

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**Controle Global de uma Unidade de
Extração de Butadieno**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Simone Maria Marcon

Porto Alegre

2001

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Controle Global de uma Unidade de Extração de Butadieno

Simone Maria Marcon

Dissertação de Mestrado apresentada como
requisito parcial para obtenção do título de
Mestre em Engenharia

Área de concentração: Controle de Processos

Orientador:
Prof. Dr. Jorge Otávio Trierweiler

PORTO ALEGRE

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação Controle Global para uma Unidade de Extração de Butadieno elaborada por Simone Maria Marcon, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Argimiro Resende Secchi

Prof. Dr. Jörg Thöming

Dr. Mário Campos

Eng. Herbert Campos G. Teixeira

"Não entendo. Isso é tão vasto que ultrapassa qualquer entender. Entender é sempre limitado. Mas não entender pode não ter fronteiras. Sinto que sou muito mais completa quando não entendo. Não entender, do modo como falo, é um dom. Não entender, mas não como um simples de espírito. O bom é ser inteligente e não entender. É uma benção estranha, como ter loucura sem ser doida. É um desinteresse manso, é uma doçura de burrice. Só que de vez em quando vem a inquietação: quero entender um pouco. Não demais: mas pelo menos entender que não entendo."

Clarice Lispector

Agradecimentos

Quero agradecer a:

- Universidade Federal do Rio Grande do Sul, por se constituir numa instituição pública e gratuita, que possibilita o acesso de muitos jovens, inclusive aqueles oriundos de classes trabalhadoras, a uma educação reconhecidamente de grande qualidade;
- Ao Departamento de Engenharia Química, que proporcionou recursos humanos e materiais, indispensáveis a minha formação;
- Ao meu orientador Jorge Trierweiler pelo acompanhamento constante e por estimular meu interesse em pesquisa.
- Ao professor Argemiro Secchi, pelo tempo dedicado ao debate das questões referentes a esse trabalho, que engrandeceram em muito minha formação;
- Ao grupo de controle e simulação, pela solidariedade e companherismo. Em especial para o sempre presente e amigo Leandro Porto Lusa, ao colega Gustavo Neumann (Gus), aos colegas Luciano, Ricardo, Pedro e Maurício por compartilharmos ideais e projetos profissionais e ao colega Marcelo Farenzena;
- Aos meus pais Alceu e Maria e minha irmã Sandra por sempre me apoiarem e incentivarem segurando todas as dificuldades para que eu chegasse até aqui. E, a quem não posso deixar de mencionar, o cunhado parceiro Dudu e a Júlia;
- Aos meus amigos pela compreensão e carinho, em especial para o Beto, o Afonso, a Magda pelas caronas, conselhos e consertos em geral e, a Rô por todo apoio.

Resumo

Nesta dissertação é realizado o estudo e caracterização do comportamento de uma Unidade de Extração de Butadieno. O objetivo deste estudo é a proposição de estratégias de controle para esta unidade que, respeitando as restrições e características do processo, permitam que sejam alcançadas as seguintes metas operacionais: elevação da carga processável, aumento do tempo de campanha, aumento da corrente de produto e diminuição das perdas de butadieno ao longo do processo.

O estudo e proposição das estratégias de controle é feito de modo sistemático, seguindo uma metodologia na qual o aspecto fundamental é o entendimento do processo e a compreensão das relações causa e efeito entre as variáveis manipuladas, controladas (ou medidas) e distúrbios. A presença de ciclos mássicos e energéticos somados aos efeitos da destilação extrativa faz com que, muitas vezes, essa relação contrarie o que é esperado pelo senso comum.

As informações utilizadas na proposição e classificação das estruturas são oriundas de estudos em modelos do processo construídos em simuladores comerciais (ASPEN Plus v10.1 e ASPEN Dynamics). Ao longo desses estudos, as características estacionárias e dinâmicas do processo foram elucidadas, permitindo com que fosse proposta uma estrutura com potencialidade de atingir os objetivos referidos acima. Como resultados importantes podem ser citados: a importância do conjunto de parâmetros binários na modelagem termodinâmica do processo, a detecção do efeito "SnowBall", relacionado com a forma como os níveis dos equipamentos e vazões das correntes são controladas em sistemas com ciclo, e a determinação do comportamento da composição de vinil acetileno no topo da 2ª Coluna de Destilação Extrativa (componente chave de separação nesta coluna) em relação a quantidade de solvente. Conforme a maneira como a corrente de alimentação da coluna Recuperadora de Butadieno é operada (temperatura ou taxa de resfriamento constante), quando a vazão de solvente na 2ª Coluna de Destilação Extrativa é modificada, pode ocorrer uma inversão de ganho na concentração deste componente.

Abstract

In this dissertation is accomplished the study and behavior characterization of an Industrial Butadiene Unit. The aim of this work is to propose control strategies for this unit that, respecting the process restrictions and characteristics, will achieve the following operational goals: increase the operating time, the feed flowrate, and the butadiene production and increase the global butadiene recovery.

The control strategies analyses are made in a systematic way, following a methodology in which the fundamental aspect is the process knowledge and the understanding of the causes and effect relationship among the manipulated variables, controlled (or measures) and disturbances. The presence of recycles streams and mass and heat integration combined to the effects of the extractive distillation make some system variables to present unexpected responses.

The control structure development and selection were based on the simulated steady-state and dynamic behaviours which were modeled using the commercial simulators ASPEN Plus and ASPEN Dynamics v.10.1 . During those studies, a series of stationary and dynamics characteristics was elucidated, allowing the choice of a control structure capable to reach the mentioned goals. Here, the highlights issues are the following: the importance of the binary parameters group in the thermodynamic modeling, the SnowBall effect detection, related with the levels and flow rates controls in systems with mass recycle; and the determination of the vinyl acetylene behavior in the top of the 2^o Extractive Distillation Collumn (key component in this column) in relation to the solvent feed. Depending on the manner how the Butadiene Recovery Column feed stream is operated (temperature or rate coling constant), a change in the gain sign of the vinyl acetylene mass fraction can occur, when the solvent feed flow is modified.

Sumário

1. Introdução	1
1.1 Estrutura da dissertação.....	2
2. Descrição do Processo e Caracterização do Problema	5
2.1 Localização e Objetivo da Unidade	5
2.2 Descrição do Processo.....	6
2.3 Características gerais do processo.....	11
2.4 Estratégia de Controle atual da UEB	12
2.5 Restrições e Características de Operação.....	13
2.6 Objetivos de Operação e Controle	14
3. Modelagem do Processo.....	17
3.1 Simulação Estática e Modelagem Termodinâmica	17
3.1.1 Desenvolvimento do modelo estático	17
3.1.2 Definição do Modelo Termodinâmico	21
3.2 Simulação Dinâmica	27
3.2.1 Obtenção do modelo dinâmico no simulador ASPEN.....	28
3.2.2 Comparação do comportamento transiente da planta real versus modelo ...	28
3.2.3 Modelos Linearizados	34
4. Análises da sensibilidade estacionária das variáveis	43
4.1 Procedimento de Análise.....	43
4.2 Principais Conclusões	46
4.3 Proposição de alterações nas SDE	53
4.3.1 Primeira Seção de Destilação Extrativa	54
4.3.2 Segunda Seção de Destilação Extrativa	58
4.3.3 Possibilidade de controlar o BD no topo da 2° S inferindo a temperatura de topo da coluna RB	63
5. Caracterização do Comportamento Dinâmico	65
5.1 Causas das Dinâmicas Lentas na UEB.....	65
5.2 Efeito “SnowBall”.....	69
6. Proposição de Estratégias de Controle	75
6.1 Metodologia de Seleção	75
6.2 Classificação das Variáveis.....	77
6.3 Propostas de Estruturas de Controle	81
6.4 Determinação e discussão dos índices de controle	86
6.4.1 RGA	87
6.4.2 Zeros Positivos (RHP-z)	91
6.4.3 Direcionalidade do sistema	94
6.4.4 Número de Desempenho Robusto (RPN)	96
6.5 Implementação das Estruturas no Simulador Dinâmico	100
6.5.1 SC3 versus RR3 com a perda de BD controlada no topo da coluna 2° S... 100	
6.5.2 Testes da estrutura est12	104

7. Considerações Finais	111
7.1 Discussão dos Resultados	111
7.2 Trabalhos Futuros.....	113
Apêndice A1	
Comparação do comportamento dinâmico da planta e do modelo	117
Apêndice A2	
Características das Matrizes Esparsas	123
Apêndice A3	
Métodos de Integração e Tolerâncias Relativas utilizadas no Modelo Linear...	125
Apêndice A4	
Gráficos da Análise de Sensibilidade Estacionária	127
Referências bibliográficas	131

Lista de figuras

Figura 2.1: Localização da UEB dentro da central petroquímica.....	6
Figura 2.2: Caixa Preta do processo	7
Figura 2.3: Unidade de Extração de Butadieno	9
Figura 3.1: Perfil de temperatura na 1°CDE (a) e 2°CDE (b) para diferentes modelos termodinâmicos	23
Figura 3.2: Fração molar de T2B na fase líquida ao longo da 1° CDE	24
Figura 3.3: Fração molar da fase líquida dos componentes chaves na modelagem da 1°CDE (a) T2B (b) C2B (c) BD	25
Figura 3.4: Perfil de composição do MAC na 1° CDE variando de PB	27
Figura 3.5: Esquema da 1° CDE utilizado no balanço de massa	29
Figura 3.6: Representação da forma como a corrente de alimentação da coluna RB é resfriada.....	30
Figura 3.7: Diferenças entre as variáveis medidas do modelo e o processo real [(a) Vazão da corrente de topo da 1° CDE (b) C2B no topo da 1° CDE (c) Vazão da carga da 2° CDE (d) Vazão de topo da 2° CDE (e) EAC no topo da 2° CDE e (f) C2B no topo da 2° CDE]	32
Figura 3.8: Diferenças entre as variáveis manipuladas do modelo e do processo real [(a) Vazão de Refluxo da 1° CDE (b) Vazão de Selagem VS1]	33
Figura 3.9: Diferenças entre o modelo e o processo real [(a) Corrente de topo da coluna RB (b) Vazão de solvente da 2° CDE (c) Temperatura de alimentação da coluna RB].....	34
Figura 3.10: Aproximação do comportamento do sistema a uma reta.	36
Figura 3.11: Representação esquemática do modelo linear implementado no <i>Simulink</i>	36
Figura 3.12: Localização dos estados na matriz Jacobiana (A) para a 1° CDE.....	37
Figura 3.13: Comparação do modelo linear e com o não-linear. (a) BDT1 (b) Degraus Tfl	38
Figura 3.14: Resultado do modelo linear para (a) diferentes métodos de integração e (b) diferentes tolerâncias no método de integração.....	40
Figura 3.15: Fração mássica de no topo da 1° CDE alterando-se a temperatura de fundo da torre	41
Figura 4.1: Forma genérica dos gráficos gerados para análises	45
Figura 4.2: Conjunto 2° CDE e coluna RB.....	48
Figura 4.3: (a) Temperatura de topo (Tp1), (b) regiões de ganho para a Tp1	50
Figura 4.4: Representação da volatilidade relativa dos componentes na coluna	53
Figura 4.5: Esquema da 1° CDE	54
Figura 0.1: Esquema da UEB	55
Figura 4.7: Quantidade de BD perdida no fundo da 2° F em função da quantidade de C2B na alimentação.....	55
Figura 4.8: Vazões mássicas de BD, C2B e T2B na corrente de topo da 1° CDE para diferentes valores de Tfl e Solv1	58
Figura 4.9: Temperatura e frações mássicas no topo da RB para diferentes Tf4 - (a) Temperatura de topo (b) BD (c) VAC.....	63

Figura 5.1:	Esquema simplificado do reciclo entre o topo da RB e o sistema de compressão	66
Figura 5.2:	Diagrama de Blocos do Sistema de Reciclo	67
Figura 5.3:	Efeitos do reciclo na resposta dinâmica do processo	68
Figura 5.4:	Correntes abordadas no estudo do efeito “SnowBall”	70
Figura 5.5:	Variação da vazão mássica das correntes do sistema de reciclo para o <i>Teste 1</i>	71
Figura 5.6:	Variação nas vazões das correntes (a) c11 (b) c15 para o <i>Teste 1</i>	71
Figura 5.7:	Variação da vazão mássica das correntes do sistema de reciclo para o <i>Teste 2</i>	72
Figura 5.8:	Variação nas vazões das correntes (a) c11 (b) c15 para o <i>Teste 2</i>	72
Figura 5.9:	Variação da vazão mássica das correntes do sistema de reciclo para o <i>Teste 3</i>	73
Figura 6.1:	Metodologia utilizada na seleção de estratégias de controle	76
Figura 6.2:	Variáveis Manipuladas da UEB	80
Figura 6.3:	Variáveis Medidas/Controladas da UEB	81
Figura 6.4:	Variáveis Manipuladas 1º CDE	82
Figura 6.5:	Variáveis Controladas 1º CDE	82
Figura 6.6:	Estrutura ES1_1	83
Figura 6.7:	Estrutura ES1_2	83
Figura 6.8:	Estrutura ES1_3	83
Figura 6.9:	Estrutura ES1_4	83
Figura 6.10:	Variáveis Manipuladas 2º SDE	84
Figura 6.11:	Variáveis Controladas 2º SDE	84
Figura 6.12:	Estrutura ES3_1	85
Figura 6.13:	Estrutura ES3_2	85
Figura 6.14:	Estrutura ES3_3	85
Figura 6.15:	Estrutura ES3_4	85
Figura 6.16:	Estrutura ES3_5	86
Figura 6.17:	RGA (w): (a) Modelo 1 - Est11, (b) Modelo 2 - ES1_1 e (c) Modelo 3 - ES3_1	89
Figura 6.18:	RGA (w): (a) Modelo 1 - Est32, (b) Modelo 2 - ES1_3 e (c) Modelo 3 - ES3_2	89
Figura 6.19:	γ^* para as estruturas est1_	95
Figura 6.20:	γ^* para as estruturas est2_	95
Figura 6.21:	γ^* para as estruturas est3_	95
Figura 6.22:	γ^* para as estruturas est4_	95
Figura 6.23:	Representação esquemática de um processo com controle “feedback”	97
Figura 6.24:	Forma da função peso do RPN	97
Figura 6.25:	Gráfico do RPN para as estruturas est1_	99
Figura 6.26:	VACT3 para diferentes valores de SC3 nos casos (a) e (b)	101
Figura 6.27:	VACT3 para diferentes valores de RR3	102
Figura 6.28:	VACT3 e SC3 – Degrau SC3	103
Figura 6.29:	VACT3 e RR3 – Degrau RR3	103
Figura 6.30:	Malha de fundo - degrau SC3	103
Figura 6.31:	Malha de fundo - degrau RR3	103
Figura 6.32:	Teste 1 - Distúrbio na vazão de carga	105

Figura 6.33: Teste 2 – Distúrbio na composição e temperatura da carga (a, b, c, d) e temperatura do solvente (e).....	105
Figura 6.34: Malhas de controle est12 – variáveis medidas e controladas.....	106
Figura 6.35: Malhas de controle est12 – variáveis medidas e controladas.....	107
Figura 6.36: Comparação das frações mássicas dos componentes envolvidos na estrutura de controle e do C2BF1 e EACT3 nas três situações.....	108
Figura 6.37: Perda de BD no processo	109
Figura 7.1: Comparação da estrutura de controle com e sem atraso na análise	114
Figura A1.1: Distúrbios modelados e dados da planta [(a) BD na carga (b) C2B na carga (c) T2B carga (d) Temperatura da carga (e) Temperatura do solvente]....	117
Figura A1.2: Alterações nas variáveis manipuladas no modelo e planta: [(a) Vazão de solvente 1° CDE (b) Vazão de Refluxo 1° CDE (c) Vazão de Selagem (VS1) (d) Vazão de solvente 2° CDE (e) Vazão de Refluxo 2° CDE].....	117
Figura A1.3: Vazões do modelo e dados de planta [(a) Topo da 1° CDE (b) Fundo da 1° CDE (c) Carga da 2° CDE (c) Topo da 2° CDE (d) Topo da coluna RB]..	118
Figura A1.4: Composições modelo e dados de planta [(a) C2B topo da 1° CDE (b) C2B fundo da 1° CDE (c) EAC topo da 2° CDE (d) T2B topo da 2° CDE (e) C2B topo da 2° CDE (f) BD topo da coluna RB]	118
Figura A1.5: Temperaturas modelo e dados de planta [(a) Topo da 1° CDE (b) Topo da 2° CDE (c) Carga da coluna RB].....	119
Figura A1.6: Distúrbios modelados e dados da planta [(a) BD na carga (b) C2B na carga (c) T2B carga (d) Temperatura da carga (e) Temperatura do solvente]....	119
Figura A1.7: Alterações nas variáveis manipuladas no modelo e planta: [(a) Vazão de solvente 1° CDE (b) Vazão de Refluxo 1° CDE (c) Vazão de Selagem (VS1) (d) Vazão de solvente 2° CDE (e) Vazão de Refluxo 2° CDE].....	120
Figura A1.8: Vazões do modelo e dados de planta [(a) Topo da 1° CDE (b) Fundo da 1° CDE (c) Carga da 2° CDE (c) Topo da 2° CDE (d) Topo da coluna RB]..	120
Figura A1.9: Composições modelo e dados de planta [(a) C2B topo da 1° CDE (b) C2B fundo da 1° CDE (c) EAC topo da 2° CDE (d) T2B topo da 2° CDE (e) C2B topo da 2° CDE (f) BD topo da coluna RB]	121
Figura A2: Matriz Jacobiana da 1° CDE.....	123

Lista de tabelas

Tabela 2.1: Seções, equipamentos e componentes chaves de separação da UEB	8
Tabela 2.2: Composição Média da Caga C4.....	10
Tabela 2.3: Volatilidade Relativa dos componentes em ordem decrescentes.....	11
Tabela 3.1: : Composição da Alimentação (frações mássicas).....	19
Tabela 3.2: Modelos de Coeficientes de Atividade, Equação de Estado e de PB testados	21
Tabela 3.3: Volatilidade Relativa (VR) do MAC e BD com e sem solvente	26
Tabela 4.1: Variáveis Manipuladas (VM) e Variáveis distúrbios (VD)	44
Tabela 4.2: Variáveis Medidas (Vme)	44
Tabela 4.3: Casos estudados na análise de sensibilidade.....	45
Tabela 4.4: Zeros positivos (z) das funções de transferência (TF) de cada região	52
Tabela 4.5: Condições estudadas para a 1° CDE	56
Tabela 4.6: Recuperação global de BD.....	57
Tabela 4.7: Relação entre a quantidade dos componentes nas correntes e a quantidade alimentada na unidade	60
Tabela 4.8: Recuperação Global de BD.....	60
Tabela 4.9: Condições estudadas para a 2° CDE	61
Tabela 4.10: Recuperação Global de BD.....	61
Tabela 4.11: Fração dos componentes no topo e fundo das extratoras em relação à alimentação	62
Tabela 4.12: Fração dos componentes no topo da coluna BD em relação à alimentação	62
Tabela 5.1: Ganhos do sistema para diferentes valores de k_2	69
Tabela 6.1: Variáveis Manipuladas.....	78
Tabela 6.2: Variáveis Medidas / Controladas	79
Tabela 6.3: RHP–z de transmissão para as estruturas propostas	92
Tabela 6.4: Direção de entrada e saída para Z5, Z2 e Z1	93
Tabela 6.5: RPN para as estruturas propostas.....	99
Tabela 6.6: Ganho VACT3 em relação a SC3 e RR3.....	102
Tabela 6.7: Variação de energia para reduzir em 10 % VACT3	104
Tabela A2: Espaço utilizado para alocar a matriz A na forma cheia e esparsa	124
Tabela A4.1: Variáveis da 1° SDE	127
Tabela A4.2: Variáveis da 2° SDE	128
Tabela A4.3: Variáveis da 2° SDE	129

Capítulo 1

Introdução

Esta dissertação trata de uma unidade real e operante de extração de butadieno, e tem por objetivo propor estratégias de controle que permitam um aumento da produtividade e otimização deste processo. Esses objetivos serão alcançados através da elevação da carga processável, que está diretamente relacionada com o aumento do tempo de campanha, e pelas diminuições das perdas de 1,3-butadieno ao longo do processo. As estratégias propostas são baseadas num estudo sistemático, nas quais, os principais aspectos são o entendimento do processo e a caracterização do comportamento global da unidade.

A unidade de extração de butadieno tem a função de separar o 1,3-butadieno, que é o monômero base na produção de borracha sintética, de uma corrente de hidrocarbonetos C4. Unidades como essa são encontradas em centrais petroquímicas de diversos lugares do mundo, com pequenas modificações estruturais no processo, que variam conforme o período no qual a unidade foi colocada em operação. Assim, os resultados dessa dissertação podem ser estendidos a essas plantas após a adequação da solução às peculiaridades de cada caso.

Uma das características desse processo é a integração mássica e energética, principalmente entre as duas seções de destilação extrativa. Além dos fatores relacionados com essas integrações, existem os efeitos da destilação extrativa. O somatório desses fatores atribui um comportamento particular a esse processo, fazendo com que seja necessário o perfeito entendimento da influência da alteração de seus graus de liberdade, pois a relação causa efeito, muitas vezes, é contrária ao que é esperado pelo senso comum. As malhas de reciclo afetam principalmente a resposta dinâmica do processo, sendo fundamental uma análise sistemática global para definição de uma estratégia de operação e controle eficientes.

Neste trabalho foi dedicada atenção especial a escolha do pareamento mais adequado entre as entradas e saídas do sistema. A definição do tipo de controlador (PID, MPC, entre outros) pode ser feita de forma mais racional, após o devido entendimento das restrições e potencialidades do sistema em questão, já que conforme FARINA 2001: “Uma boa escolha

do pareamento entre as variáveis de entrada e saída do sistema é a decisão mais importante para um bom projeto de um sistema de controle, cujos objetivos são reunir características como rejeição a distúrbios (características reguladoras), baixa interação (características servo) e robustez (avaliada matematicamente pelo condicionamento da matriz de transferência do sistema para várias frequências). Um sistema onde a estrutura de controle não foi devidamente escolhida apresenta limitações que mesmo as mais modernas técnicas de controle não são capazes de superar”.

1.1 Estrutura da dissertação

A dissertação está dividida em sete capítulos. No capítulo a seguir é feita uma breve descrição do processo de Extração de Butadieno, apresentando as principais características dos equipamentos e a forma como atualmente o processo é controlado. As metas de operação que devem ser atingidas através da estratégia de controle proposta também são apresentadas neste capítulo.

No terceiro capítulo pode ser visto o desenvolvimento da modelagem estática e dinâmica do processo. Esses modelos foram construídos no simulador comercial ASPEN Plus e ASPEN Dynamics v10.1, e seus resultados comparados com os dados de planta a fim de verificar se os modelos reproduziam satisfatoriamente o comportamento da unidade. Após a modelagem no ASPEN, a qual gerou modelos não-lineares, realizou-se a construção do modelo linear para o processo no *Simulink* (MATLAB).

O quarto capítulo trata da análise de sensibilidade estacionária das variáveis, este estudo é feito com base no modelo estacionário desenvolvido no terceiro capítulo. A análise de sensibilidade gera informações sobre a forma das interações entre as entradas e saídas do sistema, sendo o ponto de partida para o esboço das primeiras estruturas de controle com capacidade para atingir os objetivos propostos.

No quinto capítulo são abordadas algumas características do comportamento dinâmico do processo, analisadas com base no modelo dinâmico não-linear da unidade desenvolvido no terceiro capítulo. Dois aspectos serão descritos: as causas das dinâmicas lentas do processo e o efeito “Snowball”.

No sexto capítulo é descrita a metodologia seguida na avaliação e determinação de estratégias de controle. Após, as possíveis estratégias de controle são classificadas, utilizando índices que determinam os melhores emparelhamentos entre entradas e saídas (RGA), a direcionalidade (Condicionamento Mínimo) e a controlabilidade do sistema de forma robusta (RPN). As propostas mais promissoras são testadas no modelo dinâmico não-linear.

Para finalizar, o sétimo capítulo cita os principais resultados e conclusões obtidos neste trabalho, propondo algumas idéias para trabalhos futuros que poderiam melhorar ainda mais a operação da unidade.

Capítulo 2

Descrição do Processo e Caracterização do Problema

O objetivo deste capítulo é apresentar e caracterizar o problema em estudo. Na parte inicial, será feita a descrição do processo de extração de Butadieno, a fim de promover o entendimento básico do processo. O problema em estudo e os objetivos operacionais que devem ser atingidos pela estratégia de controle a ser proposta nesta pesquisa são apresentados a seguir.

2.1 Localização e Objetivo da Unidade

A Unidade de Extração de Butadieno (UEB) é encontrada, usualmente, em diversas centrais petroquímicas. Sua função é separar 1,3-Butadieno (BD) de uma corrente composta de hidrocarbonetos C₄, derivada do craqueamento da nafta, produzindo uma corrente de BD produto de alta pureza (99,6 %). A figura 2.1 mostra a localização da UEB, que será foco deste estudo, dentro da central petroquímica.

Como a corrente de alimentação da UEB é composta por hidrocarbonetos de volatilidade relativa similar (corte C₄+), o princípio básico de separação nesta unidade é a destilação extrativa. Na destilação extrativa altera-se a atividade dos componentes da fase líquida de modo que a mistura possa ser eficientemente separada nos diversos produtos. A alteração da atividade é feita através da adição de uma substância mais pesada que os componentes da mistura, chamada de solvente. O solvente tem uma afinidade maior com alguns componentes de forma a carregá-los para o fundo da coluna permitindo, com isso, a separação pretendida.

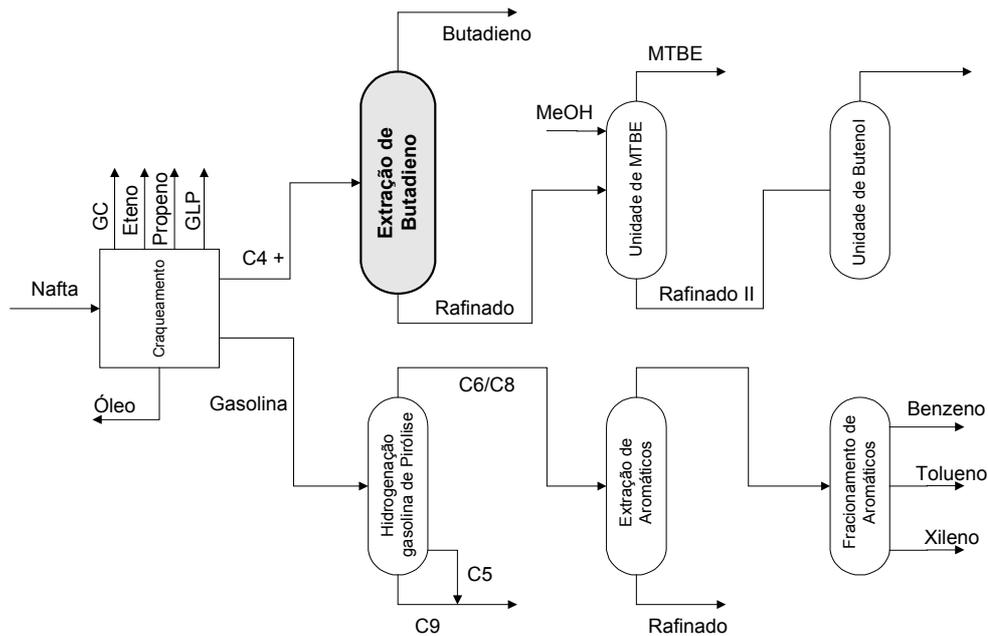


Figura 2.1: Localização da UEB dentro da central petroquímica

2.2 Descrição do Processo

A UEB é dividida em quatro seções: 1º Seção de Destilação Extrativa, 2º Seção de Destilação Extrativa, a Seção de Especificação de Butadieno e a Seção de Regeneração de Solvente. A figura 2.2 mostra esquematicamente as três primeiras seções e os componentes separados em cada uma delas.

Na 1º SDE a corrente C4 de alimentação é separada em dois grupos:

- butanos e butenos, que são menos solúveis no solvente;
- butadienos e acetilenos, que são mais solúveis no solvente.

As correntes de butadienos e acetilenos, após serem comprimidas, vão para a 2º SDE, onde são separados os acetilenos (mais solúveis no solvente). Os butadienos são enviados para a SEB, onde esta corrente é purificada em duas colunas fracionadoras, obtendo-se o produto 1,3-butadieno especificado. O solvente utilizado no processo é a dimetil-formamida (DMF).

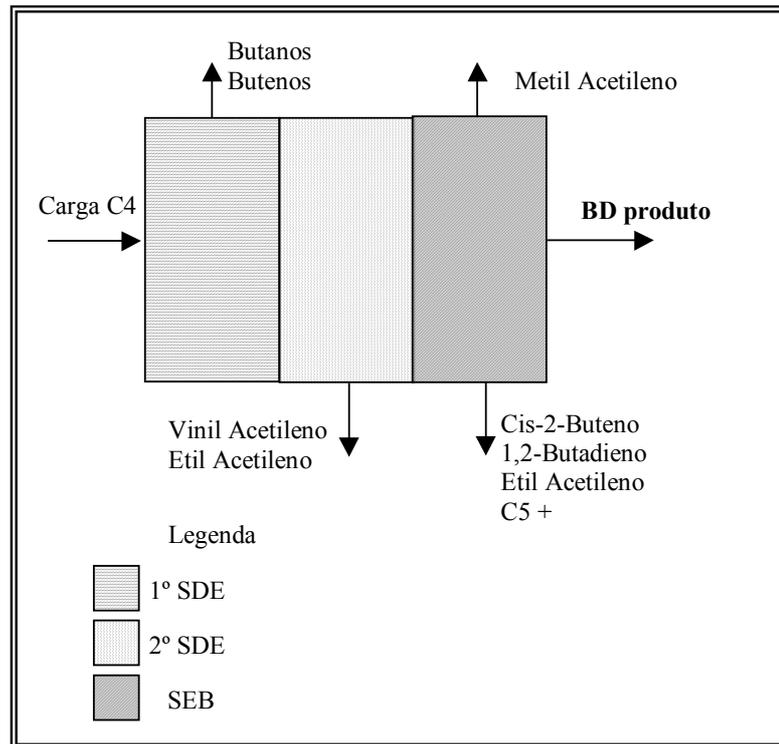


Figura 2.2: Caixa Preta do processo

A classificação das seções, com os principais equipamentos e componentes chaves de separação de cada seção estão na tabela (2.1). As abreviações utilizadas nessa tabela estão descritas a seguir. Esta simbologia será empregada ao longo de todo o trabalho.

1º SDE: 1º Seção de Destilação Extrativa

2º SDE: 2º Seção de Destilação Extrativa

SEB: Seção de Especificação de Butadieno

SRS: Seção de Regeneração de Solvente

CDE: Coluna de Destilação Extrativa

1º e 2º S: Regeneradoras de solvente

RB: Recuperadora de BD

1º e 2º F: Fracionadoras

RS: Recuperadora de Solvente (RS1: substâncias de baixo ponto de bolha; RS2: substâncias de alto ponto de bolha).

Na figura 2.3 é possível visualizar as seções e equipamentos que fazem parte da unidade. A seguir é feito um relato mais aprofundado do processo de separação de butadieno.

Tabela 2.1: Seções, equipamentos e componentes chaves de separação da UEB

Seção	Equipamento	Componente Chave
1° SDE	1° CDE, 1° S	Trans-2-buteno (T2B) Cis-2-buteno (C2B)
2° SDE	2° CDE, RB e 2° S	Vinil- Acetileno (VAC) Etil-acetileno (EAC)
SEB	1° F e 2° F	Metil-acetileno (MAC) Cis-2-buteno (C2B) 1,2 Butadieno (12BD)
SRS *	RS1	Dímeros de BD Água
	RS2	Alcatrão

* não aparece na figura 2.3

A corrente C4 (carga) é vaporizada e alimentada, juntamente com o solvente, na 1° CDE. Nesta coluna os componentes menos saturados que o 1,3-Butadieno (BD) são separados, saindo na corrente de topo. O BD e os hidrocarbonetos (HC) mais saturados, são arrastados com o solvente para o fundo da coluna, permanecendo no processo. Essa corrente de fundo, rica em solvente, serve de alimentação para a coluna de regeneração de solvente (1° S).

O solvente, por ser o componente mais pesado, sai pelo fundo da 1° S e, após ser resfriado, é retornado para as colunas de extração (1° CDE e 2° CDE). O resfriamento do solvente é necessário para prevenir a sua vaporização, a qual diminuiria a capacidade de extração e, conseqüentemente, sua eficácia. A maior parte do calor cedido no resfriamento do solvente é usado em várias partes do processo, como por exemplo: no pré-aquecimento da alimentação, aquecimento de refervedores auxiliares, etc.

Os componentes chaves de separação na 1° SDE são o C2B, T2B (tabela 2.1). Todo o T2B que não for retirado na 1° CDE não pode ser separado em nenhuma outra parte do processo, permanecendo como impureza no produto final. O C2B remanescente na corrente de fundo da coluna pode ser ainda removido na 2° F, que é a coluna que especifica o produto final.

A corrente de topo da 1° S, composta basicamente por BD e outros HC mais insaturados que o BD, vai para o sistema de compressão. Lá, a pressão da corrente é elevada de 1.2 para 6 kgf.cm⁻² permitindo, desta forma, a alimentação na 2° CDE e no fundo da 1° CDE (corrente VS1). Da massa total que deixa o sistema de compressão, cerca de 15 % é recirculado para o fundo da 1° CDE e o resto é enviado para a 2° CDE. A corrente VS1 é de importância fundamental na operação desta coluna, sua função é aumentar a pureza de BD no

fundo da coluna, agindo preferencialmente sobre o C2B. Por ela ser rica em BD, a separação do corte BD/[C2B,T2B] aumenta, já que o solvente tem maior afinidade com o BD do que com o C2B e o T2B.

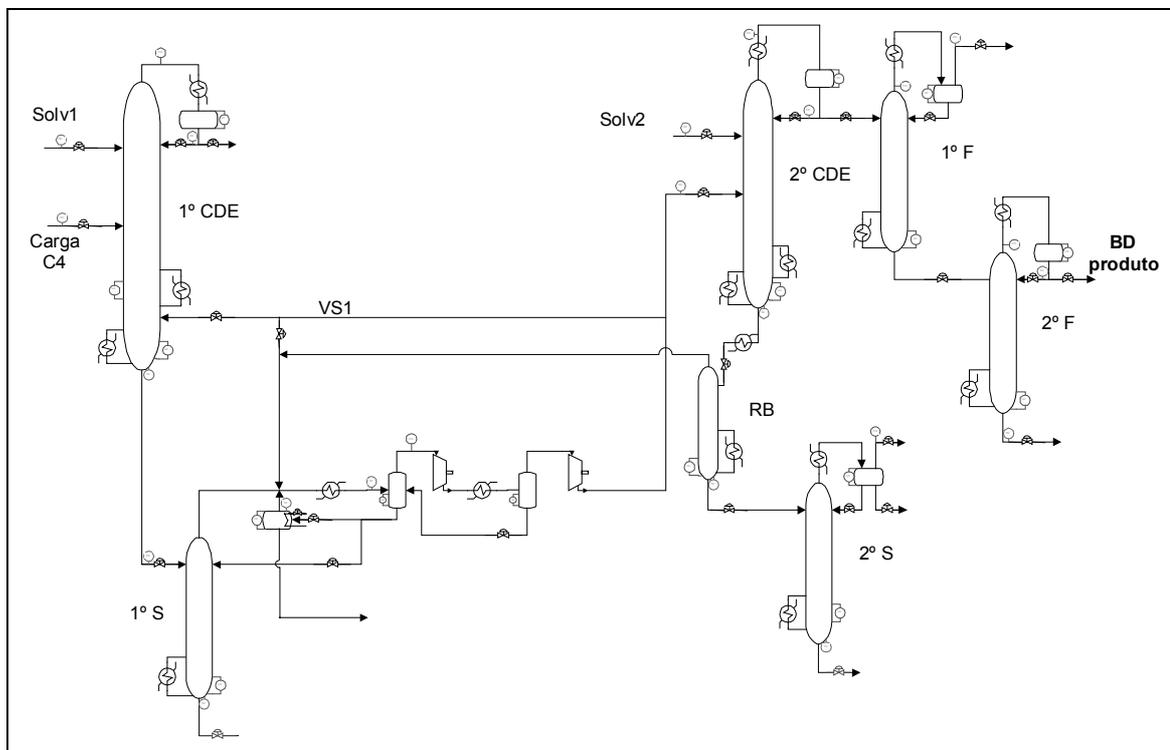


Figura 2.3: Unidade de Extração de Butadieno

Na 2º CDE são removidos os HC mais insaturados que o BD, principalmente o VAC. Como o solvente tem maior afinidade pelas espécies mais insaturadas, elas são arrastadas para o fundo e a maior parte do BD sai na corrente de topo. Todo o VAC presente na alimentação deve ser completamente eliminado do processo antes da seção de especificação, pois ele forma um azeótropo com cis-2-buteno, podendo comprometer a operação das colunas fracionadoras.

Uma quantidade considerável de BD também é arrastada para o fundo da 2º CDE. A fim de evitar perdas excessivas de produto, essa corrente vai para uma coluna recuperadora de BD (RB). O produto de topo da coluna RB é enviado para o sistema de compressão, e o de fundo vai para a 2º S, com o objetivo de separar o solvente dos HC mais solúveis. A 2º S é similar a regeneradora de solvente da 1º SDE.

Apesar da maioria das impurezas serem removidas nas SDE's algumas, de volatilidade próxima ao BD, mesmo na presença de solvente, ainda permanecem. Essas impurezas são removidas na seção SEB. Esta seção é composta por duas colunas, a primeira (1º F) remove as substâncias de baixo ponto de bolha, especialmente o MAC. A 2º F remove as substâncias de ponto de bolha superior ao BD, tais como: cis-2-buteno, 1,2-butadieno, etil-acetileno e C5.

A última seção que compõe a unidade é a SPR. Esta seção tem a função de purificar o solvente que recircula no processo. Pequenas quantidades desse solvente são purgadas, em

locais pré-definidos, e enviadas para a SPR. Existem dois tipos de impurezas que devem ser removidas do solvente, as de baixo ponto de bolha (água, dímeros, hidrocarbonetos) e as de alto ponto de bolha (alcatrão). Estas impurezas são removidas respectivamente em uma coluna de refino (RS1) e num vaso aquecedor (RS2).

Como é possível observar na descrição do processo, a SPR não é integrada ao circuito de hidrocarbonetos. Sua operação não afeta diretamente o desempenho do processo, desde que seja garantida a pureza do solvente que está circulando. Desta forma, considerando que a purificação do solvente está sendo realizada de maneira satisfatória, a SPR não será abordada neste estudo.

A tabela 2.2 mostra a composição média da carga C4 e a tabela 2.3 a volatilidade relativa dos componentes, com e sem solvente, em relação ao BD.

Tabela 2.2: Composição média da Carga C4

Componentes	% massa
Propano, Propileno	0,8
Propadieno	0,2
n-butano, i-butano	6,9
1-buteno, i-buteno	38,7
Trans-2-buteno	4,6
Cis-2-buteno	2,9
1,3-Butadieno	44,0
Metil acetileno	0,5
1,2-butadieno	0,2
Etil acetileno	0,1
Vinil acetileno	1,0
HC C5 +	0,2

Fonte: Manual de operação da Copene

Tabela 2.3: Volatilidade Relativa dos componentes em ordem decrescentes

	Com Solvente		Sem solvente
Propano	13,5	Propeno	3,2
Isobutano	8,52	Propadieno	3
Propeno	7,73	Propano	2,7
n-Butano	4,37	Metil-acetileno	2
isobuteno	2,69	Isobutano	1,2
Buteno-1	2,66	Isobuteno	1,03
propadieno	2,29	Buteno-1	1,01
Trans-2-buteno	2,03	1,3-butadieno	1
Cis-2-buteno	1,65	n-butano	0,88
1,3-butadieno	1	Trans-2-buteno	0,86
Metil-acetileno	0,92	Vinil-acetileno	0,83
1,2-butadieno	0,52	Cis-2-buteno	0,8
Etil-acetileno	0,41	Etil-acetileno	0,7
Vinil-acetileno	0,18	1,2-butadieno	0,62

Fonte: Manual de operação da Copene

2.3 Características gerais do processo

Segundo um *Technical Report* – DMC (1995) o processo de extração de Butadieno é caracterizado por dinâmicas lentas, o tempo de resposta das variáveis na UEB é superior a dez horas. Desta forma, as mudanças causadas por alterações de variáveis manipuladas ou distúrbios serão captadas no produto final após um período muito longo.

