



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
QUÍMICA



PROJETO AUXILIADO POR COMPUTADOR DE PROCESSOS
INDUSTRIAIS: ANÁLISE DE FLEXIBILIDADE

Uberlândia - MG – Brasil

2013



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
QUÍMICA



Projeto auxiliado por computador de processos industriais: Análise de flexibilidade

Renata Matos Nicodemos

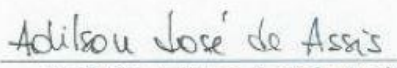
Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química, área de concentração em Pesquisa e Desenvolvimento de Processos Químicos.

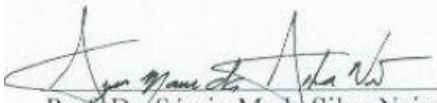
Uberlândia - MG

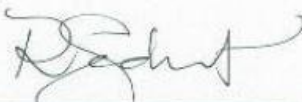
2013


DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA COMO PARTE DOS REQUISITOS PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA, EM 22/02/2013

BANCA EXAMINADORA:


Prof. Dr. Adilson José de Assis
Orientador (PPGEQ -FEQUI/UFU)


Prof. Dr. Sérgio M. da Silva Neiro
(FEQUI/UFU)


Prof. Dr. Rubens Gedraite
(FEQUI/UFU)


Dr. Marcelo Fonseca Xavier
(UNIUBE)

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG - Brasil

N633p Nicodemos, Renata Matos, 1985-
2013 Projeto auxiliado por computador de processos industriais: análise
de flexibilidade / Renata Matos Nicodemos. - 2013.
90 f. : il.

Orientador: Adilson José de Assis.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Uberlândia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.
Inclui bibliografia.

1. Engenharia química - Teses. 2. Processos químicos - Métodos de Simulação - Teses. 3. Projeto auxiliado por computador - Teses. I. Assis, Adilson José de. II. Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. III. Título.

CDU: 66.0

Aos meus pais e irmã

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiro a Deus, se não fosse de Sua vontade nada seria possível.

Aos meus pais, Renato e Nívia, e a minha irmã Raissa pelo apoio incondicional tantos nos bons quanto nos maus momentos.

Ao meu orientador, professor Adilson José de Assis, pela orientação clara e objetiva e a paciência tamanha.

Aos meus amigos e colegas: Marina, Diovanina, Rondinele, Verônica e Alessandra. Tanto pela ajuda, bons conselhos e informações valiosas.

E por último, à Faculdade de Engenharia Química e à CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) pela concessão da bolsa de demanda social.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS.....	iii
LISTA DE TABELAS.....	v
LISTA DE ABREVIATURAS.....	vi
SIMBOLOGIA.....	vii
RESUMO.....	ix
ABSTRACT.....	x
CAPÍTULO 1 – Introdução.....	1
CAPÍTULO 2- Fundamentos Teóricos e Revisão Bibliográfica.....	3
2.1. Fundamentos Teóricos.....	3
2.1.1. Simulação e Simuladores de Processo.....	3
2.1.2. Simulador COCO.....	5
2.1.3. Otimização com o uso de superfícies de resposta.....	7
2.1.3.1. Planejamento de experimentos.....	7
2.1.3.2. Meta-modelos.....	7
2.1.4. Flexibilidade de processos.....	8
2.1.5. Planta industrial de compressão de ar.....	10
2.1.5.1. Compressores.....	12
A. Compressores de deslocamento.....	13
B. Compressores dinâmicos.....	13
2.1.6. Modelagem de uma coluna de adsorção.....	15
2.2. Revisão Bibliográfica.....	20
CAPÍTULO 3 – Estudo de caso: simulação de uma planta industrial de compressão de ar.....	22
3.1. Introdução.....	22
3.2. Descrição do processo.....	22
3.3. Validação termodinâmica.....	24
3.4. Simulação da planta de ar comprimido.....	27
3.4.1. Simulação da coluna de adsorção no Scilab.....	27
3.4.2. Simulação da planta completa.....	31
CAPÍTULO 4 – Análise de flexibilidade da planta industrial de ar comprimido.....	41
4.1. Introdução.....	41

4.2. Análise paramétrica da umidade do ar.....	41
4.3. Análise paramétrica do processo.....	42
4.4. Meta-modelos na forma de superfície de resposta.....	47
4.4.1. Efeito da umidade e temperatura do ar sobre a potência do compressor.....	47
4.4.2. Efeito da umidade do ar e vazão de refrigerante sobre a potência do segundo compressor.....	51
4.4.3. Efeito da umidade do ar (corrente 8) e temperatura (corrente 8) sobre a umidade da corrente 10 (saída da coluna).....	55
4.5. Otimização do processo usando meta-modelos.....	59
4.5.1. Otimização do meta-modelo do efeito da umidade e temperatura do ar sobre a potência do compressor.....	59
4.5.2. Otimização do meta-modelo do efeito da umidade do ar e vazão de refrigerante sobre a potência do segundo compressor.....	60
4.5.3. Otimização do meta-modelo do efeito da umidade do ar (corrente 8) e temperatura (corrente 8) sobre a umidade da corrente 10 (saída da coluna).....	62
CAPÍTULO 5 – Conclusão e Sugestões.....	64
APÊNDICE 1 – Códigos em Scilab da coluna de adsorção.....	70

LISTA DE FIGURAS

Figura 2. 1 - Esquema da relação entre os componentes de um simulador (Figura adaptada de TURTON et al, 2003).....	4
Figura 2. 2 - Visão black-box de um experimento (Figura adaptada BILES e SWAIN, 1980).....	8
Figura 2. 3 – Representação esquemática de um problema de análise de flexibilidade.....	9
Figura 2. 4 – Gráfico com as porcentagens de custo de propriedade de uma planta de ar comprimido.....	11
Figura 2. 5 - Esquema de um compressor de parafuso duplo (HowStuffWorks, 2012).....	13
Figura 2. 6 - Esquema de um compressor centrífugo (HowStuffWoks, 2012).....	14
Figura 2. 7 – Esquema de um secador de ar por adsorção com dois leitos de secagem.....	15
Figura 2. 8 - Esquema da coluna de adsorção com recheio (figura retirada de RICE e DO, 1995).....	16
Figura 3. 1- Diagrama de bloco de um sistema genérico da compressão de ar.....	22
Figura 3. 2 - Diagrama representando a planta de compressão de ar do estudo de caso deste capítulo.....	23
Figura 3. 3 - Validação de dados ELV para ar e vapor saturado de água para as equações de estado de Redlich Kwon, Soave Redlich Kwong e Peng Robinson.....	26
Figura 3. 4 – Perfis de concentração de vapor saturado de água em relação à posição da coluna pelo método numérico de integração Romberg.....	29
Figura 3. 5 – Perfis de concentração de vapor saturado de água em relação à posição da coluna pelo método numérico de integração Trapézio Repetido.....	31
Figura 3. 6 - <i>Flowsheet</i> preliminar para a formação da corrente mássica de ar.....	32
Figura 3. 7 - Configuração do compressor no COCO.....	33
Figura 3. 8 - Parte da planta simulada, compressores, mixer e tanque de armazenamento...34	
Figura 3. 9 – Detalhe do flash (Purgador), coluna de adsorção (Secador por adsorção) e reservatório para consumidores mais nobres.....	37
Figura 3. 10 – <i>Flowsheet</i> da simulação completa da planta industrial de ar comprimido.....	39
Figura 4. 1- Variação da quantidade de vapor saturado de água em uma corrente de ar a $T[^\circ\text{C}] = [20, 25, 30, 35, 40, 45]$	42
Figura 4. 2 Potência do compressor em relação a variação da vazão mássica de vapor saturado de água (ou umidade) na corrente Ar 4.....	43
Figura 4. 3 - Potência do trocador de calor HeatExchanger 1 em relação a variação da vazão mássica de água refrigerante da corrente Agua1.....	44
Figura 4. 4 - Potência do trocador de calor HeatExchanger 2 em relação a variação da vazão mássica de água refrigerante da corrente Agua3.....	45
Figura 4. 5 - Potência do compressor em relação à variação da vazão mássica de água refrigerante da corrente Agua1.....	45
Figura 4. 6 – Vazão mássica de vapor saturado de água na corrente 10 em relação a variação de vazão mássico de vapor de água na corrente 8.....	46
Figura 4. 7 – Vazão mássica de vapor saturado de água na corrente 10 em relação a variação da vazão mássica de água da corrente 6.....	47
Figura 4. 8 - Gráfico de Pareto com apenas as variáveis analisadas no planejamento de experimentos para a primeira superfície de resposta.....	49

Figura 4. 9 - Superfície de resposta para as variáveis: Temperatura, Vazão de água, ambos do ar, e Potência do primeiro compressor.....	50
Figura 4. 10 - Curvas de nível para as variáveis: Vazão mássica de vapor saturado de água na corrente Ar 4, temperatura da corrente Ar 4 e Potência do primeiro compressor.....	51
Figura 4. 11 - Gráfico de Pareto com apenas as variáveis analisadas no planejamento de experimentos para a primeira superfície de resposta.....	53
Figura 4. 12 - Superfície de resposta para as variáveis: Vazão de água da corrente Agua1, Vazão de vapor saturado de água da corrente Ar4 e Potência do segundo compressor.....	54
Figura 4. 13 - Curvas de nível para as variáveis: Vazão de água da corrente Agua1, Vazão de vapor saturado de água da corrente Ar4 e Potência do segundo compressor.....	55
Figura 4. 14 - Gráfico de Pareto com apenas as variáveis analisadas no planejamento de experimentos para a terceira superfície de resposta.....	56
Figura 4. 15 - Superfície de resposta para as variáveis: Vazão de vapor saturado de água da corrente 8, temperatura corrente 8 e vazão de vapor de água na corrente 10.....	57
Figura 4. 16 - Curvas de nível para as variáveis: Vazão mássica de saturado de água na corrente 8, Temperatura da corrente 8 e a vazão mássica de vapor de água na corrente 10.....	58

TABELA DE TABELAS

Tabela 3. 1 – Informações sobre as correntes da planta industrial.....	24
Tabela 3. 2 - Validação da EOS para entalpia da água (de 20 a 50°C).....	25
Tabela 3. 3 - Validação da EOS para entalpia do ar (de -213,2 a -143,1 °C).....	25
Tabela 3. 4 – Resumo dos parâmetros utilizados no cálculo de <i>kca</i>	28
Tabela 3. 5 – Informações detalhadas sobre as correntes iniciais da simulação.....	35
Tabela 3. 6 - Vazões mássicas das correntes ligadas ao <i>splitter</i>	35
Tabela 3. 7 - Informações sobre as correntes mássicas de entrada e saída do trocador de calor.....	36
Tabela 3. 8 - Resumo dos valores de vazão mássica para verificação do balanço.....	37
Tabela 3. 9 – Tabela comparativa com valores de projeto e valores de simulação.....	37
Tabela 4. 1 - Delineamento Composto Central Rotacional (DCCR) para a umidade e temperatura do ar em relação a potência do primeiro compressor.....	48
Tabela 4. 2 - Resumo das informações sobre a primeira superfície de resposta.....	49
Tabela 4. 3 - Delineamento Composto Central Rotacional (DCCR) para a umidade do ar e vazão de refrigerante Agua1 em relação a potência do segundo compressor.....	52
Tabela 4. 4 - Resumo das informações sobre a segunda superfície de resposta.....	53
Tabela 4. 5 - Delineamento Composto Central Rotacional (DCCR) para a umidade do ar na corrente 8 e temperatura da corrente 8 sobre a umidade da corrente 10.....	56
Tabela 4. 6 - Resumo das informações sobre a terceira superfície de resposta.....	56
Tabela 4. 7 – Descrição dos valores das variáveis de acordo com a codificação para a primeira superfície de resposta.....	60
Tabela 4. 8 - Descrição dos valores das variáveis de acordo com a codificação para a segunda superfície de resposta.....	61
Tabela 4. 9 - Descrição dos valores das variáveis de acordo com a codificação para a terceira superfície de resposta.....	62

LISTA DE ABREVIATURAS

CAPE – Computer Aided Process Engineering.
COCO – CAPE OPEN to CAPE OPEN.
COFE - CAPE-OPEN Flowsheet Environment.
CORN - CAPE-OPEN Reaction Numerics.
COUSCOUS - CAPE-OPEN Unit-operations Simple.
CSTR – Continuous Stirred-Tank Reactor.
DCC – Delineamento Central Composto.
DCCR – Delineamento Central Composto Rotacional.
ELV – Equilíbrio Líquido Vapor.
EOS – Equation of State.
PCC – Planejamento Central Composto.
PFR - Plug Flow Reactor.
PR – Peng Robinson.
RK – Redlich Kwong.
Scilab - Scientific Laboratory.
SRK – Soave Redlich Kwong.
SRK mod – Soave Redlich Kwong modificada.
TEA - Thermodynamics for Engineering Applications.

SIMBOLOGIA

C – concentração de vapor saturado de água no sólido [mol.m^{-3}].
Co – concentração inicial de vapor saturado de água [mol.m^{-3}].
C* – concentração inicial de vapor saturado de água no equilíbrio [mol.m^{-3}].
d – vetor de variáveis de projeto.
 D_{Ab} ou D_{ef} – Coeficiente efetivo de difusão mássica [$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$].
dp – diâmetro da partícula de sílica-gel do leito da coluna de adsorção [m].
K – Constante de equilíbrio para a adsorção [-].
 $k_c a$ – Coeficiente volumétrico de transferência de massa [s^{-1}].
M AGUA1 – vazão mássica de líquido refrigerante da corrente Agua1 [kg.h^{-1}].
M H2O 4 – vazão mássica de vapor saturado de água da corrente Ar 4 [kg.h^{-1}].
M H2O 8 – vazão mássica de vapor saturado de água da corrente 8 [kg.h^{-1}].
q – composição de vapor saturado de água no sólido [mol.m^{-3}].
Re – Número Reynolds [-].
Sc – Número Schmidt [-].
Sh – Número Sherwood [-].
T8 – temperatura da corrente 8 [$^{\circ}\text{C}$].
T Ar4 - temperatura da corrente Ar 4 [$^{\circ}\text{C}$].
 v_o – velocidade intersticial do fluido dentro da coluna [m.s^{-1}].
X1(L) – efeito isolado da variável X1 sobre a resposta Y.
X1(Q) – efeito quadrático da variável X1 sobre a resposta Y.
X1X2(Q) – efeito cruzado das variáveis X1 e X2 sobre a resposta Y.
X2(L) – efeito isolado da variável X2 sobre a resposta Y.
X2(Q) – efeito quadrático da variável X2 sobre a resposta Y.
Y – resposta do meta-modelo.
z - vetor de variáveis de controle e comprimento da coluna [m].
 β – variável de integração.
 ΔR – variação das taxas [mol.s^{-1}].
 ε – porosidade do leito [-].
 θ – vetor de parâmetros incertos.
 ρ_{ar} – densidade do ar [kg.m^{-3}].
 μ_{ar} - viscosidade do ar [Pa.s].

ζ - variável de posição [-]

τ – variável de tempo [-].

γ – fator geométrico [-].

RESUMO

Esta dissertação investiga a viabilidade de se usar uma planta virtual, simulada com um simulador de processo, a fim de se obter modelos mais simples da planta real (meta-modelos), na forma de superfícies de resposta, e com estes investigar a influência das variáveis de entrada, controláveis ou não, sobre o desempenho da planta estabelecendo as condições ótimas (análise de flexibilidade). O estudo de caso considerado foi uma planta de compressão de ar da Vale Fertilizante em operação na cidade de Uberaba-Minas Gerais. Para tanto, foram utilizados o simulador de processos COCO, para a simulação da planta virtual, e o “software” Scilab®, para o acréscimo de uma operação unitária ao simulador, por meio do protocolo CAPE-OPEN, a saber uma coluna de adsorção. Os resultados da simulação foram validados usando dados de projeto da planta e dados operacionais. Para a construção das superfícies de resposta foi utilizado o software STATISTICA® e a otimização dos meta-modelos foi realizada no software Microsoft Excel®. Foram construídas superfícies de resposta, analisando o comportamento de cada um compressores de ar em relação a umidade do ar, temperatura e o comportamento da coluna de adsorção em relação a temperatura e umidade do ar na entrada. Os valores ótimos, que resultam em menor potência, para os compressores, foram: temperatura de 15,76°C e vazão mássica de vapor de água saturado no ar de 50,81 kg/h, para o primeiro compressor; 13,74 kg/h de vapor de água saturado e 1434,74 kg/h de água de refrigeração, diretamente relacionada com a temperatura de entrada da corrente, para o segundo compressor. Para a coluna de adsorção, em qualquer quantidade de vapor de água saturado na entrada da coluna, a melhor temperatura de entrada deverá ser de 35°C, para que a umidade de saída da coluna seja a menor possível. O procedimento utilizado permitiu reproduzir satisfatoriamente o desempenho da planta, investigar a flexibilidade do processo em relação a alterações nas condições de entrada e encontrar valores operacionais ótimos.

Palavras-chave: Simulação, otimização, CAPE-OPEN, ar comprimido, flexibilidade.

ABSTRACT

This work investigates the feasibility of using a virtual plant, simulated with a process simulator, in order to obtain simpler models of the real plant (meta-models), as response surfaces, and using those meta-models to investigate the influence of input variables, controllable or not, on the performance of the plant and on the optimum conditions (flexibility analysis). As a case study, it was considered a plant of air compression of Vale Fertilizantes in operation in the city of Uberaba, Minas Gerais. We used the process simulator COCO, to simulate the virtual plant, and the "software" Scilab® to add a unit operation, namely an adsorption column, to the simulator, using the CAPE-OPEN protocol. The simulation results were validated using plant design data as well as operational data. For the construction of response surfaces STATISTICA® software was used and the optimization of meta-models was performed using Microsoft Excel® software. Response surfaces were constructed analyzing the behavior of each air compressors relative air humidity, temperature and the behavior of the adsorption column in relation to temperature and moisture input. The optimal values, resulting in less power for the compressors, were: temperature of 15.76 ° C, mass flow of saturated steam in air of 50.81 kg / h, for the first compressor; 13.74 kg / h of saturated steam in air and 1434.74 kg / h of cooling water, for the second compressor. For the adsorption column the best inlet temperature should be 35 ° C for any amount of steam at the entrance of the column, so that outlet steam in the column is the lowest possible. The procedure used in this thesis allowed to satisfactorily reproduce the plant performance, to investigate the process flexibility with respect to changes in the inlet conditions and to find optimal operating values.

Keywords: Simulation, optimization, CAPE-OPEN, Compressed Air, Flexibility.

CAPÍTULO 1

Introdução

O projeto auxiliado por computador de processos industriais é resultado direto do desenvolvimento dos simuladores de processos mais realísticos e com mais funcionalidades, aproximando-se mais dos processos reais por meio da simulação. Os simuladores de processos estão cada vez mais sofisticados e os bancos de dados termofísicos mais completos, possibilitando a construção de plantas virtuais próximas da realidade física. As operações unitárias específicas, não disponíveis usualmente nos simuladores de processos, podem ser acrescentadas a estes através do protocolo CAPE-OPEN.

Nos últimos anos tem-se verificado uma escassez de mão de obra técnica nesta área, principalmente por conta dos investimentos significativos na área de petróleo e gás. O uso de simuladores de processos é um procedimento presente na concepção de novos projetos assim como no revamp e retrofit de plantas industriais já em funcionamento. Também são utilizados para estudos paramétricos e otimização de unidades em desenvolvimento.

O estudo paramétrico dos modelos e a otimização dos processos se torna mais fácil com o uso de simuladores de processos como ferramenta de apoio, assim como diminui os custos fiscais.

Como a maioria dos parâmetros de entrada de uma planta industrial não são controláveis e nem ao menos é possível prever a variação, uma análise de flexibilidade dos processos se faz necessária. O método adotado, antigamente, para este problema era fixar valores nominais para estes parâmetros durante o projeto e após a conclusão, fatores de correção eram aplicados. Este procedimento, apesar de simples, não é o mais adequado, já que os fatores de correção tem um comportamento linear e, nem sempre, os processos industriais se comportam assim. Portanto, para prever alterações, existe a necessidade de ter conhecimento do comportamento do processo, por meio de análises paramétricas.

O procedimento usual de análise de flexibilidade descrito na literatura envolve modelar todo o processo usando equações algébricas empíricas e fenomenológicas e tratar as incertezas de modo probabilístico. O conjunto de equações é então posto como um problema de otimização complexo. Nesta dissertação é utilizada uma abordagem diferente, pois o modelo do processo é substituído por um meta-modelo obtido através de planejamento de experimentos virtuais e superfícies de resposta. Os experimentos são virtuais, os dados são coletados em uma planta virtual. A simulação foi feita em um simulador de processos obtendo

assim os dados de desempenho da planta. Antes, porém, a planta simulada é validada com dados operacionais de uma planta real a fim de garantir a confiabilidade dos resultados obtidos. A vantagem de se utilizar meta-modelos é que estes são muito mais simples do ponto de vista matemático do que os modelos fenomenológicos e empíricos que compõem a planta virtual, conseguindo representar com uma confiabilidade pré-definida a planta em intervalos fixos operacionais. De posse então dos meta-modelos, estes podem ser usados a fim de investigar a influência quali e quantitativa das entradas sobre as saídas, assim como para se obter as condições operacionais ótimas. Portanto, o procedimento de análise de flexibilidade que será adotado, apesar de ser menos rigoroso que o descrito na literatura, é mais apropriado principalmente quando o processo é complexo e envolve muitas operações unitárias, presença de ciclos e outras peculiaridades da planta que impactam diretamente na modelagem matemática do processo utilizada na análise de flexibilidade.

Para simular e analisar a flexibilidade, foi escolhido como estudo de caso uma planta industrial de compressão de ar. O projeto foi cedido pela Vale Fertilizantes e é uma planta industrial ainda em operação na cidade de Uberaba no estado de Minas Gerais. É uma planta antiga e boa parte dos equipamentos já está defasada. Também, por ser um projeto antigo, vários dados para a simulação não estavam disponíveis e foi necessário estimá-los de acordo com as informações na literatura ou dados reais da planta em operação.

A presente dissertação tem como objetivos principais simular uma planta de produção de ar comprimido usando o simulador de processos COCO e comparar os resultados obtidos na simulação com os dados disponíveis em projeto. Também foi verificada a possível combinação de simuladores de processo com a metodologia de superfície de resposta (meta-modelos), construídas por meio do planejamento de experimentos, para realizar a análise de flexibilidade da planta industrial de compressão de ar. Os outros objetivos do trabalho são: estabelecer a comunicação entre softwares (COCO e Scilab) através do protocolo CAPE-OPEN, analisar o comportamento do processo em determinados pontos como os estágios dos compressores de ar, trocadores de calor e coluna de adsorção, e analisar a sensibilidade de alguns parâmetros do processo de produção de ar comprimido através do estudo paramétrico.

Esta dissertação possuiu a seguinte estrutura básica: o Capítulo 2 apresenta os fundamentos teóricos e revisão bibliográfica. O Capítulo 3 apresenta o estudo de caso simulado (planta industrial de compressão de ar) assim como os detalhes da simulação. O Capítulo 4 apresenta os resultados obtidos nas análises paramétricas, superfícies de resposta e otimização dos meta-modelos. O Capítulo 5 apresenta as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

Fundamentos Teóricos e Revisão Bibliográfica

2.1. Fundamentos Teóricos

2.1.1. Simulação e Simuladores de Processo

Simulação de processos é a solução de um sistema de equações de um modelo matemático que descreve um fenômeno físico. A simulação de processos químicos se divide em simulação em estados estacionário e não estacionário. As simulações em estado estacionário consideram que não há variações no comportamento do sistema ao longo do tempo. Já as simulações em estado não estacionário são consideradas as variações do sistema ao longo do tempo e, portanto, apresentam equações diferenciais na modelagem matemática.

Em vários pontos da história a simulação, não apenas de processos químicos, aparece como a solução para diversos problemas e, também, como uma nova abordagem matemática para a resolução ou a descrição de fenômenos físicos bastante complexos. Ao longo do tempo as linguagens computacionais foram aperfeiçoadas e os softwares, que antes eram apenas linhas de comando, agora apresentam interfaces mais agradáveis aos usuários. Impedimentos relacionados à memória física dos computadores e tempo de processamento das simulações foram reduzidos com o desenvolvimento de novos computadores mais potentes (GOLDSMAN et al, 2009).

Dentre as aplicações da simulação, neste trabalho será destacado o seu uso por meio dos simuladores de processos químicos. A simulação de processos químicos pode ser feita através da modelagem do processo em determinada linguagem de programação ou com o uso de simuladores de processos disponíveis para isto.

Os simuladores de processos são ferramentas computacionais que podem ser utilizadas tanto para a melhoria de processos já em operação quanto para o desenvolvimento de novos projetos de plantas químicas. Outra utilização para os simuladores de processos é na área de ensino, facilitando a aprendizagem do aluno e também possibilitando experiências em plantas industriais mesmo que virtualmente. Existem no mercado, simuladores comerciais e simuladores gratuitos, podendo ser de código livre ou não. A aquisição dos simuladores comerciais é feita mediante ao pagamento prévio enquanto os simuladores gratuitos estão

disponíveis para instalação livre de pagamento de licenças. Os *softwares* de código aberto, ou *softwares* livres, são programas de computador que devem disponibilizar o código-fonte para o usuário com a permissão de o uso, a cópia, o estudo e a redistribuição.

Os simuladores de processo obedecem a uma estrutura básica que organiza os elementos computacionais necessários para a simulação com as decisões operacionais que devem ser tomadas durante o processo.

