



# **Simulação e Controle da Etapa de Reação da Produção de Óxido de Etileno**

Maíra Carnaval Barbosa

## **Projeto de Final de Curso**

Orientadores:

Prof. José Luiz de Medeiros, *D.Sc.*

Prof<sup>ª</sup>. Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo, *Ph.D.*

Março de 2007.

# **SIMULAÇÃO E CONTROLE DA ETAPA DE REAÇÃO DA PRODUÇÃO DE ÓXIDO DE ETILENO**

*Maíra Carnaval Barbosa*

Projeto de Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheira Química.

Aprovado por:

---

André Luiz Hemerly Costa, *D.Sc.*

---

Carlos Augusto Guimarães Perlingeiro, *D.Sc.*

---

Jaime Neiva Miranda de Souza, *M.Sc.*

Orientado por:

---

José Luiz de Medeiros, *D.Sc.*

---

Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo, *Ph.D.*

Rio de Janeiro, RJ – Brasil.

Março de 2007.

Barbosa, Maíra Carnaval.

Simulação e Controle da Etapa de Reação da Produção de Óxido de Etileno / Maíra Carnaval Barbosa. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2007.

x, 108 p.; fig., tab.

(Monografia) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2007.

Orientadores: José Luiz de Medeiros e Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo.

1. Simulação. 2. Controle. 3. Óxido de Etileno. 4. Monografia (Graduação - UFRJ/EQ). 5. José Luiz de Medeiros e Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo. I – Simulação e Controle da Etapa de Reação da Produção de Óxido de Etileno.

*Após percorrer um longo caminho, a vitória se concretiza.  
Dedico esse Projeto Final aos meus pais, familiares e amigos  
que sempre me apoiaram e ajudaram.*

*Para realizar grandes conquistas, devemos não apenas agir, mas também  
sonhar; não apenas planejar, mas também acreditar.*

(Anatole France)

## **AGRADECIMENTOS**

Muitas pessoas dizem que todos nós viemos ao mundo a passeio e que estamos aqui de passagem. Nesse caminho muitas pessoas fizeram parte dele, assim agradeço a todos que, de uma forma ou de outra, contribuíram com a construção desse trabalho.

À minha família, de onde sempre recebo incentivo e reconhecimento pelo trabalho realizado. Em especial, à minha mãe e ao meu irmão, que sempre estiveram por perto.

À Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, pela excelente formação acadêmica oferecida.

Aos professores que participaram da minha formação universitária e que conseguiram desenvolver meu interesse pela engenharia química.

Agradeço especialmente à minha orientadora Ofélia, por toda a atenção a mim dispensada e por toda a orientação que recebi para poder desenvolver esse trabalho.

Muito obrigado a todos!

Resumo do Projeto apresentada à Escola de Química/UFRJ como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheira Química.

## **SIMULAÇÃO E CONTROLE DA ETAPA DE REAÇÃO DA PRODUÇÃO DE ÓXIDO DE ETILENO**

**Maíra Carnaval Barbosa**

**Março de 2007**

**Orientadores:** Prof. José Luiz de Medeiros, *D.Sc.*

Profª. Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo, *Ph.D.*

O Óxido de Etileno é a principal *commodity* química produzida em todo o Mundo, obtido pela oxidação catalítica do etileno com catalisador de prata. Essa reação de oxidação é acompanhada por reações paralelas, destacando-se a de queima total do etileno e a queima direta do próprio óxido de etileno, formando  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ . A seletividade e conversão do reator dependem fortemente das condições de processo e a baixa conversão por passe, associada ao aumento da seletividade, impõe a necessidade de reciclo, com integração energética para minimização dos custos de produção. A predição do comportamento dinâmico é dificultada pela alta sensibilidade paramétrica do processo, tornando necessárias ferramentas de simulação para análise e otimização da produção.

Neste cenário, o presente trabalho abordou a Etapa de Reação, com modelagem fenomenológica rigorosa. Adicionalmente, a Etapa de Absorção do óxido produzido foi introduzida de forma simplificada visando à simulação do reciclo e da integração energética, enquanto a Etapa de Purificação não foi objeto de simulação. Os modelos para os principais equipamentos – i.e., reator, trocadores de calor de integração energética e absorvedora – foram implementados em ambiente SIMULINK do MATLAB (SIMULINK 4.1 do MATLAB versão 6.1, *The MathWorks Inc.*), configurado para simulação do processo em correntes de processo e blocos de operações/equipamentos.

Uma análise de sensibilidade paramétrica apontou as condições de operação enquanto uma análise de controlabilidade definiu a estrutura de controle para condução do processo. A estratégia de controle proposta é composta por quatro malhas cascata de controle, além da malha de controle simples da concentração de CO<sub>2</sub>. Após procedimento de sintonia, o processo integrado e controlado foi simulado.



Abstract of Monograph presented to Escola de Química/UFRJ as partial fulfillment of the requirements for the degree of Chemical Engineer.

## **SIMULATION AND CONTROL OF REACTION SYSTEM FROM ETHYLENE OXIDE PRODUCTION PLANT**

**Maíra Carnaval Barbosa**

**March, 2007**

**Advisors** : Prof. José Luiz de Medeiros, *D.Sc.*

Prof<sup>a</sup>. Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo, *Ph.D.*

Ethylene Oxide is the most important chemical commodity produced in the whole world, gotten for the catalytic oxidation of the ethylene with silver catalyser. This reaction of oxidation is folloied by parallel reactions, like the total ethylene oxidation and the oxide of ethylene oxidation, forming CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O. The selectivity and conversion of the reactor have a strong dependence on the conditions of process and a low dependence on the conversion for associated pass. The increase of the selectivity imposes the necessity of recycle, with energy integration for decrease the production costs. The prediction of the dynamic behavior is made it difficult by the high parametric sensitivity of the process, having become necessary tools of simulation for analysis and optimization of the production.

In this scene, the present work approached the Stage of Reaction, with rigorous modeling. Additionally, the Stage of Absorption of produced oxide was introduced of simplified form aiming at to the simulation of recycle it and the energy integration, while the Stage of Purificação was not simulation object. The models for the main equipment - i.e., reactor, heat of exchangers and absorption system - had been implemented in environment SIMULINK of the MATLAB (SIMULINK 4,1 of the MATLAB version 6.1, The MathWorks Incorporation), configured for simulation of the process in chains of process and blocks of operations/equipment.

Analysis of parametric sensitivity had pointed the readinesses while a controllability analysis defined the structure of control for conduction of the process.

The control strategy proposal is composed for four meshes control cascade, beyond the mesh of simple control of the CO<sub>2</sub> concentration. After tuning procedure, the integrated and controlled process was simulated.

# ÍNDICE

<b>CAPÍTULO 1: INTRODUÇÃO .....</b>	<b>7</b>
1.1) O PRODUTO ÓXIDO DE ETILENO.....	7
1.2) O PROCESSO DE PRODUÇÃO DE ÓXIDO DE ETILENO .....	8
1.3) MOTIVAÇÃO E RELEVÂNCIA.....	10
1.4) ESTRUTURA DO TRABALHO .....	11
<b>CAPÍTULO 2: MODELAGEM E SIMULAÇÃO DOS PRINCIPAIS EQUIPAMENTOS .....</b>	<b>13</b>
2.1) REATOR DE ÓXIDO DE ETILENO.....	13
2.1.1) <i>Modelo Matemático do Reator</i> .....	16
2.1.2) <i>Condições base de operação</i> .....	21
2.1.3) <i>Simulação do Reator</i> .....	23
2.2) TROCADOR DE CALOR GÁS-GÁS .....	36
2.2.1) <i>Modelo Matemático dos Trocadores de Calor</i> .....	37
2.2.2) <i>Condições base de operação</i> .....	44
2.2.3) <i>Simulação dos Trocadores</i> .....	45
2.3) ABSORVEDORA DE ÓXIDO DE ETILENO .....	48
2.3.1) <i>Modelo Matemático</i> .....	48
<b>CAPÍTULO 3: ANÁLISE DE CONTROLABILIDADE.....</b>	<b>51</b>
3.1) SIMULADOR DO PROCESSO INTEGRADO.....	51
3.2) ANÁLISE DE CONTROLABILIDADE .....	52
3.2.1) <i>Matriz de Ganhos</i> .....	53
3.2.2) <i>Análise RGA</i> .....	54
3.2.3) <i>Estratégia de Controle</i> .....	56
<b>CAPÍTULO 4: SIMULAÇÃO DO PROCESSO CONTROLADO.....</b>	<b>59</b>

4.1)	SIMULADOR DO PROCESSO CONTROLADO .....	59
4.2)	SIMULAÇÕES PARCIAIS DOS CONTROLADORES E SINTONIA.....	60
4.2.1)	<i>Controle Cascata de Concentração de Etileno</i> .....	61
4.2.2)	<i>Controle Cascata de Concentração de Oxigênio</i> .....	64
4.2.3)	<i>Controle Cascata de Temperatura da Corrente de Processo</i> .....	65
4.2.4)	<i>Controle Cascata de Temperatura do Fluido de Refrigeração</i> .....	66
4.2.5)	<i>Controle de Concentração de CO<sub>2</sub></i> .....	68
4.3)	SIMULAÇÃO FINAL DO PROCESSO CONTROLADO .....	69
<b>CONCLUSÃO E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....</b>		<b>72</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>		<b>74</b>
<b>ANEXO A: SIMULADOR DO PROCESSO EM AMBIENTE SIMULINK .....</b>		<b>76</b>
A.1)	REATOR DE ÓXIDO DE ETILENO .....	77
A.2)	TROCADORES DE CALOR.....	80
A.3)	ABSORVEDORA DE ÓXIDO .....	83
A.4)	MISTURADORES, VÁLVULAS E CONTROLADORES:.....	86
<b>ANEXOS B: ANÁLISE DE SENSIBILIDADE.....</b>		<b>90</b>
<b>ANEXOS C: ORDEM DE CÁLCULO DE <i>H</i>.....</b>		<b>96</b>
<b>ANEXOS D: MATRIZ DE GANHOS RELATIVOS .....</b>		<b>101</b>

## **ÍNDICE DE FIGURAS**

Figura 1.1: Cadeia Produtiva do Óxido de Etileno.....	7
Figura 1.2: Processo Completo de Produção de Óxido de Etileno.....	9
Figura 2.1: Exemplo de Reator Multitubular. ....	13
Figura 2.2: Número de segmentos obtidos pela Discretização.....	21
Figura 2.3: Perfil de Conversão com a variação de CETin e CO2in. ....	25
Figura 2.4: Perfil de Seletividade com a variação de CETin e CO2in. ....	25
Figura 2.5: Perfil de Temperatura de Pico com a variação de CETin e CO2in. ....	26
Figura 2.6: Perfil de Localização de Pico com a variação de CETin e CO2in. ....	26
Figura 2.7: Perfil de Conversão com a variação de Tp e Tc. ....	27
Figura 2.8: Perfil de Seletividade com a variação de Tp e Tc.....	27
Figura 2.9: Perfil de Temperatura de Pico com a variação de Tp e Tc. ....	28
Figura 2.10: Perfil de Localização de Pico com a variação de Tp e Tc. ....	28
Figura 2.11: Perfil de Consumo de Etileno ao longo do reator e do tempo. ....	32
Figura 2.12: Consumo de Etileno ao longo do reator.....	32
Figura 2.13: Perfil de Produção de Óxido de Etileno ao longo do reator e do tempo.....	33
Figura 2.14: Produção de Óxido de Etileno ao longo do reator. ....	33
Figura 2.15: Temperatura da Corrente de Processo ao longo do reator e do tempo. ....	34
Figura 2.16: Temperatura da Corrente de Processo ao longo do reator. ....	34
Figura 2.17: Temperatura do Fluido de Refrigeração ao longo do reator e do tempo. ....	35
Figura 2.18: Temperatura do Fluido de Refrigeração ao longo do reator. ....	35
Figura 2.19: Trocador de Calor Casco e Tubo em contracorrente. ....	36
Figura 2.20: Representação da configuração de escoamento em contracorrente. ....	36
Figura 2.21: Diagrama Esquemático de Tanques de Mistura.....	38
Figura 2.22: Simulador dos Trocadores de Calor em Integração Energética com o Reator .....	45
Figura 2.23: Perfil de Temperatura no Tubo no TC1. ....	46
Figura 2.24: Perfil de Temperatura no Casco no TC1.....	46
Figura 2.25: Perfil de Temperatura no Tubo no TC2. ....	47

Figura 2.26: Perfil de Temperatura no Casco no TC2.....	47
Figura 2.27: Esquema de Correntes da Absorvedora. ....	48
Figura 3.1: Tela do Simulador do Processo Integrado. ....	51
Figura 3.2: Estratégia de controle para o Processo Global.....	57
Figura 4.1: Simulador do Processo Global Controlado. ....	59
Figura 4.2: Tela do Simulador do Processo com Controladores “Ideais”. ....	60
Figura 4.3: Tela do Simulador do Processo com Controlador de <i>CET</i> . ....	61
Figura 4.4: Variação de <i>CET</i> com o tempo na primeira tentativa de sintonia.....	62
Figura 4.5: Variação de <i>CET</i> com o tempo na sintonia calculada.....	63
Figura 4.6: Tela do Simulador do Processo com Controlador de $CO_2$ . ....	64
Figura 4.7: Tela do Simulador do Processo com Controlador de <i>TP</i> . ....	65
Figura 4.8: Variação de <i>TP</i> com o tempo na primeira tentativa de sintonia. ....	66
Figura 4.9: Tela do Simulador do Processo com Controlador de TC. ....	67
Figura 4.10: Tela do Simulador do Processo com Controlador da purga de $CO_2$ . ....	68
Figura 4.11: Tela do Simulador do Processo com os Controladores de <i>CET</i> e <i>TP</i> . ....	69
Figura 4.12: Variação de <i>CET</i> com o tempo no Processo Controlado e Integrado. ....	70
Figura 4.13: Variação de <i>TP</i> com o tempo no Processo Controlado e Integrado. ....	70
Figura A.1: Janela de Configuração da Corrente de Alimentação do Reator .....	78
Figura A.2: Telas do Simulador do Reator de Óxido de Etileno .....	78
Figura A.3: Configuração de Blocos para Simulação do Reator.....	79
Figura A.4: Janela de Configuração da Corrente de Alimentação. ....	81
Figura A.5: Bloco de Trocador de Calor para Correntes de Processo.....	82
Figura A.6: Configuração de Blocos para Simulação de Trocador de Calor de Processo. .....	83
Figura A.7: Janela de Configuração da Corrente de Alimentação de Água.....	84
Figura A.8: Bloco da Absorvedora.....	85
Figura A.9: Configuração de Blocos para Simulação da Absorvedora. ....	85
Figura A.10: Misturador de Correntes de Processo.....	86
Figura A.11: Válvula (ou divisora) de correntes de processo. ....	87
Figura A.12: Representação do Controle Cascata. ....	88

Figura A.13: Janelas de Configuração dos Controladores MESTRE e ESCRAVO, respectivamente. ....88

Figura A.14: Configuração de Blocos para o controlador MESTRE. ....89

Figura A.15: Configuração de Blocos para o controlador ESCRAVO. ....89

Figura D.1: Sistema MIMO 2x2. ....102

Figura D.2: Esquema Representativo de cada elemento da RGA. ....105

## ÍNDICE DE TABELAS

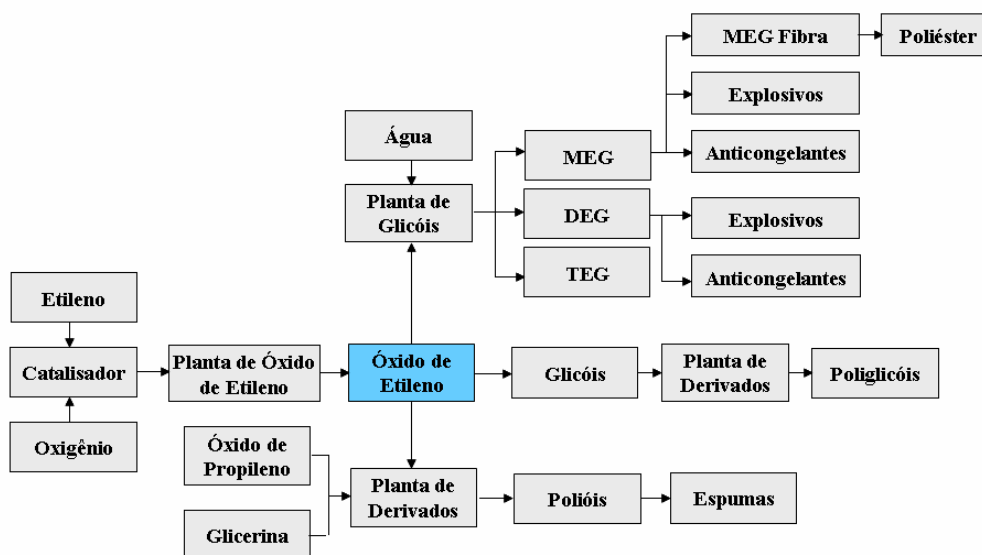
Tabela 2.1: Relação entre Conversão e Seletividade.....	16
Tabela 2.2: Conversão, Seletividade, Produtividade e Temperatura Máxima .....	22
Tabela 2.3: Dados do Catalisador.....	22
Tabela 2.4: Geometria do Reator.....	22
Tabela 2.5: Condições de Operação do Reator .....	23
Tabela 2.6: Resultados da Análise dos Gráficos de Conversão. ....	29
Tabela 2.7: Resultados da Análise dos Gráficos de Seletividade.....	29
Tabela 2.8: Resultados da Análise dos Gráficos de Temperatura de Pico. ....	29
Tabela 2.9: Resultados da Análise dos Gráficos de Localização do Pico. ....	30
Tabela 2.10: Condições Ideais para a Simulação do Reator. ....	31
Tabela 2.11: Dados do Processo dos Trocadores de Calor. ....	44
Tabela 2.12: Perfis Iniciais de Temperatura do TC-01. ....	44
Tabela 2.13: Perfis Iniciais de Temperatura do TC-02. ....	44
Tabela 2.14: Equações das concentrações dos componentes das correntes 3 e 4. ....	50
Tabela 3.1: Variáveis Manipuladas do Reator. ....	52
Tabela 3.2: Variáveis Controladas do Reator. ....	52
Tabela 3.3: Faixas das Variáveis do Reator. ....	54
Tabela 3.4: Emparelhamento de Variáveis Controladas e Manipuladas do Reator. ....	55
Tabela 3.5: Emparelhamento de Variáveis Controladas e Manipuladas do Processo Global com Integração Energética e Reciclo .....	56
Tabela 4.1: Valores Iniciais para os controladores de CET. ....	61
Tabela 4.2: Sintonia por <i>Ziegler e Nichols</i> . ....	62
Tabela 4.3: Sintonia para Controlador PI. ....	63
Tabela 4.4: Chutes Iniciais para os controladores de CO <sub>2</sub> . ....	68



# CAPÍTULO 1: INTRODUÇÃO

## 1.1) O Produto Óxido de Etileno

O óxido de eteno ou etileno (OE) é um intermediário químico utilizado na fabricação de uma grande variedade de produtos tais como: etilenoglicóis, etanolaminas, éteres etílicos e surfactantes não iônicos. A seguir, na **Figura 1.1**, a Cadeia Produtiva do óxido de etileno é apresentada:



**Figura 1.1:** Cadeia Produtiva do Óxido de Etileno.

*Fonte: a autora*

O óxido de etileno é produzido pela oxidação catalítica do etileno com catalisador de prata. Essa reação de oxidação é acompanhada por várias reações paralelas, sendo que as mais significativas são as de queima total do etileno e a queima direta do próprio óxido de etileno, formando  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ . A seguir, são apresentadas essas duas reações paralelas, além da reação principal de produção do OE:

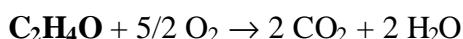
**Reação de Produção do Óxido de Etileno (*combustão incompleta*)**



**Queima Total do Etileno (*combustão completa*)**



**Queima Direta do Óxido de Etileno (*combustão completa*)**



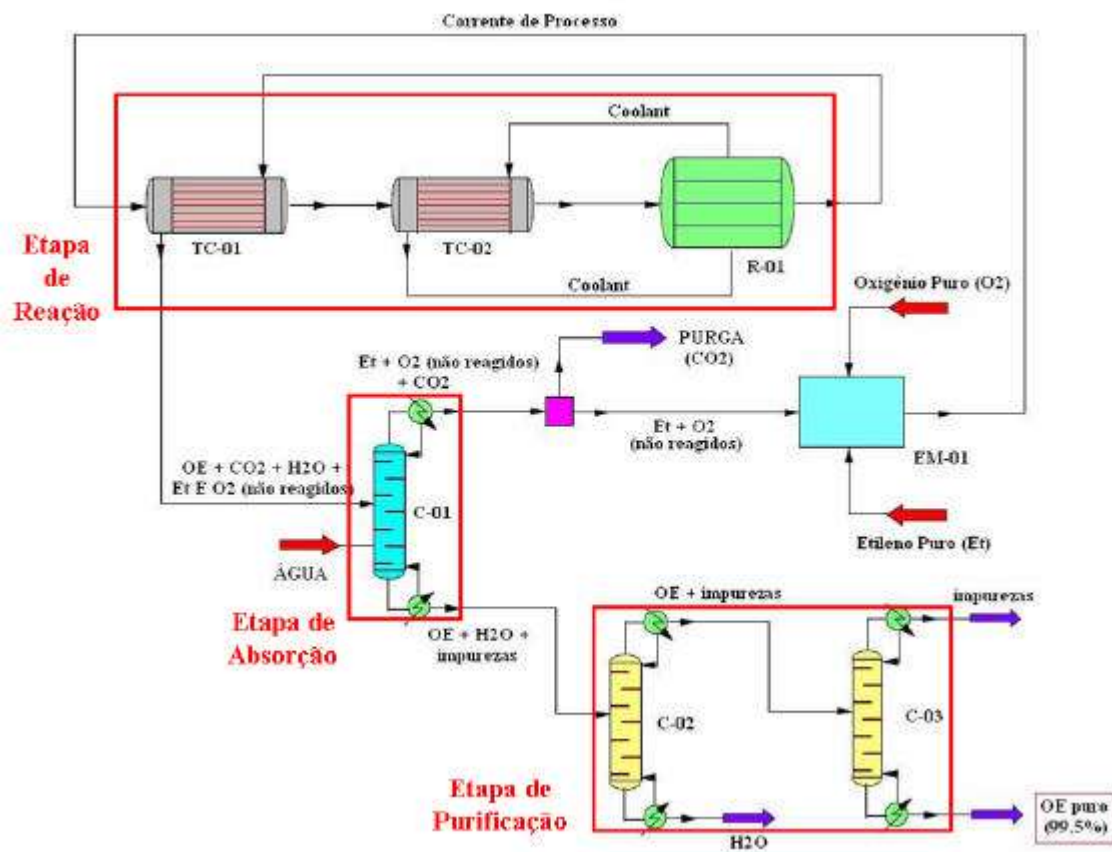
A seletividade dessas reações é determinada pelas condições de processo. Esse item será devidamente apresentado e explicado no **Capítulo 2**, na revisão sobre o reator utilizado no processo.

A demanda mundial anual por óxido de etileno se encontra na faixa de 14 milhões de toneladas, e vem crescendo em torno de 3%, o que faz com que esse composto químico tenha uma importância econômica relevante para um país [MARTINS e CARDOSO, 2005].

O maior produtor mundial do OE é os Estados Unidos, com uma produção anual de 4 milhões de toneladas. A produção anual do Brasil é de 312.000 toneladas, sendo a maior de toda a América Latina e realizada pela empresa Oxiteno. A maior parte desta produção é utilizada em reações com álcoois (metanol, etanol e butanol) e com água para a obtenção, respectivamente, de éteres mistos do etilenoglicol (60.000 ton/a) e do monômero e oligômeros do etilenoglicol (310.000 ton/a) [MARTINS e CARDOSO, 2005].

## 1.2) O Processo de Produção de Óxido de Etileno

O Processo de Produção de Óxido de Etileno é constituído por 3 etapas: a etapa de reação, a etapa de absorção e a etapa de purificação de óxido de etileno. A seguir, na **Figura 1.2**, é possível observar o fluxograma completo desse processo.



**C-01:** Torre de Absorção de Óxido de Etileno com Água

**C-02:** Coluna de Destilação para separar a Água do Óxido de Etileno

**C-03:** Coluna da Destilação para purificação do Óxido de Etileno

**EM-01:** Estação de Mistura (Make Up)

**R-01:** Reator Multitubular

**TC-01:** Trocador de Calor de Integração Energética com a Corrente de Processo

**TC-02:** Trocador de Calor de Integração Energética com o Fluido de Refrigeração (Coolant)

**Figura 1.2:** Processo Completo de Produção de Óxido de Etileno.

Fonte: a autora

Na etapa de reação, o Óxido de Etileno é produzido pela oxidação catalítica do etileno com catalisador de prata suportada em alumina. É utilizado um reator

multitubular de leito fixo, refrigerado externamente por um fluido térmico que circula em contracorrente ao fluido de processo, como em um trocador de calor casco e tubo. A alimentação do reator é composta por etileno e oxigênio com alto grau de pureza. Além do reator, o sistema de reação é composto por 2 trocadores de calor de integração energética, que são responsáveis por aquecer a corrente de alimentação do reator.

A etapa de absorção é composta por uma torre de absorção. Esta torre é alimentada pela corrente efluente do reator, que foi utilizada no primeiro trocador de integração energética para aquecer a corrente de alimentação. Essa corrente é formada pelo produto (óxido de etileno), subprodutos ( $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ ) e reagentes (etileno e  $\text{O}_2$ ) que não reagiram. Na torre de absorção, água é utilizada para absorver o óxido de etileno formado, que segue para o sistema de purificação. Os demais compostos que não são absorvidos são reciclados para o processo, onde ocorre uma purga para controle da concentração de  $\text{CO}_2$  e o reciclo dos componentes não reagidos para o reator.

Por fim, a etapa de purificação é composta por 2 colunas de destilação. A primeira é utilizada para separar a água do óxido do etileno mais os traços dos demais gases presentes no processo. Esses gases que são separados da água seguem para a segunda coluna, a partir da qual é obtido o produto, óxido de etileno, com 99,5% (em massa) de pureza [GUDEKAR e RIGGS, 2003].

### 1.3) Motivação e Relevância

O Óxido de Etileno é a principal *commodity* química produzida em todo o mundo [MARTINS e CARDOSO, 2005].

Sua produção apresenta algumas singularidades que são de grande interesse na área de simulação e controle de processos, tais como: a forte exotermia apresentada na conversão do etileno em óxido de etileno, o que pode levar a um “*runaway*” térmico; o tempo morto e resposta inversa, que leva a dificuldades no controle da planta; a sensibilidade paramétrica, ou seja, grandes alterações no processo são causadas por pequenas alterações nas condições da corrente de alimentação; e a dualidade seletividade *versus* conversão: quanto maior é a conversão da reação, menor é a sua

seletividade por óxido de etileno, ou seja, ocorre preferencialmente a oxidação completa, gerando  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ , o que não é de interesse econômico.

Além disso, a planta é normalmente configurada com integração energética, ou seja, o calor liberado pela reação fortemente exotérmica pode ser aproveitado como fonte de energia em outros pontos do processo, que podem ser a geração de vapor ou o aquecimento da corrente de alimentação. Neste último caso, a integração gera uma realimentação positiva da temperatura de saída sobre a temperatura de entrada, desestabilizando a operação do reator em malha aberta.

Sendo assim, diante de tais singularidades e do atrativo econômico apresentado por esse produto, é de grande interesse a simulação e o estudo da controlabilidade desse processo.

## **1.4) Estrutura do Trabalho**

Esse trabalho se estrutura em capítulos. Neste primeiro capítulo encontram-se: a apresentação do produto óxido de etileno, a apresentação do processo de produção deste produto, a motivação ou justificativa da sua relevância na atualidade, bem como sua estrutura.

O segundo capítulo trata da modelagem e simulação dos principais equipamentos que compõem o sistema. Para cada equipamento, são apresentados: uma revisão teórica, o modelo matemático utilizado e as condições de operação do equipamento. São, ainda, feitas simulações desses equipamentos em separado.

No terceiro capítulo, apresenta-se a análise de controlabilidade do sistema em questão. Nesse capítulo, a princípio, é demonstrado o simulador do processo integrado. Em seguida, são aplicados dois métodos utilizados em análises de controlabilidade, a saber: Matriz de Ganhos e Análise RGA. Por fim, é proposta a estratégia de controle.

O quarto capítulo contém, por fim, a simulação de processo controlado. Após todo o estudo apresentado nos capítulos anteriores, serão feitas as simulações finais com o processo controlado. Os resultados também serão apresentados e discutidos.

No quinto capítulo são apresentadas as conclusões, sugestões e recomendações para trabalhos futuros. A seguir, ainda apresentam-se as referências bibliográficas e os apêndices.

No Apêndice A tem-se a descrição detalhada do simulador desenvolvido em ambiente SIMULINK do MATLAB (SIMULINK 4.1 do MATLAB versão 6.1, *The MathWorks Inc.*).

Já no Apêndice B estão disponíveis as tabelas com os resultados da etapa preliminar da Análise de Sensibilidade.

No Apêndice C é apresentada a ordem de cálculo para os coeficientes de transferência de calor dos dois trocadores de calor de integração energética presentes no processo.

Finalmente, no Apêndice D, a descrição dos métodos utilizados para a obtenção da Matriz de RGA do processo em questão.

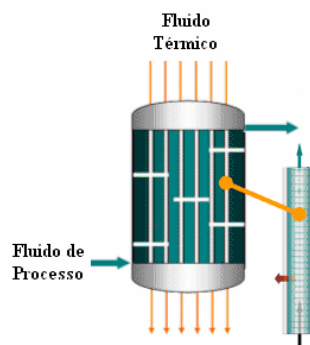
# **CAPÍTULO 2: MODELAGEM E SIMULAÇÃO DOS PRINCIPAIS EQUIPAMENTOS**

No Fluxograma de Produção de Óxido de Etileno, **Figura 1.2**, a etapa de Reação, engloba o reator e os trocadores de calor com integração energética. Neste Capítulo, são apresentados: uma revisão teórica do equipamento em questão, o modelo matemático utilizado e as condições de operação do equipamento. Resultados de simulações desses equipamentos em separado são relatados.

No escopo do estudo, além da Etapa de Reação, a Etapa de Absorção foi abordada de forma simplificada, enquanto a Etapa de Purificação não foi objeto de simulação.

## **2.1) Reator de Óxido de Etileno**

A reação de produção de óxido de etileno é conduzida industrialmente em reatores multitubulares de leito fixo, refrigerados externamente por um fluido térmico que circula em contracorrente ao fluido de processo, como em um trocador de calor casco e tubo, conforme esquematizado na **Figura 2.1**.



**Figura 2.1:** Exemplo de Reator Multitubular.

Fonte: [http://www.psenterprise.com/gproms/aml\\_fbcr.html](http://www.psenterprise.com/gproms/aml_fbcr.html)

O reator multitubular catalítico de leito fixo é um importante equipamento da indústria química. É vastamente utilizado para reações de oxidação de hidrocarbonetos, que são altamente exotérmicas. O fluido térmico ou de refrigeração, que circula externamente aos tubos, pode ser um óleo térmico ou água em ebulição. A literatura apresenta estudo comparativo do uso de três fluidos térmicos: n-Nonano, Downtherm J e n-Octano, indicando o n-Nonano como o fluido adequado ao processo [MEHL, 1996]. Com isso, foi utilizado neste estudo o n-Nonano.

Diluentes e moderadores da reação como nitrogênio e dicloroetano são utilizados na corrente de alimentação para manter a mistura gasosa abaixo do limite de flamabilidade, evitando o seu descontrole [MEHL, 1996]. Esta preocupação se deve ao fato de que o óxido de etileno é inflamável no ar em qualquer concentração acima de 2,6% (em volume), em temperaturas acima de 10,6°C. A temperatura de auto-ignição (AIT) do óxido de etileno no ar, à pressão atmosférica, é de 428,9°C [LOU *et al.*, 2006]. Assim, no estudo de caso em questão, foi utilizado o nitrogênio como diluente.

Na Etapa de Reação do processo de produção de óxido de etileno, destacam-se quatro aspectos de relevante importância no desempenho e controle do processo: a forte exotermia da reação em questão, o tempo morto, a sensibilidade paramétrica e a relação entre seletividade e conversão.