Atualmente, o controle da qualidade do produto final e composições das principais correntes do processo estão em malha aberta. Este fato torna-se bastante problemático devido ao alto tempo de resposta. A determinação de uma estratégia de operação e fechamento dessas malhas de controle é essencial para melhorar o processo. Assim, evita-se que sejam tomadas ações equivocadas para correções de distúrbios ou alterações de pontos de operação. Outro ponto problemático deste processo é a polimerização das diolefinas causada pelas elevadas temperaturas nas quais as colunas de extração devem operar. Os polímeros depositam-se sobre as superfícies de troca térmica, reduzindo o tempo de campanha e aumentando o consumo energético.

O objetivo deste capítulo é mostrar as restrições na operação e os objetivos de controle para a UEB. Na seção 2.4 é feita uma rápida descrição da maneira como é controlada a recuperação e pureza do produto final atualmente. A seguir são descritas as restrições do processo e as metas para a operação que devem ser atingidas, através da escolha de uma estratégia de controle adequada. Os fatores causadores das dinâmicas lentas são abordados no capítulo 5, que descreve o comportamento dinâmico da unidade.

2.4 Estratégia de Controle atual da UEB

Atualmente, todo o controle de recuperação e pureza do produto na UEB está em malha aberta. A manutenção desses parâmetros em valores satisfatórios é feita de forma manual, com base no conhecimento dos engenheiros e operadores no processo. Como o tempo de resposta desta unidade é extremamente lento, os efeitos de alterações causadas por distúrbios ou pela mudança de variáveis manipuladas demoram para serem captados. Assim, na tentativa de corrigir a ação de distúrbios são tomadas, muitas vezes, ações contraditórias fazendo com que o processo oscile aumentando o tempo necessário para atingir o estado estacionário.

As principais variáveis utilizadas atualmente no controle das composições na 1º CDE são a vazão de solvente e vazão de selagem (VS1). Quando são feitas alterações na vazão de solvente da 1º CDE, a vazão de refluxo desta coluna é modificada, essas modificações não afetam as composições, servindo somente para evitar a perda de solvente pela corrente de topo. Para o controle da 2º SDE as principais variáveis manipuladas são a vazão de solvente e razão de refluxo, que estão vinculadas com a 2º CDE.

O controle das Regeneradoras de solvente tem apenas a função de manter a corrente de fundo dessas colunas isentas de hidrocarbonetos, para que ela possa ser realimentada nas extratoras. As variáveis relacionadas com essas colunas não afetam diretamente a pureza do produto, a não ser que o solvente que é recirculado esteja contaminado com hidrocarbonetos. O controle da operação dessas colunas é feito através de modificações na vazão de refluxo e temperatura de fundo. A temperatura de fundo deve ser igual a temperatura de ebulição do solvente na pressão a qual a coluna está operando.

No modelo estacionário da unidade foram simuladas atenuações de distúrbios utilizando alterações nas variáveis citadas acima. Para tornar a avaliação do controle utilizado compatível com o que é feito realmente, foi feita análise de dados de planta. Nesta análise foi determinada a grandeza e forma como as ações nas variáveis manipuladas são feitas. No decorrer da dissertação é mostrado um caso de atenuação de distúrbios na carga, retirado de dados reais do processo, no qual, tanto os distúrbios como as ações tomadas na planta foram modeladas a fim de atestar a eficácia dessas ações. Este exemplo tem o intuito de demonstrar o comportamento da unidade com a estratégia de controle atual.

Uma das vantagens desta unidade, no que tange a proposição de estratégias de controle, é a quantidade considerável de instrumentos de medida. Existem, além de uma série

de medidores de temperatura nas colunas, os analisadores de composição “on-line” nas principais correntes. Não foram realizados estudos quanto a confiabilidade dessas medidas, porém após a determinação de uma estratégia de controle, onde esses medidores estejam presentes é necessária à avaliação e correção de possíveis problemas nas medidas.

O primeiro efeito do fechamento das malhas de controle de pureza e recuperação do produto final será fazer com que a UEB atinja de maneira mais eficaz o estado estacionário, tanto para a correção de distúrbios como para a alteração de pontos de operação. Isto, além de aumentar diretamente a recuperação do produto, faz com que haja uma redução no consumo energético.

2.5 Restrições e Características de Operação

As principais restrições e características de operação da UEB são [Manual de Operação da Copene]:

- a) A temperatura de operação do fundo das colunas extrativas (1° CDE e 2° CDE) deve ser mantida abaixo de 145°C, para prevenir problemas com depósitos provocados pela polimerização de diolefinas;
- b) Os componentes C2B e T2B são os componentes críticos a serem separados na 1° CDE. Usualmente, o teor de C2B na base desta coluna é aproximadamente 2,5 wt.% e o teor de T2B é cerca de 0,05 wt. %, ambos em base mássica isenta de solvente (wt.%). A impureza no produto final provocada pelo C2B ainda pode ser removida na 2° F por diferença de ponto de ebulição. Por outro lado, a impureza decorrente do T2B não pode mais ser separada em nenhuma outra parte do processo. Para entender isso, é interessante analisar as informações da tabela 2.3 sobre a volatilidade dos componentes com e sem solvente. O T2B que não foi separado na 1° CDE ruma para a 2° SDE, onde são separados os componentes com volatilidade relativa mais baixa que o BD, na presença de solvente. Eles deixam o processo através da corrente de fundo desta seção. A corrente de topo é formada pelo BD e os componentes mais voláteis que ele na presença de solvente, como o T2B. Esta corrente é enviada para a SEB, na qual existem colunas de destilação que separam os produtos por diferença de ponto de ebulição. Como a volatilidade do T2B é muito próxima a do BD não é possível separar o montante deste componente existente na alimentação dessa seção da corrente de BD produto;
- c) O VAC forma um azeótropo com o C2B, cujo o ponto de ebulição é inferior ao BD. Portanto, este componente deve ser eliminado completamente antes da seção de especificação. Dada a sua maior solubilidade em DMF que o C2B, o VAC é facilmente separado indo juntamente com outros componentes mais solúveis (tais como: EAC, 12BD) para o fundo da 2° CDE;
- d) A corrente de fundo da 2° CDE ainda contém uma quantidade considerável de 13BD. O principal objetivo da coluna RB consiste exatamente na recuperação deste componente.

Ela deve ser operada de forma a vaporizar a maior quantidade possível de BD mantendo as quantidades de VAC e EAC em níveis aceitáveis.;

- e) O MAC é removido na 1º F. A segunda coluna de especificação (2º F) remove C2B, 12BD e EAC que não saíram pelo fundo da 2º CDE e hidrocarbonetos C₅ que ainda estejam presentes especificando, desta forma, o produto final que sai pelo topo da 2º F.

2.6 Objetivos de Operação e Controle

A estratégia de controle proposta para a UEB tem que respeitar às restrições e características de operação citadas acima e ser capaz de atingir os seguintes objetivos:

1. Elevação na carga processável;
2. Aumento do tempo de campanha;
3. Aumento da corrente de produto;
4. Diminuição das perdas de BD ao longo do processo.

O aumento da carga processável e o aumento do tempo de campanha são dois pontos intimamente relacionados. A polimerização provocada pelas temperaturas elevadas se acumula nas superfícies de troca térmica diminuindo a capacidade processável da unidade. O grau de polimerização é tanto uma função da carga processável quanto do tempo de campanha. Uma carga maior leva a uma diminuição do tempo de campanha, enquanto que com cargas menores a unidade é capaz de operar por mais tempo. A adição de um anti-polimerizante juntamente com o uso de refeedores substitutos já são capazes de aumentar o tempo de campanha. O objetivo é aumentar a carga sem ter que se reduzir o tempo de operação. Para isso, se faz necessário o uso de uma estratégia de controle mais avançada para as duas colunas extrativas de destilação, a qual só será alcançada se for dada atenção especial as diversas correntes de reciclo que ligam estas colunas conferindo uma dinâmica toda especial para a UED. No capítulo 6 é feito um estudo dos efeitos do reciclo e suas influências no processo.

Naturalmente, um melhor controle das colunas de destilação extrativa já será capaz de aumentar a produção de 13BD, principalmente, através da diminuição das suas perdas nas colunas 1º CDE e RB. A primeira coluna de especificação (1º F) é outro ponto onde há considerável perda de 13BD. Uma melhor estratégia de controle para esta coluna será capaz de reduzir consideravelmente as perdas de 13BD na unidade.

O quarto objetivo será alcançado através da proposição da melhor estratégia de controle para a coluna de especificação do produto (2º F). Segundo LUYBEN (1992) colunas de alta pureza apresentam sérios problemas de não linearidade e direcionalidade, esses problemas podem ser resolvidos através de uma correta escolha das variáveis manipuladas e controladas para a coluna.

Neste trabalho, devido a complexidade do processo, somente as estratégias de controle vinculadas com as duas seções de extração serão estudadas. Em estudos subsequentes serão analisadas formas de operar a seção de especificação de produto.

Capítulo 3

Modelagem do Processo

O desenvolvimento de um modelo estático e de um modelo dinâmico representativos da unidade tem importância fundamental neste tipo de estudo. Pois é a partir das respostas geradas pelos modelos que serão baseadas as propostas de alterações no processo e as possíveis estratégias de controle que visam uma melhor condição operacional para a planta.

Na seção 3.1 é mostrada a modelagem estacionária do processo e na seção 3.2 a modelagem dinâmica.

3.1 Simulação Estática e Modelagem Termodinâmica

Além dos aspectos relacionados com a reprodutibilidade do processo, a construção da simulação estática é o ponto de partida para o entendimento do sistema e a base para a obtenção da simulação dinâmica. Para o desenvolvimento e execução do modelo optou-se pela utilização do simulador comercial ASPEN PLUS v.10.1-0.

As seções 3.1.1 e 3.1.2 apresentam os passos básicos para a construção de um modelo representativo do processo, enfocando principalmente a definição de um modelo termodinâmico adequado.

3.1.1 Desenvolvimento do modelo estático

Antes de iniciar a construção do modelo, a principal coisa a ser feita é um estudo prévio do processo, o que possibilita o conhecimento das suas características básicas e seleção das principais variáveis de operação. O conhecimento dessas variáveis serve para a fase inicial de montagem e para a posterior comparação dos resultados do modelo com os valores

da planta real. Para a coleta dos valores que melhor representem essas variáveis, é importante o acesso a um banco de dados atual do processo, a partir do qual é possível determinar o período de operação em que o conjunto de variáveis está mais representativo. Os valores médios desse período, para cada variável, são utilizados na construção do modelo.

Abaixo estão listados os passos básicos para a construção do modelo estático:

- Seleção dos Componentes;
- Montagem do Fluxograma do Processo;
- Modelagem Termodinâmica;
- Convergência da Simulação;
- Análise dos resultados e comparação com os dados reais (Seleção dos Dados de Planta).

Os passos que demonstraram maior dificuldade na modelagem do sistema necessitando cuidados especiais são descritos em maiores detalhes nas seções subsequentes. Uma descrição mais detalhada das etapas na montagem do modelo estático pode ser vista em LUSA2000.

Seleção dos Componentes

O primeiro passo na construção da simulação é a escolha das espécies envolvidas no processo e suas quantidades na alimentação. Inicialmente, a corrente de alimentação utilizada foi a mais completa possível, utilizando os dados dos analisadores de carga, de correntes intermediárias e de produto. Através de um balanço de massa nessas correntes, chegou-se a um valor aproximado da carga para a unidade.

Após obtermos um modelo inicial da planta, representativo do processo real, agrupamos alguns componentes, reduzindo o número de espécies presentes. Esta redução tem como principal objetivo a diminuição da carga computacional, visando principalmente a exportação para o simulador dinâmico.

A redução do número de espécies é realizada seguindo os seguintes passos:

- Agrupamento de componentes semelhantes: o representante do grupo geralmente é o que está em maior quantidade e que apresente características médias entre as espécies agrupadas;
- Manter os componentes necessários para descrição das características básicas de cada seção: cada um das seções possui componentes chaves de separação. Como o objetivo do trabalho é caracterizar e estudar o comportamento desses componentes para aplicação de uma estratégia de controle, eles devem estar presentes no modelo;
- Análise do impacto da alteração nos resultados do modelo: após agrupar os componentes executa-se uma nova simulação. Os resultados gerados são comparados com os resultados do caso original. A redução não deve causar alterações sensíveis em relação ao modelo original.

A tabela (3.1) mostra a composição da corrente de alimentação C4 utilizada na montagem do modelo (antes e após da redução), os componentes com “ - ” são os que foram suprimidos na redução. O componente EAC foi agrupado com o MAC e os componentes Buteno-1 e N-Iso-Butano foram agrupados com o Isobuteno. Optou-se por não considerar os componentes C3, que fazem parte da carga tabela 2.2, pois eles deixam o processo já na 1º CDE, não influenciando o comportamento dos componentes chaves nesta seção que desejam ser captados no modelo.

Tabela 3.1: : Composição da Alimentação (frações mássicas)

Componentes	Inicial	Após redução
C5	0,20	0,2
T2B	6,38	6,38
C2B	3,91	3,91
1,3BD	47,5	47,5
VAC	0,80	0,8
MAC	0,05	-
EAC	0,20	0,25
1,2BD	0,20	0,2
Isobuteno	24,30	40,76
Buteno-1	13,00	-
N-Iso-Butano	3,46	-

Após a redução restam oito HC mais o solvente, totalizando nove espécies. O ideal é que esse número fosse em torno de sete, pois a carga computacional, principalmente do modelo dinâmico, é bastante influenciada pelo número de componentes. Notou-se que a descrição do comportamento do processo, com o grau de precisão desejado, seria prejudicado caso a redução fosse maior. A tabela 2.1 - capítulo 2 mostra que cada região tem um grupo de componentes responsáveis pelas suas principais características, devendo necessariamente constar na alimentação.

Além da corrente de carga, existem duas correntes compostas unicamente de solvente que são alimentadas nas extratoras.

Modelagem Termodinâmica

A modelagem termodinâmica é um dos principais passos na construção de uma simulação representativa. Esta etapa torna-se mais importante quanto mais afastado do ideal é o comportamento do sistema.

Para o caso de estudo (processo de destilação extrativa) a maior dificuldade é a modelagem termodinâmica da fase líquida, que possui características altamente não ideais. Desta forma, a utilização de modelos do tipo ϕ - ϕ (equações de estado para a fase líquida e para a vapor) não são satisfatórios, havendo a necessidade de modelos do tipo γ - ϕ .

Nos modelos γ - ϕ , o equilíbrio entre as fases é determinado através da estimativa do coeficiente de atividade para a fase líquida (γ), com modelos de coeficiente de atividade, e do coeficiente de fugacidade (ϕ) para a fase vapor através da utilização de equações de estado.

O ponto de partida foi a consulta aos manuais do ASPEN estático v.10.1-0, a fim de encontrar alguma indicação de modelo termodinâmico para processos em questão. Existe apenas uma referência a extração (extração de BTX), que indica a utilização de modelos de coeficiente de atividade, os quais são os melhores para representar misturas líquidas não ideais a baixas pressões (< 10 atm). Desta forma, optou-se por comparar os modelos existentes no simulador para determinar qual deles seria o mais representativo para o processo de extração de butadieno.

No simulador existem cinco modelos de coeficientes de atividade e várias equações de estado. Os modelos de coeficiente de atividade e equações de estado podem ser pareados (modelos γ - ϕ) para o cálculo das propriedades termodinâmicas. É sabido que os modelos de coeficiente de atividades são bastante sensíveis aos parâmetros utilizados, principalmente, os parâmetros binários. Assim, realizou-se um amplo estudo de sensibilidade nos modelos para a fase líquida e fase vapor, bem como para os conjuntos de parâmetros binários. Este estudo e suas conclusões estão na seção 3.1.2.

Seleção dos Dados de Planta

A partir de um banco de dados do processo, com os valores médios diários de vários meses de operação, selecionou-se um conjunto de variáveis essenciais para a representação do processo. Essas informações são utilizadas inicialmente na especificação dos equipamentos e correntes. A segunda etapa é comparar os valores obtidos na simulação com as médias do banco de dados.

Um ponto problemático da seleção é conseguir um conjunto de dados reais representativos do processo. As principais dificuldades encontradas estão relacionadas com:

- determinação de um período no qual esses valores não estejam afetados por transientes;
- qualidade das medidas: calibração do instrumento de medida, sensibilidade a região de operação, precisão do equipamento, configuração inadequada no SDCD, entre outras.

Após obtido um conjunto de valores representativos, procede-se a comparação com os resultados do modelo. Neste fase, é necessário o ajuste das condições operacionais, especificações dos equipamentos e revisão da modelagem termodinâmica. Ao realizar esses

ajustes o bom senso, os conhecimentos de engenharia e o entendimento específico do processo são importantes para ponderar as variáveis que devem ser alteradas.

No caso da UEB, o ponto chave para obter uma representação aceitável do processo foi a modelagem termodinâmica, os ajustes do modelo estão descritos na seção 3.1.2 .

3.1.2 Definição do Modelo Termodinâmico

Nesta seção será apresentado os estudos realizados na etapa de escolha do modelo termodinâmico. Inicialmente foi simulado um sistema simples (flash adiabático), no HYSYS Process v1.5.2 e no ASPEN Plus v.10.1-0, com a intenção de capturar a sensibilidade frente a utilização dos diferentes modelos termodinâmicos e conjuntos de parâmetros binários (PB). A corrente de alimentação deste flash é idêntica a alimentação da primeira extratora da UEB (C4 e solvente). A temperatura e pressão do flash foram alteradas para simular os diferentes valores de T e P que ocorrem ao longo das colunas. Após as conclusões obtidas nessa fase preliminar, as seções de destilação extrativa da UEB foram modeladas no ASPEN Plus v10.1-0 e, o modelo termodinâmico foi ajustado. Este estudo tem como principal foco a 1º CDE e 2º CDE, que são os pontos que precisam ser modelados com maior precisão.

Modelos termodinâmicos e Parâmetros Binários (PB)

Um flash adiabático com a alimentação idêntica a 1º CDE foi modelado e diferentes conjuntos de modelos termodinâmicos e parâmetros de interação foram testados. As variáveis analisadas foram as de equilíbrio líquido-vapor. Os modelos testados e os conjuntos de parâmetros utilizados estão na tabela 3.2.

Tabela 3.2: Modelos de Coeficientes de Atividade, Equação de Estado e de PB testados

Modelos de Coeficientes de Atividade (MCA)	Wilson UNIQUAC UNIFAC
Equações de Estado (EE)	Gás Ideal (IG) Peng-Robson (PR) Redlich-Kwong (RK) Hayden-O'Connel (HC)
Conjunto de Parâmetros Binários (PB)	Banco de Dados Dortmund Contribuição de Grupos UNIFAC

Cada modelo de coeficiente de atividade foi combinado com todas as equações de estado da tabela 3.2, bem como, com os dois grupos de parâmetros binários.

As principais conclusões deste estudo foram:

1. O principal fator que afeta os resultados obtidos para diferentes modelos termodinâmicos é a quantidade e qualidade dos parâmetros binários disponíveis para o sistema. Diferentes modelos com conjuntos análogos de parâmetros binários apresentam um resultado praticamente idêntico;
2. A utilização do conjunto de parâmetros calculados por contribuição de grupos, via UNIFAC, não apresenta resultados satisfatórios;
3. A quantidade de parâmetros necessários para a modelagem de um sistema varia conforme as suas características e, principalmente, conforme a quantidade de componentes essenciais para descrever satisfatoriamente o comportamento do sistema;
4. A equação de estado utilizada para modelar a fase vapor não altera consideravelmente o resultado. Com exceção da equação de gás ideal, que gera resultados bastante distintos em relação aos outros modelos.

A partir dessas conclusões é possível notar que o problema reside na quantidade e qualidade dos parâmetros de interação do sistema, não importando o modelo que descreve a fase líquida, para qualquer equação de estado. Qualquer modelo de coeficiente de atividade dos estudados pode ser utilizado para descrever o processo, desde que os parâmetros binários necessários estejam disponíveis.

Para o processo em questão, no qual existem três regiões distintas em relação aos componentes chaves na descrição do processo, necessita-se idealmente de três conjuntos distintos de PB (ou de um conjunto único de parâmetros que descreva bem o processo nas diferentes condições de temperatura, pressão e composição que existem ao longo da operação). Para entender isso basta observar a 1º SDE e a 2º SDE:

- 1º SDE separa T2B e C2B da corrente de HC, para modelar esta seção necessariamente precisamos de parâmetros binários confiáveis entre C2B, T2B e BD em relação ao solvente nas suas condições de T, P e composição da mistura;
- 2º SDE separa VAC e EAC da corrente de HC, para modelar esta seção necessariamente precisamos de parâmetros binários confiáveis entre VAC, EAC, MAC e BD em relação a DMF nas suas condições de T, P e composição da mistura.

O ideal seria ter acesso a um conjunto de PB confiáveis para todos os componentes da mistura. No caso, com 9 componentes fazendo parte da simulação são necessários 72 parâmetros. O banco de dados a que temos acesso informa no máximo 10 PB, o que é um número muito reduzido para descrever o sistema. Assim, foi necessário realizar o ajuste de PB, principalmente os relacionados com os componentes chaves das colunas e o solvente.

A definição do modelo termodinâmico e os ajustes de PB são mostrados a seguir.

Definição do modelos termodinâmico e PB para a UEB

O estudo foi focado basicamente na 1º CDE e na 2º CDE, pois são os equipamentos que devem ser descritos com maior exatidão. A comparação entre os resultados da simulação e os da planta real foram feitos utilizando os valores dos analisadores existentes na planta, principalmente os de topo e fundo da 1º CDE e, de topo da 2º CDE. Desta forma, os parâmetros serão ajustados de forma que o modelo descreva o comportamento das composições nos extremos das colunas. As variações que ocorrem ao longo dela não têm base de comparação real, não podendo ser previstos.

Os componentes que devem estar melhor representados para atingir os interesses do estudo são:

- 1º CDE: BD, T2B e C2B;
- 2º CDE: BD, VAC, EAC e MAC¹.

Definição das Variáveis de Análise

No primeiro momento coletamos os perfis de temperatura gerados na simulação para todos os modelos da tabela 3.2. Alguns resultados obtidos podem ser vistos na figura 3.1.

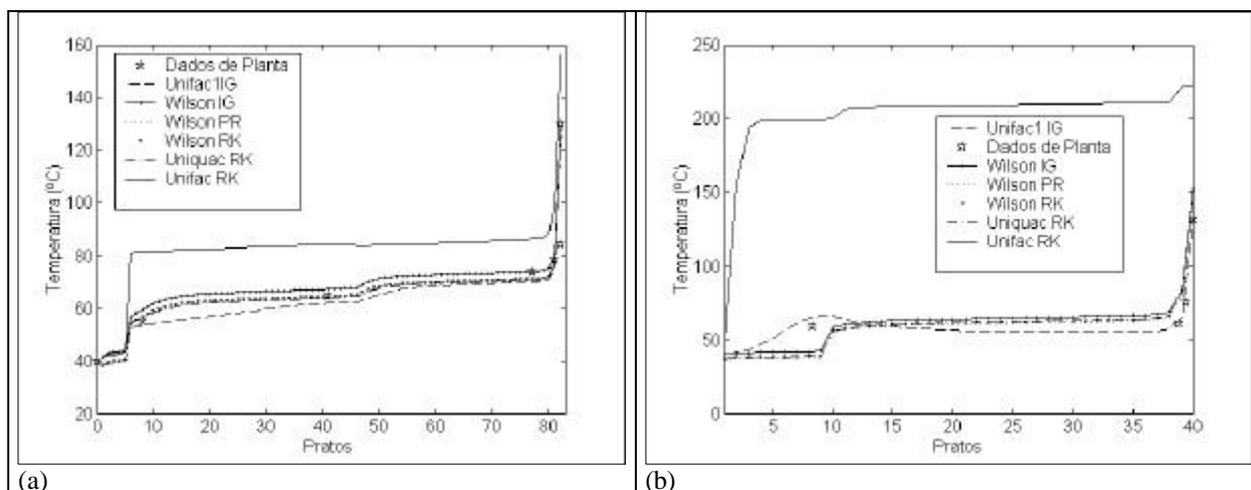


Figura 3.1: Perfil de temperatura na 1º CDE (a) e 2º CDE (b) para diferentes modelos termodinâmicos

Na legenda da figura 3.1 está descrito o modelo utilizado para a fase líquida e a equação de estado da fase vapor (tabela 3.2 traz os símbolos relacionados com as equações de estado). Para os modelos de Wilson e Uniquac foram utilizados todos os PB disponíveis no banco de dados do simulador. No modelo Unifac RK, os parâmetros foram calculados por contribuições de grupos previstos pelo UNIFAC. O modelo Unifac1 IG utiliza um conjunto de parâmetros, dependentes da temperatura. Este conjunto de parâmetros foi desenvolvido

¹ Inicialmente a simulação continha todos os componentes da tabela 3.1, entre eles o MAC. Só depois este componente foi agrupado.

pela própria indústria que patrocina este trabalho. Desta forma, muitas vezes, este modelo é utilizado como base de comparação em relação aos outros, principalmente para os perfis de composição ao longo das colunas. Deve-se ter cuidado na utilização deste modelo, pois ele prevê, para algumas variáveis do processo, um comportamento no mínimo estranho. Um exemplo é o perfil de temperatura da 2° CDE, a temperatura atinge um máximo local, no prato de alimentação.

A figura 3.1 mostra que para os diferentes modelos testados o perfil de temperatura previsto é semelhante, com exceção do modelo UNIFAC RK. Os resultados utilizando Wilson ou Uniquac, para qualquer equação de estado que não seja a de gás ideal (IG) são idênticos para as duas colunas. Essa semelhança no perfil de temperatura pode ser interpretado de forma errônea, como se todos os modelos estivessem descrevendo o sistema da mesma maneira.

Análises nos perfis de composição ao longo da coluna demonstram que, apesar dos perfis de temperatura semelhantes, a composição varia muito para os diferentes modelos. Para exemplificar esse efeito a figura 3.2 mostra o perfil de composição do T2B na 1° CDE para dois diferentes modelos testados.

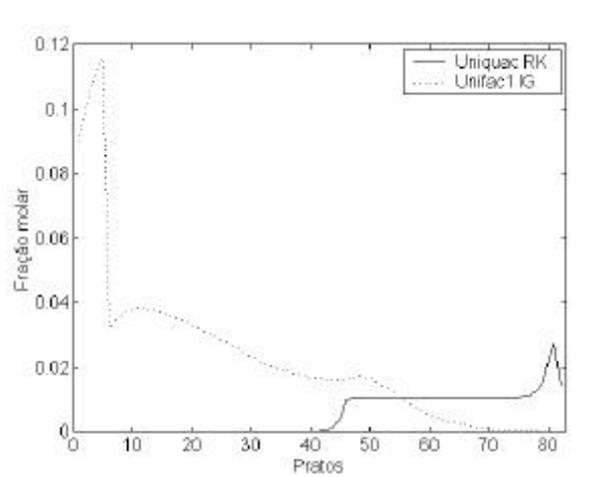


Figura 3.2: Fração molar de T2B na fase líquida ao longo da 1° CDE

O comportamento previsto pelos dois modelos é completamente distinto:

Unifac IG - todo o T2B alimentado na 1° CDE vai para o topo da coluna;

Uniquac RK- todo o T2B alimentado na 1° CDE é arrastado para o fundo da coluna.

A partir das figuras 3.1 (a) e (b) e figura 3.2 conclui-se que a temperatura não é a variável apropriada para avaliação e escolha de modelo termodinâmico, pois ela não exprime as variações de composição dos componentes de interesse, devendo-se basear a escolha do modelo no perfil de composição dos componentes chaves. Este fato é facilmente entendido: os componentes em grande concentração na coluna é que comandam o perfil de temperatura, variações na composição desses componentes acarretam variações no perfil de temperatura. Componentes em pequenas proporções na mistura (no caso, as impurezas C2B, T2B, VAC e

EAC) podem migrar do topo ao fundo da coluna sem causar alterações sensíveis no perfil de temperatura.

Definição do Modelo Termodinâmico e Parâmetros Binários

Três modelos descreveram satisfatoriamente o comportamento dos componentes chaves nas extratoras: Wilson, UNIQUAC e UNIFAC1 com os parâmetros dependentes das temperaturas. Porém, para todos era necessário realizar um ajuste dos parâmetros a fim de corrigir algumas diferenças entre a previsão do modelo e os dados de planta. O modelo escolhido foi o que tinha maior número de parâmetros de interação no banco de dados, no caso UNIQUAC. O procedimento seguido no ajuste dos parâmetros deste modelo é exemplificado através do ajuste do PB - T2B/DMF e do PB - MAC/DMF. Ao todo foram ajustados os parâmetros do T2B, C2B, MAC, EAC e VAC (todos em relação ao solvente) para conseguir com que o modelo descrevesse o comportamento do processo de forma satisfatória.

Ajuste do parâmetro T2B / Solvente

A figura 3.3 [(a), (b) e (c)] mostra o comportamento ao longo da 1^o CDE para os três componentes chaves na descrição deste equipamento.

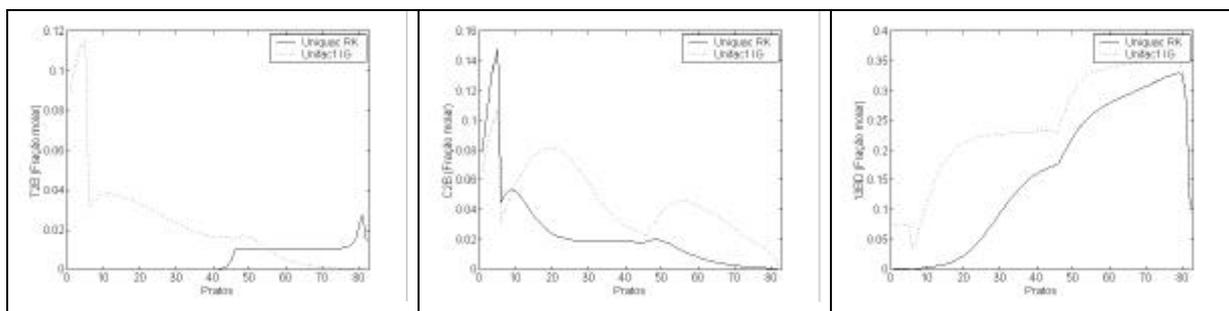


Figura 3.3: Fração molar da fase líquida dos componentes chaves na modelagem da 1^oCDE (a) T2B (b) C2B (c) BD

Os resultados obtidos do modelo UNIQUAC estão plotados junto com o modelo desenvolvido pela indústria (Unifac IG). Considera-se que o comportamento previsto pelo modelo Unifac IG é o esperado para as composições ao longo da coluna.

A maior discrepância do modelo em relação ao comportamento esperado é do T2B. Nas condições reais, esse componente apresenta interação pequena com o solvente devendo migrar praticamente todo para o topo da coluna. O resultado do modelo foi completamente oposto (figura 3.3 a). Isto aconteceu, pois no banco de dados não há informação para o PB entre o T2B e o solvente. Foram feitas várias tentativas de encontrarmos valores de parâmetros de interação entre esses componentes na literatura, porém sem sucesso. A alternativa escolhida para ajuste foi ponderar o valor dos PB, em relação ao solvente, das espécies mais próxima ao T2B que existiam no banco de dados, com as volatilidades relativas (VR) de ambos os componentes na presença de solvente. Os componentes escolhidos foram o

C2B e o Isobuteno, pois ambos possuem pequena interação com o solvente. A equação 3.2 foi utilizada para o cálculo de um valor inicial de $PB_{T2B/Solv}$, este valor foi posteriormente refinado com base nos dados dos analisadores da planta.

$$\frac{VR_{T2B} - VR_{C2B}}{VR_{Isobuteno} - VR_{C2B}} = \frac{[PB_{T2B/Solv}] - (PB_{C2B/Solv})}{PB_{isobuteno/solv} - (PB_{C2B/Solv})} \quad (3.1)$$

Ajuste do parâmetro MAC / Solvente

Após adequar o modelo para reproduzir o comportamento do T2B e C2B notou-se que, seria necessário alterar o parâmetro de interação do MAC. Ao analisar os resultados da simulação foi constatado que metade do MAC, alimentado na corrente de carga, estava sendo perdido pelo topo da 1º CDE, um resultado distante do esperado. A volatilidade deste componente é muito próxima a do BD com solvente, assim uma pequena quantidade dele é separado nas seções extrativas. Este componente é separado na coluna 1º F da seção SEB, onde não existe mais solvente e a volatilidade do MAC passa a ser praticamente o dobro da volatilidade BD (tabela 3.3).

Tabela 3.3: Volatilidade Relativa (VR) do MAC e BD com e sem solvente

	VR com solvente	VR sem solvente
MAC	0,92	2
13BD	1	1

O único analisador de MAC localiza-se no fundo da 1º F, não existindo informações da quantidade desta espécie perdida no topo da 1º CDE e no fundo da 2º CDE. Considerando que cada prato da 1º CDE é um estágio de equilíbrio ideal, a estimativa da quantidade de MAC em relação ao BD na corrente de topo da 1º CDE pode ser feita com base nos valores da tabela 3.3 (VR com solvente) e no número de pratos acima da alimentação de carga, conforme a equação 3.2:

$$\frac{x_{MAC}}{x_{BD}} = VR_{MAC \text{ com solvente}}^{NP} \quad (3.2)$$

onde,

x_{MAC} = fração mássica de MAC em relação a de BD na corrente de topo da 1º CDE

x_{BD} = fração mássica de MAC em relação a de BD na corrente de topo da 1º CDE

VR = volatilidade relativa

NP: número de pratos da 1º CDE acima da alimentação da corrente C4

Através da equação 3.2 e da fração mássica de BD no topo da 1º CDE é possível calcular um valor aproximado para a fração mássica de MAC no topo da 1º CDE. De posse

desse valor aproximado são feitas variações no PB do grupo MAC/Solvente até que a composição de topo da coluna 1º CDE esteja dentro da ordem de grandeza do valor estimado.

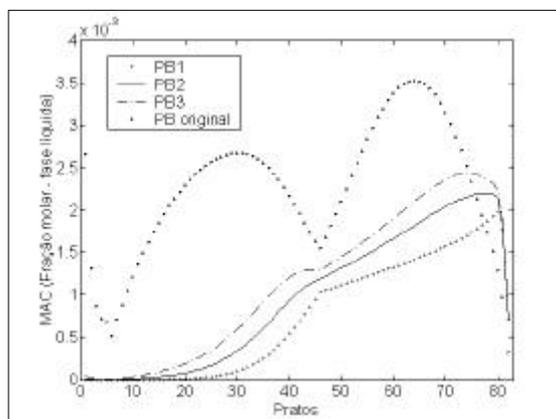


Figura 3.4: Perfil de composição do MAC na 1º CDE variando de PB

A figura 3.4 mostra o perfil de composição da MAC ao longo da 1º CDE para diferentes valores do PB, onde $PB\ original < PB1 < PB2 < PB3$. Os parâmetros PB1, PB2 e PB3 descrevem o comportamento do MAC na corrente de topo satisfatoriamente. Como não existem dados do processo sobre o comportamento das composições ao longo das colunas, optou-se pelo parâmetro PB2 para ser utilizado na modelagem, pois ele prevê um comportamento mais suave para o MAC.

Além da alteração dos parâmetros relacionados com os dois componentes descritos acima foi necessário realizar pequenos ajustes nos parâmetros do VAC e EAC em relação ao solvente. A comparação com os dados da planta mostrou que os ajustes foram realizados com sucesso, e com apenas um conjunto de parâmetros foi descrito o comportamento da 1º e 2º CDE.

3.2 Simulação Dinâmica

Uma simulação dinâmica rigorosa é a mais acurada forma de avaliar a resposta e o desempenho dinâmico de estratégias de controle. Com este objetivo será desenvolvido o modelo dinâmico da UEB.

Além disso, ela vai permitir o entendimento e caracterização do comportamento dinâmico, possibilitando a compressão, dos efeitos do reciclo no processo (e.x: variação da constante de tempo). A caracterização dos principais aspectos do comportamento dinâmico está descrita no capítulo 5.

A modelagem das malhas de controle de inventário é similar a da planta real, a única diferença é que na planta, o nível de fundo das extratoras esta em malha aberta, e no modelo

essas variáveis estão em malha fechada, manipulando a vazão de fundo das colunas. A forma como as malhas de controle de inventário estão implementadas na planta real pode ser vista na figura 5.4. É importante lembrar que essas malhas possuem uma velocidade bastante superior as malhas de composição. Além das malhas de controle de inventário, foram implementadas malhas de controle de temperatura no fundo das colunas, manipulando a carga térmica dos refeedores, pois essas variáveis são controladas na planta real.

Esta seção mostra como foi obtido o modelo dinâmico no simulador comercial ASPEN Dynamics v10.2-0 e no MATLAB (*Simulink*). Este último trabalha com o modelo linear do processo obtido através do modelo não linear do ASPEN.

3.2.1 Obtenção do modelo dinâmico no simulador ASPEN

A obtenção do modelo dinâmico para o processo é feita a partir do modelo estacionário, o próprio simulador faz a conversão do modo estacionário para o dinâmico. Para isso é necessário fornecer as informações relacionadas com as dimensões dos equipamentos. A seguir são listados os valores que devem ser informados ao simulador:

- Dimensões relativas as colunas: nível de líquido no fundo (“sump”);
- Dimensões relativas aos pratos: altura do vertedor, diâmetro do prato e espaçamento;
- Dimensões dos vasos: largura e altura

Um cuidado especial deve ser tomado ao informarmos esses valores ao simulador. O modelo deve reproduzir os volumes de líquido e dimensões das colunas e dos vasos de maneira mais fidedigna possível, já que eles influenciam diretamente as constantes de tempo do processo. Geralmente, para reduzir a carga computacional do sistema, as colunas são modeladas com eficiência igual a 1, e conseqüentemente um menor número de pratos em relação ao equipamento real. A relação entre a quantidade de pratos, altura da coluna e volume de líquido nos pratos dos equipamentos do modelo e pratos da coluna devem ser feitas para que os valores reproduzam o processo.

3.2.2 Comparação do comportamento transiente da planta real versus modelo

Da mesma forma que na modelagem estacionária do processo, deve-se comparar o modelo dinâmico com o processo real. A simulação dinâmica da unidade deve reproduzir o comportamento do processo em transientes operacionais. De posse dos dados transientes (leituras com intervalos de 15 min) realizou-se a seleção de um período em que fosse possível comparar o transiente do modelo e da planta real.

Após a análise dos dados de planta, optou-se por reproduzir um período de 80 horas, no qual as composições de BD, C2B e T2B na carga, a temperatura da carga e a temperatura do solvente sofriam perturbações. Além das variações na composição, temperatura da carga e

temperatura do solvente, foram modeladas uma série de ações nas variáveis manipuladas do processo tomadas neste período. Essas ações têm o intuito de manter o processo operando dentro das especificações.

É importante salientar que, neste conjunto de dados de planta, não existiam valores para algumas variáveis importantes, sejam por problemas nos instrumentos de medida ou no armazenamento de dados. Mesmo assim, foi possível qualificar a capacidade do modelo dinâmico em reproduzir o comportamento do processo real.

Uma variável importante no processo, corrente VS1, foi determinada através de um balanço de massa, pois não existe medida da vazão desta corrente na planta, e era sabido que ela sofrera alterações. Este cálculo foi baseado nos valores de vazão para as correntes S1, C4, Qt1 e Qf1 (vide figura 3.5) facilmente obtidos nos dados transientes. Na unidade, a quantidade dessa corrente é controlada por um atuador de pressão.

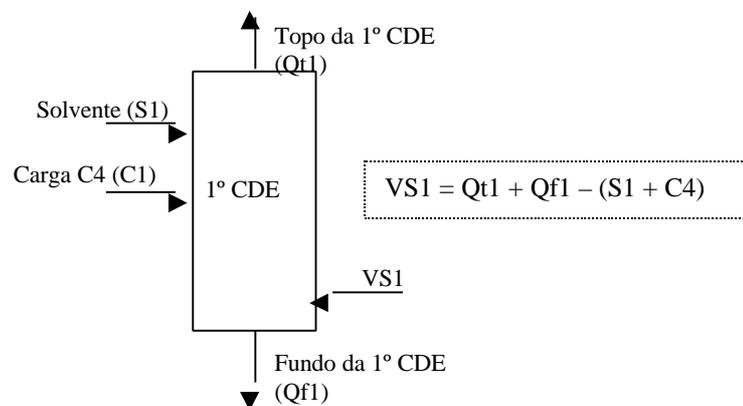


Figura 3.5: Esquema da 1º CDE utilizado no balanço de massa

No simulador foi considerado que nas primeiras 10 horas o processo estava estacionário, não ocorrendo nenhum distúrbio ou ações nas variáveis manipuladas do modelo. Excetuando-se esse fato, tanto os distúrbios na carga, quanto as ações tomadas foram modeladas na simulação da forma mais fidedigna possível.