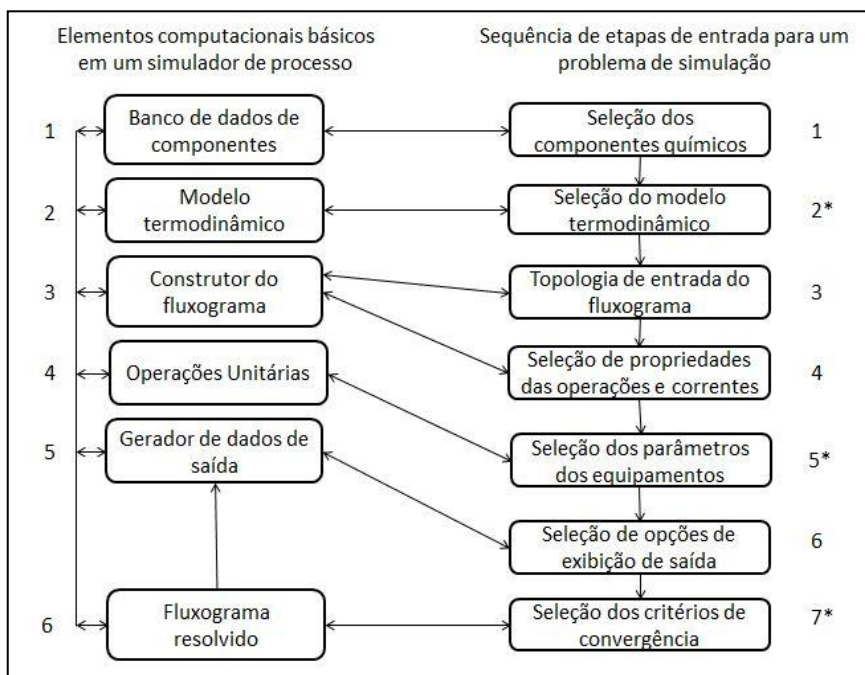


Figura 2. 1 - Esquema da relação entre os componentes de um simulador (Figura adaptada de TURTON, 2003)

Os seis itens do lado esquerdo da Figura 2.1 são as características básicas que um simulador deve apresentar. Os quatro primeiros retângulos (1, 2, 3 e 4) referem-se aos bancos de dados disponíveis no simulador para ser definido pelo usuário, por exemplo, substâncias envolvidas na simulação, modelos termodinâmicos, montagem do fluxograma (também denominado *flowsheet*) e operações unitárias. Os outros dois itens da coluna são referentes a forma como os resultados serão apresentados – gráficos, tabelas, etc.

A coluna do lado direito mostra os passos a serem seguidos para configurar a simulação. É referente a seleção dos componentes químicos, modelos termodinâmicos e estilo de fluxograma apresentado, seleção de equipamentos e operações unitárias assim como seus parâmetros e também o critério de convergência para a simulação. Os itens 2, 5 e 7 marcados com um asterisco (*), etapas de cuidado especial. A escolha do modelo termodinâmico e a

seleção dos parâmetros dos equipamentos definem a boa execução da simulação e o critério para a convergência, quando bem escolhido; facilita a solução do problema.

2.1.2. Simulador COCO

O projeto será realizado com o uso do simulador de processos COCO (CAPE-OPEN to CAPE-OPEN) e o software Scilab, no caso deste último utilizando o protocolo CAPE-OPEN. CAPE-OPEN (CAPE é a abreviação de *Computer Aided Process Engineering*) é uma norma para escrever as interfaces de software de simuladores de processos. É aplicada principalmente na engenharia de processos e permite uma comunicação padronizada entre os simuladores de processo (por exemplo, Aspen Plus) e produtos desenvolvidos por terceiros. A vantagem do CAPE-OPEN é que estes produtos são aplicáveis a mais do que apenas um simulador de processo, são destinadas a todos os simuladores de processo que são CAPE-OPEN compatíveis. Por exemplo, um modelo de um reator com membrana implementado usando o protocolo CAPE-OPEN pode ser utilizado em qualquer simulador que suporte tal protocolo, bastando para tanto "plugá-lo" no simulador de interesse.

De acordo com AmsterCHEM (2013), o *software* COCO é um ambiente gratuito de simulação no estado estacionário, modular e sequencial, consistindo nos seguintes componentes:

1. **COFE** – o Ambiente de Fluxograma (*Flowsheet Environment*) CAPE-OPEN é uma interface intuitiva à fluxogramas de plantas químicas com o usuário. COFE possui algoritmos de solução sequenciais que usam abertura automática de correntes. COFE mostra as propriedades das correntes, lida com conversão de unidades e provê funcionalidades de realizar gráficos. Fluxogramas COFE podem ser usados como uma operação unitária CAPE-OPEN; portanto, pode-se utilizar Fluxogramas COFE como uma operação unitária dentro de outro Fluxograma COFE (fluxograma dentro de um fluxograma) ou dentro de outros simuladores.
2. **TEA** – Termodinâmica disponível no COCO para Aplicações em Engenharia, é baseado no código da biblioteca termodinâmica do ChemSep e inclui um banco de dados de mais de 430 compostos químicos comumente usados. O pacote exhibe mais de 100 métodos de cálculos de propriedades com suas derivadas analíticas ou numéricas.

3. **COUSCOUS** – Pacote de Operações Unitárias Simples CAPE-OPEN que acompanha o COCO. Contém um divisor de correntes (*splitter*), um misturador de correntes (*mixer*), trocadores de calor (*heat-exchangers*), bombas (*pumps*) e reatores (*reactors*), dentre outras operações unitárias. ChemSep-LITE, uma versão limitada do ChemSep suportando um máximo de 40 componentes e 300 estágios, serve como uma operação unitária de destilação em equilíbrio no COCO. ChemSep-LITE está incluído na instalação do COCO.
4. **CORN** – Pacote Numérico de Reações CAPE-OPEN que acompanha o simulador COCO e que facilita a especificação de qualquer tipo de cinética ou de reação no equilíbrio. Unidades simples de reação, como reatores de equilíbrio, CSTR e reatores de escoamento empistonado (PFR) que podem usar o pacote CORN acompanha o pacote COUSCOUS.

Scilab (*Scientific Laboratory*) é um ambiente gráfico que inclui centenas de funções matemáticas. Possui uma linguagem de programação de alto nível que permite o acesso às estruturas de dados avançados e também as funções gráficas 2-D e 3-D. Dentre as outras funcionalidades tem-se (SCILAB, 2013):

- Matemática e simulação: para aplicações usuais para engenharia e ciências incluindo operações matemáticas e análise de dados.
- Visualização 2-D e 3-D: funções de visualização e exportação de dados de vários tipos de gráficos.
- Otimização: Algoritmos para resolver problemas de otimização tanto restritos quanto irrestritos, assim como problemas contínuos e discretos.
- Estatística: ferramenta para realizar análise de dados e modelagem.
- Análises e Projeto de Sistemas de controle: ferramenta padrão para o estudo de sistemas de controle.
- Desenvolvimento de aplicações: aumentar as funcionalidade do Scilab nativas e gerenciar a troca de dados com ferramentas externas.
- Xcos- Simulador e Modelador de Sistemas Dinâmicos Híbridos: modelagem de sistemas mecânicos, circuitos hidráulicos, sistemas de controle, etc.

2.1.3. Otimização com o uso de superfícies de resposta

2.1.3.1. Planejamento de experimentos

A primeira etapa para a construção de superfícies de resposta (meta-modelos) é o planejamento experimental. O planejamento experimental é uma metodologia que facilita a organização de experimentos de forma que seja possível avaliar os efeitos das variáveis envolvidas em um determinado resultado. O planejamento de experimentos bem fundamentado teoricamente e feito com bom senso gera resultados confiáveis e análises estatísticas consistentes (RODRIGUES e IEMMA, 2009).

De acordo com CALADO e MONTGOMERY (2003) é possível determinar as variáveis que mais influenciam em um determinado processo, tendo como resultado: a diminuição de oscilação no processo e obtenção de valores nominais próximos aos reais, menor tempo de resposta e menor custo operacional, e aumento do desempenho e/ou rendimento do processo.

O objetivo do planejamento de experimentos é obter um modelo matemático que descreva a relação entre as variáveis de entrada e saída, tentando usar o menor número de experimentos para tal. Dentre as aplicações possíveis do planejamento de experimentos, as que mais terão destaque nesta dissertação serão a seleção de parâmetros de projeto e a determinação de parâmetros de projeto específicos que melhorem o desempenho do processo.

O planejamento de experimentos é fundamentado sobre três princípios básicos:

- Replicação; a replicação é necessária por duas razões: com as réplicas é possível estimar o erro experimental e permite obter uma estimativa mais precisa de um fator quando se usa a média de uma amostra.
- Aleatoriedade; é necessário, para qualquer método estatístico, que os dados experimentais sejam variáveis aleatórias distribuídas independentemente.
- Blocagem; tem como objetivo aumentar a precisão de um experimento. Consiste em avaliar fatores que podem alterar os resultados, mas que não são do interesse do estudo principal.

2.1.3.2. Meta-modelos

A otimização é um método matemático que busca o valor ótimo de uma determinada variável de um processo. Para isto é necessário que algumas equações estejam bem

determinadas, como a função objetivo – modelo referente ao que deseja-se otimizar –, as restrições – equações que determinam os limites físicos do problema estudado e as variáveis independentes – elementos que constituem o fenômeno. Determinados problemas de otimização são de difícil solução por apresentar equações não-lineares ou mais de uma função objetivo (otimização multi-objetivo) e exigem grande esforço computacional, sendo necessário a escolha de outras técnicas sem ser a otimização clássica.

De forma mais simples pode-se dizer que as superfícies de resposta, ou meta modelos, é um tipo de otimização empírica em que é possível avaliar o efeito simultâneo de mais de um parâmetro sobre a variável resposta e quantificar estatisticamente tanto o efeito individual quanto o efeito cruzado das variáveis (GONÇALVES, 2011).

Os dados utilizados para o desenvolvimento das superfícies de resposta são obtidos por meio de experimentos. Com o planejamento experimental são selecionadas as variáveis de entrada que tem maior efeito sobre os resultados. O processo experimental pode ser descrito como uma black box, não se tem conhecimento sobre o comportamento do processo, apenas sobre as variáveis de entrada e saída, como é apresentado na Figura 2.2.

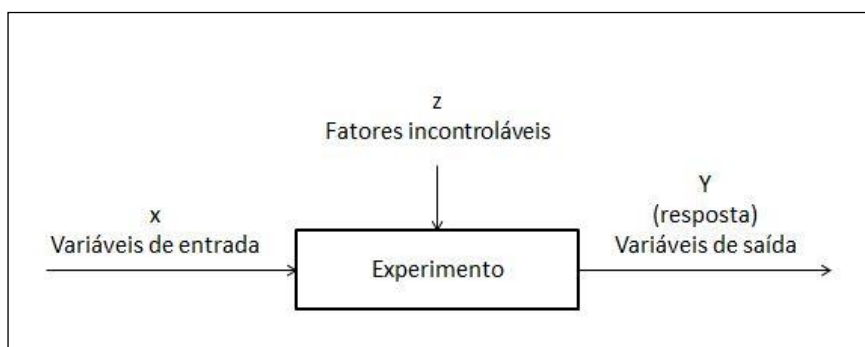


Figura 2. 2 - Visão black-box de um experimento (Figura adaptada BILES e SWAIN, 1980)

Os dados obtidos pelos experimentos podem se ajustar, frequentemente, a dois tipos de modelos: o modelo de primeira ordem e o modelo de segunda ordem. O ajuste mais simples de se recorrer é o modelo linear, por se tratar de um polinômio de menor grau.

2.1.4. Flexibilidade de processos

De forma simples, a flexibilidade de um processo pode ser definida como a capacidade de uma planta industrial operar de maneira satisfatória mesmo que haja alterações nas condições iniciais ou operacionais (SWANEY e GROSSMANN, 1985). Ou seja, a flexibilidade é o que garante que um processo químico continuará a funcionar, da forma

desejada, independente das variações de temperatura, pressão, qualidade de matéria prima, etc.

O ponto de partida para flexibilidade de um processo é considerar a existência de parâmetros incertos no projeto do processo. A incerteza dos valores dos parâmetros não é um fato isolado e isto ocorre em todos os processos, tanto químico quanto físicos. Esta incerteza pode ter origem nas variações dos parâmetros que não podem ser controlados ou o cálculo de variáveis difíceis de medir com o uso de correlações e/ou aproximações. O procedimento mais comum para projetar plantas químicas com parâmetros incertos é definir um valor fixo e utilizar fatores empíricos (fatores de correção) para as possíveis variações (utilizado em trocadores de calor). Outros métodos utilizam uma aproximação estatística e assume que são conhecidas as funções de distribuição de probabilidade dos parâmetros incertos. Há também métodos com uma aproximação determinística e assumem que os parâmetros incertos podem ser expressos por variáveis contínuas e limitadas (GROSSMANN e SARGENT, 1978).

No trabalho de SWANEY e GROSSMANN (1985) há uma proposta para um índice de flexibilidade que forneceria uma medida para a região de operação viável no espaço dos parâmetros incertos, determinando os limites de operação viável e identificando as condições que limitam a flexibilidade do processo. Outra característica deste índice é que o mesmo pode ser utilizado para identificar as combinações de parâmetros que limitam a viabilidade de um determinado projeto. A Figura 2.3, adaptada de GROSSMANN e FLOUDAS (1987), mostra o esquema com a representação para um problema de análise de flexibilidade.

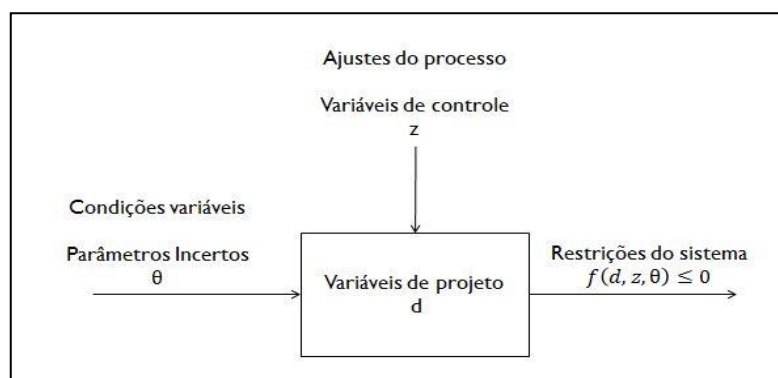


Figura 2. 3 – Representação esquemática de um problema de análise de flexibilidade

As variáveis θ , z e d apresentadas na Figura 2.3 são vetores com vários valores e a função $f(d, z, \theta)$ também é um conjunto de restrições. Portanto, a obtenção da solução de um problema de análise de flexibilidade é bastante complexa, tanto pelo número de variáveis de trabalho quanto pelo o esforço computacional necessário.

Os trabalhos citados neste item são antigos por se tratarem de artigos que apresentam os conceitos da análise de flexibilidade e não as aplicações atuais do método. A abordagem da análise de flexibilidade proposta neste trabalho é baseada no uso de meta-modelos e análises paramétricas, ou seja, um tipo de análise de flexibilidade simplificada.

Os modelos otimizados foram obtidos por meio do planejamento experimental, feito após as análises paramétricas que possibilitaram verificar o comportamento do processo em vários pontos, e, após isto, foram construídas as superfícies de resposta. As equações que representam as superfícies de resposta são os meta-modelos que foram utilizados na otimização como função objetivo.

Esta simplificação é justificável já que, desta forma, o esforço computacional para a resolução é menor e as superfícies de resposta conseguem se aproximar do comportamento real do processo a partir dos dados experimentais obtidos na simulação.

2.1.5. Planta industrial de compressão de ar

O ar comprimido é comumente usado na indústria e setores de serviços por ser de fácil manipulação e produção segura. É uma das utilidades imprescindíveis para a operação de qualquer planta industrial existente e é dividindo em dois grupos: ar de serviço ou ar de processo e ar de instrumento ou instrumentação. O ar de serviço ou de processo é utilizado em reações químicas, acionamento de equipamentos mecânicos, correias e limpeza pressurizada. Este tipo de ar não exige tratamento posterior como filtração e secagem, podendo ser usado após a compressão. Já o ar de instrumento ou de instrumentação precisa ser tratado após a compressão. Normalmente é filtrado e secado, já que é necessário que não tenha nenhuma impureza e umidade. É utilizado para finalidades mais nobres como o acionamento de válvulas e de todo sistema pneumático de unidades industriais automatizadas com malhas de controle.

O ar comprimido, como energia pneumática, pode custar de sete a dez vezes a mais do que a energia elétrica em uma aplicação semelhante, devido a perdas durante o processo de transformação em energia. Portanto, é importante certificar da necessidade do ar comprimido em determinada atividade já que a substituição por energia elétrica é financeiramente viável. Mas, este alto custo se torna irrelevante diante das vantagens da energia pneumática, como a flexibilidade de aplicação, conveniência e segurança. Na automação, por exemplo, o uso da energia pneumática é indispensável já que se trata da energia que melhor se adequa as condições de segurança.

A principal causa de perda de cerca de 40% de todo o ar comprimido produzido são os vazamentos na linha industrial (Manual do Ar Comprimido, 2010). Válvulas, tubos, mangueiras e conexões mal vedadas, corroídas, furadas e sem manutenção são responsáveis por vazamentos de enormes proporções num sistema pneumático. A manutenção e a eliminação dos vazamentos é a melhor forma de economia em um sistema de compressão de ar. Uma forma de verificar se há vazamentos nas linhas é interromper o consumo de ar comprimido enquanto mantêm-se os compressores em operação. Caso não haja vazamentos, os compressores se desligarão ao alcançarem a pressão máxima suportável, caso contrário o sistema retornará a pressão de operação usando os pontos de vazamento como alívio.

Cerca de 5 bilhões de toneladas de ar são comprimidas por ano, gerando um consumo de 400 bilhões de kWh a um custo de 20 bilhões de dólares. Levando em consideração que 1 m³ de ar a pressão de 7 barg custa aproximadamente R\$0,025 apenas em energia (Manual do Ar Comprimido, 2010). O custo de propriedade – a soma dos custos de aquisição, instalação, operação e manutenção do sistema de ar comprimido – é distribuído de acordo com a Figura 2.4, adaptada do Manual do Ar Comprimido (2010).

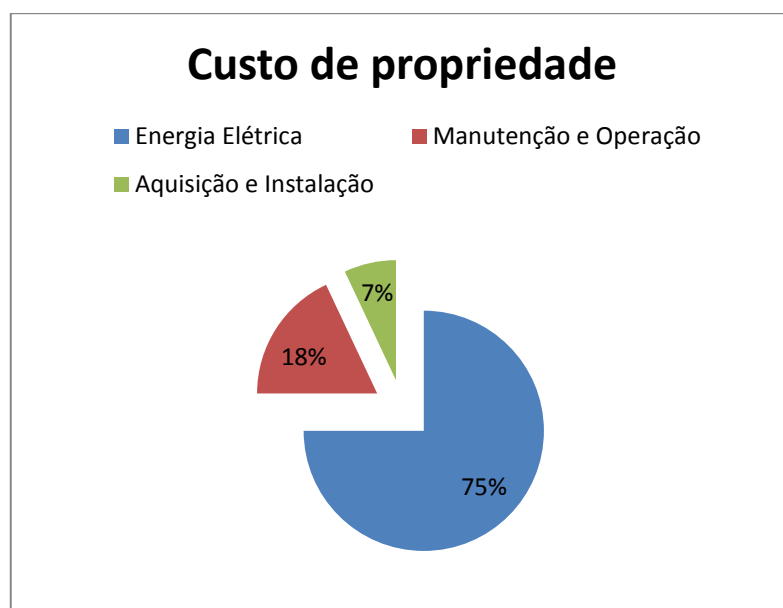


Figura 2. 4 – Gráfico com as porcentagens de custo de propriedade de uma planta de ar comprimido

Determinados processos de compressão são projetados para ter estágios já que a compressão se trata de um processo politrópico, ou seja, ocorre um aumento de temperatura proporcional à compressão. O aumento da temperatura causa o aumento de trabalho de compressão e diminuiu a eficiência do processo. Quanto maior o número de estágios, mais a

compressão se aproxima do comportamento isotérmico. Mas, a melhoria na eficiência do compressor é acompanhada pelo aumento de custos de instalação e manutenção.

Processos de compressão com multi-estágios apresentam resfriamento intermediário, o que se trata da remoção de calor entre os estágios com o uso de trocadores de calor usando ar ou água como fluido refrigerante. O resfriamento intermediário ideal é aquele em que a temperatura de saída, após o resfriamento, é igual a temperatura da corrente de entrada do compressor.

Alguns processos de compressão apresentam filtros antes da admissão de ar nos compressores, para evitar possíveis danos aos equipamentos, e antes do sistema de secagem do ar, também com o intuito de evitar danos aos equipamentos e garantir o funcionamento do processo. Os filtros são utilizados para reterem impurezas presentes no ar e também evitam o transporte de partículas líquidas para o resto do processo e alcancem os compressores.

O filtro após o secador tem como função retirar a umidade residual não eliminada no secador, para facilitar o escoamento do ar comprimido, evitando que a tubulação congele, e também para economia de energia. O ar comprimido sofre um re-aquecimento antes de voltar a tubulação que vaporiza a umidade residual, impedindo que a mesma seja retirada pelos filtros. Portanto, os filtros após o secador têm como função de reter partículas sólidas, quando os sistemas têm secadores por adsorção o pós-filtro retém partículas sólidas produzidas pela abrasão do material absorvedor.

2.1.5.1. Compressores

Os compressores são classificados em dois grupos distintos: os compressores de deslocamento e os compressores dinâmicos. Os compressores de deslocamento aumentam a pressão do gás a partir do encerramento do volume do mesmo em uma câmara fechada. Este volume é variável por ação do pistão (energia mecânica). A capacidade de gás comprimido não é alterada pela pressão de trabalho, já que o volume dentro do cilindro é constante. Os exemplos mais conhecidos são os compressores alternativos e os compressores rotativos de parafuso. Os compressores dinâmicos funcionam através de energia cinética. A energia cinética é aplicada ao gás em fluxo contínuo para, logo depois, ser convertida em energia de pressão pelo difusor. A capacidade dos compressores dinâmicos varia com a pressão de trabalho. Os compressores mais comuns deste tipo são o ejetor, radial e axial.

A. Compressores de deslocamento

Este tipo de compressor apresenta outra divisão em sua classificação: compressores alternativos e compressores rotativos. Nos compressores alternativos, a compressão é feita a partir do deslocamento do pistão, o que modifica o volume do gás. Já nos compressores rotativos, a compressão é feita por elementos giratórios. Estes compressores apresentam as menores perdas mecânicas por atrito já que dispensam várias peças móveis. Entre outras vantagens diminuem o risco de contaminação com óleo lubrificante e a compressão é feita continuamente, não intermitente, como acontece nos compressores alternativos. Um exemplo de compressores rotativos é o compressor de parafusos mostrado na Figura 2.5.

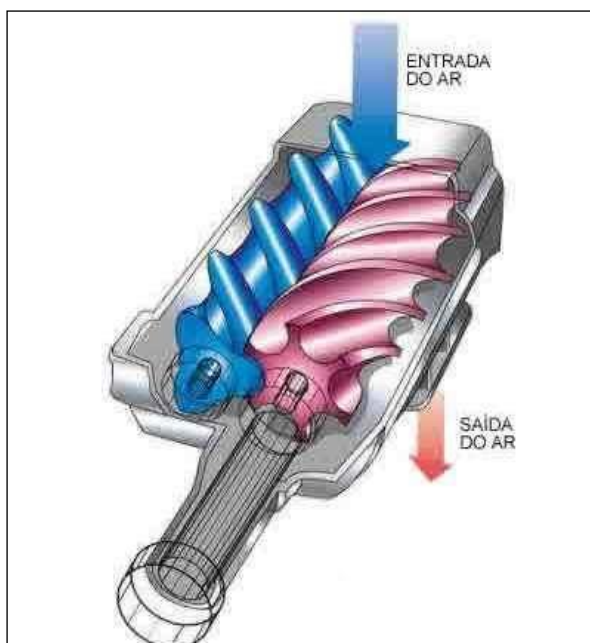


Figura 2. 5 - Esquema de um compressor de parafuso duplo (HowStuffWorks, 2012)

B. Compressores dinâmicos

O fluxo do ar é acelerado por meio de pás ou outro dispositivo (paleta). Este tipo de compressor é subdividido em duas categorias: centrífugos ou axiais. Os compressores dinâmicos têm dois componentes importantes: o impelidor, um elemento rotativo com pás que transfere a energia para o gás através da movimentação das pás; e o difusor, que tem como função transformar a energia cinética em entalpia e, conseqüentemente, aumentar a pressão.

Os compressores centrífugos, também chamados de compressores dinâmicos radiais, tem o escoamento de gás de saída perpendicular ao eixo de rotação. Enquanto que os compressores que a saída é paralela ao eixo de rotação são chamados de axiais. Esta diferença

dos equipamentos se mostra importante na aplicação dada a cada um. Os compressores centrífugos são usados para gases venenosos e inflamáveis. Os compressores axiais são mais adequados a gases menos perigosos e grandes vazões sem a necessidade de altas pressões. A Figura 2.6 indica um esquema de um compressor centrífugo exemplificando um compressor dinâmico.

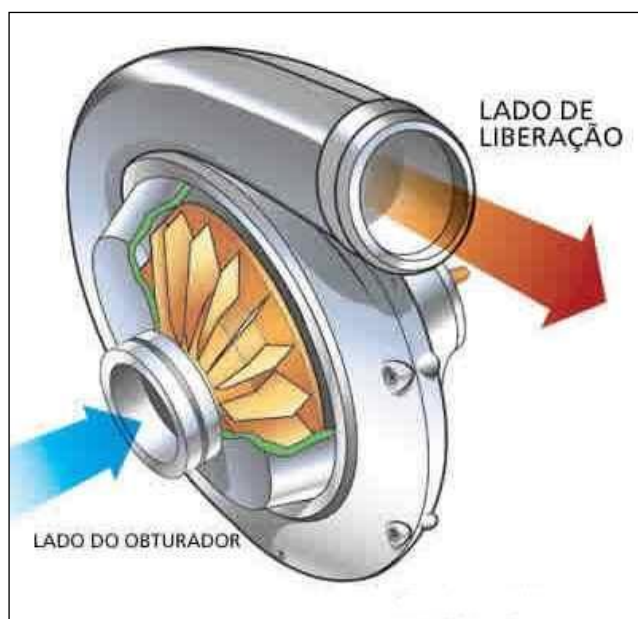


Figura 2. 6 - Esquema de um compressor centrífugo (HowStuffWoks, 2012)

2.1.5.2. Secadores de ar comprimido

A função de um secador de ar é retirar a umidade, tanto líquida quanto vapor, da corrente de ar. Existem dois tipos de secadores de ar comprimido que se diferenciam em relação ao ponto de orvalho. O ponto de orvalho é a temperatura em que começa a ocorrer a condensação. Os secadores por refrigeração apresentam a temperatura de 3°C para ponto de orvalho e para os secadores por adsorção é de -40°C.

