

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO

SISTEMAS DE PROCESSOS QUÍMICOS E INFORMÁTICA

**DINÂMICA E CONTROLE DE UM FORNO
DE PIRÓLISE DE ETANO**

Autor: Gastón Bounous Rodríguez.

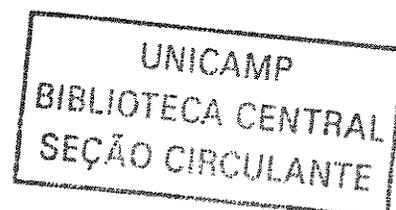
Orientador: Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira.

Co-orientador: Prof. Dr. Roger Josef Zemp.

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Campinas – São Paulo

Dezembro de 2003



UNIDADE	BC
Nº CHAMADA	T/UNICAMP
	B665d
V	EX
VALOR DO	67144
PROC.	16-P-117104
C	OR
PREÇO	R\$11,00
DATA	02/03/04
Nº CPD	

CNO1194790-5

Bib id 311490

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

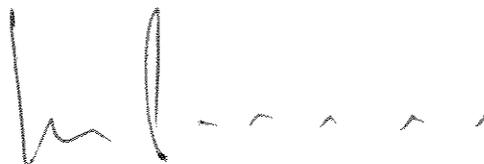
B665d Bounous Rodríguez, Gastón
Dinâmica e controle de um forno de pirólise de etano / Gastón Bounous Rodríguez. --Campinas, SP: [s.n.], 2003.

Orientadores: João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira e Roger Josef Zemp.

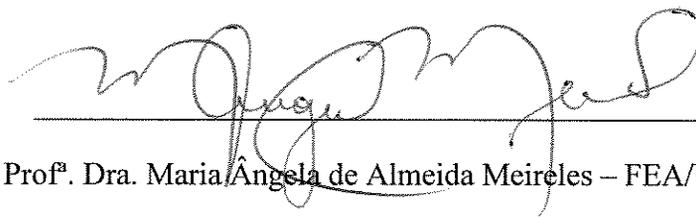
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Controle de processos químicos. 2. Simulação e modelagem. 3. Pirólise. 4. Dinâmica. I. Pereira, João Alexandre Ferreira da Rocha. II. Zemp, Roger Josef. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

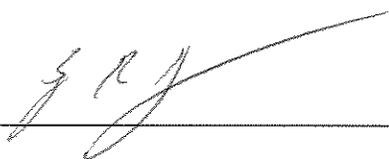
Dissertação de Mestrado defendida por Gastón Bounous Rodríguez e aprovada em
15 de dezembro de 2003 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira – Orientador

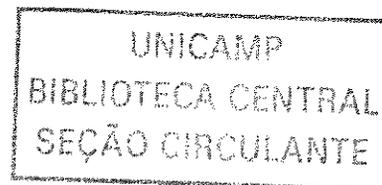


Prof.^a Dra. Maria Ângela de Almeida Meireles – FEA/UNICAMP



Prof. Dr. Sergio Persio Ravagnani – FEQ/UNICAMP

200303130



Esta versão corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida por Gastón Bounous Rodríguez e aprovada pela banca examinadora em 15 de dezembro de 2003.



Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira – Orientador



Prof. Dr. Roger Josef Zemp – Co-orientador

AGRADECIMENTOS:

Ao meu orientador, Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira, pela oportunidade propiciada e atenção dispensada.

Ao meu co-orientador, Prof. Dr. Roger Josef Zemp, pela ajuda, apoio e paciência.

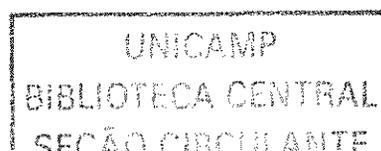
Aos meus pais, Walter e Maria Cristina, e irmãos, Daniel, Alicia e Álvaro, pelo apoio e carinho dados durante todos estes anos.

À Prof^a. Dr^a. Arislete Dantas de Aquino pelos conselhos e apoio constante.

Aos meus amigos cuja presença é fundamental em todas as etapas da vida, em especial a Pablo e Juan Manuel que mesmo longe sempre estão por perto e a Carolina pelo seu carinho, apoio e paciência incomensuráveis.

Aos funcionários e demais professores da FEQ.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.



RESUMO:

O etileno é um dos principais intermediários da indústria petroquímica, sendo que sua principal rota de obtenção industrial é através da pirólise de etano. A reação de pirólise é realizada em um forno que consiste num longo reator tubular colocado no interior de uma fornalha, sendo que a reação é rápida, altamente endotérmica e a distribuição de produtos é fortemente dependente das condições operacionais. O presente trabalho apresenta a modelagem fenomenológica do forno de pirólise de etano e uma estratégia para o controle do mesmo, utilizando o simulador desenvolvido.

A abordagem empregada consiste na resolução dos balanços transientes de massa, energia e queda de pressão no interior do reator tubular em conjunto com o balanço transiente de energia que descreve a transferência de calor da fornalha para o mesmo. O conjunto de equações diferenciais parciais obtido é resolvido mediante a aplicação do Método das Diferenças Finitas e de Runge-Kutta-Fehlberg em um programa computacional desenvolvido em linguagem Fortran. A simulação do modelo proposto permite obter e analisar a dinâmica do forno de pirólise de etano para diferentes perturbações, assim como os perfis de temperatura, conversão de etano, pressão e distribuição dos produtos ao longo do reator tubular. A seletividade do processo para o etileno, variável importante para a economia do mesmo, é analisada para diferentes condições operacionais, observando-se a dependência da mesma com a carga térmica fornecida a mistura reacional.

A estratégia de controle proposta para o forno de pirólise de etano, consiste em controlar a temperatura dos produtos efluentes do forno de pirólise, que na indústria é um importante indicador do seu funcionamento, atuando na vazão de combustível na fornalha. Inicialmente é utilizada uma técnica de controle convencional empregando-se um controlador PI digital. Em face aos resultados é proposta a aplicação da técnica de controle preditivo por matriz dinâmica (*“Dynamic Matrix Control”* – DMC). A influência dos parâmetros de sintonia no desempenho de ambos controladores é analisada, sintonizando-se os mesmo pelo método da integral do erro absoluto (IAE). Os comportamentos da variável controlada e da variável manipulada obtidos com os controladores PI e DMC propostos são comparados. Observa-se um melhor desempenho do controlador DMC, especialmente devido ao fato de implementar ações de controle menos severas que o controlador PI.

Palavras-chave: pirólise de etano, modelagem transiente, controle DMC

ABSTRACT:

Ethylene is one of the main intermediates of the petrochemical industry, being the ethane pyrolysis the main industrial route for its obtention. The pyrolysis reaction takes place in a furnace that consists of a long tubular reactor enclosed inside a combustion chamber, being fast, highly exothermic and whose products distribution is strongly dependent of the operational conditions. In the present work is developed a phenomenological modelling of the pyrolysis furnace and a control strategy for it, using the developed simulator.

The approach employed consists in the resolution of the transient mass, energy and pressure drop balances inside the tubular reactor along with the transient energy balance which describes the heat transfer between the combustion chamber and the reactor. The obtained set of partial differential equations is solved by the application of the Finite Differences Method and Runge-Kutta-Fehlberg using a developed computer program in Fortran. The simulation of the proposed model allows to obtain and analyse the furnace dynamic response to different loads, as well as the temperature, ethane conversion, pressure and products distribution profiles along the tubular reactor. The selectivity of the process to ethylene, which is an important variable for the process economy, is analyzed for different operational conditions, observing its dependence with the thermal load supplied to the reactional mixture.

The proposed control strategy for the pyrolysis furnace consists in controlling the temperature of the effluent stream from the furnace, which is an important industrial indicator of its performance, manipulating the fuel flow to the combustion chamber. Firstly, a conventional control technique is applied using a digital PI controller. Then, it is applied the predictive control technique known as Dynamic Matrix Control (DMC). The influence of the tuning parameters in the performance of both controllers is analyzed, tuning them using the integral of the absolute value of the error method (IAE). The behaviours of the controlled and manipulated variables obtained with the PI and DMC controllers are compared. A better performance of the DMC controller can be observed, especially due to the fact that it applies control actions less severe than the PI controller.

Keywords: ethane pyrolysis, transient modelling, DMC control.

SUMARIO:

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO 2 – PIRÓLISE DO ETANO	5
2.1 – INTRODUÇÃO.....	7
2.2 – CONSIDERAÇÕES TERMODINÂMICAS E CINÉTICAS.....	8
2.2.1 – Considerações termodinâmicas.....	8
2.2.2 – Considerações cinéticas.....	9
2.3 – DESCRIÇÃO DO PROCESSO INDUSTRIAL.....	12
2.3.1 – O forno de pirólise.....	13
2.4 – VARIÁVEIS OPERACIONAIS.....	17
2.4.1 – Temperatura.....	18
2.4.2 – Tempo de residência.....	21
2.4.3 – Pressão parcial dos hidrocarbonetos.....	23
2.5 – CONCLUSÃO.....	26
CAPÍTULO 3 – CONTROLE PREDITIVO POR MATRIZ DINÂMICA.....	29
3.1 – INTRODUÇÃO.....	31
3.2 – CONCEITO DE CONTROLE PREDITIVO.....	32
3.3 – MODELO DE CONVOLUÇÃO.....	33
3.4 – ALGORITMO DMC.....	35
3.4.1 – Predição simples.....	36
3.4.2 – Predição múltipla.....	37
3.5 – LEI DE CONTROLE.....	39
3.6 – PARÂMETROS DO CONTROLADOR (SINTONIA)	43
3.7 – CONCLUSÃO.....	45

CAPÍTULO 4 – FORNO DE PIRÓLISE. MODELAGEM DINÂMICA.....	47
4.1 – INTRODUÇÃO.....	49
4.2 – MODELO DO REATOR.....	49
4.2.1 – Balanço de massa transiente.....	49
4.2.2 – Balanço de energia transiente.....	53
4.2.3 – Perda de carga no reator.....	56
4.3 – MODELO DA FORNALHA.....	58
4.3.1 – Balanço de massa da combustão.....	58
4.3.2 – Balanço de energia transiente.....	60
4.4 – O PROGRAMA DE SIMULAÇÃO.....	61
4.4.1 – Fluxograma do programa.....	62
CAPÍTULO 5 – SIMULAÇÃO DO FORNO DE PIRÓLISE. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	67
5.1 – INTRODUÇÃO.....	69
5.2 – SISTEMA ESTUDADO.....	69
5.2.1 – Determinação do regime estacionário da fornalha.....	70
5.2.2 – Comportamento do forno de pirólise de etano.....	71
5.2.3 – Análise da seletividade em diferentes condições operacionais.....	76
5.2.4 – Dinâmica do forno de pirólise.....	77
5.3 – CONCLUSÃO.....	79
CAPÍTULO 6 – ESTRATÉGIA DE CONTROLE. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	81
6.1 – INTRODUÇÃO.....	83
6.2 – CONTROLE CONVENCIONAL.....	83
6.2.1 – Caracterização do processo.....	84
6.2.2 – Determinação e sintonia do controlador clássico.....	86

6.3 – CONTROLE POR MATRIZ DINÂMICA (DMC)	95
6.3.1 – Obtenção do modelo de convolução.....	95
6.3.2 – Sintonia do controlador DMC.....	96
6.4 – COMPARAÇÃO ENTRE OS CONTROLADORES DMC e PI.....	107
6.5 – CONCLUSÃO.....	110
CAPÍTULO 7 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	113
7.1 – CONCLUSÕES.....	115
7.2 – SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	117
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	119
ANEXO A – PROGRAMAS.....	127
ANEXO B – RESULTADOS DE SIMULAÇÕES.....	159

NOMENCLATURA:

Letras Latinas

- A - área de escoamento (m^2)
- a - coeficiente de resposta ao degrau no modelo de convolução
- A - matriz dinâmica formada pelas U primeiras colunas de A'
- A' - matriz dinâmica de controle
- C_i - concentração da espécie i ($kmol/m^3$)
- c_p - calor específico da mistura gasosa ($kJ/kmol K$)
- D_t - diâmetro da tubulação (m)
- E - erro entre a trajetória de referencia e o valor da variável controlada
- e - erro entre o "set-point" e a variável controlada no tempo k
- E_a - energia de ativação (kJ)
- f - fator de atrito de Fanning
- f - fator de supressão
- F - fluxo molar total ($kmol/m^2 s$)
- G - fluxo mássico total ($kg/m^2 s$)
- G° - entalpia livre de Gibbs no estado padrão ($kJ/kmol$)
- h - coeficiente de resposta ao impulso no modelo de convolução
- ΔH_j - entalpia de reação da reação j ($kJ/kmol$)
- H_c - poder calorífico do combustível
- H_r - entalpia de reação ($kJ/kmol$)
- I - matriz identidade
- J - função objetivo
- K - constante de equilíbrio
- k - constante de reação (s^{-1})

K_c – ganho do controlador ((kg/s) /°C)

K_p - constante de equilíbrio em termos das pressões parciais

K_p - ganho estático do processo (°C/(kg/s))

L - comprimento da serpentina (m)

\bar{M} - massa molecular da mistura gasosa (kg/kmol)

N - horizonte do processo

\dot{N} - vazão molar total (kmol/s)

P - pressão total (kPa)

P_j - vetor de projeção

Q - calor transferido pela parede lateral da tubulação (kJ/s m²)

r - raio da tubulação (m)

R - constante universal dos gases ideais (8,314 kJ/ kmol.K)

r - trajetória de referência

r_i - taxa de reação para o reagente i (kmol/m³ s)

r_j - taxa de reação da reação j (kmol/m³ s)

S_m - somatório das ações de controle previamente implementadas ao sistema

Δt – tempo de amostragem (s)

T - temperatura absoluta (K)

t - tempo (s)

T_a - intervalo de amostragem

T_{ar} - temperatura de entrada do ar (K)

T_g - temperatura de saída dos gases de combustão (K)

u - variável manipulada

u - velocidade superficial na direção axial (m/s)

U - horizonte de controle

V - horizonte de predição
W₁ - matriz peso para os erros preditos
W₂ - matriz peso para as ações de controle calculadas
X_A - conversão do componente A
Y - eficiência da fornalha
Y - fração molar em fase gasosa
ŷ - valor predito da variável controlada
y - variável controlada
z - comprimento (m)

Letras gregas

θ - tempo de residência (s)
Δ - variação
θ_d - tempo morto (s)
ρ - densidade da mistura gasosa (kg/m³)
τ - constante de tempo (s)
τ_I - constante de tempo integral (s)
α - constante do filtro
μ - viscosidade (kg/m.s)
ω_{ar} - vazão de ar (kg/s)
ω_c - vazão de combustível (kg/s)
ω - vazão de etano (kg/s)

Subscritos

ext - externo
i - do componente i

k - instante de tempo

max - valor máximo

Superescritos

c - valor corrigido

d - valor desejado

T - transposta

Abreviaturas

Conv - conversão

equiv - equivalentes

insat - insaturados

Int - parte inteira de um número

prod séc - produtos secundários

sat - saturados

Selet - seletividade

vol - volume

Siglas

AE - Abordagem ao Equilíbrio

DMC – Controle por Matriz Dinâmica (“*Dynamic Matrix Control*”)

IAE - Integral do valor Absoluto do Erro

PI – controlador Proporcional Integral

PID – controlador Proporcional Integral Derivativo

RPP - Razão de Pressões Parciais

Capítulo 1

Introdução

A pirólise de etano é a principal rota industrial para a obtenção do etileno. Deste fato, é que surge a importância deste processo, dado que o etileno é o principal intermediário da indústria química. Sendo utilizado direta ou indiretamente, através dos seus derivados, na fabricação de um grande número de derivados orgânicos, empregados por diversas áreas industriais.

O processo de pirólise do etano consiste no craqueamento térmico do etano na presença de vapor de água, obtendo-se etileno e outros produtos insaturados cuja distribuição depende das condições operacionais. Este processo possui um elevado grau de complexidade devido à forte interação existente entre as variáveis operacionais, especialmente a temperatura, e os produtos obtidos, além de ter-se uma grande quantidade de reações existentes. A conversão e a seletividade do processo são fortemente modificadas variando-se as condições operacionais, especialmente a carga térmica fornecida à mistura reacional. Estas duas variáveis são sumamente importantes para a viabilidade econômica do processo, devido às mesmas determinarem a quantidade de produto desejado obtido e a maior ou menor dificuldade para a separação do mesmo dos produtos secundários nas etapas de purificação posteriores.

Em vista disso, resulta muito importante a aplicação de uma técnica de controle que permita manter as condições operacionais nas condições desejadas. Com o avanço dos microcomputadores e a diminuição do preço do mesmo, estes tornaram-se ferramentas importantes no desenvolvimento de controladores. Fato que tem tornado corrente a aplicação de versões digitais, ou seja, discretas no tempo, de controladores clássicos do tipo PID, assim como a aplicação de técnicas mais avançadas como o controle preditivo com modelo.

Dentro dos controladores preditivos, o algoritmo mais utilizado atualmente na indústria de processos químicos é o controle por matriz dinâmica (DMC), o qual foi desenvolvido por CUTLER e RAMAKER (1980) no início da década de oitenta dentro da Shell. O mesmo consiste na aplicação do método dos mínimos quadrados para minimizar a distância entre a trajetória prevista para a variável controlada e o seu valor de referência. A predição das saídas do sistema é feita utilizando um modelo interno que inclui a dinâmica do processo.

O presente trabalho pretende analisar o comportamento do forno de pirólise de etano, analisando a influência do fluxo de calor fornecido à mistura reacional na conversão e seletividade do processo, assim como a análise da dinâmica do forno para uma perturbação na vazão de combustível na fornalha. Visa-se, também, implementar uma estratégia de controle que permita controlar a temperatura da mistura reacional efluente do forno atuando-se na vazão de combustível na fornalha. Um motivo para se escolher a temperatura de saída do forno de pirólise como a variável controlada é a mesma ser considerada a nível industrial um importante indicador da operação do forno (CHAUVEL e LEFEBVRE, 1986).

Para se conseguir os objetivos propostos no parágrafo anterior desenvolveu-se um modelo matemático transiente do forno de pirólise de etano, baseado nos fenômenos químicos e físicos presentes no mesmo. Ao mesmo aplicou-se primeiramente uma estratégia de controle clássico do tipo PI digital, e logo aplicou-se uma estratégia de controle preditivo do tipo DMC. Os desempenhos obtidos com ambos controladores foram comparados.

Capítulo 2

Pirólise do Etano

Análise da literatura

2.1 – INTRODUÇÃO

A cada ano são necessárias maiores quantidades de hidrocarbonetos para serem utilizados como matérias-primas das indústrias produtoras de plásticos, fibras sintéticas, borrachas sintéticas e outros derivados orgânicos. No entanto, o gás natural assim como os produtos obtidos do primeiro fracionamento do petróleo consistem principalmente de compostos saturados com pouca reatividade. Portanto, as indústrias petroquímicas devem produzir compostos insaturados cuja reatividade é mais elevada como acetileno, etileno, propileno e butadieno.

A importância do etileno pode ser medida pelo seu volume de produção e o número de derivados orgânicos sintetizados a partir dele. Segundo NATH e ALZEIN (2000) o etileno é o composto orgânico com maior volume de produção industrial, sendo esta no final da década dos 90 de aproximadamente 180 bilhões de lbs/ano. Podemos, ainda, citar como derivados diretos dele: polietileno, óxido de etileno, álcool etílico, dibrometo de etileno, cloreto de etileno, etil benzeno, éter dietílico. Há, também, os derivados indiretos como: etileno glicol, ácido acético, estireno, acetaldeído, cloreto de vinila, etanolamina, acetato de vinila (ZDONIK, GREEN e HALLEE, 1966 b). Sendo que não se deve esquecer que muitos dos compostos citados são parte fundamental na produção de vários outros.

Inicialmente o etileno era produzido industrialmente pela liquefação e fracionamento dos gases do forno de coque, por desidratação do álcool etílico ou ainda pela hidrogenação parcial do acetileno. Estas rotas de produção, segundo CHAUVEL e LEFEBVRE (1986) foram utilizadas em diversos países até o fim da segunda guerra mundial, momento no qual a pirólise de frações de petróleo, como gases leves e naftas, começa a ser adotada. Em 1920, a Union Carbide and Carbon Co. construiu uma planta piloto operando com etano e propano. Mas somente em 1946 foi que a Shell Chemical construiu o primeiro complexo petroquímico utilizando gases de refinaria como alimentação da pirólise. Na década seguinte a 1956 a produção de etileno se transformou num negócio global com um crescimento nesse período de 300% nos Estados Unidos e de 1000% na Europa ocidental (ZDONIK, GREEN e HALLEE, 1966 a).

O craqueamento por vapor consiste na pirólise de hidrocarbonetos saturados do gás natural ou de frações do petróleo, na presença de vapor. Ele produz principalmente

etileno, assim como também propileno e, dependendo da alimentação e das condições operacionais, outros produtos do grupo do C4 rico em butadieno e dos C5+ incluindo aromáticos, especialmente benzeno.

2.2 – CONSIDERAÇÕES TERMODINÂMICAS E CINÉTICAS

2.2.1 – Considerações termodinâmicas

A Figura 2.1 mostra a variação da energia livre de formação de hidrocarbonetos saturados e insaturados. Na mesma podemos observar que os hidrocarbonetos insaturados são estáveis em relação aos saturados unicamente a temperaturas relativamente elevadas. Isto é devido a que a estabilidade do hidrocarboneto insaturado como produto, é tanto mais favorecida quanto mais negativa for a diferença $\Delta G^{\circ}_{\text{insat}} - \Delta G^{\circ}_{\text{sat}}$. No caso do etileno sendo produzido a partir do etano, observa-se na figura que sua produção será possível em temperaturas acima dos 750 °C.

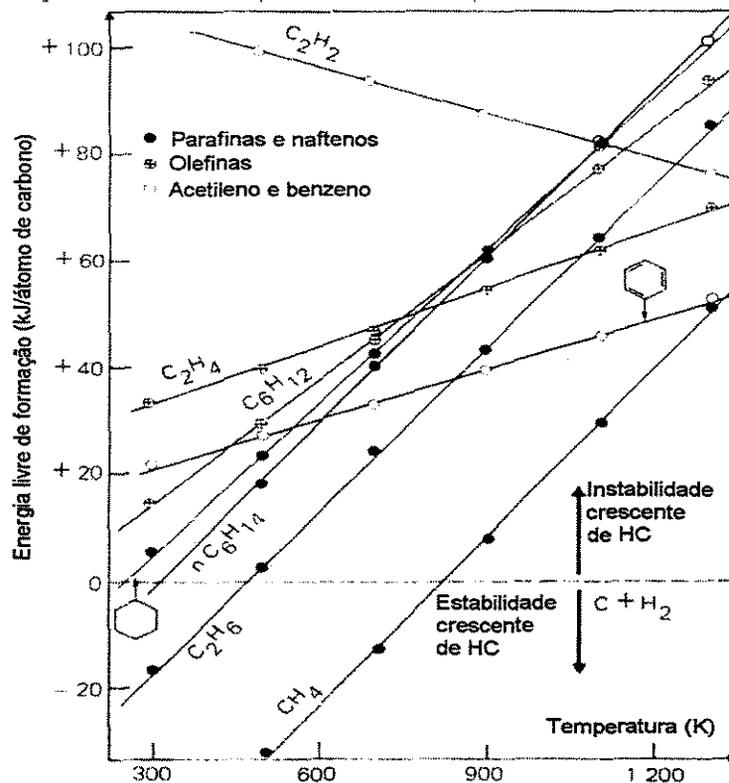
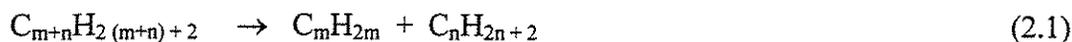


Fig. 2.1: Estabilidade termodinâmica de hidrocarbonetos (CHAUVEL e LEFEBVRE, 1986).

A molécula de um hidrocarboneto saturado, devido a sua simplicidade, pode quando ativada termicamente sofrer unicamente a quebra de uma ligação C-C ou C-H. As reações químicas correspondentes às cisões das ligações C-C e C-H são mostradas nas expressões 2.1 e 2.2 respectivamente. Estas reações são altamente endotérmicas e resultam em um aumento no número de moléculas.

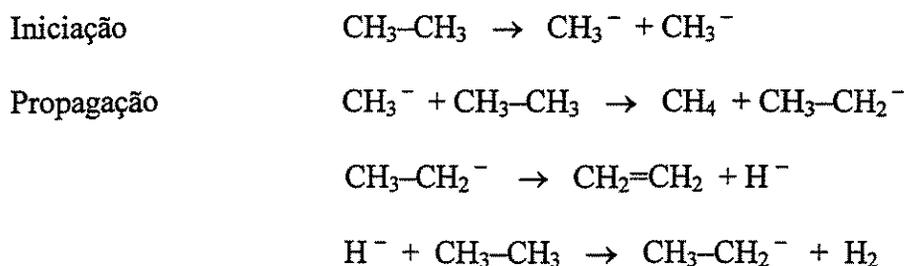


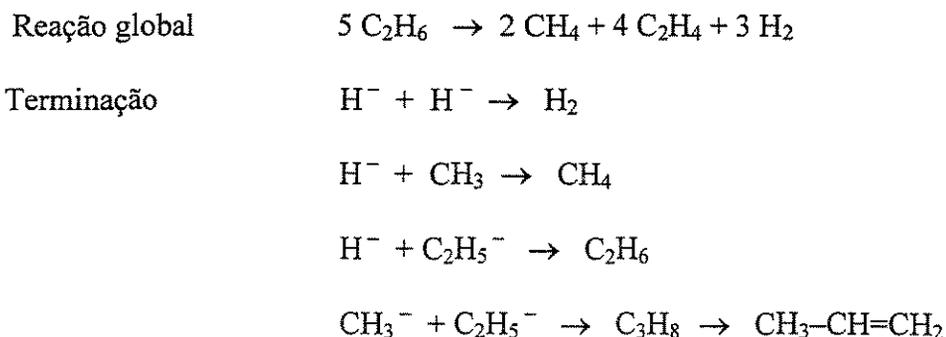
As energias das ligações C-C e C-H são de 345 kJ/mol e 413 kJ/mol respectivamente, portanto, a pirólise de hidrocarbonetos saturados deve começar com a quebra da ligação C-C de menor energia.

As características apresentadas acima mostram que a pirólise de hidrocarbonetos saturados, portanto, é favorecida termodinamicamente a alta temperatura e baixa pressão.

2.2.2 – Considerações cinéticas

Em 1930 F. O. Rice estabeleceu que o mecanismo da pirólise de hidrocarbonetos é dado pela formação e conseqüente reação de radicais livres (ZDONIK, GREEN e HALLE, 1967a). A pirólise do etano fornece a exemplificação mais simples do mecanismo por radical livre. A reação começa pela cisão da ligação C-C dando origem a dois radicais livres metila que atacam uma nova molécula de etano, iniciando assim a reação em cadeia cujas etapas são mostradas a continuação.





Quando se realiza a alimentação com hidrocarbonetos de cadeia carbônica maior existem mais possibilidades de quebra de ligação. Portanto, a variedade de produtos formados é maior e a distribuição dos mesmos é fortemente dependente das condições operacionais. Os produtos produzidos inicialmente na pirólise, como hidrogênio, metano, etileno e propileno, podem sofrer novas reações de hidrogenação ou desidrogenação aumentando ainda mais a complexidade do sistema reacional. Reações de condensação podem ainda gerar ciclenos e aromáticos que mediante policondensação levam à formação de coque. Como a formação de coque é indesejada e a mesma acontece a temperaturas acima dos 900 °C a 1000 °C, deve se adotar um tempo de residência pequeno na realização da pirólise.

A quebra de ligação C-C é determinante na taxa de reação, ZDONIK, GREEN e HALLEE (1967b) sugerem que a pirólise pode ser catalisada pela adição de radicais livres vindos de fontes externas.

A reação de pirólise de um hidrocarboneto individual na fase vapor pode ser considerada como de primeira ordem, e representada pela seguinte equação na forma integrada (ZDONIK, GREEN e HALLEE, 1967a).

$$k t = 2,3 \log \left(\frac{1}{1 - X_A} \right) \quad (2.3)$$

A constante da taxa pode ser calculada pela equação de Arrhenius,

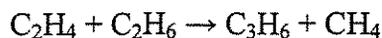
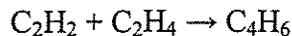
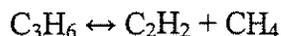
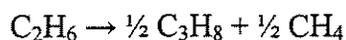
$$k = A e^{-E_A/RT} \quad (2.4)$$

que pode ser escrita da seguinte forma

$$\log k = B - (C/T) \quad (2.5)$$

Estes autores apresentam os valores de B, C e E_A para vários hidrocarbonetos importantes.

Segundo SUNDARAM e FROMENT (1976) mesmo o mecanismo da pirólise sendo por radicais livres, para efeitos de modelagem e desenho deve-se adotar um dos chamados esquemas moleculares simplificados. Desta maneira, pode-se obter a distribuição dos produtos da pirólise sem as dificuldades matemáticas das equações via radicais livres. Para o caso da pirólise de etano estes autores propõem, como modelo molecular simplificado, as equações cinéticas a seguir, sendo todas elas consideradas elementares.



Os principais produtos da pirólise são hidrogênio, metano e etileno. Em menores quantidades estão presentes acetileno, propano, propileno aromáticos e compostos C_4 e C_5 .

As considerações termodinâmicas e cinéticas analisadas anteriormente impõem alguns requerimentos nas condições de operação industrial, como:

- Um considerável fornecimento de calor;
- Limitação da pressão parcial do hidrocarboneto no reator;
- Utilização de um tempo de residência pequeno;
- Resfriamento efetivo imediatamente após a saída do reator para evitar modificações subseqüentes.

2.3 – DESCRIÇÃO DO PROCESSO INDUSTRIAL

Industrialmente, a técnica mais utilizada na pirólise consiste em passar uma mistura de hidrocarbonetos e vapor no interior de tubos colocados numa fornalha. A temperatura da mistura reacional é rapidamente elevada até o valor necessário para acontecer a pirólise, permitindo a obtenção dos produtos que na saída do reator são rapidamente resfriados e a continuação separados. O coque que se deposita no interior dos tubos deve ser periodicamente removido por meio de combustão controlada.

PICCIOTTI (1997a) afirma que o craqueamento com vapor, apesar dos vários novos processos desenvolvidos para a produção de etileno, continua sendo o modo mais vantajoso economicamente. Em neste e num outro trabalho (PICCIOTTI, 1997b), este autor apresenta várias das novas alternativas de produção de etileno, como a dimerização oxidativa do metano ou a desidratação do metanol, e aponta algumas tendências para o futuro, como o desenvolvimento de sistemas de pirólise catalítica.

A unidade industrial completa de craqueamento com vapor consta de duas seções. A primeira, a chamada seção quente onde se situa o forno de pirólise e é realizado o primeiro condicionamento do efluente do mesmo. A segunda, a chamada seção fria onde se realiza a separação e purificação dos produtos.

A Figura 2.2 mostra o diagrama simplificado da seção quente do processo para uma alimentação com nafta, que é análogo ao da pirólise utilizando etano. O hidrocarboneto é alimentado no forno pela zona de convecção (parte 1) onde é pré-aquecido e logo misturado com o vapor, que também é pré-aquecido nesta seção. A mistura passa, então, através da zona de radiação (parte 2) onde a temperatura é elevada rapidamente atingindo-se assim o valor necessário para que a pirólise aconteça. Assim que o efluente deixa o forno o mesmo é rapidamente resfriado para evitar que a reação prossiga além do ponto desejado. Este resfriamento é feito em duas etapas: inicialmente de modo indireto com água (parte 3), seguido por um resfriamento direto utilizando o reciclo dos componentes mais pesados obtidos na pirólise (parte 4 e 5). A distância entre a saída do forno e o resfriamento deve ser pequena para impedir um tempo de residência adicional. Uma coluna (parte 8) faz a primeira separação dos produtos. Os produtos leves, após serem comprimidos (parte 9) são encaminhados para a seção fria da unidade industrial.

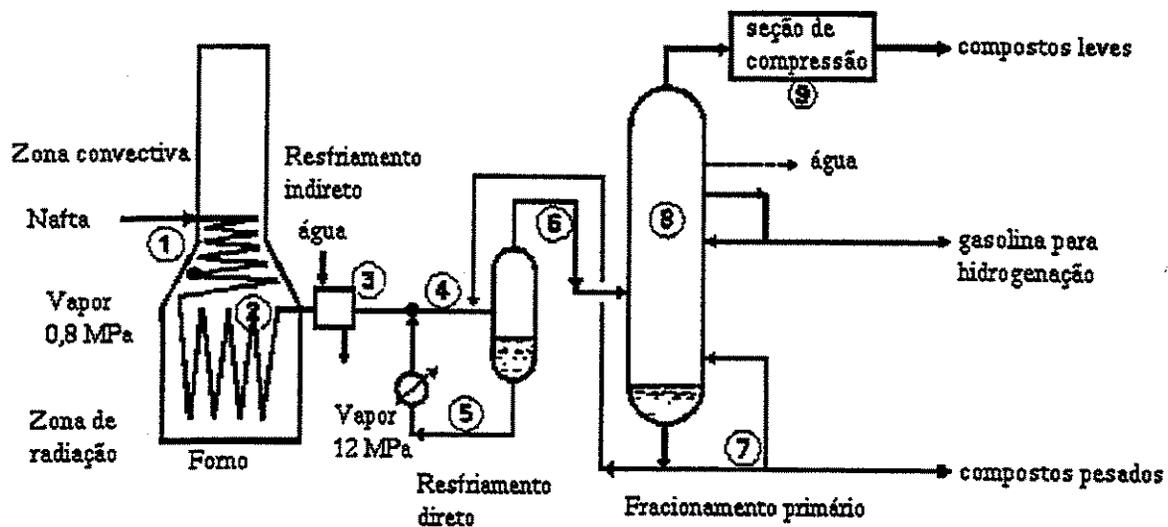


Fig. 2.2: Unidade de craqueamento com vapor
(CHAUVEL e LEFEBVRE, 1986).

A descrição da seção fria escapa ao escopo desta tese, mas uma análise detalhada da mesma pode ser encontrada na literatura em trabalhos como os de ZDONIK, GREEN e HALLEE (1969b, 1970a, 1970b).

2.3.1 – O forno de pirólise

O forno de pirólise é projetado para fornecer um rápido aumento da temperatura da alimentação, uma elevada temperatura de saída e um tempo de residência bem pequeno (0,1 - 1,0 s). Sendo que o desenho do mesmo é de vital importância para os resultados que serão obtidos no processo.

Inicialmente, os tubos no interior do forno de pirólise eram colocados nas paredes do mesmo. A primeira mudança no desenho, introduzida após 1950, foi a re-acomodação dos tubos em bancos horizontais no meio do interior do forno, recebendo o calor proveniente de queimadores situados nas paredes. Após 1960, com a idéia de reduzir o tempo de residência e aumentar a temperatura de saída dos produtos, os tubos no interior do forno foram colocados verticalmente; arranjo que resulta em um menor stress mecânico

devido à deformação térmica (ZDONIK, GREEN e HALLEE 1969a). A Figura 2.3 mostra os principais arranjos de tubos utilizados.

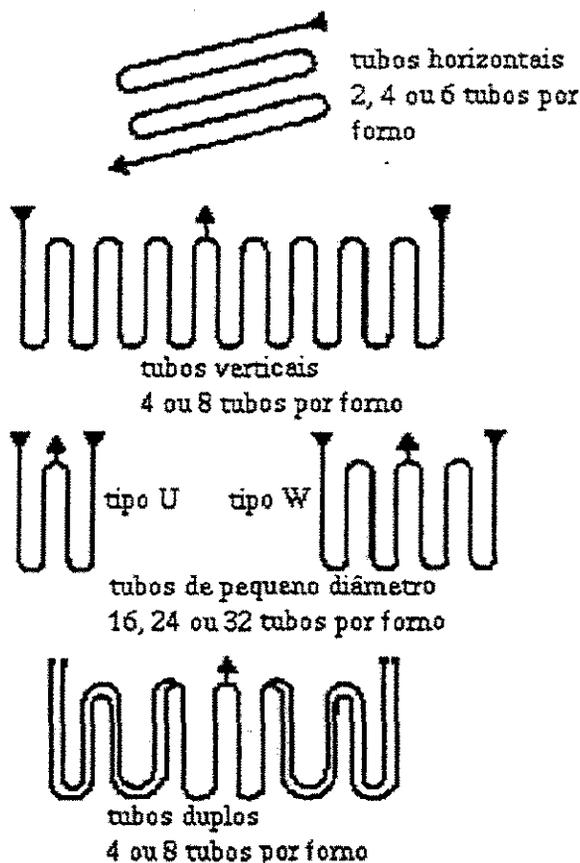


Fig. 2.3: Projetos dos tubos de pirólise
(CHAUVEL e LEFEBVRE, 1986).

A Figura 2.4 mostra dois modelos diferentes de fornos de pirólise. O diagrama (a) mostra um forno com os tubos dispostos horizontalmente, enquanto que o diagrama (b) apresenta um forno de duas celas com os tubos arranjados verticalmente. A vantagem desta divisão em duas celas radica no fato de se ter uma diminuição nas perdas de calor pelo uso de uma parede comum. As paredes são construídas de material refratário que suporta temperaturas de até 1700 – 1800 °C. Para se evitar uma chama direta sobre os tubos, o calor é fornecido por queimadores radiantes que aquecem os refratários utilizando como combustível sub-produtos da pirólise, principalmente o metano. O perfil de temperatura da mistura reacional no interior dos tubos é ajustado regulando a intensidade de calor fornecido pelos queimadores.

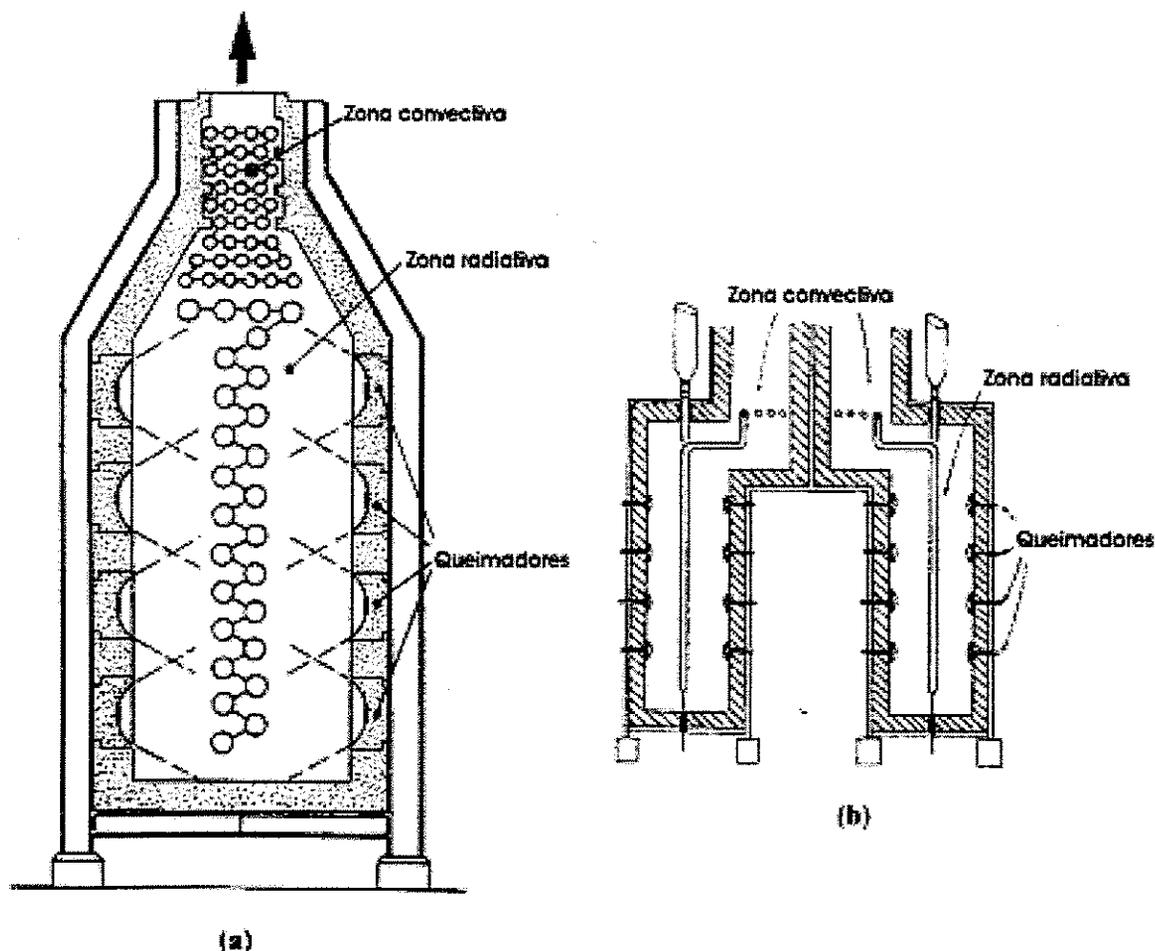


Fig. 2.4: Dois modelos diferentes de fornos de pirólise
(CHAUVEL e LEFEBVRE, 1986).

