânea do passo e da ordem de integração do método de Gear de uma forma eficiente e automática. O valor otimizado da tolerância do integrador é da ordem de  $1.0E-03$ .

#### 5. Modelo termodinâmico:

- no tratamento termodinâmico do equilíbrio líquido-vapor a utilização dos métodos UNIQUAC (Prausnitz et al. 1980) e UNIFAC (Fredenslund et al. 1977), dentro de uma forma conjunta, generaliza o modelo termodinâmico, permitindo assim a simulação de colunas de destilação para sistemas com dados termodinâmicos não disponíveis na literatura.
- para baixas pressões, a hipótese de idealidade da fase gasosa é aceitável, o mesmo não ocorrendo com a fase líquida.
- analogamente, a influência da entalpia de excesso, no cálculo das respectivas entalpias de mistura tanto da fase líquida quanto da fase vapor, pode ser considerada desprezível.

#### 6. Fluidodinâmica do prato:

- o modelo hidráulico mostra que os pratos perfurados apresentam um menor 'holdup', seguido do valvulado e por último o prato com campânulas. Coerentemente com os "holdup" molares evidenciados, os pratos perfurados apresentam uma menor constante de tempo.
- o modelo hidráulico pode ser utilizado com diferentes possibilidades. Desde uma análise comparativa de diferentes correlações objetivando a definição de um procedimento para estimativa: da perda de carga total nos pratos, do fator de aeração,

da queda de pressão residual, da geometria do prato.....etc, até para a identificação dos limites de operação para 'flooding', e "weeping".

## 7. Dinâmica em malha aberta:

### **Análise quanto a variável perturbada**

- dos estudos para diferentes variações conclui-se ser impossível definir regras genéricas para prever o comportamento qualitativo das respostas. Generalizações não podem ser efetuadas e cada variação deverá ser analisada, caso a caso, através da simulação, objetivando não só uma análise qualitativa como também quantitativa do efeito da variável perturbada na coluna.

### **Efeitos do grau de pureza e volatilidade relativa**

- respostas mais lentas da coluna são previstas à medida que o grau de pureza do produto é aumentado.
- pequenas diferenças nas respostas da coluna para diferentes volatilidades ( $\alpha = 2$  e  $\alpha = 4$ ), isto quando o grau de pureza do destilado é moderado.
- quando a pureza é aumentada as respostas apresentam acentuadas diferenças para diferentes volatilidades relativas.
- para alta volatilidade relativa a resposta é mais rápida e altamente não linear.

### **Linearidade do sistema**

- a linearidade quanto à intensidade e sentido da variação é função não somente da variável que está sendo analisada como também da variável perturbada.
- o sistema responde mais lentamente à medida que a intensidade da variação é reduzida, o que permite explicar porquê a constante de tempo predita por análise linear é maior do que aquela determinada por análise não linear.

## 8. Na síntese do esquema de controle:

- no emparelhamento entre variáveis manipuladas e variáveis controladas, a estrutura de controle dual LV apresentou melhor desempenho, maior estabilidade e menor sobre-elevação.
- na estrutura de controle dual LV a interação, entre as malhas de composição de topo e fundo da coluna, aumenta com o grau de pureza dos produtos.
- o controle dual LV com tempo de atraso nas malhas de topo e fundo da coluna apresenta um fraco desempenho do controlador. Um melhor desempenho é obtido quando o tempo morto é considerado somente na malha de topo da coluna
- a alternativa recomendada é substituir o controlador de pureza do fundo (que apresenta um custo elevado) por um controlador com ação combinada antecipação + retroação.
- ajuste dos parâmetros do controlador (simetria).

## 6 - RECOMENDAÇÕES PARA FUTUROS TRABALHOS.

As colunas de destilação representam no âmbito dos equipamentos da indústria química, unidade de fundamental importância. Isto justifica a atenção que vem sendo dada por parte dos pesquisadores de engenharia química em traduzir o conhecimento do fenômeno da destilação em termos de rigorosos modelos de simulação da coluna, permitindo caracterização completa das condições operacionais, critérios de cálculo, de projeto, otimização e controle.

Objetivando um aumento progressivo da fenomenologia desse modelo diferentes recomendações são citadas como interessantes futuros trabalhos:

### 1. Um modelo para colunas com pratos reais.

O modelo do estágio real a ser desenvolvido poderia distinguir a princípio três regiões: uma referida a fase líquida, outra a fase vapor e outra a superfície de separação (interface). Um modelo de contato para o prato real utilizaria, por exemplo, a teoria de filme (Krishna R. e Standart G.L., 1976) que trata da transferência de massa e energia em um sistema multicomponente.

Alguns aspectos a serem discutidos na definição do modelo:

- diferença de pressão entre as diversas regiões do prato
- fenômeno de interação na mistura multicomponente, considerando a introdução da matriz dos coeficientes de transferência (com interação), coeficientes de transferência de massa iguais para os estágios e componentes da mistura (sem interação) e contradifusão equimolecular na interface.
- definição de eficiência material e térmica (Krishnamurthy R. et al 1985)

### 2. Modelos do refeedor e do condensador com um maior grau de descrição fenomenológica do processo e sua influência na resposta controlada da coluna.

A coluna de destilação tem apresentado e apresenta interessantes problemas no desenvolvimento da modelagem dinâmica, alguns obviamente ligados à transferência de massa, mas outros igualmente importantes referem-se direta ou indiretamente a presença das unidades auxiliares de troca térmica que realizam o refluxo de topo e fundo, ou seja os condensadores e refeedores.

O estudo da dinâmica destes equipamentos em uma escala de descrição superior à apresentada no presente trabalho, possibilitará o resgate de aspectos significativos destas unidades auxiliares, principalmente no que concerne ao controle ótimo destes equipamentos.

A modelagem termofluidodinâmica da unidade global dependerá de mecanismos de circulação (natural ou forçada) entre o fundo da coluna e o retervedor, constituindo um quadro fenomenológico mais detalhado e complexo, o que implicará em uma maior dificuldade de resolução do sistema de equações algébricas e diferenciais, podendo-se inclusive estudar a possibilidade da utilização de processamento paralelo objetivando a solução numérica de um modelo global com maior grau de descrição fenomenológica do processo.

O problema da estabilidade do método numérico (tempo dispendido nos cálculos) poderá ser estudado de uma forma gradativa, aumentando-se gradativamente a capacidade descritiva destes modelos.

### **3. Aplicação do presente modelo à análise dinâmica e estabilidade de colunas de destilação interligadas.**

O contínuo aumento dos custos de energia conduz como consequência imediata a necessidade de uma melhor utilização dos recursos energéticos. Nesse sentido fica bastante claro a renovada atenção aos aspectos termodinâmicos de colunas de destilação interligadas, na busca de esquemas otimizados para separar misturas multicomponentes.

A literatura tem mostrado, Chaves R. et al. (1987), Lin et al. (1987), Petlyuk F.B. et al. (1964), diferentes soluções para o problema de colunas termicamente interligadas, sendo constante a presença de múltiplos estados estacionários para uma mesma especificação de projeto.

A generalidade do presente modelo dinâmico da coluna, no que se refere aos aspectos termodinâmicos, configuração da coluna, número de estágios e componentes, permitiria a sua aplicação na identificação das características de diferentes estados estacionários e o que é muito importante na presença de esquemas de controle do tipo múltiplas entrada - múltiplas saída (MIMO).

Seja do ponto de vista prático ou teórico resulta muito importante compreender de que modo surgem estas múltiplas soluções em um sistema interligado e se são todas estáveis ou vice-versa, se respondem de modo diferente a variações típicas. Desta forma a análise dinâmica (em malha aberta e fechada) pode ser muito útil neste sentido, constituindo importante ferramenta na busca contínua de uma melhor eficiência termodinâmica das colunas de destilação.

Assente-se que, nos equipamentos químicos a coluna de destilação é a maior fonte de consumo energético, com uma eficiência termodinâmica surpreendentemente baixa, geralmente de 5 a 10%, do que se deduz que qualquer melhoria desta eficiência pode ter um valor significativo (Gaggioli R.A. e Petit J., 1977).

#### 4. Escolhendo o melhor controlador

No âmbito das estratégias de controle avançado a otimização 'on-line' implementada com controle preditivo propicia um dos bons métodos para controle e otimização em unidades de destilação.

A técnica do controle preditivo prevê a implementação do modelo em computadores do processo, modelos esses que apresentam um tempo de resposta razoável. Em função deste fato, os computadores devem ser de adequada potência. Isto não parece ser um problema significativo atualmente, visto a constante diminuição da relação (custo/prestação de serviço), destas máquinas.

Contudo, se tal computador não for disponível diretamente no processo, o modelo rigoroso desenvolvido pode ser utilizado para a definição paramétrica de leis simplificadas, funções das condições operativas do processo, as quais relacionariam o 'set-point' à variação imposta ao sistema.

Neste contexto, utilizando o modelo desenvolvido, diferentes algoritmos dentro da classificação de 'model-predictive controllers' (MPC) poderiam ser comparados à estrutura de controle antecipativo-retroativo, implementada neste trabalho, que interpreta a ação do controle dentro de uma estrutura unificada do modelo:

- . Model Algorithmic Control (MAC) (Richalet e Gimonet, 1968; Mehra et al., 1981; .....)
- . Dynamic Matrix Control (DMC) (Prett e Gillette, 1979; Cutler 1983; .....)
- . Internal Model Control (IMC) (Morari, 1981; Garcia e Morari, 1982; .....), na verdade uma unificação, feita por Morari, de diferentes técnicas de controle dentro de um único "framework" denominado por ele de IMC.

Quando os controladores DMC, MAC, são utilizados juntamente com procedimentos de identificação 'on-line', eles também são chamados de adaptativos. Portanto, claramente, a estimativa de parâmetros "on-line" é a chave exigida para o controle adaptativo. A utilização do modelo rigoroso neste contexto é altamente estimulante visto a problemática existente quanto à eficiência dos esquemas de identificação para estimativa dos parâmetros necessários do algoritmo adaptativo.

## Bibliografia

- AIChE "Equipment testing Procedure - Tray Distillation Columns". New York : AIChE, 1980.
- AIChE "Bubble Tray Design Manual". New York : AIChE, 1958.
- AL-ELG A.H. et al. "Comp. Chem. Engng.", v.13, n. 10, p. 1183-1187, 1989.
- ALSOP, A.W., EDGAR, T.F. "Comp. Chem. Engng.". v. 14, n., p. 665-678, 1990.
- ASPEN User Manual, M.I.T. Cambridge : M.I.T., 1981.
- BEQUETTE, B.W., EDGAR, T.F. "Comp. Chem. Engng.". v. 13, n. 13, p. 641-650, 1989.
- BROYDEN, C.G. "Mathematics of Computations", v. 19, p. 577, 1965.
- BOSTON, J.F, BRITT, H.I, JIRAPONGPHAN, S, SHAB, V.B. In "Foundation of Computer Aided Chemical Process Design". Engineering Foundation, New York, v. 2, p. 203, 1980.
- BRAMBILLA, A, CEOLA, G.U., Ing. Chim. Ital., v. 13, p. 141, 1977.
- BRAMBILLA, A, KARDASZ, J.H., Ing. Chim. Ital, v. 11, n. 46, 1975.
- BUCKLEY, P.S. "Techniques of Process Control". New York : Wiley, 1964.
- BRISTOL, E.H. "On a New Measure of interaction for multivariable process control", IEEE Transaction of Automatic Control, p. 133-134, 1966.
- BANCROFT, W.D. , HULBARD, S.S. "A New method for Determining Dimeric Distribution". J. Amer. Chem. Soc., v. 64, p. 347-355, 1942.
- BIARDI, F, M.ROVAGLIO, C, MEOTTI, M.G.GROTTOLI, PELLEGRINI, L. "Simulation of Real Trays Fractionating Units: A New Rigorous Approach". Proceedings of CEF, v. 87, p. 489, Taormina, 1987.
- BOSTON, J.F., SULLIVAN Jr., S.L. Can. J. of Chem. Eng., 50, 664, 1972.
- BOSTON J.F, BRITT, H.I, JIRAPONGPHAN, S, SHAB, V.B. "An Advanced System for the Simulation of Batch Distillation Operations", New York: Foundation of Computer Aided Chemical process Design, Engineering Foundation, v. 2, p. 203-237, 1981.

- BUZZI FERRARIS, G. "An Optimization method for Multivariable Functions - Working party on routine computer programs and the use of computer in chemical engineering", Firenze, 1970.
- BUZZI FERRARIS, G. , MORBIDELLI, M. - "Distillation Model for Two Partially Immiscible Liquids". AICHE Journal, v. 27, p. 881-887, 1981.
- BOYD, D.M. - Chem. Eng. Prog., v. 71, n. 6, p. 55, 1975.
- BYRNE, G.D, HINDMARSH, A.C, JACKSON, K.R, BROWN, H.G. Comp. Chem. Eng. v. 1, n. 2, p. 133, 1977.
- BYRNE G.D, MASH, S.H, SEIDER, W.D. "Foundations of Computer Aided Chemical Process Design", New York: Eng. Foundation, 1981.
- CUTLER, C.R. "Dynamic Matrix Control": An Optimal Multivariable Control Algorithm With Constraints, PhD. Thesis, Univ. of Houston, (1983)
- CARNAHAN, B. , WILKES, J.O. "Numerical Solution of Differential Equations", in "Foundation of Computer Aided Chemical Process Design", Engineering Foundation, New York, v. 1, p. 225, 1980.
- CHAVES, R, SEADER, J.D, WAYBURN, T.L.: AICHE J., v. 33, p. 886, 1987.
- COHEN, G.H, COON, G.A. Trans. ASME, v. 75, p. 827, 1953.
- CASH, J.R. J.Ass.Comp.Mach., v. 23, n. 3, p. 455, 1976.
- DAVIES, J.A. Ind. Ing. Chem., v. 39, p. 774, 1947.
- DOHERTY, M.F. , PERKINS, J.D. - Chem. Eng. Sci., v. 37, p. 381, 1982.
- DISTEFANO, G.P. AICHE Journal, v. 14, n. 1, 1968.
- DING. S.S. , LUYBEN, W.L. Ind. Eng. Chem. Res., v. 29, p. 1240-1249, 1990.
- DONGARRA, J.J, BUNCH. J.R, MOLER, C.B, STEWART, G.W., Limpack User's Guide, Philadelphia: SIAM, . 1979.
- De LEIIUW DEN BOUTER, J.A. , SWENKER, A.G. Proceed "Comp. Application in Proc. Development", Erlangen , 1974.
- EISENSTAT, S.C, GURSKY, M.C, SHULTZ, M.H. ; SHERMAN, A.H."Yale Sparse Matrix Package. I and II", reports N. 112 and 114, Dep. of Computer Sciences, Yale, CT, 1977.
- EVANS, L.B. Proceed "Chem Comp 1982", Anversa , 1982.