Uma aproximação foi realizada, em relação à planta, na forma como o processo está modelado: a corrente de alimentação da coluna RB, proveniente do fundo da 2º CDE, passa por dois trocadores de calor. Um deles é o refeedor de fundo da 2º CDE (refeedor escuro na figura 3.6), onde ocorre o reaproveitamento térmico já que a corrente de fundo está em temperatura elevada. Existe ainda um resfriador que opera com água de resfriamento, atualmente fora de operação. Mesmo assim, a temperatura da corrente apresenta variações pequenas após passar troca calor com o refeedor de fundo da 2º CDE (de 1 a 1,5 °C). Optou-se então por considerar a temperatura dessa corrente constante no modelo através da implementação de um controlador de temperatura.

As figuras geradas neste estudo estão no apêndice A1. Além da comparação planta x modelo com os valores em deltas também foram colocadas as figuras com o valor absoluto das variáveis, que serão importantes na análise do comportamento do modelo dinâmico. Nesse apêndice as figuras são separadas em três conjuntos:

- Distúrbios realizados: transientes das composições de BD, C2B e T2B na carga e temperaturas de solvente e de carga para os dados da planta e os simulados no modelo. Em todo esse intervalo a quantidade, em massa, da carga permaneceu constante, bem como a pressão da alimentação;
- Ações nas variáveis manipuladas: obtidas nos transientes de dados da planta e modeladas no simulador, durante este período;
- Variáveis medidas: comportamento das vazões e temperaturas relacionadas com as extratoras e com a coluna RB e as composições dos componentes chaves no controle de cada etapa do processo, para os quais existiam dados para período selecionado.

Discussão dos Resultados

As oitenta horas desse estudo podem ser divididas em dois períodos distintos para a análise dos resultados:

período 1: de 0 a cerca de 30 horas;

período 2: de 30 horas até o tempo final.

No *período 1* o comportamento das composições e vazões medidas na planta é reproduzido no modelo de forma bastante similar, concluindo-se que o modelo descreve o processo. O fato de considerar que nas primeiras dez horas o processo está constante causa algumas diferenças, mas não chega a comprometer os resultados. A partir de 30 horas são constatadas algumas diferenças entre os resultados do modelo e do processo real. Principalmente no intervalo de tempo entre 30 e 45 horas. Essa discrepância tem origem em pequenas divergências na modelagem das ações tomadas nas variáveis manipuladas em relação a planta. A seguir são descritas as duas principais causas das diferenças entre o modelo e o processo real²:

1. Efeito da variável modelagem de RR1 e VS1 nas vazões mássicas e composições:

² Nesta parte do estudo são utilizados os valores absolutos das variáveis. Os deltas poderiam mascarar essa análise, pois são dependentes do valor inicial considerado. Para algumas variáveis o valor inicial é diferente entre o modelo (10 horas iniciais) e a planta. Na modelagem foi utilizado um valor médio calculado para um período anterior a esse plotado (80 horas), já que a média das dez horas iniciais é muito pouco representativa para descrever o comportamento médio do modelo naquele período.

Na figura xx é mostrada uma série de gráficos gerados na comparação entre o modelo e a planta que exemplificam a discrepância visualizada no período de 30 a 45 horas. Seguindo essas figuras é possível entender a seqüência de efeitos.

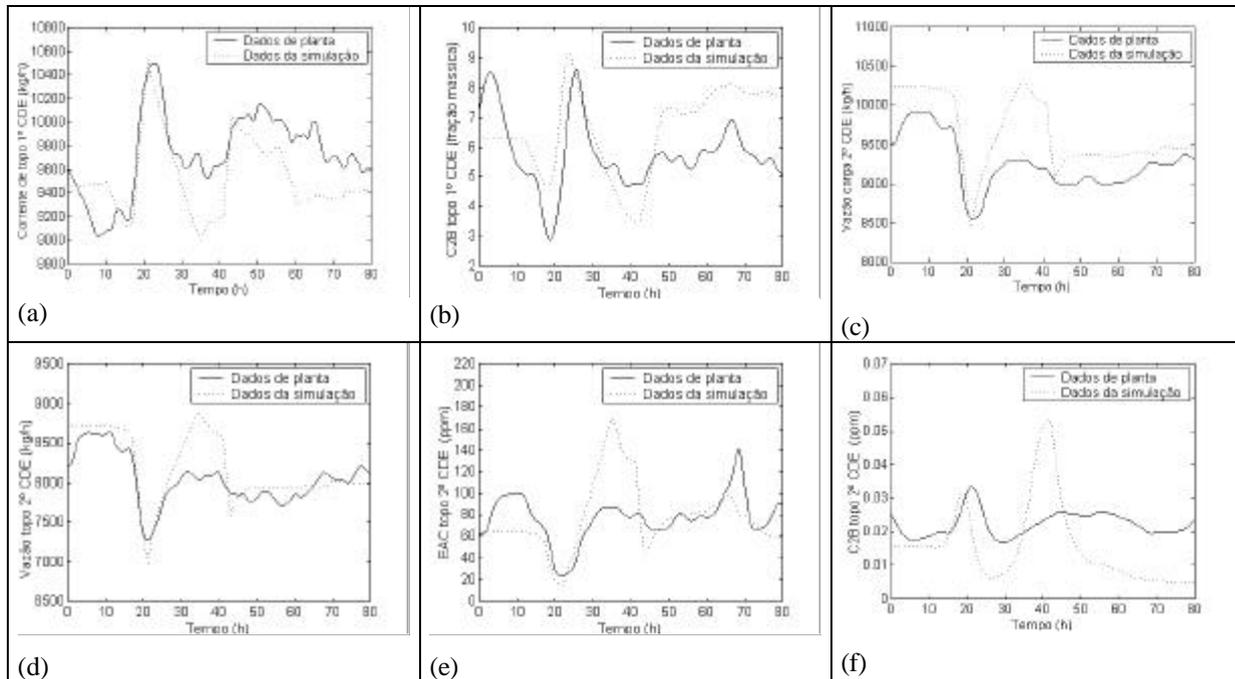


Figura 3.7: Diferenças entre as variáveis medidas do modelo e o processo real [(a) Vazão da corrente de topo da 1ª CDE (b) C2B no topo da 1ª CDE (c) Vazão da carga da 2ª CDE (d) Vazão de topo da 2ª CDE (e) EAC no topo da 2ª CDE e (f) C2B no topo da 2ª CDE]

A explicação será feita com base no comportamento do modelo. Como é possível ver na figura 3.7 (a), no período de 30 a 45 horas, a vazão da corrente de topo da 1ª CDE no modelo é menor do que a real. Isso faz com que uma quantidade de HC menor seja perdida pelo topo dessa coluna, permanecendo no processo. Aqui, a menor perda de HC é exemplificada pela figura 3.7 (b) onde, nos dados do modelo, a concentração de C2B no topo da coluna 1ª CDE é inferior a planta. A massa de HC que permaneceu no processo rumo para a 2ª CDE. A figura 3.7 (c) apresenta a vazão de alimentação da 2ª CDE, onde é visível a maior quantidade de HC no modelo em relação a planta real. A ordem de variação entre o modelo e a planta no pico (± 35 h), de forma grosseira, na corrente de topo da 1ª CDE e alimentação da 2ª CDE é respectivamente -800 e $+900$ kg.h^{-1} mostrando a inter-relação entre esses comportamentos. O fato de ser alimentada uma maior quantidade de HC na segunda extratora vai ser refletida na corrente de topo. As figuras 3.7 (d,e,f) mostram os efeitos na corrente de topo: a vazão da corrente é maior ocorrendo picos onde a concentração dos HC é elevada, aqui representados pelo EAC e C2B.

A causa dessa discrepância pode ser entendida a partir das figuras 3.8 (a e b). A variação realizada na corrente de refluxo da 1ª CDE no modelo foi maior que a real. A variável manipulada foi a razão de refluxo, ocasionando um menor valor para a corrente de destilado. Na figura 3.7 (a) para todo o intervalo de tempo superior a 35 horas, é clara a menor vazão de destilado (corrente de topo) na 1ª CDE prevista pela simulação. Num tempo em

torno de 45 horas as vazões da planta e do modelo aproximam-se, isto é causado pela corrente VS1 (figura 3.8 (b)) que no período de 40 a 50 horas é cerca de 1000 kg.h^{-1} superior na planta. Aqui é necessário abrir um parêntese para descrever a influência desta corrente no processo: sua função é aumentar a separação de HC (C2B e T2B) na 1º CDE, mas em consequência também aumenta a perda de outros HC (principalmente BD) pelo topo da 1º CDE. Maiores quantidades de VS1 aumentam o montante de HC que rumam para o topo da 1º CDE, sendo então, a causa da aproximação dos valores de vazão de topo da 1º CDE previstos pelo modelo e a real.

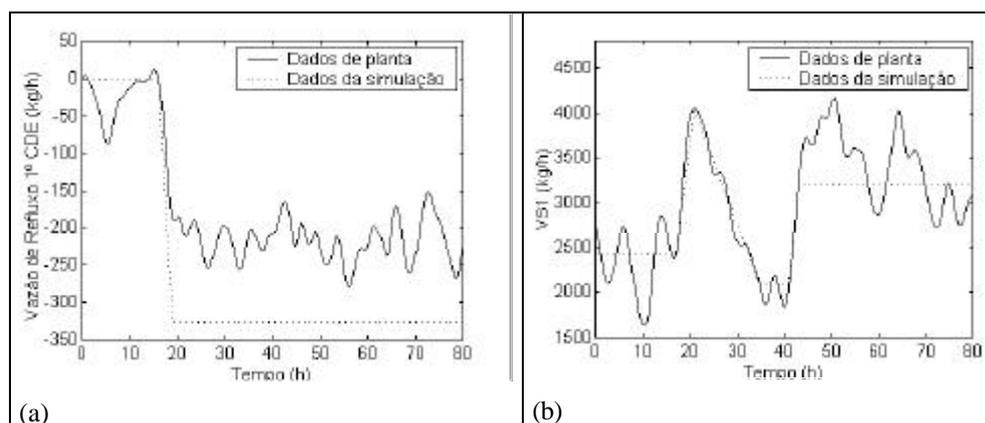


Figura 3.8: Diferenças entre as variáveis manipulada do modelo e do processo real [(a) Vazão de Refluxo da 1º CDE (b) Vazão de Selagem VS1]

Outra diferença entre o modelo e o processo foi detectada na vazão da corrente de topo da coluna RB. Na figura 3.9 (a) em torno de 35 horas é visível um pico de vazão nos dados da planta que não aparece nos resultados da simulação. A vazão da corrente de topo da coluna RB é influenciada pela composição e temperatura da corrente de alimentação desta coluna já que, no prato de topo da coluna, ocorre uma vaporização e grande parte dos HC rumam diretamente para a corrente de topo (vide desenho do processo Cap. 2 – figura 2.3). A composição da corrente de alimentação da coluna RB está diretamente relacionada com a vazão de solvente alimentada na 2º CDE, quanto maior a quantidade de solvente maior é o arraste de HC para o fundo da 2º CDE (corrente de alimentação da RB). Na figura 3.9 (b), que mostra a vazão de solvente da planta e a modelada, vemos que existe um pico em torno de 35 horas que foi desconsiderado na modelagem. Este pico ocasionou um maior arraste de HC para o fundo da 2º CDE causando o pico de vazão da figura 3.9 (a). A temperatura da corrente de alimentação da coluna RB é mostrada na figura 3.9 (c), onde é visto que sua variação é muito pequena (praticamente dentro da margem de erro do medidor no processo), não havendo correlação entre o pico da vazão de topo da coluna RB e esta variável.

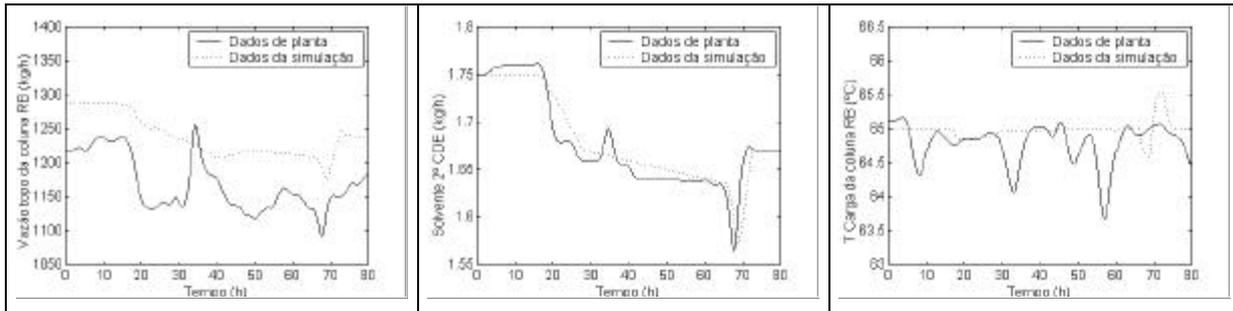


Figura 3.9: Diferenças entre o modelo e o processo real [(a) Corrente de topo da coluna RB (b) Vazão de solvente da 2ª CDE (c) Temperatura de alimentação da coluna RB]

3.2.3 Modelos Linearizados

Como foi visto acima, o modelo dinâmico está descrevendo o processo. Porém, esse modelo possui uma elevada carga computacional. O principal motivo da elevada quantidade de equações é o número de componentes na simulação. A simulação dinâmica possui 10 componentes e o ideal seria trabalhar com uma quantidade máxima de sete. Porém, como descrito na modelagem estática, pelas características do processo não foi possível realizar uma redução desta ordem. Assim, torna-se interessante trabalhar com modelos lineares do processo, que podem ser obtidos com base no modelo não-linear para diferentes pontos de operação.

Um cálculo simplificado pode exemplificar esse problema, estes valores são qualitativos, pois existem outros aspectos vinculados com a maneira como o simulador monta o sistema de equação internamente que não estão considerados:

- Número de pratos somando todas as colunas do modelo (NP) = 141
- Número de componentes no modelo (NC) = 9
- Número de componentes ideais no modelo (NCi) = 7

$$(NC + 1) \times NP = 1410 \quad (NCi + 1) \times NP = 1128$$

Para descrever cada estágio dinâmico do processo é necessário uma equação diferencial para o balanço de energia e uma para o balanço de massa de cada componente. Entende-se por estágio dinâmico “flashes” modelados dinamicamente (1 estágio), os condensadores e refeedores (cada um correspondente a 1 estágio) e os pratos das colunas (1 estágio por prato).

Os problemas estão vinculados, principalmente com o conjunto de equações da 1ª CDE, que possui cerca de cinquenta por cento do número total de pratos modelados. Até na obtenção do modelo linear, apresentada a seguir, esse elevado número de equações causou problemas vinculados com a ordem das matrizes que descrevem os estados do sistema.

Um modelo linear invariante no tempo (LTI) pode ser descrito por um conjunto de equações algébricas-diferenciais com coeficientes lineares invariantes (DAE):

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= A_{ns \times ns} x(t) + B_{ns \times ni} u(t) \\ y(t) &= C_{no \times ns} x(t) + D_{ni \times no} u(t)\end{aligned}\tag{3.4}$$

onde

A, B, C, e D são matrizes reais

ns = número de estados

no = número de saídas

ni = número de entradas

A obtenção do modelo linearizado para a UEB será feita no ASPEN Dynamics, que gera o Jacobiano do sistema (matriz A) e as matrizes B, C e D para as entradas e saídas informadas pelo usuário. A matriz Jacobiana contém todas as variáveis de estado que descrevem o modelo. Variáveis de estado são todas as determinadas por equações diferenciais.

As vantagens de trabalhar com o sistema linearizado são:

- Possibilidade de selecionar somente as entradas e saídas de interesse, tornando a análise do sistema mais simples, pois o número de informações é reduzido e focalizado nas variáveis importantes para resolver o problema em questão.
- A carga computacional é bastante reduzida, diminuindo o tempo necessário para a obtenção dos resultados;
- Linearizando o modelo do ASPEN obtém-se diretamente a representação no espaço de estado, não sendo necessário realizar a identificação das funções de transferência.³

O cuidado básico que deve ser tomado na obtenção de modelos linearizados é a faixa de validade deste modelo, pois a não linearidade é inerente aos processos reais. Para os objetivos do estudo é possível aproximar o comportamento do sistema, em torno de pontos de operação, por uma reta. A figura 3.10 demonstra essa idéia.

³ A classificação das estratégias de controle será feita com índices calculados a partir da matriz das funções de transferência. Essas matrizes são formadas pelas variáveis de entrada e saída da estruturas e pelos estados que as relacionam. As funções de transferência podem ser obtidas de duas formas: identificação baseada em dados do processo [p. e.x.: usando o “System Ident. Toolbox” - MATLAB] – da planta real ou modelo simulado - ou diretamente através do Jacobiano (A) do sistema, selecionando as entradas e saídas de interesse.

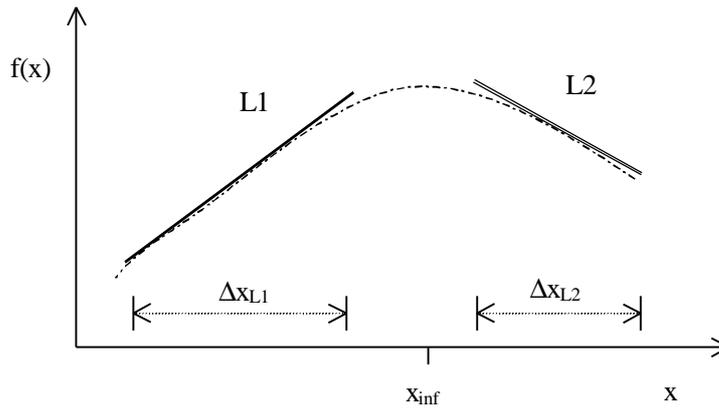


Figura 3.10: Aproximação do comportamento do sistema a uma reta.

A variável $f(x)$ apresenta um comportamento bastante não-linear em relação a x , com duas regiões bem distintas, em uma a variação de f é positiva (faixa Δx_{L1}) e na outra é negativa (faixa Δx_{L2}). Mas, trabalhando dentro de uma faixa pré-definida de valores de x , o comportamento de f pode ser aproximado por uma reta. Na figura 3.10 as retas L1 e L2 descrevem de maneira satisfatória o comportamento da variável f .

Os limites de variação para as variáveis de entrada, que definem a região de validade do modelo linear, foram definidos em torno do ponto de operação, através das análises de sensibilidade estacionária (Capítulo 4). Posteriormente, esses limites foram confirmados em testes que comparam a resposta do modelo linear com o não-linear.

Montagem do modelo da UEB no Simulink – MATLAB

As matrizes A, B, C e D foram geradas no ASPEN e convertidas para um formato compatível com o MATLAB. Sendo o modelo linear representado na forma de espaço de estado (equação 3.4)

Para a modelagem do processo foi utilizado o Simulink v.3, que é um pacote para modelagem e simulação de sistemas dinâmicos do MATLAB.

A figura 3.11 mostra como o modelo linear foi implementado no MATLAB.

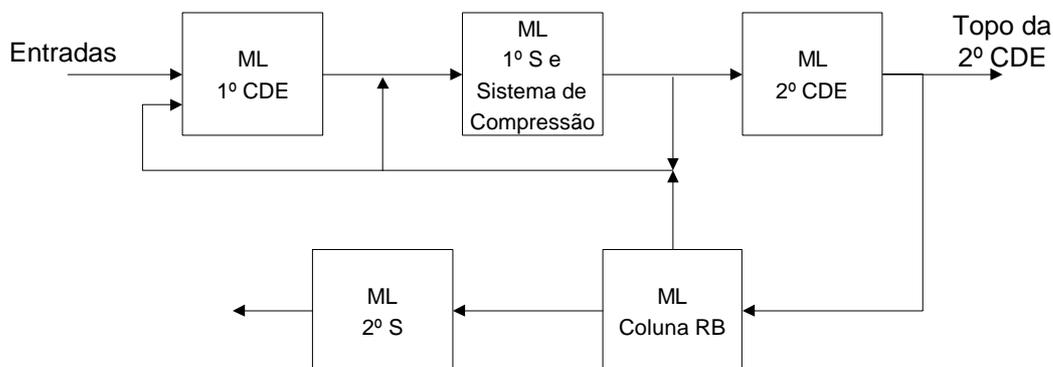


Figura 3.11: Representação esquemática do modelo linear implementado no *Simulink*

A idéia inicial era gerar o espaço de estado para o processo inteiro, mas pela elevada quantidade de estados do modelo ocorrem problemas na geração das matrizes A, B C e D no ASPEN. Desta forma, teve-se que obter essas matrizes para blocos de equipamentos e realizar as conexões necessárias para os efeitos do reciclo não serem desconsiderados. A figura 3.11 mostra esquematicamente a montagem do sistema do *Simulink*. Cada bloco representa um modelo linear gerado no ASPEN.

No ASPEN Dynamics, o número de estados necessários para a modelagem de cada prato das colunas (nos vasos modelados de forma dinâmica ocorre a mesma coisa) é igual ao número de componentes mais um, este último vinculado à equação do balanço de energia. No modelo em questão, cada prato precisa de dez estados para modelar seu comportamento. A figura 3.12 mostra a matriz Jacobina obtida no ASPEN Dynamics para a 1º CDE, nela pode-se ver a forma como os estados que descrevem o sistema localizam-se no espaço. As outras matrizes são similares, alterando-se o número de colunas ou linhas, todas com características esparsas ditadas pela localização dos estados que descrevem o modelo. As características esparsas dessas matrizes devem ser aproveitadas, pois assim, a carga computacional relacionada com a sua alocação e, com as operações, nas quais, elas estão envolvidas é muito reduzida. No apêndice A2 são descritas algumas características e peculiaridades das matrizes esparsas.

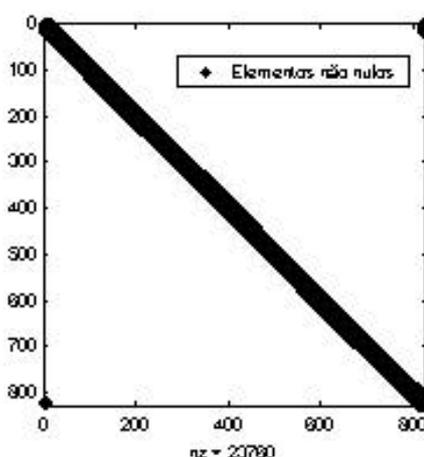


Figura 3.12: Localização dos estados na matriz Jacobiana (A) para a 1º CDE

Após a construção do modelo linear foi realizada a comparação do seu comportamento com o do modelo não-linear do ASPEN. Essa comparação é feita entre as variáveis de interesse para os objetivos de controle, principalmente temperaturas e concentrações nas correntes de topo e fundo das colunas, visando verificar se o modelo linear é confiável para ser utilizado nos estudos posteriores.

Comparação do modelo linear do MATLAB com o modelo não-linear do ASPEN

Foram realizados degraus nas principais variáveis de entrada do modelo linear, dentro dos seus limites de variação pré-definidos, e coletados os resultados das variáveis de saída. Esses mesmos degraus foram realizados no modelo não-linear. Os resultados para ambos os modelos foram plotados possibilitando sua comparação. Aqui deve-se determinar se o modelo linear comporta-se da mesma forma que o não-linear, em torno do ponto no qual foi realizada

a linearização. E, além disso, determinar a faixa de validade do modelo linear, o que significa mensurar a largura da região em torno do ponto de operação que ele é válido.

Como o objetivo desses modelos lineares é servir de base para o estudos de estratégias de controle, eles devem descrever com maior exatidão o comportamento do sistema em frequências elevadas e intermediárias (resposta transiente), região de atuação do controlador. O ganho estacionário não precisa corresponder efetivamente ao real, ou, no caso, ao ganho do modelo não-linear. A figura 3.13 exemplifica como foi realizada a comparação entre os modelos e determinação da faixa de validade (em torno do ponto em que a linearização foi realizada) do modelo linear. A figura 3.13 (a) mostra o comportamento da fração mássica de BD na corrente de topo da 1º CDE (BDT1) para quatro diferentes degraus na temperatura de fundo desta coluna (Tf1). Esses degraus foram realizados no modelo não-linear do ASPEN, e representados na figura 3.13 (b). Nestas figuras também aparece um degrau de 1.5, dado no modelo linear do *Simulink*.

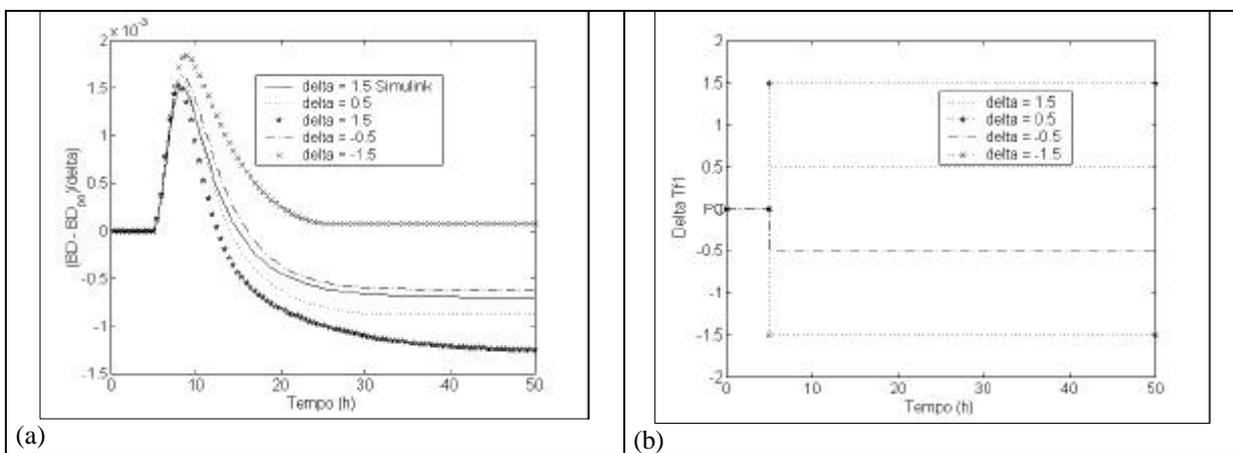


Figura 3.13: Comparação do modelo linear e com o não-linear. (a) BDT1 (b) Degraus Tf1

A resposta da saída foi normalizada, em relação ao tamanho de cada degrau, para que o grau de não linearidade do sistema fosse determinado. A curva representada pela linha cheia na figura 3.13 (a) foi obtida para um degrau no modelo linear (*Simulink*). Neste caso, para qualquer tamanho de degrau a resposta normalizada é igual, já que é um pressuposto do modelo linear o ganho ser uma constante (equação 3.5)

$$\frac{\Delta y}{\Delta u} = K \quad (3.5)$$

onde, y = variável de entrada

u = saída

K = ganho estacionário (constante para modelos lineares)

Se o modelo do ASPEN apresentasse um comportamento linear, as curvas da figura 3.13 (a), para diferentes amplitudes de variações na entrada deveriam ser coincidentes. Porém, como é observado, a resposta normalizada para os diferentes degraus não é igual. As seguintes constatações podem ser feitas:

1. A resposta do ASPEN mostrou que BDT1, em relação a variações em Tf1, além de ter um comportamento distante do linear apresenta uma mudança de ganho⁴;
2. Para menores variações em Tf1 ($\Delta = 0.5$ e $\Delta = -0.5$) o modelo não-linear tem um comportamento mais próximo ao linear, a medida que são feitas variações maiores a não linearidade do sistema é acentuada;
3. Nota-se que para pequenas variações Tf1 o comportamento do sistema é mais não-linear para reduções no PO. Já, se os degraus na Tf1 forem maiores, a não linearidade aumenta operando a temperaturas superiores ao PO;
4. Na região transiente, o modelo descreve satisfatoriamente o comportamento da variável. Com exceção de $\Delta = -1.5$ onde, realmente, a não linearidade do sistema é bastante acentuada.

Análises similares foram feitas para as outras variáveis importantes na descrição do processo. Em linhas gerais, as conclusões obtidas são:

- O modelo linearizado está correspondendo ao modelo não-linear, respeitando limites de variação para as variáveis de entrada;
- A maior discrepância é em relação ao ganho estacionário, sendo a parte transiente similar para ambos modelos. Este efeito é relacionado com a não linearidade do processo, quanto menor a amplitude do degrau menor é a diferença na resposta estacionária do modelo linear;
- O modelo linearizado apresenta para algumas saídas, na parte transiente da resposta, oscilação (região apontada pela seta - figura 3.14 (a e b)). Tal fenômeno não é observado no modelo não-linear. Isto pode ser causado por erros na geração das matrizes no ASPEN ou erros numéricos vinculados à integração no *Simulink*

A figura 3.14 representa a resposta da temperatura do prato 81 da 1° CDE a um degrau de 1.5 ° C na temperatura de fundo dessa coluna. Os dados foram retirados do modelo linear do *Simulink*.

A fim de atestar a origem dessas oscilações alterou-se o método de integração e a tolerância relativa dos métodos. Maiores detalhes sobre os métodos de integração disponíveis

⁴ O fato de aumentos na temperatura de fundo da coluna 1° CDE causarem uma redução na fração mássica de BD no topo da coluna, não significa que a quantidade de BD (em massa) é reduzida. O que, realmente, vai contra ao que é esperado. O que diminui é a fração mássica de BD. Pois quando a temperatura é elevada, uma quantidade maior de HCs rumam para o topo (principalmente C2B e T2B e menores quantidades de BD e outros mais pesados na presença de solvente). Desta forma, a massa total da corrente de topo aumenta em maiores proporções que a variação da massa de BD nessa corrente, fazendo com que a fração mássica de BD na corrente diminua. Para diminuições na temperatura ocorre o mesmo efeito de forma inversa.

no *Simulink* e as tolerância de integração podem ser encontrados no apêndice A3. As figuras 3.14 (a) e (b) mostram, respectivamente, os resultados para diferentes métodos de integração e para diferentes tolerâncias relativas, neste caso, o método de integração utilizado foi ODE23tb (vide apêndice A3).

Como visto (figura 3.14) nenhuma alteração causou modificações na resposta gerada pelo sistema linear. Portanto, estas oscilações não são originárias no método ou tolerância da integração. A origem delas devem estar relacionadas com o condicionamento do sistema, visto que a diferença nas grandezas é muito superior a 10^6 (no sistema existem ao mesmo tempo vazões mássicas na ordem de 10^6 e frações mássicas que variam na ordem de $10^{[-1 \text{ a } -15]}$, dependendo do componente). A simples alteração do sistema de unidades do sistema, ou determinação de matrizes de escalonamento pode reduzir este problemas⁵.

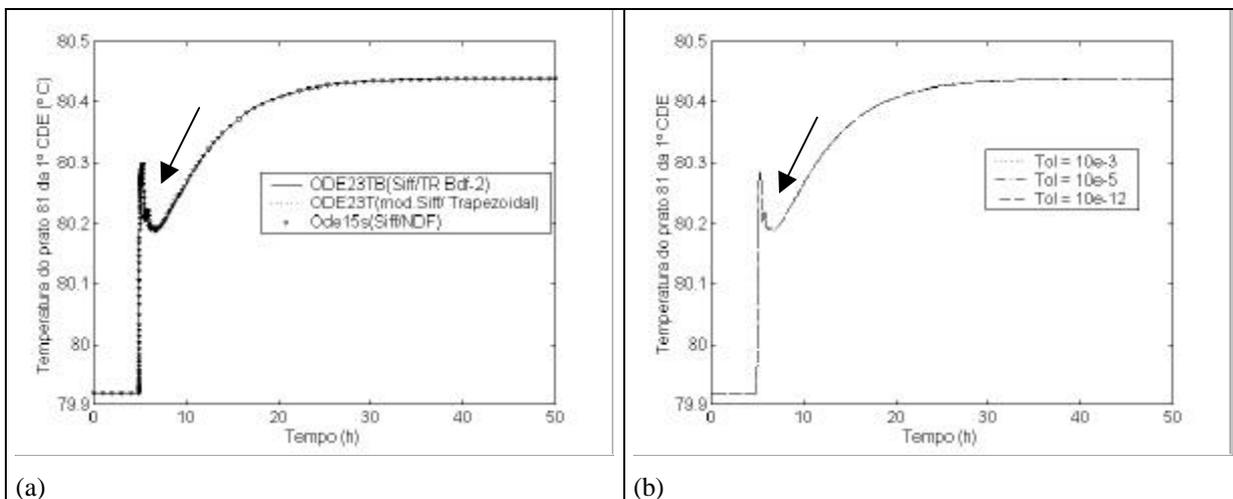


Figura 3.14: Resultado do modelo linear para (a) diferentes métodos de integração e (b) diferentes tolerâncias no método de integração

Ainda em relação às oscilações pode-se mostrar que o método de integração do modelo não-linear, em muitos casos, também apresenta erros numéricos. Este fenômeno é verificado, principalmente para grandezas inferiores a 10^{-10} . A curva pontilhada da figura 3.15, que mostra o comportamento do EAC no topo da 1ª CDE, para o mesmo degrau de + 1.5 °C na temperatura de fundo da 1ª CDE, apresenta pequenas oscilações causadas provavelmente pelo método de integração no ASPEN.

⁵ A versão do simulador dinâmico utilizada para modelar a UEB – (ASPEN Dynamics v10.1), apresenta um ‘bug’. As matrizes linearizadas só são formadas corretamente se o modelo estiver com todas as unidades no sistema métrico. Desta forma, não foi possível alterar o sistema de unidades para linearizar o sistema gerando matrizes melhores condicionadas.

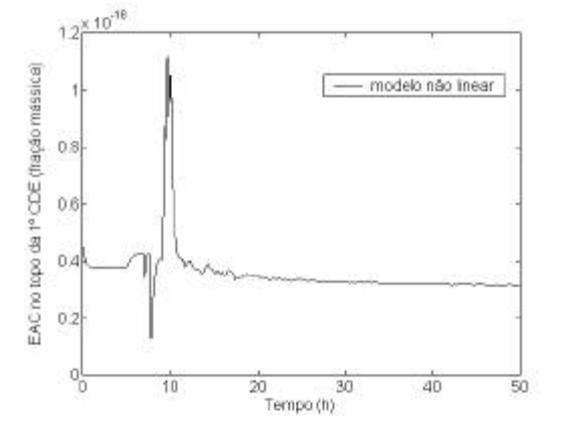


Figura 3.15: Fração mássica de no topo da 1ª CDE alterando-se a temperatura de fundo da torre

Capítulo 4

Análises da sensibilidade estacionária das variáveis

Neste capítulo está descrito o procedimento e principais resultados da análise de sensibilidade estacionária do modelo estacionário não-linear construído no ASPEN Plus v10.1. Além de permitir o entendimento da influência das variáveis no processo como um todo, esse é o passo inicial para o esboço de estratégias de controle e proposição de alterações no ponto de operação das seções de destilação extrativa. Na próxima seção está descrito o procedimento seguido nesta análise e as principais conclusões. As propostas para a operação das colunas extrativas estão na seção 4.3.

Cabe salientar que os resultados mostrados nesta seção foram obtidos a partir de um modelo do processo, carregando todas as idealizações que a modelagem exige. Desta forma, eles devem ser encarados qualitativamente, servindo como indicativo do caminho a ser seguido para melhorar o processo. Somente realizando essas alterações no processo real é possível determinar seu impacto.

4.1 Procedimento de Análise

Com o modelo descrevendo o comportamento das principais variáveis de forma satisfatória pode-se iniciar as análises de sensibilidade estacionária. A determinação da relação das principais variáveis de saída do modelo, para diferentes valores das variáveis manipuladas, aumenta a compreensão da operação da unidade. Assim, é possível propor alterações que localmente não parecem vantajosas, mas de forma global aumentam a rentabilidade do processo através da diminuição das perdas de BD.

A tabela 4.1 mostra as variáveis manipuladas e distúrbios e, a tabela 4.2 mostra as variáveis medidas envolvidas nesse estudo. Nas variáveis medidas, optou-se por coletar apenas as temperaturas dos pratos nos quais existem medidores na planta real, a numeração que aparece na tabela 4.2 é correspondente aos pratos do modelo simulado.

Tabela 4.1: Variáveis Manipuladas (VM) e Variáveis distúrbios (VD)

Seção	VM e VD
1° SDE	Solv1: Vazão solvente para a 1° CDE VS: Vazão da corrente de retorno da compressão para a 1° CDE RR1: Razão de Reciclo da 1° CDE Tf1: Temperatura de Fundo da 1° CDE VR2: Vazão de Refluxo da 1° S Tf2: Temperatura de fundo da 1° S
2° SDE	Solv3: Vazão de solvente para a 2° CDE RR3: Razão de Reciclo da 2° CDE Tf3: Temperatura de Fundo da 2° CDE Ta4: Temperatura de alimentação da RB Tf4: Temperatura de fundo da RB

Tabela 4.2: Variáveis Medidas (Vme)

Seção	Vme
1° SDE	Vazões e Frações mássicas dos componentes da: - corrente de topo da 1° CDE - corrente de fundo da 1° CDE - corrente de alimentação da 2° CDE Temperatura dos pratos 1 (Tf1_1), 18 (T1_2), 92 (T1_3), 172 (T1_4), 180 (T1_5) da 1° CDE ¹ Temperatura dos pratos 3, 5 e 6 da 1° S
2° SDE	Vazões e frações mássicas dos componentes da: - corrente de topo da 2° CDE - corrente de fundo da 2° CDE - corrente de topo da RB Temperatura dos pratos 1 (T1_3), 13 (T2_3), 61 (T1_3), 62 (T1_4) e 63 (T1_5) da 2° CDE Temperatura do prato 4 da coluna RB

¹ O número dos pratos é referente a coluna real, para relacionar com o número de pratos da coluna simulada deve-se considerar a eficiência utilizada na modelagem.

As variáveis medidas (tabela 4.2), são coletadas para diferentes valores das variáveis manipuladas e distúrbios (tabela 4.1). Essas variações são feitas de forma independente, enquanto uma variável é alterada as outras são mantidas constantes. Assim, obtém-se a resposta de cada saída para variações em uma única entrada do processo.

A fim de captar o comportamento do processo em regiões de operação distintas, as análises foram realizadas para diferentes valores de temperatura de fundo das torres (Tf1, Tf2 e Tf4), a tabela 4.3 descreve os casos estudados.

Tabela 4.3: Casos estudados na análise de sensibilidade

<i>Análise 1</i>	VM ou VD	<i>Análise 2</i>	VM ou VD	<i>Análise 3</i>	VM ou VD
Tf1 variando Tf3 constante Tf4 constante	$\left\{ \begin{array}{l} \text{PO-10\%} \\ \text{PO-5\%} \\ \text{PO} \\ \text{PO+5 \%} \\ \text{PO+10 \%} \end{array} \right.$	Tf1 constante Tf3 variando Tf4 constante	$\left\{ \begin{array}{l} \text{PO-10\%} \\ \text{PO-5\%} \\ \text{PO} \\ \text{PO+5 \%} \\ \text{PO+10 \%} \end{array} \right.$	Tf1 constante Tf3 constante Tf4 variando	$\left\{ \begin{array}{l} \text{PO-10\%} \\ \text{PO-5\%} \\ \text{PO} \\ \text{PO+5 \%} \\ \text{PO+10 \%} \end{array} \right.$

PO = Ponto de Operação da variável

Por exemplo, para a Análise 1: a temperatura Tf1 foi alterada e as outras duas temperaturas mantidas constantes. Para cada temperatura Tf1, as variáveis de entrada foram alteradas, com base nos valores do ponto de operação. O número de pontos variados para as temperaturas e variáveis de entrada, em todas as análises, é o mesmo: cinco valores de temperatura e cinco valores de cada variável manipulada, para cada valor de temperatura.

Os limites de variação de cada temperatura foram escolhidos a partir dos valores que essas variáveis podem assumir no processo real, levando em conta fatores como a polimerização e restrições energéticas. As variáveis manipuladas e distúrbios foram alteradas conforme o que está representado na tabela 4.3, valores 5 e 10 % acima e abaixo do seu ponto de operação (PO).

A forma na qual os dados foram analisados aparece de forma genérica na figura 4.1.