A forte exotermia pode ser observada em casos particularmente críticos, como em condições de emergência. Nestes casos, é difícil manter sob controle a temperatura de um reator que pode gerar até onze vezes mais calor do que na sua condição normal de operação [MEHL, 1996]. Devido a essa forte exotermia das reações envolvidas no processo, é comum a ocorrência de “pontos quentes” no interior do reator que, além de comprometerem o rendimento do processo, levam à desativação do catalisador e ameaçam a segurança operacional, com conseqüente risco de descontrole da reação (“runaway”).

O reator apresenta características dinâmicas que dificultam a sua operação e controle: a característica de tempo morto, ou atraso de transporte, é encontrada em todo reator tubular, onde transcorre atraso devido ao transporte do fluido entre a sua entrada e saída. Contudo, os reatores tubulares com escoamento do tipo empistonado, sem



reciclo, são ditos intrinsecamente estáveis, ou seja, com o fim da perturbação, o reator retorna para o seu estado original. Ressalta-se que, no estudo em questão, há integração energética entre a saída e a entrada do reator impondo a este um “feedback” positivo que torna o processo instável em malha aberta [MEHL, 1996].

Outra característica relevante na sua operação é o fenômeno conhecido como “sensibilidade paramétrica”, que pode ser definido pelas grandes variações no comportamento de um processo operado no estado estacionário em função de pequenas alterações nas condições de sua carga. Trabalhos publicados na literatura [MEHL, 1996] demonstram que reatores tubulares de leito fixo, onde são processadas reações exotérmicas, são extremamente sensíveis a pequenas variações de determinados parâmetros quando operados dentro da sua região crítica, isto é, apresentam uma região de alta sensibilidade paramétrica. Devem-se operar tais reatores dentro dessa região para não comprometer a seletividade, a conversão e a segurança do processo.

É digno de nota outro aspecto desta reação, ou seja, a dualidade entre a seletividade e a conversão da reação. A seletividade para a produção de óxido de etileno é função a conversão por passe sob condições normais de operação: a conversão de etileno por passe não pode ser elevada sem conseqüente queda da seletividade em óxido de etileno, sendo mantida uma baixa conversão por passe para favorecer a seletividade a óxido. Adicionalmente, a seletividade em óxido de etileno é favorecida quando o perfil de temperatura é mais suave, o que, porém, ocasiona queda da conversão por passe.

A **Tabela 2.1** apresenta a relação entre a conversão e a seletividade (da reação R1, de produção do óxido de etileno, em relação à reação R2, de combustão completa do etileno) obtida na literatura.

Por fim, para que a seletividade por óxido de etileno seja mantida em níveis mais elevados, a conversão deve ser mantida baixa e o perfil de temperatura ao longo do reator deve ser suave, ou seja, não deve apresentar picos de temperatura muito elevados, ou seja, os “pontos quentes” do reator.

Assim, a adoção de estratégias adequadas de operação e de controle torna-se necessária, pois o aumento excessivo da temperatura pode promover a desativação do catalisador, o favorecimento das reações paralelas, com conseqüente queda da

seletividade e, dependendo da amplitude do pico de temperatura, comprometer a estrutura física e a segurança operacional do reator.

**Tabela 2.1:** Relação entre Conversão e Seletividade.

<b>% Conversão</b>	<b>Seletividade (da reação R1 em relação à reação R2)</b>
20	6.0
30	5.9
40	5.8
50	5.6
60	5.2
70	4.4
80	3.6
85	2.4
90	1.2
95	0.0

*Fonte: ZHOU e YUAN, 2005.*

### 2.1.1) Modelo Matemático do Reator

Foi desenvolvido por Mehl [MEHL, 1996] um Modelo Matemático Dinâmico para o Reator Multitubular do processo de produção de óxido de etileno. Na formulação desse modelo algumas simplificações foram adotadas, destacando-se:

**i) Número de Dimensões:** Um modelo matemático de um reator tubular pode ser unidimensional ou bidimensional. O modelo unidimensional, mais simples, descreve apenas as variações de massa, energia e quantidade de momento na direção axial (direção do escoamento). Já o modelo bidimensional descreve as variações nas direções: axial e radial.

**ii) Número de fases:** Dependendo do número de fases considerado, o modelo será pseudohomogêneo ou heterogêneo.

- **Modelo Heterogêneo**: mais rigoroso. Considera a fase sólida (leito catalítico) e a fase fluida (gases) separadamente, sendo composto de balanços de massa e de energia para cada fase [MEHL, 1996].

- **Modelo Pseudohomogêneo**: considera uma única “*pseudo-fase*”, não fazendo distinção entre a fase sólida e a fase fluida. Neste modelo, tem-se apenas balanços de massa e energia para a “*pseudo-fase*” onde são utilizados parâmetros cinéticos e térmicos efetivos. Apresenta um emprego muito mais amplo devido à complexidade do modelo heterogêneo, que demanda um grande esforço computacional [MEHL,1996].

Sendo assim, de acordo com todas as vantagens apresentadas pelo Modelo Pseudohomogêneo, este foi o escolhido para representar o processo em questão.

**iii) Reator Multitubular:** É importante notar que a maior parte dos modelos encontrados na literatura utiliza apenas um reator tubular para representar o reator multitubular, pois se considera que todos os tubos deste reator estão sob as mesmas condições operacionais e, conseqüentemente, o comportamento de cada tubo é idêntico ao comportamento dos demais [MEHL, 1996].

Foram, então, utilizadas as seguintes simplificações e considerações:

- ⇒ **Modelo Unidimensional** – apenas os gradientes de energia, massa e quantidade de momento na direção axial (direção do escoamento) foram considerados. Como o comprimento do leito catalítico é muito maior do que o seu diâmetro, esse termo pôde ser desprezado (tubos estreitos);
- ⇒ **Modelo Pseudohomogêneo** – A presença do catalisador não foi explicitamente considerada. Não foi feita distinção entre a fase sólida (leito catalítico) e a fase fluida (corrente de processo), sendo utilizados parâmetros efetivos para a

“pseudo-fase”, que é constituída pela corrente de processo mais o catalisador.

Além disso, não há gradientes de temperatura e concentração intrafase;

⇒ Como todos os tubos do reator estão sob as mesmas condições operacionais, um único tubo (reator tubular) foi utilizado para representar o reator multitubular.

Adicionalmente, de acordo com os resultados da simulação do modelo no estado estacionário, para o mesmo sistema, realizada por Mehl [MEHL, 2006], foram utilizadas as seguintes simplificações e considerações adicionais:

⇒ Foi considerada a variação de temperatura do fluido de refrigeração, bem como o seu escoamento em contracorrente ao o fluido de processo;

⇒ A queda de pressão ao longo do leito foi desprezada por apresentar valores pouco significativos;

⇒ Escoamento do tipo “*Plug-Flow*” (empistonado), o que leva a desprezar os efeitos de parede;

⇒ Comportamento de gás ideal;

⇒ Dentre as propriedades físicas da corrente de processo, apenas a Densidade estava variando ao longo do reator.

As equações do Modelo são apresentadas a seguir.

### Balanco de Massa para o Etileno:

$$e \frac{dC_{et}}{dt} + \frac{G}{r_b} \frac{(C_{et}(z, t) - C_{et}(z - \Delta z, t))}{\Delta Z} = r_b \cdot (-R_1 - R_2) \quad (2.1)$$

onde  $e$  representa a porosidade do leito catalítico,  $C$  a concentração ( $\text{Kmol/m}^3$ ),  $t$  o tempo (s),  $G$  a densidade de fluxo mássico ( $\text{Kg/m}^2 \cdot \text{s}$ ),  $\rho$  a densidade ( $\text{Kg/m}^3$ ),  $z$  o comprimento na direção axial (m) e, por fim,  $R_i$  a taxa da  $i^{\text{ésima}}$  reação ( $\text{Kmol/m}^3 \cdot \text{s}$ ). O subscrito  $et$  identifica o etileno, o  $f$  identifica o fluido de processo e o  $b$  identifica o catalisador.

**Balanco de Massa para o Óxido de Etileno:**

$$e \frac{dC_{oe}}{dt} + \frac{G}{r_b} \frac{(C_{oe}(z,t) - C_{oe}(z - \Delta z, t))}{\Delta z} = r_b \cdot (R_1) \quad (2.2)$$

onde  $e$  representa a porosidade do leito catalítico,  $C$  a concentração ( $\text{Kmol/m}^3$ ),  $t$  o tempo (s),  $G$  a densidade de fluxo mássico ( $\text{Kg/m}^2 \cdot \text{s}$ ),  $\rho$  a densidade ( $\text{Kg/m}^3$ ),  $z$  o comprimento na direção axial (m) e, por fim, a taxa da  $i^{\text{ésima}}$  reação ( $\text{Kmol/m}^3 \cdot \text{s}$ ). O subscrito  $oe$  identifica o óxido de etileno, o  $f$  identifica o fluido de processo e o  $b$  identifica o catalisador.

**Balanco de Energia para o Fluido Refrigerante:**

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{V_c}{\Delta Z} \cdot (T_f(z - \Delta z, t) - T_f(z, t)) + \frac{U \cdot P_e}{r_b \cdot C_{p_b} \cdot A_b} \cdot (T - T_c) \quad (2.3)$$

onde  $T$  representa a temperatura (K),  $t$  o tempo (s),  $z$  o comprimento na direção axial (m),  $U$  o coeficiente global de transferência de calor ( $\text{W/m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$ ),  $P_e$  o perímetro do reator (m),  $\rho$  a densidade ( $\text{Kg/m}^3$ ),  $C_p$  o calor específico ( $\text{J/Kmol.K}$ ) e, por fim,  $A$  a área transversal ( $\text{m}^2$ ). O subscrito  $c$  identifica o fluido de refrigeração (ou refrigerante), o  $b$  identifica o catalisador e o  $f$  identifica o fluido de processo.

**Balanco de Energia para a Corrente de Processo:**

$$\left[ r_b \cdot C_{p_b} \cdot (1 - e) + r_f \cdot C_{p_f} \cdot e \right] \frac{dT}{dt} + G \cdot C_{p_f} \frac{(T(z, t) - T(z - \Delta z, t))}{\Delta Z} = r_b \cdot (-\Delta H_1 \cdot R_1 - \Delta H_2 \cdot R_2) - \frac{4 \cdot U}{dt} \cdot (T - T_c) \quad (2.4)$$

onde  $\rho$  representa a densidade ( $\text{Kg/m}^3$ ),  $C_p$  o calor específico ( $\text{J/Kmol.K}$ ),  $e$  a porosidade do leito catalítico,  $T$  a temperatura (K),  $t$  o tempo (s),  $G$  a densidade de fluxo mássico ( $\text{Kg/m}^2 \cdot \text{s}$ ),  $z$  o comprimento na direção axial (m),  $\rho H_i$  o calor liberado pela  $i^{\text{ésima}}$  reação ( $\text{MJ/mol}$ ),  $R_i$  a taxa da  $i^{\text{ésima}}$  reação ( $\text{Kmol/m}^3 \cdot \text{s}$ ) e, por fim,  $U$  o

coeficiente global de transferência de calor ( $W/m^2 \cdot ^\circ C$ ). O subscrito **b** identifica o catalisador, o **f** identifica o fluido de processo e o **c** identifica o fluido de refrigeração (ou refrigerante).

**Taxa de reação:**

$$R_i = K_{0_i} \cdot e^{-E_i/R \cdot T} \cdot C_{O_2} \cdot \text{ativ} \quad (2.5)$$

onde  $R_i$  representa a taxa da  $i^{\text{ésima}}$  reação ( $Kmol/m^3 \cdot s$ ),  $K_{0_i}$  o fator pré-exponencial de Arrhenius,  $E_i$  a energia de ativação da  $i^{\text{ésima}}$  reação ( $J/Kmol$ ),  $R$  a constante universal dos gases ( $Pa \cdot m^3/mol \cdot K$ ),  $T$  a temperatura ( $K$ ),  $C$  a concentração ( $Kmol/m^3$ ) e, por fim, **ativ** a atividade do leito catalítico. O subscrito  $O_2$  identifica o oxigênio.

A resolução numérica do modelo adotada foi de **Discretização por Diferenças Finitas**. Os sistemas descritos por um conjunto de equações diferenciais parciais, como o modelo do reator em questão, são solucionados através da discretização da variável espacial, de forma que o conjunto de equações diferenciais parciais (EDP) seja convertido em um conjunto de equações diferenciais ordinárias (EDO), que são integradas, freqüentemente, por métodos numéricos como o Runge-Kutta. O método de discretização mais comumente utilizado é o de diferenças finitas.

As equações diferenciais finitas foram obtidas a partir do truncamento no segundo termo da expansão da série de Taylor da definição da função  $y(x + \Delta x)$  que é apresentada a seguir:

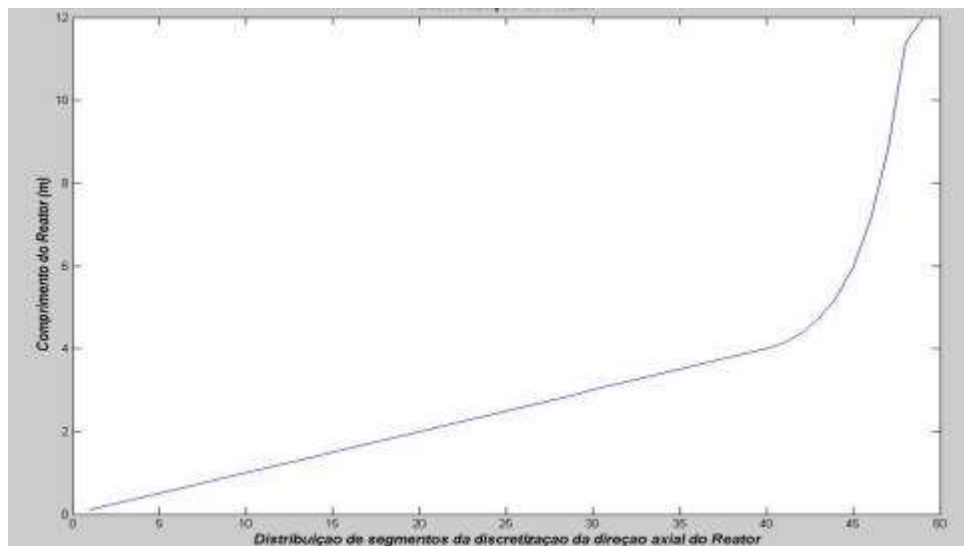
*Expansão em Série de Taylor da função  $y(x + \Delta x)$ :*

$$y(z + \Delta z) = y(z) + \frac{dy(z)}{dz} \cdot \Delta z + \dots \quad (2.6)$$

Rearranjando, tem-se a Equação (2.7):

$$\frac{y(z + \Delta z) - y(z)}{\Delta z} = \frac{dy(z)}{dz} \quad (2.7)$$

Quando o espaçamento entre os pontos de discretização tende a zero, a solução da EDO resultante tende para a solução exata da EDP original. A aplicação do Método das Diferenças Finitas deve apresentar como resultado uma discretização que apresente um maior número de segmentos na região de maior gradiente de temperatura, que é a porção inicial do reator. O número total de segmentos que foi utilizado é de 49, sendo 40 concentrados nos 4 metros iniciais do reator. É possível observar a distribuição dos segmentos pelo comprimento do reator na **Figura 2.2**:



**Figura 2.2:** Número de segmentos obtidos pela Discretização.

### 2.1.2) Condições base de operação

O modelo desenvolvido foi simulado no estado estacionário por Mehl [MEHL, 1996] com o objetivo avaliar parâmetros de desempenho do processo. Esses parâmetros calculados foram utilizados na simulação do modelo dinâmico, que é o de maior interesse neste estudo de caso. A seguir, são apresentados os valores encontrados para os principais parâmetros de desempenho com o modelo adotado a partir da simulação

no estado estacionário. Os valores encontrados para a conversão, seletividade, produtividade e temperatura máxima atingida pela corrente de processo encontram-se na **Tabela 2.2**.

**Tabela 2.2:** Conversão, Seletividade, Produtividade e Temperatura Máxima

<b>CONVERSÃO</b>	21,56
<b>SELETIVIDADE</b>	73,42
<b>PRODUTIVIDADE</b>	15,83
<b>T máxima (K)</b>	525,67

É possível observar que os valores de conversão e seletividade encontrados nessa simulação estão de acordo com a **Tabela 2.1**, que apresenta algumas relações entre Conversão e Seletividade apresentadas na literatura.

Outros dados importantes sobre o Catalisador, Reator e Processo, utilizados no modelo, são apresentados nas **Tabelas 2.3, 2.4 e 2.5**.

**Tabela 2.3:** Dados do Catalisador.

<b>CATALISADOR</b>	
Tipo	Prata suportada em alumina
Densidade	850 Kg / m <sup>3</sup>
Diâmetro de Partícula	0,008 m

**Tabela 2.4:** Geometria do Reator.

<b>REATOR</b>	
Comprimento	12 m
Número de Tubos	4000 tubos
Diâmetro dos Tubos	0,04 m
Diâmetro do Casco	3,39 m



**Tabela 2.5:** Condições de Operação do Reator

<b>DADOS DE PROCESSO</b>	
Vazão de Alimentação Total	40 Kg / s
Vazão mássica por tubo	0,01 Kg / s
Temperatura de Entrada	220°C
Pressão da Entrada	2,0265x10 <sup>6</sup> Pa
Fluido de Refrigeração	n-Nonano
Gradiente de Temperatura do Fluido de Refrigeração	4 K
Vazão Mássica do Fluido de Refrigeração	0,4383 Kg / s
Concentração da Alimentação (% molar)	
Etileno (C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> )	17%
Oxigênio (O <sub>2</sub> )	6%
Dióxido de Carbono (CO <sub>2</sub> )	---
Água (H <sub>2</sub> O)	---
Óxido de Etileno (C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O)	---
Inerte (N <sub>2</sub> )	77%
Capacidade Calorífica dos Reagentes (Cp)	1050 J/Kg.K
Capacidade Calorífica do Fluido de Refrigeração (Cp)	3222 J/Kg.K
Coeficiente se Transferência de Calor (U)	316 W/m <sup>2</sup> .K

### 2.1.3) Simulação do Reator

O bloco desenvolvido em ambiente SIMULINK/MATLAB 6.1 (*The MathWorks Inc.*) para simulação dinâmica do reator está descrito no **ANEXO A**.

Para a determinação dos parâmetros ótimos de operação, foi feita uma Análise de Sensibilidade Paramétrica. Em etapa preliminar, cada uma das variáveis de entrada foi perturbada, mantendo as demais constantes e iguais à condição base de operação (**item 2.1.2**). A cada iteração, eram acompanhados os valores para as variáveis de saída

(primárias e secundárias). As tabelas com os resultados da Análise de Sensibilidade Preliminar encontram-se no **ANEXO B**.

A seguir, é apresentada estudo realizado através de rotina computacional em MATLAB (versão 6.1, *The MathWorks Inc.*). Neste estudo, foi verificada a variação de cada variável de entrada, com as demais variáveis também sendo perturbadas dentro das faixas pesquisadas na etapa preliminar.

Foram construídas superfícies que mostram as relações entre as variáveis de entrada *CET<sub>in</sub>*, *CO<sub>2in</sub>*, *T<sub>p</sub>* e *T<sub>c</sub>* e as variáveis de saída *Conv.*, *Selet.*, *T<sub>pico</sub>* e *L<sub>pico</sub>* (**Figuras 2.3 a 2.10**). A variável de entrada *W* não foi abordada neste estudo completo, pois variar a vazão implica em alterar a produção da planta, o que normalmente não é um cenário dinâmico de interesse. Dentre as 8 variáveis de saída (primárias e secundárias), estas 4 foram as escolhidas pois são as determinantes da viabilidade do processo. A conversão e seletividade determinam o rendimento e a produção. Já a temperatura de pico e a sua localização determinam a segurança do processo, pois, como já foi dito anteriormente, este reator é capaz de chegar a uma temperatura 11 vezes maior que a temperatura de operação, podendo causar diversos danos estruturais como até mesmo explosões.

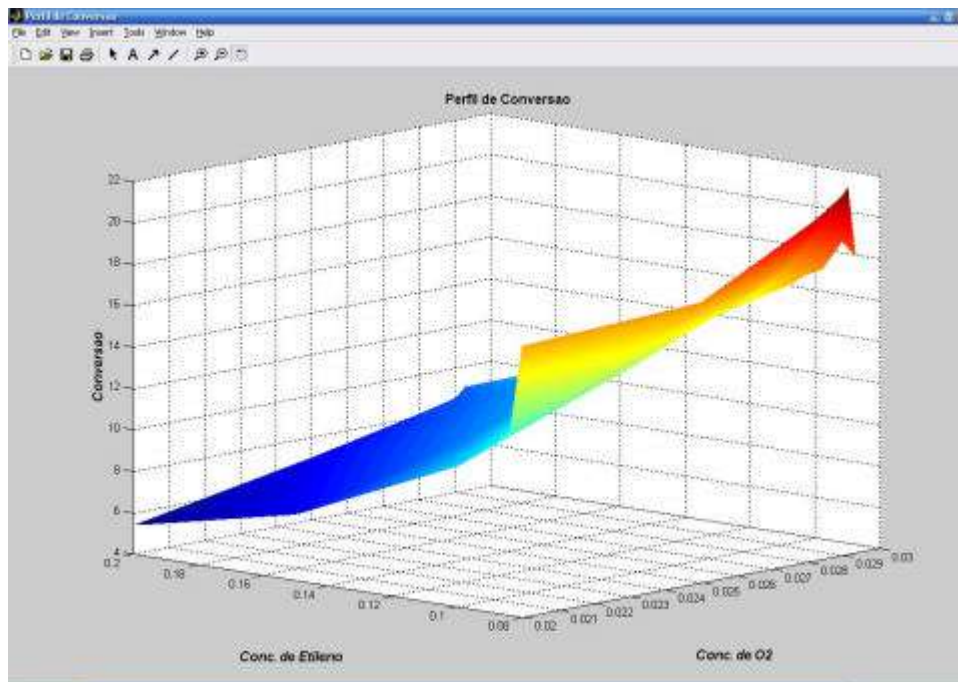


Figura 2.3: Perfil de Conversão com a variação de CETin e CO2in.

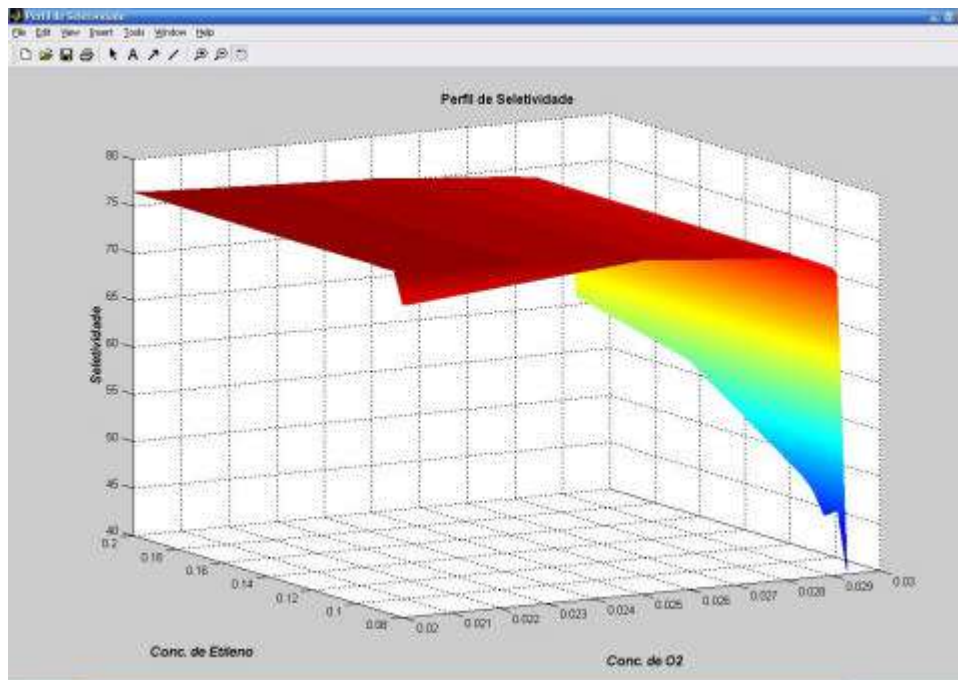


Figura 2.4: Perfil de Seletividade com a variação de CETin e CO2in.

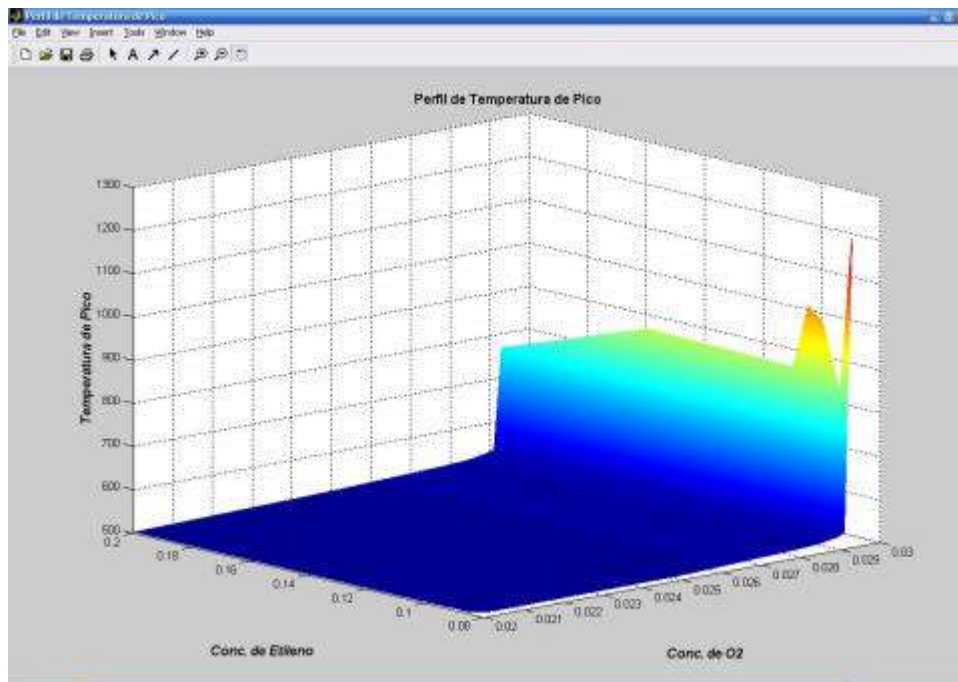


Figura 2.5: Perfil de Temperatura de Pico com a variação de CETin e CO2in.

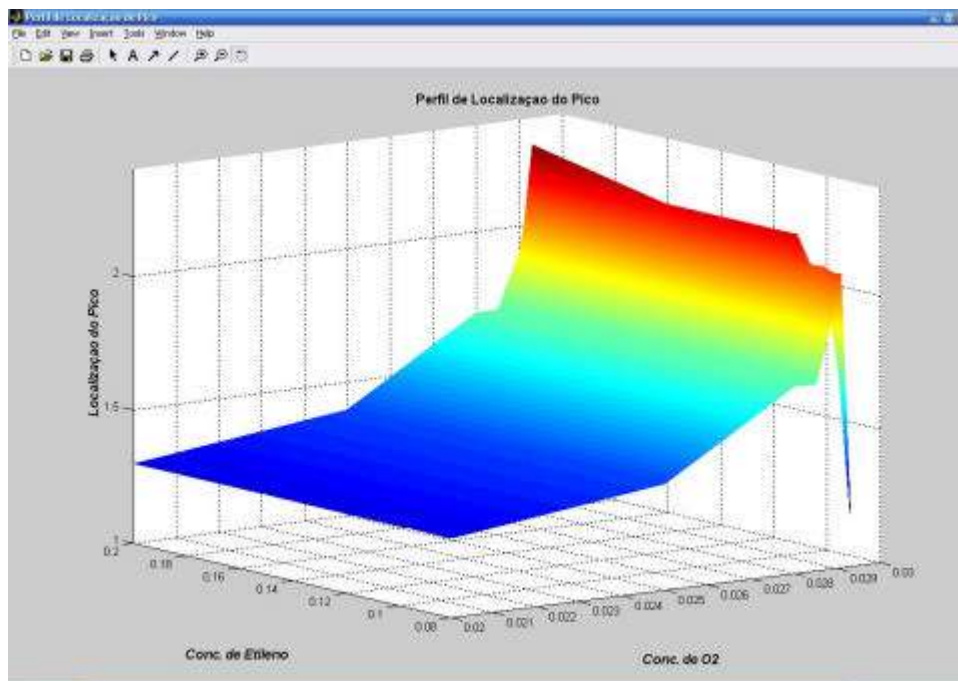


Figura 2.6: Perfil de Localização de Pico com a variação de CETin e CO2in.

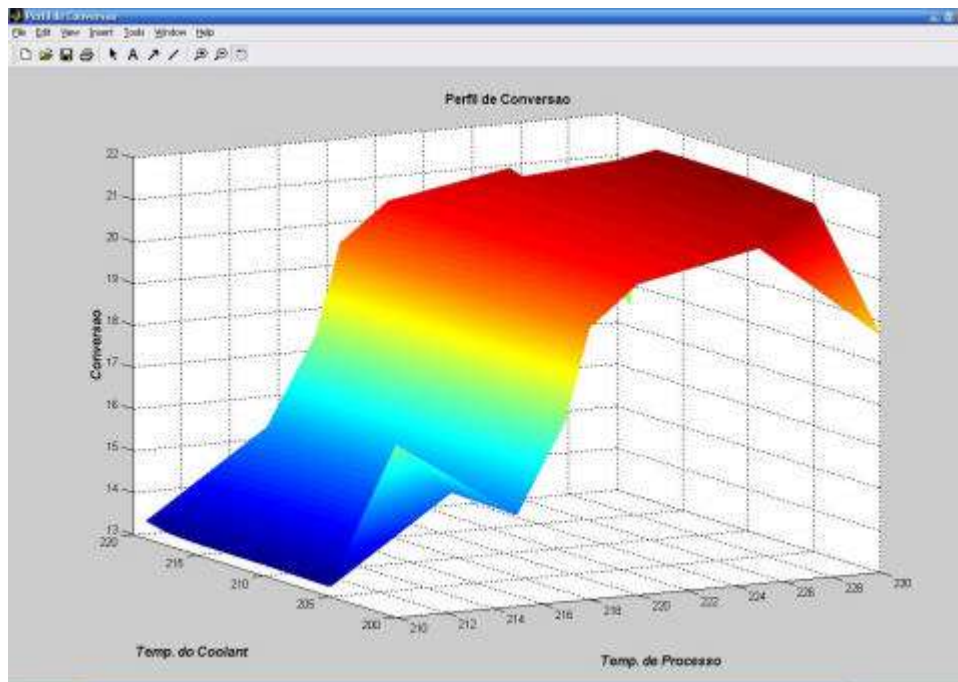


Figura 2.7: Perfil de Conversão com a variação de  $T_p$  e  $T_c$ .

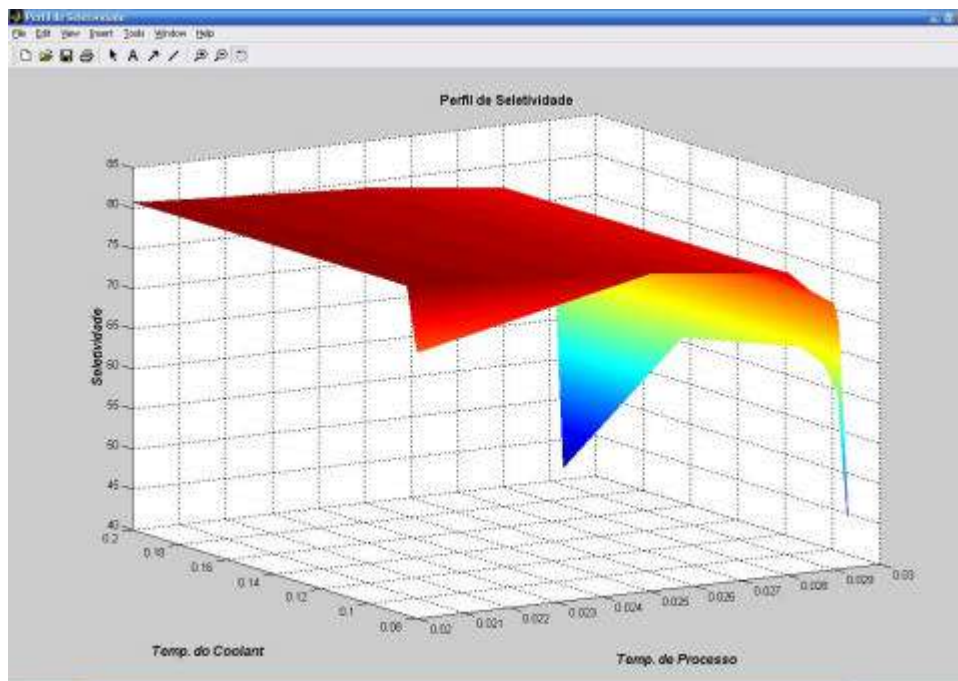


Figura 2.8: Perfil de Seletividade com a variação de  $T_p$  e  $T_c$ .