- FREDENSLUND, A, J.GMEHLING, P, RASMUSSEN, "Vapor-liquid equilibria using UNIFAC", Amsterdam : Elsevier, 1977.
- FRIDAY, J.R. , SMITH, B.D. "An Analysis of the Equilibrium Stage", AIChE J., v. 10, n. 5, p. 698, 1964.
- FERNANDES, R.D. "Simulação de uma Coluna de Destilação com Dinâmica de Pressão". São Paulo: EPUSP, 1990. Dissertação de Mestrado - Escola Politécnica da USP.
- FENG, A, HOLLAND, C.D, GALLUN, S.E. Comp. Chem. Eng., v. 8, n. 51, 1984.
- FINCO, M.V, LUYBEN, W.L. - Ind. Eng. Chem. Res., n. 28, p. 75-83, 1989.
- FUENTES, C., LUYBEN, W.L. Ind. Eng. Chem. Process. Des. Dev., n. 22, p. 361-366, 1983.
- GAGNEPAIN, J.P. , SEBORG, D.E. "Analysis of Process Interaction with Applications to Multiloop Control System Design", Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., n. 21, p. 5-11, 1982.
- GARCIA, E.C., MORARI, M. "Internal Model Control: 1. A Unifying Review and Some New Results", I , EC Process , Des. Dev., n. 21, p. 308, 1982.
- GARCIA et al, Automatica, n. 25, p.335, 1989.
- GALLUN, S.E. , HOLLAND, C.D. Comp. Chem. Eng., n. 6, p. 231, 1982.
- GAGGIOLI, R.A. , PETIT, P.J. Chemtech, n. 7, p. 496, 1977.
- GANI, R, RUIZ, C.A, CAMERON, I.T. Comp. Chem. Eng., n. 10, p. 181, 1986.
- GEAR, C.W., IEEE Transactions on circuit theory, January, 1971.
- GEAR, C.W. - "Numerical initial value problems in ordinary differential equations", Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1971.
- GEORGIU, A; GEORKAKIS, C, LUYBEN, W.L. - AIChE J., v. 34, n. 8, p. 1287-1297, 1988.
- GIORDANO R. et al, Anais do VI Congresso Brasileiro de Engenharia Química, São Paulo : UNICAMP, Julho 84.
- GLITSCH, Incl - "Ballast Tray Design Manual", Bull. 4900, IV Ediz., Dallas, 1986.

- GMEHLING, J. , ONKEN, U. "Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection", DECHEMA, Chemistry Data Series, I, Part 1, Verlag and Cruckerei Friedrick Bishoff, Frankfurt, 1977.
- HARRIOT, P. Process Control, New York : McGraw-Hill, 1974.
- HAYDEN, J.G., O'CONNELL, J.P. Ind. Eng. Chem., Process Des. Dev., n. 14, p. 221, 1975.
- HOWARD, G.H. AIChE Journal, n. 16, p. 1022, 1970.
- HUANG, C.J., HODSON, J.R. Petroleum Refiner, v. 37, n. 2, p. 104, 1958.
- HOLLAND, C.D. "Multicomponent Distillation", Englewood Cliff : Prentice Hall, 1963.
- HOLLAND, C.D. "Unsteady State Processes with Applications in Multicomponent Distillation", Englewood Cliffs : Prentice Hall, 1966.
- HINDMARSH, A.C. "ODEPACK: A Systemyzed Collection of ODE Solvers", Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, 1983.
- HOWARD, G.H. "Unsteady State Behavior of Multicomponent Distillation Columns", AIChE Journal, n. 16, p. 1022-1033, 1970.
- HINDMARSH, A.C. ACM Signum Newsletter, v. 15,n. 4, p. 10, 1980.
- HILLESTAD et al. - Comp. Chem. Engng., n. 10, p. 377, 1986.
- HINDMARSH, A.C. - Scientific Computing, p.55, R.S. Stepleman et al. (Ed.s), North-Holland. Amsterdam, 1983.
- HOLL et al. Proceed. "CEF 87", Taormina. 1987.
- HINDMARSH, A.C., BYRNE, G.D. "Numerical Methods for Differential System". p.147, L. Lapidus e W.E. Schiesser (Ed.s), Academic Press, New York, 1976.
- ISHII, Y., OTTO, F.D. Can J. of Chem. Eng., n. 51, p. 601, .1973.
- KURT, V.W. et al. AIChE Journal, n. 34, p. 853-858, 1988.
- KRISHNAMURTHY, R. et al., AIChE Journal, n. 31, p. 1973-1985, 1985.
- KRISHNA, R., STANDART, G.L. AIChE J., n. 22, p. 383, 1976.
- LUYBEN, W.L.. GERSTER, J.A. Feedforward Control of Distillation Columns, IEC Process Design Development, n. 3, p. 374, 1964.

- LUYBEN, W.L. *Ind.Eng.Chem.Res.*, n. 26, p. 2490, 1987.
- LANG, L. et al. *Comp. Chem. Engng.* v. 14, n. 11, p. 1297-1301, 1990.
- LIN, W.J, SEADER, J.D, WAYBURN, T.L. *AIChE J.*, n. 33, p. 886, 1987.
- LUYBEN, W.L. "Process Modelling, Simulation and Control for Chemical Engineers", New York : McGraw-Hill, 1981.
- LUYBEN, W.L., TYREUS, B.D. *Chem. Eng. Prog.*, v. 72, n. 9, p. 59, 1976.
- LUYBEN, W.L. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, n. 14, p. 321, 1975.
- PAPANATHANOPoulos, H.S, LUYBEN, W.L. *Ind. Eng. Chem. Res.*, n. 29, p.1859-1868, 1990.
- MICHELSEN, M.L. Semi-implicit Runge-Kutta methods for the integration off stiff ordinary differential equations, *AIChE J.*, n. 22, p. 594, 1976.
- MEDINA, A.G, ASHTON, N., McDERMOTT, C. - "Hausen and Murphree efficiencies in binary and multicomponent distillation", *Chemical Engineering Science*, n. 34, p. 1105, 1979.
- MAH, R.S.H, MICHAELSON, M, SARGENT, R.W.H. "Dynamic Behavior of Multi-Component Multi-Stage Systems - Numerical Methods for Solution", *Chem. Eng. Sci.*, n. 17, , 1962. p. 619
- MEHRA et al. "Proceedings Chemical Process Control II Conference", edit por Seborg e Edgard, 1981. p.287
- McAVOY, T.J. "Some Results on Dynamic Interaction Analysis of Complex Control System", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, n. 22, p. 42-49, 1983.
- MORARI. M. "Proceedings Chemical Process Control II", edit por Seborg e Edgard, 1981. p. 467
- McDONALD et al. *AIChE Journal*, n. 34, p. 1996-2004, 1988.
- McDONALD, K.A. , McAVOY, T.J. - *Ind. Eng. Chem. Res.*, n. 26, p. 1011-1018, 1987.
- McCUNE. L.C. et al. *ISA Transactions*, v. 12, n. 3, p. 193-207, 1973.
- MOUNTEZIARIS, J.T., GEORGIU, A. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 27, p. 1450, 1988
- NAPHTALI, L.M. , SANDHOLM, D.P. - *AIChE J.*, n. 17, p. 148, 1971.
- NAPHTALI, L.M. *AIChE Journal*, v. 60, n. 9, p. 70, 1964.

- NENCETTI, G.F, NARDINI, G., ZANELLI, S. *Ing. Chim. Ital.*, v. 2, n. 37, 1966.
- NENCETTI, G.F, NARDINI, G., ZANELLI, S. *Ing. Chim. Ital.*, v. 3, n. 27, 1967.
- NENCETTI, G.F, NARDINI, G., ZANELLI, S. *Ing. Chim. Ital.*, v. 3, p. 163, 1967.
- NENCETTI, G.F, NARDINI, G., ZANELLI, S. *Ing. Chim. Ital.*, v. 3, p. 202, 1967.
- NENCETTI, G.F, NARDINI, G., ZANELLI, S. *Ing. Chim. Ital.*, v. 4, p. 193, 1968.
- NISENFELD, A.E. , SEEMANN, R.C. "Distillation Columns", An ISA Monograph, 1981.
- NUTTER "Float Valve Design Manual", Oklahoma : Tulsa, 1976.
- OGUNNAIKE, B.A, LEMAIRE, J.P, MORARI, M, RAY, W.H. "Advanced Multivariable Control of a Pilot-Plant Distillation Column". *AIChE J.*, v. 29, n. 4, 1983.
- ODLOACK, D., " Simulação Dinâmica de Colunas de Destilação " Rio de Janeiro : UFRJ, 1977. Dissertação de Mestrado".
- PRAUSNITZ, J.M, ANDERSON, T.F, GRENS, E.A, ECKERT, C.A, HSIEH, R, O'CONNELL, J.P. "Computer Calculations for Multicomponent Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibria", New Jersey : Prentice Hall, 1980.
- PERKINS, J.D. et al. "Computer Aided Plant Design", Huston : Gulf, 1982.
- PETLYUK, F.B. , PLATONOV, V.M. *Khim Prom.*, n. 10, p. 723, 1964.
- PETZOLD, L.R, GEAR, C.W, SIAM, J. - *Numer. Anal.*, v. 21, n. 4, p. 716, 1984.
- PETZOLD, L.R. "Scientific Computing", p.65, R.S. Stepleman et al. (Eds)
- PIERUCCI S. et al, *AIChE J.*, n. 28, p. 820, 1982.
- PIERUCCI S. et al., *Proced. Computer "75"*, Carlsbad (Tchecoslovaquia), 1975.
- PRETT Y. et al. 86<sup>th</sup> National *AIChE* meeting, 1979.
- POIANI. L.M., MENDES, M.J. *Anais do 2º Congresso Nacional de Automação Industrial, SUCESU/SP*, v. 1, novembro 85.
- POIANI, L.M. , MENDES, M.J. - *Anais VI Congresso Brasileiro de Engenharia Química, São Paulo : UNICAMP*, v. 3, julho 84.
- PROKOPAKIS, G. J., SEIDER, W.D. "Feasible Specifications in Azeotropic Distillation", *AIChE Journal*, n. 29, p. 49-60, 1983.

- Process User Manual, Simulation Science, Fullerton (Canada), 1982.
- PROKOPAKIS, G.J., SEIDER, W.D. "Dynamic Simulation of Azeotropic Distillation Tower", AIChE Journal, n. 29, p. 1017-1029, 1983.
- RANZI E. et al. - "Integrazione numerica di equazioni differenziali di tipo stiff." Quaderni dell'ingegnere chimico italiano. n. 11, 1988.
- RANZI, E, ROVAGLIO, M, PIERUCCI, S, BUSSANI, G, FAVARELLI, T. "Dinamica degli Impianti Chimici: Apparecchiature de Equilibrio Liquido-Vapore", Ing. Chim. Ital., n. 21, v. 7-8, p. 29-43, 1985.
- RANZI, E, ROVAGLIO, M, PIERUCCI, S, BUSSANI, G, FARAVELLI, T. Ing. Chim. Ital. v. 21, p. 29, 1985.
- RANZI, E, ROVAGLIO, M, BIARDI, G, RIZZETTO, P, BINDA, R. Ing. Chim. Ital., v. 22, p. 5, 1986.
- RAY, W.H. "Multivariable Process Control - A Survey", Comp. Chem. Engng. v. 7, n. 4, p. 367-394, 1983.
- RAMAN, R. "Chemical Process Computations". London : Elsevier Applied Science Publishers, 1985.
- RICHALET, J, GIMONET, B. "Proceedings of Joint Automatic Control Conference", p. F49-A
- ROVAGLIO, M., BIARDI, G., RANZI, E., BINDA, R., RIZZETTO, P. - Ing. Chim. Ital. v. 22, p. 3, 1986.
- ROVAGLIO, M. et al., AIChE Journal. v. 36, n.1, p. 39-52, 1990.
- ROVAGLIO, M. et al., AIChE Journal, v. 36, n. 4, p. 576-587, 1990.
- ROVAGLIO, M et al. , ESCAPE- IX ,Congress Europeum ComputerAided Process, 1992.
- ROVAGLIO, M. et al ,Computers chem. Engng, v. 14, n. 8, p.871-887, 1990.
- ROSEMBROCK, H.H. "The Transient Behavior of Distillation Columns and Heat Exchangers. An Historical and Critical Review", Trans. Instn. Chem. Engrs., 40, 35, 1962.
- ROSEMBROCK, H.H., STOREY, C. "Computational Techniques for Chemical Engineers", Oxford : Pergamon Press, 1966.

- RYAN, P.J. , DOHERTY, M.F. "Synthesis and Optimal Design of Alternative Sequences for Separating Heterogeneous Azeotropic Mixture", Paper n° 91b, 80<sup>th</sup> annual Meeting of AIChE, New York, 1987.
- STEPHANOPOULOS, G. "Chemical Process Control An Introduction to Theory and Practice". Englewood Cliffs : Prentice Hall, 1984.
- SHINSKEY, F.G. "Distillation Control: for Productivity and Energy Conservation". 2<sup>nd</sup> Edition, McGraw-Hill, 1984.
- SHINSKEY, F.G. "Distillation Control". 2<sup>nd</sup> Edition, New York : Mc Graw-Hill, 1989.
- SASTRY, V.A, SEBORG, D.E, WOOD, R.K. "Self-Tuning Regulator Applied to a Binary Distillation Column", Automática, n. 13, p.417, 1977.
- SANCHEZ, J.M. , SHAH, S.L. "Multivariable Adaptive Predictive Control of a Binary Distillation Column", Automática, n. 20, p. 607, 1984.
- SKOGESTAD, S. et al., AIChE Journal, n. 36, p. 753-764, 1990.
- SKOGESTAD, S. et al, Chemical Engineering Science, n. 43, p. 33, 1988.
- SKOGESTAD, S. et al, IEEE Transactions on automatic control, n. 33, p. 12, 1988.
- SKOGESTAD, S. et al, 11th IFAC World Congress, v. 11, 1990.
- SKOGESTAD, S. et al, Computers chem. engng, n. 14, p. 401, 1990.
- SKOGESTAD et al. Ind.Eng.Chem.Res, n. 27, p. 1848, 1988.
- SMITH. B.D. "Design of equilibrium stage process". New York : Mc Graw-Hill, 1963.
- SMITH, B.D. , BRINKLEY, W.K. AIChE J. n. 6, p.446, 1960.
- SMITH, J.M. , VAN NESS, H.C. "Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química", McGraw-Hill, 1959.
- SEBORG, D.E. SHAH. S.L. EDGAR, T.F. "Adaptive Control Strategies for Process Control: A Survey". AIChE Journal, n. 32, p. 881, 1988.
- TAKAMATSU, T. et al. Journal of Chemical Engineering of Japan, v. 18, n. 1, 1985.
- TSNPOULOS, C. , AIChE J., n. 20, p. 263, 1974.
- TREYBALL, R. E. - "Mass Transfer Operations", Mc Graw-Hill, NY, 1980.

