

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

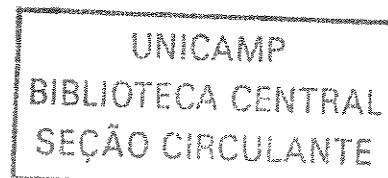
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

Integração de Processos Químicos Contínuos em Tempo Real: Estudo de Caso
para Fornos Rotativos de Incineração

Eduardo Thomaz Inglez de Souza
Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

Tese de Doutorado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos
requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Campinas - São Paulo
Julho de 2004



| | |
|-----------|-------------------------------------|
| NIDADI | pt. |
| • CHAMADA | F/UNICAMP |
| So89i | |
| EX | |
| TOMBO | BCI 61389 |
| PROC. | 61 86-05 |
| C | <input type="checkbox"/> |
| D | <input checked="" type="checkbox"/> |
| PREÇO | 11.00 |
| DATA | 04-1-05 |
| Nº CPD | |

B.b Id 335864

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

So89i

Souza, Eduardo Thomaz Inglez de

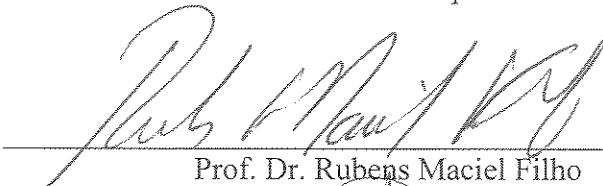
Integração de processos químicos contínuos em tempo real:
estudo de caso para fornos rotativos de incineração. / Eduardo
Thomaz Inglez de Souza.--Campinas, SP: [s.n.], 2004.

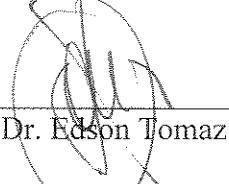
Orientador: Rubens Maciel Filho.

Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de Campinas,
Faculdade de Engenharia Química.

1. Controle de processo. 2. Otimização. 3. Incineração. 4.
Resíduos industriais. 5. Modelamento Matemático. I. Maciel Filho,
Rubens. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de
Engenharia Química. III. Título.

Tese de Doutorado defendida por Eduardo Thomaz Inglez de Souza e aprovada em 16 de julho de 2004 pela banca examinadora constituída pelos doutores:


Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

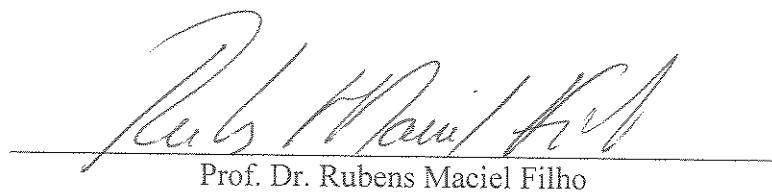

Prof. Dr. Edson Tomaz


Dr. Eduardo Coselli Vasco de Toledo


Prof. Dr. Paulo Ignácio Fonseca de Almeida


Prof. Dr. Roberto Guardani

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia Química.



Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

Agradecimentos

Aos colegas de laboratório e companheiros de profissão que nunca se furtaram em compartilhar seus conhecimentos, o que permitiu melhorar e incorporar neste trabalho os anos de pesquisa do LOPCA e do LDPS.

Ao técnicos, em especial ao amigo Cristiano, que fazem com que os alunos dediquem seus esforços exclusivamente na solução de seus problemas de pesquisa.

Ao professor Edson Tomás que desde o início desta trajetória em 1998, nos meus primeiros passo como aluno de Mestrado, acompanhou e muito contribuiu para o presente trabalho.

Em especial ao professor Rubens por ser mais que um orientador, e que nestes últimos 6 anos me ensinou e me deu oportunidades além daquelas que são oferecidas em uma Universidade.

Aos meus pais Eduardo e Cidália, meus primeiros professores, que nunca mediram esforços e carinho em todos os momentos da minha vida.

À minha esposa Liliane pelos bons momentos, alegria e amor que ela tem me trazido, diariamente, desde 16 de novembro de 2001.

Resumo

Esta Tese de Doutorado está comprometida com a aplicação de técnicas computacionais que permitam auxiliar a integração de processos químicos contínuos em tempo real. Para tal faz-se necessário um estudo de caso, que para este trabalho foi adotado um forno rotativo para incineradores de resíduos sólidos, cujas características são simuladas por meio de um modelo matemático. O objetivo principal é estudar o comportamento do processo em camadas, uma de controle avançado e outra para otimização. Sendo que a de otimização dividi-se em duas: processo e produção.

Os controladores utilizados foram os tradicionais DMC (dynamic matrix control) e GPC (generalized predictive control), mais duas versões não lineares baseadas nestes. O primeiro destes controladores não lineares usa a estrutura do DMC, entretanto o modelo preditivo da dinâmica do processo dá-se por uma rede neural, a qual incorporou o comportamento não linear do modelo matemático do processo. O outro controlador não linear usa uma rede neural para predizer os parâmetros de um modelo de primeira ordem com tempo morto. Uma vez que estes parâmetros são atualizados tem-se um modelo dinâmico preditivo não linear. Com a finalidade de comparar a performance destes controladores avançados, um controlador PID é usado como referência, já que é o padrão para este tipo de processo. As leis de controle, que são problemas de otimização linear e não linear, são resolvidas com um algoritmo S.Q.P.

A otimização da produção refere-se ao planejamento e controle, sendo que a modelagem obtida resulta em um problema linear com restrições também deste tipo. Sua resolução dá-se por meio de um algoritmo SIMPLEX.

Quanto ao processo tem-se um problema de otimização não linear, cuja meta é calcular as vazões de combustível e ar secundário a partir de variações na vazão de alimentação do resíduo sólido, e seu respectivo poder calorífico. O otimizador visa minimizar o consumo do combustível auxiliar, respeitando restrições ambientais e operacionais, explicitadas na temperatura da câmara de combustão. Esta camada hierárquica faz uso do mesmo algoritmo S.Q.P mencionado acima e uma alternativa baseada em programação genética, para se obter os resultados desejados. O otimizador tem

duas possibilidades para simular o processo: um modelo determinístico e uma rede neural baseada neste modelo.

Os resultados mostraram que os controladores lineares (DMC e GPC) são robustos, estáveis e com tempo de processamento numérico mais que suficientes para integra-los em tempo real. Os controladores não lineares ficam restritos a processos cujas dinâmicas não sejam muito rápidas, na ordem de 30 segundos, após perturbação. Estas afirmações estão baseadas em controladores monovariados.

A otimização da produção por ser linear, não apresentou problemas de convergência, tão pouco no tempo de processamento computacional. A otimização do processo também não foi problemática, excesso quando se usava o algoritmo genético com o modelo determinístico para a otimização.

A integração das partes envolvidas funcionou com muita robustez, fornecendo uma ferramenta valiosa para o desenvolvimento de processos químicos contínuos em tempo real.

Abstract

This Ph.D. Thesis has been committed in applying computational techniques that allow helping continuous chemical processes integration on-line. Thus, a case study has been necessary and for this work rotary kiln incineration process was selected, which characteristics are simulated by a mathematical model. The main goal is to understand the behavior of the process in layers, one for advanced control strategies and other for optimization. Being the optimization layer divided in two: process and production planning.

The applied controllers have been the traditional DMC (dynamic matrix control) and GPC (generalized predictive control), plus two extra nonlinear versions based on those. The former nonlinear controller uses the DMC framework, however the predictive model has been obtained by means of neural network, which has incorporated the nonlinear behavior of the numerical model. The latter nonlinear controller uses a neural network to predict the parameters of a first order model with time delay. Since these parameters are updated online one has a nonlinear dynamic predictive model. In order to compare the performance of these advanced controllers, a PID is used as a reference, because it has been the industrial standard for this kind of process. The control laws, that can be linear and nonlinear optimization problems, have been solved with a S.Q.P (sequential quadratic programming) algorithm.

The production optimization is referred to the production planning of the unit, being the resulting model a linear problem, as well as its constraints. Its resolution has been carried out by a SIMPLEX algorithm.

Concerning the process one has a nonlinear optimization problem, which goal is to compute fuel and air flow rates starting from solid residue inlet flow rate and its calorific power. The optimizer seeks to minimize the fuel consumption, respecting environmental and operational constraints, expressed by the combustion chamber temperature. This layer makes use of the same aforementioned S.Q.P, and a second strategy based on genetic algorithms. The optimizer has two possibilities to simulate the process: a deterministic and a neural network model.

The results have shown that the linear controllers (DMC and GPC) are robust, stables and with processing time fast enough to be used online. The nonlinear controllers

are restricted to process with dynamics not too quick, because a few seconds are sometimes necessary to complete then numerical computations. Such statements have been based on monovariate controllers.

Since the production optimization has a linear framework, it has not presented convergence difficulties, as well as long numerical processing time. The process optimization has not shown problems, except when the genetic algorithm was applied with the deterministic model to optimize the process.

The integration has worked robustly, supplying a precious tool to continuous chemical process development online and in real time.

Sumário

| | |
|---|------|
| Agradecimentos | i |
| Resumo | ii |
| Abstract | iv |
| Sumário | vii |
| Lista de Figuras | xiii |
| Lista de Tabelas | xxii |
| Nomenclatura | xxv |
| Capítulo 1: Introdução | 1 |
| 1.1 Introdução | 2 |
| 1.2 Processo de incineração | 5 |
| 1.3 Comentários | 6 |
| 1.4 Organização da Tese | 7 |
| Capítulo 2: Revisão Bibliográfica | 9 |
| 2.1 Incineração em fornos rotativos | 10 |
| 2.2 Definição do procedimento numérico | 21 |
| 2.3 Problemas de Otimização | 28 |
| 2.4 Controle de processos químicos | 31 |
| 2.4.1 Controle “feedback” | 32 |
| 2.4.2 Controle preditivo | 35 |
| 2.4.3 DMC | 40 |
| 2.4.4 MAC | 43 |
| 2.4.5 GPC | 44 |
| 2.4.6 Controle preditivo não linear | 48 |
| 2.4.7 Modelos fenomenológicos e empíricos | 49 |

| | |
|--|-----------|
| 2.4.8 Rede neurais aplicadas ao controle de processos químicos | 52 |
| 2.4.9 Lógica Fuzzy | 53 |
| 2.4.10 Outras Formas de Controle Não Linear | 54 |
| 2.4.11 Considerações finais | 55 |
| 2.5 Redes Neurais | 56 |
| 2.5.1 Perceptron | 58 |
| 2.5.2 ADALINE e MADALINE | 60 |
| 2.5.3 Retropropagação | 63 |
| 2.5.4 Gradientes descendentes com momento | 70 |
| 2.5.5 Retropropagação resiliente | 71 |
| 2.5.6 Gradientes conjugados | 71 |
| 2.5.7 Algoritmos Quasi-Newton | 73 |
| 2.5.8 Levenberg-Marquardt | 74 |
| 2.5.9 Outros aspectos | 76 |
| 2.5.10 Outros tipos de rede. | 77 |
| 2.6 Otimização | 78 |
| 2.6.1 Programação quadrática seqüencial | 79 |
| 2.6.2 Algoritmos Genéticos | 81 |
| 2.6.3 Comentários | 92 |
| 2.7 Integração em tempo real | 94 |
| 2.8 Conclusões | 96 |
| Capítulo 3: Modelos Matemáticos | 99 |
| 3.1 Modelagem Matemática do incinerador | 100 |
| 3.2 Mudança de coordenadas | 100 |
| 3.2.1 Balanços de energia. | 102 |

| | |
|--|-----|
| 3.2.2 Balanço de quantidade de movimento. | 102 |
| 3.2.3 Balanço de massa por componente. | 103 |
| 3.3 Condições de contorno e iniciais | 103 |
| 3.3.1 Leito sólido | 104 |
| 3.3.2 Parede | 106 |
| 3.3.3 Região gasosa | 107 |
| 3.4 Radiação térmica | 111 |
| 3.4.1 Superfície sólida (leito sólido ou parede interna) | 112 |
| 3.4.2 Região gasosa. | 113 |
| 3.4.3 Fatores de forma. | 115 |
| 3.5 Discretização do modelo | 126 |
| 3.5.1 Diferenças finitas | 126 |
| 3.5.2 Aplicando diferenças finitas ao modelo matemático | 127 |
| 3.5.3 Balanço de energia na região gasosa | 130 |
| 3.5.4 Balanço de energia no refratário | 133 |
| 3.5.5 Balanço de energia no leito sólido | 134 |
| 3.5.6 Balanço de massa por componente | 137 |
| 3.5.7 Balanço da quantidade de movimento | 138 |
| 3.5.8 Condições de contorno | 140 |
| 3.5.9 Comentários Finais | 143 |
| 3.6 Modelagem Matemática do Planejamento da Produção | 143 |
| 3.6.1 Variáveis do processo | 146 |
| 3.6.2 Parâmetros Operacionais | 147 |
| 3.6.3 Modelo Matemático | 147 |
| 3.6.4 Restrições | 149 |

| | |
|---|-----|
| 3.6.5 Problema de Programação Linear | 151 |
| 3.7 Otimização | 152 |
| 3.8 Controladores não Lineares | 154 |
| 3.9 Estruturas propostas para Integração em Tempo Real | 158 |
| 3.10 Conclusões | 160 |
| Capítulo 4: Resultados e discussão | 163 |
| 4.1 Introdução | 164 |
| 4.2 Estudo de caso: Forno Rotativo para Incinerador de Resíduos Sólidos | 164 |
| 4.3 Estado estacionário | 167 |
| 4.4 Dinâmica do sistema | 174 |
| 4.5 Planejamento e controle da produção | 182 |
| 4.6 Validação das redes neurais | 195 |
| 4.7 Otimização | 206 |
| 4.8 Controle do processo | 214 |
| 4.9 Integração em tempo real | 239 |
| 4.10 Esforços computacionais | 250 |
| 4.11 Conclusões | 252 |
| Capítulo 5: Conclusões e Trabalhos Futuros | 253 |
| 5. Conclusões e Trabalhos Futuros | 254 |
| 5.1 Conclusões | 254 |
| 5.2 Trabalhos Futuros | 256 |
| Referências Bibliográficas | 257 |
| Apêndice A: Combustíveis e Combustão | 263 |
| A.1 Tipos de combustíveis e reações de combustão | 264 |
| A.2 Combustão | 273 |

| | |
|---|-----|
| A.2.1 Cinética de combustão | 280 |
| Apêndice B: Validação do Algoritmo Genético | 287 |
| B.1 Validação do algoritmo | 288 |
| B.1.1 Exemplo 1 | 288 |
| B.1.2 Exemplo 2 | 288 |
| B.1.3 Exemplo 3 | 289 |
| B.1.4 Exemplo 4 | 289 |
| Apêndice C: Fluxograma de Execução do Integrador em Tempo Real | 291 |
| Apêndice D: Desenvolvimento Detalhado da Modelagem Matemática | 295 |
| D.1 Modelagem Matemática do incinerador | 296 |
| D.1.1 Balanço diferencial de energia para a região gasosa. | 296 |
| D.1.1.1 Modelo bidimensional | 304 |
| D.1.1.2 Modelo unidimensional | 304 |
| D.1.2 Balanço diferencial de energia para o refratário | 304 |
| D.1.2.1 Modelo bidimensional | 306 |
| D.1.2.2 Modelo unidimensional | 307 |
| D.1.3 Balanço diferencial de energia para o leito sólido. | 307 |
| D.1.3.1 Modelo bidimensional | 308 |
| D.1.3.2 Modelo unidimensional | 308 |
| D.1.4 Balanço diferencial de quantidade de movimento | 309 |
| D.1.4.1 Modelo bidimensional | 312 |
| D.1.4.2 Modelo unidimensional | 313 |
| D.1.5 Balanço diferencial de massa por componente | 313 |
| D.1.5.1 Modelo bidimensional | 316 |
| D.1.5.2 Modelo unidimensional | 317 |

Lista de Figuras

| | |
|---|-----|
| Figura 1.1 - Forno rotativo aplicado ao processo de incineração | 6 |
| Figura 2.1 - Formação de uma onda de choque com a equação de Burger. | 26 |
| Figura 2.2 - Planta em malha fechada com um controlador tipo PID. | 32 |
| Figura 2.3 - Atualização “on-line” dos parâmetros do PID. | 33 |
| Figura 2.4 - Resposta em malha aberta para perturbação pulso unitária. | 37 |
| Figura 2.5 - Resposta em malha aberta para perturbação degrau. | 38 |
| Figura 2.6 - Trajetórias de uma ação de controle. | 39 |
| Figura 2.7 - Respostas dinâmicas de sistemas com ordens diferentes em malha aberta. | 46 |
| Figura 2.8 - Dinâmica do processo. | 47 |
| Figura 2.9 - Rede neural de uma camada. | 57 |
| Figura 2.10 - Função de transferência de um Perceptron. | 58 |
| Figura 2.11 - Arquitetura do Perceptron. | 58 |
| Figura 2.12 - Função de transferência linear. | 60 |
| Figura 2.13 - ADALINE. | 61 |
| Figura 2.14 - Arquitetura de uma rede tipo retropropagação multicamadas. | 63 |
| Figura 2.15 - Função de transferência logarítmica-sigmoidal. | 64 |
| Figura 2.16 - Princípio de funcionamento de um algoritmo genético. | 83 |
| Figura 2.17 - Integração em uma camada. | 94 |
| Figura 2.18 - Integração em duas camadas. | 95 |
| Figura 2.19 - Integração em múltiplas camadas. | 96 |
| Figura 3.1 - Sistema de coordenadas cilíndricas. | 101 |
| Figura 3.2 - Fronteira leito sólido - região gasosa. | 104 |
| Figura 3.3 - Corte transversal da câmara de combustão. | 105 |

| | |
|---|-----|
| Figura 3.4 - Detalhes do corte transversal da câmara de combustão. | 106 |
| Figura 3.5 - Esquema da volatilização dos orgânicos e evaporação da água. | 111 |
| Figura 3.6 - Configuração 1. | 116 |
| Figura 3.7 - Configuração 2. | 116 |
| Figura 3.8 - Esquema de divisão dos fatores de forma para o leito sólido. | 118 |
| Figura 3.9 - Elemento de volume da parede interna emitindo radiação. | 126 |
| Figura 3.10 - Elemento de volume da chama emitindo radiação. | 126 |
| Figura 3.11 - Malha unidimensional discretizada em x no instante t. | 128 |
| Figura 3.12 - Malha discretizada em duas dimensões para coordenadas cilíndricas. | 130 |
| Figura 3.13 – Malha discretizada em três dimensões para coordenadas cilíndricas. | 130 |
| Figura 3.14 - Coordenadas cilíndricas em três dimensões. | 132 |
| Figura 3.15 - Leito sólido discretizado em três dimensões. | 136 |
| Figura 3.16 - Interface leito sólido e região gasosa. | 140 |
| Figura 3.17 - Interface leito sólido e refratário. | 142 |
| Figura 3.18 - Interface refratário e ambiente. | 142 |
| Figura 3.19 - Possibilidades na camada de otimização do processo. | 154 |
| Figura 3.20 - Desenvolvimento do controlador não linear NMPC. | 155 |
| Figura 3.21 - Desenvolvimento do controlador não linear NGPC. | 157 |
| Figura 3.22 - Estrutura de integração com controladores lineares. | 159 |
| Figura 3.23 - Estrutura de integração com controladores não lineares. | 159 |
| Figura 3.24 - Estrutura de integração em duas camadas. | 160 |
| Figura 4.1 - Perfis de temperatura ao longo da câmara de combustão. | 168 |
| Figura 4.2 - Perfis de temperatura ao longo do leito sólido. | 169 |
| Figura 4.3 - Perfis de temperatura ao longo do refratário. | 169 |
| Figura 4.4 - Efeito da vazão de resíduo sólido no perfil de temperatura da câmara | 170 |

| | |
|--|-----|
| de combustão (posição central). | |
| Figura 4.5 - Perfis radiais de temperatura. | 170 |
| Figura 4.6 - Efeito do poder calorífico do resíduo sólido no perfil de temperatura da câmara de combustão (posição central). | 171 |
| Figura 4.7 - Efeito da vazão de combustível no perfil de temperatura da câmara de combustão (posição central). | 172 |
| Figura 4.8 - Efeito da vazão de ar secundário no perfil de temperatura da câmara de combustão (posição central). | 172 |
| Figura 4.9 - Perfis de concentração de oxigênio ao longo da câmara de combustão. | 173 |
| Figura 4.10 - Perfis de concentração de combustível ao longo da câmara de combustão. | 174 |
| Figura 4.11 - Efeito da vazão de ar secundário na dinâmica da temperatura | 176 |
| Figura 4.12 - Efeito da vazão de combustível na dinâmica da temperatura | 176 |
| Figura 4.13 - Efeito da vazão do resíduo sólido na dinâmica da temperatura | 177 |
| Figura 4.14 - Efeito do poder calorífico do resíduo sólido na dinâmica da temperatura | 177 |
| Figura 4.15 - Efeito da vazão de combustível na dinâmica da temperatura do refratário (posição intermediária). | 178 |
| Figura 4.16 - Efeito da vazão de ar secundário na dinâmica da temperatura para alguns tipos de perturbações (+10%). | 178 |
| Figura 4.17 - Efeito da vazão de ar secundário na dinâmica da temperatura para alguns tipos de perturbações (-10%). | 179 |
| Figura 4.18 - Efeito da vazão de combustível na dinâmica da temperatura para alguns tipos de perturbações (+10%). | 180 |
| Figura 4.19 - Efeito da vazão de combustível na dinâmica da temperatura para alguns tipos de perturbações (-10%). | 180 |
| Figura 4.20 - Comportamento dinâmico da temperatura para algumas perturbações degrau. | 181 |

| | |
|--|-----|
| Figura 4.21 - Comportamento dinâmico da temperatura para algumas perturbações degrau. | 182 |
| Figura 4.22 - Comparação da temperatura de saída dos gases em função da vazão de ar secundário. | 197 |
| Figura 4.23 - Comparação da temperatura de saída dos gases em função da vazão de combustível. | 198 |
| Figura 4.24 - Comparação da temperatura de saída dos gases em função da vazão do resíduo sólido. | 198 |
| Figura 4.25 - Comparação da temperatura de saída dos gases em função do poder calorífico do resíduo sólido. | 199 |
| Figura 4.26 - Comparação da dinâmica da temperatura de saída dos gases para uma perturbação de -10% na vazão de ar secundário (NMPC). | 200 |
| Figura 4.27 - Comparação da dinâmica da temperatura de saída dos gases para uma perturbação de -10% na vazão de combustível (NMPC). | 200 |
| Figura 4.28 - Comparação da dinâmica da temperatura de saída dos gases para uma perturbação de $+10\%$ na vazão de resíduo sólido (NMPC). | 201 |
| Figura 4.29 - Comparação da dinâmica da temperatura de saída dos gases sem perturbação (NMPC). | 201 |
| Figura 4.30 - Comparativo entre rede neural e modelo determinístico para a temperatura de saída dos gases de combustão em função da vazão de ar secundário. | 202 |
| Figura 4.31 - Comparativo entre rede neural e modelo determinístico para a temperatura de saída dos gases de combustão em função da vazão de combustível auxiliar. | 203 |
| Figura 4.32 - Comparação da dinâmica da temperatura de saída dos gases para uma perturbação de -10% na vazão de ar secundário (NGPC). | 203 |
| Figura 4.33 - Comparação da dinâmica da temperatura de saída dos gases para uma perturbação de -10% na vazão de combustível (NGPC). | 204 |
| Figura 4.34 - Comparação da dinâmica da temperatura de saída dos gases para uma | 204 |

| | |
|---|-----|
| perturbação de +10% na vazão de resíduo sólido (NGPC). | |
| Figura 4.35 - Comparaçāo da dinâmica da temperatura de saída dos gases para uma perturbação de +10% no poder calorífico do resíduo sólido (NGPC). | 205 |
| Figura 4.36 - Comparaçāo da dinâmica da temperatura de saída dos gases sem perturbação (NGPC). | 205 |
| Figura 4.37 - Efeito do otimizador para o caso 1. | 210 |
| Figura 4.38 - Efeito do otimizador para o caso 2. | 210 |
| Figura 4.39 - Efeito do otimizador para o caso 3. | 211 |
| Figura 4.40 - Efeito do otimizador para o caso 4. | 211 |
| Figura 4.41 - Efeito do otimizador para o caso 5. | 212 |
| Figura 4.42 - Efeito do otimizador para o caso 6. | 212 |
| Figura 4.43 - Efeito do otimizador para o caso 7. | 213 |
| Figura 4.44 - Efeito do otimizador para o caso 8. | 213 |
| Figura 4.45 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de +10% na vazão do ar secundário. | 216 |
| Figura 4.46 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de +10% na vazão do ar secundário. | 216 |
| Figura 4.47 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de +10% na vazão do ar secundário. | 217 |
| Figura 4.48 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de +10% na vazão do ar secundário. | 217 |
| Figura 4.49 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de +10% na vazão de combustível. | 218 |
| Figura 4.50 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de +10% na vazão de combustível. | 218 |
| Figura 4.51 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de +10% na vazão de combustível. | 219 |

| | |
|--|-----|
| Figura 4.52 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de +10% na vazão de combustível. | 219 |
| Figura 4.53 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de +10% na vazão de resíduo sólido. | 220 |
| Figura 4.54 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de +10% na vazão de resíduo sólido. | 220 |
| Figura 4.55 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de +10% na vazão de resíduo sólido. | 221 |
| Figura 4.56 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de +10% na vazão de resíduo sólido. | 221 |
| Figura 4.57 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de +10% no poder calorífico do resíduo sólido. | 222 |
| Figura 4.58 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de +10% no poder calorífico do resíduo sólido. | 222 |
| Figura 4.59 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de +10% no poder calorífico do resíduo sólido. | 223 |
| Figura 4.60 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de +10% no poder calorífico do resíduo sólido. | 223 |
| Figura 4.61 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de -10% na vazão do ar secundário. | 225 |
| Figura 4.62 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de -10% na vazão do ar secundário. | 225 |
| Figura 4.63 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de -+10% na vazão do ar secundário. | 226 |
| Figura 4.64 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de -10% na vazão do ar secundário. | 226 |
| Figura 4.65 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de -10% na vazão de combustível. | 227 |

| | |
|--|-----|
| Figura 4.66 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de -10% na vazão de combustível. | 227 |
| Figura 4.67 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de -10% na vazão de combustível. | 228 |
| Figura 4.68 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de -10% na vazão de combustível. | 228 |
| Figura 4.69 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de -10% na vazão de resíduo sólido. | 229 |
| Figura 4.70 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de -10% na vazão de resíduo sólido. | 229 |
| Figura 4.71 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de -10% na vazão de resíduo sólido. | 230 |
| Figura 4.72 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de -10% na vazão de resíduo sólido. | 230 |
| Figura 4.73 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de -10% no poder calorífico do resíduo sólido. | 231 |
| Figura 4.74 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de -10% no poder calorífico do resíduo sólido. | 231 |
| Figura 4.75 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de -10% no poder calorífico do resíduo sólido. | 232 |
| Figura 4.76 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de -10% no poder calorífico do resíduo sólido. | 232 |
| Figura 4.77 - Performance do DMC e GPC. | 233 |
| Figura 4.78 - Performance do DMC e NMPC. | 234 |
| Figura 4.79 - Performance do GPC e NGPC. | 234 |
| Figura 4.80 - Performance do NMPC e NGPC. | 235 |
| Figura 4.81 - Comportamento da variável manipulada para perturbação tipo rampa de +10 % na vazão de ar secundário mediante ação do PID, DMC e GPC. | 235 |

| | |
|--|-----|
| Figura 4.82 - Comportamento da variável manipulada para perturbação tipo rampa de +10 % na vazão de ar secundário mediante ação do DMC e NMPC. | 236 |
| Figura 4.83 - Comportamento da variável manipulada para perturbação tipo rampa de +10 % na vazão de ar secundário mediante ação do GPC e NGPC. | 236 |
| Figura 4.84 - Comportamento da variável manipulada para perturbação tipo rampa de +10 % na vazão de ar secundário mediante ação do NGPC e NMPC. | 237 |
| Figura 4.85 - Comportamento da variável manipulada para perturbação tipo pulso de +10 % na vazão de ar secundário mediante ação do PID, DMC e GPC. | 237 |
| Figura 4.86 - Comportamento da variável manipulada para perturbação tipo pulso de +10 % na vazão de ar secundário mediante ação do NMPC e NGPC. | 238 |
| Figura 4.87 - Comportamento da variável manipulada para perturbação tipo pulso de +10 % na vazão de ar secundário mediante ação do PID, DMC, GPC, NMPC e NGPC. | 238 |
| Figura 4.88 - Atuação do PID em comparação como o otimizador para o caso 1. | 240 |
| Figura 4.89 - Atuação do DMC em comparação como o otimizador para o caso 1. | 241 |
| Figura 4.90 - Atuação do GPC em comparação como o otimizador para o caso 1. | 241 |
| Figura 4.91 - Atuação do NMPC em comparação como o otimizador para o caso 1. | 242 |
| Figura 4.92 - Atuação do NGPC em comparação como o otimizador para o caso 1. | 242 |
| Figura 4.93 - Atuação do PID em comparação como o otimizador para o caso 3. | 243 |
| Figura 4.94 - Atuação do DMC em comparação como o otimizador para o caso 3. | 243 |
| Figura 4.95 - Atuação do GPC em comparação como o otimizador para o caso 3. | 244 |
| Figura 4.96 - Atuação do NMPC em comparação como o otimizador para o caso 3. | 244 |
| Figura 4.97 - Atuação do NGPC em comparação como o otimizador para o caso 3. | 245 |
| Figura 4.98 - Atuações comparativas entre o PID, DMC e GPC para o caso 1. | 245 |
| Figura 4.99 - Atuações comparativas entre o DMC e NMPC para o caso 1. | 246 |
| Figura 4.100 - Atuações comparativas entre o GPC e NGPC para o caso 1. | 246 |

| | |
|---|-----|
| Figura 4.101 - Atuações comparativas entre o NMPC e NGPC para o caso 1. | 247 |
| Figura 4.102 - Atuações comparativas entre o PID, DMC e GPC para o caso 3. | 247 |
| Figura 4.103 - Atuações comparativas entre o DMC e NMPC para o caso 3. | 248 |
| Figura 4.104 - Atuações comparativas entre o GPC e NGPC para o caso 3. | 248 |
| Figura 4.105 - Atuações comparativas entre o NMPC e NGPC para o caso 3. | 249 |
| Figura A.1 - Comportamento transiente do propano, oxigênio, dióxido de carbono para o modelo de Westbrook e Dryer (1984). | 283 |
| Figura C.1 - Fluxograma de execução do integrador em tempo real. | 292 |
| Figura D.1 - Elemento diferencial de volume. | 296 |
| Figura D.2 - Elemento diferencial de volume esquematizado para o balanço da quantidade de movimento. | 309 |
| Figura D.3 - Esquema do balanço diferencial por componente. | 314 |
| Figura D.4 - Esquema de elemento de volume no qual ocorrem as reações. | 319 |

Lista de Tabelas

| | |
|---|-----|
| Tabela 3.1 - Restrições ambientais típicas impostas pelas CETESB para concessão da licença de funcionamento em teste de queima. | 144 |
| Tabela 3.2 - Restrições ambientais vigentes na NBR-11175. | 144 |
| Tabela 3.3 - Identificação das variáveis usadas no modelo matemático. | 146 |
| Tabela 3.4 - Quantificação das variáveis do processo. | 147 |
| Tabela 4.1 - Parâmetros operacionais de entrada e do equipamento. | 164 |
| Tabela 4.2 - Propriedades físico-químicas. | 165 |
| Tabela 4.3 - Propriedades do resíduo sólido. | 166 |
| Tabela 4.4 - Propriedades do combustível auxiliar. | 167 |
| Tabela 4.5 - Restrições operacionais. | 183 |
| Tabela 4.6 - Simulação propostas: condição 1. | 184 |
| Tabela 4.7 - Resultado da simulação para a condição 1. | 184 |
| Tabela 4.8 - Simulação propostas: condição 2. | 185 |
| Tabela 4.9 - Resultado da simulação para a condição 2. | 185 |
| Tabela 4.10 - Simulação propostas: condição 3. | 186 |
| Tabela 4.11 - Resultado da simulação para a condição 3. | 186 |
| Tabela 4.12 - Simulação propostas: condição 4. | 187 |
| Tabela 4.13 - Resultado da simulação para a condição 4. | 187 |
| Tabela 4.14 - Simulação propostas: condição 5. | 188 |
| Tabela 4.15 - Resultado da simulação para a condição 5. | 188 |
| Tabela 4.16 - Simulação propostas: condição 6. | 189 |
| Tabela 4.17 - Resultado da simulação para a condição 6. | 190 |
| Tabela 4.18 - Simulação propostas: condição 7. | 190 |
| Tabela 4.19 - Resultado da simulação para a condição 7. | 191 |

| | |
|--|-----|
| Tabela 4.20 - Simulação propostas: condição 8. | 191 |
| Tabela 4.21 - Resultado da simulação para a condição 8. | 192 |
| Tabela 4.22 - Simulação propostas: condição 9. | 193 |
| Tabela 4.23 - Resultado da simulação para a condição 9. | 193 |
| Tabela 4.24 - Estoque de referência para as condições de 1 a 5. | 194 |
| Tabela 4.25 - Estoque de referência para as condições de 6 a 7. | 194 |
| Tabela 4.26 - Estoque de referência para a condição 8. | 194 |
| Tabela 4.27 - Estoque de referência para a condição 9. | 195 |
| Tabela 4.28 - Topologia da rede neural usada no controlador NMPC. | 196 |
| Tabela 4.29 - Topologia da rede neural usada no controlador NGPC. | 196 |
| Tabela 4.30 - Topologia da rede neural usada para representar o modelo determinístico na camada de otimização. | 196 |
| Tabela 4.31 - Problemas de otimização. | 207 |
| Tabela 4.32 - Parâmetros operacionais otimizados. | 208 |
| Tabela 4.33 - Parâmetros do PID. | 215 |
| Tabela 4.34 - Parâmetros dos controladores preditivos. | 215 |
| Tabela 4.35 - Seqüência proposta de perturbações. | 233 |
| Tabela 4.36 - Perturbações impostas à estrutura de integração em tempo real. | 240 |
| Tabela 4.37 - Tempo de processamento no equipamento de referência. | 250 |
| Tabela A.1 - Produção anual e previsão de esgotamento para o gás natural, óleo cru e carvão mineral (Energy Information Administration, 1994). | 264 |
| Tabela A.2 - Análise volumétrica de alguns combustíveis gasosos (Perry e Green, 1984). | 266 |
| Tabela A.3 - Pontos de “flash” e temperaturas de auto-ignição para alguns combustíveis (Bartok e Sarofin, 1991). | 268 |
| Tabela A.4 - Propriedades dos óleos combustíveis Borman e Ragland (1998) . | 269 |

| | |
|---|-----|
| Tabela A.5 - Análise final de alguns combustíveis sólidos seco e livre de cinzas Borman e Ragland (1998). | 272 |
| Tabela A.6 - Parâmetros de pirólise para alguns combustíveis sólidos Borman e Ragland (1998). | 278 |
| Tabela A.7 - Parâmetros α, β, δ da equação (A.17). | 281 |
| Tabela C.1 – Softwares desenvolvidos durante para implementação da Tese | 293 |

Nomenclatura

α – Absortividade

α^k – Taxa de treinamento

β – O coeficiente de momento

Δm – Efeito da mutação no gene

ϵ – Emissividade

ϵ_i – Precisão desejada para a representação binária

ϕ – Termo de perda ou geração de calor no elemento de volume

ρ – Reflexividade

ρ – Massa específica

ρ_{refr} – Massa específica do material refratário ou parede interna

ρ_{sol} – Massa específica do leito sólido

σ – Constante de Boltzmann

τ_D – Tempo morto

τ_{ij} – Tensão de cisalhamento na superfície ij

μ – Parâmetro de relaxação

μ – Viscosidade

A – Fator pré-exponencial

A_1 – Área da superfície

Abs – Energia absorvida de emissões de outras superfícies

$a_{j,i}$ – Valor de saída do neurônio “i” na última camada, para o par de treinamento “j”

A_{ls} – Área superficial do leito sólido

A_p – Área superficial da parede

C_p – Capacidade calorífica

$C_{p_{sol}}$ – Capacidade calorífica do leito sólido

$C_{p_{refr}}$ – Capacidade calorífica do material refratário ou parede interna

d_i – Valor de referência na saída para o neurônio “i”
e – Energia interna
E – Energia de ativação
 E_{mt} – Emissão total do corpo
f – Variável dependente
 f^0 – Variável dependente no tempo inicial
Fcb – Vazão de combustível
 $F_{i,j}$ – Fatores de forma entre as superfícies “i” e “j”
 g_i – Resposta do processo quando este é perturbado com um degrau
 g_x – Força elétrica, magnética, gravitacional ou externa resultante na direção “x”
 h_{amb} – Coeficiente convectivo do ambiente
 h_{conv} – Coeficiente convectivo
 h_{gas} – Coeficiente convectivo da região gasosa
 h_i – Resposta do processo quando este é perturbado com impulso unitário
 h_{ls} – Altura do leito sólido
I – Matriz identidade
J – Matriz Jacobiana
 $k_{refr.}$ – Condutividade térmica do material refratário ou parede interna
 $k_{sol.}$ – Condutividade térmica do leito sólido
L – Comprimento da câmara
 l_i – Comprimento do cromossomo
 l_w – Trabalho
Nc – A quantidade de pares para treinamento entradas-saídas
No – Número de neurônios na camada de saída
 $O(\Delta t)$ – Erro de truncamento
p – Pressão

PCcb – Poder calorífico do combustível

PCrs – Pode calorífico do resíduo

Q – Troca de calor com o meio externo ao elemento de volume

q – Troca líquida do corpo

q₁ – Emissão total do corpo

Q₁ – Calor gerado pela queima do combustível auxiliar

Q₂ – Calor gerado pela queima da fração volátil orgânica do resíduo, caso haja uma

q_{cond} – Fluxo de calor condutivo na região de contorno

q_{conv} – Fluxo de calor convectivo na região de contorno

R – Raio interno da câmara

R – Constante dos gases

R_{ext} – O raio externo que computa a espessura da parede com refratário

R_j – Quantidade gerada ou consumida do componente "j" por meio de reação química no elemento de volume

s – Velocidade de propagação da onda descontínua

t – Tempo

T – Temperatura

u – Velocidade em x

U – Energia interna

u_e, u_d – Velocidade à esquerda e direita no ponto de descontinuidade

v – Velocidade em y

V – Volume

x^{max} – Limite superior de busca do ponto ótimo para x₁

x^{min} – Limite inferior de busca do ponto ótimo para x₁

Capítulo 1:

Introdução

1.1 Introdução

O tema integração de processos em tempo real vem crescendo dentro do meio industrial, uma vez que na academia este assunto há alguns anos vem publicando seus resultados. Embora de maneira muito tímida, visto a complexidade do assunto, alguns processos já se beneficiaram de partes que compõem a integração de processos em tempo real.

Separadamente vários processos usam controladores avançados, planejamento da produção e otimização em linha. Outros usam até mais de um dos itens acima, mas em quase todos os casos não estão conectados. O desafio é fazer com que as estruturas de controle, otimização e planejamento da produção interliguem-se em tempo real e em linha.

Para que isto seja implementado na prática, muitos estudos precisam ser conduzidos a fim de que se tenha casos de sucesso com dados que comprovem os benefícios do procedimento de integração. Não é uma tarefa fácil e tão pouco direta. Sem dúvida um estudo de caso real passa pela adoção das técnicas passo a passo até sua integração completa.

A vantagem é que como alguns processos já usam estes recursos o caminho é convencer os envolvidos e os benefícios de uma integração em tempo real. Por esta razão este trabalho de Doutorado procura fornecer mais uma fonte de informação neste processo evolutivo.

Neste contexto é relevante considerar dois aspectos sem os quais este assunto fica pouco relevante ou impraticável: a globalização da economia e as tecnologias de informação de processo.

Com a constituição do mercado mundial uma planta química é observada, pelo grupo que a controla, nesta mesma escala. Isto significa na prática que os clientes para seus produtos não estão no país ou Estado de instalação, mas sim no custo de seus produtos em cada potencial consumidor no mundo. Assim, a viabilidade financeira de um processo depende de muito mais aspectos para o mercado global. Por decorrência disto o envolvimento dos parâmetros operacionais com os mercadológicos são inevitáveis. Uma das maneiras de relacionar estas duas últimas varáveis é por meio da integração de processos químicos contínuos em tempo real. Portanto, este tema passou a ser importante

para as corporações. Naturalmente um desenvolvimento desta magnitude não é simples, e ainda não foi totalmente construído. Mas os primeiros passos precisam ser dados e este trabalho está inserido neste contexto.

Por outro lado sem informações de processo nada disso teria aplicação prática. Viu-se ao longo dos últimos anos um constante investimento em tecnologias de informação de processo nas plantas químicas. É cada vez mais comum, e atualmente é quase uma regra nas empresas de maior porte, CLP's (controladores lógicos programáveis) e SDCD's (sistemas digitais de controle distribuído). A função destes sistemas é adquirir dados do processo e, quando necessário, tomar ações corretivas. Os PID usam estes tipos de estruturas.

Além dos CLP's e SDCD's o mercado oferece sistemas conhecidos como PIMS (process information management system) e LIMS (laboratory information management system). Estes softwares comunicam-se com os CLP's e SDCD's, gerando banco de dados e oferecendo um pré-tratamento às informações de processo. Estas rotinas são em geral análise estatísticas cujos resultados são disponibilizadas para um nível gerencial. No nível de gerência outras ferramentas estão disponíveis o MES (manufacturing execution systems) e o ERP (enterprise resource planning).

A integração de processos em tempo real enquadra-se na camada acima dos CLP's, SDCD's, PIMS e LIMS, e pode incorporar em sua formulação conceitos contidos no ERP. Neste nível a integração ofereceria recursos mais amplos do que tem-se usado atualmente. Este é o patamar que a integração de processos químicos em tempo real pretende alcançar. Muito ainda precisa ser desenvolvido e pesquisado para que esta realidade torne-se viável.

Até então contextualizou-se a integração de processos em tempo real. Seguem os objetivos e propostas para que este trabalho contribua com as questões apresentadas acima.

Esta Tese tem por finalidade a integração de um processo químico contínuo em tempo real, usando ou desenvolvendo ferramentas computacionais no sentido de eliminar quaisquer pagamentos adicionais pelo uso da tecnologia. Por isso, todos os softwares envolvidos foram especialmente desenvolvidos, ou usou-se aqueles de utilização livre.

O processo escolhido foi o da incineração em fornos rotativos. Para tal, fez-se o desenvolvimento de um modelo matemático com o objetivo de simular os fenômenos que ocorrem em tais equipamentos: transferência de calor condutiva, convectiva e radiativa,

perda de calor através do material refratário isolante , estudo da combustão, transferência de massa e energia para a fase gasosa. Também deve fazer parte um estudo específico para o comportamento do leito sólido, avaliando a distribuição de temperatura. A modelagem matemática inclui o estado estacionário e o regime transiente.

Com um modelo determinístico representativo do processo, descrevendo as principais variáveis, a meta é desenvolver estratégias de controle robustas capazes de mudarem a direção do processo de maneira que este permaneça o mais próximo da trajetória ideal. Em contrapartida, a otimização do rendimento dos fornos rotativos fornece as condições operacionais mais adequadas. Esta etapa será implementada por meio da integração do processo em tempo real, de forma que um sistema de otimização em nível hierárquico superior proverá os parâmetros operacionais, que atuará seguindo as restrições da política operacional estabelecida.

Com o uso das simulações para os regimes transiente e estacionário, pretende-se prever as condições com potencial para aplicação em uma planta real, fornecendo amplo campo de aplicação de um modelo matemático em uma unidade em escala industrial.

Fornos rotativos usados para a incineração de resíduos, calcinação e outras aplicações específicas como fornos de clínquer nas indústrias de cimento são unidades complexas, envolvendo alto custo operacional. Por estas razões são consideradas dentro das indústrias de processos como unidades ou plantas independentes.

Devido ao alto custo operacional dos fornos rotativos e a necessidade de operação sob a ação de controle, dentro de condições operacionais impostas por qualidade do produto, durabilidade da unidade e segurança ambiental e pessoal, tais unidades se mostram adequadas para serem operadas dentro dos conceitos de integração de processos em tempo real.

Assim sendo, a inserção dos fornos rotativos dentro da integração de processos químicos contínuos em tempo real pretende contribuir com a definição de estratégias operacionais envolvendo otimização em tempo real e controle avançado a partir de um modelo determinístico do processo. Este tipo de abordagem não tem sido considerada para este sistema em literatura aberta. A necessidade de uma operação otimizada e controlada visando a redução de custos, qualidade do produto e aspectos de segurança e poluição ambiental justificam plenamente a utilização de procedimentos de integração de processos

em tempo real para fornos rotativos.

Fornos rotativos são equipamentos muito versáteis e empregado em vários tipos de processos e setores industriais, portanto, uma mesma linha de pesquisa pode ser melhor explorada e aplicada em vários setores. Dentre suas aplicações pode-se citar: incineração de resíduos sólidos, líquidos, lamas e solos contaminados, redução de óxidos, calcinação em geral, fabricação de cimento e clínquer, calcinação do coque, recuperação de cal hidratada e outras. Esta ampla faixa de aplicação é atribuída a sua versatilidade de operação, capaz de trabalhar com diversas faixas granulométricas, toxicidade variada, capacidade de processar materiais sólidos, líquidos e pastosos.

1.2 Processo de incineração

Os fornos rotativos são equipamento de formato cilíndrico que apresentam ligeira inclinação em relação ao eixo horizontal e movimento de rotação produzido por um sistema de motores, redutores e engrenagens. Eles podem apresentar duas configurações a saber: sistema de alimentação contracorrente e concorrente. No primeiro caso, a carga é alimentada em um lado do forno e o queimador fica do outro. Para sistemas concorrentes (Figura 1.1), tanto a alimentação, quanto o queimador, usado para queima do combustível, localizam-se do mesmo lado. Esta diferença de configuração dá-se em decorrência da aplicação para o forno.

Os parâmetros operacionais envolvidos em fornos rotativos são: vazão de alimentação de ar primário e secundário, alimentação de combustível e alimentação de carga. O ar secundário fornece oxigênio para que haja, quando for o caso, reações de oxidação na carga sólida ou oxigênio complementar a queima do combustível, para aumentar a temperatura da câmara. O ar primário é destinado à combustão do combustível alimentado.

Algumas outras variáveis que são importantes para a compreensão do funcionamento do forno rotativo, mas que não são parâmetros operacionais, são aquelas relacionadas ao controle do processo. Dentre estas principais variáveis importantes para os processos com fornos rotativos encontram-se: a temperatura de saída dos gases de

combustão, concentração de poluentes, os produtos de combustão como: CO, CO₂, NO_x e concentração de oxigênio.

Outro fator que faz com que fornos rotativos sejam multifuncionais é sua capacidade de homogeneizar a carga sólida e promover intenso contato entre as fases gasosa e sólida pela rotação do cilindro.

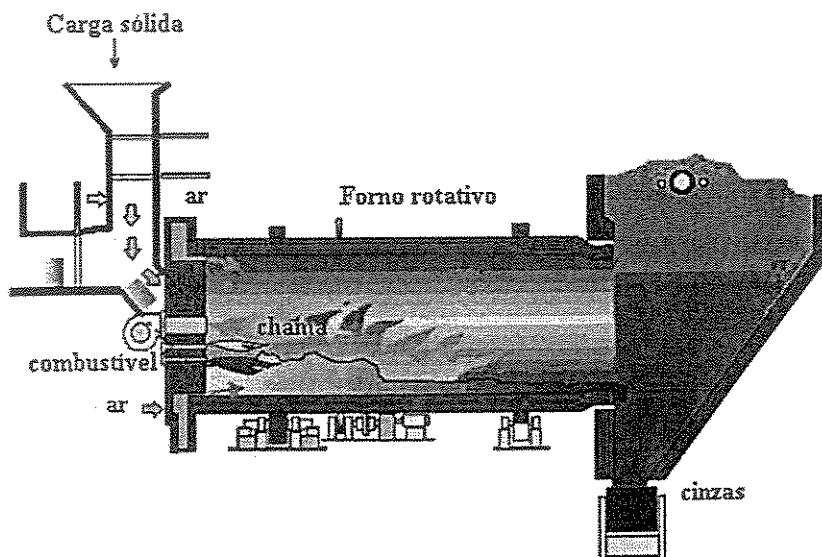


Figura 1.1 - Forno rotativo aplicado ao processo de incineração

1.3 Comentários

Conforme foi visto, a aplicação de fornos rotativos é bastante ampla, entretanto para esta Tese de Doutorado o modelo matemático focará fornos de incineração. Isto, em hipótese nenhuma, limita este trabalho a uma aplicação específica. O modelo matemático desenvolvido para fornos de incineração, com poucas modificações, atendem aos demais processos supramencionados. Além disso, as estratégias de controle avançado, assim como a camada de otimização, podem ser diretamente aplicadas à demais processos.

A parte de todo o trabalho de engenharia e pesquisa envolvidos, os algoritmos de controle, otimização (algoritmos genéticos) e redes neurais (controlador não linear) serão especialmente desenvolvidos. Desta forma, tem-se um trabalho muito pouco dependente da

aquisição de ferramentas para sua aplicação. A redução da dependência de ferramentas importadas e a criação de recursos tecnológicos nacionais, também serviram de estímulo para o desenvolvimento dos recursos computacionais.

1.4 Organização da Tese

A Tese está dividida em cinco capítulos mais os apêndices. O primeiro capítulo, este, é introdutório e apresenta as linhas gerais do trabalho, seus objetivos e um panorama do tema em questão. O capítulo seguinte é dedicado a uma revisão bibliográfica dos temas envolvidos com a integração de processos em tempo real, ou seja, métodos numéricos, técnicas de controle e otimização. Baseando-se na revisão, o terceiro capítulo modela os assuntos abordados de tal forma que o leitor se familiarize com a estrutura matemática que fundamenta o estudo. Os dois últimos capítulos mostram os resultados obtidos e as conclusões a respeitos dos mesmos, assim como sugestões para futuros trabalhos. Por fim os apêndices, que mostram fluxogramas e informações adicionais de suporte para a boa leitura desta Tese de Doutorado.

Capítulo 2:
Revisão Bibliográfica e Conceitos
Fundamentais

2.1 Incineração em fornos rotativos

Neste capítulo serão abordadas algumas considerações a respeito do embasamento teórico necessário ao desenvolvimento deste trabalho. O primeiro passo é verificar o estado da arte relativo à parte da modelagem matemática.

O estudo dos fornos rotativos e suas múltiplas aplicações, incineração, cimento, calcinação etc., têm sido amplamente pesquisado. Por isso, inúmeros são os artigos com grande variedade de abordagem sobre os mesmos tópicos, trocas de calor em fornos, radiação, comportamento do leito sólido, fluido dinâmica computacional, dinâmica, controle e otimização. Entretanto, o paradigma deste estudo está focado na integração de processos contínuos, o qual atrela o controle com a otimização. Portanto, é fundamental direcionar este desenvolvimento para que seja compatível com o objetivo proposto.

Em processos que operam à altas temperaturas, predomina a transferência de calor radiativa. Esta forma de energia é conceitualmente simples, mas complicada para sua formulação matemática. O ponto crítico é a modelagem dos fatores de forma e a determinação do fluxo líquido de energia radiativa para uma determinada superfície.

Uma abordagem bastante aceita é o modelo diferencial P-1 Sazhin, Sazhina e Heikal (2000), uma vez que este tem estrutura adequada à sua incorporação em modelos de CFD. O P-1 está baseado na expansão da intensidade da radiação em uma série ortogonal de funções harmônicas esféricas, com truncamento após o primeiro termo. Este modelo está implementado no pacote comercial VECTIS da Ricardo Consulting Engineering. Ainda que o modelo já tenha sido testado na transferência radiativa entre partículas de combustível e superfície livre em motores á Diesel, não se aplicaria neste trabalho. Os principais motivos são: a limitação do modelo com relação a todas as possibilidades existentes em uma câmara de combustão (ex. trocas sólido-parede, parede-parede) e a complexidade matemática. Adotando o P-1, outras metodologias seriam necessárias para computar as trocas radiativas entre o sólido e a parede e a interação com faces opostas da própria parede interna. Além deste inconveniente, a complexidade matemática do modelo P-1 poderia exigir um esforço computacional capaz de afetar a viabilidade para a integração em tempo real.

Com uma metodologia mais simples e que mostra resultados satisfatórios, Jenkins e Moles (1981) propõe uma balanço ponderando as energias incidente, refletida e emitida. Para cada superfície do modelo que troca energia radiativa com outra, faz-se obrigatório um destes balanços. Neste modelo os valores da emissividade e absorvividade dependem da concentração dos principais componente. Este enfoque tem por finalidade representar o comportamento de um gás real. Neste artigo os fatores de forma são calculados de acordo com o procedimento estabelecido por Einstein (1962). Tratar o gás como sendo real traz relativa melhoria na qualidade, pois a incerteza dos valores dos parâmetros e da modelagem da radiação apresentam um desvio considerável em relação aos dados reais. Os cálculos para os fatores de forma não são triviais, já que cada interação requer uma integração numérica. Como o modelo que será desenvolvido tem muitas possibilidades de interação, seu uso em tempo real pode prejudicar o desempenho geral.

Alguns pesquisadores do setor metalúrgico vêm pesquisando trocas de calor radiativa a algum tempo. Muito avanço foi obtido nas duas últimas décadas em decorrência do uso do processamento numérico com desempenho satisfatório. Gorog, Brimacombe e Adams (1981) apresentam dois enfoques: aproximação de gás cinza e gás real. No primeiro caso, a emissividade e a absorvividade são iguais e constantes para a mesma temperatura. Para gás real a emissividade e a absorvividade não são iguais devido a características diferentes de banda de emissão. Neste artigo o tratamento matemático dado para as superfícies cinzas, assim como nas demais referências, são bastante complexas e envolvem integrais triplas, duplas e simples. Para o estado estacionário os resultados seriam melhores, porém o interesse é o modelo dinâmico, e portanto este caso exige esforço computacional acima do necessário. Na modelagem para o gás real faz-se um balanço líquido dos fluxos, emissão, absorção e reflexão. Com este procedimento forma-se um conjunto de equações não lineares que podem ser facilmente incorporadas ao modelo matemático que descreve o equipamento. Os fatores de forma são simples, contudo as expressões não fornecem todas as relações necessárias para a modelagem proposta.

A maior dificuldade na modelagem dos fluxos radiativos está nos fatores de forma. Em grande parte dos artigos técnicos, suas formulações são demasiadamente detalhadas e não garantem qualidade. Em Sparrow e Cess (1970), tem-se algumas relações analíticas para o cálculo dos mesmos. Este enfoque é de baixo esforço computacional e mostra-se

coerente quando aplicado ao processo de incineração, Tomaz (1998). Entretanto, nem todas as trocas podem ser modeladas com as expressões analíticas de Sparrow e Cess (1970), e algumas expressões adicionais precisam ser implementadas. Algumas destas relações adicionais para câmaras de combustão podem ser encontradas em Tomas (1998) e Inglez de Souza (2000).

Está claro que não é simples encontrar uma solução universal quando o assunto em pauta for radiação térmica e determinação dos fatores de forma. Os procedimentos ora são complexos, ora restritos à um número de situações. Uma vez que o objetivo final é aplicação do modelo em tempo real, é necessário adotar um mecanismo matematicamente fácil. Tal afirmação faz sentido, já que o cerne do processamento numérico pode ser sobrecarregado pelas rotinas de integração e controle. E portanto, exigir excessivas etapas de cálculos em cada módulo do programa computacional é aumentar a probabilidade de fracasso de uma operação em tempo real.

Não negligenciando a importância da capacidade de representação pelo modelo de dados reais, é fundamental o desenvolvimento de uma procedimento específico para esta aplicação. Fundamentando-se em Sparrow e Cess (1970), Tomaz (1998), Inglez de Souza (2000), Gorog, Brimacombe e Adams (1981) e Jenkins e Moles (1981), pretende-se desenvolver um metodologia adequada para atingir os objetivos deste trabalho. Conceitualmente será adotado o balanço líquido apresentado como alternativa por alguns autores, e desenvolver equações analíticas para os fatores de forma. O desenvolvimento completo será abordado em maiores detalhes no capítulo destinado à modelagem matemática do processo.

Fornos rotativos são projetados a fim de realizarem a homogeneização, secagem ou reações em seu leito sólido. Consequentemente, conhecer os mecanismos pelos quais obtém-se um produto bem homogeneizado é fundamental para a qualidade final do processo.

Um fator que faz com que fornos rotativos sejam multifuncionais é sua capacidade de homogeneizar a carga sólida e promover intenso contato entre as fases gasosa e sólida pela rotação do cilindro.

Como há variação do tamanho da partícula, o movimento de mistura tende a concentrar aquelas de menor diâmetro no centro do leito, e consequentemente o centro não

ficará bem misturado, Barr e Boateng (1996a). Este fenômeno é denominado segregação, e acarretará em gradientes de temperatura no interior do leito.

As principais causas da segregação são: partículas com diâmetros diferentes, densidade, forma, rugosidade e resiliência. Embora qualquer uma destas características possa causar a segregação, a maioria das situações com segregação é resultado da diferença de tamanho das partículas e este será revisada com mais detalhes. Os mecanismos de segregação são dois: trajetória ou percolação e infiltração.

Para compreender melhor estes dois mecanismos é preciso entender o mecanismo de segregação quando o leito estiver rolando sobre o forno rotativo.

A rotação provoca o surgimento de duas camadas com diâmetros de partículas diferentes. Uma camada ativa onde há renovação constante das partículas e outra região com fluxo pistonado. Também nota-se a formação da segregação em uma região central do leito com partículas de diâmetro menor. A segregação por trajetória ocorre em função do modo de operação dos fornos. As partículas que são descarregadas da região de fluxo pistonado para a camada ativa podem ser projetadas horizontalmente do ápice para superfície do leito. Também é sugerido que a distância percorrida seja proporcional ao quadrado do diâmetro – Bridgwater (1976) - o que significa que as partículas menores tendem a se concentrar na região central. A percolação presume que quando um leito é perturbado, o processo de reorganização tem início e a probabilidade de uma partícula achar um vazio é maior quando o diâmetro da partícula for menor. Desta forma, partículas menores tendem a se concentrar na região central enquanto as maiores permanecem na área periférica do leito.

Segundo Barr e Boateng (1996a) a modelagem matemática é um modelo quase-tridimensional, pois agrupa uma equação de uma dimensão para a determinação das temperaturas ao longo do eixo axial e outras duas equações bidimensionais. A primeira para a camada ativa e uma segunda para a região com fluxo pistonado. De acordo com Barr e Boateng (1996a), o gradiente de temperatura no eixo radial para a camada ativa é uniforme. A região com fluxo pistonado é considerada um corpo rígido, por isso não tem termo que compute a dispersão axial. Para a região com fluxo pistonado adota-se coordenadas cilíndricas, pois a geometria do sólido é moldada pelo formato do forno que apresenta esta configuração geométrica. Para resolver o modelo para a camada ativa é necessário saber

sua espessura, que é conhecida a priori. Dados experimentais, apresentados por Barr e Boateng (1996a), indicam que esta espessura é da ordem de 4% do comprimento da corda que corta a seção transversal, formada pelo leito sólido do forno rotativo. Sabendo que a espessura da camada ativa é muito pequena em relação ao fluxo pistonado e que pretende-se desenvolver um modelo para aplicação em tempo real, apenas o fluxo pistonado será considerado. Isto implica em considerar um fluxo para todo o leito sólido que está homogeneizado em função da rotação. Porém, considera-se o efeito térmico em função da altura do mesmo, gerando um perfil de temperatura para o resíduo processado. Alguns artigos que desenvolveram o modelo que será adotado para este trabalho são direcionados para a modelagem do leito. Como não é o caso deste estudo, apenas as equações básicas de energia serão usadas a fim de fornecer uma ferramenta eficiente para os fins propostos inicialmente.

Com relação à modelagem matemática de processos que usam fornos rotativos, três aspectos ainda não foram abordados: o refratário, o fluxo gasoso e a emissão e poluentes.

A parede de fornos rotativos, em geral, apresentam um material isolante para efeitos de economia térmica e segurança ocupacional. Trata-se de um corpo rígido, sem fluxo, e será modelado da mesma maneira que o fluxo pistonado de leito sólido, guardando suas devidas características.

Os fluxos reativos da região gasosa podem ser modelados de diversas formas e uma delas que vem ganhando espaço é a fluido dinâmica computacional. Por razões ambientais e econômicas, as instalações vem sendo forçada pelos governos de algumas nações a melhorarem sua performance. Isto tem reflexo no desenvolvimento de novas estratégias operacionais. Assim, os esforços não estão focados apenas no fenômeno da combustão, combustores e fornalhas. Procura-se compreender também os periféricos, como o comportamento da mistura, ejetores e a dinâmica dos fluídos. Com o desenvolvimento da capacidade de processamento dos computadores, a fluido dinâmica já pode ser utilizada para resolver problemas complexos das aplicações industriais.

Christo, Fletcher e Joseph (1998) propõem um modelo para o ejetor e a chama, sendo que o metano sofre oxidação de maneira irreversível em uma etapa. O modelo consiste de dois componentes, o ejetor e o combustor. Dois modelos numéricos foram desenvolvidos. O primeiro simula a alimentação, características da mistura e performance

do bico ejetor. Os resultados são usados no segundo modelo, o qual computa fluxos complexos e a distribuição da temperatura. Desta forma, pode-se obter um melhor entendimento dos efeitos da turbulência e dos modelos de combustão. O código CFX4 (1996) foi usado nas simulações. Este é um pacote comercial desenvolvido pela AEA Technology e está baseado no método dos volumes finitos. O ejetor consiste de um bico, uma câmara de mistura e um difusor. Um modelo tridimensional isotérmico com fluxo turbulento foi adotado. Dois modelos de turbulência foram testados, o DSM (Differential Stress Model) e o modelo $\kappa-\varepsilon$. O equipamento como um todo apresenta seis ejetores, uma chicana, câmara de estabilização com duas entradas tangenciais e duas chaminés. A simulação numérica assume um modelo tridimensional, turbulento e pouco compressível. O modelo de combustão usado foi o EBU, discutido em Spalding (1971). Todos os cálculos foram conduzidos em uma estação de trabalho DEC-ALPHA 500/333. Em média as simulações do ejetor duravam duas horas e aproximadamente oito horas para todo o equipamento.

Outro modelo estudado também se apoiou na fluido dinâmica computacional para seus estudos, Veranth, Silcox e Perching (1998). Neste usou-se o FLUENT desenvolvido por Leger, Cundy e Sterling (1993) que inclui transferência de calor por radiação, geometria mais precisa e uma malha melhor ajustável. Este modelo não avalia velocidade ou temperatura da parede e do leito sólido. Baniff é um pacote comercial disponível que se fundamenta em fluxos reativos, o qual originalmente destinava-se ao estudo da combustão de carvão pulverizado Veranth, Silcox e Perching (1998). Baniff resolve um conjunto de equações, em três dimensões, não lineares do fluxo do fluido, transferência radiativa e combustão. Tais equações representam Navier-Stokes em um estrutura Euleriana usando o algoritmo SIMPLEC e o modelo $\kappa-\varepsilon$ de turbulência. Os pontos ativos formam uma malha com 15000 (quinze mil) pontos ($40 \times 25 \times 15$). Menos de oito horas são necessárias para convergir a simulação com 15000 pontos em uma estação de trabalho da Silicon Graphics Indigo 2 Extreme. Com esta malha tem-se o número suficiente de informações para predizer a distribuição da temperatura.

Aceita-se que a destruição da maioria dos compostos perigosos é atingida com o gás permanecendo durante 2 segundos a uma temperatura de 850 °C. Por isso, necessita-se de estudos mais precisos para avaliar quantitativamente pontos do processo de difícil acesso.

Shin, Ryu e Choi (1998) propõem um modelo que baseado no tempo de residência, mistura e decomposição térmica, o qual quantifica a qualidade da combustão. No modelo matemático considera-se um câmara de combustão subdividida em duas. Na primária o leito sólido é queimado na grelha. Um mistura de produtos de combustão, combustíveis e ar é liberado do sólido e passa na fornalha. A câmara secundária fornece condições adequadas para completar a combustão da fração não queimada e destruir os poluentes. Neste trabalho uma malha tridimensional de 38 x 54 x 24 foi escolhida para se ajustar à geometria do equipamento. A estrutura foi escolhida para evitar dependência da malha com a solução, enquanto minimizava a sobrecarga computacional. Usou-se o modelo $\kappa-\epsilon$ e o DTRM (Discrete Transfer Radiation Model), no qual um coeficiente local de absorção é calculado a partir das concentrações do CO₂ e H₂O. A queima de massa no leito foi modelada com as condições de fronteira, contendo a composição do resíduo e alguns parâmetros operacionais. O modelo de dissipação eddy foi usado para modelar a turbulência na região gasosa. Os produtos de combustão incompleta foram calculados como uma reação de uma etapa. Os cálculos foram realizados usando o FLUENT.

Segundo Mastorakos et al. (1999) soluções de CFD para a região gasosa é um avanço, mas isolado não é adequada para modelar um forno rotativo. Em algumas situações simula-se um modelo em três dimensões para o refratário, acoplado com um modelo de zonas para a transferência de fluxos radiativos, na qual a radiação no eixo axial está limitada a no máximo três zonas adjacentes. No trabalho de Mastorakos et al. (1999), apresenta-se um modelo modular e detalhado para a maioria dos processos que ocorrem em fornos rotativos. Neste artigo acoplam-se, três módulos independentes que interagem. A região gasosa é tratada com um código CFD multidimensional para combustão de carvão mineral. Este resolve a equação da condução de calor em três dimensões na parede do forno e uma alimentação bem misturada na temperatura e composição com um modelo similar a Spang (1972). Os três módulos (chama, parede e leito sólido) são calculados iterativamente até que se atinja a convergência. A maior vantagem deste trabalho em relação aos demais é que este está mais detalhado. Isto permite um melhor entendimento da operação do forno, através da quantificação dos fluxos de energia nas diversas partes dos sistema. As equações de Favre-Average da quantidade de movimento do gás, concentração das espécies e energia são resolvidas por um código comercial conhecido como FLOW-3D, usando o modelo $k-\epsilon$ em conjunto com o módulo de radiação RAD-3D. Embora, a geometria seja

realmente tridimensional, trata-se a região gasosa como sendo simétrica ao eixo, a fim de que a solução converja em tempo razoável com as estações de trabalho atuais. As partículas de carvão seguem distribuição de tamanho na ordem de 45 μm de diâmetro médio. A intensidade da radiação no gás foi calculada com o método de Monte Carlo contendo 80.000 (oitenta mil) partículas com o módulo RAD-3D. O forno foi dividido em zonas não uniformes, 7 na direção radial e 19 na axial, em cada uma destas a radiação é considerada uniforme. A saída do módulo que realiza os cálculos da radiação faz interface com o módulo FLOW-3D e externamente com o código para a parede. Uma malha não uniforme com 47 pontos no eixo radial e 155 no axial foi usada e considerou-se suficiente após fazer os estudos da independência da malha. O tempo médio de processamento foi de 10 horas em uma estação de trabalho HP 715/100 MHZ para completar todos os cálculos.

Muitas são as aplicações possíveis com a fluido dinâmica computacional, porém os pacotes comerciais, com códigos robustos, não são muito aplicados. Duas são as razões: custo elevado e necessidade de mão de obra altamente especializada. Um pacote razoavelmente estudado é o ADINA-F CFD. Este foi testado algumas vezes e com resultados apreciavelmente bons por Bathe, Zhang e Zhang (1997). O ADINA-F é capaz de realizar análise de fluidos para situações de fluxo compressível e incompressível. Em ambos os casos usou-se as equações de Navier-Stokes em sistema de coordenadas cartesianas. O modelo de turbulência pode ser: $\kappa-\epsilon$, RNG $\kappa-\epsilon$ ou $\kappa-\omega$ com número de Reynolds alto ou baixo. Também é possível modelar o balanço diferencial de massa, por espécie, para fluxo compressível ou incompressível. O ADINA-F permite o cálculo da radiação, a superfície é considerada cinza, transparente, difusiva e com reflexão especular. Detalhes do modelo e seu funcionamento encontram-se detalhados em ADINA (1997).

Estão disponíveis em literatura aberta alguns modelos mais simples modelando fornos rotativos. Os exemplos típicos são Tomaz (1998) e Inglez de Souza (2000). Os autores usam a técnica de divisão da câmara de combustão em zonas, e em cada um desta realizam-se balanços de massa e energia conforme os componentes envolvidos. Estes dois últimos autores incluem divisões radiais, o leito sólido, a região gasosa anular e a chama. Com estas três zonas radiais e com o perfil axial inicialmente proposto, obtém-se um número razoável de informações de temperatura e composição no interior do equipamento. Outra vantagem desta técnica é o esforço computacional reduzido para modelo dinâmico e

em estado estacionário. Porém, estudos preliminares de otimização realizados por Inglez de Souza (2000) indicam alguns problemas de convergência que podem ocorrer. Os mesmos são creditados à estrutura pouco versátil da formulação, reduzindo as possibilidades de manipulação numérica e estrutural do modelo.

É natural concluir que do ponto de vista de representatividade dos resultados, a fluido dinâmica computacional seja mais efetiva. Contudo, o esforço computacional exigido é proibitivo para os atuais equipamentos encontrados nos setores industrial e centros de pesquisa, descredenciando portanto, sua aplicação na integração de processos químicos contínuos em tempo real. Modelos mais simples são adequados em termos de processamento numérico, mas em algumas situações sua aplicação é limitada. Conclui-se que o ideal é desenvolver uma modelagem mais versátil capaz de, com poucas alterações nos códigos dos mesmos, realizar tarefas mais simples ou complexas, de acordo com a necessidade. Tal objetivo inspirou o desenvolvimento do modelo matemático para este projeto, o qual está pormenorizado no capítulo da modelagem matemática.

Com a crescente importância que tem-se dado às questões ambientais, a emissão de poluentes vem recebendo enfoque especial. As legislações estão cada vez mais rígidas, e as empresas para não reduzirem sua produção e adequarem-se às novas normas, precisam atualizar-se. A primeira alternativa é alterar os parâmetros operacionais a fim de atingir as metas. Em último caso, pode-se recorrer à aquisição de novos equipamentos. Entretanto, esta hipótese é mais cara e não está no escopo desta modelagem. Portanto, é fundamental incluir um modelo matemático para estimar as emissões dos poluentes encontrados nos processos de combustão.

Alguns estudos para incineradores de leito fluidizado com Mukati, Guy e Legros (2000) apresentam as cinéticas para a combustão do resíduo sólido. Para resíduos orgânicos, as principais emissões são: CO, CO₂, NO_x, N₂O, SO₂, O₂ e a fração que não queimou. Este poluentes são bastante conhecidos por causarem chuva ácida, aquecimento global, devido ao efeito estufa, destruição da camada de ozônio e até mesmo efeitos carcinogênicos na saúde humana. O objetivo é apresentar um modelo matemático simples que descreva sem pormenores as reações químicas, e capaz de predizer razoavelmente as concentrações de CO, CO₂, NO_x, N₂O, SO₂, O₂. O resíduo é transformado em cinzas e voláteis. Os voláteis são NH₃, CO, SO₂ e H₂O. Os não voláteis (C,N,O,S,H) são

convertidos em CO, NO, N₂O, SO₂ e H₂O a uma taxa proporcional à sua combustão. A combustão do gás natural dá-se por completo. Quatorze são as reações consideradas para a cinética de combustão do resíduo, homogêneas e heterogêneas. Estas reações são aquelas usualmente encontradas na combustão de orgânicos em incineradores de leito fluidizado. Em Mukati, Guy e Legros (2000), o estudo de caso trata areia de fundição. Não existe referência que viabilize qualquer conclusão sobre a possibilidade de usar a cinética apresentada no referido artigo em fornos rotativos.

Desroches-Ducarne et. al. (1998) apresentam uma modelagem para formação e destruição de poluentes gasosos (CO, NO, N₂O, SO₂, HCl) durante a incineração de resíduo municipal em um incinerador tipo leito fluidizado móvel. O modelo inclui devolatilização e combustão dos não voláteis. Assume-se que a combustão ocorre em dois passos: uma etapa rápida de devolatilização, a qual corresponde à transferência de material volátil para a fase gasosa; e uma segunda de queima dos não voláteis pelo oxigênio do ar de fluidização. Considera-se que: os principais produtos de volatilização são CO₂, CO, H₂O, H₂, CH₄, HCl, SO₂, NH₃ e HCN. O total de reações que formam a cinética proposta totalizam 16. A fonte do resíduo para realizar as simulações foi a média das coletas dos subúrbios de Paris, o qual continha papel, madeira, PE, PVC etc.

Os poluentes que apresentam cinética mais detalhada são os NO_x. Um estudo realizado por Hill e Smoot (2000) traz um revisão da modelagem das reações dos NO_x em sistemas de combustão, com ênfase em sistemas de queima de carvão. Este artigo também apresenta técnicas para controle da emissão e modelagem de chamas turbulentas. A emissão do NO_x é resultado de três principais mecanismos: térmico, combustível e NO_x imediato. As reações envolvidas neste processo são lentas quando comparadas com as demais reações de combustão. Portanto, as taxas de reação são necessárias para a modelagem do processo. O NO_x térmico é formado da oxidação do nitrogênio atmosférico. A formação imediata é decorrente da reação do nitrogênio da atmosfera com os radicais de hidrocarbonetos em regiões ricas de combustível na chama. O NO_x proveniente do combustível é formado com a oxidação do nitrogênio presente no mesmo. O NO_x térmico é a principal fonte de poluentes nitrogenados em sistemas de combustão. Não tem sido possível acoplar uma cinética detalhada com as equações de turbulência. Uma cinética prática deve conter um número mínimo de equações para aproximar as características do

processo de formação de NO_x. Por esta razão, modelos de poluentes nitrogenados são, em geral, desacoplados do modelo geral de combustão, e executados após a definição da estrutura da chama. A base para esta hipótese é que a formação de traços de poluentes não afetam a estrutura da chama, a qual é governada por reações rápidas de oxidação do combustível. A grande vantagem deste procedimento é a redução do esforço computacional. Mesmo assim, o sistema proposto por Hill e Smoot (2000) tem tempo numérico de processamento elevado demais para aplicação em tempo real.