Os secadores por refrigeração consistem na refrigeração do ar até a temperatura de 0°C, na qual é possível obter a condensação dos vapores de água e óleo, mas sem correr o risco de congelar a tubulação. Após o resfriamento, os condensados são retirados do sistema, evitando que os mesmos retornem ao fluxo de ar comprimido. Isto pode ser feito por meio de separadores de condensado, filtros coalescentes e purgadores automáticos. Depois de removido o condensado, o ar é aquecido para ser devolvido ao sistema em condições adequadas para o uso.

A principal característica dos secadores por adsorção é a remoção dos vapores ocorrer sem a necessidade de condensação. Por ter um ponto de orvalho muito baixo (até -100°C dependendo do equipamento), o consumo de energia é maior do que os secadores por refrigeração. A adsorção é um processo em que as moléculas, íons ou átomos (dependendo da seletividade do adsorvente) de um fluido são transportados para a superfície de um sólido poroso por meio de difusão (SEADER, 1998). O soluto de um fluido que se adere ao sólido é chamado de adsorvido, enquanto a superfície sólida é denominada adsorvente. A adsorção depende da temperatura, pressão e do adsorvente do processo. Existem vários tipos de adsorventes como a sílica-gel, alumina ativada, peneiras moleculares, H-156, etc. Normalmente um secador por adsorção possui dois leitos de secagem. Enquanto um dos leitos desumidifica o ar, o segundo leito é regenerado ou reativado. A Figura 2.7 apresenta um esquema para um secador por adsorção.

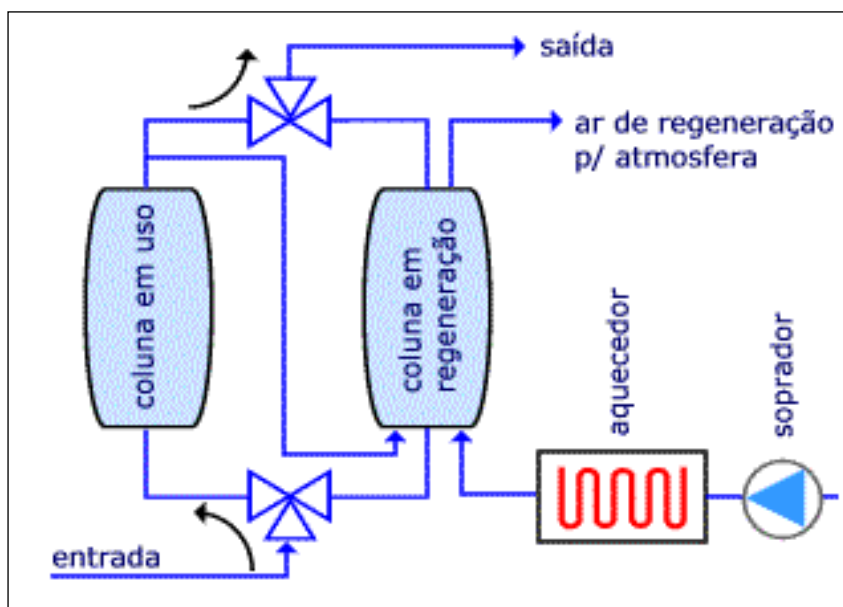


Figura 2. 7 – Esquema de um secador de ar por adsorção com dois leitos de secagem

2.1.6. Modelagem de uma coluna de adsorção

RICE e DO (1995) apresentam os conceitos de equilíbrio e combinação de taxas com uma coluna de adsorção com recheio, combinação bastante comum em processos de engenharia química. O modelo matemático foi desenvolvido considerando a Figura 2.8 que representa a coluna de adsorção com recheio. C_o é a concentração inicial do fluido que passará dentro da coluna, v_o é a velocidade intersticial do fluido e z refere-se ao comprimento da coluna.

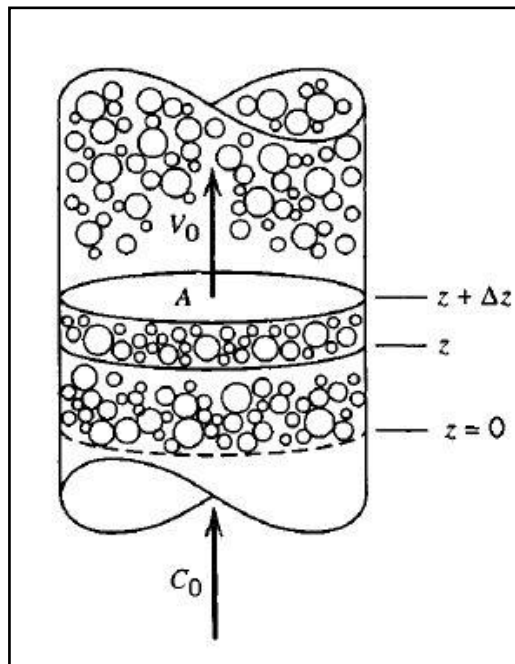


Figura 2. 8 - Esquema da coluna de adsorção com recheio (figura retirada de RICE e DO, 1995)

As hipóteses adotadas para o desenvolvimento do modelo matemático foram:

- Efeitos de calor são ignorados;
- Difusão axial é desconsiderada (partículas muito pequenas);
- Equilíbrio termodinâmico na superfície do sólido e dentro do mesmo;
- Ausência de reação química;
- Transporte do soluto da fase gasosa para a fase sólida.

O modelo apresentado é genérico, portanto aplicável a qualquer outro sistema em que haja uma coluna de adsorção com recheio, sendo este recheio um sólido granular, e uma corrente de fluido binária. Como o processo de adsorção é mais rápido em relação a outros processos, como transporte do soluto dentro do seio do fluido e a taxa de reação (quando existente), tem-se, na superfície do sólido, a seguinte equação de equilíbrio:

$$q = KC^* \quad (2.1)$$

Em que q é a composição de soluto no sólido (moles de soluto/volume da partícula sólida), K é a constante de equilíbrio (adimensional) e C^* é a composição do soluto (moles de

soluto/volume de fluido. O transporte de soluto entre as fases, da fase gasosa em direção a fase sólida, obedece a lei das taxas, dada pela equação (2.2):

$$\Delta R = k_c a (C - C^*) \quad (2.2)$$

Em que ΔR é a variação das taxas (mol.s^{-1}), $k_c a$ é o coeficiente volumétrico de transferência (s^{-1}) e C , a composição (moles de soluto/ volume). A equação (2.3) é a própria correlação de Thoenes-Kramers baseada nos números adimensionais Sh (Sherwood), Re (Reynolds) e Sc (Schmidt). Na equação os números Re e Sh estão modificados e estas modificações são mostradas nas equações (2.4) e (2.5) a seguir.

$$Sh' = 1,0(Re')^{1/2} Sc^{1/3} \quad (2.3)$$

$$Re' = \frac{Re}{(1 - \varepsilon)\gamma} \quad (2.4)$$

$$Sh' = \frac{Sh \varepsilon}{(1 - \varepsilon)\gamma} \quad (2.5)$$

Fazendo as substituições das equações (2.4) e (2.5) e o valor real de Sc , tem-se a equação (2.6) que, neste formato, permite que o valor de k_c seja calculado.

$$\left[\frac{k_c d_p}{D_{AB}} \left(\frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon} \right) \frac{1}{\gamma} \right] = \left[\frac{v_o d_p \rho}{\mu (1 - \varepsilon) \gamma} \right]^{1/2} \left(\frac{\mu}{\rho D_{AB}} \right)^{1/3} \quad (2.6)$$

Para o calculo de a foi utilizado a equação (2.7):

$$a = \frac{6(1 - \varepsilon)}{d_p} \quad (2.7)$$

A velocidade v_o foi dada em relação à porosidade do leito e vazão da corrente de ar que entra na coluna. Seu valor foi calculado considerando que:

$$v_o = \frac{\text{Vazão volumétrica } [m^3/s]}{\text{área } [m^2]} \quad (2.8)$$

Sendo a área da coluna dada por:

$$A_{real} = A_{coluna} * \varepsilon \quad (2.9)$$

Foi aplicada para o soluto adsorvido, em ambas as fases, a lei de conservação e, para fins de organização da equação, foi dividindo por $A\Delta z$. Com isto, obtém-se a equação (2.10), em que tem-se a variação da concentração em relação à posição e a variação da taxa em relação ao tempo. A equação (2.10) é a primeira equação do modelo matemático para o problema físico.

$$-v_o \frac{\partial C}{\partial z} = \varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + (1 - \varepsilon) \frac{\partial q}{\partial t} \quad (2.10)$$

Fazendo um balanço de massa para o soluto apenas na fase sólida e substituindo, no balanço de massa, a equação (2.2), a equação (2.11) foi obtida. Nesta equação, tem-se a variação da taxa em relação ao tempo e é a segunda equação do modelo matemático.

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial q}{\partial t} = k_c a. (C - C^*) \quad (2.11)$$

Considerando que $C \rightarrow C^*$, ou seja, a concentração no leito tende ser a mesma concentração da corrente de ar, isto indica a saturação do leito. Portanto, tem-se que $\frac{\partial q}{\partial t} = 0$ e lembrando-se da equação (2.1) que indica o equilíbrio, o modelo matemático pode ser apresentado pelas equações (2.12) e (2.13).

$$v_o \frac{\partial C}{\partial z} + \varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + (1 - \varepsilon) K \frac{\partial C^*}{\partial t} = 0 \quad (2.12)$$

$$(1 - \varepsilon) K \frac{\partial C^*}{\partial t} = k_c a (C - C^*) \quad (2.13)$$

As condições iniciais para o modelo são descritas nas equações (2.14) e (2.15) e a equação (2.16) indica a condição inicial do leito antes do processo.

$$C(z, 0) = 0 \quad (2.14)$$

$$C^*(z, 0) = 0 \quad (2.15)$$

$$C(0, t) = C_o \quad (2.16)$$

Para que a resolução do problema seja de solução mais fácil, o modelo foi adimensionalizado. Neste trabalho será apresentado apenas os resultados sem a demonstração, já que a mesma se encontra em RICE e DO (1995). As equações (2.17) e (2.18) mostram o modelo final, já adimensionalizado.

$$\frac{\partial C}{\partial \zeta} = -(C - C^*) \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial C^*}{\partial \tau} = (C - C^*) \quad (2.18)$$

Enquanto as equações (2.19) e (2.20) mostram as variáveis adimensionais utilizadas no processo e também indicam o valor das novas variáveis. Sendo a equação (2.19) referente a variável adimensional para a posição e a equação (2.20) a variável adimensional para o tempo.

$$\zeta = k_c a \left(\frac{z}{v_o} \right) \quad (2.19)$$

$$\tau = \left[\frac{k_c a}{K(1-\varepsilon)} \right] \left(t - \frac{z\varepsilon}{v_o} \right) \quad (2.20)$$

Por fim, além de adimensionalizar o modelo matemático, é necessário adimensionalizar as condições iniciais também, para que seja possível solucionar o sistema de equações diferenciais. As equações (2.21) e (2.22) mostram as novas condições iniciais.

$$C(\zeta, 0) = 0 \quad (2.21)$$

$$C^*(\zeta, 0) = 0 \quad (2.22)$$

A solução foi encontrada analiticamente. Através da aplicação das transformadas de Laplace, o que faz com que as equações diferenciais se transformem em equações algébricas. Após a resolução das equações algébricas, aplica-se a inversa das Transformadas de Laplace e obtém-se a seguinte solução:

$$C(\tau, \zeta) = \left[1 - \int_0^\zeta \exp(-\beta) \exp(-\tau) I_0(2\sqrt{\beta\tau}) d\beta \right] C_0 u(\tau) \quad (2.23)$$

Sendo $I_0(2\sqrt{\beta\tau})$, uma função de Bessel modificada e $u(\tau)$, uma função que garante que para qualquer solução da função $\tau > 0$, sendo a solução é dependente tanto da posição quanto do tempo.

2.2. Revisão Bibliográfica

Esta dissertação insere-se na linha de pesquisa "Projeto Auxiliado por Computador (CAE) de processos químicos" da pesquisa desenvolvida no Laboratório de Otimização e Modelagem (LOM) da Faculdade de Engenharia Química, FEQUI/UFU. A finalidade do uso de simuladores de processo é a realização de projeto, análise e otimização de processos de modo mais rápido e confiável. O primeiro trabalho que o grupo de pesquisa apresentou foi a dissertação de mestrado de GONÇALVES (2011) em que o objetivo foi simular, otimizar e avaliar ambientalmente duas plantas industriais de produção de estireno. Já o segundo trabalho é de BERTOLDI (2012) e os objetivos foram simular uma planta de produção de cumeno e otimizar as condições operacionais da planta industrial usando análise paramétrica e meta modelos. Ambos os trabalhos utilizaram o simulador de processo COCO e foi necessário o acréscimo de operações unitárias simuladas no software Scilab por meio do protocolo CAPE-OPEN.

Dentre outros trabalhos disponíveis utilizando o simulador COCO temos o de BAUR et al (2006) em que é discutido o uso do protocolo CAPE-OPEN entre os pacotes

termodinâmicos e operações unitárias nos simuladores mais conhecidos. Já em 2007 temos o trabalho de VAN BATEN et al, que especifica detalhes sobre o simulador de processos COCO e comenta sobre a comunicação, pelo protocolo CAPE-OPEN, das propriedades termodinâmicas e o *software* ChemSep que é responsável pela modelagem das operações de destilação, absorção e extração. KOOIJMAN et al (2007) demonstra a simulação de uma planta virtual de separação de ar em seus componentes primários: oxigênio, nitrogênio e argônio.

VAN BATEN e PONS (2009) apresentam a simulação de uma planta industrial de desalquilação de tolueno em benzeno com hidrogênio. Também foram utilizadas outras ferramentas para as análises dos resultados da simulação como o MATLAB e o Excel. E, ainda citando trabalhos com simulações específicas, temos o trabalho de VAN BATEN e SZCZEPANSKI (2010) em que é apresentado um modelo para um reator de equilíbrio termodinâmico com o uso da energia de Gibbs para o cálculo das composições finais.

Trabalhos com simulação de plantas industriais de ar comprimido utilizando o simulador de processos COCO não foram encontrados. O mais próximo disto encontrado foi o trabalho de KOOIJMAN et al (2007) no qual foi descrito a modelagem de uma unidade de separação de ar. Neste trabalho foi feita uma planta virtual de separação de ar por meio de criogenia e integração de trocadores de calor. A maioria dos trabalhos encontrados são sobre modelagem e simulação de CAES (sigla em inglês para ar comprimido de armazenamento energético) como RAJU e KHAITAN (2012) que discute a simulação de um modelo dinâmico para um CAES com a instalação de uma turbina de gás Huntorf para a validação do modelo e HARTMANN et al (2012) em que a eficiência de diferentes configurações de ciclos adiabáticos de CAES são investigadas.

Outros trabalhos que podem ser citados são GUANGBIN et al (2010) em que é modelado e simulado um expansor por deslocamento na recuperação de energia mecânica do ar comprimido, considerando a perda de sucção, a perda de vazamento, a perda de transferência de calor e perda de descarga. E o trabalho de NAGEL et al (2008) em que é desenvolvido um modelo numérico para a simulação de projeto de tuneis para ar comprimido em solos. Neste modelo está sendo considerado todos os componentes relevantes, desde o tipo de solo até o revestimento da tubulação.

CAPÍTULO 3

Estudo de caso: simulação de uma planta industrial de compressão de ar

3.1.Introdução

O processo de compressão do ar consiste em um sistema que combina determinados equipamentos como compressores, trocadores de calor, secadores de ar e tanques de armazenagem a alta pressão. Na Figura 3.1 é possível observar um diagrama de bloco que indica o processo genérico. O uso de trocadores de calor após os compressores é justificado em regiões em que a temperatura ambiente é elevada. O secador do ar pode ser tanto um sistema de resfriamento quanto colunas de absorção ou adsorção, assim como o tipo de compressor pode variar de acordo com a vazão de ar comprimido produzido.

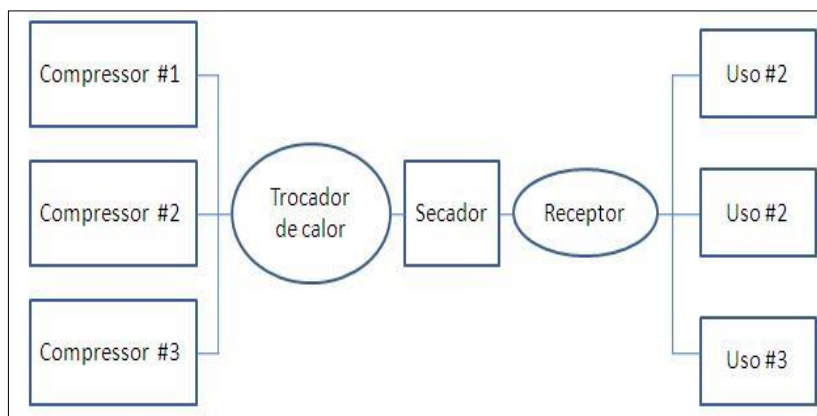


Figura 3. 1- Diagrama de bloco de um sistema genérico da compressão de ar

O objetivo deste estudo de caso é simular uma planta industrial de compressão de ar para usá-la como uma planta virtual do processo. Além da modelagem e simulação da planta industrial foi feita uma análise paramétrica para verificar a influência as principais variáveis de entrada sobre o processo.

3.2.Descrição do processo

A planta industrial simulada está em operação na unidade industrial em Uberaba, Minas Gerais, da empresa Vale Fertilizantes S.A. É constituída por compressores, reservatórios de alta pressão, colunas de adsorção e trocadores de calor. As únicas substâncias

químicas presentes no processo são o ar e a água, sendo que a água se apresenta de duas formas: como água líquida, utilizada como fluido refrigerante nos trocadores de calor, e como vapor d'água em equilíbrio no ar. A planta industrial é representada pela Figura 3.2 e a Tabela 3.1 apresenta os dados disponíveis e utilizados na simulação.

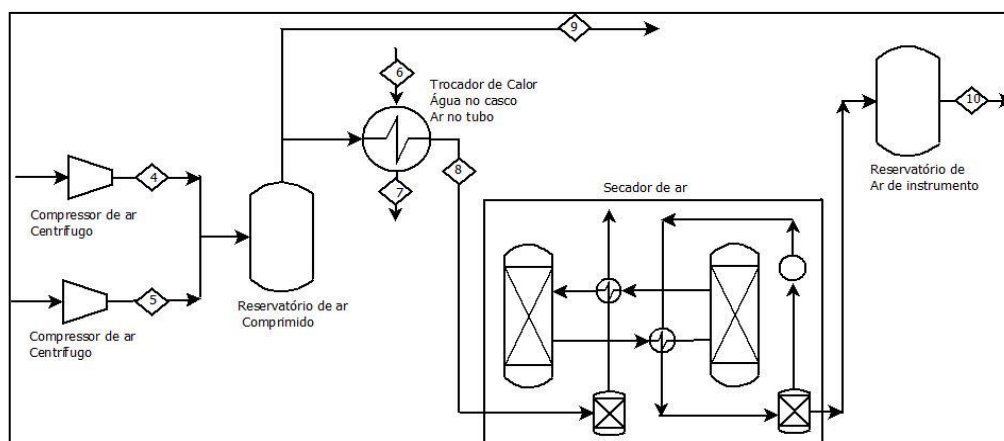


Figura 3. 2 - Diagrama representando a planta de compressão de ar do estudo de caso deste capítulo

O ar é admitido à pressão e a temperatura atmosféricas e é comprimido até 8 kgf.cm^{-2} e alcança a temperatura de $45 \text{ }^{\circ}\text{C}$. Após ser comprimido, o ar é enviado para um vaso denominado Reservatório de Ar Comprimido. A partir deste ponto o ar comprimido pode ser enviado para dois destinos distintos, uma corrente de 4889 kg.h^{-1} é enviada para os Consumidores através da corrente 9. Este ar é utilizado nos sistemas de limpeza, assim como nas atividades nas quais não existem restrições à umidade do ar. A outra corrente de 2709 kg.h^{-1} é enviada para a unidade de Secagem de Ar. O ar seco é chamado de ar de instrumento e é utilizado para a movimentação de válvulas e para transporte em dutos.

A unidade de secagem do ar é constituída por duas colunas de adsorção. As colunas são do tipo recheada e contém no seu interior sílica gel. As duas colunas trabalham em revezamento; quando uma das colunas desempenha a função de secar o ar, a outra está regenerando através de um sistema de aquecimento por uma resistência elétrica e é retirado cerca 60 a 70% da umidade do ar. A sílica gel retém a umidade do ar por meio da adsorção física. Trata-se de um processo físico pelo qual as moléculas de água ficam retidas na superfície dos poros da sílica gel. Logo após passar pela unidade de Secagem de Ar, a corrente é armazenada em outro vaso denominado de Reservatório de Ar de Instrumento e utilizado quando necessário através da corrente 10.

Tabela 3. 1 – Informações sobre as correntes da planta industrial

Corrente	Temperatura [°C]	Pressão [kgf.cm ⁻²]	Vazão mássica [kg.h ⁻¹]	Fluido
4	45	8,0	3799	Ar de serviço
5	45	8,0	3799	Ar de serviço
6	30	3,0	3250	Água de resfriamento
7	32	2,0	3250	Água de resfriamento
8	35	8,0	2709	Ar de serviço
9	45	8,0	4889	Ar de serviço
10	35	8,0	2709	Ar de instrumentação

3.3. Validação termodinâmica

A validação termodinâmica é uma forma de certificar a veracidade dos cálculos das propriedades físicas e químicas das substâncias envolvidas através de comparações com informações na literatura. Para esta simulação, foram verificados os pacotes termodinâmicos para os componentes água e ar atmosférico. Existem duas opções para a simulação do ar no *software* COCO: 1) definir uma mistura gasosa dos componentes mais comuns na atmosfera (oxigênio, nitrogênio e argônio) e 2) usar o componente fictício *air* já definido no banco de dados do *software* que apresenta as características da mistura. Por ser possível encontrar na literatura dados referentes as propriedades do ar atmosférico em várias condições de temperatura e pressão, a opção escolhida foi a segunda.

Para os dados de entalpia do ar foi utilizada a Tabela 12-4 do PERRY e GREEN (2008) para Propriedades Termodinâmicas do Ar Saturado e para os dados de entalpia da água foi utilizada a tabela F.1 de SMITH et al (2000). Para o equilíbrio líquido-vapor entre água e ar foi utilizada a mesma tabela de PERRY e GREEN (2008) citada para a entalpia do ar. A partir dos dados desta tabela é possível construir a carta psicrométrica que fornece a umidade do ar (lbmol de H₂O/lbmol de ar seco) em função da temperatura que também está presente em PERRY e GREEN (2008) nomeada FIG. 2-4.

Para a validação da entalpia da água, variando a temperatura de 20 a 50°C, foram analisadas quatro equações de estado (EOS): Peng Robinson (PR), Redlich Kwong (RK),

Soave Redlich Kwong (SRK) e Soave Redlich Kwong modificado (SRK mod). A Tabela 3.2 indica os valores de erros obtidos com a comparação dos valores fornecidos pelas EOS e os valores experimentais. Avaliando os dados obtidos na Tabela 3.2 é possível notar que a equação com menor erro absoluto médio em relação aos dados experimentais foi a equação de RK para este intervalo de temperatura considerado.

Tabela 3. 2 - Validação da EOS para entalpia da água (de 20 a 50°C)

Entalpia da água [kJ.kg⁻¹]	
Equação de Estado	Erro absoluto médio
Peng Robinson	2,8334%
Redlich Kwong	0,5329%
Soave Redlich Kwong	4,5515, %
Soave Redlich Kwong modificado	5,4469%

Já para a entalpia do ar, variando a temperatura de -213,2 a -14,1°C, a validação foi feita com três equações de estado: PR, RK e SRK, já que a equação de SRK mod. gerou o maior erro absoluto médio. A Tabela 3.3 mostra os erros absolutos médios calculados a partir da comparação entre os dados da literatura para a entalpia do ar com os resultados obtidos no simulador de processos. A partir dos erros calculados para a entalpia do ar, as melhores equações de estado para a simulação, por apresentar os menores erros, são as equações de PR e SRK.

Tabela 3. 3 - Validação da EOS para entalpia do ar (de -213,2 a -143,1 °C)

Entalpia do ar [kJ.mol⁻¹]	
Equação de Estado	Erro absoluto médio
Peng Robinson	6,4983%
Redlich Kwong	26,2676%
Soave Redlich Kwong	3,7837%

E, finalmente foi feita a validação dos pacotes termodinâmicos para os dados de equilíbrio líquido-vapor para a mistura ar e vapor saturado de água. Para esta etapa foram

analisadas as EOS de RK, SRK e PR como é mostrado na Figura 3.3. O intervalo de temperatura adotado foi de -150°F até 130°F. É possível observar na figura citada que a curva que mais se aproxima dos dados experimentais é a de SRK sendo seguida por PR. O erro médio absoluto para a EOS de SRK foi de 0,00583, enquanto o erro de PR foi de 0,00896 e de RK de 0,7650. Portanto a equação que mais se ajusta aos dados experimentais disponíveis é a equação de SRK.