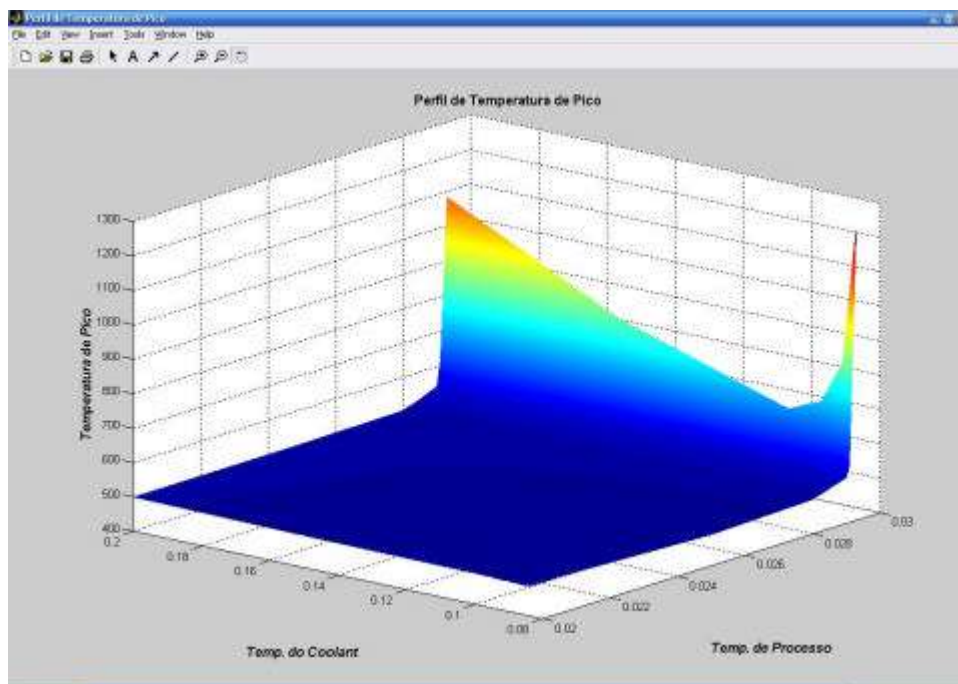


Figura 2.9: Perfil de Temperatura de Pico com a variação de  $T_p$  e  $T_c$ .

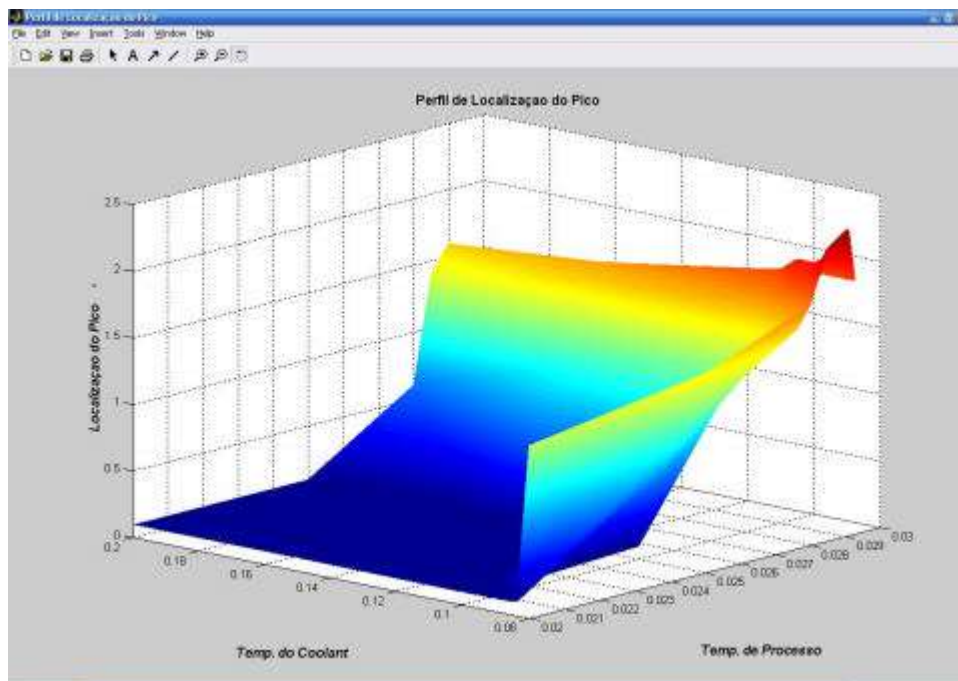


Figura 2.10: Perfil de Localização de Pico com a variação de  $T_p$  e  $T_c$ .

A partir desse estudo de sensibilidade e partindo das condições base de operação, foi possível determinar as condições ideais para a simulação do reator em

questão através da análise dos gráficos apresentados anteriormente. Os resultados estão listados nas **Tabelas 2.6 a 2.9**.

**Tabela 2.6:** Resultados da Análise dos Gráficos de Conversão.

<b>CONVERSÃO</b>			
Pelo Gráfico das Concentrações	<b>Z<sub>máx</sub></b>	21,7191	<i>conv</i>
	<b>X<sub>máx</sub></b>	0,0291	<i>CO2in</i>
	<b>Y<sub>máx</sub></b>	0,0800	<i>CETin</i>
Pelo Gráfico das Temperaturas	<b>Z<sub>máx</sub></b>	21,4498	<i>conv</i>
	<b>X<sub>máx</sub></b>	230	<i>TPin</i>
	<b>Y<sub>máx</sub></b>	210	<i>TCin</i>

**Tabela 2.7:** Resultados da Análise dos Gráficos de Seletividade.

<b>SELETIVIDADE</b>			
Pelo Gráfico das Concentrações	<b>Z<sub>máx</sub></b>	76,5400	<i>selet</i>
	<b>X<sub>máx</sub></b>	0,0200	<i>CO2in</i>
	<b>Y<sub>máx</sub></b>	0,2000	<i>CETin</i>
Pelo Gráfico das Temperaturas	<b>Z<sub>máx</sub></b>	81,0571	<i>Selet</i>
	<b>X<sub>máx</sub></b>	210	<i>TPin</i>
	<b>Y<sub>máx</sub></b>	205	<i>TCin</i>

**Tabela 2.8:** Resultados da Análise dos Gráficos de Temperatura de Pico.

<b>TEMPERATURA DE PICO</b>			
Pelo Gráfico das Concentrações	<b>Z<sub>máx</sub></b>	503,5317	<i>Tpico</i>
	<b>X<sub>máx</sub></b>	0,0200	<i>CO2in</i>
	<b>Y<sub>máx</sub></b>	0,2000	<i>CETin</i>
Pelo Gráfico das Temperaturas	<b>Z<sub>máx</sub></b>	487,2357	<i>Tpico</i>
	<b>X<sub>máx</sub></b>	210	<i>TPin</i>
	<b>Y<sub>máx</sub></b>	205	<i>TCin</i>

**Tabela 2.9:** Resultados da Análise dos Gráficos de Localização do Pico.

<b>TEMPERATURA DE PICO</b>			
Pelo Gráfico das Concentrações	<b>Zmáx</b>	1,3000	<i>Lpico</i>
	<b>Xmáx</b>	0,0200	<i>CO2in</i>
	<b>Ymáx</b>	0,2000	<i>CETin</i>
Pelo Gráfico das Temperaturas	<b>Zmáx</b>	0,1000	<i>Lpico</i>
	<b>Xmáx</b>	210	<i>TPin</i>
	<b>Ymáx</b>	205	<i>TCin</i>

Analisando os resultados obtidos, conclui-se que, para a geometria utilizada e catalisador empregado, as concentrações iniciais ideais de O<sub>2</sub> e Etileno são 0,0200 e 0,2000M, respectivamente, por possibilitar maior seletividade e menor temperatura de pico. No entanto, utilizando esses valores para as concentrações, a conversão da reação seria de apenas 5,4% (a menor conversão obtida para as faixas de concentrações estudadas), o que representa um valor muito baixo para a escala industrial.

Utilizando-se os resultados obtidos para as concentrações no caso da conversão máxima (0,0291M para a *CO2in* e 0,0800M para a *CETin*), o valor da seletividade resultante (71,9%) é bem próximo do valor máximo obtido (76,5%). O mesmo ocorre com a temperatura de pico: para a conversão máxima, seria de 540,4°C, sendo que a mínima ideal é de 503,5°C.

No caso das temperaturas, a partir dos resultados obtidos, os valores ideais para a corrente de processo e para o *coolant* seriam 210 e 205°C, respectivamente. Nessas temperaturas, tem-se maior seletividade e menor temperatura de pico. No entanto, a conversão é muito baixa: 13,2% (a menor conversão obtida para as faixas de temperaturas estudadas).

Por outro lado, utilizando-se os valores das temperaturas obtidas para uma conversão máxima (230°C para a corrente de processo e 210°C para o *coolant*), o valor da seletividade resultante (64,4%) se afasta razoavelmente do valor máximo obtido



(81,1%). O mesmo ocorre com a temperatura de pico: para a conversão máxima, seria de 724,1°C, sendo que a mínima ideal é de 487,2°C.

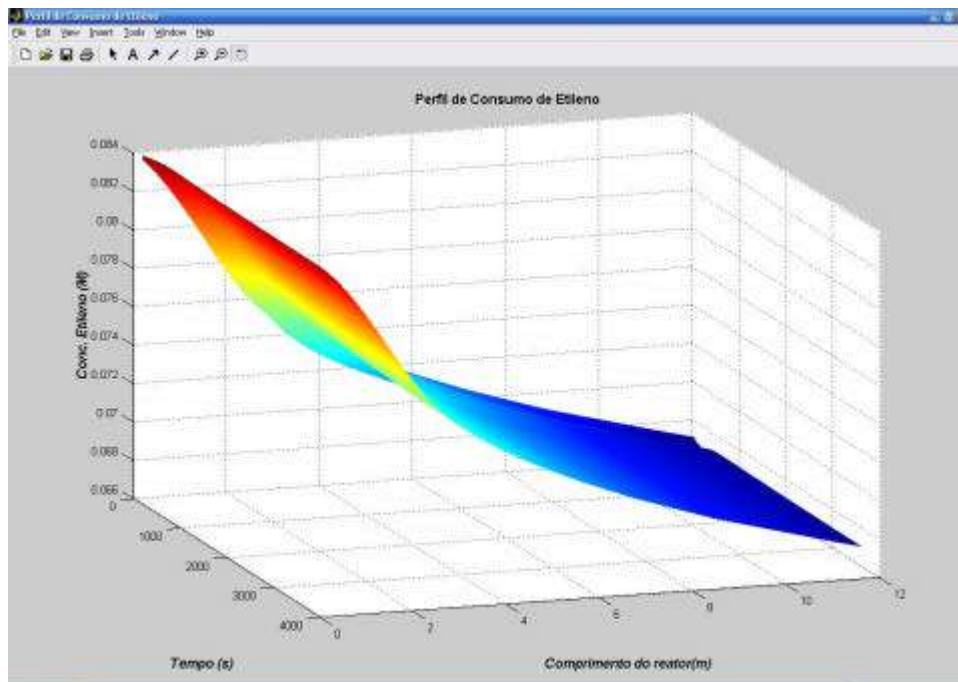
Com esse impasse, principalmente no caso das temperaturas, para decidir finalmente quais parâmetros utilizar na simulação final do processo, recorreu-se as tabelas da análise de sensibilidade preliminar. Por fim, em uma análise conjunta dos resultados apresentados tanto pela análise de sensibilidade preliminar quanto pela completa, e utilizando-se como critério a escolha de temperaturas e concentrações que, ao mesmo tempo, apresentem um valor razoável de conversão e seletividade, além de uma temperatura de pico que não fosse muito elevada, optou-se pelos valores apresentados na **Tabela 2.10**.

**Tabela 2.10:** Condições Ideais para a Simulação do Reator.

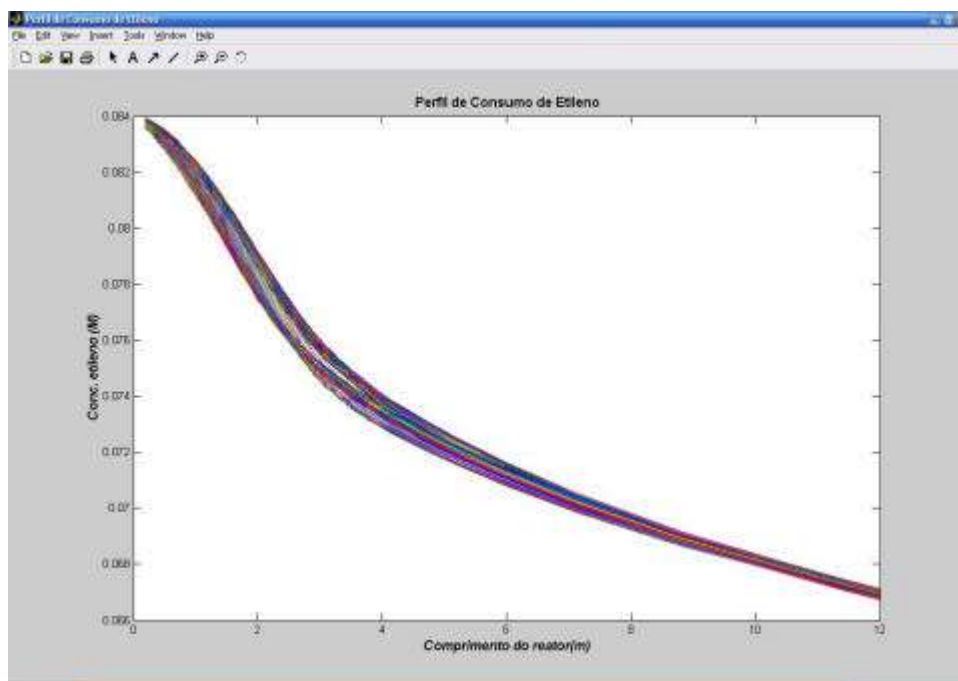
PARÂMETRO	VALOR
Concentração Inicial de O <sub>2</sub> (CO <sub>2</sub> in)	0,0291M
Concentração inicial de Etileno (CETin)	0,0840M
Temperatura inicial da corrente de processo (TP)	220°C
Temperatura inicial do <i>Coolant</i> (Tc)	217°C

Os resultados da simulação do reator com as condições ideais de operação determinadas anteriormente estão apresentados nas **Figuras 2.11 a 2.18**.

*Perfis do Reator nas condições ideais de operação*



**Figura 2.11:** Perfil de Consumo de Etileno ao longo do reator e do tempo.



**Figura 2.12:** Consumo de Etileno ao longo do reator.

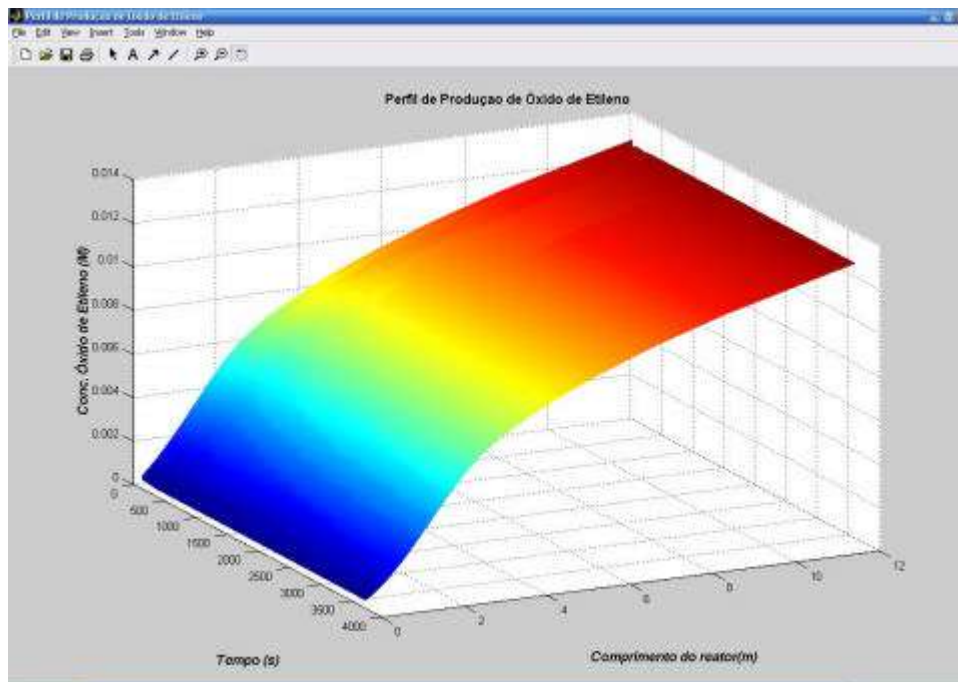


Figura 2.13: Perfil de Produção de Óxido de Etileno ao longo do reator e do tempo.

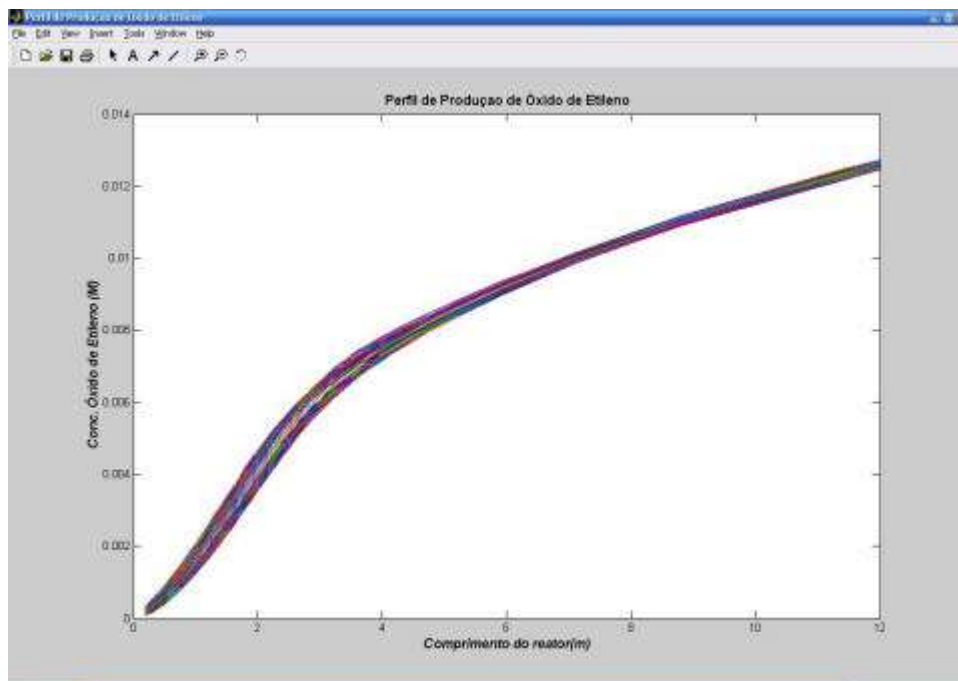


Figura 2.14: Produção de Óxido de Etileno ao longo do reator.

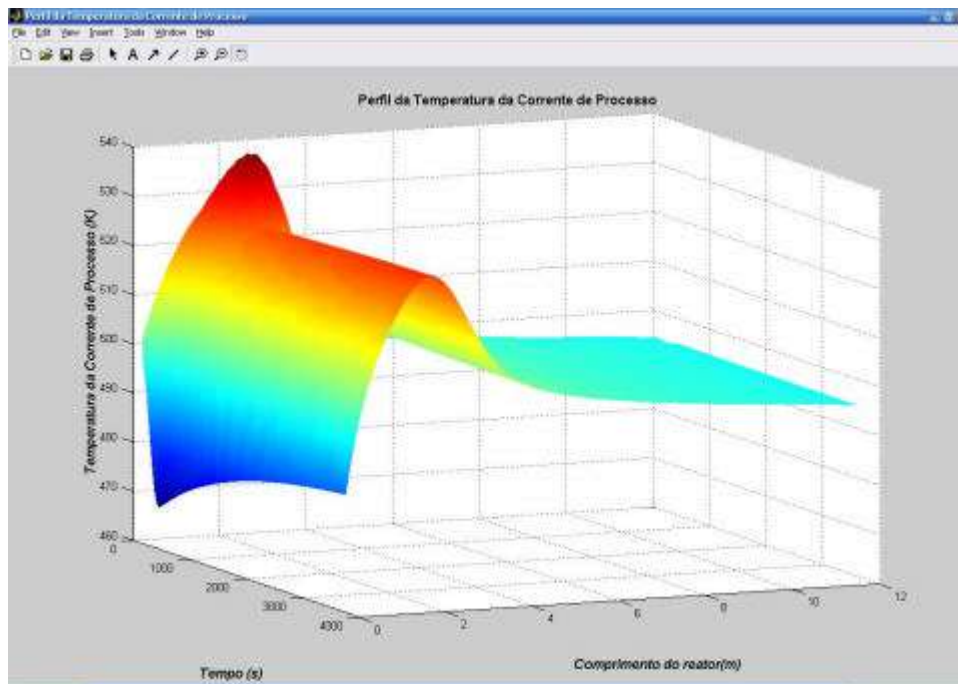


Figura 2.15: Temperatura da Corrente de Processo ao longo do reator e do tempo.

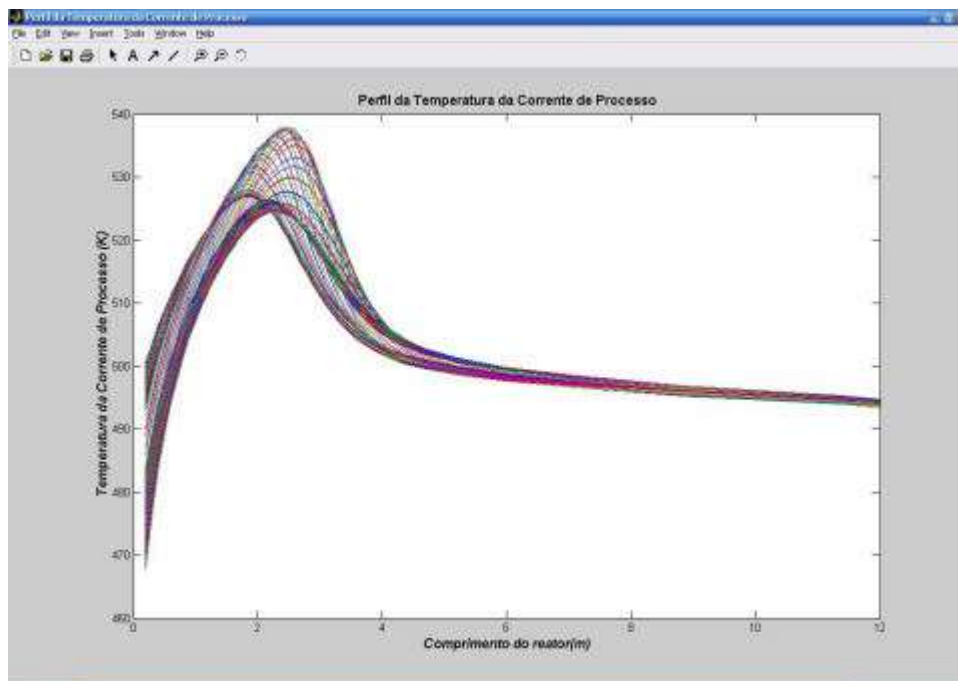


Figura 2.16: Temperatura da Corrente de Processo ao longo do reator.

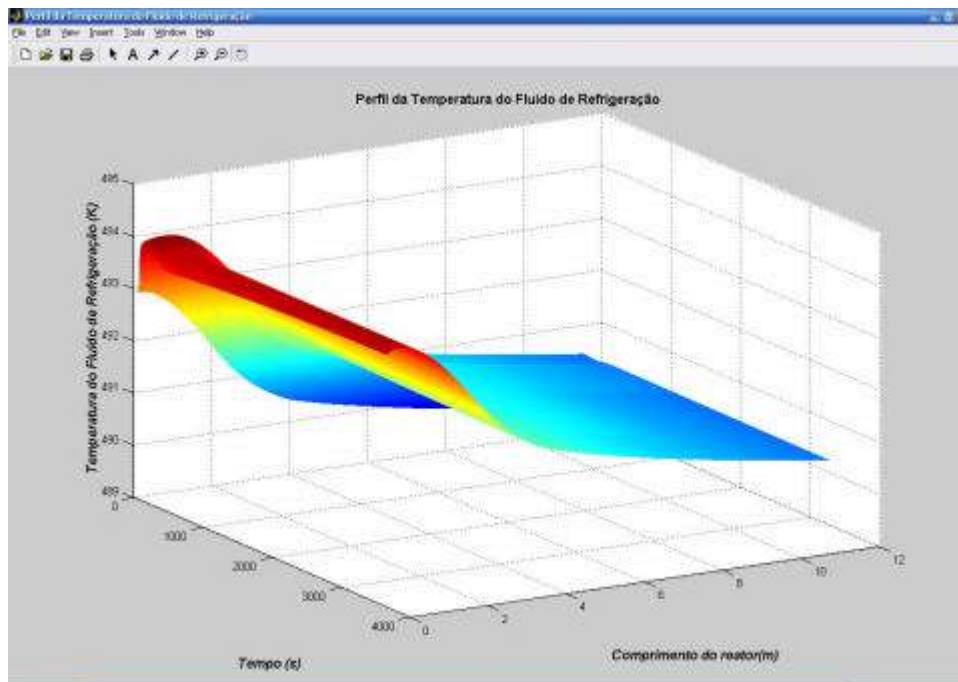


Figura 2.17: Temperatura do Fluido de Refrigeração ao longo do reator e do tempo.

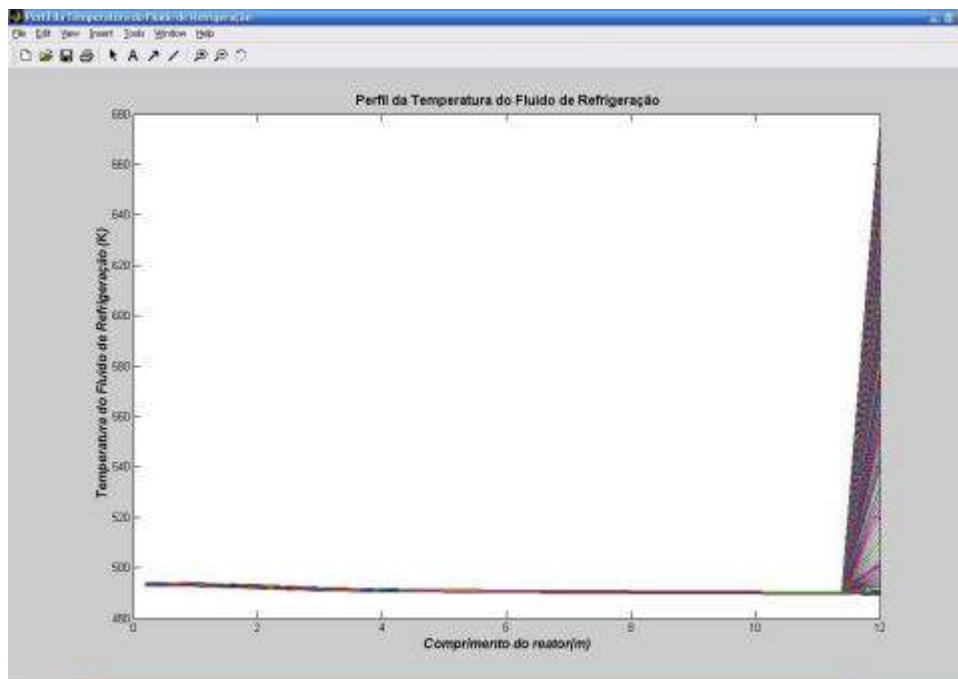
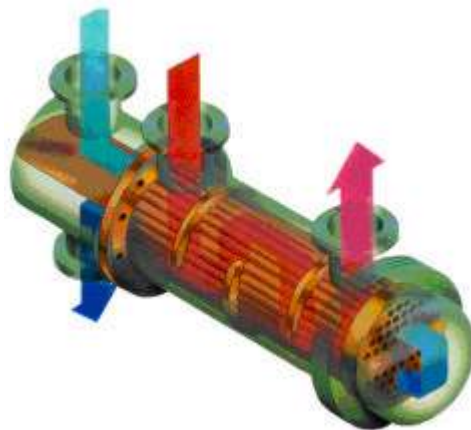


Figura 2.18: Temperatura do Fluido de Refrigeração ao longo do reator.

## 2.2) Trocador de Calor GÁS-GÁS

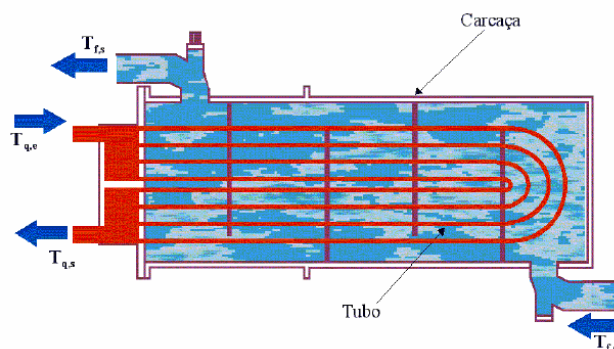
No processo de produção de óxido de etileno, a corrente de alimentação do reator deve ser pré-aquecida. Ou seja, esta, que está disponível na planta em uma temperatura de, aproximadamente,  $60^{\circ}\text{C}$ , deve ser aquecida até  $220^{\circ}\text{C}$  para atingir a temperatura de entrada requerida pelo reator. Para tal, são utilizados trocadores de calor do tipo Casco e Tubo com configuração de escoamento em contracorrente.

Um exemplo de trocador de calor (tipo Casco e Tubo) pode ser observado na **Figura 2.19** e a representação da configuração de escoamento em contracorrente pode ser observada na **Figura 2.20**.



**Figura 2.19:** Trocador de Calor Casco e Tubo em contracorrente.

Fonte: <http://www.heatexchangersonline.com/shellandtube.htm>



**Figura 2.20:** Representação da configuração de escoamento em contracorrente.

Fonte: <http://www.heatexchangersonline.com/shellandtube.htm>

Como a corrente de saída do reator se encontra numa temperatura próxima à requerida pelo reator para a corrente de entrada, é feita uma integração energética. Essa corrente de saída é o fluido quente do trocador de calor, enquanto a corrente de alimentação assume o papel do fluido frio. Como o objetivo da troca térmica é de elevar a temperatura do fluido frio até a mesma temperatura de entrada do fluido quente, foi proposta a utilização de um segundo trocador de integração, que aproveita o fluido de refrigeração do reator (n-Nonano), que também tem sua temperatura de saída do reator em torno dos 220°C, como fluido quente para concluir o aquecimento da corrente de alimentação.

### 2.2.1) Modelo Matemático dos Trocadores de Calor

Foi desenvolvido por Oliveira [OLIVEIRA, 1995] um Modelo Matemático Dinâmico para trocadores de calor do tipo Casco e Tubo. Esse modelo é constituído por equações que descrevem balanços de energia e de massa, bem como equações de projeto das unidades. Além disso, nesse modelo, as propriedades físicas são consideradas constantes e os coeficientes de transferência de calor uniformes ao longo das áreas de transferência de calor.

Adotando-se uma hipótese muito comum em trabalhos de síntese de redes de trocadores de calor, todas as simulações realizadas consideram configuração de escoamento em contracorrente nos trocadores de calor. Foi utilizada a hipótese de que as correntes dos dois fluidos que escoam através do equipamento podem ser representadas por uma série de tanques de mistura perfeita [OLIVEIRA, 1995], como mostrado na **Figura 2.21**. Ou seja, a modelagem dinâmica é efetuada através da discretização dos trocadores em células com áreas e volumes iguais, nas quais é considerada mistura ideal.

A seguir, é apresentado o modelo desenvolvido por Oliveira [OLIVEIRA, 1995], e que foi utilizado no presente trabalho.