Os modelos de emissão de poluentes em sistemas de combustão, até agora, baseiam-se em cinéticas mais detalhadas. Uma alternativa aos cálculos mais detalhados é adotar o esquema sugerido por Tomaz (1998). Neste, assume-se reações em uma única etapa, obedecendo a estequiometria das reações com combustão completa.

A fim de completar a fonte geradora de poluentes, necessita-se de estimativas de emissões provenientes do combustível auxiliar. Pre, Hemati e Marchand (1998) apresentam um modelo de combustão homogênea para ar-metano em um leito fluidizado. O modelo é usado para prever mudanças na concentração das diferentes espécies envolvidas na combustão do gás natural. A combustão de hidrocarbonetos é um fenômeno complexo, o qual não pode ser devidamente representado por uma simples reação que leva à formação de água e dióxido de carbono. Na prática, outras espécies químicas tais como: monóxido de carbono, hidrogênio, radicais estão envolvidas nos mecanismos das reações. Consequentemente, a cinética detalhada da oxidação do metano inclui um número maior de reações, aproximadamente 250. Como uma alternativa, aparecem os modelos globais, usados para calcular o surgimento e desaparecimento das principais espécies químicas envolvidas. Pre, Hemati e Marchand (1998) usam um modelo de duas etapas, que foram estabelecidos com dados experimentais obtidos de chamas turbulentas, chamas laminares e reatores agitados.

Nesta mesma linha de modelos simples para a combustão de metano, Zhang, Frankel (1998) também usam um modelo de duas etapas. A primeira que gera água e CO, e uma segunda consumindo o CO e gerando CO₂. Tanto o modelo de uma etapa, quanto o de duas para consumo do metano, são adequados para simulações de processos no contexto da integração em tempo real.

2.2 Definição do procedimento numérico

Quando se trata de fluido dinâmica computacional, dois enfoques são apreciados: formulação compressível e incompressível. A primeira considera a influência da temperatura e pressão sobre a densidade, enquanto a segunda faz a densidade constante. Em situações reais, não existe fluido dinâmica incompressível, já que o campo das velocidades, por meio da equação da continuidade, altera os perfis de densidade. Do ponto de vista computacional, a formulação compressível gera um esforço computacional e não linearidades extras. Sendo os campos de velocidades baixos e a pressão de operação do processo próxima à atmosférica, pode-se adotar a situação de incompressibilidade numérica. Os esquemas numéricos são diferentes e estão bem explicados em Maliska (1990).

Não só a escolha da forma de discretização, mas principalmente o algoritmo numérico da solução, são fundamentais para o êxito dos resultados. Nesta linha de discussão três são os fatores que devem ser considerados: consistência, estabilidade e convergência.

Admitindo que $u_e(x,t)$ seja a solução exata da equação (2.1).

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (2.1)$$

Pode-se avaliar a solução exata nos pontos de discretização no tempo e no espaço e estimar o erro local de truncamento (ELT). Este erro é a diferença entre a solução exata e a discreta ($u_d(x,t)$).

$$ELT = u_e(x,t) - u_d(x,t) \quad (2.2)$$

Um procedimento numérico é consistente se:

$$ELT \rightarrow 0 \quad \text{quando} \quad \Delta x, \Delta t \rightarrow 0 \quad (2.3)$$

A forma prática de testar a condição acima é comparar uma equação diferencial ordinária ou parcial que tenha solução analítica com seu desempenho na forma discreta. Em situações reais Δx e Δt não podem, de fato, estarem excessivamente próximo à zero por limitações numéricas dos processadores computacionais. Mas o refinamento factível das malhas permite concluir que os resultados estão coerentes e consistentes, sem a necessidade de passos de integração espacial e temporal muito pequenos.

O segundo conceito, o da estabilidade, diz respeito ao comportamento numérico da equação, ou seja, se o processo converge ou diverge. Um sistema de equações diferenciais é estável se há a convergência. Caso contrário este é considerado instável e por isso não pode ser aplicado como ferramenta auxiliar em ciência e nas engenharias. Situações intermediárias entre as expostas acima podem ocorrem. O sistema pode ser estável sob condições específicas. Neste caso, sua aplicação é limitada para o campo no qual este converge. Análises matemáticas estão disponíveis para a determinação da estabilidade de uma equação ou um sistema destas. O critério de Von Neumann é o mais utilizado, e fornece em sua instância final subsídios baseados nos passos de integração e na característica da malha. O critério de análise de Von Neumann é encontrado principalmente em literaturas direcionadas a métodos de resolução de equações diferenciais e livros de fluido dinâmica computacional como Colella e Puckett (1994), Maliska (1995) e Ferziger e Peric (1999). De acordo com o critério de análise de Von Neumann, alguns procedimentos numéricos são intrinsecamente instáveis para fluxos predominantemente convectivos, como as diferenças central e avançada. O esquema atrasado é estável e portanto deve ser o preferido em comparação aos dois últimos. As etapas desta análise estão em Colella e Puckett (1994). Uma alternativa à análise de estabilidade mencionada é o teorema de equivalência de Lax que consta em Le vecque (1992) e afirma que a consistência e estabilidade levam à estabilidade. Portanto, a convergência que é o produto final dos analistas numéricos, requer necessariamente consistência e estabilidade. Estes três conceitos formam o tripé de sustentação do sucesso ou fracasso das simulações computacionais, independente da complexidade do assunto. Mais uma vez, quanto à estabilidade, já foi mencionado que a formulação atrasada para as diferenças finitas é estável para situações de predominância convectiva. Esta situação ocorre tipicamente na fluido dinâmica computacional. Uma vez que o assunto em questão é a dinâmica do gás, este procedimento está no escopo da discussão. Verdadeiramente o que se entende por

diferenças atrasadas é a derivação considerando que o sentido do fluxo dá-se contra os pontos usados na aproximação da derivada. Ou seja, para ($u^i - u^{i-1}$) o fluxo ocorre no sentido de “ $i-1$ ” para “ i ”. A formulação deste enfoque apresenta-se da seguinte maneira:

Para a aproximação numérica da derivada $\frac{du}{dx}$,

$$\begin{aligned}\frac{du}{dx} &= \frac{u^i - u^{i-1}}{\Delta x} && \text{se } u^i > 0 \quad e \\ \frac{du}{dx} &= \frac{u^{i+1} - u^i}{\Delta x} && \text{se } u^i < 0\end{aligned}\tag{2.4}$$

A melhoria de desempenho dos procedimentos numéricos, e com isto leia-se consistência, estabilidade e convergência, apresenta outros prismas além destes, e que também podem contribuir favoravelmente. Um destes é trabalhar com o modelo na sua forma conservativa. Isto significa que a discretização das derivadas não têm os termos expandidos conforme a regra da cadeia, ou que parâmetros sejam fixados constantes em dado intervalo de tempo. Um exemplo tradicional é a equação de Burger sem o termo viscoso.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} = 0\tag{2.5}$$

Na forma não conservativa a derivada parcial em relação à “ x ” poderia ser expressa com um termo constante “ u ” e outro derivado em relação à “ x ”. Sendo feita a atualização a cada passo da integração, desde que suficientemente pequeno, garantiria a representatividade da equação (2.5).

$$\frac{1}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} = \frac{u}{2} \cdot \frac{(u^i - u^{i-1})}{\Delta x}\tag{2.6}$$

A representação conservativa discreta difere da seguinte maneira:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} = \frac{1}{2} \cdot \frac{(f^i - f^{i-1})}{\Delta x} ; \quad f = u^2 \quad (2.7)$$

Esta metodologia confere ao sistema maior estabilidade numérica e representatividade do fenômeno, já que o fluxo que contém a característica fenomenológica é preservado ao longo da integração temporal.

Para a dinâmica dos gases, um conjunto próprio de equações também pode ser representado em sua forma conservativa. São as equações de Euler, equações (2.8) a (2.11), que são muito parecidas com as equações de Navier-Stokes, porém as últimas computam os termos fonte, viscoso, condutivo e difusivo. Já que a viscosidade de gases é muito pequena, e para fluxos com predominância convectiva, pode-se desconsiderar a condutividade térmica e difusão, as equações de Euler representam a fluido dinâmica dos gases.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho.u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho.v)}{\partial y} = 0 \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial(\rho.u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho.u^2 + p)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho.u.v)}{\partial y} = 0 \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial(\rho.v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho.u.v)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho.v^2 + p)}{\partial y} = 0 \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial(u.(E + p))}{\partial x} + \frac{\partial(v.(E + p))}{\partial y} = 0 \quad (2.11)$$

Sendo,

ρ – Massa específica.

E – Energia total, definida como: $E = \frac{1}{2} \rho \cdot vel^2 + \rho \cdot e$

e – Energia interna, definida por: $e = Cv \cdot T$

t – Tempo.

u – Velocidade em x.

v – Velocidade em y.

As equações de Euler apresentam uma característica peculiar da dinâmica dos gases, é formada por equações com comportamento hiperbólico. Resolver sistemas deste tipo requer cuidados especiais que métodos numéricos mais simples não o tem. As principais complicações são a formação de ondas de choque e o subsequente aparecimento de múltiplas soluções.

Onda de choque é a situação que aparece com o avanço das Equações de Euler no tempo. Em determinado ponto não há mais solução única. Isto ocorre quando as características cruzam e surge eventualmente quando o fluxo inverte de sinal em certo ponto da malha no instante “t” quando o choque é detectado. Além deste ponto não há soluções clássicas da equação diferencial parcial e a solução que se deseja é descontínua. Basta portanto, encontrar a solução que tenha significado físico. Com o objetivo de conhecer a solução adequada recorre-se ao conceito da condição entrópica, que não deve ser violada. Fixando u^ϵ como a solução de:

$$\frac{\partial u^\epsilon}{\partial t} + \frac{\partial f(u^\epsilon)}{\partial x} = \varepsilon \cdot \frac{\partial^2 u^\epsilon}{\partial x^2} \quad (2.12)$$

Sendo ε o coeficiente viscoso e que satisfaça a relação abaixo.

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u^\epsilon = u \quad (2.13)$$

A solução que satisfaça a equação (2.12) é única, e tem dependência com a condição inicial. Soluções deste tipo são aquelas que satisfazem a condição entrópica. A terminologia vem do fato que a entropia pode apenas aumentar através de uma onda de choque. Adicionar o termo viscoso à equação (2.12) é um mecanismo utilizável para identificar a solução que tenha esta propriedade.

A Figura 2.1 mostra a formação de uma onda de choque com a evolução da equação de Burger.

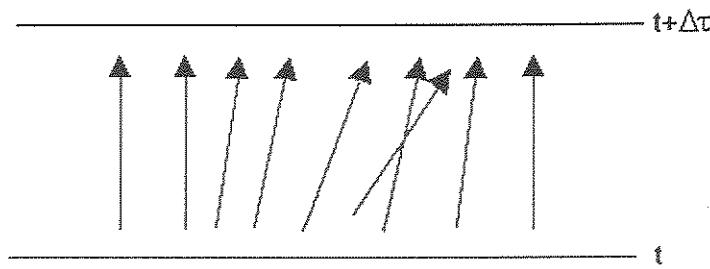


Figura 2.1 - Formação de uma onda de choque com a equação de Burger.

Detalhes sobre ondas de choque e múltiplas soluções podem ser mais bem estudadas em LeVeque (1992), Colella e Puckett (1994) e Ferziger (1999). Há um outro critério que é usado a fim de selecionar a solução fisicamente coerente e de mais fácil implementação prática. Esta condição deve satisfazer a solução na descontinuidade. A velocidade da descontinuidade é dada por:

$$s = \frac{f(u_e - u_d)}{u_e - u_s} \quad (2.14)$$

Sendo,

$f(u)$ – Forma conservativa em função das velocidades.

s – Velocidade de propagação da onda descontínua.

u_e, u_d – Velocidade à esquerda e direita no ponto de descontinuidade.

A entropia é satisfeita se,

$$\frac{\partial f(u_e)}{\partial u} < s < \frac{\partial f(u_d)}{\partial u} \quad (2.15)$$

Fica claro que um procedimento numérico robusto, capaz de contornar o aparecimento de soluções não contínuas nas ondas de choque é vital para o bom desempenho da modelagem. Um método bastante conhecido é o de Godunov. Este algoritmo processa as informações da mesma maneira que as diferenças atrasadas, diferindo no ponto que surge a onda de choque. Para a equação de Burger, equação (2.1), o procedimento, já discretizado, é o seguinte:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F_{j-\frac{1}{2}} - F_{j+\frac{1}{2}} \right) \quad (2.16)$$

$$F_{j+1/2}^{\text{Godunov}} = F_{j+1/2}^{\text{Atrasada}} + \alpha(u_{j+1} - u_j) \quad (2.17)$$

Sendo,

α – Maior que zero e da ordem de u_j ou u_{j+1}

Para situações com velocidade constante o método de Godunov é um procedimento que considera derivadas atrasadas, e por isso também pode ser usado nestas situações.

2.3 Problemas de Otimização

Este texto não tem por finalidade abranger todos os aspectos do planejamento e controle da produção, mas sim a familiarização com alguns termos técnicos e uma breve descrição dos modelos matemáticos.

Serão superficialmente abordados os tipos de problemas de otimização da produção e os algoritmos indicados para sua solução. Para o estudo de caso em questão, fornecido rotativo para incineração, o modelo e os detalhes da modelagem matemática serão tratados adiante.

Não existe uma formulação capaz de representar todos os processos, por que cada unidade tem peculiaridades que em algum ponto a formulação difere. Pode-se citar entre estes aspectos, a capacidade produtiva, disposição dos equipamentos, fonte e qualidade da matéria prima, manutenção dos equipamentos, modelo do equipamento, qualidade construtiva e outros.

Entretanto, tem-se em comum a quase todos os modelos de otimização uma estrutura. Esta estrutura é formada por uma função objetivo, a qual será sujeita a maximização ou minimização e as restrições. O tipo da função objetivo e das restrições geram problemas de características e enfoques distintos.

O problema mais simples de ser resolvido por procedimentos numéricos é a programação linear. Neste a função objetivo e suas restrições são lineares. Abaixo um exemplo de um problema de programação linear.

$$\begin{aligned} f &= x_1 - 3x_2 + x_3 - 4x_4 \\ \text{sujeito a} \\ x_1 + x_2 &\leq 2 \\ x_3 + x_4 &> 1 \\ x_1, x_2, x_3, x_4 &> 0 \end{aligned} \tag{2.18}$$

O objetivo pode ser tanto maximizar quanto minimizar “f”, mas deve-se montar as restrições de modo que estas sejam factíveis. Para o caso acima isto significa em achar valores para os x's que satisfaçam todas as restrições. Caso isto não ocorra o problema é dito infactível. Nestas situações é preciso reformular o problema a fim de achar uma formulação passível de minimização ou maximização, ou mudar as estimativas iniciais.

Dois métodos para resolver problemas de programação linear são mais populares: simplex e o método dos pontos interiores. Detalhes sobre estes métodos matemáticos e uma descrição detalhada de programação linear podem ser vistos em Rardin (1998).

No problema acima as variáveis são contínuas, ou seja, podem assumir quaisquer valores nas faixas estipuladas. Em algumas situações é possível encontrar variáveis discretas, aquelas que podem receber um número restrito de valores. Este classe de problemas é conhecida como programação mista inteira linear, em inglês MILP (mixed integer linear programming).

Para exemplificar uma situação prática do assunto, basta imaginar a formulação de uma mistura multicomponente. Ao elaborar o produto o formulador usa o estoque. Em determinada situação é possível, devido à praticidade operacional, ter que se optar por usar todo um lote, ou não usá-lo. Esta é a situação típica de variável inteira, ela passa a assumir dois valores zero (não usa) ou um (usa tudo). Um método bastante usado neste tipo de problemas é o “branch and bound”, que usa uma busca por meio de uma árvore de decisões. Em Rardin (1998) há mais informações sobre este assunto.

Caso a variável “ x_4 ”, do problema usado como exemplo para programação linear fosse inteira, e só assumisse os valores de “0” ou “1”, tem-se um caso de programação mista inteira linear.

$$\begin{aligned} f &= x_1 - 3.x_2 + x_3 - 4.x_4 \\ \text{sujeito a} \\ x_1 + x_2 &\leq 2 \\ x_3 + x_4 &> 1 \\ x_1, x_2, x_3 &> 0 \\ x_4 &= \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} \end{aligned} \tag{2.19}$$

Até o momento os problemas descritos foram lineares, pois as funções objetivo e as restrições eram lineares. Problemas não lineares (NLP – nonlinear programming) podem ocorrer na função objetivo, nas restrições, ou em ambas. Neste casos a técnica tradicional de solução é a programação quadrática seqüencial, SQP (successive quadratic programming). Atualmente também tem-se adotado os algoritmos genéticos para resolver esta classe de problemas. As implicações do uso dos algoritmos genéticos e SQP serão comentadas mais adiante. Segue um exemplo de problema não linear.

$$\begin{aligned}
 f &= (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 1)^2 \\
 \text{sujeito a} \\
 x_1 - 2x_2 + 1 &= 0 \\
 \frac{-(x_1)^2}{4} - (x_2)^2 + 1 &\geq 0
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

Assim como no caso da programação linear, também é possível aparecer na formulação de problemas não lineares variáveis inteiras. Esta última categoria de problemas que será estuda é a programação mista inteira não linear, MINLP (mixed integer nonlinear programming). Conforme já foi mencionado, o propósito no momento é apenas mostrar as possibilidades, e não aprofundar o estudo. Para isto existem a bibliografias específicas, e para o MINLP e NLP recomenda-se Floudas (1995). Um problema MINP tem a seguinte estrutura:

$$\begin{aligned}
 f &= (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 1)^2 + (x_3 - 1)^2 + (x_4 - 1)^2 \\
 \text{sujeito a} \\
 x_1 - 2x_2 + 1 &= 0 \\
 \frac{-(x_3)^2}{4} - (x_4)^2 + 1 &\geq 0 \\
 x_1, x_2, x_3 &> 0 \\
 x_4 &= \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

2.4 Controle de processos químicos

Norteando-se pelos conceitos fundamentais que orientam o desenvolvimento de aplicações destinadas à integração de processos químicos contínuos em tempo real, segue um estudo bibliográfico do assunto.

O principal conteúdo no que se refere à processamento em tempo real é a atualização das informações de maneira a não comprometer o desempenho global do processo, ou unidade. Isto implica em aspectos tecnológicos da estrutura de controle e das instalações. A dinâmica do processo deve ser conhecida de início, a fim de se estabelecer qual a necessidade real de atuação do controlador. É natural concluir que processos com dinâmicas diferentes, um lento e outro muito rápido, requerem respostas em ordem de tempo compatíveis, por isso as respostas dos controladores devem estar adequadas à estas situações. Por outro lado, os analisadores nas instalações também podem ser uma restrição, já que termopares respondem muito mais rapidamente que analisadores de oxigênio por exemplo. Assim, o projeto de uma estrutura de controle em tempo real deve ponderar, além da eficiência do controlador propriamente dito, às questões supramencionadas.

Do ponto de vista do algoritmo numérico outros aspectos são relevantes, tais como: robustez numérica, capacidade de convergência e habilidade de controlar o processo nas condições reais da planta.

A robustez numérica e a convergência não são problemas diretamente relacionados ao controle do processo, mas sim com os métodos computacionais para seus cálculos. Em muitos casos técnicas de otimização são aplicadas, e como é sabido estas apresentam limitações

Quanto à capacidade em controlar adequadamente o processo, em geral formulações lineares são indicadas para operação em estado estacionário próximas ao “set point”, ou para perturbações com amplitude restrita a determinadas faixas. Porém, em muitas situações as não linearidades dos processos são tais que se faz obrigatório o uso de um controlador não linear. Outro caso em que há a necessidade de controle não linear, é para mudanças de patamares de operação. Incorporando o planejamento operacional, independente do termo temporal (longo ou curto prazo) e das estratégias econômicas

globais da corporação, haverá alteração nos objetivos produtivos, e consequentemente alterações mais acentuadas no processo.

Com o objetivo de identificar as limitações e adequações de cada tipo de estratégia de controle, será apresentada uma revisão de controladores tipo “feedback”, preditivos e não lineares. Neste contexto, as possibilidades que cada estrutura oferece para adequação da integração controle e otimização em tempo real serão mais bem exploradas e comentadas.

2.4.1 Controle “feedback”

Este tipo de controle foi o pioneiro na indústria de processos químicos devido à sua simplicidade de implementação. Como o nome em inglês diz, o processo é controlado (elemento de controle) com informações adiante, por isso a denominação “feedback”, ou melhor, retroalimentação. Trata-se de abrir ou fechar um elemento de controle (válvula) na proporção do sinal recebido, que mede a diferença entre a variável controlada e o “set point”. Os mais populares são os PID, os quais contém três termos que agem na formulação do sinal para a válvula: proporcional, derivativo e integral. Cada um destes apresenta uma peculiaridade em relação à sua função no modelo do controlador - Babatunde e Ray (1994). A Figura 2.2 mostra um processo controlado por um controlador tipo “feedback”.

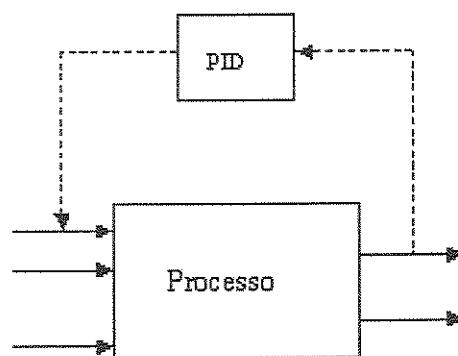


Figura 2.2 - Planta em malha fechada com um controlador tipo PID.

A formulação de um PID é dada por:

$$s = k \cdot \varepsilon + \tau_d \cdot \frac{d\varepsilon}{dt} + \frac{1}{\tau_I} \cdot \int_0^t \varepsilon \cdot dt + p \quad (2.22)$$

E o erro é calculado por:

$$\varepsilon = (x - x^{setpoint}) \quad (2.23)$$

Sendo que,

k, τ_d, τ_I - parâmetros do controlador

p - constante quando ε é nulo.

s - valor do sinal enviado à válvula.

x - variável controlada.

O modelo deste tipo de controlador é linear, portanto não é apropriado para situações com alto grau de não linearidade, ou com mudança no patamar de operação. Uma forma de contornar esta limitação seria atualizar os parâmetros do controlador por meio de um modelo matemático, ou com informações do banco de dados da planta, caso esteja disponível em linha. A Figura 2.3 mostra um esquema da atualização sugerida.

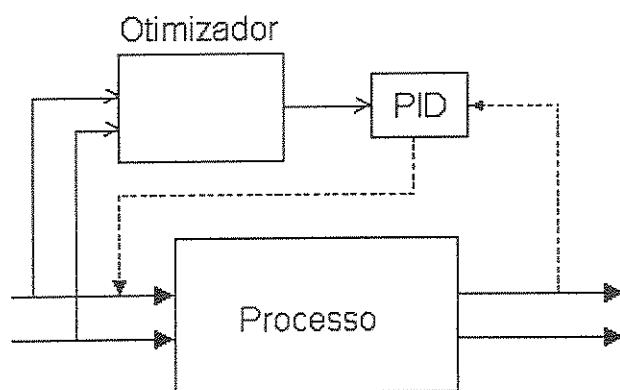


Figura 2.3 - Atualização “on-line” dos parâmetros do PID.

A característica linear de controladores PID está baseada no fato que seus parâmetros são calibrados para serem eficientes apenas em faixas limitadas de operação, através da análise de sua dinâmica. Por isso, a sugestão proposta para este caso pede novos valores para cada vez que houver mudança considerável na condição operacional. Alguns critérios estão disponíveis em literatura, como em Babatunde e Ray (1994). A representação matemática destes pode ser vista nas equações (2.24) a (2.27).

$$IAE = \int_0^{\infty} |\varepsilon(t)| dt \quad (\text{IAE} - \text{Integral Absolute Error}) \quad (2.24)$$

$$ISE = \int_0^{\infty} \varepsilon(t)^2 dt \quad (\text{ISE} - \text{Integral Squared Error}) \quad (2.25)$$

$$ITAE = \int_0^{\infty} t |\varepsilon(t)| dt \quad (\text{ITAE} - \text{Integral Time-weighted Absolute Error}) \quad (2.26)$$

$$ITSE = \int_0^{\infty} t \varepsilon(t)^2 dt \quad (\text{ITSE} - \text{Integral Time-weighted Squared Error}) \quad (2.27)$$

Cada equação acima prima por um aspecto. O critério ISE penaliza erros maiores, sem ponderar o tempo de decaimento. Por sua vez, o ITAE penaliza erros a tempos mais longos, e o ITSE penaliza erros maiores em períodos maiores.

Conforme observou-se nas equações (2.24) a (2.27), a qualidade da obtenção “online” dos parâmetros do controlador depende do modelo dinâmico. Como os critérios apresentados acima precisam ser minimizados no sentido de reduzir sua trajetória, cada passo no otimizador corresponde a uma integração temporal. Ou trabalha-se com um modelo de baixo esforço computacional, ou a estratégia está comprometida dentro do

escopo da integração em tempo real. Em geral estes modelos não são satisfatórios para representar o processo, e por consequência está não é a melhor estratégia.

2.4.2 Controle preditivo

Este trata de uma abordagem diferente da descrita no item precedente, os controladores “feedback”. Sua origem está no final da década de setenta do século passado, principalmente por Richalet *et al.* (1976) e Cutler e Ramakter (1979). O enfoque deste tipo de controlador tem como perspectiva antever o comportamento do processo, desta maneira é possível minimizar os desvios em relação a uma trajetória pré-definida.

De acordo com Borbons e Camacho (1999), controladores preditivos têm três pontos em comum: modelo do processo, função objetivo e obtenção da lei de controle.

Os modelos do processo são conhecidos como modelos de convolução, sendo estes o de resposta ao pulso e resposta ao degrau. O primeiro é representado por:

$$y(t) = \sum_{i=1}^{\infty} h_i \cdot u(t-i) \quad (2.28)$$

Para,

h_i – Resposta do processo quando este é perturbado com pulso unitário.

$u(t-i)$ - Ação de controle no instante “t-i”.

O modelo também pode ser utilizado no caso multivariado e sua formulação esta representada na equação (2.29).

$$y_j(t) = \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^N h_i^{kj} \cdot u^k(t-i) \quad (2.29)$$

O segundo modelo de convolução citado, resposta ao degrau, modela o processo de maneira semelhante ao caso acima, com a diferença que este usa como trajetória de referência em malha aberta, a perturbação degrau. O modelo truncado para “N” pontos do horizonte de predição é representado por:

$$y(t) = y_0 + \sum_{i=1}^N g_i \cdot \Delta u(t-i) \quad (2.30)$$

$$\Delta u(t-i) = u(t) - u(t-i) \quad (2.31)$$

Sendo que y_0 pode ser adotado como nulo, sem perda de generalidade.

g_i – Resposta do processo quando este é perturbado com um degrau.

Os valores de h_i e g_i podem ser provenientes de um banco de dados, ou obtidos por um modelo matemático. Em ambos os casos estes valores são determinados em uma condição pré-estabelecida, e o controlador atua com esta referência. As Figuras 2.4 e 2.5 mostram as respostas para um pulso unitário e um degrau de um processo em malha aberta.

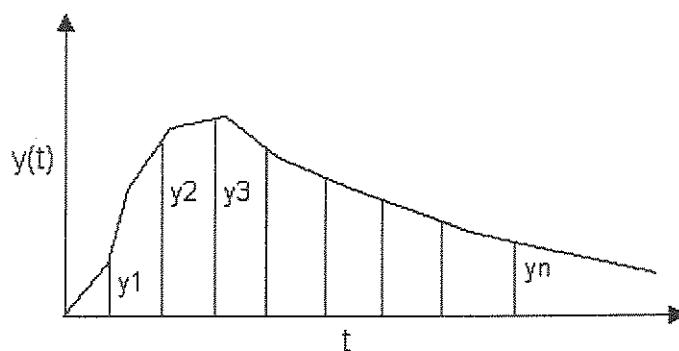


Figura 2.4 - Resposta em malha aberta para perturbação pulso unitária.

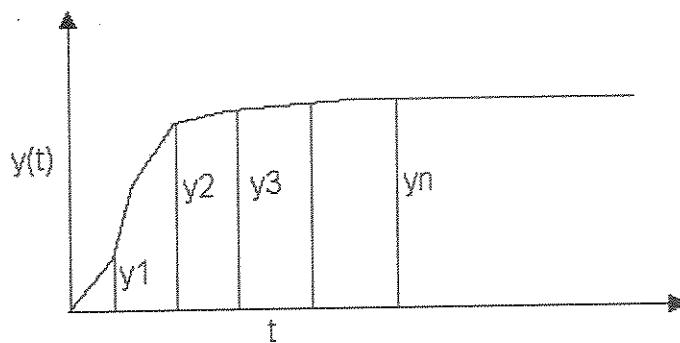


Figura 2.5 - Resposta em malha aberta para perturbação degrau.

Outro modelo matemático bastante difundido na área de controle de processos químicos é o estado-espacão. Este é dado por:

$$x(t) = M \cdot x(t-1) + N \cdot u(t-1) \quad (2.32)$$

$$y(t) = Q \cdot x(t) \quad (2.33)$$

Cada um dos modelos é adotado para uma estratégia preditiva específica, como MAC (Model Algorithm Control), DMC (Dynamic Matrix Control) e PFC (Predictive Functional Control). As diferenças, vantagens e desvantagens de cada uma destas serão apresentadas mais adiante.

Todas as estratégias referidas no parágrafo anterior devem submeter-se a um objetivo. O conceito é o mesmo, e leva à minimização da resposta ao longo do tempo, com uma trajetória de referência pré-determinada. Este caminho é atingido com a ação de controle. Também é possível ponderar neste objetivo a ação do elemento de controle com mínimo esforço da válvula. A função básica para os algoritmos preditivos de controle é:

$$J(N_1, N_2, N_u) = \sum_{j=N1}^{N2} \delta(j) \cdot (y(t+j) - w(t+j))^2 + \sum_{j=1}^{N_u} \lambda(j) \cdot (\Delta u(t+j-1))^2 \quad (2.34)$$

Sabendo que N_1 e N_2 são os limites inferior e superior do horizonte de predição, ou seja, o intervalo de tempo onde os valores preditos serão comparados com a trajetória para uma dada seqüência da ação de controle. O horizonte de controle é representado por N_u , e indica o intervalo de tempo cuja ação de controle atuará. Na prática alguns conceitos são importantes, como o caso de processos com tempo morto. Nesta situação não há razão para N_1 atuar antes, seria uma ação desnecessária e indesejável. Assim como em caso de resposta inversa, o valor de N_1 pode ser fixado em um instante cuja inversão já ocorreu e o processo responde normalmente.

Em aplicações reais apesar de calculadas N_u ações de controle futuras, apenas a primeira é implementada. Isto porque a cada instante novos valores de Δu podem estar sendo calculados, desta maneira o controlador fica mais robusto. Este última afirmação fica ainda mais consistente quando o desvio da predição em relação ao dado real é considerado no modelo. Logo, ainda que o modelo apresente desvios em relação à planta, e sempre apresentará, estes serão corrigidos toda vez que o controlador for acionado.

Os parâmetros $\delta(j)$ e $\lambda(j)$ são fatores que ponderam a influência dos desvio em relação à trajetória e das ações de controle respectivamente. Uma maneira de penalizar as ações futuras pode ser dada com a seguinte expressão:

$$\delta(j) = \alpha^{N^2-j} \quad (2.35)$$

Caso α tenha valores entre 0 e 1, os desvios mais distanciados do instante t são mais penalizados daqueles próximos. Isto gera uma ação de controle mais suave e com menos esforço. Por outro lado, caso α seja maior que 1 os desvios dos instantes iniciais são mais penalizados, resultando em uma ação de controle mais rígida. Estes parâmetros também podem ser ajustados à valores constantes, de acordo com ensaios preliminares, ou experiência anterior para uma certa situação.

O embasamento teórico sobre controladores preditivos, assim como as equações, foram obtidas em Bordons e Camacho (1999).

Até o momento nada comentou-se sobre a trajetória de otimização “ $w(t)$ ” que o controlador deve seguir. Este percurso não obrigatoriamente precisa ser o real, mas sim apenas um modelo matemático referenciado na função objetivo do controlador. Este caminho é definido de acordo com as possibilidades que a dinâmica do processo oferece. Algumas sugestões apresentadas em Bordons e Camacho (1999) estão nas equações (2.36) e (2.37).

$$w(t) = y(t) \quad ; \quad w(t+k) = \alpha \cdot w(t+k-1) + (1-\alpha) \cdot r(t+k) \quad k = 1 \dots N \quad (2.36)$$

$$w(t+k) = r(t+k) - \alpha^k \cdot (y(t) - r(t)) \quad (2.37)$$

Sendo $r(t)$ uma referência, que na ausência de maiores detalhes pode ser fixada como o “set point”. Os parâmetros α e k são responsáveis pela suavidade da ação de controle. Quando mais próximo de “1” α estiver, mais suave é a trajetória.

A Figura 2.6 exemplifica as diferenças entre referência e trajetória.

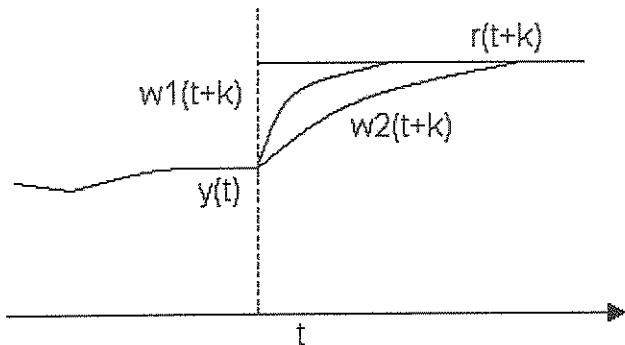


Figura 2.6 - Trajetórias de uma ação de controle.

A função objetivo apresentada acima é uma típica equação quadrática sem restrições, cuja solução pode ser obtida analiticamente. Esta característica confere garantia de convergência global, pois trata-se de um problema convexo. Isto é bastante vantajoso ao

escopo deste projeto, uma vez que um dos pontos de gargalo é a obrigatoriedade de convergência com baixo esforço computacional. Portanto, nesta formulação os algoritmos preditivos que já se mostraram bastante eficientes em aplicações industriais Clarke (1988) , Qin e Badgwell (1997), é provável que também sejam para fornos rotativos de incineração de resíduos sólidos.

Entretanto, é possível adicionar à função objetivo restrições e modelos preditivos não lineares. Em ambos os casos não há mais solução analítica, apenas numérica. As restrições estão em geral relacionadas com limites inferiores e superiores de parâmetros operacionais, como vazão de alimentação, temperatura interna. Há ainda restrições nos elementos de controle, que por razões construtivas não podem exceder certas faixas de operação. Nestas situações não há garantia de convergência numérica global do otimizador que calcula as ações de controle. Isto porque com o modelo não linear a função pode ser não convexa. Com restrições há convergência, mas o modelo preditor deve ser linear e as restrições também. Porém, nesta última situação o processo iterativo é tratado numericamente. Cabe então analisar se o algoritmo de otimização se enquadra, ou não, na filosofia de integração em tempo real.

O resultado deste procedimento é a obtenção da lei de controle, ou seja, as ações que o controlador deve executar no processo. Este é o resultado final da otimização da função objetivo formulada pela equação (2.34).

Pouco se falou sobre modelos preditivos não lineares. Estes serão abordados em outro item. A seguir serão descritas as principais estratégias de controle preditivo, DMC (Dynamic Matrix Control), MAC (Model Algorithm Control) e GPC (General Predictive Control).

2.4.3 DMC

Esta abordagem faz uso do modelo baseado na resposta degrau em malha aberta. A equação mencionada acima é acrescida do desvio modelo-planta.

$$y(t+k) = \sum_{i=1}^{\infty} (g_i \cdot \Delta u(t+k-i)) + n(t+k) \quad (2.38)$$

Sendo $n(t+k)$ a diferença entre o valor da variável controlada fornecido pelo modelo e a medida no processo.

$$n(t+k) = y_m(t) - y(t) \quad (2.39)$$

Caso o processo seja estável, em determinado período de amostragem "N", pode considerar-se que:

$$g_{k+i} - g_i \approx 0 \quad i > N \quad (2.40)$$

Este horizonte de predição cobre toda a dinâmica necessária a fim de se proceder com os cálculos.

Expandido a equação de predição tem-se:

$$y(t+1) = g_1 \cdot \Delta u(t) + n(t+1) \quad (2.41)$$

$$y(t+2) = g_2 \cdot \Delta u(t) + g_1 \cdot \Delta u(t+1) + n(t+2) \quad (2.42)$$

$$y(t+p) = \sum_{i=p-m+1}^p g_i \cdot \Delta u(t+p-i) + n(t+p) \quad (2.43)$$

O sistema pode ser escrito na forma de $y = G \cdot u + n$, e a matriz dinâmica por:

$$G = \begin{bmatrix} g_1 & 0 & \cdots & 0 \\ g_2 & g_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_m & g_{m-1} & & g_1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_p & g_{p-1} & \cdots & g_{p-m+1} \end{bmatrix} \quad (2.44)$$

O algoritmo de controle é o mesmo da equação (2.34), cuja meta é minimizar um objetivo que envolve o desvio da trajetória e as ações de controle. É importante salientar que as ações de controle não precisam pertencer à função objetivo do controlador. Se não houver restrições, o modelo acima pode ser resolvido analiticamente e as ações de controle podem ser especificadas pela expressão abaixo.

$$u = (G^T \cdot G + \lambda I)^{-1} \cdot G^T \cdot (w - n) \quad (2.45)$$

Vale relembrar que em estratégias preditivas apenas a primeira ação de controle é de fato implementada. Isto porque é impossível predizer, com exatidão, o comportamento da planta, e tão pouco antecipar as futuras perturbações.

Apesar da grande aceitação do DMC na indústria, Lundstrom et al (1995) apresentam algumas limitações que se não observadas podem levar à instabilidade no controle.

A primeira está relacionada com o erro de truncamento no horizonte de previsão. Para processos com constante de tempo muito maior daquelas especificadas no controlador, o erro pode ocasionar falhas no sistema de controle. Como o DMC trabalha com um modelo de convolução baseado na resposta em malhar aberto de uma perturbação degrau, influências diferentes, como a perturbação rampa, podem gerar os mesmos problemas. Esta deficiência está mais uma vez associada à qualidade de representação do modelo. Os erros de modelagem, quando significativos, levam a estruturas preditivas de controle não satisfatórias. Uma alternativa a esta limitação é usar o modelo tipo estado-espacó.

Outra restrição ao uso o DMC é limitar-se, devido à estrutura preditiva de seu modelo, a processos estáveis.

Um terceiro caso no qual o DMC eventualmente pode não ser eficiente é em processos multivariados. Neste caso fortes interações entre as entradas afetando as saídas trazem ao modelo erros de predição, assim como na primeira situação comentada. Lundstrom et al (1995) descrevem a melhor maneira de contornar esta limitação.

2.4.4 MAC

O Model Algorithm Control (MAC) é bastante similar à formulação do Dynamic Matrix Control (DMC). Neste caso o modelo do processo é avaliado com o comportamento do processo em malha aberta para um pulso unitário. A equação (2.46), que descreve o processo é linear. Todavia nada impede de adotar-se um modelo não linear, as vantagens e desvantagens já foram comentadas. O modelo preditor considerando o desvio $n(t)$ é dado por:

$$y(t+k) = \sum_{j=1}^N (h_j \cdot u(t+k-j)) + n(t+k) \quad (2.46)$$

Se M é o horizonte de predição, u_+ as ações futuras de controle, u_- as ações passadas de controle, y a predição , n o desvio e w a trajetória de referência tem-se:

$$y = H_1 \cdot u_+ + H_2 \cdot u_- + n \quad (2.47)$$

Sendo que,

$$u_+ = \begin{bmatrix} u(t) \\ u(t+1) \\ \vdots \\ u(t+M-1) \end{bmatrix}; u_- = \begin{bmatrix} u(t-N+1) \\ u(t-N+2) \\ \vdots \\ u(t-1) \end{bmatrix}; y = \begin{bmatrix} y(t+1) \\ y(t+2) \\ \vdots \\ y(t+M) \end{bmatrix}; n = \begin{bmatrix} n(t+1) \\ n(t+2) \\ \vdots \\ n(t+M) \end{bmatrix} \quad (2.48)$$

$$H_1 = \begin{bmatrix} h_1 & 0 & \cdots & 0 \\ h_2 & h_1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots \\ h_M & h_{M-1} & \cdots & h_1 \end{bmatrix}; H_2 = \begin{bmatrix} h_N & \cdots & h_i & \cdots & h_2 \\ 0 & \cdots & h_j & \cdots & h_3 \\ \cdots & \ddots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & h_N & \cdots & h_{M+1} \end{bmatrix} \quad (2.49)$$

Se o sistema não tiver restrições, as ações futuras de controle podem ser calculadas com a seguinte expressão analítica:

$$u_+ = (H_1^T \cdot H_1 + \lambda I)^{-1} H_1^T \cdot (w - f) \quad (2.50)$$

Por tratar-se de uma estratégia com horizonte de controle retroativo, apenas a ação $u(t)$ é implementada, rejeitando as demais ações e repetindo os cálculos no próximo intervalo de amostragem.

2.4.5 GPC

Esta estratégia de controle preditivo, assim como as demais já descritas, também está estruturada em modelos preditivos lineares, funções objetivos e ações de controle. Para este caso em particular o modelo preditivo difere dos outros dois, pois trabalha com funções de transferência.

Sabe-se que é possível trabalhar com o modelo linearizado de um processo em faixas de operação próximas ao estado estacionário usando a linearização. Este modelo pode ser composto de uma somatória de diversos elementos, gerando um modelo linear de alta

ordem. Um exemplo disto é uma tubulação dividida em elementos, com balanços de massa e energia, e para cada balanço de elemento tem-se um modelo de primeira ordem. O modelo que descreve o processo será de ordem proporcional ao número de divisões vezes dois, já que tem-se dois balanços (massa e energia). O resultado é um modelo matemático capaz de representar muito bem a dinâmica do processo, entretanto sua aplicação em controle pode ser restrita devido à sua complexidade matemática.

A solução para tal empasse é adotar um modelo simplificado do processo, que considere em sua dinâmica o ganho, a constante de tempo e o tempo morto. Este modelo simplificado pode ser representado com a seguinte equação:

$$G(s) = \frac{K}{1 + \tau \cdot s} \cdot e^{-s\tau_D} \quad (2.51)$$

Sendo,

K – Ganho estático.

τ – Constante de tempo.

τ_D – Tempo morto.

A Figura 2.7 compara a performance de modelos de diferentes ordem.

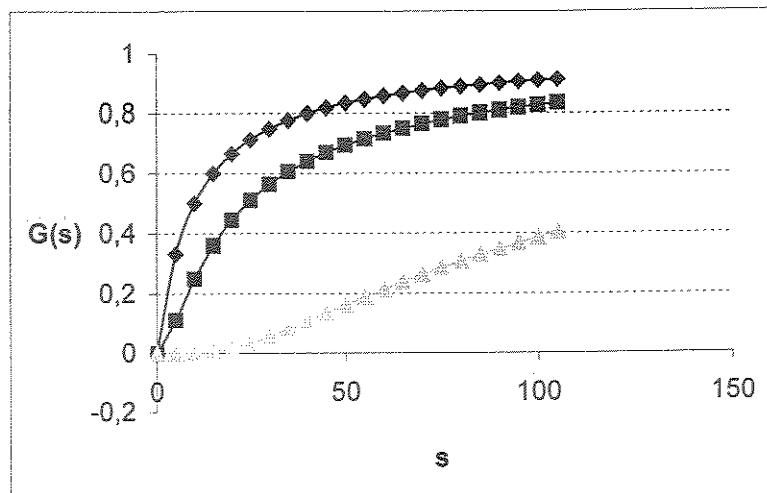


Figura 2.7 - Respostas dinâmicas de sistemas com ordens diferentes em malha aberta.

O próximo passo é obter os parâmetros do modelo. Para tanto, faz-se necessária a dinâmica real do processo, ou a resposta dinâmica de um modelo rigoroso e preferencialmente validado.

Estes parâmetros podem ser obtidos em dois instantes no tempo, t_1 e t_2 . Seus valores representam, respectivamente, os instantes em que 28,3% e 63,2% do estado estacionário é atingido.

$$K = \frac{\Delta y}{\Delta x} \quad (2.52)$$

$$\tau = 1.5(t_2 - t_1) \quad (2.53)$$

$$\tau_D = 1.5(t_1 - \frac{1}{3}t_2) \quad (2.54)$$

Também é possível determinar os valores de τ_D e τ graficamente, basta encontrar o ponto de inflexão, calcular a tangente e extrapolar para o eixo “x” (abscissa) os valores para 0% e 100%. Nestes pontos tem-se τ_D e τ de acordo a Figura 2.8.

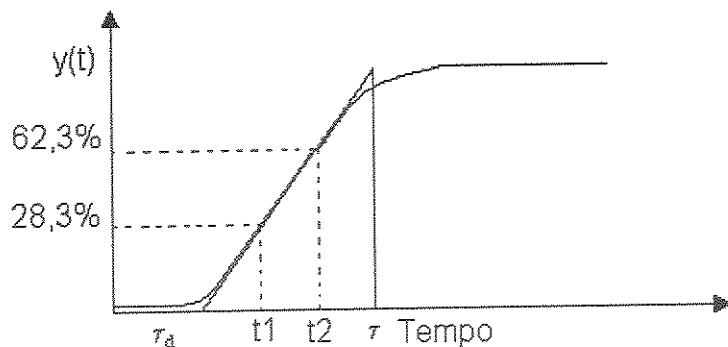


Figura 2.8 - Dinâmica do processo.

A equação (2.46) pode ser transformada em:

$$y(t+1) = (1 + a).y(t) - a.y(t-1) + b.\Delta u(t-d) + \varepsilon(t+1) \quad (2.55)$$

Sendo a, b e d dados por:

$$a = e^{-\left(\frac{T}{\tau}\right)} \quad (2.56)$$

$$b = K.(1 - a) \quad (2.57)$$

$$d = \frac{\tau_D}{T} \quad (2.58)$$

T – Tempo de amostragem, para tempo morto múltiplo deste.

$\varepsilon(t)$ – Ruído branco médio nulo.

Para tempo de amostragem não múltiplo do tempo morto tem-se:

$$y(t+1) = (1+a).y(t) - a.y(t-1) + b_0.\Delta u(t-d) + b_1.\Delta u(t-d-1) + \varepsilon(t+1) \quad (2.59)$$

$$b_0 = K(1-a)(1-a) \quad (2.60)$$

$$b_1 = K(1-a)\alpha \quad (2.61)$$

$$\alpha = \frac{a(a^{-\varepsilon} - 1)}{1-a} \quad 0 < \varepsilon < 1 \quad (2.62)$$

A determinação das ações de controle é feita com a minimização da função objetivo da equação (2.34). Em Borbons e Camacho (1999) é possível acompanhar o desenvolvimento completo para a solução analítica do GPC.

2.4.6 Controle preditivo não linear

Os itens supra explanados mostram que os controladores preditivos lineares, apesar de seu sucesso na indústria e no meio acadêmico, têm algumas limitações. Estas estão ligadas à dificuldade dos modelos lineares simularem com adequação comportamentos com não linearidade mais intensa. Neste sentido serão apresentadas alternativas que introduzirão controladores preditivos com modelos não lineares. Dentre estes tem-se: redes neurais, lógica “fuzzy” (nebulosa), modelos de Volterra, Wiener, ARX (auto-regressive exogenous), Hammerstein e os modelos fenomenológicos não lineares.

É dentro deste escopo que Henson (1998) e Morari e Lee (1999), em uma breve revisão histórica dos controladores preditivos, apontam as áreas que ainda precisam ser desvendadas para a efetiva aplicação deste tipo de controle com abordagem não linear na

indústria. Entre os principais aspectos pode-se citar: identificação de sistemas não lineares, ajustes adequados para estruturas MIMO (Multiple Input Multiple Output) e melhoria nas técnicas de otimização não linear com restrições. A mais interessante neste conjunto é identificar as diferenças intrínsecas entre os modelos não lineares, assim com os teste nos processos para encontrar qual estrutura melhor o representa.

2.4.7 Modelos fenomenológicos e empíricos

O decorrer natural de uma estratégia linear para outra não linear de controle inicialmente investiga os modelos determinísticos do processo. Estes são resultado da aplicação direta dos balanços de massa, energia e quantidade de movimento.

A vantagem desta abordagem é a capacidade natural que os modelos têm de representar os processos em quaisquer faixas de operação. Além disso, por serem razoavelmente bem representativos dos fenômenos físicos, menos informações em plantas são necessárias para sua validação. Em alguns casos a validação em laboratório pode ser suficiente, reduzindo os custos de levantamento do modelo do processo.

Por sua vez, estes modelos podem gerar estruturas não convexas e os algoritmos de otimização tradicionais, como o SQP (Successive Quadratic Programming) não garantem que o resultado seja um mínimo global. Outra desvantagem para aplicações em tempo real está na capacidade limitada que estes procedimentos numéricos têm quanto à performance computacional.

Uma alternativa aos modelos determinísticos são os modelos empíricos. Estes baseiam-se em dados do processo, e suas propriedades não lineares podem ser manipuladas e simplificadas, caso a caso, a fim de contornar as limitações descritas no último parágrafo. Os modelos empíricos mais conhecidos são: Hammerstein, Wiener, Volterra, redes neurais, lógica fuzzy e NARMAX (nonlinear auto-regressive moving average) polinomiais. Estes modelos sofrem ausência de uma teoria geral quando a identificação da estrutura. Entretanto, alguns casos específicos, assim como um pouco sobre a teoria de identificação de sistemas não lineares, podem ser encontrados em Pearson e Ogunnaike (1997). As tarefas que envolvem a identificação de sistemas são: seleção da estrutura, projeto da

seqüência de entradas, modelagem de ruídos, estimativa de parâmetros e validação do modelo.

Alguns destes modelos apresentam uma estrutura mais adequada para problemas de otimização não linear. Exemplos podem ser encontrados em Maner e Doyle (1997) descrevendo um modelo Volterra de segunda ordem, e um ARMAX polinomial em Sriniwas e Arkun (1997).

Alterações na função objetivo proposta em Henson (1998) aumentam a estabilidade do controle não linear. Sendo estas: horizonte de controle igual ao horizonte de predição, variáveis de estado são penalizadas ao invés das de saída, nenhuma penalidade na faixa de entrada é incluída, e usar o modelo em estado estacionário como restrição.

Há ainda, e estes não são muito explorados neste escopo, os modelo híbridos cuja característica principal é usar parte de modelos determinísticos e parte de modelos empíricos. A idéia central é usar a versatilidade dos modelos determinísticos com a performance dos modelos empíricos.

Um bom exemplo de aplicação de controle preditivo não linear é apresentado em Cadet *et al.* (1999). Neste faz-se necessário controlar a temperatura nos evaporadores de múltiplos estágios em uma unidade de produção de açúcar. Uma vez que a perda de sacarose pode ocorrer por meio de reações químicas entre esta e água, além do escurecimento do açúcar, faz-se necessário um controle de temperatura. A fim de evitar tais degradações chegou-se à temperaturas na faixa entre 125 a 130 °C. O modelo matemático baseia-se nos balanços de massa e energia em cada evaporador, mais as relações de equilíbrio. Este modelo fenomenológico é aplicado ao controlador.

Uma estrutura híbrida de controle é proposta, a qual associa um modelo tipo “feedback” linearizado e uma estrutura interna de modelo. A estrutura que consiste em simular com as mesmas entradas do processo, é escolhida por causa de suas características com relação aos erros de modelagem. O processo é linearizado, e o controlador usa este modelo.

Em artigo publicado por Mutha, Cluett e Penlidis (1998), são propostas algumas modificações nos algoritmos tradicionais para controle preditivo. O cerne da publicação sugere três maneiras diferentes de abordar o cálculo da matriz dinâmica da equação (2.44).

O primeiro denominado Q-NLPC (quadratic nonlinear predictive control) aproxima o modelo não linear que gerou a resposta a um degrau em malha aberta por expansão de Taylor. Os outros dois V-NLPC (Volterra nonlinear predictive control) e T-NLPC (Taylor nonlinear predictive control), fazem o mesmo, contudo aproximam o modelo originário da resposta degrau em malha aberta por um modelo Volterra de Segunda ordem e Taylor de ordem superior. Para os modelos que usam a série de Taylor a atualização destes dão-se a cada instante de atuação do controlador.

Para o algoritmo que usa T-NLPC a equação que representa a matriz dinâmica, de quarta ordem, é dada por:

$$G = \left(G^1 + \sum_{i=2}^4 \frac{G^i}{i!} \cdot (\Delta u(k))^{i-1} \right) \Big|_{u(k-1)} \quad (2.63)$$

Sendo,

$$G^i = \frac{\partial^i y(k)}{\partial u(k-1)^i} \quad (2.64)$$

O algoritmo T-NLPC pode, em teoria, ser um modelo adequado para representar processos não lineares. Todavia, deve-se ponderar que a derivação de modelos não lineares até a ordem quatro pode não ser própria para uma aplicação real, já que não se trata de uma abordagem trivial. Na indústria em geral opta-se por enfoques mais simples e com resultados satisfatórios. Muito pouco sabe-se da eficácia deste algoritmo em aplicações reais, ou da existência de controladores comerciais.

Em muitos casos, para o controle de um processo ou planta, não é obrigatório o uso de controladores não lineares. Ao contrário disto, a maioria dos processos pode ser modelada, pelo menos próximo ao “set point”, com modelos lineares. Zhu, Henson e Ogunnaike (2000) propõem uma estrutura de controle híbrida, ou seja, usa-se modelos lineares em subsistemas mais simples, e em processos com dinâmica bastante não linear adota-se um modelo mais complexo. Neste artigo modelou-se um sistema composto de um

reator e uma coluna de separação. A coluna sendo representada pelo modelo linear e o reator por um não linear, sendo que a ligação entre os equipamento é conduzida pelos balanços de massa e energia.

As vantagens parecem óbvias, já que os recursos computacionais são locados apenas em casos mais rigorosos. Este procedimento é bastante adequado para o desenvolvimento de controle da planta. Neste trabalho, cujo foco é o forno rotativo, uma estrutura híbrida não é aplicável aos moldes de Zhu, Henson e Ogunnaike (2000).

2.4.8 Rede neurais aplicadas ao controle de processos químicos

O uso de redes neurais vem crescendo dentro da área de processos químicos. Trata-se de uma ferramenta matemática muito poderosa, pois é capaz de representar diversos processos não lineares. Agrega-se a esta característica o baixo esforço computacional de modelar processos após a etapa de treinamento da rede. Algumas destas aplicações podem ser encontradas em Mujtaba e Hussain (2001).

Adotando as propriedades comentadas acima, profissionais da área de controle de processos adotaram a capacidade de representar, com baixo esforço computacional, das redes neurais em controladores preditivos não lineares. Por outro lado, o fato de representarem processos não lineares, que podem conter estruturas não convexas embutidas em seus modelos tipo caixa-preta, estas características também estão numericamente representadas nas redes neurais. A fim de evitar este empecilho alguns autores adotam a linearização como recurso.

O uso do Jacobiano para linearização em comparação com a linearização “feedback” é menos eficiente e trabalha em uma faixa menor de representação. Em Braake et al (1998) é apresentada uma estrutura de controle para um fermentador em escala experimental e em tempo real. O objetivo é controlar a pressão do equipamento. Modela-se o processo por meio de uma rede neural “feedforward”, que é posteriormente linearizada (“feedback”). A última etapa é o projeto de um controlador linear baseado no modelo. Outra vantagem deste procedimento é usar as técnicas de controle muito bem fundamentadas para controladores lineares.

A estrutura descrita acima, apesar de reconhecidamente eficiente, ainda é linear. Para grandes faixas de operação e processos altamente não lineares esta ainda não é a mais representativa. Além deste fato, é provável que a linearização de um modelo fundamental apresente melhores resultados, pois se poderia estender a linearização ponto a ponto.

Um exemplo bem sucedido de controle preditivo não linear baseado em redes neurais está em Costa, Meleiro e Maciel Filho (2001). Neste, o objetivo é controlar a concentração de substrato em um processo de fermentação alcoólica extrativa. Treina-se uma rede tipo FLN (Functional Link Network), sendo as variáveis de entrada (manipulada – vazão de alimentação do mosto) avaliada em “k” e a de saída (concentração de substrato) em “k+1”. Adota-se a FLN com o intuito de evitar o treinamento não linear.

Aplicações de redes neurais à processos instáveis podem ser melhor estudadas em Zhan e Ishida (1997).

2.4.9 Lógica Fuzzy

A lógica fuzzy é usada para obtenção de modelos tipo caixa preta. Um estudo mais detalhado sobre o assunto pode ser acompanhado em Pedrycz (1993).

Kavsek-Biasizzo, Skrjanc e Matko (1997), propõem um modelo “fuzzy” para controle de processo de pH, altamente não linear, neutralização de uma base forte com um ácido forte. Neste artigo o modelo “fuzzy” agrupa vários modelos lineares para diversas respostas degraus em “set points” distintos. Assim, é possível fazer uso da robustez de um modelo não linear com a conveniência de um DMC linear. A estrutura de controle consiste em identificar em linha e em tempo real o modelo linear contido no modelo fuzzy, e aplicá-lo como preditor do DMC linear. Outra vantagem deste enfoque é garantir um mínimo local, já que caso não haja restrições na função de otimização, tem-se solução analítica.

2.4.10 Outras Formas de Controle Não Linear

O uso de modelos NARX (nonlinear auto-regressive exogenous regression) para estruturas preditivas de controle não linear pode ser mais bem compreendido em Nicolau, Magni e Scatolini (1997) e Srinivas e Arkun (1997). A idéia central destes artigos é usar um modelo NARX em pontos de equilíbrio. Entretanto, as vantagens oferecidas não são mais atrativas que as dos modelos “fuzzy”, neurais e “neuro-fuzzy”. E por outro lado há poucas informações teóricas a respeito de identificação em linha de modelos não lineares deste tipo. Por estas razões esta estrutura não é tão bem aceita comercialmente e no meio acadêmico quanto as redes neurais e a lógica fuzzy.

Dentre as formas menos comercialmente difundidas que as redes neurais e a lógica nebulosa, encontram-se os modelos tipo Volterra, Hammerstein e Wiener. Estes apresentam o mesmo conceito de controle não linear. Trata-se de usar modelos lineares tradicionais para o “loop” central do processo e corrigir os desvios com um modelo que compute as não linearidades.

No caso dos modelos de Hammerstein e Wiener as correções não lineares não têm um modelo definido, pode-se usar até mesmo as redes neurais. A diferença destes é a ordem com que se faz a correção não linear. Modelos Wiener consistem de um bloco dinâmico linear em série com um estático não linear, enquanto Hammerstein tem os mesmos elementos em ordem inversa. O fato de o bloco linear ser dinâmico permite esta estrutura usar as vantagens muito bem fundamentadas da teoria linear de controle. Em Fruzzetti, Ogunnaike e Pearson (1997) e Norquay, Palazoglu e Romagnoli. (1998) tem-se algumas aplicações práticas, e suas estruturas, dos modelos de Wiener e Hammerstein, respectivamente.

Os modelos de Volterra também têm sua compensação não linear. Entretanto, esta é realizada por meio de uma série de potências cuja formulação básica é dada por:

$$y(t) = y_1(t) + y_2(t) + y_3(t) + \dots \quad (2.65)$$

Sendo,

$y(t)$ – O modelo contendo a parte linear.

$y_1(t)$ - Os componentes não lineares ($y_2(t)$, $y_3(t)$,).

O modelo linear, assim como os demais termos são formulados da seguinte maneira.

$$y_1(t) = \int_0^{\infty} h_1(\sigma).u(t-\sigma).d\sigma \quad (2.66)$$

$$y_2(t) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} h_2(\sigma_1, \sigma_2).u(t-\sigma_1).u(t-\sigma_2)d\sigma_1.d\sigma_2 \quad (2.67)$$

$$y_3(t) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} h_3(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3).u(t-\sigma_1).u(t-\sigma_2).u(t-\sigma_3).d\sigma_1.d\sigma_2.d\sigma_3 \quad (2.68)$$

A série de Voterra é uma expansão temporal da série de Taylor. Um estudo de caso para um reator de polimerização está em Doyle, Ogunnaike e Pearson. (1995).

2.4.11 Considerações finais

Com a breve revisão a respeito das estratégias lineares e não lineares de controle, algumas propostas serão formuladas para este trabalho. Em primeiro lugar serão descartados os modelos tipo Wiener, Hammerstein e Volterra. A razão para esta escolha não está nos resultados já discutidos em bibliografia aberta, mas sim no que estes agregam de especial em relação às estratégias lineares adaptativas e as não lineares mais difundidas. A adição de uma componente não linear não é mais eficiente que modelos lineares atualizados em linha, sem considerar a estimativa de parâmetros de modelos como Voterra, mais complexa. Por outro lado, as pesquisas buscam estratégias não lineares confiáveis, e

este trabalho também estudará um exemplo industrial com o objetivo de contribuir neste assunto.

Não se trata de desenvolver uma nova e confiável ferramenta para a teoria de controle não linear de processos químicos. O intuito é mostrar os resultados em processos que usam fornos rotativos daquelas estratégias já existentes e que ainda não foram investigadas nos processos de incineração. Assim, este estudo de caso vem a somar com os já existentes, estimulando aplicações reais com controle não linear.

Seguem as propostas para estudar a dinâmica, em malha fechada, de processos de incineração com fornos rotativos.

As estratégias de controle para os processos em estudo são duas: linear e não linear. Dentre as lineares tem-se: DMC, GPC e PID. Quanto às estratégias não lineares serão usados dois algoritmos. Detalhes de cada uma destas serão abordados no capítulo 3, o qual descreve como será tratado o problema da integração em tempo real para este estudo.

2.5 Redes Neurais Artificiais

O uso de redes neurais não é exclusivo de nenhuma área de conhecimento. Em particular, os processos químicos beneficiam-se desta técnica devido à sua capacidade em representar comportamentos não lineares.

As redes neurais funcionam a partir de informações de entrada que geram determinadas saídas. Esta é outra vantagem da rede, pois não se faz necessário desenvolver modelos fundamentais complexos para representar o processo.

Com as informações disponíveis para o projeto da rede, duas etapas seguem até ter-se uma rede neural representativa do processo: treinamento e validação. O treinamento consiste em fazer com que, a partir de dados extraídos do processo, para um dado conjunto de entradas, as saídas sejam fiéis ao esperado. A fase de validação consiste em, com informações diferentes das usadas no treinamento, checar a qualidade da rede.

Uma rede é formada por camadas: entrada, internas e saída. A camada de entrada não é considerada propriamente uma camada, pois não é computada durante o processo de

treinamento. As duas outras camadas é que de fato conferem a capacidade numérica de representar processos não lineares da rede. Nestas, os valores de entrada são multiplicados por pesos e o valor de saída é calculado por funções específicas, as funções de transferência. A Figura 2.9 apresenta um modelo de uma rede simples.

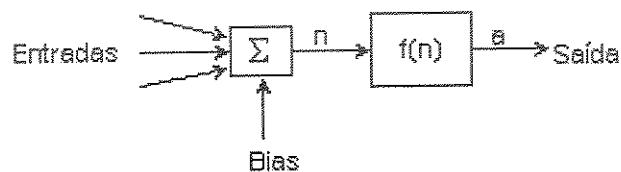


Figura 2.9 - Rede neural de uma camada.

O valor de entrada na função de transferência é dado por:

$$n = \sum_{i=1}^R w_{1,i} \cdot p_i + b \quad (2.69)$$

A saída é calculada com a equação abaixo.

$$a = f(n) \quad (2.70)$$

Existem várias funções de transferência, mas neste ponto ainda nenhuma informação específica estará sendo abordada.

Dentre as redes neurais as mais comuns são o Perceptron, Adaline, Madaline, “Backpropagation”, “Self-organising” e “Recurrent”. Embora existam outros tipos de redes, apenas as citadas acima serão comentadas.

2.5.1 Perceptron

Este tipo de rede é mais simples do ponto de vista de sofisticação numérica. Isto se deve ao tipo de função de transferência usada. O gráfico da função de transferência de um Perceptron, mostrado na Figura 2.10, indica que esta assume apenas dois valores.

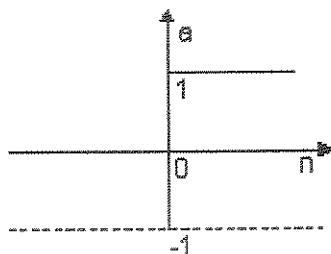


Figura 2.10 - Função de transferência de um Perceptron.

Para “n” maior ou igual a zero, a saída é “+1”, caso contrário a saída é nula. O fato de uma função de transferência ter como resposta dois valores limita a aplicação do modelo. Logo, os Perceptrons são de aplicação prática para problemas lineares, ou aqueles cujos conjuntos de dados podem ser divididos em grupos claramente distintos.

A Figura 2.9 mostrou um modelo de rede neural bastante simples, com um elemento ponderando as entradas. Porém, para melhorar a capacidade de representação da rede é possível usar vários destes elementos.

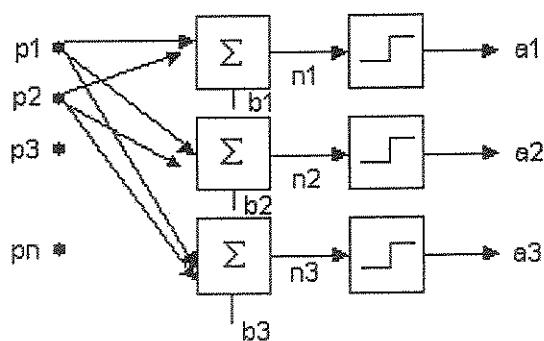


Figura 2.11 - Arquitetura do Perceptron.

Neste caso os valores de “n” são calculado conforme a equação (2.71).

$$a_j = f \left(\sum_{i=1}^R w_{ji} \cdot p_i + b_j \right) \quad j=1,S \quad (2.71)$$

O treinamento consiste em ajustar os pesos até que “a_j” seja igual, ou suficientemente próximos, aos valores referência de saída.

Este tipo de treinamento é conhecido como supervisionado, já que os pesos são calculados para conjuntos de dados entradas-saídas.

A regra de treinamento para os Perceptrons é bem simples, os valores de “w” e “b” são atualizados, iterativamente, proporcionalmente ao erro. Este erro, ou desvio, é a diferença entre a saída da rede calculada com os pesos menos as referências de saída. As equações (2.72) e (2.73) calculam as atualizações dos pesos e dos valores de “b” (bias).

$$\Delta w = (t - a)p = e.p \quad (2.72)$$

Sendo,

t – Referência de saída.

$$\Delta b = (t - a) = e \quad (2.73)$$

$$w^{i+1} = w^i + \Delta w \quad (2.74)$$

$$b^{i+1} = b^i + \Delta b \quad (2.75)$$

O processo iterativo pára quando determinada convergência ϵ é atingida.

$$\|w^{i+1} - w^i\| \leq \epsilon \quad (2.76)$$

2.5.2 ADALINE e MADALINE

Este tipo de rede neural (ADALINE – Adaptive Linear Neuron Networks) tem a mesma estrutura geral apresentada acima. A diferença é a função de transferência usada, linear. O valor de saída estimado pela rede “a” é calculado com uma função linear, a partir de um dado valor “n”. A Figura 2.12 desenha uma função de transferência linear.

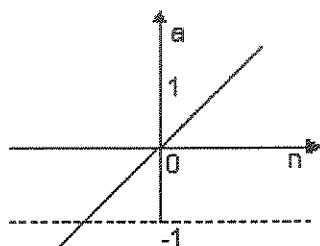


Figura 2.12 - Função de transferência linear.

A vantagem desta tipo de rede em relação ao Perceptron é que a ADALINE não tem como saída apenas dois valores, mas sim uma faixa que varia de “ $-\infty$ ” a $+\infty$. Contudo, esta faixa de saída é linear, e isto faz com que esta rede apresente bons resultados com dados de treinamento linearmente relacionados. A Figura 2.13 representa uma rede ADALINE.

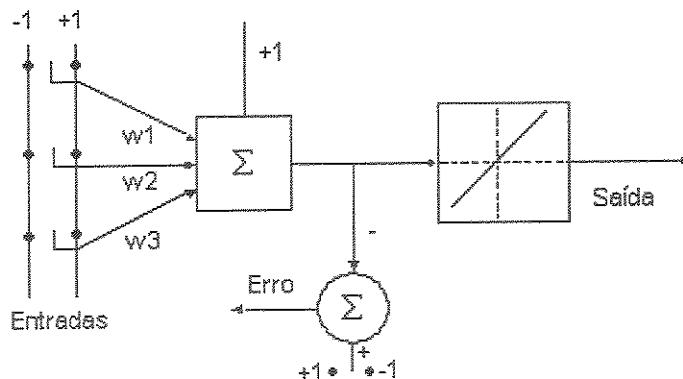


Figura 2.13 - ADALINE.

Quando há mais de uma ADALINE em paralelo dá-se o nome da rede de MALINE. O “m” inicial refere-se ao termo “multiple” em inglês.

O treinamento de ADALINES e MADALINES é baseado na minimização da média do quadrado dos erros. O mse (mean square error) é calculado com a equação (2.77).

$$mse = \frac{1}{Q} \sum_{k=1}^Q e(k)^2 = \frac{1}{Q} \sum_{k=1}^Q (t(k) - a(k))^2 \quad (2.77)$$

O algoritmo de treinamento conhecido como Widrow-Hoff baseia-se no método da máxima descida. Com a derivada parcial do quadrado do erro, em relação ao peso tem-se:

$$\frac{\partial e^2(k)}{\partial w} = 2.e(k). \frac{\partial e(k)}{\partial w} \quad (2.78)$$

Por sua vez, a derivada do erro também pode ser calculada analiticamente.

$$\frac{\partial e(k)}{\partial w} = \frac{\partial [t(k) - a(k)]}{\partial w} = \frac{\partial [t(k) - (w.p(k) + b)]}{\partial w} \quad (2.79)$$

Simplificando,

$$\frac{\partial e(k)}{\partial w_{i,j}} = -p_j(k) \quad (2.80)$$

$$\frac{\partial e(k)}{\partial b} = -1 \quad (2.81)$$

Portanto, o algoritmo de treinamento Widrow-Hoff é dado por:

$$w^{k+1} = w^k - \alpha \cdot \frac{\partial e^2(k)}{\partial w} = w^k + 2\alpha \cdot e(k) \cdot p(k) \quad (2.82)$$

$$b^{k+1} = b^k - \alpha \cdot \frac{\partial e^2(k)}{\partial b} = b^k + 2\alpha \cdot e(k) \quad (2.83)$$

O parâmetro α é conhecido como taxa de treinamento. Se α é grande, o treinamento é mais rápido, mas se for muito grande pode trazer instabilidade numérica. Para α pequenos o treinamento é mais lento, porém mais estável.

Assim como para os Perceptrons, este algoritmo de treinamento é supervisionado. Dados que correlacionam entradas e saídas precisam ser alimentados ao sistema para que haja o treinamento.

O processo é iterativo, e termina quando determinada precisão é atingida.

2.5.3 Retropropagação

Este tipo de rede neural é o mais popular, e também o é na engenharia química. Isto se deve à sua boa capacidade em representar processos não lineares, abundantes nesta área.

Seu princípio básico é semelhante à ADALINE, quanto à arquitetura e treinamento. A diferença é que o algoritmo de Widrow-Hoff foi generalizado para múltiplas camadas e funções de transferência não lineares. Em virtude destas características, redes tipo retropropagação (“backpropagation”) são capazes de modelar processos cujos comportamento não seguem os padrões exigidos pelo Perceptron e pela ADALINE.

Alguns processos químicos não lineares foram modelados por redes neurais tipo retropropagação com sucesso em Mujtaba e Hussain (2001).

A Figura 2.14 mostra a arquitetura básica de uma rede tipo retropropagação.

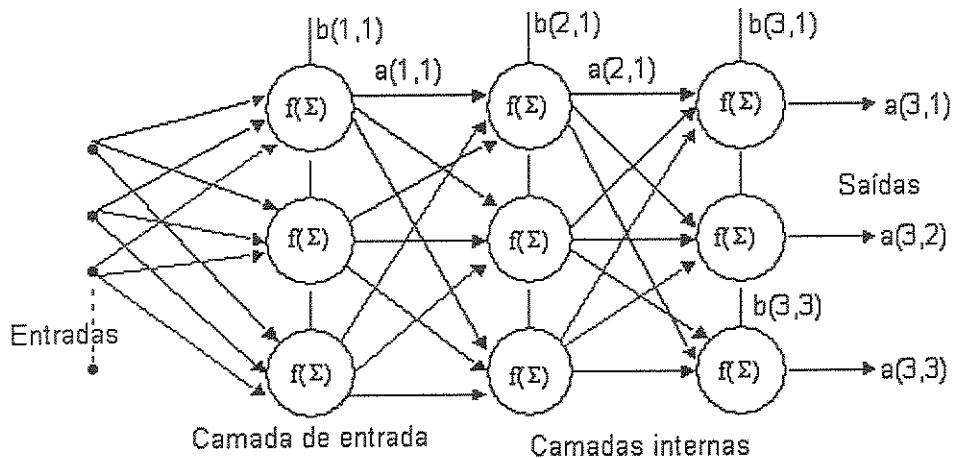


Figura 2.14 - Arquitetura de uma rede tipo retropropagação multicamadas.

A função de transferência não linear mais comum é uma sigmoidal, cuja matemática é exposta pelas equações (2.84) e (2.85).

$$f(n) = \frac{1}{1 + e^{-n}} \quad (\text{logarítmica sigmoidal}) \quad (2.84)$$

$$f(n) = \frac{2}{1 + e^{-2n}} - 1 \quad (\text{tangente sigmoidal}) \quad (2.85)$$

O comportamento destas funções é semelhante ao do gráfico da Figura 2.15.