- TSAI, T.H, LANE, J.W, LIN, C.S. "Modern Control Techniques for the Processing Industries", New York : Marcel Dekker Inc., 1986.
- TUNG, L.S., EDGAR, T.F. "Analysis of Control-Output Interaction in Dynamic Systems", AIChE J., n. 27, p. 690-693, 1981.
- TYREUS, B.D, LUYBEN, W.L, SCHIESSER, W.E. "Stiffness in Distillation Models and the Use of an Implicit Integration Method to Reduce Computation Times", Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., n. 14, p. 427-437, 1975.
- TYREUS, B.D. , LUYBEN, W.L. Chem. Eng. Prog., v. 72, n. 9, 59, 1976.
- TYREUS, B.D. "Multivariable Control System Design for an Industrial Distillation Column", Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., n. 18, p. 177-182, 1979.
- THOMAS, W.J. , OGOBOJA, O. Ind. Ing. Chem. Process Des. Dev., v. 17, n. 4, p. 429, 1978.
- TZOVANAS, V.K. et al. Ind. Eng. Chem. Res., n. 29, p. 389-403, 1990.
- TZOVANAS, V.K., et al. - Ind. Eng. Chem. Res., n. 29, p. 382-389, 1990.
- TZOVANAS, V.K., et al. - Ind. Eng. Chem. Res., n. 29, p. 404-415, 1990.
- VAN WINCLE M. "Distillation", New York : Mc Graw-Hill, 1967.
- VENKATARAMAN, S., LUCIA, A. "Solving Distillation Problems by Newton-Like Methods", Comp. Chem. Engng, n. 12, p. 55-63, 1988.
- VILLADSEN. J., MICHELSEN, M.L. "Solution of Differential Equation Models bu Polinomial Approximation", Englewood Clifs : Prentice Hall Inc., 1978.
- VOGEL, E.F., EDGAR, T.F. "An adaptive pole placement controller for Chemical Processes With Variable Dead time". Comput. Chem. Eng., v. 12, p. 15, 1988.
- WANG, J.C., HENKE, G.E. Hydrocarbon Process., v. 45, n. 8, p. 155, 1966.
- WANG, J.C. Relative Gain Matrix for Distillation Control - a rigorous computational procedure, v. 20, n. 1, p. 3, 1981.
- WEISCHEDEL, K., McAVOY, T.J. - Ind. Eng. Chem. Fundam., n. 19, p. 379-384, 1980.
- WOOD, R.K., PACEY, W.C. "A Feedback, feedforward and Combined Feedback-feedforward Controller for Distillation Column". Canadian J.of Chem. Eng., n. 50, p. 376, 1972.

- WESTERBERG, A.W. "Process Flowsheeting". Cambridge : Cambridge University Press, 1979.
- WITCHER, M., McAVOY T.J. ISA Trans., v. 16, n. 3, p. 35, 1977.

## Apêndice A - Fluidodinâmica do prato

### A.1 - Correlações geométricas

#### A.1.1 - Relações comuns a todas as geometrias.

Considerando conhecidos  $D$ ,  $W$  e  $h_i$  (Fig. A.1) que representam respectivamente o diâmetro interno da coluna, o comprimento do vertedouro de descarga e a altura da abertura pela qual se alimenta o líquido no prato, é possível calcular:

$$\beta = \arcsen (W/D) \quad \text{A-1}$$

$$A_t = \pi D^2/4 \quad \text{A-2}$$

$$A_d = D (\beta \cdot D - W \cdot \cos \beta)/4 \quad \text{A-3}$$

$$A_i = W \cdot h_i \quad \text{A-4}$$

$$A_{da} = \min (A_d, A_i) \quad \text{A-5}$$

O significado de  $\beta$  é facilmente dedutível da Figura A-1,  $A_t$  representa a superfície global do prato, secção interna da coluna,  $A_d$  (Fig. A-1) representa a secção do conduto ("downcomer") de carga ou de descarga,  $A_i$  representa a secção de ingresso no prato do conduto de carga lateral,  $A_{da}$  é a secção menor através da qual o líquido flui proveniente do conduto de carga e será utilizada na estimativa da perda de carga na entrada de líquido no prato.

A seguir apresenta-se as relações específicas para cada tipo de prato.

#### A.1.2 - Geometria "cross flow" simples

Considerando conhecidos  $D$ ,  $h_i$  e  $w$  já definidos, é possível calcular:

$$A_n = A_t - A_d \quad \text{A-6}$$

$$Z_G = D \cdot \cos \beta \quad \text{A-7}$$

$$Z_p = (A_t - 2 \cdot A_d)/Z_G \quad \text{A-8}$$

A área nominal,  $A_n$  representa a secção da coluna disponível para a passagem da corrente vapor (Fig. A-1) e será utilizada na estimativa da velocidade de vapor na coluna,  $Z_G$  é o comprimento do prato (Fig. A-1), ou seja a distância compreendida entre a linha de carga e descarga no prato e  $Z_p$  é a largura média do prato.

As correlações relativas à estimativa da área calma,  $A_c$ , da área ativa,  $A_a$ , e da área dos orifícios,  $A_o$ , serão desenvolvidas nos apêndices posteriores, pois assumem expressões diversas ao variarem com o dispositivo de contato.

### A.1.3 - Prato "'split flow'"

A Figura A-2 esquematiza o prato "split flow" e a grandeza geométrica relativa.

Outras como  $D$ ,  $h_i$  e  $W$ , consideram conhecido  $W_2$ , o qual representa o comprimento do vertedouro central do prato. No caso da corrente líquida o prato 'split-flow' pode ser visto como formado por dois pratos 'cross flow' utilizando, cada um, metade da vazão líquida da alimentação, portanto, para estimar o comprimento,  $Z_G$  do percurso de líquido no prato far-se-á referência a um prato dividido ao meio:

$$\beta_2 = \arcsen (W_2/D) \quad A-9$$

$$A_{dc} = A_t - 0.5 D(\beta_2 D - W_2 \cos \beta_2) \quad A-10$$

$$A'_1 = W_2 h_i \quad A-11$$

$$A'_d = \min (A'_1, 0.5 A_{dc}) \quad A-12$$

$$A_2 = A_t - A_{dc} - 2A'_d \quad A-13$$

$$A'_n = A_t - A_{dc} \quad A-14$$

$$A''_n = A_t - 2A'_d \quad A-15$$

$$A_n = 0.5 (A'_n + A''_n) \quad A-16$$

$$Z_G = 0.5 D(\cos \beta - \cos \beta_2) \quad A-17$$

$$Z_p = 0.5 A_2/Z_G \quad A-18$$

O significado de  $\beta_2$  é dedutível da Figura A-2,  $A_{dc}$  representa a secção do conduto central,  $A'_1$  representa a secção de ingresso no prato do conduto de descarga central,  $A'_d$  é a menor secção através da qual o líquido flui proveniente do conduto de carga central e será utilizada na estimativa da perda de carga na passagem,  $A_2$  representa a superfície do prato não ocupada pelo conduto central e lateral e é a área de referência na estimativa dos "holdup" no prato;  $A_n$ ,  $Z_G$  e  $Z_p$  tem o mesmo significado que no caso "cross-flow",  $A_n$  é porém estimada como média entre a área nominal do prato com alimentação pelos dois condutos laterais e do prato com alimentação pelo conduto central.

Também neste caso a área calma,  $A_c$ , a área ativa,  $A_a$ , e a área dos orifícios,  $A_o$  serão desenvolvidas a posterior.

### A.1.4 - Prato perfurado

Considerando conhecidos  $D$ ,  $W$  e as grandezas já definidas:  $d_f$ ,  $p_f$ ,  $s_t$ ,  $Z_c$ , respectivamente o diâmetro e o passo dos orifícios (Fig. A-3), a largura de esteio do prato e a largura da zona de calma (Fig. A-4), no caso "cross-flow", tem-se:

$$A_c = (D + Z_G)s_t + 2WZ_c + Z_c(D - Z_c)(\pi - 2\beta) + (-s_t^2 + 4Z_c s_t) \quad A-19$$

$$A_a = A_t - 2A_d - A_c \quad A-20$$

$$A_o = 0.907 (d_f/p_f)^2 \cdot A_a \quad A-21$$

Considerando também conhecido  $W_2$ , no caso 'split-flow' tem-se:

$$A_c = 2 \{z_c[W + W_2 + (D - Z_c)(0.5\pi - \beta_2 + \beta)] + (Z_G - 2Z_c)s_t\} \quad A-22$$

$$A_a = A_t - 2A_d - A_{dc} - A_c \quad A-23$$

$$A_o = 0.907 (d_f/p_f)^2 A_a \quad A-24$$

A área calma,  $A_c$ , representa a soma da área "perdida" (ocupada pela trava de sustentação do prato) e da área considerada propriamente calma devido ser muito próxima a parede da coluna e também da linha de carga e descarga no prato e portanto não pertencente a zona ativa do prato. A sustentação é considerada a área retangular disposta ao lado dos condutores e seguindo uma cruz passando pelo centro do prato e de uma coroa circular junto da parede da coluna (Fig. A-4).

A área ativa  $A_a$ , representa a superfície do prato efetivamente disponível para os orifícios (Fig. A-1),  $A_o$ , a área global dos orifícios, estimada como percentual da área ativa conforme a disposição, o passo dos furos.

### A.1.5 - Prato com campânula

Considerando conhecidos  $d_f$ ,  $d_{cp}$ ,  $h_{cm}$ ,  $h_{cp}$ ,  $n_c$ ,  $s_c$  reportados na fig. A-6 e na nomenclatura, nos casos cross e split-flow, tem-se:

$$Ar_1 = \pi \cdot d_f^2 / 4 \quad A-25$$

$$Ar_2 = \pi \cdot d_f (h_{cp} - h_{cm}) \quad A-26$$

$$Ar_3 = \pi [(d_{cp} - 2 \cdot s_{cp})^2 - (d_f + 2s_{cp})^2] / 4 \quad A-27$$

$$A_r = \min (Ar_1, Ar_2, Ar_3) \quad A-28$$

$$A_o = n_c \cdot \pi \cdot d_f^2 / 4 \quad A-29$$

A área calma,  $A_c$ , e a área ativa,  $A_a$ , não são estimadas no caso de pratos com campânulas, de fato a área calma assume uma expressão mais complexa que nos casos

anteriores sendo preferível estimar a área perfurada como uma soma das áreas de todos os furos e não mais como um percentual da área ativa.

### A.1.6 - Prato valvulado

No caso de pratos com válvulas determina-se  $A_c$  e  $A_a$  com as mesmas relações utilizadas para os pratos perfurados. Para a estimativa da área dos orifícios:

válvula Glitsch:	$A_o = 1.183 \cdot 10^{-3} n_v$	A-30
válvulas circulares:	$A_o = n_v \cdot \pi \cdot d_f^2 / 4$	A-31

Estas relações são válidas para geometrias 'cross' e "split flow".

Para válvulas do tipo Glitsch Ballast  $V_1$  ou  $V_4$  não é necessário o conhecimento de  $d_f$  enquanto utilizam um furo de dimensões padrão, a área dos orifícios é estimada como produto da área superficial de um orifício (fornecido pelo manual Glitsch - 1986), e o número de válvulas,  $n_v$ , presentes no prato.

No caso em que a válvula não é encontrada no manual de Glitsch utiliza-se a relação em que a superfície do orifício é determinada pelo conhecimento de  $d_f$ .

## A.2 - Correlações fluidodinâmicas

O módulo geometria do prato permite definir as características geométricas principais do prato:

- escoamento "cross-flow" ou "split-flow" ,
- diâmetro do prato ,
- altura (  $h_w$  ) e comprimento do "downcomer" (  $w$  )
- espaçamento entre os pratos (  $TS$  ) e
- características específicas do tipo de prato utilizado: I-perfurado, II-valvulado, III-campânula

I- perfurados :

- diâmetro do orifício (DF), passo do orifício ( $P_f$ ), espessura do prato ( $SP_i$ ), área ativa ( $A_a$ ).

IIa- valvulado modelo Glitsch - Ballast  $V_1$  e  $V_4$  :

- número de válvulas ( $n_v$ ), espessura da válvula ( $S_v$ ), espessura do prato ( $SP_i$ ), área ativa ( $A_a$ ).

IIb- valvulado modelo Nencetti - Nardini - Zanelli :

- número de válvulas ( $n_v$ ), diâmetro e espessura da válvula, densidade do metal da válvula ( $\rho_m$ ), diâmetro do orifício (DF), espessura do prato (  $Sp$ ), área ativa (  $A$ ).

III- campânulas

- número de campânulas ( $n_c$ ), diâmetro (  $Dc_p$  ) e altura da campânula ( $hc_p$ ), espessura da campânula (  $Svc$ ), número de aberturas por campânula ( $n_p$ ), distância do prato ao bordo

superior da campânula ( $h_s$ ), distância do prato ao bordo inferior da campânula ( $h_{sc}$ ), altura do conduto ( $h_{cm}$ ), diâmetro ( $d_{cm}$ ).