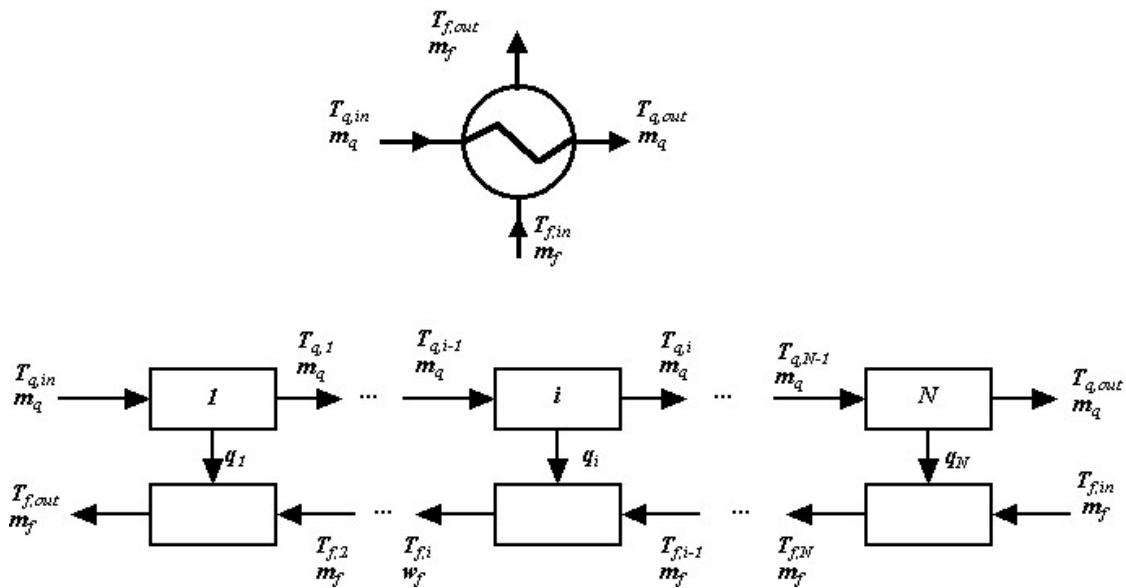


Figura 2.21: Diagrama Esquemático de Tanques de Mistura.

Fonte: OLIVEIRA, 1995.

### Balances de Energia

Os balanços de energia utilizados adotam a hipótese de equipamentos isolados termicamente do ambiente. Supondo regime de operação transiente e definindo como volume de controle o fluido quente no interior de uma célula, a representação do balanço de energia nesse volume de controle conforme **Equação 2.8**:

$$\rho_q V_q C p_q \frac{dT_q}{dt} = \dot{m}_q (H_q^e - H_q^s) - Q_{cel} \quad (2.8)$$

onde  $\rho$  representa a densidade do fluido,  $V_q$  é o volume de fluido no interior da célula,  $T_q$  é a temperatura média no interior da célula,  $\dot{m}$  representa a vazão mássica,  $H$  a entalpia por unidade de massa e  $Q_{cel}$  taxa de transferência de calor cedida para o fluido frio a partir desse volume de controle. Note que em função da hipótese de mistura ideal no interior das células,  $T_q = T_q^s$ . O subscrito  $q$  identifica o fluido quente, enquanto o superescrito  $e$  significa entrada e  $s$  saída.



Para o volume de fluido frio no interior do equipamento como volume de controle há uma equação análoga. O balanço de energia é apresentado na **Equação 2.9**:

$$\rho_f V_f C_{p_f} \frac{dT_f}{dt} = \dot{m}_f (H_f^e - H_f^s) + Q_{cel} \quad (2.9)$$

onde o subscrito  $f$  identifica o fluido frio.

Os volumes de fluido quente e de fluido frio ( $V_q$  e  $V_f$ ) no interior de cada célula são determinados a partir do conhecimento dos volumes totais de fluido no interior dos tubos ( $V_t$ ) e no casco do trocador ( $V_s$ ), da posição de cada fluido e do número de células ( $N$ ) utilizadas para representar o equipamento. Supondo o fluido quente escoando pelos tubos e o frio pelo casco, as respectivas expressões estão descritas nas **Equações 2.10 e 2.11**:

$$V_q = \frac{V_t}{N} = \frac{\left( p N_t L \frac{(D_t - 2 d_t)^2}{4} \right)}{N} \quad (2.10)$$

$$V_f = \frac{V_s}{N} = \frac{\left( \frac{p D_s^2 L}{4} - \frac{p N_t D_t^2 L}{4} \right)}{N} \quad (2.11)$$

O balanço térmico nos trocadores de calor resultante é apresentado na **Equação 2.12**.

$$\rho_q V_q C_{p_q} \frac{dT_q}{dt} + \rho_f V_f C_{p_f} \frac{dT_f}{dt} = \dot{m}_q (H_q^e - H_q^s) + \dot{m}_f (H_f^e - H_f^s) \quad (2.12)$$

que indica que a energia cedida pelo fluido quente é integralmente absorvida pelo fluido frio, em função da hipótese do trocador estar termicamente isolado do ambiente e de não haver gradiente espacial de energia nas paredes do equipamento.

Com a hipótese de propriedades físicas constantes e a não ocorrência de mudança de fase nos dois fluidos, obtém-se a **Equação 2.13**.

$$\rho_q V_q C_p \frac{dT_q}{dt} + \rho_f V_f C_p \frac{dT_f}{dt} = \dot{m}_q C_p (T_q^e - T_q^s) + \dot{m}_f C_p (T_f^e - T_f^s) \quad (2.13)$$

onde  $C_p$  representa o calor específico dos fluidos e  $T$  a temperatura.

Cada célula de fluido quente tem uma correspondente de fluido frio. Os pares formam os estágios, em número igual a  $N$ , representados na **Figura 2.21** pelo índice  $i$ . Os balanços de energia no fluido quente e no fluido frio, em cada estágio, são representados por:

$$\frac{dT_{q,i}}{dt} = \frac{\dot{m}_q}{\rho_q V_q} (T_{q,i-1} - T_{q,i}) - \frac{U (A/N)}{\rho_h V_q C_p h} T_{ef,i} \quad (2.14)$$

$$\frac{dT_{f,i}}{dt} = \frac{\dot{m}_f}{\rho_f V_f} (T_{f,i+1} - T_{f,i}) + \frac{U (A/N)}{\rho_f V_f C_p h} T_{ef,i} \quad (2.15)$$

Considerando-se a influência das paredes dos tubos no comportamento dinâmico através de um modelo simplificado, há a necessidade de se adicionar mais uma equação na descrição do comportamento em cada estágio. Essa nova equação representa o balanço térmico em um volume de controle em torno da parede do tubo no interior de cada estágio. Desprezando-se a condução axial (entre estágios) e considerando as propriedades físicas do material que compõe os tubos constantes, tem-se:

$$\frac{dT_w}{dt} = \frac{1}{\rho_w V_w C_p} \left( \frac{A_q}{N} h_q \Delta T_{ef,q} - \frac{A_f}{N} h_f \Delta T_{ef,f} \right) \quad (2.16)$$

onde  $T_w$  é a temperatura da parede;  $\rho_w$  e  $C_p$  são a densidade e o calor específico do material que compõe a parede; e  $h_q$  e  $h_f$  são os coeficientes de transferência de calor

nos lados quente e frio. As áreas de transferência de calor em contato com o fluido quente ( $A_q$ ) e com o fluido frio ( $A_f$ ) são funções da posição dos fluidos.

O volume de parede no estágio ( $V_w$ ) pode ser estimado por:

$$V_w = \frac{N_t L \left( \pi \left( D_t^2 - (D_t - 2 \delta_t)^2 \right) \right)}{4 N} \quad (2.17)$$

### Equação de Projeto

A equação de projeto relaciona a carga térmica no equipamento ( $Q$ ) com a sua área de transferência de calor ( $A$ ). Uma forma geral de representá-la é:

$$Q = U A \Delta T_{ef} \quad (2.18)$$

onde  $U$  é o coeficiente global de transferência de calor e  $\Delta T_{ef}$  é o diferencial de temperatura efetivo, entre o fluido quente e o fluido frio, ao longo da área de transferência de calor.

O coeficiente global está diretamente relacionado com as resistências térmicas entre os dois fluidos no interior do equipamento. Desprezando a resistência térmica condutiva na parede dos tubos e a diferença entre as áreas superficiais interna e externa dos tubos, tem-se para o coeficiente global:

$$U = \frac{1}{\frac{1}{h_q} + \frac{1}{h_f}} \quad (2.19)$$

onde  $h$  representa os coeficientes de transferência de calor entre os fluidos e a superfície da área de transferência de calor.

Considerando-se configuração de escoamento em contracorrente, o diferencial efetivo  $DT_{ef,i}$  no estágio  $i$  fiel à abordagem de tanques de mistura é:

$$\Delta T_{ef,i} = T_{q,i} - T_{f,i} \quad (2.20)$$

Essa forma de estimar o diferencial efetivo entre as temperaturas dos fluidos quente e frio leva a valores subestimados para o calor transferido quando o número de células utilizadas é pequeno. Assim, a sua adoção implica na necessidade de se usar um número maior de estágios para se obter uma boa representação de cada equipamento.

Uma alternativa é a utilização da média logarítmica dos diferenciais de temperaturas, que, para minimizar problemas numéricos, pode ser estimada pela aproximação de Paterson (1984):

$$\Delta T_{ef,i} \approx \frac{1}{3} \frac{(T_{q,i-1} - T_{f,i}) + (T_{q,i} - T_{f,i+1})}{2} + \frac{2}{3} \sqrt{(T_{q,i-1} - T_{f,i})(T_{q,i} - T_{f,i+1})} \quad (2.21)$$

Uma alternativa à média logarítmica é a média aritmética, que tem a vantagem de ser linear:

$$\Delta T_{ef,i} = \frac{(T_{q,i-1} - T_{f,i}) + (T_{q,i} - T_{f,i+1})}{2} \quad (2.22)$$

Ela prevê resultados para o  $DT_{ef}$  maiores do que os estimados pela média logarítmica, entretanto a diferença é pequena na medida em que os valores dos diferenciais envolvidos se aproximam.

### **Coefficientes de Transferência de Calor**

Considera-se que o fluido quente escoar através dos tubos e o frio pelo casco. A definição da correlação a ser utilizada levou em conta a simplicidade da correlação e assume que o escoamento, no interior do equipamento, é turbulento. Para o escoamento nos tubos foi utilizada a correlação de *Dittus-Boelter*, **Equação (2.23)**

$$h_t = 0,023 \frac{k_t}{D_t} \text{Re}_t^{0.8} \text{Pr}_t^{1/3} \quad (2.23)$$

onde  $h_t$  é o coeficiente de transferência de calor no lado dos tubos;  $k_t$  a condutividade térmica e  $\text{Pr}_t$  o número de Prandtl do fluido que atravessa os tubos;  $D_t$  o diâmetro dos tubos; e  $\text{Re}_t$  o número de Reynolds do escoamento através dos tubos, proporcional à velocidade média do escoamento, e, conseqüentemente, também proporcional à vazão mássica desse escoamento.

Para o escoamento através do casco, um referencial é a correlação apresentada por Kern [KERN, 1980]. A incerteza na estimativa fornecida por essa correlação é notória, porém sua simplicidade faz com que ainda seja muito utilizada como uma primeira fonte para estimativas do coeficiente de transferência de calor ( $h_s$ ) no escoamento através do casco de fluidos que não mudam de fase. Segundo Kern [KERN, 1980]:

$$h_s = 0,36 \frac{k_s}{D_e} \text{Re}_s^{0.55} \text{Pr}_s^{1/3} \quad (2.24)$$

onde  $k_s$  é a condutividade térmica e  $\text{Pr}_s$  o número de Prandtl do fluido que escoava através do casco;  $D_e$  é o diâmetro equivalente do escoamento no casco; e  $\text{Re}_s$  o número de Reynolds do escoamento no casco, proporcional à velocidade média do escoamento no casco, e, portanto, proporcional à vazão mássica desse escoamento.

O uso das correlações anteriormente apresentadas requer a estimação, ou fixação arbitrária, de alguns parâmetros, que são fornecidas pelo usuário. Os números de Prandtl são calculados a partir das propriedades físicas do fluido que compõe a corrente:

$$\text{Pr} = \frac{C_p m}{k} \quad (2.25)$$

O ANEXO C apresenta a ordem de cálculo utilizada para estimar  $h$ .

### 2.2.2) Condições base de operação

As informações fornecidas pelo usuário são: o diâmetro dos tubos, a área de transferência de calor do equipamento e a espessura da parede dos tubos, além de suas propriedades. Essas informações são utilizadas nos 2 trocadores do processo.

**Tabela 2.11:** Dados do Processo dos Trocadores de Calor.

<b>DADOS DE PROCESSO</b>	
Diâmetro dos Tubos ( $D_t$ )	0,03 m
Número de células ( $n_c$ )	20
Área Total de Troca Térmica ( $A$ )	1700 m <sup>2</sup>
Espessura da Parede dos Tubos ( $d_t$ )	0 m
Propriedades da Parede dos Tubos	
Capacidade Calorífica ( $C_p$ )	480 W/Kg.°C
Densidade (?)	7800 Kg/m <sup>3</sup>
Condutividade Térmica ( $k$ )	46 W/m.°C

**Tabela 2.12:** Perfis Iniciais de Temperatura do TC-01.

<b>PERFIL INICIAL</b>	
Temperatura de Entrada nos Tubos ( $Tt_{in}$ )	220°C
Temperatura de Saída nos Tubos ( $Tt_{out}$ )	70°C
Temperatura de Entrada no Casco ( $Ts_{in}$ )	60°C
Temperatura de Saída no Casco ( $Ts_{out}$ )	150°C

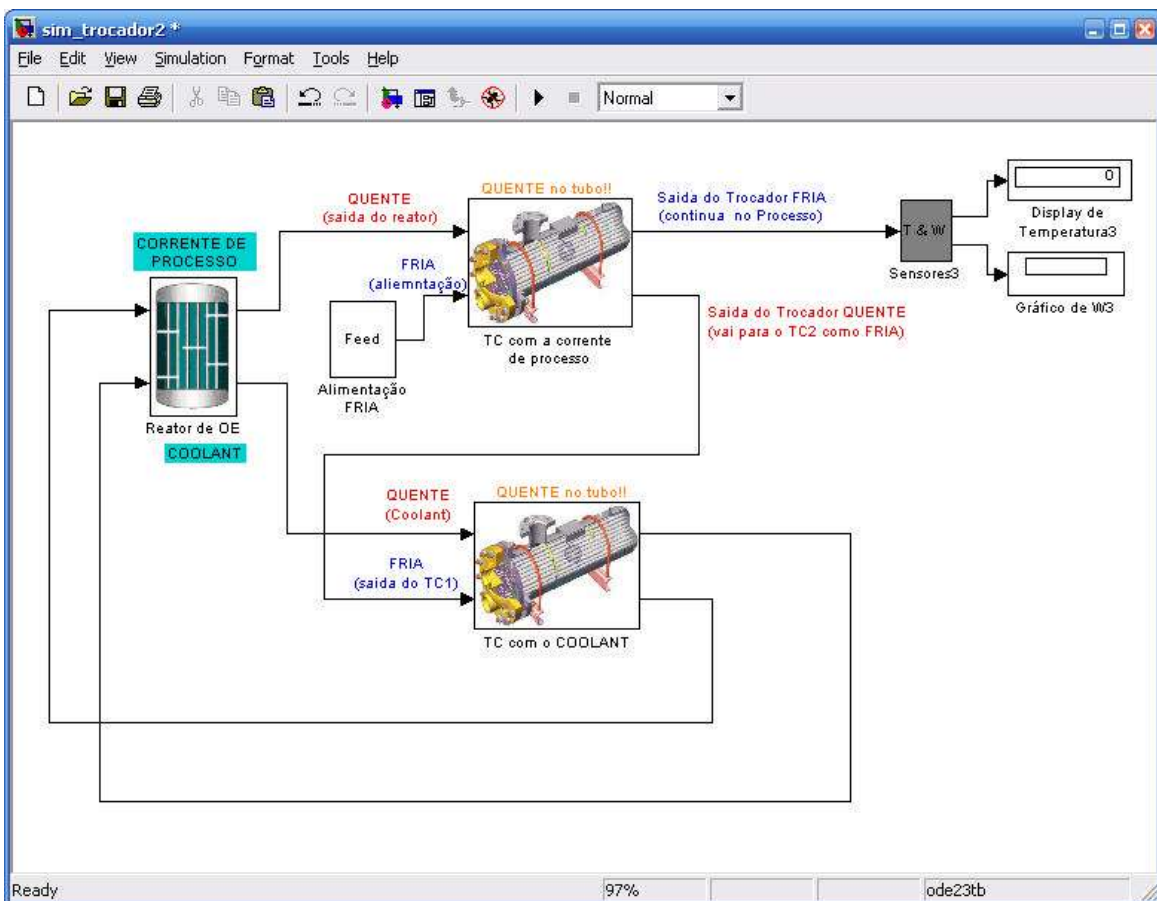
**Tabela 2.13:** Perfis Iniciais de Temperatura do TC-02.

<b>PERFIL INICIAL</b>	
Temperatura de Entrada nos Tubos ( $Tt_{in}$ )	217°C
Temperatura de Saída nos Tubos ( $Tt_{out}$ )	70°C
Temperatura de Entrada no Casco ( $Ts_{in}$ )	200°C
Temperatura de Saída no Casco ( $Ts_{out}$ )	220°C

### 2.2.3) Simulação dos Trocadores

O simulador dos trocadores de calor foi desenvolvido em ambiente SIMULINK 4.1 do MATLAB versão 6.1 (*The MathWorks Inc.*), e está apresentado no **ANEXO B**.

Foram realizadas simulações, a partir do modelo dinâmico desenvolvido para os trocadores de calor, para obter o perfil do comportamento de suas variáveis ao longo do tempo. Durante as simulações dos trocadores, já foi considerada a integração energética com o reator. Foi usada a configuração apresentada na **Figura 2.22**, a seguir:



**Figura 2.22:** Simulador dos Trocadores de Calor em Integração Energética com o Reator

As **Figuras 2.22 a 2.24** apresentam os resultados de simulação dos Trocadores de Calor em Integração Energética com o Reator.

i) Perfil de Temperatura no TC1:

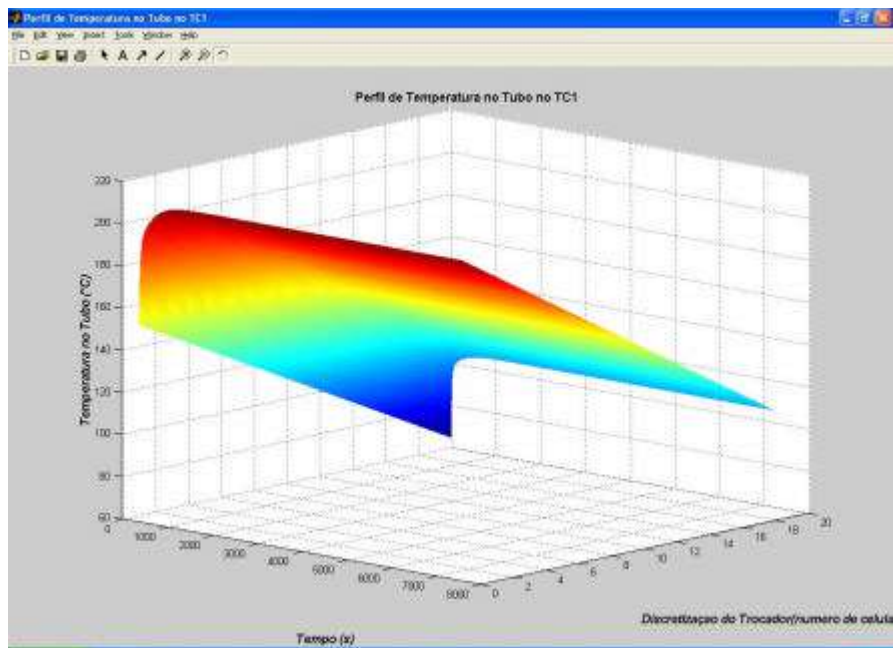


Figura 2.23: Perfil de Temperatura no Tubo no TC1.

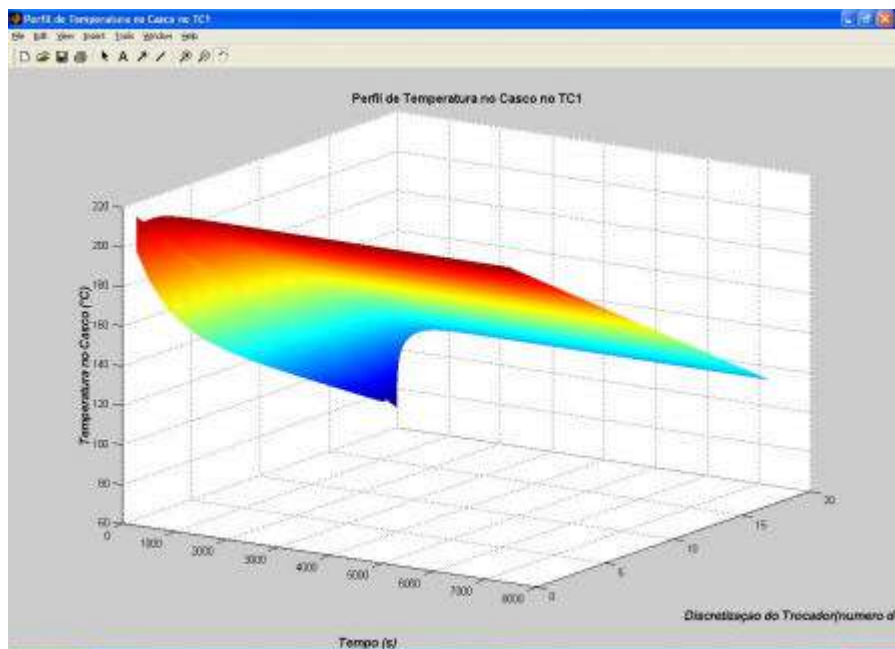


Figura 2.24: Perfil de Temperatura no Casco no TC1.



ii) Perfil de Temperatura no TC2:

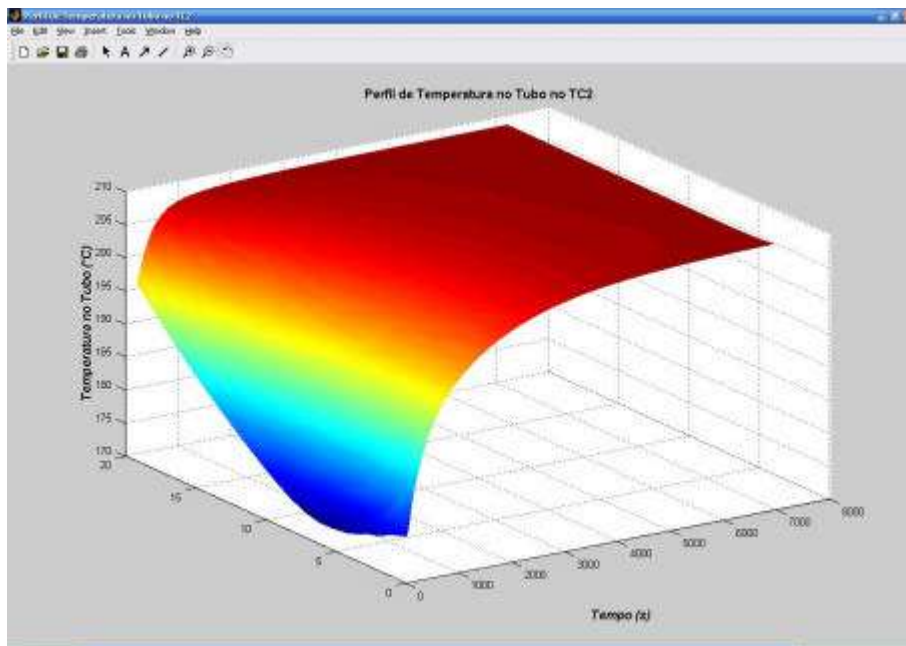


Figura 2.25: Perfil de Temperatura no Tubo no TC2.

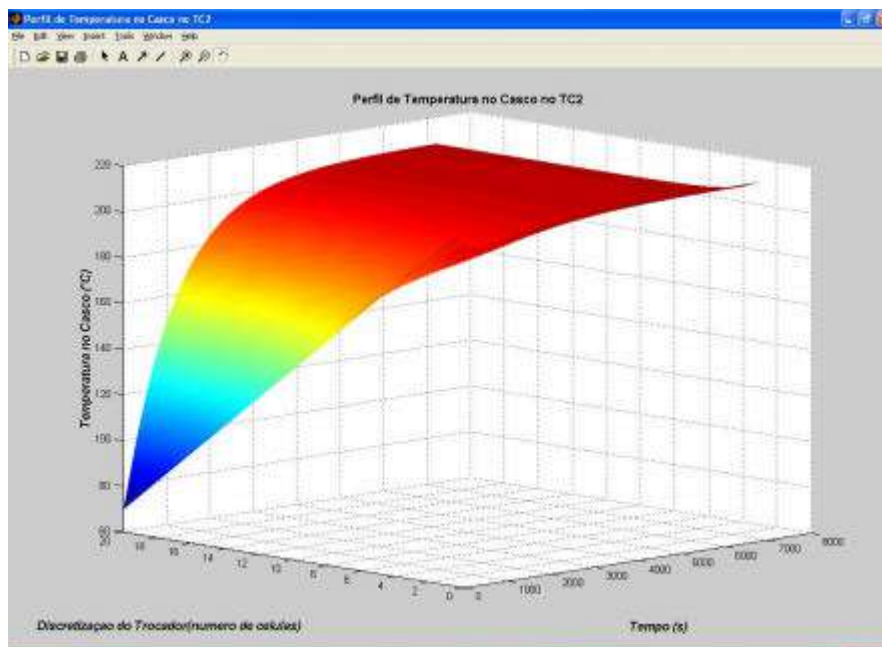


Figura 2.26: Perfil de Temperatura no Casco no TC2.

## 2.3) Absorvedora de Óxido de Etileno

A absorvedora (ou torre de absorção) de Óxido de Etileno é alimentada pela corrente efluente do reator, que foi utilizada no primeiro trocador de integração energética para aquecer a corrente de alimentação. Essa corrente é formada pelo produto (óxido de etileno), subprodutos ( $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ ) e reagentes (etileno e  $\text{O}_2$ ) que não reagiram.

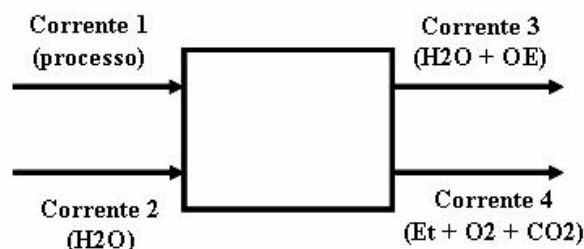
Na torre de absorção, água é utilizada para absorver o óxido de etileno formado, que segue para o sistema de purificação. Os demais compostos que não são absorvidos seguem no processo. O  $\text{CO}_2$  será eliminado numa futura purga. Já o etileno e o  $\text{O}_2$  não reagidos seguem para a estação de Mistura, para o *Make Up* da corrente de alimentação do reator, que deverá ser previamente aquecida pelos trocadores de calor de integração energética antes de seguir para o reator.

Neste trabalho, aborda-se a absorvedora com o único objetivo de fechar o reciclo para alimentação do reator, junto com o *Make Up*. Portanto, não foi desenvolvido um modelo matemático dinâmico rigoroso para a absorvedora.

Foi considerado que todo o óxido de etileno é removido pelo fundo da coluna com a água, enquanto o etileno, o  $\text{O}_2$  (não reagidos), e o  $\text{CO}_2$  saem pelo topo e seguem para reciclo, após purga.

### 2.3.1) Modelo Matemático

A **Figura 2.27** representa a coluna absorvedora.



**Figura 2.27:** Esquema de Correntes da Absorvedora.

*Fonte: a autora.*

Com o objetivo de calcular a composição das correntes 3 e 4 de saída da absorvedora, foram determinadas as vazões mássicas de cada componente na corrente 1 de alimentação. Para tal, as densidades (em Kg/m<sup>3</sup>) dos componentes puros foram calculadas inicialmente, conforme a **Equação 2.26**:

$$r_i = \frac{PM_i \cdot P}{RT} \quad (2.26)$$

onde  $r_i$  é a densidade de  $i$  (em Kg/m<sup>3</sup>),  $PM_i$  o peso molecular de  $i$  (em g/mol)  $P$  a pressão (em Pa),  $R$  a constante universal dos gases (Pa.m<sup>3</sup>/mol.K) e  $T$  a temperatura (em K). O subscrito  $i$  pode ser *oe*, *et*,  $O_2$  e  $CO_2$ .

A vazão mássica de cada componente da corrente 1 (em Kg/s) é, então, dada pela **Equação 2.27**.

$$M_i = \frac{C_{i,1} \cdot m_1 \cdot PM_i}{r_i} \quad (2.27)$$

onde  $M_i$  é a vazão mássica de  $i$  (em Kg/s),  $C_i$  a concentração de  $i$  (em M),  $m_1$  a vazão mássica da corrente 1 (em Kg/s),  $PM_i$  o peso molecular de  $i$  (em g/mol) e  $r_i$  é a densidade de  $i$  (em Kg/m<sup>3</sup>). O subscrito  $i$  pode ser *oe*, *et*,  $O_2$  e  $CO_2$ .

Para a corrente 4, assumiu-se que a densidade é a mesma da corrente 1, ou seja, considerou-se que a quantidade de óxido de etileno removida é tão pequena que não alterou a densidade da corrente. E assumindo que a massa de água na corrente 3 é oito vezes maior que a massa de óxido de etileno, a densidade da corrente 3 é aproximadamente a densidade da água.

Pelo balanço de massa no equipamento tem-se a vazão mássica (em Kg/s) das correntes 3 e 4, de acordo com as **Equações 2.28 e 2.29**:

$$m_3 = m_2 + M_{oe,rem} \quad (2.28)$$

$$m_4 = (m_1 - M_{oe,rem}) \quad (2.29)$$

Finalmente, a vazão volumétrica da corrente 4 (em m<sup>3</sup>/s):

$$\mathbf{n}_4 = \frac{m_4}{r_4} \quad (2.30)$$

As equações para o cálculo das concentrações dos componentes das correntes 3 e 4 podem ser vistos na **Tabela 2.14**.

**Tabela 2.14:** Equações das concentrações dos componentes das correntes 3 e 4.

CORRENTE 3	CORRENTE 4
$C_{oe,3} = \frac{r_{\text{água}}}{9.PM_{oe}.1000}$	$C_{oe,4} = 0$
$C_{et,3} = 0$	$C_{et,4} = \frac{M_{et}}{PM_{et} \mathbf{n}_4}$
$C_{O_2,3} = 0$	$C_{O_2,4} = \frac{M_{O_2}}{PM_{O_2} \mathbf{n}_4}$
$C_{CO_2,3} = 0$	$C_{CO_2,4} = \frac{M_{CO_2}}{PM_{CO_2} \mathbf{n}_4}$

Para a característica dinâmica do modelo da absorvedora apresentado anteriormente, adotou-se função de transferência de primeira ordem, com constante de tempo de 3 minutos (180s). Este valor foi selecionado com base em experiência industrial [GUDEKAR e RIGGS, 2003].

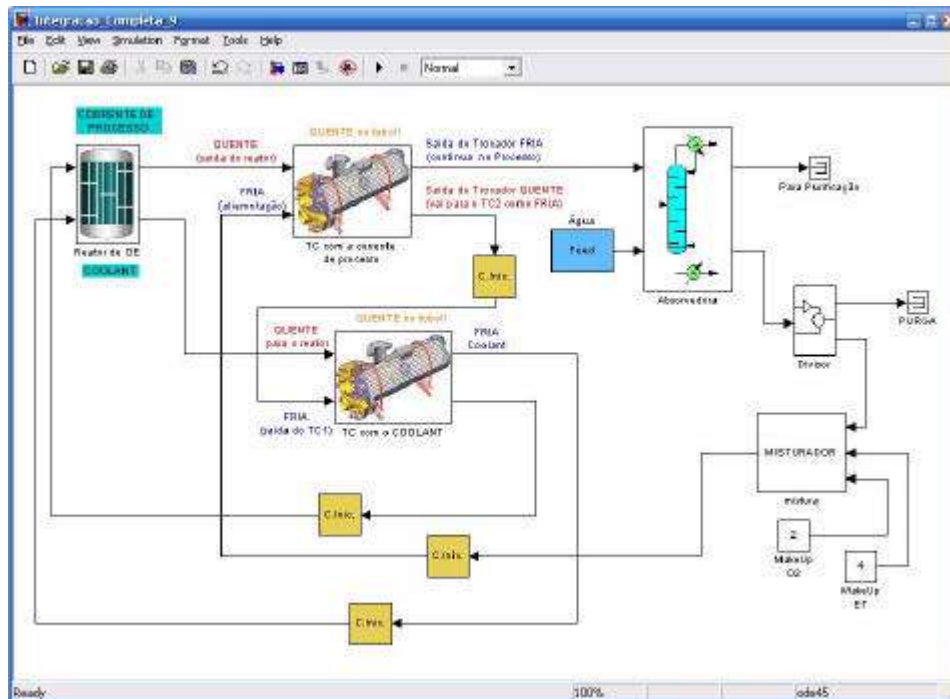
O simulador da absorvedora foi desenvolvido em ambiente SIMULINK 4.1 do MATLAB versão 6.1 (*The MathWorks Inc.*). Os principais dispositivos para especificação de dados para utilizar o simulador são apresentados no **ANEXO A**, assim como os demais equipamentos de processo (misturadores, válvulas e controladores).