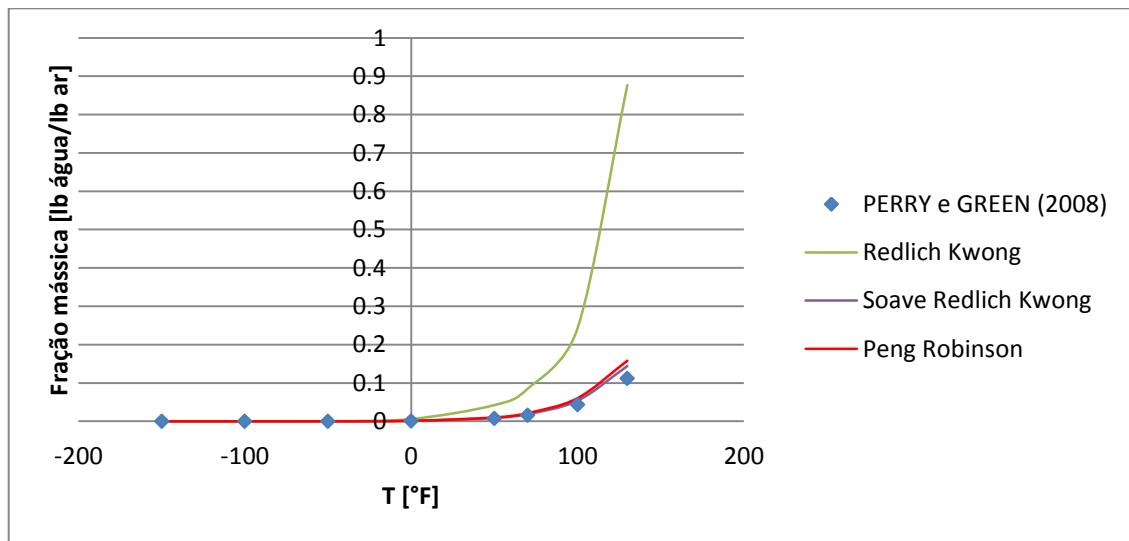


Figura 3. 3 - Validação de dados ELV para ar e vapor saturado de água para as equações de estado de Redlich Kwong, Soave Redlich Kwong e Peng Robinson

Outro detalhe que deve ser observado é a especificação da correlação para o cálculo da tensão superficial para o componente puro (*surface tension*) quando existe equilíbrio entre líquido e vapor. No *default* do *software* tem-se a opção da correlação de temperatura (*Temperature Correlation*) que apresenta um intervalo de temperatura restrito e que não engloba os valores de temperatura da simulação; portanto o cálculo desta propriedade foi alterado para componente definido (*Compound defined*) que utiliza a equação de Antoine para o cálculo.

Outras propriedades alteradas foram a condutividade térmica do componente puro na fase líquida e viscosidade do componente puro na fase líquida. Ambas as propriedades são calculadas com uma correlação de temperatura que têm intervalos de temperatura de validade bastante restritos. Para a propriedade Condutividade Térmica, *thermalConductivity* (pure), as opções de correlação para a fase líquida são: Pachaiyappan, que convergiu sem avisos; DIPPR 9E, que não obteve resultados já que é necessário acrescentar coeficientes no banco de dados para o componente ar; Sato-Riedel, que não convergiu; e a opção *Compound defined*, que

converge, mas com avisos. Para a Viscosidade do componente puro, viscosity (pure), têm-se três opções: Letsou-Stiel, que convergiu e Reid et al e Compound defined, que convergiram com avisos. Apesar de não ter apresentado nenhum aviso sobre a viscosidade, viscosity, foi alterado para Brokaw (high-pres), já que o sistema opera a altas pressões.

Quando um equipamento converge com avisos indica que a simulação gera resultados que podem não satisfazer as condições do processo já que as correlações utilizadas, ou não adequadas para o sistema, ou não se ajustam em relação a intervalos de validade para temperatura e/ou pressão. Os resultados podem apresentar erros que não podem ser quantificados. A melhor opção, quando isto ocorre, é recorrer a escolha de outra correlação que possibilite que os resultados simulados não apresentem avisos.

3.4. Simulação da planta de ar comprimido

3.4.1. Simulação da coluna de adsorção no Scilab

O modelo matemático para a coluna de adsorção descrito no item 2.1.6 foi simulado no software Scilab, o código computacional é apresentado no Apêndice A. A equação (3.1), que é a solução analítica para o modelo matemático da coluna de adsorção constituído por duas equações diferenciais, foi implementado em um código computacional e foi escolhido um método numérico para a resolução da integral, já que esta integral não possui solução analítica conhecida.

$$C(\tau, \zeta) = \left[1 - \int_0^\zeta \exp(-\beta) \exp(-\tau) I_0(2\sqrt{\beta\tau}) d\beta \right] C_0 u(\tau) \quad (3.1)$$

Para esta dissertação, o sólido utilizado é a sílica-gel e a corrente binária é constituída de ar e vapor de água. O valor da constante K foi retirado EAGLETON e BLISS (1953) apud SEADER e HENLEY (1998) é equivalente a 29. O valor da constante $k_c a$ foi calculado a partir da correlação de Thoenes-Kramers para o escoamento em leito recheados (FOGLER, 2002). A equação é válida para leitos com porosidade de 0,25 a 0,5, Re' variando de 40 a 4000 e Sc de 1 a 4000.

Os dados usados para o cálculo como, por exemplo, coeficiente de difusão de massa efetivo (Def), raio da partícula, porosidade do leito (ϵ), foram apresentados por PARK e

KNAEBEL (2002) e AMORIM (2007). O valor da densidade do ar foi retirado da tabela de dados de projeto.

Para o valor de γ não será necessário apresentar equação, como se trata de partículas esféricas e γ é um fator que relaciona outras formas com esferas, tem-se que γ para esfera é igual a 1. Os dados são apresentados na Tabela 3.4 e com a discriminação de suas respectivas fontes.

Tabela 3. 4 – Resumo dos parâmetros utilizados no cálculo de $k_c a$

Variável	Valor numérico	Fonte
$D_{ef} [m^2.s^{-1}]$	5.10^{-10}	PARK e KNAEBEL (2002)
$d_p [m]$	3.10^{-3}	AMORIM (2007)
$\varepsilon [-]$	0,4	AMORIM (2007)
$v_o [m.s^{-1}]$	2,73	Calculado
$\gamma [-]$	1	Calculado
$\mu_{ar} [Pa.s]$	$17,4.10^{-6}$	Calculado
$\rho_{ar} [kg.m^{-3}]$	9,84	Dado de projeto
$a[m^2.m^{-3}]$	720	Calculado

Por se tratar de uma função com duas variáveis independentes e sendo uma delas a variável τ , que é referente à variável adimensional do tempo, foi necessário fixar um valor para τ porque o simulador de processo utilizado trabalha apenas com simulações em estado estacionário. Foi fixado um valor de $t = 1500$ s, o que garante que τ será positivo e que será adsorvido aproximadamente 70% do vapor de água saturado na corrente de ar.

O comprimento da coluna foi definido em 3 metros e o diâmetro de 0,25 metros, já que não há este tipo de informação no projeto utilizado para a simulação. A porosidade do leito é de 40% e a velocidade intersticial, v_o , é $2,73 m.s^{-1}$, que foi calculada considerando a área da coluna e a vazão de ar que está entrando na coluna.

Antes de implementar o código dentro no protocolo CAPE-OPEN foram testados dois métodos numéricos para resolver a integral: método de Romberg e método do Trapézio Repetido. Ambos os resultados foram comparados com a resposta, na forma gráfica, encontrada em RICE e DO (1995). O método de Romberg consiste na sucessiva aplicação da extrapolação de Richardson à quadratura do trapézio composta o que resulta em uma quadratura composta de maior exatidão. A quadratura do trapézio composta com n pontos

permite aproximar a integral de um função f duas vezes continuamente diferenciável através da expressão:

$$\int_a^b dx f(x) = I_n - \frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi) \quad (3.2)$$

Onde

$$I_n = h \left(\frac{1}{2}f(a) + f(a+h) + f(a+2h) + \dots + f(a+(n-2)h) + \frac{1}{2}f(b) \right) \quad (3.3)$$

E

$$h = \frac{b-a}{n-1} \quad e \quad \xi \in (a,b)$$

Foi selecionado para os valores de a e b , 0 e ζ , respectivamente, sendo o valor de $\zeta = \frac{k_c c z}{U}$. Para cada solução, variando z (o comprimento da coluna), existe um valor diferente de ζ , gerando um conjunto de soluções de acordo com o comprimento da coluna selecionado. Para este método foram utilizados cinco pontos, ou seja, $n=5$. Considerando a concentração inicial, $C_o = 1 \text{ mol.m}^{-3}$, foram calculados os seguintes perfis, mostrados na Figura 3.4.

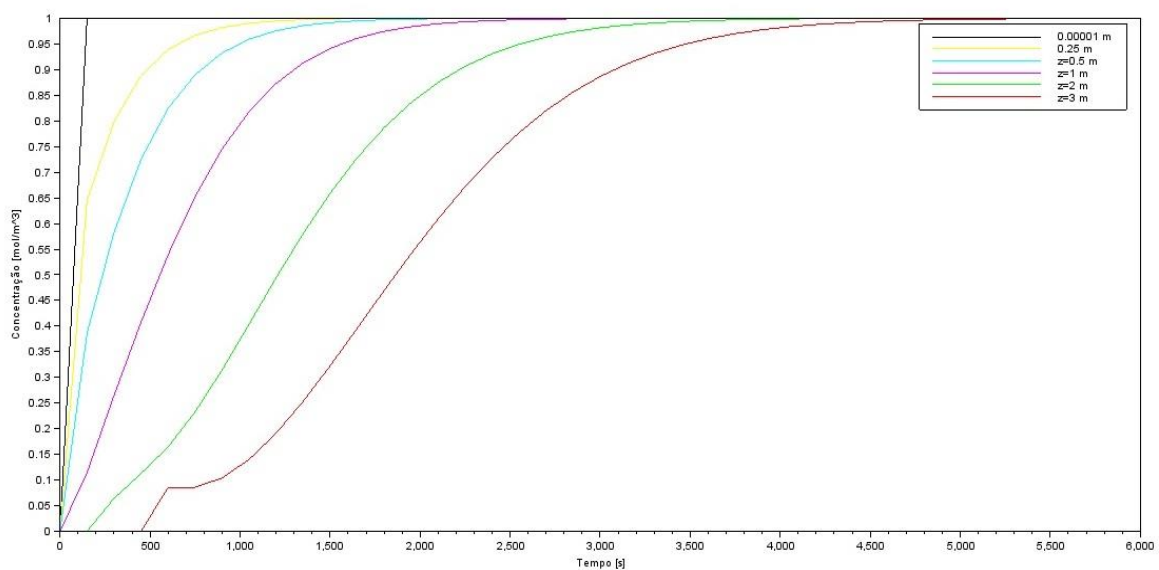


Figura 3. 4 – Perfis de concentração de vapor saturado de água em relação à posição da coluna pelo método numérico de integração Romberg

Como estão indicadas na Figura 3.4, as curvas decrescem com o aumento do comprimento de coluna selecionado, sendo que para $z=0,00001$ m (valor bastante pequeno, estipulado para substituir $z=0$, já que não havia convergência com este valor) a concentração chega ao valor máximo de saturação com aproximadamente 100 s e para $z=3$ m (final da coluna de adsorção) a saturação ocorre em aproximadamente 4600 s. Outro fato que precisa ser observado é que a curva referente a $z=3$ m tem um comportamento anômalo entre o período de 600 s a 700 s, em que, em vez da concentração aumentar com o tempo, não houve variação apesar da passagem do tempo.

O segundo método utilizado foi o Trapézio Repetido. A regra do Trapézio Simples consiste em encontrar um polinômio que se aproxime de uma determinada função $f(x)$ em um intervalo dado por $[a, b]$, através do Polinômio de Lagrange de primeiro grau:

$$P_1(x) = f(a) \frac{(x-b)}{(a-b)} + f(b) \frac{(x-a)}{(b-a)} \quad (3.4)$$

Então podemos dizer que:

$$\int_a^b f(x)dx \cong \int_a^b P_1(x)dx = \int_a^b \left[f(a) \frac{(x-b)}{(a-b)} + f(b) \frac{(x-a)}{(b-a)} \right] dx \quad (3.5)$$

$$\int_a^b f(x)dx \cong \frac{[f(a) + f(b)](b-a)}{2} \quad (3.6)$$

A equação (3.5) é equivalente ao trapézio relacionado a área da curva $f(x)$, portanto pode ser usada com aproximação para determinar o valor da integral da função $f(x)$. Mas, para este método, o erro é grande, o que justifica o método do Trapézio Repetido. Neste caso, o intervalo $[a, b]$ é dividido em n vezes para melhorar a aproximação. A equação (3.7) mostra a aproximação para a integração:

$$\int_a^b f(x)dx \cong \frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)] \quad (3.7)$$

$$\text{E sendo } h = \frac{b-a}{n}.$$

Foi selecionado para os valores de a e b , 0 e ζ , respectivamente, sendo o valor de $\zeta = \frac{k_c c z}{U}$. Para este método foram utilizados dez pontos, ou seja, $n=10$. A escolha de mais pontos para este método foi apenas por ser um método mais fácil de se implementar e quanto mais pontos utilizados, maior é a precisão. Considerando a concentração inicial, $C_o = 1 \text{ mol.m}^{-3}$, foram calculados os seguintes perfis mostrados, na Figura 3.5.

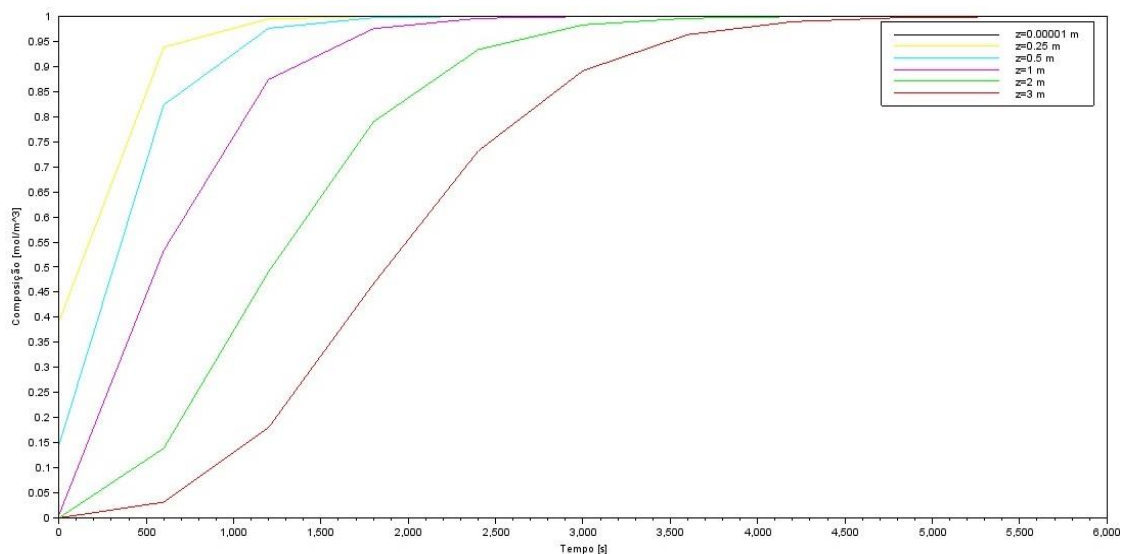


Figura 3. 5 – Perfis de concentração de vapor saturado de água em relação à posição da coluna pelo método numérico de integração Trapézio Repetido

Assim como na Figura 3.4, as curvas decrescem com o aumento do comprimento de coluna selecionado. Também foi utilizado o valor de $z = 0,00001 \text{ m}$ para representar o valor de $z = 0$, a curva não está visível na Figura 3.5 por estar muito próxima ao eixo das ordenadas, ou seja, no início da coluna e no início da operação, a concentração do leito já está saturada. Este comportamento é esperado já que o equilíbrio é determinado pela difusão e deve ser rápido. Já a curva referente a posição $z = 3 \text{ m}$ não apresenta, em nenhum intervalo de tempo, concentração constante. A concentração no final da coluna cresce até saturar em $t = 4600 \text{ s}$, assim como no método anterior.

A escolha do método foi feita em relação ao comportamento das curvas na posição $z = 3 \text{ m}$. Como não é esperado o comportamento da Figura 3.4 e não tendo nenhuma justificativa física para isto, o método escolhido foi o do Trapézio Repetido.

3.4.2. Simulação da planta completa

Antes de iniciar a simulação propriamente dita, é necessário avaliar a umidade do ar na corrente de entrada do sistema. Criando uma corrente mássica com porcentagens de água e ar, mesmo com pequenas concentrações de água, gera uma corrente com duas fases, líquida e vapor, a qual não pode dar entrada nos compressores, caso contrário os equipamentos podem avariar. Além disto, duas fases não é o que ocorre com o ar úmido, no qual há certa quantidade de água, na fase vapor, juntamente com o ar. Para a criação de uma corrente apenas na fase vapor que apresente o ar e o vapor saturado de água é preciso montar um *flowsheet* preliminar como é mostrado na Figura 3.6.

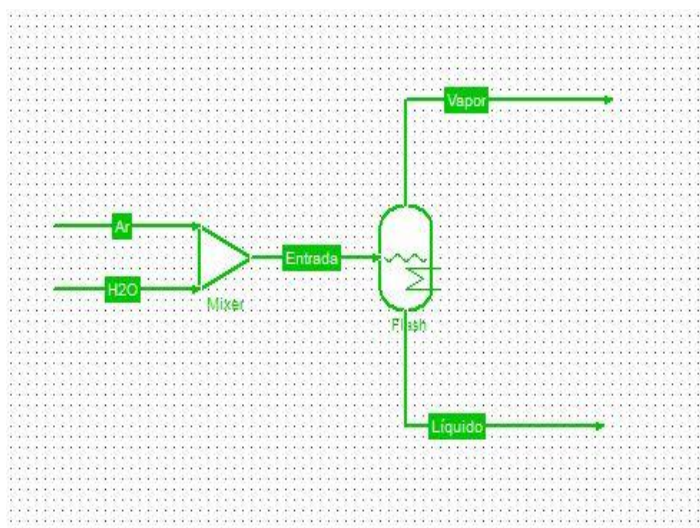


Figura 3. 6 - *Flowsheet* preliminar para a formação da corrente mássica de ar

Usando o mesmo pacote termodinâmico que será utilizado na simulação da planta de compressão, criam-se duas correntes mássicas de ar (Ar) e água (H₂O) puras a 20°C e a pressão atmosférica. Após serem misturadas por meio do equipamento *mixer*, a corrente 'Entrada' que possuiu tanto fase líquida quanto fase vapor é enviada para um *flash*. O flash separa a mistura duas correntes, uma na fase vapor e outra na fase líquida, a temperatura e pressão iguais as de entrada. A corrente denominada Vapor apresenta as características necessárias: corrente de ar com água saturada na fase vapor.

Como será possível ver ao longo do texto, a operação unitária *Flash* não aparecerá no fluxograma da simulação principal. Os dados obtidos das frações molares e pressão obtidas na simulação preliminar foram copiadas e acrescentadas nas correntes de entrada (Ar 4 e Ar 5) do fluxograma principal. Portanto este equipamento não aparecerá na simulação posterior ,

pois sua finalidade foi apenas gerar uma corrente (vapor), que contenha "ar" e vapor d'água saturado.

Por se tratar de um fluxograma sequencial, ou seja, a saída do primeiro equipamento é equivalente à entrada do próximo equipamento e sem a presença de reciclo, a montagem do modelo no *flowsheet* é equivalente à sequência física do processo, sendo possível iniciar a construção da simulação com as primeiras correntes de entrada. As duas primeiras correntes implementadas foram nomeadas de Ar 4 e Ar 5 e são equivalentes as duas correntes de admissão de ar no sistema de compressão. As correntes foram definidas a 20°C e pressão atmosférica, com frações molares 0,017 e 0,983 para a água e o ar, respectivamente.

Sabe-se que os compressores utilizados na planta industrial são constituídos por dois estágios intercalados por trocadores de calor de pequena capacidade e com o uso de água como fluido refrigerante. Foi definido um aumento igual de carga a cada compressor, ou seja, o primeiro compressor atinge 2 kg_f.cm⁻² e o segundo compressor tem a pressão final de 8 kg_f.cm⁻². Como não se tem conhecimento acerca das eficiências dos equipamentos no projeto, os parâmetros foram coletados da planta em operação, sendo a eficiência dos compressores de 60%. A Figura 3.7 mostra maiores detalhes sobre a configuração de um dos compressores, sendo que especificações sobre as eficiências são iguais para todos os compressores. Após cada um dos compressores, foram implementados trocadores de calor simples, sem a necessidade de especificar a corrente fria. O primeiro trocador de calor resfria a corrente de ar de 121 °C para 55 °C e o segundo trocador resfria uma corrente de ar de 315 °C para 45 °C. A simulação até este ponto é mostrada na Figura 3.8.

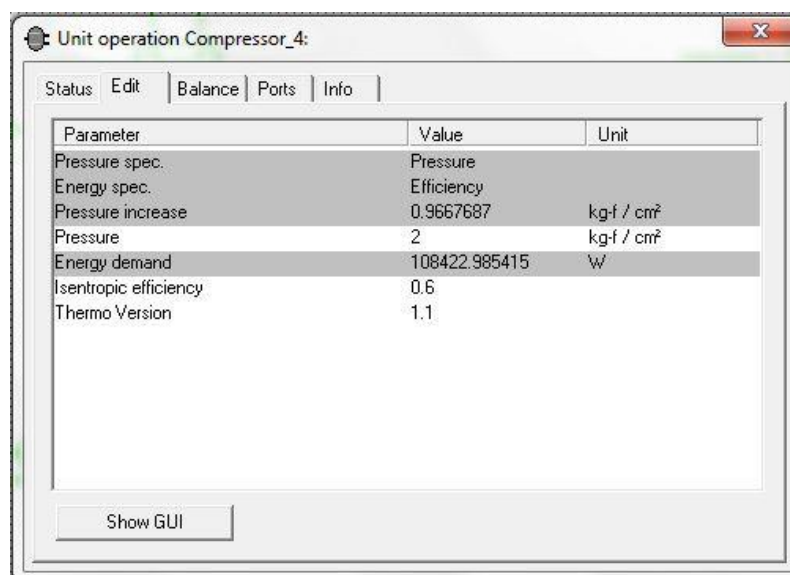


Figura 3. 7 - Configuração do compressor no COCO

Na Tabela 3.5, são apresentados os detalhes das correntes conectadas nos compressores e trocadores de calor, como temperatura, pressão e as frações molares. Como é possível observar, apesar das variações de pressão e temperatura, tanto a vazão total quanto as frações molares das correntes se mantêm constantes. Existe a formação de gotículas de água apenas nas correntes 4 e 5, após a passagem pelos compressores, portanto o aumento de pressão desta forma não traz danos aos compressores.

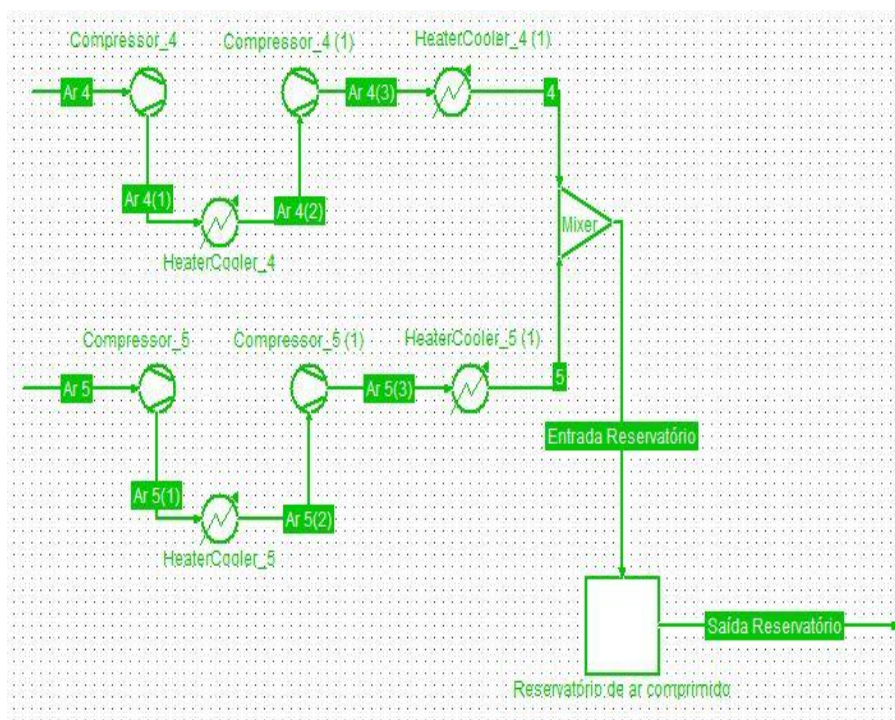


Figura 3. 8 - Parte da planta simulada, compressores, mixer e tanque de armazenamento

O equipamento *Mixer* é responsável pela união das duas correntes, 4 e 5, sem alterações nas condições de temperatura e pressão. O vaso denominado Reservatório de ar comprimido é uma operação chamada *No Operation*. Esta operação não altera nenhuma condição das correntes, sendo a entrada igual a saída. Esta operação foi especificada apenas para representar os vasos de armazenamento do sistema.

A próxima etapa da simulação consiste na separação da corrente de ar comprimido em duas outras correntes com vazões distintas, corrente 8(1) e corrente 9(1). Cada corrente tem uma função diferente, a primeira corrente, 8(1), é enviada para um trocador de calor antes de passar pelo sistema de secagem da umidade e a corrente 9(1) é enviada para os Consumidores. Estes consumidores utilizam o ar comprimido úmido para atividades como limpeza e circulação de ar nos prédios.

Tabela 3. 5 – Informações detalhadas sobre as correntes iniciais da simulação

Corrente	Pressão [kgf. cm⁻²]	Temperatura [°C]	Fração [kg. h⁻¹]	Fração molar gasosa[-]
Ar 4	1,03	20	3799	1
Ar 5	1,03	20	3799	1
Ar 4(1)	4	157,42	3799	1
Ar 5(1)	4	157,42	3799	1
Ar 4(2)	4	55	3799	1
Ar 5(2)	4	55	3799	1
Ar 4(3)	8	126,49	3799	1
Ar 5(3)	8	126,49	3799	1
4	8	45	3799	0,9942
5	8	45	3799	0,9942

Para a separação das correntes foi usada a operação *Splitter*. Este equipamento promove uma separação de vazão sendo que não ocorre a separação de componentes e nem variações de pressão e temperatura, apenas separação material. Na configuração do *splitter* é definido o *Split factors*, um valor numérico que especifica a divisão das correntes. O *Split factors* é calculado através da divisão entre o valor da corrente de saída principal (primeira corrente conectada à saída do *Splitter*) pelo valor da corrente de entrada do *Splitter*.