Os tubos do forno de pirólise de etano são fabricados com ligas metálicas de excelente resistência contra oxidação e deformação em altas temperaturas. VELENYI, SONG e FAGLEY (1991) afirmam que estas ligas apresentam o problema inerente de promover a deposição de carbono na superfície dos tubos, realizando a comparação entre o comportamento de duas ligas diferentes.

A deposição de coque diminui a transferência de calor para a mistura reacional, fazendo-se necessário aumentar a temperatura externa do tubo. A Figura 2.5 mostra o perfil de temperatura no caso de um tubo limpo e de um tubo impregnado com coque, onde pode se observar claramente a necessidade do aumento de temperatura mencionado. KINNEY e DELBEL (1954) afirmam que uma vez que a camada de coque se deposita, a mesma funciona como catalisador para as reações de desidrogenação que a formam. SUNDARAM,

VAN DAMME e FROMENT (1981) estudaram a deposição de coque na pirólise de etano, apresentando um mecanismo para sua cinética. Estes autores, sugerem como critérios para a parada periódica necessária para a remoção do coque um aumento excessivo na temperatura da parede externa dos tubos, ou um aumento excessivo da pressão interna nos mesmos.

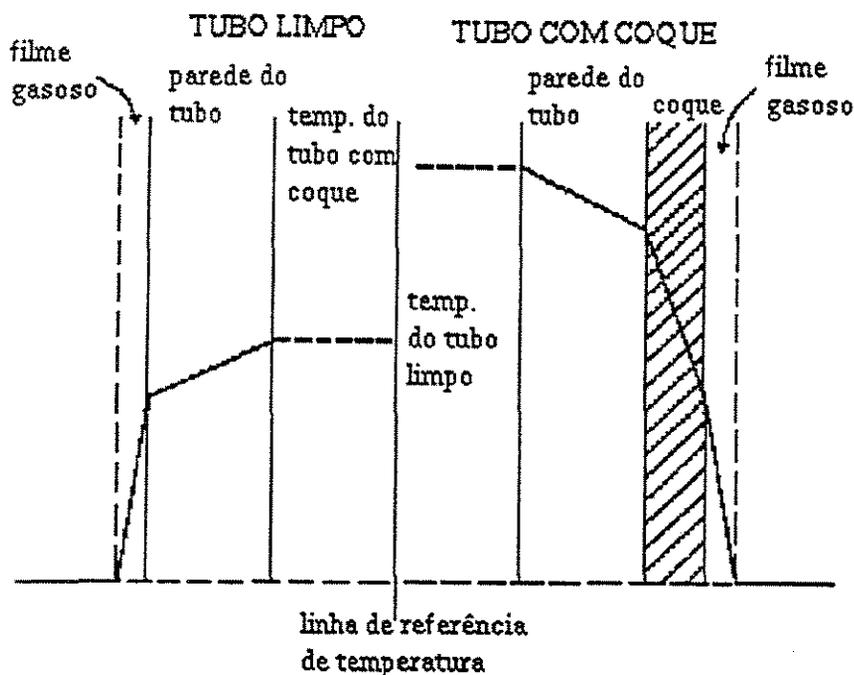


Fig. 2.5: Perfis de temperatura em um tubo limpo e em um tubo com incrustações de coque (CHAMBERS e POTTER, 1974).

ZDONIK, GREEN e HALLEE (1969a) citam alguns itens que devem ser otimizados no projeto e operação de um forno de pirólise:

- Projetar um número de tubos em U em cada forno de modo a se obter o número ótimo de fornos para o tamanho da planta;
- Acomodar as variações antecipadas na quantidade e composição da alimentação;
- Trabalhar de maneira que permita obter um alto rendimento com um alto grau de seletividade das olefinas desejadas, mantendo os produtos secundários em quantidades mínimas;

- Operar da forma mais contínua e econômica possível, e condições de longos períodos entre duas paradas sucessivas para retirada do coque incrustado;
- Permitir uma flexibilidade suficiente para acomodar possíveis mudanças na distribuição desejada dos produtos;
- Prover o aquecimento com combustíveis disponíveis da própria planta, tentando maximizar a eficiência térmica;
- Realizar um projeto que facilite a operação e manutenção da planta.

2.4 – VARIÁVEIS OPERACIONAIS

A produção de etileno e a distribuição dos produtos em um forno de pirólise são muito dependentes das condições operacionais do mesmo. As variáveis principais de operação são a temperatura, que define o grau de ativação do sistema, o tempo de residência, que evita a ocorrência de reações indesejadas posteriores, e a pressão e a razão entre vapor e etano, que regulam a pressão parcial dos hidrocarbonetos.

Além destas variáveis operacionais, um outro fator sumamente importante na distribuição dos produtos obtidos, e até no projeto da planta, é o hidrocarboneto, ou mistura destes, utilizado na alimentação da pirólise. A variedade de hidrocarbonetos que pode ser utilizada com este fim varia desde compostos saturados leves como etano, propano ou a mistura de ambos, até frações mais pesadas do petróleo como nafta e gas oil. MURPHY, CARROL e KLONOWSKI (1997) analisam a distribuição de produtos para a alimentação com alguns hidrocarbonetos específicos. ZDONIK, GREEN e HALLEE (1966c) apresentam os resultados obtidos na pirólise alimentada com os hidrocarbonetos mais utilizados industrialmente, etano, propano, butano, nafta e gas oil. A Tabela 2.1 apresenta a distribuição dos produtos obtida na pirólise destes hidrocarbonetos. Na mesma podemos observar que a alimentação com etano puro é uma das mais desejáveis devido à alta produção de etileno com quantidades mínimas de subprodutos. O uso de algum outro hidrocarboneto na alimentação é desejável quando se tem interesse econômico em algum outro produto além do etileno, especialmente o propileno, e o investimento adicional necessário para realizar as separações é viável economicamente.

Tabela 2.1: Influência da alimentação no craqueamento com vapor

Produto	Alimentação (produto puro)			
	Etano	Propano	Nafta (média)	Gas Oil (vácuo)
Rendimento (% massa)				
Hidrogênio (95% vol)	8,8	2,3	1,5	0,8
Metano	6,3	27,5	17,2	8,8
Etileno	77,8	42,0	33,6	20,5
Propileno	2,8	16,8	15,6	14,0
Butadieno	1,9	3,0	4,5	5,3
Otros C4	0,7	1,3	4,2	6,3
C5 - 200 Gasolina	1,7	6,6	18,7	19,3
Benzeno	0,9	2,5	6,7	3,7
Tolueno	0,1	0,5	3,4	2,9
Aromáticos C8	-	-	1,8	1,9
Não aromáticos	0,7	3,6	6,8	10,8
Fuel Oil	-	0,5	4,7	25,0

(CHAUVEL e LEFEBVRE, 1986)

2.4.1 – Temperatura

A temperatura varia ao longo do tubo num forno de pirólise de etano conforme mostra a Figura 2.6. Na mesma, são mostrados os perfis obtidos para três temperaturas de saída diferentes (em °C), e o comprimento do tubo é apresentado de forma indireta pelo número de tubos em U. A mudança na inclinação dos perfis aproximadamente a 700°C indica o início das reações de craqueamento, sendo que a seção anterior do tubo é utilizada para elevar a temperatura até o mínimo valor requerido pelas características termodinâmicas e cinéticas do processo. Após os 700 °C como a reação é endotérmica o aquecimento da mistura reacional é menor e, portanto, o perfil tem uma inclinação menor. Na indústria, a temperatura de saída do forno é considerada um importante indicador da operação do mesmo, sendo que na pirólise de etano deve se situar entre 800 e 850 °C.

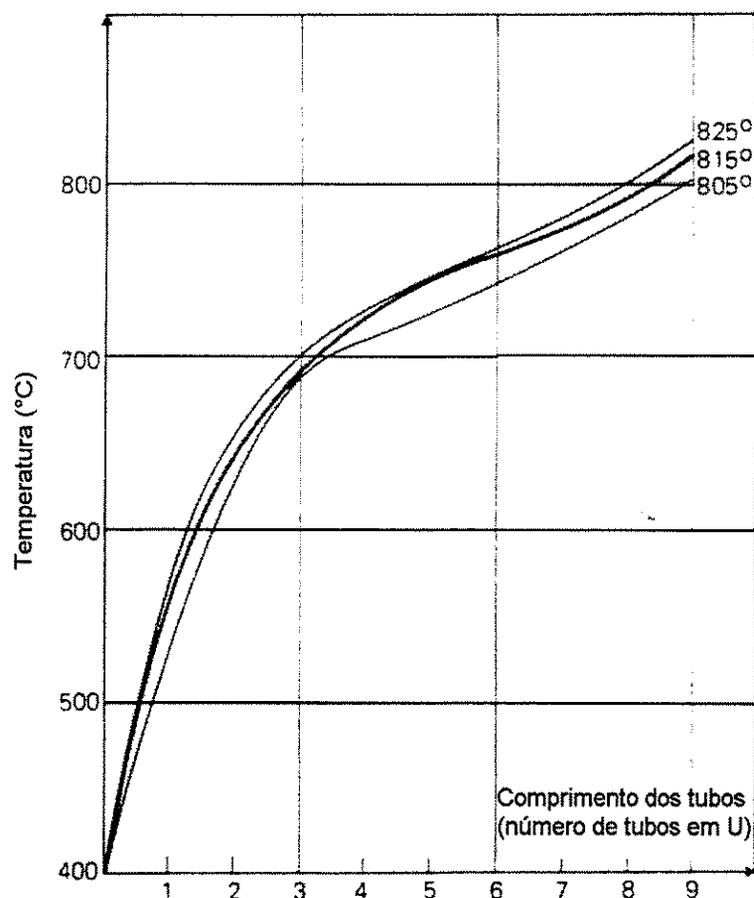


Fig. 2.6: Perfil de temperatura (CHAUVEL e LEFEBVRE, 1986).

ZDONIK, GREEN e HALLEE (1968a) afirmam que a temperatura influencia na distribuição dos produtos, no equilíbrio termodinâmico e na cinética da pirólise, sendo fundamental na conversão e rendimentos relativos obtidos no processo.

Após a etapa inicial de formação do radical livre pela quebra da ligação C-C, a reação em cadeia prossegue pela remoção de um hidrogênio de uma molécula de reagente. Os hidrogênios situados em carbonos primários, secundários ou terciários possuem diferentes reatividades. O hidrogênio do carbono primário possui a ligação C-H mais forte, e portanto a menor reatividade, e o do carbono terciário a ligação mais fraca. A posição do hidrogênio influi no produto formado. Por exemplo, considerando o propano, atacando-se o hidrogênio no carbono primário o radical propila formado libera um radical metila e realiza uma dupla ligação com as valências livres, formando etileno. No entanto, atacando-se o hidrogênio no carbono secundário o radical isopropila formado libera mais um hidrogênio e

com as valências livres realiza uma dupla ligação formando propileno. ZDONIK, GREEN e HALLEE (1967c) afirmam que a probabilidade de cada tipo de hidrogênio ser atacado é dada pelo produto entre a reatividade relativa do hidrogênio e o número de hidrogênios de cada tipo presentes. A Tabela 2.2 mostra a influência da temperatura na reatividade relativa de cada tipo de hidrogênio e, portanto, na distribuição de produtos.

Tabela 2.2: Influência da alimentação no craqueamento com vapor

Temperatura (°C)	Reatividade relativa		
	Primário	Secundário	Terciário
300	1	3,0	33
600	1	2,0	10
1000	1	1,6	5

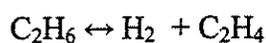
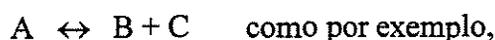
(ZDONIK, GREEN e HALLEE, 1967c)

ZDONIK, GREEN e HALLEE (1968a) avaliam, também a influência da temperatura por meio da sua relação com a constante de equilíbrio da reação considerada, levando em conta a qualidade de endo ou exotermia da mesma. A constante de equilíbrio varia com a temperatura de acordo com a equação de Van't Hoff

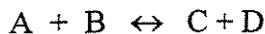
$$\frac{d(\ln K)}{dt} = \frac{\Delta H_r}{RT^2} \rightarrow \log K = \left(\frac{\Delta H_r}{2,3RT} \right) + constante \quad (2.6)$$

Pode ser observado na equação (2.6) que sendo a reação endotérmica um aumento da temperatura aumenta a constante de equilíbrio, deslocando o equilíbrio no sentido dos produtos. Por outra parte, se a reação é exotérmica um aumento na temperatura diminui a constante de equilíbrio.

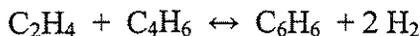
A maioria das olefinas obtidas na pirólise são formadas em reações altamente endotérmicas, portanto suas constantes de equilíbrio aumentam rapidamente com um incremento da temperatura, do tipo



Outros tipos de reações encontradas na pirólise são as bimoleculares do tipo



Estas não tem uma regra no seu comportamento quanto a serem endo ou exotérmicas, podendo até serem termicamente neutras. A obtenção de aromáticos segue este tipo de reação como, por exemplo



Esta reação é altamente exotérmica, portanto espera-se que um aumento da temperatura iniba a formação de aromáticos. No entanto, a 925 °C sua constante de equilíbrio possui um elevado valor, indicando um deslocamento na direção da obtenção do aromático. Observa-se que esta reação também conta com uma elevada taxa de reação que explica o favorecimento da formação do aromático por aspectos cinéticos mais do que termodinâmicos.

2.4.2 – Tempo de residência

O conceito de tempo de residência para casos como o do forno de pirólise de etano, aonde existe um grande gradiente de temperatura, é difícil de definir. A solução é definir um tempo equivalente, que é o tempo de residência necessário para atingir a mesma conversão em um forno isotérmico na temperatura de saída.

A conversão X_A relaciona-se com o tempo de residência θ segundo a equação,

$$\ln \frac{1}{1 - X_A} = k \theta \quad (2.7)$$

sendo k a constante da taxa de reação, que na presença de um gradiente de temperatura varia de acordo com a lei de Arrhenius.

$$k = A e^{-E_a/RT} \quad (2.8)$$

Em estas condições,

$$\ln \frac{1}{1 - X_A} = \int_0^{\theta} k dt = \int_0^{\theta} A e^{-E_a/RT} dt \quad (2.9)$$

onde θ é o tempo de residência entre a entrada do forno e a seção transversal onde a mistura reacional tem uma temperatura T .

O tempo de residência equivalente θ_{equiv} para o forno isotérmico operando na temperatura final T_f , cuja taxa de reação k_f na temperatura final é dada por $k_f = A e^{-E_a/RT_f}$, é dado pela equação

$$\ln \frac{1}{1 - X_A} = k_f \theta_{equiv} \quad (2.10)$$

Conseqüentemente o tempo de residência equivalente é expresso por

$$k_f \theta_{equiv} = \int_0^{\theta} k dt \rightarrow \theta_{equiv} = \frac{\int_0^{\theta} k dt}{k_f} \quad (2.11)$$

A influência de alguns fatores no tempo de residência foi analisada por CHAMBERS e POTTER (1974). Os autores afirmam que o tempo de residência é inversamente proporcional à velocidade mássica, porém o aumento da velocidade mássica também aumenta a densidade da mistura amortecendo o efeito de diminuição do tempo de residência. É estimado que um aumento de 100% na velocidade mássica causa uma diminuição de 20% no tempo de residência, e produz o efeito indesejado da elevação pressão parcial dos hidrocarbonetos. É apontado, também, que para uma velocidade fixa numa tubulação com diâmetro constante uma redução no tempo de residência é conseguido diminuindo o comprimento do tubo. Para se manter a conversão deve-se, neste caso, aumentar a temperatura, portanto, a diminuição no comprimento da tubulação pode ser realizada até um limite mínimo dado pela máxima temperatura que o tubo suporta. Diminuições maiores no comprimento podem ser realizadas se o diâmetro da tubulação é reduzido, o que aumenta a temperatura máxima que a mesma suporta. A Figura 2.7 mostra como o rendimento do etileno é afetado pela diminuição do diâmetro da tubulação mantendo-se constantes a conversão, composição da alimentação, velocidade mássica e pressão parcial dos hidrocarbonetos.

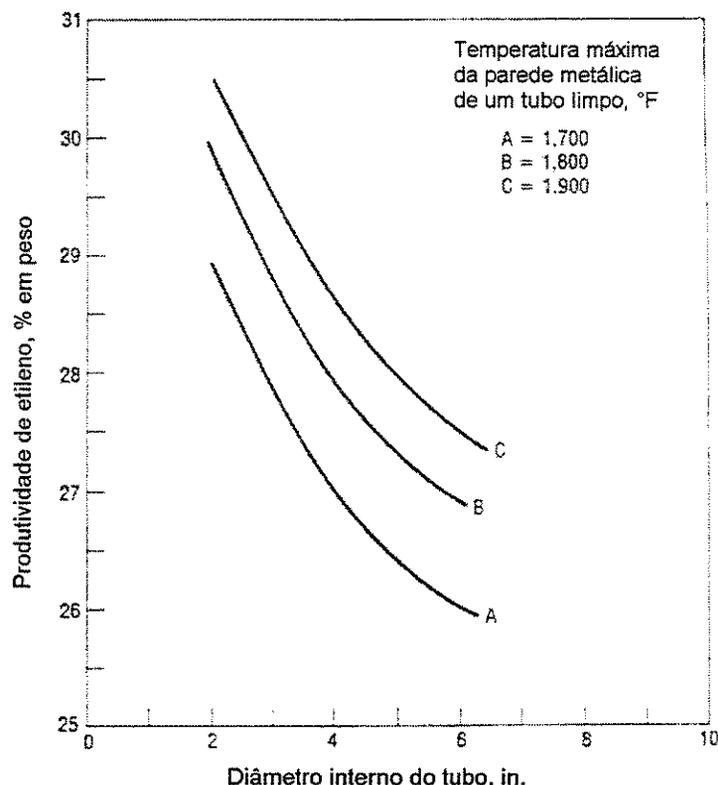


Fig. 2.7: Influência do diâmetro do tubo na produtividade de etilenos (CHAMBERS e POTTER, 1974).

Na pirólise de etano ou propano utilizam-se tempos de residência variando entre 1,2 - 0,2 s. Para a nafta os tempos de residência empregados são de 0,3 – 0,2 s. ENNIS BOYD e ORRISS (1975) estudaram a pirólise empregando uma tecnologia que utiliza tempos de residência entre 0,2 – 0,08 s.

2.4.3 – Pressão parcial dos hidrocarbonetos

As reações de pirólise que produzem olefinas leves, como o etileno, são favorecidas em condições de baixa pressão, situação que desfavorece as reações indesejadas de condensação. Por este motivo é que os fornos de pirólise operam com pressões de saída perto da pressão atmosférica.

A pressão parcial dos hidrocarbonetos é abaixada utilizando-se vapor como diluente, o que aumenta a seletividade da pirólise. Outros efeitos benéficos da adição de

vapor são: introdução de calor na alimentação; diminuição da quantidade de calor fornecida por metro de tubulação; e auxilia na remoção parcial dos depósitos de coque pela reação $C + H_2O \leftrightarrow CO + H_2$, que devido à mesma requerer uma temperatura de 1000 °C tem somente um papel secundário na limpeza dos tubos. ZDONIK, GREEN e HALLEE (1968c) afirmam que o vapor tem um poder oxidante sobre o metal da tubulação, o que diminui significativamente o efeito catalítico do ferro e do níquel sobre as reações de formação de carbono. O uso do vapor como diluente é feito dentro de certos limites devido a que o mesmo apresenta também alguns efeitos negativos. A necessidade de aquecer o vapor até a temperatura de reação aumenta o volume processado e, portanto, o valor do investimento no forno. O processo de separação dos hidrocarbonetos e o vapor requer grandes áreas de condensação, e implica em um elevado consumo de utilidades. A quantidade de vapor empregada geralmente se expressa como a razão mássica entre vapor e reagente, e para a pirólise de etano oscila entre 0,25 e 0,4.

ZDONIK, GREEN e HALLEE (1968b) estudaram a influência da pressão parcial dos hidrocarbonetos na distribuição dos produtos, analisando como uma mudança na mesma afeta o equilíbrio dos vários tipos de reações presentes na pirólise. Os autores utilizam o conceito de abordagem ao equilíbrio para explicar o comportamento do sistema para uma mudança na pressão.

Define-se, para uma reação em fase gasosa, a razão de pressões parciais (RPP) como o produto das pressões parciais dos produtos pelo produto das pressões parciais dos reagentes, definindo-se a abordagem ao equilíbrio (AE) como,

$$AE = \frac{RPP}{K_p} \quad (2.12)$$

onde K_p é a constante de equilíbrio escrita em função das pressões parciais. Portanto, para uma reação iniciada com reagentes puros o valor de AE é zero e tende à unidade conforme a reação tende ao equilíbrio.

Para uma reação do tipo $A \leftrightarrow B + C$, como as que produzem olefinas leves, tem-se que,

$$RPP = \frac{P_B P_C}{P_A} = P \frac{Y_B Y_C}{Y_A} \quad (2.13)$$

onde P é a pressão total no sistema e Y a fração molar dos hidrocarbonetos.

Tem-se, portanto, que

$$AE = \frac{P(Y_B Y_C / Y_A)}{K_p} \quad (2.14)$$

Conseqüentemente, observa-se que um aumento da pressão provoca um incremento momentâneo da abordagem ao equilíbrio (AE). O equilíbrio será restaurado deslocando a reação no sentido dos reagentes. Portanto, a produção de olefinas é favorecida pela utilização de baixas pressões parciais dos hidrocarbonetos.

As reações de adição de olefinas do tipo $D + E \leftrightarrow F$ tem o seguinte comportamento,

$$RPP = \frac{P_F}{P_D P_E} = \frac{1}{P} \frac{Y_F}{Y_D Y_E} \quad (2.15)$$

$$AE = \frac{1}{P} \frac{(Y_F / Y_D Y_E)}{K_p} \quad (2.16)$$

Observa-se, então, que um aumento da pressão reduz a abordagem ao equilíbrio (AE), portanto a reação desloca-se no sentido de favorecer a produção do produto F. Como a adição de olefinas é indesejada novamente tem-se que a utilização de pressões parciais dos hidrocarbonetos baixas é favorável para os resultados obtidos na pirólise.

A Figura 2.8 mostra o efeito da pressão no rendimento do etileno para várias conversões.

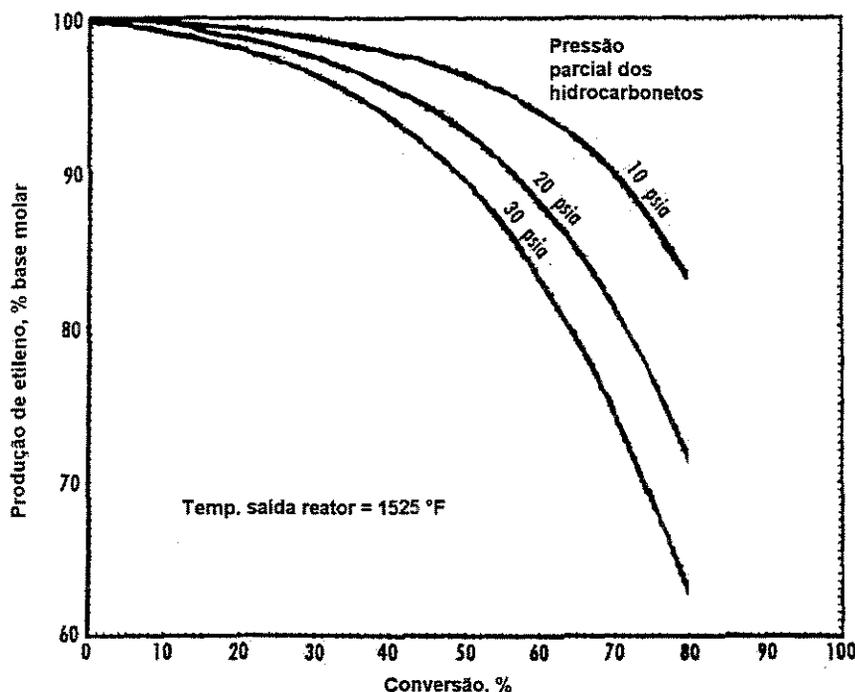


Fig. 2.8 : Influência da pressão no rendimento do etileno
(ZDONIK, GREEN e HALLE, 1968b).

2.5 – CONCLUSÃO

A pirólise de etano é um processo industrial extremamente relevante dada a importância como intermediários químicos dos produtos obtidos na mesma, especialmente o etileno que tem na pirólise sua principal rota de obtenção. Portanto, sua importância justifica o desenvolvimento de ferramentas que melhorem a sua operação, como a aplicação de métodos de controle avançado como o controle por matriz dinâmica (DMC). Atualmente encontram-se na literatura diversos trabalhos que estudam a aplicação na pirólise das técnicas de simulação e otimização.

SHAH (1967) realizou a simulação do forno de pirólise estudando a influência de várias variáveis operacionais no desempenho do mesmo. GOOSSENS, DENTE e RANZI (1978) desenvolveram um software comercial, SPYRO, que permite a simulação e análise de diferentes modelos de fornos de pirólise, e de diferentes tipos de alimentação e condições operacionais. JOO, LEE, LEE e PARK (2000) criaram um simulador

apresentado numa interface gráfica que facilita seu uso, CRACKER. O mesmo pode ser utilizado no treinamento dos operadores, e para determinar a estratégia e condição operacional mais satisfatória do forno de pirólise.

NATH e ALZEIN (2000) estudaram a aplicação da otimização on-line utilizando modelos de controle preditivo por modelo (MPC) no forno de pirólise. Segundo os autores esta tecnologia de otimização on-line tem trazido grandes benefícios econômicos e de produtividade para várias plantas de pirólise que operam com condições bem dinâmicas.

No entanto, a maioria dos trabalhos encontrados na literatura são referentes à otimização das condições operacionais e do tempo do ciclo de operação empregando modelos estacionários. É necessário, portanto, a realização de uma modelagem transiente que estudar a dinâmica do forno de pirólise, assim como a aplicação de técnicas de controle, como o controle por matriz dinâmica (DMC), para se manterem as variáveis operacionais do forno nos valores de referência.

Capítulo 3

Controle preditivo por matriz dinâmica

3.1 – INTRODUÇÃO

No final dos anos 70 foi introduzida uma nova técnica de controle de processo chamada de controle preditivo com modelo (MPC). O mesmo utiliza um modelo não paramétrico para representar o processo, motivo pelo qual pode ser chamado de controle com modelo interno (IMC), e controla o sistema realizando uma otimização das saídas do processo para um intervalo finito de tempo no futuro.

O controle por matriz dinâmica (DMC) pertence a esta categoria de controlador preditivo e foi introduzido por CUTLER e RAMAKER (1980) em um trabalho que relata sua aplicação dentro da Shell. O algoritmo consiste na aplicação do método dos mínimos quadrados para minimizar a distância entre a trajetória prevista da variável controlada e o seu “set point”. A predição das saídas do sistema é feita utilizando-se um modelo de convolução discreto que inclui a dinâmica do processo. Isto permite sua aplicação não somente em sistemas de primeira ou segunda ordem como também em sistemas com dimensões mais complexas, como por exemplo, com longo atraso de transporte ou resposta invertida.

Em 1980, PRETT e GILLETTE (1980) descreveram a aplicação do controle DMC multivariável em uma unidade de craqueamento catalítico, sendo o algoritmo DMC modificado para incluir as restrições das variáveis. CUTLER (1982) indica como o algoritmo pode ser modificado para ser aplicado em processos que não atingem o estado estacionário. MARCHETTI, MELLICHAMP e SEBORG (1983) realizaram a descrição detalhada do algoritmo DMC realizando sua aplicação para um sistema de simples entrada e simples saída (SISO), comparando os resultados com os obtidos com o controle clássico PID.

Atualmente o controle por matriz dinâmica DMC é o algoritmo MPC mais utilizado na indústria de processos químicos, com mais de 600 aplicações bem sucedidas (SHRIDHAR e COOPER, 1997). Os trabalhos mais recentes, como os de SHRIDHAR e COOPER (1997) e DOUGHERTY e COOPER (2003), focam estabelecer diretrizes para realizar a sintonia dos controladores preditivos, incluindo os controladores DMC.

3.2 – CONCEITO DE CONTROLE PREDITIVO

Os controladores preditivos utilizam uma representação discreta no tempo (modelo) para prever o comportamento futuro das saídas do processo (variáveis controladas) ao longo de um intervalo finito de tempo, chamado horizonte de predição (V), e otimizar as mesmas. A lei de controle resulta da otimização de uma função objetivo definida ao longo do horizonte de predição. Sendo, normalmente, a soma dos quadrados dos erros entre a trajetória predita da variável controlada e a trajetória de referência ou “set point” (método dos mínimos quadrados do erro). As variáveis independentes em esta otimização são os valores futuros das entradas do processo (variáveis manipuladas). A Figura 3.1 mostra a estratégia de controle comum aos controladores preditivos.

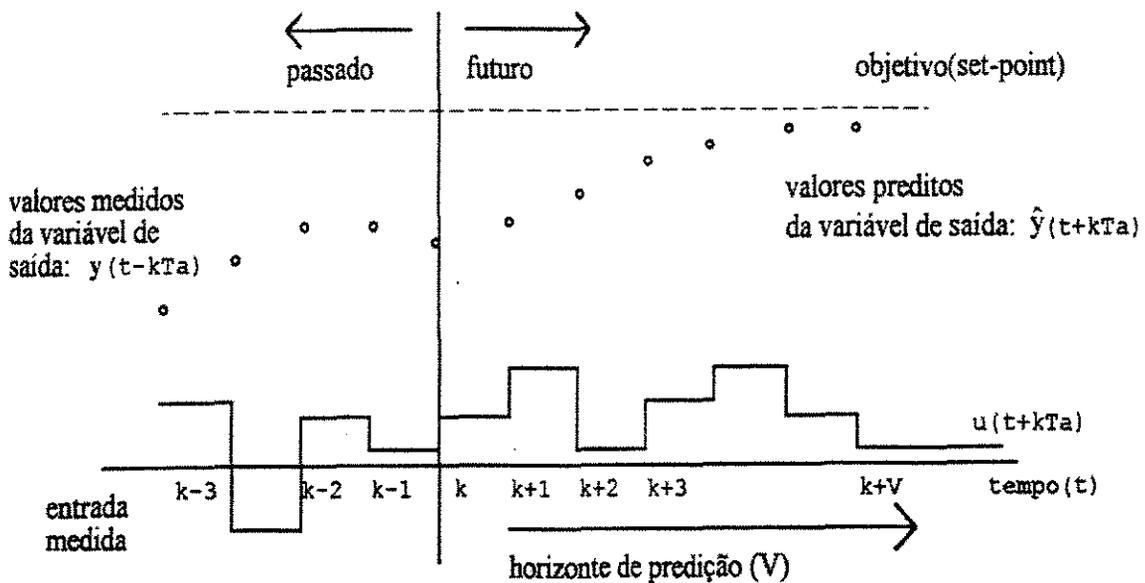


Fig. 3.1: Estratégia do controle preditivo com modelo
(SHRIDHAR e COOPER, 1997).

No instante de tempo atual k , mediante o modelo do processo pode ser calculada a trajetória ao longo do horizonte de predição (V) dos valores preditos da variável controlada (\hat{y} , $[\hat{y}_{k+1}, \hat{y}_{k+2}, \dots, \hat{y}_{k+V}]$) em cada intervalo de amostragem T_a . Calcula-se, então, a seqüência de valores da variável manipulada (u) que otimizam a função objetivo que é dada pela equação abaixo, onde r_{k+i} é a trajetória de referência ou “set point”,

$$J = \sum_{i=1}^V (\hat{y}_{k+i} - r_{k+i})^2 \quad (3.1)$$

Somente a primeira variação da variável manipulada é implementada, e os cálculos são repetidos no intervalo de tempo seguinte ($k+1$) movendo o horizonte um intervalo de tempo à frente.

Apesar de basearem-se em princípios iguais, existem diferenças significativas entre os controladores preditivos, geralmente relacionadas com o modelo ou função objetivo utilizados.

3.3 – MODELO DE CONVOLUÇÃO

O modelo de convolução é um modelo não paramétrico, portanto, não é necessário supor uma ordem para o mesmo, e tem seus coeficientes determinados da resposta experimental do processo. Esta flexibilidade permite a modelagem de processos que apresentam um comportamento dinâmico singular.

O algoritmo de controle por matriz dinâmica DMC utiliza para prever o comportamento da variável de saída do processo (ou variáveis) o modelo de resposta ao degrau. A Figura 3.2 mostra a mudança no valor da variável de saída do processo (variável controlada), em malha aberta, para uma perturbação em degrau na variável de entrada do processo (variável manipulada).

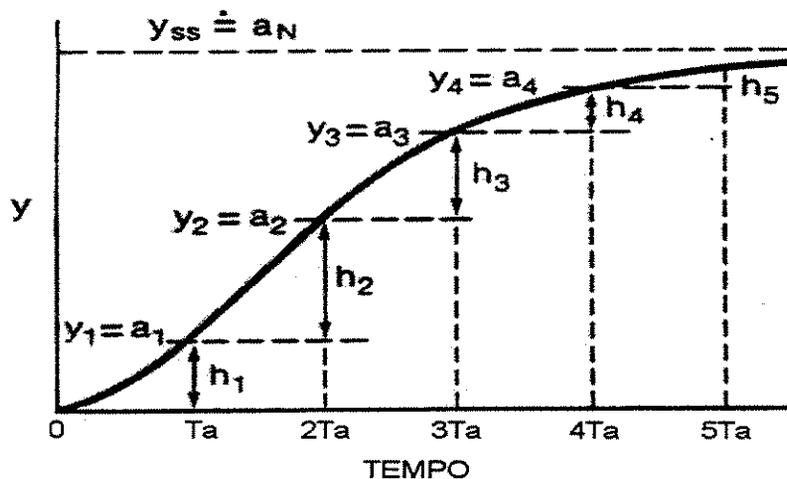


Fig. 3.2: Coeficientes do modelo de convolução
(MARCHETTI, MELLICHAMP e SEBORG, 1983).

Na Figura 3.2, a resposta do processo é dada pelos valores numéricos, discretos no tempo, dos coeficientes a_1, a_2, \dots, a_N . Os coeficientes a_i para $i \leq 0$ são por definição iguais a zero. Estes coeficientes guardam informações sobre a dinâmica do processo e são tudo o que se necessita para se obter uma relação entre uma entrada e uma saída do processo (CUTLER, 1982).

Matematicamente a resposta predita do processo (\hat{y}) para uma perturbação em degrau de grandeza Δu_0 no tempo $t = 0$, é dada por:

$$\begin{aligned} \hat{y}_1 &= y_0 + a_1 \Delta u_0 \\ \hat{y}_2 &= y_0 + a_2 \Delta u_0 \\ &\vdots \\ \hat{y}_N &= y_0 + a_N \Delta u_0 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Onde y_0 é o valor da variável controlada no estado estacionário inicial ($t = 0$), e definindo-se y como uma variável desvio y_0 será igual a zero. N é um número inteiro chamado horizonte do processo, e é o número de coeficientes dinâmicos necessários para representar a dinâmica do processo. O mesmo depende do tempo necessário para o processo atingir o novo estado estacionário, ou seja, seu valor multiplicado pelo tempo de amostragem (T_a) é o tempo de resposta do processo. Este tempo deve ser suficiente para que não surjam problemas de truncamento que negligenciem parte da dinâmica do processo. SEBORG (1989) recomenda que o valor de NT_a represente 99% do tempo necessário para se atingir o novo estado estacionário. Valores muito elevados de N aumentam o esforço computacional necessário, MAURATH, MELLICHAMP e SEBORG (1988) sugerem como uma boa estimativa para este horizonte utilizar valores entre 18 e 70.

Considerando-se duas perturbações sucessivas na variável manipulada (u), ocorrendo uma no tempo zero e outra no tempo $T_a = 1$, podemos aplicar o princípio de superposição e expressar a saída predita do processo como,

$$\begin{aligned} \hat{y}_1 &= y_0 + a_1 \Delta u_0 \\ \hat{y}_2 &= y_0 + a_2 \Delta u_0 + a_1 \Delta u_1 \\ \hat{y}_3 &= y_0 + a_3 \Delta u_0 + a_2 \Delta u_1 \\ &\vdots \\ \hat{y}_N &= y_0 + a_N \Delta u_0 + a_{N-1} \Delta u_1 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Considerando um instante de tempo k e N perturbações na variável manipulada (u), a forma generalizada do modelo de convolução em resposta ao degrau pode ser escrito como,

$$\begin{aligned} \hat{y}_k &= y_0 + \sum_{i=1}^N a_i \Delta u_{k-i} \\ \Delta u_k &= u_k - u_{k-1} \\ k &= 1, 2, 3, \dots, N \end{aligned} \quad (3.4)$$

Esta equação pode ser expressa em função dos coeficientes de resposta ao impulso (h_i) que são determinados pela expressão,

$$\begin{aligned} h_i &= a_i - a_{i-1} \quad i = 1, 2, 3, \dots, N \\ h_0 &= 0 \end{aligned}$$

Resulta, portanto, que a expressão da resposta ao impulso é dada por,

$$\hat{y}_k = y_0 + \sum_{i=1}^N h_i u_{k-i} \quad (3.5)$$

3.4 – ALGORITMO DMC

A idéia central no controle preditivo, como o DMC, é o conceito de “horizonte”. Previamente foi introduzido o horizonte de processo (N), os outros horizontes são: horizonte de predição (V) e horizonte de controle (U).

O horizonte de controle (U) é o número de ações de controle que devem ser calculadas de modo a afetar a saída predita do processo, minimizando o erro com a trajetória de referência, durante o horizonte de predição (V). O horizonte de predição (V) é a quantidade de instantes de amostragem disponíveis para que o “set point” seja alcançado. Portanto, quanto menor for o horizonte de predição mais rápida será a ação de controle. O valor máximo que o horizonte de predição pode assumir é $V_{\max} = N$.

3.4.1 – Predição simples

Forçando-se o controlador a atingir o valor desejado um passo de tempo à frente, ou seja, $V = 1$, tem-se o caso da predição simples.

Aplicando-se o modelo de convolução no instante de tempo $(k+1)T_a$, considerando um sistema de uma variável manipulada e uma controlada (SISO), tem-se que o valor predito da variável controlada pode ser calculado pela expressão,

$$\hat{y}_{k+1} = y_0 + \sum_{i=1}^N h_i u_{k+1-i} \quad (3.6)$$

Subtraindo a equação (3.5) da (3.6) obtém-se a forma recursiva do modelo expresso em termos da variação na variável manipulada (Δu).

$$\hat{y}_{k+1} = \hat{y} + \sum_{i=1}^N h_i \Delta u_{k+1-i} \quad (3.7)$$

$$\text{onde, } \Delta u_{k+1-i} = u_{k+1-i} - u_{k-i}$$

Caso o processo apresente um tempo morto igual a M instantes de amostragem, sendo M inteiro e positivo, tem-se que

$$h_i = 0 \quad \text{para } 1 \leq i \leq M \quad (3.8)$$

$$h_i \neq 0 \quad \text{para } i = M+1, M+2, \dots, N$$

A equação (3.7) permite uma predição um instante de tempo a frente, $V = 1$, da variável de saída (\hat{y}_{k+1}) a partir do valor predito no instante anterior (\hat{y}). Deste modo, a predição não leva em consideração erros no modelo ou perturbações não medidas que possam acontecer.