## CAPÍTULO 3: ANÁLISE DE CONTROLABILIDADE

A partir do detalhamento feito de cada um dos principais equipamentos que constituem o processo de produção de óxido de etileno e das simulações individuais realizadas, foi proposto o simulador do processo integrado.

### 3.1) Simulador do Processo Integrado

Na **Figura 3.1** é apresentado o simulador do Processo de Produção de Óxido de Etileno integrado, desenvolvido em ambiente SIMULINK 4.1 do MATLAB versão 6.1 (*The MathWorks Inc.*). Os parâmetros que caracterizam cada uma das correntes de processo presentes nesse simulador estão detalhados no ANEXO A, bem como a descrição detalhada de cada bloco que compõe essa tela.



**Figura 3.1:** Tela do Simulador do Processo Integrado.

Como o processo é instável em malha aberta e apresenta uma alta sensibilidade paramétrica, a simulação dinâmica requer a adição de controladores de processo. Para definir a estrutura de controle, procede-se a um estudo de controlabilidade do processo.

### 3.2) Análise de Controlabilidade

A operação determinante da dinâmica do processo de produção de óxido de etileno é a reação. Assim, o estudo da controlabilidade do processo concentra-se no reator de óxido, visando a definir o emparelhamento entre as variáveis manipuladas e as variáveis controladas, que se encontram nas **Tabelas 3.1 e 3.2**:

**Tabela 3.1:** Variáveis Manipuladas do Reator.

Variáveis Manipuladas	
Concentração inicial de O <sub>2</sub>	<i>CO<sub>2</sub>in</i>
Concentração inicial de Etileno	<i>CE<sub>T</sub>in</i>
Temperatura inicial da Corrente de Processo	<i>TP<sub>in</sub></i>
Temperatura inicial do Fluido de Refrigeração	<i>TP<sub>in</sub></i>

**Tabela 3.2:** Variáveis Controladas do Reator.

Variáveis Controladas	
Concentração de saída de Óxido de Etileno	<i>COE<sub>out</sub></i>
Concentração de saída de Etileno	<i>CE<sub>T</sub>out</i>
Temperatura de saída da Corrente de Processo	<i>TP<sub>out</sub></i>
Temperatura de saída do Fluido de Refrigeração	<i>TP<sub>out</sub></i>

O procedimento de emparelhamento adotado foi de montar a Matriz de Ganhos do Processo e analisar a matriz RGA, conforme **ANEXO D**.

### 3.2.1) Matriz de Ganhos

A Matriz de Ganhos que foi proposta para o reator está apresentada na **Equação 3.1** seguinte:

$$K = \begin{bmatrix} K(1,1) & K(1,2) & K(1,3) & K(1,4) \\ K(2,1) & K(2,2) & K(2,3) & K(2,4) \\ K(3,1) & K(3,2) & K(3,3) & K(3,4) \\ K(4,1) & K(4,2) & K(4,3) & K(4,4) \end{bmatrix} \begin{matrix} TP_{out} \\ CET_{out} \\ COE_{out} \\ TC_{out} \end{matrix} \quad (3.1)$$

$$\begin{matrix} CO_{2in} & CET_{in} & TP_{in} & TC_{in} \end{matrix}$$

onde :

$$\begin{aligned} K(1,1) &= \frac{TP_{out} - TP_{outbase}}{CO_{2in} - CO_{2inbase}} & K(1,2) &= \frac{TP_{out} - TP_{outbase}}{CET_{in} - CET_{inbase}} \\ K(2,1) &= \frac{CET_{out} - CET_{outbase}}{CO_{2in} - CO_{2inbase}} & K(2,2) &= \frac{CET_{out} - CET_{outbase}}{CET_{in} - CET_{inbase}} \\ K(3,1) &= \frac{COE_{out} - COE_{outbase}}{CO_{2in} - CO_{2inbase}} & K(3,2) &= \frac{COE_{out} - COE_{outbase}}{CET_{in} - CET_{inbase}} \\ K(4,1) &= \frac{TC_{out} - TC_{outbase}}{CO_{2in} - CO_{2inbase}} & K(4,2) &= \frac{TC_{out} - TC_{outbase}}{CET_{in} - CET_{inbase}} \\ K(1,3) &= \frac{TP_{out} - TP_{outbase}}{TP_{in} - TP_{inbase}} & K(1,4) &= \frac{TP_{out} - TP_{outbase}}{TC_{in} - TC_{inbase}} \\ K(2,3) &= \frac{CET_{out} - CET_{outbase}}{TP_{in} - TP_{inbase}} & K(2,4) &= \frac{CET_{out} - CET_{outbase}}{TC_{in} - TC_{inbase}} \\ K(3,3) &= \frac{COE_{out} - COE_{outbase}}{TP_{in} - TP_{inbase}} & K(3,4) &= \frac{COE_{out} - COE_{outbase}}{TC_{in} - TC_{inbase}} \\ K(4,3) &= \frac{TC_{out} - TC_{outbase}}{TP_{in} - TP_{inbase}} & K(4,4) &= \frac{TC_{out} - TC_{outbase}}{TC_{in} - TC_{inbase}} \end{aligned}$$

Como os valores das variáveis de concentração apresentam uma ordem de grandeza quase mil vezes menor que os das variáveis de temperatura, o cálculo dos ganhos foram tornadas adimensionais com base em faixas de operação, com um valor mínimo e um máximo, para cada variável, conforme a **Equação 3.2**:

$$Y = \frac{y - y_{\min}}{y_{\max} - y_{\min}} \quad (3.2)$$

onde  $y$  é a variável dimensional ( $CO_{2in}$ , por exemplo) e  $y_{\min}$  e  $y_{\max}$  são os limites das faixas utilizadas. As faixas utilizadas para cada variável pode ser observada na **Tabela 3.3**.

**Tabela 3.3:** Faixas das Variáveis do Reator.

Descrição da Variável	Símbolo	Valor mínimo ( $y_{\min}$ )	Valor máximo ( $y_{\max}$ )
Concentração de $O_2$	$CO_{2in}$	0,01	0,03
Concentração de Etileno	$CETin$	0,05	0,3
Concentração de Óxido de Etileno	$COE_{in}$	0,005	0,02
Temperatura da Corrente de Processo	$TPin$	200	240
Temperatura do Fluido de Refrigeração	$TCin$	190	230

A Matriz de Ganhos resultante é mostrada na **Equação 3.3**:

$$K = \begin{bmatrix} 0,385 & -0,020 & 0,759 & 0,703 \\ 0,093 & 1 & 0 & -0,059 \\ 0,444 & 0 & 0 & 0,495 \\ 0,351 & -0,032 & 0,014 & 1,150 \end{bmatrix} \begin{matrix} TP_{out} \\ CET_{out} \\ COE_{out} \\ TC_{out} \end{matrix} \quad (3.3)$$

$CO_{2in} \quad CET_{in} \quad TPin \quad TCin$

### 3.2.2) Análise RGA

Utilizando o MATLAB versão 6.1 (*The MathWorks Inc.*), obtém-se a matriz de RGA, calculada com base na matriz de ganhos  $K_p$  conforme a **Equação 3.4**:

$$RGA = K_p \cdot (K_p^T)^{-1} \quad (3.4)$$



onde o operador “.\*” corresponde ao produto:

$$a_{ij} = b_{ij} * c_{ij} \quad (3.5)$$

Assim, a matriz de RGA resultante, para o Reator, está apresentada na **Equação 3.6**:

$$RGA = \begin{bmatrix} 0,0106 & 0,0001 & 1,0067 & -0,0173 \\ -0,0044 & 1,0069 & 0 & -0,0025 \\ 1,5166 & 0 & 0 & -0,5166 \\ -0,5228 & -0,0070 & -0,0067 & 1,5364 \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

Na análise da RGA busca-se o ganho relativo mais próximo do valor unitário para cada variável controlada. A **Tabela 3.4** apresenta o emparelhamento obtido.

**Tabela 3.4:** Emparelhamento de Variáveis Controladas e Manipuladas do Reator.

VARIÁVEIS CONTROLADAS	VARIÁVEIS MANIPULADAS
<i>TPout</i>	<i>TPin</i>
<i>CETout</i>	<i>CETin</i>
<i>COEout</i>	<i>CO2in</i>
<i>TCout</i>	<i>TCin</i>

Determinado o emparelhamento das variáveis do reator e com o objetivo de traçar uma estratégia de controle para o Processo Global (*Plant Wide*), o próximo passo foi a determinação do emparelhamento das variáveis do processo global.

Fazendo-se uma passagem *ad-hoc* do emparelhamento obtido no Reator, para o emparelhamento do Processo Global, as variáveis de entrada *TPin* e *TCin* são graus de liberdade perdidos, isto é, não podem ser manipuladas para controlar as variáveis listadas na **Tabela 3.4**, devido a reciclo e integração energética.

Sendo assim, as variáveis de entrada *TPin* e *TCin* passam a ser os respectivos *set-points* dos controladores das variáveis *Tp* e *Tc*, respectivamente. Com isso, o emparelhamento de variáveis para o Processo Global é o apresentado na **Tabela 3.5**.

**Tabela 3.5:** Emparelhamento de Variáveis Controladas e Manipuladas do Processo Global com Integração Energética e Reciclo

VARIÁVEIS CONTROLADAS	VARIÁVEIS MANIPULADAS
<i>TPout</i>	<i>SP de TP</i>
<i>CETout</i>	<i>CETin</i>
<i>COEout</i>	<i>CO2in</i>
<i>TCout</i>	<i>SP de TC</i>

### 3.2.3) Estratégia de Controle

A partir do emparelhamento das variáveis globais, foi possível propor uma estratégia de controle, que pode ser observada na **Figura 3.2**. Observa-se, na figura, que foram propostas 4 malhas cascata de controle:

- ⇒ Na primeira, da Temperatura da Corrente de Processo, o controlador MESTRE recebe o *set-point* de *TPout* e envia o *set-point* para o controlador ESCRAVO, que atua na válvula de *by-pass* do trocador de calor TC-1.
- ⇒ Na segunda, da Temperatura do Fluido de Refrigeração, o controlador MESTRE recebe o *set-point* de *TCout* e envia o *set-point* para o controlador ESCRAVO, que atua na válvula de *by-pass* do trocador de calor TC-2.
- ⇒ Já na terceira, da Concentração de Etileno, o controlador MESTRE recebe o *set-point* de *CETout* e envia o *set-point* para o controlador ESCRAVO, que atua na válvula da Estação de Mistura que determina a quantidade de Etileno “fresco” que deve ser adicionada ao *Make Up* da corrente de alimentação do reator.

⇒ Por fim, na quarta, da Concentração de  $O_2$ , o controlador MESTRE recebe o *set-point* de *COEout* e envia o *set-point* para o controlador ESCRAVO, que atua na válvula da Estação de Mistura que determina a quantidade de  $O_2$  “fresco” que deve ser adicionada ao *Make Up* da corrente de alimentação do reator.

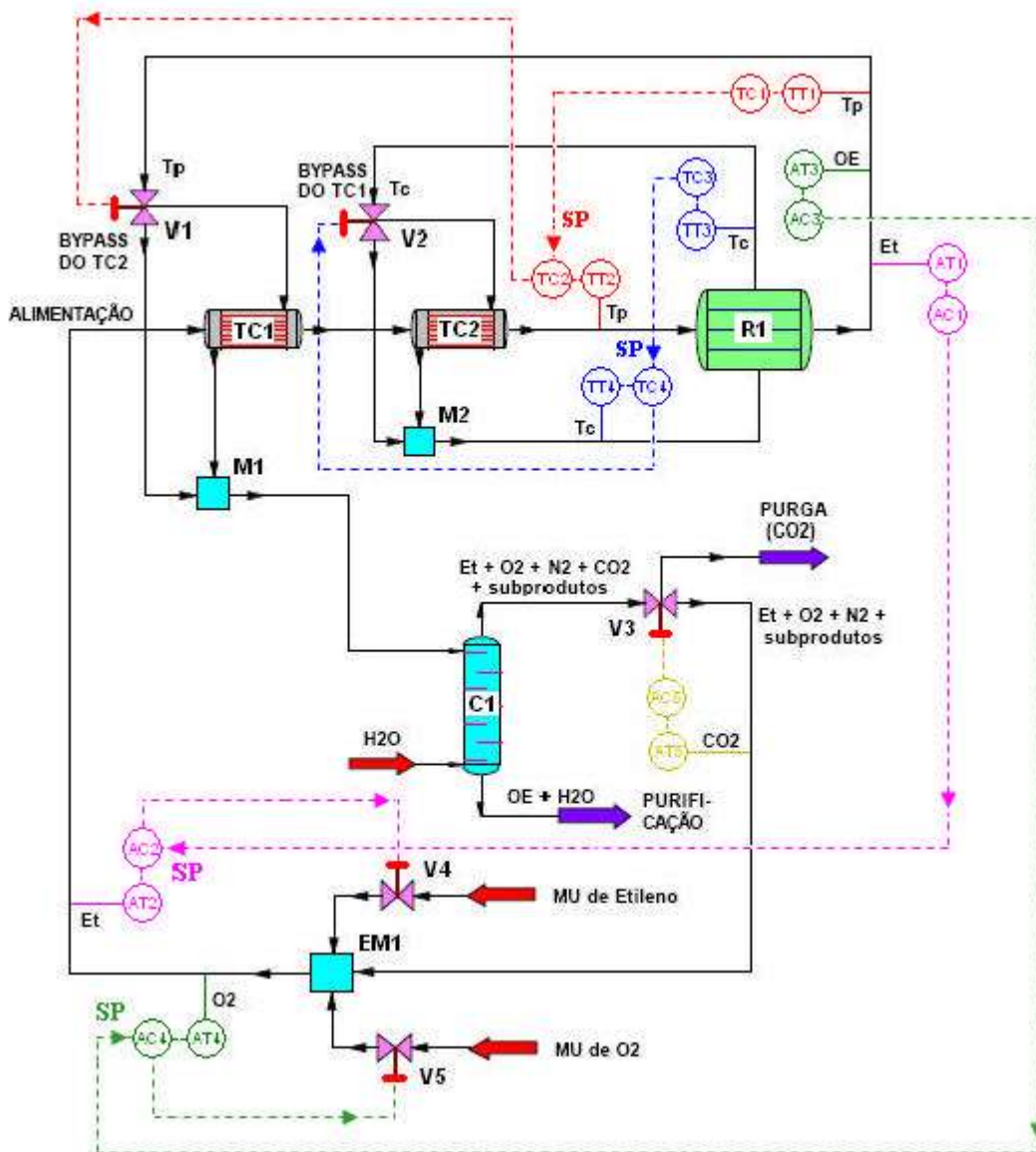


Figura 3.2: Estratégia de controle para o Processo Global

Fonte: a autora.

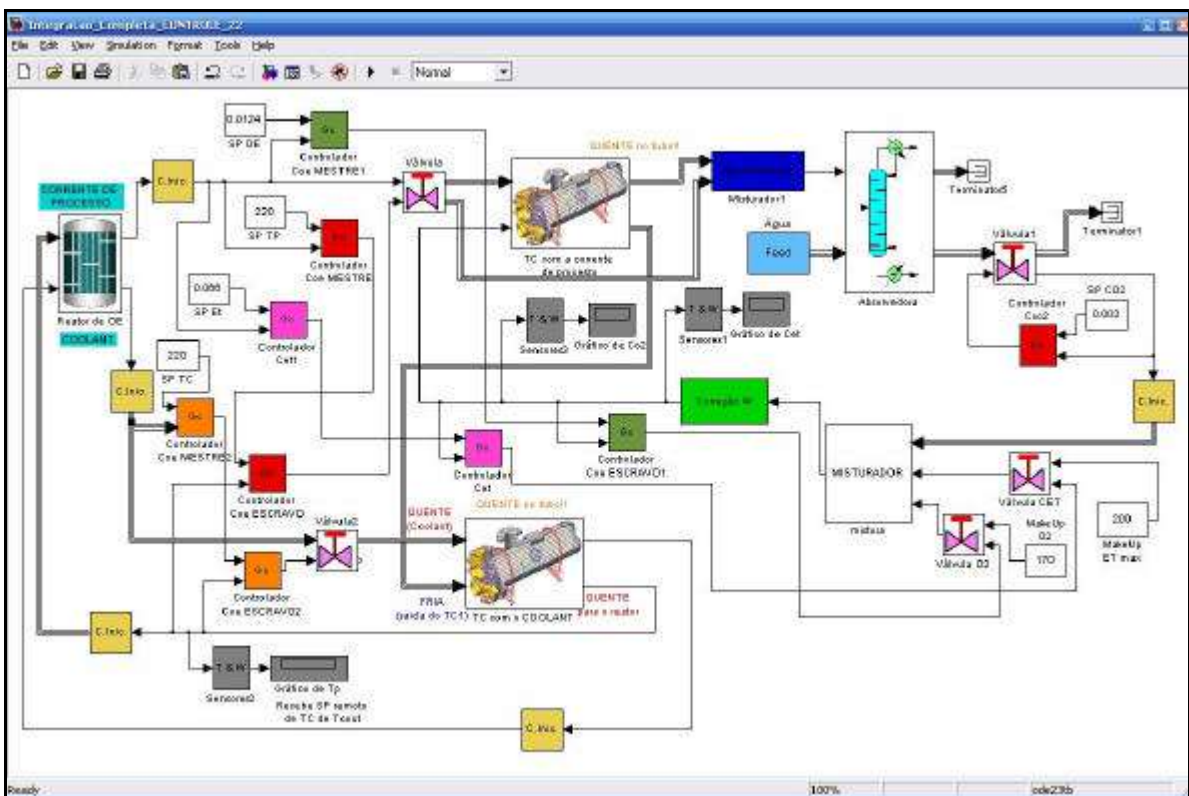
Além das 4 malhas cascata, também foi proposto 1 controle simples para a concentração de CO<sub>2</sub>. Esta variável não fez parte da análise de controlabilidade por apresentar um emparelhamento com variável manipulada, a vazão de purga, com baixo impacto nas demais variáveis controladas (baixa interação).

# CAPÍTULO 4: SIMULAÇÃO DO PROCESSO CONTROLADO

Neste Capítulo, são apresentados os resultados de simulação do processo integrado com a estrutura de controle definida no Capítulo 3.

## 4.1) Simulador do Processo Controlado

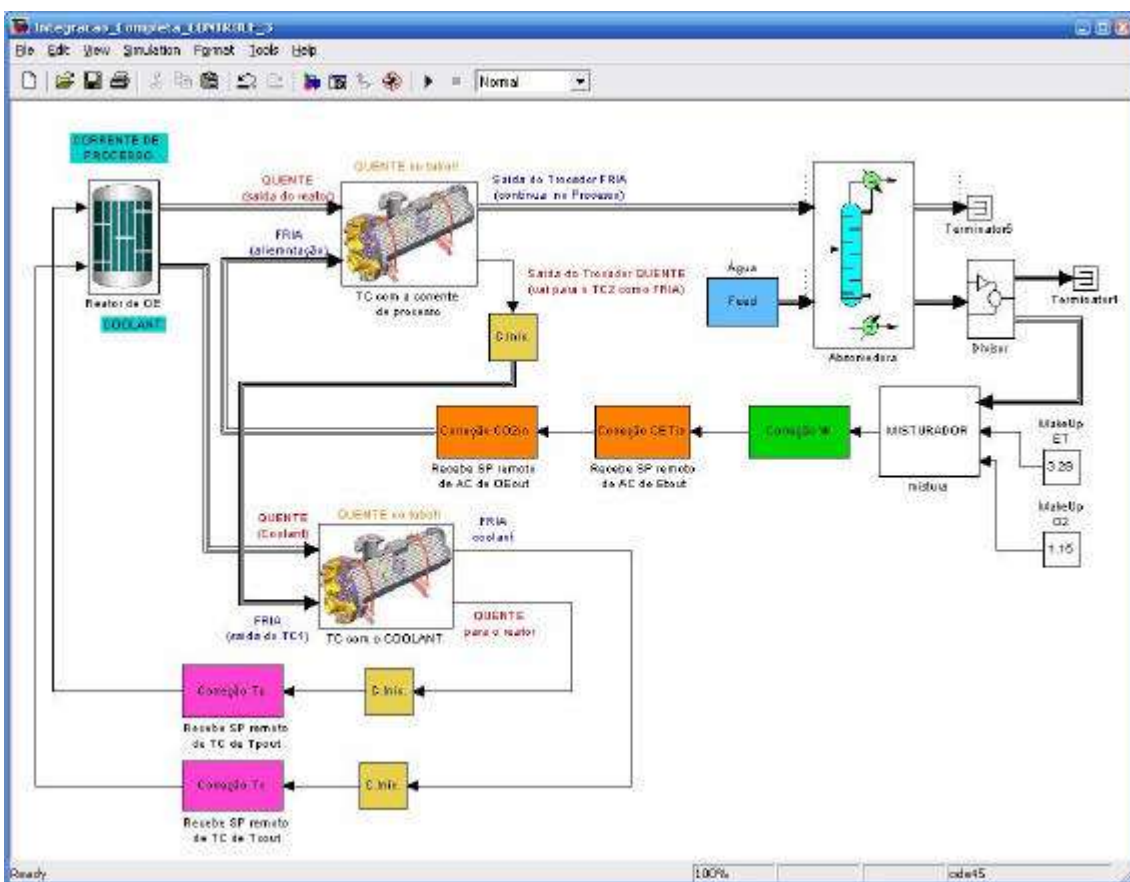
Na **Figura 4.1**, é apresentado o simulador do Processo de Produção de Óxido de Etileno Controlado, desenvolvido em ambiente SIMULINK 4.1 do MATLAB versão 6.1 (*The MathWorks Inc.*).



**Figura 4.1:** Simulador do Processo Global Controlado.

## 4.2) Simulações Parciais dos Controladores e Sintonia

Com a finalidade de sintonizar os controladores, foram feitas simulações em separado para cada uma das malhas cascata, mantendo as demais malhas sob *controle perfeito*, com um bloco que redefinía o valor da corrente conforme meta de controle - Blocos de Correção na **Figura 4.2**, sem efeitos dinâmicos. Após ter sido definida a sintonia, o processo foi então simulado com todos os seus controladores.

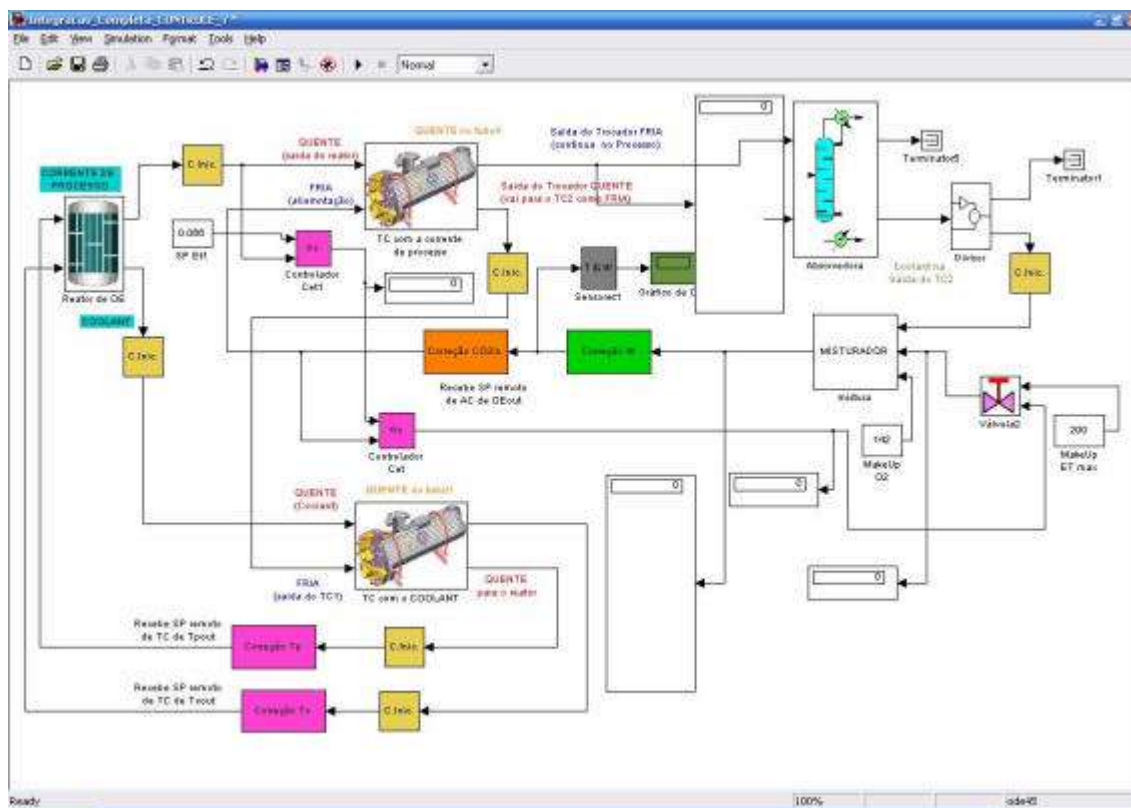


**Figura 4.2:** Tela do Simulador do Processo com Controladores “Ideais”.

A etapa seguinte foi a substituição dos blocos de correção, um a um, pelo controle proposto no capítulo anterior, para sintonia. Na próxima malha a sintonizar, o controlador sintonizado substituí o respectivo Bloco de Correção (controlador *ideal*).

### 4.2.1) Controle Cascata de Concentração de Etileno

O primeiro bloco de correção substituído foi o da variável *CET*. A seguir, na **Figura 4.3**, o esquema utilizado nessa etapa:



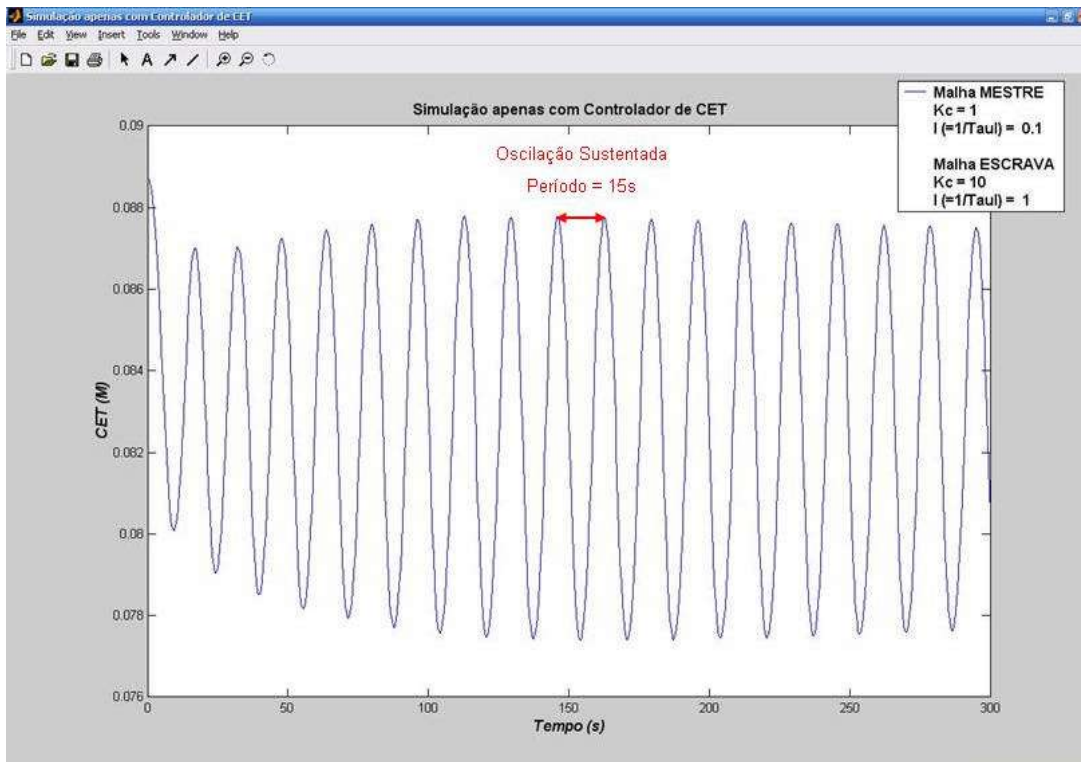
**Figura 4.3:** Tela do Simulador do Processo com Controlador de *CET*.

Foram realizadas algumas simulações com o objetivo de sintonizar essa malha cascata. O procedimento partiu com os parâmetros do controlador descritos na **Tabela 4.1**.

**Tabela 4.1:** Valores Iniciais para os controladores de *CET*.

	Controlador MESTRE	Controlador ESCRAVO
<b>Kc</b>	1	10
<b>I (= 1/t<sub>I</sub>)</b>	0	0

Foi especificando um ganho proporcional alto para o controlador escravo. O gráfico obtido para a variação de *CET* com o tempo está mostrado na **Figura 4.4**.



**Figura 4.4:** Variação de *CET* com o tempo na primeira tentativa de sintonia.

O método utilizado na sintonia dos Controladores foi o de *Ziegler e Nichols*. Para tal, foi calculado o período limite, que foi de 15s. Assim, a partir da **Tabela 4.2** e dos valores de  $K_{c,LIM}$  e  $P_{LIM}$ , foi possível determinar a sintonia para os controladores dessa malha cascata.

**Tabela 4.2:** Sintonia por *Ziegler e Nichols*.

	$K_C$	$\tau_I$	$\tau_D$
<i>P</i>	$K_{c,LIM}/2$	-	-
<i>PI</i>	$K_{c,LIM}/2,2$	$P_{LIM}/1,2$	-
<i>PID</i>	$K_{c,LIM}/1,7$	$P_{LIM}/2$	$P_{LIM}/8$

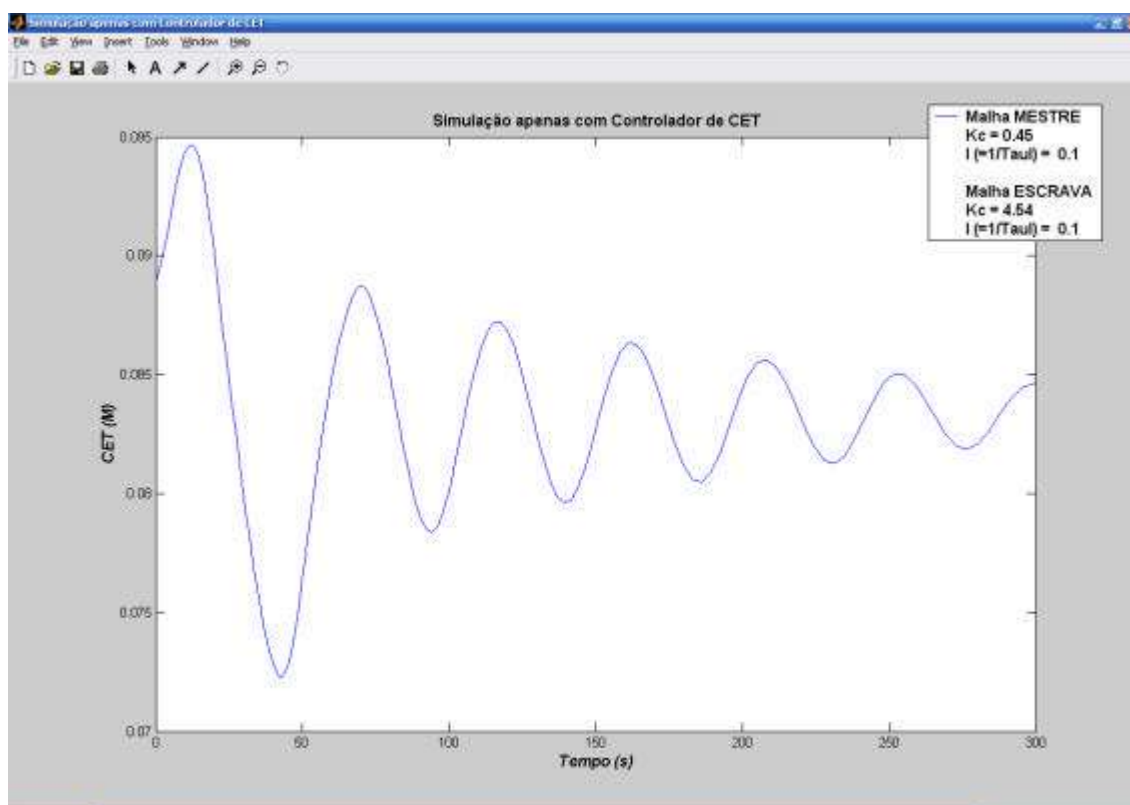


O resultado da sintonia para um controlador do tipo PI encontra-se na **Tabela 4.3**.