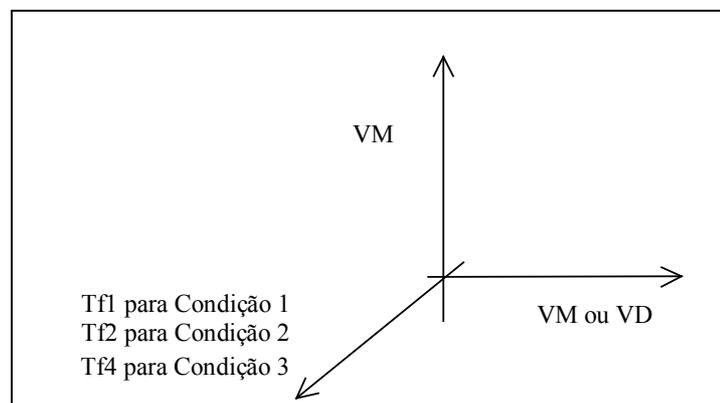


Figura 4.1: Forma genérica dos gráficos gerados para análises

Os gráficos serviram para uma triagem inicial, na qual foi possível determinar, de forma qualitativa, a grandeza da influência entre as entradas e saídas e, o grau de não linearidade do processo. Outras ferramentas, como a determinação do ganho estacionário, também foram utilizadas.

Um relato aprofundado dos resultados obtidos nesse estudo poderia ser extremamente longo, pela quantidade de informações geradas. Desta forma, optou-se pela descrição das principais conclusões de modo simplificado, atentando para aquelas com aplicação direta para atingir os objetivos de operação e controle.

Maiores informações sobre a grandeza da variação causada pelas variáveis manipuladas e grau de linearidade para diferentes pontos estacionários podem ser retiradas no apêndice 3, onde estão os principais gráficos gerados, que são:

- fração mássica de BD no topo da 1º CDE e frações mássicas de C2B e T2B no fundo da 1º CDE para variações em Solv1;
- temperaturas dos pratos da 1º CDE para variações de Solv1;
- frações mássicas de EAC e VAC no topo da 2º CDE para variações de Sol3 e RR3.

4.2 Principais Conclusões

Além do relato dos principais efeitos das entradas nas saídas de interesse, aqui será mostrada uma inversão de ganho determinada na temperatura do prato de topo da 1º CDE, para determinados valores de Tfl e Solv1. Este fenômeno está diretamente relacionado com as diferenças nas volatilidades relativas entre os HC, na presença ou ausência de solvente.

Análise de Sensibilidade

A primeira conclusão que obtemos não traz grandes novidades, pois já era esperada. As variáveis de entrada relacionadas com uma seção têm efeito desprezável sobre as variáveis de saída da outra seção. Isto significa que não faz sentido pensar em estratégias de controle que vinculem variáveis manipuladas da primeira seção com variáveis medidas da segunda seção de destilação extrativa, e vice-versa.

Assim, o efeito das variáveis de entrada será analisado para cada seção separadamente. A análise dos resultados foi concentrada em aspectos relacionados com os objetivos de operação de cada seção. Quer dizer, para a 1º SDE as atenções são voltadas para o comportamento do C2B, T2B e BD, e em determinar se as variações na temperatura dos pratos da coluna expressam as variações de composição dos componentes chaves. Da mesma

forma, para a seção 2ºSDE, as atenções foram voltadas para o comportamento do VAC, EAC e BD e para os perfis de temperaturas das colunas.

- **1º SDE**

Entre as variáveis manipuladas para a 1º SDE, a vazão de solvente (Solv1) praticamente comanda a composição das correntes de topo e fundo, as outras variáveis têm um efeito secundário. Os resultados demonstraram que as saídas de interesse, principalmente as frações mássicas, apresentam na maior parte dos casos um comportamento não-linear, com duas regiões distintas de comportamento. Abaixo é descrito o efeito das variáveis para a 1º SDE e, após a razão da não linearidade na resposta das variáveis de saída é demonstrado e explicado.

Solv1: Variável que apresenta maior efeito sobre as composições de C2B, T2B e BD.

Como era esperado, aumentos em Solv1 diminuem a fração de BD, C2B e T2B no topo da 1º CDE, esses componentes interagem com o solvente sendo arrastados para o fundo da coluna. A intensidade dessa interação é a seguinte: 1º - BD, 2º - C2B e 3º - T2B, sendo vinculada diretamente com as características dos HC (e.x.: insaturações).

Seu efeito sobre a temperatura dos pratos apresenta regiões de comportamento distinto e, geralmente, não-linear:

- ✓ região acima da alimentação de solvente: temperatura dos pratos apresenta inversão de ganho, mas com variações praticamente nulas;
- ✓ região entre a alimentação de solvente e a alimentação de carga: a temperatura aumenta com o aumento do solvente. No prato de alimentação de HC (40) o comportamento é não-linear;
- ✓ abaixo da alimentação de carga: nos pratos de fundo, principalmente a temperatura aumenta para maiores quantidades de solvente, com comportamento próximo ao linear. Nestes pratos é que ocorrem as maiores variações, em torno de 2º C em relação a faixa de solvente analisada.

VS1: Efeito seletivo, servindo para adequar pequenas variações na composição de C2B e T2B no fundo da 1º CDE. Esta variável praticamente não altera a composição de BD na corrente de topo da coluna. Ela enriquece o fundo da coluna de BD, fazendo com que o solvente que esta saindo pelo fundo tenha preferência em arrastar esse componente, e não o T2B e o C2B. Desta forma, quanto maior for VS1, menores serão as frações de T2B e C2B na corrente de fundo da 1º CDE. O C2B é mais sensível a essa variável, pois existe uma quantidade maior deste componente, em relação ao T2B (praticamente nulo) no fundo da coluna. Em relação a temperatura dos pratos da coluna 1º CDE seu efeito é muito pequeno.

RR1: Não altera a composição de C2B, T2B e BD ao longo da coluna. Sua função é garantir que o solvente não seja perdido pela corrente de topo da 1º CDE. A temperatura dos pratos comporta-se de maneira linear para alterações na razão de refluxo, sendo a variável com maior efeito sobre o perfil de temperatura, com exceção do prato de topo que é insensível. Isto

é compreensível, pois as vazões internas da coluna são diretamente vinculadas à razão de refluxo.

Tf1: Variações na temperatura de fundo da coluna tem pequena influência, em relação as outras variáveis manipuladas, sobre a composição de C2B e T2B, quando as outras variáveis (Solv1, RR1) estão dentro de suas faixas normais de operação. Isto vale também para alterações na composição de BD e o perfil de temperatura da 1º CDE.

As variáveis vinculadas com a 1º S [VR2 e Tf2] não alteram diretamente a operação na 1º CDE. Elas devem ser mantidas em valores que preservam o solvente, que deixa a 1º S para ser realimentado nas extratoras, isento de HC.

- **2º SDE**

Da mesma forma que na 1º SDE, a variável mais importante na operação da 2º SDE é a vazão de solvente (Solv3), com a diferença que aqui a quantidade de solvente é cerca de sete vezes menor. Então, a razão de refluxo (RR3) apresenta influência na alteração das composições ao longo da coluna.

A outra característica importante determinada na avaliação dos resultados foi que a temperatura de fundo da 2º CDE (Tf3) não tem praticamente influência no processo, se a temperatura de fundo da coluna RB (Tf4) permanecer fixa. A operação dessas duas colunas é acoplada como se fossem uma única coluna com uma retirada lateral, conforme ilustrado na figura 4.2.

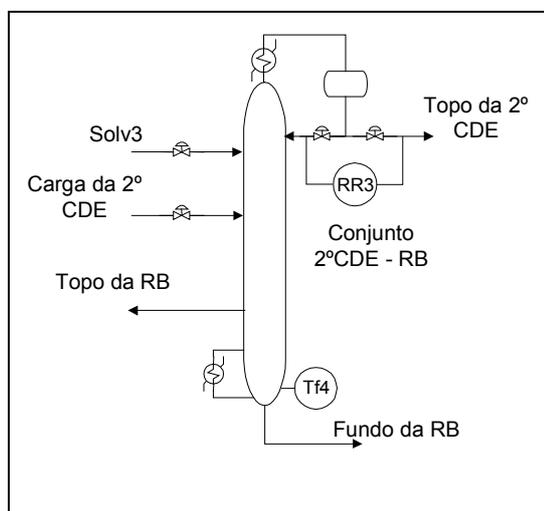


Figura 4.2: Conjunto 2º CDE e coluna RB

Abaixo são descritos os principais efeitos das variáveis manipuladas sobre as composições de VAC, EAC, BD, C2B e T2B e sobre a temperatura dos pratos citados na tabela 4.2. Essa análise será feita tomando como base os resultados gerados, variando Tf4 em conjunto com cada variável manipulada.

Solv3: Em relação a fração mássica dos componentes:

VAC: O VAC fica imutável para qualquer vazão de Solv3 quando Tf4 é menor ou igual ao PO. Para Tf4 maior que a do ponto de operação, diminuições de Solv3 ocasionam o aumento da fração mássica de VAC na corrente de topo da 2º CDE;

EAC: comportamento similar ao VAC, com a diferença que a interação entre esse componente e o solvente é menor. Em todo conjunto de Tf4 e Solv3 analisados, existem pares [Solv3 Tf4], nos quais para determinado valor de Tf4 há uma vazão de solvente acima da qual o EAC é insensível a alterações de Solv3 e, abaixo dela, a fração mássica de EAC aumenta na corrente de topo na 2º CDE para diminuições na vazão de Solv3.

C2B, T2B e BD: apresentam pequenas variações para os diferentes valores de Solv3.

O perfil de temperatura das 2º CDE apresentando um comportamento diferenciado para o ganho acima e abaixo da alimentação de solvente: acima o ganho é praticamente zero e abaixo o ganho é positivo, maiores vazões de Solv3 fazem com que a temperatura no prato seja maior.

RR3: Variações na razão de refluxo afetam, principalmente o EAC e o VAC, sendo que o EAC apresenta uma variação maior. O que é compreensível já que o EAC é mais volátil que o VAC na presença de solvente. O comportamento desses componentes em relação a RR3 para diferentes Tf4 é idêntico ao descrito acima (Solv3).

As frações mássicas de BD, C2B e T2B ficam praticamente inalterados para diferentes valores de RR3.

Somente a temperatura dos pratos de fundo da 1º CDE são alteradas, apresentando um comportamento linear. Da mesma maneira que para a 1º SDE para RR1, esta é a variável que mais afeta o perfil de temperatura da coluna.

Tf3: Como já descrito acima, seu efeito sobre as variáveis de saída é muito pequeno.

Ta4: O comportamento do sistema para alterações nessa variável é similar ao apresentado para a temperatura Tf3. Sua influência sobre as variáveis de saída é pequeno. O que leva a crer que realmente quem comanda a operação desse conjunto é a temperatura Tf4.

Tf4: Quanto às frações mássicas:

VAC: não sofre alterações para Tf4 abaixo do PO, aumentos de temperatura acima desse valor fazem com que a fração desse componente aumente, de forma linear, na corrente de topo da 2º CDE.

EAC: é mais sensível à temperatura que o VAC, somente para valores de T_{f4} abaixo do PO (3 a 4 % menores) passa a não sofrer variações com T_{f4} . Acima desse valor seu comportamento é linear, aumentando na corrente de topo da 2º CDE para aumentos da temperatura.

C2B: Ao contrário dos outros resultados a variável mais afetada pela T_{f4} é a composição de C2B no topo e fundo da 1º CDE. Esse comportamento está vinculado à corrente que recircula para o fundo da 1º CDE (corrente VS1). Que, para maiores valores de T_{f4} , fica mais rica em butadieno melhorando a separação na 1º SDE. Seu comportamento é linear na corrente de topo da 2º CDE, elevando-se com aumentos da temperatura.

BD e T2B: são praticamente insensíveis a variações de T_{f4} .

Variações desta temperatura afetam, principalmente a temperatura dos pratos de fundo da 2º CDE, a variação de temperaturas nesses pratos apresenta comportamento praticamente linear e ganho positivo. Os pratos de topo não sofrem o efeito de variações na T_{f4} .

Inversão de Ganho

Conforme LUYBEN (1992), a inversão de ganho na temperatura no topo de colunas de destilação, a medida que altera-se a composição da mistura, não é um fenômeno observado em colunas convencionais. Este efeito ocorre em sistemas extrativos, nos quais, a volatilidade relativa dos componentes é alterada pela presença do solvente.

Na coluna em questão, os pratos de topo operam sem solvente. Desta forma, a volatilidade relativa dos componentes nesta região é diferente do resto da coluna, onde existe solvente.

Alterando-se a temperatura de fundo da 1º CDE (T_{f1}) e a vazão de solvente (Solv1), foi possível determinar três regiões de comportamentos distintos para a temperatura do primeiro prato da coluna (T_{p1}), definidos por conjuntos de valores [Solv1 T_{f1}]. As figuras 4.3 (a) e (b) mostram essas regiões.

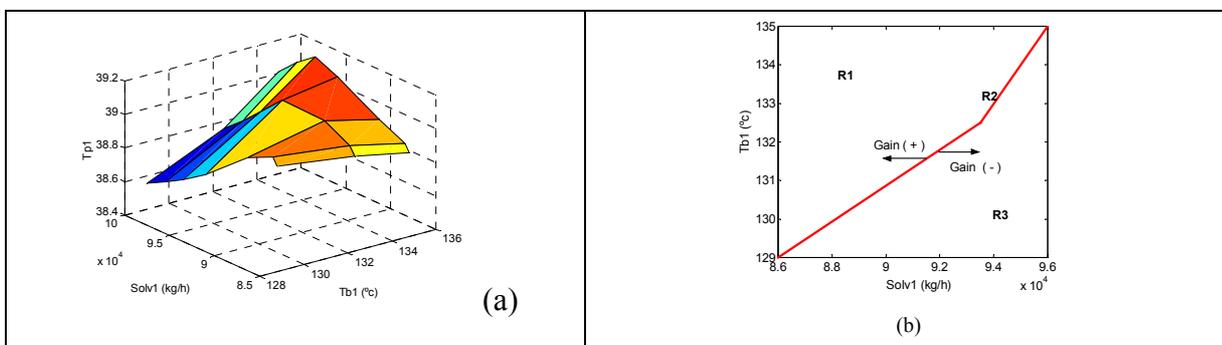


Figura 4.3: (a) Temperatura de topo (T_{p1}), (b) regiões de ganho para a T_{p1}

A figura 4.3 (b), apresenta as regiões de ganho de $Tp1$ alterando o conjunto de valores [Solv1 e Tf1]. Ela foi construída a partir da figura 4.3 (a), captando apenas o sinal do ganho de $Tp1$ no espaço definido por Tf1 e Solv1. As regiões de ganho são as seguintes:

R1: região de ganho positivo (valores de [Solv1 e Tf1] à direita da reta);

R2: região de ganho nulo (valores de [Solv1 e Tf1] sobre a reta);

R3: região de ganho negativo (valores de [Solv1 e Tf1] à esquerda da reta).

Através dela não é possível quantificar a intensidade desse ganho, somente sua direção. Já que é visível na figura 4.3 (a) o comportamento não-linear de $Tp1$ nas diferentes regiões.

Existem três possíveis razões para inversão do sinal do ganho em uma função de transferência: mudança do sinal do pólo, mudança do sinal do zero ou mudança do sinal do ganho. Isso pode ser exemplificado através de uma função genérica, com a seguinte forma:

$$G(s) = \frac{K^*(s-z)}{(s+p_1)(s+p_2)} \quad (4.1)$$

onde,

K^* = ganho da função

z = zero da função

p_1 e p_2 = pólos da função

O ganho estacionário desta função K (quando $s = 0$) é:

$$K = \frac{-K^*z}{p_1p_2} \quad (4.2)$$

É visível que quando K^* , z , p_1 ou p_2 mudam de sinal, o sinal do ganho (K) também pode ser alterado.

Sendo este um sistema estável, a primeira hipótese é descartada, pois os pólos são sempre negativos. A fim de desvendar se este fenômeno é causado por mudanças no valor de ganho ou de zeros, o sistema foi linearizado para três diferentes conjuntos de [Solv1 e Tf1], cada um localizado em uma região distinta (R1, R2 e R3). Com esses modelos foram geradas as funções de transferência que relacionam $Tp1$ e Solv1, representadas qualitativamente pela equação 4.3.

$$\left(\frac{\Delta Tp1}{\Delta Solv1} \right) = f(s) \quad (4.3)$$

Essa linearização foi feita de forma similar a realizada no capítulo 3 – seção 3.2 para obtenção dos modelos dinâmicos lineares.

A tabela 4.4 apresenta os zeros positivos das funções de transferência. A partir dessa tabela é possível concluir que a inversão de ganho em $Tp1$, é causada pela mudança de sinal de $z3$, que migra para o semi plano negativo a medida que o valor de solvente aproxima-se de $R3$.

Tabela 4.4: Zeros positivos (z) das funções de transferência (TF) de cada região

	TF_R1	TF_R2	TF_R3
z1 e z2	$0.61 + 4.13i$	$0.67 + 4.3i$	$0.76 + 4.5i$
	$0.61 - 4.13i$	$0.67 - 4.3i$	$0.76 - 4.5i$
Z3	0.63	0.29	(-)

A explicação do fenômeno sob o ponto de vista do processo é baseada na volatilidade relativa dos componentes chaves dessa coluna com ou sem a presença de solvente (vide figura 4.4 e tabela 2.3).

O BD possui volatilidade relativa maior que o T2B e o C2B na ausência de solvente, porém menor quando ele está presente. Na tabela 2.3 é possível ver que na presença do solvente existe a seguinte ordem decrescente de volatilidade: T2B, C2B e BD. Na 1ª CDE, os componentes mais voláteis que o T2B (e.x: propanos, n-butanos) saem facilmente pelo topo, na faixa de operação em que a coluna é operada (faixa que foram realizados esses estudos), e os menos voláteis que o BD (e.x: acetilenos) rumam para o fundo. Os componentes que sofrem alterações de composição dentro das faixas estudadas de $Solv1$ e $Tf1$ são o T2B, o C2B e o BD. Para altas vazões de $Solv1$ todo o BD, e algumas quantidades de T2B e C2B são arrastados para o fundo da coluna. A medida que $Solv1$ diminui, quantidades menores de C2B e T2B são arrastados para o fundo, enriquecendo a mistura do prato de topo nesses componentes. Como nos pratos de topo da coluna a volatilidade relativa é diferente (ordem decrescente de volatilidades relativas: BD, T2B e C2B), já que eles operam isentos de solvente, a mistura torna-se mais pesada e, conseqüentemente, a temperatura do prato é elevada. Aqui é interessante acompanhar o comportamento da temperatura na figura 4.3 (a) em relação às variações no $Solv1$ e $Tf1$. Diminuindo mais a vazão de solvente, chegamos num ponto em que todo o T2B e o C2B estão no topo (linha da figura 4.3 (b)). A partir deste ponto, reduções no solvente acarretam a subida de BD para o topo da coluna. Ao chegar no topo (região sem solvente) o BD torna a mistura menos volátil, reduzindo a temperatura do prato 1 e invertendo o ganho.

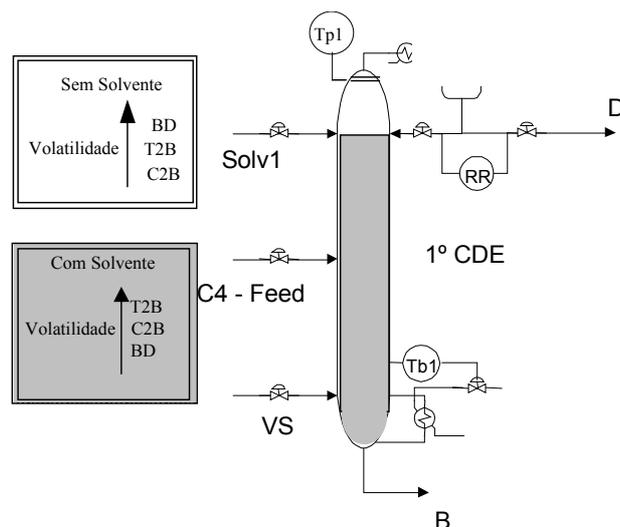


Figura 4.4: Representação da volatilidade relativa dos componentes na coluna ²

4.3 Proposição de alterações nas SDE

As mudanças na operação das seções de destilação extrativa visam aumentar a recuperação de produto, aumentar o tempo de campanha e reduzir o consumo energético do processo. Para atingir esses objetivos o caminho que deve ser seguido é a redução da temperatura de fundo das colunas, para reduzir os depósitos provocados pela polimerização das diolefinas, e a minimização da quantidade de solvente para a separação.

As próprias características da extração colaboram com essa idéia, pois operar as colunas a temperaturas inferiores resulta numa menor necessidade de solvente. A redução da pressão também melhoraria o processo, mas pelas restrições na temperatura da água de refrigeração dos condensadores, fica impossível considerar este aspecto.

Neste trabalho os estudos estão sendo focalizados nas seções de destilação extrativa, porém para propor alterações na operação dessas seções deve-se considerar a recuperação global da unidade. Entende-se por recuperação global, a recuperação de Butadieno produto calculado a partir do montante de butadieno que sai como produto no topo da coluna 2º F em relação à quantidade deste componente na alimentação da unidade. Para isso, foi construído um modelo estacionário da Seção de Especificação de Butadieno (SEB) e os aspectos vinculados à operação da coluna 2º F, necessários para os estudos, foram coletados. Para maiores informações sobre a modelagem da SEB vide o trabalho de LUSA 2001.

² É possível considerar que o topo da coluna comporta-se como se a fração de solvente fosse nula. A fração mássica de solvente no prato acima da sua alimentação é 0.000415, diminuindo em direção aos pratos de topo (dados do modelo estacionário ASPEN).

4.3.1 Primeira Seção de Destilação Extrativa

A 1º SDE deve separar o C2B e o T2B contidos na alimentação para evitar contaminações do produto final. Essa separação é realizada na 1º CDE, já que a outra coluna que faz parte desta seção tem a função única de separar os HC do solvente (coluna 1º S), para este ser recirculado. Desta forma, o estudo deve ser concentrado na 1º CDE (figura 4.5).

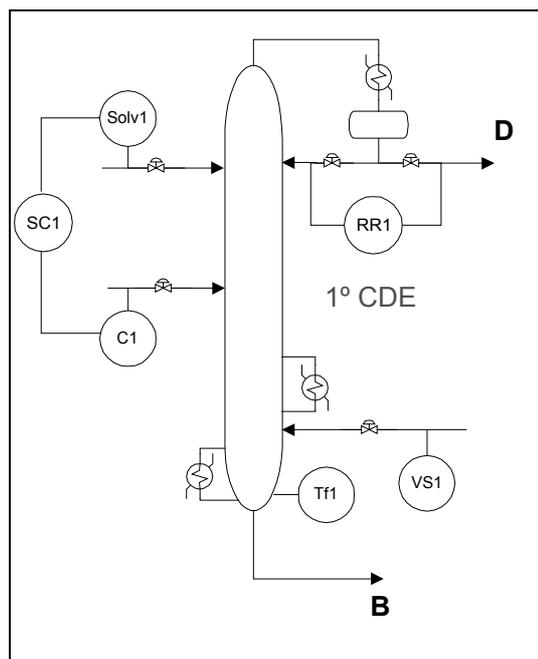


Figura 4.5: Esquema da 1º CDE

As propostas de alteração na operação devem respeitar a especificação para a perda máxima de BD na corrente D (deixa a unidade) e para os valores de C2B e T2B na corrente B (fundo da 1º CDE).

Para melhorar o entendimento, na figura 4.6 o processo é representado como uma caixa preta, mostrando os pontos de saída de C2B, T2B e BD. Todo o montante de T2B contido na alimentação, não separado na 1º CDE, permanece como impureza no produto final, devendo sua concentração ser mantida estritamente no valor especificado. A concentração de C2B tem uma liberdade maior, já que a quantidade remanescente deste composto pode ser removido na 2º F (Seção de Especificação de Butadieno - SEB). Esta coluna é a que especifica o produto final, sua corrente de alimentação é composta basicamente de BD, com pequenas quantidades de EAC, C2B e 12BD. O produto de topo desta coluna é o BD produto e no fundo saem as impurezas.

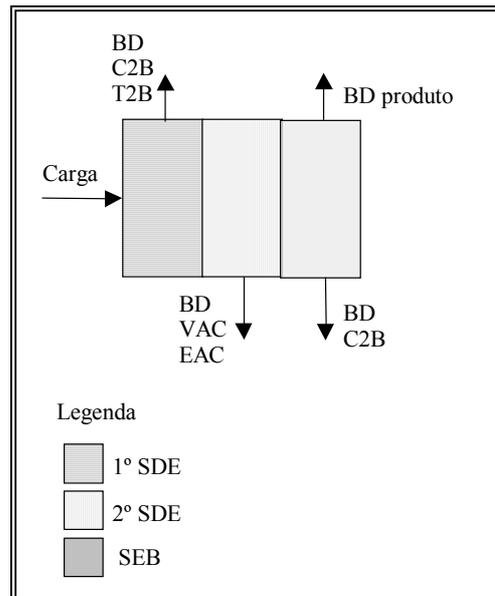


Figura 4.6: Esquema da UEB

Estudos na 2º F mostraram que a relação entre a quantidade de C2B contido na corrente de alimentação (tudo o que não saiu pelo topo da 1º CDE) e, a quantidade de BD perdida na sua corrente de fundo não é linear. A partir de dados obtidos na simulação estacionária da SEB foi construída a curva da figura 4.7, que relaciona a perda de BD no fundo da 2º F para diferentes quantidades de C2B na alimentação da seção SEB, corrente de topo da 2º CDE. Esta curva foi obtida variando a fração mássica de C2B na alimentação da seção, mantendo o valor de vazão total constante, e mesma pureza do produto final (valor da especificação). Quando a fração mássica de C2B na alimentação é maior, a razão de refluxo da coluna 2º F tem que ser aumentada para manter o produto de topo especificado, isso faz com que uma quantidade maior de BD seja realimentado na coluna (através da vazão de refluxo), parte deste BD acaba sendo perdido pela corrente de fundo, causando uma elevação na perda de BD. Este estudo pode ser visto com maiores detalhes em LUSA (2001).

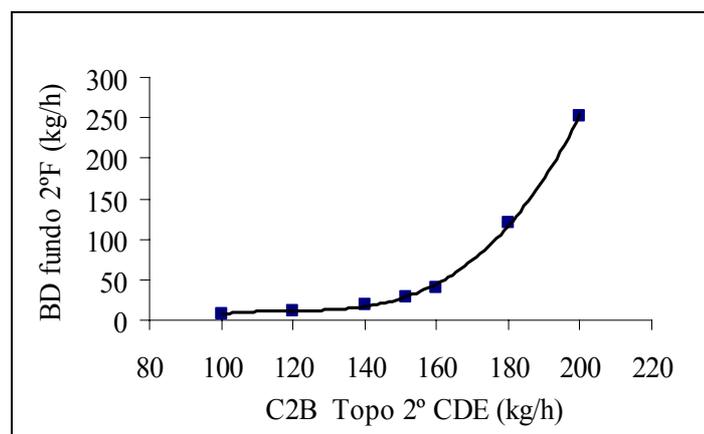


Figura 4.7: Quantidade de BD perdida no fundo da 2º F em função da quantidade de C2B na alimentação

A figura 4.7 mostra que a quantidade de C2B na alimentação da 2º F deve ser mantida abaixo de 160 kg/h para evitar perdas excessivas de BD na corrente de fundo.

Para propor modificações na operação da 1° SDE o modelo estacionário das seções de extração foi simulado em diferentes valores de Tfl e Solv1. As condições estudadas são listadas na tabela 4.5, em todas elas as especificações para separação de T2B e C2B e para o valor máximo de perda de BD pelo topo da 1° CDE devem ser respeitadas.

Tabela 4.5: Condições estudadas para a 1° CDE

Condições de operação	Legenda:
<i>Condição 1 (C1):</i> Tfl_op e Solv1_op	Tfl_op: temperatura no ponto de operação
<i>Condição 2 (C2):</i> Tfl_op e Solv1_1	Tfl_1: temperatura 0,70 % inferior ao ponto de operação
<i>Condição 3 (C3):</i> Tfl_1 e Solv1_2	Tfl_2: temperatura 1,50 % inferior ao ponto de operação
<i>Condição 4 (C4):</i> Tfl_2 e Solv1_3	Tfl_3: temperatura 2 % inferior ao ponto de operação
	Solv3_op: vazão de solvente do ponto de operação
	Solv1_1: vazão de solvente 1,35 % inferior ao ponto de operação
	Solv1_2: vazão de solvente 2,85 % inferior ao ponto de operação
	Solv1_3: vazão de solvente 4,50 % inferior ao ponto de operação

Em relação a precisão das medidas, já que as variações realizadas nas variáveis manipuladas foram pequenas, pode-se dizer que para a Tfl elas estão dentro da precisão dos equipamentos de medida, para Solv1 as variações são pequenas em relação a precisão obtida nas medidas. Como este estudo foi realizado em um simulador não foi possível captar esses efeitos. Porém, os resultados informam a tendência do processo, quando alterações deste tipo forem realizadas. A partir do conhecimento da real precisão obtida na variação do solvente pode-se estimar se serão possíveis alterações desta natureza.

Atualmente, a operação desta coluna é feita de modo a minimizar a perda de BD, mantendo-a sempre abaixo do valor máximo especificado. Isto prejudica a separação de C2B, pois as condições que aumentam o arraste de BD para o fundo da coluna também aumentam o de C2B. Na condição C1, que é um caso normal de operação, a perda de BD pelo topo da 1° CDE está abaixo da especificação. Nas outras condições, este valor é mantido na especificação e a quantidade de solvente é adequada conforme a Tfl.

Os valores de recuperação global de BD para as cinco condições e as quantidades de C2B, T2B e BD na corrente de topo da 1º CDE em relação as suas quantidades na alimentação estão na tabela 4.6.

Tabela 4.6: Recuperação global de BD

	C1	C2	C3	C4
BD	0,001	0,003	0,003	0,003
C2B	0,691	0,776	0,739	0,703
T2B	0,993	0,996	0,994	0,992
Recuperação Global de BD	0,984	0,995	0,993	0,986

Na condição C2 a temperatura T_{f1} é mantida no mesmo valor da operação normal, e a quantidade de solvente é reduzida a fim de diminuir o arraste de C2B, consequentemente a perda de BD pelo topo dessa coluna aumenta de 1 para 3 % do total alimentado. Mas esse acréscimo de perda é ínfimo em relação ao ganho obtido na seção SEB, a recuperação global é muito superior a C1. Isso acontece pois em C2 cerca de 8 % a menos de C2B é alimentado na seção SEB.

Baixando simultaneamente T_{f1} e Solv₁ obtém-se um efeito semelhante, porém em menor proporção. Para a condição C3, menor T_{f1} e Solv₁, a recuperação diminui, mas continua sendo maior que na situação atual de operação. Uma situação similar a atual (C1) é obtida em C4, porém com a vantagem da coluna estar com temperatura T_{f1} e vazão de solvente Solv₁ inferiores aos valores de operação. Para valores de T_{f1} inferiores a T_{f1_3} é impossível operar a seção com a separação desejada mesmo variando o solvente.

A composição tem uma resposta bastante não-linear para variações na temperatura e vazão do solvente, isto pode ser visto nas figuras 4.8 (a), (b) e (c), que mostram a vazão mássica do BD, C2B e T2B na corrente de topo da 1º CDE. Para temperaturas menores, mesmo baixando muito o solvente, não é possível atingir a separação desejada de C2B, mantendo a especificação de topo para o BD, havendo um limite mínimo ótimo para a T_{f1}. O T2B por ser mais volátil vai para o topo sem maiores problemas.

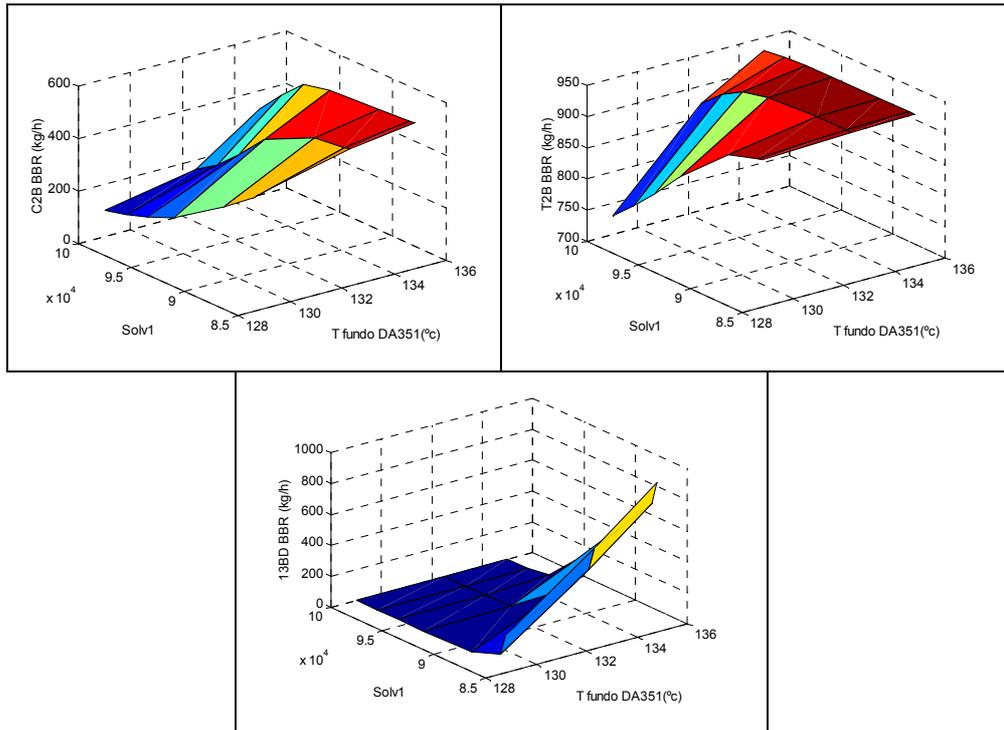


Figura 4.8: Vazões mássicas de BD, C2B e T2B na corrente de topo da 1^o CDE para diferentes valores de Tfl e Solv1

4.3.2 Segunda Seção de Destilação Extrativa

O conjunto 2^o CDE/RB tem a função de separar o VAC da corrente de HC perdendo a menor quantidade possível de BD. O BD contido na corrente de fundo da RB não retorna para o processo, sendo perdido através da corrente de topo da 2^o S. Nesta corrente existe um analisador “on line” de BD e VAC. A idéia é minimizar a quantidade de BD no topo da 2^o S de modo que o produto não saia das especificações (VAC e EAC).

Porém, ao minimizar a quantidade de BD no topo da 2^o S (operar a RB com temperatura de fundo mais elevada) aumentam-se os reciclos de VAC e EAC no sistema. Um dos efeitos que este aumento pode causar está descritos no capítulo 5, onde é relatada a influência do reciclo de massa na constante de tempo do sistema. Outro aspecto é a relação: perda de BD e reciclo VAC/EAC, ao minimizarmos o reciclo maximizamos a perda de BD no topo da 2^o S e vice-versa. Deve existir uma relação ótima entre a quantidade de BD perdida no topo da 2^o S e as quantidades de VAC e EAC no reciclo.

As questões que devem ser respondidas nesta análise são :

1. Menores quantidades de VAC no reciclo farão com que o sistema atinja o estado estacionário mais rápido ?
2. Relação: maior perda de BD no topo da 2^o S / menor reciclo de VAC. Em que condição é melhor de operar ?

3. Menores quantidades de VAC no reciclo fazem com que seja necessário uma quantidade menor de solvente para a 2^oCDE ?

Questão 1

Utilizando o modelo dinâmico realizou-se testes em duas condições diferentes de temperatura no fundo da RB. A temperatura normal de operação, e um valor inferior que torna o reciclo menor. Nestas duas situações estacionárias foram feitos os mesmos distúrbios e determinado o tempo necessário para que a concentração de BD no topo da 2^o CDE chegasse ao valor estacionário novamente.

A diferença na constante de tempo do sistema foi em torno de 1 hora, o que não é uma diferença elevada. Isto ocorre, pois a diferença na quantidade de massa recirculada é pequena frente ao total de alimentação da 2^o CDE (cerca de 3 % da massa alimentada é composta por VAC).

Questão 2

Para responder esta questão é necessário considerar uma função custo com pelo menos os seguintes fatores:

- Carga térmica dos refeedores;
- Vazão de solvente (custos hidráulicos de bombeamento, recuperação de solvente)
- Preço do BD (recuperação de BD)

Nesta etapa será feita uma análise superficial levando em consideração somente a recuperação de BD. O efeito sobre a carga térmica dos refeedores e custos do solvente são abordadas de forma qualitativa.

Para gerar os dados necessários para este estudo optou-se pela utilização do modelo estacionário. Duas condições de temperatura de fundo da coluna RB foram simuladas: a temperatura na qual ela é usualmente operada (T_{f4_op}) e uma temperatura 2 % menor (T_{f4_1}), para a mesma vazão de solvente do ponto de operação ($Solv3_op$). As variações de massa no reciclo e a recuperação de BD foram determinadas, coletando os valores de vazão e composição para as correntes de topo das extratoras e as correntes de topo e fundo da coluna RB, nas duas condições de temperatura descritas.

A tabela 4.7 mostra a relação entre as quantidades de BD, C2B, EAC e VAC que entram na carga da unidade e o montante desses componentes nas correntes de topo das extratoras e no topo da coluna RB.

Tabela 4.7: Relação entre a quantidade dos componentes nas correntes e a quantidade alimentada na unidade

	Topo da 1° CDE		Topo da 2° CDE		Topo RB		Fundo RB	
	Tf4_op	Tf4_1	Tf4_op	Tf4_1	Tf4_op	Tf4_1	Tf4_op	Tf4_1
BD	0,001	0,001	0,995	0,993	0,082	0,095	0,003	0,005
C2B	0,691	0,712	0,309	0,287	0,008	0,010	0	0
EAC	0	0	0,055	0,006	2,404	1,704	0,929	0,979
VAC	0	0	0	0	5,587	3,402	0,979	0,985

Com uma temperatura menor a quantidade de BD enviado para a seção de especificação de produto é menor (topo da 2° CDE). A perda de BD aumenta em cerca de 0.2 %, em vazão mássica, isso representa 18 kg/h. Mas, por outro lado, a separação de C2B na 1° CDE melhora com essa alteração. As implicações da maior separação de C2B na 1° SDE já foram descritas na seção anterior.

Será feita uma análise similar a realizada para a 1° SDE na seção anterior. Utilizando a equação ajustada para a curva da figura 4.7 determina-se a perda de BD na coluna 2° F, nas duas condições de temperatura de fundo da coluna RB. Assim, é possível calcular o balanço de massa global e determinar a variação na recuperação de BD produto. O resultado está na tabela 4.8.

Para a temperatura de operação normal da coluna RB, a perda no fundo da coluna 2° F, em relação a massa de BD na alimentação, é de 1,5 %. Reduzindo a temperatura de fundo da RB essa perda cai para 0,85 %.

Tabela 4.8: Recuperação Global de BD

	Top	Tmenor
Recuperação Global de BD	0,981	0,985

Essa diferença de 0,4 % representa cerca de 30 kg/h de produto, em termos financeiros isto significa 3379 U\$/h. Neste valor não estão embutidos os custos hidráulicos nem os energéticos, somente os relacionados com o valor da corrente de BD produto e, as outras correntes de saída do processo, que são utilizadas como combustível.

Somando-se a esse aumento de produção existem os aspectos da diminuição na recirculação de VAC e EAC (tabela 4.7). A massa desses componentes no reciclo cai praticamente para a metade. Isso indica que a quantidade de solvente alimentado na 2° CDE pode ser menor, reduzindo os custos hidráulicos. Também, vai ocorrer uma diminuição na constante de tempo do sistema que, embora pequena, colabora para a redução de custos energéticos, pois o sistema atingirá o estacionário de forma mais rápida.

Os resultados desse estudo mostram que análises somente sobre as seções de extração geram conclusões equivocadas. A perda de BD é maior nas seções de extração, mas a separação de C2B aumenta, diminuindo as perdas de produto na SEB. É necessário um estudo global da unidade (seções de extração e especificação) para avaliar os impactos de alterações nos processos em que existem correntes de reciclo.

Questão 3

Quatro condições diferentes foram analisadas para estudar a influência entre a quantidade de solvente e a temperatura de fundo da coluna RB. Os valores de vazão de solvente (Solv3) foram definidos a partir da concentração de VAC na corrente de topo da 2° CDE, que deve respeitar uma especificação.