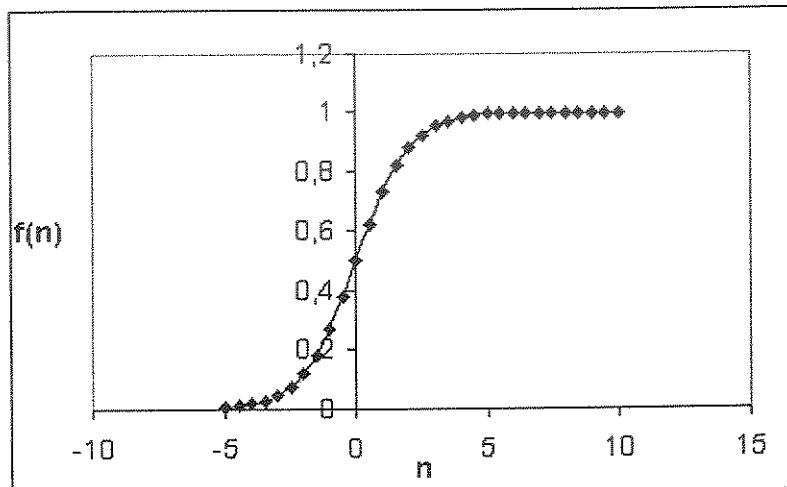


Figura 2.15 - Função de transferência logarítmica-sigmoidal.

Outras funções de transferência muito adotadas são:

$$f(n) = e^{-n^2} \quad (\text{base radial}) \quad (2.86)$$

$$f(n) = \frac{1 - e^{-n}}{1 + e^{-n}} \quad (\text{tangente hiperbólica}) \quad (2.87)$$

$$f(n) = 1 - |n| \quad -1 \leq n \leq 1 \quad (\text{base triangular}) \quad (2.88)$$

Na figura acima fica claro que as saídas destas funções de transferência, ainda que não lineares, são limitadas entre “0” e “1”. Este aspecto poderia ser um fator limitante para modelagem de problemas cujas respostas operem em faixas diferentes e mais amplas. Para resolver esta situação há duas alternativas: normalizar os dados de entrada e saída, ou usar na camada de saída uma função de transferência linear, com faixa de resposta entre “ $-\infty$ ” e “ $+\infty$ ”. A primeira opção é mais adequada, uma vez que a última camada não fica restrita a uma função de transferência linear.

O treinamento de uma rede tipo retropropagação dá-se pelo método da máxima descida, que também é conhecido pela regra do delta generalizado. A regra do delta já foi apresentada quanto tratou-se das redes ADALINE e MADALINE.

A idéia fundamental deste procedimento numérico é atualizar os pesos e “bias” com o negativo da derivada do erro total em relação a eles mesmos. O erro total é dado pela equação (2.89)

$$E_T = \sum_{j=1}^{Nc} \sum_{i=1}^{No} (d_{j,i} - a_{j,i})^2 \quad (2.89)$$

Sendo,

$a_{j,i}$ – Valor de saída do neurônio “i” na última camada, para o par de treinamento “j”.

d_i – Valor de referência na saída para o neurônio “i”.

Nc – A quantidade de pares para treinamento entradas-saídas.

No – Número de neurônios na camada de saída.

Portanto, os pesos e “bias” são treinados com as seguintes equações:

$$\Delta w = -\gamma \frac{\partial E_T}{\partial w} \quad (2.90)$$

$$\Delta b = -\gamma \frac{\partial E_T}{\partial b} \quad (2.91)$$

O parâmetro “ γ ” é a taxa de treinamento.

O método consiste em um processo iterativo que atualiza os pesos e “bias” até que o erro total seja suficientemente pequeno para que o processo já possa ser representado pela rede. Este critério não é rígido, sendo que cada caso merece atenção particular em função do número de neurônios na camada de saída e tamanho do banco de dados para treinamento. As equações (2.92) e (2.93) mostram como deve ser o processo de treinamento da rede.

$$w_{k,i,j}^{t+1} = w_{k,i,j}^t + \Delta w_{k,i,j}^t \quad (2.92)$$

$$b_{k,j}^{t+1} = b_{k,j}^t + \Delta b_{k,j}^t \quad (2.93)$$

Para,

i e j – Neurônios das camada “i” e “j” respectivamente.

k – Camada interna.

t – Instante da iteração.

Da maneira como foi exposta nas equações (2.90) e (2.91) a derivação analítica seria bastante complexa, e resultaria em equações de difícil generalização. Para tal fato usa-se a regra da cadeia a fim de melhorar a tratabilidade analítica do problema. Deste ponto em diante o erro da rede, para efeito descritivo do algoritmo de treinamento, fica reduzido à equação abaixo.

$$E_T = \sum_{i=1}^{No} (d_i - a_i)^2 \quad (2.94)$$

A seqüência de equações abaixo resolve o problema, para um dado par entrada-saída da base de dados para treinamento. No final desta etapa será explicado como a base de dados enquadra-se no procedimento.

$$\frac{\partial E_T}{\partial w_{k,i,j}} = \frac{\partial E_T}{\partial I_i} \cdot \frac{\partial I_i}{\partial w_{k,i,j}} \quad (2.95)$$

$$\frac{\partial E_T}{\partial b_{k,j}} = \frac{\partial E_T}{\partial I_i} \cdot \frac{\partial I_i}{\partial b_{k,j}} \quad (2.96)$$

$$\frac{\partial I_i}{\partial w_{k,i,j}} = a_j \quad (2.97)$$

$$\frac{\partial I_i}{\partial b_{k,j}} = 1 \quad (2.98)$$

Sabendo que, a variável “a” é a saída de um neurônio após a transformação não linear (função de transferência), e “I” é apenas o resultado dos somatórios dos pesos e “bias” de um neurônio.

Definindo a variável δ como:

$$\delta_i = -\frac{\partial E_T}{\partial I_i} \quad (2.99)$$

Assim, a atualização pode ser representada por uma equação mais compacta e de fácil implementação.

$$\Delta w_{k,i,j} = \gamma \cdot \delta_i \cdot a_j \quad (2.100)$$

$$\Delta b_{k,j} = \gamma \cdot \delta_i \quad (2.101)$$

Aplicando a regra da cadeia para a equação (2.99),

$$-\frac{\partial E_T}{\partial I_i} = -\frac{\partial E_T}{\partial a_i} \cdot \frac{\partial a_i}{\partial I_i} \quad (2.102)$$

Os dois novos termos decorrentes da aplicação da regra da cadeia têm representação compacta, proporcionando um algoritmo de treinamento matematicamente acessível aos engenheiros e eficiente do ponto de vista numérico, pois trabalha com derivadas analíticas.

$$\frac{\partial a_i}{\partial I_i} = f'(I_i) \quad (2.103)$$

O último termo ainda não desenvolvido, a derivada do erro em relação ao valor de saída ativado do neurônio ($\frac{\partial E_T}{\partial a_i}$), depende da camada onde este se encontra.

Para a camada de saída tem-se que:

$$\frac{\partial E_T}{\partial a_i} = -(d_i - a_i) \quad (2.104)$$

A partir da camada de saída os erros são propagados para as camadas internas, por isso o nome de retropropagação.

$$\frac{\partial E_T}{\partial a_i} = \sum_{h=1}^{N_o} \frac{\partial E_T}{\partial I_i} \cdot \frac{\partial I_i}{\partial a_i} = \sum_{h=1}^{N_o} \frac{\partial E_T}{\partial I_i} \cdot w_{k,h,i} \quad (2.105)$$

$$\frac{\partial E_T}{\partial a_i} = \sum_{h=1}^{N_o} \delta_h \cdot w_{k,h,i} \quad (2.106)$$

Todas as etapas necessárias para o entendimento do treinamento já foram expostas, porém para um único par de treinamento entrada-saída. Para todo o banco de dados faz-se o somatório do Δw e Δb para cada conjunto entrada-saída.

$$\Delta w_{k,i,j} = \sum_{h=1}^{N_c} \Delta w_{k,i,j} \quad (2.107)$$

$$\Delta b_{k,j} = \sum_{h=1}^{Nc} \Delta b_{k,j} \quad (2.108)$$

Entretanto, a fim de proporcionar treinamentos mais rápidos e estáveis, outros procedimentos numéricos são disponíveis. Dentre estes destacam-se: gradientes descendentes com momento, retropropagação resiliente, gradientes conjugados, algoritmos Quasi-Newton e Levenberg-Marquardt. A revisão bibliográfica sobre redes neurais baseou-se em Krose, Van der Smagt (1993) e em Bulsari (1995).

Uma breve descrição, apontando as diferenças, vantagens e desvantagens de cada um será apresentada a seguir.

2.5.4 Gradientes descendentes com momento

Diferentemente do gradiente descendente comum, o momento permite que o treinamento não responda somente em função do gradiente, mas também com as tendências recentes dos erros da superfície. O momento possibilita que o algoritmo ignore pequenas características da superfície, que em algumas situações podem conduzir à convergência para um mínimo local. Em geral este algoritmo converge mais rapidamente que o dos gradientes descendente (método da máxima descida).

A modificação deste procedimento numérico em relação ao método da máxima descida é adicionar um termo que considere no processo de treinamento informações do nível iterativo anterior. Neste caso o treinamento é dado por:

$$w_{k,i,j}^{t+1} = w_{k,i,j}^t + \alpha(\Delta w_{k,i,j}^t + \beta.\Delta w_{k,i,j}^{t-1}) \quad (2.109)$$

$$b_{k,j}^{t+1} = b_{k,j}^t + \alpha(\Delta b_{k,j}^t + \beta.\Delta b_{k,j}^{t-1}) \quad (2.110)$$

Sendo,

β – O coeficiente de momento.

Os valores de β não obrigatoriamente precisam ser os mesmos para a atualização dos pesos e “bias”.

Informações mais detalhadas, incluindo o método dos gradientes descendentes com momento, podem ser obtidas em Hagan, Demuth e Beale (1996).

2.5.5 Retropropagação resiliente

O treinamento de redes neurais que usam funções de transferência com saídas em faixas limitadas sofrem consequências destas características. Por exemplo, a função sigmoidal, cuja faixa pode variar entre “0” e “1”, gera derivadas de magnitude pequena quando a inclinação destas estiverem próximas do limite inferior. Isto causa um efeito negativo nos pesos e “bias”, já que a atualização pode ficar muito pequena e não convergir até os critérios de performance pré-estabelecidos.

É com o objetivo de eliminar este problema que se usa a retropropagação resiliente. Neste método as derivadas fornecem apenas o sinal para onde caminham os pesos e “bias”. A atualização é feita por um fator anteriormente especificado, que age com se fosse o gradiente, mas que pode mudar durante o processo de convergência a fim de garantir estabilidade e convergência do procedimento. Detalhes sobre o método estão em Riedmiller e Braun (1993).

2.5.6 Gradientes conjugados

No método da máxima descida a tática é usar o negativo dos gradientes, pois este promove a máxima descida. Porém, não converge mais rápido que o método dos gradientes conjugados.

Neste método uma busca é realizada ao longo de direções conjugadas, as quais geralmente produzem convergência mais rápida.

Todas as variações dos gradientes conjugados iniciam o algoritmo calculando a máxima descida.

$$p_o = g_0 \quad (2.111)$$

Uma busca por linhas é realizada com o objetivo de determinar a distância ótima da direção de busca atual.

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k \cdot p^k \quad (2.112)$$

Sendo,

α^k – Taxa de treinamento.

e – Erro.

x^k – Os pesos ou bias

E g^k é definido como:

$$g_k = \frac{\partial e}{\partial w} \quad ou \quad g_k = \frac{\partial e}{\partial b} \quad (2.113)$$

A próxima direção de busca é determinada conjugada, com a direção anterior. O procedimento geral, que define a nova direção de busca, combina a máxima descida com a direção de busca anterior, conforme equação (2.114).

$$p^k = -g^k + \beta^k \cdot p^{k-1} \quad (2.114)$$

Os vários tipos de gradientes conjugados distinguem-se pela forma como calculam o valor de β^k . As equações (2.115) e (2.116) são usadas nos métodos de Fletcher-Reeves e Polak-Ribiére respectivamente.

$$\beta_k = \frac{g_k^T \cdot g_k}{g_{k-1}^T \cdot g_{k-1}} \quad (2.115)$$

$$\beta_k = \frac{\Delta g_{k-1}^T \cdot g_k}{g_{k-1}^T \cdot g_{k-1}} \quad (2.116)$$

2.5.7 Algoritmos Quasi-Newton

Outras alternativas para o treinamento de redes neurais são os algoritmos de Newton. A iteração básica deste método é:

$$x_{k+1} = x_k - A_k^{-1} \cdot g_k \quad (2.117)$$

Sendo A_k o Hessiano (segundas derivadas).

$$A_k = \frac{\partial^2 e}{\partial w^2} \quad ou \quad A_k = \frac{\partial^2 e}{\partial b^2} \quad (2.118)$$

Este método em geral converge mais rápido que o dos gradientes conjugados. Entretanto, o cálculo do Hessiano não é trivial e muitas vezes potencializa os erros numéricos a cada iteração, levando à não convergência.

Há também os métodos chamados de Quasi-Newton, ou método das secantes, que usam as segundas derivadas. Estes atualizam o Hessiano baseando-se nos gradientes. Esta classe de método pode ser mais bem estudada em Bazaraa, Sherali e Shetty (1979).

2.5.8 Levenberg-Marquardt

Este é outro método numérico que também faz uso do Hessiano em seu algoritmo. Levenberg-Marquardt computa os gradientes e Hessianos das seguintes maneiras:

$$H = J^T J \quad (2.119)$$

$$g = J^T E \quad (2.120)$$

Sendo,

J – Matriz Jacobiana (gradiente do erro em relação aos pesos e “bias”).

E – erro.

Para,

k – Número de neurônios na camada de saída.

p – Número de padrões entradas-saídas para o treinamento.

N – Número de pesos.

N2 – Numero de “bias”.

E_T - Erro total.

$$E_T = \sum_{k=1}^k \sum_{p=1}^p e_{kp} \quad (2.121)$$

Sendo,

$$e_{kp} = (d_{k,p} - a_{k,p})^2 \quad (2.122)$$

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial E_T}{\partial w_1} \\ \frac{\partial E_T}{\partial w_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial E_T}{\partial w_N} \end{bmatrix} \quad (2.123)$$

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial E_T}{\partial b_1} \\ \frac{\partial E_T}{\partial b_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial E_T}{\partial b_{N2}} \end{bmatrix} \quad (2.124)$$

A matriz Jacobiana “J” é calculada com a técnica padrão de retropropagação, Hagan e Menhaj (1994), que é bem menos complexa que o cálculo do Hessiano. O algoritmo de retropropagação já foi apresentado, mas precisa de algumas modificações para adequar-se ao método de Levenberg-Marquardt.

O processo iterativo proposto por Levenberg-Marquardt é dado por:

$$x_{k+1} = x_k - [J^T J + \mu I]^{-1} J^T E \quad (2.125)$$

μ – Parâmetro de relaxação.

I – Matriz identidade.

x – Pesos ou “bias”.

Em geral o melhor desempenho, quanto à velocidade de convergência, é atribuída ao método de Levenberg-Marquardt. Por isso, este tem sido bastante utilizado em aplicações em todas as áreas, incluindo os processos químicos. Contudo, o algoritmo apresenta algumas limitações. Devido ao tamanho da matriz $J^T J$, recomenda-se sua aplicação para redes menores. Além deste empecilho, o método é mais adequado para apenas um neurônio na camada de saída.

2.5.9 Outros aspectos

Aparte ao treinamento que gera um modelo caixa preta do processo, outros aspectos devem ser considerados para o bom desempenho da rede. O mais comum é o super dimensionamento desta. Em situações como esta ocorre que um número excessivo de informações foi usado para treinar a rede. A rede é capaz de representar com um desvio muito pequeno o conjunto de dados do treinamento, mas para condições diferentes a performance deprecia-se. O super ajuste leva a este tipo de situação.

A solução é bastante simples, usar o número mínimo de informações que representem o processo. Não é uma tarefa fácil, já que *a priori* não se sabe quais e quantas informações são necessárias. Contudo, dois procedimentos ajudam a evitar o super ajuste de uma rede neural: regularização e parada prematura.

A regularização é a modificação da função que mede a performance da rede, o erro (mse).

$$mse = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (t_i - a_i)^2 \quad (2.126)$$

É possível melhorar a capacidade de generalização por meio da modificação abaixo.

$$mse_reg = \gamma.mes + (1 - \gamma).msw \quad (2.127)$$

$$msw = \frac{1}{N2} \sum_{j=1}^{N2} w_j^2 \quad (2.128)$$

γ – Índice de performance.

Adotando este critério têm-se pesos e “bias” menores, e isto forçará a rede a responder mais suavemente, reduzindo a probabilidade de super ajuste. Uma rede devidamente ajustada representa melhor o processo.

A parada prematura também ajuda a evitar o super ajuste. Na fase inicial do treinamento o erro diminui mais velozmente, e tende a reduzir a descida com o andamento das iterações. Em determinada situação do processo iterativo pode ocorrer aumento do erro. Se para um certo número de iterações esta tendência mantiver-se, para-se o treinamento, e os pesos e “bias” anteriores ao fenômeno são os usados.

2.5.10 Outros tipos de rede.

Além das já descritas dois outros tipo são bastante populares: redes “self-organising” e redes recorrentes.

O primeiro tipo tem aplicações em situações diferentes das mais comuns em engenharia química, conjuntos com informações de entradas e saídas. Redes tipo “self-organising” trabalham apenas com os dados de entrada. A idéia é identificar agrupamentos neste conjunto de dados. Para este tipo de rede o treinamento não é supervisionado, e o cálculo dos pesos é definido por uma forma de competição global entre os neurônios. As redes “Kohonen” estão entre as mais comuns dentre as “self-organising”.

As demais redes anteriormente discutidas não são recorrentes, ou seja, os fluxos de informações são em uma direção. Logo, para um determinado número de passos os pesos e “bias” são especificados. Nas redes recorrentes os valores de ativação “a” são submetidos a um processo de relaxação, mas os pesos e “bias” permanecem inalterados. Este tipo de rede tem laços da saída para a entrada. A rede “Hopfeld” é um destes tipos de rede.

Uma descrição mais detalhada sobre os dois últimos tipos de redes abordados pode ser avaliada em Kroese e Smagt (1993).

2.6 Otimização

A otimização é um assunto que deve ser tratado com bastante atenção neste trabalho. A inserção de equipamentos que usam fornos rotativos no escopo da integração em tempo real corrobora com a afirmação acima. Neste tipo de estudo a otimização pode ser aplicada em três situações: no controle do processo, no cálculo dos melhores parâmetros operacionais e no planejamento da produção. Sendo que a falha numérica e computacional em cada uma destas etapas pode ser traduzida em prejuízos financeiros. Por isso tudo, o uso de um método numérico robusto para a otimização é imprescindível.

O foco desta pesquisa não está em desenvolver um procedimento específico para a otimização do processo, entretanto compreender e escolher as melhores opções é necessário. De uma maneira geral, embora cada um dos tipos de otimização enquadre-se em subproblemas de otimização mais específicos, o problema é não linear podendo conter restrições.

Para esta classe de problema duas alternativas bastante difundidas estão disponíveis: o SQP (successive quadratic programming) e os algoritmos genéticos. As características de

cada um, uma breve descrição teórica, assim como suas vantagens e desvantagens serão apresentadas a seguir.

2.6.1 Programação quadrática seqüencial

O estudo da programação quadrática para otimização é necessária para entender melhor o algoritmo usado neste trabalho, o SQP. A programação quadrática é o nome dado ao procedimento que minimiza uma função quadrática de n variáveis com m restrições lineares.

Um exemplo desta metodologia pode ser dado por:

Função objetivo -
$$f(x) = c^T x + \frac{1}{2} x^T Q x \quad (2.129)$$

Restrições -
$$\begin{aligned} A.x &\geq b \\ x &\geq 0 \end{aligned} \quad (2.130)$$

sendo c um vetor de coeficientes constantes, A uma matriz $(m \times n)$ e Q é uma matriz simétrica.

Os algoritmos SQP correspondem a um método iterativo que gera uma seqüência de valores $\{x_k, \lambda_k, \mu_k\}$ que converge para a solução do problema dada por (x^*, λ^*, μ^*) . Objetiva-se obter a solução (x^*, λ^*, μ^*) e sabe-se que esta deve satisfazer certas condições. Por outro lado, estas condições correspondem a um sistema de equações não lineares. Assim, obter a solução ótima nada mais é que resolver um sistema de equações $F(x, \lambda, \mu) = 0$. Logo, os métodos SQP são essencialmente métodos de Newton ou quasi-Newton de resolução de $F(x, \lambda, \mu) = 0$. Resta analisar como este sistema de equações é resolvido

Em função do que foi exposto tem-se que a classe de algoritmos SQP, que é caracterizada pela geração da seqüência $\{x_k, \lambda_k, \mu_k\}$ como segue:

1. Resolva o seguinte problema da PQ para obter d_k :

$$\begin{array}{ll} \min \frac{1}{2} d_k^T H(x_k, \lambda_k, \mu_k) d_k + \nabla f^T(x_k) d_k & \leftrightarrow \min \frac{1}{2} d_k^T H(x_k, \lambda_k, \mu_k) d_k + \nabla f^T(x_k) d_k \\ s.a. \nabla h^T(x_k) d_k = -h(x_k) & s.a. x_k + d_k \in X(x_k) \\ \nabla g^T(x_k) d_k \leq -g(x_k) & \end{array}$$

onde, H é uma aproximação do Hessiano de (P1) ou (P2) avaliado na iteração k . $X(x_k)$ é a aproximação linear de X na iteração k , obtida expandindo-se as restrições em série de Taylor e truncando-se os termos de ordem superior.

$$x_{k+1} = x_k + d_k$$

2. λ_{k+1} e μ_{k+1} correspondem aos multiplicadores de Lagrange do problema da PQ.

A essência do método SQP é simples. No entanto, sendo um método de Newton a convergência para a solução do problema será local sob certas hipóteses, i.e., a seqüência $\{x_k, \lambda_k, \mu_k\} \rightarrow (x^*, \lambda^*, \mu^*)$ para valores (x_k, λ_k, μ_k) suficientemente próximos da solução ótima. Como não se conhece a solução ótima a priori é necessário que se efetuem mudanças no algoritmo básico de forma a que se tenha convergência global, independentemente do ponto de partida. Se o espaço definido por X for convexo, então se a seqüência for construída como: $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \in X$ para todo $\alpha_k \in [0,1] \subset IR$, tem-se que x_{k+1} pertencerá a X . Pode-se, então, definir um problema de minimização em linha de forma a se garantir a propriedade de convergência global do método SQP para esta situação. Este é o ponto de partida do método SQP, ou seja, introduz-se uma penalidade no passo 2, o qual passa a ser definido como:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \quad (2.131)$$

sendo, α_k um amortecimento obtido a partir da minimização unidirecional de uma função objetivo adequada, denominada função de mérito.

Existem diversas particularidades implícitas na exposição e delas depende o bom funcionamento do algoritmo, a saber:

1. É necessário se calcular os gradientes dos mapeamentos f, h, g .
2. É necessário se obter uma boa aproximação do Hessiano da função Lagrangeana.
3. É necessário se resolver o problema da programação quadrática e estabelecer se este terá solução.
4. É necessário se definir a função de mérito e resolver um problema de busca unidirecional.

É necessário se estabelecer um critério de parada, i.e., quando o algoritmo convergiu para a solução ótima. Diversos critérios existem para se identificar se uma dada solução é ótima ou não. Um dos mais usados se baseia na idéia de que na solução ótima, a direção de busca obtida na programação quadrática será nula e, desta forma, se pequenos incrementos são feitos nas variáveis de decisão é porque se está perto da solução ótima. Assim, a idéia é medir o quanto as variáveis diferem de uma iteração a outra

$$\|x_k - x_{k-1}\| \leq \varepsilon_p; \varepsilon_p > 0 \quad (2.132)$$

2.6.2 Algoritmos Genéticos

Os algoritmos genéticos têm sua origem na década de 60, pelo professor John Holland da Universidade de Michigan, e apresentam este nome em função de sua analogia com a teoria da evolução primeiro explica por Charles Darwin. Este procedimento

numérico transforma variáveis em vetores chamados de cromossomos, que por processos de reprodução, crossover e mutação, em representação algébrica, evoluem até um ponto ótimo. Assim como na teoria evolucionista, os cromossomos menos aptos, longe do objetivo, são preteridos por aqueles com desempenho mais adequado. A representação numérica do cromossomo, suas características e limitações serão abordadas mais adiante. Neste ponto pode-se adiantar que para a maioria dos códigos esta representação é feita na forma binária.

As operações citadas acima são realizadas para diversos cromossomos (população) que ocupam o espaço onde possivelmente o ótimo global se encontra. Desta forma, aumenta-se a probabilidade de sucesso do algoritmo. Cada conjunto de operação que contenha uma reprodução seguida de crossover e mutação é entendida como geração.

Os algoritmos genéticos não dependem que o ponto de partida seja bom para que um ótimo seja alcançado. Na verdade trata-se de um procedimento combinatorial e probabilístico, cuja performance dependerá basicamente da população e do número de gerações. Portanto, a solução encontrada não será exatamente o valor do ótimo global, mas sim algo aproximado em função dos parâmetros utilizados.

Em um primeiro instante pode-se pensar que basta apenas aumentar o tamanho da população e o número de gerações que de qualquer forma uma solução bem próxima do ótimo global será obtida. A prática mostra que isto não é possível por duas razões. A primeira é que o aumento indiscriminado da população e do número de cromossomos trazem consequências para o processamento computacional, que torna-se ineficaz para estes casos. A segunda é o aumento do número de gerações, que em um determinado ponto do processo não resolve, pois a convergência já foi atingida.

Uma das maneiras de solucionar o inconveniente descrito acima é utilizar, ao invés de codificação binária, cromossomos com codificação real. Embora ter-se-á detalhado apenas a forma binária, o tratamento real expande as possibilidades de precisão para um cromossomo e supera o entrave que o código binário tem intrínseco à sua representação numérica de apenas dois dígitos “0” e “1”.

A estrutura geral e básica de algoritmos genéticos pode ser acompanhada na Figura 2.16.

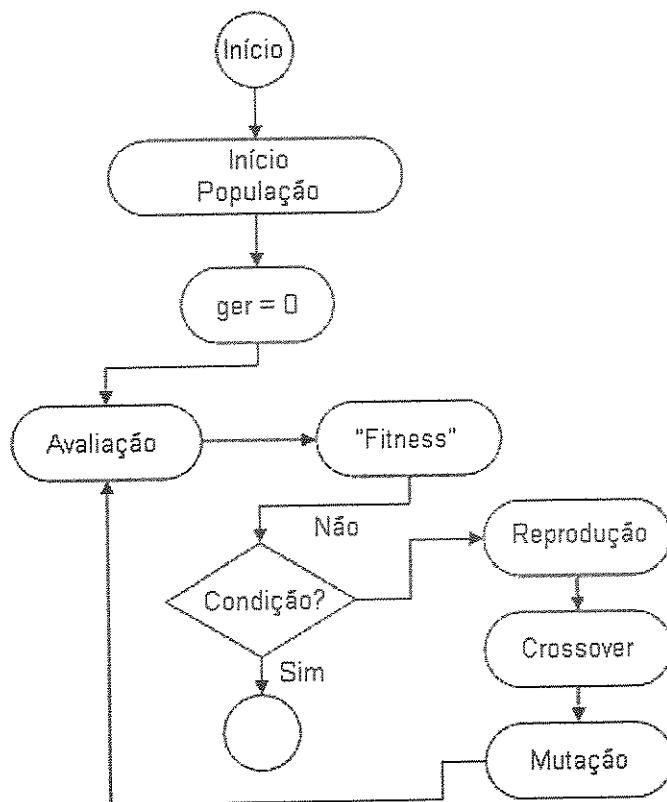


Figura 2.16 - Princípio de funcionamento de um algoritmo genético.

Mais detalhes a respeito dos algoritmos genéticos, e todo o desenvolvimento formal aqui mostrado, encontram-se em Michalewicz (1996). Segue embasamento teórico a respeito de algoritmos genéticos binários, contendo descrição das técnicas de reprodução, crossover e mutação.

O primeiro passo a explicar na codificação de um algoritmo genético binário é a representação de uma variável por meio de um cromossomo binário.

Para uma variável x_i que será avaliada entre [-1,2] com precisão de 6 (seis) casas decimais tem-se:

$$l_i = \log_2 \left(\frac{x_i^{\max} - x_i^{\min}}{\varepsilon_i} \right) \quad (2.133)$$

Sendo,

l_i – Comprimento do cromossomo.

ε_i – Precisão desejada para a representação binária.

x_i^{\max} – Limite superior de busca do ponto ótimo para x_i

x_i^{\min} – Limite inferior de busca do ponto ótimo para x_i

Seguindo as características da variável x_1 tem-se:

$$l_i = \log_2 \left(\frac{2 - (-1)}{1.E - 06} \right) = \log_2 (3.E + 06) \approx 22 \text{ (próximo inteiro)}$$
(2.134)

Os valores das variáveis, ou genes para o algoritmo, são calculados com a equação abaixo.

$$x_i = x_i^{\min} + \frac{x_i^{\max} - x_i^{\min}}{2^l - 1} \cdot DV(s_i)$$
(2.135)

Sendo “DV”, o valor decodificado do indivíduo (cromossomo) e calculado por:

$$DV(s_i) = \sum_{j=0}^{l-1} (2^j \cdot s_j)$$
(2.136)

$$S \equiv (s_{l-1}, s_{l-2} \dots s_2, s_1, s_0)$$
(2.137)

Assim, o cromossomo tem a seguinte forma:

$$\underbrace{(001100\ldots001)}_{22 \text{ elementos}} \quad (2.138)$$

Caso o problema tenha mais de uma variável, procede-se com o cálculo realizado pela equação (2.133), e faz-se a soma dos l_i de todas as variáveis. A equação abaixo exemplifica uma situação com “N” variáveis.

$$\underbrace{0011\ldots101}_{x_1} \quad \underbrace{1101\ldots1}_{x_2} \quad \underbrace{10101\ldots11}_{x_3} \quad \cdots \quad \underbrace{0110110}_{x_N} \quad (2.139)$$

Após a estruturação do cromossomo o passo seguinte consiste em especificar o tamanho da população (quantidade de cromossomos no espaço de busca) e suas características. Quando não há prévio conhecimento dos problemas, o usual é proceder com uma população aleatoriamente gerada. Nesta fase os valores binários de cada gene são escolhidos entre “0” ou “1”, de acordo com o procedimento citado acima. Em algumas situações o conhecimento da situação permite formular de maneira heurística a população inicial. A vantagem desta possibilidade é que o estado inicial está mais próximo do ponto ótimo. Portanto, a convergência é mais rápida e a probabilidade de que seja encontrado um mínimo local é menor.

Após a determinação da população pode-se iniciar com a reprodução da mesma. Este termo não é muito bem adequado, pois o que ocorre numericamente é a seleção por probabilidade dos cromossomos mais aptos. Em uma população com “N” cromossomos cada um terá um valor que indica sua aptidão. Este valor é obtido por meio da decodificação binária com a equação (2.136).

Sendo v_i cada cromossomos, tem-se:

$$\begin{aligned}
 v_1 &= (001100100011001) \\
 v_2 &= (111100100011001) \\
 v_3 &= (011010101010001) \\
 &\vdots \\
 v_N &= (101011001010110)
 \end{aligned} \tag{2.140}$$

Decodificado cada um destes obtém-se um valor real r_i para cada v_i .

$$\begin{aligned}
 r_1 &= eval(v_1) \\
 r_2 &= eval(v_2) \\
 r_3 &= eval(v_3) \\
 &\vdots \\
 r_N &= eval(v_N)
 \end{aligned} \tag{2.141}$$

Sendo,

$$eval(v_i) = \log_2 \left(\frac{x_i^{\max} - x_i^{\min}}{\varepsilon_i} \right) \tag{2.142}$$

Em seguida calcula-se a probabilidade de seleção “ p_i ” de v_i conforme a equação (2.143).

$$p_i = eval(v_i)/F \tag{2.143}$$

Sendo, “ F ” aptidão da população e calculado pela equação abaixo.

$$F = \sum_{i=1}^N eval(v_i) \tag{2.144}$$

Com os valores de “ p_i ” já calculados inicia-se o processo de reprodução (seleção) dos cromossomos mais aptos. São sorteados “N” (tamanho da população) números aleatórios entre “0” e “1”. Cada um destes números será comparado com os valores de “ p_i ”. Este valor na prática encontrar-se-á entre algum “ p_{i-1} ” e “ p_i ”. O cromossomo selecionado é aquele de maior valor. O exemplo abaixo esclarece o último parágrafo.

Dado o conjunto de “ p_i ’s”,

$$\begin{aligned} p_1 &= 0.0234 & p_4 &= 0.2034 & \cdots & \cdots \\ p_2 &= 0.0846 & p_5 &= 0.2269 & \cdots & \cdots \\ p_3 &= 0.1215 & \cdots & \cdots & p_N &= 1.000 \end{aligned} \quad (2.145)$$

Se o valor aleatoriamente sorteado for 0.1345, então o cromossomo escolhido será o “ p_4 ”. Este procedimento é repetido o número de vezes igual ao da população.

Este procedimento é clássico para a seleção da população. Entretanto, existem outras formas, uma destas baseia-se na competição entre os cromossomos. Aleatoriamente são selecionados dois cromossomos, comparados e o mais apto é selecionado. O selecionado é copiado e este passa a substituir o perdedor na população. Repete-se sistematicamente o procedimento até ter-se a nova população de cromossomos.

Após a seleção, a primeira operação de um algoritmo genético é o crossover. Dois cromossomos, aleatoriamente escolhidos, trocam genes. Esta troca de material genético é numericamente representada pela permutação dos binários a partir de determinado ponto da seqüência de genes dos cromossomos.

Para esta operação um parâmetro precisa ser definido, a probabilidade de crossover (p_c). Para cada cromossomo um número aleatório entre “0” e “1” é sorteado. Se o número for menor que “ p_c ”, então este cromossomo é selecionado para o crossover, caso contrário não. Os cromossomos são pareados de acordo com a ordem de sorteio, ou aleatoriamente combinados, e trocam as informações genéticas. Caso o número de cromossomos sorteados não seja par, duas são as alternativas. Selecionar outro, ou eliminar um, a fim de se ter número par de indivíduos.

Supondo que os indivíduos v_1 e v_2 vão realizar crossover.

$$\begin{aligned}v_1 &= (001100100011001) \\v_2 &= (111100100001011)\end{aligned}\tag{2.146}$$

Um número aleatório para indicar a posição de troca é sorteado e a operação é executada.

$$\begin{aligned}v_1' &= (0011001000 | 11001) \\v_2' &= (1111001000 | 01011)\end{aligned}\tag{2.147}$$

Os dois indivíduos resultantes da operação são:

$$\begin{aligned}v_1' &= (0011001000 | 01011) \\v_2' &= (1111001000 | 11001)\end{aligned}\tag{2.148}$$

O “crossover” também pode acontecer de maneira combinada. Os vetores que representam o cromossomo (indivíduo) mesclam-se por meio de uma operação linear. Tendo v_1 e v_2 , os cromossomos resultantes seriam:

$$\begin{aligned}v_1' &= a.v_1 + (1-a).v_2 \\v_2' &= a.v_2 + (1-a).v_1\end{aligned}\tag{2.149}$$

Os valores de “a” podem variar entre “0” e “1”.

Há ainda o “crossover” heurístico, mas este não será abordado.

Uma segunda e última operação, durante cada geração em um algoritmo genético, é a mutação. Definida a probabilidade de mutação (p_m), o procedimento é similar ao do “crossover”.

Para cada gene do cromossomo um número aleatório entre “0” e “1” é sorteado. Caso este seja menor que “ p_m ” o gene sofre mutação. Isto significa, para codificação binária, ter seu valor alterado para “0” caso este seja “1”, e vice-versa.

$$\begin{aligned} v_i &= (0011 \mid 00100011001) \\ v'_i &= (0010 \mid 00100011001) \end{aligned} \quad (2.150)$$

No exemplo acima, o 4º gene do cromossomo sofreu mutação.

A operação de mutação é uniforme, ou seja, a opção de mutação é única. Existem também as não uniforme. Este segundo tipo restringe a faixa de mutação com o decorrer das gerações, porém só pode ser usada com codificação real.

A expressão abaixo é usada quando se deseja introduzir no algoritmo genético mutações não uniformes.

$$\Delta m = r \cdot \left(1 - \frac{t}{T}\right)^b \quad (2.151)$$

Sendo,

Δm – Efeito da mutação no gene (codificação real).

B – Parâmetro de não uniformidade.

r – Número aleatório [0,1].

t – Geração corrente.

T- Número total de gerações.

Quanto mais próximo do final as mutações têm menor efeito.

Este técnica é mais indicada para algoritmos que requeiram ajustes finos na busca da solução ótima (“hill climbing”). Com isto, as gerações não apresentam mutações muito drásticas, que em alguns casos podem levar à ótimos locais devido à convergência prematura.

Até agora foi estudado o caso em que a função objetivo não tinha restrições. Mas em problemas reais é bastante comum deparar-se com situações envolvendo restrições, sejam estas de igualdade, desigualdade, ou ambas. Em literatura encontram-se cinco formas distintas de abordagens, Michalewicz (1996), Michalewicz e Schoenauer (1996):

- Métodos baseados na preservação das soluções factíveis.
- Métodos baseados em funções penalizadas.
- Métodos interferindo soluções factíveis e infactíveis.
- Métodos baseados em decodificadores.
- Métodos híbridos.

Os métodos mais populares são os de adicionar uma penalidade na função objetivo, e estes serão comentados mais adiante.

A idéia básica é adicionar à função objetivo principal suas restrições.

Para o problema abaixo,

minimizar $f(x)$,

sujeito a,

$$\sum_{i=1}^{Ne} h_i(x) = 0 \quad (2.152)$$

$$\sum_{j=1}^{Ni} g_j(x) \geq 0$$

Ne – Número de restrições de igualdade.

Ni – Número de restrições desigualdade.

A nova função objetivo, computando as penalidades, é representada por:

$$F(x) = f(x) + \left(\sum_{i=1}^{Ne} r_i |h_i(x)| + \sum_{j=1}^{Ni} R_j \langle g_j(x) \rangle \right) \quad (2.153)$$

R_i e r_i – Parâmetros de penalidade para adequar o peso das restrições com a função objetivo principal f(x). O operador ⟨ ⟩, na função objetivo indica o valor absoluto de g_j(x) se este for negativo, caso contrário o valor na função é zero.

O ideal é normalizar as restrições antes de inseri-las na função objetivo. Assim, com uma constante para ambos os tipos de restrições, a função objetivo fica adequada. Isto significa que os pesos das restrições são proporcionais entre si e estão na mesma ordem de grandeza da função principal. Com este procedimento a função objetivo ganha a forma da equação (2.154).

$$F(x) = f(x) + R \left(\sum_{i=1}^{Ne} |h_i(x)| + \sum_{j=1}^{Ni} \langle g_j(x) \rangle \right) \quad (2.154)$$

O valor de R é empírico para cada situação. Valores muito grandes, ou pequenos, podem levar à ótimos locais (primeira situação), ou não influenciarem a função objetivo a ponto de soluções fora das restrições serem obtidas (segunda situação).

Outro aspecto empírico em algoritmos genéticos diz respeito ao rigor do método de seleção durante cada geração. Um procedimento muito “elitista”, cuja fórmula restrinja em excesso os indivíduos menos aptos, reduz a variabilidade genética da população. Neste contexto, é provável uma convergência prematura para um ótimo local.

Por outro lado, um algoritmo pouco seletivo durante a fase de seleção torna a convergência mais lenta e com comportamento similar a uma busca puramente aleatória.

Além do que já foi discutido, os algoritmos genéticos também podem operar com funções objetivos como mais de uma solução e com mais de um objetivo.

A codificação real, ao contrário da binária, usa números reais e por isso é capaz de representar com maior riqueza de detalhes a região de otimização com menos esforço computacional. Este tipo de abordagem é recomendado para problemas com número de variáveis grandes e onde requer-se maior precisão. Esta codificação pode ser melhor estudada em Deb e Kumar (1995).

2.6.3 Comentários

A técnica do SQP baseia nas derivadas primeira e segunda da função objetivo e das restrições, caso haja alguma. Em sua fundamentação teórica apenas situações específicas garantem o ótimo global. Em processos químicos contínuos as não linearidades presentes em geral levam à problemas não convexos, e portanto o ótimo global não está assegurado.

Como é sabido um ótimo local pode dirigir o processo para situações economicamente não favoráveis. Assim, a rigor, o SQP não é uma ferramenta segura para todo caso de integração de processos químicos em tempo real.

Por sua vez, os algoritmos genéticos também não garantem o ótimo global. Em Michalewicz (1996) consta que como decorrência de uma convergência prematura, em virtude de processos de seleção mal formulados, o algoritmo genético converge para um mínimo local. Além deste fato, a própria característica probabilística do método não garante um ótimo global, mas sim um valor próximo.

Um aspecto que não foi abordado, mas é condição indispensável para o sucesso deste estudo, é a habilidade das técnicas acima realizarem suas tarefas em tempo real. O SQP quando lida problemas não lineares convexos de pequeno e médio porte (até 20 variáveis) converge rapidamente. O algoritmo genético também é rápido para populações de até 50 cromossomos e por volta de 10 variáveis.

Na prática o que determina a capacidade de convergência em tempo real é a formulação do problema e o equipamento utilizado para seu processamento. Neste aspecto os algoritmos genéticos levam vantagem, apesar do maior tempo de processamento nas mesmas condições, pois seus códigos podem ser facilmente paralelizados. Métodos numéricos baseados nos gradientes, como o SQP, são de difícil paralelização, pois a solução avança iterativamente. Nos algoritmos genéticos cada cromossomo pode sofrer reprodução, crossover e mutação em paralelo, assim como várias populações podem ser testadas desta maneira. Na prática o que entende-se por tempo real é somente o período que pode-se estar processando numericamente as informações, sem ação nenhuma no processo, com prejuízo para o mesmo. Logo, cabe ao desenvolvedor do sistema de integração testar *a priori* os métodos numéricos e analisar as soluções a fim de saber se estas estão compatíveis com a filosofia adotada.

Quanto às possibilidades de não convergência à um ótimo global para ambas as soluções, as dificuldades devem ser solucionadas por partes. Se de fato o SQP não garante ótimo global para todos os problemas, este pelo menos deve quando aplicado à uma situação real otimizar o processo, ainda que localmente. Mesmo que o resultado não seja o melhor, ainda assim houve ganhos. Além disso, muitas vezes usa-se um modelo idealizado do processo, contendo desvios em relação às informações reais. Neste caso, mesmo que o ótimo global seja factível, não necessariamente é igual ao real do processo.

Com relação aos algoritmos genéticos valem as mesmas afirmações do último parágrafo. Apesar da solução ótima ser uma aproximação, este valor pode ser de grande valia, já que o ótimo real do processo é muitas vezes insondável.

Um procedimento que une as capacidades de ambas as técnicas parece bastante razoável. Deve-se então usar a solução próxima da ótima, conseguida com o algoritmo genético, e adotá-la como ponto de partida para um SQP. É mais provável nesta situação obtém-se o ótimo global, embora não haja nenhum desenvolvimento teórico que possa afirmar com todas as garantias que a solução seja o ótimo global.

Portanto, a integração de processos químicos contínuos em tempo real pode ser muito bem conduzida para um patamar de operação economicamente mais rentável. Cabe aos responsáveis pelo sistema estudar sistematicamente as opções disponíveis, e

implementar em campo àquelas que de alguma maneira são confiáveis e levam à níveis operacionais ótimos.

2.7 Integração em tempo real

Em projetos que trabalham com integração de processos químicos em tempo real, a primeira identificação concerne qual nível de estrutura será utilizada. Pode-se distinguir três tipos de integração: em uma camada, duas camadas e múltiplas camadas.

Na integração em uma camada o problema de otimização e controle são resolvidos simultaneamente. Os problemas de otimização são responsáveis pela determinação dos pontos ótimos de operação. Estes valores são resultados de modelos de planejamento operacional e fenomenológicos, os quais envolvem parâmetros mercadológicos, produtivos e de processo. O problema de controle consiste em manter o processo nos “set points” gerados pela otimização, ou controlar o processo mesmo com mudanças de patamar produtivo. Quando se trabalha em uma camada não é obrigatório usar uma estrutura complexa. Basta recalcular os parâmetros do controlador com propósitos de otimização e performance, que a estrutura é enquadrada em uma integração de simples camada. Na Figura 2.17 tem-se um exemplo de integração em uma camada.

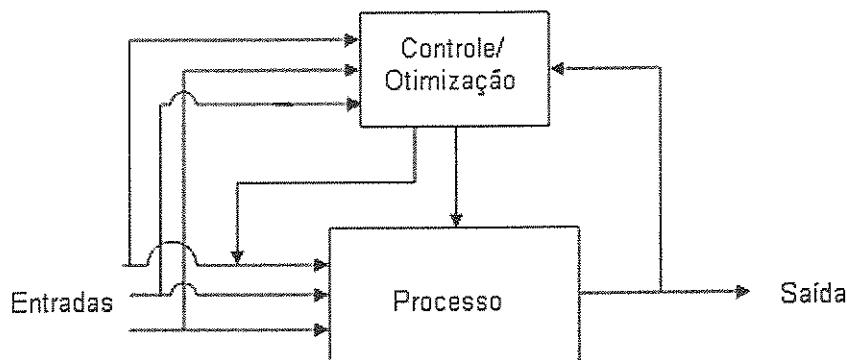


Figura 2.17 - Integração em uma camada.

A integração em duas camadas é a situação típica, pois as camadas processam as informações separadamente. Neste caso, o otimizador gera as informações que servirão de trajetória e referência para o controlador ou processo, o qual deve manter este perfil até nova atualização dos parâmetros.

Em algumas situações a complexidade é tamanha que unidades de processos inteiras, ou muitos equipamentos, com integração em duas camadas não têm um bom desempenho. Em condições como estas pode-se criar uma terceira camada, segunda de otimização, para controlar e gerir os problemas menores de otimização. Este é o caso com múltiplas camadas, ou híbrido. As duas figuras subsequentes mostram estruturas de integração em duas e múltiplas camadas respectivamente.

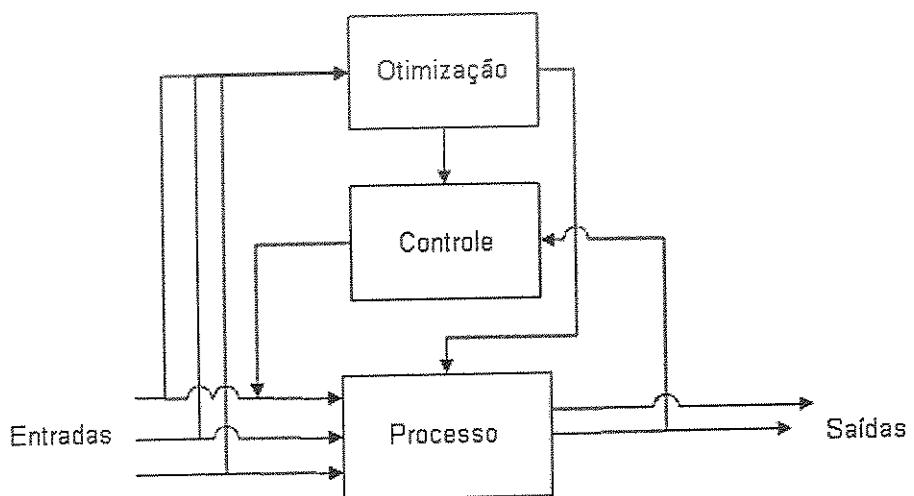


Figura 2.18 - Integração em duas camadas.

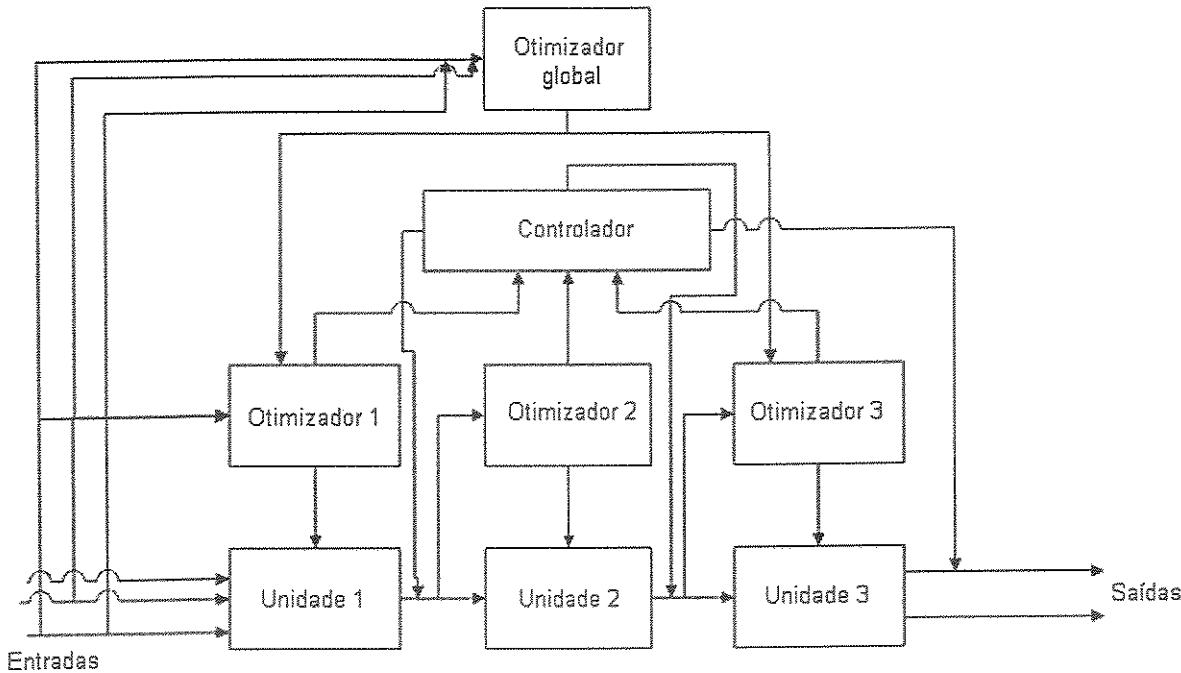


Figura 2.19 - Integração em múltiplas camadas.

2.8 Conclusões

Neste capítulo foram abordados e discutidos os itens necessários para compreender os desenvolvimentos necessários. Uma revisão bibliográfica seguida dos conceitos fundamentais permite ao leitor situar-se ao longo do desenvolvimento da Tese.

O processo de incineração de resíduos sólidos foi discutido em seu nível operacional e conceitual. Os princípios de funcionamento, assim com os principais fenômenos foram apresentados.

O nível hierárquico de controle também foi explorado, controladores lineares e preditivos estudados com o nível de detalhamento matemático suficiente para avaliar quantitativamente e qualitativamente sua atuação no processo.

A camada de otimização responsável pelo desempenho ótimo do processo, trabalha com dois tipos de algoritmos: S.Q.P e os algoritmos genéticos. Ambos foram suficientemente bem explicados para que o leitor pondere as diferenças conceituais e seu impacto em nível de resultados e processamento computacional.

Uma vez que as estratégias de controle e otimização usam redes neurais artificiais foi-se necessário conceituá-las. Sua estrutura, funcionamento e os principais algoritmos para redes tipo retropropagação foram devidamente apresentados.

De maneira geral a fundamentação teórica apresentada supre as necessidades básicas como visão geral. Cabendo ao próximo capítulo o detalhamento das modelagens matemáticas usadas nesta Tese.

Capítulo 3:

Modelos Matemáticos

3.1 Modelagem Matemática do incinerador

Neste capítulo será apresentado o modelo matemático, em coordenadas cilíndricas, que representará os processos a serem simulados por meio de aplicativos computacionais. O detalhamento desta modelagem, em coordenadas retangulares, está no apêndice D.

Trata-se de um modelo determinístico, cujas equações estão baseadas nos balanços diferenciais de massa, energia e quantidade de movimento. As equações descrevem um incinerador de forno rotativo. Este equipamento é, em geral, composto por duas câmaras de combustão, uma primeira para queima de resíduos sólidos, líquidos, lamas e outros. A segunda câmara de combustão tem como função complementar o processo de combustão, que eventualmente não foi satisfatório no forno e também pode ser usada para resíduos líquidos. Entretanto, devido à complexidade do tema abordado apenas o forno rotativo será foco de estudo.

Alguns outros processos, além da incineração, podem ser beneficiados com um modelo determinístico semelhante. Encontram-se nesta lista os fornos de cimento e calcinação.

3.2 Mudança de coordenadas

Conforme já mencionado anteriormente, por uma questão geométrica dos equipamentos que são usados para processos de incineração, calcinação ou produção de cimento, será adotado para fins de modelagem matemática o sistema de coordenadas cilíndricas.

A mudança do sistema de coordenadas retangulares para cilíndrica é bastante simples e pode ser encontrada em Swokowski (1983). O que precisa ser feito é substituir "x" e "y" por uma correspondente função que depende do raio (r) e do ângulo (θ). A terceira dimensão permanece inalterada, pois representa o eixo axial dos equipamentos em questão.

$$\begin{cases} z = z \\ x = r \cdot \cos(\theta) \\ y = r \cdot \sin(\theta) \end{cases} \quad (3.1)$$

A transformação inversa tem o seguinte formato:

$$\begin{cases} z = z \\ \operatorname{tg}(\theta) = \frac{y}{x} \\ r^2 = x^2 + y^2 \end{cases} \quad (3.2)$$

A escolha de "x" e "y" e sua substituição por r e θ altera o modelo do ponto de vista matemático, mas não fenomenológico. A única atenção é em relação ao eixo "z", o qual permanece constante, e necessariamente deve ser o eixo axial da câmara de combustão.

Uma vez que o modelo apresenta-se em forma de balanço diferencial, suas derivadas parciais em relação à "r" e " θ " modificam-se para:

$$\begin{cases} dx = dr \\ dy = rd\theta \end{cases} \quad (3.3)$$

A representação do sistema em coordenadas cilíndricas está ilustrada na Figura 3.1.

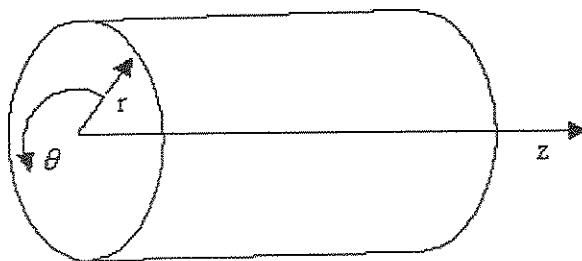


Figura 3.1 - Sistema de coordenadas cilíndricas.

Seguem as transformações de coordenadas propostas para os modelos desenvolvidos em três dimensões. Estes modelos terão as mudanças baseadas na forma mais completa possível que poderá ser aplicada para futuras simulações. As formas em duas e uma dimensões podem ser facilmente obtidas com a anulação direta dos eixos não representados.

3.2.1 Balanços de energia.

- Região gasosa

$$\rho.Cp.\frac{\partial T}{\partial t} + \rho.Cp.\left[u_r.\frac{\partial T}{\partial r} + T.\frac{\partial u_r}{\partial r} + u_\theta.\frac{\partial T}{r.\partial\theta} + T.\frac{\partial u_\theta}{r.\partial\theta} + u_z.\frac{\partial T}{\partial z} + T.\frac{\partial u_z}{\partial z} \right] = \\ -k\left[\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T}{r.\partial\theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + Q_1 + Q_2 + \sum \pm\sigma.F_{i-j}.T^4 \quad (3.4)$$

- Parede

$$\rho_{refr}.Cp_{refr}.\frac{\partial T}{\partial t} = -k_{refr}\left[\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T}{r^2.\partial\theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \quad (3.5)$$

- Leito sólido

$$\rho_{sol}.Cp_{sol}.\frac{\partial T}{\partial t} + \rho_{sol}.Cp_{sol}.\left[\frac{\partial(u_z.T)}{\partial z} \right] = -k_{sol}\left[\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T}{r^2.\partial\theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \quad (3.6)$$

3.2.2 Balanço de quantidade de movimento.

- Direção r

$$\mu\left(\frac{\partial^2 u_r}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 u_r}{r^2.\partial\theta^2} + \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} \right) + \frac{I}{3}.\mu.\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_\theta}{r.\partial\theta} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) - \frac{\partial P_r}{\partial r} + \rho.g_r = \rho.\frac{\partial u_r}{\partial t} \quad (3.7)$$

- Direção θ

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_\theta}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 u_\theta}{r^2 \partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_\theta}{r \partial \theta} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) - \frac{\partial P_\theta}{r \partial \theta} + \rho \cdot g_\theta = \rho \cdot \frac{\partial u_\theta}{\partial t} \quad (3.8)$$

- Direção z

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 u_z}{r^2 \partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_\theta}{r \partial \theta} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) - \frac{\partial P_z}{\partial z} + \rho \cdot g_z = \rho \cdot \frac{\partial u_z}{\partial t} \quad (3.9)$$

3.2.3 Balanço de massa por componente.

$$\rho \cdot \frac{\partial m_j}{\partial t} + \rho \cdot u_r \cdot \frac{\partial m_j}{\partial r} + \rho \cdot m_j \cdot \frac{\partial u_r}{\partial r} + \rho \cdot u_\theta \cdot \frac{\partial m_j}{r \partial \theta} + \rho \cdot m_j \cdot \frac{\partial u_\theta}{r \partial \theta} + \rho \cdot u_z \cdot \frac{\partial m_j}{\partial z} + \rho \cdot m_j \cdot \frac{\partial u_z}{\partial z} = R_j \quad (3.10)$$

3.3 Condições de contorno e iniciais

Para efeitos didáticos, deste ponto em diante a coordenada “z” representará o eixo axial, r o raio e θ o ângulo no plano transversal ao eixo “z”. Uma vez que o objetivo desta modelagem matemática é a integração controle e otimização em tempo real, a dinâmica é muito importante. Neste contexto, os valores iniciais são calculados até que o processo atinja o equilíbrio a partir do modelo dinâmico.

Geralmente a integração numérica parte de valores do estado estacionário quando uma perturbação é aplicada ao sistema. Abaixo serão apresentadas as condições de contorno para a região gasosa, o leito sólido e a parede interna.

3.3.1 Leito sólido

Em $r=h_{ls}$; $0 \leq z \leq L$ e $0 \leq \theta \leq \xi$

Na interface entre o leito sólido e a câmara ocorrem fluxos de calor condutivo e convectivo. Neste ponto, dependendo do gradiente de temperatura, o fluxo convectivo dá-se em direção ao leito ou o condutivo para a região gasosa. Estes fenômenos estão apresentados na Figura 3.2.



Figura 3.2 - Fronteira leito sólido - região gasosa.

Nesta região de fronteira, a condição de contorno pode ser expressa por:

$$q_{conv} = q_{cond} \quad (3.11)$$

Em balanço diferencial,

$$h_{gas} \frac{dT}{dr} = k_{sol} \frac{d^2T}{dr^2} \quad (3.12)$$

q_{conv} - Fluxo de calor convectivo na região de contorno.

q_{cond} - Fluxo de calor condutivo na região de contorno.

h_{gas} - Coeficiente convectivo da região gasosa.

Em $r=R$; $0 \leq z \leq L$ e $0 \leq \theta \leq \xi$

Na região de contato entre o leito sólido e a parede interna, vale o mesmo princípio para a condição anterior. A diferença é que nesta situação ambos os fluxos são de condução.

$$q_{\text{cond}}^{\text{leito}} = q_{\text{cond}}^{\text{refratário}} \quad (3.13)$$

Na forma diferencial,

$$k_{\text{refrl}} \frac{d^2 T}{dr^2} = k_{\text{sol}} \frac{d^2 T}{dr^2} \quad (3.14)$$

A Figura 3.3 mostra um corte transversal para que se possa compreender melhor o que o ângulo ξ representa nas condições de contorno.

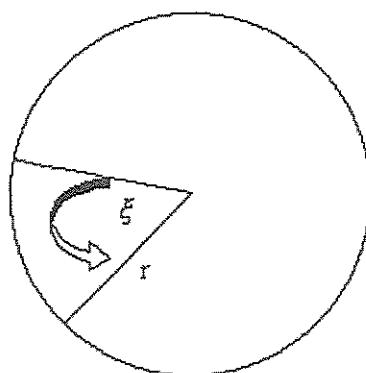


Figura 3.3 - Corte transversal da câmara de combustão.

3.3.2 Parede

Na Figura 3.4 estão ilustradas geometricamente as características que dão sentido físico entra às diferenças das regiões de contorno do leito sólido e da parede.

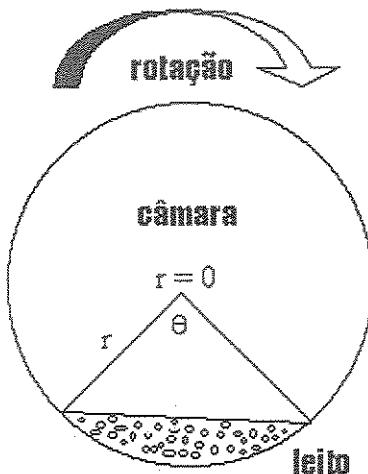


Figura 3.4 - Detalhes do corte transversal da câmara de combustão.

Em $r=R$; $0 \leq z \leq L$ e $\xi \leq \theta \leq 2\pi$

$$q_{conv}^{gas} = q_{cond}^{parede} \quad (3.15)$$

ϕ_{parede} - Balanço das trocas radiativas na superfície da parede.

Na forma diferencial,

$$h_{gas} \frac{dT}{dr} = k_{refr} \frac{d^2T}{dr^2} \quad (3.16)$$

Em $r=R_{\text{ext}}$; $0 \leq z \leq L$ e $0 \leq \theta \leq 2\pi$

$$q_{\text{conv}}^{\text{ambiente}} = q_{\text{cond}}^{\text{parede}} \quad (3.17)$$

Na forma diferencial,

$$h_{\text{amb}} \frac{dT}{dr} = k_{\text{refr}} \frac{d^2T}{dr^2} \quad (3.18)$$

Sendo,

h_{amb} - Coeficiente convectivo do ambiente.

R_{ext} - O raio externo que computa a espessura da parede com refratário.

h_s - Altura do leito sólido.

L - Comprimento da câmara.

R - Raio interno da câmara.

3.3.3 Região gasosa

Conforme pôde ser observado na Figuras 3.4, as fronteiras são coincidentes. Isto quer dizer que na discretização os pontos nesta região pertencerão a ambas as regiões adjacentes. Isto é positivo do ponto de visto da modelagem matemática, pois o compartilhamento de pontos na malha une fisicamente as regiões.

No caso da região gasosa duas fronteiras já foram estudadas, com o leito sólido e parede. Na região gasosa, em função dos balanços de massa e quantidade de movimento, outras condições de contorno são necessárias.

Começando pelas já apresentadas, o balanço de energia tem as seguintes condições de contorno:

Em $r=h_{ls}$; $0 \leq z \leq L$ e $0 \leq \theta \leq \xi$

$$h_{gas} \frac{dT}{dr} = k_{sol} \frac{d^2T}{dr^2} \quad (3.19)$$

Em $r=R$; $0 \leq z \leq L$ e $\xi \leq \theta \leq 2\pi$

$$h_{gas} \frac{dT}{dr} = k_{refr} \frac{d^2T}{dr^2} \quad (3.20)$$

No balanço de quantidade de movimento as condições de contorno devem estar em função das velocidades. As duas formas básicas são: a primeira condição admite que na região central a velocidade é máxima e a segunda implica em velocidade nula nas paredes e na superfície do leito sólido.

Em $r=0$; $0 \leq z \leq L$ e $0 \leq \theta \leq 2\pi$

$$\frac{\partial u_z}{\partial r} = 0 \quad (3.21)$$

Em $r=R$; $0 \leq z \leq L$ e $\xi \leq \theta \leq 2\pi$

$$u_z = 0 \quad (3.22)$$

Em $r=h_{ls}$; $0 \leq z \leq L$ e $0 \leq \theta \leq \xi$

$$u_z = 0 \quad (3.23)$$

Em $r=r_{in}$; $z=0$ e $\xi = \xi_m$

$$u_z = u_z^{inicial} \quad (3.24)$$

Em $z=0$; $0 \leq r \leq R$ e $0 \leq \theta \leq 2\pi$

$$u_r = 0 \quad (3.25)$$

Em $z=L$; $0 \leq r \leq R$ e $0 \leq \theta \leq 2\pi$

$$u_r = 0 \quad (3.26)$$

Caso seja adotado fluxo pistonado com velocidades constantes, todas as equações do balanço de quantidade movimento, incluindo as condições de contorno, não são necessárias para a modelagem. Esta condição, por razões já mencionadas, será adotada no modelo matemático.

As últimas condições que faltam são aquelas pertencentes aos balanços de massa. Assumindo a hipótese que haja alimentação de ar secundário e combustível auxiliar, tem-se, portanto duas condições:

Para $z=0$; $r=r_{in}$ e $\theta=\theta_{in}$

$$m_j(z, r, \theta) = m_j^{inicial} \quad (3.27)$$

r_{in} - Posição no eixo "r" de alimentação do ar ou combustível auxiliar.

θ_{in} - Posição no eixo " θ " de alimentação do ar ou combustível auxiliar.

Outra peculiaridade dos leitos sólidos é a volatilização da parte orgânica e evaporação da água. Este aspecto fornece outra condição de contorno muito importante para o modelo.

Para $r=h_{ls}$; $0 \leq z \leq L$ e $0 \leq \theta \leq \xi$

$$m_j(z, r, \theta) = f(z, r, \theta) \cdot x_{comp} \cdot m_{solido}^{inicial} \quad (3.28)$$

$f(z, r, \theta)$ - Fração da massa inicial que se volatiliza ou evapora na posição (z, r, θ) .

x_{comp} - Fração mássica de determinado componente na alimentação.

O esquema da Figura 3.5 exemplifica o comportamento da volatilização formulado matematicamente através das condições de contorno.

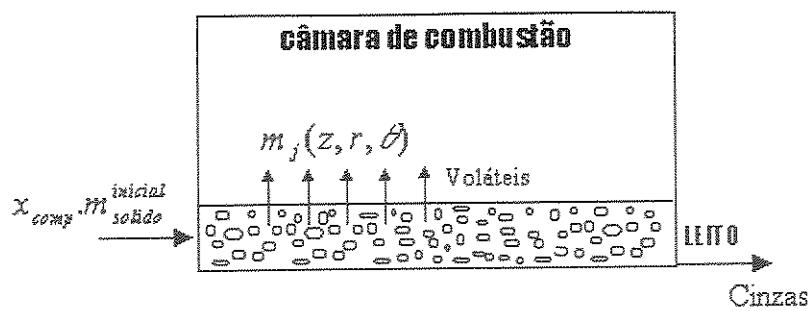


Figura 3.5 - Esquema da volatilização dos orgânicos e evaporação da água.

3.4 Radiação térmica

A natureza da energia provocada pela radiação é diferente dos fluxos de calor por convecção e condução. Nos dois últimos, a força motriz é resultante de gradientes de temperatura. Fluxos radiativos são compostos pela emissão total de um corpo que independe de qualquer gradiente. Para que um corpo emita radiação, basta que este esteja a uma temperatura acima do zero absoluto. Em função desta característica é que a influência dos fluxos radiativos aparecem no termo fonte do modelo. Na prática, a influência da radiação é predominante a partir de 500⁰ C.

O balanço de energia radiativa de uma superfície é dado por:

$$E = Abs - Emt \quad (3.29)$$

Abs - Energia absorvida de emissões de outras superfícies.

E_{mt} - Emissão total do corpo.

De maneira geral, uma superfície é capaz de emitir, absorver, refletir e transmitir radiação.

$$\alpha + \rho + \tau = 1 \quad (3.30)$$

A equação acima mostra que o balanço radiativo de um corpo é a soma da energia que o mesmo absorve, transmite e sua emissão total.

É sabido que gases monoatômicos e diatômicos (O_2 , Ar, N_2) pouco emitem ou absorvem radiação, mesmo em temperaturas elevadas, McCabe, Smith e Harriott (1985). Por outro lado, gases poliatômicos (H_2O , CO_2 , SO_2 , CH_4) emitem e absorvem radiação apreciavelmente nas temperaturas encontradas em câmaras de combustão. Portanto, faz sentido modelar a fase gasosa absorvendo e emitindo radiação, pois nos processos de incineração e calcinação é comum encontrar gases poliatômicos. Além disso tem-se um parâmetro muito importante para o ajuste do modelo com dados reais, visto que a radiação é o mecanismo de troca de calor dominante e as incertezas associadas são grandes. Por estas razões a radiação na fase gasosa será considerada.

Para os corpos sólidos deste modelo, o leito e a parede será admitida a hipótese de superfície cinzenta, ou seja, o corpo emite absorve e reflete a radiação.

A formulação básica de modelo consiste em fazer um balanço daquilo que sai e entra em forma de radiação de uma dada superfície.

3.4.1 Superfície sólida (leito sólido ou parede interna).

$$q = \alpha \cdot q_2 - q_1 - \rho \cdot q_2 \quad (3.31)$$

Sendo,

α - Absortividade.

ρ - Reflexividade.

q - Troca líquida do corpo.

q_1 - Emissão total do corpo.

q_2 - Radiação recebida das demais superfícies e região gasosa.

$$q_1 = A_1 \cdot \sigma \cdot \varepsilon_1 \cdot T^4 \quad (3.32)$$

$$q_2 = \sum q_i \quad (3.33)$$

σ - Constante de Boltzmann.

ε - Emissividade.

A_1 - Área da superfície.

$\sum q_i$ - Radiação recebida das demais superfícies e região gasosa, considerando os fatores de forma.

$$q_i = F_{i-1} \cdot A_i \cdot \sigma \cdot \varepsilon_i \cdot T^4 \quad (3.34)$$

F_{i-1} - Fator de forma do corpo "i" para o corpo "1".

Admite-se que as superfícies sólidas são opacas, ou seja, a transmissividade (τ) é nula.

3.4.2 Região gasosa.

$$q = \alpha \cdot q_2 - q_1 - \tau \cdot q_2 \quad (3.35)$$

É complicado interpretar uma região gasosa do ponto de vista de área superficial a fim de calcular a emissão do corpo. Para contornar este problema uma alternativa é proposta para a situação.

Volume do elemento para modelo unidimensional:

$$V = (\pi \cdot R^2) \Delta z \quad (3.36)$$

$$A_1 = 2 \cdot (\pi \cdot R^2) \quad (3.37)$$

A_1 - Soma das áreas no eixo "z".

Volume do elemento para modelo bidimensional:

$$V = [(\pi \cdot R^2) - \pi(n_i \cdot \Delta r)^2] \Delta z \quad (3.38)$$

$$A_1 = 2 \cdot [(\pi \cdot R^2) - \pi(n_i \cdot \Delta r)^2] \quad (3.39)$$

Sendo,

$$n_T \cdot \Delta r = R \quad (3.40)$$

n_i - Número do elemento de volumes a partir de $r=0$.

n_T - Número total de elementos de volume no eixo "r".

Volume do elemento para modelo tridimensional:

$$V = \frac{[(\pi \cdot R^2) - \pi(n_i \cdot \Delta r)^2]}{n_s} \Delta z \quad (3.41)$$

$$A_i = 2 \cdot \frac{[(\pi \cdot R^2) - \pi(n_{\xi} \cdot \Delta r)^2]}{n_{\xi}} \quad (3.42)$$

Sendo,

n_{ξ} - Número de elementos de volume no eixo " ξ ".

Esta formulação pondera as seis faces diferentes do elemento de volume. Caso o modelo adotado seja em duas ou uma dimensão, basta reduzir o número de faces.

3.4.3 Fatores de forma.

Diversas são as maneiras de se determinar os fatores de forma encontrados na literatura. O principal conceito é que a soma dos fatores de forma deve ser um. Isto significa que a soma das frações de energia radiativa que uma superfície emite deve ser igual à emissão total.

$$\sum F_i = 1 \quad (3.43)$$

Este princípio governará a modelagem matemática das trocas de calor radiativa para o referido processo.

Os fatores de forma são fundamentais para o cálculo dos fluxos radiativos. O modelo proposto é uma inovação em relação aos existentes, já que possibilita múltiplas influências entre as superfícies, com equações analíticas simples e de pouco impacto na memória do processador numérico. Um outro aspecto vantajoso é a possibilidade de parametrizar o modelo, assim a representatividade é melhorada. Como é necessária uma

informação inicial para avaliar os fatores de forma à direita e esquerda, usou-se a metodologia geométrica de Sparrow e Cess (1970). A seguir as expressões matemáticas das mesmas e suas respectivas figuras ilustrativas.

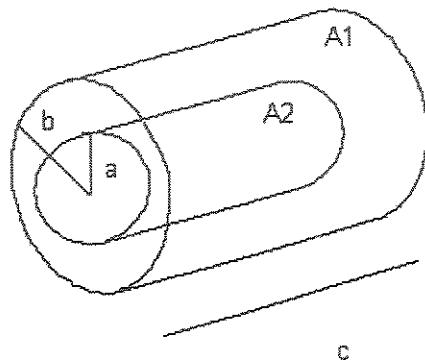


Figura 3.6 - Configuração 1.

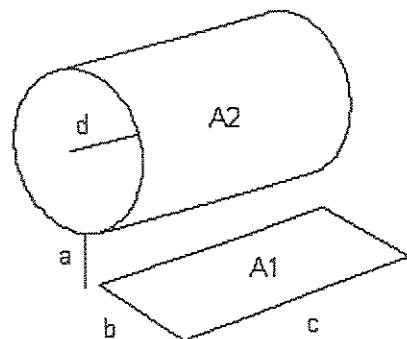


Figura 3.7 - Configuração 2.