### A.2.1 - Correlações fluidodinâmicas para pratos perfurados

#### 1. Carga hidráulica.

O líquido sobre a área perfurada encontra-se na forma de espuma de altura  $h_f$ . A altura equivalente do líquido  $h_L$  é aquela que se obtém se todo o líquido clarificasse:

$$h_L = 0.0061 - 0.238 h_w \cdot \rho_v^{0.5} V/A_a + 1.225 L/Z_p + 0.725 h_w \quad \text{A-32}$$

$$h_F = 0.673 \cdot \rho_v^{0.5} V/A_n + 10.33 L/Z_p + 0.73 h_w \quad \text{A-33}$$

#### 2. Perda de carga total do vapor ( $h_G$ ).

A queda total de pressão entre os pratos  $n$  (inferior) e  $n+1$  (superior) é dividida em perda do prato seco ( $h_D$ ), perda devido a altura de líquido ( $h_L$ ) e perda residual ( $h_R$ ):

$$h_G = h_D + h_L + h_R, \quad \text{A-34}$$

$$h_D = 0.5 V_o^2 \cdot C_o [0.4(1.25 - A_o/A_n) + 4 S_{pl} f/df + (1 - A_o/A_n)^2] \frac{\rho_v}{\rho_l} \cdot g, \quad \text{A-35}$$

$$\text{onde } C_o = 1.09 \frac{d_f}{S_{pl}} \quad \left( \text{na faixa } 0.2 \leq \frac{S_{pl}}{d_f} \leq 2.0 \right)$$

$$h_R = 6 \cdot T_s / (d_f \cdot g \cdot \rho_l), \quad \text{A-36}$$

#### 3. Perda de carga do líquido ao entrar no prato pela abertura do canal de entrada ( $h_2$ ).

O fluxo de líquido proveniente do 'downcomer' do prato superior ao entrar no prato inferior resulta uma perda de carga estimada por :

$$h_2 = (3/2 g)(L/A_{da})^2 \quad \text{A-37}$$

#### 4. Altura de líquido no 'downcomer' ( $h_c$ ) (fig. A.5)

- a diferença de altura ( $h_3$  na fig. A5) entre o interior e o exterior do do conduto de carga é dado pela soma da perda de carga do vapor sob o prato superior, aproximada por  $h_G$  e determinada sobre o prato considerado, com a perda  $h_2$  do líquido, ou seja:

$$h_3 = h_G + h_2$$

- desprezando o gradiente líquido o nível externo do conduto supera o vertedouro de uma altura de líquido é dada por  $h_{ow}$  (relação de Francis):

$$h_{ow} = 0.666 (L'/w)^{2/3} \quad A-38$$

- no caso de conduto de carga lateral é necessário introduzir  $W_{ef}$  que considera o efeito da restrição de secção causado pela parede circular da coluna:

$$h_{ow} = 0.666 (L'/w_{ef})^{2/3} \quad A-39$$

$$w_{ef} = [D^2 - (D \cos \beta + 2 h_1')^2]^{1/2} \quad A-40$$

- a altura de líquido  $h_c$ , no interior do conduto resulta:

$$h_c = h_w + h_{ow} + h_G + h_2 \quad A-41$$

#### 5. 'holdup' molar no prato ( $M_p$ ) e no conduto ( $M_c$ )

- os valores do 'holdup' são expressos em kmol e obtidos da relação entre a área de referência e relativa altura de líquido (congruência volumétrica).

- para geometria 'cross-flow':

$$M_p = (A_n - A_d) h_L \rho^l = \sum_{i=1}^{NC} M_{i,n} \quad A.42a$$

$$M_c = A_d h_c \rho^l = \sum_{i=1}^{NC} M_{i,n}^d \quad A-42b$$

$$M_p + M_c = (A_n - A_d) h_L \rho^l + A_d h_c \rho^l = \sum_{i=1}^{NC} M_{i,n} + \sum_{i=1}^{NC} M_{i,n}^d \quad A-43$$

- para geometria 'split flow' estima-se o 'holdup' no conduto como uma média entre o 'holdup' no conduto central e no conduto lateral.

#### 6. Controle de 'flooding', e gotejamento:

- a altura do líquido no conduto não deve ser superior a metade do espaçamento entre os pratos.

$$h_c \leq 0.5 S_{pt} \quad A-44$$

- definidos alguns coeficientes em função da razão entre a área ativa e dos orifícios, do espaçamento entre os pratos, das vazões e densidades é possível estimar a velocidade limite de 'flooding',  $V_F$  e definir como grau de 'flooding',  $F_1$ , a razão entre a velocidade do vapor referida a área nominal e a velocidade limite. Todas as condições de funcionamento em que  $F_1$  se mantém inferior a 0.8 ou 0.85 são aceitáveis:

$$\text{para } A_o/A_a \leq 0.1: F_F = 0.5 + 5 A_o/A_a \quad \text{A-45}$$

$$\text{para } A_o/A_a > 0.1: F_F = 1$$

$$a = 0.01173 + 0.0744 S_{pt} \quad \text{A-46}$$

$$b = 0.015 + 0.034 S_{pt} \quad \text{A-47}$$

$$C_F = F_F \{a \log [(\frac{\rho_l}{\rho_v})^{1/2} V/L'] + b\} (T_s/0.02)^2 \quad \text{A-48}$$

$$V_F = C_F \left[ \frac{\rho_l - \rho_v}{\rho_v} \right]^{1/2} \quad \text{A-49}$$

$$V_n = V/A_n \quad \text{A-50}$$

$$F_1 = V_n/V_F \quad \text{A-51}$$

- se a velocidade do vapor for muito baixa parte da corrente líquida gotejará pelos orifícios do prato. A velocidade limite mínima,  $V_{01}$  do vapor no orifício é dada por:

$$E_{sp} = 2.8 (d_f/z_g)^{0.724} \quad \text{A-52}$$

$$V_{01} = 0.0229 [\mu_v^2 \rho_l / (T_s d_f \rho_v^2)]^{0.379} \cdot (S_{pt}/d_f)^{0.293} \cdot [2 A_a d_f / (3^{1/3} p_f^3)]^{Esp} T_s / \mu_v \quad \text{A-53}$$

## A.2.2 - Correlações fluidodinâmicas para pratos com campânula

### 1. Carga hidráulica.

Altura do líquido ( $h_L$ ) e espuma ( $h_F$ ) no prato:

- para o prato com campânula deve-se determinar a altura média da espuma ( $h_F$ ), e também a altura equivalente do líquido claro  $h_L$  (Nencetti et al - 1967).

$$h_L = 0.01262 - 0.0123 \cdot \rho_v \cdot S^{1/2} V/A_n + 2.052 L/w + 0.69 h_w \quad \text{A-54}$$

$$h_F = -0.00969 + 0.0435 \rho_v \cdot (V/A_n)^2 + 1.71 L/w + 1.94 h_w \quad \text{A-55}$$

- para o prato 'split flow' com conduto central deve-se substituir o comprimento do vertedouro lateral ( $w$ ) pelo central ( $w_2$ ).

## 2. Perda de carga total do vapor ( $h_G$ ):

- a perda de carga global do vapor ao atravessar o prato é devido a passagem na campânula ( $P_c$ ) a saída da abertura ( $P_f$ ) e a fração da altura de líquido ( $P_1$ ) atravessada pelo vapor.

$$P_c = 3 [V/(A_r n_c)]^2 \cdot \frac{\rho_v}{(g \cdot \rho_l)} \quad \text{A-56}$$

$$P_f = 0.32 [3.6 V/(n_f \rho_l \cdot n_c)]^{2/3} [\rho_l - \rho_v]^{0.5} \quad \text{A-57}$$

$$P_1 = h_L (1 - h_s/h_F) \quad \text{A-57a}$$

$$h_G = P_c + P_f + P_1 \quad \text{A-58}$$

## 3. Perda de carga do líquido ao entrar no prato:

- análoga ao modelo de Treybal e com a mesma simbologia:

$$h_2 = (3/2 g) (L/A_{da})^2 \quad \text{A-59}$$

- a perda por atrito devido a resistência da campânula a passagem do líquido é representada pela diferença entre o nível de líquido na extremidade de entrada e de saída do prato. Tal desnível,  $D_t$  (delta) é chamado de gradiente líquido e tem a dimensão de um comprimento. O seu valor é obtido, resolvendo-se uma equação de terceiro grau na incógnita  $D_t^{1/2}$  (Davies, 1947):

$$a \cdot D_t^{3/2} + c \cdot D_t^{1/2} + d = 0, \quad \text{A-60}$$

os coeficientes desta equação são funções do passo em que as campânulas estão distribuídas. No programa desenvolvido considera-se as disposições a passo triangular equilátero, triangular não equilátero e passo quadrado.

## 4. Altura de líquido no conduto de carga ( $h_c$ ):

- para o prato com campânula não é possível desprezar-se o gradiente líquido como nos casos do prato perfurado.

- a altura de crista (acima do vertedouro) do líquido limpo é estimada pelo modelo de Treybal:

$$h_{ow} = 0.666 (L/w_{ef})^{2/3} \text{ onde} \quad \text{A-61}$$

$$w_{ef} = [D^2 - (D \cos \beta + 2 h_1)^2]^{1/2}. \quad \text{A-62}$$

- assim para o prato 'cross-flow' tem-se a altura do líquido no interior do conduto:

$$h_c = h_w + h_{ow} + h_G + h_2 + D_t \quad \text{A-63}$$

- no prato 'split flow', a altura de líquido no interior do conduto central,  $h_c'$ , do conduto lateral,  $h_c''$ , resulta:

$$h_c' = h_w + h_{ow} + h_G + h_2' + D_t \quad \text{A-64}$$

$$h_c'' = h_w + h_{ow}'' + h_G'' + h_2 + D_t'' \quad \text{A.65}$$

5. 'holdup' molar no prato ( $M_p$ ) e no conduto ( $M_c$ ):

- para geometria 'cross-flow':

$$M_p = (A_n - A_d) h_L \rho^l \quad \text{A-66}$$

$$M_c = A_d h_c \rho^l \quad \text{A-67}$$

- para geometria 'split-flow'  $M_p$  e  $M_c$  são estimados como valores médio.

6. Controle de 'flooding',

- a altura de líquido no conduto de carga não deve ser superior a metade do espaçamento entre os pratos:

$$h_c \leq 0.5 S_{pt} \quad \text{A-68}$$

- definindo alguns coeficientes (Treybal, 1968 e 1980) em função dos valores dos fatores de carga (arg) do espaçamento entre os pratos, das vazões e das densidades é possível determinar a velocidade limite de 'flooding',  $V_F$ , e definir como grau de 'flooding',  $F_1$ , a razão entre a velocidade do vapor referida a área nominal e a velocidade limite. Todas as condições em que  $F_1$  se mantém inferior a 0.85 são aceitáveis.

$$\text{arg} = \left( \frac{\rho_v}{\rho_l} \right)^{0.5} . L / V \quad \text{A-69}$$

para  $\text{arg} \leq 0.2$ :

$$a = 0.0015 + 0.0916 S_{pt} \quad \text{A-70}$$

$$b = 0.0013 + 0.0336 S_{pt} \quad \text{A-71}$$

para  $\text{arg} > 0.2$ :

$$a = 0.0041 + 0.0492 S_{pt} \quad \text{A-72}$$

$$b = 0.0021 + 0.0564 S_{pt} \quad \text{A-73}$$

$$C_F = \{a \cdot \log[(\frac{\rho_l}{\rho_v})^{1/2} V/L] + b\} (T_s/0.02)^{0.2} \quad \text{A-74}$$

$$V_F = C_F \left[ \frac{\rho_l - \rho_v}{\rho_v} \right]^{1/2} \quad \text{A-75}$$

$$V_n = V/A_n \quad \text{A-76}$$

$$F_1 = V_n/V_F \quad \text{A-77}$$

### A.2.3. Correlações fluidodinâmicas para prato a válvula: modelo Glitsch-Ballast $V_1$ e $V_4$ .

As relações relativas as válvulas Glitsch contém um maior grau de empirismo quando comparado com os procedimentos anteriores, enquanto trata-se de um manual para o projeto de válvulas (Glitsch, 1986).

Este modelo consiste de simular válvulas do tipo Ballast  $V_1$  e  $V_4$ , a diferença de procedimento é devido aos valores assumidos por alguns coeficientes:

$$\begin{aligned} C_1 &= 0.05468 \text{ Ballast } V_1 \\ C_2 &= 0.2871 \text{ Ballast } V_1, S_{pi} = 1.880 \text{ mm} \\ C_2 &= 0.2515 \text{ Ballast } V_1, S_{pi} = 2.642 \text{ mm} \\ C_2 &= 0.2242 \text{ Ballast } V_1, S_{pi} = 3.404 \text{ mm} \\ C_2 &= 0.1586 \text{ Ballast } V_1, S_{pi} = 6.350 \text{ mm} \\ C_1 &= 0.02734 \text{ Ballast } V_4 \\ C_2 &= 0.1859 \text{ Ballast } V_4, S_{pi} \leq 3.404 \text{ mm} \end{aligned}$$

#### 1. Altura de líquido e espuma no prato:

- considerando o efeito de aeração devido ao vapor presente no líquido, obtém-se  $h_L$  somando-se os 80% da altura de crista com os 40% (fator de aeração) da altura do vertedouro:

$$h_L = 0.554 (L/w)^{2/3} + 0.4 h_{ow} \quad \text{A-78}$$

#### 2. Perda de carga do vapor atravessando o prato:

- a perda seca  $h_d$  é obtida escolhendo-se o maior valor entre  $h_{d1}$  (válvula parcialmente aberta) e  $h_{d2}$  (válvula totalmente aberta):

$$h_{d1} = [1.35 S v_{a1} \cdot \rho_m + C_1 \cdot \rho_v (V/A_o)^2] / \rho_l \quad A-79$$

$$h_{d2} = C_2 (V/A_o)^2 \cdot \frac{\rho_v}{\rho_l} \quad A-79a$$

$$h = \text{máx} (h_{d1} \cdot h_{d2}) \quad A-80$$

- uma equação assim definida, pode ser contínua, porém pode apresentar descontinuidade na derivada, criando problemas durante a integração do sistema de equações algébrico-diferencial. Portanto assume-se  $h_D = h_{D1}$ .

- a perda de carga total do vapor atravessando o prato resulta :

$$h_G = h_D + h_L \quad A-81$$

### 3. Perda de carga do líquido:

- o manual Glitsch reporta uma relação proporcional a altura cinética segundo um fator confrontável com aquele teórico utilizado por Treybal (1968, 1980) no caso de pratos perfurados:

$$h_2 = 0.1777 (L/A_{da})^2 \quad A-82$$

### 4. Altura de líquido no conduto de carga ( $h_c$ )

- a altura de líquido no conduto obtém-se somando o nível do líquido nas proximidades do vertedouro de entrada ( $h_1 + h_{ow}$ ) com a perda de carga do vapor e do líquido mediante um fator dependente da densidade. A altura da crista (acima do vertedouro) e do líquido no conduto resulta:

$$h_{ow} = 0.554 (L/W)^{2/3} \quad A-83$$

$$h_c = h_w + h_{ow} + [h_L + h_D + h_2] \left( \frac{\rho_l}{\rho_l - \rho_v} \right) \quad A-84$$

### 5. 'holdup' molar no prato e no conduto

- análogo aos pratos anteriores.