Normalmente, esta coluna é operada de forma que a concentração de VAC esteja abaixo da especificação. A condição normal de operação é a C1, na condição C2 a concentração de VAC é menor ainda que na condição normal, pois a temperatura de fundo está menor e a vazão de solvente permaneceu inalterada. Na condição C3 e C4, a vazão de solvente é reduzida de forma que em C3 a concentração de VAC é igual a C1 e, na condição C4 esta concentração está no valor da especificação. Os valores de T de fundo da RB e vazão de solvente utilizados são descritos na tabela:

Tabela 4.9: Condições estudadas para a 2° CDE

<i>Condições de Operação</i>	Legenda:
<i>Condição 1 (C1):</i> Tf4_op e Solv3_op	Tf4_op: temperatura de fundo no ponto de operação
<i>Condição 2 (C2):</i> Tf4_1 e Solv3_op	Solv3_op: vazão de solvente do ponto de operação
<i>Condição 3(C3):</i> Tf4_1 e Solv3_1	Tf4_1: temperatura 2 % inferior ao ponto de operação
<i>Condição 4 (C4):</i> Tf4_1 e Solv3_2	Solv3_1: vazão de solvente 12,5 % inferior ao ponto de operação
	Solv3_2: vazão de solvente 17,5 % inferior ao ponto de operação

Os valores de recuperação global de BD para os quatro casos estão na tabela 4.10.

Tabela 4.10: Recuperação Global de BD

	C1	C2	C3	C4
Recuperação Global de BD	0,981	0,985	0,984	0,984

A condição C2 apresenta a melhor recuperação global de BD, isto é devido ao aumento na separação de C2B (questão 2). Ao reduzirmos a quantidade de solvente, a recuperação permanece superior a condição normal de operação. Porém, nestes casos, a recuperação aumenta pelo somatório de dois efeitos: o efeito da separação de C2B, que é menor que C2, e a redução nas perdas de BD no topo da 2° S .

Sob o aspecto da recuperação as condições C2, C3 e C4 são praticamente similares. Então, outros fatores devem ser considerados, dentre eles os principais são: recirculação de VAC/ EAC e, as reduções dos custos hidráulicos e de aquecimento nos refulvedores devido a menor vazão de solvente.

Uma maneira de mensurar esses efeitos é analisar as tabelas 4.11 e 4.12 que mostram, respectivamente, a fração dos componentes nas correntes de topo e fundo das extratoras e de topo da coluna BD, todos em relação à alimentação da unidade.

Tabela 4.11: Fração dos componentes no topo e fundo das extratoras em relação à alimentação

	Topo da 1° CDE				Topo da 2° CDE			
	C1	C2	C3	C4	C1	C2	C3	C4
BD	0,001	0,001	0,001	0,001	0,995	0,993	0,995	0,995
C2B	0,691	0,712	0,700	0,700	0,309	0,287	0,300	0,299
EAC	0	0	0	0	0,054	0,006	0,076	0,367
VAC	0	0	0	0	1,85e-6	2,70e-8	1,81e-6	8,3e-5

Tabela 4.12: Fração dos componentes no topo da coluna BD em relação à alimentação

	Topo da RB				Fundo da RB			
	C1	C2	C3	C4	C1	C2	C3	C4
BD	0,082	0,095	0,072	0,066	0,003	0,005	0,003	0,003
C2B	0,008	0,008	0,008	0,007	0	0	0	0
EAC	2,398	1,704	2,006	1,367	0,928	0,979	0,913	0,621
VAC	5,583	3,402	4,625	4,719	0,979	0,985	0,981	0,981

Deve-se futuramente fazer um estudo da relação recirculação/redução de solvente para determinar qual é a condição mais lucrativa de operar a unidade. A menor recirculação (VAC e EAC) é obtida para a condição C2, em C3 e C4 observa-se também uma redução nestes valores, mas menores que em C2. Porém, nestes casos, o solvente também foi reduzido, colaborando para a redução dos custos energéticos do processo.

Existe uma desvantagem na condição C4, a concentração de EAC na corrente de topo da 2° CDE é muito elevada, ficando acima do valor especificado. Caso a coluna seja operada nessas condições, isto pode ser corrigido alterando a razão de refluxo da coluna, que tem grande influência na adequação da concentração desse componente.

4.3.3 Possibilidade de controlar o BD no topo da 2° S inferindo a temperatura de topo da coluna RB

O controle da quantidade de BD no topo da 2° S é um ponto básico para a operação da unidade. Como já descrito, nesta corrente existe um analisador “on line” de BD e VAC, mas associado a essa medida, existe o tempo morto envolvido com a própria medida e os relacionados com a constante de tempo do processo. Alterações na corrente de reciclo e na coluna 2° CDE podem demorar para serem refletidas na corrente de topo da 1° S. Desta forma, seria interessante conseguir relacionar a temperatura do reciclo com a composição de BD na corrente de topo da 2° S. Esta seria uma maneira de inferir a relação perda de BD/reciclo VAC e EAC.

Utilizando a simulação estacionária variou-se a temperatura de fundo da coluna RB (Tf4) e coletou-se os valores de temperatura e fração mássica de BD, VAC no topo desta coluna. Os resultados estão nas figuras 4.9 (a), (b) e (c).

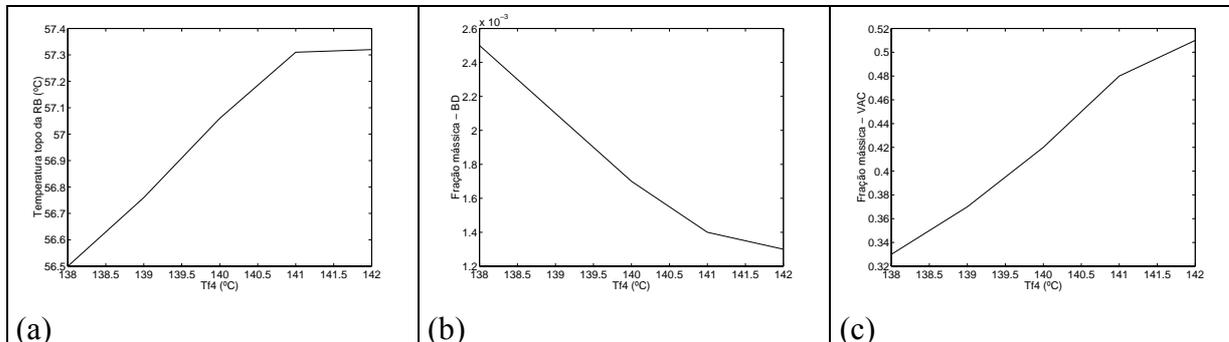


Figura 4.9: Temperatura e frações mássicas no topo da RB para diferentes Tf4 - (a) Temperatura de topo (b) BD (c) VAC

As composições apresentam uma variação grande para diferentes temperaturas de fundo da coluna RB. Porém, a temperatura de topo não consegue representar essas alterações, sua variação é muito pequena. Desta forma, a inferência da composição de BD no topo da 2° S a partir desta temperatura fica descartada. Pode-se pensar na possibilidade de colocar um analisador nesta corrente, que além de controlar o BD no topo da 2° S serviria como controlador do reciclo.

Capítulo 5

Caracterização do Comportamento Dinâmico

Este capítulo aborda algumas características da dinâmica da UEB, analisadas com base no modelo dinâmico não-linear da unidade. Dois aspectos serão descritos: as causas das dinâmicas lentas do processo e o efeito “SnowBall”. Nos dois é possível observar a importância do estudo dos efeitos dos ciclos mássicos.

5.1 Causas das Dinâmicas Lentas na UEB

A primeira seção de destilação extrativa é a principal responsável pela resposta lenta do processo. Dois efeitos distintos causam este comportamento:

1. Número elevado de pratos da 1º CDE;
2. Reciclo do fundo da 2º CDE e sistema de compressão.

Efeito 1

A primeira causa para as respostas lentas é facilmente detectada e compreendida. A 1º CDE é composta por um número elevado de pratos, que conferem inércia à alterações no equilíbrio ao longo da coluna. Nos dados de projeto a 1º CDE é composta de 181 pratos, por motivos de construção, ela é dividida fisicamente em duas: 1º CDE/A com 92 pratos e a 1º CDE/B com 89 pratos. Este elevado número de pratos torna o equilíbrio líquido-vapor extremamente lento. É necessário que as informações de alterações no equilíbrio de cada prato sejam transmitidas ao longo da coluna (prato a prato). Se alguma alteração no processo

modificar as condições da coluna, as correntes de topo e fundo demorarão cerca de oito horas para atingir um novo estado estacionário, considerando que mais nenhuma alteração seja efetuada neste intervalo.

Efeito 2

O segundo fator está diretamente relacionado com os efeitos do reciclo de massa na unidade. Segundo LUYBEN (1998), a constante de tempo do sistema de reciclo pode ser muito diferente da soma das constantes de tempo dos componentes individuais da malha. Na figura 5.1 aparece um esquema simplificado do processo, atentando para o reciclo entre a corrente de topo da RB e o sistema de compressão, maiores detalhes da sua localização no processo vide a figura 2.3 do Cap. 2.

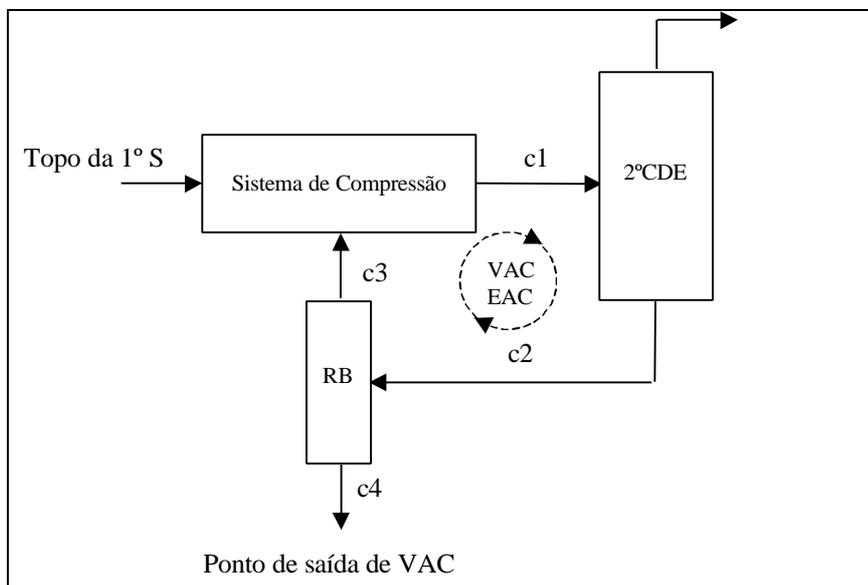


Figura 5.1: Esquema simplificado do reciclo entre o topo da RB e o sistema de compressão

A função da 2º CDE é separar o VAC e EAC da corrente de HC, que são arrastados pelo solvente, saindo na corrente c2. Todo o montante desses componentes possui apenas um ponto de saída do processo: o topo da 2º S. Isto significa que o VAC e EAC que saem na corrente c4 não retornam mais ao processo.

A corrente c2 possui, além de VAC e EAC, uma quantidade considerável de BD, que deve ser retornado ao processo para evitar perdas excessivas de produto. Esta recuperação é feita na coluna RB, que é operada de forma a vaporizar o BD remanescente na corrente de fundo da 2º CDE (c2), vaporizando também uma grande quantidade de VAC e EAC.

A partir de um modelo simples de diagramas de blocos para o sistema da figura 5.1 pode ser estudado, genericamente, o efeito desse reciclo na constante de tempo do processo. A figura 5.2 mostra este diagrama.

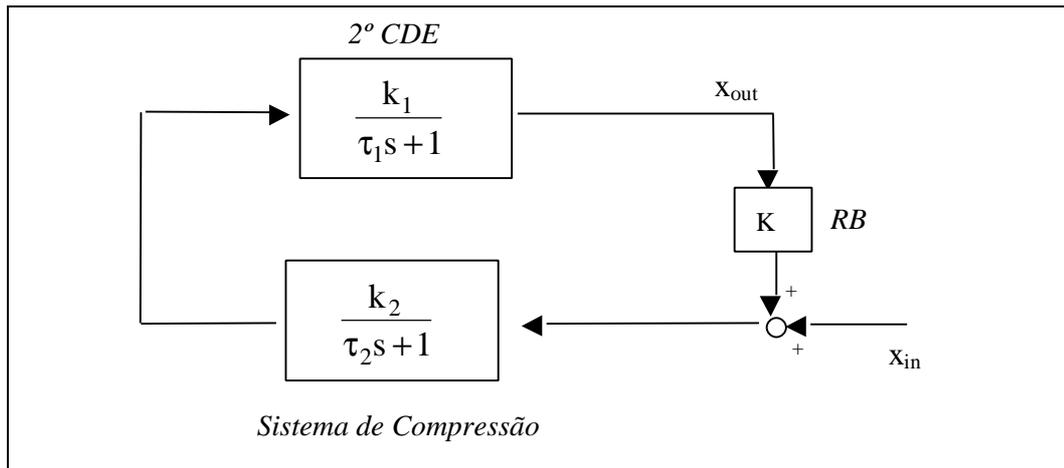


Figura 5.2: Diagrama de Blocos do Sistema de Reciclo

Na figura 5.2 os equipamentos estão representados como funções de transferência, com as seguintes características:

- 1º CDE: dinâmica de primeira ordem com ganho k_1 e constante de tempo τ_1 ;
- RB: ganho estacionário K . Este valor representa o quanto de VAC e EAC deixam o processo em relação ao que recircula.

$$K = 0 \text{ reciclo nulo}$$

$$K = 1 \text{ reciclo total}$$

- Sistema de Compressão: dinâmica de primeira ordem com ganho k_2 e constante de tempo τ_2 .

A entrada desse sistema (x_{in}) pode ser vista como a massa de VAC e EAC que entram no processo, a saída do sistema (x_{out}) como a massa de VAC e EAC que saem do processo, o valor de K representa a relação do quanto desse montante deixa o sistema (dependente da forma como a RB é operada).

A álgebra dos blocos (figura 5.2) fornece os valores de constantes de tempo e ganho global para o sistema .

$$\frac{x_{out}}{x_{in}} = \frac{\frac{k_2}{(\tau_2 s + 1)} \times \frac{k_1}{(\tau_1 s + 1)}}{1 - K \frac{k_2}{(\tau_2 s + 1)} \times \frac{k_1}{(\tau_1 s + 1)}} \quad (5.1)$$

$$\frac{x_{out}}{x_{in}} = \frac{k_2 k_1}{(\tau_2 s + 1)(\tau_1 s + 1) - K k_2 k_1} \quad (5.2)$$

$$\frac{x_{out}}{x_{in}} = \frac{k_2 k_1}{\tau_2 \tau_1 s^2 + (\tau_2 + \tau_1)s + (1 - Kk_2 k_1)} \quad (5.3)$$

Conforme LUYBEN (1998), o denominador de uma função de transferência é a equação característica de um sistema. Para o sistema de reciclo descrito:

$$\tau_2 \tau_1 s^2 + (\tau_2 + \tau_1)s + (1 - Kk_2 k_1) = 0 \quad (5.4)$$

$$\frac{\tau_2 \tau_1}{(1 - Kk_2 k_1)} s^2 + \frac{(\tau_2 + \tau_1)}{(1 - Kk_2 k_1)} s + 1 = 0 \quad (5.5)$$

A equação 5.5 tem a forma geral de uma função de segunda ordem, cuja a constante de tempo para o sistema em malha fechada e, o ganho do sistema de reciclo em malha aberta (produto do ganho de todas as unidades no caminho do reciclo) são, respectivamente :

$$\tau_{sis} = \sqrt{\frac{\tau_2 \tau_1}{(1 - Kk_2 k_1)}} \quad (5.6)$$

$$G_{malha} = Kk_2 k_1 \quad (5.7)$$

A constante de tempo do sistema é diretamente relacionada com o ganho da malha, no caso k_1 e k_2 são constantes e, K dependente da operação da RB (quantidade de VAC e EAC que será recirculada). Quando o ganho da malha aproxima-se de 1 a constante de tempo do sistema em malha fechada (τ_{sis}) tende a infinito, ou equivalentemente, surge um pólo na origem indicando características integradoras ao sistema . Desta forma, a constante de tempo global para de um sistema com reciclo pode ser muito maior do que qualquer constante de tempo individual do sistema.

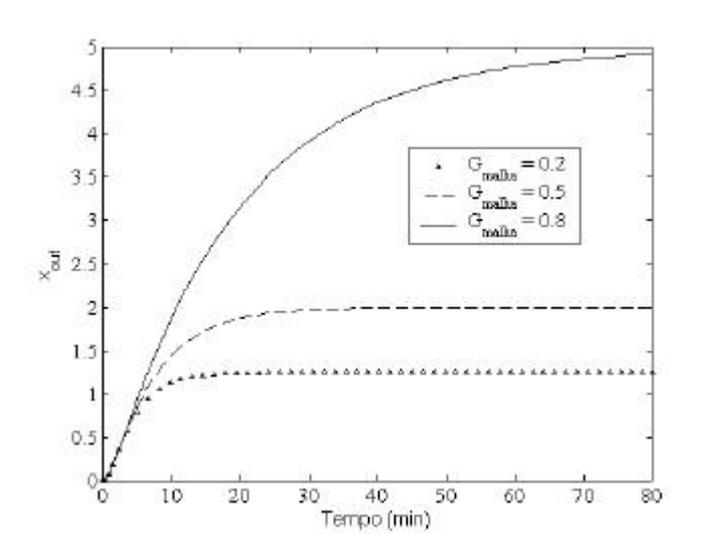


Figura 5.3: Efeitos do reciclo na resposta dinâmica do processo

A figura 5.3 mostra o comportamento do sistema para diferentes valores de k_2 , os valores de k_1 , k_3 , τ_1 e τ_2 são mantidos constantes. A medida que o ganho da malha se aproxima da unidade, τ_{sis} aumenta. Para $G_{malha} = 0.8$ a constante de tempo para o sistema é 20 min enquanto para as unidades individuais a constante de tempo é igual a 2 min. O ganho do estado estacionário para o processo em malha fechada (eq. 5.8), também é afetado pelo reciclo, tornando-se maior para maiores K , da mesma forma que a constante de tempo para o sistema. Na tabela 5.1 estão os ganhos do sistema no estado estacionário para os diferentes valores de K .

$$G = \frac{k_1 k_2}{(1 - k_1 K k_2)} \quad (5.8)$$

Tabela 5.1: Ganhos do sistema para diferentes valores de k_2

K	G
0.2	1.25
0.5	2
0.8	5

As alterações da dinâmica em sistema com reciclos devem ser consideradas durante o desenvolvimento das estratégias de controle. Em sistemas com elevados reciclos, o tempo necessário para que um novo estado estacionário seja alcançado, quando ocorre alguma alteração no processo, pode ser muito elevado. A detecção de distúrbios no processo também pode ser prejudicada conforme o grau do reciclo.

5.2 Efeito “SnowBall”

Segundo LUYBEN (1998), os sistemas de reciclo tendem a exibir grandes variações nos fluxos das suas correntes para pequenas alterações na operação. Isto causa problemas na operação da unidade, principalmente nas malhas de controle de nível. Essa alta sensibilidade das vazões nos sistemas de reciclo, para pequenos distúrbios na unidade, é conhecida como efeito “SnowBall”.

Uma forte evidência de que este fenômeno pode ocorrer na UEB é que, na planta real, os níveis de fundo das duas extratoras são operados em malha aberta, não havendo nenhum motivo explícito para isso. A vazão das correntes de fundo é modificada manualmente com base num indicador de nível. Quando essas malhas estavam fechadas ocorriam “problemas na operação”, que os engenheiros de processo não sabiam explicar.

Para analisar o efeito “SnowBall” na UEB, foram realizados três distúrbios no modelo da unidade. Sendo os impactos dessas alterações avaliados nas vazões mássicas das correntes envolvidas no sistema de reciclo. As correntes monitoradas estão representadas na figura 5.4

(para evitar confusões é importante salientar que a nomenclatura utilizada para designar as correntes nesta figura não são as mesmas utilizadas na figura 5.1). Na figura 5.4 aparece a estrutura de controle atual dos níveis e vazões das correntes na unidade real. A estrutura de controle de níveis no modelo que foi simulado é a seguinte: o nível das colunas extratoras, da coluna RB e 1° S é controlada através da manipulação da vazão de fundo, em malha fechada. O nível dos vasos de “flash” é controlado conforme a figura 5.4. E, de forma distinta ao processo real, ao invés da vazão da corrente VS1 ser mantida fixa, na simulação existe um separador que divide em três parcelas (correntes c4, c15 e c19) a corrente de saída do sistema de compressão. O que é controlado neste separador (mantido fixo) é a vazão de massa de alimentação da 2° CDE e a fração da massa da corrente de saída do sistema de compressão que forma a corrente c4. Desta forma, a massa da corrente c19 não varia e, c4 e c15 podem sofrer alterações conforme as variações da vazão de massa de saída do sistema de compressão.

Os distúrbios realizados no estudo estão descritos abaixo:

Teste 1: Aumento da fração mássica de VAC na carga em 25%, mantendo a vazão total constante. A quantidade de massa acrescida de VAC foi reduzida na massa BD.

Teste 2: Aumento da carga total de HC na unidade em 25 % sem variação na vazão de solvente.

Teste 3: Aumento da vazão mássica de BD na carga de HC, em 25%, variando a vazão de solvente na mesma proporção.

O *Teste 1* tem o objetivo de determinar se variações apenas na composição causam o “Snowball”. No *Teste 2* variou-se a carga total de HC na unidade, sem alterações na composição e na vazão de solvente. Isso não aconteceria no processo real, pois para manter a qualidade do produto é necessário uma razão solvente/carga constante. No *Teste 3* simulou-se uma variação na composição e na vazão da carga, alterando-se a quantidade de solvente para manter a razão solvente/carga constante. Esta é a situação que mais aproxima-se do que acontece na realidade.

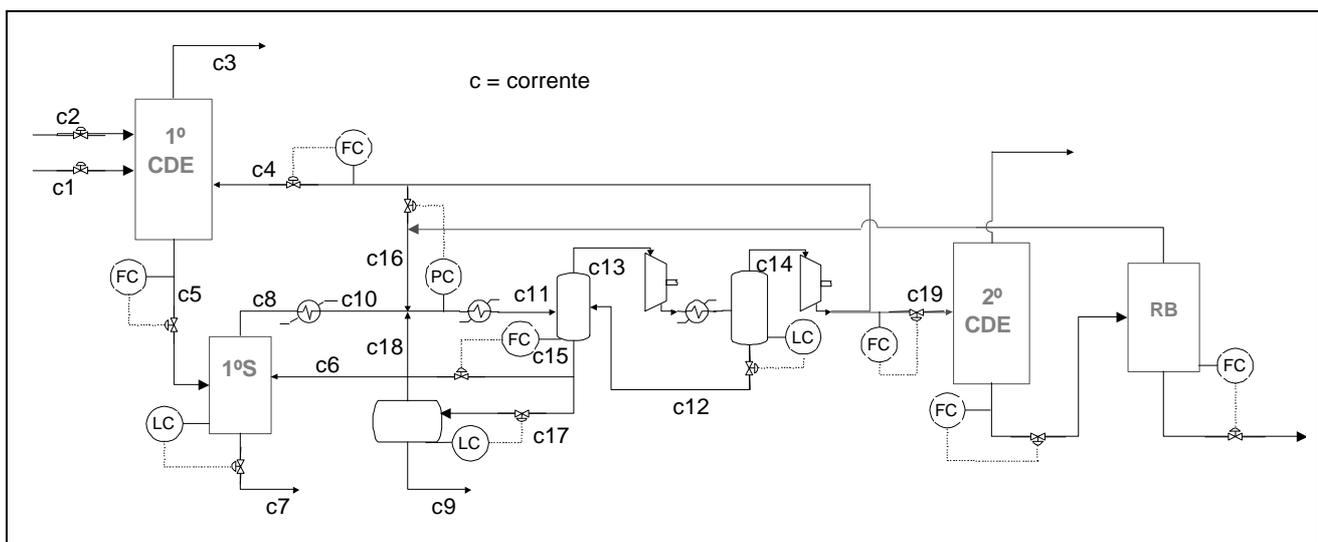


Figura 5.4: Correntes abordadas no estudo do efeito “SnowBall”

A fim de analisar as variações causadas nas vazões das correntes pelos distúrbios, os resultados foram plotados em diagramas de barras. Nos quais as correntes c1 e c2 são as correntes de carga da unidade, HC e solvente respectivamente. Desta forma é fácil relacionar a amplitude dos distúrbios na carga com as variações causadas nas vazões das correntes.

Teste 1 : Na figura 5.5 vê-se que as variações nas correntes de alimentação da unidade é nula (c1 e c2). Porém, verifica-se aumentos superiores a 25% na corrente que recircula para o sistema de compressão, proveniente da saída desse sistema, corrente c16 e na corrente de fundo do tambor intermediário do compressor (c12). Em outras correntes ocorrem variações na vazão, mas em menor grau. As figuras 5.6 (a) e (b) mostram o comportamento da resposta dinâmica dessas duas correntes. Para a corrente c15 ocorre na parte transiente uma elevação superior ao valor estacionário, o que pode agrava mais a operação.

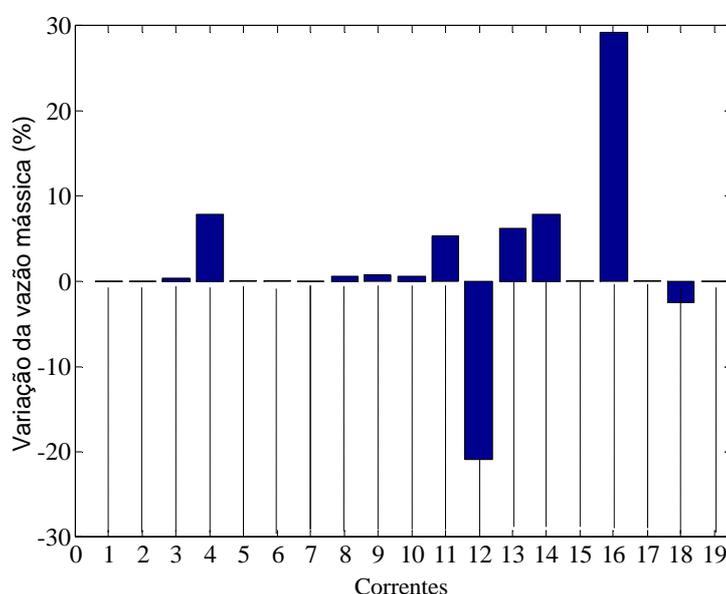


Figura 5.5: Variação da vazão mássica das correntes do sistema de reciclo para o *Teste 1*

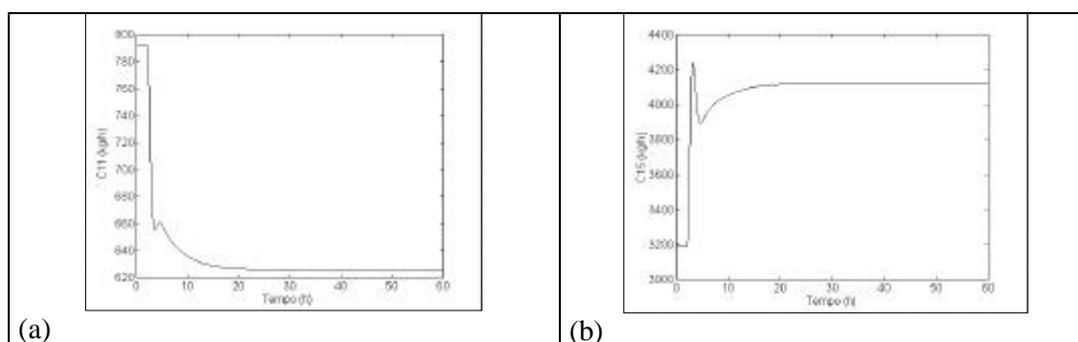


Figura 5.6: Variação nas vazão das correntes (a) c11 (b) c15 para o *Teste 1*

Teste 2: Na figura 5.7 é possível observar as variações nas correntes para o degrau de 25 % na corrente de carga da unidade (c1). Novamente, as correntes c16 e c12 apresentaram elevadas alterações, muito superiores a variação de carga da unidade. A corrente c16 aumentou cerca de 110%. Neste caso, a corrente de topo da 1ª CDE (c3) aumentou 60 %, este fato é devido a vazão solvente ter permanecido constante, o que prejudica a separação na

coluna, aumentando as perdas de BD. Aumentos nesta corrente não tem relação com o efeito “SnowBall”.

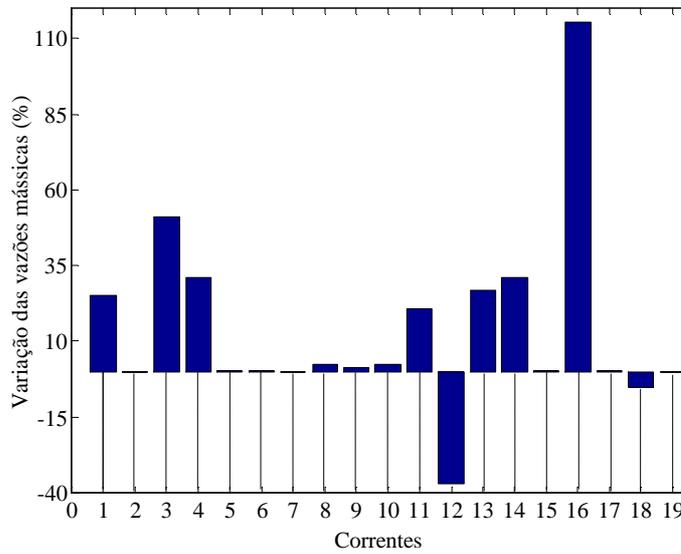


Figura 5.7: Variação da vazão mássica das correntes do sistema de reciclo para o Teste 2

As figuras 5.8 (a) e (b) mostram os transientes para as correntes com maior variação nas vazões mássicas. Onde, o mesmo comportamento no transiente anterior é visto na corrente c15.

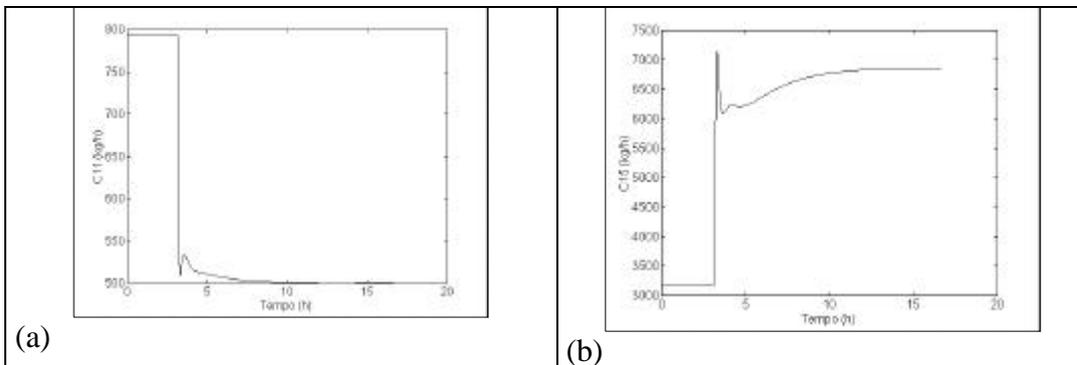


Figura 5.8: Variação nas vazões das correntes (a) c11 (b) c15 para o Teste 2

Teste 3 : a variação realizada aqui é a mais próxima à realidade do processo e, também a que demonstrou, de modo mais acentuado, o efeito “SnowBall”. A figura 5.9 apresenta os resultados obtidos. Neste caso, verificou-se aumentos muito superiores a variação de carga da unidade numa serie de correntes, em torno de 100 %. Mas, novamente, o pior caso foi a corrente c16, com variação na ordem de 400%.

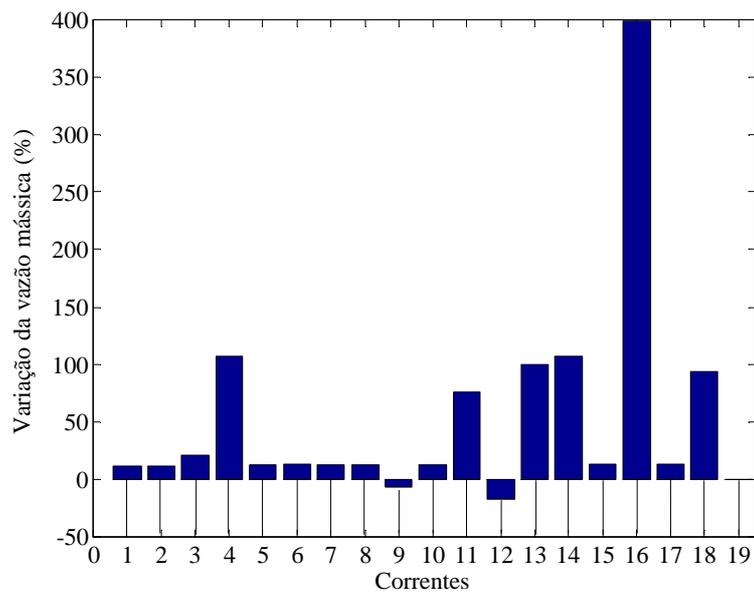


Figura 5.9: Variação da vazão mássica das correntes do sistema de reciclo para o Teste 3

Através desses resultados fica comprovada a tendência da unidade em apresentar o efeito “SnowBall”. Posteriormente, um estudo similar deve ser feito considerando as restrições da operação, tais como, as vinculadas com o sistema de compressão, que não foram levadas em conta nesta etapa. Desta forma, será possível avaliar de forma mais acurada a ordem de grandeza deste fenômeno. Com base nos resultados acima pode-se dizer que a unidade pode apresentar o efeito “Snowball”, quando as malhas de controle de nível das extratoras estiverem fechadas e, provavelmente, o equipamento que apresentaria os maiores problemas na operação, seria o tambor intermediário do compressor.

A definição da estratégia de controle para a unidade deve ser feita de forma a evitar o aparecimento desse fenômeno. Uma alteração simples no processo, que possibilitaria o fechamento das malhas de controle de nível das colunas extratoras, é atrelar a variação na corrente de alimentação da 2º CDE as variações na corrente de fundo da 1º CDE. Desta forma, quando a carga da unidade aumenta, o sistema de reciclo não seria sobrecarregado. Este tipo de estratégia de controle é focada no próximo capítulo.

Capítulo 6

Proposição de Estratégias de Controle

6.1 Metodologia de Seleção

A seleção das estratégias de controle deve ser feita de modo sistemático a fim de obter-se a forma mais simples e eficaz de atingir os objetivos operacionais. Os principais pontos que devem ser seguidos são: (1) determinação dos graus de liberdade dos sistemas e (2) objetivos de controle, (3) análises de sensibilidade do processo, (4) conhecimento do comportamento dinâmico e caracterização das principais dinâmicas, (5) escolha do desempenho nominal desejado, (6) cálculo dos índices de seleção de estruturas (RGA, RPN, Condicionamento Mínimo) e (7) implementação da estrutura. Esta metodologia pode ser vista de forma mais aprofundada em TRIERWEILER (1997).

A classificação das variáveis e determinação dos graus de liberdade é mostrada na seção 6.2 Os passos (3) até (4) foram realizados no decorrer dos capítulos 3, 4 e 5. Eles têm a função de reduzir o número de possíveis estruturas, a fim de realizar o cálculo dos índices de seleção e implementações no simulador dinâmico somente das estruturas que mostram potencial para controlar o processo.

Dependendo do caso, alguns passos do procedimento de seleção de estrutura podem ser desconsiderados, da mesma forma que não há uma ordem rígida para a seqüência dos passos TRIERWEILER (1997). Os passos seguidos neste estudo podem ser vistos na figura 6.1. Optou-se por fazer uma junção entre a metodologia descrita em TRIERWEILER (1997) e MAHENEY e FRUHAUF. Este último mostra como projetar o controle de colunas de destilação utilizando os aspectos estacionários e dinâmicos do modelo simulado.

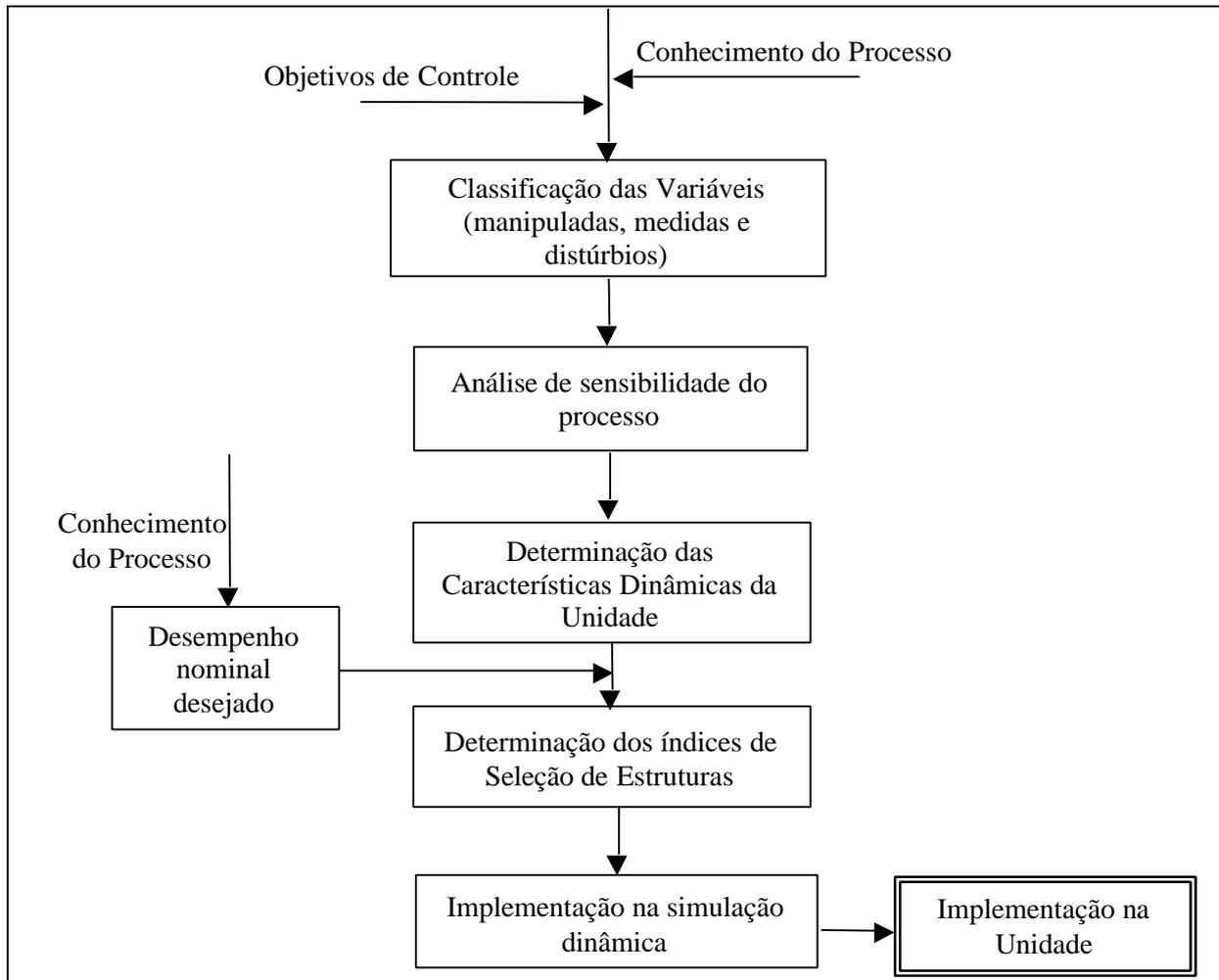


Figura 6.1: Metodologia utilizada na seleção de estratégias de controle

O procedimento de seleção que foi realizado pode ser resumido da seguinte forma: através do conhecimento do processo e dos objetivos de controle é possível selecionar as variáveis manipuladas, os distúrbios e as variáveis medidas/controladas para a UEB. Com estes conjuntos definidos, realizam-se as análises de sensibilidade do modelo estacionário, que fornecem informações sobre a interação entre as entradas e saídas do sistema. Os resultados das análises estacionárias possibilitam o esboço das primeiras estruturas de controle com capacidade para atingir os objetivos propostos.

A próxima etapa é a caracterização dinâmica, que é de extrema importância, pois as informações estacionárias permitem excluir as estruturas impraticáveis do ponto de vista estático, mas não informam nada sobre a operabilidade dinâmica. Aspectos importantes no desempenho de uma estrutura, tais como: resposta do sistema em frequências intermediárias (frequência em que o controlador irá atuar) e, efeitos dos “hold ups” na atenuação dos distúrbios são contemplados nesta parte da seleção.