As equações (3.44) e (3.45) representam a configuração 1.

$$F_{A1-A2} = \frac{2}{Y} \int_0^{Y/2} f(\zeta) d\zeta \quad (3.44)$$

$$f(\zeta) = \frac{X}{X^2 + \zeta^2} - \frac{X}{(X^2 + \zeta^2)\pi} \cdot \left\{ \cos^{-1}\left(\frac{B}{A}\right) - \frac{1}{2Z} \left[\begin{array}{l} \sqrt{A^2 + 4Z^2} \cdot \cos^{-1}\left(\frac{B}{A\sqrt{X^2 + \zeta^2}}\right) + \\ B \cdot \sin^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{X^2 + \zeta^2}}\right) - \frac{\pi A}{2} \end{array} \right] \right\} \quad (3.45)$$

Sendo,

- $X = a/d$, $Y = b/d$, $Z = c/d$
- $A = Z^2 + X^2 + \zeta^2 - 1$
- $B = Z^2 - X^2 - \zeta^2 + 1$

Para a configuração 2 tem-se:

- $X = b/a$, $Y = c/a$
- $A = Y^2 + X^2 - 1$
- $B = Y^2 - X^2 + 1$

$$F_{A1-A2} = \frac{1}{X} - \frac{1}{\pi X} \left\{ \cos^{-1}\left(\frac{B}{A}\right) - \frac{1}{2Y} \left[\begin{array}{l} \sqrt{(A+2)^2 - (2X)^2} \cdot \cos^{-1}\left(\frac{B}{X \cdot A}\right) \\ + B \cdot \sin^{-1}\left(\frac{1}{X}\right) - \frac{\pi A}{2} \end{array} \right] \right\} \quad (3.46)$$

$$\begin{aligned}
 F_{A1-A1} &= 1 - \frac{1}{X} + \frac{2}{\pi X} \cdot \tan^{-1} \left(\frac{2\sqrt{X^2 - 1}}{Y} \right) \\
 &- \frac{Y}{2\pi X} \left\{ \frac{\sqrt{4X^2 + Y^2}}{Y} \cdot \sin^{-1} \left[\frac{4(X^2 - 1) + Y^2 / X^2 \cdot (X^2 - 2)}{Y^2 + 4(X^2 - 1)} \right] \right. \\
 &\quad \left. - \sin^{-1} \left(\frac{X^2 - 2}{X^2} \right) + \frac{\pi}{2} \left(\frac{\sqrt{4X^2 + Y^2}}{Y} - 1 \right) \right\}
 \end{aligned} \tag{3.47}$$

- Leito sólido

O primeiro passo é determinar a posição ao longo do eixo "z". Neste ponto admite-se que uma fração é emitida para as superfícies à direita e a outra para esquerda. Esta divisão é feita de maneira proporcional seguindo o esquema da Figura 3.8.

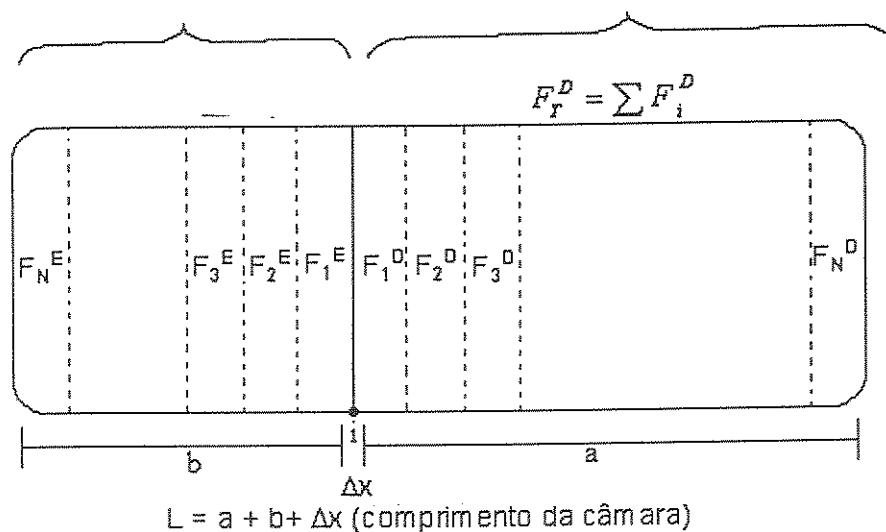


Figura 3.8 - Esquema de divisão dos fatores de forma para o leito sólido.

F_i^D - Soma dos fatores de forma destinados às superfícies localizadas à direita do elemento Δz .

F_i^E - Soma dos fatores de forma destinados às superfícies localizadas à esquerda do elemento Δz .

$$F_i^E = \frac{b}{a+b} ; F_i^D = \frac{a}{a+b} \quad (3.48)$$

As regiões que o leito sólido troca radiação são: a parede interna e o gás. Faz-se necessário pré definir em qual proporção se dará a distribuição entre o gás e a parede interna. A maneira sugerida é usar a quantidade de radiação absorvida pela região gasosa como referência.

Assim tem-se que:

$$F_i^D(gás) = \alpha \cdot F_i^D \quad (3.49)$$

$$F_i^D(parede) = (1 - \alpha) \cdot F_i^D \quad (3.50)$$

$$F_i^E(gás) = \alpha \cdot F_i^E \quad (3.51)$$

$$F_i^E(parede) = (1 - \alpha) \cdot F_i^E \quad (3.52)$$

O próximo passo é especificar como a soma dos fatores de forma das superfícies, ou região gasosa, à direita e esquerda são distribuídos. O procedimento proposto sugere que haja um decaimento linear ou exponencial de intensidade entre os F_i ("região") para um elemento Δz adjacente no eixo "z". A aplicação dos fatores de forma pode ocorrer no modelo em três, duas ou uma dimensão. Por isso, nos possíveis elementos interiores em Δz a distribuição é uniforme entre todos estes elementos. Esta hipótese é razoável, pois com a

rotação da câmara a espera-se que a distribuição média dos fluxos de radiação entre os elementos seja parecida.

Pela regra de decaimento exponencial:

$$F_1^D(\text{parede}) = F^D(\text{parede}) \cdot \beta \quad (3.53)$$

$$F_2^D(\text{parede}) = F_1^D(\text{parede}) \cdot \beta = F^D(\text{parede}) \cdot \beta^2 \quad (3.54)$$

$$F_3^D(\text{parede}) = F_2^D(\text{parede}) \cdot \beta = F^D(\text{parede}) \cdot \beta^3 \quad (3.55)$$

$$F_a^D(\text{parede}) = F^D(\text{parede}) \cdot \beta^a \quad (3.56)$$

$$\sum F_i^D(\text{parede}) = F^D(\text{parede}) \quad (3.57)$$

$$F^D(\text{parede}) = F^D(\text{parede}) \cdot (\beta^1 + \beta^2 + \beta^3 + \dots + \beta^a) \quad (3.58)$$

$$(\beta^1 + \beta^2 + \beta^3 + \dots + \beta^a) = I \quad (3.59)$$

Calculando β com a fórmula da soma de uma progressão geométrica.

$$S = \frac{a' \cdot (r^n - 1)}{r - 1} \quad (3.60)$$

a' - Primeiro termo da série.

r - Razão.

n - Número de termos da série.

$$I = \frac{\beta \cdot (\beta^a - 1)}{\beta - 1} \quad (3.61)$$

$$\beta^{a+1} - 2\beta + 1 = 0 \quad (3.62)$$

Resolvendo o polinômio de ordem "a+1" obtém o valor de β .

$F_i^D(\text{parede})$ - Soma dos fatores de forma para o "i-ésimo" elemento adjacente à direita.

Para determinar os F_i dos elementos de volume pertencentes ao Δz , basta dividir $F_i^D(\text{parede})$ pelo número total de elementos de volume em Δz .

$$F_{i,\Delta x,\Delta y,\Delta z}^D(\text{parede}) = \frac{F_i^D(\text{parede})}{n^o \text{elementos}} \quad (3.63)$$

Sendo,

$F_{i,\Delta x,\Delta y,\Delta z}^D(\text{parede})$ - Fator de forma do elemento $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ na parede à direita de Δz .

Este procedimento é semelhante para o lado esquerdo da parede, e para ambos os lados na região gasosa.

- Parede interna

O cálculo para os fatores de forma na parede interna é semelhante ao realizado no leito sólido. A diferença é que nesta situação aparece um parâmetro a mais, a troca radiativa entre a própria parede. Assim, pode-se expressar os fatores de forma da parede interna da seguinte maneira:

$$F_i^D = \frac{a}{a+b} \quad (3.64)$$

$$F_i^E = \frac{b}{a+b} \quad (3.65)$$

Admitindo que as frações entre a parede e o leito sólido sejam proporcionais à suas área ocupadas em Δz .

$$\bar{F}_i^D (\text{gás}) = \alpha \cdot F_i^D \quad (3.66)$$

$$F_i^D (\text{parede}) = (1 - \alpha) \cdot \frac{A_p}{A_{ls} + A_p} \cdot F_i^D \quad (3.67)$$

$$F_i^D (\text{leito sólido}) = (1 - \alpha) \cdot \frac{A_{ls}}{A_{ls} + A_p} \cdot F_i^D \quad (3.68)$$

$$F_i^E (\text{gás}) = \alpha \cdot F_i^E \quad (3.69)$$

$$F_i^E (\text{parede}) = (1 - \alpha) \cdot \frac{A_p}{A_{ls} + A_p} \cdot F_i^E \quad (3.70)$$

$$F_i^E (\text{leito sólido}) = (1 - \alpha) \cdot \frac{A_{ls}}{A_{ls} + A_p} \cdot F_i^E \quad (3.71)$$

A_{ls} - Área superficial do leito sólido.

A_p - Área superficial da parede.

$$\beta^{a+1} - 2\beta + 1 = 0 \quad (3.72)$$

$$F_1^E(\text{parede}) = F^E(\text{parede}) \cdot \beta \quad (3.73)$$

$$F_2^E(\text{parede}) = F_1^E(\text{parede}) \cdot \beta = F^D(\text{parede}) \cdot \beta^2 \quad (3.74)$$

$$F_3^E(\text{parede}) = F_2^E(\text{parede}) \cdot \beta = F^D(\text{parede}) \cdot \beta^3 \quad (3.75)$$

$$F_a^E(\text{parede}) = F^E(\text{parede}) \cdot \beta^a \quad (3.76)$$

$$F_1^D(\text{parede}) = F^D(\text{parede}) \cdot \beta \quad (3.77)$$

$$F_2^D(\text{parede}) = F_1^D(\text{parede}) \cdot \beta = F^D(\text{parede}) \cdot \beta^2 \quad (3.78)$$

$$F_3^D(\text{parede}) = F_2^D(\text{parede}) \cdot \beta = F^D(\text{parede}) \cdot \beta^3 \quad (3.79)$$

$$F_a^D(\text{parede}) = F^D(\text{parede}) \cdot \beta^a \quad (3.80)$$

$$F_i^D_{\Delta x, \Delta y, \Delta z}(\text{parede}) = \frac{F_i^D(\text{parede})}{n^o \text{elementos}} \quad (3.81)$$

Realizar os cálculos para $F_i^D(\text{gás})$, $F_i^E(\text{gás})$, $F_i^D(\text{sólido})$, $F_i^E(\text{sólido})$, com a mesma metodologia apresentada nas equações (3.73) a (3.81), a fim de obter os mesmos.

- Região gasosa.

A região gasosa emite radiação para a parede interna e o sólido. A frase anterior parece ambígua com uma afirmação anterior concluindo que a emissão na região gasosa pode ser negligenciada. Porém, a região gasosa com chama é tratada como translusente. De acordo com McCabe, Smith e Harriott (1985), tais superfícies emitem radiação. O delineamento da região da chama dá-se nos elementos de volumes onde houver queima do combustível auxiliar.

A modelagem segue o mesmo padrão que do leito sólido e parede interna.

$$F_i^D = \frac{a}{a+b} \quad (3.82)$$

$$F_i^E = \frac{b}{a+b} \quad (3.83)$$

$$F_i^D(\text{parede}) = \frac{A_p}{A_{ls} + A_p} \cdot F_i^D \quad (3.84)$$

$$F_i^D(\text{leito sólido}) = \frac{A_{ls}}{A_{ls} + A_p} \cdot F_i^D \quad (3.85)$$

$$F_i^E(\text{parede}) = \frac{A_p}{A_{ls} + A_p} \cdot F_i^E \quad (3.86)$$

$$F_i^E(\text{leito sólido}) = \frac{A_{ls}}{A_{ls} + A_p} \cdot F_i^E \quad (3.87)$$

$$F_1^E(\text{parede}) = F^E(\text{parede}) \cdot \beta \quad (3.88)$$

$$F_2^E(\text{parede}) = F_1^E(\text{parede}) \cdot \beta = F^D(\text{parede}) \cdot \beta^2 \quad (3.89)$$

$$F_3^E(\text{parede}) = F_2^E(\text{parede}) \cdot \beta = F^D(\text{parede}) \cdot \beta^3 \quad (3.90)$$

$$F_a^E(\text{parede}) = F^E(\text{parede}) \cdot \beta^a \quad (3.91)$$

$$F_1^D(\text{parede}) = F^D(\text{parede}) \cdot \beta \quad (3.92)$$

$$F_2^D(\text{parede}) = F_1^D(\text{parede}) \cdot \beta = F^D(\text{parede}) \cdot \beta^2 \quad (3.93)$$

$$F_3^D(\text{parede}) = F_2^D(\text{parede}) \cdot \beta = F^D(\text{parede}) \cdot \beta^3 \quad (3.94)$$

$$F_a^D(\text{parede}) = F^D(\text{parede}) \cdot \beta^a \quad (3.95)$$

$$F_i^D_{\Delta x, \Delta y, \Delta z}(\text{parede}) = \frac{F_i^D(\text{parede})}{n^o \text{elementos}} \quad (3.96)$$

Os cálculos para $F_i^D(\text{parede})$, $F_i^E(\text{parede})$, $F_i^D(\text{sólido})$, $F_i^E(\text{sólido})$ são análogos aos apresentados.

As Figuras 3.9 e 3.10 mostram esquema de um elemento de volume emitindo radiação para as demais superfícies.

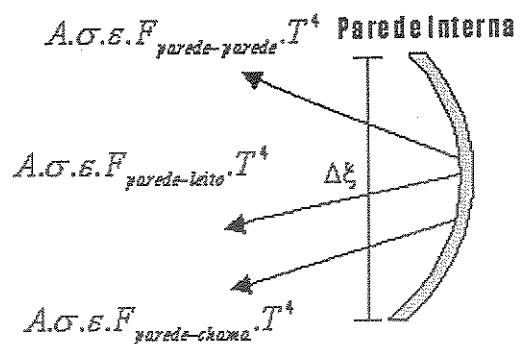


Figura 3.9 - Elemento de volume da parede interna emitindo radiação.

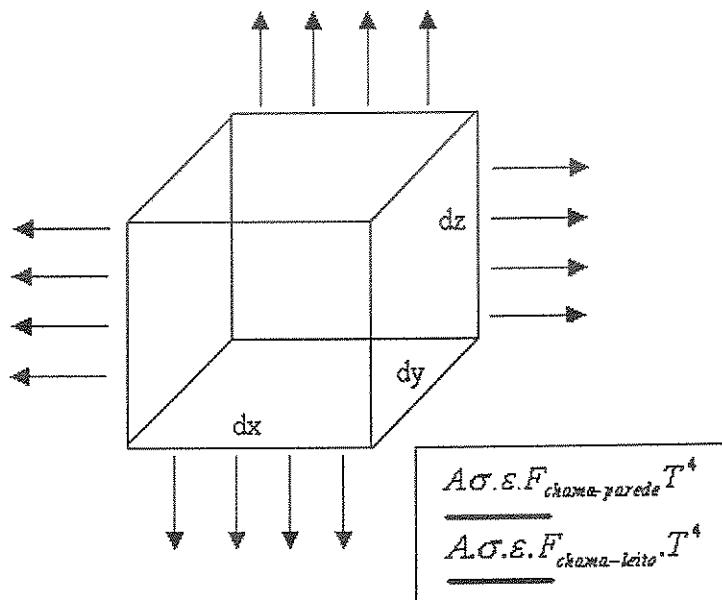


Figura 3.10 - Elemento de volume da chama emitindo radiação.

3.5 Discretização do modelo

3.5.1 Introdução

Após a determinação das equações que representam o processo, faz-se necessário sua solução. Conforme será apresentado, o modelo é formado por um conjunto de equações

diferenciais parciais. A configuração destas não permite uma solução analítica. Neste caso, um procedimento numérico deve ser adotado. A solução proposta é resolver o modelo por meio dos métodos das diferenças finitas. Entretanto, antes de tudo é preciso transformar um modelo contínuo em discreto. A seguir será apresentado o modelo discretizado, de acordo com os métodos das diferenças finitas.

3.5.2 Aplicando diferenças finitas ao modelo matemático

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f - f^0}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (3.97)$$

f – Variável dependente.

f^0 – Variável dependente no tempo inicial.

$O(\Delta t)$ – Erro de truncamento.

t – Tempo.

x – Variável independente.

Caso o modelo seja representado por:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \alpha \cdot \frac{\partial f}{\partial x} \quad (3.98)$$

A forma discreta é:

$$\frac{f_i^\theta - f_i^0}{\Delta t} = \alpha \cdot \frac{f_{i+1}^\theta - f_i^\theta}{\Delta x} \quad (3.99)$$

i – Ponto da malha discretizada.

θ – Posição no tempo.

A Figura 3.11 mostra a forma discreta para o modelo da equação (3.98).

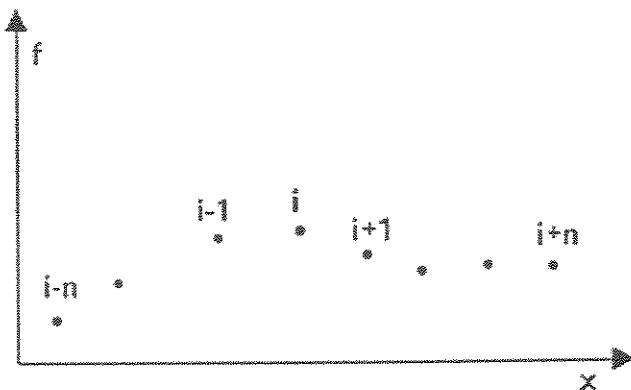


Figura 3.11 - Malha unidimensional discretizada em x no instante t.

Dois enfoques são possíveis quanto à solução da equação discreta: explícita e implícita. Quando o procedimento explícito for adotado θ é zero, e um procedimento iterativo é aplicado.

$$f_i^{\theta+1} = \alpha \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (f_{i+1}^\theta - f_i^\theta) + f_i^\theta \quad (3.100)$$

Assim, a cada Δt um novo perfil de f é obtido ao longo do eixo “x”. Porém, conforme Maliska (1990), os valores de Dx e Dt não podem ser aleatórios e devem obedecer a critérios preestabelecidos, como o critério de estabilidade de Von Neumann, que é apresentado nesta mesma referência.

A formulação implícita pondera a variável dependente entre o período de tempo Δt .

$$f_i^{\theta+1} = \theta \cdot f_i^{\theta+1} + (1-\theta) \cdot f_i^\theta \quad (3.101)$$

Portanto, o mesmo modelo da equação (3.100), com formulação implícita, tem estrutura diferente e pode ser observado na equação abaixo.

$$f_i^{\theta+1} = \alpha \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (\theta \cdot f_{i+1}^{\theta+1} + (1-\theta) \cdot f_{i+1}^\theta - \theta \cdot f_i^{\theta+1} - (1-\theta) \cdot f_i^\theta) + f_i^\theta \quad (3.102)$$

Separando os termos com valor definido daquele que serão calculados em cada um dos lados da equação.

$$(1+r\theta) \cdot f_i^{\theta+1} - r\theta \cdot f_{i+1}^{\theta+1} = r \cdot f_{i+1}^\theta - r\theta \cdot f_{i+1}^\theta - r \cdot f_i^\theta + r\theta \cdot f_i^\theta + f_i^\theta \quad (3.103)$$

Logo, com todos os pontos da malha tem-se um conjunto de equações lineares ou não lineares, o qual depende do tipo de equação diferencial contínua. Caso tenha-se um conjunto de equações lineares, a solução é bastante simples do ponto de vista de algoritmo numérico.

As Figuras 3.12 e 3.13 apresentam um esquema de malha discretizada em duas e três dimensões para coordenadas cilíndricas.

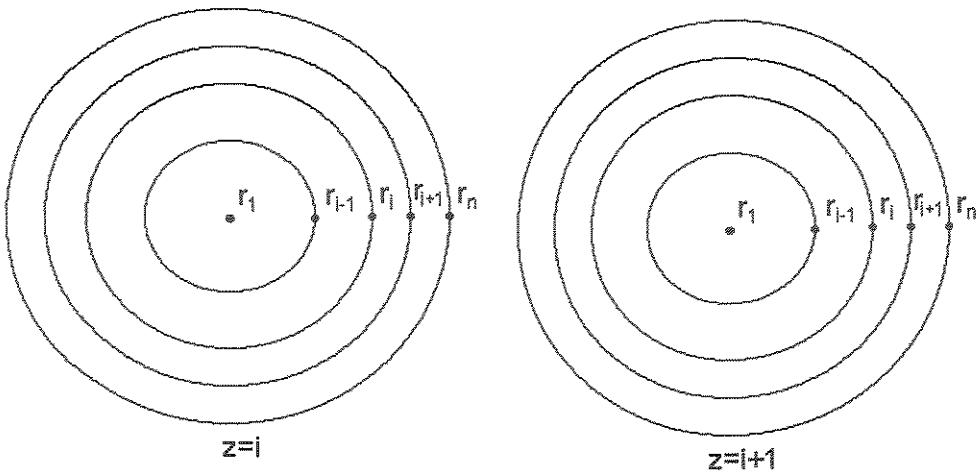


Figura 3.12 - Malha discretizada em duas dimensões para coordenadas cilíndricas.

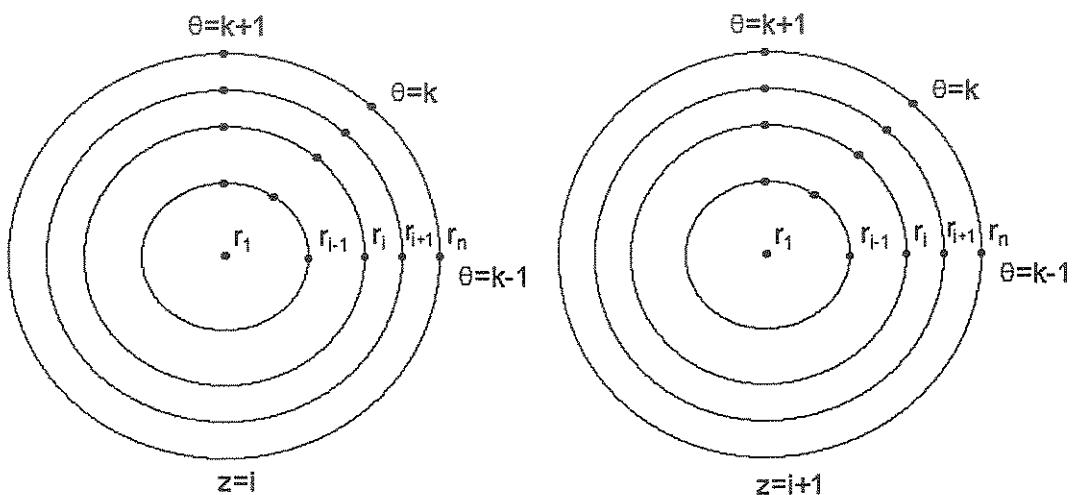


Figura 3.13 – Malha discretizada em três dimensões para coordenadas cilíndricas.

3.5.3 Balanço de energia na região gasosa

A partir da equação geral em três dimensões para a região gasosa, os modelos discretos serão desenvolvidos.

$$\rho.C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \rho.C_p.u_r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + \rho.C_p \cdot \frac{u_\theta}{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial \theta} + \rho.C_p.u_z \cdot \frac{\partial T}{\partial z} = \phi + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r.k \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(k \cdot \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.104)$$

Uma vez que nesta região o termo convectivo é muito mais importante que o condutivo a equação reduz-se a:

$$\rho.C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \rho.C_p.u_r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + \rho.C_p \cdot \frac{u_\theta}{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial \theta} + \rho.C_p.u_z \cdot \frac{\partial T}{\partial z} = \phi \quad (3.105)$$

A fim de facilitar a representação do modelo, os termos são divididos por $\rho.c_p$.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -(u_r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial \theta} + u_z \cdot \frac{\partial T}{\partial z}) + \frac{\phi}{\rho.C_p} \quad (3.106)$$

Muitas são as alternativas para discretizar a equação (3.106), diferenças centrais, avançada e atrasada. O procedimento que será adotado neste capítulo será o de diferenças finitas atrasadas para as derivadas parciais de primeira. Com isto a equação (3.106) discretizada apresenta-se da seguinte forma:

$$\frac{T_{i,j,k}^{\theta+1} - T_{i,j,k}^\theta}{\Delta t} = - \left(u_{i,j,k}^z \cdot \frac{T_{i+1,j,k}^\theta - T_{i,j,k}^\theta}{\Delta z} + u_{i,j,k}^r \cdot \frac{T_{i,j+1,k}^\theta - T_{i,j,k}^\theta}{\Delta r} + u_{i,j,k}^\theta \cdot \frac{T_{i,j,k+1}^\theta - T_{i,j,k}^\theta}{\Delta \theta} \right) + \frac{\phi_{i,j,k}}{\rho_{i,j,k}^{\text{gás}} \cdot C_P_{i,j,k}^{\text{gás}}} \quad (3.107)$$

Sendo,

i,j,k – Coordenadas z,r,θ.

θ – Instante no tempo.

$u_{i,j,k}^{eixo}$ - Valor da velocidade no ponto i,j,k na direção do eixo determinado.

$\rho_{i,j,k}^{gás}$ - Valor da massa específica na região gasosa no ponto i,j,k.

$Cp_{i,j,k}^{gás}$ - Valor da capacidade calorífica na região gasosa no ponto i,j,k.

$\phi_{i,j,k}$ - Calor gerado ou consumido no elemento de volume centrado no ponto i,j,k.

A forma como “i” e “i+1” estão apresentados na equação acima não é importante. O fundamental, para diferenças atrasadas, é fazer como que o fluxo seja representado no sentido real, para evitar as múltiplas soluções de uma onda de choque, conforme explicado no capítulo 2.

A Figura 3.14 mostra geometricamente o que representa cada uma destas coordenadas.

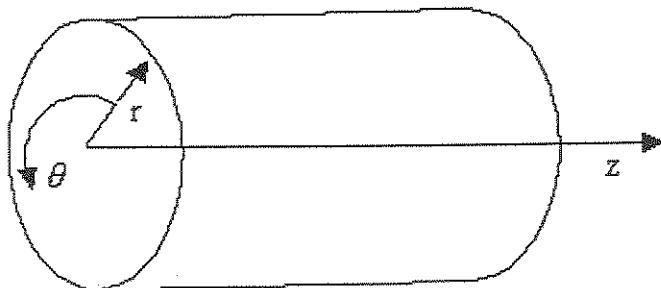


Figura 3.14 - Coordenadas cilíndricas em três dimensões.

O modelo discreto em duas e uma dimensões é similar ao desenvolvido acima, diferindo apenas quanto ao número de dimensões. As equações (3.108) e (3.109) representam tal modelo em duas e uma dimensões respectivamente. Também neste caso usou-se diferença atrasada.

$$\frac{T_{i,j}^{\theta+1} - T_{i,j}^{\theta}}{\Delta t} = - \left(u_{i,j}^z \cdot \frac{T_{i+1,j}^{\theta} - T_{i,j}^{\theta}}{\Delta z} + u_{i,j}^r \cdot \frac{T_{i,j+1}^{\theta} - T_{i,j}^{\theta}}{\Delta r} \right) + \frac{\phi_{i,j}}{\rho_{i,j}^{gás} \cdot Cp_{i,j}^{gás}} \Big|^\theta \quad (3.108)$$

$$\frac{T_i^{\theta+1} - T_i^{\theta}}{\Delta t} = - \left(u_i^z \cdot \frac{T_{i+1}^{\theta} - T_i^{\theta}}{\Delta z} \right) + \frac{\phi_i}{\rho_i^{gás} \cdot Cp_i^{gás}} \Big|^\theta \quad (3.109)$$

A forma de resolução de cada uma das formulações encontra-se com mais detalhes em Maliska (1990).

3.5.4 Balanço de energia no refratário

A partir da equação diferencial contínua obtém-se o modelo discretizado.

$$\rho_{refr} \cdot C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot k_{refr} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(k_{refr} \cdot \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_{refr} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.110)$$

Sabendo que não há fluxo convectivo em meios sólidos, todos os termos com campo de velocidade são nulos e a equação (3.110) é representada apenas pelos termos transiente e condutivo.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k_{refr}}{\rho \cdot C_p} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} \right) \quad (3.111)$$

Discretizando com diferenças atrasadas para três dimensões,

$$\frac{T_{i,j,k}^{\theta+1} - T_{i,j,k}^{\theta}}{\Delta t} = \frac{k_{i,j,k}^{refr}}{\rho_{i,j,k}^{refr} \cdot Cp_{i,j,k}^{refr}} \cdot \left(\frac{T_{i,j,k}^{\theta} - 2T_{i+1,j,k}^{\theta} + T_{i+2,j,k}^{\theta}}{\Delta z^2} + \frac{T_{i,j,k}^{\theta} - 2T_{i,j+1,k}^{\theta} + T_{i,j+2,k}^{\theta}}{\Delta r^2} \right) + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{T_{i,j,k}^{\theta} - 2T_{i,j,k+1}^{\theta} + T_{i,j,k+2}^{\theta}}{\Delta \theta^2} \quad (3.112)$$

Em duas e uma dimensões,

$$\frac{T_{i,j}^{\theta+1} - T_{i,j}^{\theta}}{\Delta t} = \frac{k_{i,j}^{refr}}{\rho_{i,j}^{refr} \cdot Cp_{i,j}^{refr}} \cdot \left(\frac{T_{i,j}^{\theta} - 2T_{i+1,j}^{\theta} + T_{i+2,j}^{\theta}}{\Delta z^2} + \frac{T_{i,j}^{\theta} - 2T_{i,j+1}^{\theta} + T_{i,j+2}^{\theta}}{\Delta r^2} \right) \quad (3.113)$$

$$\frac{T_i^{\theta+1} - T_i^{\theta}}{\Delta t} = \frac{k_i^{refr}}{\rho_i^{refr} \cdot Cp_i^{refr}} \cdot \left(\frac{T_i^{\theta} - 2T_{i+1}^{\theta} + T_{i+2}^{\theta}}{\Delta z^2} \right) \quad (3.114)$$

3.5.5 Balanço de energia no leito sólido

O modelo para o leito sólido não necessita estar em coordenadas cilíndricas, uma vez que apenas pontos na superfície e um ponto interno podem ser considerados. Sabe-se que a superfície é constantemente renovada em função da volatilização, por isso são importantes pontos que representem a superfície do leito. O fato de aproximar o restante do leito com um único ponto, em teoria, não traz prejuízos à modelagem. A própria rotação do equipamento faz com que a carga sólida seja homogeneizada. Esta abordagem é consistente com os modelos matemáticos desenvolvidos para o leito sólido por Barr e Boateng (1996b). Para representar um elemento com o mesmo volume uma das dimensões precisa ser ajustada.

$$V_{curvilíneo} = V_{retangular} \quad (3.115)$$

O modelo em três dimensões para o leito sólido representado em coordenadas retangulares é semelhante ao do refratário.

$$\rho_{sol} \cdot C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_{sol} \cdot C_p \cdot u_z \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + \rho_{sol} \cdot C_p \cdot u_x \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + \rho_{sol} \cdot C_p \cdot u_y \cdot \frac{\partial T}{\partial y} = \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(z \cdot k_{sol} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(k_{sol} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_{sol} \cdot \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (3.116)$$

A dinâmica da carga sólida é bastante lenta quando comparada com a dos gases, portanto é natural considerar fluxo convectivo apenas na direção “z”. Nas duas outras há predominância da condução. Nesta mesma linha de raciocínio é possível, para efeitos computacionais, considerar que o termo condutivo é razoavelmente menor que o convectivo no eixo “z”.

A equação (3.116) fica reduzida a:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_z \cdot \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{k_{sol}}{\rho_{sol} \cdot C_p}_{sol} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (3.117)$$

A Figura 3.15 apresenta a discretização para o leito sólido em três dimensões.

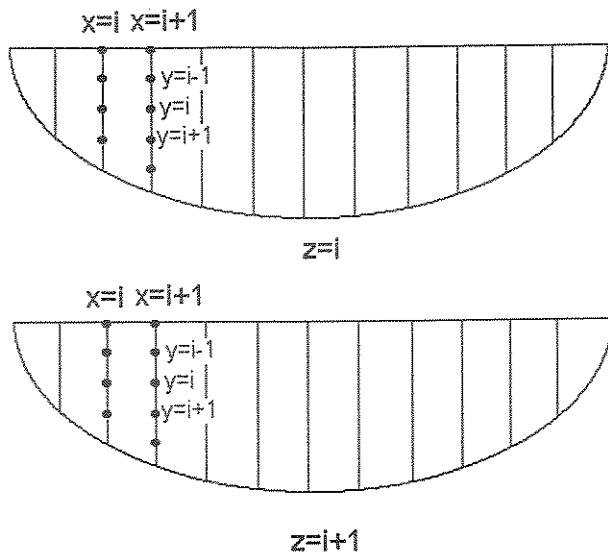


Figura 3.15 - Leito sólido discretizado em três dimensões.

O modelo discretizado em três dimensões é representado por:

$$\frac{T_{i,j,k}^{\theta+1} - T_{i,j,k}^{\theta}}{\Delta t} + u_{i,j,k}^z \cdot \frac{T_{i+1,j,k}^{\theta} - T_{i,j,k}^{\theta}}{\Delta z} = \frac{k_{i,j,k}^{sol}}{\rho_{i,j,k}^{sol} \cdot Cp_{i,j,k}^{sol}} \cdot \left(\frac{T_{i,j,k}^{\theta} - 2 \cdot T_{i+1,j,k}^{\theta} + T_{i+2,j,k}^{\theta}}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j,k}^{\theta} - 2 \cdot T_{i,j+1,k}^{\theta} + T_{i,j+2,k}^{\theta}}{\Delta y^2} \right) \quad (3.118)$$

Em duas e uma dimensões,

$$\frac{T_{i,j}^{\theta} - T_{i,j}^0}{\Delta t} + u_{i,j}^z \cdot \frac{T_{i+1,j}^{\theta} - T_{i,j}^{\theta}}{\Delta z} = \frac{k_{i,j}^{sol}}{\rho_{i,j}^{sol} \cdot Cp_{i,j}^{sol}} \cdot \left(\frac{T_{i,j}^{\theta} - 2 \cdot T_{i+1,j}^{\theta} + T_{i+2,j}^{\theta}}{\Delta x^2} \right) \quad (3.119)$$

$$\frac{T_i^{\theta} - T_i^0}{\Delta t} + u_i^z \cdot \frac{T_{i+1}^{\theta} - T_i^{\theta}}{\Delta z} = 0 \quad (3.120)$$

3.5.6 Balanço de massa por componente

A equação abaixo modela o comportamento dinâmico de cada componente na região gasosa.

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} + u_r \cdot \frac{\partial C_j}{\partial r} + C_j \cdot \frac{\partial u_r}{\partial x} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial C_j}{\partial \theta} + C_j \cdot \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_z \cdot \frac{\partial C_j}{\partial z} + C_j \cdot \frac{\partial u_z}{\partial z} = R_j + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot D \cdot \frac{\partial C_j}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(D \cdot \frac{\partial C_j}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \cdot \frac{\partial C_j}{\partial z} \right) \quad (3.121)$$

Entretanto, algumas simplificações são possíveis. A primeira delas é dispensar os termos de condução, visto que o escoamento é predominantemente convectivo.

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} + u_r \cdot \frac{\partial C_j}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial C_j}{\partial \theta} + u_z \cdot \frac{\partial C_j}{\partial z} = R_j \quad (3.122)$$

Na forma discreta para três dimensões,

$$\begin{aligned} & \frac{C(j)_{i,j,k}^{\theta+1} - C(j)_{i,j,k}^\theta}{\Delta t} + u_{i,j,k}^r \cdot \frac{C(j)_{i,j+1,k}^\theta - C(j)_{i,j,k}^\theta}{\Delta r} + \frac{u_{i,j,k}^\theta}{r} \frac{C(j)_{i,j,k+1}^\theta - C(j)_{i,j,k}^\theta}{\Delta \theta} \\ & + u_{i,j,k}^z \cdot \frac{C(j)_{i+1,j,k}^\theta - C(j)_{i,j,k}^\theta}{\Delta z} = R(j)_{i,j,k}^\theta \end{aligned} \quad (3.123)$$

Em duas e uma dimensões,

$$\frac{C(j)_{i,j}^{\theta+1} - C(j)_{i,j}^\theta}{\Delta t} + u_{i,j}^r \cdot \frac{C(j)_{i,j+1}^\theta - C(j)_{i,j}^\theta}{\Delta r} + u_{i,j}^z \cdot \frac{C(j)_{i+1,j}^\theta - C(j)_{i,j}^\theta}{\Delta z} = R(j)_{i,j}^\theta \quad (3.124)$$

$$\frac{C(j)_i^{\theta+1} - C(j)_i^\theta}{\Delta t} + u_i^z \cdot \frac{C(j)_{i+1}^\theta - C(j)_i^\theta}{\Delta z} = R^\theta(j)_i \quad (3.125)$$

3.5.7 Balanço da quantidade de movimento

Para o balanço de quantidade de movimento, também é razoável admitir que a influência dos termos condutivos sejam bem menores que os convectivos. A equação (3.126) é a forma do modelo, na direção “z”, considerando todos os termos, enquanto a equação (3.127) tem as simplificações propostas. Uma vez que as forças externas não aparecem, ou no caso da força gravitacional, têm muito pouco influência em nível molecular estes termos também são nulos.

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \cdot \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \cdot \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \cdot \frac{\partial u_z}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right) + F_z + \mu \cdot \frac{\partial^2 u_z}{\partial r^2} + \frac{\mu}{r} \cdot \frac{\partial u_z}{\partial r} \\ &+ \frac{\mu}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 u_z}{\partial \theta^2} + \mu \cdot \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \end{aligned} \quad (3.126)$$

$$\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \cdot \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \cdot \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \cdot \frac{\partial u_z}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right) \quad (3.127)$$

O modelo discreto da equação (3.127) é dado por:

$$\begin{aligned} \frac{u(z)_{i,j,k}^{\theta+1} - u(z)_{i,j,k}^\theta}{\Delta t} &= -u(r)_{i,j,k}^\theta \cdot \frac{u(z)_{i,j+1,k}^\theta - u(z)_{i,j,k}^\theta}{\Delta r} - \frac{u(\theta)_{i,j,k}^\theta}{r} \cdot \frac{u(z)_{i,j,k+1}^\theta - u(z)_{i,j,k}^\theta}{\Delta \theta} \\ &- u(z)_{i,j,k}^\theta \cdot \frac{u(z)_{i+1,j,k}^\theta - u(z)_{i,j,k}^\theta}{\Delta z} - \frac{1}{\rho_{i,j,k}} \left(\frac{P_{i+1,j,k}^\theta - P_{i,j,k}^\theta}{\Delta z} \right) \end{aligned} \quad (3.128)$$

Em uma e duas dimensões,

$$\frac{u(z)_{i,j}^{\theta+1} - u(z)_{i,j}^\theta}{\Delta t} = \\ -u(r)_{i,j}^\theta \cdot \frac{u(z)_{i,j+1}^\theta - u(z)_{i,j}^\theta}{\Delta r} - u(z)_{i,j}^\theta \cdot \frac{u(z)_{i+1,j}^\theta - u(z)_{i,j}^\theta}{\Delta z} - \frac{1}{\rho_{i,j}} \left(\frac{P_{i+1,j}^\theta - P_{i,j}^\theta}{\Delta z} \right) \quad (3.129)$$

$$\frac{u(z)_i^{\theta+1} - u(z)_i^\theta}{\Delta t} = -u(z)_i^\theta \cdot \frac{u(z)_{i+1}^\theta - u(z)_i^\theta}{\Delta z} - \frac{1}{\rho_i} \left(\frac{P_{i+1}^\theta - P_i^\theta}{\Delta z} \right) \quad (3.130)$$

Modelo discreto em três dimensões para os eixos “r” e “θ”,

$$\frac{u(r)_{i,j,k}^{\theta+1} - u(r)_{i,j,k}^\theta}{\Delta t} = -u(r)_{i,j,k}^\theta \cdot \frac{u(r)_{i,j+1,k}^\theta - u(r)_{i,j,k}^\theta}{\Delta r} - \frac{u(\theta)_{i,j,k}^\theta}{r} \cdot \frac{u(r)_{i,j,k+1}^\theta - u(r)_{i,j,k}^\theta}{\Delta \theta} \\ -u(z)_{i,j,k}^\theta \cdot \frac{u(r)_{i+1,j,k}^\theta - u(r)_{i,j,k}^\theta}{\Delta z} - \frac{1}{\rho_{i,j,k}} \left(\frac{P_{i,j+1,k}^\theta - P_{i,j,k}^\theta}{\Delta r} \right) \quad (3.131)$$

$$\frac{u(\theta)_{i,j,k}^{\theta+1} - u(\theta)_{i,j,k}^\theta}{\Delta t} = -u(r)_{i,j,k}^\theta \cdot \frac{u(\theta)_{i,j+1,k}^\theta - u(\theta)_{i,j,k}^\theta}{\Delta r} - \frac{u(\theta)_{i,j,k}^\theta}{r} \cdot \frac{u(\theta)_{i,j,k+1}^\theta - u(\theta)_{i,j,k}^\theta}{\Delta \theta} \\ -u(z)_{i,j,k}^\theta \cdot \frac{u(\theta)_{i+1,j,k}^\theta - u(\theta)_{i,j,k}^\theta}{\Delta z} - \frac{1}{\rho_{i,j,k}} \left(\frac{P_{i,j,k+1}^\theta - P_{i,j,k}^\theta}{\Delta \theta} \right) \quad (3.132)$$

Modelo discreto em duas dimensões para o eixo “r”,

$$\frac{u(r)_{i,j}^{\theta+1} - u(r)_{i,j}^\theta}{\Delta t} = \\ -u(z)_{i,j}^\theta \cdot \frac{u(r)_{i,j+1}^\theta - u(r)_{i,j}^\theta}{\Delta z} - u(r)_{i,j}^\theta \cdot \frac{u(r)_{i,j+1}^\theta - u(r)_{i,j}^\theta}{\Delta r} - \frac{1}{\rho_{i,j}} \left(\frac{P_{i,j+1}^\theta - P_{i,j}^\theta}{\Delta r} \right) \quad (3.133)$$

3.5.8 Condições de contorno

As equações apresentadas acima representam regiões no equipamento que não estão na fronteira. Entretanto, fornos rotativos têm interfaces entre as superfícies, gás-leito, gás-parede e parede-ambiente.

Para efeitos de modelagem numérica, os pontos internos da região gasosa na fronteira com o leito e o sólido serão modelados de acordo com as mesmas equações apresentadas acima. Tais superfícies absorvem e emitem radiação térmica e realizam a troca calor condutivo e convectivo com a região gasosa. Em ambas as superfícies, apenas o fluxo unidimensional de troca de calor é considerado. As superfícies do leito sólido e as camadas interna e externa do refratário fazem a união física das regiões modeladas, e formam o equipamento na sua totalidade.

Portanto, as regiões de fronteira entre o sólido com o gás, sólido com refratário, o refratário com o gás e o meio externo são respectivamente representadas por:

$$h_{gas} \cdot \frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx} \left(k_{sol} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (3.134)$$

$$k_{sol} \frac{d^2 T}{dr^2} = k_{refr} \frac{d^2 T}{dr^2} \quad (3.135)$$

$$h_{gas} \cdot \frac{dT}{dr} = k_{refr} \frac{d^2 T}{dr^2} \quad (3.136)$$

$$h_{amb} \cdot \frac{dT}{dr} = k_{refr} \frac{d^2 T}{dr^2} \quad (3.137)$$

As equações discretizadas ficam:

$$h_i^{gas} \cdot \frac{T_{j(gás)}^\theta - T_i^\theta}{\Delta x} = k_i^{sol} \frac{T_i^\theta - 2.T_{i+1}^\theta + T_{i+2}^\theta}{\Delta x^2} \quad (3.138)$$

$$k_i^{sol} \frac{T_{j=2}^\theta - 2.T_{j-1}^\theta + T_j^\theta}{\Delta x^2} = k_i^{refr} \frac{T_i^\theta - 2.T_{i+1}^\theta + T_{i+2}^\theta}{\Delta r^2} \quad (3.139)$$

$$h_i^{gas} \cdot \frac{T_{j(gás)}^\theta - T_i^\theta}{\Delta x} = k_i^{refr} \frac{T_i^\theta - 2.T_{i+1}^\theta + T_{i+2}^\theta}{\Delta r^2} \quad (3.140)$$

$$h_i^{amb} \cdot \frac{T_{j(gás)}^\theta - T_i^\theta}{\Delta x} = k_i^{refr} \frac{T_i^\theta - 2.T_{i+1}^\theta + T_{i+2}^\theta}{\Delta r^2} \quad (3.141)$$

As Figuras 3.16 a 3.18 mostram as interfaces das regiões, exemplificando os fluxos nas malhas discretizadas.

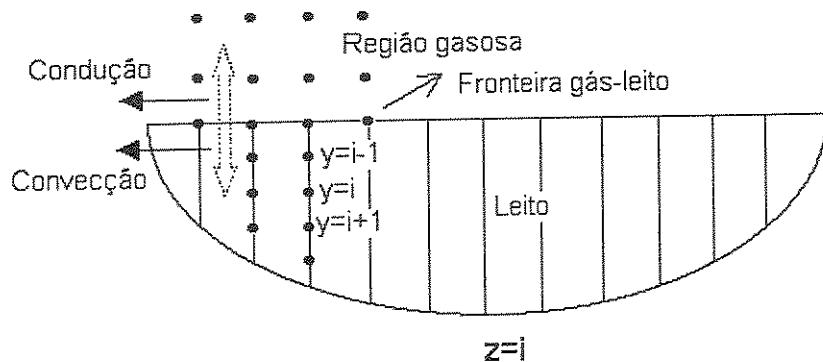


Figura 3.16 - Interface leito sólido e região gasosa.

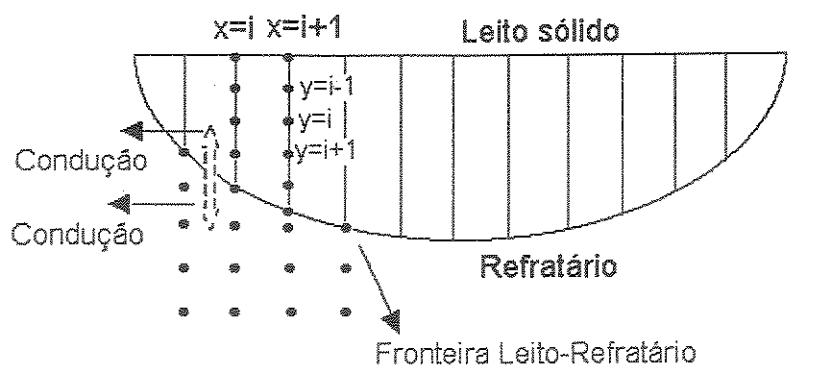


Figura 3.17 - Interface leito sólido e refratário.

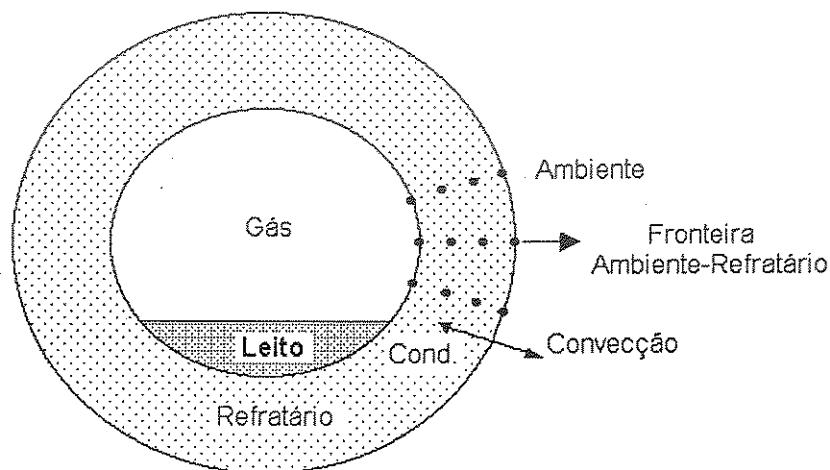


Figura 3.18 - Interface refratário e ambiente.

Com as equações discretas para algumas regiões de fronteira, o modelo está completo. Recapitulando sobre o desenvolvimento do modelo, nota-se falta das condições de contorno para as velocidades e os balanços de massa. No primeiro caso, apenas as velocidades de alimentação de ar e combustível são conhecidas. Quando ao balanço de massa também não há uma equação a ser discretizada, visto que propõe-se distribuição uniforme nos elementos de volumes, ao longo do eixo axial, da fração volatilizada de orgânicos mais evaporação da umidade.

3.5.9 Comentários finais

Para a modelagem matemática aplicada a este trabalho foram usadas as equações em duas dimensões para as diferentes regiões descritas anteriormente. Ratificando que os campos de velocidade são considerados constantes.

O modelamento por meio de equações diferenciais ordinárias deu-se em razão da proposta desta Tese. Por tratar-se de uma aplicação em tempo real, o processamento numérico do modelo matemático que representa o processo precisa ser rápido e robusto. Estes tipos de equações são as mais indicadas para este caso, uma vez que a integração numérica é mais bem mais robusta que a solução de um sistema algébrico de equações não lineares. A afirmação acima é válida especialmente para a obtenção do estado estacionário, resultante da integração a partir de um estado inicial geral até atingir-se o regime permanente. Além disso, o modelo dinâmico é expresso com equações diferenciais ordinárias, que são necessárias para o estudo das estratégias de controle.

3.6 Modelagem Matemática do Planejamento da Produção

A modelagem da produção de um forno rotativo para incineração leva em conta três aspectos: meta produtiva, restrições ambientais e restrições operacionais.

Para a meta produtiva é natural que se vise a maximização da capacidade instalada na planta. Ainda que uma unidade de incineração tenha outros equipamentos e unidades como: lavadores de gases, filtros, estações de tratamento de água etc., o mais importante é o processo de queima. Este item foca o planejamento, a otimização da produção e restrições do incinerador.

Para tal, alguns ponto precisam ser revisados antes de maximizar a produção. Não basta simplesmente aumentar a vazão de alimentação do resíduo. Consequências gravíssimas podem decorrer de ações inadvertidas. A super alimentação pode gerar dois problemas: combustão incompleta e excesso de temperatura no incinerador. Resíduos sólidos com baixos poderes caloríficos, se alimentados em excesso, não geram a carga

térmica necessária para a temperatura mínima de operação. O contrário, super alimentação de um resíduo com poder calorífico alto, pode aumentar a temperatura a ponto causar danos à estrutura do forno. Estes parâmetros são fornecidos pelo fabricante do equipamento, que em testes preliminares ajustou a operação às condições construtivas do equipamento.

A temperatura mínima de incineração, o tempo de residência mínimo e a eficiência de destruição são estabelecidos por órgão ambientais. Estes órgãos reguladores baseiam-se em normas próprias, ou seguem uma NBR, aqui no Brasil. No estado de São Paulo a CETESB (Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental) baseia-se na NBR-11175 e em resoluções próprias apresentadas em tabelas abaixo.

Tabela 3.1 - Restrições ambientais típicas impostas pelas CETESB para concessão da licença de funcionamento em teste de queima.

| Componente | Limite emissão ou formulação |
|-------------------------|------------------------------|
| Cl (cloro) | 42,9 kg/h |
| S (enxofre) | 23,3 kg/h |
| N (nitrogênio) | 4,0 kg/h |
| Cinzas | 50,0 kg/h |
| F (flúor) | 2,0 kg/h |
| P (fósforo) | 1,5 kg/h |
| C (carbono) | Máximo de 25 % |
| H ₂ O (água) | Máximo de 30 % |

Tabela 3.2 - Restrições ambientais vigentes na NBR-11175.

| Componente | Limite de emissão |
|------------------------|----------------------|
| HCl (ácido clorídrico) | 1,8 kg/h |
| HF (ácido fluorídrico) | 5 mg/Nm ³ |

| | |
|---|---|
| CO (monóxido de carbono) | 100 ppm corrigido a 7% de O ₂ |
| SO _X (medido com SO ₂) | 280 mg/Nm ³ corrigido a 7% de O ₂ |
| NO _X (medido com NO ₂) | 560 mg/Nm ³ corrigido a 7% de O ₂ |
| Material Particulado | 70 mg/Nm ³ corrigido a 7% de O ₂ |
| Metais classe 1 | |
| Cd (cádmio) e seus compostos | 0,114 g/h |
| Hg (mercúrio) e seus compostos | 0,114 g/h |
| Tl (Tálio) e seus compostos | 0,114 g/h |
| Metais classe 2 | |
| As(arsênio), Co (cobalto), Ni (níquel), Se(selênio), Te (telúrio) e seus compostos | 0,25 g/h |
| Metais classe 3 | |
| Sb (antimônio), Pb (chumbo), Cr (cromo), Cn (cianetos), F(fluoretos), Cu (cobre), Mn (manganês), Pt (platina), Pd (paládio), V (vanádio), Sn (estanho), Rh (ródio) e seus compostos | 0,025 g/h |

Baseado nas Tabelas 3.1 e 3.2 dá-se a otimização do processo de incineração. A proposta é formular uma mistura (“blend”), a partir dos lotes disponíveis em estoque, que maximize a produtividade respeitando as restrições operacionais e ambientais. As restrições medidas na saída do chaminé não entram para a formulação do “blend”. Estes parâmetros são checados em linha com analisadores, ou eventualmente por amostragem.

3.6.1 Variáveis do processo

A fim de identificar as variáveis e seus significados, segue uma lista da descrição destas contendo suas unidades.

Tabela 3.3 - Identificação das variáveis usadas no modelo matemático.

| Variável | Descrição | Unidade |
|--------------------|---|-----------------|
| i | Identificação do lote | - |
| j | Identificação do componente | - |
| NL | Número de lotes | - |
| NC | Número de componentes | - |
| L _i | Limite inferior para x_i (fração mássica); | % |
| L _s | Limite superior para x_i (fração mássica); | % |
| C _{ij} | Fração mássica do componente “j” no lote “i” | % |
| M _i | Massa do lote “i” | kg |
| M _{min} | Menor quantidade de massa usada de um lote para a formulação do “blend” | kg |
| M _T | Massa do “blend” | kg |
| PCI _i | Poder calorífico inferior do lote “i” | kcal/kg |
| PCI _{med} | Poder calorífico inferior médio | C _{ij} |

| | | |
|------------|---|--------|
| Q_{\max} | Máxima carga térmica admitida na alimentação do forno | kcal/h |
| V_{rs} | Meta produtiva de incineração | kg/h |
| x_i | Massa do lote usada no “blend” | kg |

3.6.2 Parâmetros Operacionais

As informações abaixo são realistas, visto que foram obtidas em uma unidade real em larga escala. Porém, a empresa reserva-se ao direito em manter-se no anonimato por questões comerciais.

Tabela 3.4 - Quantificação das variáveis do processo.

| Variável | Valor |
|----------------------|--------------------|
| NL | - |
| NC | - |
| L_s | 1 |
| M_{\min} | 100 kg |
| M_T | 7.000 kg |
| Q_{\max} | Dado fabricante |
| V_{rs} | 800 – 1.100 kg/h |
| C_{ij}, M_i, PCI_i | Dependente do lote |

3.6.3 Modelo Matemático

Função Objetivo,

Maximizar,

$$f = PCI_{med} \cdot Vrs \quad (3.142)$$

Ou Minimizar,

$$f = -PCI_{med} \cdot Vrs \quad (3.143)$$

Como em alguns algoritmos a função objetivo precisa ser minimizada, o valor negativo na equação (3.143) indica que o objetivo mínimo é o mesmo que maximizar a equação (3.142). A variável “Vrs” para cada simulação precisa ser constante, senão o problema passa a ser não linear. A idéia é trabalhar com problemas lineares, já que a solução para um conjunto factível de restrições é garantida, e em tempo real. Caso a variável “Vrs” fosse considerada na função objetivo outro complicador apareceria, a questão da temperatura na câmara de combustão. No forno rotativo recomenda-se que a temperatura fique em 1000 °C. Com uma variação na vazão de alimentação do resíduo sólido, o impacto térmico no equipamento seria maior, e um modelo de combustão teria que ser considerado na otimização. As não linearidades decorrentes seriam tamanhas que muito provavelmente uma otimização em tempo real seria inviável.

Do ponto de vista operacional prático o planejador da produção, através de metas pré-estabelecidas pelos contratos comerciais, fixa um valor de “Vrs” que o equipamento aceite, e planeja a formulação do “blend”.

O poder calorífico médio pode ser representado pela equação (3.144);

$$PCI_{med} = \frac{\sum_{i=1}^{NL} x_i \cdot PCI_i}{Mt} \quad (3.144)$$

3.6.4 Restrições

De acordo com a máxima carga térmica no incinerador sugerida pelo fabricante, o “blend” é montado considerando o efeito da composição no poder calorífico médio para uma dada meta produtiva.

$$PCI_{med}.Vrs \leq Q_{\max} \quad (3.145)$$

A massa total do “blend” não deve passar uma determinada quantidade. Este valor é definido pela empresa e pondera a capacidade de transporte interna do “blend”, histórico do volume médio em estoque e quantidade para preencher um turno produtivo, ou boa parte deste.

$$\sum_{i=1}^{NL} x_{i\cdot} = M_T \quad (3.146)$$

A mínima quantidade do lote no “blend” é uma questão de praticidade operacional. Por isso defini-se um valor mínimo. Se o lote for menor que esta quantidade, este será usado inteiro na formação do “blend”.

$$x_{i\cdot} \geq M_{\min} \quad (3.147)$$

As restrições ambientais impostas pelas CETESB e NBR 11.175 estão nas Tabelas (3.1) e (3.2). Duas categorias de restrições existem: a restrição por quantidade alimentada em kg e por fração mássica na formulação do “blend”, independente do volume.

Caso 1: Limitação por vazão de alimentação no incinerador (kg comp. /h)

$$\frac{\sum_{i=1}^{NL} x_i \cdot C_{i,j}}{M_T} \cdot Vrs \leq Max(j) \quad \dots \quad j = 1, NC \quad (3.148)$$

Caso 2: Limitação por fração mássica no “blend” (H_2O e C)

$$\frac{\sum_{i=1}^{NL} x_i \cdot C_{i,H2O}}{M_T} \leq Max(H_2O) \quad (3.149)$$

$$\frac{\sum_{i=1}^{NL} x_i \cdot C_{i,C}}{M_T} \leq Max(C) \quad (3.150)$$

Para evitar longos tempos de estocagem de um dado lote, foi definido o limite inferior (L_i) obrigatório da fração mássica do lote presente no “blend” para um dado período de armazenagem.

$$Li \leq x_i \leq Mi \quad (3.151)$$

$$\begin{cases} 0-2 \text{ meses } Li = 0,00 \\ 2-6 \text{ meses } Li = 0,00 \\ 7-9 \text{ meses } Li = 0,20 \\ 9-11 \text{ meses } Li = 0,40 \\ 11-12 \text{ meses } Li = 0,50 \\ 1 \text{ ano ou mais } Li = 1,00 \end{cases} \quad (3.152)$$

Para lotes muito pequenos, ou seja, cuja massa seja menor que M_{min} , tem-se que:

$$\text{Se } Mi \leq M_{\min} \quad Li = 1,00 \quad (3.153)$$

Um aspecto importante, mas que não foi considerado nas restrições é a compatibilidade de produtos. A formulação acima não considera tal questão, mas esta é muito importante, já que pode ocorrer a formação de subprodutos tóxicos, corrosivos ou explosivos.

Uma vez que o forno incinerador opere em condições adequadas, e que seja construído com materiais próprios para operação, estes subprodutos na sua maioria também serão incinerados. A inserção de todas as restrições em um modelo de planejamento, sem dúvida, geraria um problema muito rígido, e muitas vezes de solução inexistente. O ideal é selecionar apenas os mais críticos e tratá-los separadamente. Este modelo de planejamento e otimização da produção não considera esta peculiaridade.

3.6.5 Problema de Programação Linear

O problema de otimização do planejamento da produção é formado por uma função objetivo linear, assim como suas restrições. Para que isto seja verdade, deve-se manter “Vrs” constante para cada problema de otimização. Caso contrário teria-se um a função objetivo não linear.

Seguem as equações que representam o modelo de planejamento de produção.

$$f = - \frac{\left(\sum_{i=1}^{NL} x_i \cdot PCI_i \right)}{Mt} \cdot Vrs \quad (3.154)$$

Sujeito a:

$$\frac{\left(\sum_{i=1}^{NL} x_i \cdot PCI_i \right)}{Mt} \cdot Vrs \leq Q_{\max} \quad (3.155)$$

$$\sum_{i=1}^{NL} x_i \cdot = M_T \quad (3.156)$$

$$\frac{\sum_{i=1}^{NL} x_i \cdot C_{i,j}}{M_T} \cdot Vrs \leq Max(j) \quad \dots \quad j = 1, NC \left(-H_2O \text{ e } C \right) \quad (3.157)$$

$$\frac{\sum_{i=1}^{NL} x_i \cdot C_{i,H2O}}{M_T} \leq Max(H_2O) \quad (3.158)$$

$$\frac{\sum_{i=1}^{NL} x_i \cdot C_{i,C}}{M_T} \leq Max(C) \quad (3.159)$$

$$Li \leq x_i \leq Mi \quad (3.160)$$

Este problema deve ser resolvido por um algoritmo de otimização de problemas lineares. Neste caso usou-se o método SIMPLEX.

3.7 Otimização

Este item é referente à otimização dos parâmetros operacionais do processo, e pertence à estrutura de integração descrita adiante. Embora o planejamento e controle da produção façam uso de técnicas de otimização, esta é linear. A otimização do processo é mais complexa, e por isso precisa de algoritmos mais robustos. No caso o problema é não linear e usa dois algoritmos, S.Q.P e os algoritmos genéticos, já discutidos neste trabalho.

O objetivo, assim com a formulação do problema, são bastante simples. A meta é operar com um mínimo consumo de combustível, contudo deve-se respeitar as restrições ambientais e operacionais do equipamento. Neste escopo definiu-se a temperatura de combustão na câmara como representante das restrições mencionadas acima. Esta hipótese faz sentido, já que o fabricante projeta seu equipamento para trabalhar em determinadas condições operacionais. Por sua vez as agências reguladoras do meio ambiente estipulam a temperatura de operação, que julgam apropriadas para a combustão completa dos resíduos sólidos, a fim de conceder a licença de operação da unidade.

A equação (3.161) representa o problema de otimização do forno rotativo para este trabalho.

$$f_{\minimo} = Fcb$$

sujeito a:

$$Li^2 \leq \left(\frac{\bar{T}_i}{N} - T_{media} \right)^2 \leq Ls^2 \quad (3.161)$$

Sendo,

Fcb – Vazão de combustível.

L_i e L_s – A faixa na qual a temperatura média na câmara pode variar.

N – Número de pontos de temperatura colhidos da câmara de combustão.

T_i – Temperaturas em “i” pontos internos da câmara de combustão

T_{media} – Temperatura média estabelecida de acordo com as restrições ambientais e operacionais.

Uma vez que as temperaturas são calculadas com modelos matemáticos, a otimização está respeitando os balanços de massa e energia. Tal característica é fundamental para a representatividade dos resultados quando aplicados ao processo. Portanto, a otimização obtém resultados que respeitam as características dos fenômenos que ocorrem no processo.

Os resultados da otimização, que serão apresentados no próximo capítulo, quando re-alimentados ao processo mostram, pelo fato dos resultados serem coerentes, a influência do que foi exposto no último parágrafo.

Os modelos matemáticos para representar o processo foram dois: um determinístico e uma rede neural treinada com o primeiro. A rede neural foi testada a fim de acelerar a otimização, assim como de testar os resultados da técnica na estrutura de integração. A Figura 3.19 mostra as possibilidades de otimização.

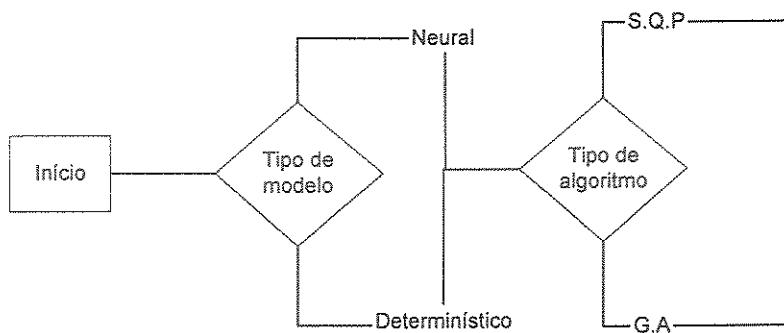


Figura 3.19 - Possibilidades na camada de otimização do processo.

Ainda que esteja disponível a combinação modelo determinístico com algoritmo genético, esta é inviável. O tempo de processamento é excessivamente longo para que esta solução seja adotada em uma integração de processos em tempo real. As demais, dependendo da janela de tempo disponível, são factíveis.

3.8 Controladores não Lineares

Os dois controladores não lineares usados neste trabalho apresentam estrutura adaptada dos controladores lineares. As diferenças serão explicadas a seguir.

O controlador denominado NMPC usa toda a estrutura do DMC, só que o modelo preditivo do processo é não linear. Este modelo é uma rede neural treinada a partir do modelo determinístico do processo, apresentado no capítulo 2. A rede neural Perceptron multicamadas, tipo retropropagação e com termo de momento, estima a dinâmica da

temperatura de saída dos gases de combustão em função das variáveis de entrada. Estas variáveis são: vazão de combustível, ar secundário, resíduo sólido e poder calorífico inferior deste. Este perfil dinâmico usa 10 instantes no tempo, separados por 0,5 segundo, totalizando 5 segundos de dinâmica. Para esta câmara de combustão este tempo é suficiente para que o processo chegue suficientemente próximo ao estado estacionário.

Outro ponto relevante é a estrutura formada para obtenção da lei de controle. Trata-se de um problema de otimização não linear cujo método adotado foi o S.Q.P. Apesar do número relativamente grande de entradas e saídas que a rede tem que representar, o modelo neural representou bem processo. Esta validação será mostrada no próximo capítulo.

A Figura 3.20 esquematiza como foi desenvolvido este controlador não linear.

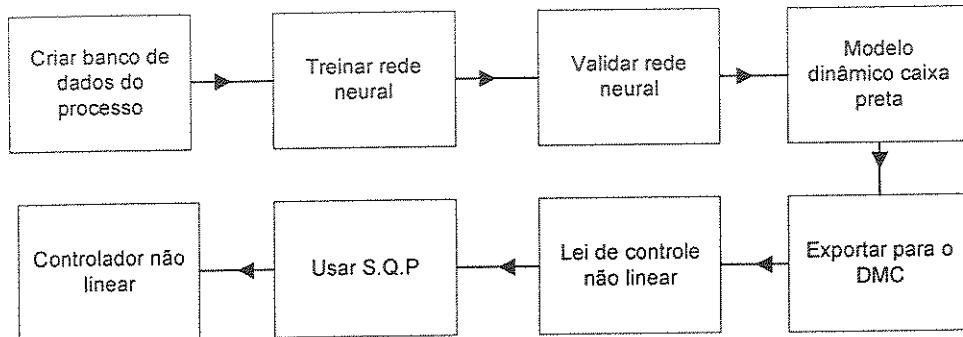


Figura 3.20 - Desenvolvimento do controlador não linear NMPC.

O controlador esquematizado acima usa a seguinte lei de controle:

$$J(N_1, N_2, N_u) = \sum_{j=N1}^{N2} \delta(j) \cdot (y(t+j) - w(t+j))^2 + \sum_{j=1}^{N_u} \lambda(j) \cdot (\Delta u(t+j-1))^2 \quad (3.162)$$

Sendo que os parâmetros N_1 , N_2 , N_u , w , y , λ e γ já foram introduzido no capítulo anterior, por isso dispensa-se a nomenclatura neste ponto.

O controlador não linear é conceitualmente simples, um algoritmo tipo S.Q.P encontra os valores de “ Δu ” que minimizem a equação (3.162). Os parâmetros são pré-

determinados e as estimativas do processo são calculadas pela equação (3.163), que é um modelo tipo caixa preta. Assim, as ações do controlador são determinadas.

Este modelo matemático tipo caixa preta, representado pela rede neural mencionada, tem por finalidade estimar os valores de “ g_i ” da equação (3.163) de acordo com os parâmetros operacionais referidos.

$$y(t) = y_0 + \sum_{i=1}^N g_i \cdot \Delta u(t - i) \quad (3.163)$$

O segundo controlador não linear, O NGPC (nonlinear GPC), assim como o NMPC importa a estrutura do GPC. Porém, usa um modelo não linear para representar a dinâmica do processo. Este controlador é essencialmente similar ao primeiro, a forma como o modelo não linear é predito difere. Baseado em parâmetros de entrada na câmara de combustão (vazão de combustível, ar secundário, resíduo sólido e poder calorífico inferior deste) o modelo estima o comportamento dinâmico da temperatura de saída dos gases.

Neste caso uma rede neural é usada para treinar os parâmetros (ganho, constante de tempo e tempo morto) do modelo de um GPC linear. Portanto, para cada condição de entrada, estes parâmetros são atualizados e o modelo passa a descrever as não linearidades do processo.

Em teoria há duas vantagens deste modelo não linear. Uma vez que precisa-se treinar apenas três parâmetros, menos que no caso anterior, é possível que a rede treine melhor e mais rápido o banco de dados. Além disso, a forma do modelo permite que se escolha arbitrariamente os espaços de tempo de amostragem das estimativas, fazendo desta metodologia mais versátil que a primeira.

A Figura 3.21 apresenta a estrutura de desenvolvimento deste controlador não linear.

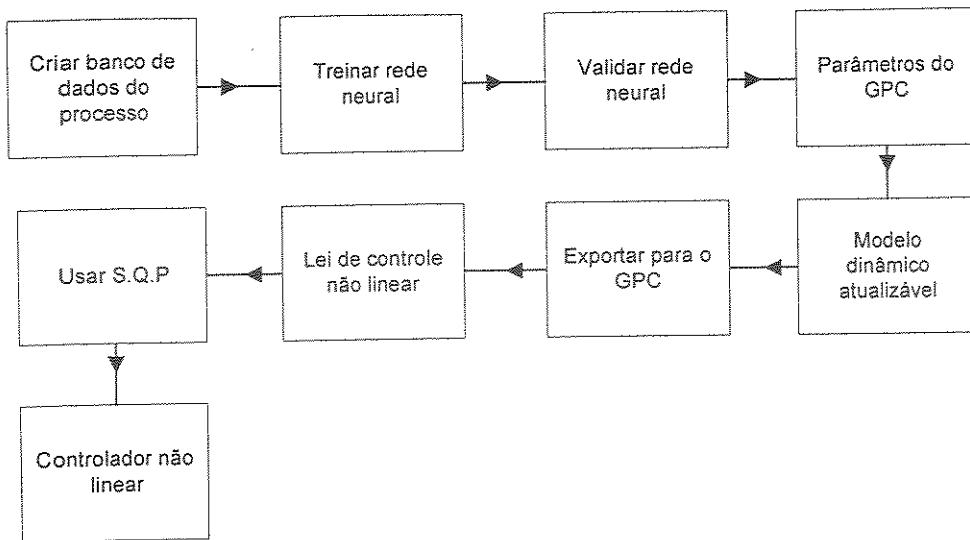


Figura 3.21 - Desenvolvimento do controlador não linear NGPC.

O controlador detalhado na Figura 3.21 tem uma lei de controle idêntica ao primeiro, entretanto o modelo preditor não linear do processo não usa modelo de convolução conforme exposto na equação (3.163). Trata-se de um modelo de primeira ordem com tempo morto, representado pela equação (3.164).

O modelo matemático tipo caixa preta, que usa outra rede neural, estima os valores de K , τ e τ_D para cada condição operacional.

$$y(t+1) = (1+a).y(t) - a.y(t-1) + b.\Delta u(t-d) + \varepsilon(t+1) \quad (3.164)$$

Onde,

$$a = e^{-\left(\frac{T}{\tau}\right)} \quad (3.165)$$

$$b = K.(1-a) \quad (3.166)$$

$$d = \frac{\tau_D}{T} \quad (3.167)$$

Os parâmetros T , $\varepsilon(t)$, de K , τ e τ_D foram definidos no Capítulo 2.

Assim como no controlador NMPC este tem um algoritmo S.Q.P que calcula as ações de controle “ Δu ” .

Detalhes acerca das equações dos dois controladores estão melhor detalhadas no capítulo anterior.

3.9 Estruturas propostas para Integração em Tempo Real

Para este estudo três propostas serão expostas a diante. Em cada uma destas os conceitos revisados, validados e testados individualmente terão aplicação integrada. O objetivo neste primeiro instante é montar a estrutura, no passo seguinte ter-se-ão as simulações.

Como o propósito é testar a metodologia, apenas um computador será usado para as simulações. Em função dos resultados, e principalmente da disponibilidade de protocolos de transferência de informações entre máquinas, pode-se adotar mais de um computador, mas não é a meta desta pesquisa. Enquanto uma máquina roda o processo, outras poderiam incumbir-se dos cálculos de otimização e controle avançado.

As estruturas desenvolvidas são de duas camadas, um otimizador trabalhando separadamente dos nível de controle, mas o planejamento da produção em camada separada.

No primeiro modelo tem-se controladores preditivos lineares monovariados e um PID controlando a vazão de combustível, em função da temperatura interna na câmara de combustão. A Segunda proposta é usar os controladores preditivos não lineares para as mesmas variações no processo. A vazão e as características do resíduo que compõem o lote são determinadas no planejamento e controle da produção. Esta parte da estrutura considera para a formulação do “blend” as metas produtivas, restrições operacionais e ambientais. A Figura 3.22 representa este primeiro modelo proposto de estrutura de integração.

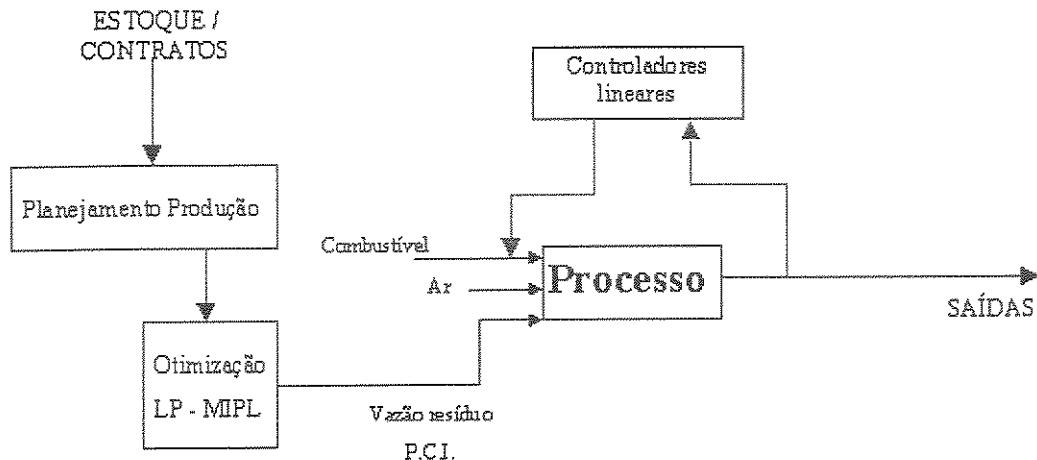


Figura 3.22 - Estrutura de integração com controladores lineares.