A Tabela 3.6 traz informações mais detalhadas sobre o comportamento das vazões antes e depois do *splitter*. A corrente 9(1) é ligada a outro ícone *No Operation* que apenas representa os consumidores. A corrente 8(1) é conectada ao trocador de calor *HeatExchanger*. É possível confirmar, com a divisão da corrente 8(1) pela corrente Saída do Reservatório, o valor 0,356541 equivalente ao *Split factors*.

Tabela 3. 6 - Vazões mássicas das correntes ligadas ao *splitter*

Corrente	Vazão mássica [kg.h⁻¹]
Saída do Reservatório	7598
8(1)	2709
9(1)	4889

O trocador de calor foi definido para que a corrente de saída de ar comprimido seja 10 °C mais fria do que a corrente de entrada. Para isto é utilizado 3250 kg.h⁻¹ de água com fluido refrigerante. É necessário especificar que este trocador de calor apresenta uma queda de pressão de 1 kg_f.cm⁻², sendo a pressão inicial de 3 kg_f.cm⁻², assim como a variação de temperatura é de 30 °C para 32°C. No simulador foram especificadas a queda de pressão em ambas as correntes e a variação de temperatura em apenas uma das correntes. Como a corrente de ar comprimido é de maior relevância nesta simulação, os cálculos matemáticos foram realizados de forma que as especificações desta corrente permanecessem fixas.

Apesar das especificações citadas acima, na simulação a temperatura da corrente de saída do fluido refrigerante foi de 33,05 °C em vez de 32 °C. Esta diferença se deve as equações de estado e correlações adotadas na simulação, que apenas se aproximam do comportamento real do fenômeno físico assim como a opção *Adapt outlet temperatures* que foi assinalada. A Tabela 3.7 mostra os resultados obtidos pela simulação.

Tabela 3. 7 - Informações sobre as correntes mássicas de entrada e saída do trocador de calor

Corrente	Temperatura [°C]	Pressão [kg_f.cm⁻²]
6	30,00	3
7	33,05	2
8(1)	45,00	8
8	35,00	8

A corrente 8, agora a 35 °C e 8 kg_f.cm⁻², é enviada para o sistema de secagem do ar. No projeto original, este sistema de secagem consiste em duas colunas de adsorção recheadas com sílica gel. As duas colunas operam em revezamento, ou seja, quando uma coluna está adsorvendo a umidade do ar comprimido, a outra coluna está sendo regenerada através da evaporação da umidade por aquecimento. Como não existe a opção de colunas recheadas no *software* COCO, a coluna de adsorção com recheio foi modelada e simulada no *software* Scilab.

Antes da implementação da coluna de adsorção, foi necessário colocar um *flash* com a função de purga, já que a corrente 8 que sai do trocador de calor tem tanto fase gasosa quanto fase líquida. No projeto este equipamento não está presente, mas na planta em operação há a necessidade dele já que a água formada pode danificar a sílica-gel utilizada na adsorção. Além desta modificação, foi necessário implementar a corrente Água adsorvida na coluna para que

o balanço de massa fosse respeitado. O material presente nesta corrente é referente a água adsorvida e confinada dentro da sílica-gel. A Tabela 3.8 está indicando os valores das vazões mássicas das correntes obtidos na simulação indicada pela Figura 3.9.

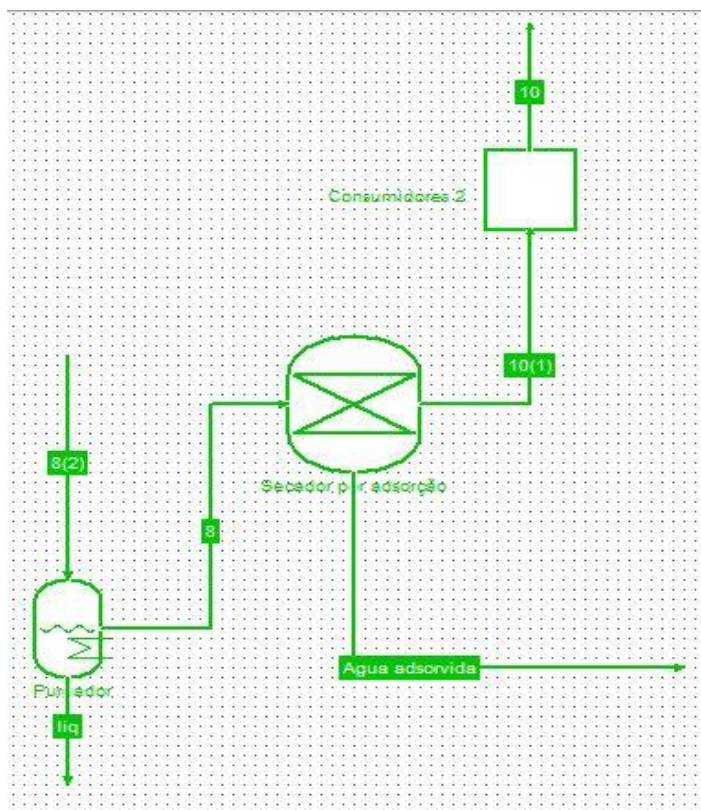


Figura 3. 9 – Detalhe do flash (Purgador), coluna de adsorção (Secador por adsorção) e reservatório para consumidores mais nobres

Tabela 3. 8 - Resumo dos valores de vazão mássica para verificação do balanço

Corrente	8(2)	8	liq	10	Água adsorvida
Vazão mássica total [kg.h ⁻¹]	2709,00	2685,62	23,38	2676,46	9,16
Vazão mássica de ar [kg.h ⁻¹]	2672,77	2672,43	0,34	2672,43	0,00
Vazão mássica de água [kg.h ⁻¹]	36,23	13,19	23,04	4,03	9,16

Não existe variação de temperatura da corrente 8(2) até a corrente 10. O equipamento nomeado de Consumidores 2 é uma operação nula, não alterando em nada as propriedades da corrente. Foi especificado uma queda de pressão dentro da coluna de 1 kg_f.cm⁻², portanto a pressão da corrente 10 é de 7 kg_f.cm⁻² e não de 8 kg_f.cm⁻² como a corrente 8.

Tabela 3. 9 – Tabela comparativa com valores de projeto e valores de simulação

Corrente	Vazão [kg.h⁻¹]	Temperatura [°C]	Pressão [kgf.cm⁻²]
Dados de projeto			
4	3799	45	8,0
5	3799	45	8,0
6	3250	30	3,0
7	3250	32	2,0
8	2709	35	8,0
9	4889	45	8,0
10	2709	35	8,0
Dados da simulação			
4	3799	45	8,0
5	3799	45	8,0
6	3250	30	3,0
7	3250	33,5	2,0
8	2685,62	35	8,0
9	4889	45	8,0
10	2676,46	35	7,0

A Figura 3.10 é referente a simulação completa com todos os equipamentos implementados.

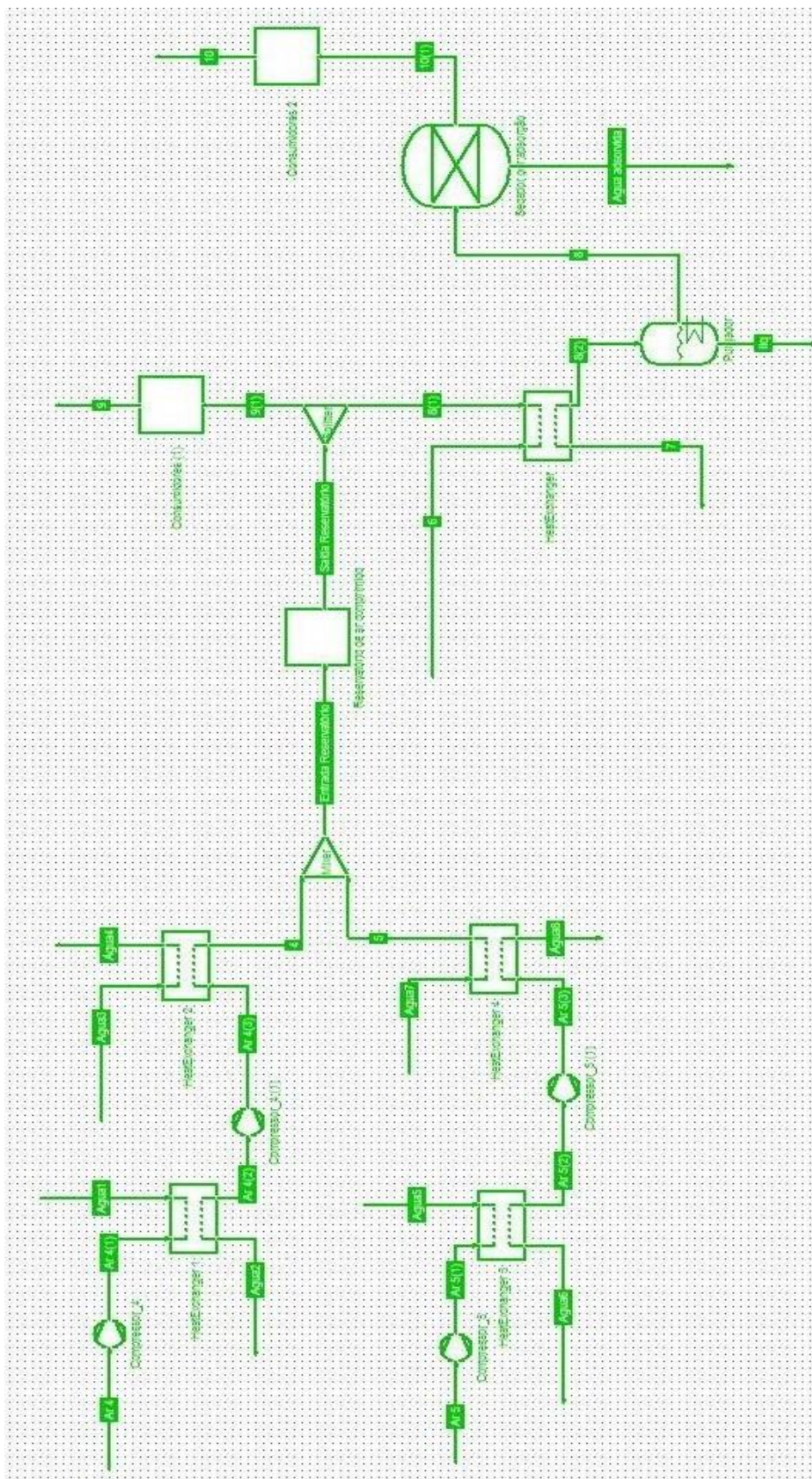


Figura 3. 10 – Flowsheet da simulação completa da planta industrial de ar comprimido

Como é possível notar na Tabela 3.9, a maioria dos valores da simulação coincidiu com os dados de projeto. Os valores de vazões das correntes 8 e 10 da simulação resultaram valores inferiores aos de projeto porque na simulação foi considerado que a vazão de entrada era o total das frações tanto do ar quanto do vapor de água. Portanto, a massa inferior indica a retirada da umidade do ar. A pressão da corrente 10 na simulação foi 7 kgf.cm^{-2} , o que implica na queda de pressão da coluna de adsorção que existe na coluna real, mas não foi especificado no projeto. E por último, a temperatura da corrente 7, corrente de água refrigerante do trocador de calor anterior ao secador de ar. Apesar de todas as modificações realizadas nas correlações usadas para o cálculo do trocador de calor, o resultado se manteve o mesmo. Esta variação pode ser explicada pela precisão das correlações utilizadas, já que se trata de um modelo matemático de um fenômeno real, erros deste tipo são possíveis. Mas, por se tratar de uma corrente que não retornará para o processo (dentro dessa simulação), a diferença de temperatura entre a planta simulada as condições de projeto pode ser considerada dentro do aceitável.

CAPÍTULO 4

Análise de flexibilidade da planta industrial de ar comprimido

4.1. Introdução

A análise paramétrica (ou otimização paramétrica) é um problema de dimensionamento em que busca uma solução ótima das dimensões dos equipamentos e das condições das correntes (PERLINGEIRO, 2005). As análises preliminares feitas nesta dissertação consistiram na avaliação do efeito de uma única variável de entrada sobre uma determinada variável de saída.

Com a análise paramétrica é possível verificar a sensibilidade de um processo químico quando ocorrer variações em torno de um ponto ótimo e, também, prever possíveis instabilidades no processo.

Neste capítulo, serão apresentadas as análises paramétricas para os compressores, trocadores de calor entre os compressores e a coluna de adsorção, assim como a análise de flexibilidade usando meta-modelos.

4.2. Análise paramétrica da umidade do ar

Como foi necessária, antes de iniciar a simulação, a criação de um fluxograma para verificar a quantidade de vapor saturado de água a determinada temperatura e pressão, uma análise paramétrica desta variável se torna interessante. Esta análise serve tanto para verificar se o simulador de processo gera um resultado semelhante ao esperado no fenômeno físico, como também auxilia na definição da amplitude de variação da umidade do ar.

A vazão de água na entrada do *flash* foi variada de 50 a 5000 kg.h⁻¹ e a temperatura de ambas as correntes de entrada no mesmo equipamento foram variadas de 20 a 45 °C. Para a temperatura foram respeitadas as possíveis temperaturas do ar ambiente e os valores para a vazão foram selecionados de forma que obtivesse um grande intervalo. A pressão adotada é a pressão atmosférica e foi mantida constante já que a ideia desta simulação era determinar a fração de vapor de água no início do processo. Ao longo do processo existe variação de pressão e temperatura e, conseqüentemente, também há variação da quantidade de vapor, mas esta variação é considerada pelo projeto do processo. A Figura 4.1 mostra os resultados obtidos para diferentes temperaturas.

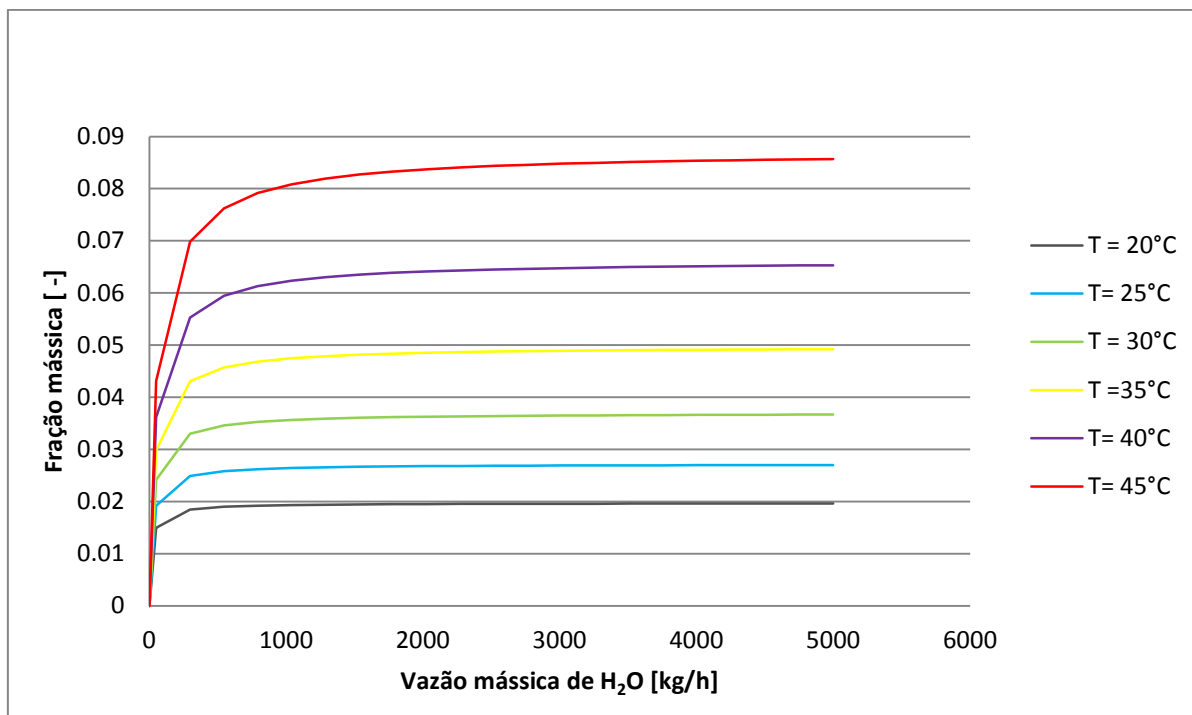


Figura 4. 1- Variação da quantidade de vapor saturado de água em uma corrente de ar a T[°C]
= [20, 25, 30,35,40,45]

Quanto maior a temperatura da corrente de ar, maior é a fração de vapor de água na corrente. O comportamento de todas as curvas é semelhante e após determinada vazão de água, obtém-se um valor estacionário de fração de água. Este valor estacionário é determinado pela temperatura e pressão da corrente. Para a simulação realizada foi especificada a temperatura inicial de 20°C, o que representa a menor umidade investigada neste estudo paramétrico.

4.3. Análise paramétrica do processo

No primeiro estudo paramétrico, foi analisada a influência da umidade ou vazão mássica de vapor de água da corrente de entrada (corrente Ar 4) sobre a energia necessária para o funcionamento do compressor (potência). A vazão mássica de água da corrente Ar 4 foi variada, em 10 intervalos, de 13,449 kg.h⁻¹ – o que é equivalente 0,005 de fração molar de vapor de água na corrente de ar – a 51,471 kg.h⁻¹ – máximo de vapor de água possível em uma corrente de ar a 20°C e pressão atmosférica.

Como é possível observar na Figura 4.2, o aumento de umidade no ar exige uma demanda maior de potência do compressor para que a pressão de 2 kgf.cm⁻² seja mantida. Este comportamento é constante até quando a quantidade de vapor de água na corrente de ar

alcança o valor de 44 kg.h^{-1} . A partir deste ponto a potência do compressor cai mais drasticamente do que estava aumentando anteriormente. Este comportamento pode ser explicado de duas formas: isto pode ser pelo fato de ocorrer a condensação da umidade do ar em gotículas de água dentro do compressor, o que diminuiria a demanda de potência ou a partir desta quantidade de umidade a potência de trabalho do compressor não é capaz de manter a pressão estabelecida e, portanto, o equipamento desligou. O valor da vazão mássica da corrente Ar 4 foi fixada em 3799 kg.h^{-1} , portanto, na análise paramétrica, quando a vazão mássica de vapor saturado de água aumenta consequentemente a vazão mássica de ar diminui, o que pode interferir no cálculo da potência do compressor.

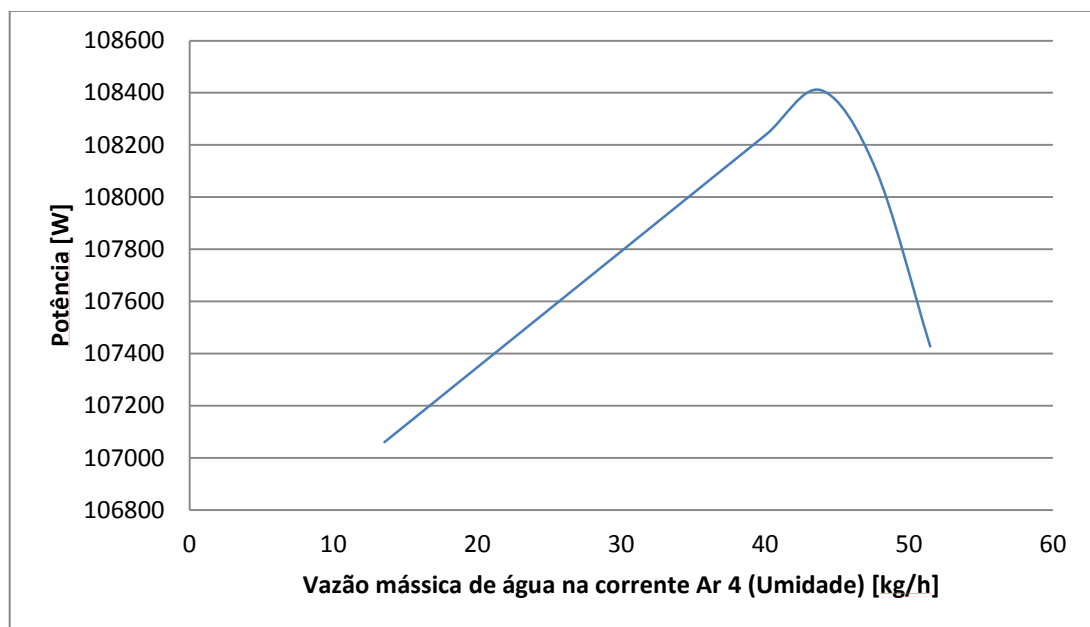


Figura 4. 2 Potência do compressor em relação a variação da vazão mássica de vapor saturado de água (ou umidade) na corrente Ar 4.

Esta análise foi feita com o compressor nomeado de Compressor_4 na simulação, mas representa o comportamento dos quatro compressores presentes na simulação. Portanto, apenas esta figura será apresentada.

Os próximos estudo paramétrico investigaram os efeitos das variações das vazões de refrigerante dos trocadores de calor sobre os compressores e em relação a quantidade de calor trocado. É de conhecimento da planta real que as vazões de refrigerante sofrem variações que não podem ser controladas. As Figuras 4.3 e 4.4 mostram o comportamento da potência dos trocadores de calor em relação a variação das vazões de refrigerante.

Para o primeiro trocador de calor (HeatExchanger 1), a vazão mássica de água da corrente Agua1 foi variada de 0 a 8000 kg.h⁻¹ de água sendo que tal corrente resfria a corrente de ar de 120°C até 55°C, sem ocorrer quedas de pressão. Já para o segundo trocador (HeatExchanger 2) a variação foi de 0 a 1600 kg/h de água e ocorrendo um resfriamento de 315°C para 45°C., sem haver variações na pressão. Em ambos os casos foi avaliado o efeito das vazões de refrigerante sobre a troca de calor nos trocadores de calor.

Na Figura 4.3, o gráfico não se inicia no ponto zero porque o simulador não convergiu neste ponto. Ao longo do gráfico é possível notar que a curva está ascendendo cada vez menos enquanto a vazão de refrigerante aumenta, o que pode levar a conclusão de que a vazão de 8000 kg.h⁻¹ de água ainda não é a vazão ótima para a troca de calor exigida. Na Figura 4.4, já é possível definir um valor estacionário para a vazão de água refrigerante, sendo esta vazão equivalente a 640 kg.h⁻¹. A partir deste valor, o aumento de vazão de refrigerante não tem efeito sobre a potência do trocador de calor. Isto ocorre já que a temperatura de saída do trocador de calor foi fixada em 45°C, ou seja, a potência do trocador de calor não varia mais, mesmo sendo possível com o aumento da vazão de refrigerante, por estar definido que a maior potência possível é de aproximadamente 300000 W.

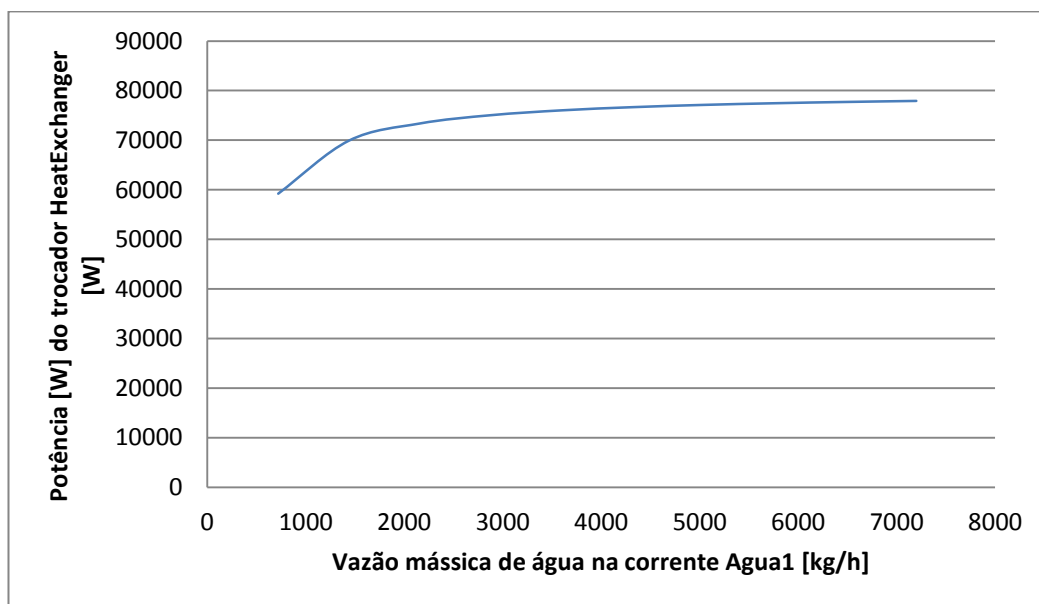


Figura 4. 3 - Potência do trocador de calor HeatExchanger 1 em relação a variação da vazão mássica de água refrigerante da corrente Agua1.

Ainda analisando os sistemas de compressores e trocadores de calor que formam os estágios dos compressores, foi verificado o efeito da variação de vazão mássica de água na corrente refrigerante Agua1 (referente ao primeiro trocador de calor) sobre a potência do

segundo compressor da linha (Compressor_4 (1)). O resultado é apresentado na Figura 4.5 e é possível observar um comportamento inversamente proporcional.

Quanto maior a vazão de água refrigerante no trocador de calor anterior ao compressor, menor é a potência exigida do compressor para chegar e manter a pressão de $8 \text{ kg}_f.\text{cm}^{-2}$ da corrente de ar. Portanto, é necessário que a corrente de entrada do compressor esteja a mais fria possível para que o custo de energia no compressor seja menor.