### 6. Controle de 'flooding', e de gotejamento.

- para não encontrar-se em condições de 'flooding', o nível de líquido no conduto não deve superar os 60% do espaçamento entre os pratos:

$$h_c < 0,6 S_{pt} \quad \text{A-85}$$

- define-se o coeficiente de 'flooding', como o mínimo entre  $C_{F1}$ ,  $C_{F2}$  e  $C_{F3}$ :

$$C_{F1} = 0.1742 S_{pt}^{.65} \cdot \rho_v^{1/6} \cdot SF \quad \text{A-86}$$

$$C_{F2} = (0/1865 - 0.0277/S_{pt} - 5.012 \cdot 10^{-4} \cdot S_{pt} \cdot \rho_v) SF \quad \text{A-87}$$

$$C_{F3} = (0.1823 - 1.138 \cdot 10^{-3} \cdot \rho_v) \cdot SF \quad \text{A-88}$$

$$C_F = \min(C_{FD}, C_{F2}, C_{F3}) \quad \text{A-89}$$

- estima-se o grau de 'flooding', como o maior valor entre  $F_{11}$  e  $F_{12}$ . Todas as condições de funcionamento em que  $F_1$  mantém-se inferior a 0.85 e 0.90 são consideradas aceitáveis:

$$F_{11} = \{V \left[ \frac{\rho_v}{\rho_l - \rho_v} \right]^{1/2} + 1.3719 L Z_G\} / (A_a \cdot C_F) \quad \text{A-90}$$

$$F_{12} = 1.1821 \cdot V \cdot \left[ \frac{\rho_v}{\rho_l - \rho_v} \right]^{1/2} / (A_t \cdot C_F) \quad \text{A-91}$$

$$F_1 = \max(F_{11}, F_{12}) \quad \text{A-92}$$

- a velocidade limite mínima de vapor nos furos,  $V_{o1}$  (m/s) abaixo da qual tem-se gotejamento é dada por:

$$V_{o1} = 0.0914 \quad \text{para Ballast } V_1$$

$$V_{o1} = 0.1829 \quad \text{para Ballast } V_4$$

#### A.2.4 - Correlações fluidodinâmicas para pratos a válvula. Modelo Nencetti - Nardini - Zanelli

##### 1. Altura de líquido e de espuma do prato

- segundo correlação proposta por Nencetti, Nardini e Zanelli (1967)

$$P_s = \rho_m S_v (d_v/d_f)^2 \quad \text{A-93}$$

$$h_{l1} = 0.00143 P_s - 0.0123 \cdot \rho_v^{0.5} \cdot V/A_n + 1.55 L/w + 0.69 h_w \quad \text{A-94}$$

$$h_{f1} = 0.4232/P_s + 0.01696 \cdot \rho_v \cdot (V/A_n)^2 + 8.064 L/w + 1.43 h_w \quad \text{A-95}$$

##### 2. Perda de carga do vapor:

- a resistência encontrada pelo vapor para atravessar o prato a válvula,  $h_G$ , é estimada pela soma das resistências em série (Nencetti et al. 1967):

. perda de carga na entrada do orifício, devida a restrição de fluxo,

. perda de carga para alçar a válvula,

. perda de carga através do líquido (desprezando o gradiente hidráulico no prato).

- somando as duas primeiras perdas obtém-se uma relação relativa a queda de pressão global do vapor ao atravessar a válvula:

$$P_v = 1.35 S_v \cdot \frac{\rho_m}{\rho_l} + 0.1504 \left( \frac{\rho_v}{\rho_l} \right) (V/A_o)^2 \quad A-96$$

- a perda através do líquido é estimada utilizando o fator de aeração  $\beta_f$  a relação de Francis e a altura do vertedouro:

$$\beta_f = 0.5 (1 + h_l/h_f) \quad A-97$$

$$P_1 = \beta_f [0.6648(L/w)^{2/3} + h_w] \quad A-98$$

- a perda de carga global do vapor:

$$h_G = P_v + P_1 \quad A-99$$

### 3. Perda de carga do líquido

- utiliza-se a relação proposta por Treybal (1968, 1980) para prato perfurado:

$$h_2 = (3/2 g) (L/A_{da})^2 \quad A-100$$

### 4. Altura de líquido no conduto de descarga

- referindo-se ainda a Treybal (1968, 1980)

$$h_{ow} = 0.666 (L/W_{ef})^{2/3} \quad A-101$$

$$W_{ef} = [D^2 - (D \cdot \cos \beta + 2 h_1)^2]^{1/2} \quad A-102$$

- a altura de líquido no interior do conduto resulta:

$$h_c = h_w + h_{ow} + h_G + h_2 \quad A-103$$

### 5. 'holdup' molar no prato e no conduto:

- análogo aos procedimentos anteriores

### 6. Controle de 'flooding', e de gotejamento:

- Nenceti et al. (1967) não reportam correlações relativa ao controle de 'flooding', e gotejamento, portanto considera-se somente o limite imposto ao nível de líquido no conduto:

$$h_c < 0.5 S_{pt}$$

A-104

- o significado das condições de 'flooding', e de gotejamento é o mesmo tratado para os pratos perfurados.

## Apêndice A: Lista de Figuras

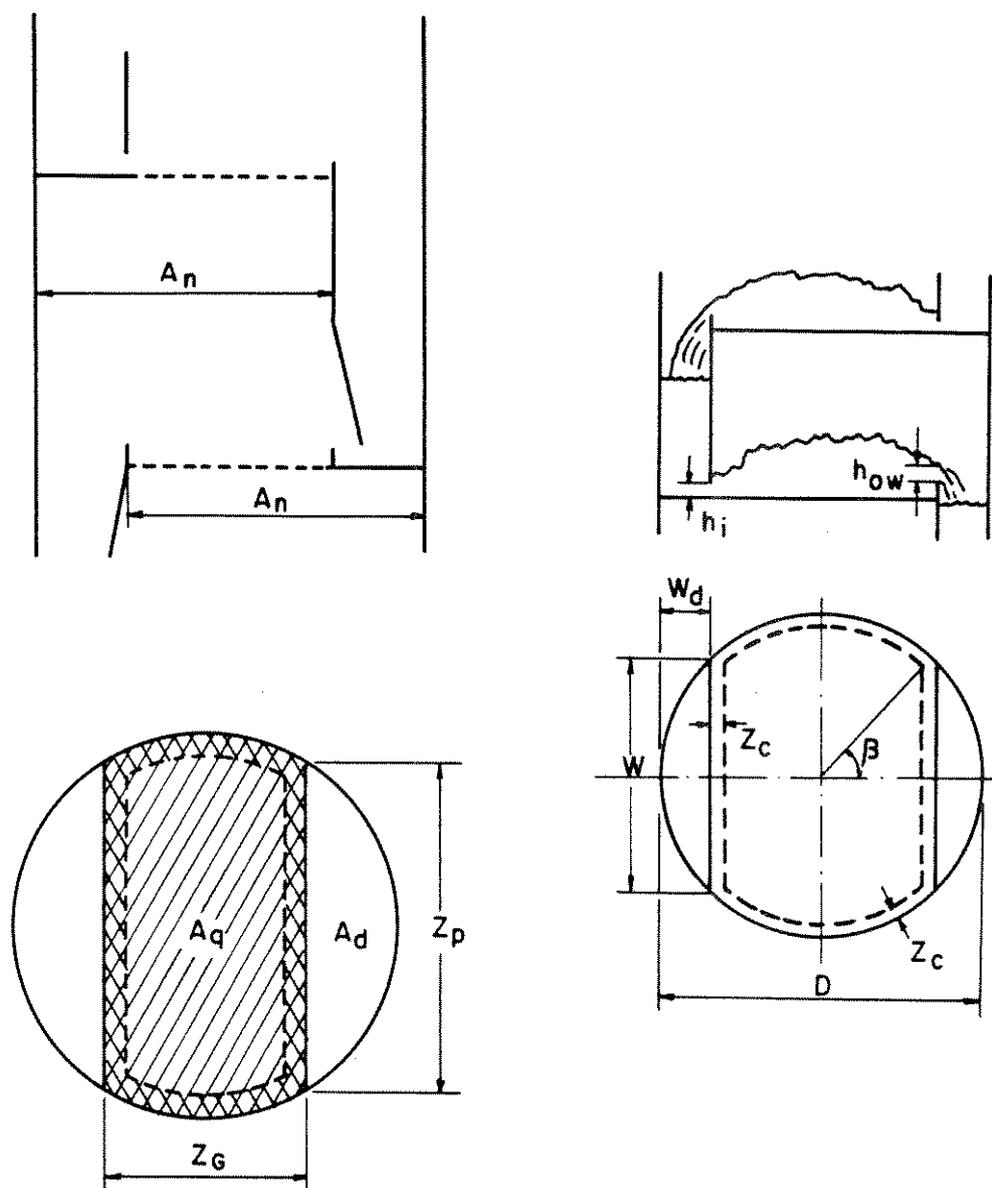


Fig. A1 - Grandezas geométricas referentes ao prato 'cross flow'.

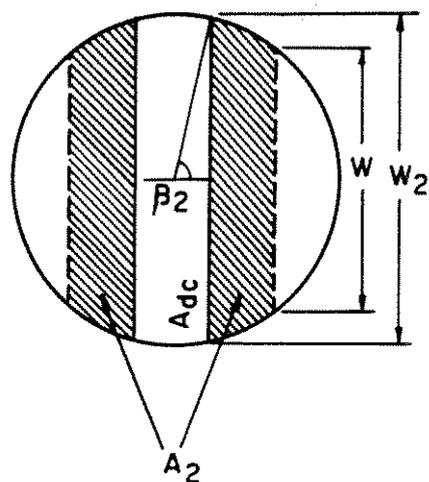


Fig. A2 - Grandezas geométricas referentes ao prato 'split flow'.

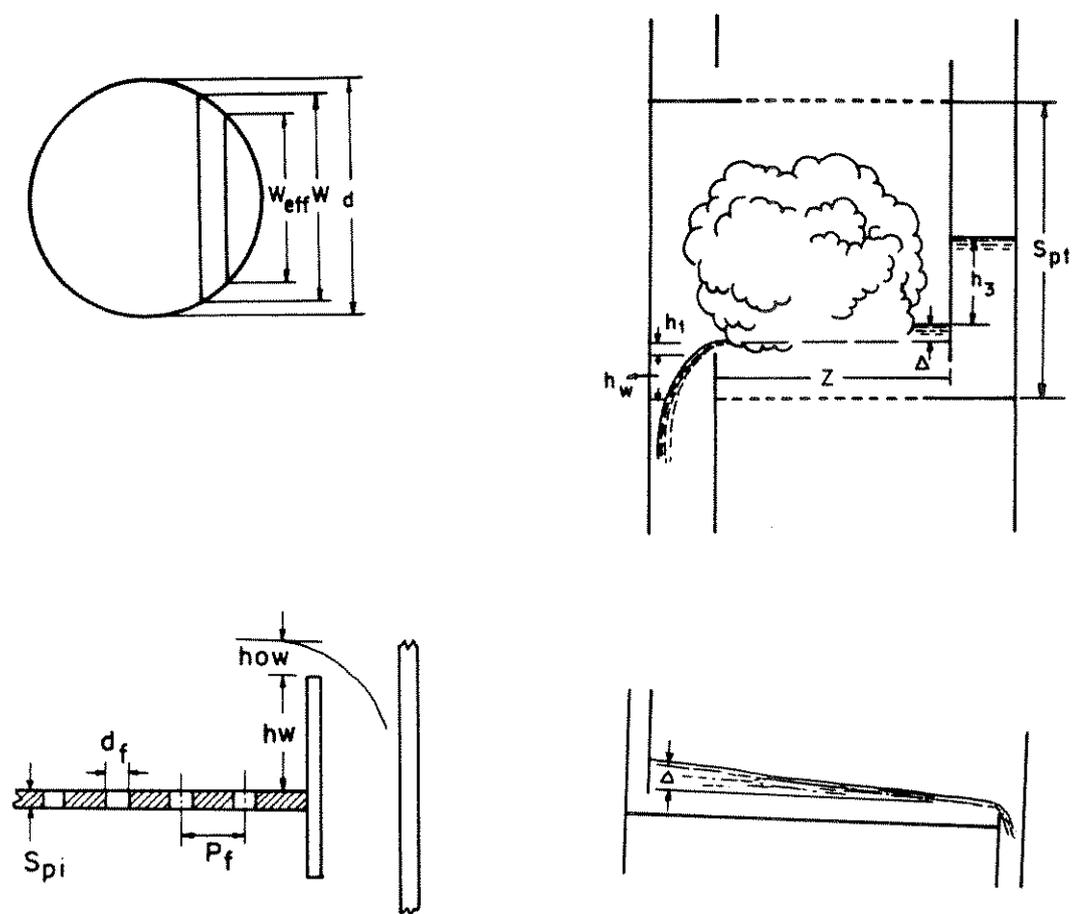


Fig. A3 - Simbologia do prato perfurado.