O segundo modelo é semelhante ao primeiro, porém introduz um sofisticado extra, controladores não lineares. Estes controladores manipulam a vazão de combustível em função da resposta da temperatura da câmara de combustão.

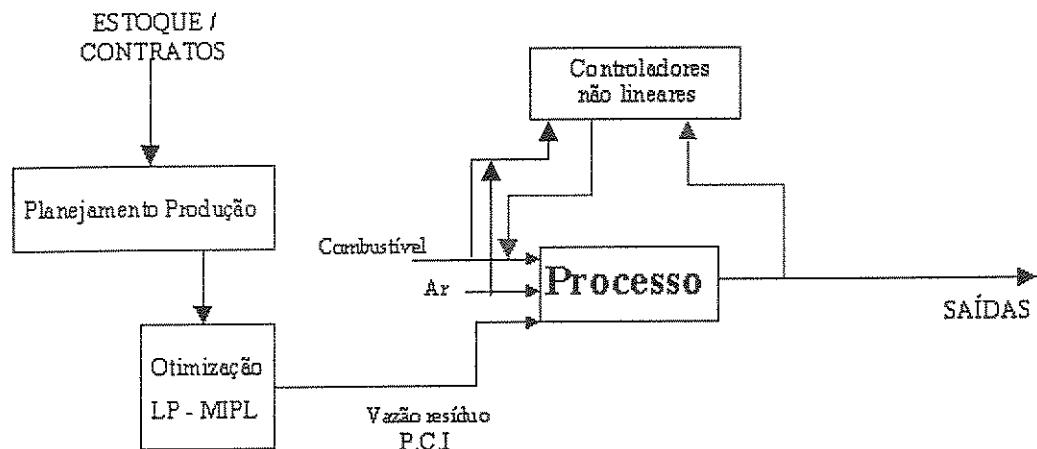


Figura 3.23 - Estrutura de integração com controladores não lineares.

O terceiro, e último, estudo de caso é diferente. Além do controlador preditivo há a adição de mais uma camada de otimização. A nova camada de otimização fornece para o

processo os parâmetros operacionais, vazões de ar e combustível que minimizem o consumo de combustível e respeitem condições ambientais e operacionais.

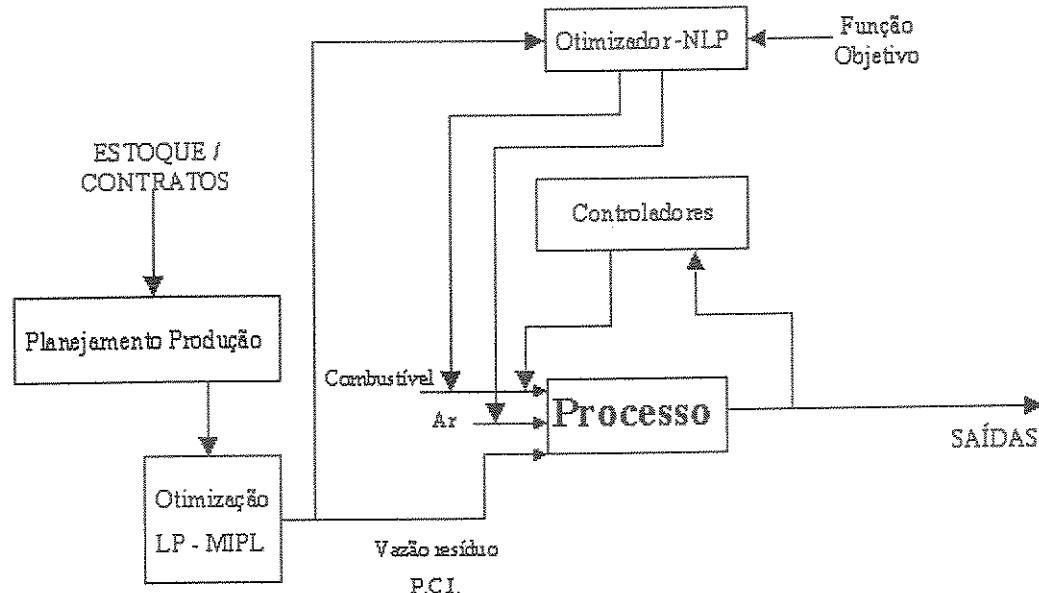


Figura 3.24 - Estrutura de integração em duas camadas.

A otimização da produção será realizada com o método SIMPLEX, já que o modelo é linear. Os controladores preditivos usarão os tradicionais DMC (dynamic matrix control) e GPC (generalized predictive control) lineares e duas versões não lineares, cuja predição da planta será feita por uma rede neural treinada com o modelo matemático do processo. A otimização do terceiro modelo terá dois estudos: o primeiro com o SQP (sequential quadratic programming) e outro usando um algoritmo genético.

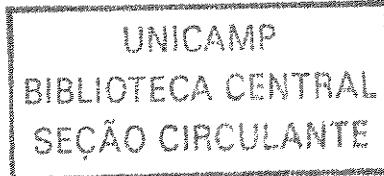
3.10 Conclusões

Os modelos matemáticos desenvolvidos permitem quantificar em detalhes os resultados obtidos nesta Tese. O processo de incineração de resíduos sólidos considera além dos balanços massa, energia e componentes, as reações químicas envolvidas no leito e na câmara.

Da mesma forma os problemas de otimização são formulados, e suas características linear (planejamento da produção) e não linear (processo) ficam bastante evidentes. Assim, fica mais prático relacionar e entender as estruturas matemáticas para cada problema de otimização com os algoritmos propostos para sua solução. Além disso, identifica-se a combinação problema de otimização com a janela de tempo para sua solução e as necessidades para a integração em tempo real.

Os controladores não lineares esquematizados nas Figuras 3.20 e 3.21 mostram a seqüência necessária para seu desenvolvimento e aplicação. Nesta, as etapas são relacionadas com os modelos matemáticos previamente apresentados no capítulo anterior. Os passos são claros e as equações usadas foram desenvolvidas até o ponto que engenheiros de processo e pesquisadores possam usá-las sem desenvolvimentos adicionais.

As modelagens matemáticas apresentadas estão prontas para serem usadas. Isto significa desenvolve-las em ambientes específicos para que gerarem resultados. Neste trabalho optou-se por desenvolver os módulos em linguagem de programação computacional (Fortran 95). Os resultados estão no próximo capítulo e os softwares desenvolvimentos citados e descritos no Apêndice C.



Capítulo 4:

Resultados e discussão

4.1 Introdução

Este capítulo é dedicado aos resultados da integração em tempo real do processo de incineração de resíduos sólidos. O primeiro passo é mostrar a sensibilidade dos principais parâmetros de controle (temperatura e oxigênio) em função dos parâmetros operacionais (vazões de ar, resíduo e combustível). Sendo este estudo conduzido em estado estacionário e transiente.

Segue-se para o planejamento da produção e validação das redes neurais artificiais, os quais são módulos que fornecem parâmetros operacionais, ou são partes integrantes das camadas de controle, otimização ou processo.

As camadas de controle e otimização são inicialmente estudadas individualmente. Por fim, as camadas são integradas a fim atestar sua estabilidade, robustez e viabilidade com a proposta inicial desta Tese, integração em tempo real.

4.2 Estudo de caso: Forno Rotativo para Incinerador de Resíduos Sólidos

Antes de apresentar os resultados seguem as características do mesmo. As três tabelas seguintes mostram as dimensões e parâmetros operacionais do equipamento (Tomaz, 1998), assim como as propriedades físico-químicas eventualmente envolvidas. As Tabelas 4.3 e 4.4 contém as análises elementares do resíduo sólido e combustível auxiliar, usadas como referência para as simulações.

Tabela 4.1 - Parâmetros operacionais de entrada e do equipamento.

| Parâmetro | Valor de referência | Unidade |
|-------------------------|---------------------|---------|
| Comprimento da câmara | 12,0 | m |
| Raio interno da câmara | 1,25 | m |
| Espessura do refratário | 0,15 | m |

| | | |
|---|------|------|
| Diâmetro duto alimentação ar primário | 4,0 | in |
| Diâmetro duto alimentação ar secundário | 10,0 | in |
| Vazão de alimentação do ar primário | 0,85 | kg/s |
| Vazão de alimentação do ar secundário | 2,65 | kg/s |
| Vazão de alimentação do combustível - propano | 0,06 | kg/s |
| Vazão de alimentação do resíduo sólido | 0,20 | kg/s |
| Temperatura de alimentação do ar primário | 300 | K |
| Temperatura de alimentação do ar secundário | 300 | K |
| Temperatura de alimentação do resíduo sólido | 300 | K |
| Tempo de residência | 1800 | s |
| Temperatura ambiente | 300 | K |

Tabela 4.2 - Propriedades físico-químicas.

| Parâmetro | Valor de referência | Unidade |
|--|---------------------|---------|
| Poder calorífico do combustível auxiliar | 2,045E+06 | kJ/kmol |

| | | |
|---|----------|-------------------|
| Poder calorífico do resíduo sólido | 1,50E+05 | kJ/kmol |
| Capacidade calorífica do resíduo sólido | 0,84 | kJ/kg.K |
| Capacidade calorífica do refratário | 3,0 | kJ/kg.K |
| Densidade do resíduo sólido | 1490,0 | kg/m ³ |
| Densidade do refratário | 4000,0 | kg/m ³ |
| Condutividade do resíduo sólido | 0,61E-03 | W/m.K |
| Condutividade do refratário | 1,2E-03 | W/m.K |

Tabela 4.3 - Propriedades do resíduo sólido.

| | |
|---|---------------------|
| Calor específico do sólido seco (j/kg/K) | 840,0 |
| Poder calorífico do inferior resíduo (j/kg) | 5,0x10 ⁶ |
| Densidade do sólido seco (kg/m ³) | 1490,0 |
| Composição elementar (base seca) | |
| Carbono (kg/kg) | 0,36 |
| Hidrogênio (kg/kg) | 0,12 |
| Enxofre (kg/kg) | 0,03 |
| Nitrogênio (kg/kg) | 0,03 |
| Fósforo (kg/kg) | 0,006 |
| Cloro (kg/kg) | 0,006 |
| Flúor (kg/kg) | 0,006 |
| Bromo (kg/kg) | 0,006 |
| Iodo (kg/kg) | 0,006 |

| | |
|------------------|------|
| Oxigênio (kg/kg) | 0,03 |
| Cinzas (kg/kg) | 0,40 |

Tabela 4.4 - Propriedades do combustível auxiliar.

| | |
|---|--------------------|
| Calor específico do sólido seco (j/kg/K) | 3000,00 |
| Poder calorífico do inferior resíduo (j/kg) | $4,18 \times 10^7$ |
| Composição elementar | |
| Carbono (kg/kg) | 0,872 |
| Hidrogênio (kg/kg) | 0,095 |
| Enxofre (kg/kg) | 0,028 |
| Nitrogênio (kg/kg) | 0,0005 |

Os resultados serão divididos em itens dentro deste capítulo, cada qual contendo informações relevantes para a compreensão dos respectivos resultados e discussão destes. Estes itens serão divididos na seguinte seqüência: estado estacionário, dinâmica do sistema, planejamento e controle da produção, validação das redes neurais, otimização, controle do processo, integração em tempo real e esforços computacionais.

As tabelas com os dados mostrados acima foram as mesmos de Tomas (1998) e Inglez de Souza (2000).

4.3 Estado estacionário

Com o objetivo de avaliar o modelo matemático apresentado no terceiro capítulo, uma série de simulações para o estado estacionário será mostrada. Desta maneira é possível obter uma sensibilidade dos parâmetros do processo e suas principais variáveis.

Este tipo de ferramenta possui três propósitos: treinamento, otimização de processo e validação de outras técnicas aplicadas ao processo. Neste trabalho a última aplicação é o propósito principal. A fim de implementar ferramentas de integração em tempo real algo que representasse o processo seria necessário. Testar estratégias de controle e otimização em uma planta real não é viável, tão pouco seria possível uma autorização para os testes.

Embora o modelo matemático não tenha sido validado em escala industrial, a complexidade das equações fundamentais desenvolvidas permitem uma real avaliação dos módulos de controle e otimização. No estado estacionário apenas a otimização faz uso de seus resultados, já que o controle do processo requer um modelo dinâmico.

Os resultados para o modelo em estado estacionário foram obtidos com o dinâmico, integrando numericamente no tempo até que a solução atingisse o regime permanente. Este recurso foi utilizado, já que resolver o conjunto de equações não lineares com métodos tradicionais (Newton, Levenberg-Marquardt e outros) é pouco robusto.

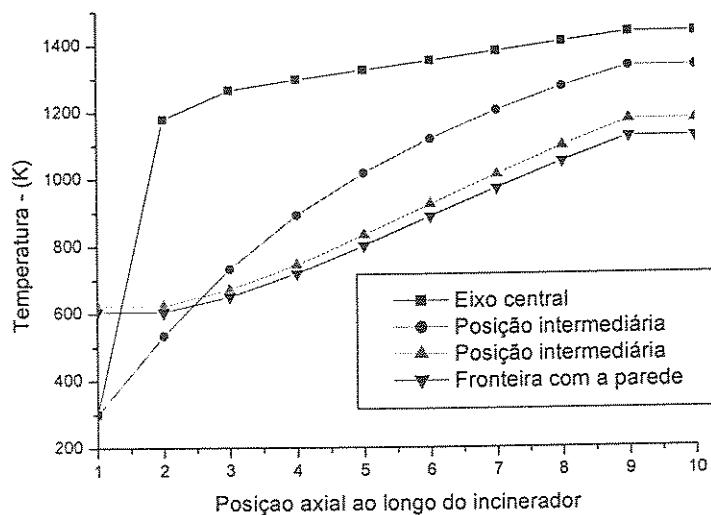


Figura 4.1 - Perfis de temperatura ao longo da câmara de combustão.

Observa-se no gráfico acima que a abscissa tem 10 posições para o cálculo de temperatura. Cada um destes pontos está espacado uniformemente ao longo da câmara de

combustão. Quando não houver nenhuma observação, trata-se de resultados obtidos com as condições de referência especificadas nas Tabelas 4.1 a 4.4.

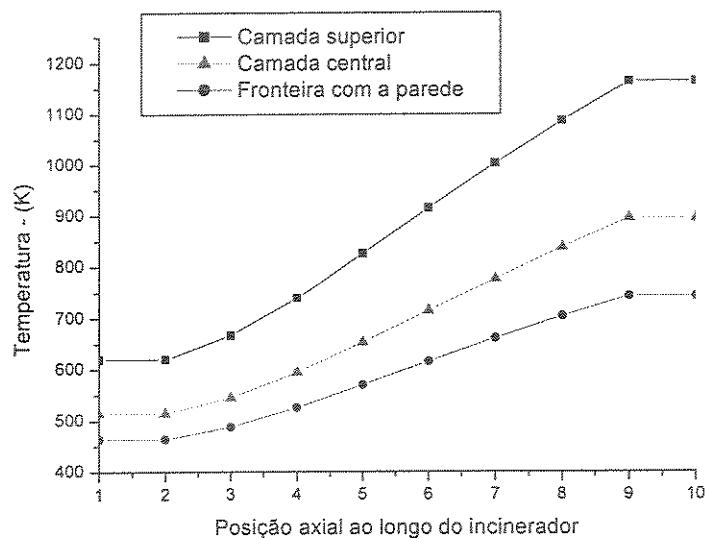


Figura 4.2 - Perfis de temperatura ao longo do leito sólido.

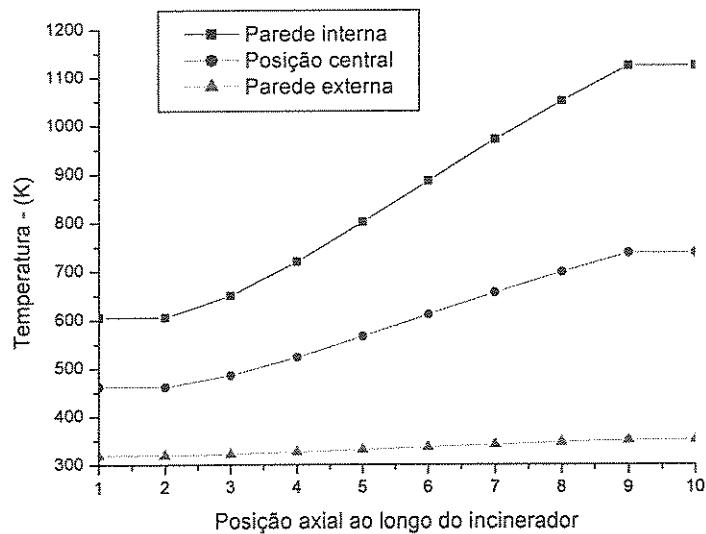


Figura 4.3 - Perfis de temperatura ao longo do refratário.

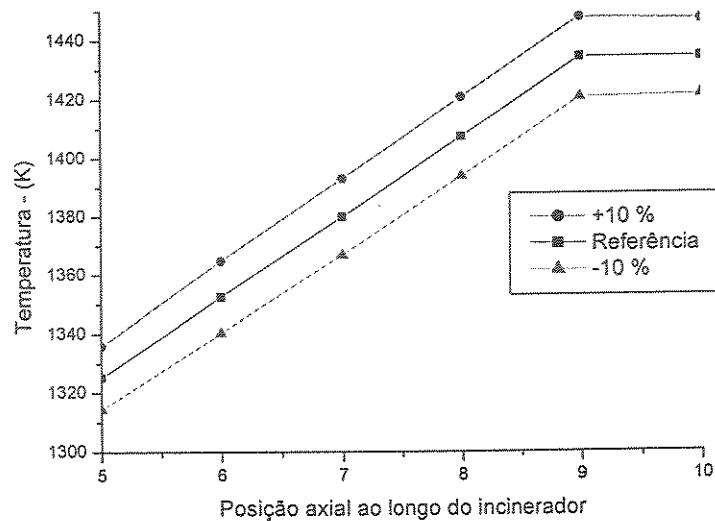


Figura 4.4 - Efeito da vazão de resíduo sólido no perfil de temperatura da câmara de combustão (posição central).

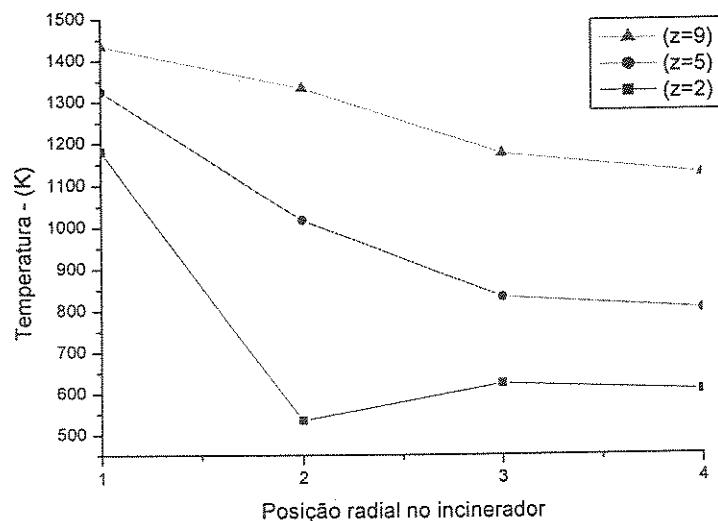


Figura 4.5 - Perfis radiais de temperatura.

Sendo, “z” as posições na câmara (total de 10).

No gráfico da Figura 4.1 dois perfis iniciam com temperaturas menores. Isto deve-se à alimentação, já que admite-se entrada de ar externo à temperatura ambiente. Nos demais perfis os efeitos térmicos são predominantes, pois trata-se de regiões internas da câmara de combustão.

Os perfis de temperatura no leito sólido e no refratário representam os fenômenos físicos presentes. Conforme aproxima-se do meio externo, as temperaturas decaem. Esta propriedade fica mais clara na Figura 4.3, que mostra as temperaturas da parede externa.

A Figura 4.5 com os perfis radiais de temperatura em três posições ao longo da câmara de combustão tem uma configuração parabólica. Como o modelo foi desenvolvido em coordenadas cilíndricas o ponto de maior temperatura é a região central. Para uma extrapolação destes pontos em valores negativos do eixo da abcissa, formaria-se uma imagem em espelho, dividida pelo eixo da ordenadas.

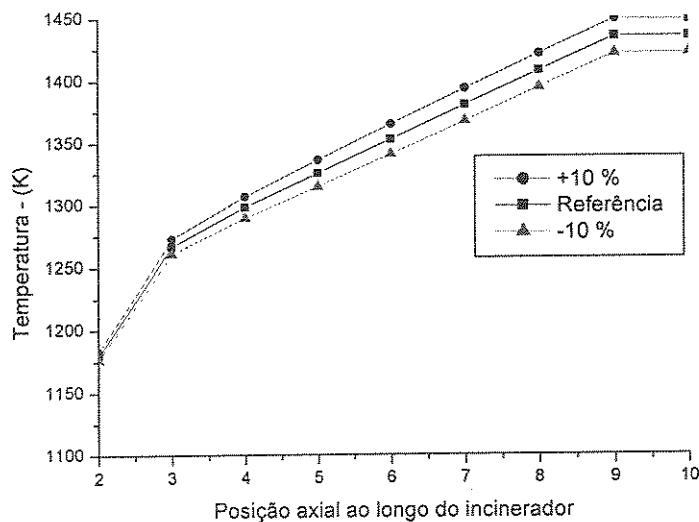


Figura 4.6 - Efeito do poder calorífico do resíduo sólido no perfil de temperatura da câmara de combustão (posição central).

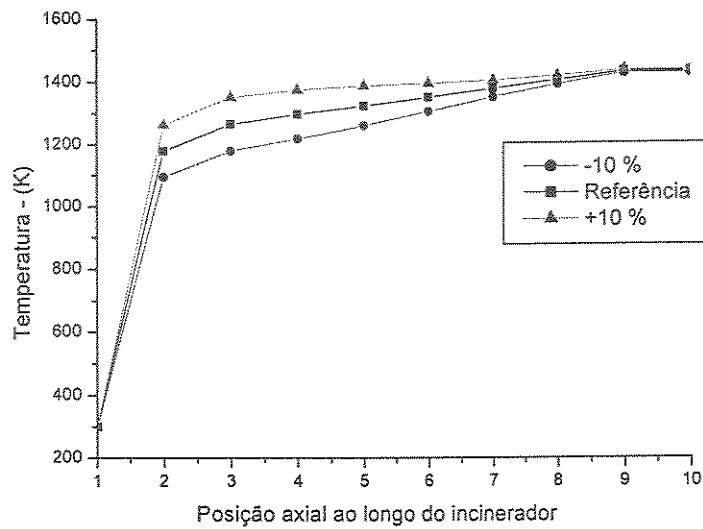


Figura 4.7 - Efeito da vazão de combustível no perfil de temperatura da câmara de combustão (posição central).

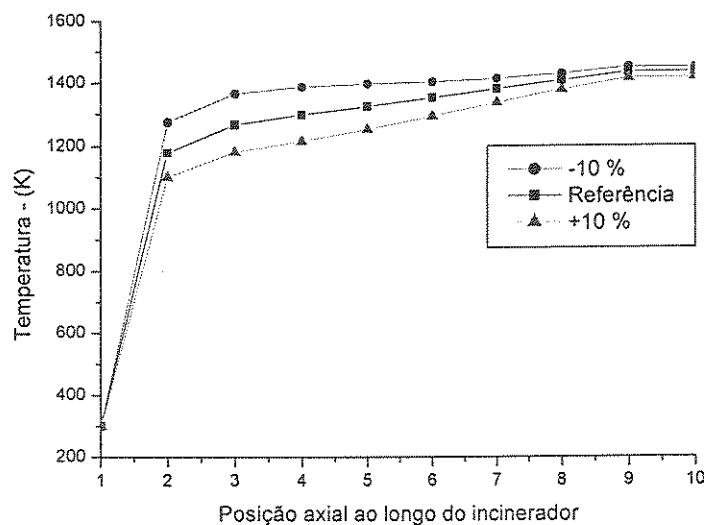


Figura 4.8 - Efeito da vazão de ar secundário no perfil de temperatura da câmara de combustão (posição central).

Os efeitos das principais variáveis envolvidas no processo estão bastante coerentes. Quanto maior a vazão de combustível auxiliar mais energia tem-se nesta corrente, e portanto, a temperatura tem que ser maior. O mesmo vale para a vazão de resíduo sólido, ou seu poder calorífico. O oposto das condições mencionadas reduz as temperaturas, já que menos energia está sendo alimenta ao sistema.

O ar de combustão comporta-se de maneira diferente, já que aumentar a vazão de ar, em condições ambientais, refrigeraria a câmara de combustão. Reduzir esta vazão tem naturalmente o efeito contrário.

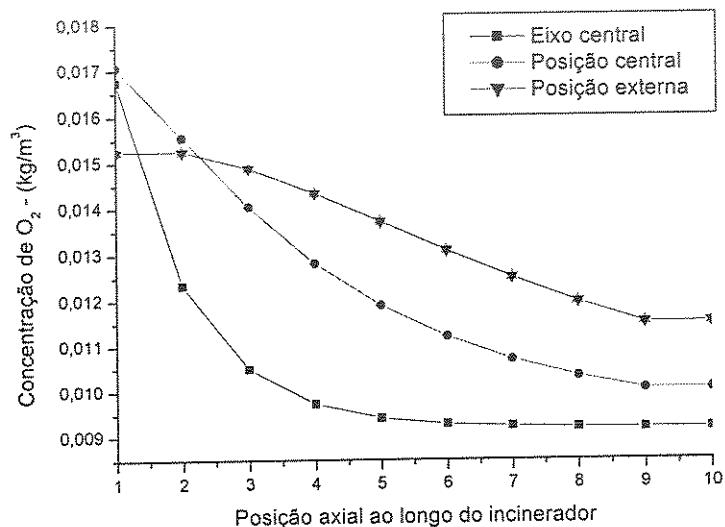


Figura 4.9 - Perfis de concentração de oxigênio ao longo da câmara de combustão.

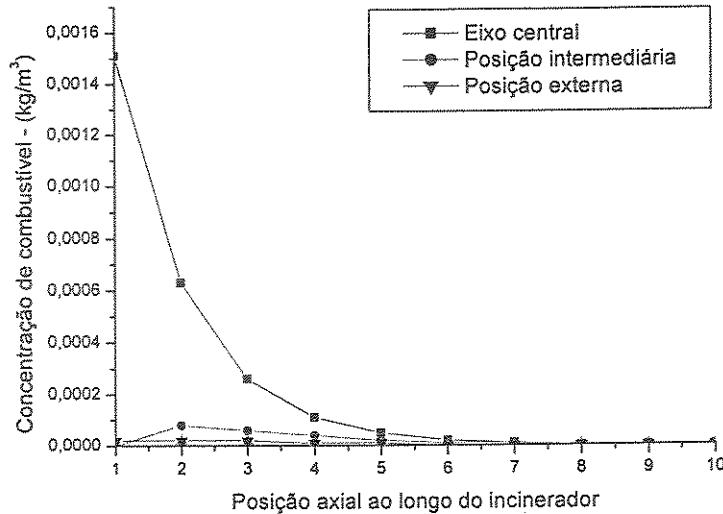


Figura 4.10 - Perfis de concentração de combustível ao longo da câmara de combustão.

As Figuras 4.9 e 4.10, revelam os fundamentos das características térmicas de um forno incinerador rotativo, as reações de combustão. Como há consumo de oxigênio e combustível, espera-se um decaimento ao longo do forno. De fato este comportamento pode ser observado. Porém, restrições operacionais e uma operação economicamente projetada devem ser respeitadas. O oxigênio ao final da câmara está em excesso, enquanto o combustível foi totalmente consumido. Isto mostra que as condições ambientais estão respeitadas, e que não há desperdício de combustível auxiliar.

Baseando-se nas Figuras 4.1 a 4.10, pode-se concluir que o modelo matemático representa os fenômenos naturais presentes neste tipo de processo. Portanto, tem-se uma ferramenta de base adequada para estudar aplicativos de controle de processo e otimização.

4.4 Dinâmica do sistema

Usando o mesmo modelo matemático do item anterior, mas com objetivos distintos, algumas simulações são apresentadas. Em todos os casos o modelo responde em malha aberta, a partir de um estado de equilíbrio, ou seja, sem ação de controladores.

Os efeitos dos principais parâmetros operacionais são avaliados. O comportamento dinâmico da temperatura de saída dos gases de combustão é graficada para as principais variáveis, sendo estas: vazões de combustível, ar e resíduo sólido, e o poder calorífico do resíduo.

Além das perturbações degrau, muito comuns em processos químicos, observou-se o efeito para perturbações tipo pulso, e rampa. Com este conjunto de simulações acredita-se ter mapeado a maior parte das situações reais de uma planta em escala industrial. Situações de partida e parada da planta não fazem parte deste estudo, mesmo porque o intertravamento e lógicas específicas do sistema é que comandam as ações nestas situações.

A importância do modelo dinâmico para este trabalho é crítica, uma vez que sem este o estudo das estratégias de controle é quase impossível.

O ideal é que os módulos do processo e controle rodem em máquinas distintas, ou pelo menos que sejam processados em paralelo. Assim, é possível examinar com um pouco mais de realismo a qualidade dos controladores no processo em questão. Esta não é uma tarefa fácil, já que exige protocolos de comunicação, e estes não estão no escopo desta Tese. Porém, a maneira como o software foi desenvolvido permite adaptar-se à condição sugerida sem maiores dificuldades. Os controladores, o otimizador, o equipamento e o planejamento forma desenvolvidos e compilados em bibliotecas distintas (dll – dynamic link library). Nestes moldes basta construir um software que gerencie as execuções dos módulos em computadores diferentes, mas ligados por uma rede.

Neste trabalho um programa principal, em uma mesma máquina, controla e gerencia os módulos mencionados acima.

Os gráficos a seguir mostram o comportamento da temperatura de saída dos gases de combustão. Quando não especificadas, as perturbações são do tipo degrau.

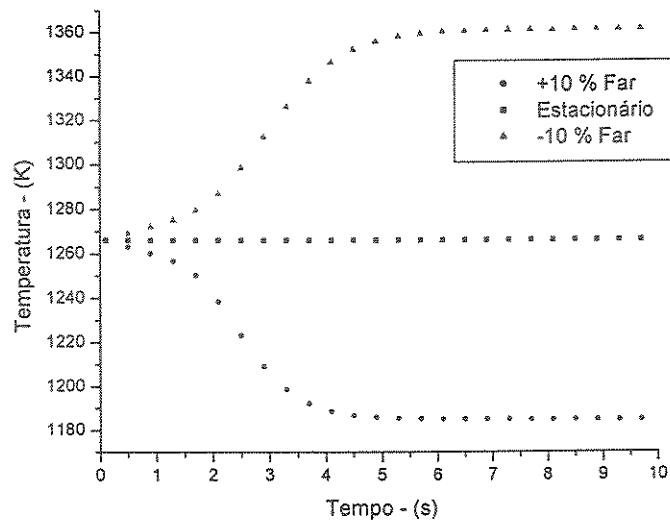


Figura 4.11 - Efeito da vazão de ar secundário na dinâmica da temperatura

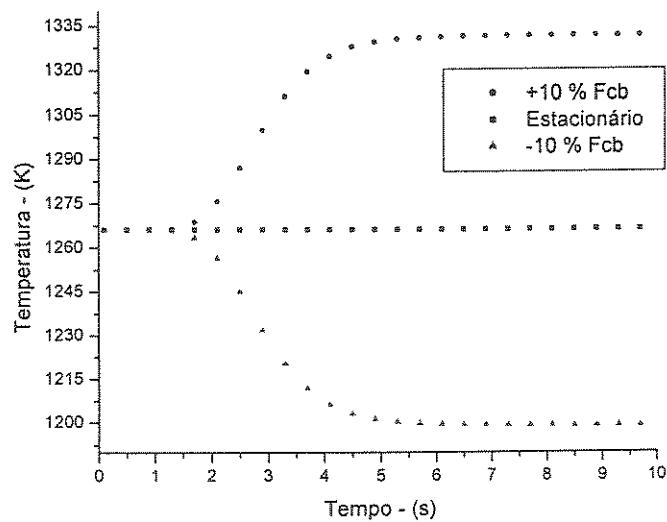


Figura 4.12 - Efeito da vazão de combustível na dinâmica da temperatura

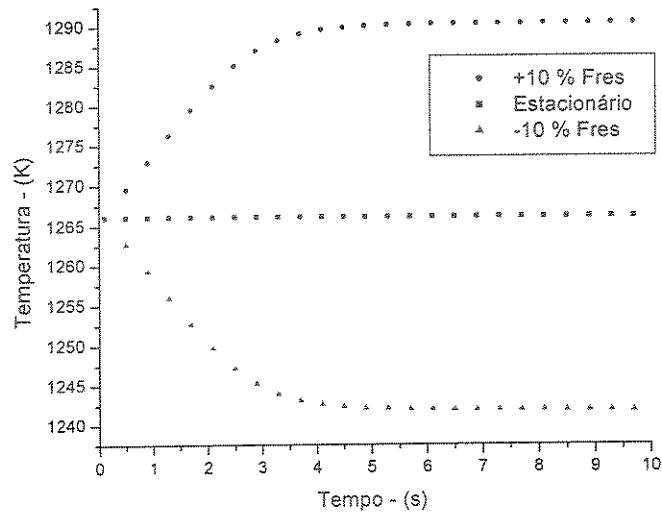


Figura 4.13 - Efeito da vazão do resíduo sólido na dinâmica da temperatura

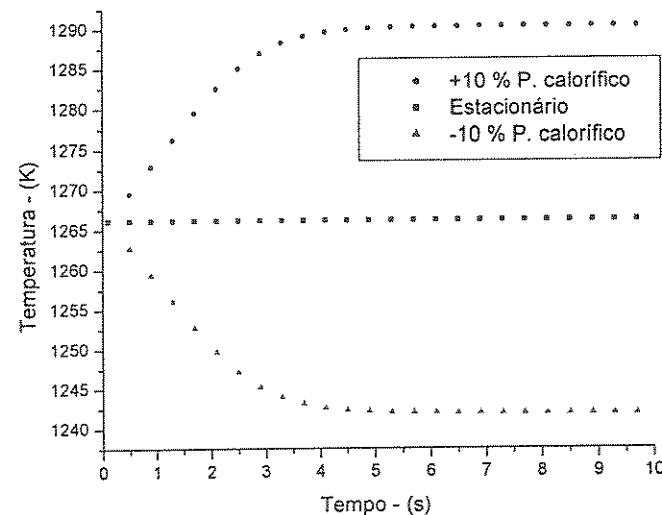


Figura 4.14 - Efeito do poder calorífico do resíduo sólido na dinâmica da temperatura

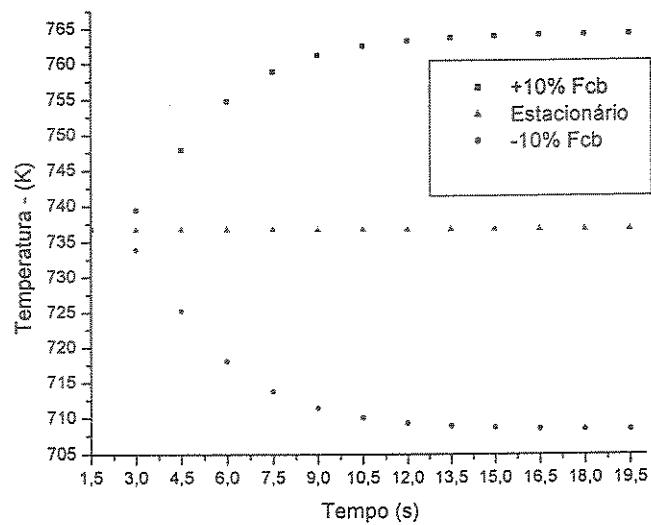


Figura 4.15 - Efeito da vazão de combustível na dinâmica da temperatura do refratário (posição intermediária).

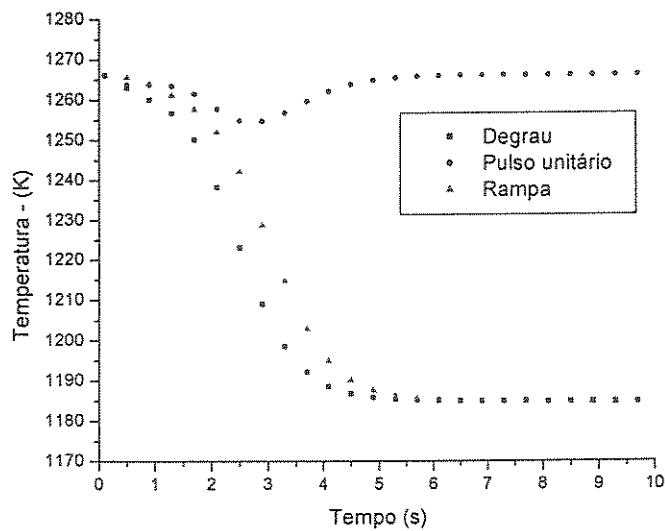


Figura 4.16 - Efeito da vazão de ar secundário na dinâmica da temperatura para alguns tipos de perturbações (+10%).

As mesmas observações para os parâmetros operacionais abordadas em estado estacionário valem para o regime transitório. Uma vez que o modelo é o mesmo, os resultados têm que ser iguais. Principalmente porque os resultados em estado estacionário são obtidos integrando numericamente, em relação ao tempo, o modelo dinâmico até o estado estacionário.

Comparando a Figura 4.15 com as demais, nota-se que a dinâmica no interior da câmara é diferente, mais rápida, que a do refratário. Esta informação é importante, pois para obter-se o estado estacionário, de maneira ótima, é preciso saber o tempo necessário de integração numérica até que todas as variáveis atinjam o regime permanente. Este aspecto é fundamental no escopo da integração em tempo real e para o otimizador em linha usando o modelo determinístico.

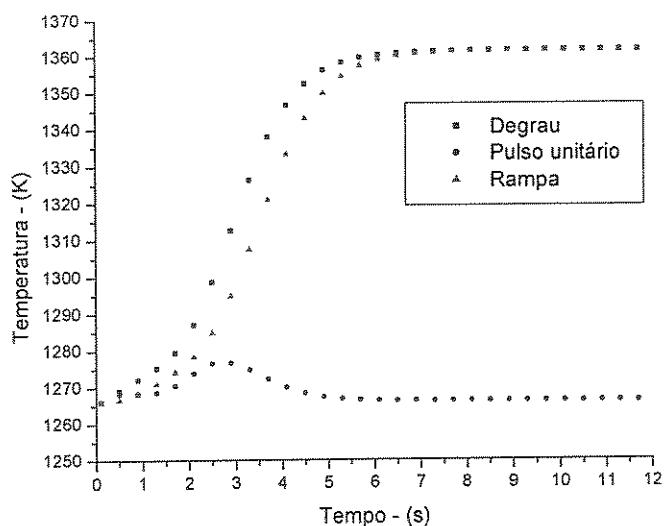


Figura 4.17 - Efeito da vazão de ar secundário na dinâmica da temperatura para alguns tipos de perturbações (-10%).

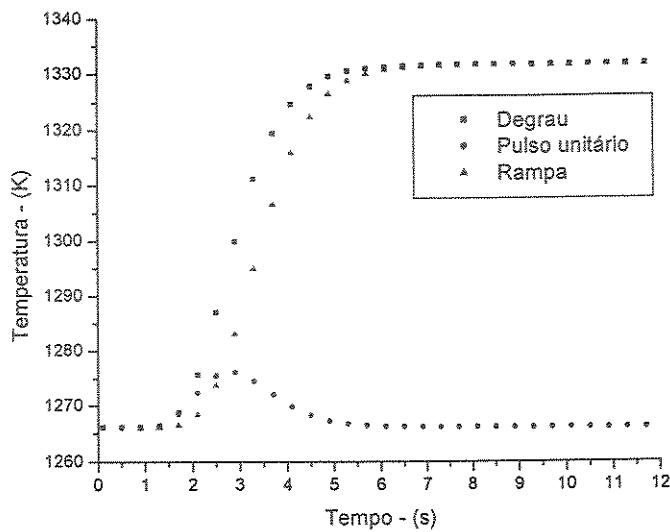


Figura 4.18 - Efeito da vazão de combustível na dinâmica da temperatura para alguns tipos de perturbações (+10%).

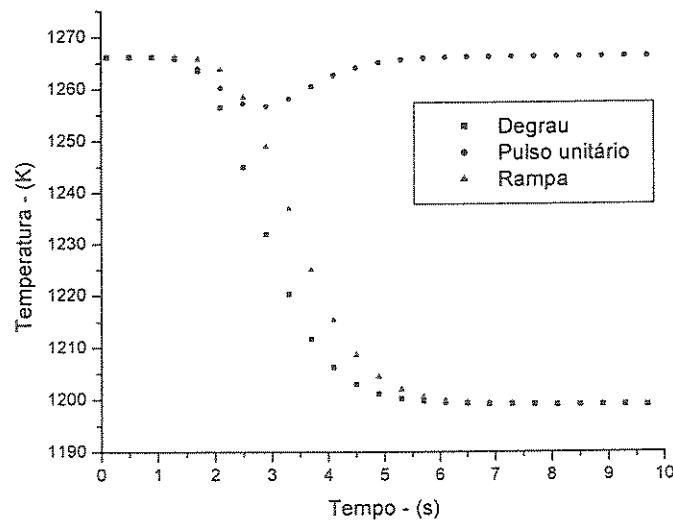


Figura 4.19 - Efeito da vazão de combustível na dinâmica da temperatura para alguns tipos de perturbações (-10%).

Quando comparados alguns tipos de perturbações, degrau, rampa e pulso, o modelo também respondeu coerentemente. Após o tempo morto do processo o efeito do pulso fica claro na figuras mostradas acima (Figuras 4.17 a 4.19). As respostas dinâmicas quando o processo foi submetido à uma perturbação tipo rampa, apresentam uma defasagem em relação às perturbações degrau. Este comportamento é o esperado, pois a rampa demora mais até que a intensidade máxima da perturbação seja atingida.

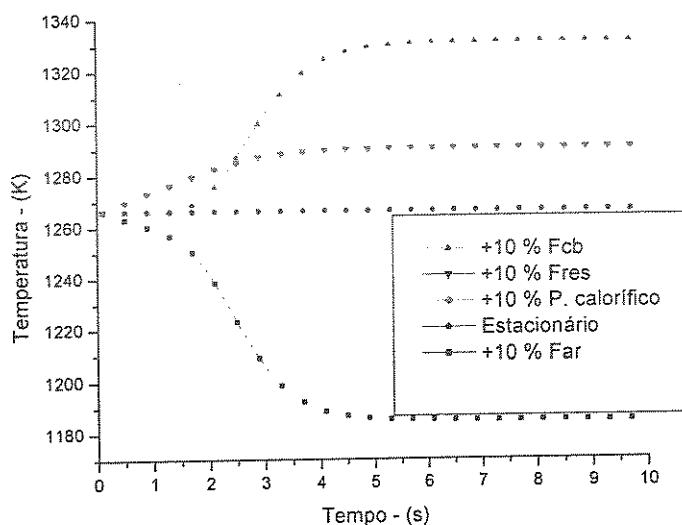


Figura 4.20 - Comportamento dinâmico da temperatura para algumas perturbações degrau.

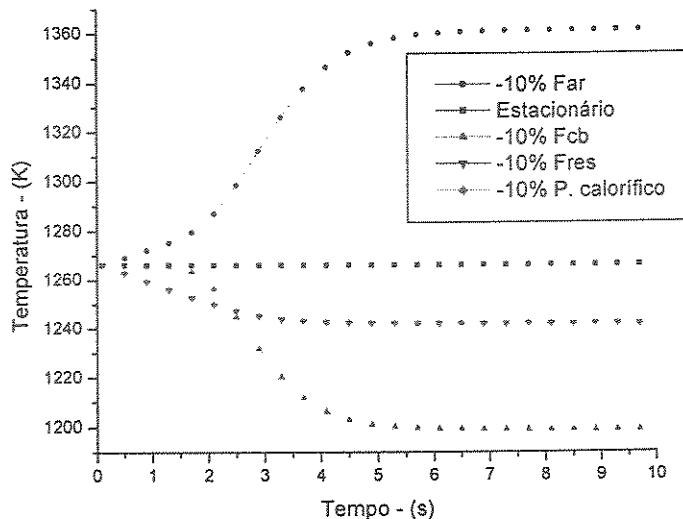


Figura 4.21 - Comportamento dinâmico da temperatura para algumas perturbações degrau.

As duas figuras anteriores resumem as perturbações consideradas em um único gráfico. Com isto pode-se avaliar quantitativamente e qualitativamente o efeito que cada uma provoca na temperatura de saída dos gases de combustão.

4.5 Planejamento e controle da produção

O planejamento e controle da produção pode ser encarado como uma estrutura hierárquica à parte. Isto por que a dinâmica do tempo de resposta de uma otimização de parâmetros operacionais e controle é bem diferente do planejamento. Este pode ser mensal, semanal e, na melhor das hipóteses diário, enquanto o otimizador e o controlador trabalham com poucos segundos para completar seus cálculos sem que haja prejuízo para o processo.

Mas, de qualquer maneira, seus resultados afetam o processo e as partes estão conectadas em maior ou menor grau de influência.

Neste item os resultados atêm-se apenas em mostrar como o modelo matemático desenvolvido pode beneficiar este tipo de processo. Mais adiante, no instante em que todas

as partes forem integradas, assume-se que os resultados do planejamento da produção são transmitidos ao otimizador para que este gere os melhores parâmetros operacionais.

Em decorrência da falta de dados realistas associados às características do equipamento, este artifício foi empregado. Contudo, de maneira alguma isto empobrece os resultados deste trabalho. Primeiro por que a integração em tempo real não depende do planejamento da produção para rodar nesta escala, segundo é que neste módulo o fundamental é ter-se uma metodologia aplicável. Neste contexto, o trabalho e os resultados mostrarão que cumprem com seus objetivos.

A Tabela 4.5 especifica os limites operacionais e ambientais que devem ser obedecidos. Estes parâmetros estão na NBR-11175.

Tabela 4.5 - Restrições operacionais.

| Restrição | Condição |
|---------------------------------------|----------|
| Máxima vazão de cloro (kg/h) | 42,9 |
| Máxima vazão de enxofre (kg/h) | 23,3 |
| Máxima vazão de nitrogênio (kg/h) | 20,0 |
| Máxima vazão de flúor (kg/h) | 2,0 |
| Máxima vazão de fósforo (kg/h) | 3,5 |
| Máxima vazão de cinzas (kg/h) | 400,0 |
| Máximo teor de água (%) | 30,0 |
| Máximo teor de carbono (%) | 25,0 |
| Máxima vazão de metais classe 1 (g/h) | 0,114 |
| Máxima vazão de metais classe 2 (g/h) | 0,25 |
| Máxima vazão de metais classe 3 (g/h) | 0,025 |
| Máxima carga térmica (kcal/h) | 2,70E+06 |

As condições foram criadas a fim estudar a validade do modelo do planejamento da produção. Por isso as condições não são totalmente fiéis com a realidade industrial, mas sim muito parecidas. Esta semelhança permite que se possa estudar a aplicabilidade do modelo em situações reais.

Os estoques apresentam dados dos lotes do resíduo, cujos valores foram alterados de tal forma que fossem úteis para este trabalho. Por isso, as proporções entre os teores de carbono e cinza não podem ser relacionados com o poder calorífico. Trata-se de um exercício didático a fim suplantar a inexistência de informações fidedignas da realidade. Entretanto, as ordens de grandeza basearam-se em uma referência real, cuja origem será mantida em sigilo por recomendação dos responsáveis técnicos da unidade de incineração.

Tabela 4.6 - Simulação propostas: condição 1.

| | |
|---------------------------------|-------------|
| Quantidade de “blends” | 1 |
| Peso do “blend” (kg) | 1200 |
| Mínima quantidade por lote (kg) | 100 |
| Meta de incineração (kg/s) | 0,25 |
| Estoque | Tabela 4.24 |

Tabela 4.7 - Resultado da simulação para a condição 1.

| Propriedade | Resultado |
|---|-----------|
| Quantidade do lote 1 (“blend” 1) – (kg) | 233,33 |
| Quantidade do lote 2 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 3 (“blend” 1) – (kg) | 666,66 |
| Quantidade do lote 4 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 5 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Teor de carbono do “blend” 1 - (%) | 25,00 |
| Vazão de fósforo do “blend” 1 - (kg/h) | 3,95 |

| | |
|---|---------|
| Vazão de enxofre do “blend” 1 - (kg/h) | 0,20 |
| Teor de água do “blend” 1 - (%) | 29,30 |
| Vazão de cinzas do “blend” 1 - (kg/h) | 31,73 |
| Pode calorífico do “blend” 1 - (kcal/h) | 2393,88 |

Tabela 4.8 - Simulação propostas: condição 2.

| | |
|---------------------------------|-------------|
| Quantidade de “blends” | 1 |
| Peso do “blend” (kg) | 1200 |
| Mínima quantidade por lote (kg) | 50 |
| Meta de incineração (kg/s) | 0,25 |
| Estoque | Tabela 4.24 |

Tabela 4.9 - Resultado da simulação para a condição 2.

| Propriedade | Resultado |
|---|-----------|
| Quantidade do lote 1 (“blend” 1) – (kg) | 316,66 |
| Quantidade do lote 2 (“blend” 1) – (kg) | 50,00 |
| Quantidade do lote 3 (“blend” 1) – (kg) | 733,33 |
| Quantidade do lote 4 (“blend” 1) – (kg) | 50,00 |
| Quantidade do lote 5 (“blend” 1) – (kg) | 50,00 |
| Teor de carbono do “blend” 1 - (%) | 25,00 |
| Vazão de fósforo do “blend” 1 - (kg/h) | 3,95 |
| Vazão de enxofre do “blend” 1 - (kg/h) | 0,20 |
| Teor de água do “blend” 1 - (%) | 29,48 |
| Vazão de cinzas do “blend” 1 - (kg/h) | 31,55 |

| | |
|---|---------|
| Pode calorífico do “blend” 1 - (kcal/h) | 2498,27 |
|---|---------|

Tabela 4.10 - Simulação propostas: condição 3.

| | |
|---------------------------------|-------------|
| Quantidade de “blends” | 1 |
| Peso do “blend” (kg) | 1200 |
| Mínima quantidade por lote (kg) | 0 |
| Meta de incineração (kg/s) | 0,25 |
| Estoque | Tabela 4.24 |

Tabela 4.11 - Resultado da simulação para a condição 3.

| Propriedade | Resultado |
|---|-----------|
| Quantidade do lote 1 (“blend” 1) – (kg) | 400,00 |
| Quantidade do lote 2 (“blend” 1) – (kg) | 0,00 |
| Quantidade do lote 3 (“blend” 1) – (kg) | 800,00 |
| Quantidade do lote 4 (“blend” 1) – (kg) | 0,00 |
| Quantidade do lote 5 (“blend” 1) – (kg) | 0,00 |
| Teor de carbono do “blend” 1 - (%) | 25,00 |
| Vazão de fósforo do “blend” 1 - (kg/h) | 3,95 |
| Vazão de enxofre do “blend” 1 - (kg/h) | 0,20 |
| Teor de água do “blend” 1 - (%) | 29,66 |
| Vazão de cinzas do “blend” 1 - (kg/h) | 31,37 |
| Pode calorífico do “blend” 1 - (kcal/h) | 2602,66 |

As condições 1 2 e 3 comparam o efeito da menor quantidade que um lote deve dispor. Isto significa que todos os lotes têm que contribuir com pelo menos esta quantia.

Relembrando, a meta é maximizar o poder calorífico, respeitando as condições apresentadas na Tabela 4.5. Para as referidas condições o modelo funcionou conforme o planejado.

Como na condição 3 não havia empecilho de usar uma certa fração de um lote, o poder calorífico foi o maior. Uma vez que as condições são menos restritivas, o ponto ótimo é termicamente mais eficiente na condição 3.

Tabela 4.12 - Simulação propostas: condição 4.

| | |
|---------------------------------|-------------|
| Quantidade de “blends” | 6 |
| Peso do “blend” (kg) | 1200 |
| Mínima quantidade por lote (kg) | 100 |
| Meta de incineração (kg/s) | 0,25 |
| Estoque | Tabela 4.24 |

Tabela 4.13 - Resultado da simulação para a condição 4.

| Propriedade | Resultado |
|--|-----------|
| Quantidade do lote 1 (“blends” 1 a 6) – (kg) | 233,33 |
| Quantidade do lote 2 (“blends” 1 a 6) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 3 (“blends” 1 a 6) – (kg) | 666,66 |
| Quantidade do lote 4 (“blends” 1 a 6) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 5 (“blends” 1 a 6) – (kg) | 100,00 |
| Teor de carbono do “blends” 1 a 6 - (%) | 25,00 |
| Vazão de fósforo do “blends” 1 a 6 - (kg/h) | 3,95 |
| Vazão de enxofre do “blends” 1 a 6 - (kg/h) | 0,20 |
| Teor de água do “blends” 1 a 6 - (%) | 29,30 |

| | |
|--|---------|
| Vazão de cinzas do “blends” 1 a 6 - (kg/h) | 31,73 |
| Pode calorífico do “blends” 1 a 6 - (kcal/h) | 2393,88 |

Tabela 4.14 - Simulação propostas: condição 5.

| | |
|---------------------------------|-------------|
| Quantidade de “blends” | 36 |
| Peso do “blend” (kg) | 1200 |
| Mínima quantidade por lote (kg) | 100 |
| Meta de incineração (kg/s) | 0,25 |
| Estoque | Tabela 4.24 |

Tabela 4.15 - Resultado da simulação para a condição 5.

| Propriedade | Resultado |
|--|-----------|
| Quantidade do lote 1 (“blends” 1 a 30) – (kg) | 233,33 |
| Quantidade do lote 2 (“blends” 1 a 30) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 3 (“blends” 1 a 30) – (kg) | 666,66 |
| Quantidade do lote 4 (“blends” 1 a 30) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 5 (“blends” 1 a 30) – (kg) | 100,00 |
| Teor de carbono do “blends” 1 a 30 - (%) | 25,00 |
| Vazão de fósforo do “blends” 1 a 30 - (kg/h) | 3,95 |
| Vazão de enxofre do “blends” 1 a 30 - (kg/h) | 0,20 |
| Teor de água do “blends” 1 a 30 - (%) | 29,30 |
| Vazão de cinzas do “blends” 1 a 30 - (kg/h) | 31,73 |
| Pode calorífico do “blends” 1 a 30 - (kcal/h) | 2393,88 |
| Quantidade do lote 1 (“blends” 31 a 36) – (kg) | 233,33 |

| | |
|--|---------|
| Quantidade do lote 2 (“blends” 31 a 36) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 3 (“blends” 31 a 36) – (kg) | 0,00 |
| Quantidade do lote 4 (“blends” 31 a 36) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 5 (“blends” 31 a 36) – (kg) | 766,66 |
| Teor de carbono do “blends” 31 a 36 - (%) | 0,25 |
| Vazão de fósforo do “blends” 31 a 36 - (kg/h) | 3,95 |
| Vazão de enxofre do “blends” 31 a 36 - (kg/h) | 2,00 |
| Teor de água do “blends” 31 a 36 - (%) | 28,19 |
| Vazão de cinzas do “blends” 31 a 36 - (kg/h) | 32,8455 |
| Pode calorífico do “blends” 31 a 36 - (kcal/h) | 1891,66 |

As condições 4 e 5 propõe o cálculo de vários “blends”, pois na prática o planejamento precisa ter uma folga de tempo em relação à operação. Pode-se planejar a operação para 01 turno, 02 turnos e até dias. A idéia nestas condições é testar a capacidade do algoritmo de resolver planejamento em prazos maiores, não apenas uma simulação.

Para a condição 4 o estoque gerou “blends” com as mesmas características. Porém, para um horizonte de planejamento maior (condição 5), o modelo interpretou a redução do estoque e gerou um “blend” diferente, mas dentro das restrições programadas.

Tabela 4.16 - Simulação propostas: condição 6.

| | |
|---------------------------------|-------------|
| Quantidade de “blends” | 1 |
| Peso do “blend” (kg) | 1200 |
| Mínima quantidade por lote (kg) | 100 |
| Meta de incineração (kg/s) | 0,25 |
| Estoque | Tabela 4.25 |

Tabela 4.17 - Resultado da simulação para a condição 6.

| Propriedade | Resultado |
|---|-----------|
| Quantidade do lote 1 (“blend” 1) – (kg) | 770,00 |
| Quantidade do lote 2 (“blend” 1) – (kg) | 130,00 |
| Quântidade do lote 3 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 4 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 5 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Teor de carbono do “blend” 1 - (%) | 23,56 |
| Vazão de fósforo do “blend” 1 - (kg/h) | 3,95 |
| Vazão de enxofre do “blend” 1 - (kg/h) | 0,20 |
| Teor de água do “blend” 1 - (%) | 28,76 |
| Vazão de cinzas do “blend” 1 - (kg/h) | 33,72 |
| Pode calorífico do “blend” 1 - (kcal/h) | 3000,00 |

Tabela 4.18 - Simulação propostas: condição 7.

| | |
|---------------------------------|-------------|
| Quantidade de “blends” | 1 |
| Peso do “blend” (kg) | 1200 |
| Mínima quantidade por lote (kg) | 100 |
| Meta de incineração (kg/s) | 0,2583 |
| Estoque | Tabela 4.25 |

Tabela 4.19 - Resultado da simulação para a condição 7.

| Propriedade | Resultado |
|---|-----------|
| Quantidade do lote 1 (“blend” 1) – (kg) | 537,74 |
| Quantidade do lote 2 (“blend” 1) – (kg) | 362,25 |
| Quantidade do lote 3 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 4 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 5 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Teor de carbono do “blend” 1 - (%) | 23,36 |
| Vazão de fósforo do “blend” 1 - (kg/h) | 3,95 |
| Vazão de enxofre do “blend” 1 - (kg/h) | 0,20 |
| Teor de água do “blend” 1 - (%) | 28,17 |
| Vazão de cinzas do “blend” 1 - (kg/h) | 34,49 |
| Pode calorífico do “blend” 1 - (kcal/h) | 2903,22 |

As condições 6 e 7 estudam o efeito do planejamento da produção para resíduos sólidos com alto poder calorífico. Para entender melhor esta característica basta observar o estoque relativo a estas simulações. A fim de adequar-se à restrição operacional, o modelo atribuiu maior peso para a formulação de lotes com o menor poder calorífico. A condição 7 é ainda pior, já que a meta produtiva é maior, mas em todas as condições o modelo atendeu às necessidades das restrições.

Tabela 4.20 - Simulação propostas: condição 8.

| | |
|---------------------------------|------|
| Quantidade de “blends” | 1 |
| Peso do “blend” (kg) | 1200 |
| Mínima quantidade por lote (kg) | 100 |
| Meta de incineração (kg/s) | 0,25 |

| | |
|---------|-------------|
| Estoque | Tabela 4.26 |
|---------|-------------|

Tabela 4.21 - Resultado da simulação para a condição 8.

| Propriedade | Resultado |
|---|-----------|
| Quantidade do lote 1 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 2 (“blend” 1) – (kg) | 800,00 |
| Quantidade do lote 3 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 4 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 5 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Teor de carbono do “blend” 1 - (%) | 25,00 |
| Vazão de fósforo do “blend” 1 - (kg/h) | 3,95 |
| Vazão de enxofre do “blend” 1 - (kg/h) | 0,20 |
| Teor de água do “blend” 1 - (%) | 27,08 |
| Vazão de cinzas do “blend” 1 - (kg/h) | 33,96 |
| Pode calorífico do “blend” 1 - (kcal/h) | 1067,00 |

A oitava condição proposta deve resolver a situação de um resíduo com alto teor de carbono. O carbono foi escolhido sem nenhuma razão especial, apenas para representar este tipo de restrição presente no modelo, e apresentado no capítulo anterior. Como os teores de carbono estavam muito restritivos na maioria das amostras, apenas na segunda que não, a única alternativa foi maximizar a participação deste lote no “blend”.

Embora as condições tenham sido pré-determinadas para que fossem factíveis, o algoritmo usado (SIMPLEX) muito facilmente detecta quando o perfil do resíduo não se adequa às condições estabelecidas pelo modelo matemático do planejamento e controle da produção.

Tabela 4.22 - Simulação propostas: condição 9.

| | |
|---------------------------------|-------------|
| Quantidade de “blends” | 1 |
| Peso do “blend” (kg) | 1200 |
| Mínima quantidade por lote (kg) | 100 |
| Meta de incineração (kg/s) | 0,25 |
| Estoque | Tabela 4.27 |

Tabela 4.23 - Resultado da simulação para a condição 9.

| Propriedade | Resultado |
|---|-----------|
| Quantidade do lote 1 (“blend” 1) – (kg) | 100,03 |
| Quantidade do lote 2 (“blend” 1) – (kg) | 199,97 |
| Quantidade do lote 3 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 4 (“blend” 1) – (kg) | 100,00 |
| Quantidade do lote 5 (“blend” 1) – (kg) | 699,99 |
| Teor de carbono do “blend” 1 - (%) | 25,00 |
| Vazão de fósforo do “blend” 1 - (kg/h) | 3,95 |
| Vazão de enxofre do “blend” 1 - (kg/h) | 0,20 |
| Teor de água do “blend” 1 - (%) | 28,08 |
| Vazão de cinzas do “blend” 1 - (kg/h) | 32,96 |
| Pode calorífico do “blend” 1 - (kcal/h) | 1867,02 |

A condição 9 leva em conta o efeito da idade do lote em estoque. Pelo modelo matemático, lotes têm um prazo para serem processado. Neste caso o lote 5 precisaria ser processado com maior urgência, já que é o mais antigo dos presentes. O modelo funcionou conforme esperado, fazendo com que o lote 5 tivesse uma maior participação no “blend”.

Tabela 4.24 - Estoque de referência para as condições de 1 a 5.

| Lote | Data | Massa | PCI | Cinzas | H2O | C | S | P |
|------|-----------|----------|--------|--------|-------|-------|-----|------|
| 1 | 30/Jän/03 | 10000,00 | 1800,0 | 34,04 | 29,00 | 23,00 | 0,2 | 0,26 |
| 2 | 31/Ján/03 | 15000,00 | 500,0 | 38,04 | 26,00 | 22,00 | 0,2 | 0,26 |
| 3 | 01/Fev/03 | 20000,00 | 3004,0 | 30,04 | 30,00 | 26,00 | 0,2 | 0,26 |
| 4 | 02/Fev/03 | 30000,00 | 1900,0 | 31,04 | 30,00 | 25,00 | 0,2 | 0,26 |
| 5 | 03/Fev/03 | 9000,00 | 2100,0 | 32,04 | 28,00 | 26,00 | 0,2 | 0,26 |

Tabela 4.25 - Estoque de referência para as condições de 6 a 7.

| Lote | Data | Massa | PCI | Cinzas | H2O | C | S | P |
|------|-----------|----------|--------|--------|-------|-------|-----|------|
| 1 | 30/Jan/03 | 10000,00 | 3000,0 | 34,04 | 29,00 | 23,00 | 0,2 | 0,26 |
| 2 | 31/Jan/03 | 15000,00 | 2500,0 | 38,04 | 26,00 | 22,00 | 0,2 | 0,26 |
| 3 | 01/Fev/03 | 20000,00 | 3700,0 | 30,04 | 30,00 | 26,00 | 0,2 | 0,26 |
| 4 | 02/Fev/03 | 30000,00 | 3100,0 | 31,04 | 30,00 | 25,00 | 0,2 | 0,26 |
| 5 | 03/Fev/03 | 9000,00 | 2850,0 | 32,04 | 28,00 | 26,00 | 0,2 | 0,26 |

Tabela 4.26 - Estoque de referência para a condição 8.

| Lote | Data | Massa | PCI | Cinzas | H2O | C | S | P |
|------|-----------|----------|--------|--------|-------|-------|-----|------|
| 1 | 30/Jan/03 | 10000,00 | 1800,0 | 24,04 | 29,00 | 33,00 | 0,2 | 0,26 |
| 2 | 31/Jan/03 | 15000,00 | 500,0 | 38,04 | 26,00 | 22,00 | 0,2 | 0,26 |
| 3 | 01/Fev/03 | 20000,00 | 3004,0 | 26,04 | 30,00 | 30,00 | 0,2 | 0,26 |
| 4 | 02/Fev/03 | 30000,00 | 1900,0 | 31,04 | 30,00 | 25,00 | 0,2 | 0,26 |
| 5 | 03/Fev/03 | 9000,000 | 2100,0 | 22,04 | 28,00 | 36,00 | 0,2 | 0,26 |

Tabela 4.27 - Estoque de referência para a condição 9.

| Lote | Data | Massa | PCI | Cinzas | H2O | C | S | P |
|------|-----------|----------|--------|--------|-------|-------|-----|------|
| 1 | 30/Jan/03 | 10000,00 | 1800,0 | 34,04 | 29,00 | 23,00 | 0,2 | 0,26 |
| 2 | 30/Ago/02 | 15000,00 | 500,0 | 38,04 | 26,00 | 22,00 | 0,2 | 0,26 |
| 3 | 01/Fev/03 | 20000,00 | 3004,0 | 30,04 | 30,00 | 26,00 | 0,2 | 0,26 |
| 4 | 02/Fev/03 | 30000,00 | 1900,0 | 31,04 | 30,00 | 25,00 | 0,2 | 0,26 |
| 5 | 30/Jun/02 | 7000,00 | 2100,0 | 32,04 | 28,00 | 26,00 | 0,2 | 0,26 |

Para todos os estoques apresentados nas Tabelas 4.24 a 4.27, a data de referência é 30 de abril de 2003.

4.6 Validação das redes neurais

Três redes neurais diferentes foram treinadas para dar suporte aos diferentes módulos deste trabalho. Duas delas são usadas nos controladores não lineares. A primeira para predizer o comportamento dinâmico da temperatura de saída dos gases em função dos parâmetros operacionais (NMPC). Uma outra que calcule os parâmetros da equação preditora da dinâmica do processo de um controlador GPC linear. Como o GPC tem seus parâmetros atualizados, tem-se portanto um controlador não linear.

A terceira rede neural estima a temperatura de saída dos gases de combustão em estado estacionário. Esta temperatura é usada para substituir ao modelo determinístico na camada de otimização.

As redes neurais usadas são multicamadas tipo retropropagação, usando como função de transferência uma tangente-sigmoidal.

As três tabelas seguintes apresentam a topologia de cada uma das redes neurais.

Tabela 4.28 - Topologia da rede neural usada no controlador NMPC.

| Parâmetros | Descrição | | |
|---|--|---|----|
| Neurônios na camada de entrada. | 4 | | |
| Número de camadas internas. | 3 | | |
| Número de neurônios em cada camada interna. | 3 | 3 | 10 |
| Variáveis de entrada. | Vazões de ar, combustível, resíduo sólido e poder calorífico do resíduo. | | |
| Variáveis de saída. | Dinâmica da temperatura de saída dos gases em 10 instantes futuros. | | |

Tabela 4.29 - Topologia da rede neural usada no controlador NGPC.

| Parâmetros | Descrição | | |
|--|---|---|---|
| Neurônios na camada de entrada | 4 | | |
| Número de camadas internas | 3 | | |
| Número de neurônios em cada camada interna | 3 | 5 | 3 |
| Variáveis de entrada | Vazões de ar, combustível, resíduo sólido e poder calorífico do resíduo | | |
| Variáveis de saída | Ganho estático, constante de tempo e tempo morto do modelo preditor do NGPC | | |

Tabela 4.30 - Topologia da rede neural usada para representar o modelo determinístico na camada de otimização.

| Parâmetros | Descrição | | |
|--------------------------------|-----------|--|--|
| Neurônios na camada de entrada | 4 | | |
| Número de camadas internas | 3 | | |

| | | | |
|--|---|---|---|
| Número de neurônios em cada camada interna | 3 | 3 | 1 |
| Variáveis de entrada | Vazões de ar, combustível, resíduo sólido e poder calorífico do resíduo | | |
| Variáveis de saída | Temperatura de saída dos gases de combustão | | |

O uso da rede não é direto, esta precisa ser validada para que se tenha confiança em seus resultados. Os gráficos abaixo comparam a rede neural com o modelo usado para seu treinamento. Esta comparação foi usada com dados de treinamento e outros diferentes, para garantir a capacidade preditora do modelo caixa preta.

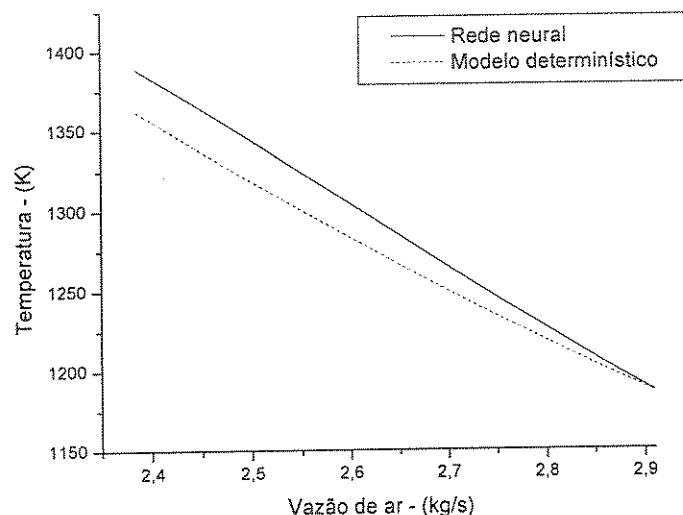


Figura 4.22 - Comparação da temperatura de saída dos gases em função da vazão de ar secundário.

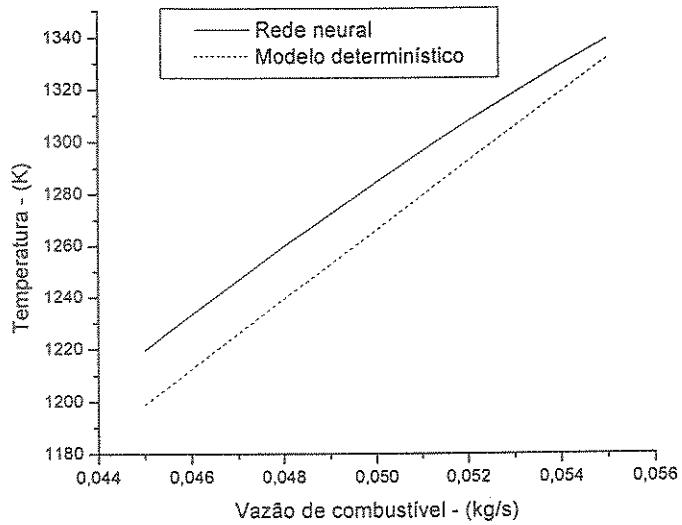


Figura 4.23 - Comparação da temperatura de saída dos gases em função da vazão de combustível.

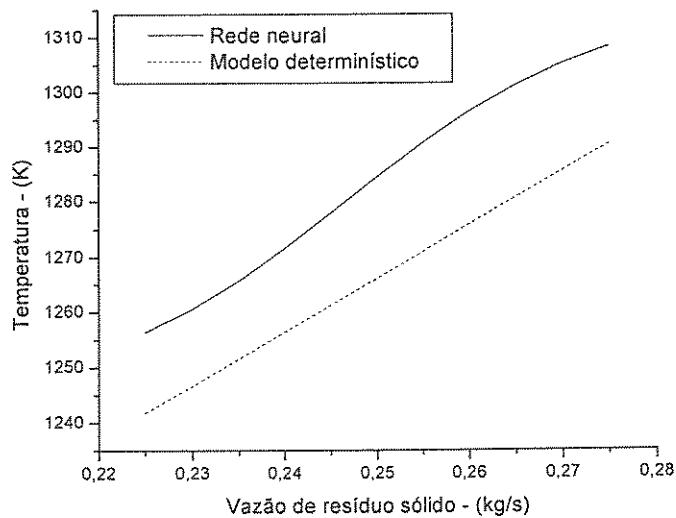


Figura 4.24 - Comparação da temperatura de saída dos gases em função da vazão do resíduo sólido.

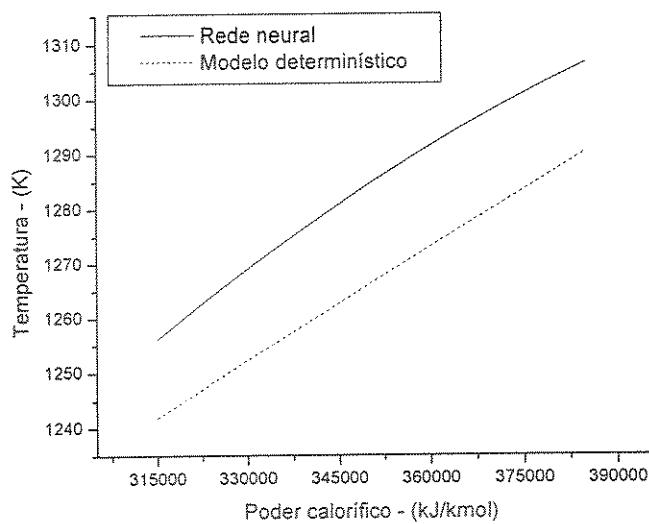


Figura 4.25 - Comparaçāo da temperatura de saída dos gases em função do poder calorífico do resíduo sólido.

A capacidade da rede em reproduzir o modelo determinístico é bastante boa. Os perfis dos dois tipos de modelo são basicamente os mesmos, com pequenos desvios. A ordem destas diferenças nunca é maior que 20 °C, que na prática implica em um erro relativo na ordem de 1,5%, na pior condição. Este erro relativo faz com que o otimizador calcule os parâmetros operacionais com desvios da rede, em relação ao modelo determinístico nesta ordem de grandeza. Por ser uma estratégia totalmente adequada para operações em tempo real seus resultados foram muito bons, e podem ser observados no próximo item.