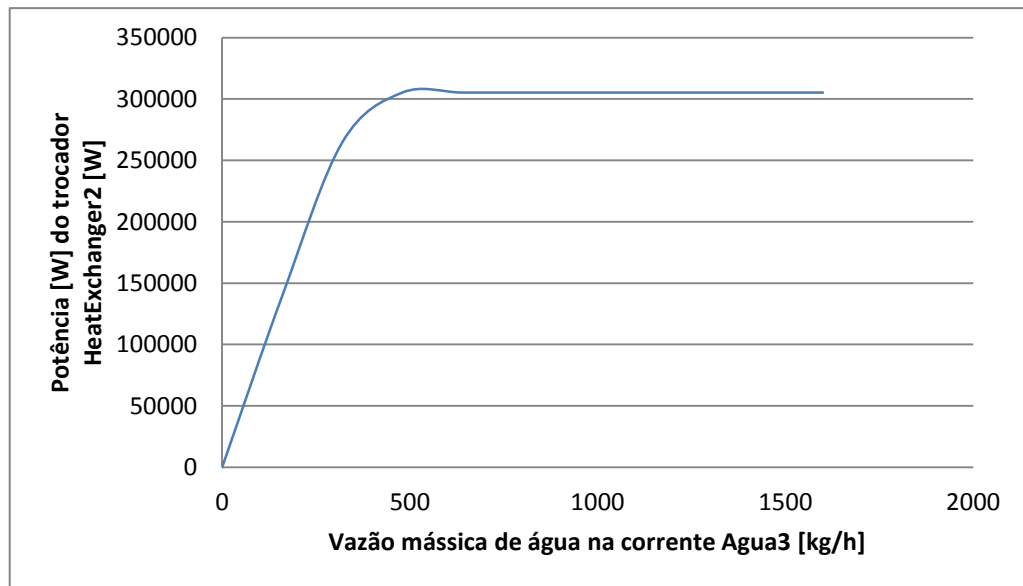


Figura 4. 4 - Potência do trocador de calor HeatExchanger 2 em relação a variação da vazão mássica de água refrigerante da corrente Agua3

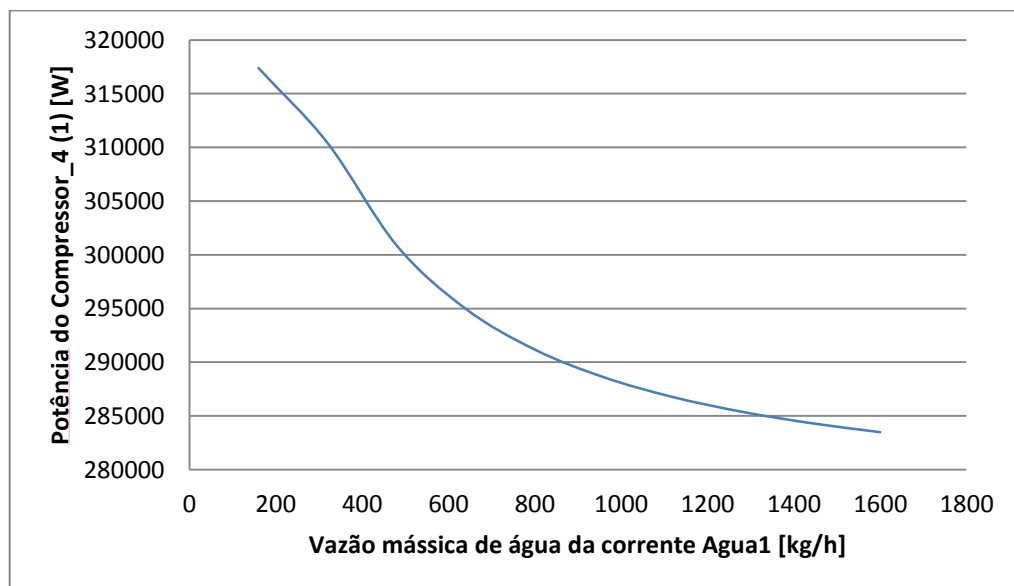


Figura 4. 5 - Potência do compressor em relação à variação da vazão mássica de água refrigerante da corrente Agua1

Levando em consideração que após determinada potência o compressor pode desligar, a manutenção da vazão de refrigerante do trocador de calor anterior é importante para impedir que ocorra desligamento dos equipamentos.

A Figura 4.6 apresenta de uma análise paramétrica de outro ponto da planta industrial, a coluna de adsorção simulado no software Scilab. Para demonstrar o comportamento da curva de forma mais clara foi traçada uma curva de tendência sobre a curva obtida para determinar a função mais próxima que representa o grupo de dados obtidos na simulação. A curva encontrada é uma suave função de segundo grau, sendo o coeficiente de determinação, $r^2=1$, tanto a equação quanto o r^2 é apresentado no gráfico.

Portanto, a relação entre a umidade da entrada não é linearmente proporcional à umidade da saída da coluna. Ou seja, o intervalo de umidade na entrada da coluna é ligeiramente maior que o intervalo de umidade na saída.

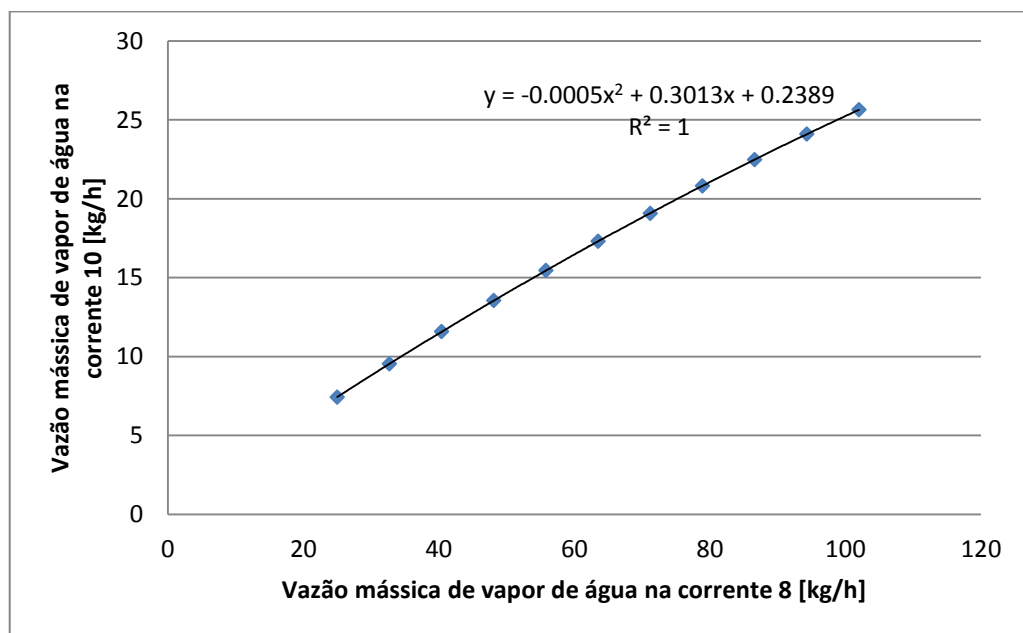


Figura 4. 6 – Vazão mássica de vapor saturado de água na corrente 10 em relação a variação de vazão mássico de vapor de água na corrente 8

E a última análise paramétrica realizada foi a avaliação do efeito da variação da vazão de refrigerante da corrente 6, ou seja, a variação de temperatura da corrente 8(2), sobre a umidade da corrente 10. A Figura 4.7 mostra a relação das variáveis. É possível observar, pela Figura 4.7, que quanto maior a vazão de água refrigerante, menor é a quantidade de vapor de água saturado na corrente 10, corrente de saída da coluna de adsorção. Isto está relacionado com a forte influência que a temperatura tem sobre a umidade ou quantidade de vapor de água do ar.

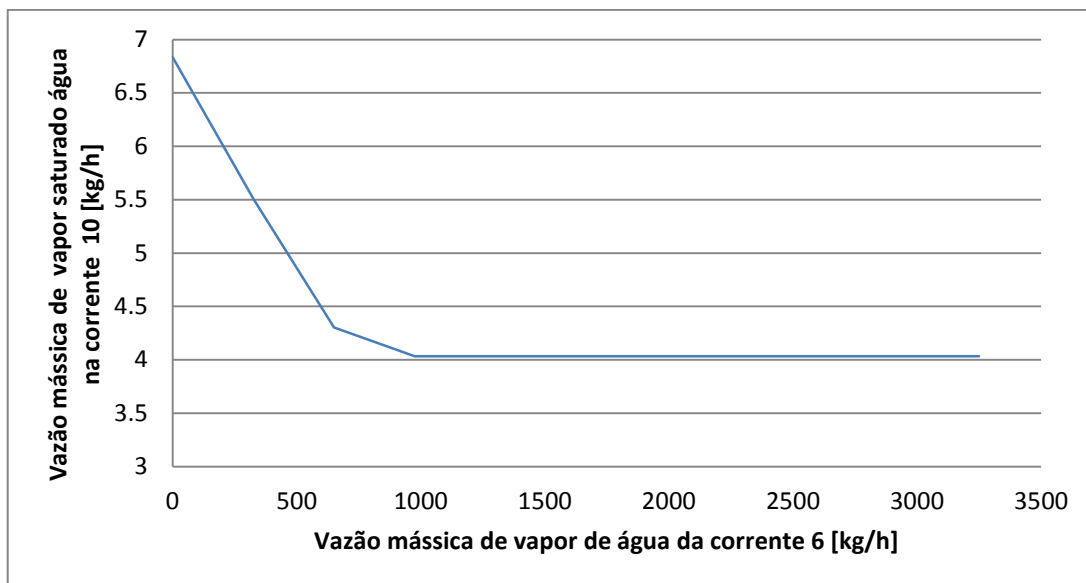


Figura 4. 7 – Vazão mássica de vapor saturado de água na corrente 10 em relação a variação da vazão mássica de água da corrente 6

4.4. Meta-modelos na forma de superfície de resposta

As análises paramétricas apresentadas no item 4.3 foram usadas como um estudo preliminar para a construção das superfícies de resposta. A metodologia adotada para o desenvolvimento das superfícies foi o planejamento de experimentos realizado no software STATISTICA e, logo após, a superfície de resposta no mesmo aplicativo. A escolha da superfície de resposta nesta etapa é justificada pela facilidade no desenvolvimento e o baixo esforço computacional.

Para o planejamento experimental foram feitos delineamentos composto central rotacional (DCCR), já que a adição de pontos axiais possibilita o ajuste dos dados a um modelo de segundo grau. O DCCR se trata de um delineamento composto central (DCC) ou planejamento composto central (PCC) com dois níveis originais, sendo 2^K pontos fatoriais + $2K$ pontos axiais + um número arbitrário de pontos centrais (RODRIGUES E IEMMA, 2009).

4.4.1. Efeito da umidade e temperatura do ar sobre a potência do compressor

Foi feito um delineamento composto central rotacional (DCCR) com 10 experimentos sendo duas réplicas no ponto central e dois pontos rotacionais. Para os níveis inferiores (-1) foram adotados os valores de 20 °C e 50,81 kg.h⁻¹ para a temperatura e vazão mássica de vapor de água, respectivamente. Para os níveis superiores (+1), os valores utilizados foram 40

°C e 163,26 kg.h⁻¹ para temperatura e vazão mássica de vapor de água, respectivamente. E, por fim, no nível central (0), para a temperatura foi selecionado 30 °C e para a vazão mássica de vapor de água 107,03 kg.h⁻¹. Estes valores foram selecionados de acordo com as restrições físicas do processo. Os pontos rotacionais para este DCCR são $\pm 1,41421$ e para o cálculo desses pontos foi utilizada a equação de codificação:

$$xi = \frac{Ei - E(0)}{(E(1) - E(-1))/2} \quad (4.1)$$

Para este planejamento os pontos calculados foram 20,1 °C e 34,9 °C para a temperatura da corrente Ar4 e 13,74 kg.h⁻¹ e 51,28 kg.h⁻¹ para a vazão mássica de vapor saturado de água na corrente Ar4. A Tabela 4.1 apresenta todos os valores, tanto codificados quanto não, das variáveis envolvidas.

Tabela 4. 1 - Delineamento Composto Central Rotacional (DCCR) para a umidade e temperatura do ar em relação a potência do primeiro compressor

Variáveis codificadas		Variáveis decodificadas		Y
X1	X2	T [°C]	Vazão H ₂ O Ar4 [kg/h]	Potência [W]
-1,00000	-1,00000	22,25	19,24	105237,88
-1,00000	1,00000	22,25	45,78	101595,82
1,00000	-1,00000	32,75	19,24	112417,68
1,00000	1,00000	32,75	45,78	117763,92
-1,41421	0,00000	20,10	32,51	99813,46
1,41421	0,00000	34,90	32,51	116648,59
0,00000	-1,41421	27,50	13,74	107731,32
0,00000	1,41421	27,50	51,28	106898,15
0,00000	0,00000	27,50	32,51	111113,69
0,00000	0,00000	27,50	32,51	111113,69

Os efeitos quadráticos de ambas as variáveis foram eliminados, assim como o efeito linear da variável X_2 por apresentarem um nível de significância, p , superior a 5%, valor estipulado para o DCCR como é mostrado na Tabela 4.2.

Tabela 4. 2 - Resumo das informações sobre a primeira superfície de resposta

Variável	Efeito	Coefficiente	p-valor
Intercepto	109033,4	109033,4	0,000000
X1	11789,1	5894,5	0,000014
X1X2	4494,2	2247,1	0,023935

A Figura 4.8 apresenta o gráfico de Pareto e mostra os efeitos que apresenta p com valor inferior a 5%.

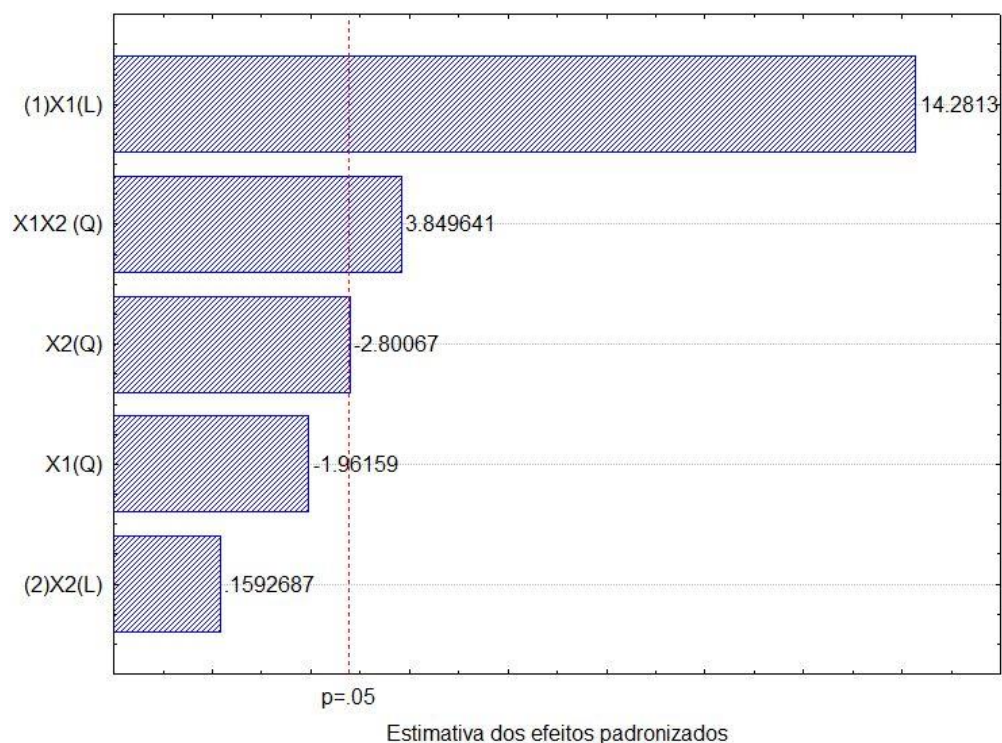


Figura 4. 8 - Gráfico de Pareto com apenas as variáveis analisadas no planejamento de experimentos para a primeira superfície de resposta

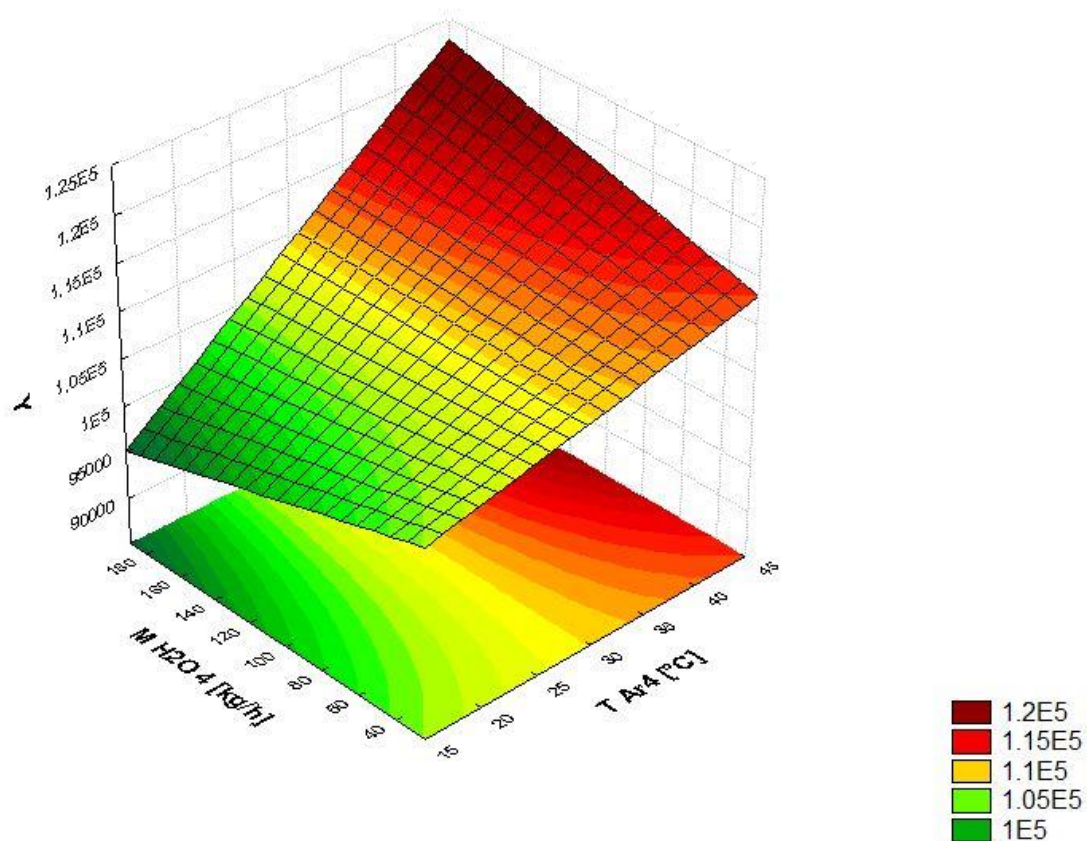


Figura 4. 9 - Superfície de resposta para as variáveis: Temperatura, Vazão de água, ambos do ar, e Potência do primeiro compressor

A Figura 4.9 mostra a superfície de resposta obtida a partir do planejamento indicado na Tabela 4.1, em que Y é a potência do primeiro compressor (W), T Ar4 é a temperatura da corrente de entrada Ar 4 e M H2O 4 é a vazão mássica de vapor de água saturado na corrente de entrada Ar 4. O maior valor de potência obtido foi quando se tem a combinação de alta temperatura e alta vazão mássica de vapor de água ou umidade. Assim como a menor potência obtida é referente ao efeito da combinação de menor temperatura e maior umidade da corrente. A umidade ou quantidade de vapor de água está diretamente relacionada com a temperatura. No ponto de menor potência do gráfico já existe a formação de fase líquida na corrente de ar. O modelo desenvolvido tem $R^2 = 0,94563$ e pode ser montado a partir dos coeficientes presentes na tabela a seguir.

Para a análise de flexibilidade foi utilizada a Figura 4.10 que mostra as curvas de nível da superfície de resposta apresentada. De acordo com CIIAGRO (2012), a média anual máxima de temperatura em Uberaba de janeiro de 1961 a maio de 2010 foi de aproximadamente 28°C e a mínima de 14 °C. Partindo dessa informação, pode-se considerar que a temperatura inicial do processo varia, aproximadamente, de 15 a 30°C.

O gráfico foi dividido em três regiões, a região 1 a que apresenta a menor potência do compressor e, portanto, menor gasto energético. Para o processo operar nesta região é necessário que o ar seja resfriado antes de entrar no processo, o que, de forma simplista, não significaria diminuição nos custos já que seria necessário o gasto com utilidades para este resfriamento.

A região 2 é equivalente a região de operação do processo simulado, claro que como a restrição de aproximadamente 90 kg.h^{-1} de vapor de água na corrente de ar, valor máximo de vapor de água saturado às condições de temperatura e pressão. Já, operar na região 3 seria inadequado, já que para a compressão da mesma massa de ar seria gasto mais com energia nos compressores.

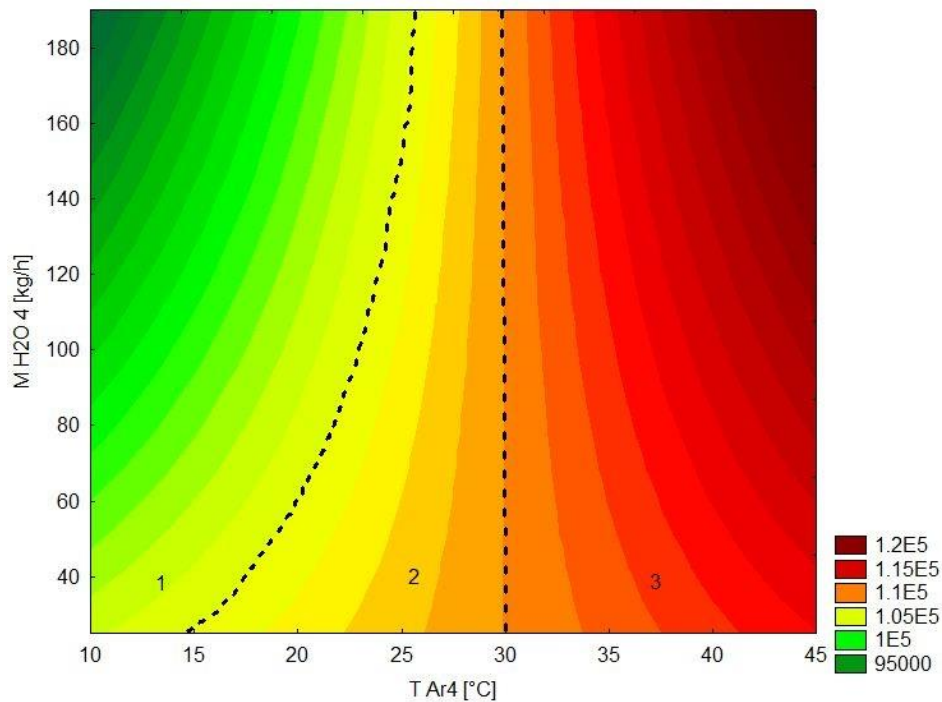


Figura 4. 10 - Curvas de nível para as variáveis: Vazão mássica de vapor saturado de água na corrente Ar 4, temperatura da corrente Ar 4 e Potência do primeiro compressor

4.4.2. Efeito da umidade do ar e vazão de refrigerante sobre a potência do segundo compressor

A segunda superfície de resposta construída foi feita a partir do efeito da vazão mássica de vapor de água na corrente Ar4 (X_1) e da vazão de refrigerante da corrente Agua1 (X_2) sobre a potência do segundo compressor da linha. Também foi feito um DCCR com 10

experimentos sendo 2 réplicas e 2 pontos rotacionais com $\alpha = \pm 1,41421$. Para a variável X_1 foram definidos para os níveis: 19,24 kg.h⁻¹, 32,51 kg.h⁻¹ e 45,78 kg.h⁻¹ para nível (-1), nível (0) e nível (+1), respectivamente. E para a variável X_2 , 325 kg.h⁻¹, 850 kg.h⁻¹ e 1375 kg.h⁻¹ para nível (-1), nível (0) e nível (+1), respectivamente. Para os pontos rotacionais, foram calculados para X_1 , 13,74 kg.h⁻¹ e 51,28 kg.h⁻¹, para $-\alpha$ e $+\alpha$, respectivamente. E para X_2 , 107,54 kg.h⁻¹ e 1592,46 kg.h⁻¹, idem. A Tabela 4.3 apresenta o planejamento codificado e os valores reais da potência obtidos pela simulação.

Tabela 4. 3 - Delineamento Composto Central Rotacional (DCCR) para a umidade do ar e vazão de refrigerante Água1 em relação a potência do segundo compressor

Variáveis codificadas		Variáveis decodificadas		Y
X1	X2	Vazão H ₂ O Ar4 [kg/h]	Vazão Água1 [kg/h]	Potência [W]
-1,00000	-1,00000	19,24	32,50	307191,07
-1,00000	1,00000	19,24	1375,00	282022,62
1,00000	-1,00000	45,78	32,50	310723,56
1,00000	1,00000	45,78	1375,00	285395,02
-1,41421	0,00000	13,74	850,00	286786,24
1,41421	0,00000	51,28	850,00	290141,57
0,00000	-1,41421	32,51	107,54	315982,88
0,00000	1,41421	32,51	1492,46	282394,2
0,00000	0,00000	32,51	850,00	289238,42
0,00000	0,00000	32,51	850,00	289238,42

O gráfico de Pareto apresentando na Figura 4.11 mostra os efeitos que apresenta p com valor inferior a 5%. De acordo com a figura, apenas os efeitos linear e quadrático de X_2 são significantes. Mas, quando os efeitos são eliminados um por vez, considerando como critério de eliminação o maior valor de p, o efeito linear de X_1 torna-se significativo.