**Tabela 4.3:** Sintonia para Controlador PI.

	Controlador MESTRE	Controlador ESCRAVO
<b>K<sub>c</sub></b>	0,45	4,54
<b>I (= 1/t<sub>I</sub>)</b>	0,1	0,1

Utilizando esta sintonia, o gráfico obtido para a variação de *CET* com o tempo está mostrado na Figura 4.5.

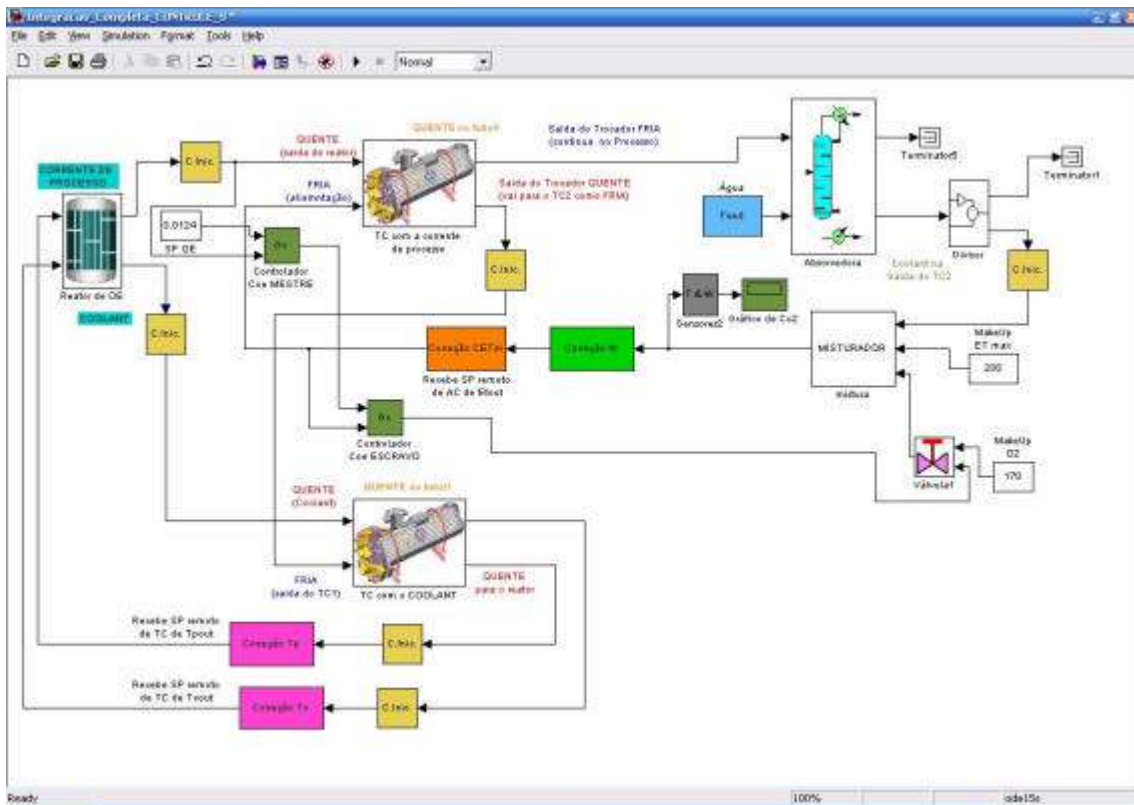


**Figura 4.5:** Variação de *CET* com o tempo na sintonia calculada.

Analisando-se o Gráfico da **Figura 4.5**, é possível observar que a sintonia calculada anteriormente levou à uma Oscilação sub-amortecida da variável controlada.

#### 4.2.2) Controle Cascata de Concentração de Oxigênio

O segundo bloco de correção substituído foi o da variável  $CO_2$ , conforme a tela do simulador mostrada na **Figura 4.6**.



**Figura 4.6:** Tela do Simulador do Processo com Controlador de  $CO_2$ .

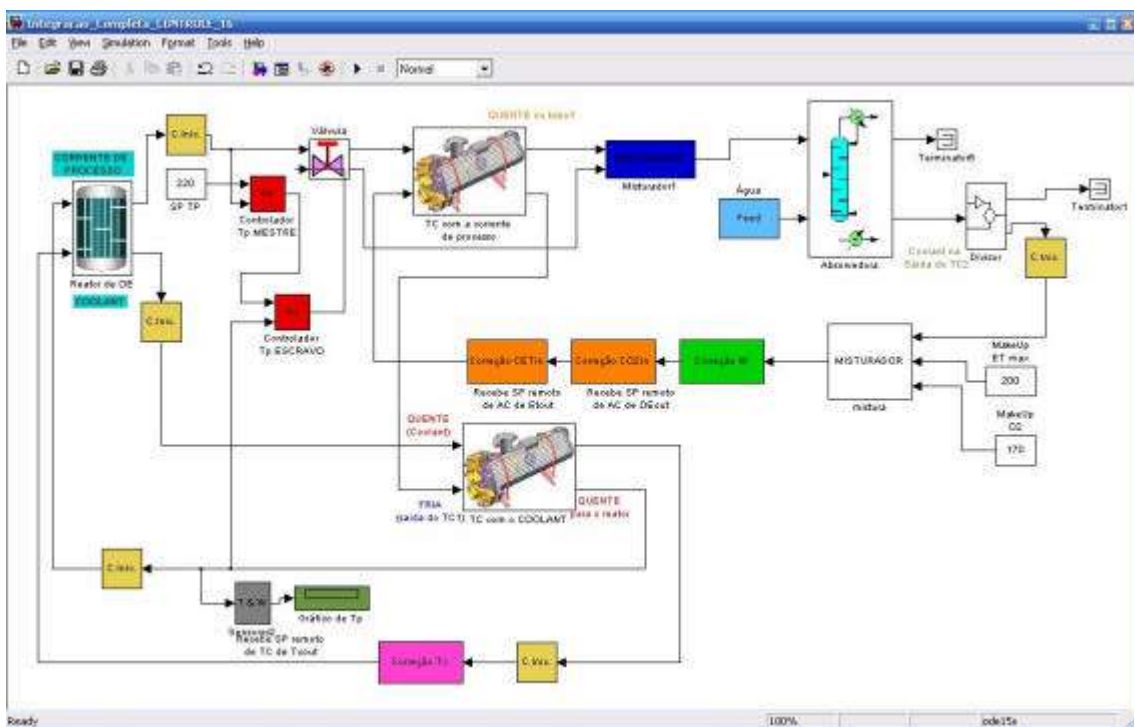
O mesmo procedimento adotado para o controlador de temperatura foi repetido. No entanto, não foi possível realizar nenhuma simulação, pois, logo nos segundos iniciais, o valor da concentração de  $O_2$  na entrada do reator estava muito distante do ideal. Como o reator apresenta uma alta sensibilidade paramétrica em relação a essa variável, o tempo de simulação, neste caso, se tornou muito longo ou até mesmo inviável.

Para confirmar tal resultado, foram realizadas simulações apenas com o reator em condições afastadas da ideal em relação à concentração de  $O_2$  e o mesmo comportamento foi observado.

Sendo assim, optou-se por permanecer com o bloco de correção da concentração de  $O_2$ , reservando-se esta malha para desenvolvimentos futuros.

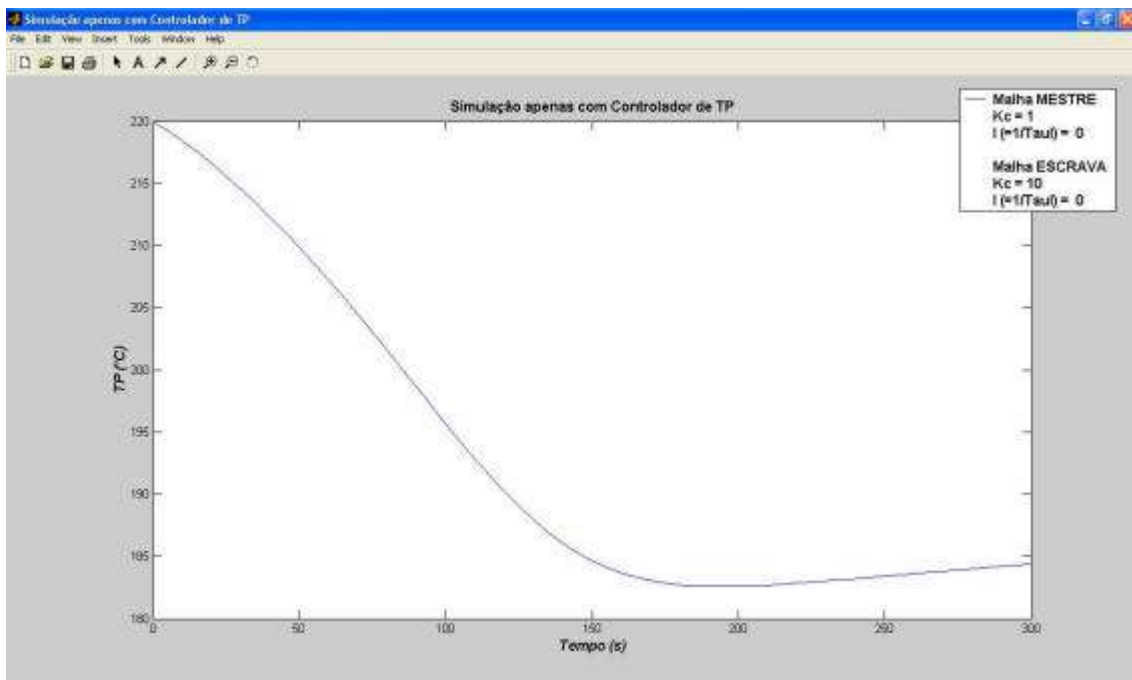
### 4.2.3) Controle Cascata de Temperatura da Corrente de Processo

O terceiro bloco de correção substituído foi o da variável  $TP$ . A **Figura 4.7** apresenta o esquema utilizado nessa etapa:



**Figura 4.7:** Tela do Simulador do Processo com Controlador de  $TP$ .

Foram realizadas algumas simulações com o objetivo de sintonizar essa malha cascata. O primeiro valor utilizado para os parâmetros do controlador foi descrito na **Tabela 4.1**. O gráfico obtido para a variação de  $TP$  com o tempo pode ser observado na **Figura 4.8**. Os valores utilizados para os parâmetros do controlador, a variável manipulada entrou em estado estacionário, e não apresentou oscilação.



**Figura 4.8:** Variação de  $TP$  com o tempo na primeira tentativa de sintonia.

Outras duas simulações foram feitas. Na primeira, os valores de  $K_c$  e  $I$ , tanto para o controlador MESTRE quanto para o ESCRAVO foram multiplicados por 10. Já na segunda, esses valores foram multiplicados por 100. No entanto, o gráfico obtido para a variação de  $TP$  com o tempo foi o mesmo nesses dois casos. Logo, optou-se por usar a sintonia da primeira tentativa.

#### 4.2.4) Controle Cascata de Temperatura do Fluido de Refrigeração

O quarto e último bloco de correção substituído foi o da variável  $TC$ . A **Figura 4.9** apresenta o esquema utilizado nessa etapa.

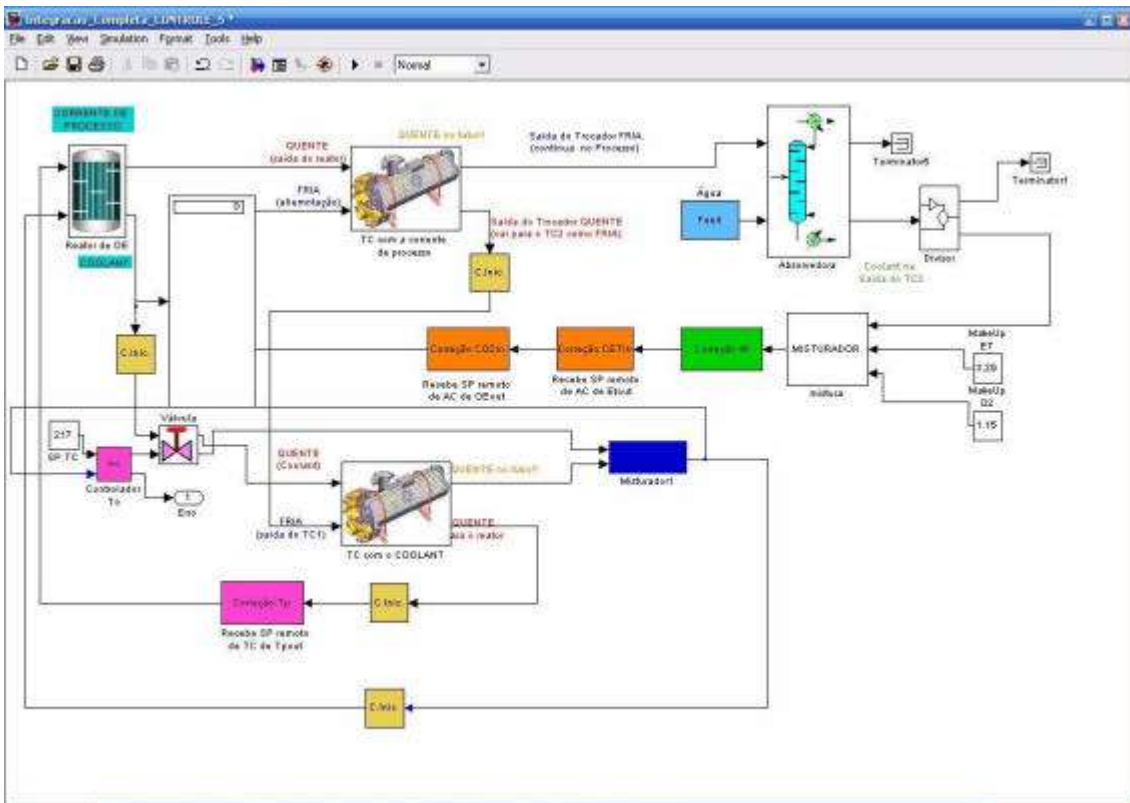


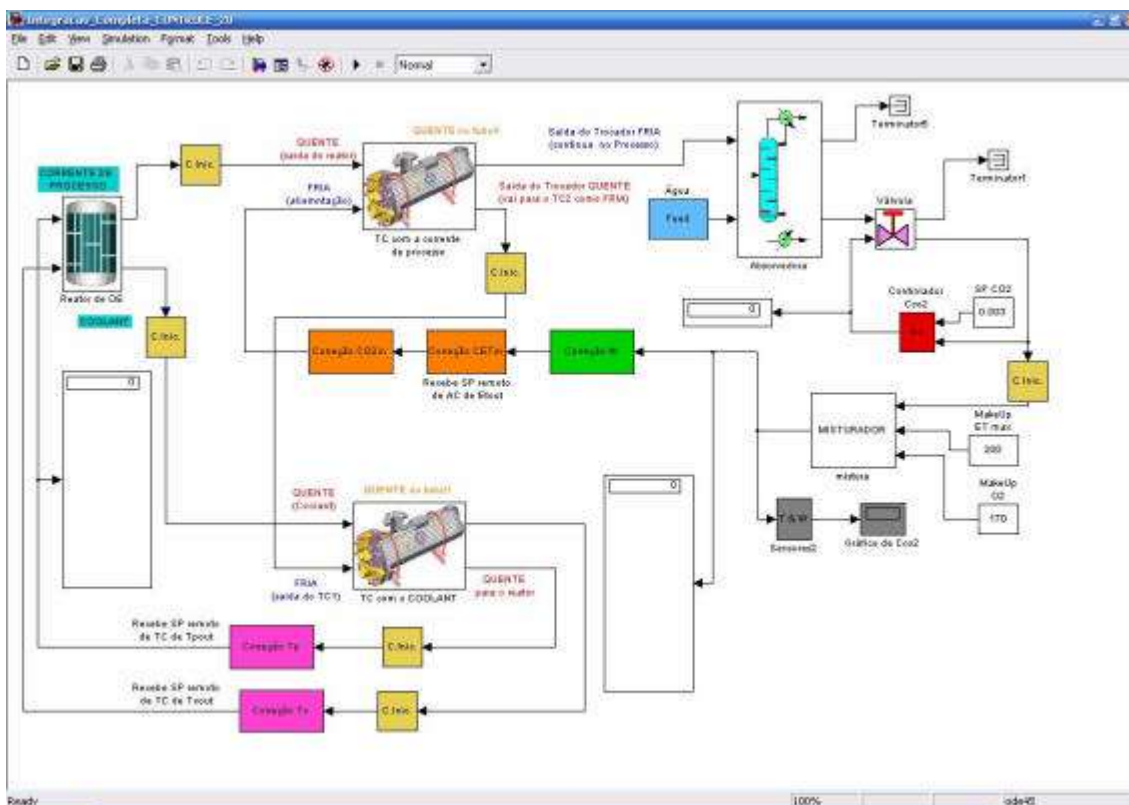
Figura 4.9: Tela do Simulador do Processo com Controlador de TC.

Com o objetivo de sintonizar essa malha cascata, simulou-se o processo com os parâmetros iniciais descritos na **Tabela 4.1**. Assim como ocorreu com o controlador de  $O_2$ , não foi possível realizar nenhuma simulação com o controlador de TC. Nos segundos iniciais, o valor da temperatura do fluido de refrigeração na entrada do reator estava muito distante da ideal. Como o reator também apresenta uma alta sensibilidade paramétrica em relação a essa variável, o tempo de simulação, neste caso, também se tornou muito longo ou até mesmo inviável.

Para confirmar tal resultado, também foram realizadas simulações apenas com o reator em condições longes da ideal em relação à temperatura do fluido de refrigeração e o mesmo comportamento foi observado. Sendo assim, optou-se por permanecer com o bloco de correção da temperatura do fluido de refrigeração, deixando esta etapa para desenvolvimentos futuros.

### 4.2.5) Controle de Concentração de CO<sub>2</sub>

O último controlador estudado foi o da purga de CO<sub>2</sub>. Na **Figura 4.10**, é mostrada a malha de controle:



**Figura 4.10:** Tela do Simulador do Processo com Controlador da purga de CO<sub>2</sub>.

Com o objetivo de sintonizar esse controlador, o primeiro chute utilizado para os parâmetros foi descrito na **Tabela 4.4**.

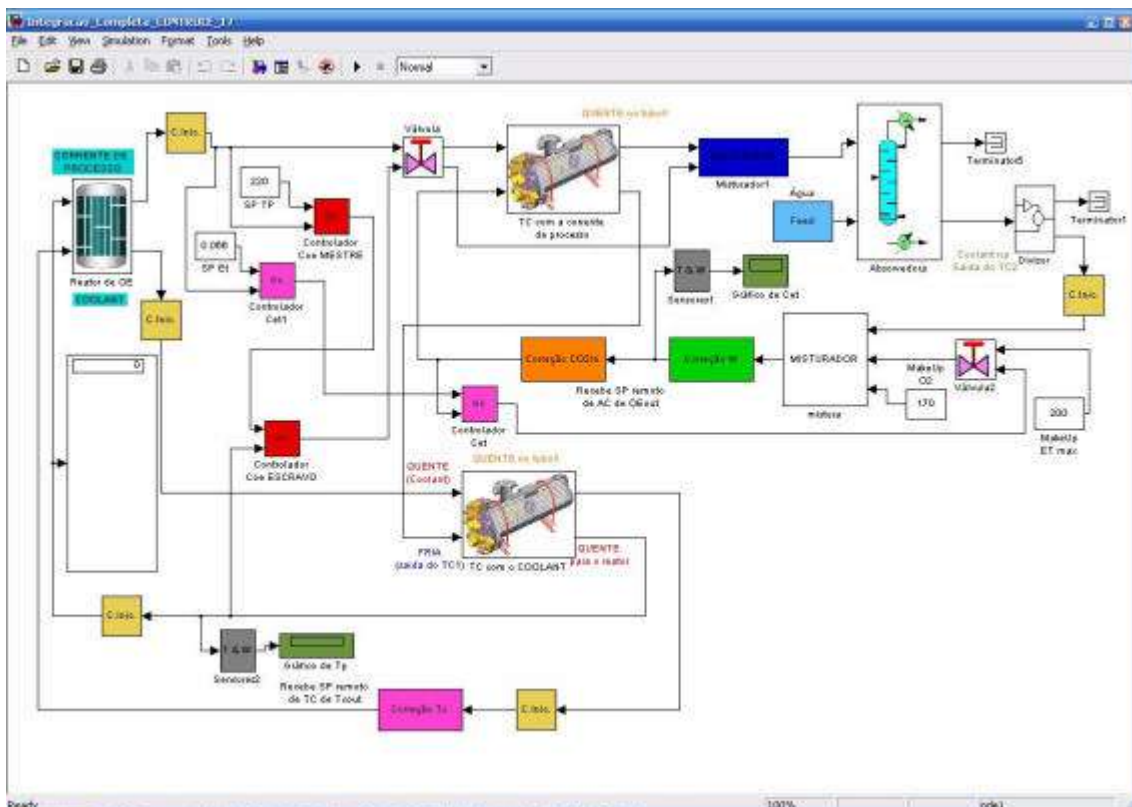
**Tabela 4.4:** Chutes Iniciais para os controladores de CO<sub>2</sub>.

	Valor do Parâmetro
<b>K<sub>c</sub></b>	1
<b>I (= 1/t<sub>I</sub>)</b>	0

Assim como ocorreu com o controlador de  $O_2$  e  $T_c$ , não foi possível realizar nenhuma simulação com o controlador de  $CO_2$ . O tempo de simulação, neste caso, também se tornou muito longo ou até mesmo inviável. Sendo assim, optou-se por permanecer com a fração constante de abertura da válvula de purga, utilizando o valor encontrado na literatura, que é de 85%.

### 4.3) Simulação Final do Processo Controlado

Após as simulações em separado de cada malha de controle e de sua respectiva sintonia, foi realizada uma simulação final com os controles cascata de **CET** e **TP**. Os demais controles foram substituídos pelos Blocos de Correção. A **Figura 4.11** apresenta o esquema simulado.



**Figura 4.11:** Tela do Simulador do Processo com os Controladores de **CET** e **TP**.

A simulação final foi realizada com os valores encontrados para as sintonias no item anterior. Os gráficos então obtidos para a variação de **CET** (Figura 4.12) e **TP** (Figura 4.13) com o tempo foram os seguintes:

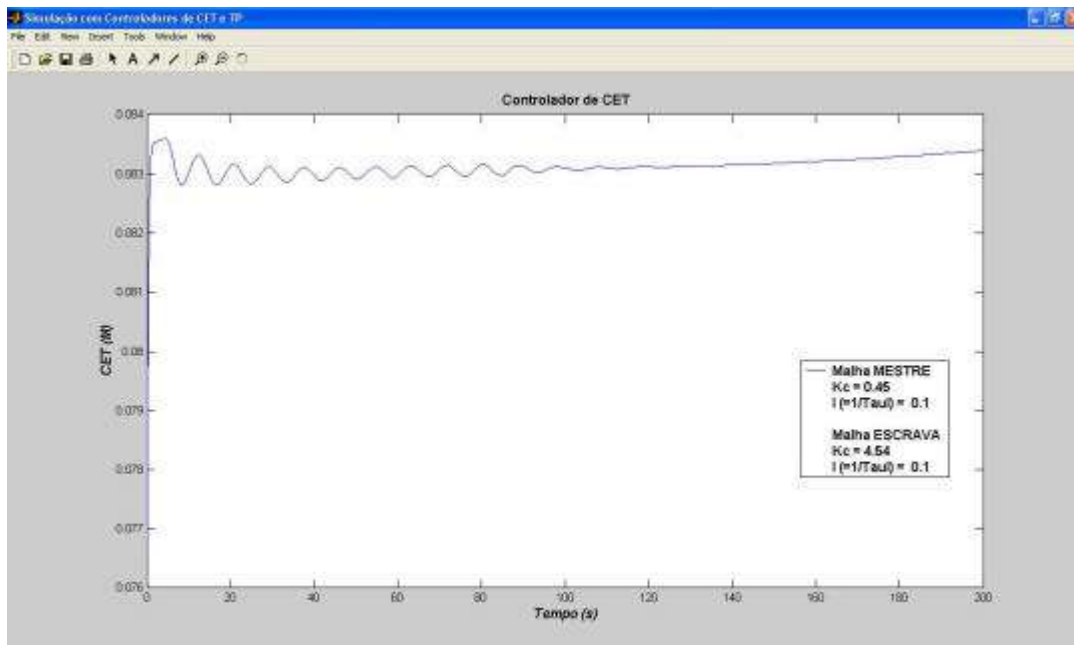


Figura 4.12: Variação de **CET** com o tempo no Processo Controlado e Integrado.

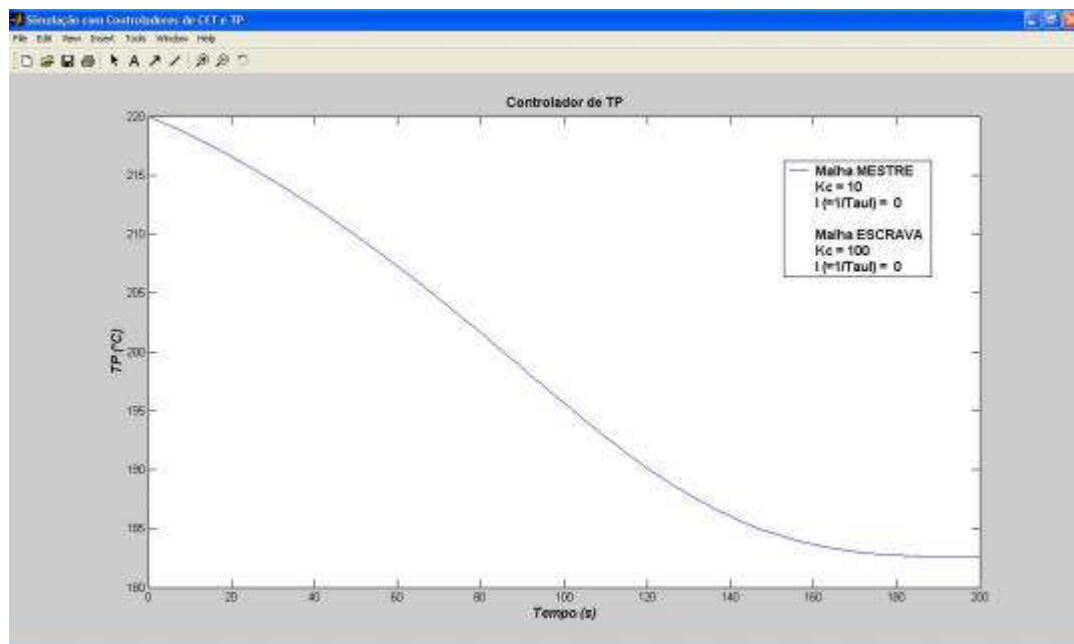


Figura 4.13: Variação de **TP** com o tempo no Processo Controlado e Integrado.



Analisando os Gráficos anteriores, é possível observar que o uso das 2 malhas cascata simultaneamente, houve uma pequena alteração no gráfico de **CET** x tempo: apesar do *overshoot* ter ocorrido com uma maior amplitude, a variável manteve a oscilação Sub-amortecida obtida anteriormente. Já o gráfico de **TP** x tempo não apresentou nenhuma interferência.

# **CONCLUSÃO E SUGESTÕES**

## **PARA TRABALHOS FUTUROS**

O presente trabalho abordou a Etapa de Reação no processo de produção de Óxido de Etileno, com modelagem fenomenológica rigorosa. Adicionalmente, a Etapa de Absorção do óxido produzido foi introduzida de forma simplificada visando à simulação do reciclo e da integração energética, enquanto a Etapa de Purificação não foi objeto de simulação. Os modelos para os principais equipamentos – i.e., reator, trocadores de calor de integração energética e absorvedora – foram implementados em ambiente SIMULINK do MATLAB (SIMULINK 4.1 do MATLAB versão 6.1, *The MathWorks Inc.*), configurado para simulação do processo em correntes de processo e blocos de operações/equipamentos.

Foram levantadas as principais características dos equipamentos que constituem a etapa de reação do processo em questão e os respectivos modelos matemáticos foram propostos, em diferentes níveis de complexidade. A partir destes modelos, foi possível a construção de blocos de simulação em ambiente SIMULINK/MATLAB (*The MathWorks Inc*) para cada um desses equipamentos e a realização das simulações parciais, avaliando-se o comportamento das variáveis do processo global antes mesmo da integração.

Adicionalmente, a partir de uma Análise de Sensibilidade do Reator, que contempla a operação determinante da dinâmica do processo de produção de óxido de etileno, foi possível definir condições de operação que favorecem um compromisso entre seletividade e conversão. Simulações permitiram a definição da matriz de ganhos do processo, que permitiu uma Análise de Controlabilidade pela Matriz de Ganhos Relativos (*RGA*). Foi, então, possível traçar uma estratégia de controle para o Processo Global (*Plant Wide*), composta por quatro malhas cascata de controle, além da malha de controle simples da concentração de CO<sub>2</sub>.

Na seqüência, o processo integrado controlado foi simulado. No entanto, como o custo de CPU representado pelo modelo rigoroso do reator com integração energética, com forte rigidez numérica dificultou, no horizonte de tempo disponível, a simulação com as cinco malhas de controle propostas. Sugere-se, como desenvolvimento futuro, avaliar alternativas de integradores numéricos mais adequados ao processo simulado.

Adicionalmente, para definição de uma Estratégia *Plant Wide*, recomenda-se a inclusão da etapa de purificação de óxido, e a substituição do modelo simplificado da absorvedora por um modelo rigoroso visando à quantificação dos custos energéticos associados aos diferentes estados de operação.

# **REFERÊNCIAS**

# **BIBLIOGRÁFICAS**

1. GUDEKAR, K. G. e RIGGS, J. B., **“Bifurcation and Stability Analysis of an Ethylene Oxide Reactor System”**, Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 42, págs. 3285-3293, 2003.
2. GUEDES, M. J. M., ROBAINA, D. T., DRUMMOND, L. M. A., KISCHINHEVSKY, M., FILHO, O. T.S., **“Solução Numérica de Equações Diferenciais Parciais Parabólicas usando o Método Hopscotch com Refinamento Não-Uniforme”**, 2002.
3. HOPKINS, L., LANT, P. e NEWELL, B., **“Output structural controllability: a tool for integrated process design and control”**, J. Proc. Cont. Vol. 8, No. 1, págs. 57-68, 1998.
4. KAKAÇ, S., BERGLES, A. E., MAYINGER, F., **“Heat Exchangers: Thermal-Hydraulic Fundamentals and Design”**, Hemisphere, Washington, 1981.
5. KERN, Donald Q., **“Processos de Transmissão de Calor”**, Editora Guanabara Dois S.A., Rio de Janeiro – RJ, 1980.
6. KLEMOLA, K., TURUNEN, I., **“State of Mathematical Modelling and Simulation in the Finnish Process Industry, Universities and Research Centres”**, Tekes report 107, 2001.

7. LOU, H. H., CHANDRASEKARAN, J., SMITH, R. A., “**Large-scale dynamic simulation for security assessment of an ethylene oxide manufacturing process**”. *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 30, págs. 1102–1118, 2006.
8. MARTINS, L., CARDOSO, D., “**Produção de etilenoglicóis e derivados por Reações Catalíticas do Óxido de Eteno**”. *Química Nova*, Vol. 28, No. 2, págs. 264-273, 2005.
9. MEHL, A., “**Simulação e Análise de Estratégias de Operação de Reator para produção de Óxido de Etileno**”. Dissertação de Mestrado, Escola de Química, UFRJ, 1996.
10. OLIVEIRA, S. G., “**A influência do projeto na síntese de redes de trocadores de calor**”, Dissertação de Mestrado, Escola de Química, UFRJ, 1995.
11. PERRY, R. H. e CHILTON, C. H., “**Chemical Engineer’s Handbook**”, McGraw-Hill Book Company, Inc., Fifth Edition, 1973.
12. SCHLUNDER, E. U., “**Heat Exchanger Design Handbook**”, Hemisphere Publishing Corporation, 1983.
13. ZHOU, X. G., YUAN, W. K., “**Optimization of the fixed-bed reactor for ethylene epoxidation**”, *Chemical Engineering and Processing*, Vol. 44, págs. 1098–1107, 2005.