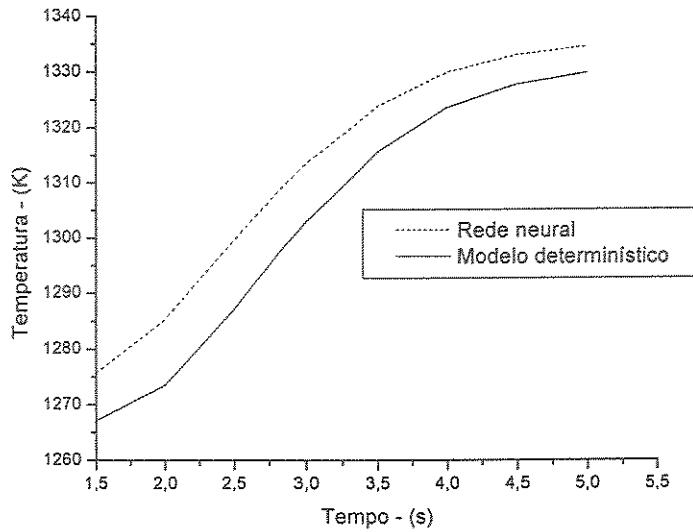


Figura 4.26 - Comparaçāo da dināmica da temperatūra de saída dos gases para uma perturbação de -10% na vazão de ar secundário (NMPC).

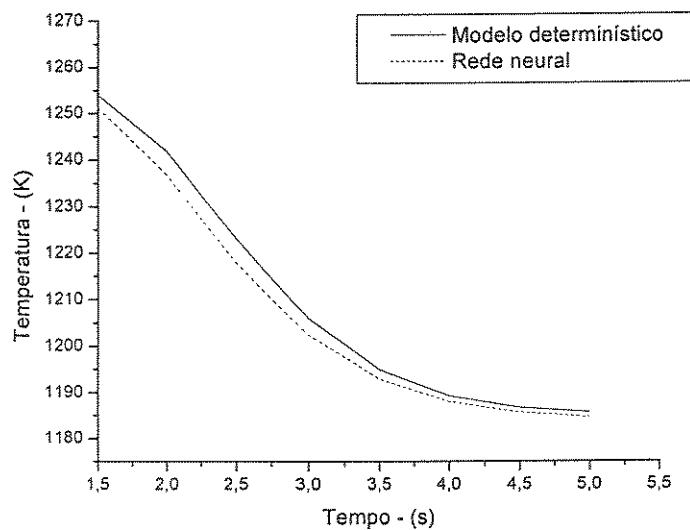


Figura 4.27 - Comparaçāo da dināmica da temperatūra de saída dos gases para uma perturbação de -10% na vazão de combustível (NMPC).

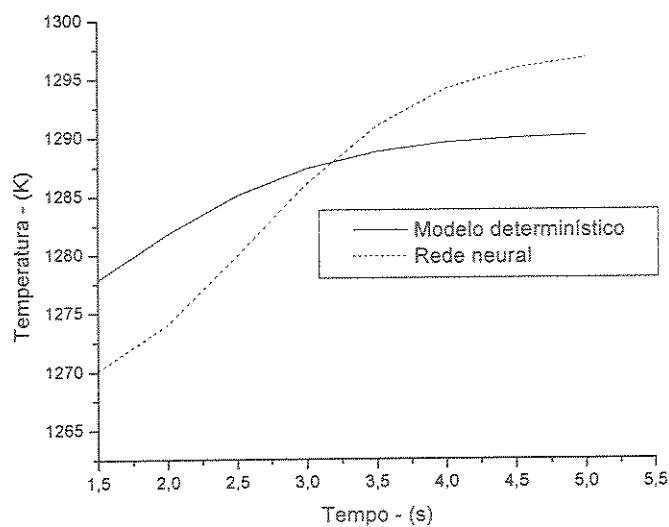


Figura 4.28 - Comparação da dinâmica da temperatura de saída dos gases para uma perturbação de +10% na vazão de resíduo sólido (NMPC).

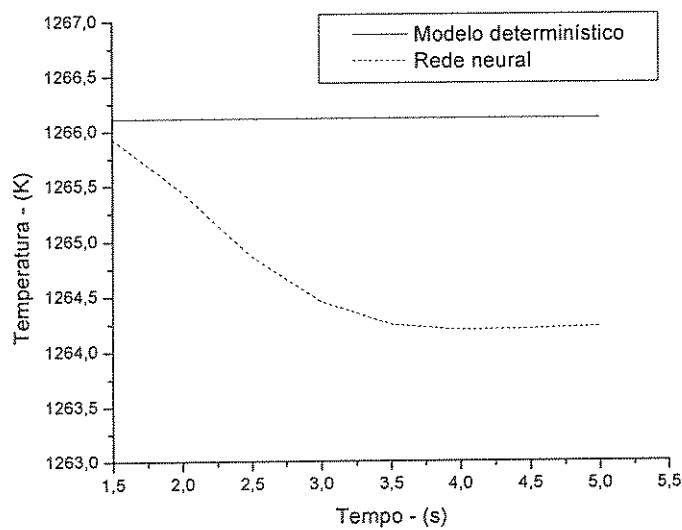


Figura 4.29 - Comparação da dinâmica da temperatura de saída dos gases sem perturbação (NMPC).

A rede neural mostrou-se capaz de predizer a dinâmica da temperatura de saída dos gases, em função dos parâmetros operacionais, com boa precisão. Dez pontos ao longo do tempo são estimados para perturbações tipo degrau para as variáveis de entrada. Estes instantes de tempo estão separados em 0,5 segundo, de tal forma que cubra-se a resposta dinâmica até seu estado estacionário. A precisão para o controlador NMPC foi ainda melhor que a rede treinada para o otimizador. O erro relativo foi, na pior condição, na ordem de 1 %.

A curva, analisando o efeito da vazão do resíduo sólido - ainda que a precisão fosse adequada - tem perfil diferente. Isto se deve ao tipo de resposta dinâmica e da função de transferência usada. A resposta é de primeira ordem, e como a rede deve representar, na maioria dos casos, um comportamento sigmoidal, assim como suas funções de transferência, os perfis diferiram. Ainda que nesta condição o erro relativo tenha sido até mesmo menor que 1%.

Embora os resultados tenham sido satisfatórios, as Figuras 4.26 e 4.27 sugerem um possível erro sistemático da rede neural. Para avaliar esta possibilidade os dois próximos gráficos seguintes comparam os valores preditos versus o real, e calculam a correlação entre eles.

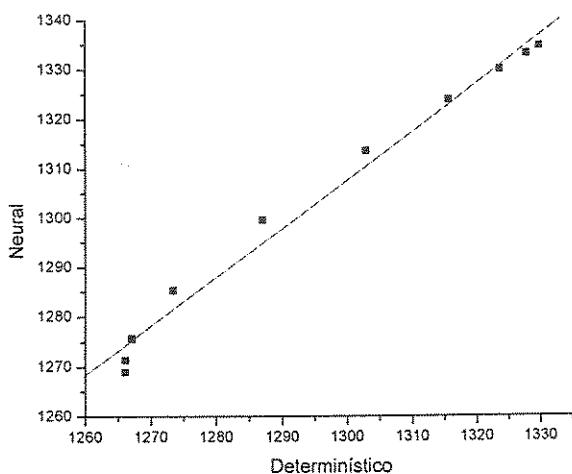


Figura 4.30 - Comparativo entre rede neural e modelo determinístico para a temperatura de saída dos gases de combustão em função da vazão de ar secundário.

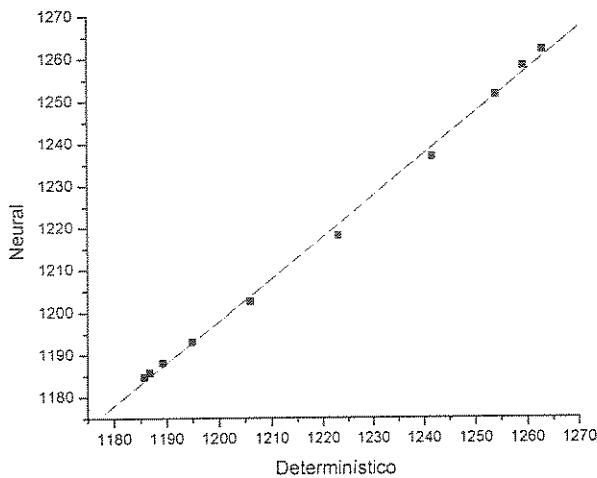


Figura 4.31 - Comparativo entre rede neural e modelo determinístico para a temperatura de saída dos gases de combustão em função da vazão de combustível auxiliar.

As Figuras 4.32 e 4.33 mostram que as previsões da rede neural estão adequadamente distribuídas, e portanto não há erro sistemático. As correlações e desvios padrões calculados foram de “0,9926” / “3,42” e “0,9987” / “1,67”, respectivamente.

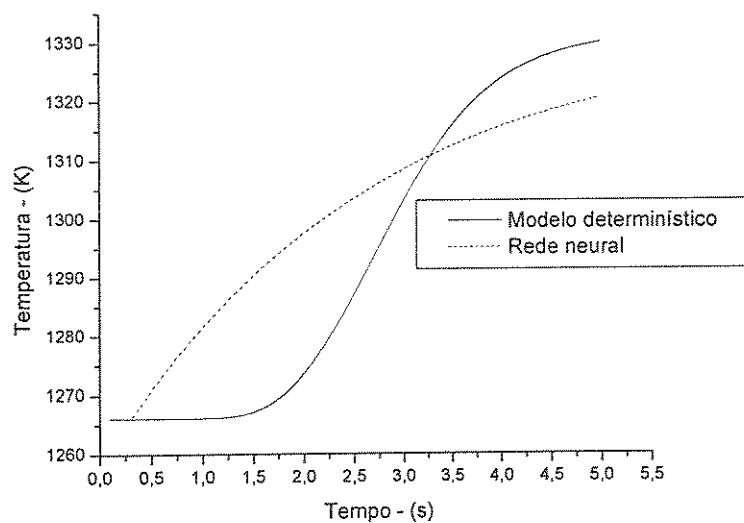


Figura 4.32 - Comparaçāo da dinâmica da temperatura de saída dos gases para uma perturbação de -10% na vazão de ar secundário (NGPC).

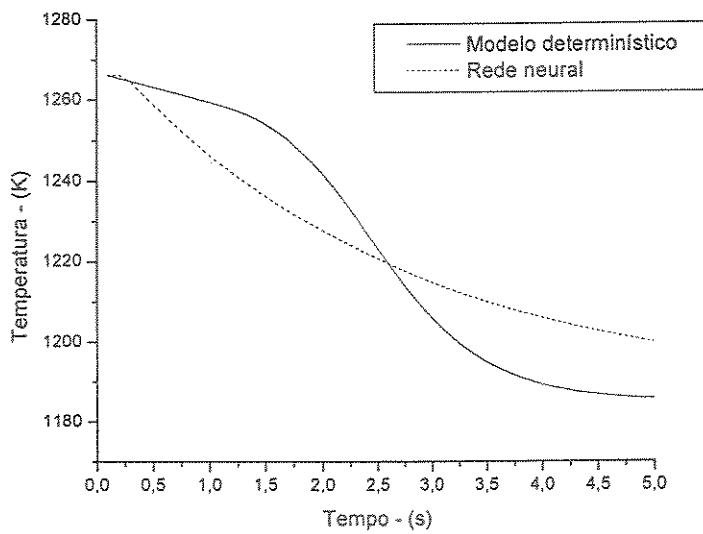


Figura 4.33 - Comparaçāo da dināmica da temperatura de saída dos gases para uma perturbaçāo de -10% na vazão de combustível (NGPC).

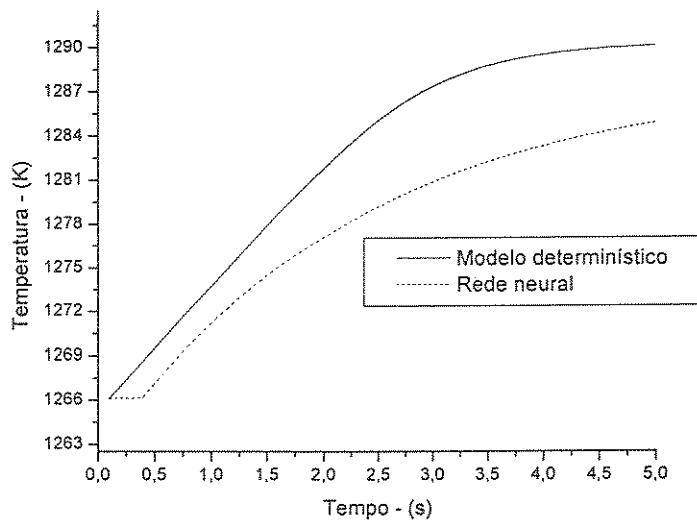


Figura 4.34 - Comparaçāo da dināmica da temperatura de saída dos gases para uma perturbaçāo de +10% na vazão de resíduo sólido (NGPC).

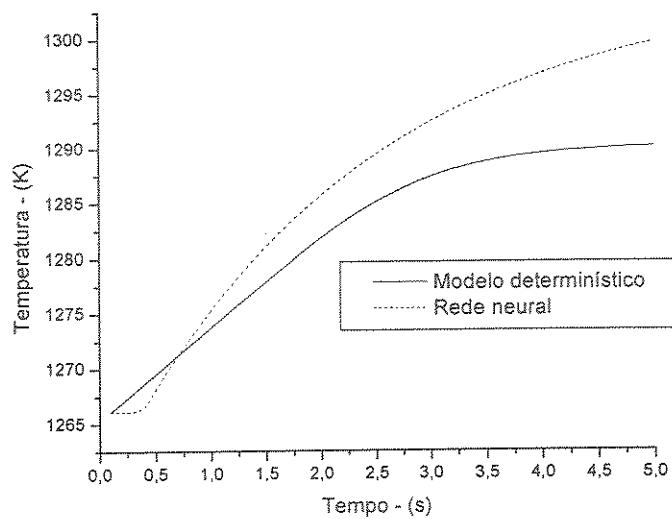


Figura 4.35 - Comparaçāo da dinâmica da temperatura de saída dos gases para uma perturbação de +10% no poder calorífico do resíduo sólido (NGPC).

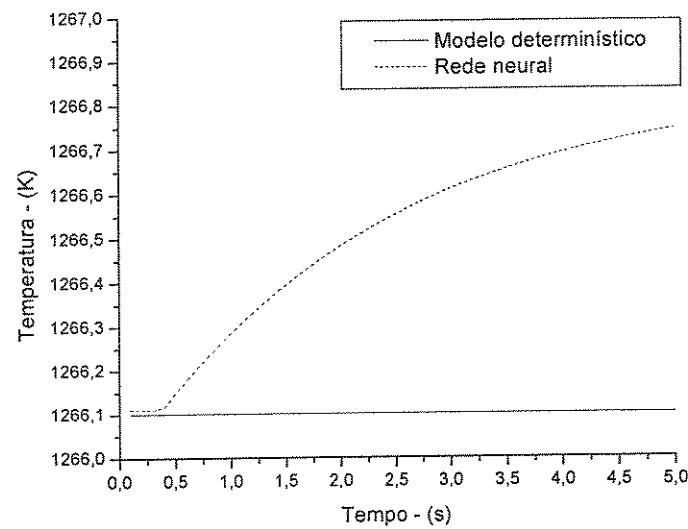


Figura 4.36 - Comparaçāo da dinâmica da temperatura de saída dos gases sem perturbação (NGPC).

Para os controladores NGPC a rede neural tem a função de predizer os parâmetros de modelos usados em controladores tipo GPC, ou seja, o tempo morto mais a constante de tempo “ τ ”. Uma vez que a dinâmica deste tipo de modelo é limitada à sua uma formulação matemática preestabelecida, as curvas apresentam disparidades. A rede neural estima os parâmetros do modelo de primeira ordem com tempo morto, cujo conjunto de dados para treinamento foi obtido por meio de várias simulações e ajustes dos referidos parâmetros. O ajuste minimiza a diferença entre os dois modelos (GPC-Neural e determinístico), mas não significa que as curvas apresentarão sempre as mesmas tendências. Esta é uma restrição matemática do modelo preditor do GPC, que a rede neural usada na estimativa dos parâmetros não interfere.

O fato da estrutura não representar bem o perfil dinâmico não invalida o procedimento. Primeiro porque para as vazões de resíduo sólido e poder calorífico foram mais bem estimadas. Em segundo lugar, usar os mesmos princípios para predizer parâmetros de outros modelos dinâmicos parece bastante interessante, especialmente aqueles que tenham uma curva similar às respostas de uma modelo de primeira ordem com tempo morto.

De modo geral as redes neurais conseguem predizer o processo de tal maneira que o modelo determinístico, computacionalmente oneroso, possa ser substituído sem prejuízos significativos para a performance. Considerando que os modelo determinísticos também apresentam desvios em relação ao processo real, para certos tipos de aplicações a rede neural é até mesmo mais indicada. E esta é uma situação representativa da afirmação anterior, já que controladores, na maioria das vezes, baseiam-se em modelos derivados de dados reais da planta.

4.7 Otimização

Embora o planejamento e controle da produção use otimização linear, esta não é a camada de otimização na integração em tempo real. Sua performance deve satisfazer a dinâmica do processo a tal ponto de não prejudicar os resultados.

Para incineradores tipo forno rotativo o tempo de resposta não é crítico. Isto deve-se pelo modo como o equipamento é operado. Barricas com os resíduos sólidos são alimentadas ao forno. A automatização deste procedimento é muito complexa, já que operacionalmente não é prático, ou até mesmo possível, instalar analisadores de poder calorífico em linha, assim como medidores de vazão do resíduo. O que se tem é o poder calorífico e a taxa que as barricas devem ser alimentadas para um lote, ou conjunto de lotes.

Toda vez que há uma mudança nestas condições operacionais (lote, sub-lotes), o otimizador é acionado e os melhores parâmetros de operação são calculados. Como estas mudanças não ocorrem muito freqüentemente, os tempos para o processamento não são um problema.

Entretanto, as estruturas, assim como os softwares desenvolvidos neste trabalho têm por finalidade serem aplicados a processos semelhantes, o tempo de execução passa a ser fundamental.

Ratificando o parágrafo acima, em processos que usem fornos rotativos e cujos analisadores estão em linha, uma metodologia capaz de atender sua dinâmica faz-se necessária. Por isso, todos os esforços vão no sentido de obter uma alternativa que trabalhe em tempo real, já que um dos objetivos do trabalho é oferecer soluções para processos simulares.

No módulo de otimização quatro opções são possíveis, combinado o método numérico (S.Q.P e algoritmo genético) com o modelo que representa o processo (determinístico e rede neural).

As propostas de otimização estão descritas na Tabela 4.31

Tabela 4.31 - Problemas de otimização.

| Caso | Parâmetro operacional | |
|------|-----------------------------|------------------------------------|
| | Vazão de combustível (kg/s) | Pode calorífico do resíduo (kJ/kg) |
| 1 | 0.275 | 350000 |
| 2 | 0.250 | 385000 |
| 3 | 0.225 | 350000 |

| | | |
|---|-------|--------|
| 4 | 0.250 | 297500 |
| 5 | 0.275 | 385000 |
| 6 | 0.225 | 297500 |
| 7 | 0.275 | 297500 |
| 8 | 0.225 | 385000 |

Tabela 4.32 - Parâmetros operacionais otimizados.

| Caso | Parâmetro operacional (Fcb – Far) | | |
|----------------|-----------------------------------|----------------|----------------|
| | Procedimento numérico | | |
| S.Q.P – Neural | S.Q.P – determinístico. | G.A – Neural | |
| 1 | 0.04800 – 2.65 | Não convergiu | 0.04796 – 2.65 |
| 2 | 0.04816 – 2.65 | Não convergiu | 0.04814 – 2.65 |
| 3 | 0.05236 – 2.65 | 0.05183 – 2.65 | 0.05231 – 2.65 |
| 4 | 0.05379 – 2.65 | 0.05275 – 2.65 | 0.05372 – 2.65 |
| 5 | 0.04628 – 2.65 | Não convergiu | 0.04620 – 2.65 |
| 6 | 0.05636 – 2.65 | 0.05432 – 2.65 | 0.05636 – 2.65 |
| 7 | 0.05167 – 2.65 | 0.05118 – 2.65 | 0.05161 – 2.65 |
| 8 | 0.05044 – 2.65 | 0.05018 – 2.65 | 0.05037 – 2.65 |

Sendo,

Far – Vazão de ar secundário (kg/s);

Fcb – Vazão de combustível (kg/s);

A combinação do modelo determinístico com o algoritmo genético não foi viável computacionalmente.

Os dados da Tabela 4.32 revelam que usar um modelo determinístico com um algoritmo S.Q.P não é confiável. Em 8 situações 3 não tiveram sucesso, o que é um percentual de falhas muito elevado para operações em linha e em tempo real. Usar um algoritmo S.Q.P com um modelo determinístico não garante boa performance, pois as condições iniciais podem estar em uma região não convexa. Tal situação leva com freqüência à não convergência. Por isso esta combinação não mostrou-se adequada neste estudo de caso para uso em linha e em tempo real.

O modelo neural obteve sucesso em todos os casos, sendo que associado ao algoritmo S.Q.P a resposta dá-se em fração de segundo.

Quanto ao uso do algoritmo genético pode-se concluir que seus resultados são confiáveis para o problema proposto. As diferenças em relação ao S.Q.P não são significativas, apenas o tempo de processamento é maior.

Os tempos computacionais para um equipamento de referência serão apresentados no item 4.9.

Evidentemente usar o S.Q.P com um modelo neural é mais eficiente que sua versão aplicada ao algoritmo genético. Todavia pode-se não obter a convergência com o S.Q.P, e este trabalho oferece uma segunda opção, um pouco mais lenta, mas igualmente eficaz. Usá-la ou não dependerá da dinâmica do processo e da janela de tempo disponível para os cálculos computacionais sem prejuízo para o desempenho do processo.

Com a finalidade de testar o efeito da otimização nos parâmetros, as figuras abaixo comparam as respostas em malha aberta com as otimizadas. A idéia inicial é que a otimização leve o processo o mais próximo possível do “set point” sem a ação dos controladores.

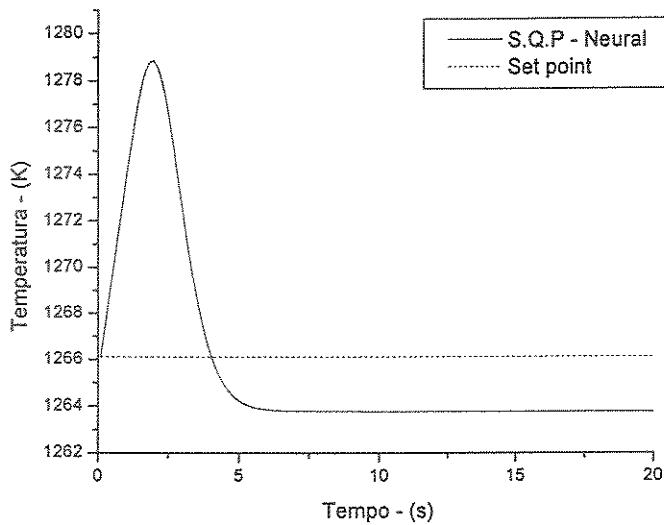


Figura 4.37 - Efeito do otimizador para o caso 1.

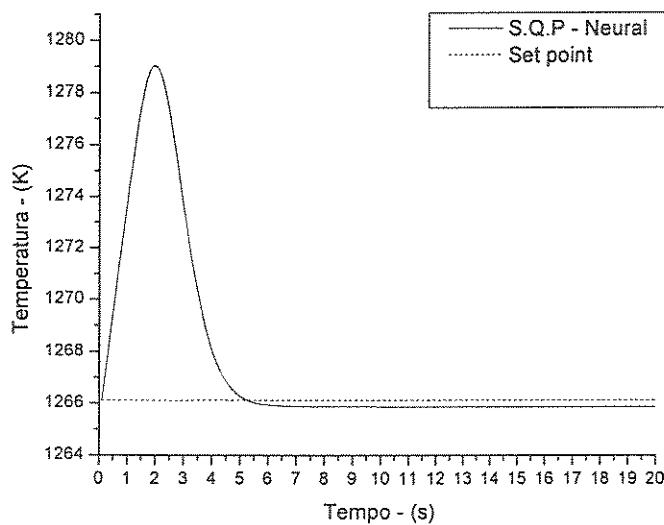


Figura 4.38 - Efeito do otimizador para o caso 2.

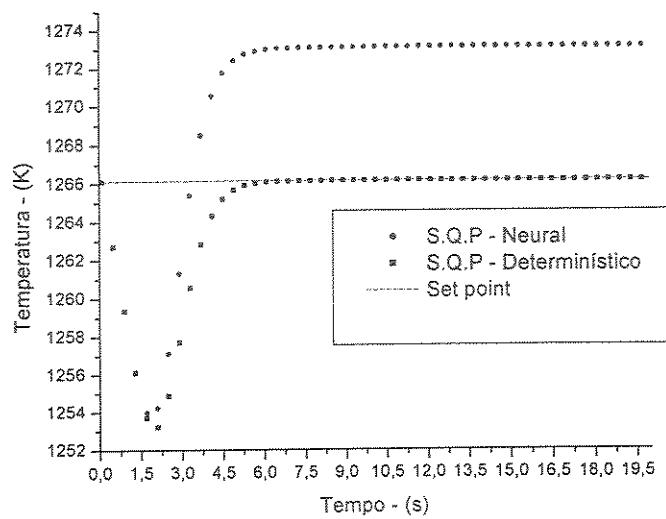


Figura 4.39 - Efeito do otimizador para o caso 3.

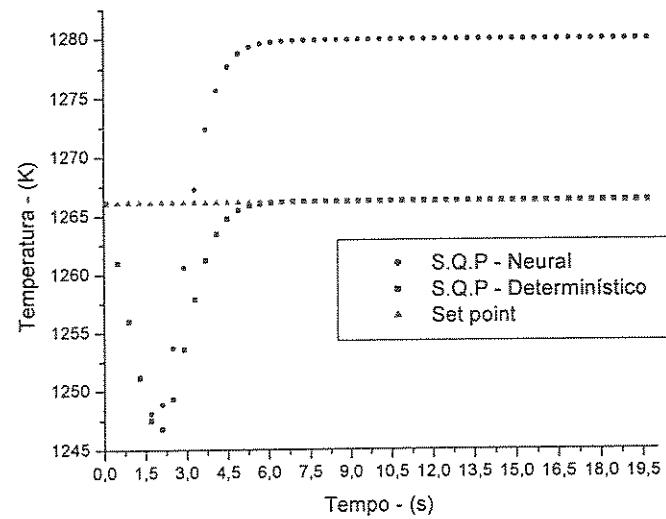


Figura 4.40 - Efeito do otimizador para o caso 4.

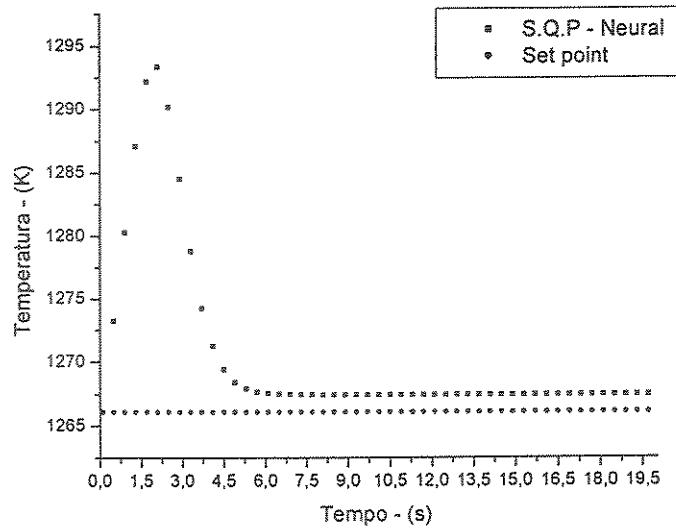


Figura 4.41 - Efeito do otimizador para o caso 5.

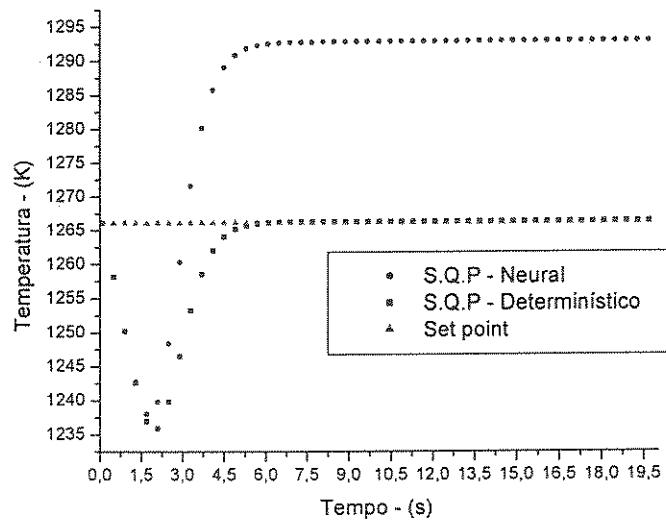


Figura 4.42 - Efeito do otimizador para o caso 6.

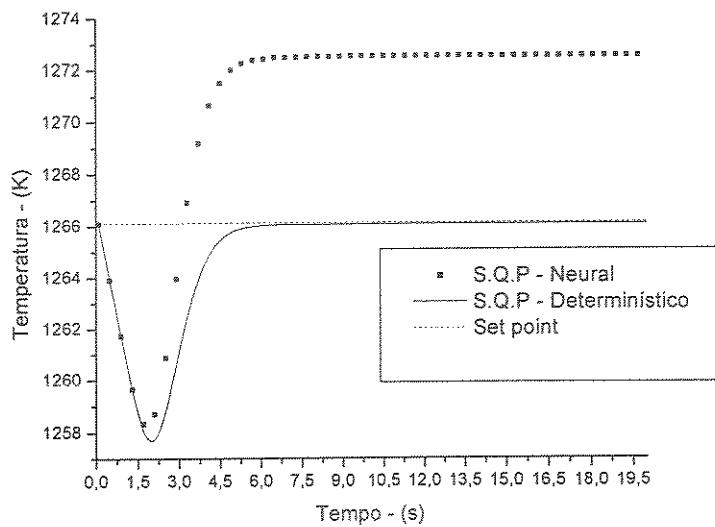


Figura 4.43 - Efeito do otimizador para o caso 7.

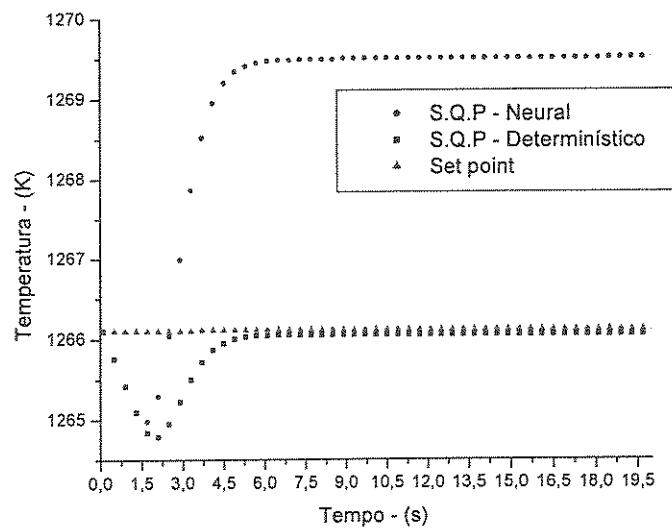


Figura 4.44 - Efeito do otimizador para o caso 8.

Comparando as Figuras 4.37 a 4.44, nota-se que a rede neural deixa um pseudo “offset” no processo. Mas esta diferença em relação ao “set point” é muito pequena e o controlador rapidamente faria o processo convergir para o estado estacionário projetado. O

objetivo deste otimizador é calcular os parâmetros operacionais que minimizem o consumo de combustível, respeitando as restrições ambientais e operacionais, assim como reduzir a amplitude das oscilações decorrentes de perturbações. Com isso tem-se um processo mais estável, mais seguro e financeiramente mais econômico.

4.8 Controle do processo

Cabe neste instante relembrar que a escolha da temperatura de saída dos gases de combustão deu-se por critérios técnicos. Este parâmetro é a referência de que a combustão está ocorrendo de maneira adequada, assim como garante-se a integridade física do equipamento. Sob o foco financeiro, quanto menores as oscilações da temperatura, maior é a economia com o combustível auxiliar.

O comportamento dinâmico da temperatura é avaliado para perturbações nas variáveis de entrada com os controladores propostos para este trabalho. Além da temperatura, as ações de controle também serão apresentadas. Esta informação mostra como a vazão de combustível, variável controlada, comporta-se. Portanto, tem-se uma dimensão de qual controlador é mais eficiente no que diz respeito ao consumo de combustível. A integridade da válvula não é variável econômica predominante neste processo, por isso não é levada em consideração para as análises.

Os controladores são comparados aos pares (ex. GPC e DMC), ou por categoria (ex. lineares e não lineares). Desta forma, é possível acompanhar as características de cada um sem que os gráficos fiquem visualmente poluídos, já que tem-se cinco tipos controladores em análise.

Como é sabido, os poderes caloríficos e as vazões de alimentação do resíduo sólido não são monitoradas em linha para fornos rotativos incineradores. Esta automação seria bastante complexa e pouca informação até o momento tem-se para que justifique-se economicamente sua implementação. Porém, para cada mudança de lote estas informações são atualizadas no sistema, é neste instante que esta estratégia entra em ação. Uma vez que nestes momentos as maiores perturbações ocorrem, a metodologia desenvolvida tem espaço

para aplicação. Por sua vez as vazões de combustível e ar secundário são, na sua grande maioria, monitoradas em linha.

Os controladores preditivos foram parametrizados manualmente, por tentativa e erro, para +10% de perturbação na vazão de ar secundário. O PID foi parametrizado usando a técnica de Ziegler-Nichols para a mesma perturbação usada nos controladores preditivos.

Seguem os parâmetros usados:

Tabela 4.33 - Parâmetros do PID.

| Parâmetro | Valor |
|-----------|-------|
| K_c | 0,85 |
| τ_D | 0,10 |
| τ_I | 100 |

Tabela 4.34 - Parâmetros dos controladores preditivos.

| Parâmetro | Controlador | | | |
|------------------------------|-------------|-------|-------|-------|
| | DMC | GPC | NMPC | NGPC |
| α – equação 2.36 | 0,50 | 0,50 | 0,50 | 0,50 |
| λ – equação 2.34 | 1,0 | 1,0 | 1,0 | 1,0 |
| γ – equação 2.34 | 5E-07 | 1E-05 | 5E-06 | 1E-04 |
| Horizonte de controle | 3 | 3 | 3 | 3 |
| Horizonte de predição | 30 | 10 | 10 | 10 |
| Freqüência de amostragem (s) | 1,0 | 0,10 | 1,0 | 1,0 |

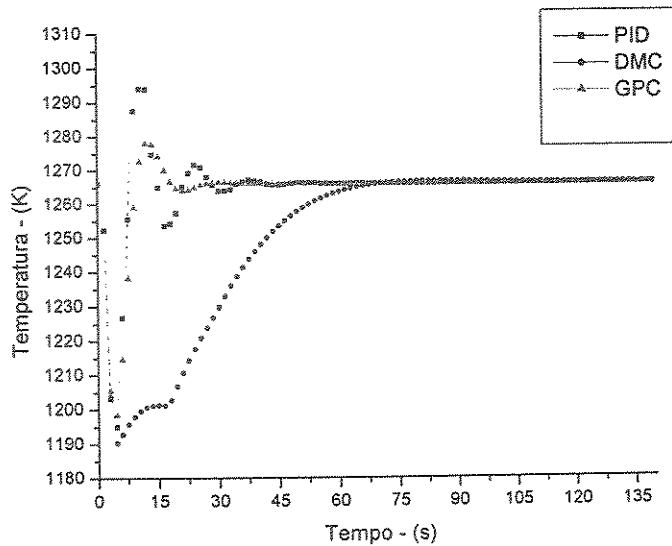


Figura 4.45 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de +10% na vazão do ar secundário.

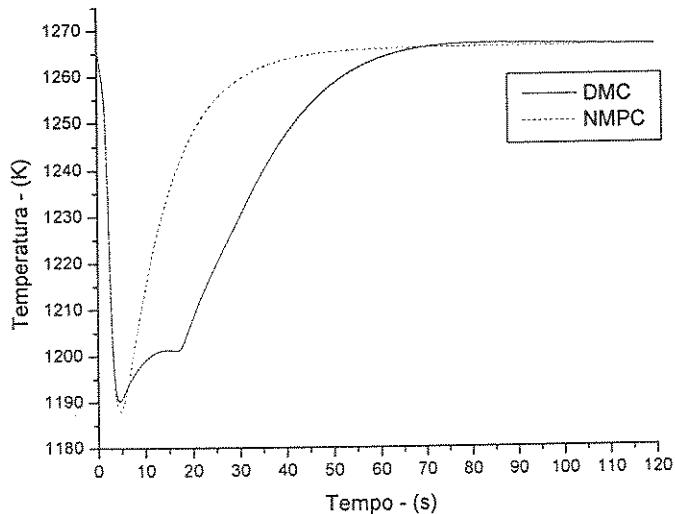


Figura 4.46 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de +10% na vazão do ar secundário.

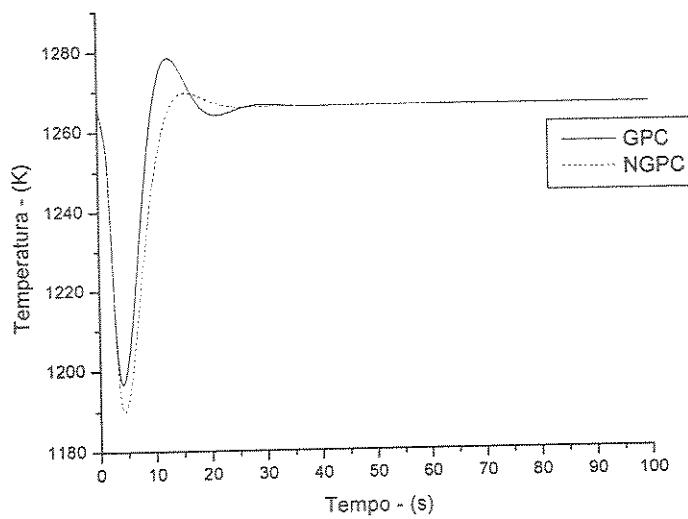


Figura 4.47 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de +10% na vazão do ar secundário.

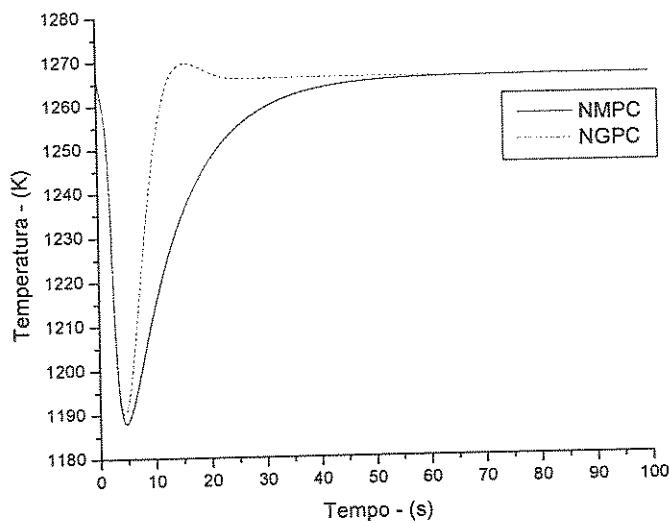


Figura 4.48 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de +10% na vazão do ar secundário.

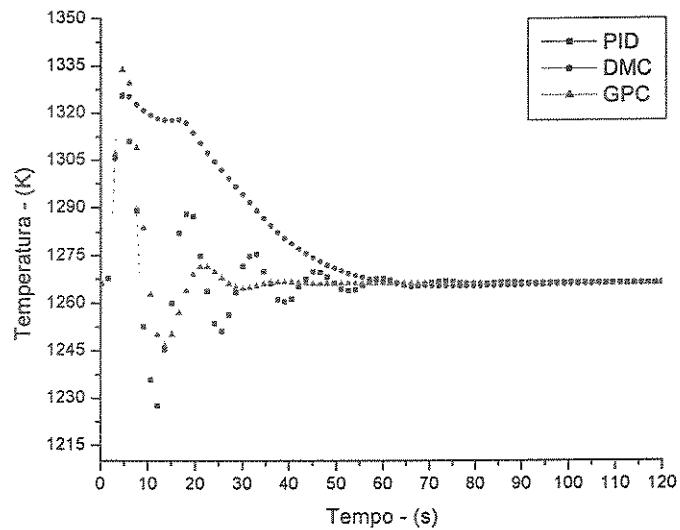


Figura 4.49 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de +10% na vazão de combustível.

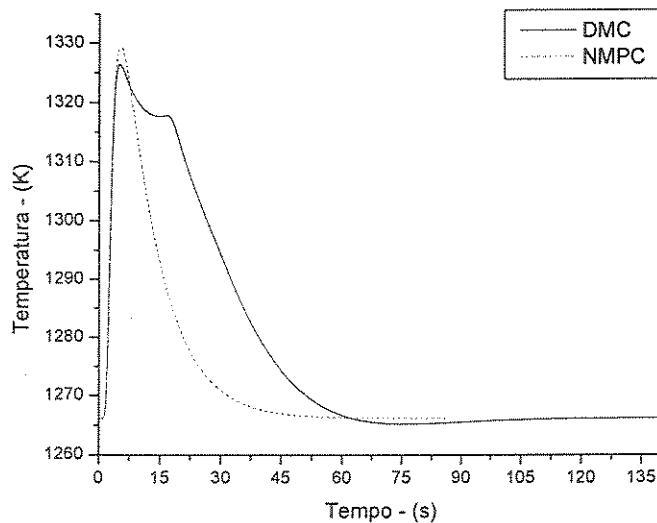


Figura 4.50 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de +10% na vazão de combustível.

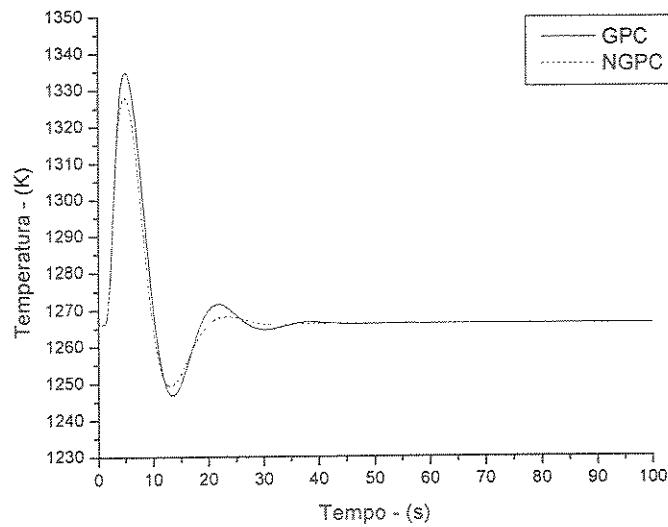


Figura 4.51 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de +10% na vazão de combustível.

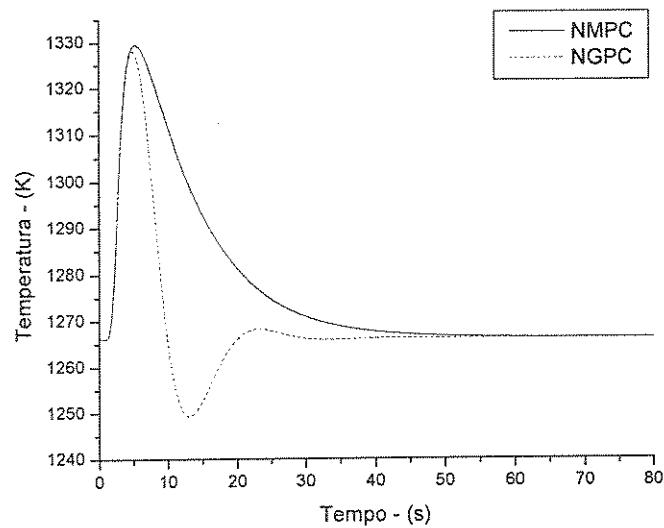


Figura 4.52 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de +10% na vazão de combustível.

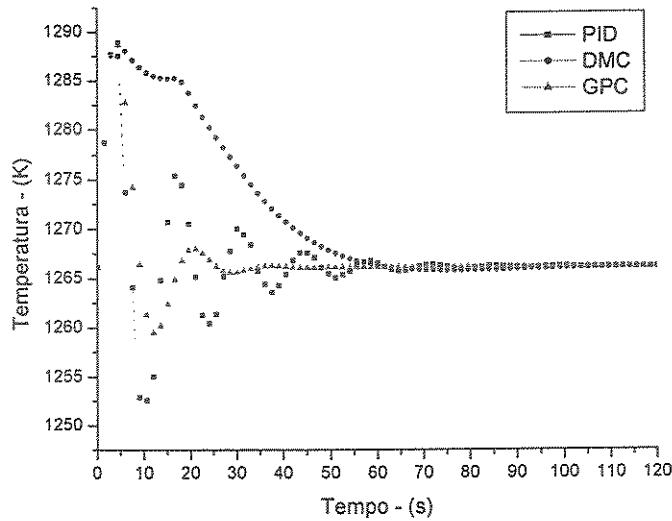


Figura 4.53 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de +10% na vazão de resíduo sólido.

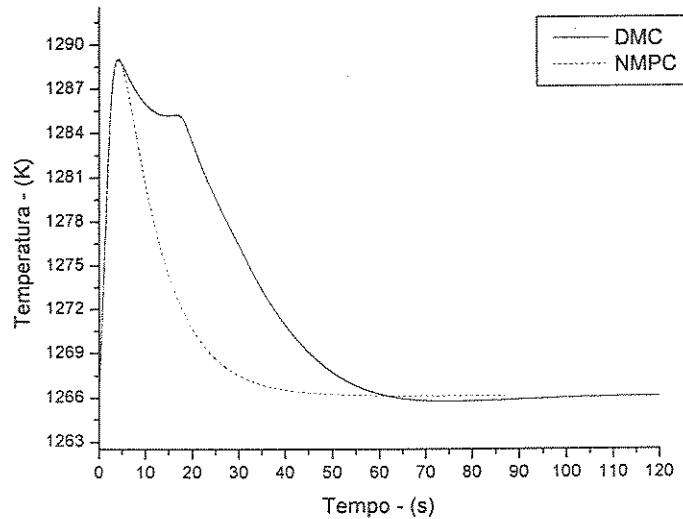


Figura 4.54 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de +10% na vazão de resíduo sólido.

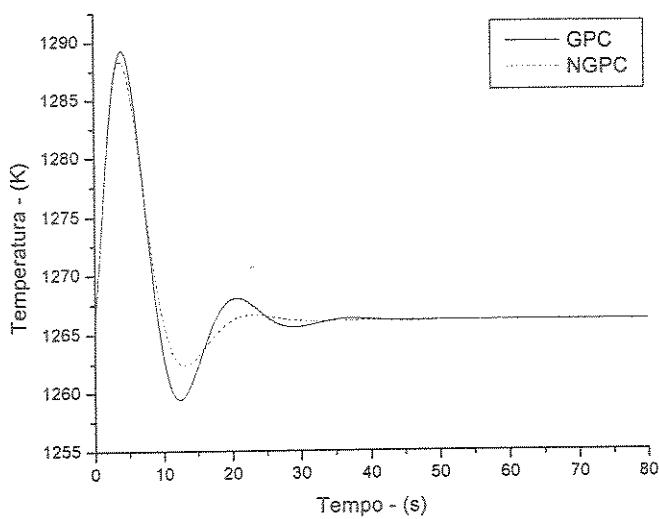


Figura 4.55 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de +10% na vazão de resíduo sólido.

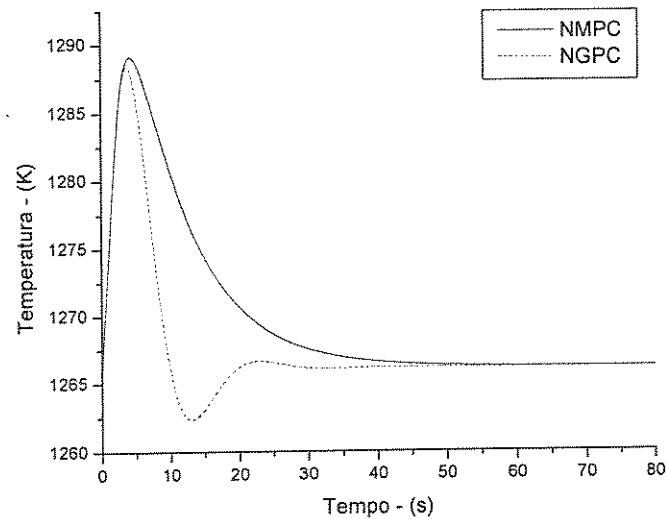


Figura 4.56 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de +10% na vazão de resíduo sólido.

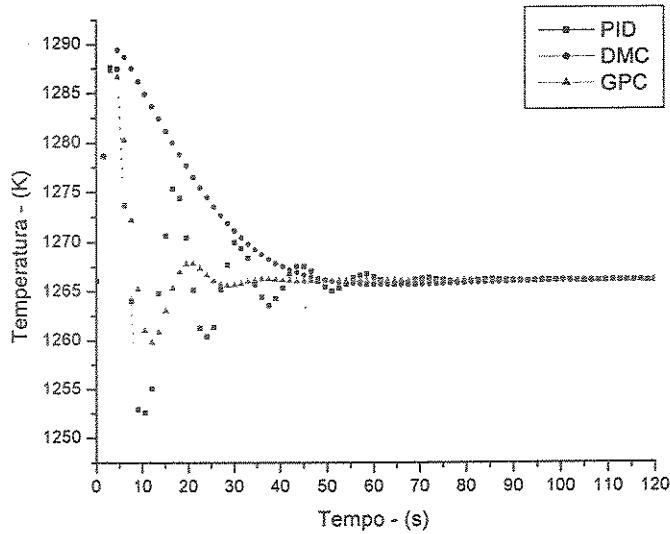


Figura 4.57 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de +10% no poder calorífico do resíduo sólido.

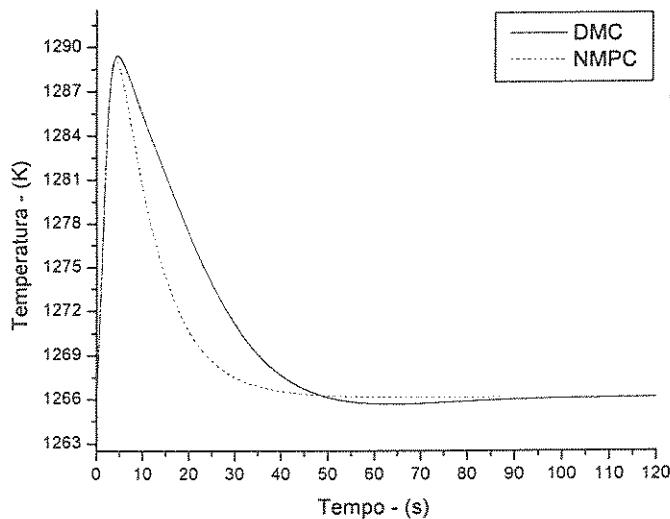


Figura 4.58 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de +10% no poder calorífico do resíduo sólido.

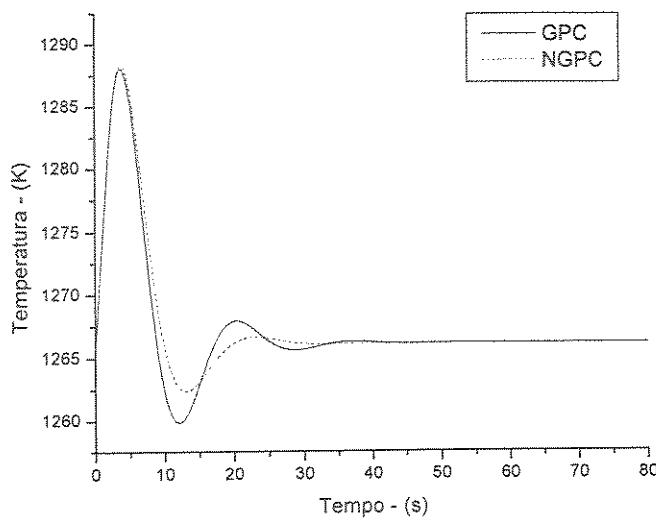


Figura 4.59 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de +10% no poder calorífico do resíduo sólido.

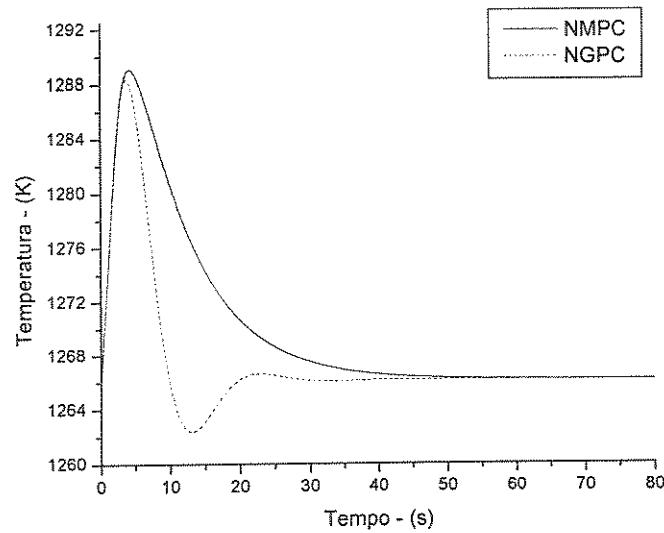


Figura 4.60 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de +10% no poder calorífico do resíduo sólido.

As performances dos controladores lineares (PID, DMC e GPC) são bem distintas. O PID apresenta as oscilações típicas, enquanto que os lineares preditivos eliminam este comportamento, ou minimizam bastante. Embora o tempo de estabilização do DMC seja pouco menor que o PID, a trajetória de controle é bem mais estável.

A resposta em malha aberta atinge o estado estacionário em pouco mais de 5 (cinco) segundos. Além disso, mesmo perturbando o processo em uma dada variável e usando o otimizador para calcular os parâmetros operacionais ótimos, o processo oscila e depois atinge o estado estacionário. Este comportamento pode ser observado no item anterior, já que mesmo atingindo o “set point” a trajetória é semelhante a de uma perturbação com posterior ação de controle. Por estas razões o DMC não foi consideravelmente melhor que o PID.

Por sua vez o GPC tem uma trajetória bastante suave e estabiliza o processo em quase 50% a menos do tempo do PID. Isto se deve ao fato que o GPC permite amostrar com mais freqüência o processo, pois não depende de tantos dados da planta, como faz-se obrigatório para modelos de convolução. Neste tipo de controlador a dinâmica do processo é ajustada com os parâmetros de um modelo de primeira ordem com um tempo morto. Neste sentido pode manipular o tempo de amostragem e ponto de avaliação do processo a fim de obter-se o melhor modelo possível.

Dentre os controladores lineares o melhor desempenho foi o do GPC.

Comparando o DMC e o NMPC que têm a mesma estrutura, embora os modelos preditivos do processo sejam diferentes, os resultados não foram surpreendentes. O controlador não linear é mais eficiente no sentido de dirigir o processo para o “set point” em menos tempo. Este comportamento era esperado, uma vez que o NMPC usa um modelo preditivo não linear, ou seja, sua fonte preditora do processo é mais precisa.

As mesmas observações valem quando se compara o GPC com o NGPC, porém em menor amplitude. O efeito benéfico esperado de um modelo não linear do NGPC pouco trouxe de vantagens. Considerando que o tempo de processamento é razoavelmente maior para o NGPC, este não vale a pena nesta aplicação.

Os controladores não lineares são qualitativamente equivalentes no tocante a conduzir o processo para o estado estacionário. A pequena oscilação do NGPC anula sua

vantagem de reduzir a área da curva entre o pico do desvio e o “set point”. Este era um comportamento caso os modelos não lineares fossem igualmente capazes de predizer a dinâmica do processo.

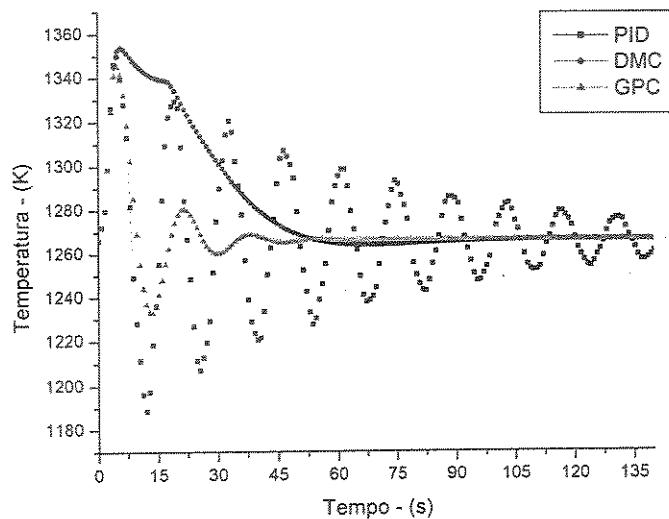


Figura 4.61 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de -10% na vazão do ar secundário.

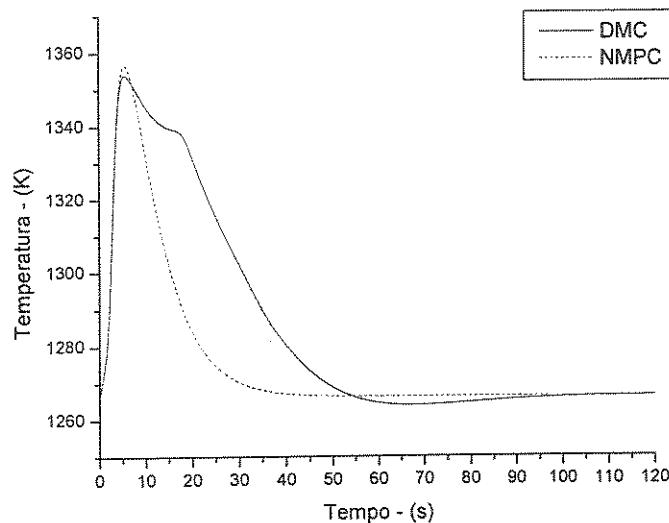


Figura 4.62 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de -10% na vazão do ar secundário.

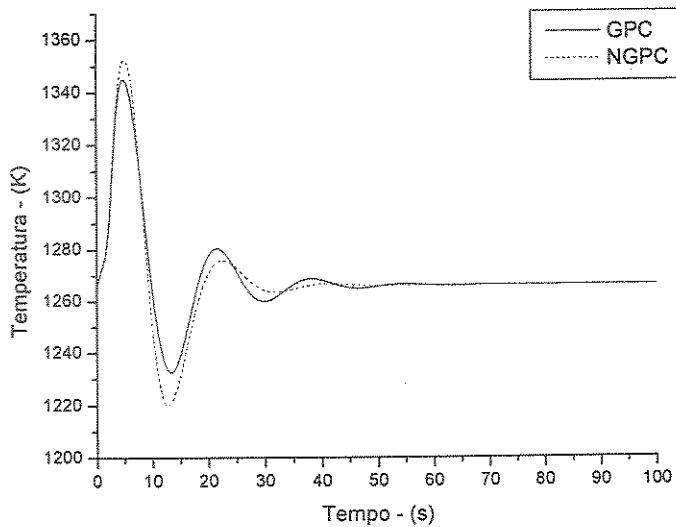


Figura 4.63 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de +10% na vazão do ar secundário.

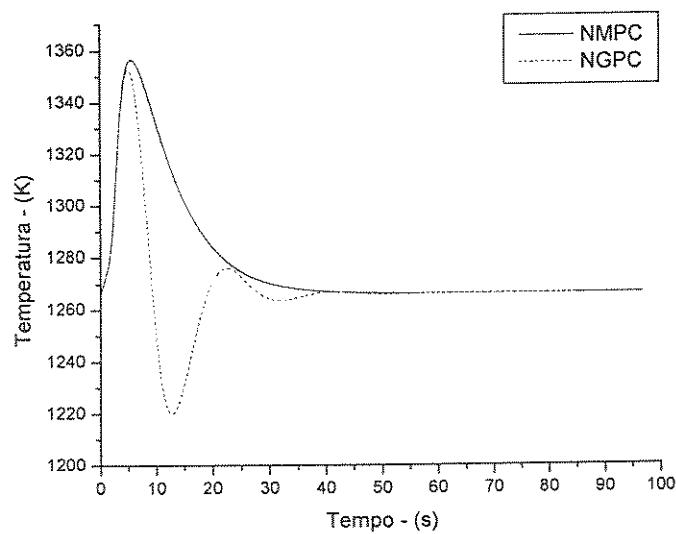


Figura 4.64 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de -10% na vazão do ar secundário.

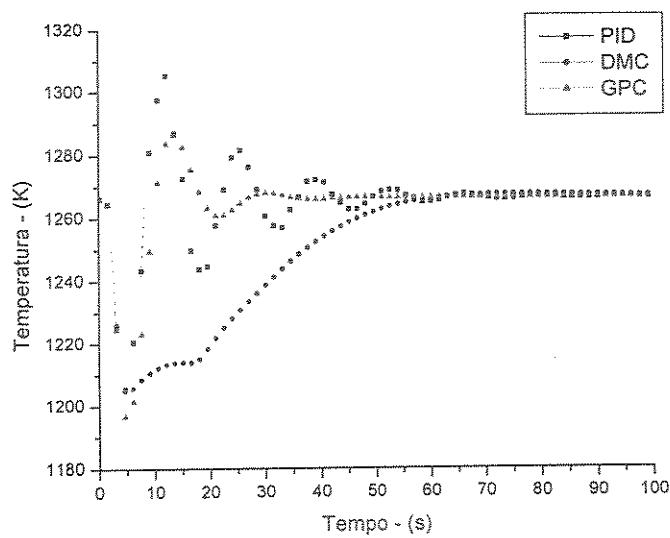


Figura 4.65 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de -10% na vazão de combustível.

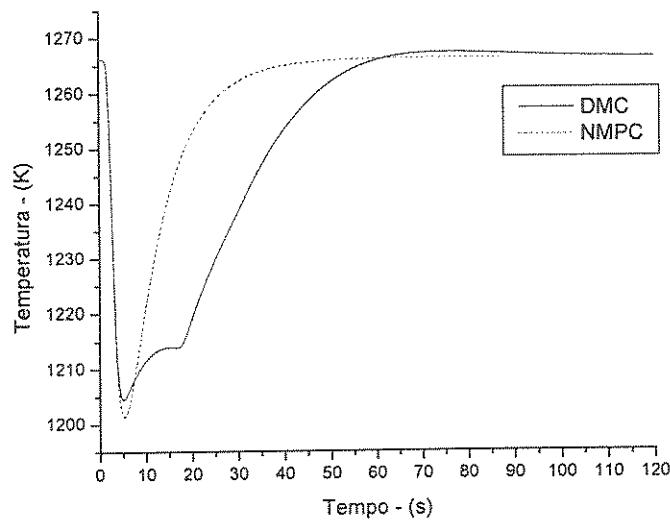


Figura 4.66 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de -10% na vazão de combustível.

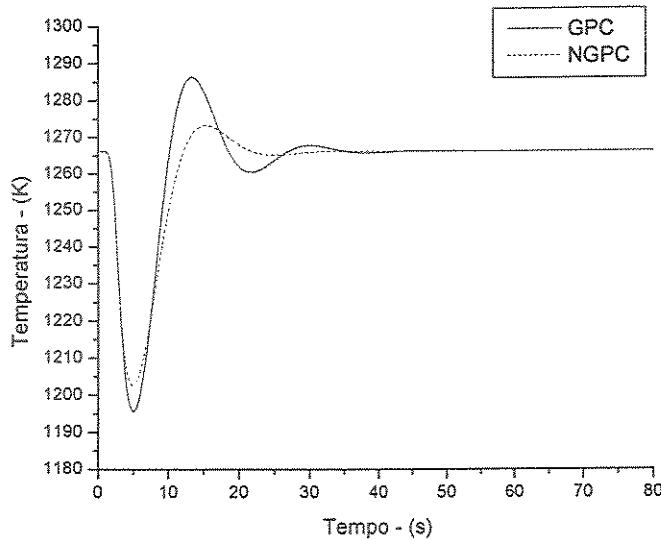


Figura 4.67 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de -10% na vazão de combustível.

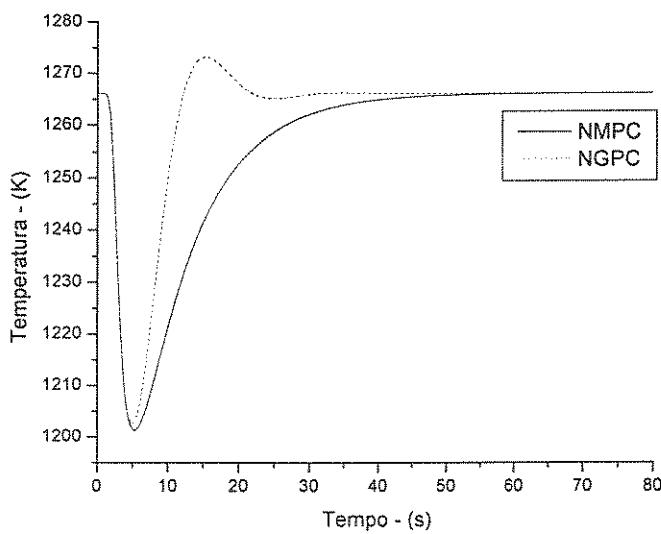


Figura 4.68 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de -10% na vazão de combustível.

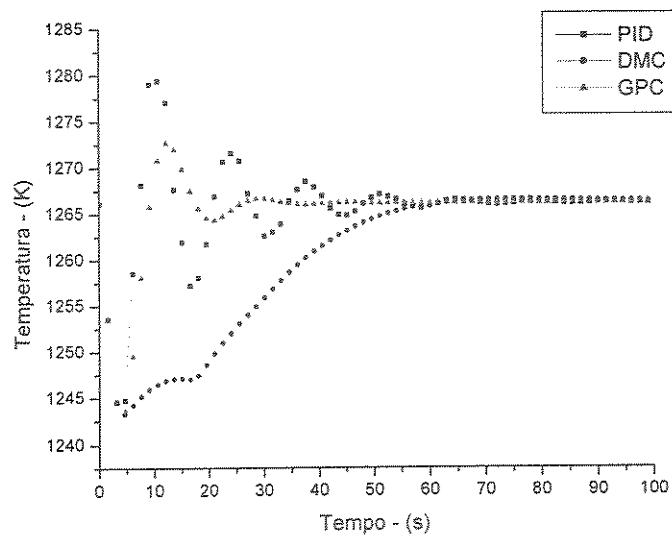


Figura 4.69 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de -10% na vazão de resíduo sólido.

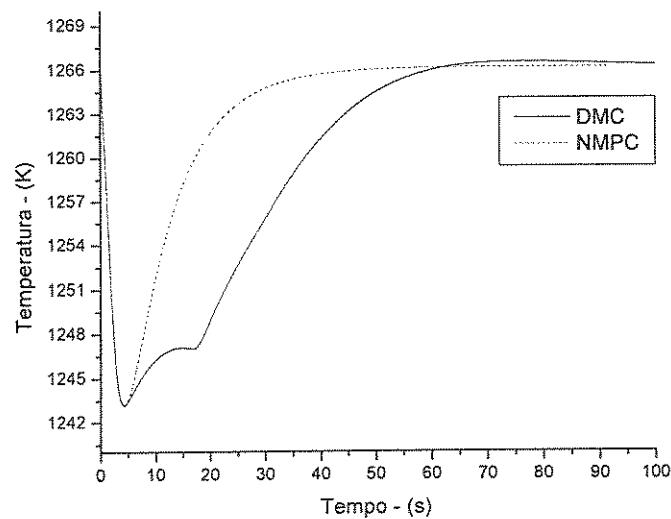


Figura 4.70 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de -10% na vazão de resíduo sólido.

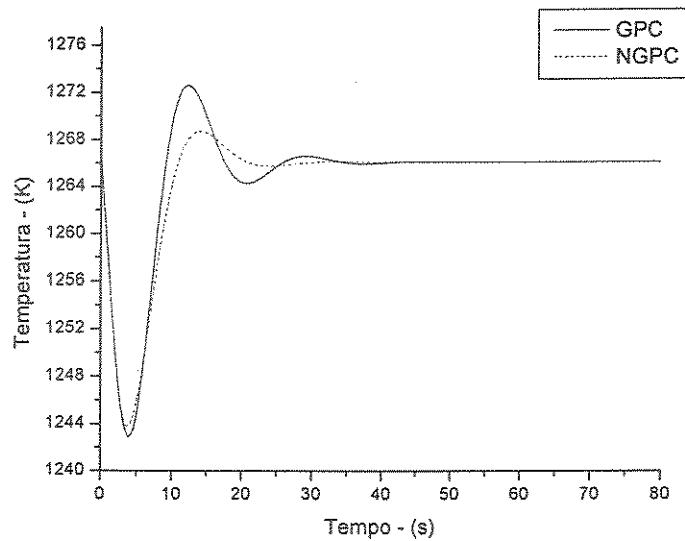


Figura 4.71 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de -10% na vazão de resíduo sólido.

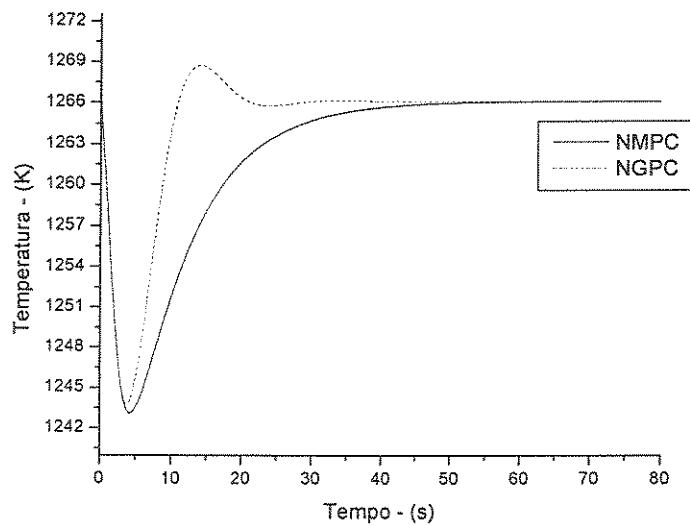


Figura 4.72 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de -10% na vazão de resíduo sólido.

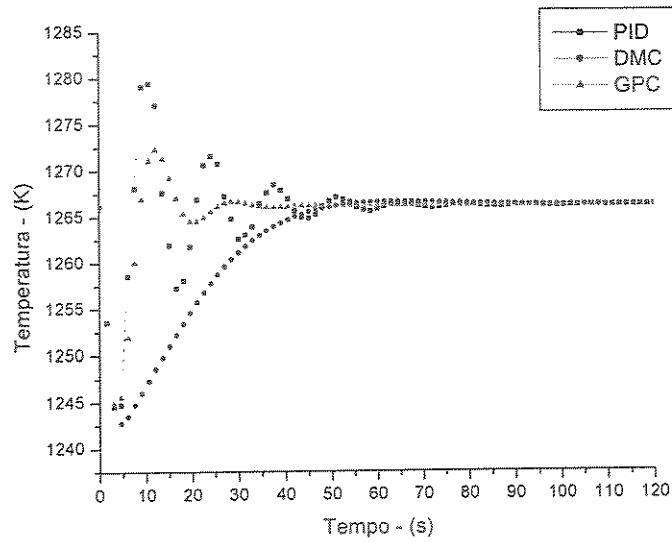


Figura 4.73 - Comparativo entre as atuações do PID, DMC e GPC para perturbação degrau de -10% no poder calorífico do resíduo sólido.

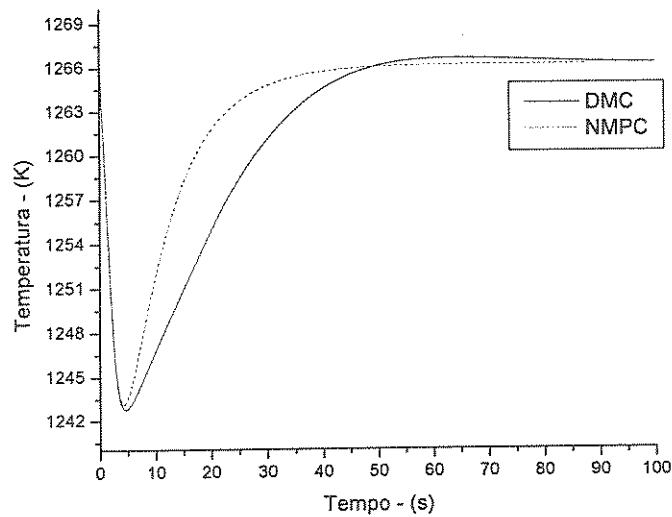


Figura 4.74 - Comparativo entre as atuações do DMC e NMPC para perturbação degrau de -10% no poder calorífico do resíduo sólido.

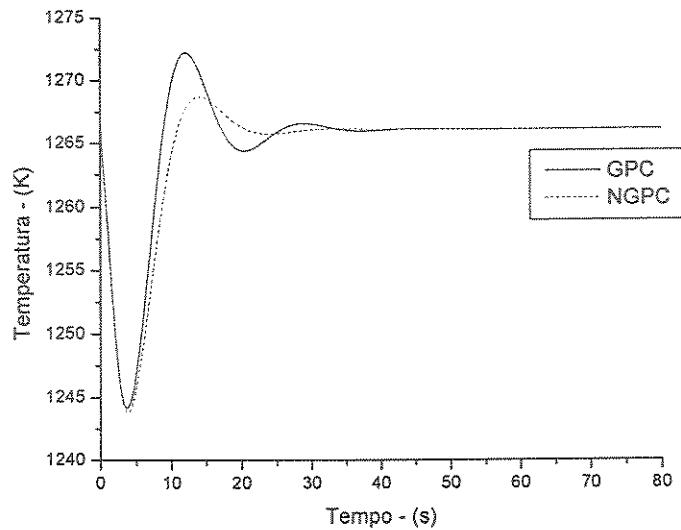


Figura 4.75 - Comparativo entre as atuações do GPC e NGPC para perturbação degrau de -10% no poder calorífico do resíduo sólido.