Além disso, características dinâmicas, tais como a localização de pólos e zeros somados às informações sobre o processo (saturação das variáveis e ruídos) devem ser levadas em consideração na determinação do desempenho desejado para o sistema.

Muitas estruturas que eram viáveis estaticamente são desconsideradas após esses passos, restando um pequeno número que devem ser classificadas utilizando índices que determinam os melhores emparelhamentos entre entradas e saídas (RGA), a direcionalidade (Condicionamento Mínimo) e a controlabilidade do sistema de forma robusta (RPN). As estruturas mais promissoras são as que têm de forma global os melhores valores para esses índices.

Seguindo estes passos, o número de estruturas implementadas para os testes no simulador ou no próprio processo é pequeno. Desta forma, aumenta-se muito a chance de optar pela melhor entre as possíveis estruturas, não havendo desperdício de energia no estudo e proposição de sistemas que não produziriam bons resultados.

Os resultados obtidos através de modelos dinâmicos desenvolvidos em simuladores comerciais, não passando por uma validação com dados de planta, devem ser encarados de forma mais qualitativa do que quantitativa. Ou seja, é possível concluir a ordem das estruturas conforme o seu desempenho alcançável, determinando qual configuração é mais viável entre as possibilidades existentes. Essas conclusões irão, na grande maioria dos casos, se verificar na planta real. O que provavelmente não se verificará é o ajuste dos controladores, esses devem diferir já que a dinâmica do modelo e da planta real pode apresentar diferenças. Porém, as diferenças na dinâmica não são significativas a ponto de invalidar a análise e classificação das estruturas, uma vez que este estudo é realizado usando uma base comum de comparação, o modelo do processo.

6.2 Classificação das Variáveis

As possíveis estratégias de controle para a UEB são determinadas a partir do conhecimento dos graus de liberdade disponíveis na unidade, bem como, das variáveis que podem ser medidas para atingir os objetivos operacionais. Como este estudo trata de um processo real em operação, consideram-se graus de liberdade aqueles que podem ser modificados durante a operação normal do sistema, sendo fortemente relacionados com as variáveis manipuladas do processo, TRIERWEILER (1997). As variáveis controladas são as composições das correntes envolvidas na recuperação e pureza do produto, conjuntos de temperaturas que estimem mudanças de composição nas colunas e as variáveis relacionadas com o tempo de campanha (polimerização → temperatura dos equipamentos). A classificação das variáveis em manipuladas, medidas/controladas está nas tabelas 6.1 e 6.2 respectivamente.

Tabela 6.1: Variáveis Manipuladas

Região	Variáveis Manipuladas	
	Código	Descrição
1° SDE	Solv1	Vazão de Solvente para a 1° CDE
	SC1	Razão entre a vazão de solvente e carga da 1° CDE
	RR1	Razão de Refluxo da 1°CDE
	VS1	Vazão de selagem - saída do sistema de compressão para a 1°CDE
	Tf1	Set point da temperatura de fundo da 1° CDE
	Tf2	Set point da temperatura de fundo da 1° S
	VR2	Vazão de Refluxo da 1° S
2° SDE	Solv3	Vazão de Solvente para a 2° CDE
	SC3	Razão entre a vazão de solvente e carga da 2° CDE
	RR3	Razão de Refluxo da 2°CDE
	Tf3	Set point da temperatura de fundo da 2° CDE
	Ta4	Set point da temperatura de alimentação da RB
	Tf4	Set point da temperatura de fundo da RB
	Tf5	Temperatura de Fundo da 2° S
	VR5	Vazão de Refluxo da 2° S

As temperaturas que aparecem como sendo variáveis manipuladas, trata-se do set point das malhas. Por exemplo, Tf1 é o “set point” da temperatura de fundo da 1° CDE, tendo como variável manipulada a carga térmica do refeedor desta coluna.

Tabela 6.2: Variáveis Medidas / Controladas

Região	Variáveis Medidas / Controladas	
	Código	Descrição
1º SDE	BD_T1	Fração mássica de BD na corrente de topo da 1ºCDE
	T2B_F1	Fração mássica de T2B no fundo da 1ºCDE
	C2B_F1	Fração mássica de C2B no fundo da 1ºCDE
	T1_1	Temperatura do prato 1 da 1º CDE
	T1_2	Temperatura do prato 18 da 1º CDE
	T1_3	Temperatura do prato 92 da 1º CDE
	T1_4	Temperatura do prato 172 da 1º CDE
	T1_5	Temperatura do prato 180 da 1º CDE
	T1_6	Temperatura do prato 181 da 1º CDE
	T2_1	Temperatura do prato 8 da 1º S
	T2_2	Temperatura do prato 12 da 1º S
	T2_3	Temperatura do fundo da 1º S
	2º SDE	VAC_T3
EAC_T3		Fração mássica de EAC na corrente de topo da 2ºCDE
T2B_T3		Fração mássica de T2B na corrente de topo da 2ºCDE
C2B_T3		Fração mássica de C2B na corrente de topo da 2ºCDE
VAC_T5		Fração mássica de VAC no topo da 2º S
BD_T5		Fração mássica de BD no topo da 2º S
T3_1		Temperatura do prato 1 da 2º CDE
T3_2		Temperatura do prato 13 da 2º CDE
T3_3		Temperatura do prato 61 da 2º CDE
T3_4		Temperatura do prato 62 da 2º CDE
T3_5		Temperatura do prato 63 da 2º CDE
T4_1		Temperatura do topo da coluna RB
T4_2		Temperatura do prato 11 da coluna RB
T5_1		Temperatura de topo da coluna 2º S
T5_2		Temperatura do prato 12 da coluna 2º S
T5_3	Temperatura de fundo da coluna 2º S	

As variáveis medidas que aparecem na tabela 6.2 estão relacionadas diretamente com as estratégias de controle propostas a seguir, elas foram escolhidas com base nos medidores que já existem na unidade. As outras variáveis manipuladas, medidas e controladas, que pertencem a outros níveis de controle (por exemplo: controle de nível e pressão), não são descritas aqui, pois este não é o escopo do trabalho.

Os principais distúrbios desta unidade estão vinculados com a temperatura, vazão e composição da corrente de carga C4 e das correntes de solvente [Solv1 e Solv2]. A composição da corrente de carga C4 não caracteriza-se exatamente como um distúrbio, pois é parcialmente determinada por um analisador de carga. As espécies medidas neste analisador são basicamente as vinculadas com a 1º CDE: C2B, T2B, BD e NC5. Essas informações podem ser aproveitadas para a implementação de uma estratégia de controle “feedforward” na 1º CDE.

Nas figuras 6.2 e 6.3 estão representadas respectivamente as variáveis manipuladas e as possíveis variáveis controladas para as seções de destilação extrativa.

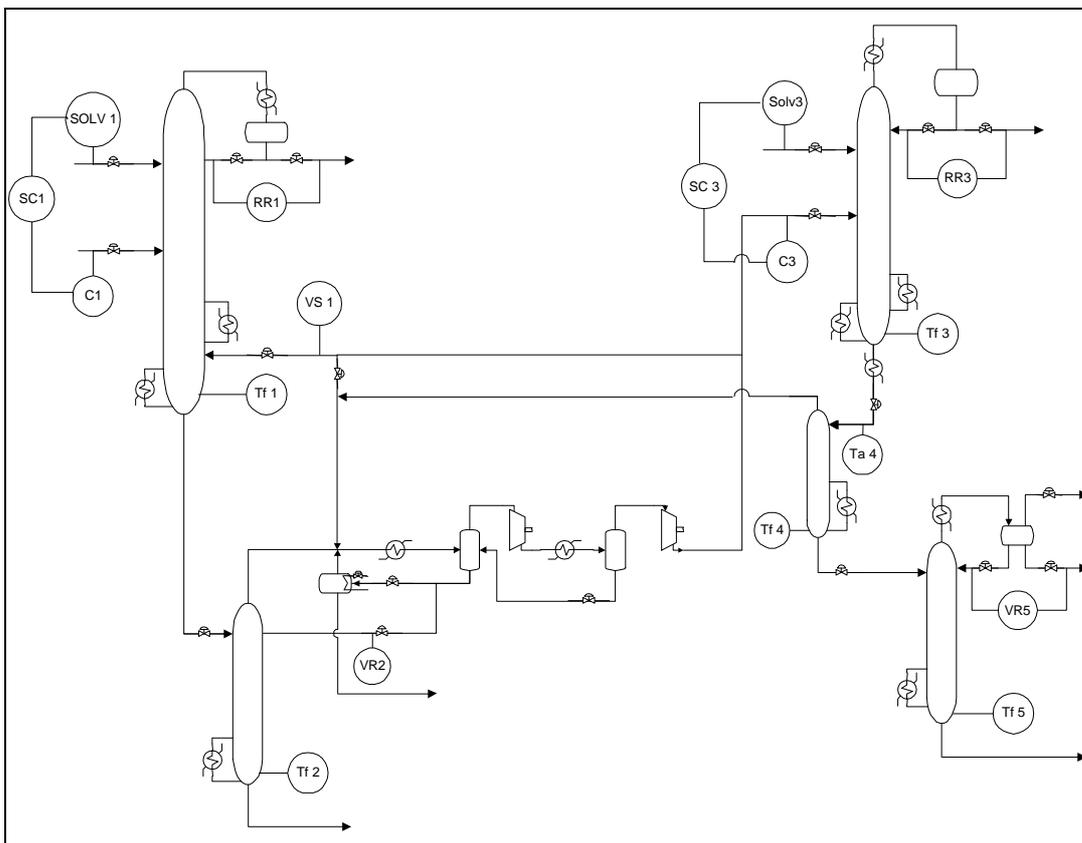


Figura 6.2: Variáveis Manipuladas da UEB

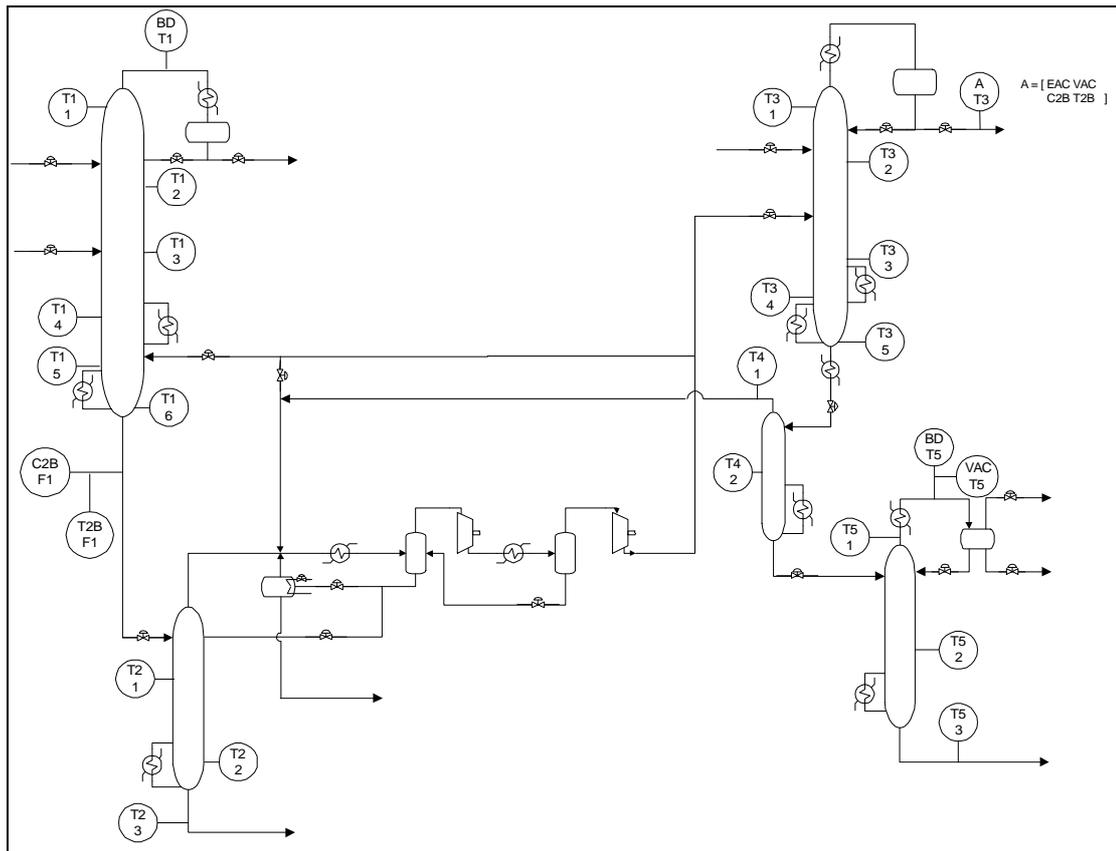


Figura 6.3: Variáveis Medidas/Controladas da UEB

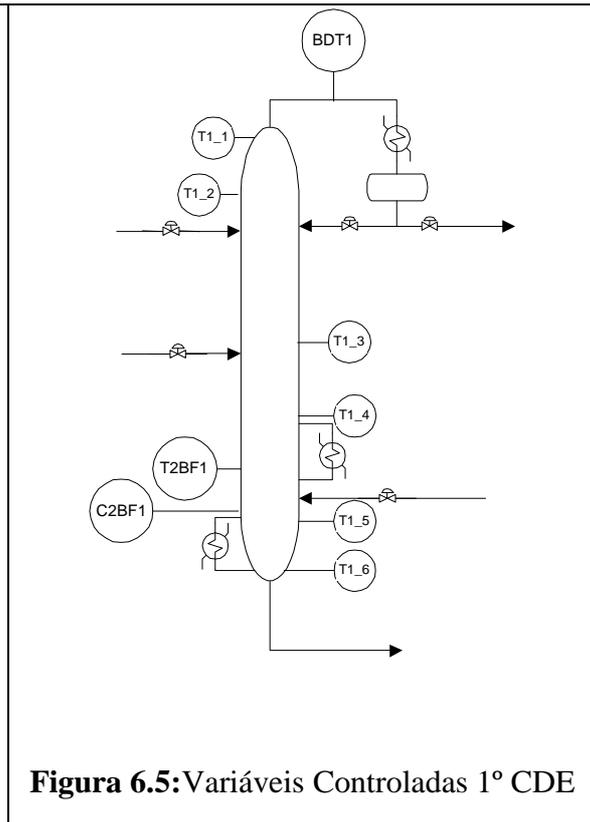
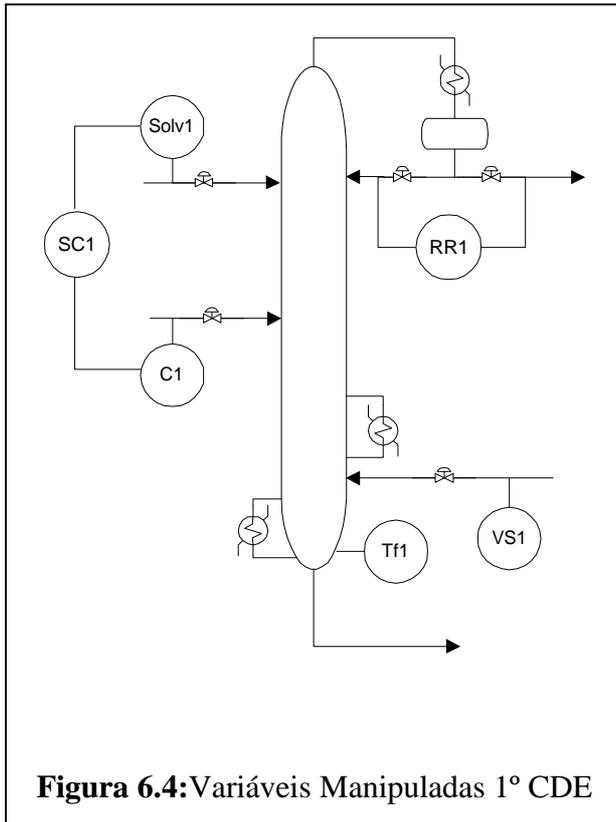
6.3 Propostas de Estruturas de Controle

Após o estudo sistemático do sistema restaram quatro possíveis configurações para a 1º SDE e cinco possíveis configurações para a 2º SDE. Essas opções devem ser combinadas entre si, gerando 20 propostas de estruturas de controle para as seções de destilação extrativa da UEB. A separação entre as seções (1º SDE e 2º SDE) pode ser feita, pois as variáveis medidas e manipuladas de cada região são combinadas entre si, estruturas nas quais um grau de liberdade da 1º SDE controla uma variável da 2º SDE não são viáveis.

As estratégias discutidas para a 1º SDE e 2º SDE desconsideram a operação das colunas regeneradoras de solvente. Estas podem vir a ser abordadas num estudo posterior, pois sua operação não afeta diretamente as extratoras, desde que o solvente que está recirculando esteja isento de HC.

Estruturas 1º CDE

As figuras 6.4 e 6.5 apresentam as variáveis manipuladas e controladas para a 1º SDE.



As quatro configurações de estruturas de controle viáveis aparecem nas figuras 6.6, 6.7, 6.8 e 6.9. É possível constatar que, em nenhuma das opções aparece a razão de refluxo (RR1). Como foi visto no Capítulo 4, onde foi descrita a análise de sensibilidade, os componentes que devem ser controlados nesta seção (BDT1, C2BF1 e T2BF1) não são influenciados pela razão de refluxo. A função dessa variável é evitar que o solvente saia pela corrente de topo da 1º CDE, estando seu valor vinculado com a vazão de solvente alimentado na coluna.

A diferença entre as estruturas ES1_1 - ES1_3 e Es1_2 - ES1_4 é apenas o componente controlado na malha de fundo, sendo as variáveis manipuladas idênticas nos dois conjuntos. A opção entre o componente mais indicado depende dos resultados dos índices e de fatores relacionados com a operação, dentre os quais:

- T2B deve ser mantido abaixo de um valor mínimo no fundo da 1º CDE (especificação);
- C2B tem liberdade para variar numa faixa, sendo que seu valor afeta diretamente a operação da SEB.

Três situações podem acontecer:

1. Controlando o T2B automaticamente mantendo a quantidade de C2B no fundo da 1º CDE, no mínimo valor possível;

2. Controlando o C2B é possível manter o T2B abaixo do valor especificado, minimizando de forma mais eficiente o C2B;
3. Deve-se monitorar os dois componentes, atuando sobre o C2B quando este puder ser reduzido e sobre o T2B, quando ele estiver acima da especificação.

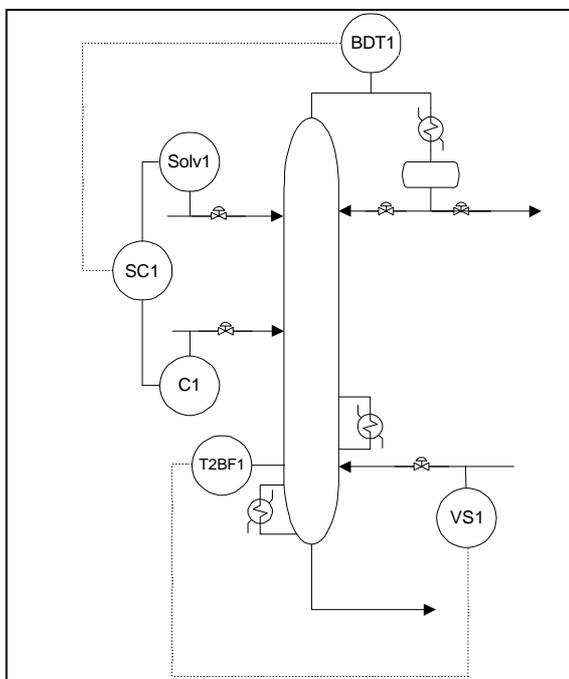


Figura 6.6: Estrutura ES1_1

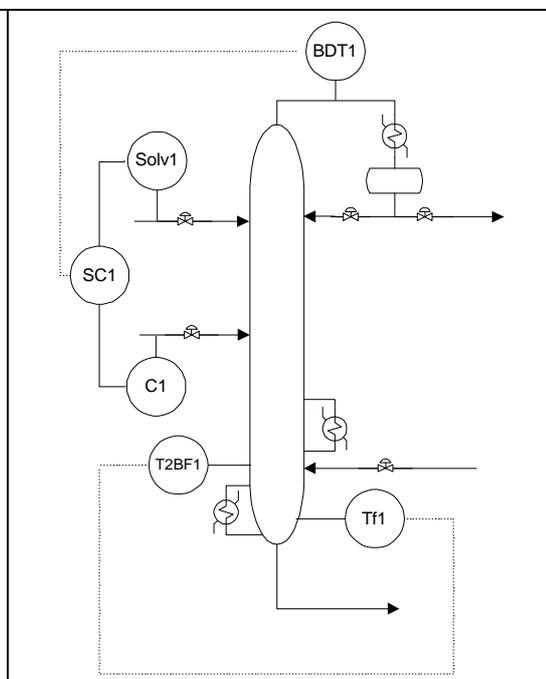


Figura 6.7: Estrutura ES1_2

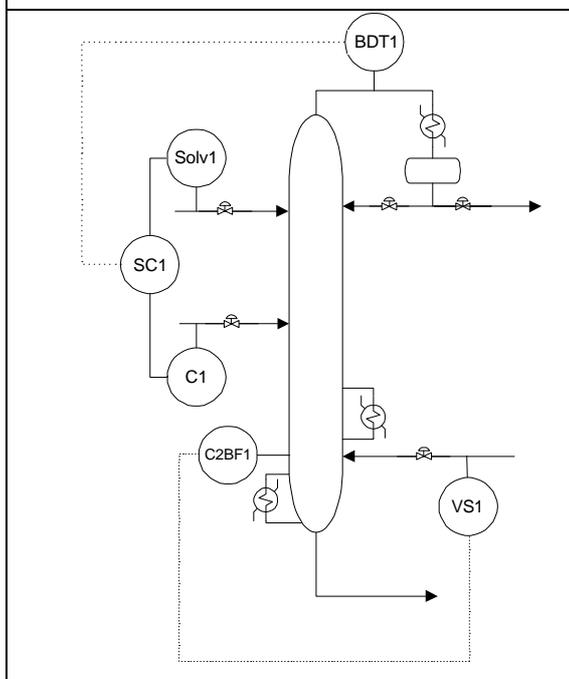


Figura 6.8: Estrutura ES1_3

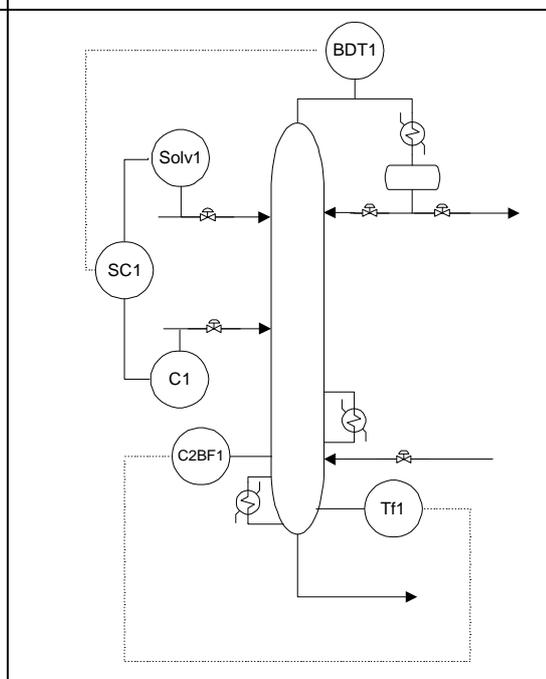
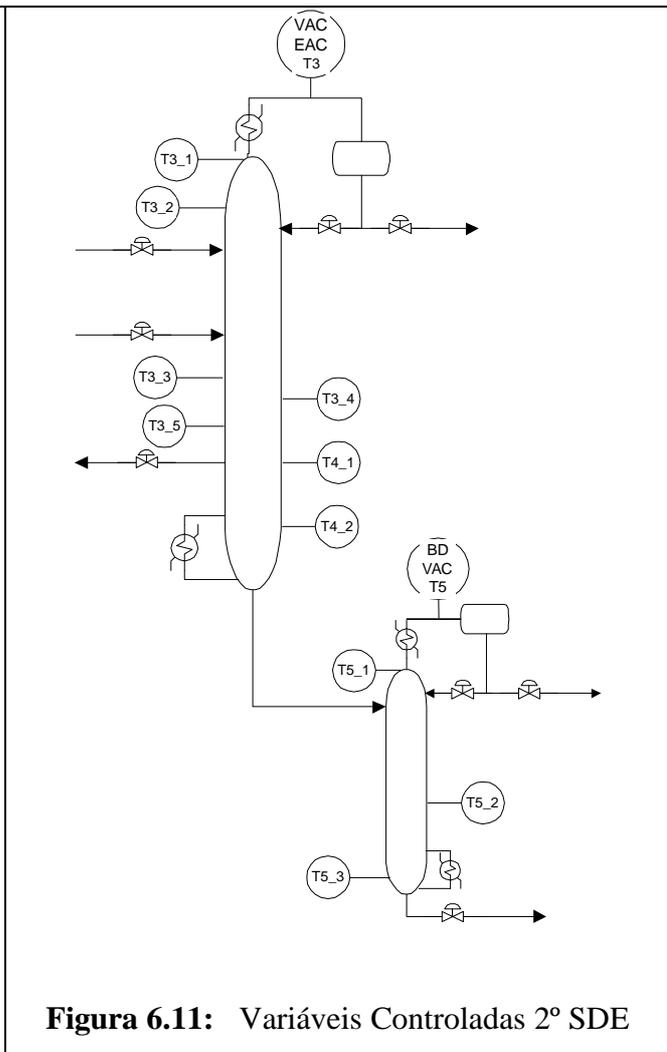
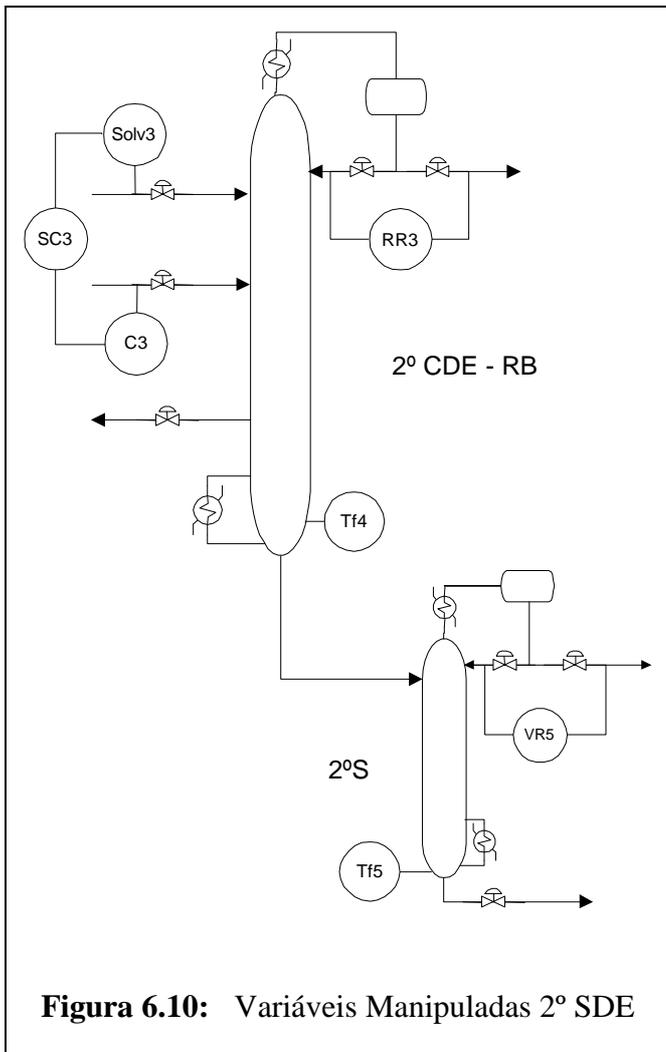


Figura 6.9: Estrutura ES1_4

Estruturas 2º SDE

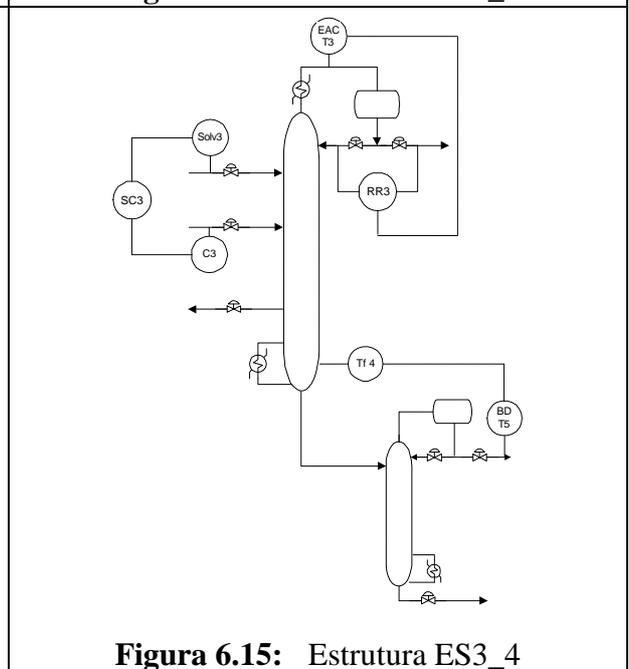
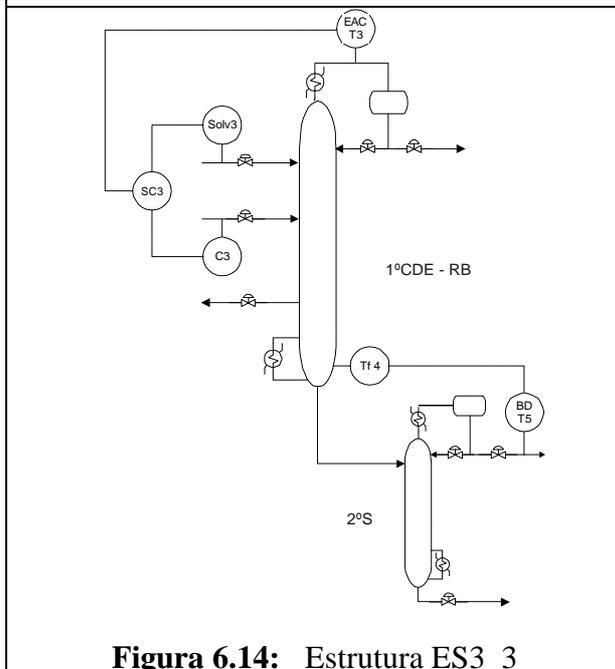
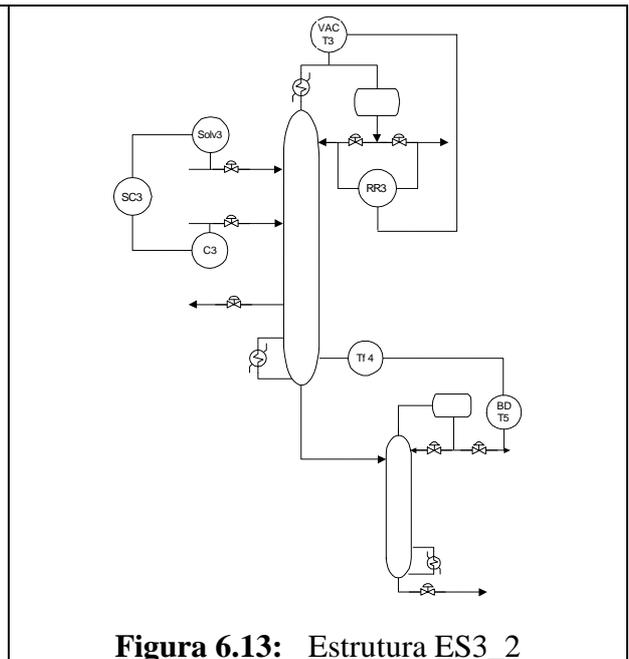
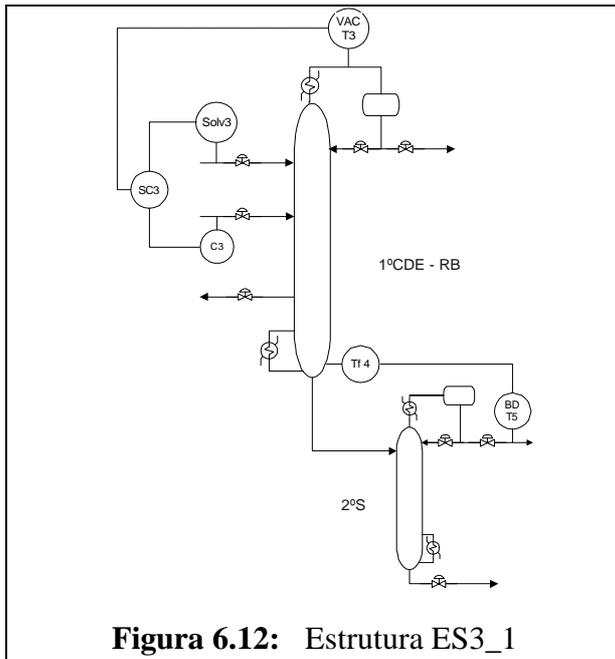
Conforme os resultados da análise estacionária (Capítulo 4), concluiu-se que a 2º CDE e a coluna RB operam como uma única coluna com uma retirada lateral, as figuras 6.10 e 6.11 mostram como esta seção pode ser visualizada. Nelas também podem ser vistas as variáveis manipuladas e controladas envolvidas nas quatro configurações de estruturas de controle.

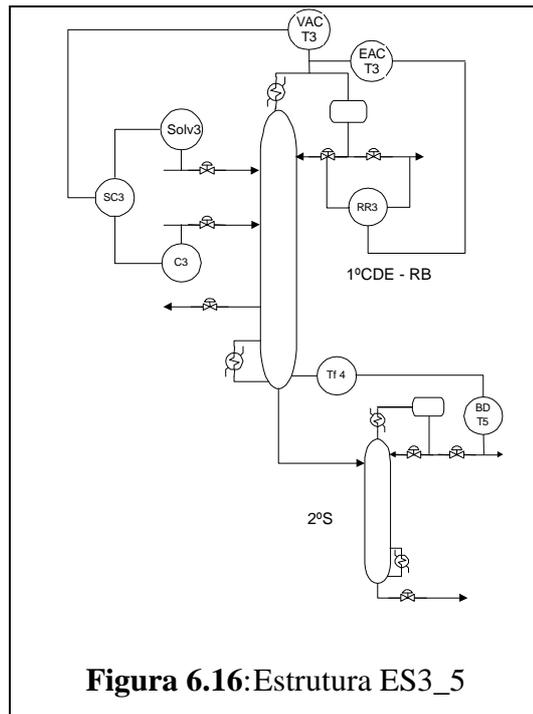


As cinco configurações para as estruturas da 2º SDE estão nas figuras, 6.12, 6.13, 6.14, 6.15 e 6.16. Ao contrário do que ocorre na 1º CDE, aqui a razão de refluxo (RR3) é uma variável importante no controle da composição (VAC e EAC). Isto acontece pois nesta coluna a vazão de solvente é cerca de 7 vezes menor que na 1º CDE. Assim, a razão de refluxo, além de garantir que o solvente não seja perdido pelo topo tem força para afetar a composição ao longo da coluna. O componente mais afetado pela RR3 é o EAC, já que ele é mais volátil que o VAC na presença de solvente (vide tabela 2.3 – Capítulo 2). Analogamente a 1º SDE, as estruturas ES3_1 - ES3_3 e ES3_2 – ES3_4 são diferenciadas somente pela variável controlada na malha de topo, nas primeiras a variável controlada é a fração mássica de VAC e nas duas últimas o EAC. A situação é idêntica ao caso anterior, levando em consideração que:

- VAC deve ser mantido abaixo do valor especificado no topo da 2^o CDE; e
- EAC pode variar numa faixa de concentração no topo da 2^o CDE, já que pode ser separado na SEB.

A estrutura Es3_5 é uma junção entre ES3_1 e ES3_4 que, tenta mostrar o que aconteceria se a estratégia de controle utilizada tentasse manter sempre a composição de ambos, VAC e EAC, nos valores ótimos.





Para descrever a combinação entre as estruturas será adotada a seguinte convenção: estnm. Onde n é o número da estrutura para a 1º CDE e m para a estrutura da 2º SDE, por exemplo: est11: ES1_1 e ES3_1, est23: ES1_2 e ES3_3 e, assim por diante.

6.4 Determinação e discussão dos índices de controle

Para a determinação dos índices utiliza-se o modelo linear, gerado através do Jacobiano do modelo do ASPEN Dynamics v10.1. Os detalhes envolvidos na obtenção desse modelo estão descritos no capítulo 3.

Em função da elevada ordem do sistema é complicado trabalhar com os modelos no espaço de estado. Existem duas maneiras de contornar essa problema: reduções no número de estados ou trabalhar com o sistema no domínio da frequência. Optou-se pelo domínio da frequência por dois motivos:

1. nenhuma simplificação é feita sobre o sistema, não havendo o risco de algum estado importante na caracterização do comportamento do processo ser perdido; e
2. uma série de problemas numéricos ocorrem na utilização das funções de redução para sistemas mal condicionados de elevada ordem vinculados, principalmente com o cálculo dos valores singulares.

Desta forma, foram construídas funções no MATLAB para levar o modelo do espaço de estado para o domínio da frequência. Estas funções trabalham diretamente com as matrizes esparsas, reduzindo tanto o tempo computacional¹ quanto os erros numéricos.

O cálculo do RGA, Condicionamento Mínimo e RPN é feito rapidamente, utilizando a resposta no domínio da frequência, mesmo para sistemas de ordem elevadas como o da UEB. Seria interessante desenvolver também uma forma para a determinação dos zeros utilizando a resposta no domínio da frequência, a maneira de determiná-los é através de um problema de autovalores generalizado, o que é bastante demorado quando as matrizes têm características esparsas com elevada ordem.

6.4.1 RGA

Conceito

De acordo com SKOGESTAD e POSTLETHWAITE (1996), o RGA foi desenvolvido por *Bristol (1966)* com o objetivo de determinar a eficiência de uma estratégia de controle descentralizada. Este fornece uma medida da interação entre pares de saídas e entradas, informando qual é o emparelhamento mais adequado.

O RGA de uma matrix $M_{n \times n}$ complexa não-singular, conhecido como $RGA(M)$, é uma matrix complexa não-singular definida por:

$$RGA(M) = M \times \left(M^{-1} \right)^T \quad (6.1)$$

onde, M é a matriz de ganho estacionário do sistema e a operação \times significa multiplicação elemento por elemento.

Quando os elementos da diagonal da matriz do $RGA(\lambda_{ij})$ são próximos de 1, o ganho entre a variável de entrada e a de saída não são afetados pelo fechamento das malhas, caracterizando um sistema com pequena interação.

Bristol desenvolveu esta ferramenta pensando na análise estacionária ($RGA(0)$), porém podemos utilizá-la para selecionar um emparelhamento dependente da frequência ($RGA(j\omega)$). A análise na frequência é mais importante, pois necessitamos conhecer a interação entre as variáveis na região de atuação do controlador. O cálculo é idêntico ao descrito para o RGA estacionário, porém utilizamos matrizes de ganho (M) que são dependentes da frequência do sistema.

O RGA estacionário ($RGA(0)$) e dinâmico ($RGA(\omega)$) foram calculados para as vinte combinações de estruturas de controle possíveis. A discussão dos resultados é focado na

¹ Por exemplo: a resposta no domínio da frequência calculada para 50 pontos, através da função *frd* do Control Toolbox (MATLAB) para a 1º CDE demora 5 minutos, enquanto que a calculada utilizando o modelo esparsa demora 5s. Os dois cálculos foram feitos em um PC-Pentium-III 350 Mhz.

$RGA(\omega)$, pois o controlador atua em frequências intermediárias e não quando o sistema atingiu o estado estacionário. A avaliação dos resultados obtidos segue a seguinte ordem:

1. Interação entre as estruturas de controle das seções 1° SDE e 2° SDE
2. Estruturas com SC1 e Tf1
3. Estruturas com SC3 e RR3
4. Estruturas com T2BT1e C2BT1
5. Estruturas com VACT3 e EACT1

1. Interação entre as malhas de controle das seções

Para analisar a influência entre as malhas de controle utilizadas na 1° SDE (estruturas de controle ES1_) e na 2° SDE (estruturas ES3_) o valor dos RGAs foram calculados utilizando três modelos lineares distintos, que são:

Modelo Completo: modelo completo composto pela 1° SDE, sistema de compressão e 2° SDE. Esse modelo leva em consideração o efeito dos reciclos mássicos e suas influências nas malhas de controle.