**ANEXO A:**  
**SIMULADOR DO PROCESSO EM**  
**AMBIENTE SIMULINK**

## A.1) REATOR DE ÓXIDO DE ETILENO

O modelo matemático dinâmico do reator codificado por Mehl [MEHL, 1996] foi adaptado para ambiente SIMULINK do MATLAB (SIMULINK 4.1 do MATLAB versão 6.1, *The MathWorks Inc.*). O Simulador desenvolvido, cujas telas são apresentadas na seqüência, é estruturado em correntes de processo e blocos de operações/equipamentos.

**Correntes de Processo:** As correntes de processo do reator estão estruturadas com 11 informações:

- ⇒ concentração de óxido de etileno na alimentação (***COEin***) em M,
- ⇒ concentração de etileno na alimentação (***CETin***) em M,
- ⇒ concentração de O<sub>2</sub> na alimentação (***CO2in***) em M,
- ⇒ temperatura (***T***) em K,
- ⇒ vazão (***m***) em Kg/s,
- ⇒ calor específico (***Cp***) em J/Kg.K,
- ⇒ densidade (***r***) em Kg/m<sup>3</sup>,
- ⇒ viscosidade (***m***),
- ⇒ condutividade térmica (***k***),
- ⇒ coeficiente de transferência de calor (***h***) em W/m<sup>2</sup>.K, e
- ⇒ concentração de CO<sub>2</sub> na alimentação (***CCO2in***) em M.

As informações que caracterizam as correntes de alimentação do processo são fornecidas através de caixa de diálogo específica, conforme mostrado na **Figura A.1**.

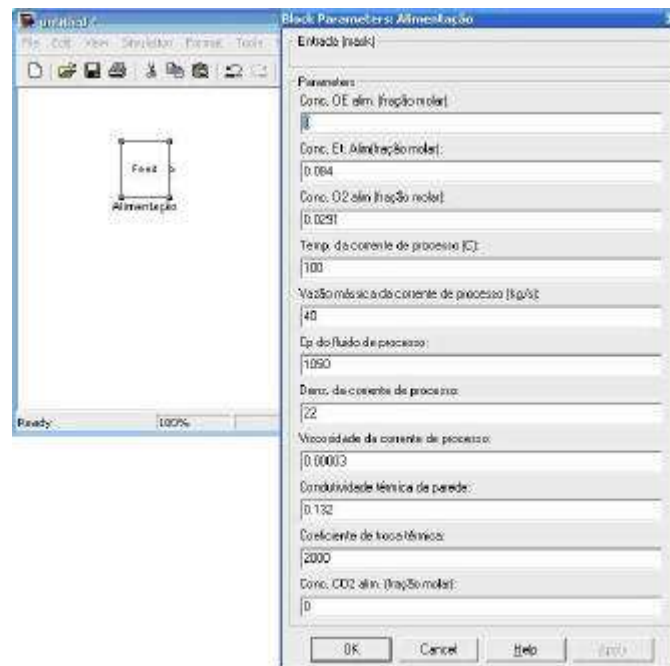


Figura A.1: Janela de Configuração da Corrente de Alimentação do Reator

**Reator:** O reator é simulado pelo bloco *S-function* do SIMULINK, que utiliza o modelo não linear apresentado no Capítulo 2, mostrado na Figura A.2. Sua entrada é a corrente de alimentação.

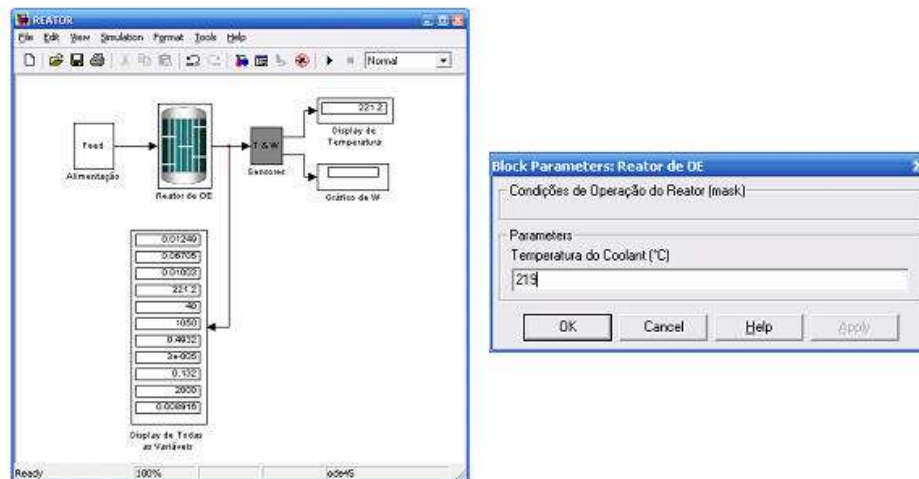
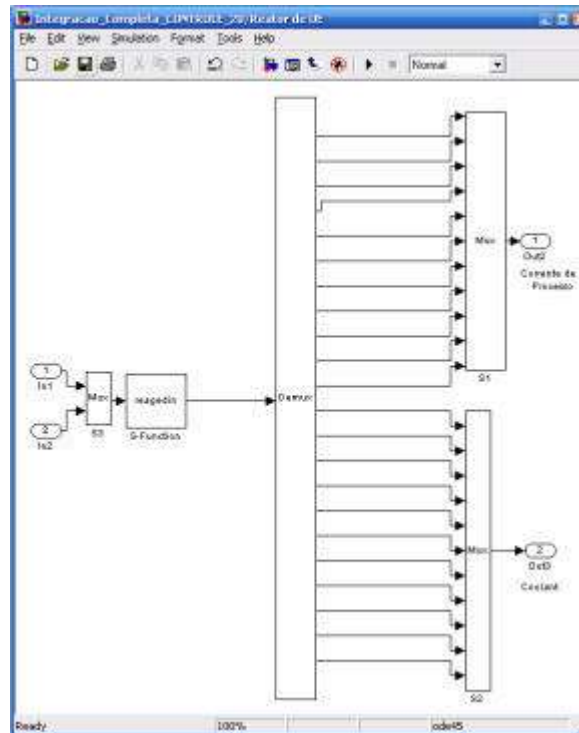


Figura A.2: Telas do Simulador do Reator de Óxido de Etileno



Como se pode observar na **Figura A.2**, a informação fornecida para o bloco é apenas a Temperatura do Coolant ( $T_{c_{in}}$ ). As informações de geometria do reator e dados do catalisador não foram disponibilizados para modificação por janela de diálogo, não havendo, contudo, qualquer limitação na arquitetura do software que impeça esta disponibilidade futura. A **Figura A.3** apresenta a estrutura do Bloco Reator.



**Figura A.3:** Configuração de Blocos para Simulação do Reator

As variáveis de entrada e saída utilizadas nas simulações foram as seguintes:

Variáveis de Entrada:

- ⇒ Vazão da corrente de processo (**W**) em Kg/s;
- ⇒ Temperatura inicial da corrente de processo (**T<sub>p</sub>**) em K;
- ⇒ Temperatura inicial do fluido de refrigeração (**T<sub>c</sub>**) em K;
- ⇒ Concentração de Etileno inicial (**CET<sub>in</sub>**) em M;
- ⇒ Concentração de O<sub>2</sub> inicial (**CO<sub>2in</sub>**) em M.

Variáveis de Saída primárias:

- ⇒ Concentração de Etileno final (**CETout**) em M;
- ⇒ Concentração de Óxido de Etileno final (**COEout**) em M;
- ⇒ Temperatura final da corrente de processo (**TPout**) em K;
- ⇒ Temperatura final do Fluido de Refrigeração (**TCout**) em K;
- ⇒ Temperatura de Pico ( **Tpico**) em K;
- ⇒ Localização do Pico (**Lpico**) em m.

Variáveis de Saída secundárias:

- ⇒ Conversão (**Conv**) em %;
- ⇒ Seletividade (**Selet**) em %.

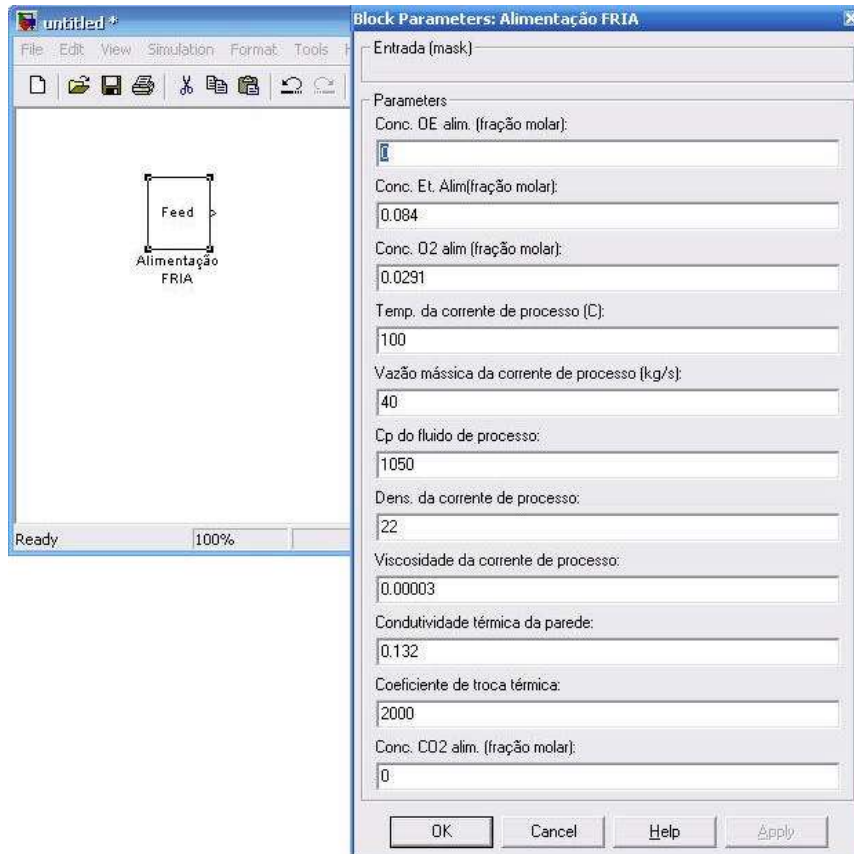
## A.2) TROCADORES DE CALOR

Os principais dispositivos para especificação de dados para utilização do simulador são apresentados nesse item.

**Correntes de Processo:** As correntes de processo do trocador de calor estão estruturadas com 7 informações:

- ⇒ temperatura (**T**) em K,
- ⇒ vazão (**W**) em Kg/s,
- ⇒ calor específico (**Cp**) em J/Kg.K,
- ⇒ densidade (**r**) em Kg/m<sup>3</sup>,
- ⇒ viscosidade (**m**),
- ⇒ condutividade térmica (**k**), e
- ⇒ coeficiente de transferência de calor (**h**) em W/m<sup>2</sup>.K.

A introdução das informações que caracterizam as correntes de alimentação do processo é feita através de caixa de diálogo específica, conforme mostrado na **Figura A.4**.

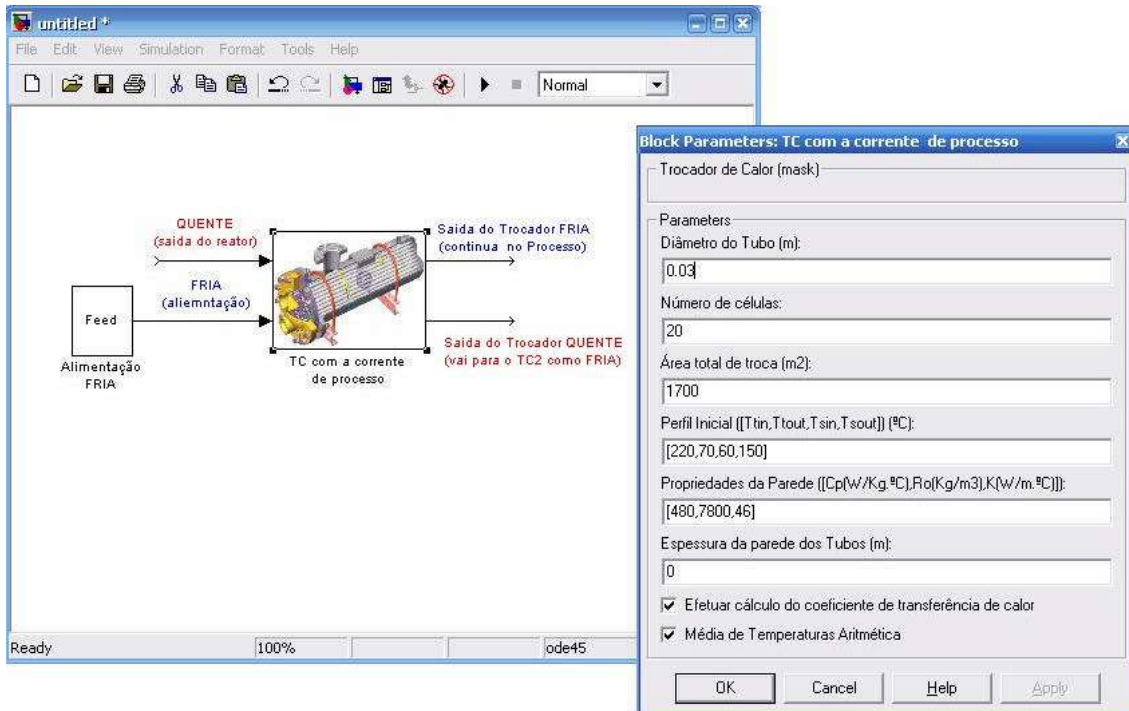


**Figura A.4:** Janela de Configuração da Corrente de Alimentação.

As demais informações de concentração presentes na Janela de Configuração da Corrente de Alimentação exibida anteriormente, tais como Concentração de Óxido de Etileno na alimentação, Concentração de Etileno na alimentação, Concentração de  $O_2$  na alimentação e Concentração de  $CO_2$  na alimentação, são necessárias para o Reator. Como a corrente que sai do segundo trocador de calor segue para o reator, esta deve conter todas essas informações de concentração.

**Trocadores de Processo:** Um bloco foi criado para simular trocadores de calor entre correntes de processo, considerando configuração de escoamento em

contracorrente. Suas entradas são as correntes de processo quente e fria envolvidas, e suas saídas as correntes correspondentes após a troca. Como se pode observar na **Figura A.5**, as informações fornecidas são: o diâmetro dos tubos ( $D_t$ ), o número de células, a área total de troca térmica ( $A$ ), o perfil inicial de temperaturas, as propriedades da parede dos tubos ( $C_p$ ,  $\rho$  e  $K$ ) e a sua espessura ( $d_t$ ).



**Figura A.5:** Bloco de Trocador de Calor para Correntes de Processo.

As equações do modelo, apresentadas no **Capítulo 2**, são chamadas pela função escrita em linguagem de programação do MATLAB, chamada **redelx11**, através de bloco *S-function* do SIMULINK, como se pode observar na **Figura A.6**:

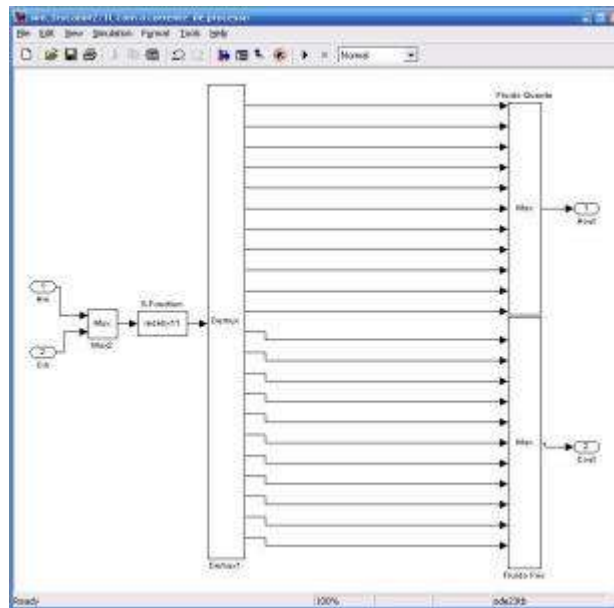


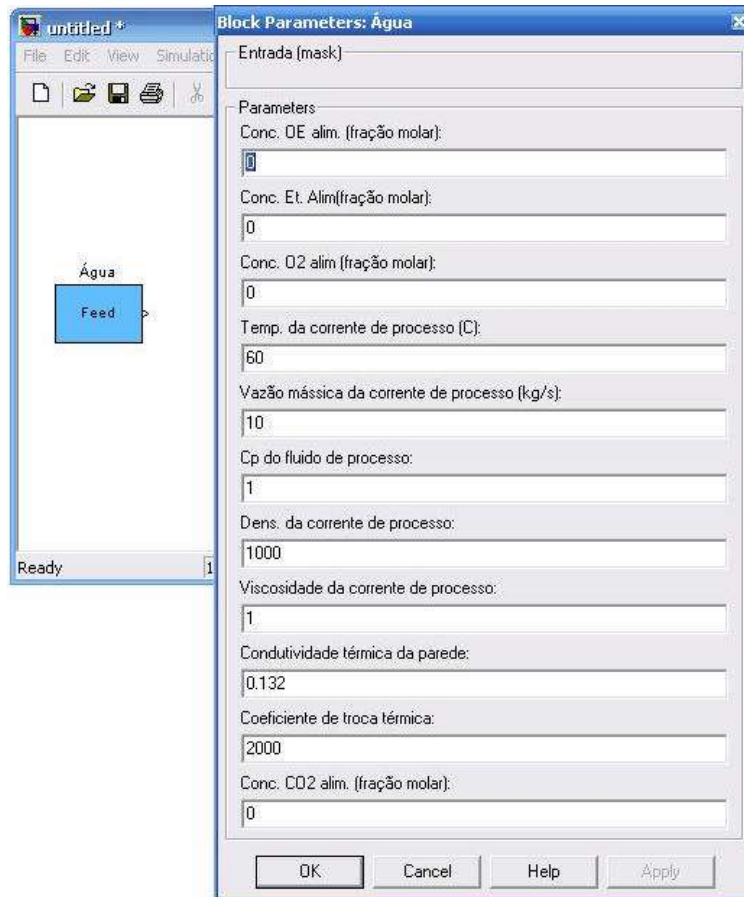
Figura A.6: Configuração de Blocos para Simulação de Trocador de Calor de Processo.

### A.3) ABSORVEDORA DE ÓXIDO

**Correntes de Processo:** As correntes de processo da absorvedora, assim como as do reator, estão estruturadas com 11 informações:

- ⇒ concentração de óxido de etileno na alimentação ( $COEin$ ) em M,
- ⇒ concentração de etileno na alimentação ( $CETin$ ) em M,
- ⇒ concentração de  $O_2$  na alimentação ( $CO2in$ ) em M,
- ⇒ temperatura ( $T$ ) em K,
- ⇒ vazão ( $m$ ) em Kg/s,
- ⇒ calor específico ( $Cp$ ) em J/Kg.K,
- ⇒ densidade ( $r$ ) em Kg/m<sup>3</sup>,
- ⇒ viscosidade ( $m$ ),
- ⇒ condutividade térmica ( $k$ ),
- ⇒ coeficiente de transferência de calor ( $h$ ) em W/m<sup>2</sup>.K, e
- ⇒ concentração de  $CO_2$  na alimentação ( $CCO2in$ ) em M.

A introdução das informações que caracterizam as correntes de alimentação do processo é feita através de caixa de diálogo específica, conforme mostrado na **Figura A.7.**



**Figura A.7:** Janela de Configuração da Corrente de Alimentação de Água.

**Absorvedora:** Um bloco foi criado para simular a absorvedora, Figura A.8. Suas entradas são: a corrente de processo que sai do primeiro trocador de calor de integração energética e a corrente de alimentação de água. Suas saídas são: a corrente que contém o óxido de etileno absorvido em água e a corrente que segue no processo, composta por: etileno e O<sub>2</sub> (não reagidos), e CO<sub>2</sub>.

Como se pode observar na **Figura A.8**, a informação fornecida é a constante de tempo do modelo de primeira ordem da absorvedora ( $t_{SP}$ ).

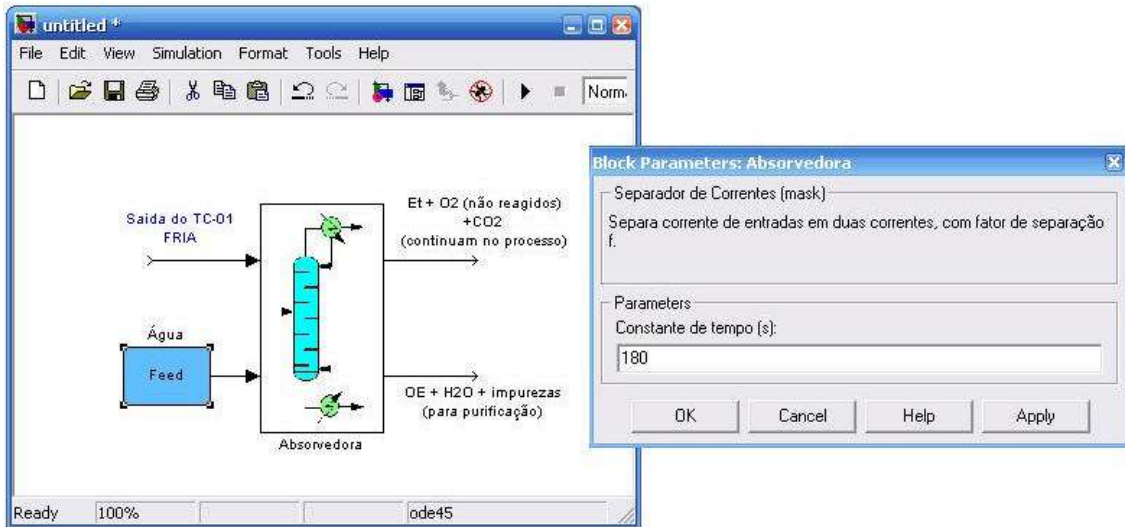


Figura A.8: Bloco da Absorvedora.

As equações do modelo, apresentadas anteriormente, são chamadas pela função escrita em linguagem de programação do MATLAB, chamada **scrubber**, através de bloco *S-function* do SIMULINK, como se pode observar na **Figura A.9**:

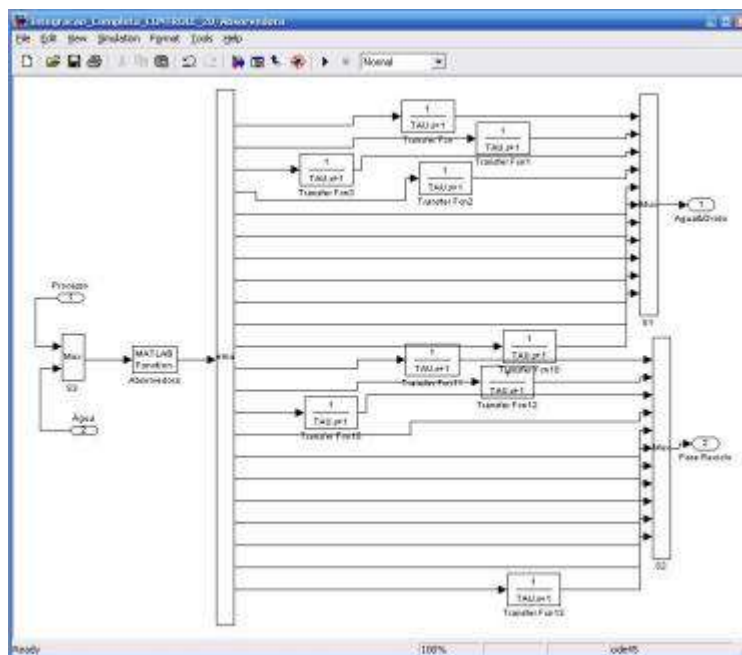


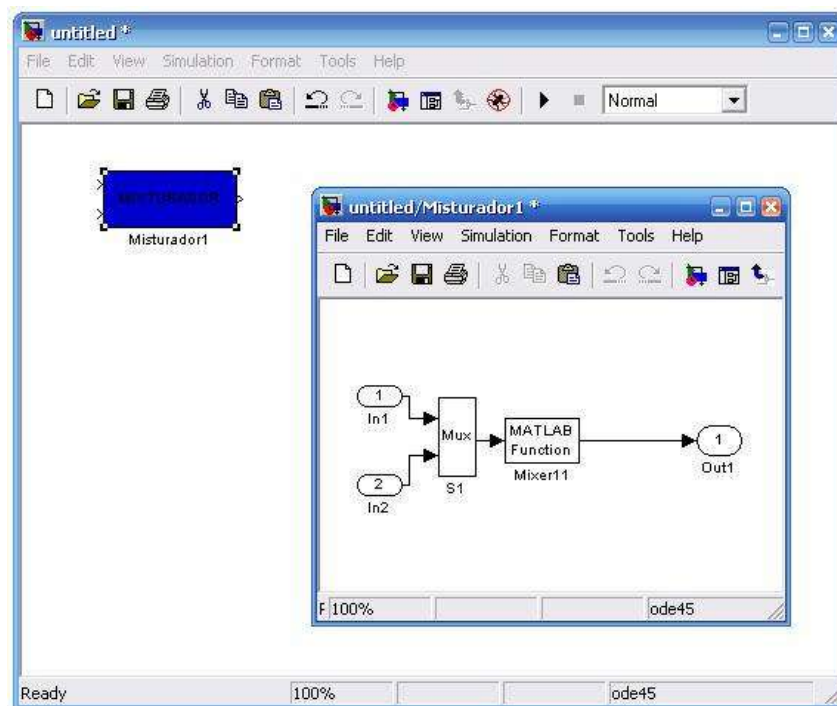
Figura A.9: Configuração de Blocos para Simulação da Absorvedora.

## A.4) MISTURADORES, VÁLVULAS E CONTROLADORES:

Neste item, são abordados os demais equipamentos do processo.

### Misturadores

A mistura de correntes de processo é modelada pelo bloco MISTURADOR, com configuração apresentada na **Figura A.10**, a seguir. Através do bloco MUX, as diferentes corrente são empilhadas e encaminhadas para uma rotina desenvolvida para efetuar os balanços de massa e de energia no processo de mistura, chamada **mixer11**, através do bloco do **Matlab Function** do SIMULINK. Nessa mesma rotina, é corrigido o valor do coeficiente de transferência de calor em função da nova vazão mássica, que é igual ao somatório das vazões mássicas das correntes alimentadas no misturador.

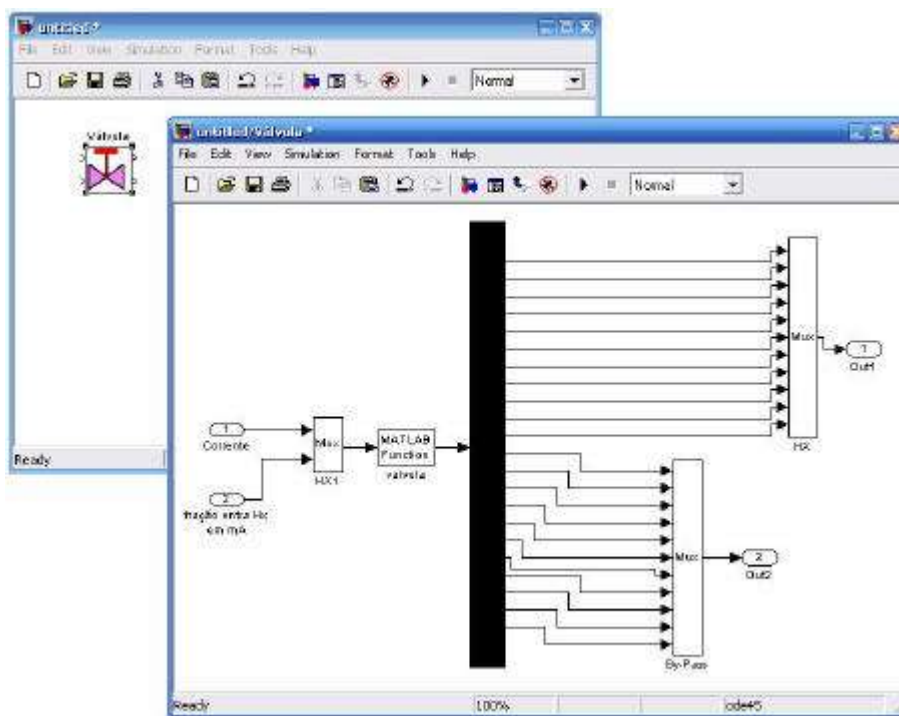


**Figura A.10:** Misturador de Correntes de Processo.



## Válvulas

As válvulas (ou *by-passes*) são modeladas por uma rotina desenvolvida (**valvula**), que executa a divisão das correntes mantendo as suas propriedades físicas. Além das vazões, somente o valor do coeficiente de transferência de calor é corrigido em função das vazões das correntes que saem do divisor. A **Figura A.11** apresenta o bloco e a sua configuração, que utiliza o bloco **Matlab Function** do SIMULINK.



**Figura A.11:** Válvula (ou divisora) de correntes de processo.

## Controladores

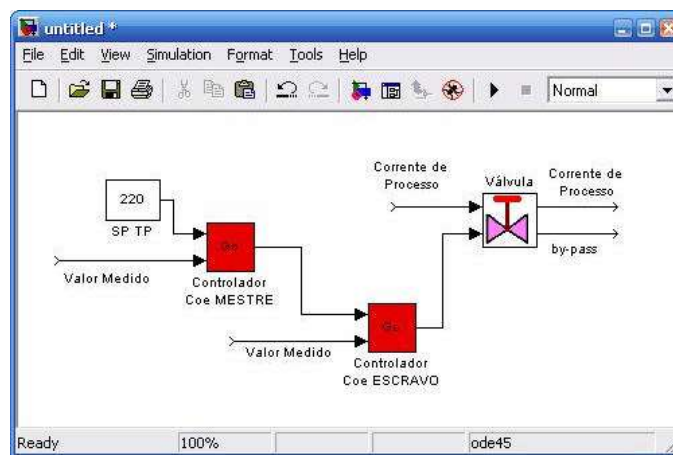
Foram utilizados 2 tipos de controladores: de temperatura e de concentração. Ambos se apresentam na configuração cascata.

No caso do controle cascata das temperaturas, por exemplo, o controlador MESTRE recebe um valor de *set-point* de temperatura em °C e o valor medido, também em °C, da variável em questão. Este manda o *set-point* para o controlador ESCRAVO,

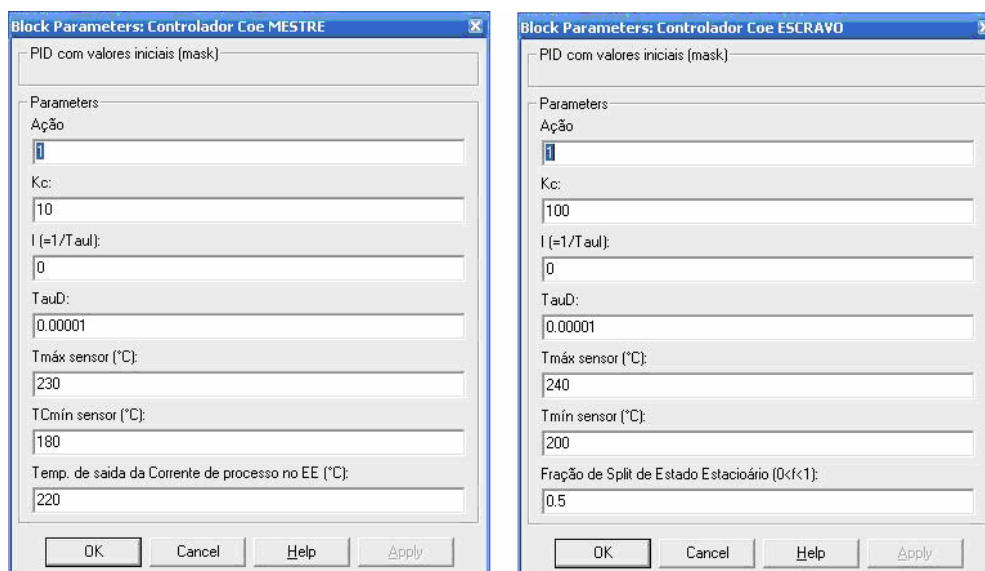
só que em mA. O controlador ESCRAVO, então, recebe esse *set-point* em mA e o valor medido, em °C, da variável em questão (este valor é, posteriormente, transformado em mA). Por fim, este manda a fração de abertura ( $f$ ) para a válvula, em mA.

O controle cascata das concentrações é análogo ao das temperaturas, sendo que as variáveis medidas são na unidade de M.

As **Figuras A.12 a A.15** apresentam os blocos dos controles cascata e suas configurações.