Para obter-se uma predição mais precisa, o valor predito da variável de saída, calculado pela equação (3.7), deve ser corrigido. Esta correção é realizada utilizando-se uma estratégia de retro-alimentação baseada no fato de que o valor real (medido) da variável controlada no instante atual de amostragem é conhecido (y_k). Conhecendo-se a diferença entre o valor real e o predito no instante atual (kT_a), pode-se corrigir utilizando esse valor a diferença para o instante futuro ($[k+1]T_a$). O valor predito corrigido é representado por,

$$\hat{y}_{k+1}^c = \hat{y}_{k+1} + (y_k - \hat{y}_k) \quad (3.9)$$

Esta expressão compensa os erros do modelo e outras perturbações que possam ocorrer no intervalo de predição. Substituindo a equação (3.9) na (3.7) tem-se,

$$\hat{y}_{k+1}^c = y_k + \sum_{i=1}^N h_i \Delta u_{k+1-i} \quad (3.10)$$

Para que a ação de controle no instante atual de amostragem (u_k) possa ser calculada, deve ser especificado o valor desejado para a variável controlada no próximo instante de amostragem (\hat{y}_{k+1}^d). MARCHETTI, MELLICHAMP e SEBORG (1983) sugerem que isto pode ser realizado selecionando um “set point” desejado (r_k) ou utilizando um valor filtrado,

$$y_{k+1}^d = \alpha y_k + (1 - \alpha) r_k \quad (3.11)$$

onde α é a constante do filtro, $0 \leq \alpha < 1$

No caso de se querer uma trajetória desejada igual a um “set point” sem filtro ($y_{k+1}^d = r_k$), o objetivo de se ter o valor corrigido igual ao desejado ($\hat{y}_{k+1}^c = y_{k+1}^d$) em um intervalo de amostragem resulta na lei de controle que é expressa pela seguinte equação

$$\Delta u_k = \frac{E_k}{h_1} - \frac{1}{h_1} \sum_{i=2}^N h_i \Delta u_{k+1-i} \quad (3.12)$$

onde, $E_k = r_k - y_k$

Usualmente esta lei de controle não é satisfatória por estar baseada na condição do valor predito ser igual ao “set point” em apenas um instante de amostragem.

3.4.2 – Predição múltipla

A principal vantagem do controle preditivo é que incorpora predições para um número de passos de tempo no futuro, permitindo antecipar a tendência de comportamento do processo. O número de intervalos de tempo, e conseqüentemente o número de predições, é o que já foi definido como horizonte de predição (V).

Um preditor com V passos pode ser representado pela equação

$$\hat{y}_{k+j} = \hat{y}_{k+j-1} + \sum_{i=1}^N h_i \Delta u_{k+j-i} \quad (3.13)$$

$j=1, 2, 3, \dots, V \quad V < N$

Realizando-se uma correção por retro-alimentação análoga à dada pela equação (3.9),

$$\hat{y}_{k+j}^c = \hat{y}_{k+j} + (\hat{y}_{k+j-1}^c - \hat{y}_{k+j-1}) \quad (3.14)$$

A equação (3.14) corrige os V valores preditos da variável controlada ao longo do horizonte de predição. Para se obter a solução, deve-se assumir que

$$\hat{y}_k^c = y_k \quad (3.15)$$

Substituindo-se a equação (3.13) na (3.14) tem-se,

$$\hat{y}_{k+j}^c = \hat{y}_{k+j-1}^c + \sum_{i=1}^N h_i \Delta u_{k+j-i} \quad (3.16)$$

MARCHETTI (1981) arrumou a equação acima em forma de vetor-matriz onde as mudanças futuras na variável manipulada ficam fora do somatório, o que resulta em um arranjo mais interessante do ponto de vista do controle.

Escrevendo-se a equação (3.16) no instante $(k+1)T_a$, tem-se

$$\hat{y}_{k+1}^c = \hat{y}_k^c + h_1 \Delta u_k + h_2 \Delta u_{k-1} + h_3 \Delta u_{k-2} + \dots + h_N \Delta u_{k+1-N} \quad (3.17)$$

As ações de controle $\Delta u_{k-1}, \Delta u_{k-2}, \dots, \Delta u_{k+1-N}$ são passadas, e podem ser agrupadas em um somatório na forma,

$$S_1 = \sum_{i=2}^N h_i \Delta u_{k+1-i} \quad (3.18)$$

Substituindo as equações (3.18) e (3.15) na (3.17), obtém-se

$$\hat{y}_{k+1}^c = y_k + h_1 \Delta u_k + S_1 \quad (3.19)$$

No instante $(k+2)T_a$, tem-se

$$\hat{y}_{k+2}^c = \hat{y}_{k+1}^c + h_1 \Delta u_{k+1} + h_2 \Delta u_k + h_3 \Delta u_{k-1} + h_4 \Delta u_{k-2} + \dots + h_N \Delta u_{k+2-N} \quad (3.20)$$

onde as ações de controle passadas podem ser agrupadas em,

$$S_2 = \sum_{i=3}^N h_i \Delta u_{k+2-i} \quad (3.21)$$

Substituindo-se a equação (3.21) na (3.20), obtém-se

$$\hat{y}_{k+2}^c = \hat{y}_{k+1}^c + h_1 \Delta u_{k+1} + h_2 \Delta u_k + S_2 \quad (3.22)$$

Substituindo-se agora a expressão (3.19) em (3.22), tem-se

$$\hat{y}_{k+2}^c = y_k + (h_1 + h_2) \Delta u_k + h_1 \Delta u_{k+1} + S_1 + S_2 \quad (3.23)$$

Aplicando-se este raciocínio para todo o horizonte de predição, define-se a equação na forma genérica,

$$\begin{aligned} \hat{y}_{k+j}^c &= y_k + a_j \Delta u_k + a_{j-1} \Delta u_{k+1} + \dots + a_1 \Delta u_{k+j-1} + P_j \\ \text{onde, } a_j &= \sum_{i=1}^j h_i \quad ; \quad (j=1, 2, 3, \dots, V) \\ P_j &= \sum_{i=1}^j S_i \\ S_m &= \sum_{j=m+1}^N h_j \Delta u_{k+m-j} \quad (m=1, 2, 3, \dots, V) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Sendo P_j elementos do vetor de projeção que incluem as predições futuras da variável controlada, baseadas em mudanças já implementadas na variável manipulada.

Na sua forma vetor-matriz a equação (3.24) pode ser escrita como,

$$\begin{bmatrix} \hat{y}_{k+1}^c \\ \hat{y}_{k+2}^c \\ \hat{y}_{k+3}^c \\ \vdots \\ \hat{y}_{k+V}^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_2 & a_1 & 0 & \dots & 0 \\ a_3 & a_2 & a_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_V & a_{V-1} & a_{V-2} & \dots & a_1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Delta u_k \\ \Delta u_{k+1} \\ \Delta u_{k+2} \\ \vdots \\ \Delta u_{k+V-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_k + P_1 \\ y_k + P_2 \\ y_k + P_3 \\ \vdots \\ y_k + P_V \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

3.5 – LEI DE CONTROLE

O projeto do controlador no controle preditivo com modelo é baseado no comportamento predito do processo. O objetivo do controlador é calcular as ações de controle de modo que as predições corrigidas (\hat{y}_{k+j}^c) se aproximem o máximo possível da trajetória de referência, ou seja, dos valores desejados de “set point” nos V passos de tempo

futuros. CUTLER e RAMAKER (1980) utilizaram como trajetória de referência para todo o horizonte de predição o valor atual do “set point”, ou seja,

$$y_{k+j}^d = r_k \quad j = 1, 2, 3, \dots, V \quad (3.26)$$

Fazendo-se a diferença entre as equações (3.26) e (3.25), obtém-se de forma matricial,

$$\bar{E}_{V \times 1} = -A'_{V \times V} \Delta \bar{u}_{V \times 1} + \bar{E}'_{V \times 1} \quad (3.27)$$

onde A' e $\Delta \bar{u}$ são, respectivamente, a matriz triangular $V \times V$ e o vetor de ações de controle futuras, com dimensão $V \times 1$, definidos na equação (3.25). Os outros dois vetores são definidos por,

$$\bar{E} = \begin{bmatrix} y_{k+1}^d - \hat{y}_{k+1}^c \\ y_{k+2}^d - \hat{y}_{k+2}^c \\ y_{k+3}^d - \hat{y}_{k+3}^c \\ \vdots \\ y_{k+V}^d - \hat{y}_{k+V}^c \end{bmatrix} \quad (3.28)$$

$$\bar{E}' = \begin{bmatrix} E_k - P_1 \\ E_k - P_2 \\ E_k - P_3 \\ \vdots \\ E_k - P_V \end{bmatrix} \quad \text{onde } E_k = r_k - y_k \quad (3.29)$$

Ambos vetores, \bar{E} e \bar{E}' , representam os erros preditos. \bar{E}' é calculado com base nas ações de controle passadas e representa o desvio predito da variável controlada em relação à trajetória desejada. No entanto, o cálculo de \bar{E}' assume um comportamento em malha aberta, ou seja, assume que nenhuma perturbação ou ação de controle ocorrerá no processo durante o horizonte de predição. O cálculo do vetor \bar{E} faz a mesma suposição referente às perturbações, porém assume um comportamento em malha fechada, predizendo o erro entre a trajetória desejada e o valor predito com base nas ações de controle implementadas a partir do instante atual de tempo até o final do horizonte de predição.

Se pretende-se um ajuste perfeito entre o valor predito da variável controlada e a trajetória desejada para todo o horizonte de predição, portanto $\bar{E} = 0$, tem-se que

$$0 = -A' \Delta \bar{u} + \bar{E}' \quad (3.30)$$

A solução da equação (3.30) é dada por,

$$\Delta \bar{u} = (A')^{-1} \bar{E}' \quad (3.31)$$

A solução dada pela equação (3.31) para a lei de controle tende a não ser satisfatória, pois está baseada na condição do valor predito ser exatamente igual ao valor desejado durante todo o horizonte de predição.

Para resolver este problema, a estratégia DMC consiste em diminuir arbitrariamente a dimensão do vetor $\Delta \bar{u}$ de V para U. Desta maneira unicamente são calculadas as próximas U (horizonte de controle) ações de controle, podendo se escrever a equação (3.27) como,

$$\bar{E}'_{V \times 1} = -A_{V \times U} \Delta \bar{u}_{U \times 1} + \bar{E}'_{V \times 1} \quad (3.32)$$

onde A é a matriz $V \times U$, chamada de matriz dinâmica, formada pelas primeiras U linhas de A' .

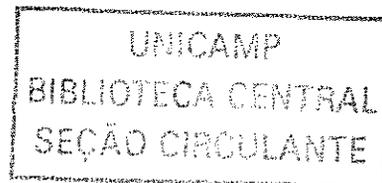
Desta maneira a equação (3.32) forma um sistema sobre determinado que não possui solução exata. No entanto, é possível obter os melhores valores para a variável manipulada minimizando um fator de desempenho definido por CUTLER e RAMAKER (1980) como,

$$J[\Delta \bar{u}] = \bar{E}'^T \bar{E} \quad (3.33)$$

A equação (3.33) é análoga à equação (3.1) dada como função objetivo do controlador preditivo. Portanto, são calculados os U valores da variável manipulada ($\Delta \bar{u}$) que minimizam os quadrados dos erros entre a trajetória predita e desejada da variável manipulada ao longo do horizonte de predição

Estes valores de $\Delta \bar{u}$ são dados pela equação abaixo, que é a solução da equação (3.33) e corresponde à lei de controle para o controlador DMC.

$$\Delta \bar{u} = (A^T A)^{-1} A^T \bar{E}' \quad (3.34)$$



Uma dificuldade da lei de controle dada pela equação (3.34) é que a sua implementação pode resultar em movimentos excessivos na variável manipulada, entenda-se grandes valores de cada elemento de $\Delta\bar{u}$, ou até em respostas instáveis. Uma alternativa para solucionar este inconveniente é modificar o fator de desempenho de maneira que se penalizem os movimentos da variável manipulada. O novo fator de desempenho é definido como,

$$J[\Delta\bar{u}] = \bar{E}^T W_1 \bar{E} + \Delta\bar{u}^T W_2 \Delta\bar{u} \quad (3.35)$$

onde W_1 e W_2 são matrizes definidas positivas, normalmente matrizes diagonais com elementos positivos. A nova lei de controle que minimiza o fator de desempenho é dada por,

$$\begin{aligned} \Delta\bar{u} &= (A^T W_1 A + W_2)^{-1} A^T W_1 \bar{E}' \\ \text{ou } \Delta\bar{u} &= K_c \bar{E}' \end{aligned} \quad (3.36)$$

Onde K_c é a matriz pseudoinversa dos ganhos feedback com dimensões $U \times V$.

A equação (3.36) permite calcular U ações de controle. Teoricamente, depois de calculadas as ações de controle, é possível esperar U instantes de tempo para recomeçar os cálculos. Porém, se durante este intervalo de tempo ocorrerem perturbações no sistema, ou houverem erros no modelo, estes não seriam levados em consideração pelo controlador. Portanto, o procedimento usual é calcular a cada instante de tempo U ações de controle e implementar unicamente o primeiro elemento do vetor $\Delta\bar{u}$, observar y_{k+1} e então reiniciar os cálculos. Como somente o valor do escalar Δu_k , primeiro elemento de $\Delta\bar{u}$, precisa ser calculado, precisa-se unicamente a primeira linha (K_{c1}) da matriz K_c . Então, para reduzir o esforço computacional, escreve-se a lei de controle como,

$$u_k = u_{k-1} + K_{c1} \bar{E}' \quad (3.37)$$

Uma poderosa ferramenta que o controle DMC fornece é a possibilidade de acrescentar restrições nas variáveis manipuladas e controladas na função objetivo, situação que se apresenta normalmente em vários processos químicos na indústria. Outro poderoso recurso é a possibilidade de se aplicar o algoritmo DMC a sistemas de controle de múltiplas entradas e saídas (MIMO). Estas duas opções escapam ao escopo deste trabalho e, portanto,

não serão tratados aqui. Encontram-se na literatura alguns trabalhos que estudam e mostram exemplos de controle DMC com múltiplas variáveis e com restrições, como os de PRETT e GILLETTE (1980); MAURATH, LAUB, SEBORG e MELLICHAMP (1988) e SHRIDHAR e COOPER (1998). Sendo que neste último trabalho são apresentadas regras para a sintonia deste tipo de controlador.

3.6 – PARÂMETROS DO CONTROLADOR (SINTONIA)

No projeto de um controlador preditivo, devem ser determinados vários parâmetros para obter-se a resposta desejada com um esforço de controle apropriado. Para o controlador DMC com supressão de movimento desenvolvido anteriormente estes parâmetros são: o tempo de amostragem (T_a), o horizonte do processo (N), o horizonte de predição (V), o horizonte de controle (U), a matriz peso para os erros preditos (W_1) e a matriz peso para as ações de controle calculadas (W_2).

A seleção do tempo de amostragem afeta a escolha dos horizontes, já que os mesmos são definidos como múltiplos inteiros de T_a .

O horizonte do processo (NT_a) deve ser grande o suficiente para reduzir os erros de truncamento que podem surgir quando for feita a predição do processo utilizando o modelo, e para que o mesmo seja representativo dos dados experimentais. SEBORG (1989) sugere que NT_a seja escolhido de maneira que corresponda ao tempo de estabilização do processo em malha aberta, que é igual ao tempo necessário para que a resposta ao degrau em malha aberta alcance 99%. MARCHETTI, MELLICHAMP e SEBORG (1983) sugerem que N seja escolhido de maneira que o valor de h_N seja da ordem do erro da medida na variável de saída. Valores de N pequenos são desejáveis para se reduzir o esforço computacional nos cálculos envolvidos no problema de controle. No entanto, uma diminuição de N implica em um aumento de T_a , o que resulta em uma descrição mais limitada da dinâmica do processo e numa menor flexibilidade do controlador. Portanto, deve-se buscar um compromisso entre estas duas variáveis de maneira que o desempenho do controlador não seja prejudicado. MAURATH, MELLICHAMP e SEBORG (1988) recomendam valores de N compreendidos entre 18 e 70.

O horizonte de predição (V) é o número de predições, quantidades de valores da variável controlada que serão preditos, utilizados nos cálculos de otimização. É, também, a

dimensão da primeira linha da matriz K_c , o vetor \bar{K}_{Cl} . Aumentar o horizonte de predição (V) resulta em uma ação de controle mais conservativa, estabilizando a resposta do processo em malha fechada. Porém, aumentar V aumenta também o número de equações que devem ser resolvidas pelo método dos mínimos quadrados na otimização, aumentando o esforço computacional (MAURATH, MELLICHAMP e SEBORG, 1988). SEBORG (1989) sugere escolher $V = N + U$, enquanto MAURATH, MELLICHAMP e SEBORG (1988) sugerem utilizá-lo como parâmetro de sintonia e SHRIDHAR e COOPER (1997) sugerem determinar V utilizando dados da dinâmica do processo aproximada por um modelo de primeira ordem com tempo morto.

O horizonte de controle (U) é o número de ações de controle futuras que serão calculadas na etapa de otimização para reduzir os erros preditos. Corresponde, também, à dimensão da matriz a ser invertida na implementação da lei de controle, gerando um aumento do esforço computacional quando seu valor aumenta. Aumentar o valor de U pode resultar em uma performance melhor do sistema de controle, porém resulta em ações de controle excessivas e em um controlador menos robusto. SEBORG (1989) sugere que um bom valor inicial para U resulta do tempo necessário para que a resposta em malha aberta atinja 60% do seu valor, ou seja, $UT_a = t_{60\%}$. MAURATH, MELLICHAMP e SEBORG (1988) afirmam que para o processo sem restrição e uma única entrada e saída obtém-se resultados excelentes fazendo-se $U = 1$ e sintonizando-se o valor de V , sendo um bom valor inicial para V o que corresponde a $VT_a = t_{50\%}$.

As matrizes W_1 e W_2 são as matrizes peso da lei de controle e contém um número potencialmente grande de parâmetros de sintonia. No entanto, geralmente é suficiente selecionar $W_1 = I$, o que implica que todos os erros preditos são ponderados igualmente, e $W_2 = fI$, onde I é a matriz identidade e f um fator de supressão.

Valores grandes de f penalizam mais a ação de controle (Δu) reduzindo seu tamanho, tendo-se um controle menos vigoroso e mais robusto. Quando $f = 0$ o controlador é muito sensível a mudanças no valor de U . MARCHETTI, MELLICHAMP e SEBORG (1983) mostram que isto é devido a que quando o valor de U aumenta ou o de T_a diminui o determinante de $A^T A$ tende a zero, a matriz passa a ser mal-condicionada, o que resulta em uma resposta muito oscilatória ou instável, problema que pode ser solucionado fazendo-se $f > 0$. MAURATH, MELLICHAMP e SEBORG (1988) sugerem selecionar o valor de f por

tentativa e erro usando resultados de simulação para julgar se a resposta do controlador é muito lenta ou enérgica. Recomendam, também, inicialmente modificar f em fatores de 10. SHRIDHAR e COOPER (1997) determinaram uma expressão analítica para o cálculo de f a partir da dinâmica do processo aproximada por um modelo de primeira ordem com tempo morto. Estes autores sugerem que o fator de supressão (f) é o principal parâmetro de sintonia de um controlador DMC.

3.7 – CONCLUSÃO

O controle DMC é uma técnica de controle digital que faz parte das técnicas de controle preditivo com modelo (MPC). O mesmo é uma poderosa ferramenta para o controle dos processos químicos por permitir controlar sistemas que possuem dinâmicas complexas, adicionar restrições nas variáveis controladas e manipuladas, e ser aplicado a sistemas com múltiplas entradas e saídas. Atualmente é a técnica de controle MPC mais utilizada na indústria.

O algoritmo de controle permite obter uma expressão explícita para o cálculo das ações de controle resolvendo unicamente um sistema algébrico. O seu funcionamento depende da sintonia correta de diversos parâmetros. A influência direta de cada um destes não é fácil de ser determinada requerendo, muitas vezes, a simulação do comportamento do controlador para diferentes sintonias, de modo a obter o melhor desempenho do mesmo.

Encontram-se na literatura diversos estudos dos resultados obtidos e sintonias utilizadas em controladores DMC aplicados a vários sistemas, sendo alguns deles industriais e outros de simulação teórica. Os trabalhos mais recentes tentam estabelecer diretrizes para a sintonia dos controladores DMC tanto no caso SISO como MIMO.

Capítulo 4

Forno de Pirólise

Modelagem Dinâmica

4.1 – INTRODUÇÃO

A implementação de uma estratégia de controle exige o conhecimento do comportamento dinâmico do equipamento que se deseja controlar. Este comportamento será determinado através da modelagem matemática dos fenômenos que ocorrem em seu interior.

Neste capítulo é apresentada a modelagem matemática do forno de pirólise de etano. É realizado o equacionamento de dois sistemas dentro do forno: a tubulação da serpentina (que será chamada de reator) em cujo interior acontecem as reações de pirólise, e a câmara de combustão (que será chamada de fornalha) que fornece o calor necessário à reação. Ambos sistemas deveram ser resolvidos em forma conjunta.

4.2 – MODELO DO REATOR

As reações químicas para a obtenção do etileno acontecem no interior da serpentina do forno de pirólise. Esta serpentina é formada por duas seções: (1) a seção de convecção onde a mistura de hidrocarbonetos e vapor d'água é pré-aquecida e, (2) a seção de radiação onde as reações químicas acontecem.

Para descrever o comportamento dinâmico do reator (isto é, da serpentina na zona radiativa), é necessário que sejam estabelecidas as equações que descrevem o comportamento das variáveis operacionais ao longo do mesmo.

4.2.1 – Balanço de massa transiente

Considerando um reator tubular com fluxo turbulento (PFR), pode-se obter a equação de conservação da massa aplicando-se o balanço de massa para a espécie *i* em um elemento de volume fixo no espaço. O elemento de volume está representado na Figura 4.1. e deve ser pequeno o suficiente para que as hipóteses assumidas sejam válidas.

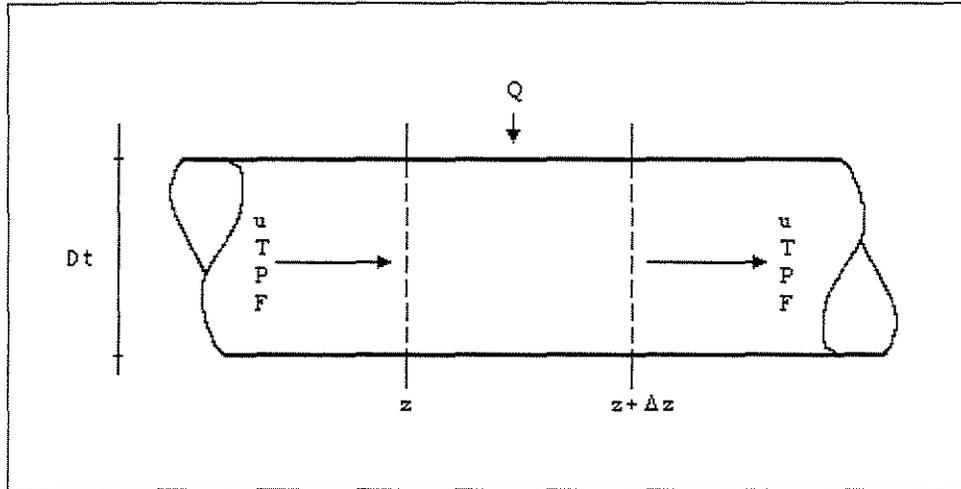


Fig. 4.1: Elemento de volume do reator tubular.

O balanço de massa para a espécie i pode ser representado pela seguinte equação:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Acúmulo de} \\ \text{massa de } i \text{ no} \\ \text{volume de controle} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de entrada} \\ \text{de massa de } i \text{ no} \\ \text{volume de controle} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de saída} \\ \text{de massa de } i \text{ no} \\ \text{volume de controle} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de consumo} \\ \text{de } i \text{ por reação no} \\ \text{volume de controle} \end{array} \right] \quad (4.1)$$

Desprezando todos os efeitos difusionais as várias contribuições ao balanço de massa são:

- Taxa de acúmulo de massa da espécie i

$$\pi r^2 \Delta z \frac{\partial C_i}{\partial t} \quad (4.2)$$

- Taxa de entrada de i no elemento de volume ΔV

$$\pi r^2 u C_i \Big|_z \quad (4.3)$$

- Taxa de saída de i do elemento de volume ΔV

$$\pi r^2 u C_i \Big|_{z+\Delta z} \quad (4.4)$$

- Taxa de consumo de i por reação química no elemento de volume ΔV

$$\pi r^2 \Delta z (-r_i) \quad (4.5)$$

onde:

- $\pi r^2 \Delta z$ → Volume do elemento de controle (m^3)
 πr^2 → Área transversal do volume de controle (m^2)
 Δz → Comprimento do volume de controle (m)
 r → raio da tubulação (m)
 C_i → Concentração da espécie i ($kmol/m^3$)
 u → Velocidade superficial na direção axial (m/s)
 r_i → Taxa de reação para o reagente i ($kmol/m^3 s$)

Substituindo as equações (4.2) a (4.5) em (4.1), obtém-se:

$$\pi r^2 \Delta z \frac{\partial C_i}{\partial t} = \pi r^2 u C_i|_z - \pi r^2 u C_i|_{z+\Delta z} - \pi r^2 \Delta z (-r_i) \quad (4.6)$$

Dividindo a equação (4.6) por $(\pi r^2 \Delta z)$ e aplicando a definição de derivada quando $\Delta z \rightarrow 0$ (elemento de volume infinitesimal), tem-se:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = - \frac{\partial (u C_i)}{\partial z} - (-r_i) \quad (4.7)$$

Devido à mudança de volume associada à reação química, é mais conveniente expressar o balanço de massa em termos do número de moles do que em termos da concentração da espécie i. Portanto, sabendo-se que:

$$u C_i = F_i \quad (4.8)$$

e,

$$F_i = \frac{\dot{N}_i}{A} \quad (4.9)$$

onde:

- F_i → Fluxo molar de i ($kmol/m^2 s$)

\dot{N}_i → Vazão molar de i (kmol/s)

A → Área de escoamento (m^2)

pode-se rearrumar a equação (4.7) da seguinte maneira:

$$\frac{\partial(\dot{N}_i/u A)}{\partial t} = -\frac{\partial(\dot{N}_i/A)}{\partial z} - (-r_i) \quad (4.10)$$

Considerando u constante num dado ∂z e ∂t , hipótese que é validada considerando-se elementos de volume e intervalos de tempo pequenos o suficiente, a equação (4.10) pode ser escrita como:

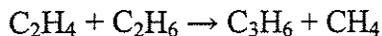
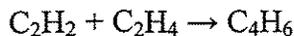
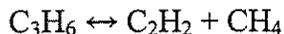
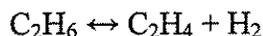
$$\frac{1}{u A} \frac{\partial \dot{N}_i}{\partial t} = -\frac{1}{A} \frac{\partial \dot{N}_i}{\partial z} - (-r_i) \quad (4.11)$$

Rearranjando os termos da equação (4.11), sabendo-se que $A = \frac{\pi D_t^2}{4}$ (onde D_t é o diâmetro da tubulação), e considerando as j reações existentes (onde α_{ij} é o coeficiente estequiométrico do componente i na reação j , convencionado como positivo para produtos e negativo para reagentes) obtém-se a equação final do balanço de massa, apresentada a seguir:

$$\frac{\partial \dot{N}_i}{\partial t} = -u \frac{\partial \dot{N}_i}{\partial z} + u A \sum_{j=1}^s \alpha_{ij} r_j \quad (4.12)$$

O balanço de massa na equação (4.12) é escrito para uma espécie química devendo-se, portanto, aplicar o balanço para todas as espécies químicas participantes das j reações.

Para o caso da pirólise de etano RAMAN, R. (1985) realizou a simulação em regime estacionário utilizando a série de reações propostas por FROMENT *et al.* (1976). Este mesmo esquema reacional será utilizado neste modelo transiente. Sendo as principais reações:



Como o tempo de residência é muito pequeno, as reações inversas foram consideradas desprezíveis. A decomposição do C_2H_2 formando carbono, e as reações entre este e o vapor não são consideradas para preservar a simplicidade. As taxas de reação são determinadas utilizando-se a equação de Arrhenius.

Observa-se, portanto, que teremos cinco reações químicas j e oito compostos químicos i participando das mesmas (a água só atua como diluente). O que significa que devem ser resolvidas oito equações diferenciais como a equação (4.12).

4.2.2 – Balanço de energia transiente

Os sistemas reacionais apresentam, geralmente, efeitos térmicos associados às reações químicas ou a quantidade de calor trocada com o exterior através das paredes do reator. Isto faz com que haja a necessidade de mais uma equação que modele matematicamente o comportamento da temperatura ao longo do reator. Esta expressão adicional é o balanço de energia, podendo ser representado pela seguinte equação:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Acúmulo de} \\ \text{energia no interior do} \\ \text{volume de controle} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de entrada} \\ \text{de energia no} \\ \text{volume de controle} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de saída} \\ \text{de energia no} \\ \text{volume de controle} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de energia} \\ \text{absorvida no} \\ \text{volume de controle} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de energia} \\ \text{liberada na} \\ \text{reação química} \end{array} \right] \quad (4.13)$$

As várias contribuições ao balanço de energia podem ser expressas como:

- Taxa de acúmulo de energia

$$\pi r^2 \Delta z \frac{\partial \left(\frac{\rho c_p T}{M} \right)}{\partial t} \quad (4.14)$$

- Taxa de entrada de energia no elemento de volume ΔV

$$\frac{\pi r^2 u \rho c_p T}{\bar{M}} \Big|_z \quad (4.15)$$

- Taxa de saída de energia do elemento de volume ΔV

$$\frac{\pi r^2 u \rho c_p T}{\bar{M}} \Big|_{z+\Delta z} \quad (4.16)$$

- Taxa de energia absorvida pelo elemento de volume ΔV

$$2 \pi r \Delta z Q \quad (4.17)$$

- Taxa de energia liberada ou consumida pelas j reações químicas

$$\pi r^2 \Delta z \sum_{j=1}^5 (-\Delta H_j) r_j \quad (4.18)$$

onde:

$\pi r^2 \Delta z$ → Volume do elemento de controle (m^3)

πr^2 → Área transversal do volume de controle (m^2)

Δz → Comprimento do volume de controle (m)

r → Raio da tubulação (m)

T → Temperatura dos reagentes (K)

u → Velocidade superficial na direção axial (m/s)

ρ → Densidade da mistura gasosa (kg/m^3)

c_p → Calor específico da mistura gasosa ($kJ/kmol K$)

\bar{M} → Massa molecular da mistura gasosa ($kg/kmol$)

Q → Calor transferido pela parede lateral da tubulação ($kJ/s m^2$)

ΔH_j → Entalpia de reação da reação j ($kJ/kmol$)

r_j → Taxa de reação da reação j ($kmol/m^3 s$)

Rigorosamente o calor de reação (ΔH_j) varia com a temperatura ao longo do reator, e é calculado usando dados apropriados de capacidade calorífica. Entretanto, neste modelo, é usado um valor médio para cada reação, considerando uma faixa previsível de temperatura no reator.

Substituindo as equações (4.14) a (4.18) em (4.13), obtém-se:

$$\pi r^2 \Delta z \frac{\partial \left(\frac{\rho c_p T}{\bar{M}} \right)}{\partial t} = \frac{\pi r^2 u \rho c_p T}{\bar{M}} \Big|_z - \frac{\pi r^2 u \rho c_p T}{\bar{M}} \Big|_{z+\Delta z} + 2 \pi r \Delta z Q + \pi r^2 \Delta z \sum_{j=1}^5 (-\Delta H_j) r_j \quad (4.19)$$

Dividindo a equação (4.19) por $(\pi r^2 \Delta z)$ e aplicando a definição de derivada quando $\Delta z \rightarrow 0$ (elemento de volume infinitesimal), tem-se:

$$\frac{\partial \left(\frac{\rho c_p T}{\bar{M}} \right)}{\partial t} = - \frac{\partial \left(\frac{u \rho c_p T}{\bar{M}} \right)}{\partial z} + \frac{2 Q}{r} + \sum_{j=1}^5 (-\Delta H_j) r_j \quad (4.20)$$

Sabendo-se que:

$$u \rho = G \quad (4.21)$$

que pode ser reescrito como,

$$\frac{u \rho}{\bar{M}} = F \quad (4.22)$$

onde novamente podemos escrever,

$$F = \frac{\dot{N}}{A} \quad (4.23)$$

e,

$$\dot{N} c_p = \sum_{i=1}^9 (\dot{N}_i c_{pi}) \quad (4.24)$$

onde:

$G \rightarrow$ Fluxo mássico total ($\text{kg/m}^2 \text{ s}$)

- F → Fluxo molar total (kmol/m² s)
 Ṅ → Vazão molar total (kmol/s)
 A → Área de escoamento (m²)

pode se rearranjar a equação (4.20) da seguinte maneira (sendo $r = D_t/2$):

$$\frac{\partial \left(\frac{\sum_{i=1}^9 (\dot{N}_i c_{pi}) T}{u A} \right)}{\partial t} = - \frac{\partial \left(\frac{\sum_{i=1}^9 (\dot{N}_i c_{pi}) T}{A} \right)}{\partial z} + \frac{4 Q}{D_t} + \sum_{j=1}^5 (-\Delta H_j) r_j \quad (4.25)$$

Considerando u , \dot{N} e c_p constantes num dado ∂z e ∂t , hipótese que novamente é validada considerando-se elementos de volume e intervalos de tempo pequenos o suficiente, a equação (4.25) ficará:

$$\frac{\sum_{i=1}^9 (\dot{N}_i c_{pi})}{u A} \frac{\partial T}{\partial t} = - \frac{\sum_{i=1}^9 (\dot{N}_i c_{pi})}{A} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{4 Q}{D_t} + \sum_{j=1}^5 (-\Delta H_j) r_j \quad (4.26)$$

Rearranjando os termos da equação (4.26), lembrando que $A = \frac{\pi D_t^2}{4}$, obtém-se a equação final do balanço de energia que apresenta a seguinte forma:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = - u \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{u}{\sum_{i=1}^9 (\dot{N}_i c_{pi})} Q \pi D_t + \frac{u}{\sum_{i=1}^9 (\dot{N}_i c_{pi})} \frac{\pi D_t^2}{4} \sum_{j=1}^5 (-\Delta H_j) r_j \quad (4.27)$$

4.2.3 – Perda de carga no reator

Para realizar a simulação do reator, necessita-se conjuntamente com os balanços de massa e energia a equação da perda de carga ao longo do reator. FROMENT (1990) recomenda utilizar na modelagem da perda de carga a seguinte expressão:

$$-\frac{dP}{dz} = \frac{2 f \rho u^2}{D_i} + \rho u \frac{du}{dz} \quad (4.28)$$

A equação acima considera a perda de carga devido ao atrito nas porções reta da tubulação, sendo que não são consideradas as perdas devidas às curvas da serpentina, e também a perda devida a mudanças na velocidade (segundo termo da equação). Estas mudanças na velocidade se devem às mudanças devido às variações das condições operacionais, assim como a mudança no número de moles totais ao longo do reator.

Para uma mistura reacional gasosa a baixa pressão, onde pode se considerar gás ideal, tem-se que:

$$u = \frac{G}{\bar{M}} \frac{RT}{P} \quad (4.29)$$

portanto, pode-se escrever o termo correspondente a variação da velocidade em relação à posição como:

$$\frac{du}{dz} = \frac{GR}{P} \left[\frac{1}{\bar{M}} \frac{dT}{dz} + T \frac{d(1/\bar{M})}{dz} \right] - \frac{GRT}{\bar{M}P^2} \frac{dP}{dz} \quad (4.30)$$

Substituindo as equações (4.29) e (4.30) em (4.28) obtém-se:

$$\begin{aligned} -\frac{dP}{dz} &= \frac{2 f \rho}{D_i} \frac{G^2 R^2 T^2}{\bar{M}^2 P^2} + \rho \frac{GRT}{\bar{M}P} \left[\frac{GR}{P} \left[\frac{1}{\bar{M}} \frac{dT}{dz} + T \frac{d(1/\bar{M})}{dz} \right] - \frac{GRT}{\bar{M}P^2} \frac{dP}{dz} \right] \\ &= \frac{2 f \rho}{D_i} \frac{G^2 R^2 T^2}{\bar{M}^2 P^2} + \frac{\rho G^2 R^2 T}{\bar{M}^2 P^2} \frac{dT}{dz} + \frac{\rho G^2 R^2 T^2}{\bar{M} P^2} \frac{d(1/\bar{M})}{dz} - \frac{\rho G^2 R^2 T^2}{\bar{M}^2 P^3} \frac{dP}{dz} \end{aligned} \quad (4.31)$$

Multiplicando por P e dividindo por G^2RT a equação (4.31) e eliminando da mesma ρ , lembrando que $\rho = \frac{P\bar{M}}{RT}$, tem-se após rearrumar os termos:

$$\left(\frac{1}{\bar{M}P} - \frac{P}{G^2RT} \right) \frac{dP}{dz} = \frac{d(1/\bar{M})}{dz} + \frac{1}{\bar{M}} \left[\frac{2f}{D_i} + \frac{1}{T} \frac{dT}{dz} \right] \quad (4.32)$$

Sabendo-se que $G = \frac{\dot{N}\bar{M}}{A} \Rightarrow \frac{1}{\bar{M}} = \frac{\dot{N}}{GA}$, pode-se escrever:

$$\frac{d(1/\bar{M})}{dz} = \frac{1}{GA} \frac{d\dot{N}}{dz} = \frac{1}{GA} \sum_{i=1}^8 \frac{d\dot{N}_i}{dz} \quad (4.33)$$

Substituindo a equação (4.33) na equação (4.32) e arrumando a expressão obtida, tem-se a expressão final da para a perda de carga no reator:

$$\frac{dP}{dz} = \frac{\frac{1}{GA} \sum_{i=1}^8 \frac{d\dot{N}_i}{dz} + \frac{1}{\bar{M}} \left[\frac{2f}{D_i} + \frac{1}{T} \frac{dT}{dz} \right]}{\frac{1}{\bar{M}P} - \frac{P}{\alpha G^2 RT}} \quad (4.34)$$

onde:

- R → Constante universal dos gases (8.314 kJ/kmol K)
- P → Pressão da mistura gasosa (kPa)
- f → Fator de atrito de Fanning
- α → Constante para adequação das unidades (neste caso $\alpha = 1.0 \times 10^{-3}$)

4.3 – MODELO DA FORNALHA

A pirólise do etano é uma reação endotérmica e, portanto, deve ser fornecida energia para a mesma acontecer.

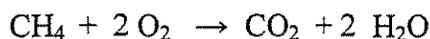
Para se ter a descrição completa do comportamento da fornalha é necessário obter o modelo matemático que descreva o comportamento da câmara de combustão da fornalha (que, como dito anteriormente, será chamada de fornalha) e as trocas de energia da fornalha para o reator.

4.3.1 – Balanço de massa da combustão

A fornalha consiste, em forma simplificada, de uma caixa metálica retangular na qual é gerado calor a partir da combustão de certos hidrocarbonetos. Esta combustão é dada no interior de uma série de queimadores radiativos que se encontram ao longo de todas as paredes da câmara.

Em seu trabalho RAMANA *et al.* (1988) realizou a simulação de uma fornalha de pirólise de etano no qual o combustível utilizado era uma mistura de 95% v-v de metano e 5% v-v de hidrogênio com 15% de excesso de oxigênio. Neste trabalho será utilizado a mesma mistura combustível para a simulação da fornalha.

A reação de combustão é considerada, por hipótese, uma reação completa, tendo como produtos a água e o dióxido de carbono. O ar alimentado será admitido como tendo uma composição molar de 21% de oxigênio e 79% de nitrogênio. As reações de combustão para o combustível utilizado são as seguintes



A base de cálculo é escolhida em função da conveniência de cada situação. Para este caso foi determinada uma base de cálculo de 1 kmol de combustível seco.