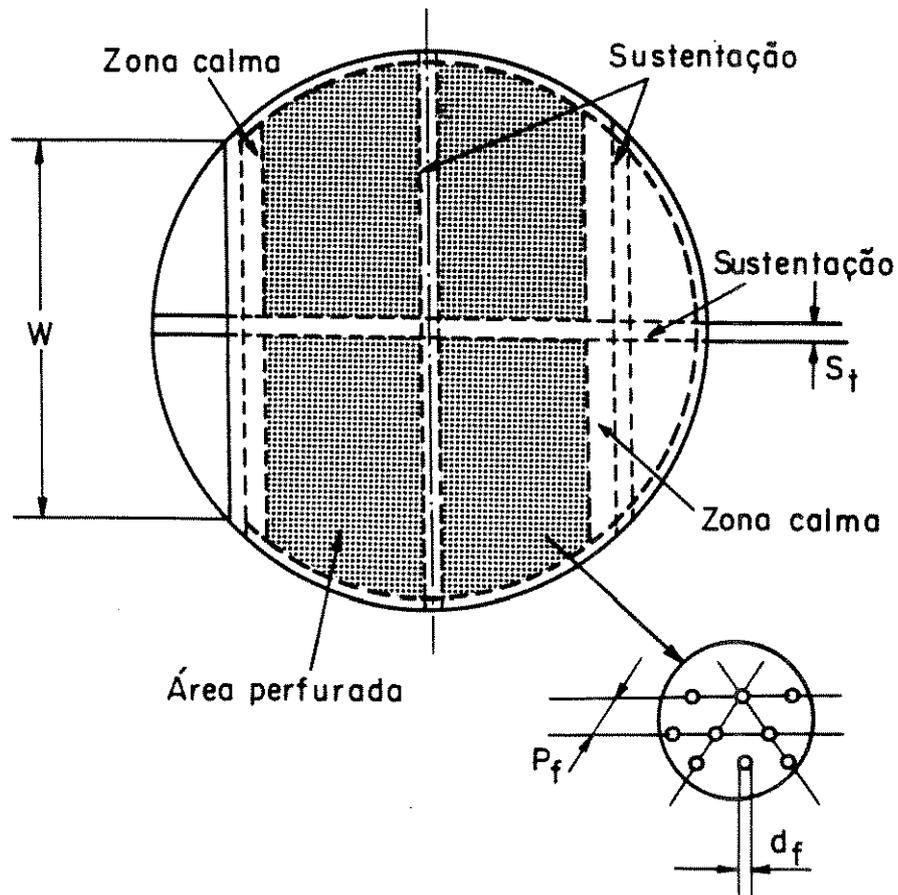


Fig. A4 - Sustentação do prato.

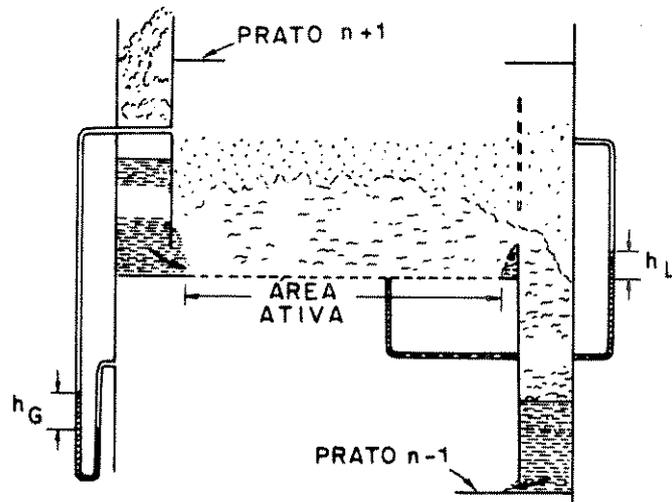


Fig. A5 - Diagrama esquema do prato perfurado.

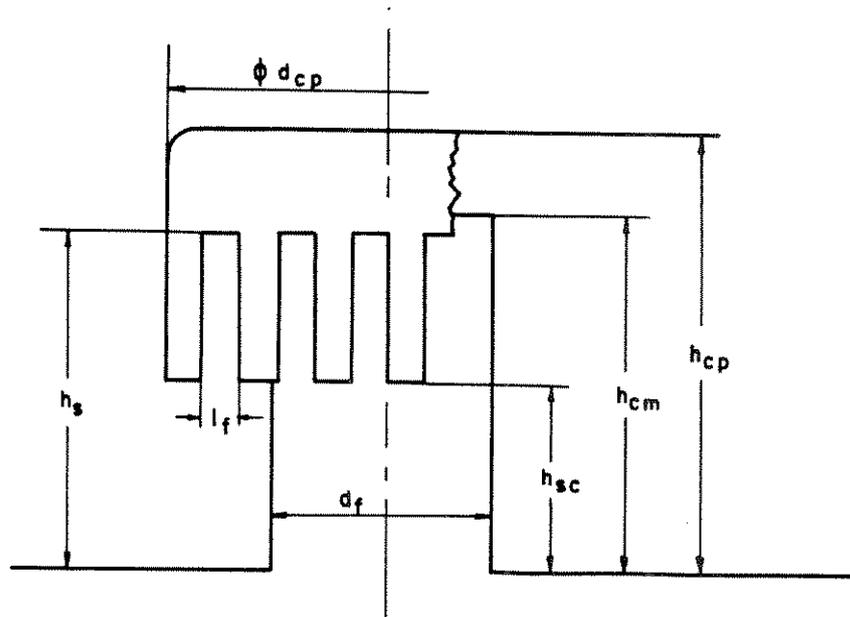


Fig. A6 - Simbologia do prato com campânula.

## Apêndice B - Correlações Para o Segundo Coeficiente Virial

- Modificações apresentada por Tsnopoulos na correlação de Pitzer e Curl

Para os componentes puros

Correlação de Pitzer-Curl

$$\frac{B_1 P_{c_i}}{RT_{c_i}} = f_{P_q}^{(0)}(T_r) + W_i f_{P_q}^{(1)}(T_r); \text{ com} \quad (\text{B.1})$$

$$f_{P_q}^{(0)}(T_r) = 0.1445 - \frac{0.330}{T_r} - \frac{0.1385}{T_r^2} - \frac{0.0121}{T_r^3} \quad (\text{B.2})$$

$$f_{P_q}^{(1)}(T_r) = 0.073 + \frac{0.46}{T_r} - \frac{0.50}{T_r^2} - \frac{0.097}{T_r^3} - \frac{0.0073}{T_r^8} \quad (\text{B.3})$$

Modificação de Tsnopoulos para gases apolares

$$\frac{B_1 P_{c_i}}{RT_{c_i}} = f_{T_r}^{(0)}(T_r) + W_i f_{T_r}^{(1)}(T_r), \text{ com} \quad (\text{B.4})$$

$$f_{T_r}^{(0)} = f_{P_q}^{(0)}(T_r) - \frac{0.000607}{T_r^8} \quad (\text{B.5})$$

$$f_{T_r}^{(1)} = 0.0637 + \frac{0.331}{T_r^2} - \frac{0.423}{T_r^3} - \frac{0.008}{T_r^8} \quad (\text{B.6})$$

Modificação de Tsnopoulos para gases polares

- para compostos que não formam pontes de hidrogênio

$$\frac{B_1 P_{c_i}}{RT_{c_i}} = f_{T_r}^{(0)} + W_i f_{T_r}^{(1)} + f_{T_r}^{(2)}, \quad (\text{B.7})$$

$$f_{T_r}^{(2)} = \frac{a_i}{T_r^6} \quad (\text{B.8})$$

- para compostos que formam pontes de hidrogênio

$$f_{T_r}^{(2)} = \frac{a_i}{T_r^6} - \frac{b_i}{T_r^8} \quad (\text{B.9})$$

- Coeficientes cruzados para mistura

O segundo coeficiente virial cruzado, " $B_{ij}$ ", apresenta a mesma dependência da temperatura  $B_{ii}$  e  $B_{jj}$ . As equações a serem utilizadas  $T_{c_{ij}}$ ,  $P_{c_{ij}}$ ,  $W_{i,j}$ ,  $a_{i,j}$  e  $b_{i,j}$ , relacionados com os parâmetros dos componentes puros através da regra da mistura:

$$T_{c_{ij}} = (T_{c_i} T_{c_j})^{1/2} (1 - W_{i,j}) \quad (\text{B.10})$$

$$P_{c_{ij}} = \frac{4T_{c_{ij}} (P_{c_i} v_{c_i} / T_{c_i} + P_{c_j} v_{c_j} / T_{c_j})}{(v_{c_i}^{1/3} + v_{c_j}^{1/3})} \quad (\text{B.11})$$

$$W_{i,j} = 0,5 (W_i + W_j) \quad (\text{B.12})$$

Para binários polar-não polar,  $B_{ij}$  não polar

$$a_{i,j} = 0 \quad (\text{B.13})$$

$$b_{i,j} = 0 \quad (\text{B.14})$$

Para binários polar-polar,  $B_{ij}$  é calculado assumindo

$$a_{i,j} = 0,5 (a_i + a_j) \quad (\text{B.15})$$

$$b_{i,j} = 0,5 (b_i + b_j) \quad (\text{B.16})$$

Correção de Hayden-O'Connell

$$B_{i,j} = B_{i,j}^F + B_{i,j}^D \quad (\text{B.17})$$

A contribuição das moléculas livres é dada por  $B_{i,j}^F$  e  $B_{i,j}^D$  representa a contribuição das moléculas dimerizadas.

$$B_{i,j}^F = (B_{\text{polar}}^F)_{i,j} \quad (\text{B.18})$$

$$B_{i,j}^D = (B_{\text{metaestável}})_{i,j} + (B_{\text{ligação}})_{i,j} + (B_{\text{químico}})_{i,j}, \text{ onde} \quad (\text{B.19})$$

$$(B_{\text{apolar}}^F)_{i,j} = b_{o_{i,j}} \left[ 0,94 - \frac{1,47}{T_{i,j}^*} - \frac{0,85}{(T_{i,j}^*)^2} - \frac{1,015}{(T_{i,j}^*)^3} \right] \quad (\text{B.20})$$

$$(B_{\text{polar}}^F)_{i,j} = b_{o_{i,j}} u_{i,j}^* \left[ 0,74 - \frac{3,0}{T_{i,j}^*} + \frac{2,1}{(T_{i,j}^*)^2} + \frac{2,1}{(T_{i,j}^*)^3} \right] \quad (\text{B.21})$$

$$(B_{\text{metaestável}})_{ij} + (B_{\text{ligação}})_{ij} = b_{o_{i,j}} A_{i,j} e^{(\Delta h_{i,j}/T_{i,j}^*)} \quad (\text{B.22})$$

$$(B_{\text{químico}})_{ij} = b_{o_{i,j}} E_{i,j} \left[ 1 - e^{(1500n_{i,j}/T)} \right] \quad (\text{B.23})$$

com

$$\frac{1}{T_{i,j}^*} = \frac{1}{T_{i,j}} - 1,6 W_{ij} \quad (\text{B.24})$$

## Apêndice C - Equações para os coeficientes de Atividade

### C.1 - Equação UNIQUAC

- parâmetros  $a_{ji}$  e  $a_{ij}$

$$\ln \gamma_i = \ln \frac{\phi_i}{X_i} + \left( \frac{Z_e}{2} \right) q_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} + l_i - \frac{\phi_i}{X_i} \sum_j X_j l_j - q_i \ln \left( \sum_j \theta_j \tau_{ji} \right) + q_i - q_i \frac{\sum_j \theta_j \tau_{ij}}{\sum_k \theta_k \tau_{ki}} \quad (\text{C.1})$$

com

$$\tau_{ji} = \exp \left( -\frac{a_{ji}}{T} \right) \quad \tau_{ij} = \exp \left( -\frac{a_{ij}}{T} \right) \quad (\text{C.2})$$

$$l_j = \frac{Z_e}{2} (r_j - q_j) - (r_j - 1) \quad (\text{C.3})$$

$$\phi_i = \frac{r_i X_i}{\sum_j r_j X_j} \quad (\text{C.4})$$

$$\theta_i = \frac{q_i X_i}{\sum_j q_j X_j} \quad (\text{C.5})$$

$$\theta_i = \frac{q_i X_i}{\sum_j q_j X_j} \quad (\text{C.6})$$

### C.2 - Equação de Wilson

- parâmetros  $\Delta\lambda_{ij}$  e  $\Delta\lambda_{ji}$

$$\ln \gamma_k = 1 - \ln \sum_j X_j \Lambda_{k,j} - \sum_i \frac{X_i \Lambda_{i,k}}{\sum_j X_j \Lambda_{i,j}}$$

$$\Lambda_{i,j} = \frac{V_j}{V_i} \exp \left[ -\frac{\Delta\lambda_{i,j}}{RT} \right]$$

## C.3 - Equação NRTL

- parâmetros  $\Delta g_{ij}$  e  $\Delta g_{ji}$

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_j \tau_{j,i} G_{j,i} X_j}{\sum_l G_{l,i} X_l} + \sum_j \frac{X_j G_{i,j}}{\sum_l G_{l,i} X_l} \left[ \tau_{i,j} - \frac{\sum_r X_r \tau_{r,j} G_{r,j}}{\sum_l G_{l,j} X_l} \right]$$

$i, j, l \text{ e } r = 1, 2 \dots \text{NC}$

$$\tau_{j,i} = \frac{\Delta g_{j,i}}{RT}$$

$$G_{j,i} = \exp(-\alpha_{j,i} \tau_{j,i})$$

- os parâmetros das correlações anteriores são encontrados nas referências Prausnitz et al (1980) e Fredenslund et al (1977).

## Apêndice D - Estimativa automática dos parâmetros de sintonia do controlador.

Considerando que o método proposto por Cohen-Coon, e muito usado na literatura, para identificar os parâmetros do modelo da curva de reação, demonstra-se de difícil aplicação, principalmente na presença de ruídos, apresenta-se aqui um procedimento que permite estimar  $K_C$ ,  $\tau$  e  $t_d$  de modo automático, desfrutando-se do conhecimento do conjunto de pontos que descrevem a resposta do sistema.

De forma geral, a função exponencial:

$$y = \alpha \cdot \exp\left(-\frac{\beta}{t}\right) \quad (D1)$$

descreve frequentemente a curva de reação do sistema. Logo, esta pode ser assumida como modelo interpolante do conjunto de pontos que representam a curva de reação do sistema. Utiliza-se para a estimativa dos parâmetros adaptativos, uma típica rotina de regressão não linear, método de Levenberg-Marquardt (Himmelblau, 1988) para minimizar a função objetivo (modelo interpolante).

Uma vez estimado os parâmetros do modelo interpolante faz-se uma análise estatística dos resultados para verificar a adaptação do modelo aos dados. Utiliza-se para isto um índice de correlação objetivando verificar se, para cada caso específico, o modelo interpolante ajusta-se de modo satisfatório aos dados experimentais. O índice de correlação  $R^2$  ;é definido como a razão entre a soma dos quadrados dos resíduos e a soma dos quadrados totais, isto é:

$$R^2 = \frac{SSR_m}{SST_m} \quad \text{onde} \quad (D2)$$

$$SSR_m = \sum_{i=1}^N P_i (y_i - y)^2 \quad (D3)$$

$$SST_m = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{N_i} (y_{ij} - y)^2 \quad (D4)$$

$y$  é o valor estimado no ponto  $i$ ,  $y_{ij}$  é o valor do experimento  $j$  no ponto  $i$  e  $y$  é o valor médio repetido no ponto  $i$ . Assim, pode-se afirmar que o modelo se ajusta corretamente aos dados experimentais se  $R^2$  é próximo da unidade. Considera-se neste trabalho que a estimativa dos parâmetros que apresentem  $R^2 < 0,95$  não é precisa.