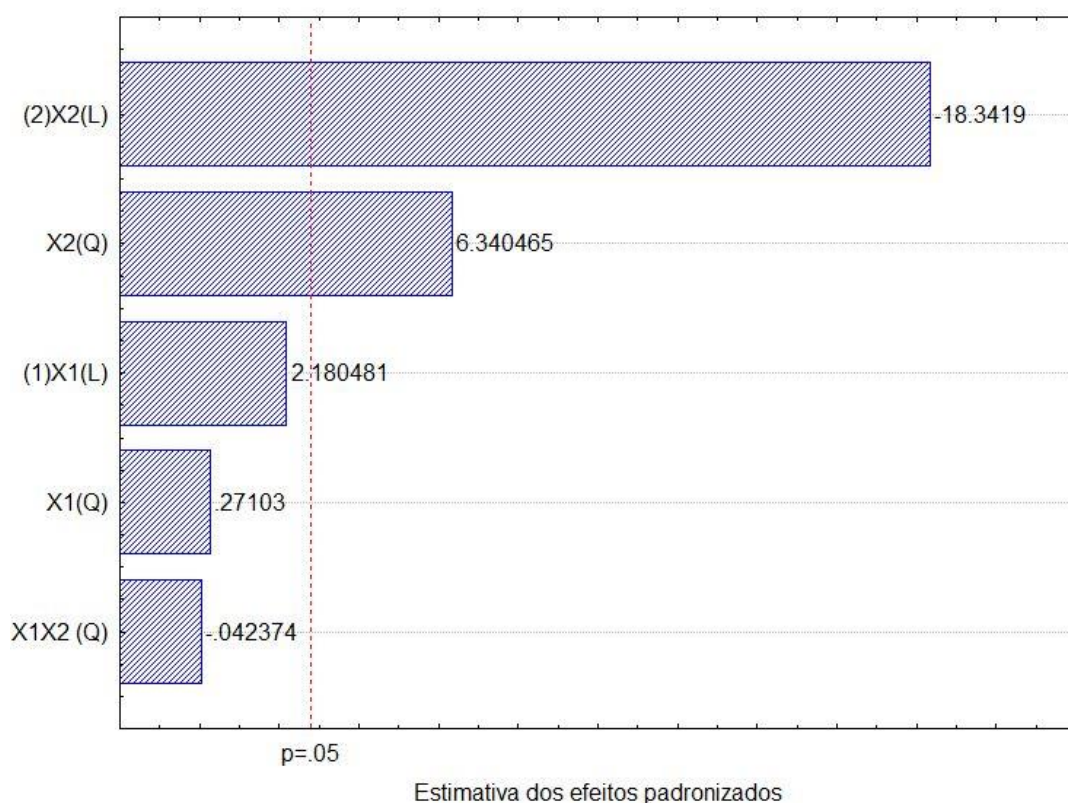


Figura 4. 11 - Gráfico de Pareto com apenas as variáveis analisadas no planejamento de experimentos para a primeira superfície de resposta

A Tabela 4.4 apresenta o resumo acerca dos valores dos efeitos e dos coeficientes e seus respectivos p-valores. Foi obtido $R^2 = 0,98962$ e o modelo pode ser montado a partir dos coeficientes que aparecendo na Tabela 4.4.

Tabela 4. 4 - Resumo das informações sobre a segunda superfície de resposta

Variável	Efeito	Coeficiente	p-valor
Intercepto	289512,1	289512,1	0,000000
X1	2912,5	1456,3	0,038245
X2	-24499,6	-12249,8	0,000001
X2X2	10998,3	5499,1	0,000159

A Figura 4.12 apresenta a superfície de resposta obtida. Como esperado, pelos efeitos que mais influenciam na resposta, a curva apresenta um comportamento quadrático em relação a vazão mássica de água usada como refrigerante no primeiro trocador de calor (Água1). A variável vazão de vapor de água na corrente Ar 4 (umidade) influencia em um

aumento suave da potência enquanto ocorre o aumento da umidade. Este efeito é melhor observado na Figura 4.13 em que é possível ver as inclinações em relação ao eixo.

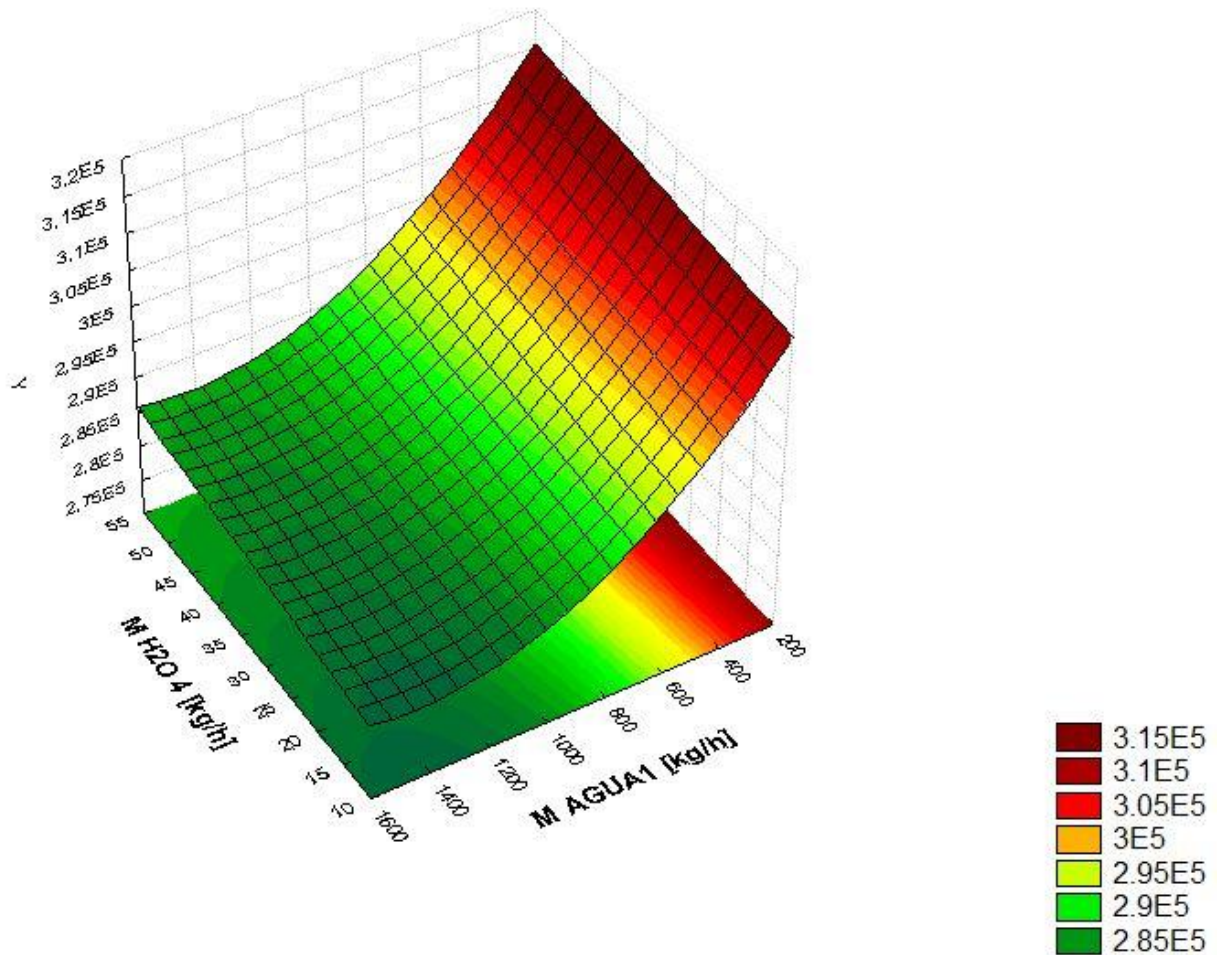


Figura 4. 12 - Superfície de resposta para as variáveis: Vazão de água da corrente Agua1, Vazão de vapor saturado de água da corrente Ar4 e Potência do segundo compressor

Sendo Y equivalente a potência do segundo compressor (W), M H2O equivalente à vazão mássica de vapor de água saturado na corrente Ar 4 e M AGUA1 equivalente a vazão mássica de água (líquido refrigerante) da corrente Agua1.

Na Figura 4.13 têm-se as curvas de níveis que indicam a relação da variação da potência do segundo compressor de acordo com a variação da vazão de água da corrente Agua1. É possível concluir com uma análise visual que quanto maior a quantidade de líquido refrigerante, menor será a potência exigida pelo segundo compressor. A vazão ótima está entre 1250 a 1600 kg.h⁻¹.

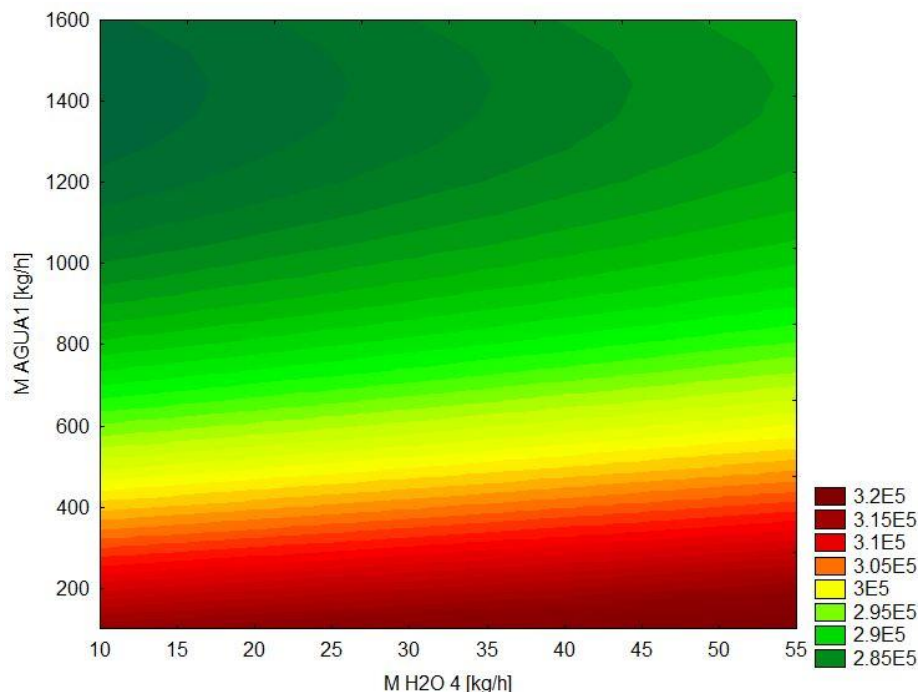


Figura 4. 13 - Curvas de nível para as variáveis: Vazão de água da corrente Agua1, Vazão de vapor saturado de água da corrente Ar4 e Potência do segundo compressor

4.4.3. Efeito da umidade do ar (corrente 8) e temperatura (corrente 8) sobre a umidade da corrente 10 (saída da coluna)

A terceira superfície de resposta é referente ao efeito que a umidade do ar (vazão mássica de vapor de água) da corrente 8 (X_1) e a temperatura também da corrente 8 (X_2) sobre a umidade da corrente 10 ou vazão mássica de vapor de água na corrente 10 (Y), sendo a corrente 10 a corrente de saída da coluna de adsorção.

Novamente foi feito um delineamento composto central rotacional (DCCR) com 10 experimentos sendo duas réplicas no ponto central e dois pontos rotacionais com os mesmos valores para α usando anteriormente. Para os níveis inferiores (-1) foram adotados os valores de 47,16 kg.h⁻¹ e 25 °C para a vazão mássica de vapor de água e temperatura, respectivamente. Para os níveis superiores (+1), os valores utilizados foram 251,52 kg.h⁻¹ e 55°C para a vazão mássica de vapor de água e temperatura, respectivamente. E, por fim, no nível central (0), para a vazão mássica de vapor de água 149,34 kg.h⁻¹ e 40°C para a temperatura. Os pontos rotacionais foram calculados e para a variável X_1 tem-se 4,84 kg.h⁻¹ e 293,84 kg.h⁻¹ e para X_2 , 18,79 °C e 61,36°C. A tabela 4.5 apresenta todos os valores codificados e não codificados do planejamento.

Tabela 4. 5 - Delineamento Composto Central Rotacional (DCCR) para a umidade do ar na corrente 8 e temperatura da corrente 8 sobre a umidade da corrente 10

Variáveis codificadas		Variáveis decodificadas		Y
X1	X2	Vazão H ₂ O 8 [kg/h]	Temp. [°C]	Vazão H ₂ O 10 [kg/h]
-1,00000	-1,00000	47,16	25,00	2,06
-1,00000	1,00000	47,16	55,00	9,38
1,00000	-1,00000	251,52	25,00	2,06
1,00000	1,00000	251,52	55,00	9,37
-1,41421	0,00000	4,84	40,00	1,54
1,41421	0,00000	293,84	40,00	4,62
0,00000	-1,41421	149,34	18,79	1,43
0,00000	1,41421	149,34	61,36	12,29
0,00000	0,00000	149,34	40,00	4,62
0,00000	0,00000	149,34	40,00	4,62

A Figura 4.14 apresenta o gráfico de Pareto com todos os efeitos relacionados com a variável de saída. O gráfico indica que apenas os efeitos linear e quadrático da variável X_2 são significativos, ou seja, são os únicos efeitos que tem p inferior a 5%.

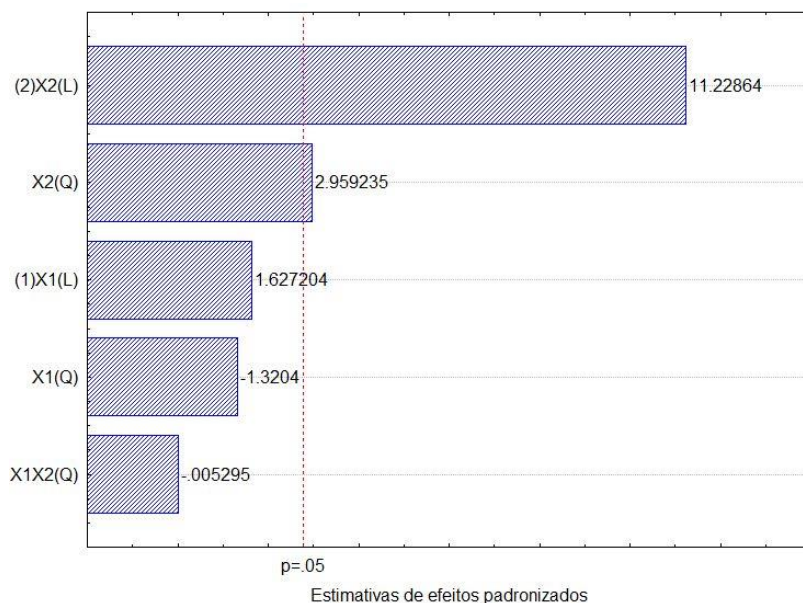


Figura 4. 14 - Gráfico de Pareto com apenas as variáveis analisadas no planejamento de experimentos para a terceira superfície de resposta

A superfície de resposta obtida é apresentada na Figura 4.15 e é possível notar um comportamento quadrático suave em relação à temperatura, a vazão mássica de vapor de água não influencia fortemente no resultado final. O modelo utilizado para a simulação da coluna de adsorção no *Scilab* que desconsiderou a variação de temperatura durante a secagem assim como é dito no projeto da planta industrial, então se a temperatura na entrada da coluna for superior a 35°C, automaticamente a saída o também será. Portanto, a umidade de saída da coluna é influenciada apenas pela umidade da entrada.

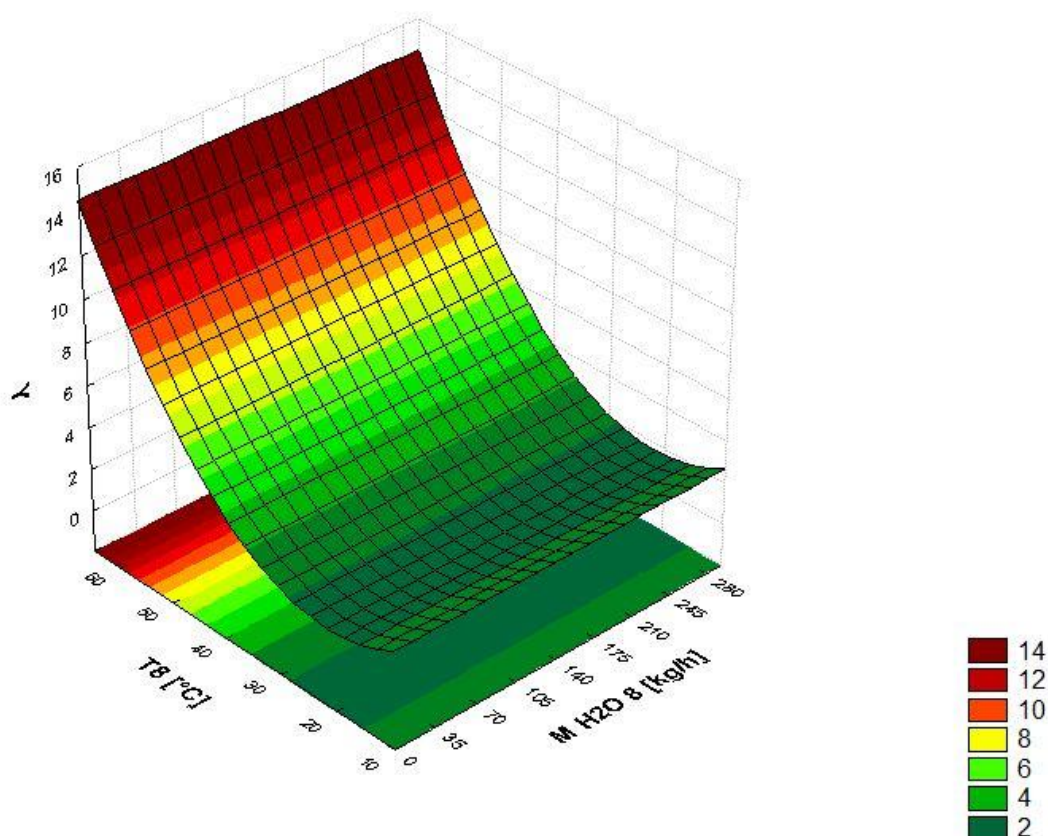


Figura 4. 15 - Superfície de resposta para as variáveis: Vazão de vapor saturado de água da corrente 8, temperatura corrente 8 e vazão de vapor de água na corrente 10

Por fim tem-se a Tabela 4.6 com o resumo sobre a superfície de resposta obtida, sendo Y equivalente à vazão de vapor de água saturado na corrente 10 (kg.h^{-1}), M H₂O 8 equivalente à vazão de vapor de água saturado na corrente 8 (kg.h^{-1}) e T8 a temperatura da corrente 8. de Todos os efeitos calculados apresenta p-valores inferiores a 5% e o modelo pode ser montado a partir dos coeficientes apresentados na tabela. O R^2 calculado foi de 0,94394.

Tabela 4. 6 - Resumo das informações sobre a terceira superfície de resposta

Variável	Efeito	Coefficiente	p-valor
Intercepto	3,953571	3,953571	0,000074
X2	7,497090	3,748545	0,000018
X2X2	3,113571	1,556786	0,009176

As marcações na Figura 4.16 foram feitas de acordo com a temperatura de entrada de projeto (35°C) e 45°C que seria a temperatura da corrente caso o compressor anterior a coluna de adsorção não esteja em operação. A área 2 é referente a região em que o projeto pode operar, caso apenas o compressor antes do secador não funcione. A área 1 tem a maior vazão mássica de vapor de água (umidade) na corrente 10 por ter a maior temperatura, mas dentro deste processo não é possível ter operação neste intervalo de temperatura. Já a área 3 temos a menor umidade, sendo a melhor faixa (menor umidade possível) a que a temperatura varia de aproximadamente 15°C a 28°C. Caso seja possível resfriar o ar, não apenas de 45°C a 35°, para temperaturas próximas a 28°C é possível que o ar de instrumentação esteja mais seco.

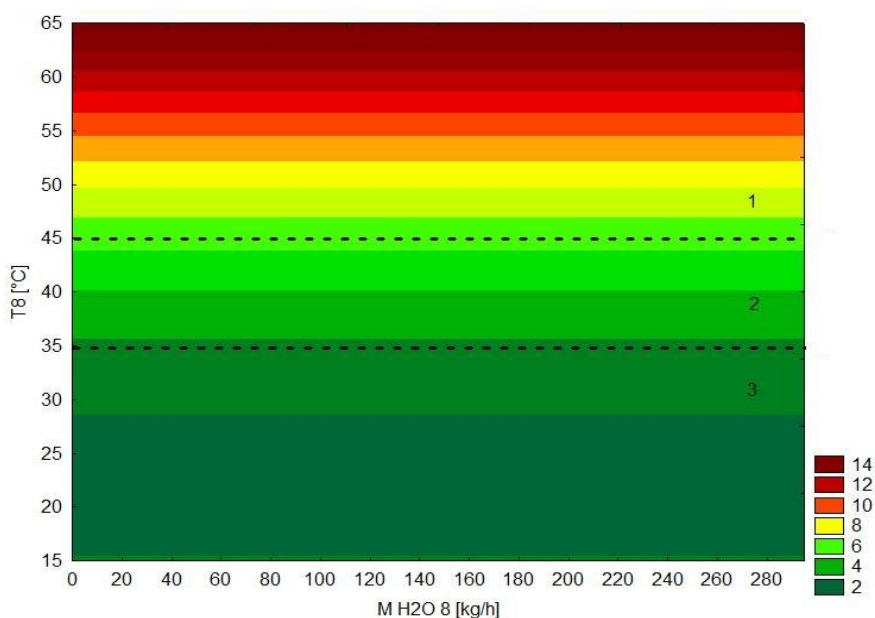


Figura 4. 16 - Curvas de nível para as variáveis: Vazão mássica de saturado de água na corrente 8, Temperatura da corrente 8 e a vazão mássica de vapor de água na corrente 10

A variável T8 é referente a temperatura em °C da corrente 8 enquanto M H2O 8 é o símbolo para a vazão mássica de vapor de água saturado na corrente 8. Já a variável Y, para esta superfície de resposta, é a vazão mássica de vapor de água saturado na corrente 10.

4.5. Otimização do processo usando meta-modelos

A otimização foi feita com a função SOLVER presente no software Microsoft Excel. Tal função é um suplemento que permite estimar raízes, máximos e mínimos de praticamente qualquer função, independente da quantidade de variáveis e com a adição de restrições é possível otimizar equações lineares e não lineares (MOURA, 2007). Os métodos de solução disponíveis são GRG Não Linear, utilizados para solucionar problemas suaves e equações lineares, LP Simplex, para a solução de problemas lineares e Evolutionary, que soluciona problemas não suaves. As otimizações apresentadas a seguir foram resolvidas com o método GRG Não Linear, já que as funções objetivo são não lineares.

4.5.1. Otimização do meta-modelo do efeito da umidade e temperatura do ar sobre a potência do compressor

Para este meta-modelo as incógnitas Y, X1 e X2 representam as variáveis: potência do primeiro compressor, vazão mássica de vapor saturado de água na corrente Ar4 e temperatura da corrente Ar4, respectivamente. A equação utilizada para a otimização foi o meta modelo encontrado quando a superfície de resposta foi construída a partir do planejamento experimental. Para a primeira superfície, a equação matemática do meta modelo é a equação (4.2) escrita a seguir. Como foi descrito acima, 94,56% dos dados experimentais obtidos na simulação se ajustam ao modelo.

$$Y = 109033,4 + 5894,5 X1 + 2247,1 X1X2 \quad (4.2)$$

A equação (4.2) está na forma codificada, como foi descrito no planejamento experimental da Tabela 4.1 e a Tabela 4.7 especifica os valores de cada variável e suas codificações dentro dos limites em que o modelo foi construído.

A equação (4.2) é equivalente à função objetivo e, como já foi comentado, é uma equação não linear por causa da multiplicação entre as variáveis X1 e X2. As restrições foram definidas de acordo com as equações (4.3) e (4.4). Estes valores foram selecionados de acordo com o comportamento físico do processo. Para a variável X1 foram selecionadas os limites do meta modelo, variando a temperatura de 15,76 a 44,24°C o que é concebível no clima da cidade de Uberaba.

Tabela 4. 7 – Descrição dos valores das variáveis de acordo com a codificação para a primeira superfície de resposta

Variável codificada	X1 [°C]	X2 [kg.h ⁻¹]
-1,41421	15,76	26,96
-1,00000	20,00	50,81
0,00000	30,00	107,03
1,00000	40,00	163,26
1,41421	44,24	187,10

$$-1,41421 \leq X1 \leq 1,41421 \quad (4.3)$$

$$-1,41421 \leq X2 \leq -1,00000 \quad (4.4)$$

Já para a variável X2 ocorre uma restrição. Como a umidade (ou quantidade de vapor de água saturado) é influenciada diretamente pela temperatura, os valores codificados apresentados na Tabela 4.7 estão correlacionados. Isto quer dizer, por exemplo para a primeira linha, a quantidade de 26,96 kg.h⁻¹ é equivalente a temperatura de 15,76 °C. Como a superfície de resposta foi construída desta forma, o intervalo de umidade ficou bastante restrito, já que neste ponto do processo a variação real é de 13,45 a 51,47 kg.h⁻¹ e não é possível colocar esta variação a não ser que a temperatura seja diminuída bruscamente. Sabendo disto, a restrição para a variável X2 varia de -1,41421 (26,96 kg.h⁻¹) e -1,00000 (50,81 kg.h⁻¹).

Foi calculado o mínimo da função objetivo utilizando o método de solução GRG Não Linear. O menor valor para a potência do primeiro compressor encontrado, sendo uma solução globalmente ideal, foi 103875,21 W. Para isto é necessário que o valor de X1 seja -1,41421, equivalente a 15,76°C, menor temperatura selecionada, e para X2 foi -1,00000, equivalente a 50,81 kg.h⁻¹.