A partir dos dados disponíveis, o cálculo estequiométrico, com base no esquema reacional acima, fornecerá o balanço de massa do sistema de combustão e, portanto, uma relação entre a massa de combustível e de ar alimentados que será necessária no desenvolvimento posterior do modelo. Os resultados obtidos encontram-se na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Resultados balanço de massa do sistema de combustão

Componente	kmoles	Componente	kmoles
H ₂	0,95	O ₂ fornecido	2,214
CH ₄	0,05	N ₂ fornecido	8,328
O ₂ teórico	1,925	CO ₂ produzido	0,95
N ₂ teórico	7,242	H ₂ O produzido	1,95
Ar teórico	9,167	O ₂ em excesso	0,289
Ar fornecido	10,542	N ₂ em excesso	8,328

A tabela acima mostra que para cada kmol de combustível alimentado é necessário alimentar 10,542 kmoles de ar. Sabendo-se a composição do combustível e do ar e os pesos moleculares de ambos, é imediata a determinação da razão entre a vazão mássica de ar e de combustível (ω_c). Os dados considerados para a realização deste cálculo estão referenciados

no PERRY (1997) e são: $PM_{ar} = 28,951$ kg/kmol, $PM_{H_2} = 2,016$ kg/kmol, e $PM_{CH_4} = 16,032$ kg/kmol.

Desta maneira a razão entre a vazão de combustível e de ar é:

$$\varpi_{ar} = 19,907 \varpi_{comb} \quad (4.35)$$

4.3.2 – Balanço de energia transiente

É necessário saber qual é a dinâmica que apresenta o sistema de combustão, já que o mesmo calor gerado por este será absorvido pela mistura reacional no interior do reator (serpentina).

A simulação rigorosa da troca de energia na câmara da fornalha é um processo complexo, que já foi estudado por autores como RAMANA *et al.* (1988), devido a que o principal mecanismo de troca é o radiativo o que requer uma descrição completa da geometria da fornalha, o arranjo da tubulação e os queimadores.

Neste trabalho para preservar a simplicidade, já que o interesse principal do mesmo é o controle do equipamento, todas as resistências às trocas térmicas serão desprezadas, tornando o modelo ideal, e o fluxo de calor da fornalha para a serpentina será considerado uniforme ao longo da mesma e, portanto, função unicamente do tempo.

Dada estas simplificações o fluxo de calor que será absorvido pelo reator pode ser considerado como o gerado pelo combustível menos o que é perdido pela eficiência da fornalha e o que é gasto para aquecer o ar alimentado na combustão. Desta maneira aplicando-se a primeira lei da termodinâmica obtem-se:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\varpi_c (1-Y) H_c - \varpi_{ar} c p_{ar} (T_g - T_{ar})}{\pi D_{i,ext} L} - Q \quad (4.36)$$

Substituindo a equação (4.35) na (4.36) obtem-se a expressão final do balanço de energia transiente na fornalha que apresenta a seguinte forma:

$$\boxed{\frac{dE}{dt} = \frac{\varpi_c (1-Y) H_c - 19,907 \varpi_c c p_{ar} (T_g - T_{ar})}{\pi D_{i,ext} L} - Q} \quad (4.37)$$

onde:

ω_c → Vazão de combustível (kg/s)

Y → Eficiência da fornalha

H_c → Poder calorífico do combustível (kJ/kg)

$c_{p_{ar}}$ → Capacidade calorífica do ar (kJ/kg K)

T_g → Temperatura de saída dos gases de combustão (K)

T_{ar} → Temperatura de entrada do ar (K)

D_{text} → Diâmetro externo da serpentina (m)

L → Comprimento da serpentina na zona radiativa (m)

Q → Calor transferido pela parede lateral da serpentina (kJ/s m²)

4.4 – O PROGRAMA DE SIMULAÇÃO

A modelagem matemática desenvolvida anteriormente forneceu sistemas de equações diferenciais parciais (balanços de massa e energia do reator) e equações diferenciais ordinárias (perda de carga no reator e balanço de energia da fornalha). Para obter-se a solução do modelo matemático as equações diferenciais parciais serão reduzidas a ordinárias mediante a aplicação de um método de discretização.

O método utilizado neste trabalho será o Método das Diferenças Finitas. A utilização deste método é propícia para os balanços de energia e massa transientes no reator, onde se tem a temperatura e o fluxo molar em função do tempo e da posição.

A discretização será aplicada somente na posição z porque possui o domínio restrito e definido, enquanto que o tempo t possui um domínio infinito.

Exemplificamos o método mediante o balanço de massa no reator, cuja expressão após a aplicação das Diferenças Finitas para trás é:

$$\frac{d\dot{N}_{i,z}}{dt} = -u \frac{d\dot{N}_{i,z}}{dz} + u A \sum_{j=1}^5 \alpha_{ij} r_j \quad (4.38)$$

Sendo que o termo da derivada em relação à posição é calculado como:

$$\frac{d\dot{N}_{i,z}}{dz} = \frac{\dot{N}_{i,z} - \dot{N}_{i,z-1}}{\Delta z} \quad (4.39)$$

Portanto, é necessário para a resolução do sistema de equações o conhecimento dos perfis iniciais de temperatura e composição ao longo de reator.

Uma vez obtido o sistema de equações diferenciais ordinárias unicamente, o mesmo será resolvido mediante a aplicação do método de Runge-Kutta-Fehlberg.

4.4.1 – Fluxograma do programa

O programa de simulação foi escrito em linguagem Fortran, e a listagem do mesmo se encontra na seção anexa A.1. As equações (4.21), e (4.22) são discretizadas na posição (z) utilizando o método das Diferenças Finitas na subrotina DERIV escrita de forma genérica. O sistema de equações formado pelas expressões já discretizadas (4.21), (4.22), e a expressão (4.38) é integrado no tempo (t) segundo o procedimento Runge-Kutta-Fehlberg na subrotina RKF45 (WATTS e SHAMPINE, 2000), que é escrita de modo genérico podendo ser usada para qualquer sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. Os integrandos das equações diferenciais são calculados na subrotina INTEGR.

Todas as informações sobre pesos moleculares dos componentes, parâmetros da equação de Arrhenius para todas as constantes das taxas de reação, calores de reação e os coeficientes que relacionam a capacidade calorífica e a viscosidade com a temperatura são citados por RAMAN (1985) e estão alocados no subprograma BLOCK DATA DADOS sob os blocos COMMON apropriados.

A relação entre a capacidade calorífica e a temperatura é expressa como uma função polinomial sobre a faixa de temperatura

$$c_{pi} = a_i + b_i T + c_i T^2 \quad (4.40)$$

e a relação entre a viscosidade e a temperatura é expressa como

$$\mu_i = a_i e^{\frac{b_i}{T}} \quad (4.41)$$

A viscosidade da mistura da mistura gasosa é calculada na subrotina VISCMIX, utilizando a equação de Wilke (RAMAN, 1985).

A queda de pressão é calculada utilizando a expressão (4.34), onde o fator de Fanning é calculado na subrotina PRDROP. Esta queda de pressão é subtraída de pressão total no início do intervalo para obter a pressão total no final do intervalo. A densidade da mistura gasosa em cada ponto é calculada com a pressão total em cada ponto pela lei dos gases ideais.

Finalmente, para cada passo de tempo, a conversão do etano e a distribuição dos produtos são obtidas ao longo do reator. Obtendo-se assim, o comportamento dinâmico e os perfis de temperatura, composição e pressão do forno de pirólise de etano.

Os dados de entrada utilizados nos cálculos incluem as dimensões do reator, pressão na entrada, perfis de temperatura e composição ao longo do reator para o instante inicial, vazão de combustível inicial na fornalha, vazão de alimentação do reator e razão de vapor na alimentação. As expressões das taxas de reação e a matriz dos coeficientes estequiométricos das reações, também são especificadas.

As Figuras 4.2 e 4.3 a seguir apresentam o diagrama de blocos para o programa de simulação da fornalha de pirólise de etano em regime transiente.

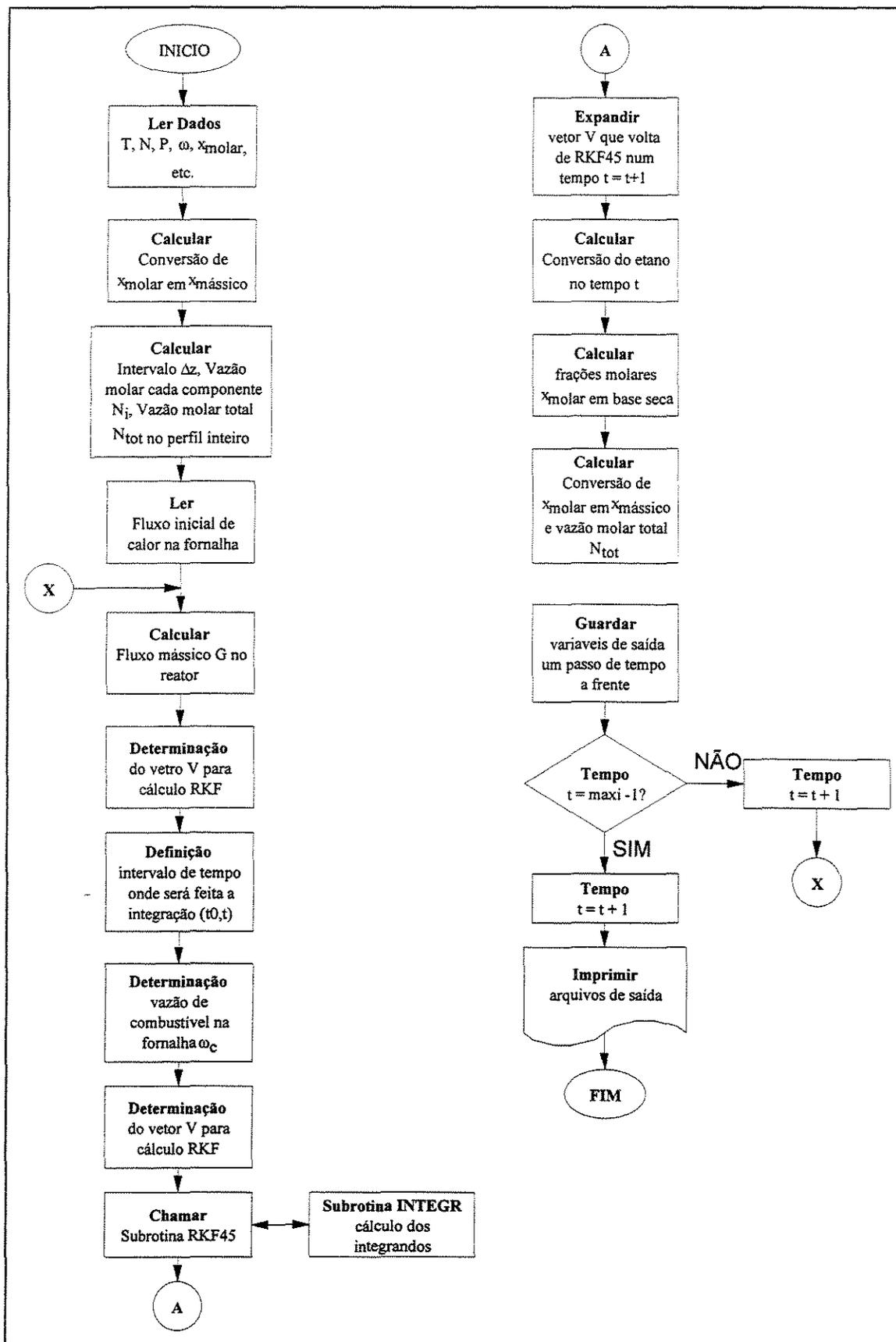


Fig. 4.2: Diagrama de blocos da simulação transiente do forno de pirólise de etano.

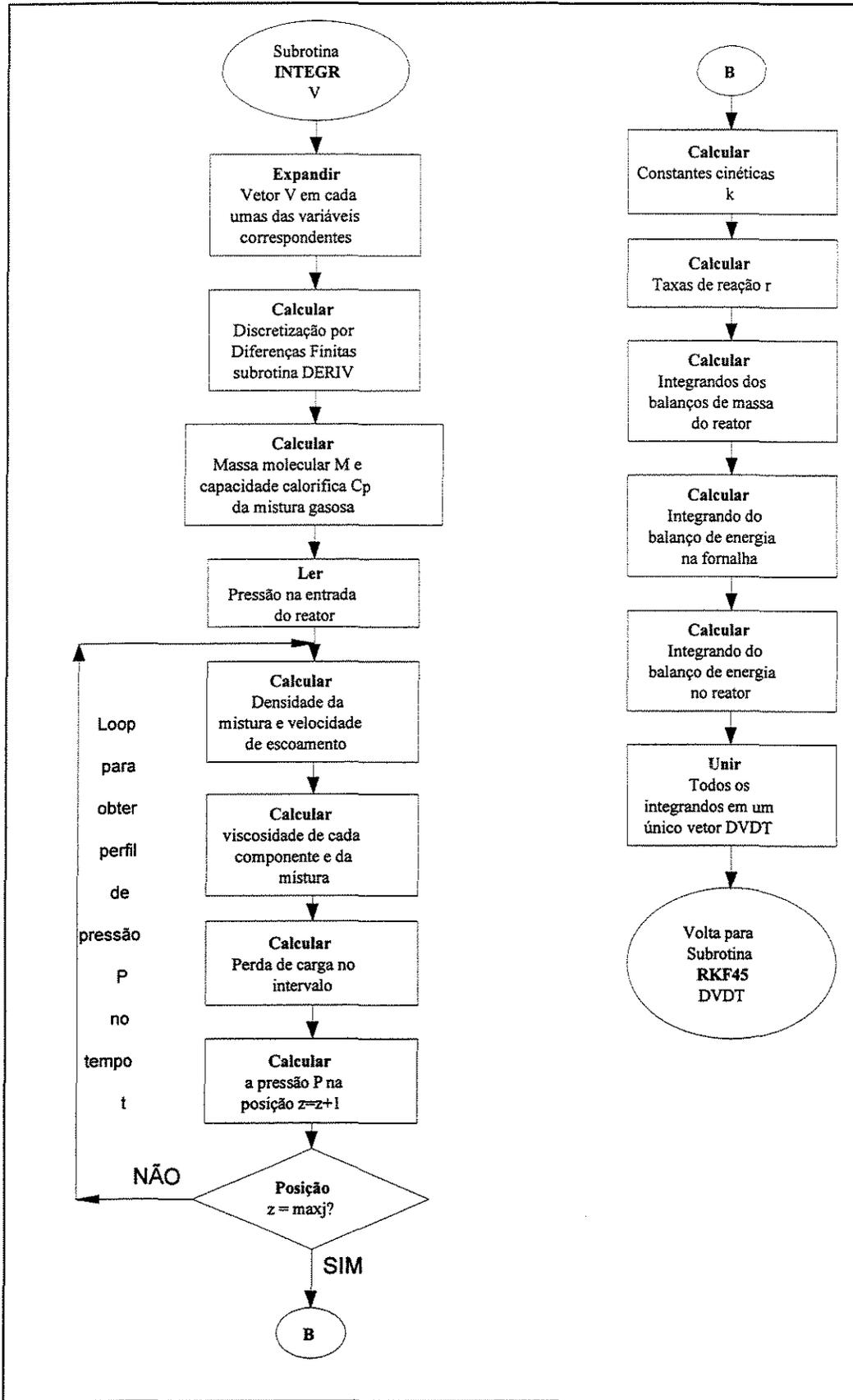


Fig. 4.3: Diagrama de blocos da subrotina INTEGR que calcula os integrandos de RKF45.

Capítulo 5

Simulação do forno de pirólise

Resultados e discussão

5.1 – INTRODUÇÃO

No presente capítulo serão apresentados os resultados obtidos na simulação do forno de pirólise de etano utilizando o modelo matemático e programa computacional descritos no capítulo 4. A partir destes resultados é possível testar o modelo desenvolvido e realizar a análise do comportamento do forno de pirólise de etano.

5.2 – SISTEMA ESTUDADO

O modelo do processo foi simulado para as mesmas condições operacionais utilizadas por RAMAN (1985) em seu modelo estacionário. A Tabela 5.1 resume as condições utilizadas na simulação.

Tabela 5.1: Condições operacionais utilizadas na simulação

Variável	Valor	Variável	Valor
Vazão etano (ω)	0,63 kg/s	Composição (% molar)	98,2 C ₂ H ₆
Razão vapor/etano	0,4 kg vap/kg et		1,0 C ₂ H ₄
Temperatura inicial (T)	953 K		0,8 C ₃ H ₆
Pressão inicial (P)	304 kPa abs	Comprimento do tubo	95 m
Fluxo de calor (Q)	70 kW/m ²	Diâmetro interno tubo	0,108 m
Vazão combustível (ω_c)	0,088261 kg/s	Diâmetro externo tubo	0,116 m

Para realizar a simulação considerou-se que toda a tubulação interna (serpentina) encontrava-se no instante de tempo inicial carregada com a mistura reacional cuja composição é mostrada na Tabela 5.1. Neste mesmo instante foi considerado que a fornalha já se encontrava em regime estacionário, cuja determinação será explicada a continuação. Desta maneira, foi obtida a dinâmica do forno de pirólise e os perfis de temperatura, conversão, pressão e distribuição de produtos ao longo da tubulação, desde o estado inicial até o mesmo atingir o estado estacionário.

5.2.1 – Determinação do regime estacionário da fornalha

Como citado anteriormente, considerou-se que a fornalha já se encontrava no estado estacionário no instante de tempo inicial. Para que o modelo empregado possa ser comparado, a fornalha deve fornecer à mistura reacional o mesmo fluxo de calor utilizado por RAMAN (1985) no seu trabalho. Portanto, deve-se determinar qual é a vazão de combustível que, no estado estacionário, fornece um fluxo de calor de 70 kW/m^2 à mistura reacional no interior da serpentina. Esta determinação foi feita resolvendo a equação (4.37) para o estado estacionário, ou seja para $\frac{dE}{dt} = 0$.

Na resolução desta equação os parâmetros da mesma devem ser conhecidos, sendo empregados neste trabalho os valores apresentados na literatura. A eficiência da fornalha (Y) foi considerada como sendo a fornecida no trabalho de RAMANA, PLEHIERS e FROMENT (1988) para um forno de pirólise industrial. Estes mesmos autores apresentam a temperatura de saída dos gases de combustão (T_g) na indústria, cujo valor foi o empregado na resolução do modelo. A temperatura de entrada do ar na fornalha (T_a) foi considerada como sendo $25 \text{ }^\circ\text{C}$. A capacidade calorífica do ar (cp_{ar}) foi calculada por meio da expressão polinomial fornecida por SMITH, VAN NESS, ABBOTT (2000), cuja faixa de aplicação é de 298 a 2000 K. No caso do poder calorífico do combustível foi empregado o valor sugerido por PERRY (1997) para o gás natural com um mínimo de 86% de metano, que é similar ao empregado no forno simulado. CHAUVEL e LEFEBVRE (1986) afirmam que tubos com espessura entre 7 e 8,5 mm são empregados na pirólise, sendo adotado neste trabalho o valor de 8 mm, o qual se encontra dentro da faixa sugerida pelos autores.

A Tabela 5.2 resume os dados utilizados na determinação do estado estacionário na fornalha.

Tabela 5.2: Dados empregados na determinação do estado estacionário da fornalha

Variável	Valor	Variável	Valor
Eficiência fornalha (Y)	3,0 %	Coeficientes cp_{ar}	a = 3,355
Temp. saída gases (T_g)	1300 K		b = $0,575 \times 10^{-3}$
Temp. entrada do ar (T_a)	998,15 K		c = 0
Poder calorífico comb. (H_c)	52510 kJ/kg		d = $-0,016 \times 10^5$
Comprimento do tubo	95 m	Diâmetro externo tubo	0,116 m

A vazão de combustível necessária para fornecer 70 kW/m^2 à mistura reacional será $\omega_c = 0,088261 \text{ kg/s}$.

5.2.2 – Comportamento do forno de pirólise de etano

Nesta seção será apresentada a dinâmica do forno de pirólise obtida na simulação proposta, bem como os perfis desenvolvidos no interior do mesmo no estado estacionário atingido.

A Figura 5.1 mostra a dinâmica da temperatura de saída da mistura reacional no forno de pirólise de etano desde o tempo inicial até o mesmo atingir o estado estacionário. Como a fornalha já se encontra no estado estacionário no tempo inicial, a figura representa a dinâmica da serpentina interna. Observa-se que o tempo de estabilização do processo é de aproximadamente um segundo, o que era esperado dada a alta velocidade de escoamento da mistura reacional e, portanto, pequeno tempo de residência empregado na pirólise.

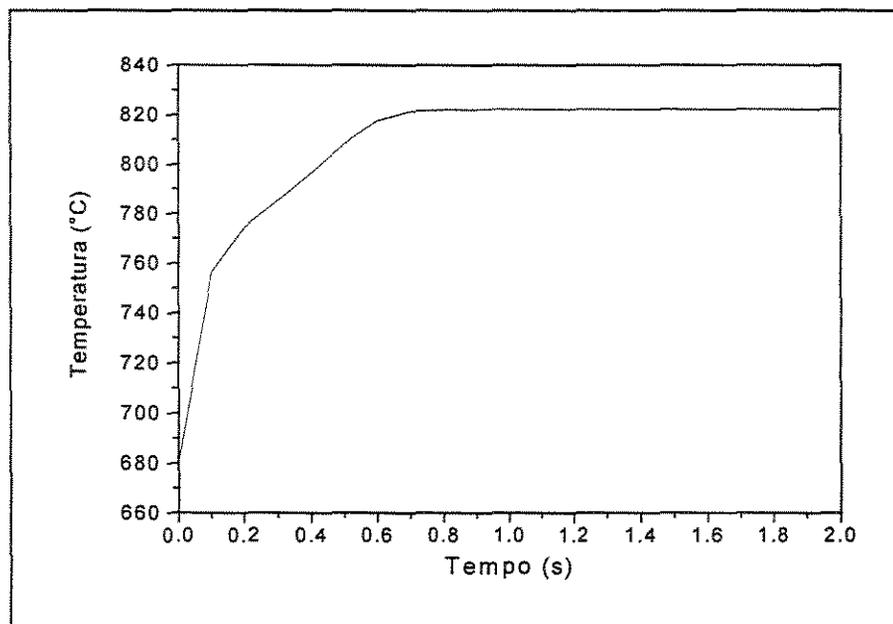


Fig. 5.1: Dinâmica do forno de pirólise de etano

A Figura 5.2 apresenta o perfil de temperatura da mistura reacional no interior do forno de pirólise para o estado estacionário atingido. O mesmo é comparado, com o objetivo de validar o modelo proposto no trabalho, com o perfil obtido por RAMAN (1985) na sua simulação e com o valor de saída da temperatura numa planta industrial indicado por FROMENT (1990).

Observa-se que ambos os perfis comparados são praticamente coincidentes e que a temperatura de saída obtida na simulação proposta no trabalho é muito próxima com a obtida num forno industrial, o que valida o modelo empregado. Vale salientar ainda que a curva do perfil de temperatura sofre uma inflexão, diminuindo o gradiente com que aumenta a temperatura a partir da mesma. Este comportamento é devido a que na seção inicial da serpentina a mistura reacional não se encontra ainda na temperatura mínima necessária para as reações de pirólise acontecerem. Na inflexão é quando se atinge este valor mínimo, e devido à natureza endotérmica das reações envolvidas só uma pequena parte do calor fornecido fica disponível para elevar a temperatura da mistura reacional, o que resulta num menor aumento da mesma a partir deste ponto. A temperatura no ponto de inflexão é de aproximadamente 750 °C, que é a indicada na literatura como sendo a mínima necessária para acontecer a pirólise do etano para o etileno (ver o item 2.2.1).

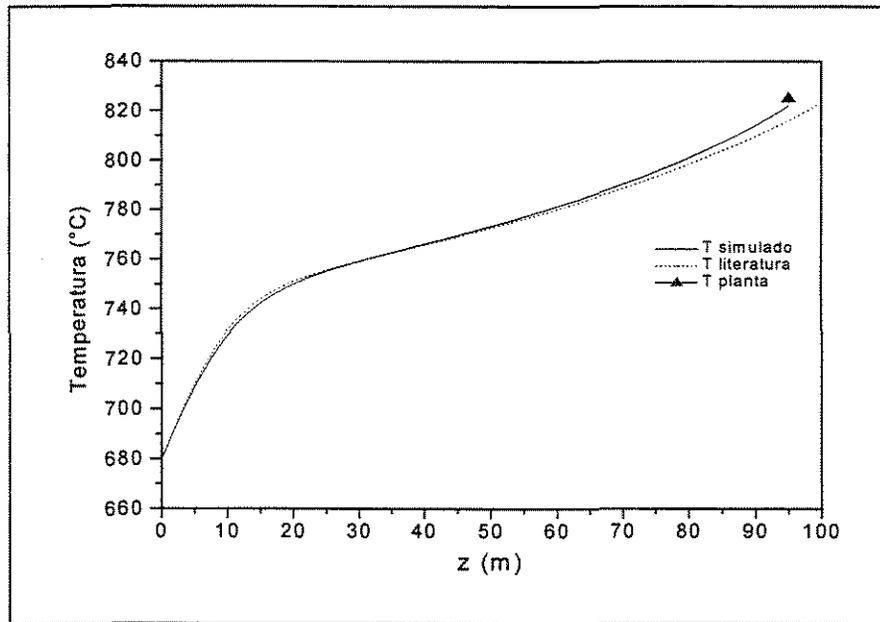


Fig. 5.2: Perfil de temperatura ao longo do forno de pirólise de etano

Na Figura 5.3 é mostrado o perfil da conversão do etano ao longo do forno de pirólise. O mesmo é comparado com o perfil obtido por RAMAN (1985) observando-se que ambos são coincidentes.

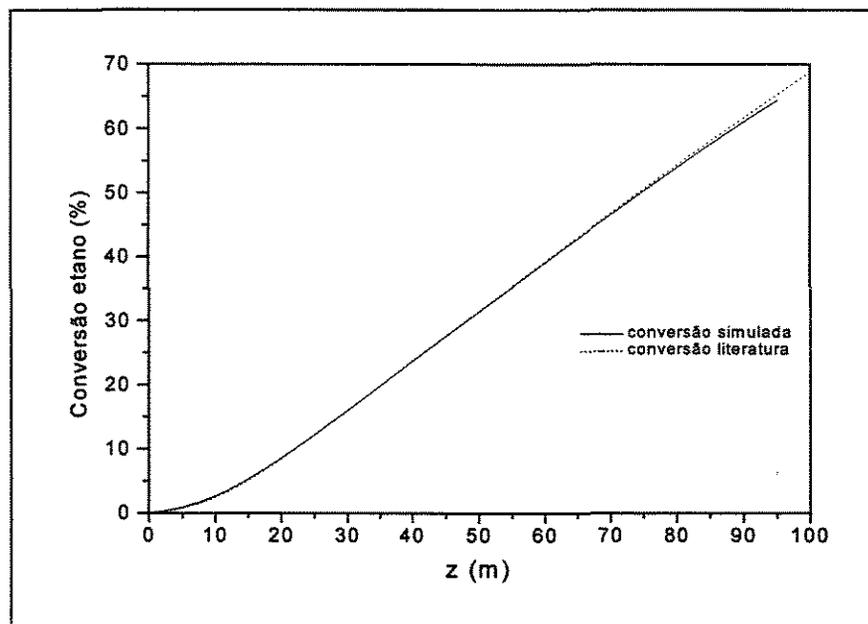


Fig. 5.3: Conversão do etano ao longo do forno de pirólise

Pode-se observar na Figura 5.3 que a conversão apresenta um aumento no seu gradiente na mesma posição em que a temperatura sofre a inflexão. Mostrando, mais uma vez, que é a partir deste ponto que as reações de pirólise acontecem na sua plenitude, e que sem o fornecimento necessário de calor a reação pode ser extinta.

Na Figura 5.4 é apresentado o perfil da pressão total da mistura reacional no interior do forno de pirólise. Novamente o mesmo é comparado com o perfil obtido por RAMAN (1985) na sua simulação e com o valor da pressão total de saída numa planta industrial segundo FROMENT (1990). Observa-se que a simulação proposta prevê a mesma pressão de saída que a encontrada num forno industrial, resultado que serve como validação do modelo proposto. Vale evidenciar também a importância em se considerar o termo da variação da pressão com a variação da velocidade. No presente trabalho foi considerada a variação da pressão devido ao atrito do fluido com as paredes da serpentina (sem considerar as curvas) e devido à variação da velocidade de escoamento ao longo do reator. No entanto, RAMAN (1985) não considerou a variação da pressão com a variação da velocidade no seu trabalho, o que explica a não coincidência entre os dois perfis mostrados na Figura 5.4.

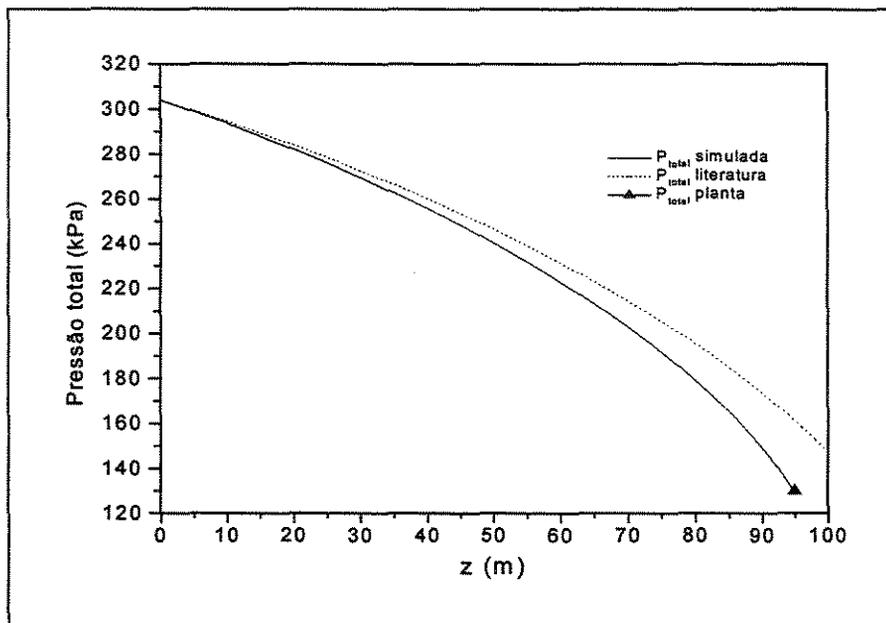


Fig. 5.4: Pressão total da mistura reacional ao longo do forno de pirólise

A Figura 5.5 mostra a distribuição dos produtos ao longo do forno de pirólise de etano. Observa-se que a quantidade de produtos secundários aumenta consideravelmente a medida em que a reação ocorre no interior da serpentina. Como a temperatura e a conversão aumentam também no sentido do escoamento (z), fica comprovada a importância de se utilizar um tempo de residência pequeno que limite a conversão do etano e o aumento de temperatura. Nota-se que o butino, que é o produzido a partir de uma reação que consome etileno (ver item 4.2.1), é o produto secundário que mais aumenta sua produção ao longo do tubo, portanto, na direção do escoamento além de se ter um aumento no consumo do etano tem-se o consumo do etileno, que é o produto de interesse, para produzir um produto indesejado. Resulta então, que a utilização de um reator mais longo ou de um tempo de residência maior, implicaria em um maior custo e um projeto mais complexo para as etapas de purificação que se seguem, devido ao aumento da concentração de produtos secundários na mistura reacional que deixa o forno de pirólise.

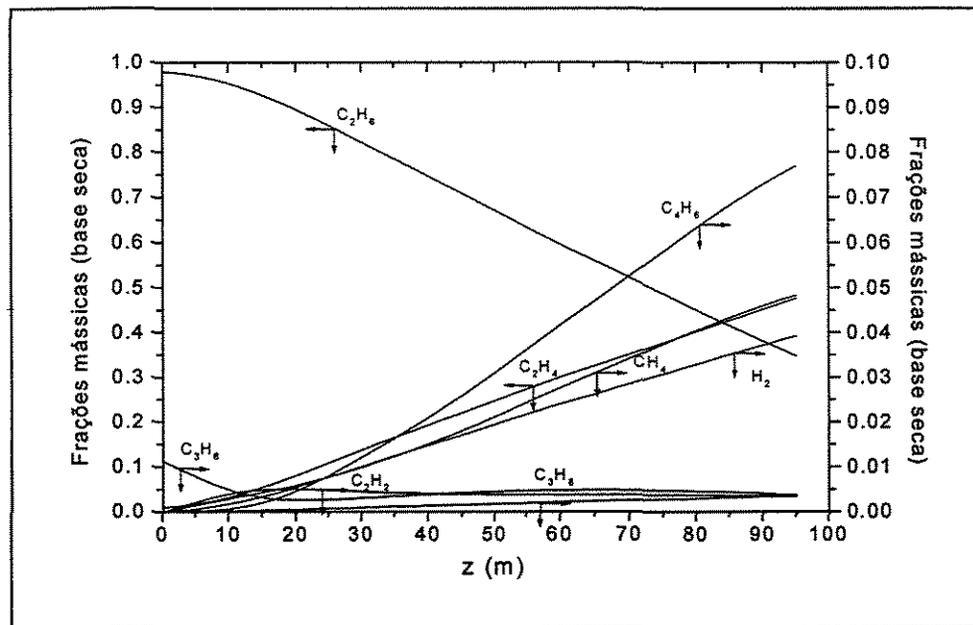


Fig. 5.5: Distribuição dos produtos ao longo do forno de pirólise

Com as condições operacionais mostradas na Tabela 5.1 o forno de pirólise de etano teve uma conversão de 64,43 %, e uma seletividade de 79,35 %. Sendo que em este trabalho a seletividade é definida como a razão entre a variação no número de moles de

etileno e a variação no número de moles de etano. A produção de etileno resulta ser de 0,3002 kg/s. No anexo B encontram-se tabelados os resultados obtidos para a simulação do forno de pirólise de etano.

5.2.3 – Análise da seletividade em diferentes condições operacionais

Dado que a seletividade do processo é um parâmetro de grande importância na economia do mesmo e na complexidade das etapas de separação posteriores, será analisada a influencia da temperatura na mesma. Para isto, foram feitas variações na vazão de combustível utilizada na simulação apresentada anteriormente de maneira a se fornecer à mistura reacional diversos fluxos de calor.

A Tabela 5.3 apresenta de forma resumida os resultados obtidos para as variações percentuais na vazão de combustível aplicadas em cada caso.

Tabela 5.3: Seletividade do etileno em varias condições operacionais

ω_c (kg/s)	Conv. (%)	T (°C)	Selet. (%)	ω_{etileno} (kg/s)	$\omega_{\text{prod sec}}$ (kg/s)
-20%	51,00	796,13	80,86	0,2432	0,0844
-15%	54,38	802,35	80,44	0,2577	0,0908
-10%	57,75	808,73	80,05	0,2720	0,0973
-5%	61,10	815,31	79,68	0,2861	0,1038
0,088261	64,43	822,15	79,35	0,3002	0,1103
5%	67,73	829,30	79,04	0,3141	0,1168
10%	70,99	836,86	78,78	0,3278	0,1232
15%	74,20	844,92	78,52	0,3413	0,1295
20%	77,35	853,63	78,31	0,3546	0,1356

Analisando a Tabela 5.3 pode-se observar que diminuindo-se a vazão de combustível, portanto, diminuindo-se a quantidade de calor fornecida, aumenta-se levemente a seletividade do processo. Não obstante, a conversão do etano diminui consideravelmente e a quantidade de etileno produzido (ω_{etileno} na Tabela 5.3) também diminui consideravelmente. Desta maneira o aumento na seletividade obtido não compensa a diminuição na produção do etileno e na conversão do etano, resultando num produto efluente do forno de pirólise com muita matéria prima não reagida, o que também diminui a economia do processo.

Por outro lado, aumentando-se a vazão de combustível, ou seja, o calor fornecido à mistura reacional, a seletividade diminui. Neste caso a conversão do etano aumenta consideravelmente assim como a quantidade de etileno produzida. Porém, a quantidade de produtos secundários produzida ($\omega_{\text{prod séc}}$), como um todo, também aumenta, sendo que este aumento é maior que o aumento na produção de etileno o que explica a diminuição da seletividade.

Conclui-se então que a seletividade é sensível a mudanças no fluxo de calor fornecido à mistura reacional. Um aumento do fluxo de calor diminui a seletividade devido a um aumento da produção de produtos indesejados, e uma diminuição do fluxo de calor a aumenta, mas prejudica a produção de etileno e converte pouca matéria prima.

Assim, pode-se observar que as condições operacionais apresentadas na Tabela 5.1 levam ao resultado com maior benefício econômico do ponto de vista da produção de etileno. Portanto, a temperatura de saída da mistura reacional no estado estacionário obtido nestas condições será considerada como “set-point” no desenvolvimento da estratégia de controle proposta no seguinte capítulo deste trabalho.

5.2.4 – Dinâmica do forno de pirólise

Na Figura 5.6 é apresentado o comportamento da temperatura de saída da mistura reacional do forno de pirólise para três variações em degrau na vazão de combustível na fornalha. Todas as variações foram aplicadas no instante de tempo correspondente a 1,1 segundos, sendo que anteriormente o forno de pirólise se encontrava no estado estacionário

descrito no item 5.2.2. As magnitudes das variações implementadas foram de um degrau de $\pm 20\%$ e $+10\%$.

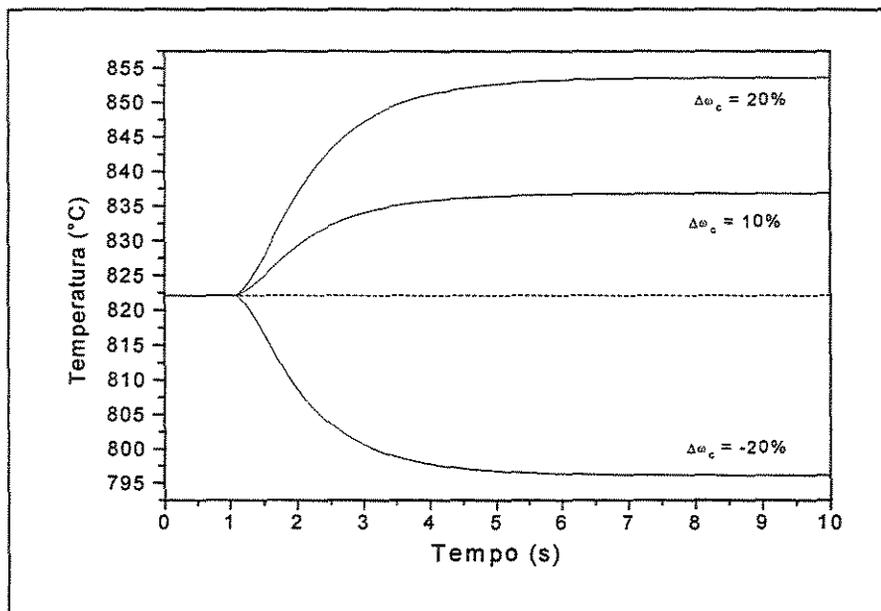


Fig. 5.6: Comportamento da temperatura de saída do forno de pirólise para diferentes perturbações na vazão de combustível

Analisando a Figura 5.6 observa-se que a dinâmica do forno para perturbações na vazão de combustível tem a forma característica dos processos que podem ser aproximados como sendo de primeira ordem com tempo morto, dada a leve inflexão que se observa no início de cada curva de reação obtida para cada perturbação implementada. Para variações da mesma grandeza, porém em direções opostas, a resposta do sistema apresenta praticamente a mesma amplitude e forma, o que mostra uma linearidade do sistema para as perturbações introduzidas. Nota-se, também, que a resposta para uma perturbação de 20% é praticamente o dobro que para uma variação de 10% na vazão de combustível, e ambas apresentam formas muito similares, o que é mais um indicativo da linearidade do sistema. A forma da curva de reação do sistema indica também que o processo se auto regula para variações na vazão de combustível já que um novo estado estacionário é atingido. Observa-se que a resposta do processo é rápida, já que o mesmo se estabiliza em aproximadamente 5 segundos.

5.3 – CONCLUSÃO

O modelo implementado para o forno de pirólise de etano permite obter o comportamento dinâmico do sistema de maneira a poder se implementar uma estratégia de controle no mesmo. Pode ser observado um comportamento linear da temperatura da corrente efluente do forno de pirólise para uma variação na vazão de combustível na fornalha.

A partir dos resultados do estado estacionário obtidos neste trabalho pode-se concluir que o modelo proposto permite analisar o comportamento de um forno de pirólise de etano, podendo ser estudada a influência das variáveis operacionais no seu desempenho.

Os resultados obtidos mostram a influência, e conseqüente importância, do calor fornecido à mistura reacional, na composição de saída do forno e, portanto, na seletividade do processo, o que afeta diretamente a economia do mesmo.