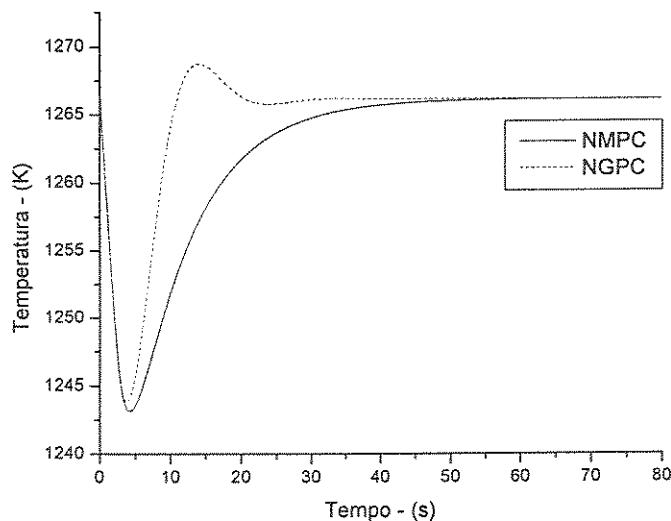


Figura 4.76 - Comparativo entre as atuações do NMPC e NGPC para perturbação degrau de -10% no poder calorífico do resíduo sólido.

As Figuras 4.61 a 4.76 são réplicas das simulações contidas nas Figuras 4.45 a 4.60, cujos comentários já foram feitos. A diferença é que uma considera perturbação degrau de +10% e a outra -10 %.

As mesmas conclusões são válidas, pois os comportamentos são parecidos. As pequenas diferenças devem-se às não linearidades do processo, mas de modo geral a lógica foi a mesma para ambas as direções de perturbação.

A fim de avaliar a robustez dos controladores, uma seqüência de perturbações é proposta. Os resultados estão nas Figuras 4.77 a 4.79.

Tabela 4.35 - Seqüência proposta de perturbações.

| Instante (s) | Ar secundário (kg/s) | Resíduo sólido (kg/s) | Poder calorífico (kcal/kg) |
|--------------|----------------------|-----------------------|----------------------------|
| 0 | 2,915 | 0,25 | 350000 |
| 10 | 2,65 | 0,275 | 350000 |
| 20 | 2,65 | 0,25 | 297500 |
| 30 | 2,65 | 0,275 | 380000 |

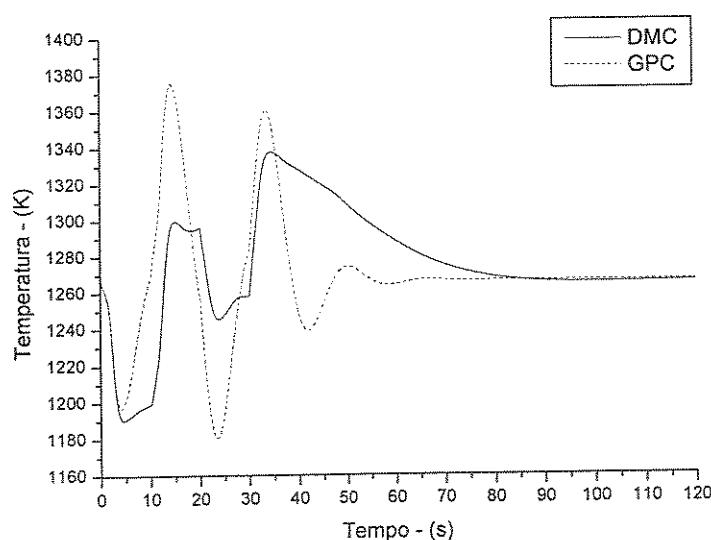


Figura 4.77 - Performance do DMC e GPC.

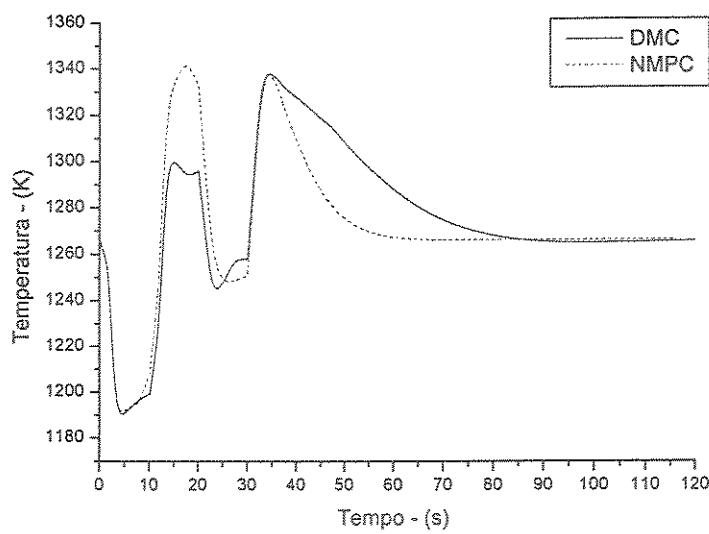


Figura 4.78 - Performance do DMC e NMPC.

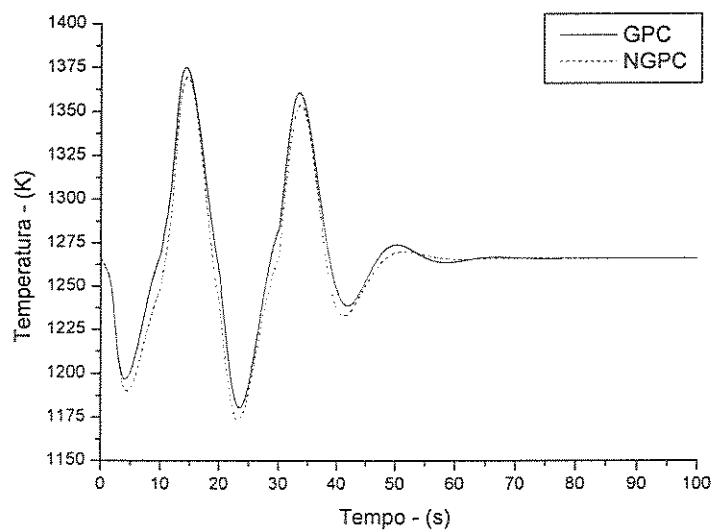


Figura 4.79 - Performance do GPC e NGPC.

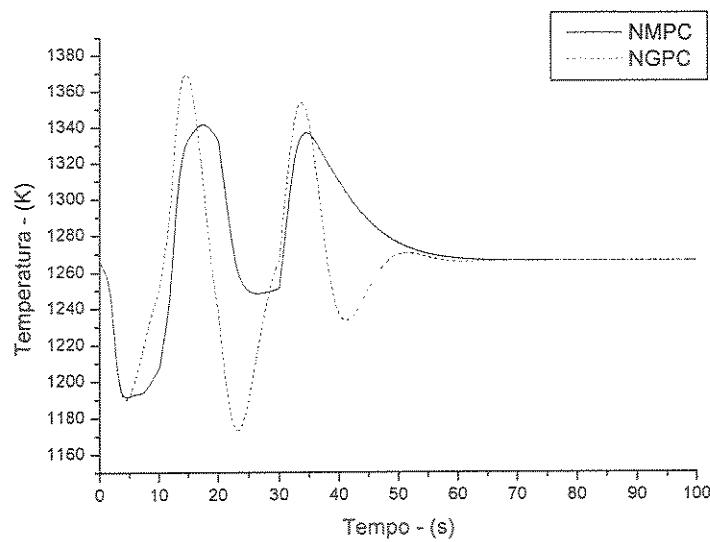


Figura 4.80 - Performance do NMPC e NGPC.

Outro aspecto importante na ação dos controladores é observar com a variável controlada comporta-se mediante o PID, DMC, GPC, NMPC ou NGPC. As figuras a seguir mostram este comportamento para diferentes tipos de perturbações.

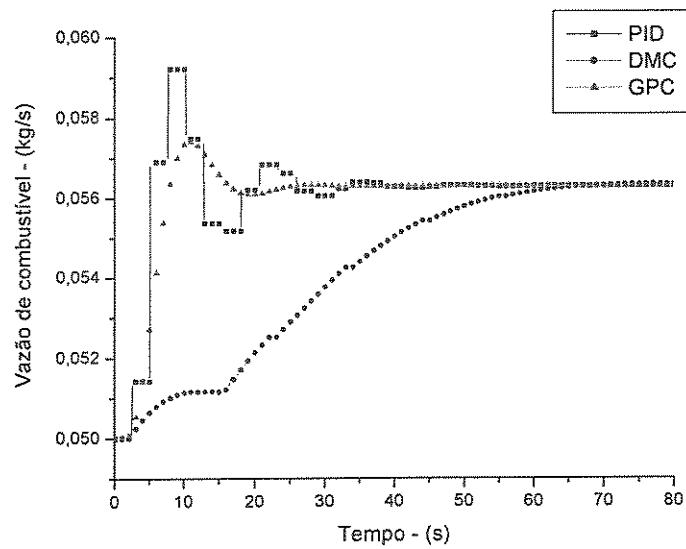


Figura 4.81 - Comportamento da variável manipulada para perturbação tipo rampa de +10 % na vazão de ar secundário mediante ação do PID, DMC e GPC.

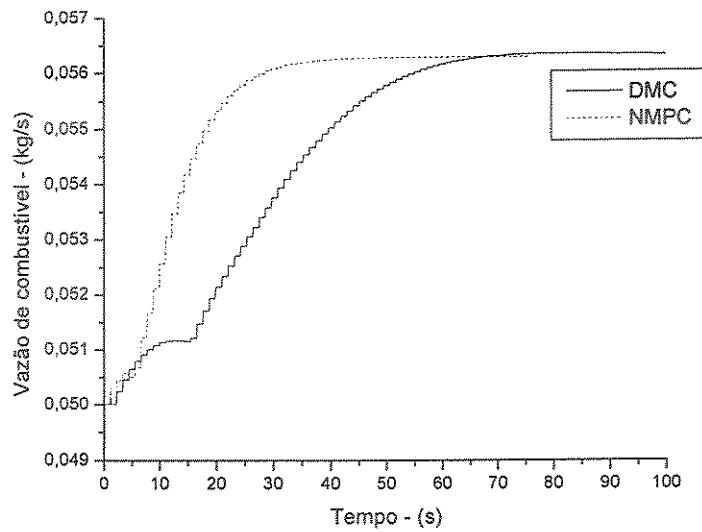


Figura 4.82 - Comportamento da variável manipulada para perturbação tipo rampa de +10 % na vazão de ar secundário mediante ação do DMC e NMPC.

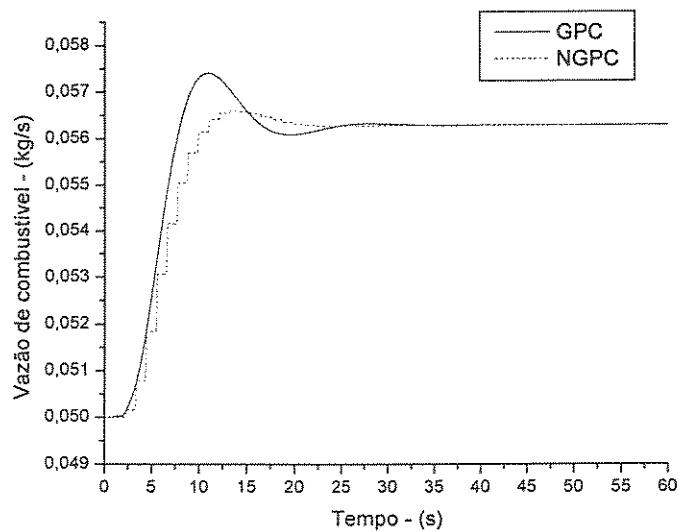


Figura 4.83 - Comportamento da variável manipulada para perturbação tipo rampa de +10 % na vazão de ar secundário mediante ação do GPC e NGPC.

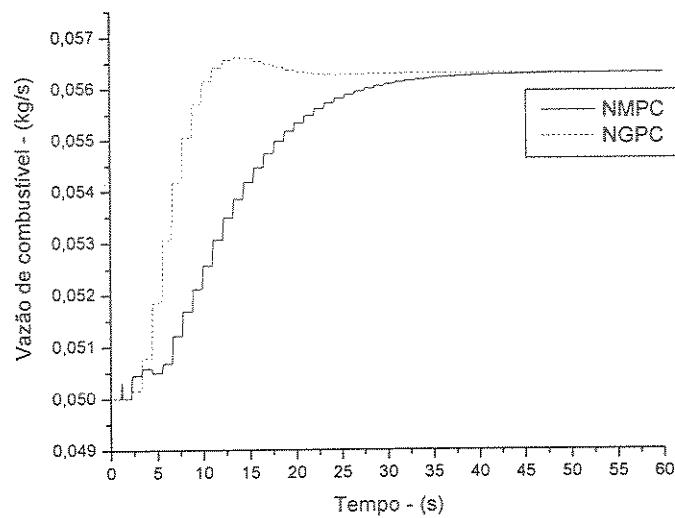


Figura 4.84 - Comportamento da variável manipulada para perturbação tipo rampa de +10 % na vazão de ar secundário mediante ação do NGPC e NMPG.

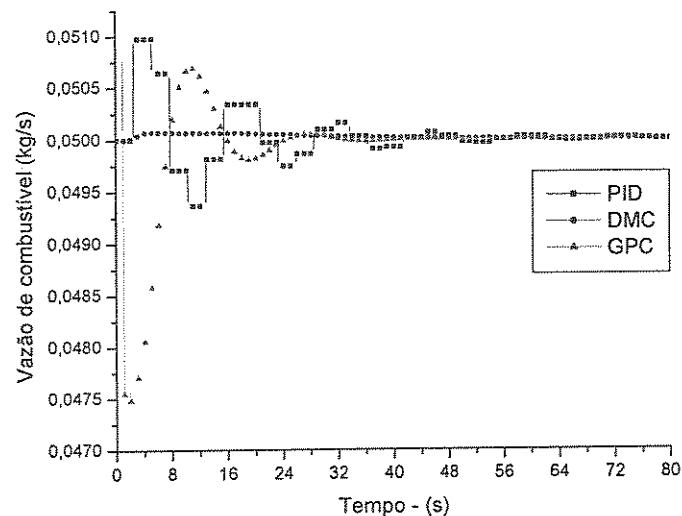


Figura 4.85 - Comportamento da variável manipulada para perturbação tipo pulso de +10 % na vazão de ar secundário mediante ação do PID, DMC e GPC.

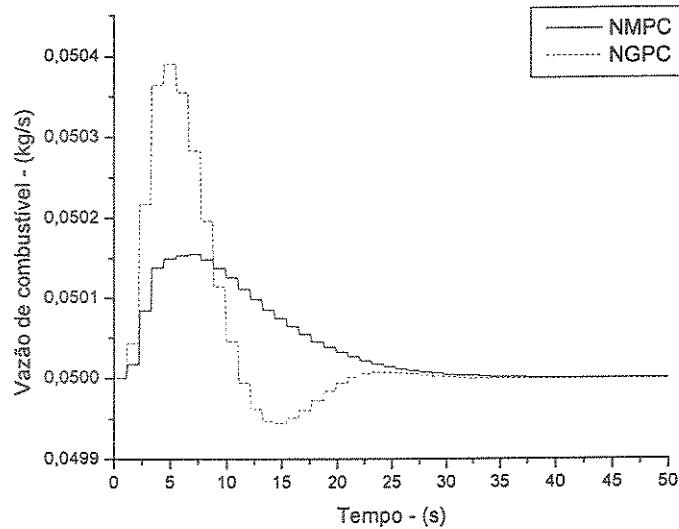


Figura 4.86 - Comportamento da variável manipulada para perturbação tipo pulso de +10 % na vazão de ar secundário mediante ação do NMPC e NGPC.

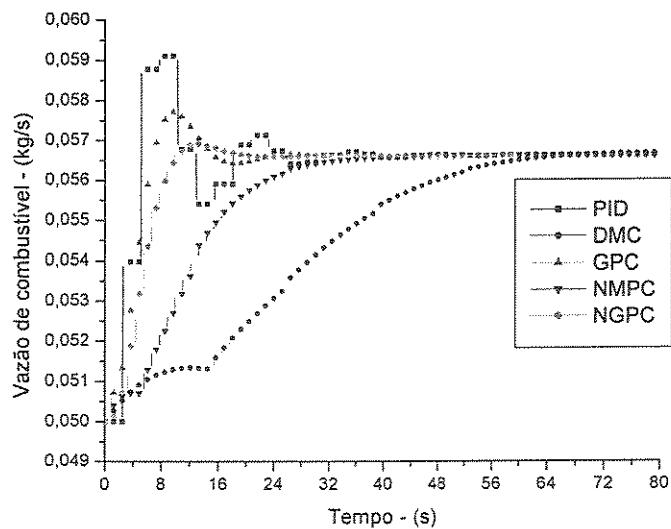


Figura 4.87 - Comportamento da variável manipulada para perturbação tipo pulso de +10 % na vazão de ar secundário mediante ação do PID, DMC, GPC, NMPC e NGPC.

Para as perturbações tipo degrau e rampa a variável manipulada, comportou-se como a variável de saída controlada. O PID oscila mais que os controladores preditivos e os não lineares preditivos são melhores que os lineares. Melhor no sentido de atingir o patamar de operação indicado mais rapidamente.

Quando o sistema foi submetido a uma perturbação pulso, apenas o DMC identificou a dinâmica com precisão tal que computou que nenhum cálculo precisaria ser feito.

Sobre as estratégias de controle pode-se afirmar que para o incinerador tipo forno rotativo o mais indicado, para atuar em tempo real, é o GPC. Exceção a esta regra dá-se para perturbações pulsos, porém é muito provável que este mau funcionamento esteja relacionado com um melhor ajuste de parâmetro para esta situação, ou mudar o tempo de inicial de atuação na lei de controle da função objetivo do controlador.

4.9 Integração em tempo real

Neste item o conjunto da obra vai ser posta em julgamento. Todos os módulos sendo executados e geridos por um software de integração. Os cálculos devem ser executados em tempo real, sem que haja interferência na performance entre as parte.

Inicialmente o módulo de otimização não fará parte de estrutura de integração. Uma série de perturbações serão introduzidas ao sistema a fim de comparar qual a melhor estrutura de integração para este caso. Conforme já havia sido afirmado, e por razões já esclarecidas, o planejamento e controle da produção trabalha separado.

Em uma segunda estrutura hierárquica de integração, o otimizar entra no sistema como a camada que oferece os melhores parâmetros operacionais. O objetivo é fazer com que a temperatura de saída dos gases sofra menos desvios em relação ao “set point”. Em incineradores de resíduos sólidos esta condição é especialmente importante, pois a temperatura é que garante a destruição térmica. Pelo lado econômico quanto menos oscilações o processo sofrer reduz-se o consumo de combustível auxiliar, principal componente no custo operacional.

A tabela abaixo mostra a variável perturbada, a intensidade e o instante no tempo.

Tabela 4.36 - Perturbações impostas à estrutura de integração em tempo real.

| Variável | Instante (s) | Intensidade (%) |
|-----------------|--------------|-----------------|
| Pode calorífico | 5 | + 3 |
| Pode calorífico | 15 | - 2 |
| Pode calorífico | 25 | - 1 |
| Pode calorífico | 35 | + 2 |
| Pode calorífico | 45 | + 1,5 |

Baseado nos casos 1 e 3 (Tabela 4.28), mais as perturbações da Tabela 4.31 tem-se os seguintes resultados:

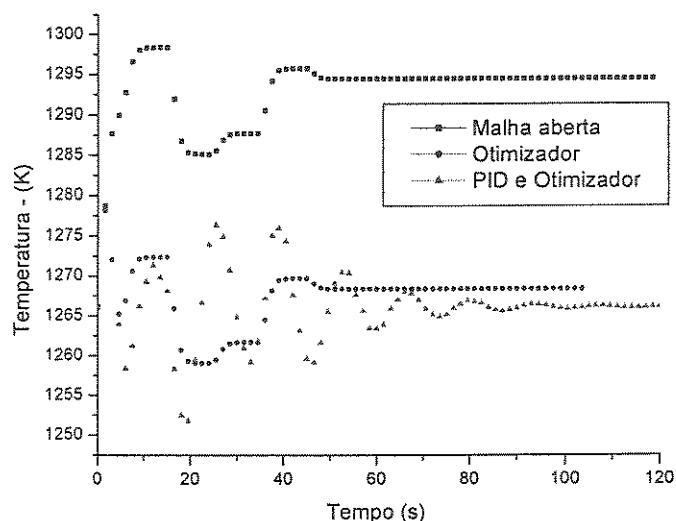


Figura 4.88 - Atuação do PID em comparação como o otimizador para o caso 1.

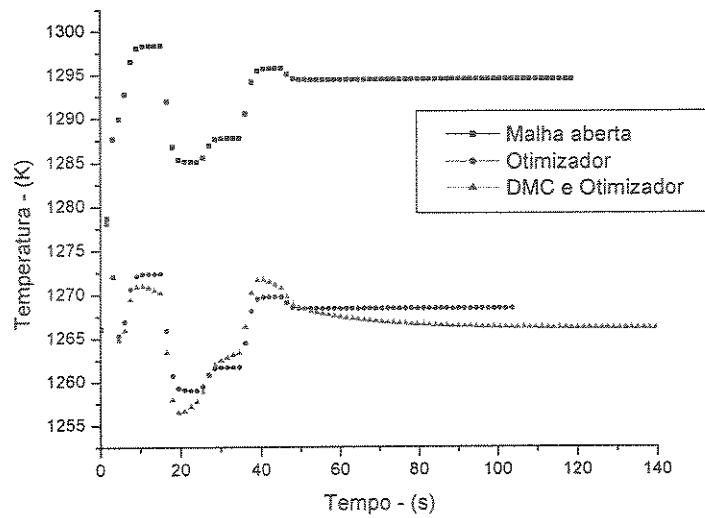


Figura 4.89 - Atuação do DMC em comparação como o otimizador para o caso 1.

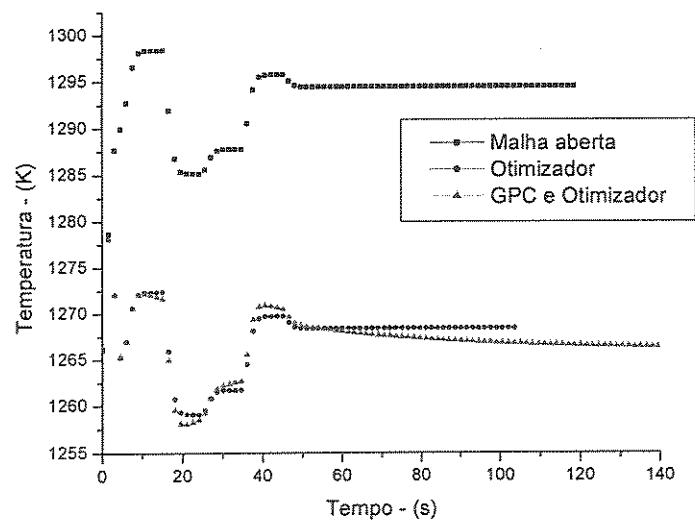


Figura 4.90 - Atuação do GPC em comparação como o otimizador para o caso 1.

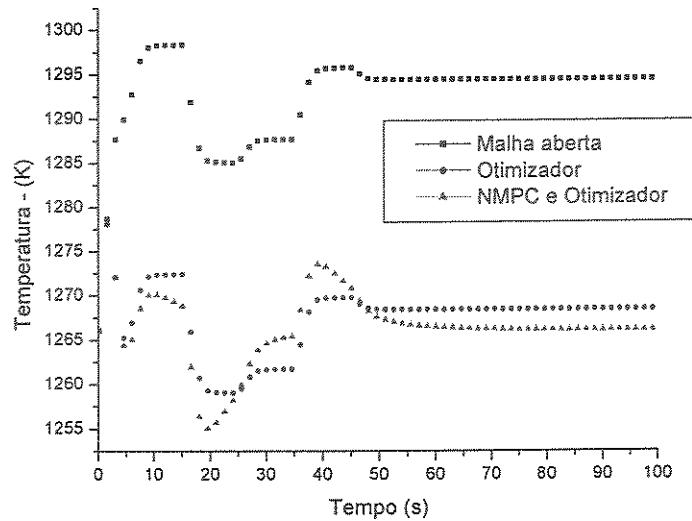


Figura 4.91 - Atuação do NMPC em comparação como o otimizador para o caso 1.

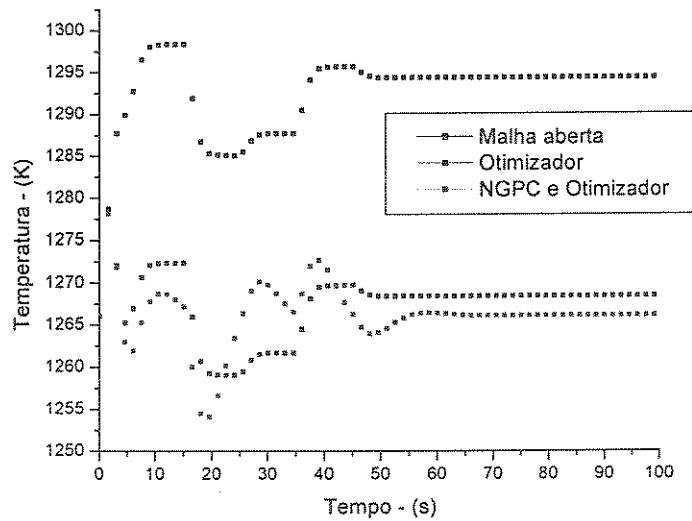


Figura 4.92- Atuação do NGPC em comparação como o otimizador para o caso 1.

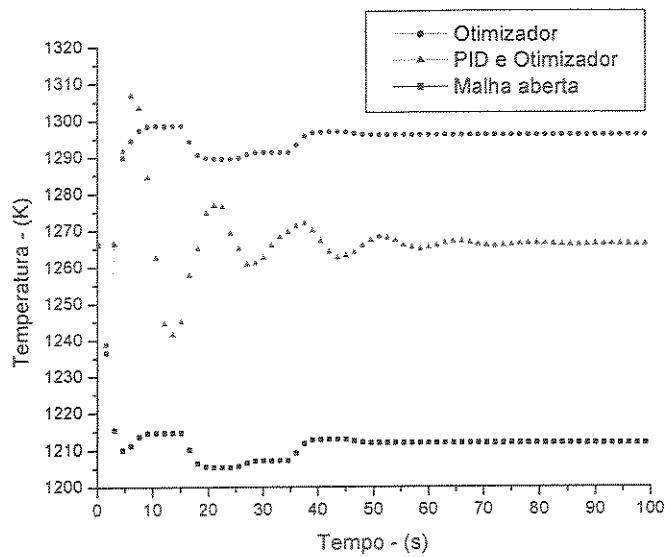


Figura 4.93 - Atuação do PID em comparação como o otimizador para o caso 3.

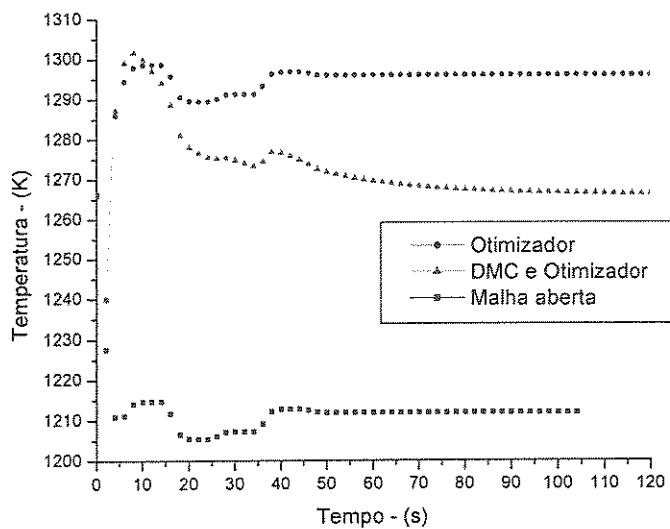


Figura 4.94 - Atuação do DMC em comparação como o otimizador para o caso 3.

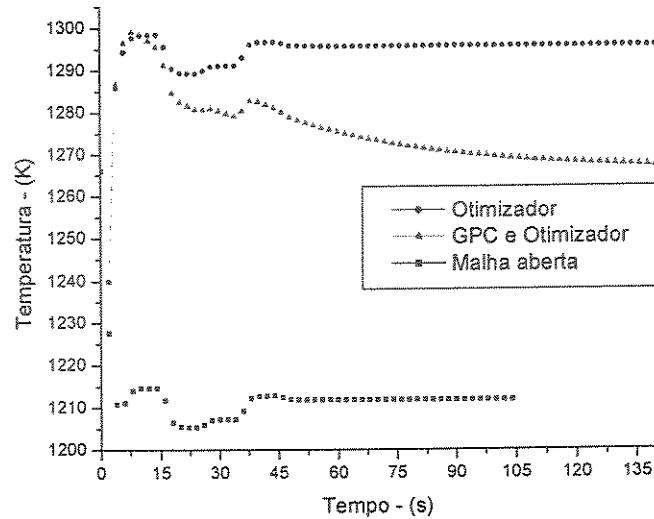


Figura 4.95 - Atuação do GPC em comparação como o otimizador para o caso 3.

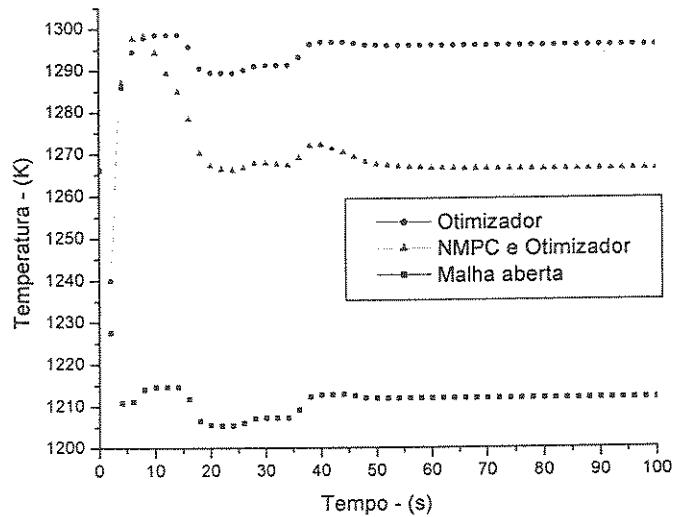


Figura 4.96 - Atuação do NMPC em comparação como o otimizador para o caso 3.

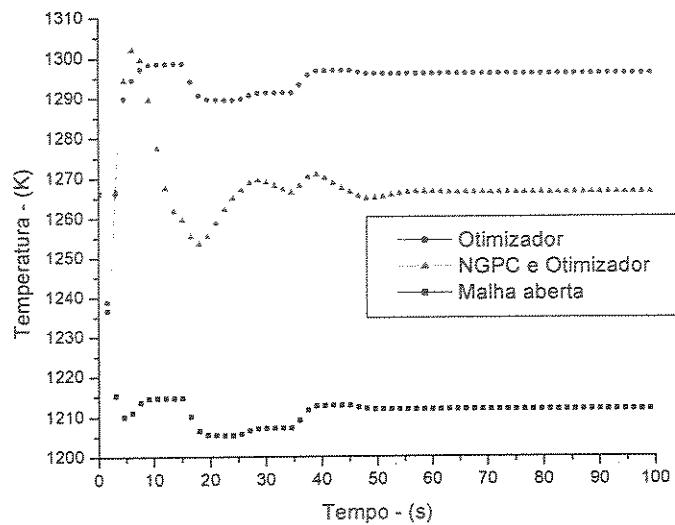


Figura 4.97 - Atuação do NGPC em comparação como o otimizador para o caso 3.

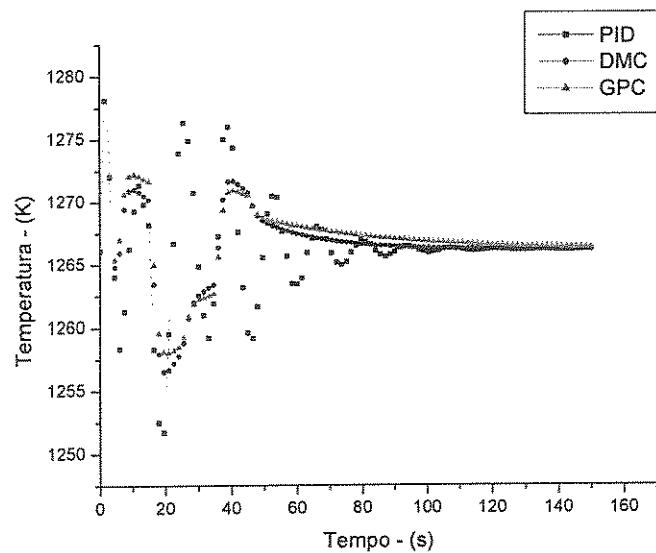


Figura 4.98 - Atuações comparativas entre o PID, DMC e GPC para o caso 1.

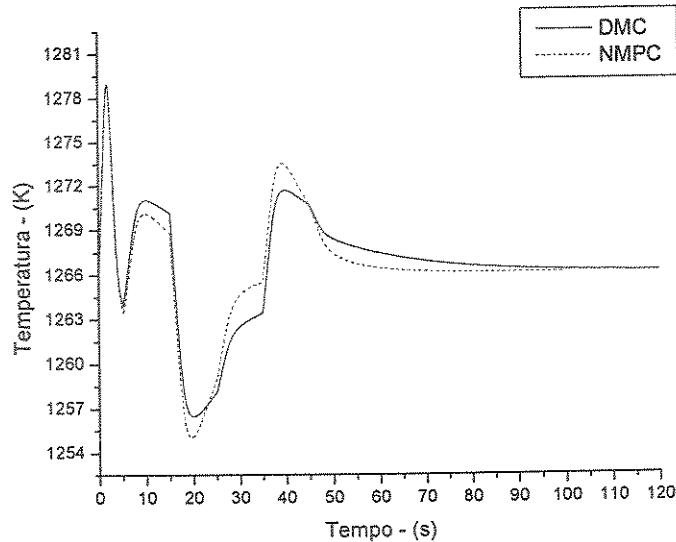


Figura 4.99 - Atuações comparativas entre o DMC e NMPC para o caso 1.

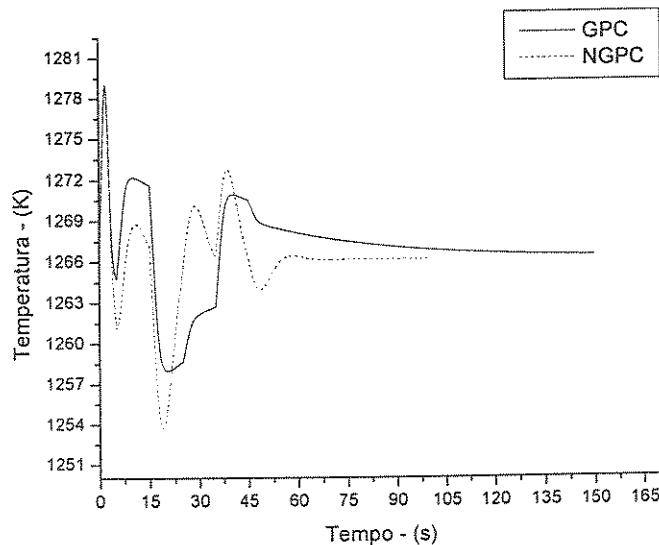


Figura 4.100 - Atuações comparativas entre o GPC e NGPC para o caso 1.

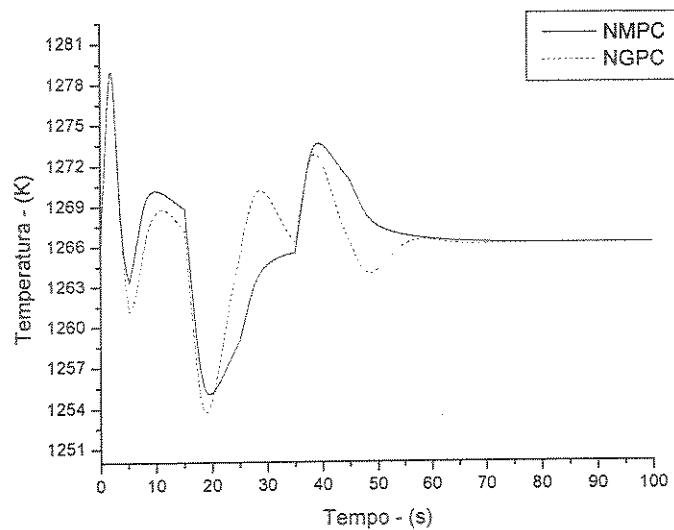


Figura 4.101 - Atuações comparativas entre o NMPC e NGPC para o caso 1.

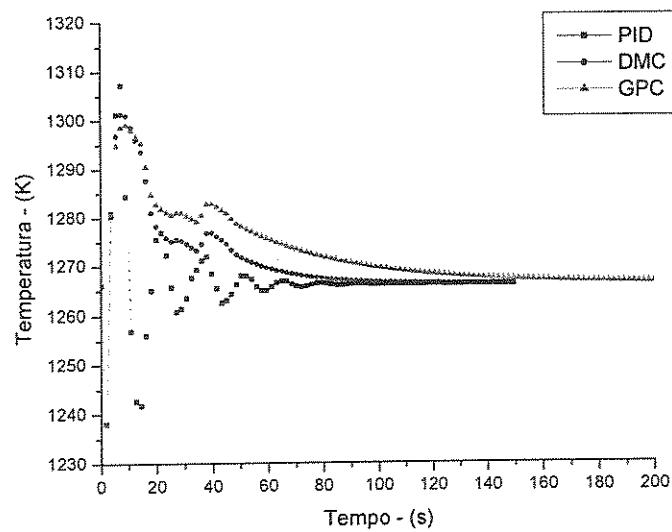


Figura 4.102 - Atuações comparativas entre o PID, DMC e GPC para o caso 3.

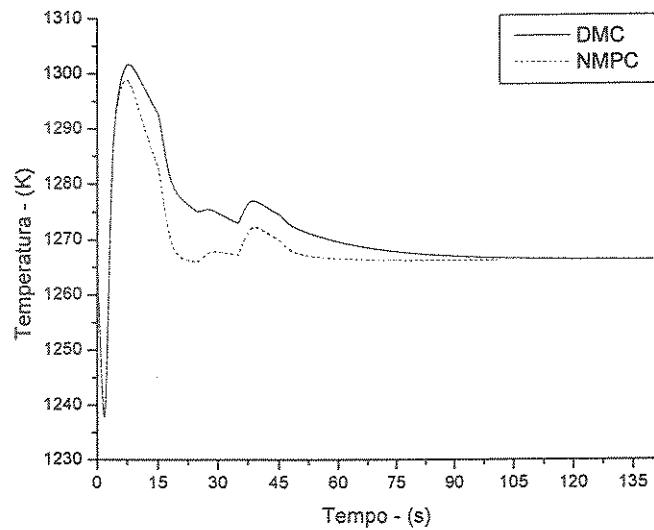


Figura 4.103 - Atuações comparativas entre o DMC e NMPC para o caso 3.

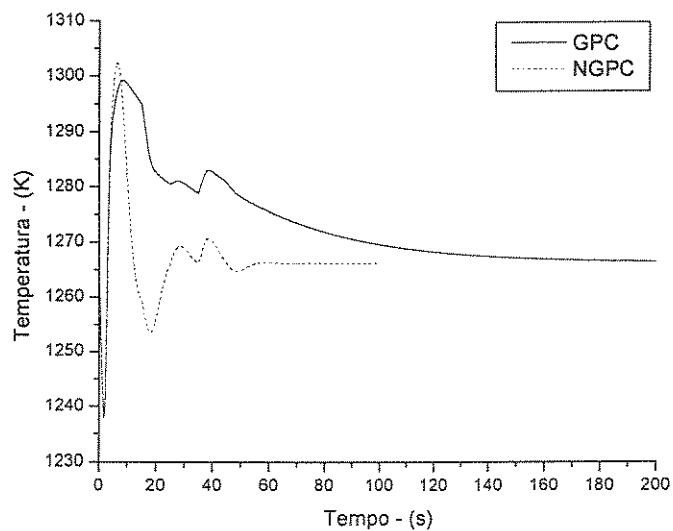


Figura 4.104 - Atuações comparativas entre o GPC e NGPC para o caso 3.

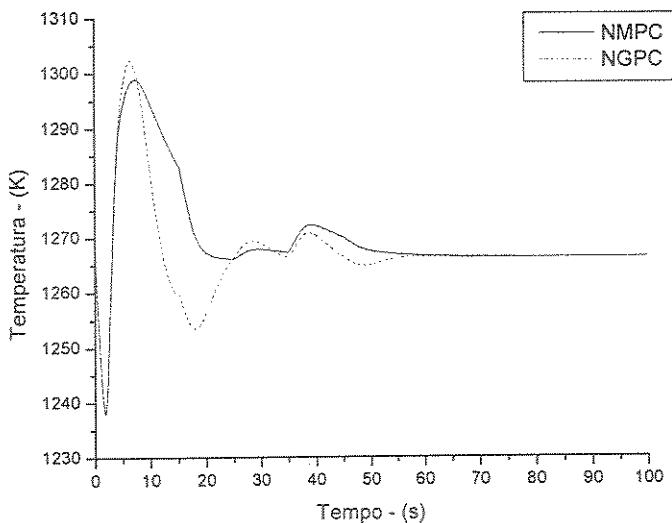


Figura 4.105 - Atuações comparativas entre o NMPC e NGPC para o caso 3.

As simulações conduzidas a partir das condições propostas na Tabela 4.31 põem a prova a estrutura de integração. Não apenas no sentido de análises de resultados, mas sim de verificar se o objetivo principal, integração em tempo real, foi atingido. Embora não tenha sido especificado o otimizador utilizado trabalha com o modelo neural e com um algoritmo tipo S.Q.P.

Discutir sobre os resultados não é mais necessário, pois as observações já foram feitas nos itens anteriores. Neste instante o importante é certificar-se que as simulações foram robustas e em tempo real. Em nenhum dos casos apresentados acima, independente do controlador usado, houve falha numérica. Isto permite concluir que o trabalho fornece uma ferramenta adequada para estudos da integração em tempo real do ponto de vista de estabilidade numérica. Basta verificar se os tempos computacionais de processamento numérico estão adequados. Este aspecto será abordado no item seguinte.

Para se testar uma estrutura complexa de integração em tempo real, diversas variáveis deveriam se levadas em consideração. Contudo, observou-se o comportamento da estrutura apenas para perturbações no poder calorífico do resíduo sólido. Escolheu-se esta variável por ser aquela que mais oscila em processos de incineração, ainda que sua análise em linha não seja atualmente disponível. Mas o foco é testar a metodologia e expandir a

aplicação deste trabalho para outros processos, assim como fornecer subsídios para automação da leitura desta variável. Além disso, como observou-se a atuação estável das demais perturbações possíveis, quando do estudo dos controladores, optou-se por não gerar um número exagerado de gráficos. Isto não contribuiria didaticamente na mesma proporção de sua quantidade.

4.10 Esforços computacionais

Para saber se de fato as propostas cumpriram com seus compromissos de atuarem em tempo real algumas simulações foram conduzidas. A tabela abaixo compara os tempos de execução para os diversos módulos. O computador usado foi um Pentium 933 MHz com 512 Mb de memória RAM.

Especialmente para os controladores este tempo deve ser o menor possível, já que sua ação convém que seja o mais rápido possível.

Tabela 4.37 - Tempo de processamento no equipamento de referência.

| Simulação | Tempo de processamento numérico(s) |
|---|------------------------------------|
| Ação do controlador DMC | 1.1718750E-02 |
| Ação do controlador GPC | 1.9531250E-02 |
| Ação do controlador NMPC | 0,92 |
| Ação do controlador NGPC | 1,96 |
| Ação do otimizador (S.Q.P – Neural) | 0,0195 |
| Ação do otimizador (S.Q.P – Determinístico) | 2,23 |
| Ação do otimizador (G.A – Neural) | 14,10 |
| Planejamento da produção | 0,0117 |

| | |
|--------------------------|-------|
| Processo (7 s do modelo) | 0,218 |
|--------------------------|-------|

Para os resultados acima usou-se uma perturbação degrau de +10 % na vazão de alimentação do ar secundário (estudo dos controladores) e o caso 2 (Tabela 4.31) para o otimizador.

Os controladores lineares, DMC e GPC, estão adequados ao escopo desta Tese, integração de processos químicos em tempo real. Na pior condição da perturbação de referência, imediatamente após esta, os controladores precisaram de frações de segundo para seus cálculos.

O mesmo não é verdadeiro para os controladores não lineares, especialmente o NGPC. Um segundo de processamento numérico para obtenção das ações de controle para este processo não é suficiente em função dos tempos de resposta já estudados. Provavelmente o NMPC com um processador de última geração (Pentium 4) certamente atenderá a condição de processamento em tempo real.

O otimizador usando o algoritmo S.Q.P e a rede neural apresentaram resultados excelentes. Robustez numérica e tempo de processamento mais que suficiente. Pode-se dizer que a combinação S.Q.P e modelo determinístico também foi aceitável, mas não é robusta. O algoritmo genético para este problema é robusto, mas não atende às condições de integração em tempo real. De fato os algoritmos genéticos foram projetados para operações numéricas em tempo real, por isso o tempo de processamento maior era esperado.

O planejamento da produção, apesar de não estar integrado, converge muito rapidamente. A formulação linear é que confere esta propriedade.

Por fim o modelo matemático do processo, parte essencial do estudo, comportou-se de maneira a não comprometer a performance dos demais módulos. Sete segundos para o modelo matemático foram simulados, no computador de referência, em um quarto de segundo.

Pelo que foi exposto nos parágrafos acima conclui-se que foi possível fazer a integração em tempo real, usando as técnicas já mencionadas.

4.11 Conclusões

Os estudos conduzidos cumprem com os objetivos iniciais. A integração do processo de incineração em tempo real foi realizada êxito. O modelo matemático do processo, a camada de controle e a camada de otimização trouxeram ganhos de desempenho para o processo.

Ainda que em algumas situações os controladores não lineares não atendessem perfeitamente a janela de tempo disponível para este processo, os controladores preditivos lineares o fazem. Sabendo que a capacidade de processamento cresce exponencialmente e que os controladores podem ser aplicados a outros processos, seu desenvolvimento é muito significativo no escopo da integração em tempo real. Como cada processo tem uma janela de tempo, e incineradores são das menores, estes controladores com certeza podem ser estudados em demais processos que requerem controladores não lineares em tempo real.

A camada de otimização também cumpre com os objetivos. O processo e o planejamento da produção são otimizados sem que haja prejuízos de desempenho. Mesmo para situações críticas, com janelas de tempo muito pequenas, uma solução está disponível, S.Q.P. com algoritmos genéticos (Tabela 4.32).

Todos os resultados apresentados foram gerados com programas especialmente desenvolvidos para esta Tese. A linguagem de programação adotada foi o Fortran 95 e a lista descrevendo cada programa pode ser vista no apêndice C, assim como o fluxograma do software que integrou e simulou as camadas. Isto faz desta Tese uma fonte potencial de produtos comerciais para a indústria de processo. Além disso, ela cumpre sua função no que diz respeito ao financiamento do projeto, já seus frutos podem substituir softwares importados, muito comuns em nosso parque industrial.

Capítulo 5:
Conclusões e Trabalhos Futuros

5. Conclusões e Trabalhos Futuros

5.1 Conclusões

Conforme exposto na introdução desta Tese de Doutorado, este trabalho propunha-se em contribuir com a integração de processos contínuos em tempo real. Para tal, o processo de incineração em fornos rotativos foi escolhido como estudo de caso a fim de testar as técnicas que dão suporte à integração de processos.

Controladores avançados e otimizadores para o processo e produção foram aplicados em diversas situações realistas de operação, fornecendo uma base de dados capaz de ajudar na tomada de decisões técnicas e gerenciais. Neste sentido pode-se afirmar que os objetivos foram cumpridos, uma vez que as partes propostas tiveram estudos em maior ou menor detalhamento.

Técnicas de controle avançado, pouco exploradas em processos envolvendo fornos rotativos, foram aplicadas com sucesso. Os resultados mostraram os potenciais benefícios do uso de tais recursos, assim como forneceram subsídios para o incremento da automação do processo.

Na maioria das vezes a implementação de aprimoramentos, na indústria de processos, é necessariamente respaldada por argumentos técnicos e econômicos. Embora este trabalho seja de cunho científico, seus frutos podem ser incorporados em estratégias corporativas mais amplas, além daquelas relativas à otimização do processo. Dentre estas pode-se citar: planos diretores de automação industrial, gestão integrada de processo, produção e mercado e até mesmo créditos de carbono. Este último aspecto é questão chave no que se refere à adequação ao protocolo de Kyoto.

Todos estes argumentos não estão direcionados para o processo de incineração com fornos rotativos. Em primeiro instante todos os processos, cujo equipamento principal seja um destes fornos, com poucas alterações no código fonte, podem beneficiar-se deste desenvolvimento. Além disso, como as estruturas de otimização e controle são independentes do processo de incineração, as camadas de integração em tempo real podem

ser aplicadas a outros estudos de caso. Isto faz deste trabalho potencialmente ainda mais útil.

Com menor grau de complexidade as camadas de otimização (processo e produção), mostraram que um aumento de performance não precisa estar vinculado à super estruturas de otimização, que na maioria das vezes é pouco robusta e excessivamente rígida numericamente. A combinação de uma modelo neural representando o processo com o tradicional algoritmo de otimização para problemas não lineares mostrou-se bastante robusto. Em todas as condições testadas, e mesmo aquelas que por razões didáticas não foram apresentadas, a combinação convergiu em tempo real para um ponto ótimo. Não é possível garantir que este seja o ótimo global, mas os resultados sempre dirigiram-se para uma condição de melhor performance.

Para os processos, a otimização não precisa ser o ótimo global do ponto de vista matemático. O importante são os benefícios econômicos, ambientais e de segurança ocupacional. Além disso, garantir o ótimo global é, do ponto de vista prático, impossível. Muitos fatores interferem para que esta condição não seja factível, tais como: incertezas do modelo matemático, simplificações para tornar a modelagem viável, precisão e confiança da instrumentação e outros.

Os parágrafos anteriores revelam a relevância desta Tese de Doutorado no escopo da integração em tempo real. Outros aspectos precisam ser considerados, dois destes são a capacitação dos recursos humanos envolvidos e a dependência tecnológica de ferramentas importadas. Este trabalho primou por desenvolver todos os algoritmos fundamentais necessários tais como: controladores, algoritmo genético e as redes neurais. Assim, pouco investiu-se para que a estrutura de integração fosse desenvolvida, com exceção do compilador da linguagem de programação (FOTRAN 90). Soma-se a isso, o fato que o desenvolvimento impulsiona os recursos humanos para um nível de conhecimento superior a dos melhores usuários de ferramentas comerciais.

Por tudo isso conclui-se que o trabalho atingiu plenamente seus objetivos principais, contribuindo para esta área multidisciplinar, a integração de processos químicos em tempo real e na formação de recursos humanos para o desenvolvimento sustentável do país.

5.2 Trabalhos Futuros

Como sugestões para trabalhos futuros seria muito importante focar dois pontos principais: desenvolver um software gerenciador da integração e aplicar em escala industrial os modelos desenvolvidos.

Considerando o escopo da integração de processos químicos contínuos em tempo real, faz-se necessário um software que gerencie as trocas de informação entre as camadas da integração, por exemplo, via cliente/servidor OPC. O fluxo de informação entre o processo (planta ou modelo), controlador e otimizador não deve afetar o desempenho dos módulos quando integrados em tempo real.

Outro ponto relevante é estimular parcerias com a iniciativa privada a fim fomentar esta linha de pesquisa e fortalecer este tipo de aplicação em plantas em escala real, ou até mesmo piloto. A validação de um controlador e otimizador em tempo real deve visar sua instância final, a indústria de processo como consumidor da tecnologia, pois desta forma completa-se o primeiro ciclo de um desenvolvimento.

Referências Bibliográficas

- ADINA R & D, Inc., ADINA theory and modeling guide, ADINA-F: Computational fluid dynamics, Watertown, MA, (1997).
- BARR P.V. ; BOATENG A. A, Modeling of Particles Mixing and Segregation in the Transverse Plane of a Rotary Kiln, **Chemical Engineering Science**, V51, N°17, pg. 4167 - 4181 (1996a).
- BARR P.V. ; BOATENG A. A, A Thermal Model for the Rotary Kiln Including Heat Transfer Within the Bed, **Int. Journal of Heat and Mass Transfer**, V39, N°10, pg.2131 - 2147 (1996b).
- BARTOK AND SAROFIN, Fossil Fuel Combustion: A source book, John Wiley and Sons Inc. (1991).
- BATHE, K.J. ; ZHANG, H. ; ZHANG, X. , Some advances in the analysis of fluid flows, **Computers & Structures**, V64, N° 5/6, pg. 909 - 930 (1997).
- BAZARAA, M.S.; SHERALI, H.D.; SHETTY, C.M; Nonlinear Programming Theory and Algorithms , John Wiley & Sons Inc (1979).
- BENNETT, C.O. ;MYERS J. E. , Momentum, Heat and Mass Transfer, McGraw-Hill (1990).
- BORBONS, C. ;CAMACHO. E.F. , Model Predictive Control, Springer-Verlag, New York (1999).
- BORMAN, G. L. ; RAGLAND, K. W. , Combustion Engineering, WBC/McGraw-Hill,Boston (1998).
- BRAAKE, H.B.A. ; VAN CAN, E.J.L ; SCHERPEN, J.M.A ; VERBRUGGEN, H.B, Control of nonlinear chemical processes using neural models and feedback linearization, **Computers and Chemical Engineering**, V.22, N°7-8. pg. 1113-1127 (1998).
- BRIDGWATER, J. ,Fundamental powder mixing mechanisms, **Powder Technology**, V15, p. 215-236 (1976).
- BULSARI, A. , Neural Network for Chemical Engineers, Elsevier Science (1995).
- CADET, C. ; TOUR, Y. ; GILLES G. ; CHABRIAT, J.P, Knowledge modeling and nonlinear predictive control of evaporators in cane sugar production plants, **Journal of Food Engineering**, V. 40, pg. 59-70 (1999).
- CFX4 Flow solver release 4.1, User manual: Computational fluid dynamic services, AEA Technology, Harwell Laboratory, Discot, Oxon, (1996).

- CHRISTO, F.C. ; FLETCHER, D.F. ; JOSEPH, S.D. , Computational fluid dynamics modelling of a landfill gas flare, **Journal of the Institute of Energy**, V71, pg 145 -151 (1998).
- CLARKE, D.W. , Application of Generalized Predictive Control to Industrial Processes, **IEEE Control Systems Magazine**, April, 1988, pg. 49-55 (1988).
- COLELLA, P. ; PUCKETT, E.G. , Modern Numerical Methods for Fluid Flow, Phillip Colella and Elbridge Gerry Puckett (1994).
- COSTA, A.C. ; MELEIRO, L.A.C. ; MACIEL FILHO, R. , Controle Preditivo Não Linear de um Processo de Fermentação Alcoólica Extrativa, (2001).
- CUTLER, C.R. ; RAMAKER, B.L. , Dynamic Matrix Control – A Computer Control Algorithm, **AICHE National Meeting**, Houston (1979).
- DEB, K. ; KUMAR, A. , Real-coded Genetic Algorithm With Simulated Binary Crossover: Studies on Multimodal and Multiobjective Problems, **Complex Systems**, V.9, N°1, pg. 431-454 (1995)
- DESROCHES-DUCARNE, E. ; DOLIGNIER, J.C. ; MARTY, E. ; MARTIN, G. ; DELFOSSE, L. , Modelling of gaseous pollutants emissions in circulating fluidized bed combustion of municipal refuse, **Fuel**, V 77, N° 13, pg. 1399 – 1410 (1998).
- DOYLE, F.J ; OGUNNAIKE, B.A. ; PEARSON, R.K. , Nonlinear Model Based Control Using Second-Order Volterra Models, **Automatica**, V.31, N°5, pg. 697-714 (1995).
- DRYER, F.L ; GLASSMAN, I. , 14th Symposium on Combustion, The combustion Institute, p. 978-1003 (1973).
- EINSTEIN, T.H, Radiant heat transfer to absorbing gases enclosed in a circular pipe with condition gas flow and internal heat generation, Tech Rept (Cleveland: National Aeronautics and Space Administration, U.S.A), 1962.
- Energy Information Administration, “Energy INFOcard”, U.S Dept. of Energy, 30 de Junho (1994).
- FERZIGER, J.H ; PERIC, M. , Computational Method for Fluid Dynamics, Springer, Berlin (1999).
- FLOUDAS, C.A. , Nonlinear and mixed-integer optimization: fundamentals and applications, Oxford University Press (1995).
- FOGLER, H.S , Elements of Chemical Reaction Engineering, Prentice Hall, New Jersey (1999).
- FRUZZETTI, K.P ; PALAZOGLU, A. ; McDONALD, K.A. , Nonlinear Model Predictive Control Using Hammerstein Models, **Journal of Process Control**, V.7, N°1. pg. 31-41 (1997).

GOROG, J.P. ; BRIMACOMBE, J.K. ; ADAMS, T.N., Radiative heat transfer in rotary kilns, **America Society for Metal and the Metallurgical Society of Aime**, V12B, pg. 55-70 (1981).

HAGAN, M.T. ; MENHAJ, M. , Training feedforward networks with the Marquardt algorithm, **IEEE Transactions on Neural Networks**, V. 5, N° 6, pg. 989–993 (1994).

HAGAN, M. T. ; DEMUTH H.B. ; BEALE, M.H, **Neural Network Design**, Boston, MA: PWS Publishing (1996).

HANNES, J.P , Ph.D. Thesis, Delft University of Technology, The Netherlands (1996).

HENSON, M.A. , Nonlinear Model Predictive: Current Status and Future Direction, **Computer and Chemical Engineering**, V.23, pg. 187-202 (1998).

HILL, S.C. ; SMOOT, L.D. , Modeling of nitrogen oxides formation and destruction in combustion systems, **Progress in Energy and Combustion Science**, V26, pg. 417-458 (2000).

HOTTEL, H.C ; WILLIAMS, G.C. ; NERHEIM, N.M. ; SCHNEIDER, G.R , 10th Symposium on Combustion, The Combustion Institute, p.111-121 (1965).

HOWARD, J.B ; WILLIAMS, G.C. ; FINE, D.H , 14th Symposium on Combustion, The Combustion Institute, p.975-986 (1973).

INGLEZ DE SOUZA E.T.; Modelagem Matemática, Controle e Otimização do Processo de Incineração em Fornos Rotativos com Pós-Combustor. Dissertação de mestrado, Faculdade de Engenharia Química ,Unicamp (2000).

JENKINS, B.G. ; MOLES, F.D. , Modelling of heat transfer from a large enclosed flame in a rotary kiln, **Trans IchemE**, V59, pg. 17-25 (1981).

JENSEN, A ; JOHNSON, J.E ; DAM-JOHANSEN, K. , 12th Conference on Fluidized Bed, San Diego, ASME, p. 447-454 (1993).

KAVSEK-BIASIZZO, K. ; SKRJANC, I. ; MATKO, D , Fuzzy Predictive Control of Highly Nonlinear pH Process, **Computers and Chemical Engineering**, V.21, pg. 613-618 (1997).

KROSE, B.J.A ; VAN DER SMAGT, P.P. ; An Introduction to Neural Networks, Fifth Edition, (1993)

LEGER, C.B. ; CUNDY, V.A ; STERLING, A.M. , **Environ. Sci. Technol.**, V27, pg. 677 – 690 (1993).

LEVENSPIEL, O. , Engenharia das Reações Químicas, E. Blucher, São Paulo, 1983-1987.

LEVEQUE, R.J, Numerical Methods for Conservation Laws, Birkhauser, Basel (1992).

LUNDSTOM, P. ; LEE, J.H. ; MORARI, M. ; SKOGESTAD S. , Limitations of Dynamic matrix Control, **Computers and Chemical Engineering**, V.19, N°4. pg. 409-421 (1995).

MALISKA, C.R, Transferência de calor e Mecânica dos Fluidos Computacional: Fundamentos e Coordenadas Generalizadas, Livros Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro (1995).

MANER, B.R. ; DOYLE, F.J, Polymerization Reactor Control Using Autoregressive-plus Volterra-Based MPC, **A.I.ch.E Journal**, V.43, pg. 1763-1784 (1997).

MASTORAKOS, E. ; MASSIAS, A. ; TSAKIROGLOU, C.D. ; GOUSSIS, D.A. ; BURGABANOS, V.N. ; PAYATAKES, A.C. , CFD predictions for cement kiln including flame modelling heat transfer and clinker chemistry, **Applied Mathematical Modelling**, V23, pg. 55-76 (1999).

McCABE, W.L.; SMITH, J.C.; HARRIOTT; P. ,**Unit operations of chemical engineering**, McGraw-Hill, New York (1985).

MICHALEWICZ, Z. , Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs, Springer, New York (1996).

MICHALEWICZ, Z. ; SCHOENAUER, M. , Evolutionary Algorithms for Constrained Parameter Optimization Problems, **Evolutionary Computation**, V.4, N°10 ,pg. 1-32 (1996).

MORARI, M. ; LEE, J.H. , Model predictive control: past, present and future, **Computers and Chemical Engineering**, V.23, pg. 667-682 (1999).

MUJTABA, I.M. ; HUSSAIN, M.A. , Application of Neural networks and Other Learning Technologies in Process Engineering, Imperial College Press (2001).

MUKADI, L. ; GUY, C ; LEGROS, R. , Prediction of gas emissions in an internally circulating fluidized bed combustor for treatment of industrial solid wastes, **Fuel**, V79, pg. 1125 –1136 (2000).

MURPHY, M.S ; HARISH, B.R ; RAJANANDAN, K.Y. ; AJOY PAVAN KUMAR, Investigation on the Kinetics of Thermal Decomposition of Calcium Carbonate, **Chemical Engineering Science**, Vol. 49 (1996).

MUTHA, R.K ; CLUETT, W.R. ; PENLIDIS, A. , Modifying the Prediction Equation for Nonlinear Model-Based Predictive Control, **Automatica**, V.34, N°10, pg. 1283-1287 (1998).

NICOLAU, G. ; MAGNI, L ; SCATOLLINI, R. , Stabilizing Predictive Control of ARX Models, **Automatica**, V.33, N°4, pg. 1691-1697 (1997).

- NORQUAY, S. J. ; PALAZOGLU, A. ; ROMAGNOLI J. A. , Model Predictive Control Based on Wiener Models, **Computers and Chemical Engineering**, V.53, N°1, pg. 75-84 (1998).
- OGUNNAIKE, B.A. ; RAY, W.H. , Process Dynamics, Modeling Control, Oxford, New York (1994).
- PATANKAR, S.V. ; Numerical heat transfer and fluid flow, Hemisphere, Washington (1980).
- PEARSON, R.K ; OGUNNAIKE, B.A. , Nonlinear Process Identification, *Nonlinear Process Control (chapter 2)*, pg 11-110, Prentice-Hall, NJ (1997).
- PEDRYCZ, W, Fuzzy Control and Fuzzy Systems, John Wiley, New York (1993).
- PERRY, R.H ; GREEN, D.W , Chemical Engineering Handbook, McGraw-Hill, New York (1984).
- PRE, P. ; HEMATI, M ; MARCHAND, B , Study on natural gas combustion in fluidized beds: modelling and experimental validation, **Chemical Engineering Science**, N° 16, V53, pg. 2871 - 2883 (1998).
- QIN, S.J. ; BADGWELL, T.A. , An Overview of Industrial Model Predictive Control Technology, **Chemical Process Control - AIChE Symposium Series**, 93(316), pg. 232-256 (1997).
- RARDIN, R.L, Optimization in Operation Research, Prentice Hall (1998).
- RICHALET, J. ; RAULT, A. ;TESTUD, J.L. ;PAPON, J., Algorithmic Control of Industrial Processes, **Proceedings. of the 4th IFAC Symposium on Identification and System Parameter Estimation**, pg.1119-1167 (1976).
- RIEDMILLER, M. ; BRAUN H., A direct adaptive method for faster backpropagation learning: The RPROP algorithm, **Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks** (1993).
- SAZHIN, S.S ; SAZHINA, E.M. ; HEIKAL, M.R , Modelling of the gas to fuel droplets radiative exchange, **Fuel**, V79, pg. 1843-1852 (2000).
- SHIN, D. ; RYU, C.K. ; CHOI, S. , Computational fluid dynamics evaluation of good combustion performance in waste incinerators, **Journal of the Air & Waste Management Association**, V48, pg. 345-351 (1998).
- SMITH, J.M. , Chemical Engineering Kinetic, McGraw-Hill, New York (1970).
- SMITH, J.M. ; VAN NESS, H.C. , Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química, Guanabara Koogan, Rio de Janeiro (1980).

SPALDING, D.B., Mixing and chemical reaction in steady state confined turbulent flames, 13th Symposium on Combustion, The combustion Institute, Pittsburgh, pg. 649-657 (1971).

SPANG, H.A. , A dynamic model of a cement kiln, **Automatica**, V8, pg. 309 (1972).

SPARROW E. M. ; CESS R. D. , Radiation heat transfer, Broks/Cole, 1970.

SRINIWAS, G. R ; ARKUN, Y. , A global Solution to the Nonlinear Predictive Controls Algorithms Using Polynomial ARX Model, **Computer and Chemical Engineering**, V.21, N°4, pg. 431-439 (1997).

SWOKOWSKI, E. W., Cálculo com geometria analítica, Volume 2, McGraw-Hill do Brasil, (1983).

TILLMAN, D.A. , The combustion of solid fuels and waste, Academic, San Diego (1991).

TOMAZ E. ; Modelagem Matemática e Simulação de Incinerador de Resíduos Perigosos de Forno Rotativo com Pós-Combustor em Estado Estacionário e Não Estacionário, Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Química, Unicamp (1998).

VERANTH, J.M. ; SILCOX, G.D ; PERSHING, D.W. , Numerical modeling of the temperature distribution in a commercial hazardous waste slagging rotary kiln, **Environmental Science & Technology**, N° 9, V31, pg. 2534-2539 (1997).

WESTBROOK, C.K. ; DRYER, F.L. , Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion, **Prog. Energy Combustion Science**, Vol-10, p. 1-57 (1984).

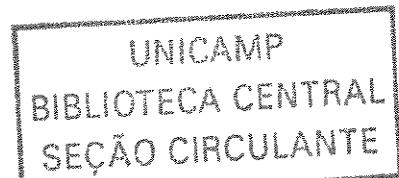
YETTER, R.A. ; DRYER, F.L ; RABITZ, H. , 21th Symposium on Combustion, The Combustion Institute, p.749-760 (1986).

ZHAN, J. ; ISHIDA, M. ; The Multi-Step Predictive Control of Nonlinear SISO Processes With a Neural Model Predictive Control (NMPC) Method , **Computer and Chemical Engineering**, V.21, N°2, pg. 201-210 (1997).

ZHANG, D. ; FRANKEL, S.H. , A numerical study of natural gas combustion in a lean burn engine, **Fuel**, V77, N° 12, pg. 1339 – 1347 (1998).

ZHU, G. ; HENSON, M.A ; OGUNNAIKE, B.A , A hybrid model predictive control strategy for nonlinear plant-wide control, **Journal of Process Control** , V.10, pg. 449-458 (2000).

Apêndice A:
Combustíveis e Combustão



A.1 Tipos de combustíveis e reações de combustão

Entende-se por combustível a substância química que ao entrar em contato com um oxidante (geralmente o ar que contém o oxigênio) reage liberando calor. Uma vez que os combustíveis têm sido a principal fonte geradora de energia para os parques industriais, é relevante o entendimento do processo de caracterização de suas variantes. Atualmente, existem três tipos de combustíveis: sólidos, líquidos e gasosos. Os resíduos sólidos e os combustíveis são fonte de energia para diversos tipos de aplicações. O primeiro consiste principalmente de resíduos urbanos (indústrias, hospitais e municípios) e agrícolas (embalagens de defensivos agrícolas). Os combustíveis fósseis são encontrados na natureza e consistem basicamente de gás natural, petróleo bruto, carvão mineral e coque. O processo de formação do gás natural e do petróleo dá-se em milhões de anos, por meio de acumulação de matéria orgânica no subsolo terrestre, ou marinho, e gradualmente submetido a pressões e temperaturas elevadas.

Informações publicadas em 1993 pelo órgão que administra as informações sobre energia nos Estados Unidos, revelam que com a atual taxa de consumo e produção dos combustíveis não renováveis, em pouco mais de cem anos todo o estoque mundial terá acabado. Isto inclui as possíveis novas descobertas de fontes produtoras, porém não computa o aumento do consumo em decorrência do crescimento populacional. Portanto, pode-se considerar esta estatística conservadora. As informações estão na Tabela A.1.

Tabela A.1 - Produção anual e previsão de esgotamento para o gás natural, óleo cru e carvão mineral (Energy Information Administration, 1994).

| Combustível | Produção em 1993 | Previsão de suprimento nas taxas de consumo de 1993 |
|-------------|--------------------------------|---|
| Gás natural | 75 trilhões de ft ³ | 123 anos |
| Óleo cru | 25 bilhões de barris | 67 anos |
| Carvão | 4,1 bilhões de toneladas | 230 anos |

Considerando os dados da Tabela A.1 e ressaltando a influência do impacto deste produto nas economias atuais, o manejamento otimizado dos derivados de petróleo é vital para o planejamento a médio e longo prazo da economia de um país. É evidente contudo, que a solução final aponta para o desenvolvimento de novas tecnologias como forma de geração de energia industrial, automotiva e residencial. Este não é um processo imediato, e de grande valia é a maximização do uso dos combustíveis não renováveis. Por isso, este trabalho busca estudar a aplicação otimizada dos combustíveis a processos com dependência substancial de geração energética. Mais especificamente a incineração e processos que usem fornos rotativos.

Conforme mencionado acima, os combustíveis encontram-se em três estados: sólido, líquido e gasoso, e tais características os diferenciam no tipo de aplicação, caracterização e desempenho. Iniciando pelos combustíveis gasosos, podemos apontar dois de maior uso: o gás natural e o GLP (gás liquefeito de petróleo). O gás natural é encontrado comprimido em rochas porosas e formações de xisto. Sua presença freqüentemente ocorre acima ou próxima a reservatórios de petróleo. O gás natural é uma mistura de hidrocarbonetos e quantidades menores de outras substâncias. Este é formado por metano, etano, propano, butano e pentano. Enxofre e nitrogênio orgânico são tipicamente de pouco importância no gás natural. Dióxido de carbono e nitrogênio estão presentes, porém não são combustíveis. O GLP consiste de etano, propano e butano, produzidos em plantas de processamento de gás natural. O GLP inclui gases liquefeitos de refinaria como etileno, propileno e butadieno, produzidos a partir do óleo cru.

Outras formas menos utilizadas para geração de energia são produzidas de madeira e carvão. Ar em quantidade inferior à estequiométrica flui através de um leito aquecido dos referidos materiais, gerando como combustível principal hidrogênio e monóxido de carbono. Nitrogênio e dióxido de carbono também estão presentes. O gás de água é feito soprando ar em leito de madeira, carvão ou coque para aumentar a temperatura do mesmo, e então alimentar com vapor. O vapor reage endotermicamente com o carbono da seguinte maneira:



Assim, CO e H₂ aumentam e N₂ diminui comparados com o gás produzido, e a quantidade aquecida aumenta. Em algumas situações requer-se chamas especialmente quentes. Neste caso, os combustíveis recomendados são hidrogênio e acetileno. A Tabela A.2 mostra a análise volumétrica de alguns combustíveis gasosos.

Tabela A.2 - Análise volumétrica de alguns combustíveis gasosos (Perry e Green, 1984).

| Espécie | Gás natural | GLP | Gás de carvão | Gás de madeira |
|-----------------------------------|-------------|------|---------------|----------------|
| CO | - | - | 20 – 30% | 18 – 25% |
| H ₂ | - | - | 8 – 20% | 13 – 15% |
| CH ₄ | 80 – 95% | - | 0,5 – 3 % | 1 – 5% |
| C ₂ H ₆ | < 6 % | - | Traço | Traço |
| > C ₂ H ₆ * | < 4% | 100% | Traço | Traço |
| CO ₂ | < 5% | - | 3 – 9% | 5 – 10% |
| N ₂ | < 5% | - | 50 – 56% | 45 – 54% |
| H ₂ O | - | - | - | 5 – 15% |

* Contendo hidrocarbonetos mais pesados que C₂H₆

A caracterização técnica de combustíveis gasosos dá-se por meio de duas propriedades: poderes caloríficos superior e inferior. O primeiro refere-se ao calor liberado por unidade de massa do combustível inicialmente à 25°C, reagindo completamente com oxigênio e os produtos retornando à 25°C, quando água é condensada. Quando não há condensação de água tem-se o poder calorífico inferior do combustível. Relacionam-se as duas propriedades com a equação abaixo.

$$LHV = HHV - \frac{m_{H2O}}{m_{fuel}} \cdot h_{lv} \quad (A.2)$$

Sendo,

LHV – Poder calorífico inferior (lower heating value - LHV).

HHV – Poder calorífico superior (higher heating value - HHV).

h_{lv} – Calor latente de vaporização.

m_{H2O} – Massa de água.

m_{fuel} – Massa de combustível.

O conhecimento do significado, assim como o poder calorífico dos combustíveis gasosos é importante na avaliação energética e econômica dos processos. A partir do momento que calor precisa ser gerado para determinado processo, a exata quantificação do que cada combustível pode gerar e seus respectivos custos tornam-se parte integrante da avaliação financeira e técnica. Para processos de incineração informações iniciais são necessárias: carga energética para a volatilização da fração orgânica dos resíduos sólidos, condições para combustão completa e a temperatura mínima necessária para o processo no forno. Logo, o conhecimento das propriedades termodinâmicas é condição fundamental.

Por sua vez, combustíveis líquidos são amplamente empregados em processos industriais. Entretanto, seu comportamento físico-químico e suas fontes de origem são diferentes dos combustíveis gasosos. Tais combustíveis são na sua imensa maioria derivados do petróleo bruto, embora algumas pesquisas mais recentes incluem na lista de potenciais combustíveis derivados líquidos de xisto, carvão mineral, biomassa e areia de alcatrão. O petróleo cru encontra-se *in natura* na crosta terrestre, entre camadas de rochas que já pertenceram a oceanos e foram formadas pelo mesmo processo descrito para o gás natural. Pode-se encontrar petróleo tanto no mar quanto em continente.