4.5.2. Otimização do meta-modelo do efeito da umidade do ar e vazão de refrigerante sobre a potência do segundo compressor

Para este meta-modelo as incógnitas Y, X1 e X2 representam as variáveis: potência do segundo compressor, vazão mássica de vapor saturado de água na corrente Ar4 e vazão mássica de água na corrente Agua1, respectivamente. A função objetivo para esta otimização é a equação 4.5, descrita logo a baixo. A equação está codificada como foi descrito no planejamento experimental da Tabela 4.3. A Tabela 4.8 apresenta os limites de validação do modelo matemático, estando dentro deste intervalo é possível afirmar que 98,96% dos dados experimentais obtidos na simulação se ajustaram ao modelo encontrado.

$$Y = 289512.1 + 1456.3.X1 - 12249.8.X2 + 5499.1.X2X2 \quad (4.5)$$

A variável X1 é relativa à codificação da vazão mássica de vapor de água saturado na corrente Ar 4 e a X2 é a vazão mássica de água na corrente de refrigerante Agua1. Para a otimização especificadas as seguintes restrições:

$$-1,41421 \leq X1 \leq 1,41421 \quad (4.6)$$

$$-1,41421 \leq X2 \leq 1,41421 \quad (4.7)$$

Para a variável X1, o valor relacionado a -1,41421 é a quantidade mínima de vapor de água estipulada na análise paramétrica, o que é equivalente 0,5% de fração molar de vapor de água na corrente de ar e o valor de 1,41421 que é referente a quantidade máxima de vapor de água saturado que é possível ter no ar a temperatura e pressão da corrente. Já para a variável X2 foi escolhido os limites mínimo e máximo utilizados no planejamento experimental.

Tabela 4. 8 - Descrição dos valores das variáveis de acordo com a codificação para a segunda superfície de resposta

Variável codificada	X1 [kg.h ⁻¹]	X2 [kg.h ⁻¹]
-1,41421	13,74	107,54
-1,00000	19,24	325,00
0,00000	32,51	850,00
1,00000	45,78	1375,00
1,41421	51,28	1592,46

O método de solução escolhido foi o GRG Não Linear e foi calculado o mínimo valor de Y, que é a potência (W) do segundo compressor. Foi encontrada pelos menos uma solução ideal local que respeitou tanto a função objetivo quanto as restrições. O menor valor da potência do segundo compressor (Y) encontrado foi 280630,67 W e para termos este valor a variável X1 deve valer -1,41421, equivalente a 13,74 kg.h⁻¹ de vapor de água saturado na corrente Ar 4 e X2 vale 1,11380, o que equivale a 1434,74 kg.h⁻¹ de água da corrente Agua1.

4.5.3. Otimização do meta-modelo do efeito da umidade do ar (corrente 8) e temperatura (corrente 8) sobre a umidade da corrente 10 (saída da coluna)

As incógnitas Y, X1 e X2 representam as variáveis: vazão mássica de vapor saturado na corrente 10, vazão mássica de vapor saturado de água na corrente 8 e temperatura da corrente 8, respectivamente. Para a terceira superfície de resposta, temos a função objetivo descrita pela equação (4.8), sendo que a quantidade de vapor de água saturado na corrente 10 (Y) depende apenas da temperatura da corrente 8 (X2). A equação é não linear e, portanto, foi utilizado o método de solução GRG Não Linear. A Tabela 4.9 mostra os valores das variáveis codificadas e seus valores reais.

$$Y = 3,9536 + 3,7485 X2 + 1,5568 X2X2 \quad (4.8)$$

Tabela 4. 9 - Descrição dos valores das variáveis de acordo com a codificação para a terceira superfície de resposta

Variável codificada	X1 [kg.h ⁻¹]	X2 [°C]
-1,41421	4,84	18,79
-1,00000	47,16	25,00
0,00000	149,34	40,00
1,00000	251,52	55,00
1,41421	293,84	61,36

A partir da Tabela 4.9 foram estabelecidas as restrições para a otimização. Como a função objetivo é dependente apenas da variável X2, não é necessário especificar uma restrição para X1, já que sua variação não interfere na resposta Y (vazão mássica de vapor de água saturado na corrente 10). Então foi fixado o valor codificado de -1,3325 para X1 o que

equivale a $13,18 \text{ kg.h}^{-1}$, este valor para $X1$ é o valor da vazão mássica de vapor de água na corrente 8, corrente de saída do trocador de calor anterior a coluna de adsorção. Esta restrição está descrita pela equação (4.9).

$$X1 = -1,3325 \quad (4.9)$$

$$-0,33333 \leq X2 \leq 1,41421 \quad (4.10)$$

Já para a variável $X2$ foi escolhido o valor $-0,33333$, equivalente a temperatura de 35°C , que é a temperatura de projeto para a corrente 8, e o valor $1,41421$, que equivale a $61,36^\circ\text{C}$, este valor mais alto é para considerar algum problema nos trocadores de calor anteriores à coluna.

Neste caso, também foi calculado o mínimo da função objetivo e o menor valor encontrado, considerando que este resultado é pelo menos uma solução ideal local, foi $2,88 \text{ kg.h}^{-1}$ para os valores de $-1,3325$ ($13,18 \text{ kg.h}^{-1}$) para $X1$, já que este valor estava fixo, e $-0,33333$ (35°C) para $X2$, sendo este o menor valor de temperatura possível no sistema.

CAPÍTULO 5

Conclusões e Sugestões

Com este trabalho pode-se concluir que é possível simular uma planta industrial em operação com certo grau de precisão, se aproximando bastante do comportamento real com simuladores de processo, neste caso o simulador gratuito COCO. As limitações dos simuladores em termos de operações unitárias podem ser contornadas pela adição de novas operações, conhecidos seus modelos matemáticos, pela utilização do protocolo CAPE-OPEN. Neste trabalho, uma coluna de adsorção foi acrescentada ao simulador COCO, através da sua implementação em Scilab. O SOLVER do Microsoft Excel foi usado com sucesso para encontrar os pontos de ótimo dos meta-modelos desenvolvidos. Sua utilização é direta e descomplicada.

A manutenção dos trocadores de calor dos estágios dos compressores é fundamental para o bom funcionamento dos mesmos e também para a eficiência da coluna de adsorção. Os compressores funcionam melhor com temperaturas menores e dessa forma apresentam menores custos de energia para manter a pressão desejada.

Já a relação dos compressores com a coluna de adsorção se deve ao fato de que a umidade se relaciona fortemente com a temperatura, o que pode ser visto na primeira análise paramétrica, portanto, quanto mais baixa a temperatura, menor será a quantidade de vapor saturado de água na corrente de ar.

As condições de entrada do ar interferem sensivelmente no processo. Portanto é necessário que a planta industrial esteja apta a responder a estas variações. A resposta da planta industrial não é alterar as variáveis de entrada, de forma que estejam de acordo com o que foi especificado em projeto, antes de entrar no processo, mas sim o processo manter sua operacionalidade mesmo com as variações. Ou seja, os compressores da planta de compressão de ar comprimido devem ser capazes de operar mesmo quando a vazão mássica de vapor saturado de água é grande, o que não aconteceu na simulação, já que a potência dos compressores diminuiu com o aumento da umidade, já que há restrições físicas nesta operação unitária.

A primeira superfície de resposta mostra a evidente relação entre temperatura e quantidade de vapor de água saturado e o comportamento destas variáveis com a potência do primeiro compressor. O aumento de demanda da potência do compressor ocorre quando se

tem temperaturas altas e, conseqüentemente, altas umidades. A necessidade de menores potências ocorre quando as temperaturas e umidades são menores. Portanto, o melhor ponto de operação para este caso seria trabalhar com temperaturas baixas, o que nem sempre é possível. Na otimização desta superfície obteve-se os valores da 15,76°C para a temperatura e 50,81 kg.h⁻¹ para a vazão mássica de vapor de água saturado na corrente de ar.

A segunda superfície de resposta descreve o comportamento da potência do segundo compressor em relação a variação da umidade da corrente de entrada e da vazão de líquido refrigerante do primeiro trocador de calor. Usando esta superfície, mostrou-se que a vazão de refrigerante tem muito mais efeito sobre a potência do compressor do que a umidade, resultado diferente do que ocorre com o primeiro compressor. Na otimização, para obter a menor potência do segundo compressor, a quantidade de vapor de água saturado deve ser aproximadamente a 13,74 kg.h⁻¹, menor vazão mássica de vapor de água saturado a temperatura de 20°C e pressão atmosférica e a vazão de líquido refrigerante, que não foi possível determinar nas análises paramétricas em relação ao trocador de calor, é de 1434,74 kg.h⁻¹ de água.

Já na terceira superfície de resposta, tem-se o efeito da temperatura da corrente 8 sobre a vazão mássica de vapor de água saturado na corrente 10. Sendo a corrente 8, a corrente de entrada da coluna de adsorção, e a corrente 10, a corrente de saída da mesma. O efeito da temperatura é quadrático e na otimização o melhor resultado para a temperatura é 35°C que é equivalente a temperatura de projeto caso todos os trocadores de calor estejam funcionando sem nenhuma falha.

Finalmente, mostrou-se a viabilidade de se usar uma planta virtual, usando um simulador de processo, a fim de se obter modelos mais simples da planta real e com estes investigar a influência das variáveis de entrada, controláveis ou não, sobre o desempenho da planta e sobre as condições ótimas. Ou seja, foi possível verificar o quão flexível é a planta frente a mudanças ambientais e/ou operacionais.

Como sugestões para trabalhos futuros:

- Estudo mais detalhado dos métodos numéricos para a integração numérica da solução analítica do modelo para a coluna de adsorção.
- Modelo matemático para a coluna de adsorção que considere o balanço de energia, ou seja, a variação de temperatura ao longo da coluna apesar de não haver variação de temperatura dentro do secador por adsorção do projeto.

- Modelo para a coluna de adsorção que possibilite determinar o efeito que a entrada de água na fase líquida tem sobre a eficiência da coluna.
- Solução que possibilite o funcionamento dos compressores de ar independente do aumento de umidade do ar.

CAPÍTULO 6

Referências Bibliográfica

- AMORIN, J. A. de, Caracterização de uma coluna de sílica gel para desumidificação de ar. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Universidade Federal da Paraíba, 2007.
- AmsterCHEM. COCO – Cape Open to Cape Open Simulation Environment, disponível em: <<http://www.cocosimulator.org>>, acesso em: 21 de janeiro, 2013
- BAUR, R.; van BATEN, J.; KOOIJMAN, H., DREWITZ, W. Cross Platform Chemical Processes with CAPE-OPEN. NPT. v. 4, p-22-24, 2006.
- BERTOLDI, O. J. Investigação de estratégias de otimização de plantas virtuais usando os softwares COCO, Scilab e Excel. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Federal de Uberlândia, 2012.
- CALADO, V.; MONTGOMERY, D. C. Planejamento de Experimentos usando o Statistica. 1 ed. Rio de Janeiro, E-papers Serviços Editoriais, 2003. 260p.
- CIIAGRO, disponível em:
<<http://www.ciiagro.sp.gov.br/ciiagroonline/Quadros/QTmedPeriodo.asp>>, disponível em: 07 de dezembro, 2012.
- FOGLER, H. S. Elementos de Engenharia das Reações Químicas. 3 ed. Rio de Janeiro, LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2002, 892p.
- GUANGBIN, L.; YUANYANG, Z.; LIANSHENG, L. e PENGCHENG, S. Simulations and experiment research on wide ranging working process of scroll expander driven by compressed air. Applied Thermal Engineering. v. 30, p.2073-2079, 2010.
- GOLDSMAN, D.; NANCE, R. E.; WILSON, J.R. A Brief History of Simulation. Proceedings of the 2009 Winter Simulations Conference, p.310-313, 2009.
- GONÇALVES, R. V. Projeto Auxiliado por Computador de Processos Industriais Sustentáveis Usando os Softwares COCO e Scilab. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Uberlândia, 2011.
- GROSSMANN, I. E. e FLOUDAS, C. A. Active Constraint Strategy for Flexibility Analysis in Chemical Processes. Comput. Chem. Engng. v. 11, n. 6, p. 675-693, 1987.
- GROSSMANN, I. E. e SARGENT, R. W. H. Optimum Design of Chemical Plants with Uncertain Parameters. AIChE Journal. v. 24, n. 6, p.-1021-1028, 1978.
- HARTMANN, N.; VÖHRINGER, O.; KRUCK, C. e ELTROP, L. Simulation and analysis of different adiabatic Compressed Air Energy Storage plant configurations. Applied Energy. v.93, p. 541-548, 2012.

HowStuffWorks,, disponível em: < <http://carros.hsw.uol.com.br/supercompressores1.htm>>, acesso em 20 de novembro, 2012.

KOOIJMAN, H.; TAYLOR, R. e VAN BATEN, J. M. The ChemSep/COCO Casebook: Air Separation Unit. CACHE News, Winter 2007.

MANUAL do Ar Comprimido. 4 ed. Metalplan Airpower. 2010. 60p.

MOURA, L. F. de. Excel para Engenharia – Formas simples para resolver problemas complexos. Volume 1. São Carlos, Editora da Universidade Federal de São Carlos, 2007. 150p.

MSPC - Informações Técnicas, disponível em:
<http://www.mspc.eng.br/fldetc/arcompr_120.shtml visitado dia 21/11/2012>, acesso em 20 de novembro, 2012.

NAGEL, F.; STASCHEIT, J. e MESCHKE, G. A Numerical Simulation Model for Shield Tunnelling with Compressed Air Support. Geomechanik und Tunnelbau. v. 1, ed. 3, p. 222-228, 2008.

PARK, I. and KNAEBEL, K. S., Adsorption Breakthrough Behavior: Unusual Effects and Possible Causes, AIChE Journal, v. 38, n. 38, p. 660-670, 1992.

PERLINGEIRO, C. A. G. Engenharia de Processos. 1 ed. São Paulo, Edgard Blücher, 2005. 198p.

PERRY, R. H.; GREEN, D. W. Perry's chemical engineers' handbook. 8th. New York, McGraw-Hill, 2008.

RAJU, M. e KHAITAN, S. K. Modeling and simulation of compressed air storage in caverns: A case study of the Huntorf plant. Applied Energy. v.89, p.474-481, 2012.

RICE, R. G. e DO, D.D. Applied mathematics and modeling for chemical engineers. 1 ed. John Wiley & Sons, Inc. , 1995. 719p.

RODRIGUES, M. I.; IEMMA, A. F. Planejamento de Experimentos & Otimização de Processos. 2ed. Campinas, Casa do Espírito Amigo Fraternidade Fé e Amor, 2009. 357p.

SCILAB – Open source software for numeral computation, disponível em: <<http://www.scilab.org>>, acesso em: 21 de janeiro, 2013.

SEADER, J. D.; HENLEY, E., J. Separation Process Principles. 1 ed. New Jersey, John Wiley & Sons, 1998. 886p.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C. e ABBOTT, M. M. Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química. 5 ed. Livros Técnicos e Científicos Editora, 2000. 697p.

- SWANEY, R. E. e GROSSMANN, I. E. An Index for Operational Flexibility in Chemical Process Design. Part 1: Formulation and Theory. AIChE Journal. v. 31, n. 4, p. 621-630, 1985.
- TURTON, R. Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes. 2 ed. New Jersey, Prentice Hall PTR, 2003. 987p (Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences).
- VAN BATEN, J.M.; KOOIJMAN, H. e TAYLOR, R. Flowsheeting for Free with COCO. CACHE News, Winter 2007.
- VAN BATEN, J. M.; SZCZEPANSKI, R. A thermodynamic equilibrium reactor model as a CAPE-OPEN unit operation. Computer and Chemical Engineering. v. 35, p. 1251-1256, 2010.
- VAN BATEN, J. M. e PONS, M. Rapid Prototyping of Unit Operation Models Using Generic Tools and CAPE-OPEN. Resumo extendido, 6th US CAPE-OPEN Conference, AIChE Annual meeting, Nashville, 2009.

APÊNDICE 1

Códigos em Scilab da coluna de adsorção

Código utilizado para calcular as curvas da Figura 3.5

//Método de Trapezio Repetido

clc

clear

mode(-1)

lines(0)

funcprot(0)

//Cálculo de kca

Dab=0.0000000005 //m²/s

dp=0.005 //m

r= 0.25 // m raio da coluna

gama=1

mi_ar=0.00000174 //Pa.s

rho_ar=9.84 //kg/m³ Valor de projeto

phi=.4

A=%pi*r²; //Área transversal

Vazao_entrada= ((7598/3600)*(1/9.84));

U=Vazao_entrada/(A*phi); // velocidade intersticial

kc=((U*dp*rho_ar)/(mi_ar*(1-phi)*gama)^(1/2))*((mi_ar/(rho_ar*Dab))^(1/3))*(gama)*((1-phi)/phi)*(Dab/dp);

//kc = m/s

a=(6*(1-phi)/dp); //[m²/m³]

kca=a*kc

//kca= [1/s]

disp(kca);

vo=U; //m/s

epsilon=0.4;

K=29;

z=300;

c0=1 //mol/m³

x0=0.0;

csi=(kca*z)/vo;

a=0;

b= csi;

//Pontos para o método numérico

h=(b-a)/10;

x1=x0+1*h

```

x2=x0+2*h
x3=x0+3*h
x4=x0+4*h
x5=x0+5*h
x6=x0+6*h
x7=x0+7*h
x8=x0+8*h
x9=x0+9*h
x10=x0+10*h

```

```

t=0;
t0=(kca/(K*(1-epsilon)))*(t-(epsilon*z)/vo)
deff('y=f(b)', 'y=exp(-b)*exp(-t0)*besseli(0,2*sqrt(b*t0))');
In=(h/2)*(f(x0)+2*f(x1)+2*f(x2)+2*f(x3)+2*f(x4)+2*f(x5)+2*f(x6)+2*f(x7)+2*f(x8)+2*f(x9)+f(x10));
C1(1,1)=c0*(1-In)*0;

```

```

t=600;
t1=(kca/(K*(1-epsilon)))*(t-(epsilon*z)/vo)
deff('y=f(b)', 'y=exp(-b)*exp(-t1)*besseli(0,2*sqrt(b*t1))');
In=(h/2)*(f(x0)+2*f(x1)+2*f(x2)+2*f(x3)+2*f(x4)+2*f(x5)+2*f(x6)+2*f(x7)+2*f(x8)+2*f(x9)+f(x10));
C1(1,2)=c0*(1-In);

```

```

t=1200;
t2=(kca/(K*(1-epsilon)))*(t-(epsilon*z)/vo)
deff('y=f(b)', 'y=exp(-b)*exp(-t2)*besseli(0,2*sqrt(b*t2))');
In=(h/2)*(f(x0)+2*f(x1)+2*f(x2)+2*f(x3)+2*f(x4)+2*f(x5)+2*f(x6)+2*f(x7)+2*f(x8)+2*f(x9)+f(x10));
C1(1,3)=c0*(1-In);

```

```

t=1800;
t3=(kca/(K*(1-epsilon)))*(t-(epsilon*z)/vo)
deff('y=f(b)', 'y=exp(-b)*exp(-t3)*besseli(0,2*sqrt(b*t3))');
In=(h/2)*(f(x0)+2*f(x1)+2*f(x2)+2*f(x3)+2*f(x4)+2*f(x5)+2*f(x6)+2*f(x7)+2*f(x8)+2*f(x9)+f(x10));
C1(1,4)=c0*(1-In);

```

```

t=2400;
t4=(kca/(K*(1-epsilon)))*(t-(epsilon*z)/vo)
deff('y=f(b)', 'y=exp(-b)*exp(-t4)*besseli(0,2*sqrt(b*t4))');
In=(h/2)*(f(x0)+2*f(x1)+2*f(x2)+2*f(x3)+2*f(x4)+2*f(x5)+2*f(x6)+2*f(x7)+2*f(x8)+2*f(x9)+f(x10));
C1(1,5)=c0*(1-In);

```

```

t=3000;
t5=(kca/(K*(1-epsilon)))*(t-(epsilon*z)/vo)
deff('y=f(b)', 'y=exp(-b)*exp(-t5)*besseli(0,2*sqrt(b*t5))');
In=(h/2)*(f(x0)+2*f(x1)+2*f(x2)+2*f(x3)+2*f(x4)+2*f(x5)+2*f(x6)+2*f(x7)+2*f(x8)+2*f(x9)+f(x10));

```

```

C1(1,6)=c0*(1-In);

t=3600;
t6=(kca/(K*(1-epsilon)))*(t-(epsilon*z)/vo)
deff('y=f(b)', 'y=exp(-b)*exp(-t6)*besseli(0,2*sqrt(b*t6))');
In=(h/2)*(f(x0)+2*f(x1)+2*f(x2)+2*f(x3)+2*f(x4)+2*f(x5)+2*f(x6)+2*f(x7)+2*f(x8)+2*f(x9)+f(x10));
C1(1,7)=c0*(1-In);

t=4200;
t7=(kca/(K*(1-epsilon)))*(t-(epsilon*z)/vo)
deff('y=f(b)', 'y=exp(-b)*exp(-t7)*besseli(0,2*sqrt(b*t7))');
In=(h/2)*(f(x0)+2*f(x1)+2*f(x2)+2*f(x3)+2*f(x4)+2*f(x5)+2*f(x6)+2*f(x7)+2*f(x8)+2*f(x9)+f(x10));
C1(1,8)=c0*(1-In);

t=4800;
t8=(kca/(K*(1-epsilon)))*(t-(epsilon*z)/vo)
deff('y=f(b)', 'y=exp(-b)*exp(-t8)*besseli(0,2*sqrt(b*t8))');
In=(h/2)*(f(x0)+2*f(x1)+2*f(x2)+2*f(x3)+2*f(x4)+2*f(x5)+2*f(x6)+2*f(x7)+2*f(x8)+2*f(x9)+f(x10));
C1(1,9)=c0*(1-In);

t=5400;
t9=(kca/(K*(1-epsilon)))*(t-(epsilon*z)/vo)
deff('y=f(b)', 'y=exp(-b)*exp(-t9)*besseli(0,2*sqrt(b*t9))');
In=(h/2)*(f(x0)+2*f(x1)+2*f(x2)+2*f(x3)+2*f(x4)+2*f(x5)+2*f(x6)+2*f(x7)+2*f(x8)+2*f(x9)+f(x10));
C1(1,10)=c0*(1-In);

t=6000;
t10=(kca/(K*(1-epsilon)))*(t-(epsilon*z)/vo)
deff('y=f(b)', 'y=exp(-b)*exp(-t10)*besseli(0,2*sqrt(b*t10))');
In=(h/2)*(f(x0)+2*f(x1)+2*f(x2)+2*f(x3)+2*f(x4)+2*f(x5)+2*f(x6)+2*f(x7)+2*f(x8)+2*f(x9)+f(x10));
C1(1,11)=c0*(1-In);

disp(C1);

T=0:600:6000;

plot(T,C1);
hl=legend(['z=0.00001 m'; 'z=0.25 m'; 'z=0.5 m'; 'z=1 m'; 'z=2 m'; 'z=3 m']);

```

Código utilizado dentro da operação Secador por Adsorção utilizando o protocolo CAPE-OPEN


```

//Código com modelagem da coluna de adsorção (secador)
//Coluna de 3m de comprimento e raio de 0.25 m
clc
clear
mode(-1)
lines(0)
funcprot(0)

//Primeira parte
//Cálculo do kca
Dab=0.0000000005 //m^2/s
dp=0.005 //m
r= 0.25 // m raio da coluna
gama=1
mi_ar=0.00000174 //Pa.s
rho_ar=9.84 //kg/m^3 Valor de projeto
phi=.4
A=%pi*r^2; //m^2 área transversal da coluna
Vazao_entrada= ((7598/3600)*(1/9.84));
U=Vazao_entrada/(A*phi); // velocidade intersticial
//Cálculo do kc
kc=((U*dp*rho_ar)/(mi_ar*(1-phi)*gama)^(1/2))*((mi_ar/(rho_ar*Dab))^(1/3))*(gama)*((1-phi)/phi)*(Dab/dp);
//kc = [m/s]
ac=(6*(1-phi)/dp);
kca=ac*kc
//kca= [1/s]

//Segunda parte
//Método numérico de Trapézio Repetido para integração
MM_ar=29; // kg/mol
MM_agua=18; // kg/mol
rho_agua=1; // kg/m3
F=getFeedProp(1,"totalFlow");// mol/s
x1=getFeedProp(1, "fraction"); //Gera as duas frações, primeira do ar e a segunda do vapor de água
P=getFeedProp(1,"pressure");
T=getFeedProp(1,"temperature");
h1=F*x1(1,2);
h2=(F*x1(1,1)*(MM_ar/rho_ar)+F*x1(1,2)*(MM_agua/rho_agua));
c0=h1/h2; //concentração inicial, considerando a umidade presente na corrente 8

disp(c0);

vo=U; //m/s
epsilon=0.4;
K=29;
z=300; //cm z0, início da coluna
csi= (kca*z)/vo;
a=0;

```

```

b=csi;
w0=0;
//Pontos para o método numérico
h=(b-a)/10;
w1=w0+1*h
w2=w0+2*h
w3=w0+3*h
w4=w0+4*h
w5=w0+5*h
w6=w0+6*h
w7=w0+7*h
w8=w0+8*h
w9=w0+9*h
w10=w0+10*h

```

```

t=1500; //tempo necessário para que haja adsorção de, aproximadamente, 60 a 70% da
umidade
t1=(kca/(K*(1-epsilon)))*(t-(epsilon*z)/vo)
deff('y=f(b)', 'y=exp(-b)*exp(-t1)*besseli(0,2*sqrt(b*t1))');
In=(h/2)*(f(w0)+2*f(w1)+2*f(w2)+2*f(w3)+2*f(w4)+2*f(w5)+2*f(w6)+2*f(w7)+2*f(w8)+2
*f(w9)+f(w10));
C=c0*(1-In);

```

```

disp(C); // concentração final na corrente 10

```

```

h3=C*(MM_ar/rho_ar)*F*x1(1,1);
h4=1-C*(MM_agua/rho_agua);
f3=h3/h4; //mol/s, vazão da corrente 10
f1=F*x1(1,1); //mol/s de ar
f=f1+f3;
Ftot=sum(f);
x3=[1-(f3/Ftot),f3/Ftot];
p2=P-101325; //Pa, pressão de saída considerando queda de pressão de 1kgf/cm^2
f4=F*x1(1,2)-f3; // mol/s, vazão de água retida na sílica-gel
Fvapor=sum(f4);
disp(Fvapor);
x4=[0,f4/f4];

```

```

setProduct(1,Ftot ,x3,"pressure" ,p2, "temperature",T);
setProduct(2,Fvapor ,x4,"pressure" ,p2, "temperature",T);

```