Modelo 1° SDE: modelo composto apenas pela 1° CDE

Modelo 2°SDE: modelo composto pela 2° SDE, nele estão presentes as colunas 2° CDE, RB e 2° S

O *Modelo Completo* foi usado para gerar os vinte subsistemas formados, combinando as estruturas ES1 e ES3 (ex.: est11 = ES1_1 e ES3_1, est12 = ES1_1 e ES3_2). Com o *Modelo 1° SDE*, gerou-se os quatro subsistemas correspondentes as configurações de controle para a 1° CDE (figuras 6.6, 6.7, 6.8 e 6.9). Analogamente, com o *Modelo 2° SDE* foram obtidos os cinco subsistemas relativos as estruturas ES3 (figuras 6.12, 6.13, 6.14, 6.15 e 6.16). Os subsistemas gerados a partir dos modelos *Modelo 1° SDE* e *Modelo 2° SDE*, não levam em consideração os reciclos mássicos, pois a 1° CDE e a 2° SDE as seções estão modeladas de forma isolada.

Comparando os valores dos RGAs para as estruturas obtidas através dos subsistemas relativos aos *Modelos 1° SDE* e *2°SDE*, com os valores relativos as estruturas para o *Modelo Completo* é possível ter uma idéia da influência que a utilização de determinada estrutura numa seção tem sobre a outra.

Aqui são analisados dois casos que representam o comportamento geral dos resultados. A figura 6.17 mostra os resultados de $RGA(\omega)$ para: (a) est11 *Modelo Completo*, (b) EST1_1 - *Modelo 1° CDE* e (c) EST3_1 - *Modelo 2° CDE*. A figura 6.18 para: (a) est32 *Modelo Completo*, (b) EST1_3 - *Modelo 1° CDE* e (c) EST3_2- *Modelo 2° CDE*.

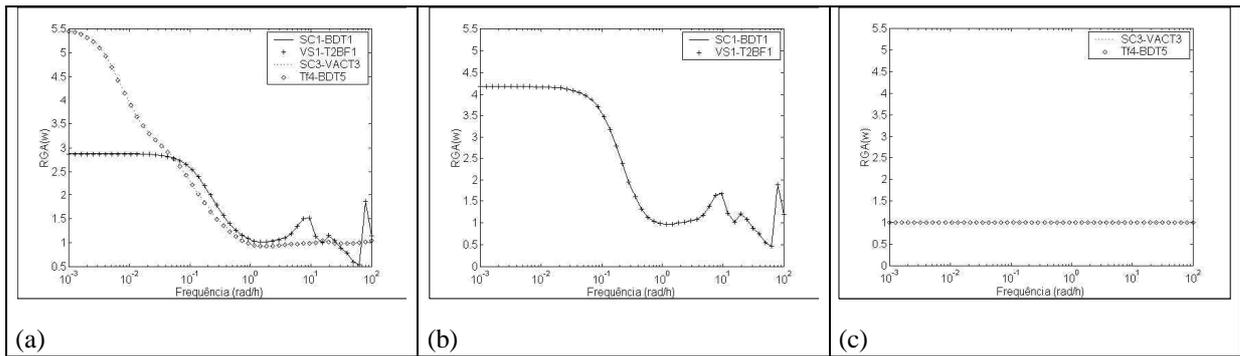


Figura 6.17: RGA (w): (a) Modelo 1 - Est11, (b) Modelo 2 - ES1_1 e (c) Modelo 3 - ES3_1

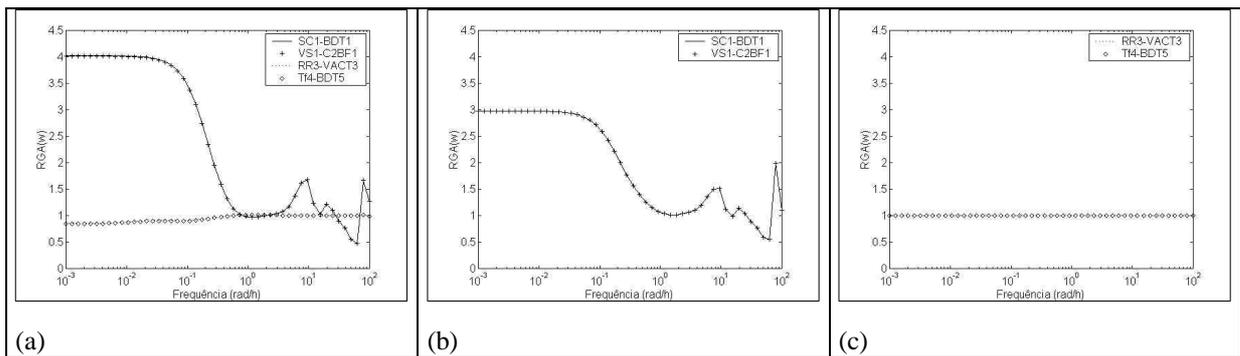


Figura 6.18: RGA (w): (a) Modelo 1 - Est32, (b) Modelo 2 - ES1_3 e (c) Modelo 3 - ES3_2

Analisado os resultados da figura 6.17 é possível ver que o $RGA(\omega)$ das malhas da 1^o SDE, calculado a partir do modelo linear para a 1^o SDE é similar ao do obtido para o modelo completo. As malhas de controle da 1^o SDE não são afetadas pela corrente de reciclo. Porém, o RGA das malhas no modelo linear para a 2^o SDE é bastante distinto do obtido para o modelo completo. Isto significa que existe uma interação acentuada nas malhas da 2^o SDE quando o sistema está interligado pelo reciclo. Na figura 6.17 (c) é possível notar que as malhas SC3-EACT3 e Tf4-BDT5 possuem RGA igual a 1 para toda a faixa de frequência, caracterizando-se como um sistema com baixo acoplamento, facilmente controlável. Quando o cálculo do RGA dessas malhas é feito para o modelo linear completo, interligado pelo reciclo, o acoplamento entre essas duas malhas cresce (figura 6.17 (a)), comprovando que, neste caso, os efeitos do reciclo serão sentidos pela estrutura de controle.

Os resultados da figura 6.18 são similares aos da figura 6.17 para as malhas da 1^o SDE. O RGA para o sistema isolado (*Modelo 1^o CDE*) e, para o modelo completo sofre poucas alterações. Mas, neste caso, as malhas de controle para a 2^o CDE têm um comportamento diferente. A interação entre as malhas RR3-EACT3 e Tf4-BDT5, da 2^o SDE, é baixa (próxima a 1) tanto para o modelo completo (figura 6.18 (a)) quanto para o modelo isolado (figura 6.18 (a)). Neste caso, o acoplamento das malhas da 2^o SDE não sofre os efeitos do reciclo, sendo uma estrutura com baixa interação apesar do reciclo.

Esse diferente comportamento é causado pela variável de entrada utilizada para controlar a malha de topo da 2^o CDE (EACT3). A variável SC3, como já descrito na análise de sensibilidade estacionária, afeta a composição de todos os componentes na 2^o SDE, entre eles, o BD. Ao reduzir a quantidade de VAC no topo da 2^o CDE, manipulando SC3, acaba-se arrastando uma quantidade de BD para o fundo desta coluna. Esta maior quantidade de BD

acumula-se na corrente de topo da coluna 2° S fazendo com que a Tf4 seja alterada, a fim de manter BDT5 no valor de “set point”. Quando esta variável é alterada a composição da corrente de reciclo (topo da coluna RB) é modificada. No caso do “set point” de BDT5 estar acima do valor especificado, Tf4 é aumentada para evitar que BD seja perdido no topo da 2° S. Assim, este componente será vaporizado e enviado novamente para a 2° CDE, através da corrente de reciclo. Mas, a quantidade de VAC no reciclo também aumenta, fazendo com que as malhas de controle entrem em conflito. Segundo RIGGS (1998), esse é um problema típico enfrentado quando um controle dual de composição é implementado numa coluna. Este comportamento concorda com a idéia descrita anteriormente, de imaginar a operação do conjunto 2° CDE e, como uma única coluna. No caso de ser utilizada, ao invés de SC3, RR3 a composição da corrente de reciclo fica praticamente inalterada. Pois, lembrando novamente, as análises de sensibilidade estacionária, RR3 possuem um efeito mais seletivo, afetando o VAC e o EAC e não alterando o BD. Para todas as combinações de estruturas com SC3 e RR3 os resultados foram similares.

Em relação a 1° SDE, a influência do reciclo é pequena, nota-se que nas estruturas com a variável controlada C2BT1 o RGA(ω) do sistema completo é maior (figura 6.18 (a) em relação ao sistema isolado (figura 6.18 (b)). Quando é utilizado o T2BT1 o RGA(ω) do sistema completo é menor (figura 6.17 (a)), sendo que para o sistema isolado o valor aumenta. Isso concorda com o esperado a partir do conhecimento do processo, pois a função do reciclo é adequar a composição do componente C2B no fundo da 1° CDE.

Essa avaliação pretende mensurar a influência do reciclo no processo, a função dos RGAs calculados para os Modelos 2 e 3 é servir como base para essa análise. Eles não têm validade na análise das estruturas, pois na realidade, o processo é acoplado pelo reciclo. Todas as análises feitas a seguir são focadas nas estruturas para o modelo completo.

2. Estruturas com SC1 e Tf1

A diferença nos valores dos RGAs entre as estruturas com a variável manipulada SC1 e a Tf1 é pequena, sendo mais acentuada a baixa frequência, quando o sistema está próximo do estado estacionário. Na região de atuação do controlador, aproximadamente entre as frequências de 0,3 a 5 rad.h⁻¹ (3 a 0,2 h), as estruturas apresentam respostas similares. Assim, é mais vantajoso utilizar a variável SC1 e deixar a temperatura ser fixada num valor que minimize os problemas de polimerização na unidade.

3. Estruturas com SC3 e RR3

A variável RR3 praticamente acaba com o acoplamento do sistema vinculado com o reciclo. Isto já foi explicado acima, no item 1, a razão de refluxo atua diretamente sobre o VAC e o EAC, não afetando os componentes importantes no reciclo, que são o BD e o C2B. O solvente, além de ajustar a concentração de VAC e EAC no topo da 2° CDE, provoca mudanças no BD e no C2B, que são refletidas na 1° CDE e no topo da 2° CDE, por causa da corrente de reciclo. Isso pode ser visto nas figuras 6.17 (a) e 6.18 (a), onde na primeira a interação das malhas das 2° CDE (SC3-VACT3, Tf4-BDT5) cresce a medida que a frequência é reduzida, chegando a 3 no estacionário. E na segunda o RGA é próximo a 1 para toda a faixa de frequência.

4. Estruturas com T2BT1e C2BT1

Como já comentado no item referente à interação entre as malhas de controle, a variável T2B reduz o acoplamento do sistema. Esse efeito é mais pronunciado próximo ao estacionário, ocorrendo o mesmo fenômeno com as variáveis de entrada SC1 e RR1. Na região de atuação do controlador os RGAs dos sistemas foram semelhantes, sendo indiferente a utilização de uma ou outra variável para o controle.

5. Estruturas com VACT3 e EACT1

O RGA(ω) das estruturas com as variáveis controladas VACT3 e EACT3 foram idênticos. Este índice não é suficiente para determinar qual é a mais indicada para implementação do controle.

6.4.2 Zeros Positivos (RHP-z)

Outro índice importante na classificação das estruturas de controle são os zeros positivos. Eles limitam o desempenho alcançável do sistema em malha fechada, constituindo-se um fator limitante da velocidade de atuação do controlador. Quando existem RHP-z, qualquer estratégia de controle empregada ficará com o desempenho limitado, conforme o valor desse zeros.

Segundo TRIERWEILER (1997), os zeros de um sistema podem surgir quando existem efeitos competitivos, de forma que, as saídas são nulas quando as entradas (ou estados) não são nulos. Para sistemas multivariáveis, o conceito de zeros usualmente adotado é o de zero de transmissão, i.e., z é um zero de transmissão do sistema quando o rank de $G(z)$ é menor que o da matriz das funções de transferência $G(s)$.

A presença de zeros em determinadas funções de transferência do sistema multivariável não implica na existência de zeros de transmissão. E vice e versa, a matriz $G(s)$ pode ter um zero de transmissão mesmo que seus canais não tenham zeros. Utilizando uma estratégia de controle multivariável, os zeros de determinados canais não são problemáticos, desde que o sistema não tenha restrições. Se alguma variável de entrada atingir seu limite, os zeros desses canais podem instabilizar a malha por si só. Neste caso, é interessante pensar em uma estratégia de controle, na qual é possível escolher o pareamento de entradas e saídas em canais que não tenham zeros, evitando as limitações que eles poderiam trazer ao desempenho do sistema em malha fechada e possíveis problemas de instabilidade vinculados com as restrições de entrada. Para fazer isso é necessário conhecer também a direção de entrada e saída dos zeros, conceito vinculado somente com sistemas multivariáveis.

A distância entre o zero e o eixo imaginário, em relação a escala de tempo do sistema, é que determina a ordem da limitação do sistema em malha fechada. Em linhas gerais, pode-se pensar que quanto menor o valor do zero maior será a limitação. Quer dizer, maior será o tempo que o sistema em malha fechada levará para atenuar distúrbios. A descrição mais

aprofundada das limitações que os zeros positivos causam nos sistemas pode ser encontrada em TRIERWEILER (1997).

Os zeros de transmissão para as estruturas propostas estão na tabela 6.3. A direção de entrada e saída desses zeros também foi determinada. Felizmente, nenhum deles é problemático, pois possuem valores elevados em relação a ordem de tempo do sistema. É interessante deixar claro que o cálculo desses zeros foi feito utilizando um modelo, no qual, o tempo de amostragem dos controladores não estava simulado. A limitação da velocidade que esses zeros trazem ao controlador pode ser determinada de maneira bastante simples, utilizando os conceitos da resposta no domínio da frequência. Invertendo o valor do zero, obtemos diretamente o tempo até o qual o sistema está sentindo os efeitos do zero. Por exemplo, para $z = 741.5$ rad/h, o sistema sente os efeitos desse zero até um tempo igual a 0,008 h (0,5 min.)

Nesta análise será feita uma relação entre os valores de zeros positivos para as estruturas e as direções de entrada e saída. O objetivo é mostrar como o conhecimento do processo ajuda na avaliação dos resultados, permitindo determinar se os valores calculados são pertinentes com o processo.

Tabela 6.3: RHP–z de transmissão para as estruturas propostas

	Z1	Z2	Z3	Z4	Z5	Z6
est11		1433	1000 + 2330i 1000 - 2330i	248.1+ 144.6i 248.1- 144.6i	741.5	
est12		1433	1000 + 2330i 1000 - 2330i		741.5	
est13		1433	1000 + 2330i 1000 - 2330i		741.5	49.7 + 104i 49.7 - 104i
est14	84253	1433	1000 + 2330i 1000 - 2330i		741.5	
est21			1000 + 2330i 1000 - 2330i	248.7 + 144.7i 248.7 - 1.44.7i	753.4	
est22			1000 + 2330i 1000 - 2330i		753.4	
est23			1000 + 2330i 1000 - 2330i		753.4	49.7 + 104i 49.7 - 104i
est24	84253		1000 + 2330i 1000 - 2330i		753.4	
est31		1142	1000 + 2330i 1000 - 2330i	248.1+ 144.6i 248.1- 144.6i	731.4	
est32		1142	1000 + 2330i 1000 - 2330i		731.4	
est33		1142	1000 + 2330i 1000 - 2330i		731.4	49.7 + 104i 49.7 - 104i
est34	84253	1142	1000 + 2330i 1000 - 2330i		731.4	
est41			1000 + 2330i 1000 - 2330i	248.7 + 144.7i 248.7 - 1.44.7i	753.4	
est42			1000 + 2330i 1000 - 2330i		753.4	
est43			1000 + 2330i 1000 - 2330i		753.4	49.7 + 104i 49.7 - 104i
est44	84253		1000 + 2330i 1000 - 2330i		753.4	

Com base somente na tabela 6.3, é clara a relação que alguns zeros têm com as variáveis de entrada e saída, sendo possível chegar as seguintes conclusões:

- Z1 e Z6 só aparecem nas estruturas nas quais a variável de saída EAC está presente, estando relacionado diretamente com ela. Conforme a variável de entrada (SC3 ou RR3), ele apresenta valores diferentes, Z1 ou Z6;
- Z4 está vinculado com o canal [SC3, VAC], só nas estruturas com esse canal ele aparece;
- Z2 está vinculado com a entrada VS1, nas estruturas em que é utilizado Tf1, ao invés de VS1 este zero desaparece. Apenas com base na tabela 6.3 é impossível determinar com qual saída ele está relacionado [C2BF1, T2BF1 ou BDT1], para ambas ele aparece.
- Z3 e Z5 estão presentes em todas as estruturas, podendo estar relacionados com os dois canais que são imutáveis em todas elas: [SC1 - BDT1 ou Tf4 - BDT5].

As direções de entrada (u_z) e saída (y_z) foram calculadas para o zero mais próximo da origem, que é Z5, e para Z2 e Z1. É necessário conhecer a direção de saída de Z5, pois ela tem que ser informada na determinação do RPN, já que é um fator limitante do desempenho do sistema. Maiores detalhes sobre o RPN serão apresentados a seguir. As outras direções foram determinadas para fazer um paralelo com as conclusões qualitativas descritas anteriormente. A tabela 6.4 mostra as direções de entrada e saída desses zeros. Nesta tabela não estão listadas as direções para todas as estruturas, optou-se por colocar resultados que representam o comportamento geral.

Tabela 6.4: Direção de entrada e saída para Z5, Z2 e Z1

	Estruturas	Entradas	u_z	Saídas	y_z
Z5	est11	SC1	- 0,795	BDT1	0,999
		SV1	0,606	T2BF1	- 0,002
		SC3	- 0,021	VACT3	0
		Tf5	- 0,002	BDT5	0
	est21	SC1	- 0,999	BDT1	-1
		Tf1	0,022	T2BF1	0
		SC3	0	VACT3	0
		Tf5	0	BDT5	0
Z2	est11	SC1	0,081	BDT1	0,999
		SV1	- 0,994	T2BF1	0,034
		SC3	0,067	VACT3	0
		Tf5	0	BDT5	- 0,007
Z2	est13	SC1	- 0,081	BDT1	0,999
		SV1	- 0,993	T2BF1	0,034
		SC3	0,090	EACT3	0
		Tf5	0	BDT5	- 0,007
Z1	est14	SC1	0	BDT1	0
		SV1	0	T2BF1	- 0,007
		RR3	- 1	EACT3	0,984
		Tf5	0	BDT5	- 0,177

Em relação aos valores da tabela 6.4, pode-se chegar as seguintes conclusões, quanto aos canais nos quais os zeros estão acoplados:

- Z5: em todas as estruturas ele está acoplado a saída BDT1. Em relação as variáveis de entrada, ocorreram dois comportamentos distintos. As estruturas com SC1 e VS1 tem esse zero vinculado aos dois canais, quando Tf1 é usada o zero fica acoplado somente a SC1.
- Z2: está vinculada a entrada VS1 e a saída BDT1;
- Z1: está vinculada com a entrada RR3 e a saída EACT3;

As conclusões tiradas a partir das tabelas 6.3 e 6.4 são coincidentes, sendo que o cálculo das direções é essencial para verificar e completar as informações da tabela 6.3. A correlação entre esses resultados foi realizada apenas para mostrar a importância de conhecer o sistema que está sendo estudado, pois assim, as análises dos índices tornam-se mais rápidas e confiáveis.

6.4.3 Direcionalidade do sistema

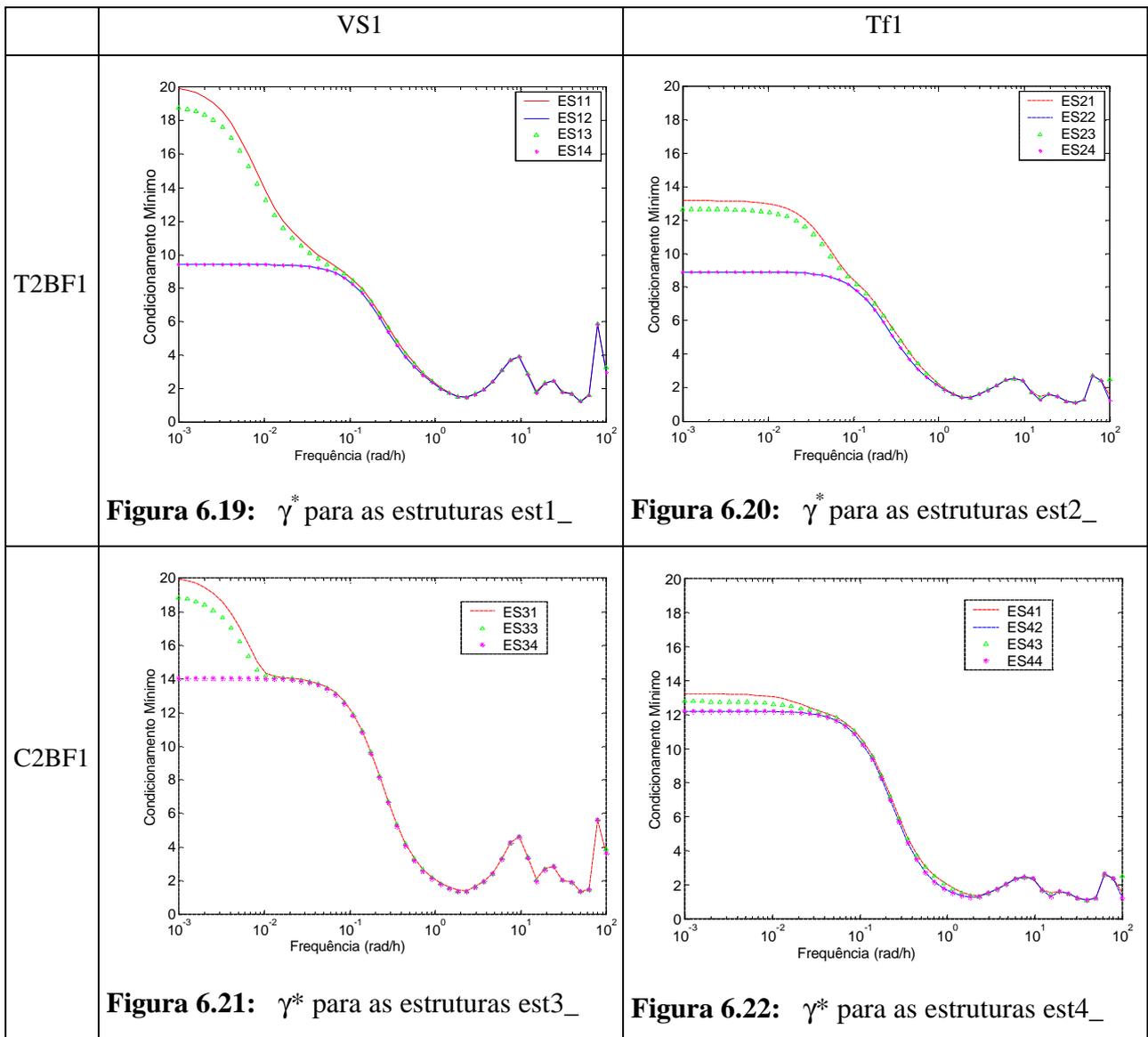
Segundo TRIERWEILER (1997), a direcionalidade de um sistema é usualmente calculada através da decomposição em valores singulares. Esta análise tem o objetivo de estender o conceito de ganho em sistemas com uma entrada e uma saída (SISO) para sistemas multivariáveis (MIMO). Desta forma, o ganho de sistemas multivariáveis varia entre o maior e o menor valor singular da matriz das funções de transferência do sistema, dependendo da direção na qual essas entradas são manipuladas. Um cuidado básico deve ser tomado na análise do condicionamento dos sistemas multivariáveis: eles podem ser escalonados de forma a terem uma infinidade de números de condicionamentos. Assim, quando trabalha-se com diferentes tipos de entradas (fluxo de energia, pressões, etc) e saídas (frações mássicas, temperaturas, fluxos mássicos, etc) deve-se atentar para a escolha das unidades. Isso é feito para escalonar o sistema de modo a obter o número de condicionamento mínimo (γ^*), que é uma medida característica do sistema.

O grau de direcionalidade de um sistema multivariável é a medida de quanto o ganho entre um conjunto de saídas e um conjunto de entradas pode variar, pois diferentes conjuntos e direções de entrada podem afetar as saídas de variadas formas. Alguns sistemas têm o mesmo ganho para uma série de direções de entrada, já em outros há uma variação considerável. Esses sistemas são chamados, respectivamente, de bem condicionados e mal condicionados. Essa medida, da mesma forma que o RGA, varia com a frequência na qual o sistema está sendo incitado. Desta forma, é interessante encontrar configurações que possuam baixos condicionamentos na região de atuação do controlador.

As figuras abaixo apresentam o condicionamento mínimo (γ^*) para as estruturas propostas. Essas figuras estão representadas da seguinte maneira: cada uma delas mostra o γ^*

para quatro diferentes estruturas, sendo que a estrutura para a 1º SDE é mantida constante variando as possíveis estruturas para a 2º CDE.

A fim de facilitar a análise dos resultados estão descritas as variáveis de entrada e saída constantes para cada conjunto de resultados. Por exemplo, todas as estruturas das figuras 6.19 e 6.21 têm como variável de saída VS1 e todas das figuras 6.20 e 6.22 a variável Tf1. Bem como as estruturas das figuras 6.19 e 6.20 têm como variável de saída T2BF1 e todas relativas as figuras 6.21 e 6.22 a variável C2BF1. As estruturas representadas por pontilhados e triângulos, em todas as figuras, possuem a variável de entrada SC3 e com linhas cheias e asteriscos a variável de entrada RR3.



A partir das figuras do condicionamento mínimo é possível concluir, em linhas gerais, que:

- Para frequências elevadas, aproximadamente até 10^{-1} rad.h⁻¹ (10 h), todas as estruturas apresentam condicionamento mínimo similar. Considerando que, até este momento, os controladores já agiram sobre o processo, todas elas seriam idênticas em desempenho;

Para frequências mais baixas as seguintes considerações podem ser feitas:

Em relação às entradas

- Estruturas com SC1 e RR3 apresentam, em frequências baixas, menor condicionamento mínimo que as com SC1 e SC3. Nos quatro gráficos esse comportamento é visto (est_1 e est_3 em relação a est_2 e est_4), onde _ deve ser entendido como todas as combinações possíveis;
- Se ao invés de SC1 for utilizada Tf1, tanto as estruturas com SC3 como as com RR3 apresentam um condicionamento mínimo menor (est2_ e est4_ em relação a est1_ e est3_);

Em relação às saídas

- Estruturas com T2B apresentam menor condicionamento que as com C2B, somente quando RR3 estiver presente nas variáveis de entradas. Com SC3 o resultado é similar para ambos os componentes. Para ver isso basta analisar as curvas das estruturas est13 e est14 da figura 6.19 (condicionamento em torno de 9) em relação as est33 e est34 da figura 6.21 (condicionamento em torno de 14). O mesmo acontece nas figuras 6.20 e 6.22 para as estruturas est23 e est24, em relação a est43 e est44;
- Estruturas com EAC apresentar condicionamento menor que as com VAC, nas estruturas com a variável de entrada SC3, quando é utilizada RR3 os resultados são idênticos. Esse comportamento pode ser visto nas quatro figuras do condicionamento para as curvas das est_1 e est_3 (SC3-VAC e SC3-EAC) em relação a est_2 e est_4 (RR3-VAC e RR3-EAC).

6.4.4 Número de Desempenho Robusto (RPN)

Conceito

Segundo TRIERWEILER (1997), o RPN é uma medida da dificuldade de um sistema em atingir o desempenho desejado de forma robusta. Quanto mais baixo for seu valor (próximo a 1) melhor serão os resultados da estrutura de controle.

A figura 6.23 mostra esquematicamente um processo com controle “feedback”, onde $G(s)$ é o modelo do processo, $C(s)$ o controlador e $T(s)$ a função de sensibilidade de saída para o desempenho desejado.

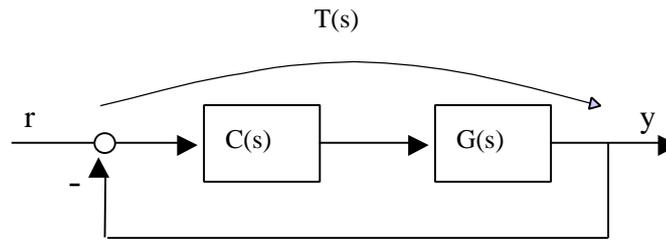


Figura 6.23: Representação esquemática de um processo com controle “feedback”

Tendo como base a figura 6.23, o RPN é definido como:

$$\Gamma(G, T, \omega) = \sqrt{\bar{\sigma}([I - T(j\omega)]\Gamma(j\omega)) \left[\gamma^*(G(j\omega)) + \frac{1}{\gamma^*(G(j\omega))} \right]} \quad (6.2)$$

$$\text{RPN} = \Gamma_{\text{sup}}(G, T, \omega) = \sup_{\omega \in \mathbb{R}} \{ \Gamma(G, T, \omega) \} \quad (6.3)$$

Onde,

G = modelo nominal do processo

T = função de sensibilidade complementar para o desempenho desejado na saída

ω = frequência

$\gamma^*(G(j\omega))$ é o número de condicionamento mínimo de $G(j\omega)$;

$\bar{\sigma}([I - T]T)$ é o máximo valor singular da função T .

O RPN consiste em dois fatores:

$\bar{\sigma}([I - T]T)$: este termo atua como uma função peso, enfatizando a região de maior importância para o sistema em malha fechada. O seu valor máximo será localizado sobre a frequência de corte, que é a região onde as incertezas do processo são determinantes para a estabilidade e performance robusta. A figura 6.24 mostra a forma geral da função peso, para frequências baixas e elevadas (regiões de menor importância para o sistema em malha fechada) ela é praticamente nula, atingindo seus valores máximos em torno da frequência de corte. Este valor varia com as características do processo e com o desempenho desejado para as saídas (funções T e S , que são respectivamente a função de sensibilidade e sensibilidade complementar).

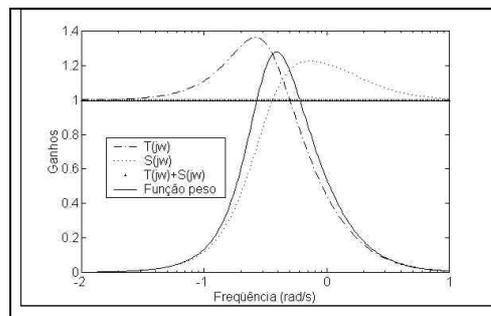


Figura 6.24: Forma da função peso do RPN

$\gamma^*(G)+1/\gamma^*(G)$: este termo é uma medida da direcionalidade do sistema. A definição e implicações da direcionalidade do sistema foi discutida na seção anterior.

Como é possível ver, para o cálculo do RPN é preciso conhecer, para todas as frequências, as matrizes de escalonamento que geram $\gamma^*(G(j\omega))$. O correto escalonamento do sistema é essencial para a análise da direcionalidade. Em geral isso não pode ser feito para todos os sistemas. Assim, é necessário ter uma forma de escolher um único conjunto de matrizes escalonadas que possam ser utilizadas em todas as frequências e, permitam a correta interpretação das propriedades do sistema em malha fechada. A escolha do conjunto de matrizes de escalonamento é feita com base na região da frequência de corte do sistema (o que equivale ao desempenho desejado). Quando calcula-se o RPN com apenas um conjunto de matrizes de escalonamento (para a frequência de corte), ele passa a ser chamado de RPN_{LR} . Este índice informa se a direcionalidade do sistema varia muito com a frequência.

Para realizar os cálculos é necessário conhecer o modelo do processo e informar a função T para as saídas do sistema. A escolha de T depende dos seguintes fatores:

- Frequência de trabalho desejada em malha fechada;
- Sensores de ruído;
- Restrições de entrada;
- RHP-zeros, tempos mortos e RHP-pólos² para sistemas com comportamento de fase não mínima.

As especificações típicas de T para um sistema SISO no domínio do tempo são: tempo de subida, “overshoot” máximo e o erro no estado estacionário.

Calculo do RPN para as estruturas propostas

Para o calculo do RPN foi utilizado modelo linear do processo (Capítulo 3) na forma de resposta no domínio da frequência. O desempenho desejado para as saídas de cada estrutura foi idêntica, com os parâmetros informados conforme descrito acima, possuindo os seguintes valores:

- Tempo de subida: 2h
- “Overshoot” máximo: 5 %
- Erro no estado estacionário: zero

Também foi informado, como restrição de entrada, o tempo morto relacionado com os analisadores de composição, da onde provém as saídas das estruturas. Tal como os zeros positivos, o tempo de análise limita o desempenho da estrutura de controle. Para todos os

² O sistema em questão (UEB) é estável, portanto não existem pólos positivos.

canais foi utilizado um valor médio de 1 h, para o atraso gerado pelos analisadores (os analisadores geram atrasos na informação das composições que variam de 0,8 h a 1,3 h).

De posse do modelo e do desempenho desejado, utilizou-se o “RPN Toolbox” para a determinação do RPN para as estruturas propostas. Maiores informações sobre esta ferramenta podem ser encontradas em FARINA (2001).

Resultados

Para todas as estruturas o valor do RPN e RPN_{LR} varia muito pouco. Isto já era esperado, pois para todas elas tanto os valores de condicionamento quanto os RGAs foram baixos nas frequências de intermediárias. A tabela 6.5 apresenta os valores de RPN obtidos. A partir desses valores pode-se concluir que todas as estruturas são similares no que se refere a controlabilidade.

Tabela 6.5: RPN para as estruturas propostas

	RPN		RPN		RPN		RPN
<i>est11</i>	2,14	<i>est21</i>	2,13	<i>est31</i>	2,1	<i>est41</i>	2,02
<i>est12</i>	2,1	<i>est22</i>	2,04	<i>est32</i>	1,97	<i>est42</i>	1,93
<i>est13</i>	2,14	<i>est23</i>	2,12	<i>est33</i>	2,1	<i>est43</i>	2,02
<i>est14</i>	2,1	<i>est24</i>	2,04	<i>est34</i>	2,08	<i>est44</i>	1,93

Os gráficos de RPN e RPN_{LR} para as estruturas *est1_* podem ser vistas na figura 6.25. A diferenciação das curvas é difícil pois elas estão sobrepostas, isso evidência a equivalência entre as estruturas. Também é possível ver nesta figura que o sistema não tem grandes variações de direcionalidade no ganho. A curva do RPN_{LR} , calculada com apenas um conjunto de matrizes de escalonamento, é muito parecida com a do RPN (um conjunto de matrizes de escalonamento para cada frequência).

Não há necessidade de ilustrar o RPN para os outros conjuntos de estrutura, pois as curvas são praticamente idênticas as das figura 6.25, para nenhuma configuração foi verificada alterações no comportamento.

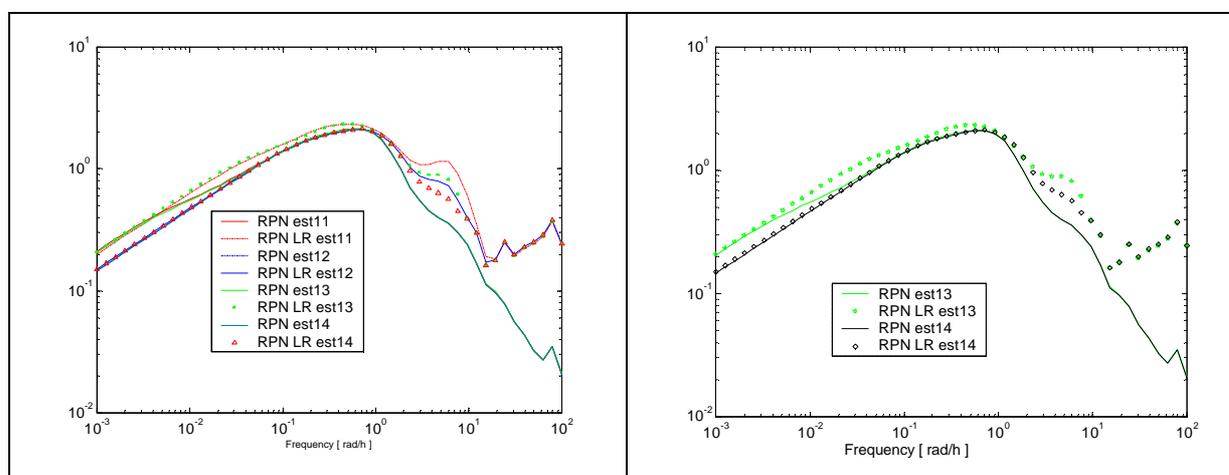


Figura 6.25: Gráfico do RPN para as estruturas *est1_*

6.5 Implementação das Estruturas no Simulador Dinâmico

Com base nas análises e conclusões dos índices acima optou-se por implementar duas estruturas no simulador dinâmico:

- est11 [SC1-BDT1, VS1-T2BF1, SC3-VACT3 e Tf4-BDT5]
- est12 [SC1-BDT1, VS1-T2BF1, RR3-VACT3 e Tf4-BDT5]

A escolha de T2BF1 e VACT3, ao invés das outras possibilidades (C2BT1 e EACT3), é devido ao fato desses componentes serem os que, necessariamente, precisam estar abaixo de um valor especificado. O estudo da possibilidade de controlar os outros componentes mantendo as correntes especificadas não vem ao caso no momento, já que o objetivo desta implementação é mostrar o potencial das estruturas propostas.

A implementação das quatro malhas foi feita de maneira descentralizada utilizando controladores PID. O método utilizado no ajuste dos parâmetros dos controladores foi o Método do Domínio da Frequência, maiores informações sobre este método podem ser vistas em TRIERWEILER (1997). Nas quatro malhas o atraso relativo às medidas de composição, causado pelos analisadores, foi modelado com o valor de 1 hora. Os valores do tempo de medida dos quatro analisadores que fazem parte da estrutura variam de 50 minutos a 1,2 hora no processo real.

Como já era esperado, devido a maior interação e direcionalidade, os resultados obtidos para a estrutura est11 foram bastante inferiores a est12. No momento em que a malha de controle de composição de BD no topo da 2° S foi implementada, aspectos importantes do comportamento da unidade, não visualizados na análise de sensibilidade estacionária (capítulo 4) vieram a tona. A estrutura est11 mostrou-se impraticável dependendo da forma como a unidade é operada, esta constatação será explicada no decorrer da próxima seção.

6.5.1 SC3 versus RR3 com a perda de BD controlada no topo da coluna 2° S

Na análise de sensibilidade estacionária, a influência da variação do solvente (Solv3) na composição VACT3, foi determinada utilizando um modelo no qual a composição de BD no topo da 2° S estava em malha aberta. Ao aumentar o solvente, a grandeza da redução de VACT3 era superior a obtida com aumentos na razão de refluxo (RR3). É importante lembrar que o solvente, da mesma forma que arrasta o VAC, vai arrastar o BD para o fundo da coluna. A razão de refluxo age de forma mais específica, afetando somente as composições de VAC e EAC.

Nos casos em que a composição de BD no topo da 2° S (BDT5) está em malha fechada, aumentos no solvente (SC3 para carga constante) acarretam um aumento da temperatura Tf4 para manter a variável BDT5 no valor especificado. O problema é que juntamente com o BD, um montante de VAC retorna para a coluna 2° CDE, tornando as variações deste componente na corrente de topo da 2° CDE muito pequenas ou, em certos

casos, contrariando o esperado, a resposta é inversa (fração de VAC aumenta ao invés de diminuir). Esses dois comportamentos distintos, pequena alteração na composição de VAC ou resposta inversa, estão relacionados com o modo de operação do trocador de calor localizado na alimentação da coluna RB. Este trocador tem a função de adequar a temperatura de alimentação da corrente de fundo da 2^o CDE para que ela seja alimentada na coluna RB, é necessário que essa temperatura seja reduzida a fim de evitar a vaporização elevada no prato de topo da coluna RB. Atualmente, este equipamento é operado mantendo a carga térmica fixa, sendo a temperatura de alimentação variável conforme o montante da corrente de fundo da 2^o CDE.

A figura 6.26 mostra o comportamento da variável VACT3 em relação a SC3 em dois casos: (a) temperatura de alimentação da coluna RB fixa e (b) carga térmica do trocador fixa na corrente de alimentação da coluna RB. Esses dados foram obtidos com o modelo estacionário (capítulo 3), mantendo a fração de BD no topo da coluna 2^o S num valor fixo.