Uma vez que a dinâmica do forno de pirólise é rápida, é de grande importância a implementação de uma estratégia de controle que mantenha as condições operacionais, dado que qualquer perturbação é rapidamente sentida na saída do processo.

Capítulo 6

Estratégia de controle

Resultados e discussão

6.1 – INTRODUÇÃO

Neste capítulo será apresentada a estratégia de controle proposta para o forno de pirólise de etano e os resultados obtidos na mesma. Também será analisada a influência dos diferentes parâmetros de sintonia no comportamento do controlador, assim como na resposta em malha fechada do sistema.

Em primeiro lugar será aplicada uma técnica de controle convencional para controlar a temperatura de saída da mistura reacional do forno de pirólise, manipulando a vazão de combustível na fornalha. Em seguida será desenvolvido um controlador DMC para realizar a aplicação da mesma estratégia de controle. Desta maneira em ambas técnicas o controlador será com uma única entrada e uma única saída, ou seja, SISO. Finalmente os resultados obtidos com ambos controladores serão comparados.

Um motivo para se escolher a temperatura de saída do forno de pirólise como a variável controlada é a mesma ser considerada a nível industrial um importante indicador da operação do forno (CHAUVEL e LEFEBVRE, 1986). A vazão de combustível é a variável manipulada, pois alterando a mesma pode se ajustar a quantidade de calor fornecida à mistura reacional.

6.2 – CONTROLE CONVENCIONAL

Nesta seção será aplicada ao forno de pirólise, com o objetivo de manter a temperatura de saída da mistura reacional em um valor constante pré-determinado (“*set-point*”), uma técnica convencional de controle por retro-alimentação (“*feed-back*”). A Figura 6.1 mostra a configuração típica de este tipo de malha de controle.

Para se poder aplicar a técnica de controle, deve ser feita a caracterização do processo. Uma vez conhecido o mesmo, será escolhida qual a melhor configuração do tipo PID, proporcional integral derivativo, a ser utilizada no controlador. Após selecionar o tipo de controlador empregado, será realizada a sintonia dos seus parâmetros.

O comportamento do forno de pirólise de etano em malha fechada com o controlador desenvolvido será analisado para variações no “*set-point*” da temperatura de saída, caso servo, e para a aplicação de algumas perturbações, caso regulador.

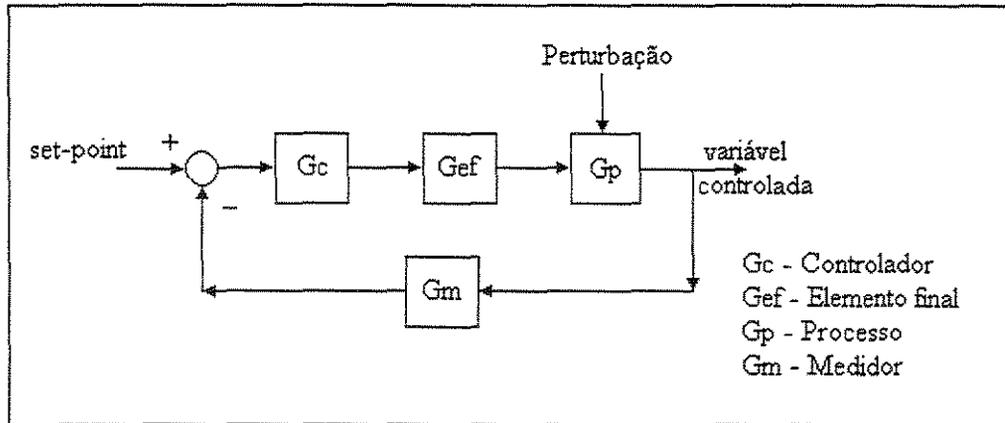


Fig. 6.1: Malha de controle por retro-alimentação.

6.2.1 – Caracterização do processo

Utilizando o modelo dinâmico cujos resultados foram apresentados no capítulo anterior, pode-se realizar a caracterização da resposta do processo para uma perturbação. Esta caracterização consiste em identificar os parâmetros que descrevem o comportamento do sistema tanto qualitativamente como quantitativamente.

O método empregado é o desenvolvido por Cohen e Coon chamado Método da Curva de Reação do processo. Estes autores observaram que, para a maioria dos processos químicos, a resposta do processo em malha aberta a uma variação em degrau de amplitude M na variável manipulada, tem uma forma sigmoïdal (STEPHANOPOULOS, 1984). Esta curva pode ser aproximada adequadamente por um modelo de primeira ordem com tempo morto, cuja função de transferência no domínio de Laplace é dada por,

$$G_p(s) = \frac{K_p e^{-\theta_d s}}{\tau s + 1} \quad (6.1)$$

onde: K_p – ganho estático

τ – constante de tempo

θ_d – tempo morto

são os parâmetros que devem ser determinados para caracterizar o processo.

A curva de reação é obtida abrindo-se a malha de controle desconectando o controlador do elemento final de controle e aplicando uma variação de magnitude M na variável manipulada. Se não se considera a dinâmica do elemento final de controle e do instrumento de medida a função de transferência em malha aberta será igual à função de transferência do processo descrita pela equação 6.1

No presente trabalho a magnitude M da perturbação, em valor percentual, introduzida na variável manipulada, a vazão de combustível, é de +20%. A Figura 6.2 mostra o comportamento no tempo da variável manipulada, a temperatura da corrente efluente do forno de pirólise, para a perturbação aplicada.

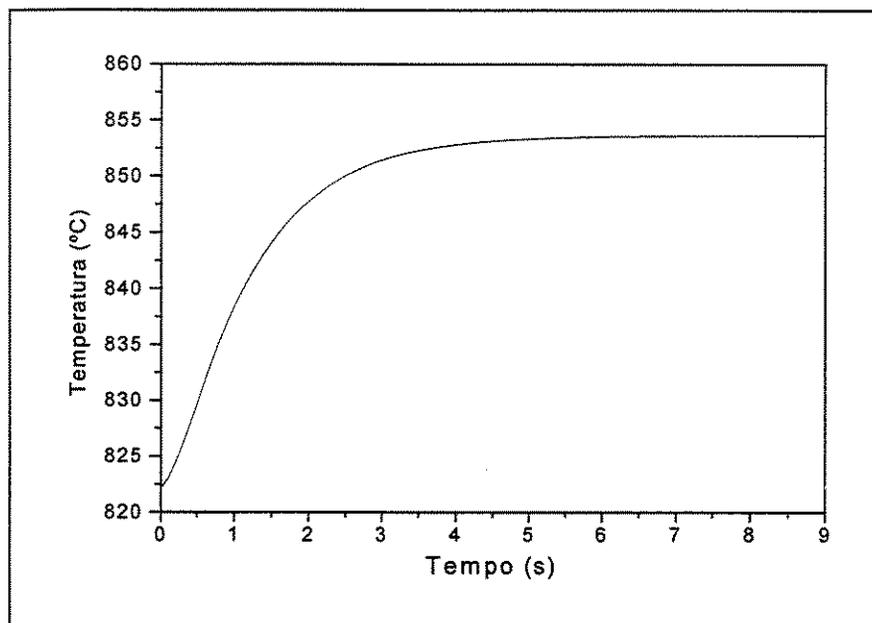


Fig. 6.2: Curva de reação em malha aberta do forno de pirólise de etano.

A determinação dos parâmetros pode ser feita tanto graficamente quanto analiticamente. Dada a dificuldade de se determinar exatamente os pontos necessários e ao maior erro que o método gráfico possui, optou-se pela determinação analítica de K_p , τ , e θ_d segundo o procedimento que é explicado por SEBORG (1989).

O ganho estático do processo é determinado calculando a razão entre a mudança no valor da temperatura no estado estacionário final e inicial, e o valor da mudança em degrau aplicada, ou seja,

$$K_p = \frac{\Delta T}{\Delta \omega_c} = \frac{T_{\text{estado estacionário final}} - T_{\text{estado estacionário inicial}}}{\omega_{c \text{ estado estacionário final}} - \omega_{c \text{ estado estacionário inicial}}} \quad (6.2)$$

A constante de tempo (τ) e o tempo morto (θ_d) são determinados pelo método de Sundarensan e Krishnaswamy. Os autores propõem que se estimem da curva de reação os tempos t_1 e t_2 correspondentes a 35,3% e 85,3% da resposta do processo. Desta maneira o tempo morto e a constante de tempo podem ser calculados pelas seguintes equações,

$$\begin{aligned} \theta_d &= 1,3 t_1 - 0,29 t_2 \\ \tau &= 0,67 (t_2 - t_1) \end{aligned} \quad (6.3)$$

Os resultados obtidos para a determinação dos parâmetros da função de transferência utilizando a curva de reação mostrada na Figura 6.2 encontram-se na Tabela 6.1 a continuação.

Tabela 6.1: Valores obtidos dos parâmetros de caracterização do processo.

Ganho estático (K_p)	Constante de tempo (τ)	Tempo morto (θ_d)
1783,35 °C/(kg/s)	1,041 s	0,244 s

Observa-se que a constante de tempo do processo é pequena, ou seja, que a resposta do mesmo é rápida, o que era esperado da análise da dinâmica do mesmo realizada anteriormente.

6.2.2 – Determinação e sintonia do controlador clássico

Uma vez determinados os parâmetros que descrevem o comportamento dinâmico do processo, deve se realizar a escolha da configuração do tipo PID a ser empregada no controlador clássico, e a sintonia do mesmo.

SMITH (1985) recomenda que quando a razão entre o tempo morto (θ_d) e a constante de tempo (τ) não supera o valor de 0,25 deve-se utilizar um controlador PI. Analisando os resultados apresentados na Tabela 6.1 observa-se que no sistema em estudo a

razão entre (θ_d) e (τ) é de 0,234 e, portanto, um controlador do tipo PI será utilizado na malha de controle.

A lei de controle para o controlador do tipo PI digital, a ser implementado por computador, na sua forma de velocidade é a seguinte,

$$\Delta u_k = u_k - u_{k-1} = K_c \left[(e_k - e_{k-1}) + \frac{\Delta t}{\tau_I} e_k \right] \quad (6.4)$$

$$e_k = y_{sp_k} - y_k$$

onde: K_c – ganho do controlador

τ_I – constante de tempo integral

Δt – tempo de amostragem

e_k – erro entre o “set-point” e a variável controlada no tempo k

u_k – saída do controlador no tempo k, valor da variável manipulada

A equação (6.4) foi implementada para o modelo dinâmico do forno de pirólise de etano utilizando uma subrotina em linguagem FORTRAN. Esta subrotina foi chamada de DIGPI e a listagem da mesma encontra-se no anexo A.

É necessário para poder implementar o controlador que seja feita a sintonia do mesmo para o processo, ou seja que seus parâmetros (K_c e τ_I) sejam ajustados. O método utilizado neste trabalho é o de Cohen-Coon, onde os valores dos parâmetros são calculados de acordo com as equações abaixo,

$$K_c = \frac{1}{K_p} \frac{\tau}{\theta_d} \left[0,9 + \frac{\theta_d}{12 \tau} \right] \quad (6.5)$$

$$\tau_I = \frac{\theta_d \left[30 + 3 \left(\frac{\theta_d}{\tau} \right) \right]}{9 + 20 \left(\frac{\theta_d}{\tau} \right)} \quad (6.6)$$

Substituindo-se os valores dos parâmetros de caracterização do processo apresentados na Tabela 6.1, obtém-se a sintonia do controlador. O resultado obtido encontra-se na Tabela 6.2 a seguir

Tabela 6.2: Resultado da sintonia por Cohen-Coon do controlador PI.

Ganho do controlador (K_c)	Constante de tempo integral (τ_I)
$2,20 \times 10^{-3}$ (kg/s)/ °C	0,547 s

A Figura 6.3 mostra o comportamento em malha fechada da variável controlada, a temperatura da corrente efluente do forno de pirólise, para uma mudança no seu “*set-point*” da mesma (caso servo). O controlador PI empregado utiliza a sintonia proposta na Tabela 6.2 e um tempo de amostragem de 0,1 segundo. O “*set-point*” da variável controlada foi mudado de 822,15 °C para 842,15 °C no instante de tempo igual a 0,6 segundos.

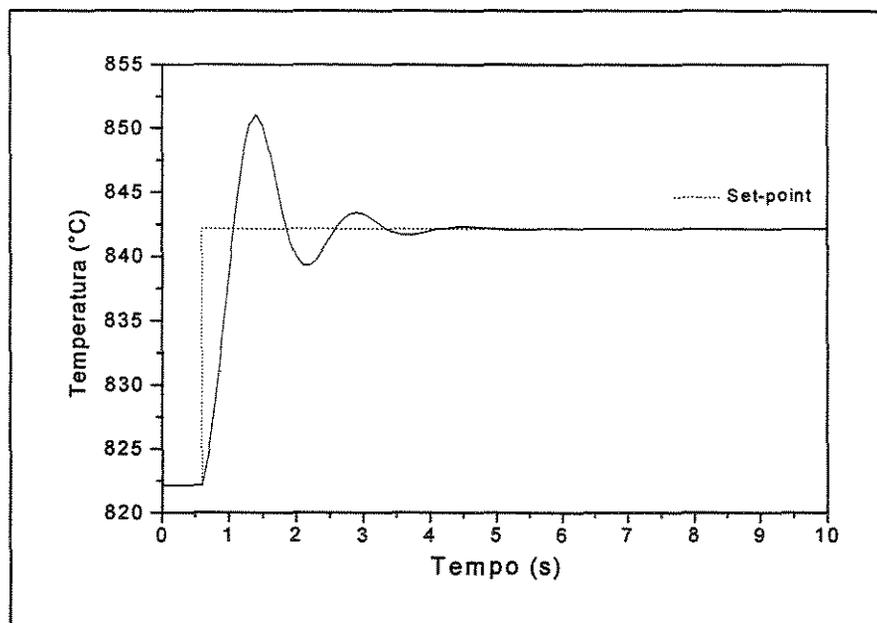


Fig. 6.3: Comportamento da variável controlada, para o controlador PI, dada uma mudança no “*set-point*”.

Analisando a Figura 6.3, nota-se que a mesma apresenta o formato típico da resposta obtida com um controlador sintonizado pelo método de Cohen-Coon, podendo se observar a razão de decaimento de um quarto e o comportamento oscilatório com uma sobre elevação inicial importante. As oscilações mostram que o processo que em malha aberta apresentava uma dinâmica de primeira ordem com tempo morto, apresenta agora em

malha fechada, pela introdução do controlador, um comportamento dinâmico de segunda ordem. O tempo de estabilização da resposta é de aproximadamente 5 segundos.

A Figura 6.4 mostra as ações de controle, ou seja, o comportamento em malha fechada da variável manipulada, implementadas pelo controlador PI para obter a resposta descrita pela Figura 6.2. Podemos observar que a primeira ação de controle é brusca mudando a vazão de combustível em quase 60% seu valor o que resulta prejudicial para o elemento final de controle.

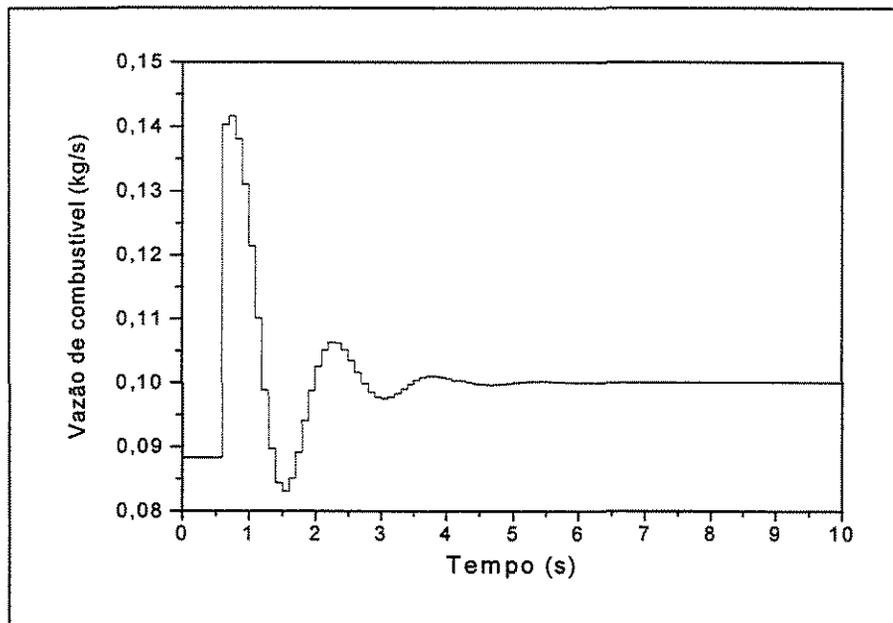


Fig. 6.4: Comportamento da variável manipulada, para o controlador PI, dada uma mudança no “*set-point*”.

A continuação foram feitas variações, sendo que só algumas delas foram selecionadas, nos parâmetros do controlador com o objetivo de analisar a influência dos mesmos no seu desempenho, e de obter uma melhor sintonia. O controlador sintonizado por Cohen-Coon foi tomado como caso base e será chamado de controlador A, sendo a variação do “*set-point*” foi introduzida aos 0,6 segundos.

A Tabela 6.3 mostra os diferentes conjuntos de parâmetros que foram utilizados, assim como o valor da integral do erro absoluto (IAE), que é a somatória dos valores absolutos de todos os erros entre a variável controlada e o “*set-point*”. O valor do IAE foi o índice de desempenho utilizado para determinar qual é a sintonia mais adequada.

Tabela 6.3: Diferentes sintonias do controlador PI.

Controlador	K_c (kg/s)/ °C	τ_I (s)	IAE
A	$2,20 \times 10^{-3}$	0,547	128,58
B	$2,70 \times 10^{-3}$	0,547	133,84
C	$1,70 \times 10^{-3}$	0,547	127,14
D	$2,20 \times 10^{-3}$	0,747	109,18
E	$2,20 \times 10^{-3}$	0,347	192,19
F	$1,70 \times 10^{-3}$	0,747	109,78

A Figura 6.5 mostra o comportamento da variável controlada para os exemplos A, B e C, nos quais foram modificados os valores do ganho do controlador deixando o valor da constante de tempo integral constante.

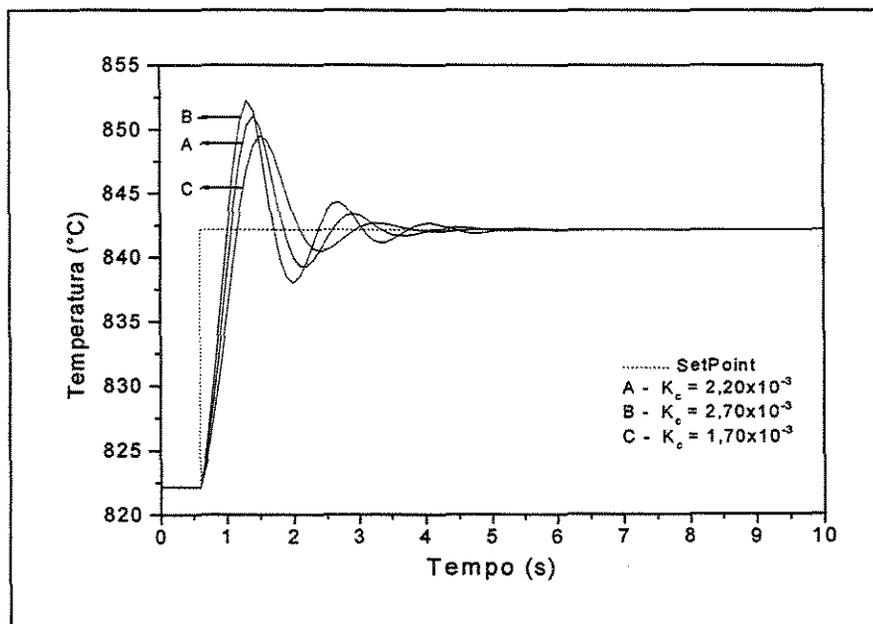


Fig. 6.5: Influência do ganho do controlador (K_c) no comportamento da variável controlada, para o controlador PI, dada uma mudança no “set-point”.

Analisando-se a figura 6.5, observa-se que aumentando K_c a curva atinge por primeira vez o “*set-point*” mais rapidamente, porém apresenta uma maior sobre elevação e é introduzida uma maior oscilação na resposta, o que segundo SEBORG (1989) é o comportamento geral esperado para este tipo de controlador. Nota-se, também, que o aumento do ganho do controlador aumenta o tempo de estabilização da resposta devido à maior oscilação introduzida. Antes de decidir qual conjunto de parâmetros apresenta a melhor resposta devemos analisar também o comportamento da variável manipulada.

A Figura 6.6 apresenta as ações de controle implementadas pelo controlador PI nos três casos em estudo. Na mesma, pode-se observar que o aumento do ganho do controlador implica em ações de controle mais severas. As mudanças bruscas na variável controlada são prejudiciais para o elemento final de controle, como já foi citado anteriormente, e a possibilidade do limite físico da válvula ser atingido aumenta.

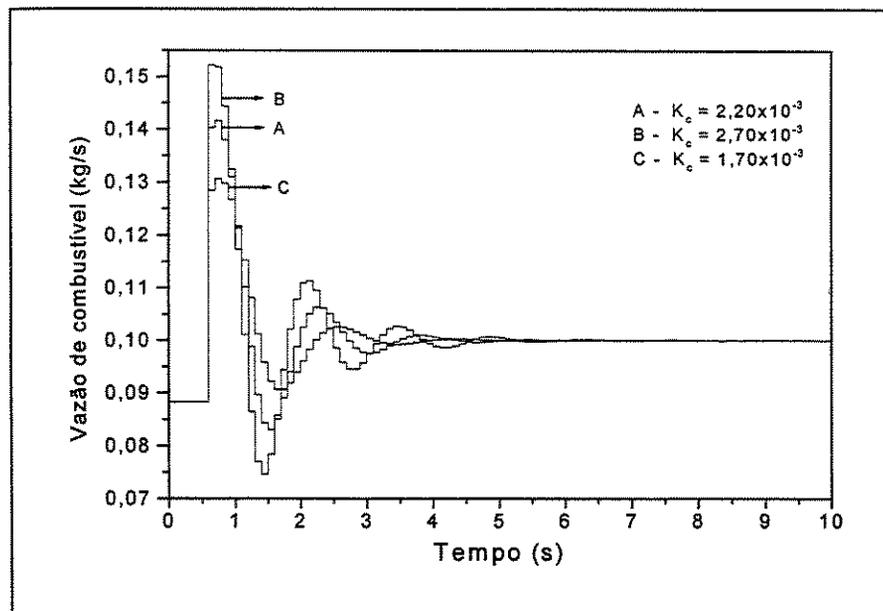


Fig. 6.6: Influência do ganho do controlador (K_c) no comportamento da variável manipulada, para o controlador PI, dada uma mudança no “*set-point*”.

Na Figura 6.7 é mostrado o comportamento da variável controlada para os exemplos A, D e E, nos quais foram modificados os valores da constante de tempo integral do controlador deixando o valor do ganho do controlador constante.

Analisando a Figura 6.7 observa-se que quando o τ_I do controlador diminui a resposta do processo se torna mais oscilatória e a sobre elevação aumenta. Segundo STEPHANOPOULOS (1984) este é o comportamento esperado neste tipo de controlador. Observa-se, também, que o tempo de estabilização da resposta é diminuído quando se aumenta, a constante de tempo integral do controlador.

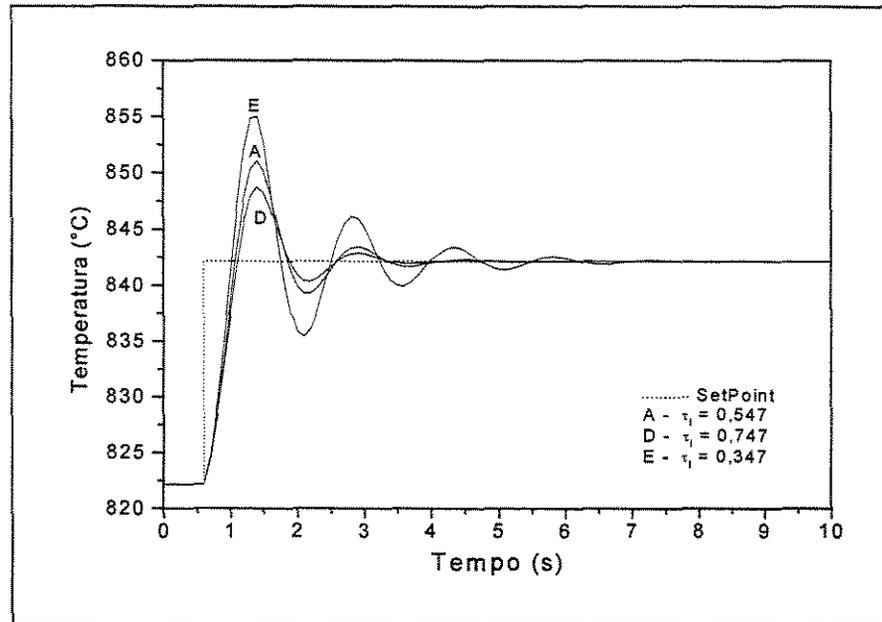


Fig. 6.7: Influência do tempo integral (τ_I) no comportamento da variável controlada, para o controlador PI, dada uma mudança no “set-point”.

A Figura 6.8 apresenta as ações de controle implementadas pelo controlador PI nos três casos em estudo. Observa-se, na mesma, que o aumento da constante de tempo integral resulta em ações de controle mais suaves. Isto resulta em um melhor desempenho do controlador, pois preserva o elemento final de controle.

A análise das Figuras 6.5 e 6.6 permite concluir que o controlador C com um ganho $K_c = 1,7 \times 10^{-3}$ foi o que apresentou melhor desempenho entre os comparados. Por outra parte, a análise das Figuras 6.7 e 6.8 determina que, entre os comparados, o desempenho melhor é o do controlador D com tempo integral $\tau_I = 0,747$. Devido a estas conclusões, decidiu-se realizar uma comparação entre os exemplos C, D e F, sendo este último um novo controlador sintonizado com os valores $K_c = 1,7 \times 10^{-3}$ e $\tau_I = 0,747$ que resultaram ser os melhores em cada comparação.

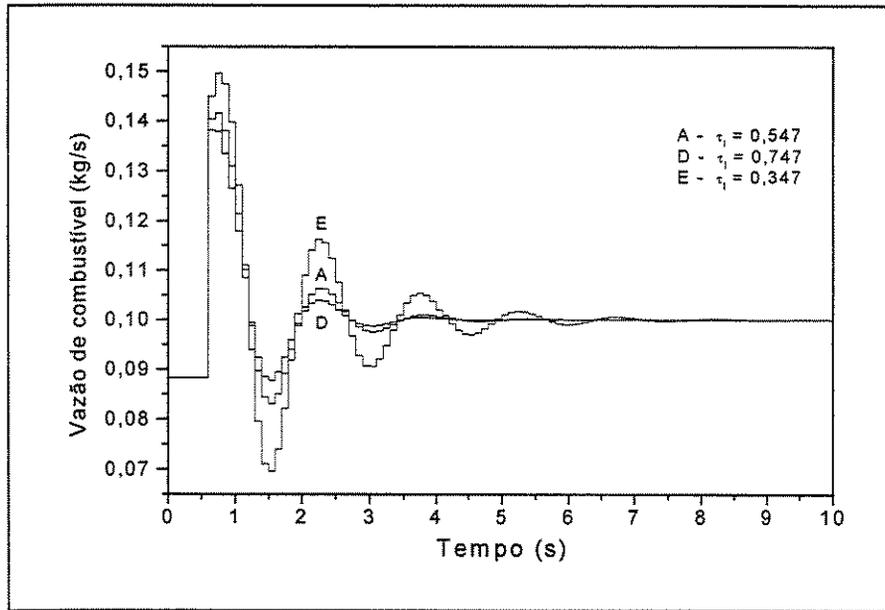


Fig. 6.8: Influência do tempo integral (τ_i) no comportamento da variável manipulada, para o controlador PI, dada uma mudança no “set-point”.

A Figura 6.9 mostra o comportamento da variável controlada para os exemplos C, D e F, com o objetivo de definir qual é a sintonia mais adequada para o controlador PI.

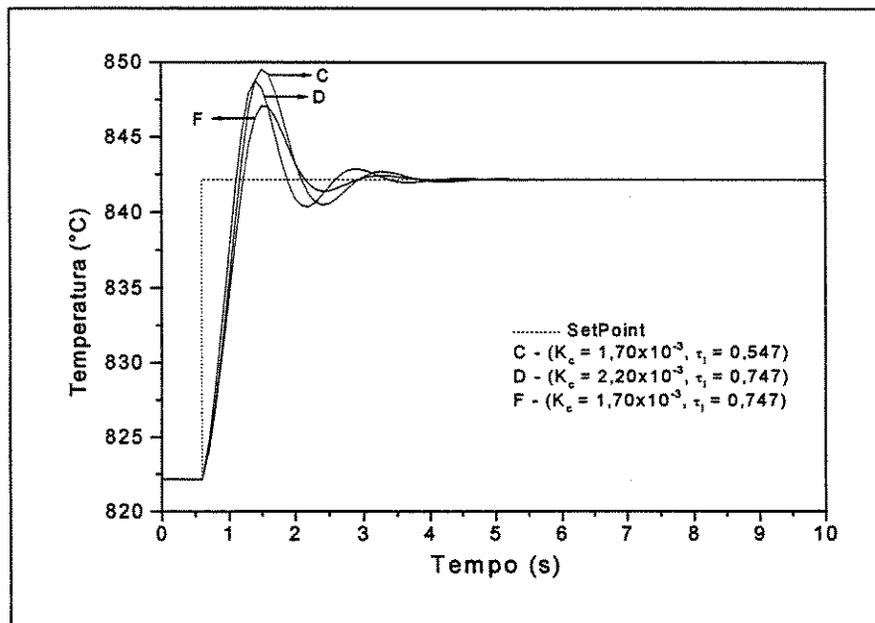


Fig. 6.9: Comportamento da variável manipulada, para três sintonias do controlador PI empregadas, dada uma mudança no “set-point”.

Observa-se na Figura 6.9 que o controlador F apresenta a resposta com menor sobre elevação, menor oscilação e que se estabiliza mais rapidamente. Resta agora observar o comportamento da variável manipulada, que é apresentado na Figura 6.10.

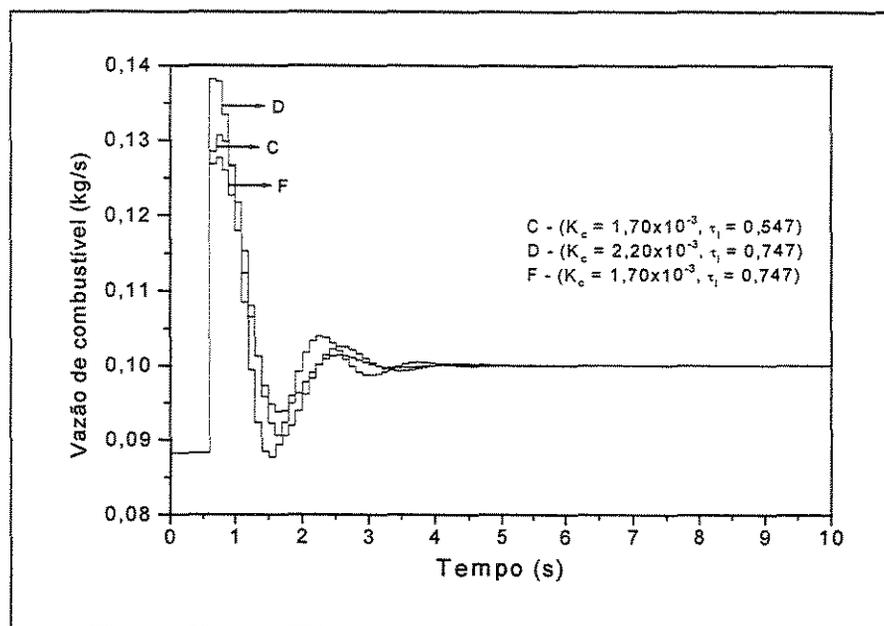


Fig. 6.10: Comportamento da variável controlada, para três sintonias do controlador PI empregadas, dada uma mudança no “set-point”.

Analisando a Figura 6.10 resulta, novamente, que o controlador F apresenta a resposta com variações menos severas da variável manipulada.

Pode-se, portanto, concluir da análise de ambas figuras (6.9 e 6.10) que o controlador PI com o melhor desempenho é o sintonizado com os valores utilizados no exemplo F. Analisando os valores da IAE apresentados na Tabela 6.3 observa-se que o controlador que apresenta o menor valor é o D, porém a diferença entre este valor e o do exemplo F é desprezível. Portanto, utilizando a IAE como índice de desempenho pode se afirmar que os dois melhores controladores são sintonizados segundo os valores do exemplo D e F. Da comparação conjunta da IAE e das Figuras 6.9 e 6.10 conclui-se, então, que a sintonia do exemplo F é a que resulta em um melhor desempenho do controlador PI.

A continuação será aplicado ao forno de pirólise de etano o controle preditivo por matriz dinâmica, DMC.

6.3 – CONTROLE POR MATRIZ DINÂMICA (DMC)

O controlador DMC foi desenvolvido em linguagem FORTRAN numa subrotina chamada CONTROL que se encontra no anexo A.

Para realizar a implementação do controlador por matriz dinâmica ao processo é necessário obter o modelo de convolução que será utilizado pelo mesmo. Após superar esta etapa deve ser realizada a sintonia do controlador definindo os parâmetros do mesmo, sendo estes o horizonte do processo, o horizonte de predição, o horizonte de controle e o fator de supressão.

O comportamento do forno de pirólise de etano em malha fechada com o controlador desenvolvido será analisado para variações no “*set-point*” da temperatura de saída, caso servo, e para a aplicação de algumas perturbações, caso regulador.

6.3.1 – Obtenção do modelo de convolução

As ações de controle no controlador DMC são calculadas utilizando um modelo de convolução discreto. Os coeficientes do modelo são obtidos introduzindo-se uma perturbação em degrau na variável controlada e observando-se o comportamento em malha aberta da variável controlada.

No presente trabalho foi introduzida uma perturbação de 20% na vazão de combustível para se obterem os coeficientes de resposta ao degrau e impulso. Para se ter os coeficientes normalizados, ou seja, para se ter a resposta a um degrau unitário, dividiram-se os valores da variável controlada obtidos pelo valor da mudança aplicada na variável manipulada. O horizonte do processo (N), ou seja, o número de termos do modelo de convolução, deve ser o suficientemente grande para não acontecerem erros de truncamento quando for realizada a predição. Isto significa que o processo deve estar o mais próximo possível do novo estado estacionário. SEBORG (1989) recomenda que se utilize um horizonte de processo tal que seu produto com o tempo de amostragem corresponda a 99% do tempo de resposta do processo em malha aberta. Aplicando esta recomendação com um tempo de amostragem de 0,1 segundo obteve-se um horizonte do processo $N = 50$. Os coeficientes de resposta ao degrau e impulso obtidos, para a temperatura da corrente

efluente do forno de pirólise dada uma variação na vazão de combustível, encontram-se tabelados no anexo B.

6.3.2 – Sintonia do controlador DMC

Uma vez determinado o modelo de convolução a ser utilizado, deve-se realizar a sintonia dos demais parâmetros do controlador para o forno de pirólise. Inicialmente foi sintonizado um controlador de acordo com as diretrizes sugeridas por DOUGHERTY e COOPER (2003). Nesta sintonia foi considerado que as matrizes peso eram definidas como sendo $W_1 = I$ e $W_2 = fI$, onde I é a matriz identidade e f o fator de supressão.

Estes autores realizam a sintonia do controlador considerando que o processo pode ser aproximado por um modelo de primeira ordem com tempo morto, sendo utilizado o determinado no item 6.2.1 deste trabalho. O primeiro passo consiste em determinar o tempo de amostragem (Δt) a ser empregado pelo controlador, sendo que o mesmo deve satisfazer as condições abaixo,

$$\Delta t \leq 0,1 \tau \quad \text{e} \quad \Delta t \leq 0,5 \theta_d \quad (6.7)$$

Substituindo os valores de τ e θ_d obtém-se que o tempo de amostragem do controlador deve ser como máximo $\Delta t = 0,1$ s, conforme o valor utilizado para determinar o horizonte do processo.

A continuação deve se determinar o valor do horizonte de predição (V). Os autores indicam que o mesmo seja calculado utilizando a equação a seguir,

$$\begin{aligned} V &= \text{Int} \left(\frac{5 \tau}{\Delta t} + k \right) \\ k &= \text{Int} \left(\frac{\theta_d}{\Delta t} + 1 \right) \end{aligned} \quad (6.8)$$

Observa-se na equação (6.8) que o valor do horizonte deve ser a parte inteira do número calculado utilizando a expressão sugerida. Substituindo os valores de τ , θ_d e Δt obtém-se um valor do horizonte de predição igual a 55. Os autores sugerem que o mesmo seja no máximo igual ao horizonte do processo e, portanto, optou-se por adotar como horizonte de predição $V = 50$ que é o valor determinado para o horizonte do processo.

O horizonte de controle (U) é determinado, segundo os autores, utilizando a expressão a continuação,

$$U = \text{Int} \left(\frac{\tau}{\Delta t} + k \right) \quad (6.9)$$

Observa-se que novamente o valor do horizonte deve ser a parte inteira do número calculado. Substituindo os valores de τ , Δt e k obtém-se, considerando a parte inteira do resultado, um valor do horizonte de controle igual a 13.

Resta determinar o valor do fator de supressão, sendo que o mesmo é calculado utilizando a seguinte equação,

$$f = \frac{U}{10} \left[\frac{3,5 \tau}{\Delta t} + 2 - \frac{U-1}{2} \right] K_p^2 \quad (6.10)$$

A Tabela 6.4 resume a sintonia do controlador DMC seguindo o procedimento sugerido por DOUGHERTY e COOPER (2003).

Tabela 6.4: Resultados da sintonia do controlador DMC segundo Dougherty e Cooper.

Δt	N	V	U	f
0,1 s	50	50	13	$1,34 \times 10^8$

A Figura 6.11 mostra o comportamento em malha fechada da variável controlada para o caso servo, mudança no seu “*set-point*”, utilizando o controlador DMC com a sintonia proposta na Tabela 6.4. O “*set-point*” da variável controlada foi mudado de 822,15°C para 842,15 °C no instante de tempo igual a 0,6 segundos.

Pode-se observar na Figura 6.11 que a variável controlada apresenta um comportamento oscilatório com sobre elevação. O tempo de estabilização da resposta é de aproximadamente 18 segundos. Novamente pode ser observado que a dinâmica em malha fechada tem um comportamento que pode ser aproximado por um modelo de segunda ordem, ou seja, a introdução do controlador aumentou a ordem do sistema.

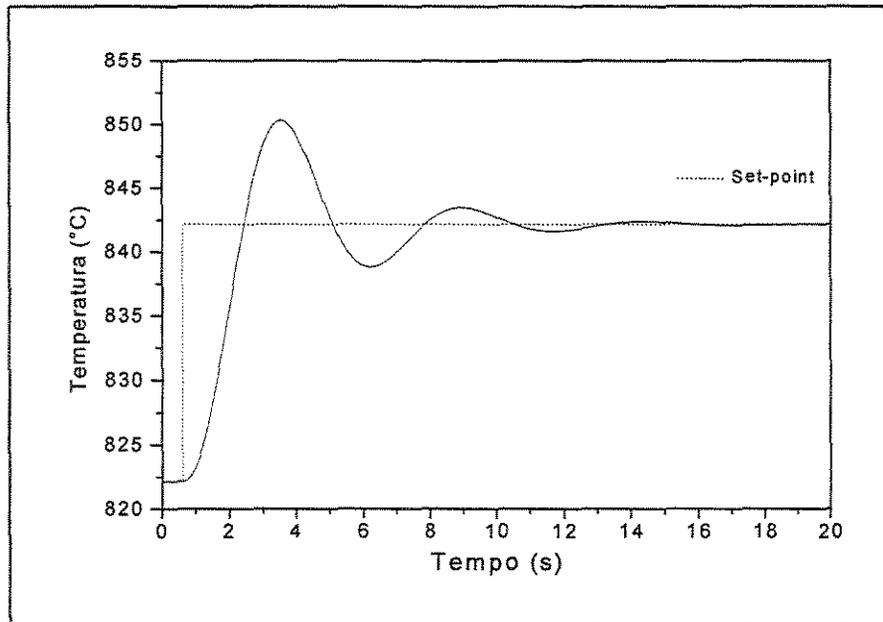


Fig. 6.11: Comportamento da variável controlada, para o controlador DMC, dada uma mudança no “set-point”.