Conhecidos os parâmetros adaptativos  $\alpha$  e  $\beta$  da equação D1 a estimativa analítica de  $K_C$ ,  $\tau$  e  $t_d$  é feita pela primeira e segunda derivada desta equação (eq. D1):

$$y' = \frac{\alpha \cdot \beta}{t^2} \exp\left(-\frac{\beta}{t}\right) \quad (\text{D5})$$

$$y'' = -\frac{2\alpha\beta}{t^3} \exp\left(-\frac{\beta}{t}\right) + \frac{\alpha \cdot \beta^2}{t^4} \exp\left(-\frac{\beta}{t}\right) \quad (\text{D6})$$

A coordenada do ponto de inflexão (F) é obtida anulando-se a eq. D6:

$$F \equiv \left( \alpha \cdot e^{-2}; \frac{\beta}{2} \right) \quad (\text{D7})$$

Substituindo os valores de F na eq. D5 obtém-se o coeficiente angular da tangente no ponto de inflexão:

$$S = \frac{4\alpha}{\beta} e^{-2} \quad (\text{D8})$$

Portanto a reta tangente ao ponto de inflexão é dada por:

$$y = \frac{4\alpha}{\beta} e^{-2} (t - \alpha \cdot e^{-2}) + \frac{\beta}{2} \quad (\text{D9})$$

O tempo morto  $t_d$  é determinado calculando-se a intersecção da eq. D9 com o eixo referencial do tempo:

$$t_d = \alpha \cdot e^{-2} - \frac{\beta^2}{8\alpha e^{-2}} \quad (\text{D10})$$

Os outros dois parâmetros ficam determinados:

$$K_c = \frac{\alpha}{A} \quad \text{e} \quad t = \frac{\alpha}{S} \quad (\text{D11})$$

Estas grandezas inseridas nas relações da tabela 4.1 (Regras de Cohen-Coon) permitem a determinação dos parâmetros típicos do controlador.

## Apêndice E - Refervedor e Condensador - Desenvolvimento das equações dos modelos.

### E.1 - Determinação da altura de liquido no volume de controle A.

A Figura E1 apresenta uma secção transversal genérica do refervedor.

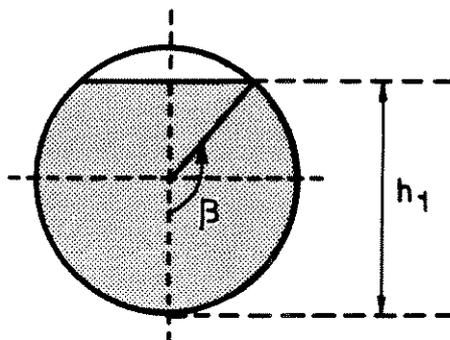


Fig. E1- Secção transversal genérica do refervedor

Deseja-se obter uma relação entre o volume e a altura de liquido com o ângulo  $\beta$ .  
O volume do trocador de comprimento  $l_a$  é:

$$V = 2 \cdot l_a \cdot \left\{ \int_0^{R_r} d\rho \int_0^\beta r \cdot d\beta + \frac{1}{2} [R_r \cdot \cos(\Pi - \beta) \cdot R_r \cdot \sin(\Pi - \beta)] \right\} \quad \text{E1.1}$$

resolvendo a integral, obtém-se:

$$V = 2 \cdot l_a \cdot \left[ \frac{R_r^2 \cdot \beta}{2} - \frac{R_r^2}{2} \cos \beta \sin \beta \right] \quad \text{E1.2}$$

simplificando, tem-se:

$$V = l_a \cdot R_r^2 \cdot (\beta - \cos \beta \sin \beta) \quad \text{E1.3}$$

e considerando a hipótese de parâmetros concentrados tem-se a relação entre o 'holdup' de liquido no volume de controle a e o ângulo  $\beta$  :

$$M_1^a = \rho_1' \cdot l_a \cdot R_r^2 \cdot (\beta - \cos \beta \cdot \sin \beta) \quad \text{E1.4}$$

e com relação a figura FE1, a relação entre a altura  $h_1$  e o ângulo  $\beta$  é :

$$h_1 = 2 \cdot R_r \cdot \text{sen}^2 \frac{\beta}{2} \quad \text{E1.5}$$

### E.2 - Determinação da vazão volumétrica de líquido ( $L_b'$ ), corrente de saída do volume de controle b.

O holdup' de líquido no volume de controle b relaciona-se com a vazão volumétrica  $L_b'$  pela relação :

$$\sum_i M_{i,1}^b = \left( \frac{L_b'}{\mu_0 l \cdot \sqrt{2 \cdot g}} \right)^{\frac{2}{3}} \cdot l \cdot l_u \cdot \rho_l' + V_{liv} \cdot \rho_l' \quad \text{E2.1}$$

onde  $\mu_0$  é o coeficiente de Francis (Holland C.D. - 1963),  $l$  é a largura de vertedouro do refervedor (m),  $g$  é a aceleração da gravidade ( $\text{m}/\text{min}^2$ ),  $l_u$  é o comprimento do tambor definido pelo volume de controle b (m),  $\rho_l'$  é a densidade do líquido ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ) e  $V_{liv}$  o volume ocupado pelo líquido, definido pela altura do vertedouro ( $\text{m}^3$ ), relativo ao volume de controle b.

### E.3 - Equações de especificações de $Q_1$ e B.

A vazão do produto de fundo é definida pela equação da válvula utilizada:

$$B = CV_1 \cdot F_1 \cdot \sqrt{\frac{P_1 + \rho_l' \cdot g \cdot h_1 - P_{atm}}{\gamma_l'}} \quad \text{E3.1}$$

onde  $CV_1$  é a constante da válvula ( $\text{kmol}/\text{min}/\text{atm}^{0.5}$ ),  $F_1$  é a fração de abertura da válvula (adim),  $P_1$  é a pressão no refervedor (atm),  $P_{atm}$  é a pressão externa (pressão atmosférica),  $\gamma_l'$  é o peso específico relativo a água.

Considerando que o refervedor utiliza vapor de água saturado como fluido de aquecimento, a taxa de calor trocado no refervedor é calculada por:

$$Q_1 = W_r \cdot \lambda_r = U_r \cdot A_r \cdot (T_{st} - T_1) \quad \text{E3.2}$$

onde a vazão de vapor necessária para aquecer o refervedor é calculada pela equação da válvula :

$$W_r = CV_2 \cdot FV_2 \cdot \frac{\sqrt{P_u - P_s}}{\gamma_1^v} \quad \text{E3.3}$$

onde  $P_u$  é a pressão de vapor a montante da válvula e  $P_s$  sua pressão a jusante. A pressão a jusante depende da temperatura do vapor de água no refeedor ( $T_{st}$ ). A relação entre estas duas variáveis é encontrada interpolando valores através da tabela de vapor saturado, com  $T_{st}$  sendo função da taxa de calor trocada no refeedor e dada pela equação E3.2.  $A_r$  representa a área de troca térmica ( $m^2$ ),  $U_r$  ( $kcal/min/m^2/K$ ) o coeficiente global de troca térmica considerado constante,  $\lambda_r$  o calor latente do vapor do refeedor ( $kcal/kmol$ ) também considerado constante.

As frações de abertura  $F_1$  e  $F_2$  são funções dos tipos de controladores que estiverem sendo utilizados. Para a simulação da coluna em malha aberta tem-se que

$$\frac{dF_1}{dt} = \frac{dF_2}{dt} = 0 \quad E3.4$$

#### E.4 - Determinação da altura de líquido no tambor de refluxo

Considerando o modelo de parâmetros concentrados a altura de líquido no tambor de refluxo está relacionada com o 'holdup' de líquido e a geometria do tambor. Para a geometria considerada (Fig 2.9) tem-se:

$$\sum_i M_{i,ns} = [(h_{ns} - h_{dm}) \cdot S_a + V_d] \cdot \rho'_{ns} \quad E4.1$$

onde  $h_{ns}$  representa a altura de líquido no tambor (m),  $h_{dm}$  a altura do domo (m),  $S_a$  a secção transversal do tambor ( $m^2$ ),  $V_d$  volume do domo ( $m^3$ ).

#### E.5 - Perda de carga ( $\Delta P_f$ ) por atrito na tubulação (refeedor - fundo da coluna)

Considera-se a hipótese de que queda de pressão é expressa em termos de do fator de atrito de Fanning,

$$\Delta P = \frac{2 \cdot f \cdot L_c \cdot \rho \mu^2}{D} \quad E5.1$$

onde  $\rho$  é a densidade,  $\mu$  a velocidade no tubo de diâmetro  $D$  e comprimento equivalente  $L_c$  e  $f$ , o fator de atrito de Fanning dado por Round :

$$f = 2 \left[ \left( \frac{8}{Re} \right)^{12} + \frac{1}{(A+B)^{1.5}} \right]^{1/12}, \text{ onde} \quad E5.2$$

$$A = \left[ 2.457 \ln \frac{1}{\left\langle \frac{7}{\text{Re}} \right\rangle^{0.9} + 0.27 \frac{E}{D}} \right] \quad \text{E5.3}$$

$$B = \left( \frac{37530}{\text{Re}} \right)^{16} e \quad \text{E5.4}$$

$$\text{Re} = \frac{D\mu\rho}{\nu} \quad \text{E5.5}$$

### E.6 - Equações de especificação de $D$ , $L_{ns}$ , $Q_{ns}$ e $W_{ns}$ .

As vazões do destilado, do refluxo de topo e da retirada de vapor no condensador são definidas pelas respectivas equações das válvulas :

$$D = CV_3 \cdot FV_3 \cdot \sqrt{\frac{P_{ns} + \rho \cdot g \cdot (h_{ns} + h_t) - P_{atm}}{\gamma'_{ns}}} \quad \text{E6.1}$$

$$L_{ns} = CV_4 \cdot FV_4 \cdot \sqrt{\frac{P_{ns} + \rho \cdot g \cdot (h_{ns} + h_t) - P_{atm}}{\gamma'_{ns}}} \quad \text{E6.2}$$

$$W_{ns} = CV_5 \cdot FV_5 \cdot \sqrt{\frac{\Delta P_s}{\gamma^v_{ns}}} \quad \text{E6.3}$$

onde  $h_t$  representa a altura do tambor de refluxo (m),  $P_{atm}$  a pressão atmosférica e  $\Delta P_s$  a queda de pressão (constante) na retirada ( $W_{ns}$ ) da válvula de vapor do condensador. Para a situação de condensador total  $W_{ns}$  é nula.

A taxa de calor retirada no condensador pelo fluido de resfriamento é dada por

$$Q_{ns} = W_c \cdot Cp_c \cdot \Delta T_c = U_c \cdot A_c \cdot \Delta T_{mi} \quad \text{E6.4}$$

onde  $W_c$  representa a vazão molar do fluido de resfriamento (kmol/min),  $\Delta T_c$  a variação de temperatura do fluido refrigerante (K),  $U_c$  o coeficiente (constante) global de troca térmica (kcal/min/m<sup>2</sup>/K),  $A_c$  a área de troca térmica do condensador (m<sup>2</sup>) e  $\Delta T_{mi}$  a variação média logarítmica da temperatura entre a entrada e a saída do condensador (K).

A vazão do fluido de resfriamento é dada pela equação da válvula :

$$W_c = CV_6 \cdot FV_6 \cdot \sqrt{\frac{\Delta P_6}{\gamma_c}} \quad \text{E6.5}$$

onde  $\Delta P_6$  representa a perda de carga (constante) na válvula do fluido de resfriamento.

Analogamente ao refeedor as frações de abertura  $F_3$ ,  $F_4$ ,  $F_5$  e  $F_6$  são funções dos tipos de controladores que estiverem sendo utilizados. Para a simulação dinâmica da coluna em malha aberta tem-se;

$$\frac{dF_3}{dt} = \frac{dF_4}{dt} = \frac{dF_5}{dt} = \frac{dF_6}{dt} = 0 \quad \text{E6.6}$$

## Apêndice F - Método de Gear

Partindo-se da fórmula linear multipasso (LMS) de equação geral:

$$y_n = \sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n-1-j} + h \sum_{j=-1}^k \beta_j f_{n-1-j} \quad \text{F.1}$$

onde  $k$  é o número de passos do método, Gear desenvolveu a fórmula do tipo BDF (Fórmula de Diferenciação Regressiva) "stiffly-stabili" até a sexta ordem do método :

$$y_n = \sum_{j=1}^k \alpha_j y_{n-j} + h \beta_{-1} f_n \quad k=1,2,\dots,6 \quad \text{F.2}$$

O método de Gear ( Gear, 1971; Miranker, 1981) é do tipo PE(C)<sup>m</sup>E isto é consiste na utilização da fórmula explícita de Adams Bashforth como 'predictor':

$$y_n = y_{n-1} + h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n-j-1} \quad \text{F.3}$$

e sucessivamente  $m$  iterações na fórmula BDF implícita do tipo (F.2). As Tabelas F.1 e F.2 apresentam respectivamente os coeficientes  $\alpha_j$  e  $\beta_j$  dos métodos Adams-Basforth e BDF.

Tabela F.1 : coeficientes da fórmula Adams-Bashforth

k	$\beta_0$	$\beta_1$	$\beta_2$	$\beta_3$	$\beta_4$	$\beta_5$
1	1					
2	3/2	-1/2				
3	23/12	-16/12	5/12			
4	55/24	-59/24	37/24	-9/24		
5	1901/720	-2774/720	2616/720	-1274/720	251/720	
6	4277/144	-7923/1440	9982/1440	-7298/1440	2887/144	-475/1440

Tabela F.2 : coeficientes da formula BDF

k	$\beta_{-1}$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha_3$	$\alpha_4$	$\alpha_5$	$\alpha_6$
1	1	1	1				
2	2/3	4/3	-1/3				
3	6/11	18/11	-9/11	2/11			
4	12/25	48/25	-36/25	16/25	-3/25		
5	60/137	300/137	-300/137	200/137	-75/137	12/137	
6	60/147	360/147	-450/147	400/147	-225/147	72/147	-10/147

Uma importante característica do método é a possibilidade de aumentar automaticamente a ordem e o passo, de uma forma econômica, durante a integração, utilizando-se do vetor:

$$\mathbf{v}_n = [\mathbf{y}_n, h\mathbf{y}_n, \mathbf{y}_{n-1}, \mathbf{y}_{n-2}, \dots, \mathbf{y}_{n-k+1}]^T \quad \text{F.5}$$

que contém os valores das variáveis dependentes estimadas no passo (k-1) anterior e também do vetor de Nordsieck (Chua e Lin - 1975):

$$\mathbf{x}_n = \left[ \mathbf{y}_n, h\mathbf{y}_n^{(1)}, h^2 \frac{\mathbf{y}_n^{(2)}}{2!}, \dots, h^k \frac{\mathbf{y}_n^{(k)}}{k!} \right]^T \quad \text{F.5}$$

cujos componentes são as derivadas até ordem k das variáveis dependentes estimadas no ponto corrente  $t_n$ .