**Figura A.12:** Representação do Controle Cascata.



**Figura A.13:** Janelas de Configuração dos Controladores MESTRE e ESCRAVO, respectivamente.

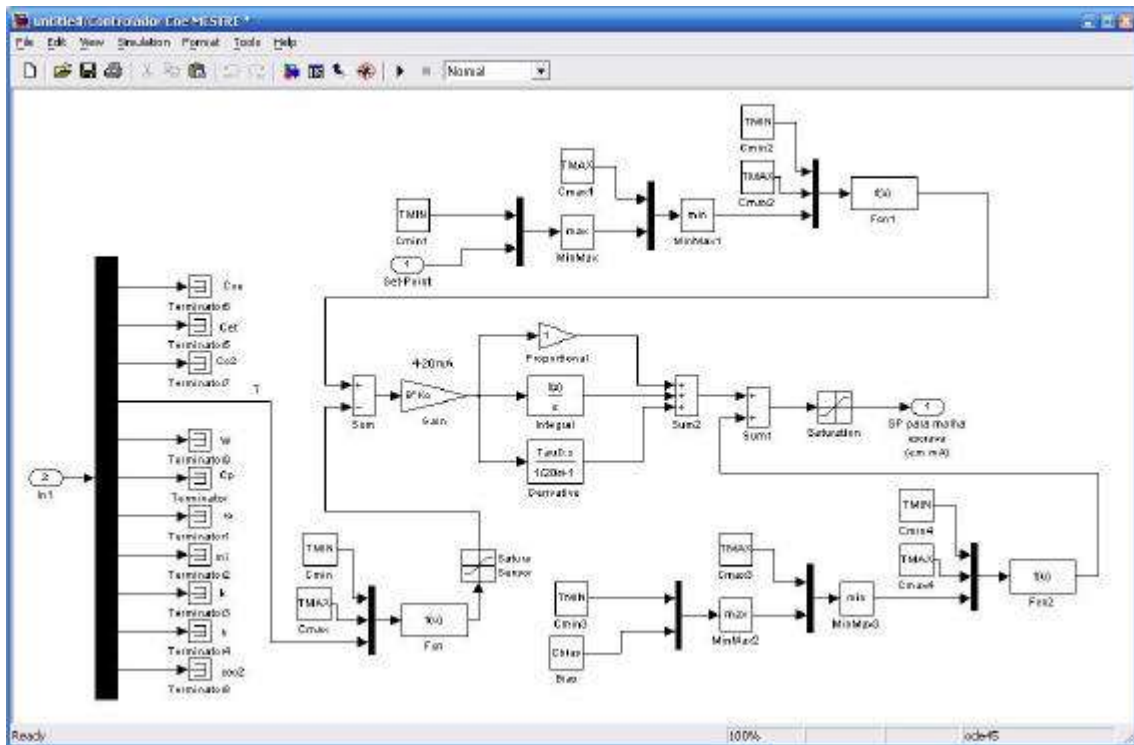


Figura A.14: Configuração de Blocos para o controlador MESTRE.

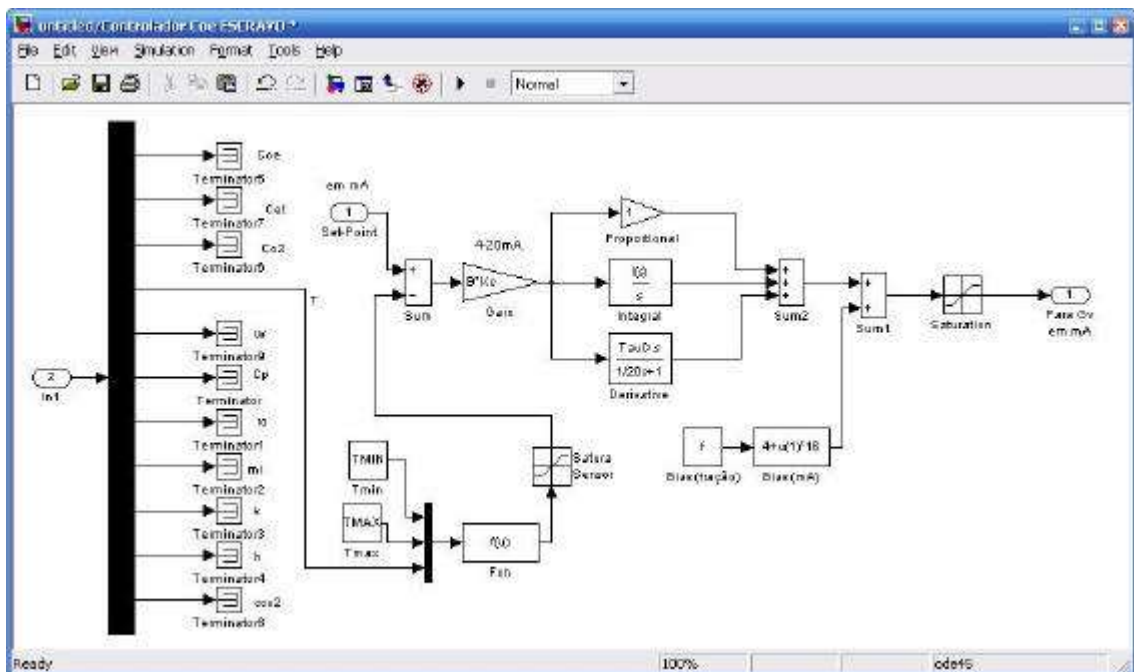


Figura A.15: Configuração de Blocos para o controlador ESCRAVO.

# **ANEXOS B:**

## **ANÁLISE DE SENSIBILIDADE**

Tabelas com os Resultados da Análise de Sensibilidade:

Variando W:

W = 39		W = 39,5		W = 40		W = 40,5	
<b>CETout</b>	0,0660	<b>CETout</b>	0,0660	<b>CETout</b>	0,0660	<b>CETout</b>	0,0660
<b>COEout</b>	0,0118	<b>COEout</b>	0,0118	<b>COEout</b>	0,0118	<b>COEout</b>	0,0118
<b>TPout</b>	495,3874	<b>TPout</b>	495,3874	<b>TPout</b>	495,3874	<b>TPout</b>	495,3874
<b>TCout</b>	494,3871	<b>TCout</b>	494,3871	<b>TCout</b>	494,3871	<b>TCout</b>	494,3871
<b>Tpico</b>	683,4611	<b>Tpico</b>	683,4611	<b>Tpico</b>	683,4611	<b>Tpico</b>	683,4611
<b>Lpico</b>	1,9000	<b>Lpico</b>	1,9000	<b>Lpico</b>	1,9000	<b>Lpico</b>	1,9000
<b>CONV.</b>	21,4286	<b>CONV.</b>	21,4286	<b>CONV.</b>	21,4286	<b>CONV.</b>	21,4286
<b>SELET.</b>	65,5556	<b>SELET.</b>	65,5556	<b>SELET.</b>	65,5556	<b>SELET.</b>	65,5556
W = 41							
<b>CETout</b>	0,0660						
<b>COEout</b>	0,0118						
<b>TPout</b>	495,3874						
<b>TCout</b>	494,3871						
<b>Tpico</b>	683,4611						
<b>Lpico</b>	1,9000						
<b>CONV.</b>	21,4286						
<b>SELET.</b>	65,5556						

Variando Tp:

Tp = 210		Tp = 215		Tp = 217		Tp = 218	
<b>CETout</b>	0,0660	<b>CETout</b>	0,0660	<b>CETout</b>	0,0660	<b>CETout</b>	0,0660
<b>COEout</b>	0,0121	<b>COEout</b>	0,0119	<b>COEout</b>	0,0116	<b>COEout</b>	0,0117
<b>TPout</b>	222,6569	<b>TPout</b>	222,4581	<b>TPout</b>	222,2824	<b>TPout</b>	222,3345
<b>TCout</b>	493,8560	<b>TCout</b>	494,2069	<b>TCout</b>	494,3813	<b>TCout</b>	494,3849
<b>Tpico</b>	1258,2000	<b>Tpico</b>	850,2355	<b>Tpico</b>	723,7825	<b>Tpico</b>	705,7660
<b>Lpico</b>	2,0000	<b>Lpico</b>	2,0000	<b>Lpico</b>	2,0000	<b>Lpico</b>	1,9000
<b>CONV.</b>	21,4286	<b>CONV.</b>	21,4286	<b>CONV.</b>	21,4286	<b>CONV.</b>	21,4286
<b>SELET.</b>	67,2222	<b>SELET.</b>	66,1111	<b>SELET.</b>	64,4444	<b>SELET.</b>	65,0000
Tp = 220		Tp = 225		Tp = 230			
<b>CETout</b>	0,0660	<b>CETout</b>	0,0661	<b>CETout</b>	0,0661		
<b>COEout</b>	0,0118	<b>COEout</b>	0,0119	<b>COEout</b>	0,0121		
<b>TPout</b>	222,3874	<b>TPout</b>	222,5269	<b>TPout</b>	222,7210		
<b>TCout</b>	494,3871	<b>TCout</b>	494,2072	<b>TCout</b>	493,7668		
<b>Tpico</b>	683,4611	<b>Tpico</b>	846,3547	<b>Tpico</b>	1289,7000		
<b>Lpico</b>	1,9000	<b>Lpico</b>	1,6000	<b>Lpico</b>	1,3000		
<b>CONV.</b>	21,4286	<b>CONV.</b>	21,3095	<b>CONV.</b>	21,3095		
<b>SELET.</b>	65,5556	<b>SELET.</b>	66,4804	<b>SELET.</b>	67,5978		

Variando Tc:

Tc = 200		Tc = 205		Tc = 210		Tc = 215	
<b>CETout</b>	0,0728	<b>CETout</b>	0,0712	<b>CETout</b>	0,0694	<b>CETout</b>	0,0676
<b>COEout</b>	0,0090	<b>COEout</b>	0,0102	<b>COEout</b>	0,0113	<b>COEout</b>	0,0123
<b>TPout</b>	477,2618	<b>TPout</b>	482,7240	<b>TPout</b>	487,9786	<b>TPout</b>	492,7913
<b>TCout</b>	497,2724	<b>TCout</b>	496,7685	<b>TCout</b>	496,1643	<b>TCout</b>	495,3594
<b>Tpico</b>	527,2621	<b>Tpico</b>	527,2621	<b>Tpico</b>	558,7147	<b>Tpico</b>	591,8854
<b>Lpico</b>	1,8000	<b>Lpico</b>	1,8000	<b>Lpico</b>	0,1000	<b>Lpico</b>	0,1000
<b>CONV.</b>	13,3333	<b>CONV.</b>	15,2381	<b>CONV.</b>	17,3810	<b>CONV.</b>	19,5238
<b>SELET.</b>	80,3571	<b>SELET.</b>	79,6875	<b>SELET.</b>	77,3973	<b>SELET.</b>	75,0000
Tc = 217		Tc = 218		Tc = 219			
<b>CETout</b>	0,0668	<b>CETout</b>	0,0664	<b>CETout</b>	0,0660		
<b>COEout</b>	0,0126	<b>COEout</b>	0,0125	<b>COEout</b>	0,0118		
<b>TPout</b>	494,4410	<b>TPout</b>	495,1033	<b>TPout</b>	495,3874		
<b>TCout</b>	494,9383	<b>TCout</b>	494,6887	<b>TCout</b>	494,3871		
<b>Tpico</b>	605,5089	<b>Tpico</b>	612,5115	<b>Tpico</b>	683,4611		
<b>Lpico</b>	0,1000	<b>Lpico</b>	0,1000	<b>Lpico</b>	1,9000		
<b>CONV.</b>	20,4762	<b>CONV.</b>	20,9524	<b>CONV.</b>	21,4286		
<b>SELET.</b>	73,2558	<b>SELET.</b>	71,0227	<b>SELET.</b>	65,5556		

Variando CO2in:

CO2in = 0,0200		CO2in= 0,0250		CO2in= 0,0280		CO2in= 0,0285	
<b>CETout</b>	0,0728	<b>CETout</b>	0,0694	<b>CETout</b>	0,0671	<b>CETout</b>	0,0667
<b>COEout</b>	0,0085	<b>COEout</b>	0,0109	<b>COEout</b>	0,0122	<b>COEout</b>	0,0124
<b>TPout</b>	495,9889	<b>TPout</b>	496,5069	<b>TPout</b>	496,3158	<b>TPout</b>	496,1071
<b>TCout</b>	493,5074	<b>TCout</b>	494,3330	<b>TCout</b>	494,5342	<b>TCout</b>	494,5047
<b>Tpico</b>	574,5539	<b>Tpico</b>	597,8479	<b>Tpico</b>	613,0667	<b>Tpico</b>	615,9167
<b>Lpico</b>	0,1000	<b>Lpico</b>	0,1000	<b>Lpico</b>	0,1000	<b>Lpico</b>	0,1000
<b>CONV.</b>	13,3333	<b>CONV.</b>	17,3810	<b>CONV.</b>	20,1190	<b>CONV.</b>	20,5952
<b>SELET.</b>	75,8929	<b>SELET.</b>	74,6575	<b>SELET.</b>	72,1893	<b>SELET.</b>	71,6763
CO2in= 0,0290		CO2in= 0,0291		CO2in= 0,0293			
<b>CETout</b>	0,0661	<b>CETout</b>	0,0660	<b>CETout</b>	0,0671		
<b>COEout</b>	0,0121	<b>COEout</b>	0,0118	<b>COEout</b>	0,0090		
<b>TPout</b>	495,6036	<b>TPout</b>	495,3874	<b>TPout</b>	494,5721		
<b>TCout</b>	494,4185	<b>TCout</b>	494,3871	<b>TCout</b>	494,2886		
<b>Tpico</b>	638,2171	<b>Tpico</b>	683,4611	<b>Tpico</b>	974,8537		
<b>Lpico</b>	0,1000	<b>Lpico</b>	1,9000	<b>Lpico</b>	1,7000		
<b>CONV.</b>	21,3095	<b>CONV.</b>	21,4286	<b>CONV.</b>	20,1190		
<b>SELET.</b>	67,5978	<b>SELET.</b>	65,5556	<b>SELET.</b>	53,2544		



Variando CETin:

<b>CETin = 0,0800</b>		<b>CETin = 0,0840</b>		<b>CETin = 0,0900</b>		<b>CETin = 0,0950</b>	
<b>CETout</b>	0,0622	<b>CETout</b>	0,0660	<b>CETout</b>	0,0721	<b>CETout</b>	0,0771
<b>COEout</b>	0,0108	<b>COEout</b>	0,0118	<b>COEout</b>	0,0123	<b>COEout</b>	0,0124
<b>TPout</b>	495,0312	<b>TPout</b>	495,3874	<b>TPout</b>	495,7685	<b>TPout</b>	495,8682
<b>TCout</b>	494,7606	<b>TCout</b>	494,3871	<b>TCout</b>	494,0593	<b>TCout</b>	494,0054
<b>Tpico</b>	823,0511	<b>Tpico</b>	683,4611	<b>Tpico</b>	618,3166	<b>Tpico</b>	617,8467
<b>Lpico</b>	1,8000	<b>Lpico</b>	1,9000	<b>Lpico</b>	0,1000	<b>Lpico</b>	0,1000
<b>CONV.</b>	22,2500	<b>CONV.</b>	21,4286	<b>CONV.</b>	19,8889	<b>CONV.</b>	18,8421
<b>SELET.</b>	60,6742	<b>SELET.</b>	65,5556	<b>SELET.</b>	68,7151	<b>SELET.</b>	69,2737
<b>CETin = 0,1000</b>		<b>CETin = 0,1500</b>		<b>CETin = 0,2000</b>			
<b>CETout</b>	0,0821	<b>CETout</b>	0,1322	<b>CETout</b>	0,1822		
<b>COEout</b>	0,0124	<b>COEout</b>	0,0125	<b>COEout</b>	0,0125		
<b>TPout</b>	495,9001	<b>TPout</b>	495,9817	<b>TPout</b>	496,0062		
<b>TCout</b>	493,9551	<b>TCout</b>	493,7748	<b>TCout</b>	493,7079		
<b>Tpico</b>	617,6727	<b>Tpico</b>	617,1766	<b>Tpico</b>	635,8832		
<b>Lpico</b>	0,1000	<b>Lpico</b>	0,1000	<b>Lpico</b>	0,1000		
<b>CONV.</b>	17,9000	<b>CONV.</b>	11,8667	<b>CONV.</b>	8,9000		
<b>SELET.</b>	69,2737	<b>SELET.</b>	70,2247	<b>SELET.</b>	70,2247		

# **ANEXOS C:**

## **ORDEM DE CÁLCULO DE $h$**

A seguir, são apresentadas as ordens dos cálculos realizados para estimar os parâmetros importantes na determinação dos coeficientes de transferência de calor e dos perfis de temperatura. Cabe ressaltar que o código não incorpora testes em relação à violação de alguns limites recomendados no projeto de trocadores (como as faixas de velocidades), e ao mesmo tempo são consideradas recomendações vindas do projeto, como a fixação de  $L/D_s = 8$  e a razão de passo de  $P_t/D_t = 1,25$ . É também considerado arranjo triangular na construção da matriz tubular.

1º) Cálculo do diâmetro do casco ( $D_s$ ):

$$D_s = \left( 2\sqrt{3} \frac{A}{p D_t 8 D_s} \frac{(1,25 D_t)^2}{p} \right)^{0,5} \quad (\text{C.1})$$

2º) Cálculo do número de tubos ( $N_t$ ), considerado igual ao número inteiro mais próximo:

$$N_t = \text{round} \left[ \frac{A}{p D_t 8 D_s} \right] \quad (\text{C.2})$$

3º) Cálculo do comprimento dos tubos ( $L$ ):

$$L = \frac{A}{p D_t N_t} \quad (\text{C.3})$$

4º) Cálculo da velocidade média nos tubos ( $v_t$ ):

$$v_t = \frac{4 \dot{m}_t}{p r_t N_t (D_t - 2 d_t)^2} \quad (\text{C.4})$$

5º) Cálculo do volume de fluido quente ( $V_q$ ) no interior de cada célula:

$$V_q = \frac{V_t}{N} = \frac{\left( p N_t L \frac{(D_t - 2 d_t)^2}{4} \right)}{N} \quad (\text{C.5})$$

6º) Cálculo do volume de fluido frio ( $V_f$ ) no interior de cada célula:

$$V_f = \frac{V_s}{N} = \frac{\left( \frac{p D_s^2 L}{4} - \frac{p N_t D_t^2 L}{4} \right)}{N} \quad (\text{C.6})$$

7º) Cálculo do espaçamento entre as chicanas ( $B_b$ ) (considerando um número de chicanas igual a 11):

$$B_b = \frac{L}{10+1} \quad (\text{C.7})$$

8º) Cálculo da velocidade de referência para o escoamento do fluido no casco:

$$v_s = \frac{\dot{m}_s}{r_s \frac{D_s}{1,25 D_t} 0,25 D_t B_b} \quad (\text{C.8})$$

9º) Cálculo do diâmetro equivalente para o escoamento no casco ( $D_e$ ), segundo Kern [KERN, 1980]:

$$D_e = 4 \frac{\left( \frac{\sqrt{3}}{4} \right) (1,25 D_t)^2 - \frac{p D_t^2}{8}}{0,5 p D_t} \quad (\text{C.9})$$

10º) Cálculo do número de Reynolds para o escoamento no casco, segundo Kern [KERN, 1980]:

$$\text{Re}_s = D_e v_s r_s / m_s \quad (\text{C.10})$$

11º) Cálculo do número de Prandtl:

$$\text{Pr} = \frac{C_p m}{k} \quad (\text{C.11})$$

12º) Cálculo do coeficiente de transferência de calor ( $h_s$ ) no escoamento através do casco, segundo Kern [KERN, 1980]:

$$h_s = 0,36 \frac{k_s}{D_e} \text{Re}_s^{0.55} \text{Pr}_s^{1/3} \quad (\text{C.12})$$

13º) Cálculo da velocidade média nos tubos ( $v_t$ ):

$$v_t = \frac{4 \dot{m}_t}{\rho r_t N_t (D_t - 2 d_t)^2} \quad (\text{C.13})$$

14º) Cálculo do número de Reynolds do escoamento no interior dos tubos:

$$\text{Re}_t = (D_t - 2 d_t) (v_t) \rho_t / \mu_t \quad (\text{C.14})$$

15º) Cálculo do número de Prandtl:

$$\text{Pr} = \frac{C_p m}{k} \quad (\text{C.15})$$

16º) Cálculo do coeficiente de transferência de calor ( $h_t$ ) no escoamento através do tubo, segundo Kern [KERN, 1980]:

$$h_t = 0,023 \frac{k_t}{D_t} \text{Re}_t^{0.8} \text{Pr}_t^{1/3} \quad (\text{C.16})$$

17º) Cálculo do coeficiente global de transferência de calor:

$$U = \frac{1}{\frac{1}{h_q} + \frac{1}{h_f}} \quad (\text{C.17})$$

18º) Cálculo do diferencial efetivo  $DT_{ef,i}$  (pode ser feito através da média logarítmica ou através da média aritmética. O usuário do simulador que escolhe essa opção):

⇒ Média logarítmica:

$$\Delta T_{ef,i} \approx \frac{1}{3} \frac{(T_{q,i-1} - T_{f,i}) + (T_{q,i} - T_{f,i+1})}{2} + \frac{2}{3} \sqrt{(T_{q,i-1} - T_{f,i})(T_{q,i} - T_{f,i+1})} \quad (\text{C.18})$$

⇒ Média aritmética:

$$\Delta T_{ef,i} = \frac{(T_{q,i-1} - T_{f,i}) + (T_{q,i} - T_{f,i+1})}{2} \quad (\text{C.19})$$

19º) Cálculo da carga térmica no equipamento ( $Q$ ):

$$Q = U A \Delta T_{ef} \quad (\text{C.20})$$

20º) Cálculo dos balanços de energia na célula:

$$\frac{dT_q}{dt} = \frac{\dot{m}_q C_{p,q} (T_q^e - T_q^s) - Q_{cel}}{V_q C_{p,q}} \quad (\text{C.21})$$

$$\frac{dT_f}{dt} = \frac{\dot{m}_f C_{p,f} (T_f^e - T_f^s) + Q_{cel}}{V_f C_{p,f}} \quad (\text{C.22})$$

⇒ Caso seja considerada a influência das paredes dos tubos no comportamento dinâmico, tem-se 2 equações a mais:

Cálculo do volume de parede:

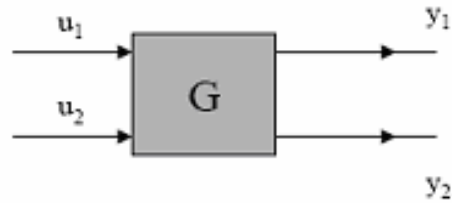
$$V_w = \frac{N_t L \left( \pi (D_t^2 - (D_t - 2 \delta_t)^2) \right)}{4 N} \quad (\text{C.23})$$

$$\frac{dT_w}{dt} = \frac{1}{r_w V_w C_{p,w}} \left( \frac{A_q}{N} h_q \Delta T_{ef,q} - \frac{A_f}{N} h_f \Delta T_{ef,f} \right) \quad (\text{C.24})$$

# **ANEXOS D:**

## **MATRIZ DE GANHOS RELATIVOS**

Dado um processo 2x2:



**Figura D.1:** Sistema MIMO 2x2.

*Fonte: a autora.*

Tem-se que:

$$y_1 = f_1(u_1, u_2) \quad \text{(D.1)}$$

$$y_2 = f_2(u_1, u_2). \quad \text{(D.2)}$$

Na vizinhança de um ponto de operação, pode-se escrever:

$$\Delta y_1 = \frac{\partial y_1}{\partial u_1} \Delta u_1 + \frac{\partial y_1}{\partial u_2} \Delta u_2 = K_{11} \Delta u_1 + K_{12} \Delta u_2 \quad \text{(D.3)}$$

$$\Delta y_2 = \frac{\partial y_2}{\partial u_1} \Delta u_1 + \frac{\partial y_2}{\partial u_2} \Delta u_2 = K_{21} \Delta u_1 + K_{22} \Delta u_2 \quad \text{(D.4)}$$

$$\text{Define-se: } \underline{\underline{K}} = \underline{\underline{G}}(0) \quad \text{(D.5)}$$

O ganho  $K_{ij}$  pode ser obtido de modelos matemáticos ou experimentos (pulso ou degrau) na planta:

$$K_{11} = \left. \frac{\Delta y_1}{\Delta u_1} \right|_{u_2} ; K_{21} = \left. \frac{\Delta y_2}{\Delta u_1} \right|_{u_2} \quad \text{(D.6)}$$

Definindo-se um segundo ganho:



$$a_{11} = \left. \frac{\Delta y_1}{\Delta u_1} \right|_{y_2} \quad (\text{D.7})$$

tem-se uma medida de como  $u_1$  afeta  $y_1$  se  $y_2$  estivesse sob controle perfeito (isto é, mantido constante).

A relação entre estes dois ganhos é, então, uma medida de como a segunda malha ( $y_2-u_2$ ) afeta a primeira malha:

$$I_{11} = \frac{K_{11}}{a_{11}} \quad (\text{D.8})$$

Comparando-se os  $I_{ij}$ , pode-se apontar qual o  $u_j$  que tem maior efeito sobre um dado  $y_i$ , e decidir-se sobre o melhor emparelhamento  $u_j-y_i$ .

Calculando-se todos os  $I_{ij}$  para o sistema 2x2:

$$\Delta y_1 = K_{11}\Delta u_1 + K_{12}\Delta u_2 \quad (\text{D.9})$$

$$\Delta y_2 = K_{21}\Delta u_1 + K_{22}\Delta u_2 \quad (\text{D.10})$$

Para controle perfeito:

$$\Delta y_2 = 0 = K_{21}\Delta u_1 + K_{22}\Delta u_2 \quad (\text{D.11})$$

$$\Delta u_2 = -\frac{K_{21}}{K_{22}}\Delta u_1 \quad (\text{D.12})$$

Substituindo na equação para  $y_1$ :

$$\Delta y_1 = (K_{11} - \frac{K_{12}K_{21}}{K_{22}})\Delta u_1 \text{ e } a_{11} = \frac{(K_{11} - \frac{K_{12}K_{21}}{K_{22}})\Delta u_1}{\Delta u_1} = \frac{K_{11}K_{22} - K_{12}K_{21}}{K_{22}} \quad (\text{D.13})$$

Logo:

$$I_{11} = \frac{K_{11}}{a_{11}} = \frac{K_{11}K_{22}}{K_{11}K_{22} - K_{12}K_{21}} \quad (\text{D.14})$$

Analogamente:

$$a_{12} = \left. \frac{\Delta y_1}{\Delta u_2} \right|_{y_1} = \frac{K_{12}K_{21} - K_{11}K_{22}}{K_{12}} \Rightarrow I_{21} = \frac{K_{12}K_{21}}{K_{12}K_{21} - K_{11}K_{22}} \quad (\text{D.15})$$

e

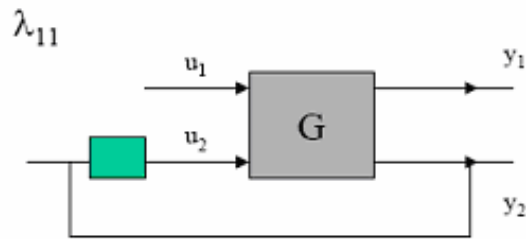
$$a_{22} = \left. \frac{\Delta y_2}{\Delta u_2} \right|_{y_1} = \frac{K_{11}K_{22} - K_{12}K_{21}}{K_{11}} \Rightarrow I_{22} = \frac{K_{11}K_{22}}{K_{11}K_{22} - K_{12}K_{21}} \quad (\text{D.16})$$

Em forma matricial, tem-se:

$$\Lambda = \begin{bmatrix} I_{11} & I_{12} \\ I_{21} & I_{22} \end{bmatrix} \quad (\text{D.17})$$

Esta é a Matriz de Ganhos Relativos ou RGA (Relative Gain Array).

A matriz de ganhos relativos é utilizada para capturar qualitativa e/ou quantitativamente as interações do processo. Fisicamente, cada elemento da RGA que relaciona uma variável controlada  $y_i$  e uma variável manipulada  $u_j$ , representa o quociente entre o ganho em cadeia aberta  $G_{ij}$  entre a variável de entrada  $j$  e a de saída  $i$ , e o ganho em cadeia fechada com todas as outras variáveis de saída e de entrada perfeitamente controladas.



**Figura D.2:** Esquema Representativo de cada elemento da RGA.

*Fonte: a autora.*

Substituindo-se as expressões na RGA observa-se que:

- ⇒ A soma dos termos de cada linha vale 1;
- ⇒ A soma dos termos de cada coluna vale 1.

Estas observações obtidas para um sistema 2x2 são gerais para qualquer sistema nxn:

$$\sum_{j=1}^n I_{ij} = 1 \quad (\text{D.18})$$

$$\sum_{i=1}^n I_{ij} = 1 \quad (\text{D.19})$$

Generalizando-se a definição para um sistema nxn:

$$I_{ij} = \frac{\left( \frac{\partial y_i}{\partial u_j} \right)_{uk \neq j}}{\left( \frac{\partial y_i}{\partial u_j} \right)_{yk \neq j}} \quad (\text{D.20})$$

Note-se, pela definição, que:

$$I_{ij} = \frac{\text{Ganho da controlada } i \text{ a variações na manipulada } j, \text{ com todas as demais malhas ABERTAS}}{\text{Ganho da controlada } i \text{ a variações na manipulada } j, \text{ com todas as demais malhas FECHADAS (controle perfeito)}} \quad (\text{D.21})$$

Assim,  $I_{ij}$  é uma medida de interação entre as malhas de controle em uma determinada configuração.

Para matrizes não-quadradas, o conceito é estendido com o uso de PSEUDOINVERSA.

A matriz RGA tem as seguintes propriedades e características:

- ⇒ Quanto mais próximo o elemento de +1 menor a interação entre as malhas;
- ⇒ Elementos com valores muito grandes em módulo indicam forte interação entre as malhas;
- ⇒ Elementos com valores muito grandes em módulo indicam que o sistema pode ser bastante sensível a mudanças nos parâmetros (pequena robustez);
- ⇒ Se algum elemento da diagonal principal for negativo o sistema pode apresentar instabilidade integral;
- ⇒ Recomenda-se que os elementos da diagonal sejam maiores que 0,5 e menores que 4.

Valores elevados dos elementos da RGA indicam baixo desempenho com todos os anéis de controle fechados ou instabilidade com os outros anéis abertos. E os valores baixos dos elementos da RGA indicam baixo desempenho com todos os outros anéis de controle abertos ou instabilidade com os outros anéis fechados.

### **Interpretação da RGA:**

- ⇒ Para  $I_{ij} = 1$ , o ganho em cadeia aberta é igual ao ganho em cadeia fechada. A variável controlada  $i$  não sofre interações de outras variáveis manipuladas. Mas

não se sabe nada acerca da interação entre as outras variáveis manipuladas e as outras controladas. No entanto, o emparelhamento da variável controlada  $i$  com a variável manipulada  $j$  é desejável;

⇒ **Para  $\lambda_{i,j} = 0$** , O ganho em cadeia aberta é zero. A variável manipulada,  $j$ , não tem efeito na variável controlada,  $i$ . Claro que  $u_j$  poderá influenciar outras variáveis controladas. Não faz sentido emparelhar a variável controlada  $i$  com a variável manipulada  $j$ ;

⇒ **Para  $0 < \lambda_{i,j} < 1$** , há interações dos outros anéis. Alguns ganhos do processo devem ter sinais opostos;

⇒ **Para  $\lambda_{i,j} < 0$** , os ganhos em cadeia aberta e em cadeia fechada têm sinais opostos ou efeitos opostos. A influência global dos outros anéis de controle está em oposição ao efeito de  $u_j$  em  $y_i$ . A interação indesejável é forte. O sistema multiloop pode ficar facilmente instável se abrir um dos seus anéis de controle;

⇒ **Para  $\lambda_{i,j} > 1$** , há interações dos outros anéis de controle, mas todos os ganhos do processo têm o mesmo sinal. Evitar emparelhar a variável controlada com a variável manipulada  $j$  se for muito maior que 1.

Notas sobre a RGA:

⇒ Grandes elementos na RGA em torno da frequência de quebra indicam plantas de difícil controle devido à sensibilidade a incertezas de entrada (evitar desacopladores ou controladores baseados em inversa do modelo da planta, G-1);

⇒ Se os sinais dos elementos da RGA mudam quando  $s$  varia de 0 a 1, significa que há pelo menos um zero no semi-plano direito;

- ⇒ Se os elementos de uma coluna forem muito menores que 1, considerar remover a entrada correspondente;
  
- ⇒ Se todos os elementos de uma linha forem pequenos, a saída correspondente não pode ser controlada.