A Figura 6.12 mostra as ações de controle implementadas pelo controlador DMC para obter o comportamento da variável controlada descrito pela Figura 6.11.

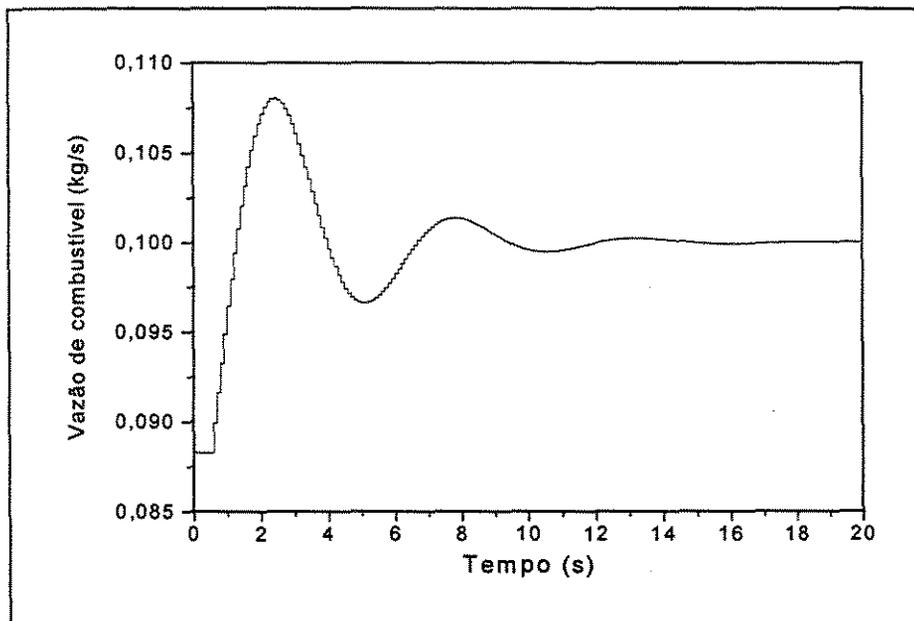


Fig. 6.12: Comportamento da variável manipulada, para o controlador DMC, dada uma mudança no “set-point”.

Observa-se na Figura 6.12 que a curva da variável manipulada segue o formato da curva da variável controlada, e que as ações de controle implementadas são suaves. Sendo que este último fato é considerado positivo, pois preserva o elemento final de controle. A suavidade da resposta é devido à utilização do fator de supressão (f) que limita as mudanças no valor da variável manipulada que são aplicadas pelo controlador.

Novamente, foram feitas várias variações, sendo que só algumas delas foram selecionadas, nos parâmetros do controlador com o objetivo de analisar a influência dos mesmos no seu desempenho, e de obter uma melhor sintonia. O controlador sintonizado seguindo o procedimento descrito DOUGHERTY e COOPER (2003) foi tomado como caso base e será chamado de controlador DMC A.

A Tabela 6.5 mostra os diferentes conjuntos de parâmetros que foram utilizados, assim como o valor da integral do erro absoluto (IAE) que, novamente, será considerado como índice de desempenho para determinar qual é a sintonia mais adequada. Em todas as simulações realizadas o tempo de amostragem considerado foi de 0,1 segundo, o valor do horizonte do processo foi sempre $N = 50$ e a mudança no “*set-point*” foi aos 0,6 segundos.

Tabela 6.5: Diferentes sintonias do controlador DMC.

Controlador	V	U	f	IAE
DMC A	50	13	$1,34 \times 10^8$	466,66
DMC B	60	13	$1,34 \times 10^8$	452,34
DMC C	40	13	$1,34 \times 10^8$	463,24
DMC D	50	18	$1,34 \times 10^8$	472,19
DMC E	50	8	$1,34 \times 10^8$	479,32
DMC F	50	13	$7,37 \times 10^8$	461,32
DMC G	50	13	$1,34 \times 10^7$	1495,44
DMC H	60	13	$7,37 \times 10^8$	471,46

A Figura 6.13 mostra o comportamento da variável controlada para os exemplos DMC A, DMC B e DMC C, nos quais modificou-se o valor do horizonte de predição V , deixando os outros parâmetros de sintonia constantes.

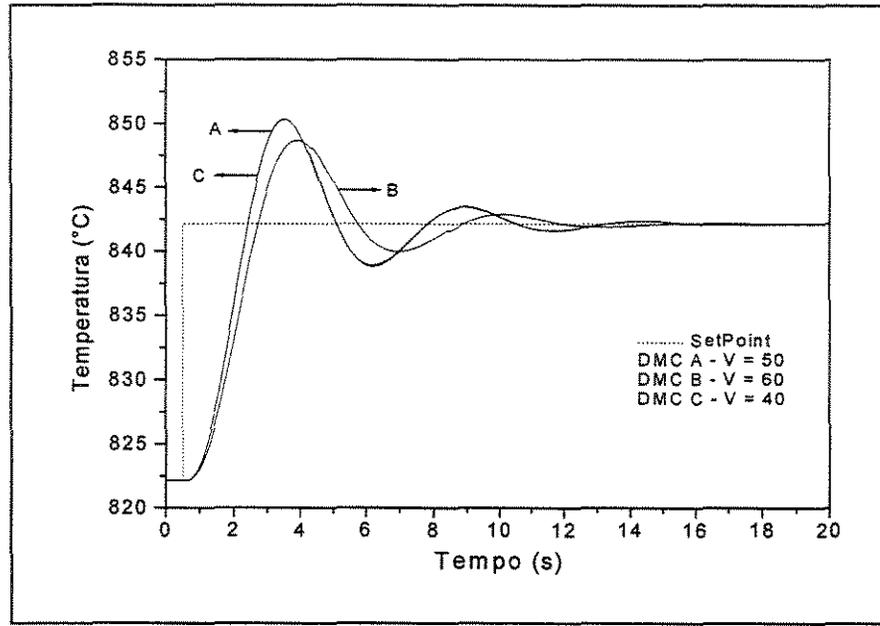


Fig. 6.13: Influência do horizonte de predição (V) no comportamento da variável controlada, para o controlador DMC, dada uma mudança no “*set-point*”.

Analisando a Figura 6.13, observa-se que a diminuição de (V) não resultou em modificações consideráveis no comportamento da variável controlada. O aumento do horizonte de predição (V) resulta numa resposta que é inicialmente mais lenta, ou seja, que demora mais para atingir o primeiro máximo, porém é menos oscilatória e estabiliza mais rapidamente. Este comportamento está de acordo com as conclusões de MAURATH, MELLICHAMP e SEBORG (1988) que afirmam que um aumento de V tem um efeito estabilizador na malha de controle.

A figura 6.14 mostra as ações de controle implementadas pelos controladores para se obter a resposta do sistema descrita pela Figura 6.13.

Na Figura 6.14 observa-se que as mudanças na variável manipulada implementadas pelos controladores DMC são suaves. O controlador com $V=60$ é o que implementa ações de controle mais suaves, entre os comparados.

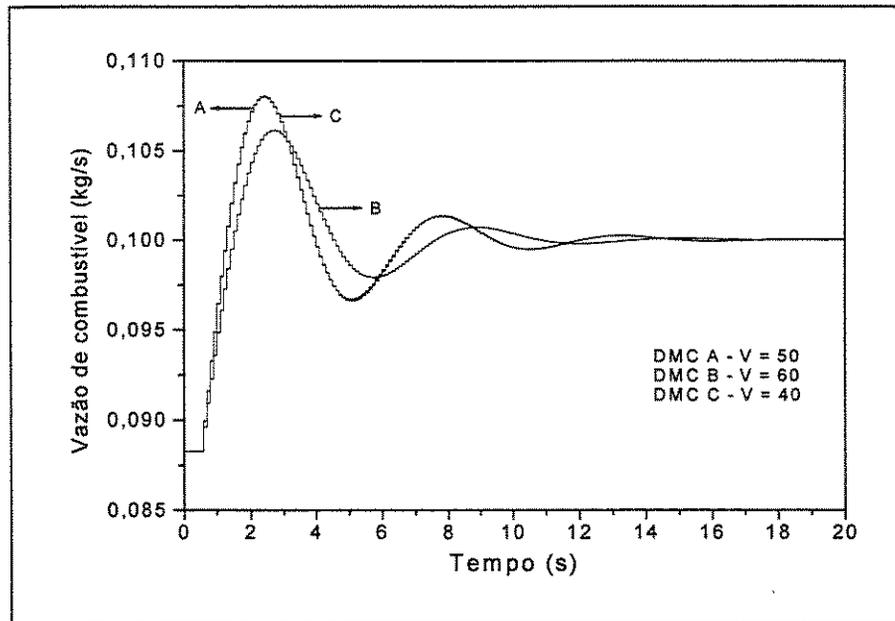


Fig. 6.14: Influência do horizonte de previsão (V) no comportamento da variável manipulada, para o controlador DMC, dada uma mudança no “*set-point*”.

A figura 6.15 mostra a influência do horizonte de controle (U) no comportamento do controlador DMC. Na mesma são apresentados os exemplos DMC A, DMC D e DMC E nos quais o valor de U foi alterado deixando os demais parâmetros constantes.

A análise da Figura 6.15 mostra que um aumento do valor do horizonte de controle não muda significativamente o comportamento da variável controlada. Como um incremento de U aumenta o esforço computacional envolvido, por ser este a dimensão da matriz que deve ser invertida, não é recomendável que seja feito devido a não apresentar nenhuma melhora na resposta do processo em malha fechada que o justifique. Pode se observar, também, que a diminuição do horizonte de controle aumenta a oscilação da resposta e a sua sobre elevação.

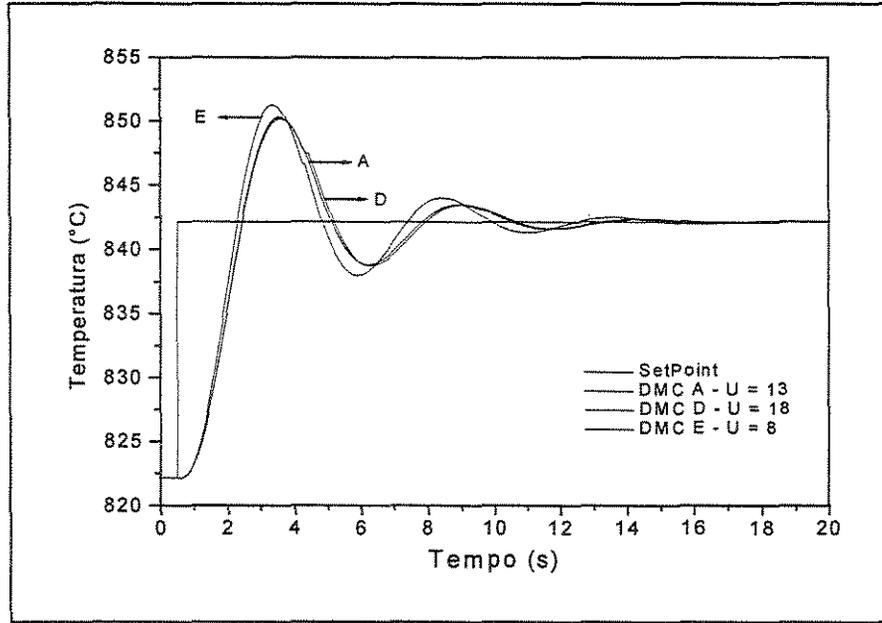


Fig. 6.15: Influência do horizonte de controle (U) no comportamento da variável controlada, para o controlador DMC, dada uma mudança no “*set-point*”.

Na Figura 6.16 é mostrado o comportamento da variável manipulada para as modificações no horizonte de controle exemplificadas.

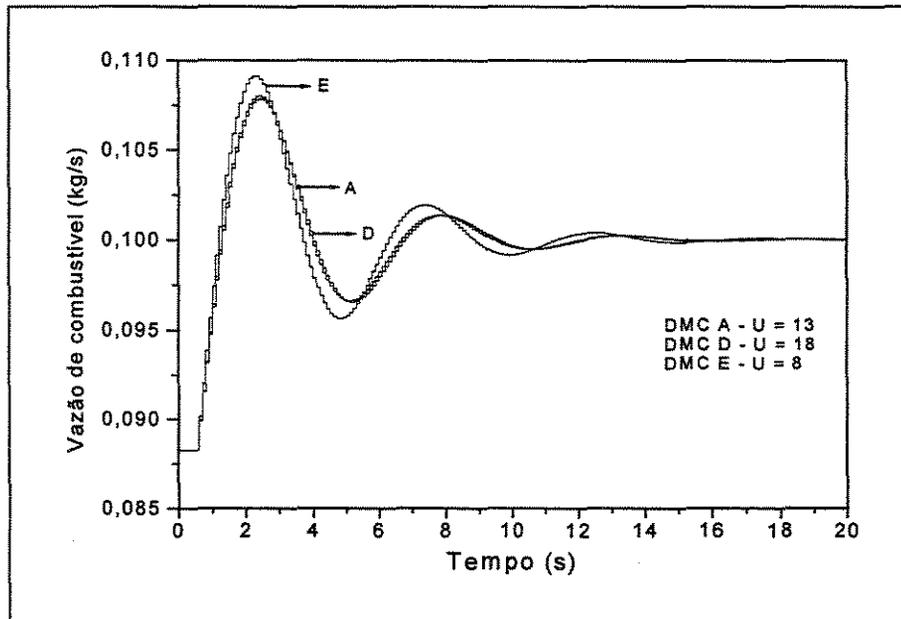


Fig. 6.16 Influência do horizonte de controle (U) no comportamento da variável manipulada, para o controlador DMC, dada uma mudança no “*set-point*”.

Observa-se na Figura 6.16 que, novamente, em todos os casos as ações de controle são suaves, sendo que as implementadas pelo controlador DMC E são um pouco mais bruscas, porém não a ponto de serem prejudiciais ao elemento final de controle.

Na figura 6.17 são apresentados os exemplos DMC A, DMC F e DMC G, nos quais foi modificado o valor do fator de supressão (f) deixando os demais parâmetros do controlador constante. Desta maneira, pode-se analisar a influência de f no desempenho do controlador.

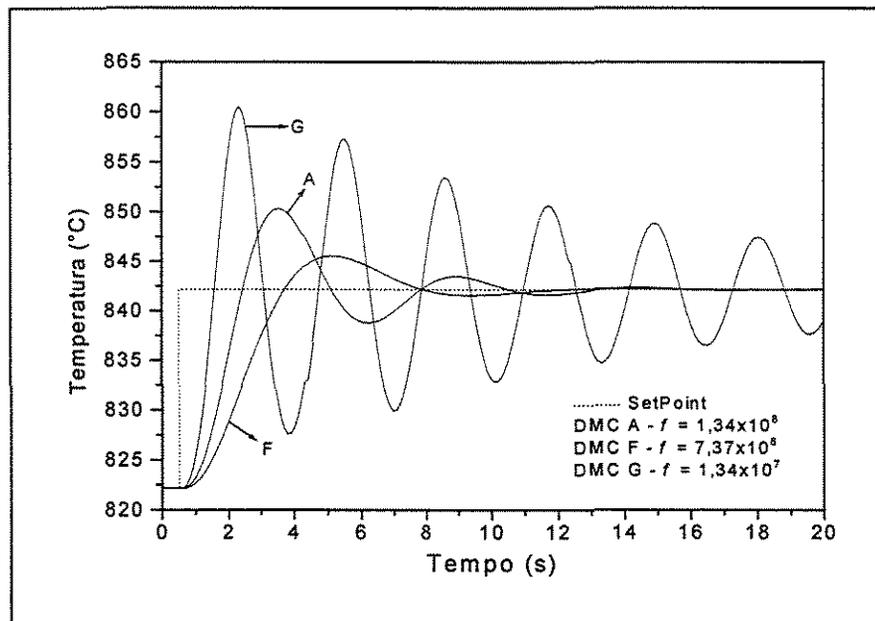


Fig. 6.17: Influência do fator de supressão (f) no comportamento da variável controlada, para o controlador DMC, dada uma mudança no “set-point”.

Observa-se na Figura 6.17 que a resposta do processo em malha fechada é muito sensível a mudanças no fator de supressão (f), sendo que podem ser criadas instabilidades no comportamento da variável controlada com pequenas mudanças no seu valor. A diminuição do valor do fator de supressão gera uma resposta do processo que é muito oscilatória, a qual no tempo de amostragem não consegue atingir o novo “set-point”. Foi observado, porém não se encontra aqui graficado, que diminuições maiores no f resultam numa resposta instável, ou seja, a variável controlada sofre oscilações com uma amplitude cada vez maior perdendo-se completamente o controle do processo. O aumento do fator de supressão no exemplo DMC F faz com que a resposta do processo seja mais conservadora,

a mesma atinge o “*set-point*” por primeira vez em um tempo maior, porém, a curva tem um comportamento menos oscilatório e se estabiliza em um tempo menor. Constatou-se que aumentos maiores no valor do fator de supressão podem tornar o controlador muito lento, o que resulta numa resposta conservadora em excesso demais na qual a curva da variável controlada acaba ficando assintótica ao valor do “*set-point*”.

A Figura 6.18 mostra as ações de controle implementadas pelo controlador nos exemplos DMC A, DMC F e DMC G. Na mesma pode-se notar que o aumento do fator de supressão resulta em ações de controle menores, comportamento que é esperado dado que este é o objetivo da utilização do fator de supressão no algoritmo DMC.

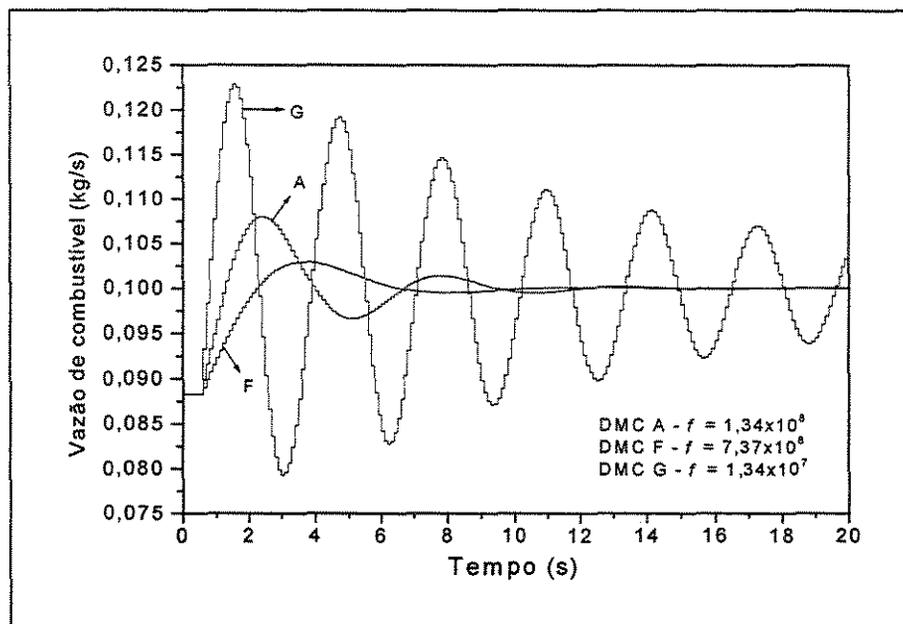


Fig. 6.18: Influência do fator de supressão (f) no comportamento da variável manipulada, para o controlador DMC, dada uma mudança no “*set-point*”.

A análise da influência do horizonte de predição (V) no desempenho do controlador indica que o exemplo DMC B, no qual $V = 60$, apresenta um melhor desempenho. Por outra parte, a análise da influência do horizonte de controle (U), nos leva a concluir que não haveria necessidade de alterar o valor de $U = 13$ já que este foi o que mostrou um melhor desempenho. Finalmente o exemplo DMC F, onde $f = 7,37 \times 10^8$, foi o que apresentou o melhor desempenho na análise da influência do fator de supressão (f). Estas conclusões fizeram com que fosse necessário analisar a possibilidade de obtermos um

controlador com um melhor desempenho empregando-se a sintonia do exemplo DMC H: $V = 60$, $U = 13$ e $f = 7,37 \times 10^8$. Portanto, realizou-se a comparação entre os exemplos DMC B, DMC F e DMC H que são os que têm os melhores desempenhos.

A Figura 6.19 apresenta o comportamento da variável controlada para os exemplos DMC B, DMC F e DMC H com a intenção de determinar qual é a melhor sintonia para o controlador DMC.

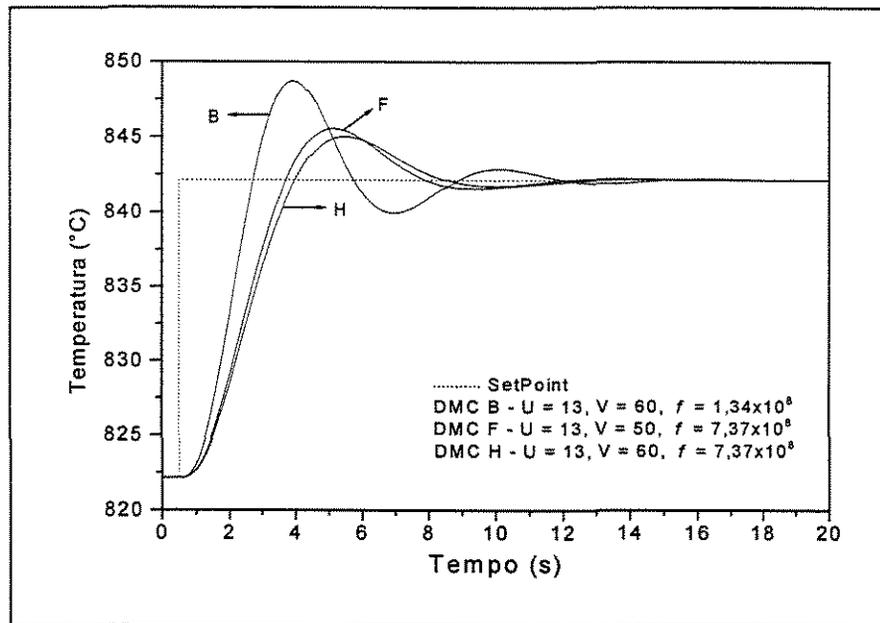


Fig. 6.19: Comportamento da variável manipulada, para três sintonias do controlador DMC empregadas, dada uma mudança no “set-point”.

Observa-se na Figura 6.19 que os controladores DMC F e DMC H apresentam um comportamento similar e superior ao do controlador DMC B. O controlador DMC H apresenta a resposta com a menor sobre elevação, porém o controlador DMC F estabiliza a sua resposta em menos tempo, sendo que a diferença entre os dois comportamentos é pequena.

A Figura 6.20 mostra o comportamento da variável controlada para os exemplos em questão. Na mesma pode-se observar que as mudanças na variável manipulada implementadas pelos controladores DMC F e DMC H são similares e de menor magnitude do que as implementadas pelo controlador DMC B.

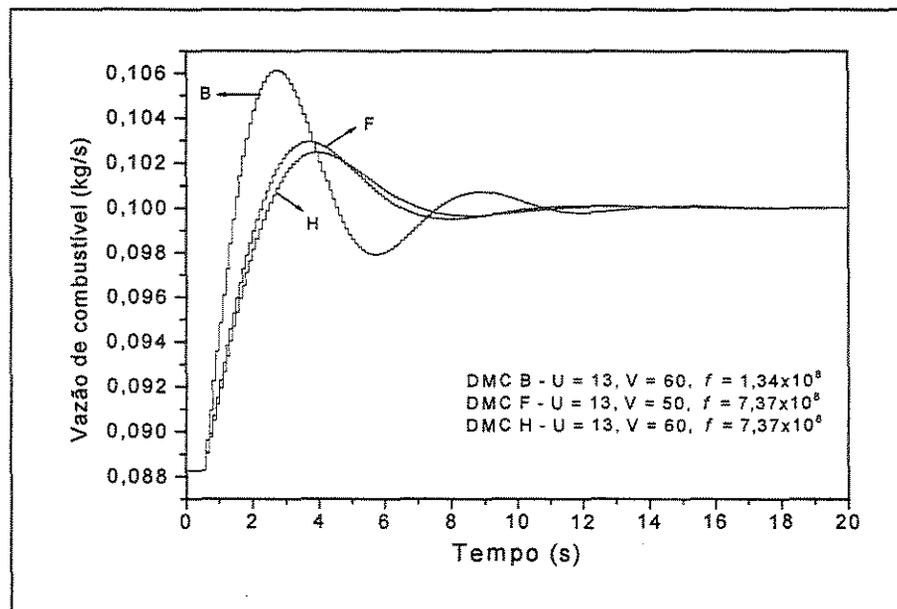


Fig. 6.20: Comportamento da variável manipulada, para três sintonias do controlador DMC empregadas, dada uma mudança no “set-point”.

A análise destas duas figuras (6.19 e 6.20) leva a concluir que os valores empregados nos exemplos DMC H e DMC F resultam em desempenhos similares e que ambos podem ser utilizados na sintonia do controlador DMC. Para definir um conjunto de parâmetros de sintonia são analisados os valores da IAE apresentados na Tabela 6.5. Na mesma observa-se que o controlador com menor IAE é o do exemplo DMC B, e o que apresenta o segundo menor valor é o controlador do exemplo DMC F. Portanto, a análise do valor da IAE leva a concluir que o desempenho do controlador DMC F é superior ao do controlador DMC H, porém o de melhor desempenho seria, segundo este critério, o controlador DMC B. A análise conjunta da IAE e das Figuras 6.19 e 6.20 mostra que o maior valor de IAE para o controlador DMC F em relação ao do controlador DMC B é devido ao primeiro ser inicialmente mais lento, ou seja, demorar mais para atingir o máximo. No entanto a resposta do controlador DMC F é superior ao do controlador DMC B, pois apresenta uma menor oscilação, menor sobre elevação e estabiliza mais rapidamente. Sendo que a diferença no valor da IAE de ambos controladores não é significativa, conclui-se que os valores do exemplo DMC F constituem o conjunto de parâmetros de sintonia que resultam em um melhor desempenho do controlador DMC.

A seguir será realizada a comparação entre o controlador PI e o controlador DMC que apresentam a melhor sintonia para uma mudança no “*set-point*” (caso servo) e para uma perturbação (caso regulatório).

6.4 – COMPARAÇÃO ENTRE OS CONTROLADORES DMC E PI

Nesta seção será realizada a análise comparativa do desempenho do controlador DMC e do controlador PI para uma mudança no “*set-point*”, caso servo, e quando o sistema recebe uma perturbação, caso regulatório.

A Figura 6.21 mostra o comportamento da variável controlada para uma variação no “*set-point*”, introduzida aos 0,6 segundos, nos controladores DMC e PI que apresentaram a melhor sintonia anteriormente. Na mesma pode ser observado que o controlador PI possui uma sobre elevação um pouco maior do que o DMC, porém o mesmo atinge o “*set-point*” mais rapidamente. Ambos controladores apresentam uma resposta com uma leve oscilação. Ainda não se pode afirmar que o controlador PI possui um desempenho superior ao DMC, pois o comportamento que é imposto a variável manipulada é um ponto importante de ser observado.

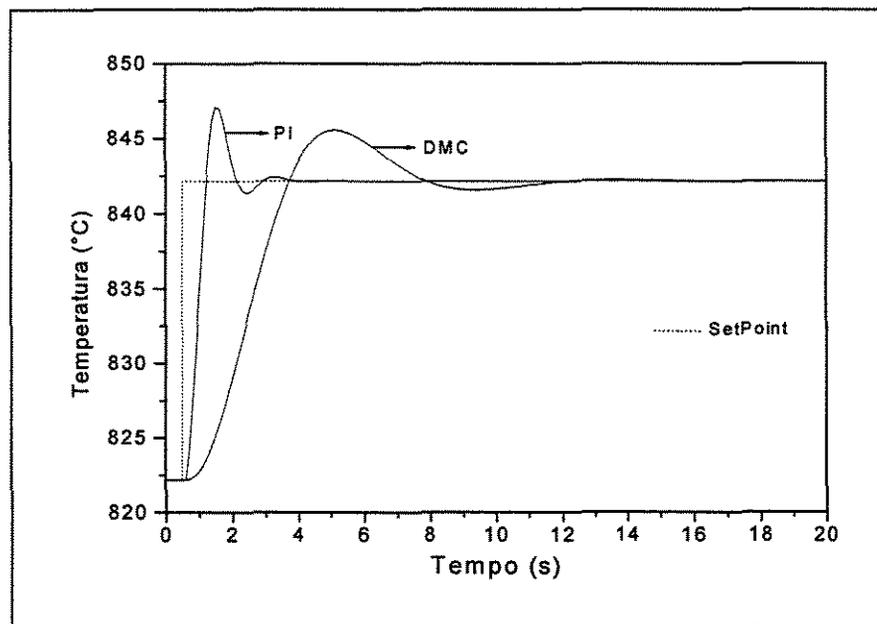


Fig. 6.21: Comparação do comportamento da variável controlada, para os controladores DMC e PI, dada uma mudança no “*set-point*”.

A Figura 6.22 apresenta a comparação entre os comportamentos da variável manipulada para os controladores DMC e PI.

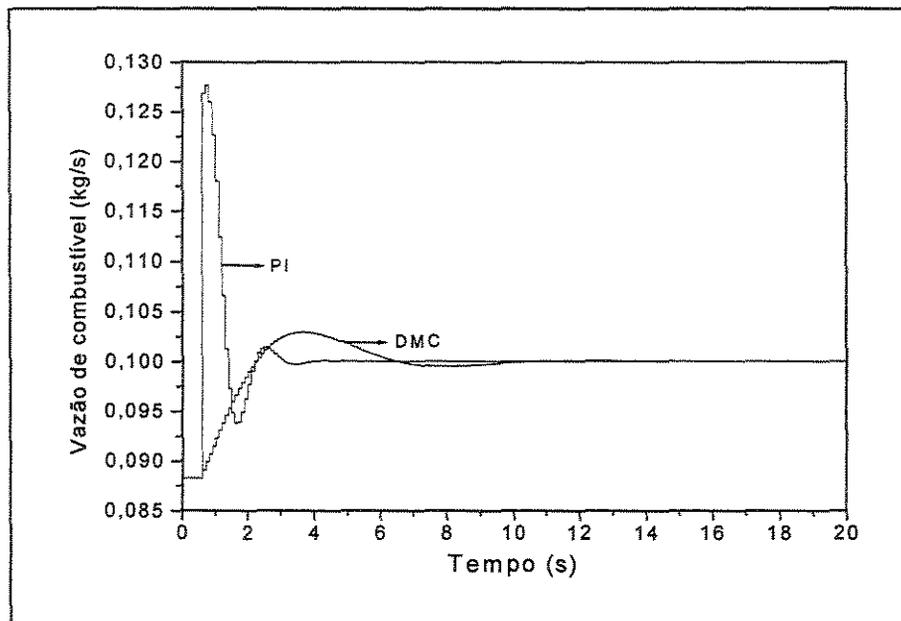


Fig. 6.22: Comparação do comportamento da variável manipulada, para os controladores DMC e PI, dada uma mudança no “*set-point*”.

Observa-se na Figura 6.22 que o controlador PI realiza ações de controle bruscas, principalmente ao início do seu acionar, enquanto que as ações implementadas pelo controlador DMC são suaves. Nota-se também que a primeira mudança na variável controlada implementada pelo controlador PI quase duplica a vazão de combustível no forno. Isto permite concluir que para mudanças maiores de “*set-point*” o limite físico do elemento final de controle pode ser ultrapassado, e que a válvula de controle não funcionará adequadamente nem será preservada utilizando-se o controlador PI. Portanto, apesar do controlador DMC ser mais lento, o desempenho do mesmo é superior ao do controlador PI para mudanças no “*set-point*”.

Um outro ponto a ser observado é o comportamento da malha de controle após acontecer uma perturbação no sistema. A Figura 6.23 mostra a resposta do sistema, em malha fechada, para uma perturbação na vazão da mistura reacional de -10% .

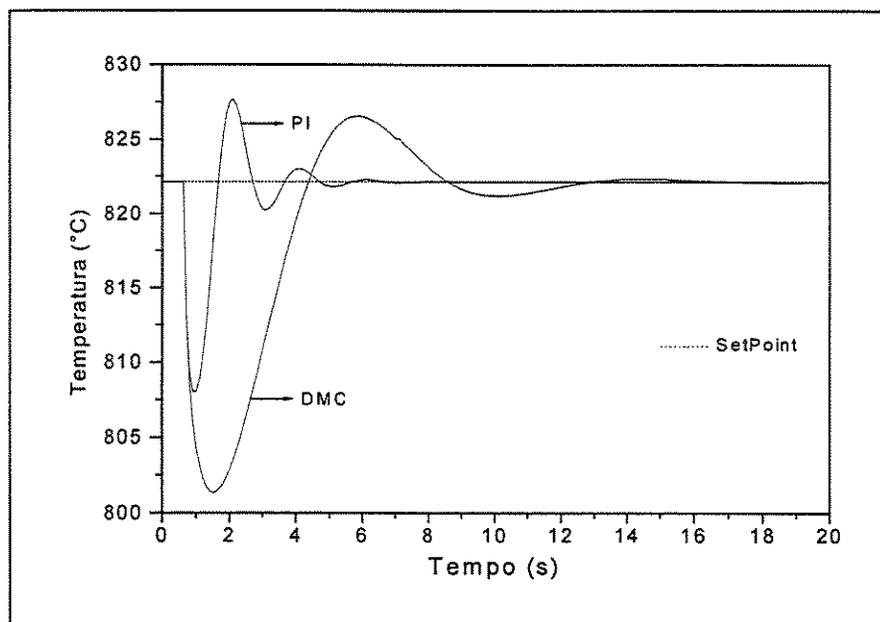


Fig. 6.23: Comparação do comportamento da variável controlada, para os controladores DMC e PI, dada uma perturbação na vazão da mistura reacional de -10% .

Na Figura 6.23 observa-se que o controlador DMC novamente possui uma resposta mais lenta que a do controlador PI. Analisa-se a continuação o comportamento imposto à variável manipulada por ambos controladores, o qual é mostrado a Figura 6.24

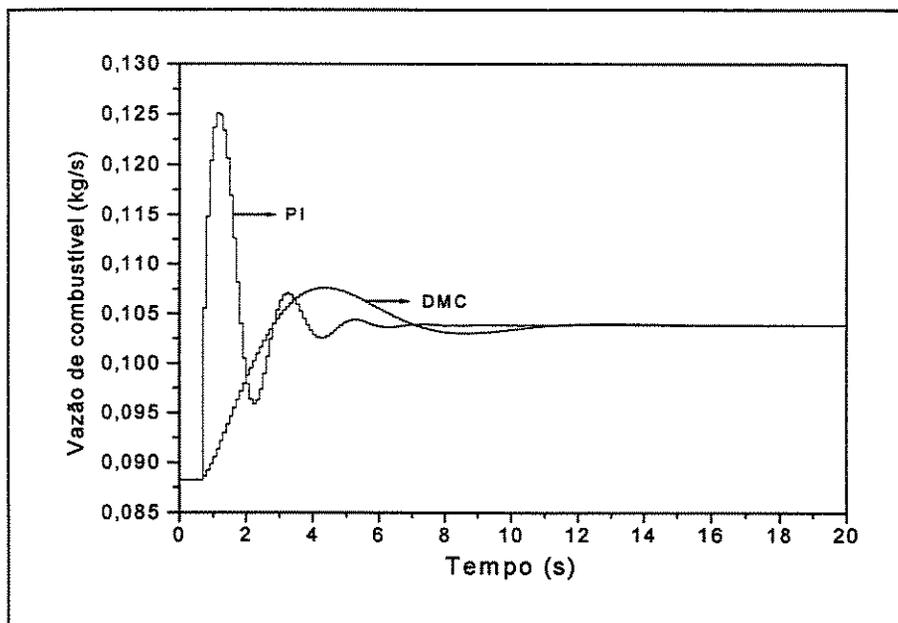


Fig. 6.24: Comparação do comportamento da variável manipulada, para os controladores DMC e PI, dada uma perturbação na vazão da mistura reacional de -10% .

A análise da Figura 6.24 volta a resultar na conclusão de que as ações de controle aplicadas pelo controlador PI são severas e que o elemento final de controle em este caso pode não atuar corretamente e ter seu limite físico ultrapassado. O controlador DMC, que realiza mudanças suaves na variável manipulada, tem apesar de ser mais lento um comportamento superior para uma perturbação na vazão dos reagentes.

6.5 – CONCLUSÃO

Neste capítulo foram apresentadas duas estratégias para controlar a temperatura da corrente efluente do forno de pirólise de etano mediante mudanças na vazão de combustível no mesmo. Inicialmente foi desenvolvido um controlador clássico por retro-alimentação do tipo PI, e a continuação foi aplicada uma técnica de controle preditivo, controle por matriz dinâmica (DMC).

O controlador PI foi inicialmente sintonizado pelo método de Cohen-Coon. Foram aplicadas variações no valor dos parâmetros do controlador com o objetivo de analisar a influência dos mesmos no desempenho deste, assim como de obter a melhor sintonia do mesmo. Observou-se que o aumento do ganho do controlador aumenta a oscilação da resposta, e que a diminuição da constante de tempo integral resulta numa diminuição da oscilação da mesma. Conclui-se que o método de Cohen-Coon fornece uma boa aproximação inicial dos parâmetros do controlador, porém o desempenho do mesmo pode ser melhorado pelo ajuste destes. A sintonia final do controlador PI foi determinada analisando o comportamento do mesmo em conjunto com o valor da IAE obtida em cada caso.

Inicialmente utilizou-se o procedimento proposto por DOUGHERTY e COOPER (2003) para realizar a sintonia do controlador DMC. Realizaram-se modificações nos parâmetros do controlador com o objetivo de melhorar a sua sintonia e de analisar a influência dos mesmos no desempenho obtido. O aumento do horizonte de predição (V) resultou em uma resposta mais estável com uma menor oscilação. Mudanças no horizonte de controle (U) não modificaram significativamente o comportamento do sistema. A resposta obtida foi fortemente influenciada pelo fator de supressão (f), sendo que uma diminuição do mesmo pode chegar a resultar em um comportamento instável do sistema e um aumento muito importante torna a resposta muito vagarosa. A análise da IAE obtida em

cada caso, em conjunto com o comportamento do controlador DMC foi o método utilizado para determinar a melhor sintonia do mesmo.

O desempenho do controlador DMC foi comparado ao do controlador PI. A resposta da variável controlada no caso do controlador DMC resultou ser mais lenta que no controlador PI. Porém, as ações de controle implementadas pelo controlador PI são severas, podendo ultrapassar o limite físico do elemento final de controle e não preservando o mesmo, enquanto que as aplicadas pelo controlador DMC foram sempre suaves. Por este motivo, conclui-se que, independentemente de se obter uma resposta mais lenta com o controlador DMC, o desempenho do mesmo resultou ser superior ao do controlador PI.

Capítulo 7

Conclusões e

Sugestões para trabalhos futuros

7.1 – CONCLUSÕES

A modelagem baseada nos fenômenos físicos e químicos presentes proposta neste trabalho permitiu obter o comportamento do forno de pirólise de etano, podendo ser analisados os perfis de temperatura, conversão, pressão e distribuição de produtos ao longo do reator. Inicialmente realizou-se a simulação partindo-se o forno de pirólise com a sua fornalha já em regime estacionário e a serpentina interna cheia com a mistura reacional nas condições iniciais. Desta maneira foi obtida a dinâmica da serpentina interna a que resultou ser rápida, com um tempo de resposta de aproximadamente um segundo, o que era esperado devido à alta velocidade de escoamento e pequeno tempo de residência empregados na pirólise do etano. A pressão e temperatura de saída obtidas no estado estacionário atingido, no qual obteve-se uma conversão do 64,43% com uma seletividade do etileno de 79,35%, são as mesmas às encontradas num forno de pirólise industrial citado por FROMENT (1990). Com o intuito de se analisar a influência da carga térmica fornecida à mistura na conversão e seletividade e determinar a melhor condição operacional foram aplicadas variações na vazão de combustível na fornalha. Pode-se concluir que ambas variáveis são muito sensíveis à carga térmica fornecida à mistura reacional, e que o aumento da mesma aumenta a conversão, porém também aumenta a produção de produtos secundários resultando numa queda na seletividade do etileno o que acaba não resultando em benefício econômico algum, pois dificultará e encarecerá as etapas de separação posteriores. Este comportamento é devido às várias reações competitivas que se encontram presentes na pirólise as quais tem suas constantes cinéticas alteradas de maneira diferente pelas mudanças na temperatura alterando assim a distribuição de produtos. As perturbações mostraram também uma dinâmica do forno de pirólise, em malha aberta, rápida com um tempo de resposta de aproximadamente 5 segundos, sendo que a mesma apresentou uma forma sigmoideal o que resulta em que pode ser aproximada por um modelo de primeira ordem com tempo morto. Conclui-se que a pirólise de etano é um processo industrial com um elevado grau de complexidade, devido a na mesma existir uma forte interação entre as variáveis operacionais, especialmente a temperatura, e os produtos obtidos, além de ter-se uma grande quantidade de reações existentes.