De uma forma sintética, o método de Gear pode ser esquematizado nas seguintes etapas:

i) os valores preditos  $\bar{\mathbf{x}}_n$  em  $t_n$  são calculados por

$$\bar{\mathbf{x}}_n = \mathbf{D}\mathbf{x}_{n-1}$$

onde D é a matriz preditiva, que devido a utilização do vetor de Nordsieck, resulta triangular de Pascal (Chan et al., 1978).

ii) utilizando um método quase Newton-Raphson, determina-se o vetor  $\mathbf{b}$  resolvendo o sistema algébrico:

$$\mathbf{G}(\mathbf{b}) = \mathbf{b} + h\mathbf{f}_n - h\mathbf{f}(t_n, \bar{\mathbf{y}}_n + \mathbf{b}\beta_{-1}) = 0 \quad \text{F.7}$$

onde  $\mathbf{f}_n = \mathbf{f}(t_n, \bar{\mathbf{y}}_n)$ . Os valores  $\mathbf{y}_n$  estão relacionados com os valores preditos de primeira tentativa  $\bar{\mathbf{y}}_n$  pela correlação:

$$\mathbf{y}_n = \bar{\mathbf{y}}_n + \beta_{-1} \mathbf{b} \quad \text{F.8}$$

iii) retualiza-se o vetor de Nordsieck para cada variável :

$$\bar{\mathbf{x}}_n = \bar{\mathbf{x}}_n + \mathbf{b} \cdot \mathbf{l} \quad \text{F.9}$$

As componentes do vetor  $\mathbf{l}$  são reportadas na tabela (F.3). De (F.8) parece evidente que  $l_{(1)} = \beta_{-1}$ .

Tabela F.3 : Componentes do vetor  $\mathbf{l}$

k	1	2	3	4	5	6
$l_1$	1	2/3	6/11	24/50	120/274	720/1764
$l_2$	1	3/3	11/11	50/50	274/274	1764/1764
$l_3$		1/3	6/11	35/50	225/274	1624/1764
$l_4$			1/11	10/50	35/274	735/1764
$l_5$				1/50	15/274	175/1764
$l_6$					1/274	21/1764
$l_7$						1/1764

A escolha da ordem e do passo de integração é efetuada de modo eficiente, no senso de tempo dispêndido nos cálculos, em satisfazer a condição que o erro local de truncamento resulte inferior a tolerância  $\xi$  especificada.

O erro local de truncamento de (F.2), na hipótese que  $\mathbf{y}_{(t)}$  tenha  $(k+1)$  derivadas contínuas é dado por (Gear-1971) :

$$\mathbf{T}_n(h) = \frac{1}{k+1} h^{k+1} \mathbf{y}^{(k+1)} + O(h^{(k+2)}) \quad \text{F.10}$$

Utilizando-se os vetores  $\mathbf{b}$  e  $\mathbf{l}$  anteriormente definidos obtém-se (Gallun e Holland, 1982) :

$$\mathbf{T}_n(h) = \frac{1}{k+1} k! \mathbf{b} \mathbf{l}_{k+1} + O(h^{k+2}) \quad \text{F.11}$$

Com referência a norma Euclidiana e introduzindo um vetor  $\mathbf{w}$  de normalização obtém-se :

$$\mathbf{T}_n(h) = \frac{1}{k+1} k! \left\| \frac{\mathbf{b} \mathbf{l}_{k+1}}{\mathbf{w}} \right\| \leq \xi \quad \text{F.12}$$

O controle de (F.12) é feito em correspondência a cada passo de integração e o tamanho do passo a ser utilizado em passo sucessivo, ou mesmo repetir o passo precedente, é estimado por  $\alpha.h$ , onde :

$$\mathbf{T}_n(\alpha h) = \xi \quad \text{F.13}$$

De forma análoga são estudados os tamanhos a utilizar-se com as ordens  $(k-1)$  e  $(k+1)$ . Dentre os três valores de  $\alpha$  escolhe-se o máximo, definindo-se assim a ordem que permite aumentar majoritariamente o passo de integração. Para evitar um tempo de cálculo excessivo a estimativa do tamanho e da ordem são efetuadas somente periodicamente.

Toda vez que o passo é modificado de  $h$  a  $\alpha.h$  o vetor de Nordsieck é recalculado pela equação:

$$\mathbf{x}_n^{(i)}|_{\alpha h} = \alpha^{i-1} \mathbf{x}_n^{(i)}|_h \quad i = 1, \dots, k+1 \quad \text{F.14}$$

A redução do passo de integração, devido a falha de convergência no método de Newton-Raphson aplicado a (F.7), é feita até um número pré-fixado de iterações internas. Gear e Petzold (1984) sugerem que este número seja limitado em um valor ótimo de três iterações.

Para problemas particulares são também utilizadas fórmulas do tipo BDF a passos variáveis, isto é:

$$\mathbf{y}_n = \sum_{j=0}^k \alpha_{j,n} \mathbf{y}_{n-1-j} + \sum_{j=-1}^k h_n \beta_{j,n} \mathbf{f}_{n-1-j} \quad \text{F.15}$$

Pode-se demonstrar (Gear e Tu - 1974; Jackson e Sacks-Davies - 1980) que utilizando tais formas o método de Gear é estável e convergente para todo esquema de seleção do passo, enquanto a fórmula com coeficientes fixos pode-se demonstrar instável se a amplitude do passo variar muito. A fórmula a coeficientes variáveis apresenta, portanto melhores propriedades quanto a estabilidade. Assim, um método que a utiliza está em grau de reduzir o número de passos necessários na resolução do problema, desfrutando portanto de um melhor majoramento da ordem e passo. As duas técnicas diferem quanto ao acúmulo do trabalho requerido em cada passo. Para uma fórmula a  $k$  passos com coeficientes variáveis, os coeficientes devem ser recalculados quando o tamanho do passo é alterado nos últimos  $k$  passos; o acúmulo do trabalho requerido para recalculá-los depende de  $k$ , mas é independente do número de equações a ser resolvido. Por outro lado, na fórmula para coeficientes fixos, estes são calculados uma vez para todos, mas quando se altera o passo deve-se recorrer a interpolação.

Agora na implementação a passos fixos  $\beta_{-1,n}$  varia somente quando a ordem é alterada, enquanto que no outro caso varia para todos os  $k$  passos. Portanto se um método a coeficientes variáveis apresenta por um lado uma maior garantia de estabilidade, por outro requer um maior número de fatorização da matriz e estimativas de funções.

## Apêndice G - Cálculo das entalpias

Na resolução das equações do balanço de energia da coluna é necessário o conhecimento das entalpias da fase líquida e da fase vapor, sendo neste apêndice denominadas simplesmente por (h) e (H) respectivamente.

A entalpia da fase vapor é dada por:

$$H = H' + \Delta H \quad \text{G.1}$$

onde  $H'$  é a entalpia da mistura de vapor ideal e  $\Delta H$  corresponde a correção de entalpia para o vapor a temperatura T e pressão P em relação ao vapor ideal a mesma temperatura e composição.

A capacidade calorífica do vapor ideal será obtida pela relação empírica apresentada por Prausnitz (1980):

$$Cp_i^0 = D_{1i} + \frac{D_{2i}}{T} + D_{3i}T + D_{4i} \ln T \quad \text{G.2}$$

onde  $Cp_i^0$  em joules/mol- e T em K.

A entalpia do vapor puro ideal a temperatura T é tomada em relação a temperatura de referência  $T_0 = 0$  K

$$H_i' = \int_0^T Cp_i^0 dt \quad \text{G.3}$$

Substituindo G.2 em G.3 obtém-se:

$$H_i' = D_{1i}(T - T_0) + D_{2i} \ln \left( \frac{T}{T_0} \right) + D_{3i} \left( \frac{T^2 - T_0^2}{2} \right) + D_{4i} (T \ln T - T_0 \ln T_0 + T_0 - T) \quad \text{G.4}$$

Para a mistura de vapor ideal com NC componentes:

$$H' = \sum Y_i H_i' \quad \text{G.5}$$

Substituindo G.4 em G.5 obtém-se G.6:

$$H' = \sum_{i=1}^{NC} Y_i \left[ D_{1i}(T - T_0) + D_{2i} \ln \left( \frac{T}{T_0} \right) + D_{3i} \left( \frac{T^2 - T_0^2}{2} \right) + D_{4i} (T \ln T - T_0 \ln T_0 + T_0 - T) \right] \quad \text{G.6}$$

A entalpia de correção  $\Delta H$  é calculada por :

$$\Delta H = \int_0^P \left[ v - T \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_{P,Y} \right] dP \quad \text{G.7}$$

onde  $v$  é o volume molar da fase vapor.

Para avaliar a integral considerou-se a mistura como sendo não associada e utilizando a equação virial truncada no segundo termo (consideração como já discutida válida para pressões moderadas), obtendo-se

$$\Delta H = P \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} Y_i Y_j \left[ B_{i,j} - T \frac{dB_{i,j}}{dT} \right] \quad \text{G.8}$$

sendo  $B_{i,j}$  calculado pelo método de Tsnopoulos e as derivadas analiticamente (derivando a correlação de Tsnopoulos em relação a temperatura).

Em misturas de vapor associadas, onde ocorre forte dimerização, a determinação do  $\Delta h_{\text{associado}}$  é feita através da teoria química (Prausnitz, 1980).

A entalpia da fase líquida é dada por:

$$h^L = h^I + \sum_{i=1}^{NC} X_i \overline{\Delta h}_i, \quad \text{G.9}$$

onde  $h^I$  é obtido pela equação G.6 com  $Y$  substituído por  $X$ .  $\overline{\Delta h}_i$  corresponde a entalpia residual do componente  $i$  na mistura líquida (em relação ao componente  $i$  gás ideal à  $T$  do sistema).

Considerando a equação de Gibbs Helmholtz para exprimir a entalpia residual ( $\overline{\Delta h}$ ), parâmetros binários (UNIQUAC)  $a_{i,j}$  e  $a_{j,i}$  independentes da temperatura e pressões moderadas, chega-se a G.10 :

$$h^L = h^I + R \sum_{i=1}^{NC} \left[ \frac{q_i X_i \left( \sum_{j=1}^{NC} \theta_j \tau_{j,i} a_{j,i} \right)}{\sum_{j=1}^{NC} \theta_j \tau_{j,i}} \right] - R \sum_{i=1}^{NC} X_i \left( -C_{2i} + C_{3i} T^2 + C_{4i} T + 2C_{5i} T^3 \right) \quad \text{G.10}$$

com a entalpia de excesso dada por :

$$h^E = R \sum_{i=1}^{NC} \left[ \frac{q_i X_i}{\sum_{j=1}^{NC} \theta_j \tau_{j,i}} \left( \sum_{j=1}^{NC} \theta_j \tau_{j,i} \theta_{j,i} \right) \right]$$

G.11

## Apêndice H - Desacoplador parcial Unidade Lead/Lag

Para uma unidade Lead-lag tem-se a seguinte função de transferência:

$$\bar{y}(s) = K_d \frac{\tau_2 s + 1}{\tau_1 s + 1} \bar{u}(s) \quad \text{H.1}$$

onde  $\tau_1$  representa a constante de atraso (lag) e  $\tau_2$  a constante de tempo de antecipação (lead), ou ainda no domínio do tempo:

$$\tau_1 \frac{dy}{dt} + y = K_d \left[ \tau_2 \frac{du}{dt} + u \right] \quad \text{H.2}$$

Para integrar esta equação, com  $u=0$  e  $y=0$  para  $t=0$  tem-se:

-solução geral da equação

$$\tau_1 \frac{dy}{dt} + 1 = K_d u(t) \quad \text{H.3}$$

$$y(t) = \frac{K_d}{\tau_1} \int e^{-(t-\theta)/\tau_1} u(\theta) d\theta \quad \text{H.4}$$

Logo, para o nosso caso tem-se:

$$y(t) = \frac{K_d}{\tau_1} \int e^{-\frac{(t-\theta)}{\tau_1}} \left[ \tau_2 \frac{du}{d\theta} + u(\theta) \right] d\theta \quad \text{H.5}$$

ou ainda :

$$y(t) = \frac{K_d}{\tau_1} \int_0^t e^{-\frac{(t-\theta)}{\tau_1}} u(\theta) d\theta + \frac{K_d \tau_2}{\tau_1} \int_0^t e^{-\frac{(t-\theta)}{\tau_1}} \frac{du}{d\theta} d\theta \quad \text{H.6}$$

Mas:

$$\frac{d}{d\theta} \left[ e^{-\frac{(t-\theta)}{\tau_1}} u(\theta) \right] = e^{-\frac{(t-\theta)}{\tau_1}} \frac{du}{d\theta} + \frac{1}{\tau_1} e^{-\frac{(t-\theta)}{\tau_1}} u(\theta) \quad \text{H.7}$$

Substituindo H.5 em H.7 tem-se:

$$y(t) = \frac{K_d}{\tau_1} \int e^{-\frac{(t-\theta)}{\tau_1}} u(\theta) d\theta + \frac{K_d \tau_2}{\tau_1} \int_0^t \left[ \frac{d \left[ e^{-\frac{(t-\theta)}{\tau_1}} u(\theta) \right]}{d\theta} - \frac{1}{\tau_1} e^{-\frac{(t-\theta)}{\tau_1}} u(\theta) \right] d\theta \quad \text{H.8}$$

$$y(t) = K_d \left[ \frac{\tau_2}{\tau_1} u(t) + \frac{1}{\tau_1} \left( 1 - \frac{\tau_2}{\tau_1} \right) \int e^{-\frac{(t-\theta)}{\tau_1}} u(\theta) d\theta \right] \quad \text{H.9}$$

que representa a função matemática desacopladora utilizada no item 4.4.2. Esta função utiliza a variação da vazão de refluxo  $u(t)$  como entrada e fornece como saída a variação da potência térmica  $y(t)$  do refeedor.