A análise última do petróleo cru tem praticamente a mesma composição em todo o mundo, com pequenas diferenças que serão importantes apenas no processo de refino, 84% de carbono, 3% de enxofre e até 0,5% de nitrogênio e oxigênio, Borman e Ragland (1998). O óleo bruto pode ser queimado diretamente, porém devido à sua grande faixa de densidades isto não é tecnicamente e economicamente produtivo, fazendo-se então o refino do mesmo. O processo de refino consiste em quebrar o óleo bruto em frações com cadeias carbônicas próximas, gerando produtos com densidades, aplicações e estados físicos

distintos. Dentre os mais conhecidos derivados de petróleo tem-se: coque, asfalto, graxa, óleo diesel, querosene, combustível para jatos, gasolina, nafta e GLP. Os destilados podem estar livres ou conter cinzas, que são compostas de minerais.

Tal qual para combustíveis gasosos, os líquidos são caracterizados por seus poderes caloríficos, entretanto outras propriedades também são importantes no uso destes. Densidade, viscosidade, ponto de “flash”, temperatura de autoignição, teores de enxofre, vanádio e chumbo, octanagem etc. Certas propriedades são interessantes na medida que fornecem o risco ambiental implícito em seu uso (teor de enxofre e chumbo) e a manuseabilidade de fluidos com diferentes viscosidades e densidades. Por sua vez, o ponto de “flash” e a temperatura de autoignição mostram condições favoráveis, desfavoráveis e perigosas em seu processamento. O ponto de “flash” indica a temperatura máxima que um combustível líquido pode ser armazenado e manuseado sem problema sério de incêndio. Esta temperatura é a mínima que o combustível irá inflamar-se quando exposto a uma chama acima de onde está armazenado. A temperatura de auto-ignição é a menor requerida a fim de iniciar uma combustão auto-sustentável em condições padronizadas, com ar atmosférico, sem a presença de chama ou faísca de ignição. A Tabela A.3 apresenta os pontos “flash” e as temperaturas de auto-ignição de alguns combustíveis.

Tabela A.3 - Pontos de “flash” e temperaturas de auto-ignição para alguns combustíveis (Bartok e Sarofin, 1991).

| Substância | Ponto de “Flash” (°C) | Autoignição (°C) |
|------------|-----------------------|------------------|
| Metano | -188 | 537 |
| Etano | -135 | 472 |
| Propano | -104 | 470 |
| n-Butano | -60 | 365 |
| n-Octano | 10 | 206 |
| Isooctano | -12 | 418 |
| n-Cetano | 135 | 205 |

| | | |
|---------------------|-----|-----|
| Metanol | 11 | 385 |
| Etanol | 12 | 365 |
| Acetileno | Gás | 305 |
| Monóxido de carbono | Gás | 609 |
| Hidrogênio | Gás | 400 |

Combustíveis líquidos são bastante usados em veículos de transporte como: automóveis, motocicletas, barcos e aeronaves. Porém, combustíveis líquidos também fazem parte de processos industriais. É comum encontrar queimadores a diesel para secadores de cereais e café. Óleos combustíveis cobrem uma larga faixa de derivados de petróleo, os quais foram divididos em seis grades. A grade 1 é o querosene, grade 2 óleo combustível doméstico. As grades de óleos combustíveis mais pesadas são divididas de acordo com a viscosidade, e são usadas nas indústrias e motores de grande porte. Os combustíveis mais pesados (grades 4,5 e 6) produzem quantidade significativa de cinzas. Aquecimento prévio faz-se necessário algumas vezes, dependendo da temperatura ambiente. O resíduo de combustíveis da grade 6, o mais pesado, é queimado diretamente em algumas caldeiras, e após algum tratamento pode ser usado em turbinas industriais de carga mais pesada. A Tabela A.4 apresenta as propriedades típicas dos óleos combustíveis.

Tabela A.4 - Propriedades dos óleos combustíveis Borman e Ragland (1998).

| Grade | 1 | 2 | 4 | 5 | 6 |
|---|-----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|-----------------------|
| | Querosene | Destilado | Resíduo muito leve | Resíduo leve | Residual |
| Cor | Clara | Âmbar | Preta | Preta | Preta |
| Massa específica à 16 °C (g/cm ³) | 0,825 | 0,865 | 0,928 | 0,953 | 0,986 |
| Visc. Cinemática à 38 °C (m ² /s) | 1,6 x10 ⁻⁶ | 2,6x10 ⁻⁶ | 15 x10 ⁻⁶ | 50 x10 ⁻⁶ | 360 x10 ⁻⁶ |

| Ponto “Pour” (°C) | < -17 | < -18 | -23 | -1 | 19 |
|------------------------|-------|--------|------|------|-----------|
| Ponto “Flash” (°C) | 38 | 38 | 55 | 55 | 66 |
| Autoignição (°C) | 230 | 260 | 263 | - | 408 |
| Carbono (%) | 86,5 | 86,4 | 86,1 | 85,5 | 85,7 |
| Resíduo de carbono (%) | Traço | Traço | 2,5 | 5,0 | 12,0 |
| Hidrogênio (%) | 13,2 | 12,7 | 11,9 | 11,7 | 10,5 |
| Oxigênio (%) | 0,01 | 0,04 | 0,27 | 0,3 | 0,38-0,64 |
| Cinzas (%) | - | < 0,01 | 0,02 | 0,03 | 0,04 |
| HHV (MJ/kg) | 46,2 | 45,4 | 43,8 | 43,2 | 42,4 |

Combustíveis líquidos, subprodutos de processos e produtos que tenham poder calorífico adequado, podem ser usados para gerar energia. A avaliação de suas propriedades dá-se da mesma forma que para os combustíveis abordados neste item.

O terceiro tipo de combustível disponível é o sólido. Este ocorre naturalmente como biomassa, turfa, lignina, carvão betuminoso e antracito. Rejeitos industriais e municipais também se classificam como combustíveis sólidos. Além de carbono e hidrogênio, este tipo de resíduo contém água, oxigênio, cinzas, nitrogênio e enxofre. O oxigênio pode estar quimicamente livre ou ligado ao combustível e pode variar de 45% a 2% na composição. Assim com o oxigênio, a água também pode estar ligada ao sólido, estar livre nas células da madeira ou nos poros. As cinzas são compostas de inorgânicos que permanecem no resíduo mesmo depois de queimados. Normalmente as cinzas começam a fundir-se a partir de 1200°C e torna-se fluida a 1300°C.

A biomassa é um material composto por celulose, sendo este madeira ou orgânicos com composição similar. Entre as que se classificam como madeira existem as duras e as macias. No segundo caso estão as coníferas, enquanto a biomassa de madeira dura é formada pelos demais tipo de árvores caducifólias. As demais biomassas são formadas por: bagaço, palha, caules, cascas folhas.

A madeira seca é composta por celulose ($C_6H_{10}O_5$), hemicelulose, lignina, resinas (extrativas) e cinzas. A celulose (40 a 45% da madeira) é um polímero condensado de glicose ($C_6H_{10}O_6$). A hemicelulose é formada de outros açúcares que não a glicose que encapsulam as fibras de celulose, e representa de 20 a 35% da madeira seca. A lignina ($C_{40}H_{44}O_6$) é um polímero que não é derivado de nenhum tipo de açúcar, e confere solidez às fibras da madeira, sendo responsável por 15 a 30% em peso de madeira seca. Os materiais extraíveis são: óleos, resinas, gomas e ceras, porém não excedem a poucos porcentos na formação da madeira.

A turfa é formada por galhos de árvores, juncos, sedimentos e musgo em pântanos de climas frios. A trufa é formada em ambiente úmido no qual o ar é excluído e com presença de bactérias. A ação química de decomposição procede por um processo chamado umidificação.



Uma vez que a taxa de formação é cerca de 3 centímetros por 100 anos, a turfa é considerada um material não renovável. Como a turfa é encontrada na sua forma natural contendo entre 80 a 90% de água, ela deve ser seca antes de ser usada como combustível.

O combustível sólido de maior aplicação industrial é o carvão de origem mineral. Sua composição é dada por carbono, hidrogênio, oxigênio, enxofre e nitrogênio; os dois últimos em menores quantidades. O carvão também apresenta cinzas inorgânicas. Alguns tipos de carvão tornam-se plásticos quando aquecidos e liberam alcatrão, licores e gases, restando um resíduo chamado coque. Este é um resíduo poroso formado por carbono e cinza mineral, o qual surge quando os constituintes voláteis do carvão betuminoso são liberados por calor na ausência, ou com suprimento de ar limitado. Carvões que também não se fundem, emitem alcatrão, licores e gases, quando aquecidos. Mas deixam um resíduo fibroso de carbono ao invés de coque. O carvão é originalmente formado por meio do acúmulo de madeira e demais biomassas que foram anteriormente cobertas, compactadas e transformadas em rochas por um período de centenas de milhares de anos.

O processo natural capaz de concentrar o teor de carbono e reduzir o de voláteis, aumentando o poder calorífico dos combustíveis sólidos, é conhecido como coqueificação. Esta transformação tem início na celulose da madeira e termina no carvão betuminoso. A Tabela A.5 apresenta a análise final de combustíveis sólidos.

Tabela A.5 - Análise final de alguns combustíveis sólidos seco e livre de cinzas Borman e Ragland (1998).

| | Tipo de combustível | | | | |
|---------------|---------------------|-------|---------|-------------------|----------|
| | Madeira | Turfa | Lignina | Carvão betuminoso | Rejeitos |
| Voláteis (%) | 81 | 65 | 55 | 40 | 85 |
| Hidrogênio(%) | 6 | 6 | 5 | 5 | 7 |
| Carbono (%) | 50 | 55 | 68 | 78 | 52 |
| Enxofre(%) | 0,1 | 0,4 | 1 | 2 | 0,3 |
| Nitrogênio(%) | 0,1 | 1 | 1 | 2 | 0,6 |
| Oxigênio (%) | 44 | 38 | 25 | 13 | 40 |
| HHV (Btu/lb) | 8700 | 9500 | 10000 | 14000 | 9700 |

Por fim, tem-se os rejeitos industriais, comerciais e agrícolas, que podem ser utilizados como combustíveis sólidos. Estes materiais são dispostos em aterros sanitários ou queimados em incineradores. Recentes esforços estão sendo feitos no sentido de transformar o poder calorífico destes subprodutos em vapor, uma vez que sua produção pode atingir milhões de toneladas por ano em países com atividades comercial e industrial mais desenvolvidas. Os rejeitos podem ser queimados diretamente ou serem submetidos a um pré-processamento, cujo objetivo é separar metais, não combustíveis e vidros. Esta pré-classificação ajuda a aumentar o valor agregado do material, já que seu poder calorífico aumenta. Uma análise de resíduo municipal típica contém: papel, borracha, plástico, couro, madeira, tecidos, matéria orgânica, vidro, cerâmica etc. A composição média dos resíduos

urbanos é diferente em decorrência de diversos fatores, entre estes: cultura do país, desenvolvimento sócio-econômico da região, existência de pólos regionais e outros. Por isso, a determinação da composição média do resíduo, assim como a análise final deve ser direcionada para cada unidade.

Os combustíveis sólidos têm uma grande importância nos processos que necessitam de energia externa. Seu uso pode minimizar os gastos com combustíveis fósseis que são mais caros, não renováveis e cujas previsões de esgotamento não estão tão distante. Desta maneira, o co-processamento de resíduos sólidos combustíveis, ainda que de natureza não renovável, atenua o decaimento das reservas mundiais de petróleo e resolve parcialmente o problema dos resíduos urbanos e industriais. O efeito adverso desta prática é a geração extra de poluentes, caminhando de encontro às tendências atuais. Entretanto, processos atuando com controladores ajustados no sentido de evitar os limites permitidos, assim como parâmetros operacionais previamente otimizados e equipamentos de controle de poluição, resgatam o valor do uso dos combustíveis sólidos.

A.2 Combustão

No item apresentado acima, aspectos relacionados com o processamento dos combustíveis não foram destacados. Todavia, o fato dos combustíveis terem características tão diversas, principalmente no estado físico da matéria, requer uma visão breve de como cada mecanismo de combustão age. Os combustíveis em estado gasosos são aqueles cujo mecanismo de combustão são os mais simples. Desconsiderando a complexidade da cinética envolvida no processo de queima, a reação ocorre de imediato em fase gasosa. O tempo decorrente do contado inicial entre as moléculas de oxidante e combustível até o equilíbrio químico depende da cinética, e será abordada adiante.

Com relação aos combustíveis líquidos, o processo total tem mais etapas. Nesta condição ocorrem três estágios: atomização, vaporização e combustão. A atomização é responsável pelo tamanho das gotas pulverizadas. O diâmetro das gotas é proporcional à taxa de combustão, quando menor o diâmetro maior é a taxa, pois a área superficial é maior. A etapa seguinte consiste na vaporização com subsequente mistura dos gases com o

ar, iniciando a combustão. A forma precisa do modelo de atomização varia de acordo com a pressão de injeção e do bico atomizador. Como é sabido, o tamanho das gotas atomizadas interfere diretamente no rendimento do combustor. Uma vez que os modelos determinísticos não são capazes de modelar adequadamente a distribuição de tamanho das gotas, faz-se necessária a experimentação empírica. Existem dois tipos básicos para se medir a distribuição dos diâmetros: espacial e temporal. A distribuição espacial é obtida contando o número de gotas em um determinado volume, em um dado instante. A distribuição temporal é calculada contando-se todas as gotas passando por uma dada superfície. As técnicas obtidas para o cálculo da distribuição espacial são fotográficas e estes métodos, exceto a holografia, sofrem da falta de profundidade do campo para detectar partículas muito pequenas. Uma variedade de métodos temporais têm sido usados para medir a distribuição de tamanho das gotas em estado estacionário. Um destes é o congelamento com nitrogênio e subsequente escaneamento das partículas sólidas. Por meio do velocímetro de Doppler a laser, é possível medir simultaneamente a velocidade e distribuição de tamanho.

A vaporização por sua vez, pode ser modelada com uma representação fenomenológica. Esta consiste de um balanço de energia na gota, assumindo temperatura uniforme do líquido a cada intervalo de tempo. A taxa líquida de troca térmica é igual ao fluxo de calor menos o que é levado pelo vapor. A expressão pode ser modelada com a seguinte expressão matemática:

$$m_1 \cdot c_1 \frac{dT_1}{dt} = h \cdot A_0 \cdot (T_\infty - T_1) + m_1 \cdot (h_v - h_l) \quad (A.4)$$

Para,

$$A_0 = \pi \cdot d^2 \quad (A.5)$$

$$m_1 = \frac{\rho_1 \pi d^3}{6} \quad (A.6)$$

sendo,

A_0 – Área superficial da gota

c_1 – Capacidade calorífica na gota.

d – Diâmetro da gota.

h – Coeficiente convectivo.

h_v, h_l – Entalpia no vapor e no líquido.

m_1 – Massa total da gota.

T_∞ – Temperatura externa.

T_1 – Temperatura na gota.

A quantidade de massa evaporada é usada no cálculo da quantidade de calor liberado da reação e na cinética desta. Estas etapas de cálculo fornecem os perfis de temperatura e concentração das espécies, que são fontes de informação valiosa para se avaliar possíveis riscos ambientais, qualidade do combustor, adequação da carga térmica ao sistema etc. A equação (A.4) é destinada ao estado dinâmico, a solução estacionária usa o mesmo modelo. Basta para tal, eliminar o termo com a derivada em relação ao tempo.

$$h.A_0.(T_\infty - T_1) = m_1.(h_v - h_l) \quad (A.7)$$

Quando uma partícula de combustível sólido é submetida a uma corrente de ar quente, ocorrem três processos: secagem, devolatilização e combustão do carbono restante. A ordem e duração que ocorrem as etapas dependem da análise final do combustível e distribuição de tamanho da partícula. Por exemplo, carvão tem pouca água e voláteis em

comparação com madeira, portanto a etapa de combustão é mais longa. Para partículas com tamanho maior, a secagem e a devolatilização ocorrem simultaneamente.

Para partículas pulverizadas, na ordem de 100 μm , a água é vaporizada e forçada para fora da partícula antes que haja a devolatilização. O tempo de secagem para uma partícula pulverizada é aquele requerido para aquecer o meio até o ponto de ebulição da água, mais o calor latente de vaporização multiplicado pela massa de água na partícula. Um balanço de energia indica que o tempo de mudança na taxa de energia é igual à taxa de calor para a evaporação de água mais o fluxo líquido de energia composto pela convecção e radiação.

$$\frac{d(m_w u_w + m_{df} u_{df})}{dt} = -m_w h_{fg} + q \quad (\text{A.8})$$

$$q = \varepsilon \cdot \sigma \cdot A_p (T_b^4 - T_p^4) + h \cdot A_p (T_g - T_p) \quad (\text{A.9})$$

sendo,

A_p – Área superficial da partícula.

H_{fg} – Calor latente de vaporização da água.

q – Taxa de transferência de calor da partícula.

T_b – Temperatura da parede da fornalha.

T_g, T_p – Temperatura do gás e partícula.

w, df – Subscritos para água e combustível seco.

Integrando as equações (2.7) e (2.8) da temperatura inicial até a temperatura de evaporação da água e fazendo $du = c.dT$, tem-se o tempo teórico de secagem da partícula.

$$t_{\text{sec}} = \frac{(m_{wi} \cdot c_w + m_{df} \cdot c_{df})(373 - T_i) + m_{wi} \cdot h_{fg}}{\varepsilon \cdot \sigma \cdot A_p \cdot (T_b^4 - T_p^4) + h \cdot A_p \cdot (Tg - T_p)} \quad (\text{A.10})$$

Para partículas relativamente grandes tais como carvão de fornalha e lascas de madeira, em fluxo convectivo, a equação (A.8) não é válida. Por causa dos gradientes de temperatura na partícula, a umidade é expandida no interior enquanto o material volátil é emitido próximo à parte externa do sólido. Simultaneamente, a pirólise tem inicio na borda externa da partícula e gradualmente move-se para o interior, liberando voláteis. A liberação de umidade reduz as transferências de massa e calor para a superfície da partícula, e por conseqüência a taxa de queima é reduzida.

Quando a secagem das partículas pequenas é completada, a temperatura aumenta e o combustível sólido começa a se decompor, liberando voláteis. Uma vez que os voláteis saem do sólido por meio de poros, o oxigênio externo não consegue penetrar na partícula. A taxa de devolatilização e os produtos de pirólise dependem da temperatura e do tipo de combustível. Os produtos de pirólise sofrem auto-ignição e formam uma chama ao redor da partícula, causando aumento da devolatilização.

Se o objetivo é apenas transformar o combustível sólido em gás combustível, o oxigênio é suprido apenas para gerar a reação endotérmica da secagem e pirólise das partículas. Nesta situação, a chama não se estabelece. Os produtos são monóxido e dióxido de carbono, valor de água, nitrogênio e alcatrão. A fração mineral composta de cinzas e inorgânicos é separada do gás combustível para que este possa ser usado em motores de combustão. A taxa de devolatilização do combustível sólida pode ser representada pela equação (A.11).

$$\frac{dm_v}{dt} = -m_v \cdot k_{pir} \quad (\text{A.11})$$

Sendo,

m_v - Massa da partícula menos a massa de água e cinzas na partícula.

$$k_{pir} = k_{o,pir} \cdot \exp\left(-\frac{E_{pir}}{R \cdot T_p}\right) \quad (\text{A.12})$$

Observa-se que a taxa de pirólise é independente do tamanho da partícula quando a temperatura é constante. A energia de ativação e o fator pré-exponencial devem ser determinados experimentalmente em condições específicas para o combustível utilizado. Maiores detalhes dos processos de secagem, devolatilização e pirólise para os combustíveis sólidos e líquidos estão em Borman e Ragland (1998). Alguns valores típicos dos parâmetros para pirólise estão na Tabela A.6.

Tabela A.6 - Parâmetros de pirólise para alguns combustíveis sólidos Borman e Ragland (1998).

| Combustível | $k_{0,pir}$ (s^{-1}) | E_{pir} (kcal/gmol) |
|-------------------|--------------------------|-----------------------|
| Lignina | 280 | 11,3 |
| Carvão betuminoso | 700 | 11,8 |
| Madeira | 7×10^7 | 31,0 |

A última etapa de todo o processo é a combustão do carbono remanescente. Assim que a devolatilização é completada, restam apenas cinzas e carbono. A fração sólida remanescente é porosa, em média de 0,9% para madeira e 0,7% para carvão, embora este valor seja bastante variável. Como a fração sólida final é porosa, o oxigênio pode difundir-se pelo interior. O principal produto de combustão é o CO, o qual reage fora do sólido para formar CO₂. A taxa de queima do carbono depende da concentração de oxigênio, temperatura externa, número de Reynolds, tamanho das partículas sólidas e porosidade destas. Para propósitos de engenharia é apropriado determinar a taxa global de reação. As reações que ocorrem nas partículas sólidas são:



As reações (A.13) e (A.14) são geralmente muito mais lentas que a oxidação do carbono, por isso apenas esta precisa ser considerada no processo global. Quando o oxigênio é escasso, as reações de redução (2.13) e (2.14) são importantes. A taxa de combustão global do carbono é dada por:

$$\frac{dm_c}{dt} = i \left(\frac{M_c}{M_{O_2}} \right) A_p k_c (\rho_{O_2(s)})^n \quad (A.16)$$

Sendo,

i - Razão estequiométrica de moles de carbono por moles de oxigênio.

K_c – Taxa cinética.

M_c – Massa de carbono.

M_{O_2} – Massa de oxigênio.

ρ_{O_2} – Densidade parcial do oxigênio na superfície da partícula.

A.2.1 Cinética de combustão

As taxas cinéticas que de fato ocorrem na combustão são muitas, já que o número de reações e espécies intermediárias assim exigem. Entretanto, por tratar-se de um trabalho de integração em tempo real, necessita-se somente de um número restrito de reações químicas que representem o processo. Neste sentido, considerar a reação de queima do combustível e uma cinética de transformação de monóxido a dióxido de carbono é razoável. É sabido que em processos que envolvem combustão, um dos pontos chave é a emissão de NO_x, porém a cinética é complicada e envolve concentrações de espécies como "O" que não são triviais de se determinar. Do ponto de vista de engenharia, uma alternativa computacionalmente viável é aplicar os resultados das simulações obtidas com cinéticas simples na cinética complexa. Esta opção é razoável, já que as concentrações das espécies intermediárias têm pouca influência nos perfis de temperatura que são quantificados pela quantidade de combustível queimado. Por não se tratar do escopo deste projeto, o comentário acima serve apenas como sugestão. A cinética de oxidação do monóxido de carbono pode ser modelada conforme a equação (A.17).

$$r_{CO} = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E}{R \cdot T}\right) \cdot C_{CO}^{\alpha} \cdot C_{O2}^{\beta} \cdot C_{H2O}^{\delta} \quad (A.17)$$

com a seguinte reação,



Sendo seus parâmetros apresentados na Tabela A.7.

Tabela A.7 - Parâmetros α, β, δ da equação (A.17).

| Referência | K_0 | E/R | α | β | δ |
|-----------------------------|---------------------|--------|----------|---------|----------|
| Howard <i>et al.</i> (1973) | $1,3 \cdot 10^8$ | 15.106 | 1 | 0,5 | 0,5 |
| Hottel <i>et al.</i> (1965) | $1,9 \cdot 10^9$ | 8.056 | 1 | 0,3 | 0,5 |
| Dryer e Glassman (1937) | $1,3 \cdot 10^{10}$ | 20.141 | 1 | 0,25 | 0,5 |
| Yetter <i>et al.</i> (1986) | $7,2 \cdot 10^{14}$ | 34.743 | 1 | 0,25 | 0,5 |
| Hannes (1996) | $1 \cdot 10^7$ | 15.106 | 1 | 0,5 | 0,5 |
| Jensen <i>et al.</i> (1993) | $3,25 \cdot 10^7$ | 15.098 | 1 | 0,5 | 0,5 |

As condições com as quais foram determinados estes parâmetros, assim como suas faixas de validade podem ser encontradas nas referências citadas. Para a combustão do metano, admitindo este como o combustível principal, a cinética apresentada por Desroches-Ducarne *et al.*, está representada pela equação (A.19).

$$r_{ch4} = 1,585 \cdot 10^{10} \cdot \exp\left(-\frac{24.157}{T}\right) \cdot C_{o2}^{0,8} \cdot C_{ch4}^{0,7} \quad (A.19)$$

Ao invés de agregar diversas cinéticas provenientes de fontes diferentes, uma cinética global para o propano e alcanos com número de carbonos maior que 3 é proposta por Westbrook e Dryer (1984).

$$\frac{d[C_nH_{2n+2}]}{dt} = -10^{17,32} \cdot \exp\left(-\frac{49.600}{RT}\right) \cdot [C_nH_{2n+2}]^{0,5} \cdot [O_2]^{1,07} \cdot [C_2H_4]^{0,4} \quad (A.20)$$

$$\frac{d[C_2H_4]}{dt} = -10^{14,70} \cdot \exp\left(-\frac{50.000}{RT}\right) \cdot [C_2H_4]^{0,9} \cdot [O_2]^{1,18} \cdot [C_nH_{2n+2}]^{-0,37} \quad (A.21)$$

$$\frac{d[CO]}{dt} = -10^{14,6} \cdot \exp\left(\frac{-40.000}{RT}\right) [CO]^{1,0} [O_2]^{0,25} [H_2O]^{0,5} \\ + 5 \cdot 10^8 \cdot \exp\left(\frac{-40.000}{RT}\right) [CO_2] \quad (A.22)$$

$$\frac{d[H_2]}{dt} = -10^{13,52} \cdot \exp\left(\frac{-41.200}{RT}\right) [H_2]^{0,85} [O_2]^{1,42} [C_2H_4]^{-0,56} \quad (A.23)$$

Neste caso, as faixas de operação são de 960 a 1540 K, 1 a 9 atm de pressão e taxa entre combustível e oxigênio na faixa de 0,12 a 2. As unidades são cm³, gmol, s, cal e K. Mas se for necessário um esquema ainda mais simplificado, pode-se adotar a cinética de combustão em duas ou uma etapas.

Em uma etapa,



Em duas etapas



A reação em uma etapa superestima o calor liberado por que a combustão é completa, enquanto que em duas etapas a combustão do CO continua após a oxidação total

do combustível. Os parâmetros “a” e “b” estão em Borman e Ragland (1998), na Tabela 4.3 da página 122 .

Alheio ao fato de empregar uma modelagem simples ou complexa para as reações químicas, a dinâmica desta acoplada com a do equipamento pode trazer complicações. Em geral a dinâmica de escoamentos dos equipamentos em engenharia são de ordem diferente das reações químicas, em especial as de combustão. O tempo total de oxidação, ou que este atinja o estado estacionário de um combustível como o metano, sujeito a condições fixas, é da ordem de 10^{-3} s. A Figura A.1 apresenta o perfil de consumo do combustível e geração de CO₂ de acordo com o modelo de Westbrook e Dryer (1984):

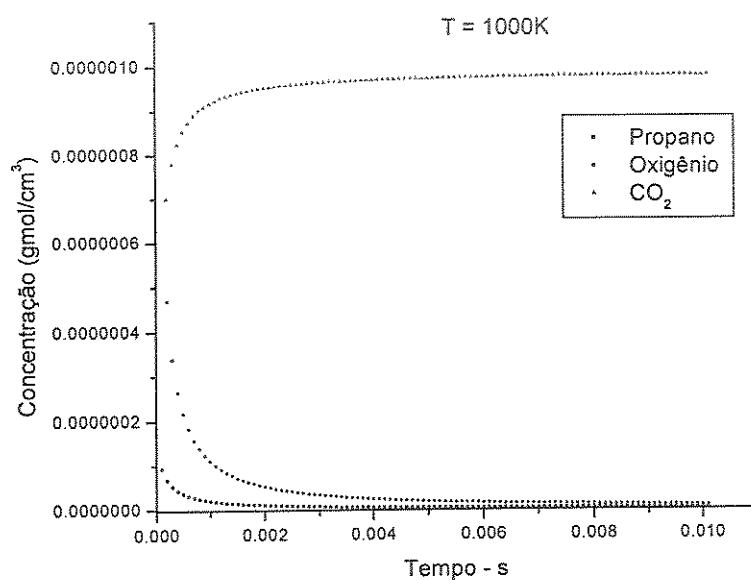


Figura A.1 - Comportamento transiente do propano, oxigênio, dióxido de carbono para o modelo de Westbrook e Dryer (1984).

$$\begin{aligned} \frac{d[CO]}{dt} &= -10^{14.6} \cdot \exp\left(\frac{-40.000}{RT}\right) [CO]^{1.0} [O_2]^{0.25} [H_2O]^{0.5} \\ &+ 5 \cdot 10^8 \cdot \exp\left(\frac{-40.000}{RT}\right) [CO_2] \end{aligned} \quad (A.27)$$

Com unidades de concentração em (gmol/cm³) , energia em (cal), tempo em (s) e temperatura em (K).

Caso o modelo pretenda capturar informações cinéticas precisas, seria necessário de um passo de integração compatível com o apresentado na Figura A.1. Como o objetivo deste estudo foca o controle e a otimização em tempo real, está fora de questão adotar este tipo de abordagem. Contudo, transferir os perfis de temperatura obtidos com as equações cinéticas simplificadas, e usá-los em um estudo independente do comportamento detalhado dos reagentes, produtos e intermediários é plausível.

Muitos esforços têm sido feito por pesquisadores com o objetivo de melhor representar a cinética das equações, fornecendo parâmetros para diversos sistemas reacionais. Entretanto, nem sempre as informações disponíveis em literatura são as mais adequadas para uma situação específica. Outra fonte de insatisfação diz respeito à representatividade dos modelos abertos. Nem sempre as condições criadas para encontrar os parâmetros cinéticos são as mesmas de uma situação industrial. Para casos como este, a solução é calibrar o modelo usando dados do próprio processo. Não se trata de um procedimento simples, mas que está bastante discutido por vários autores, Smith (1970), Levenspiel (1987) e Fogler (1999).

Apenas como esclarecimento do procedimento supramencionado, duas etapas decorrem. A primeira consiste em calcular as diferentes constantes de equilíbrio k em função da temperatura da equação (A.28) para uma faixa operacional.

$$r = k.[Ca]^a.[Cb]^b \quad (\text{A.28})$$

O passo seguinte é ajustar os parâmetros “A” e “E” do modelo de Arrhenius. A equação (A.29) expressa o modelo de Arrhenius.

$$k = A \cdot \exp\left(\frac{-E}{R \cdot T}\right) \quad (\text{A.29})$$

Este é o procedimento mínimo para a determinação dos parâmetros cinéticos de uma reação. Quanto aos valores de “a” e “b” na equação (A.28), estes representam a ordem da reação e também estão detalhados na literatura recomendada.

Uma segunda alternativa ao uso das equações cinéticas, e que vem ganhando bastante destaque nos últimos anos, é a modelagem neural das reações. A partir dos dados de entrada e saída é possível obter o comportamento das espécies com uma rede neural interagindo com o modelo determinístico. Esta abordagem é conhecida como modelagem híbrida e não será foco da atenção deste trabalho.

Uma alternativa aos inconvenientes causados pelas ordens de grandezas diferentes da cinética e do modelo determinístico é usar a estequiometria das reações, considerando conversão total, Tomaz (1998).

Apêndice B:
Validação do Algoritmo Genético

B.1 Validação do algoritmo

Com a finalidade de testar o algoritmo genético alguns problemas clássicos lineares e não lineares serão testados. Em todas as situações o procedimento numérico comparativo é da IMSL que faz parte do pacote de compilação Fortran da Compaq versão 6.1. Embora o tempo computacional não seja objeto de estudo, pois o fundamental neste caso é o resultado numérico, em todos os exemplos o tempo computacional ficou restrito a poucos segundos. O computador usado foi um Pentium de 933 MHz com 128 M de memória Ram.

B.1.1 Exemplo 1

Função objetivo: maximizar

$$x_1 + 3.x_2 \quad (B.1)$$

Restrições:

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &\leq 1,5 \\ x_1 + x_2 &\geq 0,5 \\ 0 \leq x_1 &\leq 1 \\ 0 \leq x_2 &\leq 1 \end{aligned} \quad (B.2)$$

Solução com o método Simplex: $x=[0,50 \ 1,00]$

Solução com o algoritmo genético: $x=[0,496 \ 1,00]$

B.1.2 Exemplo 2

Função objetivo: minimizar

$$(x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 \quad (B.3)$$

Restrições:

$$\begin{aligned}x_1 - 2x_2 + 1 &= 0 \\ \frac{-(x_1)^2}{4} - (x_2)^2 + 1 &\geq 0 \\ 0 \leq x_1 &\leq 1 \\ 0 \leq x_2 &\leq 1\end{aligned}\tag{B.4}$$

Solução com o método SQP: $x=[0,8229 \ 0,9114]$

Solução com o algoritmo genético: $x=[0,8260 \ 0,9130]$

B.1.3 Exemplo 3

Função objetivo: minimizar

$$100.(x_2 - x_1)^2 + (1 - x_1)^2\tag{B.5}$$

Restrições:

$$\begin{aligned}-2 \leq x_1 &\leq 0,5 \\ -1 \leq x_2 &\leq 2\end{aligned}\tag{B.6}$$

Solução com o método Quasi_Newton: $x=[0,500 \ 0,250]$

Solução com o algoritmo genético: $x=[0,500 \ 0,2505]$

B.1.4 Exemplo 4

Função objetivo: minimizar

$$6x_1x_2 - 2x_1 + x_2 + 6.(x_1)^2 - 4.(x_2)^2 + 8\tag{B.7}$$

Restrições:

Não há (B.8)

Solução com o método Quasi-Newton: $x = [1,000 \ -0,62497]$

Solução com o algoritmo genético: $x = [1,000 \ -0,623529]$

Em todos os exemplos acima, os quais usaram diferentes técnicas numéricas, o algoritmo desenvolvido mostrou-se bastante eficaz. Para processos reais os desvios em relação aos procedimentos tradicionais não foram significativos. Pela performance apresentada o algoritmo desenvolvido pode ser aplicado com segurança no estudo para o incinerador tipo forno rotativo.

Apêndice C:
Fluxograma de Execução do Integrador em
Tempo Real

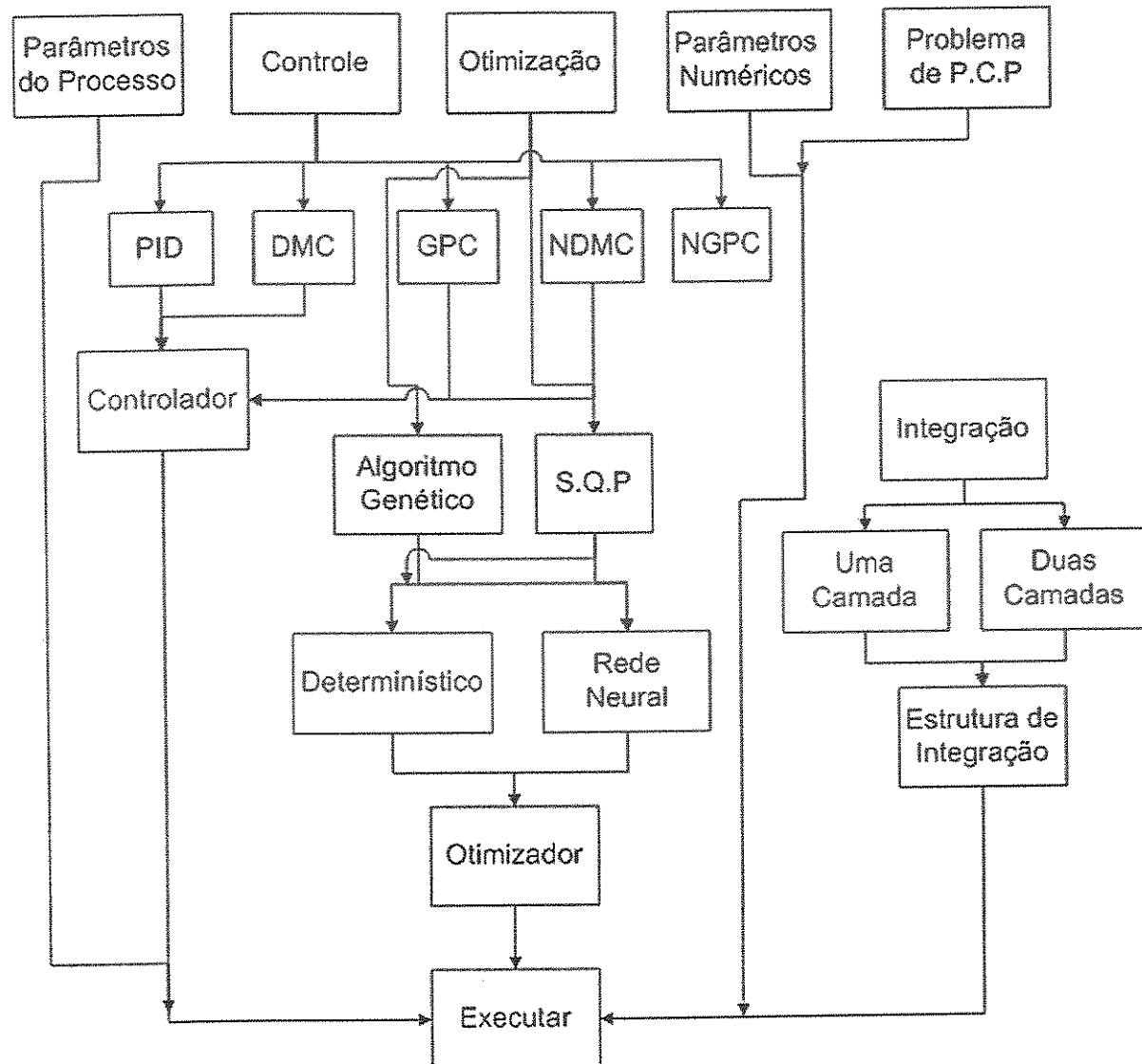


Figura C.1 - Fluxograma de execução do integrador em tempo real.

Tabela C.1 – Softwares desenvolvidos durante para implementação da Tese

| Software | Descrição |
|-------------|--|
| i-LControl | Controlador preditivo linear multivariado baseado em matriz dinâmica de controle |
| i-LGControl | Controlador preditivo linear multivariado baseado em modelos de primeira ordem com tempo morto |
| i-NLControl | Controlador preditivo não linear multivariado baseado em redes neurais artificiais |
| i-Neural | Rede neural artificial tipo retropropagação |
| i-Gen | Algoritmo genético de codificação binária |
| i-PID | Controlador numérico proporcional, integral e derivativo |
| RSSim | Modelo matemático determinístico do processo de incineração de resíduos sólidos |

Apêndice D:
Desenvolvimento Detalhado da Modelagem
Matemática

D.1 Modelagem Matemática do incinerador

Neste apêndice será desenvolvido o modelo matemático em coordenadas retangulares, de maneira detalhada. A partir deste modelo matemático uma transformação de coordenadas, descrita no capítulo 3, é aplicada a este a fim de se estabelecer o modelo matemático usado nas simulações numéricas.

D.1.1 Balanço diferencial de energia para a região gasosa.

Seguindo a linha do desenvolvimento de modelos diferenciais, sobretudo baseando-se em Bennett (1990), seguem as idéias do modelo para a região gasosa. Os balanços diferenciais, incluindo o de energia, partem de um elemento diferencial de volume, conforme a Figura D.1.

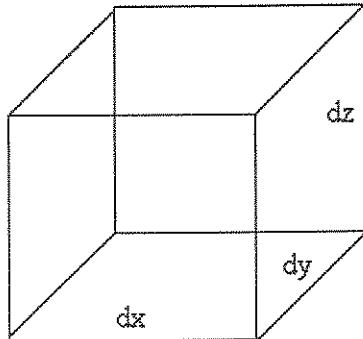


Figura D.1 - Elemento diferencial de volume.

Da termodinâmica tem-se que:

$$\frac{dU}{dt} = \frac{dQ}{dt} - p \cdot \frac{dV}{dt} + \frac{d(L_w)}{dt} \quad (\text{D.1})$$

Onde,

ρ – Massa específica.

l_w – Trabalho

p – Pressão.

Q – Troca de calor com o meio externo ao elemento de volume.

U – Energia interna.

V – Volume.

Multiplicando os termos da equação (D.1) por $\rho dx dy dz$ para aplicá-la ao elemento diferencial de volume e fazendo $\phi = \rho \frac{d(l_w)}{dt}$ tem-se:

$$\frac{dU}{dt} \rho dx dy dz = \rho \frac{dQ}{dt} dx dy dz - p \cdot \frac{dV}{dt} \rho dx dy dz + \phi dx dy dz \quad (\text{D.2})$$

ϕ - Termo de perda ou geração de calor no elemento de volume.

Como,

$$\rho \frac{dQ}{dt} = - \left[\frac{\partial(q/A)_x}{\partial x} + \frac{\partial(q/A)_y}{\partial y} + \frac{\partial(q/A)_z}{\partial z} \right] dx dy dz \quad (\text{D.3})$$

A equação (D.2) após dividida por seu elemento diferencial de volume ($dx dy dz$) fica com a seguinte forma:

$$\rho \frac{dU}{dt} + p \cdot \rho \frac{dV}{dt} = - \left[\frac{\partial(q/A)_x}{\partial x} + \frac{\partial(q/A)_y}{\partial y} + \frac{\partial(q/A)_z}{\partial z} \right] dx dy dz + \phi \quad (\text{D.4})$$

Lembrando que pode-se obter da termodinâmica a relação,

$$H = U + p \cdot V \quad (D.5)$$

e portanto,

$$\frac{dH}{dt} = \frac{dU}{dt} + p \cdot \frac{dV}{dt} \quad (D.6)$$

A relação matemática apresentada nesta última equação, só é válida quando a pressão (p) for constante. Substituindo a equação (D.6) no modelo do balanço diferencial de energia obtém-se uma equação cuja variável dependente é a entalpia.

$$\frac{\partial(\rho.h)}{\partial t} + \nabla(\rho.u.h) + \frac{dp}{dt} = - \left[\frac{\partial(q/A)_x}{\partial x} + \frac{\partial(q/A)_y}{\partial y} + \frac{\partial(q/A)_z}{\partial z} \right] + \phi \quad (D.7)$$

Conforme mencionado acima, admitiu-se para efeito de modelagem, que a pressão é constante e portanto, o termo $\frac{Dp}{Dt}$ é nulo. Isto implica em assumir que o fluido é considerado incompressível. Logo, a equação que representa o balanço diferencial de energia em três dimensões fica assim resumida:

$$\frac{\partial(\rho.h)}{\partial t} + \nabla(\rho.u.h) = - \left[\frac{\partial(q/A)_x}{\partial x} + \frac{\partial(q/A)_y}{\partial y} + \frac{\partial(q/A)_z}{\partial z} \right] + \phi \quad (D.8)$$

Esta formulação matemática é similar a apresentada por Patankar (1990) em seu desenvolvimento para problemas de fluido dinâmica.

Nos tipos de aplicação que este modelo pode representar, as pressões de operação são atmosféricas, então pode-se assumir que os gases comportam-se de maneira ideal. Isto auxilia na simplificação do modelo, uma vez que para gases ideais, de acordo com Patankar (1990):

$$C_p \frac{dT}{dx} = \frac{dh}{dx} \quad (D.9)$$

C_p – Capacidade calorífica.

Aplicando ao modelo a hipótese de gás ideal, deriva-se uma equação diferencial parcial tendo com variável dependente a temperatura. Neste ponto de desenvolvimento, aparece a temperatura que é uma variável que confere sensibilidade física ao processo.

$$C_p \frac{\partial(\rho.T)}{\partial t} + C_p \nabla(\rho.u.T) = - \left[\frac{\partial(q/A)_x}{\partial x} + \frac{\partial(q/A)_y}{\partial y} + \frac{\partial(q/A)_z}{\partial z} \right] + \phi \quad (D.10)$$

A princípio admitiu-se que a massa específica é constante e que os perfis de velocidade não tem um comportamento de fluxo pistonado ($u_{x,y,z} = \text{cte}$). Consequentemente a equação (D.10) fica reduzida a:

$$\rho.C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho.C_p \nabla(u.T) = - \left[\frac{\partial(q/A)_x}{\partial x} + \frac{\partial(q/A)_y}{\partial y} + \frac{\partial(q/A)_z}{\partial z} \right] + \phi \quad (D.11)$$

O gradiente do produto u por T é:

$$\nabla(u,T) = \frac{\partial(u_x.T)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y.T)}{\partial y} + \frac{\partial(u_z.T)}{\partial z} \quad (D.12)$$

Sendo $u_{x,y,z}$ – as velocidades nas direções x, y e z, em coordenadas cartesianas.

$$\frac{\partial(u_x.T)}{\partial x} = u_x \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + T \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} \quad (D.13)$$

Esta última relação também é válida para as direções, y e z. O termo ϕ é relativo à geração ou consumo no interior do elemento de volume. Para um processo com reações químicas pode haver geração de calor com reações exotérmicas, como as de combustão, e perda de calor em caso de reações endotérmicas. Em fornos rotativos ou câmaras de combustão e calcinação, há geração de calor devido à queima do combustível auxiliar. Especificamente em fornos de incineração, também aparece o termo relativo à combustão das frações de orgânicos presente no resíduo. Então, o termo ϕ apresenta a seguinte composição:

$$\phi = Q_1 + Q_2 \quad (D.14)$$

Onde,

Q_1 – Calor gerado pela queima do combustível auxiliar.

Q_2 – Calor gerado pela queima da fração volátil orgânica do resíduo, caso haja uma.

$$Q_1 = PCcb(\Delta M_{cb}(x) + \Delta M_{cb}(y) + \Delta M_{cb}(z)) \quad (D.15)$$

$$Q_2 = PCrs(\Delta M_{rs}(x) + \Delta M_{rs}(y) + \Delta M_{rs}(z)) \quad (D.16)$$

Onde,

PCcb - Poder calorífico do combustível.

PCrs - Pode calorífico do resíduo.

$\Delta M_{cb}(x,,z)$ - Queima do combustível nas direções x, y e z

$\Delta M_{rs}(x,y,z)$ - Queima dos orgânicos nas direções x, y e z

$$\Delta M_{cb} = \Delta M_{rs} = M^i - M^{i+1} \quad (\text{D.17})$$

Sendo,

M^i e M^{i+1} - Vazão mássica do combustível, ou resíduo total, nas direções x, y e z.

Em caso de aplicação aos modelos de duas ou uma dimensão, a formulação elimina os termos relativos aos eixos não presentes.

Outro termo que ainda não foi abordado é o $\partial(q/A)/\partial i$, e representa o fluxo de calor condutivo em uma dada direção “i”.

Para fluxos de calor condutivo,

$$(q/A)_x = k \frac{\partial T}{\partial x} \quad (\text{D.18})$$

Sendo,

k – Coeficiente condutivo.

$$\frac{\partial(q/A)_x}{\partial x} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (\text{D.19})$$

E para o convectivo,

$$\frac{\partial(q/A)_x}{\partial x} = \rho \cdot cp \frac{\partial T}{\partial x} \quad (D.20)$$

Sendo,

h_{conv} – Coeficiente convectivo.

O fluxo de calor total na direção “x” fica determinado por:

$$\frac{\partial(q/A)_x^{Conduktivo}}{\partial x} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (D.21)$$

Conforme McCabe, Smith e Harriott (1985), em câmaras de altas temperaturas o processo de transferência de calor predominante é o radiativo. Entretanto, a natureza da radiação é diferente da condução e convecção. Sua transferência de calor não tem como força motriz gradientes de temperatura. Acima de 0 K, um corpo emite energia radiativa. Na prática sabe-se que a radiação tem maior influência sobre o processo a partir de 500° C.

Desta maneira, os termos relativos à radiação fazem parte de ϕ e não $\frac{\partial(q/A)_x}{\partial x}$. O termo

de geração ou perda de calor passa a ter mais elementos, que são originários das trocas de calor radiativa entre as superfícies e o elemento de volume com o meio externo. Seu valor final vai depender se está recebendo mais radiação das demais superfícies do que sua emissão total. Adiante, será dedicado um item para a modelagem matemática das transferências radiativas, pois sua complexidade assim exige. O termo de geração ou perda de calor fica:

$$\phi = Q_1 + Q_2 + \sum \pm \sigma \cdot F_{i-j} \cdot T^4 \quad (D.22)$$

Sendo,

σ - Constante de Boltzmann.

F_{i-j} – Fatores de forma entre as superfícies “i” e “j”.

Outra simplificação plausível na região gasosa é negligenciar os efeitos de transferência de calor por condução.

Compilando as informações apresentadas acima, o modelo diferencial para o balanço de energia em três dimensões na região gasosa fica assim representado:

$$\rho.C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho.C_p \left[u_x \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + T \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \cdot \frac{\partial T}{\partial y} + T \cdot \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + T \cdot \frac{\partial u_z}{\partial z} \right] = - \left[\frac{\partial (q/A)_x}{\partial x} + \frac{\partial (q/A)_y}{\partial y} + \frac{\partial (q/A)_z}{\partial z} \right] + Q_1 + Q_2 + \sum \pm \sigma.F_{i-j}.T^4 \quad (D.23)$$

$$\rho.C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho.C_p \left[u_x \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + T \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \cdot \frac{\partial T}{\partial y} + T \cdot \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + T \cdot \frac{\partial u_z}{\partial z} \right] = -k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + Q_1 + Q_2 + \sum \pm \sigma.F_{i-j}.T^4 \quad (D.24)$$

O modelo apresentado está em coordenadas retangulares, porém é conveniente transformá-lo para coordenadas cilíndricas, visto que equipamentos para incineração, clínquer e calcinação apresentam esta geometria. A mudança de coordenadas será apresentada após terem sido desenvolvidos todos os balanços de energia, massa e quantidade de movimento. Como pode ser observado, as equações mostram uma modelagem dinâmica, embora a obtenção do modelo estático requer apenas a exclusão dos termos com derivadas em relação ao tempo.

Admitindo que os fluxos são pistonados nas três direções e as velocidades são constantes, o modelo fica representado por:

$$\rho.Cp.\frac{\partial T}{\partial t} + \rho.Cp.\left[u_x \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \cdot \frac{\partial T}{\partial y} + u_z \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right] = -k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + Q_1 + Q_2 + \sum \pm \sigma.F_{i-j}.T^4 \quad (D.25)$$

A seguir serão desenvolvidas as reduções do modelo em três dimensões para duas e uma dimensões respectivamente. Nesta etapa a hipótese de fluxo pistonado com velocidades constantes não será aplicada.

D.1.1.1 Modelo bidimensional

A redução de uma dimensão, assim como de duas dimensões não necessita de mais desenvolvimento do modelo. Basta eliminar os termos com derivadas que pertencem às dimensões que não serão utilizadas.

$$\rho.Cp.\frac{\partial T}{\partial t} + \rho.Cp.\left[u_x \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + T \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \cdot \frac{\partial T}{\partial y} + T \cdot \frac{\partial u_y}{\partial y} \right] = -k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right] + Q_1 + Q_2 + \sum \pm \sigma.F_{i-j}.T^4 \quad (D.26)$$

D.1.1.2 Modelo unidimensional

$$\rho.Cp.\frac{\partial T}{\partial t} + \rho.Cp.\left[u_x \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + T \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} \right] = -k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right] + Q_1 + Q_2 + \sum \pm \sigma.F_{i-j}.T^4 \quad (D.27)$$

D.1.2 Balanço diferencial de energia para o refratário

Assim como para a modelagem na fase gasosa, a parede refratária tem o mesmo elemento diferencial de volume. Ao longo do desenvolvimento do modelo é que aparecem

as diferenças. A fim de facilitar as passagens matemáticas, parte-se da equação (D.10), a qual representa o balanço diferencial de energia em determinado meio.

$$\rho_{refr.} \cdot C_{p_{refr.}} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_{refr.} \cdot C_{p_{refr.}} \cdot \nabla(u \cdot T) = -k_{refr} [\nabla T] + \phi \quad (D.28)$$

Onde,

ρ_{refr} – Massa específica do material refratário ou parede interna.

$C_{p_{refr}}$ - Capacidade calorífica do material refratário ou parede interna.

No interior da parede do refratário, não existe geração ou perda de calor devido à reações químicas. Também não ocorrem as trocas de calor radiativas entre pontos internos da parede. Partindo destas premissas, o termo ϕ é nulo. Além disso não há convecção em materiais sólidos, ou seja

$$\phi = 0 \quad (D.29)$$

No tocante às trocas de calor condutivas e convectivas, apenas a condução é considerada como fluxo no interior do refratário. Consequentemente, para a direção “x”.

$$\frac{\partial(q / A)_x^{Condutivo}}{\partial x} = k_{refr.} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (D.30)$$

Para as direções “y” e “z”.

$$\frac{\partial(q / A)_y^{Condutivo}}{\partial y} = k_{refr.} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (D.31)$$

$$\frac{\partial(q/A)_z^{Conduktiva}}{\partial z} = k_{refr.} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (D.32)$$

Onde,

$k_{refr.}$ – Condutividade térmica do material refratário ou parede interna.

Com as informações apresentadas acima, o modelo matemático para a parede interna está estabelecido:

$$\rho_{refr.} \cdot C_{p_{refr.}} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_{refr.} \cdot C_{p_{refr.}} \cdot \nabla(u \cdot T) = -k_{refr.} \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \quad (D.33)$$

Assumindo que a condutividade térmica é constante, o modelo final em três dimensões apresenta-se como:

$$\rho_{refr.} \cdot C_{p_{refr.}} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = -k_{refr.} \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \quad (D.34)$$

Este modelo está representado em coordenadas retangulares, mas adiante o mesmo será transformado em coordenadas cilíndricas.

D.1.2.1 Modelo bidimensional

$$\rho_{refr.} \cdot C_{p_{refr.}} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = -k_{refr.} \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right] \quad (D.35)$$

D.1.2.2 Modelo unidimensional

$$\rho_{refr} \cdot Cp_{refr} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = -k_{refr} \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right] \quad (D.36)$$

D.1.3 Balanço diferencial de energia para o leito sólido.

O balanço de energia para o leito sólido é muito parecido com o do refratário. Algumas alterações nas propriedades e o modelo está definido. Partindo da mesma equação (D.10), deriva-se o modelo para o leito sólido.

$$\rho_{sol} \cdot Cp_{sol} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_{sol} \cdot Cp_{sol} \cdot \nabla(u \cdot T) = - \left[\frac{\partial(q/A)_x}{\partial x} + \frac{\partial(q/A)_y}{\partial y} + \frac{\partial(q/A)_z}{\partial z} \right] + \phi \quad (D.37)$$

Onde,

ρ_{sol} – Massa específica do leito sólido.

k_{sol} – Condutividade térmica do leito sólido.

Cp_{sol} – Capacidade calorífica do leito sólido.

Admitindo que não ocorrem reações no leito sólido e que não há trocas radiativas em seu interior. Para efeito de modelagem matemática as reações ocorrem na câmara de combustão, após a devolatilização.

$$\phi = 0 \quad (D.38)$$

Esta hipótese é razoável para incineradores e câmaras de calcinação. Em fornos de clínquer, no qual ocorrem reações químicas no leito, a mesma não é válida. Para esta segunda situação, devem ser incorporadas ao modelo as taxas de geração ou remoção de calor devido às reações químicas. Para efeito de transferência de calor no leito, considera-se apenas o processo condutivo. Portanto, o modelo em três dimensões é representado por:

$$\rho_{sol} \cdot Cp_{sol} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_{sol} \cdot Cp_{sol} \left[\frac{\partial(u_x \cdot T)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y \cdot T)}{\partial y} + \frac{\partial(u_z \cdot T)}{\partial z} \right] = -k_{sol} \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \quad (D.39)$$

D.1.3.1 Modelo bidimensional

$$\rho_{sol} \cdot Cp_{sol} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_{sol} \cdot Cp_{sol} \left[\frac{\partial(u_x \cdot T)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y \cdot T)}{\partial y} \right] = -k_{sol} \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right] \quad (D.40)$$

D.1.3.2 Modelo unidimensional

$$\rho_{sol} \cdot Cp_{sol} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_{sol} \cdot Cp_{sol} \left[\frac{\partial(u_x \cdot T)}{\partial x} \right] = -k_{sol} \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right] \quad (D.41)$$

Considerando que o deslocamento do fluxo na direção “x” (axial) é razoavelmente mais importante que nas demais, pode-se usar o modelo com u_z e u_y nulos. O valor de u_x pode ser calculado como a velocidade média do resíduo ao longo da câmara. Esta velocidade depende do comprimento da câmara e do tempo de residência do resíduo.

$$u_x = \bar{u} = \frac{L}{t_{res}} \quad (D.42)$$

O tempo de residência pode ser estimado empiricamente com a rotação do cilindro.

$$t_{res} = f(rot) \quad (D.43)$$

D.1.4 Balanço diferencial de quantidade de movimento

O balanço da quantidade de movimento representa o comportamento dos fluxos nas direções x, y e z. Isto dá-se pelo fato que a quantidade de movimento expressa os perfis de velocidade na geometria estudada. O elemento diferencial de volume para a quantidade de movimento está representado na Figura D.2.

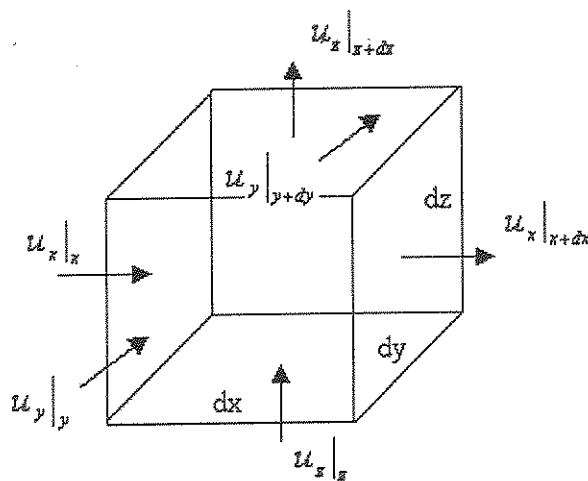


Figura D.2 - Elemento diferencial de volume esquematizado para o balanço da quantidade de movimento.

Para a direção x e em coordenadas retangulares.

$$\frac{\partial(\rho.u_x)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho.u_x.u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho.u_y.u_y)}{\partial y} \frac{\partial(\rho.u_z.u_z)}{\partial z} = \frac{\partial\tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial\tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial\tau_{zx}}{\partial z} - \frac{\partial P}{\partial x} + \rho.g_x \quad (D.44)$$

Sendo,

ρ – Massa específica da mistura gasosa.

μ – Viscosidade.

τ_{ij} – Tensão de cisalhamento na superfície ij

g_x – Força elétrica, magnética, gravitacional ou externa resultante na direção “x”.

p – Pressão.

$u_{x,y,z}$ – Velocidade nas direções x, y ou z.

Expandindo as derivadas parciais da equação (D.44) tem-se:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \cdot \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \cdot u_x \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_x \cdot \frac{\partial(\rho \cdot u_x)}{\partial x} + \rho \cdot u_y \cdot \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_y \cdot \frac{\partial(\rho \cdot u_y)}{\partial y} + \rho \cdot u_z \cdot \frac{\partial u_z}{\partial z} + u_z \cdot \frac{\partial(\rho \cdot u_z)}{\partial z} = \\ \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} - \frac{\partial P_x}{\partial x} + \rho \cdot g_x \end{aligned} \quad (\text{D.45})$$

De acordo com Bennett^b (1990),

$$\tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) \quad (\text{D.46})$$

$$\tau_{zx} = \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \quad (\text{D.47})$$

$$\tau_{xx} = 2 \cdot \mu \cdot \frac{\partial u_x}{\partial z} - \frac{2}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \quad (\text{D.48})$$

Substituindo as equações (3.46) a (3.48) na equação (D.45) e rearranjando,

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) - \frac{\partial P_x}{\partial x} + \rho \cdot g_x = \rho \cdot \frac{\partial u_x}{\partial t} \quad (\text{D.49})$$

Esta equação é conhecida na literatura como a equação de Navier-Stokes. Neste caso para a direção “x”. Abaixo, as equações de Navier-Stokes nas direções y e z.

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) - \frac{\partial P_y}{\partial y} + \rho \cdot g_y = \rho \cdot \frac{\partial u_y}{\partial t} \quad (\text{D.50})$$

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) - \frac{\partial P_z}{\partial z} + \rho \cdot g_z = \rho \cdot \frac{\partial u_z}{\partial t} \quad (\text{D.51})$$

Já foi mencionado, que em algumas situações como em Tomas (1998) e Inglez de Souza (2000), assume-se fluxo pistonado e velocidade constante. Seguindo esta linha de raciocínio para as três dimensões e adotando fluxo incompressível, as equações (3.49) a (3.51) resumem-se ao termo da velocidade em relação ao tempo constante. Isto está correto, pois neste caso todas as derivadas parciais, de primeira e segunda ordens, em relação às direções x, y e z são nulas.

$$\frac{\partial u_{x,y,z}}{\partial t} = g_{x,y,z} \quad (\text{D.52})$$

Também é possível considerar que o fluido é incompressível. Com esta imposição as equações de Navier-Stokes ficam reduzidas da seguinte maneira:

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + \rho \cdot g_x = \rho \cdot \frac{\partial u_x}{\partial t} \quad (\text{D.53})$$

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + \rho \cdot g_y = \rho \cdot \frac{\partial u_y}{\partial t} \quad (\text{D.54})$$

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + \rho \cdot g_z = \rho \cdot \frac{\partial u_z}{\partial t} \quad (\text{D.55})$$

Este é o modelo tridimensional para a quantidade de movimento, e está formalizado em coordenadas ortogonais retangulares.

Em certas ocasiões, faz-se necessária a redução do modelo para duas ou uma dimensão.

D.1.4.1 Modelo bidimensional

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) + \rho \cdot g_x = \rho \cdot \frac{\partial u_x}{\partial t} \quad (\text{D.56})$$

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) + \rho \cdot g_y = \rho \cdot \frac{\partial u_y}{\partial t} \quad (\text{D.57})$$

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) + \rho \cdot g_z = \rho \cdot \frac{\partial u_z}{\partial t} \quad (\text{D.58})$$

D.1.4.2 Modelo unidimensional

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} \right) + \frac{1}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right) + \rho \cdot g_x = \rho \cdot \frac{\partial u_x}{\partial t} \quad (\text{D.59})$$

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} \right) + \frac{1}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} \right) + \rho \cdot g_y = \rho \cdot \frac{\partial u_y}{\partial t} \quad (\text{D.60})$$

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} \right) + \frac{1}{3} \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_z}{\partial x} \right) + \rho \cdot g_z = \rho \cdot \frac{\partial u_z}{\partial t} \quad (\text{D.61})$$

Uma vez que usar as equações de Navier-Stokes implica em adotar procedimentos numéricos de solução do sistema robustos e computacionalmente onerosos, estas não serão usadas. Esta Tese considera a integração dos processos químicos contínuos em tempo real, por isso o modelo matemático do processo não pode ser de difícil convergência numérica.

D.1.5 Balanço diferencial de massa por componente

O modelo básico do balanço de massa é a equação da continuidade. Entretanto, esta refere-se ao balanço global. Para processos que envolvem combustão o importante é determinar os perfis para os componentes. Por outro lado, o balanço global está automaticamente especificado, uma vez que a soma das espécies gera o resultado global.

Observando a Figura D.3, com o elemento diferencial de volume, nota-se dois fluxos: um difusivo e outro convectivo.

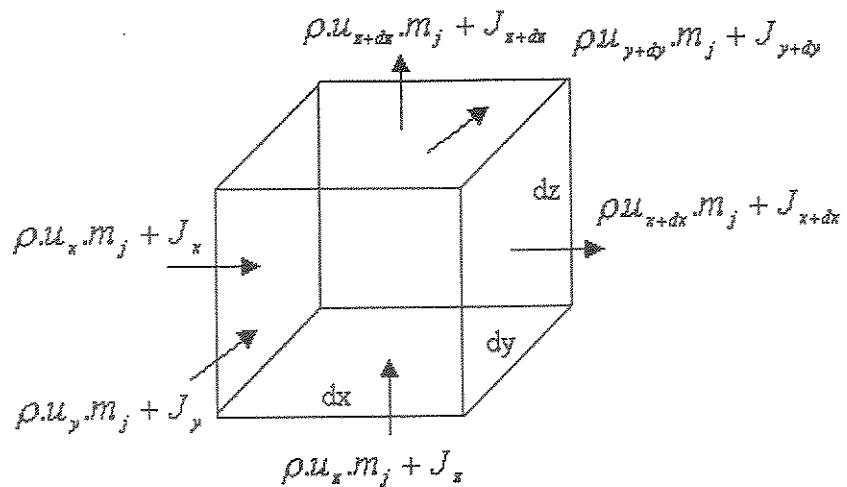


Figura D.3 - Esquema do balanço diferencial por componente.

Sabendo que:

m_j - Fração mássica do componente “j” no elemento de volume.

$$\rho.u_x.m_j + \rho.u_x \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} \cdot dx \text{ - Fluxo convectivo.} \quad (D.62)$$

$$J_x + \frac{\partial J_x}{\partial x} \cdot dx \text{ - Fluxo difusivo.} \quad (D.63)$$

Em x,

$$[u_x \cdot \rho.m_j + J_x + d(u_x \cdot \rho.m_j + J_x)]dy.dz - (u_x \cdot \rho.m_j \cdot dy \cdot dz + J_x) \quad (D.64)$$

$$d(u_x \cdot \rho.m_j + J_{jx}) = \frac{d(u_x \cdot \rho.m_j + J_x)dx}{dx} \quad (D.65)$$

$$d(u_x \cdot \rho \cdot m_j + J_{jx}) dy \cdot dz = \left[\frac{\partial(u_x \cdot \rho \cdot m_j)}{\partial x} + \frac{\partial J_{jx}}{\partial x} \right] dx \cdot dy \cdot dz \quad (\text{D.66})$$

Sendo o termo de acúmulo definido por:

$$\frac{\partial(\rho \cdot m_j)}{\partial t} dx \cdot dy \cdot dz \quad (\text{D.67})$$

Dividindo a equação (D.66) por $dx \cdot dy \cdot dz$ nas três direções, adicionando o termo de geração e o acúmulo obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot m_j) + \frac{\partial(\rho \cdot u_x \cdot m_j)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho \cdot u_y \cdot m_j)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho \cdot u_z \cdot m_j)}{\partial z} + \nabla J = R_j \quad (\text{D.68})$$

R_j - Quantidade gerada ou consumida do componente "j" por meio de reação química no elemento de volume.

Admitindo que o processo de difusão na região gasosa seja muito pequeno em relação à convecção tem-se:

$$\nabla J = 0 \Rightarrow \frac{\partial J_{jx}}{\partial x} = \frac{\partial J_{jy}}{\partial y} = \frac{\partial J_{jz}}{\partial z} = 0 \quad (\text{D.69})$$

Portanto, o modelo para os fluxos de componentes tem a seguinte forma:

$$\rho \cdot \frac{\partial m_j}{\partial t} + \rho \cdot \frac{\partial(u_x \cdot m_j)}{\partial x} + \rho \cdot \frac{\partial(u_y \cdot m_j)}{\partial y} + \rho \cdot \frac{\partial(u_z \cdot m_j)}{\partial z} = R_j \quad (\text{D.70})$$

Expandindo as derivadas parciais com duas variáveis dependentes tem-se:

$$\rho \cdot \frac{\partial m_j}{\partial t} + \rho \cdot u_x \cdot \frac{\partial m_j}{\partial x} + \rho \cdot m_j \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} + \rho \cdot u_y \cdot \frac{\partial m_j}{\partial y} + \rho \cdot m_j \cdot \frac{\partial u_y}{\partial y} + \rho \cdot u_z \cdot \frac{\partial m_j}{\partial z} + \rho \cdot m_j \cdot \frac{\partial u_z}{\partial z} = R_j \quad (\text{D.71})$$

Assim como nos demais balanços diferenciais, neste também é possível usar a hipótese de fluxo pistonado com velocidades constantes. Aplicando-se esta condição nas três dimensões, todos os termos com velocidade variável na derivada parcial são nulos. A equação (D.72) é o modelo que representa o balanço de massa por componente.

$$\rho \cdot \frac{\partial m_j}{\partial t} + \rho \cdot u_x \cdot \frac{\partial m_j}{\partial x} + \rho \cdot u_y \cdot \frac{\partial m_j}{\partial y} + \rho \cdot u_z \cdot \frac{\partial m_j}{\partial z} = R_j \quad (\text{D.72})$$

Os modelos em duas e uma dimensões serão apresentados com e sem a simplificação que supõe fluxo pistonado e velocidades constantes, respectivamente.

D.1.5.1 Modelo bidimensional

$$\rho \cdot \frac{\partial m_j}{\partial t} + \rho \cdot u_x \cdot \frac{\partial m_j}{\partial x} + \rho \cdot m_j \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} + \rho \cdot u_y \cdot \frac{\partial m_j}{\partial y} + \rho \cdot m_j \cdot \frac{\partial u_y}{\partial y} = R_j \quad (\text{D.73})$$

$$\rho \cdot \frac{\partial m_j}{\partial t} + \rho \cdot u_x \cdot \frac{\partial m_j}{\partial x} + \rho \cdot u_y \cdot \frac{\partial m_j}{\partial y} = R_j \quad (\text{D.74})$$

D.1.5.2 Modelo unidimensional

$$\rho \cdot \frac{\partial m_j}{\partial t} + \rho \cdot u_x \cdot \frac{\partial m_j}{\partial x} + \rho \cdot m_j \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} = R_j \quad (\text{D.75})$$

$$\rho \cdot \frac{\partial m_j}{\partial t} + \rho \cdot u_x \cdot \frac{\partial m_j}{\partial x} = R_j \quad (\text{D.76})$$

D.1.6 Geração ou consumo de componentes

A taxa de reação pode ser determinada através da equação de Arrhenius. A expressão final R_j é definida em função da ordem da reação.



$$R_j = k(T) \cdot C_a^n \quad (\text{D.78})$$

$k(T)$ - Equação de Arrhenius

n - Ordem da reação

A expressão de Arrhenius é representada por:

$$k(T) = A \cdot e^{\frac{-E}{RT}} \quad (\text{D.79})$$

Sendo,

A - Fator pré-exponencial.

E - Energia de ativação (J/mol)

R - Constante dos gases (J/mol.K)

T - Temperatura absoluta (K)

Detalhes sobre cinética de reações químicas podem ser encontrados com maiores detalhes em Fogler (1999).

Em um processo de incineração as equações básicas que ocorrem são relativas à queima do combustível auxiliar e da parte orgânica volátil do resíduo.

De acordo com Tillman (1991) a maior dificuldade ao se modelar a combustão é determinar quais das centenas de reações descritas em literatura melhor representariam um sistema com um número mínimo destas.

Uma vez que a otimização de processos químicos em tempo real requer agilidade computacional, adota-se um processo com combustão completa, cinética estequiométrica e instantânea.

A partir do seguinte modelo de reação segue como será realizado o cálculo de consumo dos reagentes e formação dos produtos:



A reação ocorre em um elemento de volume, como na Figura D.4, que pode ser em uma, duas ou três dimensões, conforme o modelo adotado.

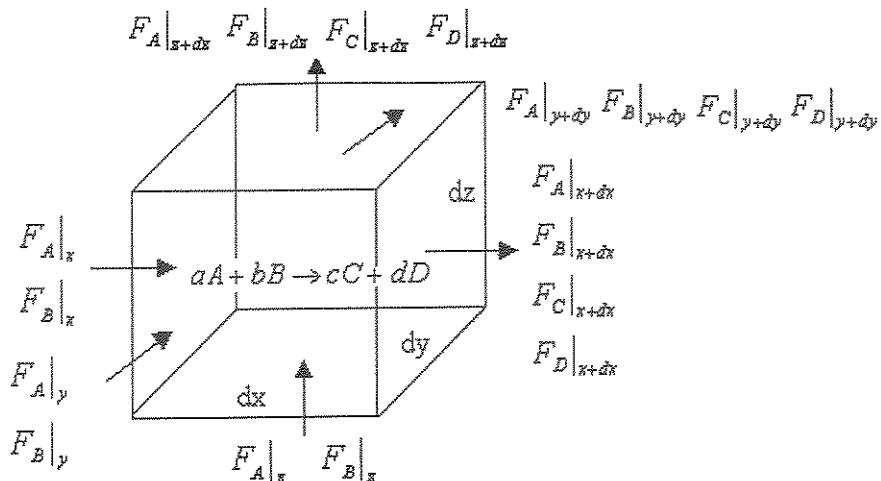


Figura D.4 - Esquema de elemento de volume no qual ocorrem as reações.

Sabendo que,

$$\frac{MM_A}{F_A} = \frac{1 \text{ kmol } A}{x} \quad \rightarrow \quad x = F_A^M = \frac{F_A}{MM_A} (\text{kmol/h}) \quad (\text{D.81})$$

F_A – Vazão mássica de A (kg/h).

MM_A – Peso molecular de A.

R_A – Taxa de reação de “A”

R_B – Taxa de reação de “B”

Se $\frac{F_A^M}{F_B^M} > \frac{a}{b}$ então o reagente “B” é limitante.

$$R_B = F_B^0$$

F_B^0 – Vazão inicial de B no elemento de volume.

$$R_A = F_A^o \cdot \frac{a/b}{F_A^M / F_B^M} \quad (D.82)$$

Se $F_B^M / F_A^M > b/a$ então o reagente "A" é limitante.

$$R_A = F_A^o$$

F_A^o – Vazão inicial de A no elemento de volume.

$$R_B = F_B^o \cdot \frac{b/a}{F_B^M / F_A^M} \quad (D.83)$$

$$R_C = \frac{c}{a} \cdot F_A^M \cdot MM_C \quad (D.84)$$

$$R_D = \frac{d}{a} \cdot F_A^M \cdot MM_D \quad (D.85)$$

Se $F_A^M / F_B^M = a/b$ a relação é estequiométrica.

$$R_A = F_A^o ; R_B = F_B^o$$

$$R_C = \frac{c}{a} \cdot F_A^M \cdot MM_C = \frac{c}{b} \cdot F_B^M \cdot MM_C \quad (D.86)$$

$$R_D = \frac{d}{a} \cdot F_A^M \cdot MM_D = \frac{d}{b} \cdot F_B^M \cdot MM_D \quad (D.87)$$