O problema de controle proposto neste trabalho foi o de controlar a temperatura da corrente reacional efluente do forno de pirólise atuando na vazão de combustível na fornalha, o que configura um problema com uma entrada e uma saída (SISO). Primeiramente foi proposta a utilização de um controlador PI digital, que foi inicialmente sintonizado utilizando-se o método de Cohen-Coon. O mesmo apresentou uma resposta rápida, porém as mudanças aplicadas na variável manipulada são muito severas não preservando o elemento final de controle e podendo ultrapassar o limite físico do mesmo. Com o intuito de se analisar a influência dos parâmetros de sintonia e realizar um ajuste da mesma os valores do ganho do controlador e constante de tempo integral foram modificados. Pode-se concluir que um aumento do ganho do controlador resulta em uma resposta mais oscilatória, ou seja, desestabiliza a resposta do sistema, comportamento que também foi observado quando foi diminuída a constante de tempo integral. Das variações aplicadas concluiu-se, também, que a sintonia encontrada por Cohen-Coon resulta em uma boa estimativa inicial dos parâmetros, porém o desempenho do controlador PI pode ser melhorado variando os mesmos. Em segundo lugar, foi proposto empregar um controlador preditivo por matriz dinâmica DMC para resolver o problema de controle supracitado. A sintonia inicial do controlador foi realizada segundo o procedimento sugerido por DOUGHERTY e COOPER (2003). O controlador DMC apresentou uma resposta mais lenta que o controlador PI, porém aplica ações de controle suaves em todo momento preservando o elemento final de controle. Novamente mudaram-se os parâmetros do controlador com o intuito de se analisar a influência dos mesmos no seu desempenho, assim como de tentar se obter uma melhor sintonia. Pode-se observar que o aumento do horizonte de predição (V) teve um efeito estabilizador na resposta do sistema tornando-a menos oscilatória. O horizonte de controle (U) não apresentou um efeito importante na resposta do sistema, devido ao fato de ser empregado em todos os casos o fator de supressão que limita as ações de controle. Conclui-se que não é recomendável aumentar o mesmo, pois aumenta-se o esforço computacional sem se obter benefícios no desempenho do controlador. O fator de supressão (f) apresentou a maior influência no desempenho do controlador, sendo que uma diminuição do mesmo aumenta a oscilação da resposta podendo resultar em uma oscilação com amplitude crescente que implica na perda de controle do processo. O aumento do (f), se em excesso, acarreta em uma resposta muito conservadora que resulta assintótica ao “*set-point*” desejado. Esta forte influência do fator de supressão na resposta do sistema é esperada devido ao fato do mesmo ser utilizado para alterar a magnitude das

mudanças que podem ser implementadas pelo controlador. Novamente a sintonia inicialmente proposta resultou em uma boa aproximação inicial dos valores dos parâmetros, porém ajustes posteriores dos mesmos resultaram em um melhor desempenho do controlador DMC.

A comparação entre o desempenho do controlador PI e DMC permite concluir que o controlador DMC resulta mais apropriado para a implementação da estratégia de controle proposta. Não obstante a resposta do controlador PI foi mais rápida que a do controlador DMC, este último aplica ações de controle suaves e que além de preservar o elemento final de controle permitem concluir que o limite físico do mesmo não será ultrapassado, comportamento que o controlador PI não apresenta comprometendo assim sua utilização no forno de pirólise de etano. Pode-se concluir, também, que a sintonia do controlador DMC requer o conhecimento da influência dos seus parâmetros no desempenho do mesmo, e que a utilização de um simulador permite analisar cada um destes independentemente, e obter um controlador que na hora da implementação na planta industrial requererá ajustes muito menores, o que irá resultar em uma grande economia para a empresa.

7.2 – SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

A modelagem proposta permitiu obter e analisar o comportamento dinâmico do forno de pirólise de etano, porém acredita-se que possa resultar interessante analisar o comportamento do forno caso sejam consideradas no modelo as resistências à troca de calor entre a fornalha e a serpentina interna. O controlador DMC apresentou-se útil para se preservar a temperatura de saída do forno de pirólise da mistura reacional. No entanto, acredita-se que maiores benefícios podem chegar a ser alcançados utilizando-se o mesmo como controlador secundário numa malha de controle em cascata que otimize o ciclo de operação do forno de pirólise. Portanto, sugere-se que seja considerado um modelo que leve em consideração a deposição de coque no interior da serpentina, podendo ser obtido assim o tempo de operação da unidade entre duas paradas para limpeza dos tubos. Para o controlador primário da malha em cascata, acredita-se que uma boa escolha é empregar um controlador do tipo LDMC, controle por matriz dinâmica com programação linear, no qual restrições das variáveis envolvidas são adicionadas explicitamente mediante o emprego de

uma função objetivo, que no caso seria a maximização da produção de etileno. O controlador DMC permite sua utilização em estratégias de controle com múltiplas entradas e múltiplas saídas (MIMO), portanto, pode resultar interessante analisar se um controle da temperatura em vários pontos da serpentina, empregando-se um modelo com um perfil de fluxo de calor na fornalha e com alimentações de combustível independentes, resultará em um desempenho superior do forno de pirólise.

Referências bibliográficas

CHAMBERS, L.E., POTTER, W. S. Design ethylene furnaces: (Part 1: Maximum ethylene). *Hydrocarbon Processing*, v.53, n.1, p.121-126, 1974.

CHAUVEL, A., LEFEBVRE, G., *Petrochemical process*, vol. 1, Houston, Gulf Publishing Co., 1986.

CUTLER , C. R. Dynamic Matrix Control of imbalanced systems. *ISA Transactions*, v.21, n. 1, p.1-6, 1982.

CUTLER , C. R., RAMAKER, B. L. Dynamic Matrix Control – A computer control algorithm. *Joint Automatic Control Conference Preprints*, Paper WP5-B , 1980.

DOUGHERTY, D., COOPER, D. J. Tuning guidelines of a Dynamic Matrix Controller for integrating (non-self-regulating) processes. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.42, n. 8, p.1739-1752, 2003.

ENNIS, B. P., BOYD, H. B., ORRISS, R. Olefin manufacture via millisecond pyrolysis. *Chemtech*, v.5, n. 11, p.693-699, 1975.

FROMENT, G. F., *Chemical reactors analysis and design*, 2. ed. New York, John Wiley & Sons, 1990, Cap. IX: The plug flow reactor.

FROMENT, G. F., VAN DE STEENE, B. O., VAN DAMME, P.S., NARAYANAN S., GOOSSENS, A.G. Thermal cracking of ethane and ethane-propane mixtures. *Ind. Eng. Chem., Process Des. Dev.*, v.15, n. 4, p.495-504, 1976.

GOOSSENS, A. G., DENTE, M., RANZI, E. Improve steam cracker operation. *Hydrocarbon Processing*, p.227-236, 1978.

- JOO, E., LEE, K., LEE, M., PARK, S. CRACKER – a PC based simulator for industrial cracking furnaces. *Computers and Chemical Engineering*, v.24, n. 2-7, p.1523-1528, 2000.
- KINNEY, C. R., DELBEL, E. *Ind. and Eng. Chem.*, v.46, p.548, 1954. *apud* CHAMBERS, POTTER, 1974.
- MARCHETTI, J. L., MELLICHAMP, D. A., SEBORG, E. D. Predictive control based on discrete convolution models. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v.22, n. 3, p.488-495, 1983.
- MAURATH, P. R., LAUB, A. J., SEBORG, E. D., MELLICHAMP, D. A. Predictive controller design by principal components analysis. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.27, n. 7, p.1204-1212, 1988.
- MAURATH, P. R., MELLICHAMP, D. A., SEBORG, E. D. Predictive controller design for single-input/single-output (SISO) systems. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.27, n. 6, p.956-963, 1988.
- MURPHY, D. B., CARROLL, R. W., KLONOWSKI, J. E. Analysis of products of high-temperature pyrolysis of various hydrocarbons. *Carbon*, v.35, n. 12, p.1819-1823, 1997.
- NATH, R., ALZEIN, Z. On-line dynamic optimization of olefins plants. *Computers and Chemical Engineering*, v.24, n.3, p.533-538, 2000.
- NATH, R., ALZEIN, Z. On-line dynamic optimization of olefins plants. *Computers and Chemical Engineering*, v.24, n. 2-3, p.533-538, 2000.

PERRY, H. R., GREEN, D. W. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 7. ed. New York, McGraw-Hill, 1997.

PICCIOTTI, M. New ethylene routes are available, but economics inhibit their use. *Oil & Gas Journal*, v.95, n.26, p.71-74, 1997.

PICCIOTTI, M. Novel ethylene technologies developed, but steam cracking remains king. *Oil & Gas Journal*, v.95, n.25, p.53-58, 1997.

PRETT, D. M., GILLETTE, R. D. Optimization and constrained multivariable control of a catalytic cracking unit. *Joint Automatic Control Conference Preprints*, Paper WP5-C, 1980.

RAMAN, R., *Chemical process computations*. London, Elsevier Applied Science Publishers, 1985.

RAMANA, M. V., PLEHIERS, P. M., FROMENT, G. F. The coupled simulation of heat transfer and reaction in a pyrolysis furnace. *Chemical Engineering Science*, v.43, n.6, p.1223-1229, 1988.

SEBORG, E. D., EDGAR, T. F., MELLICHAMP, D. A. *Process dynamics and control*. New York: John Wiley & Sons, 1989, 717 p.

SHAH, M. J. Computer control of ethylene production. *Industrial and Engineering Chemistry*, v.59, n. 5, p.70-85, 1967.

SHRIDHAR, R., COOPER, D. J. A tuning strategy for unconstrained multivariable model predictive control. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.37, n. 10, p.4003-4016, 1998.

SHRIDHAR, R., COOPER, D. J. A tuning strategy for unconstrained SISO model predictive control. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.36, n. 3, p.729-746, 1997.

SMITH, C. A., CORRIPIO, A. B. *Principles and practice of automatic process control*. New York, John Wiley & Sons, 1985, 614 p.

SMITH, J. M., VAN NESS, H. C., ABBOTT, M. M. *Introdução à termodinâmica da engenharia química*. 5.ed. Rio de Janeiro: LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2000. Apêndice C: Capacidades caloríficas e propriedades de formação, p.576-581.

STEPHANOPOULOS, G. *Chemical process control. An introduction to theory and practice*. New Jersey, Prentice-Hall, 1984, 696 p.

SUNDARAM, K. M., FROMENT, G. F. Thermal cracking of ethane, propane and their mixtures. *Chemical Engineering Science*, v.32, n. 7, p.601-608, 1977.

SUNDARAM, K. M., VAN DAMME, P. S., FROMENT, G. F. Coke deposition in the thermal cracking of ethane. *AIChE Journal*, v.27, n.6, p.946-951, 1981.

VELENYI, L. J., SONG, Y., FAGLEY, J. C. Carbon deposition in ethane pyrolysis reactors. *Ind. Eng. Chem Res.*, v.30, n. 8, p.1708-1712, 1991.

WATTS, H. A., SHAMPINE, L. F. Solving Non-stiff Ordinary Differential Equations - The State of the Art. *Sandia Laboratories Report SAND75-0182*. Albuquerque, New Mexico, 2000. URL: http://www.csit.fsu.edu/~burkardt/f_src/rkf45/rkf45.html .

ZDONIK, S. B., GREEN, E. J., HALLEE, L. P. Ethylene Worldwide. *The Oil and Gas Journal*, v.64, n.48, p.62-66, 1966; v.64, n.49, p.108-114, 1966; v.64, n.51, p.75-80, 1966; v.65, n.26, p.96-101, 1967; v.65, n.28, p.192-196, 1967; v.65, n.34, p.86-89, 1967; v.66, n.11, p.99-107, 1968; v.66, n.15, p.71-77, 1968; v.66, n.22, p.103-108, 1968; v.67, n.19, p.220-222, 1969; v.67, p.96-101, 1969; v.68, p.94-104, 1970; v.68, p.57-62, 1970.

Anexo A

Programas

A.1 – SIMULAÇÃO DO FORNO DE PIRÓLISE

```
!* * * * *
!  PROGRAMA PARA SIMULAÇÃO DA DINAMICA DE UM
!    REATOR DE PIROLISE DE ETANO
!
!C  N - NUMERO DE COMPONENTES
!C  M - NUMERO DE REACOES
!C  I - NUMERO DE INTERVALOS DE TEMPO
!C  J - NUMERO DE INTERVALOS DE DISTANCIA (DIF. FINITAS)
!C  CC(N,I,J) - CONCENTRACAO, [Kmol/m^3]
!C  VEL - VELOCIDADE LINEAR, [m/s]
!C  DELTAZ - INTERVAL DE DISCRETIZACAO, DIFERENCAS FINITAS, [m]
!C  LL - COMPRIMENTO DO REATOR
!C  ALFA(N,M) - COEFICIENTES ESTEQUIOMETRICOS
!C  TAXA(M) - TAXA DE REACAO
!C  KK(M) - CONSTANTE CINETICA
!C  AA(M) - CONSTANTE DE ARRHENIUS [m^3/kmol.s]
!C  EE(M) - ENERGIA DE ATIVACAO [kJ/kmol]
!C  TT(I,J) - TEMPERATURA [K]
!C  PP(I,J) - PRESSAO, [kPa]
!C  FF - FATOR DE ATRITO
!C  GG - FLUXO MASSICO
!C  WW - VAZAO MASSICA [kg/s]
!C  RATIO - KG DE VAPOR/KG DE REAGENTE ALIMENTADO
!C  DT - DIAMETRO DO TUBO [m]
!C  RHOM - DENSIDADE DA MISTURA [kg/m^3]
!C  RGAS - CTE UNIVERSAL DOS GASES [kJ/kmol.K]
!C  MMM - MASSA MOLECULAR DA MISTURA [kg/kmol]
!C  MM(N) - MASSA MOLECULAR DE CADA COMPONENTE
!C  XX(N,I,J) - FRACAO MOLAR
!C  XXS(N,I,J) - FRACAO MOLAR EM BASE SECA
!C  YY(N,I,J) - FRACAO MASSICA
!C  CPM - CAPACIDADE CALORIFICA DA MISTURA
!C  CPA(N), CPB(N), CPC(N) - CONSTANTES DE CAPACIDADE CALORIFICA
!C  DELHR(M) - ENTALPIA DE REACAO
!C
!C* * * * *
```

```

PROGRAM REATOR
IMPLICIT NONE
INTEGER N,M,I,NJ,NI, cont
INCLUDE 'param.inc'
REAL RGAS, YY1 (MAXI, MAXJ), YY2 (MAXI, MAXJ), YY3 (MAXI, MAXJ),
&      YY4 (MAXI, MAXJ), YY5 (MAXI, MAXJ), YY6 (MAXI, MAXJ),
&      YY7 (MAXI, MAXJ), YY8 (MAXI, MAXJ), YSUM, V (10*MAXJ), SUM,
&      TT (MAXI, MAXJ), PP (MAXI, MAXJ), CONVER (MAXI, MAXJ),
&      XXS (8, MAXI, MAXJ), YYS (8, MAXI, MAXJ), NNI (9, MAXI, MAXJ),
&      NNTOT (MAXI, MAXJ), NNTOTS (MAXI, MAXJ), QQ (MAXI, MAXJ)

!C  DEFINICAO DOS BLOCOS COMUNS CONTENDO DADOS
EXTERNAL DADOS, PRDROP, VISCMIX, KTMIX, INTEGR
INCLUDE 'masmol.inc'
INCLUDE 'dimen.inc'
INCLUDE 'alim.inc'
INCLUDE 'esteq.inc'
INCLUDE 'prop.inc'
INCLUDE 'anter.inc'
DATA RGAS /8.3143/

!C  DEFINICAO DAS VARIAVEIS NECESSARIAS PARA UTILIZAR RKF45
REAL WORK(60000), T0, T, RELERR, ABSERR
INTEGER IWORK(5), IFLAG
IFLAG = 1
RELERR = 1.0e-5
ABSERR = 1.0e-5

!C  LEITURA DA MATRIZ DOS COEFICIENTES ESTEQUIOMETRICOS
OPEN(10, FILE='alfa.dat', STATUS='UNKNOWN')
DO N = 1, 8
  READ (10, *) (ALFA(N,M), M = 1, 5)
ENDDO
CLOSE(10)

!c  CONDICAOES INICIAIS DE TEMPO PORTANTO I = 1
I = 0
I = I + 1

!C  LEITURA DA TEMPERATURA NO TEMPO 1 E TODAS AS POSICOES
OPEN(20, FILE='temperat.dat', STATUS='UNKNOWN')
READ (20, *) (TT(I,NJ), NJ = 1, MAXJ)

```

```

CLOSE (20)
!C  LEITURA DAS FRACOES MOLARES DE  CADA COMPONENTE NO TEMPO 1 E TODAS
!C  AS POSICOES EM (BASE SECA, PORTANTO 8 COMPONENTES)
OPEN(30,FILE='Alimentacao.dat',STATUS='UNKNOWN')
DO N = 1, 8
  READ (30,*) (XXS(N,I,NJ), NJ = 1, MAXJ)
ENDDO
CLOSE (30)

!C  CONVERSÃO DAS FRACOES MOLARES EM FRACOES MASSICAS  (BASE SECA)
!C  (PARA TODAS AS POSICOES)
DO NJ =1, MAXJ
  YSUM = 0
  DO N = 1, 8
    YSUM = YSUM + XXS(N,I,NJ)*MM(N)
  ENDDO
  DO N = 1, 8
    YYS(N,I,NJ) = (XXS(N,I,NJ)*MM(N)) / YSUM
  ENDDO
ENDDO

!C  GUARDANDO A PRIMEIRA LINHA DOS ARQUIVOS DE SAIDA DA COMPOSICAO
!C  9 ARQUIVOS (1 PRA CADA COMPONENTE, COM MATRICES I*J)
!C
!C  HIDROGENIO (1)
  N = 1
  DO 11 NJ = 1,MAXJ
11  YY1(I,NJ) = YYS(N,I,NJ)
!C  METANO (2)
  N = 2
  DO 12 NJ = 1,MAXJ
12  YY2(I,NJ) = YYS(N,I,NJ)
!C  ACETILENO (3)
  N = 3
  DO 13 NJ = 1,MAXJ
13  YY3(I,NJ) = YYS(N,I,NJ)
!C  ETILENO (4)
  N = 4
  DO 14 NJ = 1,MAXJ

```

```

14 YY4(I,NJ) = YYS(N,I,NJ)
!C ETANO (5)
N = 5
DO 15 NJ = 1,MAXJ
15 YY5(I,NJ) = YYS(N,I,NJ)
!C PROPENO (6)
N = 6
DO 16 NJ = 1,MAXJ
16 YY6(I,NJ) = YYS(N,I,NJ)
!C PROPANO (7)
N = 7
DO 17 NJ = 1,MAXJ
17 YY7(I,NJ) = YYS(N,I,NJ)
!C BUTINO (8)
N = 8
DO 18 NJ = 1,MAXJ
18 YY8(I,NJ) = YYS(N,I,NJ)

!C CALCULO DO TAMANHO DE INTERVALO DELTAZ (DEPENDE NUMERO DE INTERV.)
DELTAZ = LL / REAL (MAXJ-1)
!C CALCULO DOS MOLES INICIAIS DOS COMPONENTES NA ALIMENTACAO (I = 0)
!C (INCLUINDO A AGUA, PARA TODAS AS POSICOES)
DO NJ = 1, MAXJ
DO N = 1, 8
NNI(N,I,NJ) = WW*YYS(N,I,NJ)/MM(N)
ENDDO
NNI(9,I,NJ) = WW*RATIO / MM(9)
ENDDO
!C CALCULO DOS MOLES TOTAIS NO PRIMEIRO TEMPO EM TODAS AS POSICOES
DO NJ =1, MAXJ
NNTOT(I,NJ) = 0
DO N =1, 9
NNTOT(I,NJ) = NNTOT(I,NJ) + NNI(N,I,NJ)
ENDDO
ENDDO

CONT = 0
!c FLUXO DE CALOR INICIAL NA FORNALHA
DO NJ = 1, MAXJ

```

```

      QQ(I,NJ) = 70.
ENDDO

!C      PRESAO NA ENTRADA DO REATOR (POSICAO 1) (EXPRESSA EM kPa)
! 100 PP(I,1)=304

!C      CALCULO DO FLUXO MASSICO (TOTAL) (É CTE. EM TODAS AS POSICOES)
      100 GG = 4*WW*(1+RATIO)/(3.14*DT**2)

!C      VAZAO DE COMBUSTIVEL NA FORNALHA (KG/S)
      WWC = 0.088261

!C      CALCULO DOS VETORES V(I) PARA INICIALIZAR RUNGE-KUTTA
!C      V(I) DE I = 1, 8 SAO OS VALORES DE NNI(N,I,J) E
!C      V(9) E O VALOR DE TT(I,J)
      DO NJ = 1, MAXJ
          V(NJ) = NNI(1,I,NJ)
          V(NJ+MAXJ) = NNI(2,I,NJ)
          V(NJ+2*MAXJ) = NNI(3,I,NJ)
          V(NJ+3*MAXJ) = NNI(4,I,NJ)
          V(NJ+4*MAXJ) = NNI(5,I,NJ)
          V(NJ+5*MAXJ) = NNI(6,I,NJ)
          V(NJ+6*MAXJ) = NNI(7,I,NJ)
          V(NJ+7*MAXJ) = NNI(8,I,NJ)
          V(NJ+8*MAXJ) = TT(I,NJ)
          V(NJ+9*MAXJ) = QQ(I,NJ)
      ENDDO

!C      DEFININDO AS VARIAVEIS QUE PASSO POR COMMON A LA SUBROTINA INTEGR
      DO NJ = 1, MAXJ
          WATER(NJ) = NNI(9,I,NJ)
      ENDDO

!C      DEFININDO O INTERVALO DE TEMPO EM QUE ESTOU INTEGRANDO COM RKF45
      T0 = (REAL(I) - 1.)/10
      T = REAL(I)/10

!C      CHAMANDO A SUBROTINA RUNGE-KUTTA FEHLBERG PARA RESOLUCAO DO PERFIL
!C      DO REATOR INNTEIRO, OBTENDO-SE O PERFIL INTEIRO DO REATOR DOS MOLs
!C      E TEMPERATURA NUM INTERVALO DE TEMPO ACIMA

```



```

      NNTOTS((I+1),NJ) = 0
      DO 40 N= 1, 8
40      NNTOTS((I+1),NJ) = NNTOTS((I+1),NJ) + NNI(N,(I+1),NJ)
      DO 50 N= 1, 8
50      XXS(N,(I+1),NJ) = NNI(N,(I+1),NJ) / NNTOTS((I+1),NJ)
      ENDDO

!C  CONVERSAO DAS FRACOES MOLARES EM FRACOES MASSICAS      DEPENDE DE I,J
!C  (BASE SECA) PARA CADA COMPONENTE PARA TODAS AS POSICOES
!C  E O TEMPO I = TEMPO+1
      DO NJ = 1, MAXJ
          YSUM = 0
          DO N = 1, 8
              YSUM = YSUM + XXS(N,(I+1),NJ)*MM(N)
          ENDDO
          DO N = 1, 8
              YYS(N,(I+1),NJ) = (XXS(N,(I+1),NJ)*MM(N)) / YSUM
          ENDDO
      ENDDO

!C  CALCULO DO NOVO NUMERO DE MOLS TOTAIS NO TEMPO I = TEMPO+1
!C  E PARA TODAS AS POSICOES (INCLUINDO A AGUA)
      DO NJ = 1, MAXJ
          NNTOT((I+1),NJ) = 0
          DO 60 N =1, 9
60      NNTOT((I+1),NJ) = NNTOT((I+1),NJ) + NNI(N,(I+1),NJ)
          ENDDO

!C  PERFIL DE CADA COMPONENTE UM PASSO DE TEMPO A FRENTE
!C  EM FRACAO MASSICA EM BASE SECA
      N = 1
      DO NJ = 1,MAXJ
          YY1((I+1),NJ) = YYS(N,(I+1),NJ)
      ENDDO
      N = 2
      DO NJ = 1,MAXJ
          YY2((I+1),NJ) = YYS(N,(I+1),NJ)
      ENDDO
      N = 3

```

```

DO NJ = 1,MAXJ
  YY3((I+1),NJ) = YYS(N,(I+1),NJ)
ENDDO
N = 4
DO NJ = 1,MAXJ
  YY4((I+1),NJ) = YYS(N,(I+1),NJ)
ENDDO
N = 5
DO NJ = 1,MAXJ
  YY5((I+1),NJ) = YYS(N,(I+1),NJ)
ENDDO
N = 6
DO NJ = 1,MAXJ
  YY6((I+1),NJ) = YYS(N,(I+1),NJ)
ENDDO
N = 7
DO NJ = 1,MAXJ
  YY7((I+1),NJ) = YYS(N,(I+1),NJ)
ENDDO
N = 8
DO NJ = 1,MAXJ
  YY8((I+1),NJ) = YYS(N,(I+1),NJ)
ENDDO

```

```

!C LOOP PARA INICIAR NOVAMENTE A INTEGRAÇÃO UM PASSO DE TEMPO A FRENTE
!C PARA O PERFIL INTEIRO DO REATOR (I = TEMPO+1)
  IF (I.NE.(MAXI-1)) THEN
    I = I + 1
    GOTO 100
  ELSE
!C CALCULEI 100 TEMPOS DIFERENTES (PORQUE PARA CADA I CALCULO I+1)
!C   TEMPO = TEMPO + H
    I = I + 1

!C CALCULO DA PRESSAO E CONVERSAO NO TEMPO I = MAXI
  DO NJ = 1, MAXJ
    PP(I,NJ) = PRESS(NJ)
  ENDDO
!C CALCULO DA CONVERSAO DO ETANO

```

```

DO NJ = 1, MAXJ
  CONVER(I,NJ) = 100*(NNI(5,I,1)- NNI(5,I,NJ)) / NNI(5,I,1)
ENDDO
!C ARQUIVO DE SAIDA DO PERFIL AO LONGO DO REATOR PARA O TEMPO FINAL DE
!   CONVERSAO, TEMPERATURA E PRESSAO
OPEN(80,FILE='perfis.dat',STATUS='UNKNOWN')
WRITE(80,501)
WRITE(80,502) ((REAL(NJ)-1)*DELTAZ,CONVER(I,NJ),TT(I,NJ),      &
&
&          PP(I,NJ), NJ=1,MAXJ)
501  FORMAT(/20X,'PERFIS DE CONVERSAO, TEMPERATURA E PRESSAO'//      &
&
&          T10,'Z,m      ',T23,'CONVERSAO,%',T41,'T, K  ', T51,'P,  kPa'//)
502  FORMAT(4F15.2)
CLOSE(80)
!C ARQUIVO DE SAIDA DO PERFIL DOS PRODUTOS AO LONGO DO REATOR PARA O
TEMPO FINAL
OPEN(90,FILE='perfprod.dat',STATUS='UNKNOWN')
WRITE(90,503)
WRITE(90,504) ((REAL(NJ)-1)*DELTAZ,YY1(I,NJ),YY2(I,NJ),      &
&
&          YY3(I,NJ),YY4(I,NJ),YY5(I,NJ),YY6(I,NJ),      &
&
&          YY7(I,NJ),YY8(I,NJ), NJ=1,MAXJ)
503  FORMAT(/20X,'COMPOSICAO DE PRODUTOS (KG/KG)'//      &
&
&          T9,'Z,m',T23,'H2',T35,'CH4',T45,'C2H2',T59,'C2H4',      &
&
&          T72,'C2H6',T85,'C3H6',T98,'C3H8',T111,'C4H6'//)
504  FORMAT(9F13.4)
CLOSE(90)
!C ARQUIVO DE SAIDA DA DINAMICA DA TEMPERATURA DE SAIDA DO REATOR
OPEN(100,FILE='dintemp.dat',STATUS='UNKNOWN')
WRITE(100,505)
WRITE(100,506) ((REAL(NI)-1)/10,TT(NI,MAXJ), NI=1,MAXI)
505  FORMAT(/20X,'DINAMICA DA TEMPERATURA DE SAIDA DO REATOR'//      &
&
&          T10,'TEMPO,s',T23,'TEMPERATURA,K'//)
506  FORMAT(2F15.2)
CLOSE(100)
ENDIF
END

```

BLOCK DATA DADOS

!C* * * * *

!C

!C BLOCO DE DADOS CONTENDO

!C DADOS CONSTANTES NO TEMPO E POSICAO

!C* * * * *

IMPLICIT NONE

INCLUDE 'masmol.inc'

INCLUDE 'arrhen.inc'

INCLUDE 'trcal.inc'

INCLUDE 'visc.inc'

INCLUDE 'condut.inc'

INCLUDE 'dimen.inc'

INCLUDE 'alim.inc'

!C

DATA MM /2.016, 16.032, 26.016, 28.032, 30.048, 42.048, &
& 44.064, 54.048, 18.0/
DATA AA /4.652E13, 3.850E11, 9.810E8, 1.026E12, 7.083E13/
DATA EE /2.7302E5, 2.7319E5, 1.5458E5, 1.7275E5, 2.5301E5/
DATA DELHR /1.44530E5, -7.285E3, 1.33310E5, -9.8140E4, 2.1810E4/
DATA CPA /27.143, 19.251, 26.821, 3.806, 5.409, 3.71, -4.225, 12.548, &
& 32.243/
DATA CPB /.00927, .05213, .07578, .15659, .17811, .23454, .30626, &
& .27436, .00192/
DATA CPC /-1.381E-5, 1.197E-5, -5.007E-5, -8.349E-5, -6.938E-5, &
& -11.602E-5, -15.864E-5, -15.449E-5, 1.056E-5/
DATA VISCA /4.23E-5, 6.16E-5, 6.33E-5, 5.9E-5, 5.82E-5, 5.26E-5, &
& 5.27E-5, 6.23E-5, 1.005E-4/
DATA VISCB /-729.3, -755.1, -820.9, -754.7, -792.2, -802.2, &
& -788.7, -924.5, -1022.5/
DATA KTA /8.099E-3, -1.869E-3, 4.999E-3, -1.760E-2, -3.174E-2, &
& -7.584E-3, 1.858E-3, -2.844E-2, 7.341E-3/
DATA KTB /6.689E-4, 8.727E-5, -2.573E-5, 1.200E-4, 2.201E-4, &
& 6.101E-5, -4.698E-6, 1.255E-4, -1.013E-5/
DATA KTC /-4.158E-7, 1.179E-7, 3.507E-7, 3.335E-8, -1.923E-7, &
& 9.966E-8, 2.177E-7, 7.286E-8, 1.801E-7/
DATA KTD /1.562E-10, -3.614E-11, -2.765E-10, -1.366E-11, &
& 1.664E-10, -3.840E-11, -8.409E-11, -5.109E-11, -9.100E-11/

```

DATA DT /0.108/, LL /95/
DATA WW /0.63/, RATIO /0.4/
END

```

```

SUBROUTINE INTEGR(TIME,V,DVDT)
!C* * * * *
!C      SUBROTINA PARA O CALCULO DOS INTEGRANDOS
!C      DO SISTEMAS DE EQUACOES DIFERENCIAIS
!C      A SER INTEGRADOS POR RUNGE-KUTTA (9 EQUACOES)
!C* * * * *
      IMPLICIT NONE
      INTEGER N,M,NJ
      INCLUDE 'param.inc'
      REAL KK(5,MAXJ),TAXA(5,MAXJ),a(maxj),b(maxj),c(maxj),
&      CPM(MAXJ),CPI(9,MAXJ),MOLTOT,RE,FF,KTMIX,
&      RGAS,VISCM,VISC(9),VISC MIX,XXVISC(9),PRDROP,DELP,
&      V(10*MAXJ),SUM(MAXJ),SUMMOL,TERM(MAXJ),KTM,
&      NNIT(9,MAXJ),TTT(MAXJ),VEL(MAXJ),RHOM(MAXJ),KTI(9),
&      NNIT1(MAXJ),NNIT2(MAXJ),NNIT3(MAXJ),NNIT4(MAXJ),
&      NNIT5(MAXJ),NNIT6(MAXJ),NNIT7(MAXJ),NNIT8(MAXJ),
&      DN1DX(MAXJ),DN2DX(MAXJ),DN3DX(MAXJ),DN4DX(MAXJ),
&      DN5DX(MAXJ),DN6DX(MAXJ),DN7DX(MAXJ),DN8DX(MAXJ),
&      DTTTTDX(MAXJ),DVDT(10*MAXJ),DV1DT(MAXJ),DV2DT(MAXJ),
&      DV3DT(MAXJ),DV4DT(MAXJ),DV5DT(MAXJ),DV6DT(MAXJ),
&      DV7DT(MAXJ),DV8DT(MAXJ),DV9DT(MAXJ),DV10DT(MAXJ),
&      QQQ(MAXJ),PERDA,HCOMB,WWAR,MMAR,TAR,TG,CPAR,DET,VOLTOT
!C      DEFINICAO DOS BLOCOS COMUNS CONTENDO DADOS
      EXTERNAL DADOS,PRDROP,VISC MIX,KTMIX
      INCLUDE 'arrhen.inc'
      INCLUDE 'trcal.inc'
      INCLUDE 'dimen.inc'
      INCLUDE 'esteq.inc'
      INCLUDE 'prop.inc'
      INCLUDE 'anter.inc'
      INCLUDE 'masmol.inc'
      INCLUDE 'visc.inc'
      INCLUDE 'condut.inc'
      DATA RGAS /8.3143/

```

```

!C  ABRINDO NOVAMENTE O VETOR V(10*MAXJ) EM UM VETOR DE CADA
!C  COMPONENTE DE DIMENSOES MAXJ
DO NJ = 1, MAXJ
  NNIT(1,NJ) = V(NJ)
  NNIT(2,NJ) = V(NJ+MAXJ)
  NNIT(3,NJ) = V(NJ+2*MAXJ)
  NNIT(4,NJ) = V(NJ+3*MAXJ)
  NNIT(5,NJ) = V(NJ+4*MAXJ)
  NNIT(6,NJ) = V(NJ+5*MAXJ)
  NNIT(7,NJ) = V(NJ+6*MAXJ)
  NNIT(8,NJ) = V(NJ+7*MAXJ)
  TTT(NJ) = V(NJ+8*MAXJ)
  QQQ(NJ) = V(NJ+9*MAXJ)
!C  A AGUA E TRAZIDA POR BLOCO COMMON POR SER CONSTANTE NO TEMPO
  NNIT(9,NJ) = WATER(NJ)
ENDDO

!C  CALCULO DAS DERIVADAS ESPACIAIS POR DIFERENCAS FINITAS
DO NJ = 1, MAXJ
  NNIT1(NJ) = NNIT(1,NJ)
  NNIT2(NJ) = NNIT(2,NJ)
  NNIT3(NJ) = NNIT(3,NJ)
  NNIT4(NJ) = NNIT(4,NJ)
  NNIT5(NJ) = NNIT(5,NJ)
  NNIT6(NJ) = NNIT(6,NJ)
  NNIT7(NJ) = NNIT(7,NJ)
  NNIT8(NJ) = NNIT(8,NJ)
ENDDO
CALL DERIV(NNIT1, DN1DX, DELTAZ, MAXJ, 1., 1)
CALL DERIV(NNIT2, DN2DX, DELTAZ, MAXJ, 1., 1)
CALL DERIV(NNIT3, DN3DX, DELTAZ, MAXJ, 1., 1)
CALL DERIV(NNIT4, DN4DX, DELTAZ, MAXJ, 1., 1)
CALL DERIV(NNIT5, DN5DX, DELTAZ, MAXJ, 1., 1)
CALL DERIV(NNIT6, DN6DX, DELTAZ, MAXJ, 1., 1)
CALL DERIV(NNIT7, DN7DX, DELTAZ, MAXJ, 1., 1)
CALL DERIV(NNIT8, DN8DX, DELTAZ, MAXJ, 1., 1)
CALL DERIV(TTT, DTTDX, DELTAZ, MAXJ, 1., 1)

!C  CALCULO DA MASSA MOLECULAR DA MISTURA (PARA TODA POSICAO)

```

```

DO NJ = 1, MAXJ
MOLTOT = 0
  DO N = 1, 9
    MOLTOT = MOLTOT + NNIT(N,NJ)
  ENDDO
MMM(NJ) = 0
  DO N = 1, 9
    MMM(NJ) = MMM(NJ) + NNIT(N,NJ)*MM(N)/MOLTOT
  ENDDO
ENDDO

!C  CALCULO DA CAPACIDADE CALORIFICA DA MISTURA
DO NJ = 1, MAXJ
  CPM(NJ) = 0
  DO 40 N = 1, 9
40   CPI(N,NJ) = CPA(N)+CPB(N)*TTT(NJ)+CPC(N)*TTT(NJ)**2
    DO 60 n =1, 9
60   CPM(NJ) = CPM(NJ)+NNIT(N,NJ)*CPI(N,NJ)
  ENDDO

!C  BLOCO PARA O CALCULO DOS PERFIS DE PRESSAO, DENSIDADE E VELOCIDADE
!C  PARA TODAS AS POSICOES
PRESS(1) = 304
DO NJ = 1, MAXJ
!C  CALCULO DA DENSIDADE DA MISTURA
  MOLTOT = 0
  DO N = 1, 9
    MOLTOT = MOLTOT + NNIT(N,NJ)
  ENDDO
  VOLTOT = MOLTOT*RGAS*TTT(NJ)/PRESS(NJ)
  RHOM(NJ) = GG*3.14*DT**2/(VOLTOT*4)
!C  CALCULO DA VELOCIDADE DE ESCOAMENTO
  VEL(NJ) = 4*VOLTOT/(3.14*DT**2)
!C  CALCULO DA VISCOSIDADE DOS COMPONENTES
  DO N =1, 9
    VISC(N) = VISCA(N) * EXP(VISCB(N)/TTT(NJ))
  ENDDO
!C  CALCULO DA VISCOSIDADE DA MISTURA GASOSA
  MOLTOT = 0

```

```

DO N = 1, 9
  MOLTOT = MOLTOT + NNIT(N,NJ)
ENDDO
DO N = 1, 9
  XXVISC(N) = NNIT(N,NJ)/MOLTOT
ENDDO
VISC M = VISC MIX(VISC,MM,XXVISC,9)

!C  CALCULO DA PERDA DE CARGA NO INTERVALO DELTAZ DE TUBO
!C  E CALCULO DA PRESSAO NA POSICAO = POSIC + 1 NO TEMPO = I
  FF = PRDROP(DT,VEL(NJ),RHOM(NJ),VISC M,1.E-4,DELTAZ,FF,RE)
  DELP = ( ((4/(GG*3.14*DT**2))* (DN1DX(NJ)+DN2DX(NJ)+DN3DX(NJ) +
&          DN4DX(NJ)+DN5DX(NJ)+DN6DX(NJ)+DN7DX(NJ)+DN8DX(NJ)) +
&          ((1/MMM(NJ))* (2*FF/DT)+((1/TTT(NJ))*DTTDX(NJ)))) /
&          ((1/(MMM(NJ)*PRESS(NJ))) -
&          (1000*PRESS(NJ)/(GG**2*RGAS*TTT(NJ)))) ) * DELTAZ
  IF (NJ.NE.MAXJ) THEN
    PRESS(NJ+1) = PRESS(NJ) + DELP
  ENDIF
ENDDO

!C  CALCULO DAS CONSTANTES CINETICAS
DO NJ = 1, MAXJ
  DO 20 M=1,5
20    KK(M,NJ) = AA(M)*EXP(-EE(M)/(RGAS*TTT(NJ)))
  ENDDO
DO NJ = 1, MAXJ
  SUMMOL = 0
  DO 30 N = 1, 8
30    SUMMOL = SUMMOL + NNIT(N,NJ)
  TERM(NJ) = PRESS(NJ)/(RGAS*TTT(NJ)*SUMMOL)
ENDDO

!C  CALCULO DAS TAXAS DE REACAO DE CADA REACAO
DO NJ =1, MAXJ
  TAXA(1,NJ) = KK(1,NJ)*NNIT(5,NJ)*TERM(NJ)
  TAXA(2,NJ) = KK(2,NJ)*NNIT(5,NJ)*TERM(NJ)
  TAXA(3,NJ) = KK(3,NJ)*NNIT(6,NJ)*TERM(NJ)
  TAXA(4,NJ) = KK(4,NJ)*NNIT(3,NJ)*NNIT(4,NJ)*TERM(NJ)**2

```

```

TAXA(5,NJ) = KK(5,NJ)*NNIT(4,NJ)*NNIT(5,NJ)*TERM(NJ)**2
ENDDO

!C  CALCULO DOS INTEGRANDOS DAS EQUACOES DE BALANCO DE MASSA
!C  (A AGUA NAO PARTICIPA DA RECAO, ENTAO SAO 8 COMPONENTES)
!C  1 - HIDROGENIO
!c  A ENTRADA DO REATOR SE MANTEM CONSTANTE (POSICAO 1)
DV1DT(1)=0
DO NJ =2, MAXJ
SUM(NJ) = 0
DO 70 M=1, 5
70  SUM(NJ) = SUM(NJ) + ALFA(1,M)*TAXA(M,NJ)
    DV1DT(NJ) = - VEL(NJ) * DN1DX(NJ) +
&
&          (3.14*DT**2*vel(nj)/4)*SUM(NJ)
ENDDO

!C  2 - METANO
!c  A ENTRADA DO REATOR SE MANTEM CONSTANTE (POSICAO 1)
DV2DT(1)=0
DO NJ =2, MAXJ
SUM(NJ) = 0
DO 80 M=1, 5
80  SUM(NJ) = SUM(NJ) + ALFA(2,M)*TAXA(M,NJ)
    DV2DT(NJ) = - VEL(NJ) * DN2DX(NJ) +
&
&          (3.14*DT**2*vel(nj)/4)*SUM(NJ)
ENDDO

!C  3 - ACETILENO
!c  A ENTRADA DO REATOR SE MANTEM CONSTANTE (POSICAO 1)
DV3DT(1)=0
DO NJ =2, MAXJ
SUM(NJ) = 0
DO 90 M=1, 5
90  SUM(NJ) = SUM(NJ) + ALFA(3,M)*TAXA(M,NJ)
    DV3DT(NJ) = - VEL(NJ) * DN3DX(NJ) +
&
&          (3.14*DT**2*vel(nj)/4)*SUM(NJ)
ENDDO

!C  4 - ETENO
!c  A ENTRADA DO REATOR SE MANTEM CONSTANTE (POSICAO 1)
DV4DT(1)=0
DO NJ =2, MAXJ

```

```

SUM(NJ) = 0
DO 100 M=1, 5
100    SUM(NJ) = SUM(NJ) + ALFA(4,M)*TAXA(M,NJ)
      DV4DT(NJ) = - VEL(NJ) * DN4DX(NJ) +
&
&          (3.14*DT**2*vel(nj)/4)*SUM(NJ)
      ENDDO
!C    5 - ETANO
!c    A ENTRADA DO REATOR SE MANTEM CONSTANTE (POSICAO 1)
      DV5DT(1)=0
      DO NJ =2, MAXJ
        SUM(NJ) = 0
        DO 110 M=1, 5
110    SUM(NJ) = SUM(NJ) + ALFA(5,M)*TAXA(M,NJ)
      DV5DT(NJ) = - VEL(NJ) * DN5DX(NJ) +
&
&          (3.14*DT**2*vel(nj)/4)*SUM(NJ)
      ENDDO
!C    6 - PROPENO
!c    A ENTRADA DO REATOR SE MANTEM CONSTANTE (POSICAO 1)
      DV6DT(1)=0
      DO NJ =2, MAXJ
        SUM(NJ) = 0
        DO 120 M=1, 5
120    SUM(NJ) = SUM(NJ) + ALFA(6,M)*TAXA(M,NJ)
      DV6DT(NJ) = - VEL(NJ) * DN6DX(NJ) +
&
&          (3.14*DT**2*vel(nj)/4)*SUM(NJ)
      ENDDO
!C    7 - PROPANO
!c    A ENTRADA DO REATOR SE MANTEM CONSTANTE (POSICAO 1)
      DV7DT(1)=0
      DO NJ =2, MAXJ
        SUM(NJ) = 0
        DO 130 M=1, 5
130    SUM(NJ) = SUM(NJ) + ALFA(7,M)*TAXA(M,NJ)
      DV7DT(NJ) = - VEL(NJ) * DN7DX(NJ) +
&
&          (3.14*DT**2*vel(nj)/4)*SUM(NJ)
      ENDDO
!C    8 - BUTINO
!c    A ENTRADA DO REATOR SE MANTEM CONSTANTE (POSICAO 1)
      DV8DT(1)=0

```

```

DO NJ =2, MAXJ
  SUM(NJ) = 0
  DO 140 M=1, 5
140    SUM(NJ) = SUM(NJ) + ALFA(8,M)*TAXA(M,NJ)
      DV8DT(NJ) = - VEL(NJ) * DN8DX(NJ) +
&
&      (3.14*DT**2*vel(nj)/4)*SUM(NJ)
ENDDO

!C  CALCULO DO INTEGRANDOS DO BALANCO DE ENERGIA
!C  CALCULO O BALANÇO DE ENERGIA NA FORNALHA
!C  PERDA DE CALOR DA FORNALHA
      PERDA = 0.03
!c  PODER CALORIFICO DO COMBUSTIVEL (KJ/KG)
      HCOMB = 52510
!C  VAZAO DE AR (KG/S)
      WWAR = 19.907*WWC
!C  MASSA MOLAR DO AR (KG/KMOL)
      MMAR = 28.951
!C  TEMPERATURA INICIAL E FINAL DO AR (K)
      TAR = 298.15
      TG = 1300.15
!C  CP DO AR (KJ/KG K)
      CPAR = 8.314*(3.355 + 0.575E-3*TG - 0.016E5*TG**(-2)) / MMAR
!C  DIAMETRO EXTERNO DO TUBO (M)
      DET = DT + 0.008
!C  BALANCO DE ENERGIA NA FORNALHA
      DO NJ = 1, MAXJ
          DV10DT(NJ) = (((WWC*(1-PERDA)*HCOMB) - (WWAR*CPAR*(TG-TAR)))/
&
&          (DET*3.14*LL)) - QQQ(NJ)
ENDDO

!C * * * * *
!C  BALANCO ENERGIA NO REATOR
!c  A ENTRADA DO REATOR SE MANTEM CONSTANTE (POSICAO 1)
      DV9DT(1)=0
      DO NJ = 2, MAXJ
          SUM(NJ) = 0
          DO 150 M = 1, 5
150    SUM(NJ) = SUM(NJ) + (-DELHR(M))*TAXA(M,NJ)

```

```

A(NJ) = - VEL(nj)*DTTDX(NJ)
B(NJ) = (VEL(NJ)*3.14*DT*QQQ(NJ)/CPM(NJ))
C(NJ) = (VEL(NJ)*3.14*DT**2*SUM(NJ))/(4*CPM(NJ))
DV9DT(NJ) = A(NJ)+B(NJ)+C(NJ)
ENDDO
DO NJ = 1, MAXJ
  DVDT(NJ) = DV1DT(NJ)
  DVDT(NJ+MAXJ) = DV2DT(NJ)
  DVDT(NJ+2*MAXJ) = DV3DT(NJ)
  DVDT(NJ+3*MAXJ) = DV4DT(NJ)
  DVDT(NJ+4*MAXJ) = DV5DT(NJ)
  DVDT(NJ+5*MAXJ) = DV6DT(NJ)
  DVDT(NJ+6*MAXJ) = DV7DT(NJ)
  DVDT(NJ+7*MAXJ) = DV8DT(NJ)
  DVDT(NJ+8*MAXJ) = DV9DT(NJ)
  DVDT(NJ+9*MAXJ) = DV10DT(NJ)
ENDDO
RETURN
END

```

```

REAL FUNCTION VISC MIX (VISC,MWT,Y,NC)
!C * * * * *
!C _ FUNCAO PARA O CALCULO DA VISCOSIDADE DE UMA MISTURA GASOSA
!C USANDO A EQUACAO DE WILKE
!C USING WILKE'S EQUATION
!C NC - NUMERO DE COMPONENTES
!C MWT - VETOR DAS MASSAS MOLARES
!C Y - VETOR DE FRACOES MOLARES
!C VISMIX - VISCOSIDADE DA MISTURA GASOSA
!C * * * * *
IMPLICIT NONE
INTEGER NC,NI,NJ
REAL VISC(NC),MWT(NC),Y(NC),PHI,SUM,TOTAL
TOTAL = 0
DO NI= 1,NC
  SUM = 0
  DO NJ= 1,NC

```

```

        PHI = (1+SQRT(VISC(NI)/VISC(NJ)))*(MWT(NJ)/MWT(NI))**0.25) &
&          **2 / SQRT(8.*(1+MWT(NI)/MWT(NJ)))
        SUM= SUM+Y(NJ)*PHI
        ENDDO
        TOTAL = TOTAL + VISC(NI)*Y(NI)/SUM
        ENDDO
        VISCMIX = TOTAL
        RETURN
        END

```

```

        REAL FUNCTION PRDROP(D,U,RHO,VISCO,EPS,L,FF,RE)
!C * * * * *
!C      FUNCAO PARA O CALCULO DA PERDA DE CARGA DE UM FLUIDO
!C      NEWTONIANO NUMA TUBULACAO
!C      PRDROP - PERDA DE CARGA, [Pa]
!C      U - VELOCIDADE DE ESCOAMENTO, [m/s]
!C      RHO - DENSIDADE, [kg/m^3]
!C      D - DIAMETRO INTERNO DO TUBO, [m]
!C      L - COMPRIMENTO DO TUBO, [m]
!C      EPS - RUGOSIDADE DO TUBO, [m]
!C      RE - NUMERO DE REYNOLDS
!C      FF - FATOR DE FRICCAO DE FANNING
!C      VISC - VISCOSIDADE DO FLUIDO, [kg/(m.s)]
!C * * * * *

```

```

        IMPLICIT NONE
        REAL RE,D,U,RHO,VISCO,FF,EPS,RF,T1,T2,TERM
        RE = D*U*RHO/VISCO
        IF (RE .GT. 2100.) GO TO 10
        FF = 16./RE
        GO TO 30
10      RF = EPS/D
        IF ( RE .GT. 4000.) GO TO 20
        T1 = RF/3.7
        T2 = 5.02/RE
        TERM = LOG10(T1-T2*LOG10(T1+13./RE))
        FF = 1./(4.*LOG10(T1)+T2*TERM)**2
        GO TO 30

```

```

20  FF = 1./((3.6*LOG10(RE/(0.135*(RE*RF+6.5))))**2
30  PRDROP = FF !2.*FF*RHO*U**2*L/D
    RETURN
    END

```

```

    SUBROUTINE DERIV (Y, DY, DX, N, V, ITYPE)
!C * * * * *
!C      SUBROTINA PARA A APLICACAO DO METODO DAS DIFERENCAS FINITAS
!C * * * * *
    REAL Y(1000), DY(1000),DX
    INTEGER ITYPE

!    FORWARD FINITE DIFFERENCE
!    -----
    IF (ITYPE .EQ. 1) THEN
        IF (V .GT. 0.) THEN
            DY(1) = (Y(2) - Y(1)) / DX
            DO I = 2, N
                DY(I) = (Y(I) - Y(I-1)) / DX
            END DO
        ELSE
            DO I = 1, N - 1
                DY(I) = (Y(I+1) - Y(I)) / DX
            END DO
            DY(N) = (Y(N) - Y(N-1)) / DX
        END IF
    END IF

!    CENTRAL FINITE DIFFERENCE
!    -----
    IF (ITYPE .EQ. 2) THEN
        CONST1 = 0.5/DX
        DY(1) = CONST1 * (-3. * Y(1) + 4. * Y(2) - Y(3))
        DO I = 2, N-1
            DY(I) = CONST1 * (-Y(I-1) + Y(I+1))
        END DO
        DY(N) = CONST1 * (Y(N-2) - 4. * Y(N-1) + 3. * Y(N))
    END IF

```

```

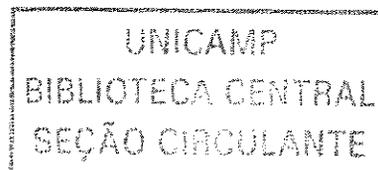
!      4TH ORDER, FIVE POINT, CENTERED DIFFERENCE
!      -----
      IF (ITYPE .EQ. 3) THEN
          CONST1 = 0.041666667 / DX
          DY(1) = CONST1 * (-50.*Y(1) + 96.*Y(2) - 72.*Y(3) + 32.*Y(4) - &
&              6.*Y(5))
          DY(2) = CONST1 * (-6.*Y(1) - 20.*Y(2) + 36.*Y(3) - 12.*Y(4) + &
&              2.*Y(5))
          DO I = 3, N-2
              DY(I) = CONST1 * (2.*Y(I-2) - 16.*Y(I-1) + 16.*Y(I+1) - &
&              2.*Y(I+2))
          END DO
          DY(N-1) = CONST1 * (-2.*Y(N-4) + 12.*Y(N-3) - 36.*Y(N-2) + &
&              20.*Y(N-1) + 6.*Y(N))
          DY(N) = CONST1 * (6.*Y(N-4) - 32.*Y(N-3) + 72.*Y(N-2) - &
&              96.*Y(N-1) + 50.*Y(N))
      END IF

```

```

!      FIVE POINT, BIASED UPWIND DIFFERENCE
!      -----
      IF (ITYPE .EQ. 4) THEN
          CONST1 = 0.041666667 / DX
          IF (V .GT. 0.0) THEN
              DY(1) = CONST1 * (-50.*Y(1) + 96.*Y(2) - 72.*Y(3) + 32.*Y(4) &
&              - 6.*Y(5))
              DY(2) = CONST1 * (-6.*Y(1) - 20.*Y(2) + 36.*Y(3) - 12.*Y(4) &
&              + 2.*Y(5))
              DY(3) = CONST1 * (2.*Y(1) - 16.*Y(2) + 16.*Y(4) - 2.*Y(5))
              DO I = 4, N-1
                  DY(I) = CONST1 * (-2.*Y(I-3) + 12.*Y(I-2) - 36.*Y(I-1) + &
&                  20.*Y(I) + 6.*Y(I+1))
              END DO
              DY(N) = CONST1 * (6.*Y(N-4) - 32.*Y(N-3) + 72.*Y(N-2) - &
&              96.*Y(N-1) + 50.*Y(N))
          ELSE
              DY(1) = CONST1 * (-50.*Y(1) + 96.*Y(2) - 72.*Y(3) + 32.*Y(4) &
&              - 6.*Y(5))
              DO I = 2, N-3

```



```

        DY(I) = CONST1 * (-6.*Y(I-1) - 20.*Y(I) + 36.*Y(I+1) -      &
&          12.*Y(I+2) + 2.*Y(I+3))
        END DO
        DY(N-2) = CONST1 * (2.*Y(N-4) - 16.*Y(N-3) + 16.*Y(N-1) -      &
&          2.*Y(N))
        DY(N-1) = CONST1 * (-2.*Y(N-4) + 12.*Y(N-3) - 36.*Y(N-2) +      &
&          20.*Y(N-1) + 6.*Y(N))
        DY(N) = CONST1 * (6.*Y(N-4) - 32.*Y(N-3) + 72.*Y(N-2) -      &
&          96.*Y(N-1) + 50.*Y(N))
        END IF
    END IF
    RETURN
END

```

A.2 – SUBROTINA DO CONTROLADOR PI

```

!C* * * * *
!C  PROGRAMA PARA CALCULO DE UM CONTROLADOR
!C    PI DIGITAL (SUBROTINA)
!C
!C  SETP - SET-POINT DA VARIAVEL CONTROLADA
!C  YYK - VARIAVEL CONTROLADA
!C  DELTAU - VARIACAO DA VARIAVEL MANIPULADA
!C          CALCULADA PELA LEI DE CONTROLE
!C  UK - VARIAVEL MANIPULADA
!C  NT - INSTANTE DE TEMPO EM QUE ME ENCONTRO
!C  TAU1 - HORIZONTE DE CONTROLE
!C  KKC - GANHO DO CONTROLADOR
!C  TA - TEMPO DE AMOSTRAGEM
!C* * * * *
      SUBROUTINE DIGPI (ERRO,NT,DELTAU,UK,TA)
      IMPLICIT NONE
      INTEGER NT
      INCLUDE 'pid.inc'
      INCLUDE 'param.inc'
      REAL ERRO(MAXI),SETP,DELTAU(MAXI),UK(MAXI),TA

```

```

!C  CALCULO DA PROXIMA ACAO DE CONTROLE UK(NT)
      DELTAU(NT) = KKC*((ERRO(NT)-ERRO(NT-1)) + (TA/TAUI)*ERRO(NT))
      UK(NT) = UK(NT-1) + DELTAU(NT)
      RETURN
      END

```

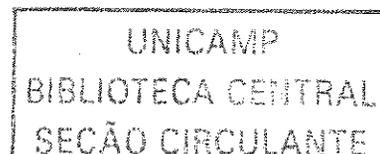
A.3 – SUBROTINA DO CONTROLADOR DMC

```

      SUBROUTINE CONTROL (SETP, YYK, NT, DELTAU, UK)
!C* * * * *
!C  PROGRAMA PARA CALCULO DE UM CONTROLADOR DMC
!C    "DYNAMIC MATRIX CONTROL"  (SUBROTINA)
!C
!C  SETP - SET-POINT DA VARIAVEL CONTROLADA
!C  YYK - VARIAVEL CONTROLADA
!C  DELTAU - VARIACAO DA VARIAVEL MANIPULADA
!C          CALCULADA PELA LEI DE CONTROLE
!C  UK - VARIAVEL MANIPULADA
!C  NT - INSTANTE DE TEMPO EM QUE ME ENCONTRO
!C  UU - HORIZONTE DE CONTROLE
!C  VV - HORIZONTE DE PREDICAO
!C  NN - HORIZONTE DE PROCESSO
!C* * * * *
      IMPLICIT NONE
      INTEGER NI, NJ, NT
      INCLUDE 'dmc.inc'
      INCLUDE 'param.inc'
      REAL AALIN(VV, VV), AA(VV, UU), WW1(VV, VV), WW2(UU, UU), EELIN(VV, 1),
& DELTAU(MAXI), AATR(UU, VV), TERM1(UU, UU), TERMAT(UU, VV),
& AATWW1(UU, VV), ATW1A(UU, UU), INVTER(UU, UU), COEFHI(NN),
& COEFAI(NN), SOMA, KKC(UU, VV), SSM(VV), PPJ(VV), UK(MAXI), SETP, YYK

!C  LEITURA DOS COEFICIENTES DE RESPOSTA AO IMPULSO hi (PARA O HORIZONTE
DO PROCESSO N)
      OPEN(10, FILE='coefh.dat', STATUS='UNKNOWN')
      READ(10, *) (COEFHI(NI), NI = 1, NN)

```



```

CLOSE(10)
!C  CALCULO DOS COEFICIENTES DE RESPOSTA AO DEGRAU ai = somatorio(hi)
(PARA TODO O N)
DO NI = 1, NN
  COEFAI(NI) = 0
  SOMA = 0
  DO NJ = 1, NI
    SOMA = SOMA + COEFHI(NJ)
  ENDDO
  COEFAI(NI) = SOMA
ENDDO
!C  DEFINICAO DAS MATRICES PESO W1 E W2
!C  CONSIDERANDO UM FATOR DE SUPRESAO FF =
DO NI = 1, VV
  DO NJ = 1, VV
    IF (NI.EQ.NJ) THEN
      WW1(NI,NJ) = 1
    ELSE
      WW1(NI,NJ) = 0
    ENDIF
    IF (NI.LE.UU.AND.NJ.LE.UU) THEN
      WW2(NI,NJ) = FF * WW1(NI,NJ)
    ENDIF
  ENDDO
ENDDO
!C  MONTAGEM DA MATRIZ DINAMICA A' v*v (AALIN)
DO NI = 1, VV
  DO NJ = 1, VV
    IF (NJ.GT.NI) THEN
      AALIN(NI,NJ) = 0
    ELSE
      AALIN(NI,NJ) = COEFAI(NI-(NJ-1))
    ENDIF
  ENDDO
ENDDO
!C  TRUNCANDO A MATRIZ DINAMICA PARA AS U PRIMEIRAS COLUNAS (MATRIZ AA)
DO NI = 1, VV
  DO NJ = 1, UU

```

```

        AA(NI,NJ) = AALIN (NI,NJ)
    ENDDO
ENDDO
!C  CALCULO DE AA TRANSPOSTA
    CALL TRANSP(AA,VV,UU,AATR)
!C  MULTIPLICANDO AATR * WW1
    CALL MULTMATR(AATR,UU,VV,WW1,VV,VV,AATWW1)
!C  MULTIPLICANDO (AATR * WW1) * AA
    CALL MULTMATR(AATWW1,UU,VV,AA,VV,UU,ATW1A)
!  SOMANDO AAT*WW1*AA + WW2
    CALL SOMAMATR(ATW1A,UU,UU,WW2,UU,UU,INVTER)
!  CALCULANDO A INVERSA (AATR*WW1*AA + WW2) ^(-1)
    CALL INVERT(INVTER,TERM1,UU)
!  CALCULO DE (AATR*WW1*AA + WW2)^(-1) * AATR
    CALL MULTMATR(TERM1,UU,UU,AATR,UU,VV,TERMAT)
!  CALCULO DE KKC = (AATR*WW1*AA + WW2)^(-1) * AATR * WW1
    CALL MULTMATR(TERMAT,UU,VV,WW1,VV,VV,KKC)

!C  CALCULO DO VETOR Pj = somatorio Sm
!C  CALCULO DO VETOR Sm
    DO NI = 1, VV
        SSM(NI) = 0
        SOMA = 0
        DO NJ = NI+1, NN
            SOMA = SOMA + (COEFHI(NJ)*DELTAU((NT+NI-NJ)))
        ENDDO
    ENDDO

!C  CALCULO DO VETOR Pj
    DO NI = 1, VV
        PPJ(NI) = 0
        SOMA = 0
        DO NJ = 1,NI
            SOMA = SOMA + SSM(NJ)
        ENDDO
        PPJ(NI) = SOMA
    ENDDO

!c  DETERMINACAO DO VETOR E' (EELIN)
    DO NI =1, VV

```

```

        EELIN(NI,1)= SETP - YYK - PPJ(NI)
    ENDDO

!C  CALCULO DA PROXIMA Acao DE CONTROLE U(NT) = U(NT-1) + (KKC1 * EELIN)
!C  ONDE KKC1 É A PRIMEIRA LINHA DA MATRIZ KKC
        SOMA = 0
        DO NJ = 1, VV
            SOMA = SOMA + KKC(1,NJ)*EELIN(NJ,1)
        ENDDO
        UK(NT) = UK(NT-1) + SOMA
        DO NI = 1, (UU-1)
            DELTAU((UU-(NI-1))) = DELTAU((UU-NI))
        ENDDO
        DELTAU(NT) = UK(NT)-UK(NT-1)
    RETURN
    END

```

```

        SUBROUTINE TRANSP(MAT,NL,NC,MATTR)
!C * * * * *
!C  SUBROTINA PARA O CALCULO DE UMA MATRIZ TRANSPOSTA
!C
!C  MAT - MATRIZ QUE QUERO TRANSPOR
!C  NL - NUMERO DE LINHAS DE MAT
!C  NC - NUMERO DE COLUNAS DE MAT
!C  MATTR - MATRIZ TRANSPOSTA DE MAT
!C * * * * *
        IMPLICIT NONE
        INTEGER NC,NL,NI,NJ
        REAL MAT(NL,NC),MATTR(NC,NL)

        DO 10 NI = 1, NL
            DO 10 NJ = 1, NC
10          MATTR(NJ,NI) = MAT(NI,NJ)
        RETURN
    END

```

```

        SUBROUTINE MULTMATR (MATA, LA, CA, MATB, LB, CB, MATC)
!C * * * * *
!C  SUBROTINA PARA CALCULO DO PRODUTO DE UMA
!C    MATRIZ A n*m COM UMA MATRIZ B m*p
!C      SENDO C n*p = A*B
!C  CA - NUMERO DE COLUNAS DA MATRIZ  A
!C  LA - NUMERO DE LINHAS DA MATRIZ  A
!C  CB - NUMERO DE COLUNAS DA MATRIZ  B
!C  LB - NUMERO DE LINHAS DA MATRIZ  B
!C  MATA(LA,CA) - MATRIZ A
!C  MATB(LB,CB) - MATRIZ B
!C  MATC(LA,CB) - MATRIZ C = A*B
!C
!C * * * * *
        IMPLICIT NONE
        INTEGER LA, CA, LB, CB, NI, NJ, K
        REAL MATA(LA, CA), MATB(LB, CB), MATC(LA, CB), SOMA

        IF (CA.NE.LB) THEN
            WRITE(*, '(A45,/)' ) 'Nao e possivel multiplicar as matrices'
        ELSE
            DO NI = 1, LA
                DO NJ = 1, CB
                    SOMA = 0
                    DO K = 1, LB
                        SOMA = SOMA + MATA(NI, K) * MATB(K, NJ)
                    MATC(NI, NJ) = SOMA
                ENDDO
            ENDDO
        ENDDO
    ENDDO
ENDIF
RETURN
END

```

```

        SUBROUTINE SOMAMATR (MATA, LA, CA, MATB, LB, CB, MATC)
!C * * * * *
!C  SUBROTINA PARA CALCULO DA SOMA DE UMA

```

```

!C      MATRIZ A n*m COM UMA MATRIZ B n*m
!C      SENDO C n*m = A+B
!C      CA - NUMERO DE COLUNAS DA MATRIZ A
!C      LA - NUMERO DE LINHAS DA MATRIZ A
!C      CB - NUMERO DE COLUNAS DA MATRIZ B
!C      LB - NUMERO DE LINHAS DA MATRIZ B
!C      MATA(LA,CA) - MATRIZ A
!C      MATB(LB,CB) - MATRIZ B
!C      MATC(LA,CB) - MATRIZ C = A*B
!C
!C * * * * *
      IMPLICIT NONE
      INTEGER LA, CA, LB, CB, NI, NJ
      REAL MATA(LA, CA), MATB(LB, CB), MATC(LA, CB)

      IF (CA.NE.CB.AND.LA.NE.LB) THEN
        WRITE(*, '(A45,/)' ) 'Nao e possivel somar as matrices'
      ELSE
        DO NI = 1, LA
          DO NJ = 1, CA
            MATC(NI, NJ) = MATA(NI, NJ)+MATB(NI, NJ)
          ENDDO
        ENDDO
      ENDIF
      RETURN
      END

      SUBROUTINE INVERT( A, AINV, N )
! * * * * *
!C      SUBROUTINA PARA INVERTER UMA MATRIZ POR ELIMINACAO DE GAUSS
!C      AINV=INVERSE(A)   A(N,N)   AINV(N,N)
!C      NOTA: TAMANHO MAXIMO 64 X 64 - RE-DIMENSIONAR PARA MATRICES MAIORES
!C      MATRIX D E EXTENDIDA.
! * * * * *
      REAL A(N,N), AINV(N,N)
      REAL D(N, (2*N))

```

```

!C INICIALIZAR A REDUCAO DA MATRIZ
      N2 = 2*N
      DO 1 I = 1,N
        DO 2 J = 1,N
          D(I,J) = A(I,J)
          D(I,N+J) = 0.
2      CONTINUE
      D(I,N+I) = 1.
1      CONTINUE

!C FAZER A REDUCAO
      DO 3 I = 1,N
        ALPHA = D(I,I)
        IF(ALPHA .EQ. 0.) GO TO 300
        DO 4 J = 1,N2
          D(I,J) = D(I,J)/ALPHA
4      CONTINUE
        DO 5 K = 1,N
          IF((K-I).EQ.0) GO TO 5
          BETA = D(K,I)
          DO 6 J = 1,N2
            D(K,J) = D(K,J) - BETA*D(I,J)
6      CONTINUE
5      CONTINUE
3      CONTINUE

!C COPIAR RESULTADO NA MATRIZ DE SAIDA
      DO 7 I = 1,N
        DO 8 J = 1,N
          AINV(I,J) = D(I,J+N)
8      CONTINUE
7      CONTINUE
      RETURN
300  PRINT *, '*** ERROR: MATRIZ SINGULAR ***'
      STOP
      RETURN
      END

```

Anexo B

Resultados de simulações

B.1 – SIMULAÇÃO DO FORNO DE PIRÓLISE

Tabela B.1 – Perfis desenvolvidos no forno de pirólise de etano para o estado estacionário atingido.

z (m)	Conversão (%)	T (K)	T (°C)	P (kPa)
0	0,00	953,15	680,00	304,00
1,9	0,25	965,06	691,91	302,09
3,8	0,60	975,87	702,72	300,13
5,7	1,07	985,46	712,31	298,15
7,6	1,68	993,77	720,62	296,13
9,5	2,43	1000,83	727,68	294,07
11,4	3,32	1006,73	733,58	291,98
13,3	4,33	1011,61	738,46	289,85
15,2	5,44	1015,64	742,49	287,69
17,1	6,64	1018,98	745,83	285,50
19	7,91	1021,76	748,61	283,27
20,9	9,24	1024,13	750,98	281,00
22,8	10,61	1026,18	753,03	278,69
24,7	12,01	1028,00	754,85	276,34
26,6	13,43	1029,64	756,49	273,94
28,5	14,87	1031,16	758,01	271,51
30,4	16,32	1032,59	759,44	269,03
32,3	17,78	1033,96	760,81	266,50
34,2	19,24	1035,30	762,15	263,92
36,1	20,71	1036,62	763,47	261,30
38	22,18	1037,93	764,78	258,62
39,9	23,65	1039,25	766,10	255,89
41,8	25,12	1040,57	767,42	253,10
43,7	26,59	1041,91	768,76	250,25
45,6	28,05	1043,27	770,12	247,35
47,5	29,52	1044,66	771,51	244,38
49,4	30,98	1046,07	772,92	241,34
51,3	32,44	1047,50	774,35	238,23
53,2	33,90	1048,97	775,82	235,05
55,1	35,35	1050,47	777,32	231,80
57	36,80	1052,01	778,86	228,46
58,9	38,25	1053,58	780,43	225,04
60,8	39,70	1055,19	782,04	221,53
62,7	41,14	1056,83	783,68	217,92
64,6	42,57	1058,53	785,38	214,22
66,5	44,00	1060,26	787,11	210,40
68,4	45,43	1062,05	788,90	206,47
70,3	46,85	1063,88	790,73	202,41
72,2	48,26	1065,77	792,62	198,22
74,1	49,67	1067,72	794,57	193,88
76	51,07	1069,74	796,59	189,38
77,9	52,46	1071,82	798,67	184,70

79,8	53,84	1073,98	800,83	179,84
81,7	55,21	1076,22	803,07	174,75
83,6	56,58	1078,55	805,40	169,42
85,5	57,93	1080,99	807,84	163,82
87,4	59,26	1083,54	810,39	157,89
89,3	60,58	1086,22	813,07	151,59
91,2	61,89	1089,05	815,90	144,84
93,1	63,17	1092,06	818,91	137,54
95	64,43	1095,30	822,15	129,53

Tabela B.2 – Distribuição de produtos no estado estacionário atingido, frações mássicas em base seca.

z (m)	H ₂	CH ₄	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₆	C ₃ H ₈	C ₄ H ₆
0	0,0000	0,0000	0,0000	0,0093	0,9795	0,0112	0,0000	0,0000
2	0,0002	0,0005	0,0008	0,0115	0,9771	0,0099	0,0000	0,0000
4	0,0004	0,0011	0,0016	0,0146	0,9737	0,0086	0,0000	0,0000
6	0,0007	0,0016	0,0024	0,0187	0,9690	0,0073	0,0001	0,0001
8	0,0011	0,0022	0,0032	0,0240	0,9631	0,0061	0,0001	0,0003
10	0,0016	0,0027	0,0038	0,0304	0,9557	0,0051	0,0001	0,0005
11	0,0021	0,0033	0,0043	0,0379	0,9470	0,0042	0,0002	0,0009
13	0,0028	0,0038	0,0047	0,0463	0,9372	0,0036	0,0002	0,0014
15	0,0035	0,0044	0,0049	0,0554	0,9262	0,0031	0,0003	0,0021
17	0,0042	0,0049	0,0050	0,0651	0,9145	0,0028	0,0004	0,0030
19	0,0050	0,0055	0,0051	0,0752	0,9020	0,0027	0,0004	0,0040
21	0,0059	0,0062	0,0050	0,0856	0,8890	0,0026	0,0005	0,0052
23	0,0067	0,0069	0,0049	0,0962	0,8756	0,0026	0,0006	0,0065
25	0,0076	0,0076	0,0048	0,1069	0,8619	0,0027	0,0007	0,0078
27	0,0084	0,0084	0,0047	0,1177	0,8480	0,0028	0,0007	0,0093
29	0,0093	0,0092	0,0046	0,1285	0,8339	0,0029	0,0008	0,0108
30	0,0102	0,0100	0,0044	0,1393	0,8197	0,0031	0,0009	0,0124
32	0,0111	0,0110	0,0043	0,1500	0,8054	0,0032	0,0010	0,0140
34	0,0120	0,0119	0,0042	0,1607	0,7911	0,0034	0,0011	0,0156
36	0,0129	0,0129	0,0041	0,1713	0,7767	0,0035	0,0011	0,0174
38	0,0138	0,0139	0,0041	0,1819	0,7623	0,0037	0,0012	0,0191
40	0,0147	0,0150	0,0040	0,1924	0,7479	0,0038	0,0013	0,0209
42	0,0156	0,0161	0,0040	0,2028	0,7335	0,0040	0,0014	0,0227
44	0,0165	0,0172	0,0039	0,2132	0,7191	0,0041	0,0015	0,0246
46	0,0173	0,0184	0,0039	0,2235	0,7047	0,0042	0,0015	0,0264
48	0,0182	0,0195	0,0039	0,2337	0,6904	0,0043	0,0016	0,0284
49	0,0191	0,0207	0,0038	0,2438	0,6761	0,0044	0,0017	0,0303
51	0,0200	0,0219	0,0038	0,2540	0,6618	0,0045	0,0018	0,0323
53	0,0209	0,0232	0,0038	0,2640	0,6475	0,0046	0,0018	0,0343
55	0,0217	0,0244	0,0038	0,2740	0,6332	0,0046	0,0019	0,0363
57	0,0226	0,0256	0,0038	0,2840	0,6190	0,0047	0,0020	0,0383
59	0,0235	0,0269	0,0038	0,2939	0,6048	0,0047	0,0021	0,0404
61	0,0243	0,0281	0,0037	0,3037	0,5907	0,0047	0,0022	0,0425

63	0,0252	0,0294	0,0037	0,3136	0,5766	0,0048	0,0022	0,0446
65	0,0260	0,0306	0,0037	0,3234	0,5625	0,0048	0,0023	0,0466
67	0,0269	0,0319	0,0037	0,3331	0,5485	0,0048	0,0024	0,0487
68	0,0278	0,0331	0,0037	0,3429	0,5346	0,0048	0,0025	0,0508
70	0,0286	0,0344	0,0037	0,3526	0,5206	0,0047	0,0025	0,0529
72	0,0295	0,0356	0,0037	0,3622	0,5068	0,0047	0,0026	0,0549
74	0,0303	0,0368	0,0036	0,3719	0,4930	0,0047	0,0027	0,0570
76	0,0311	0,0380	0,0036	0,3815	0,4793	0,0046	0,0028	0,0590
78	0,0320	0,0392	0,0036	0,3911	0,4657	0,0046	0,0028	0,0610
80	0,0328	0,0403	0,0036	0,4007	0,4521	0,0045	0,0029	0,0630
82	0,0336	0,0414	0,0036	0,4103	0,4387	0,0044	0,0030	0,0649
84	0,0345	0,0425	0,0036	0,4199	0,4254	0,0044	0,0031	0,0668
86	0,0353	0,0436	0,0035	0,4294	0,4121	0,0043	0,0031	0,0687
87	0,0361	0,0446	0,0035	0,4389	0,3990	0,0042	0,0032	0,0704
89	0,0369	0,0456	0,0035	0,4484	0,3861	0,0041	0,0033	0,0722
91	0,0377	0,0466	0,0035	0,4578	0,3733	0,0040	0,0033	0,0738
93	0,0385	0,0475	0,0035	0,4672	0,3607	0,0038	0,0034	0,0754
95	0,0392	0,0483	0,0035	0,4765	0,3484	0,0037	0,0035	0,0769

B.2 – MODELO DE CONVOLUÇÃO

Tabela B.3 – Coeficientes ao degrau (a_i) e impulso (h_i) do modelo de convolução

Tempo (s)	i	a_i	h_i
0,0	0	0,00	0,00
0,1	1	49,85	49,85
0,2	2	126,90	77,05
0,3	3	217,54	90,64
0,4	4	317,81	100,27
0,5	5	424,88	107,07
0,6	6	534,78	109,90
0,7	7	641,85	107,07
0,8	8	742,13	100,27
0,9	9	834,47	92,34
1,0	10	918,88	84,41
1,1	11	995,92	77,05
1,2	12	1067,30	71,38
1,3	13	1131,88	64,58
1,4	14	1190,80	58,92
1,5	15	1244,62	53,82
1,6	16	1293,90	49,29
1,7	17	1339,23	45,32
1,8	18	1380,01	40,79
1,9	19	1417,40	37,39
2,0	20	1451,39	33,99

2,1	21	1481,99	30,59
2,2	22	1510,31	28,33
2,3	23	1535,80	25,49
2,4	24	1559,03	23,23
2,5	25	1579,99	20,96
2,6	26	1598,69	18,69
2,7	27	1616,25	17,56
2,8	28	1632,11	15,86
2,9	29	1646,27	14,16
3,0	30	1659,30	13,03
3,1	31	1671,20	11,90
3,2	32	1681,40	10,20
3,3	33	1691,59	10,20
3,4	34	1700,09	8,50
3,5	35	1708,02	7,93
3,6	36	1714,25	6,23
3,7	37	1721,05	6,80
3,8	38	1726,72	5,67
3,9	39	1732,38	5,67
4,0	40	1736,91	4,53
4,1	41	1742,01	5,10
4,2	42	1745,41	3,40
4,3	43	1749,38	3,97
4,4	44	1752,78	3,40
4,5	45	1755,61	2,83
4,6	46	1758,44	2,83
4,7	47	1760,71	2,27
4,8	48	1762,97	2,27
4,9	49	1764,67	1,70
5,0	50	1766,37	1,70
5,1	51	1768,07	1,70
5,2	52	1769,77	1,70
5,3	53	1770,90	1,13
5,4	54	1772,60	1,70
5,5	55	1773,17	0,57
5,6	56	1774,30	1,13
5,7	57	1775,44	1,13
5,8	58	1776,00	0,57
5,9	59	1777,14	1,13
6,0	60	1777,70	0,57
6,1	61	1778,27	0,57
6,2	62	1778,84	0,57
6,3	63	1779,40	0,57
6,4	64	1779,40	0,00
6,5	65	1779,97	0,57
6,6	66	1780,53	0,57
6,7	67	1780,53	0,00
6,8	68	1781,10	0,57

6,9	69	1781,10	0,00
7,0	70	1781,67	0,57
7,1	71	1781,67	0,00
7,2	72	1782,23	0,57
7,3	73	1782,23	0,00
7,4	74	1782,80	0,57
7,5	75	1782,23	-0,57
7,6	76	1782,80	0,57
7,7	77	1782,80	0,00
7,8	78	1782,80	0,00
7,9	79	1782,80	0,00
8,0	80	1782,80	0,00
8,1	81	1782,80	0,00
8,2	82	1783,37	0,57
8,3	83	1783,37	0,00
8,4	84	1783,37	0,00
8,5	85	1783,37	0,00
8,6	86	1783,37	0,00
8,7	87	1783,37	0,00
8,8	88	1783,37	0,00
8,9	89	1783,37	0,00
9,0	90	1783,37	0,00