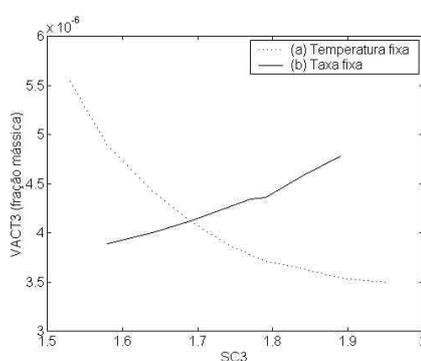


Figura 6.26: VACT3 para diferentes valores de SC3 nos casos (a) e (b)

Quando a carga térmica é mantida num valor fixo, o comportamento da variável VACT3 é completamente diferente do esperado. Injetando uma quantidade maior de solvente na coluna, ao invés da fração de VAC ser reduzida ela é acrescida, tornando a utilização desta variável inviável. Operando a unidade com a temperatura da corrente de alimentação da coluna RB (Ta4) fixa, o comportamento da variável VACT3 concorda com o esperado. Neste caso, o ganho da variável VACT3 em relação a SC3 será diretamente influenciada pelos valor de Ta4. Esta afirmação é de simples compreensão, basta imaginar o que ocorre no prato de alimentação da coluna RB (primeiro prato). A pressão da corrente de alimentação é superior a da coluna, ocorrendo uma vaporização dos componentes mais voláteis neste prato. O montante que vaporiza acaba saindo diretamente pelo topo da coluna, rumando para o sistema de compressão da unidade e sendo realimentado na 2^o CDE. O componente que preferencialmente será vaporizado é o BD, por ser o mais volátil desta corrente, porém uma certa quantidade dos outros hidrocarbonetos também vaporizará, entre eles, o EAC e VAC. Quanto mais baixa for a temperatura desta corrente menor será a vaporização, e menor a quantidade de VAC e EAC retornada para a 2^o CDE. O valor mínimo para a temperatura Ta4 dependerá dos limites de carga térmica disponíveis para esse trocador e da vazão da corrente de fundo da 2^o CDE. Quanto maior a corrente de fundo maior a quantidade de carga térmica necessária para manter a temperatura no valor desejado. Como cerca de 65 % dessa corrente é formada por solvente, alterações na variável Solv3 têm um forte efeito sobre a quantidade de

carga térmica necessária no trocador. A curva (a) da figura 6.26 foi construída para um valor de temperatura na qual a unidade usualmente é operada, este valor foi obtido a partir dos dados da planta real.

A figura 6.27 mostra o comportamento de VACT3 para variações em RR3 com a carga térmica do trocador fixa na corrente de alimentação da coluna RB. Esses dados foram obtidos utilizando o modelo estacionário (capítulo 3), mantendo a fração de BD no topo da 2° S num valor fixo, da mesma forma que os dados da figura 6.26. Com base na curva desta figura e nas curvas da figura 6.26 foram calculados os ganhos de VACT3 em relação a RR3 e SC3 com carga térmica fixa e temperatura fixa. O ganho para os três casos está na tabela 6.6. Neste cálculo o comportamento da variável VACT3 foi considerado linear.

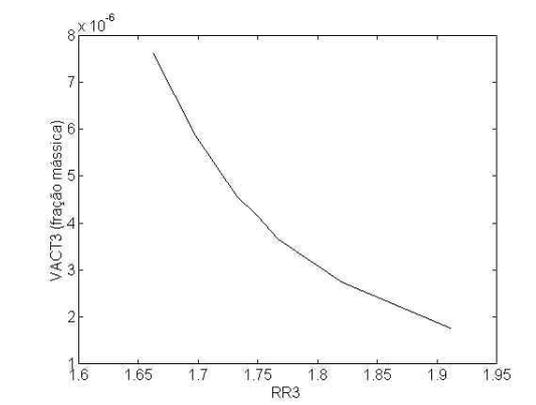


Figura 6.27: VACT3 para diferentes valores de RR3

Analisando os valores da tabela 6.6 é possível observar que para SC3 com temperatura fixa, em que o sentido da variação de VACT3 concorda com o esperado, o ganho é cerca de cinco vezes menor que o obtido para a variável RR3. Deve-se lembrar que estes valores de ganho estão vinculados com a temperatura fixa utilizada para retirar os dados. Para diferentes temperaturas os valores de ganho serão distintos. Sendo que, quanto menor a temperatura, maior será o ganho de VACT3 em relação a SC3.

Tabela 6.6: Ganho VACT3 em relação a SC3 e RR3

	Ganho ($\times 10^{-6}$)
RR3	- 23,6
SC3 - Temperatura fixa	- 4,9
SC3 - Taxa fixa	2,8

Outra constatação interessante é o comportamento do BDT5. As figuras 6.28 , 6.29, 6.30 e 6.31 foram construídas a partir de dados obtidos no simulador dinâmico, mantendo a carga térmica fixa na corrente de alimentação da coluna RB, com VACT3 em malha aberta e as malhas [SC1-BDT1, T2BF1-VS1 e BDT5-Tf4] fechadas. Dois casos foram simulados:

1. Aumento de 5% em SC3 na forma de degrau no tempo igual a 5 horas
2. Aumento de 5% em RR3 na forma de degrau no tempo igual a 5 horas

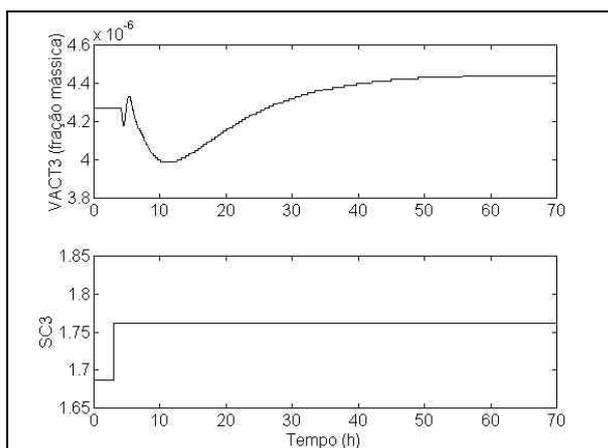


Figura 6.28: VACT3 e SC3 – Degrau SC3

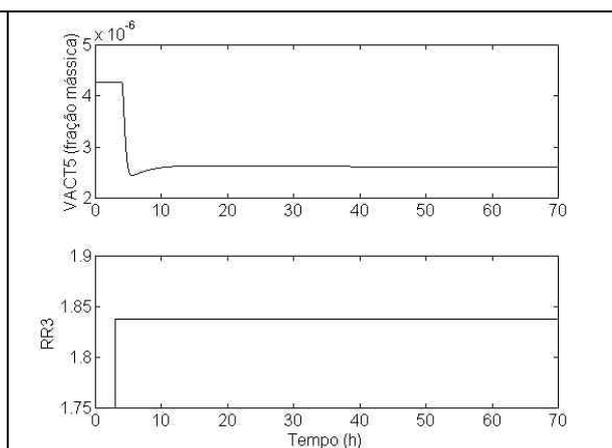


Figura 6.29: VACT3 e RR3 – Degrau RR3

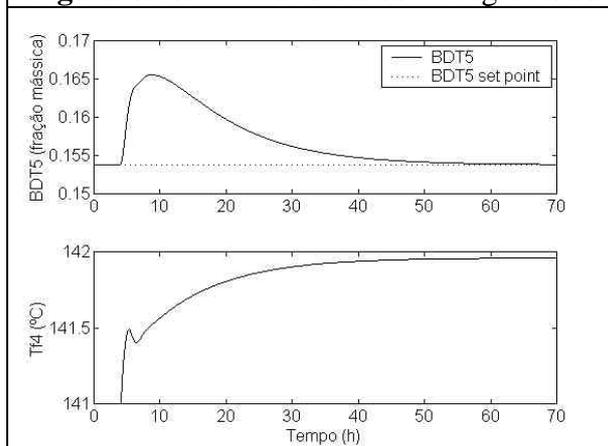


Figura 6.30: Malha de fundo - degrau SC3

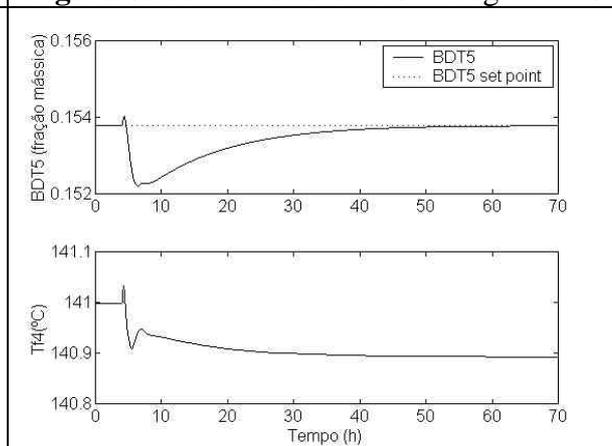


Figura 6.31: Malha de fundo - degrau RR3

Com base nessas figuras, verifica-se que:

- A diferença na constante de tempo da variável VACT3: para RR3 em menos de 10 horas VACT3 atinge o valor estacionário, em contrapartida, para SC3 após 50 horas a variável não atingiu o valor estacionário (figuras 6.29 e 6.28 respectivamente). Essa diferença é causada pelo efeito do reciclo mássico na constante de tempo do processo, descrito no capítulo 5. Quando RR3 é utilizada esse efeito é atenuado, já que essa variável não causa alterações na quantidade de VAC na corrente de reciclo. É importante salientar que quando SC3 é utilizada o tempo necessário para VACT3 atingir o estacionário também é dependente da velocidade da malha de fundo, quanto mais rápida for essa malha menor será a constante de tempo.
- A intensidade da influência da variável candidata para controlar o VACT3 na malha de fundo: SC3 causa variações maiores em BDT5 que RR3, vide figuras 6.30 e 6.31. Além disso, o sentido da variação em RR3 colabora para que a malha de topo estabilize mais rápido, pois como o BDT5 diminui a temperatura de fundo é reduzida, evitando que o VAC seja vaporizado e saia pelo topo da coluna RB.

Para completar esse estudo é interessante analisar as cargas térmicas que necessitam ser supridas na unidade (condensadores, resfriadores de carga e refervedores), em ambos os

casos. Este é um estudo preliminar, servindo apenas como um indicativo. Na tabela 6.7 aparece a variação de energia de resfriamento e aquecimento necessárias para uma alteração de 10 % em VACT3, em relação ao valor estacionário usual da unidade para esta variável. Considera-se energia de aquecimento aquela cedida aos refeedores e energia de resfriamento a relacionada com os condensadores e resfriadores de carga, no caso água de resfriamento. Esses valores foram coletados no modelo estacionário (capítulo 3).

Tabela 6.7: Variação de energia para reduzir em 10 % VACT3

	SC3	RR3
Energia de Resfriamento ($\times 10^3$ kcal.h ⁻¹)	28,75	21,63
Energia de Aquecimento ($\times 10^3$ kcal.h ⁻¹)	27,64	7,16

É visível que utilizando RR3 há uma redução, tanto na taxa de resfriamento como na de aquecimento da unidade. A redução na taxa de resfriamento é uma característica inegável e importante, já que é sabido que para esta unidade existem restrições na água de resfriamento. Porém, a grande redução de energia necessária para o aquecimento deve ser analisada com mais profundidade, já que as correntes de fundo das regeneradoras de solvente (1 ° S e 2° S) e da 2° CDE, compostas basicamente de solvente em temperatura elevada, retiram calor dos refeedores das colunas que operam a temperaturas inferiores, auxiliando no resfriamento e diminuindo a quantidade de água de resfriamento. Desta forma existe um contraponto, quanto mais solvente é alimentado na unidade, mais calor deve ser cedido para o fundo das extratoras e regeneradoras de solvente, a fim de manter a temperatura de operação no valor desejado. Mas, por outro lado, isso aumenta a capacidade das correntes de fundo desses equipamentos em retirar calor elevando o reaproveitamento energético e reduzindo a necessidade de água de resfriamento. O estudo mais detalhado da relação: mais solvente → maior carga térmica para aquecimento no fundo das extratoras e regeneradoras de solvente → menor quantidade de água de resfriamento (reaproveitamento energético), para determinar as reais vantagens da utilização de SC3 ou RR3, no que tange a energia de aquecimento, não foi realizado.

Com base nas informações apresentadas nesta seção, a utilização da variável SC3 no controle da composição VACT3, quando deseja-se controlar a perda de BD no topo da 2° S parece ser inviável. Com BDT5 em malha aberta, a utilização de SC3 pode ser até mais vantajosa, em termos de ganho, que RR3. Porém, como um dos objetivos da estratégia de controle é reduzir as perdas de BD não há sentido em manter a malha de BDT5 aberta. Na figura 6.30 fica claro que para maiores valores de SC3 a fração mássica de BD no topo da 2° S aumenta. Considerando que nenhuma ação seja tomada, esse montante de BD arrastado acaba sendo perdido pela corrente de topo da 2° S.

6.5.2 Testes da estrutura est12

A partir de informações dos engenheiros de processo e dos dados de planta transientes foram determinados os distúrbios usuais que afetam a UEB. Optou-se pela implementação de dois casos para o teste da estrutura est12 no modelo dinâmico não-linear (ASPEN Dynamics), que são:

Teste 1- Distúrbio na vazão de carga da unidade: degrau de 500 kg em 5 horas na carga em forma de rampa. Usualmente ocorrem variações de 1 a 1,5 toneladas em 24 horas.

Teste 2 - Distúrbio na composição de BD, C2B e T2B na carga, temperatura da carga e temperatura de alimentação do solvente. Aqui são modelados os mesmos distúrbios utilizados na comparação do modelo dinâmico no capítulo 3, que foram retirados dos dados reais da planta.

A figura 6.32 mostra o degrau realizado no teste (1)

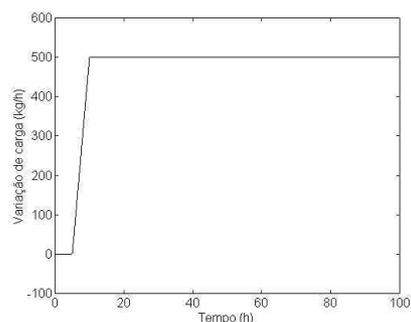


Figura 6.32: Teste 1 - Distúrbio na vazão de carga

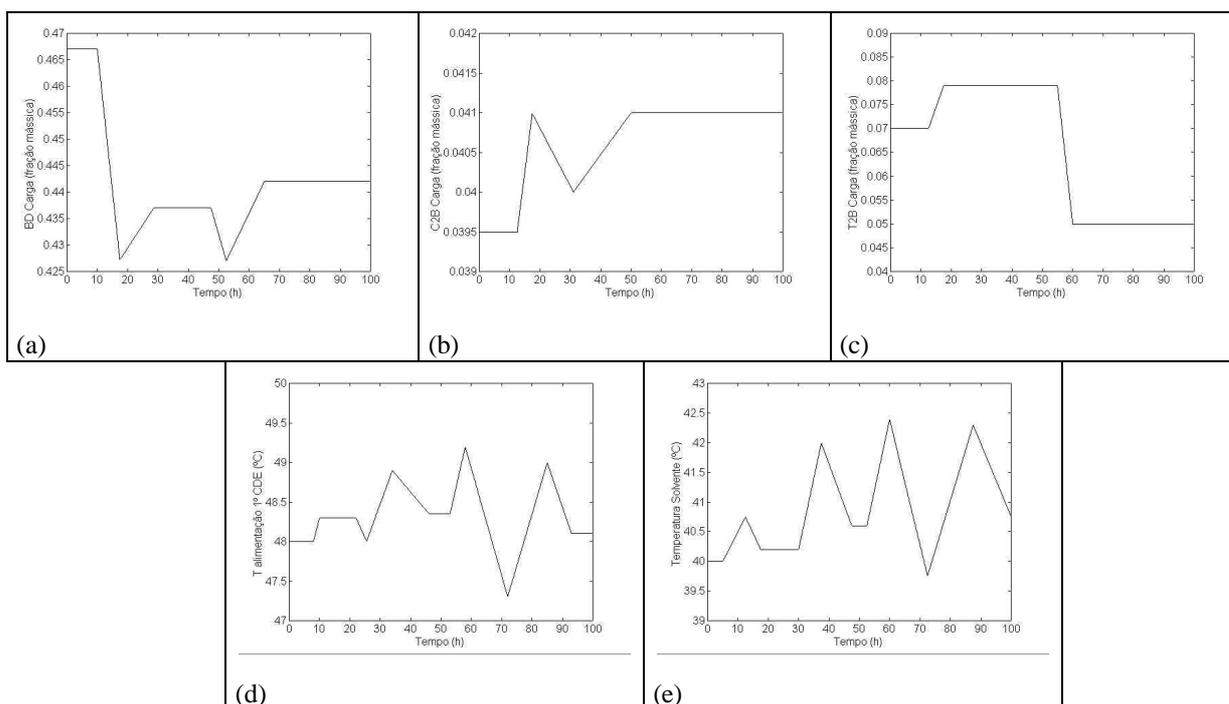


Figura 6.33: Teste 2 – Distúrbio na composição e temperatura da carga (a, b, c, d) e temperatura do solvente (e)

Na figura 6.33 é possível ver que os distúrbios do Teste 2, onde são feitas várias perturbações, durante um período de 80 horas. Este período foi escolhido para teste da estrutura, pois conforme informação dos engenheiros do processo, as variações nas composições foram maiores que as usuais. A fração mássica de BD chega a variar 4% (de 0,47 para 0,43) e a de T2B cerca de 3 % (8 % para 5%) em períodos menores que 10 horas.

Normalmente ocorrem variações de 1 a 1,5 % em 24 horas nessas composições. Ao mesmo tempo uma variável importante na separação das extratoras, a temperatura do solvente sofre variações com amplitude de até 3 °C.

Resposta da Estrutura

O comportamento das variáveis manipuladas e controladas nas quatro malhas de controle propostas, para os Testes 1 e 2, são mostrados respectivamente nas figuras 6.34 e 6.35, nas quais (a) BDT1-SC1, (b) T2BF1-VS1, (c) VACT3-RR3 e (d) BDT5-Tf4.

Nos dois Testes a resposta dos controladores foi satisfatória, com o processo sendo controlado com sucesso. No teste 1, onde ocorre somente o aumento de carga, as variáveis controladas praticamente não saíram do valor especificado. Após 30 horas o processo estava completamente estabilizado. No teste 2, no qual ocorrem distúrbios constantes no processo, os quatro controladores conseguiram manter as variáveis controladas em torno do valor especificado, com uma variabilidade baixa. É importante salientar que o ajuste dos controladores foi feito de modo rápido, se um ajuste mais cuidadoso fosse realizado os resultados apresentados seriam ainda superiores.

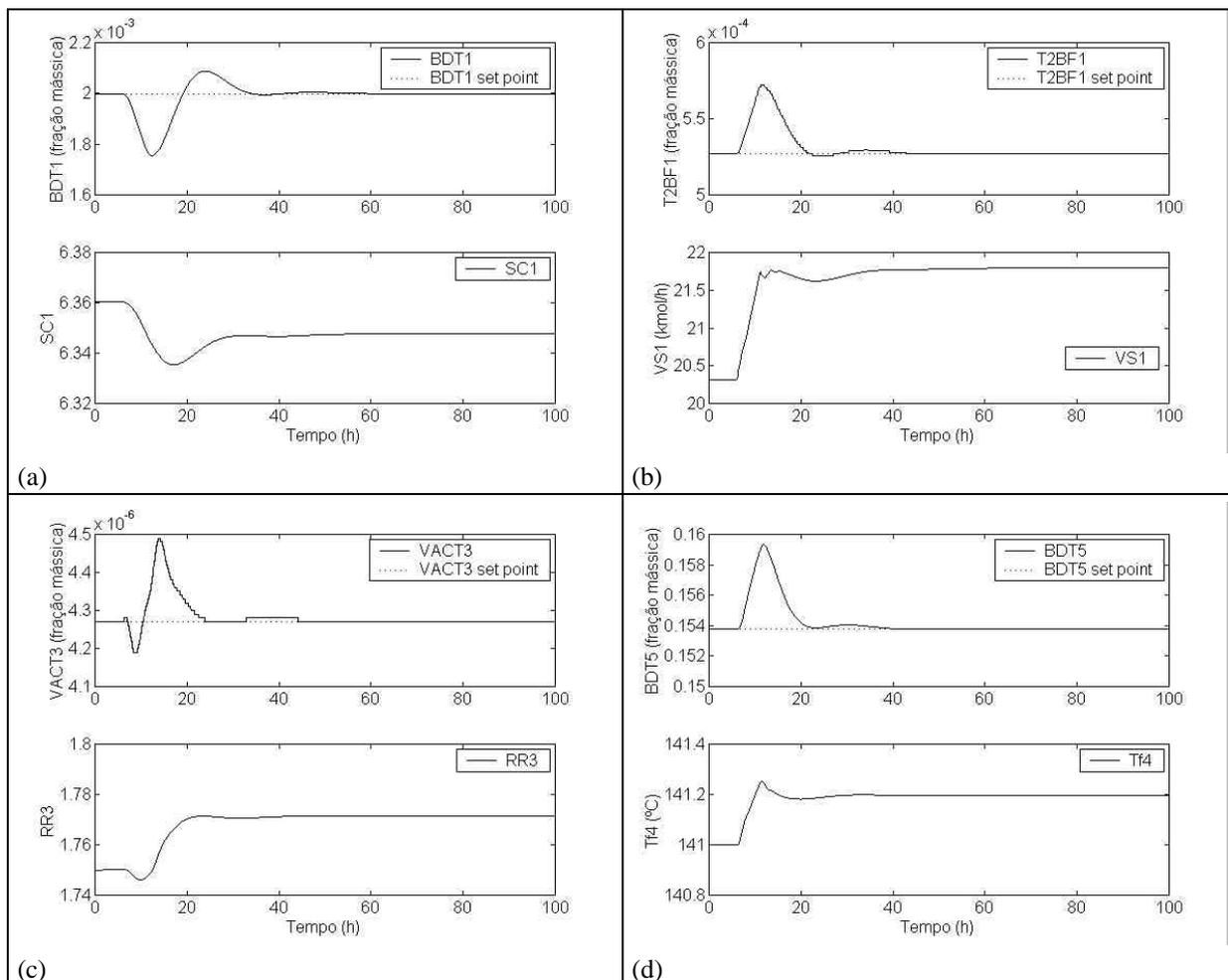


Figura 6.34: Malhas de controle est12 – variáveis medidas e controladas

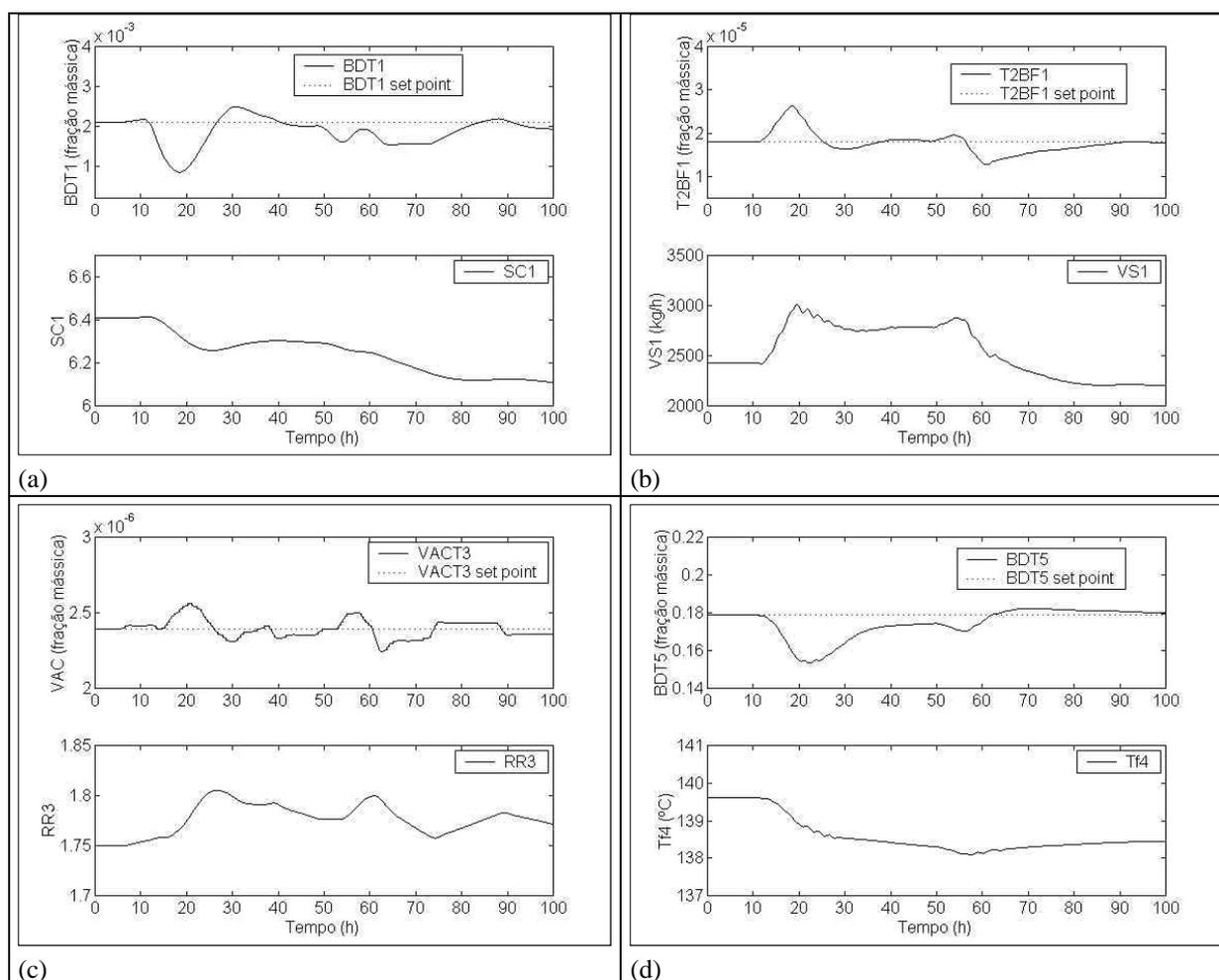


Figura 6.35: Malhas de controle est12 – variáveis medidas e controladas

Em relação ao teste 2 foi realizado um estudo complementar para avaliar as vantagens da implementação da estrutura de controle. Considerando os distúrbios da figura 6.33 três situações podem ser comparadas:

Situação 1: foram modeladas no simulador as ações tomadas pelos operadores na planta real para correção dos distúrbios;

Situação 2: nenhuma ação foi modelada para a correção dos distúrbios;

Situação 3: a estrutura de controle proposta é utilizada na correção dos distúrbios.

As informações necessárias para a implementação da Situação 1 foram retiradas dos dados transientes do processo, onde foi possível determinar quais foram as ações tomadas na planta para a correção dos distúrbios. Além dos distúrbios, as variações nas variáveis manipuladas foram modeladas na simulação dinâmica e os dados coletados para estudo.

Na Situação 2 apenas os distúrbios foram modelados e o processo variou livremente, sem que nenhuma variável manipulada fosse alterada.

O comportamento das principais composições de interesse no processo, que são: variáveis de saída envolvidas na estrutura de controle, BDT1 – T2BF1 – VACT3 e BDT5, e

do C2BT1 e EACT3, que também precisam estar abaixo de um valor especificado são comparados nas três situações. Os resultados podem ser vistos na figura 6.36.

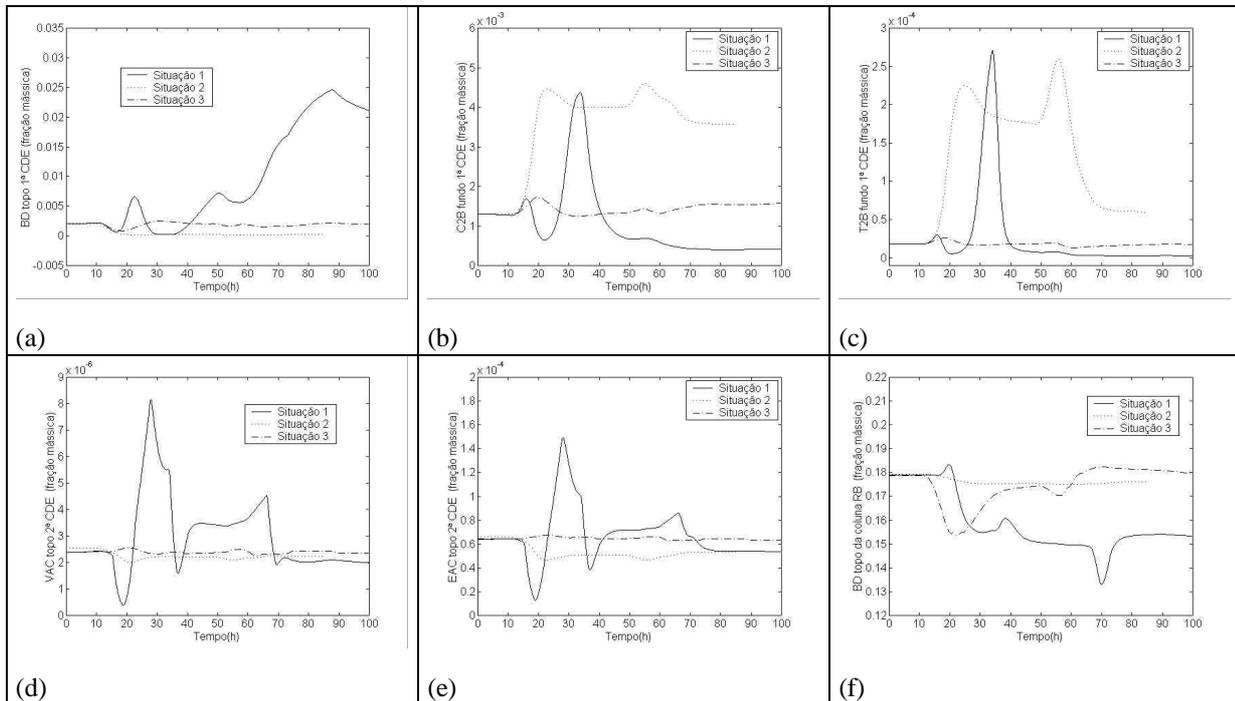


Figura 6.36: Comparação das frações mássicas dos componentes envolvidos na estrutura de controle e do C2BF1 e EACT3 nas três situações

Se nenhuma ação para corrigir os distúrbios fosse tomada (Situação 2), o que certamente traria problemas na especificação do produto, a composição dos componentes de interesse sairia dos valores especificados. Para o estudo em questão ocorrem aumentos na composição das impurezas T2B e C2B na alimentação. É visível na figura 6.36 (b) e (c), que se nenhuma ação fosse tomada a especificação do produto final seria problemática, devido as elevadas quantidades desses componentes contidos na corrente de fundo da 1º CDE, que acabam rumando para a seção de especificação de produto.

A comparação dos resultados para a Situação 1 e 3 têm um enfoque mais prático, já que sabemos que alguma ação é tomada na unidade quando ocorrem distúrbios. Vários aspectos podem ser citados, dentre os quais:

1. Vê-se claramente que o objetivo das ações na Situação 1 é evitar que a quantidade de impurezas aumente, dificultando a especificação do produto final. As composições de impurezas nas figuras 6.36 (b), (c), (d) e (e), são mantidas variando em torno de uma ampla faixa, mantendo os valores especificados apesar da variabilidade. Porém, nas ações tomadas, não existe preocupação com as composições de BD no topo das colunas 1º CDE e RB, que variam livremente. Isso pode ser visto nas figuras 6.36 (a) e (f) respectivamente. No topo da coluna 1º CDE a perda de BD aumenta. Isto ocorre porque a corrente VS1 foi aumentada (em torno de 95 % dessa corrente é BD) para reduzir a concentração de C2B e T2B no fundo da coluna. Aumentos em VS1 sempre ocasionam maior perda de BD no topo da 1º CDE, por isso devem ser feitos de forma cuidadosa. No

topo da coluna RB há uma redução na perda de BD, mas isso não significa que o aumento da perda em um local esteja sendo compensada pela redução em outro. A perda de BD no processo, definida como a quantidade de BD contida nas correntes de topo das colunas 1º CDE e RB e, na corrente de fundo da 2º F (aqui não estão consideradas as perdas na coluna 1ºF), para as Situações 1 e 3 é apresentada na figura 6.2.

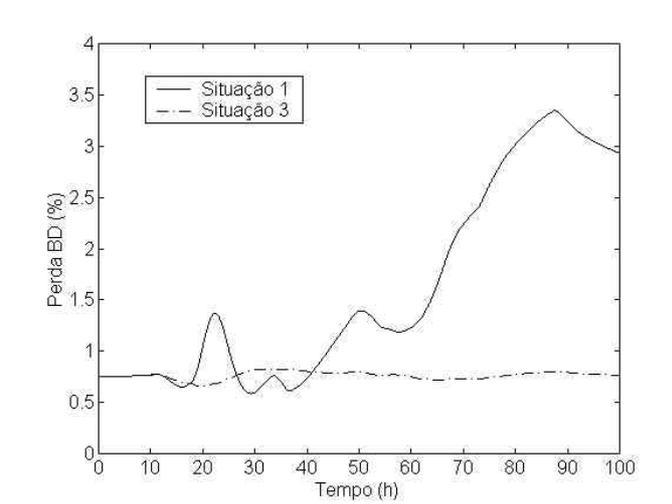


Figura 6.37: Perda de BD no processo

Na situação em que a estrutura de controle está implementada a perda da unidade é praticamente constante, apesar da intensidade dos distúrbios (distúrbios podem ser vistos na figura 6.33). Entanto, as ações de controle tomadas no processo real fazem com que a perda de BD aumente em praticamente 2 %. Neste cálculo não estão consideradas as perdas que ocorrem no topo da 1º F em nenhuma das situações, desta forma, este valor não representa a perda total da unidade.

2. Na situação 3 o que mais chama atenção é a pequena variabilidade do processo, as variáveis são mantidas em faixas reduzidas de variação. Isso é uma qualidade importante numa estrutura de controle. Sabendo que a estrutura mantém as variáveis do processo operando dentro de uma faixa restrita, é possível manter os valores das variáveis controladas (impurezas) próximas a especificação sem o perigo de contaminar o produto final, quando forem tomadas ações para corrigir distúrbios. Operando o processo próximo as restrições de impureza, são reduzidas tanto as quantidades de energia (os ciclos internos não são mantidos acima dos valores necessários nas colunas) como as perdas de BD ao longo do processo.
3. Com a estrutura de controle est12, as composições de C2B e EAC, que não estão sendo controladas, são mantidas nos valores esperados com variações de pequena amplitude.

Os resultados acima mostram que a unidade é operada de forma mais racional com a estrutura de controle proposta implementada. Desta forma, não são tomadas ações bruscas para manter as especificações evitando perdas de produto além das necessárias.

Capítulo 7

Considerações Finais

Neste capítulo estão apresentados e discutidos, de forma sucinta, alguns dos principais estudos e resultados desta dissertação. Após, são propostas algumas sugestões de futuros trabalhos, voltados para a área de controle de processos, que objetivam aumentar o potencial de controle e otimização desse processo.

7.1 Discussão dos Resultados

Como resultados importantes obtidos ao longo da dissertação, podem ser citados:

- Utilização da variável RR3, ao invés de Solv3, para controlar a composição de topo da 2º CDE. Neste ponto é necessária a determinação da faixa de variação de RR3 no processo real, a fim de avaliar sua capacidade de controle;
- Inversão de ganho do VAC no topo da 2º CDE conforme a maneira que a temperatura da corrente de alimentação da coluna RB for operada: se a quantidade de calor da corrente de alimentação da RB for mantida fixa, aumentos da quantidade de solvente na 2º CDE causam aumentos na composição de VAC no topo da coluna, esse efeito é completamente oposto do esperado;
- Determinação do efeito ‘SnowBall’ na unidade: Foi determinado que quando a unidade é operada com os níveis de fundo das extratoras em malha fechada, com as vazões das correntes de fundo como variáveis manipuladas, a unidade apresenta o efeito ‘SnowBall’. Isto mostra a importância dos fluxos mássicos das correntes

envolvidas no sistema de reciclo da unidade serem operados de forma consciente, para evitar problemas de inundação em alguns equipamentos. O equipamento que parece ser mais propenso a problemas é o tambor intermediário do sistema de compressão. Atualmente, o controle de nível das duas extratoras é operado em malha aberta, com a vazão das correntes de fundo sendo manipuladas conforme as leituras de registradores de nível. O nível de fundo das extratoras poderia ser controlado em malha fechada, sem problemas de “SnowBall”, se fosse implementada uma estratégia de controle na qual a vazão da corrente de alimentação da coluna 2º CDE estivesse vinculada com as variações da vazão de fundo da coluna 1º CDE.

- A importância do modelo termodinâmico na representação do processo: a modelagem termodinâmica é o ponto chave para a reprodução do processo. Ao longo do estudo, foi determinado que a utilização de diferentes modelos na descrição das fases pouco afeta os resultados. O fator determinante é o conjunto de parâmetros binários. Para processos deste tipo existem poucos dados disponíveis relativos aos valores dos parâmetros de interação, assim é difícil definir um conjunto de parâmetros que reproduzam o processo. Além disso, é sabido que o valor desses parâmetros são altamente influenciados pela concentração da mistura (trabalhamos com mistura de dez componentes) e pela faixa de temperatura. A adequação dos parâmetros existentes, a fim de que o processo pudesse ser representado, foi feita através da comparação dos resultados do modelo com os dados do processo. O modelo obtido pode ser considerado satisfatório. Porém, um refinamento dos parâmetros com base em dados do processo, para distintas condições de carga e operacionais, seria ideal para obter valores mais confiáveis e abrangentes;
- Confiabilidade da Classificação das Estruturas de Controle: toda a análise e classificação das estruturas de controle é feita com base em dados obtidos a partir de um modelo do processo. Com certeza existe discrepância entre o processo real e o modelo, proveniente de idealizações necessárias na concepção do modelo no simulador. Na comparação do comportamento do modelo e da planta fica evidente as diferenças no ganho estacionário e na constante de tempo do processo. Porém, características como a escolha de determinada variável para compor a malha de controle frente a outras opções, tal como ocorreu na determinação de RR3 ao invés de Solv3, não serão alteradas pelas diferenças de ganho ou constantes de tempo entre o processo real e o modelo. Essas determinações são influenciadas pelas características estruturais do processo (e.x.: correntes de reciclo, interligações entre os equipamentos) que foram captadas na modelagem. Assim, as conclusões obtidas neste trabalho, em relação a estrutura de controle mais indicada não serão invalidadas na planta real. A aplicação dessas idéias na unidade é que, provavelmente, será diferente da forma realizada na simulação (algoritmo de controle utilizado). E, mesmo que sejam utilizadas malhas de controle PID descentralizadas, idênticas ao modelo simulado, o ajuste dos parâmetros de controlador é inválido. Esses parâmetros sofreram influência da discrepância entre

o modelo simulado e o processo real (constante de tempo e ganho estacionário) devendo ser determinados na unidade.

7.2 Trabalhos Futuros

Um trabalho desta natureza, tratando de um processo com essas dimensões, possui uma série de assuntos que devem ser explorados e aprofundados. Alguns tópicos interessantes serão citados abaixo, entre eles, o desenvolvimento de um modelo de inferência de composições. O que, provavelmente, traria um aumento sensível de desempenho e qualidade no controle do processo.

O desempenho de uma estratégia de controle das composições nesta unidade é dificultado pelo elevado tempo consumido na análise (de 50 minutos a 1,2 hora). Outro fator que pode prejudicar a operação é a confiabilidade dos dados informados pelo analisador. Uma série de problemas podem ocorrer, sejam eles vinculados com a calibração dos equipamentos ou mesmo problemas técnicos, que obriguem a retirada de operação dos analisadores durante certos períodos.

Se, ao invés de uma estratégia de controle baseada apenas nos dados fornecidos pelos analisadores, fosse utilizado um modelo para a inferência das composições os resultados seriam muito superiores. A inferência das composições pode ser baseada em uma série de medidas existentes na unidade, como temperatura de determinados pratos das colunas, vazões de correntes, pressão, entre outros.

A principal vantagem na utilização de um modelo de inferência é que o tempo morto, relacionado com as informações de composição, desapareceria. Para exemplificar isso foi comparada a resposta da estrutura de controle proposta a um distúrbio na carga (Teste 1 do Capítulo 6), em dois casos:

Caso 1: atraso de tempo relacionado com a análise de 1 hora;

Caso 2: atraso de tempo nulo, representando o processo com inferência de composição

Nos dois casos foram utilizados controladores PID descentralizados, com ajuste de parâmetros através do Método do Domínio da Frequência. A implementação dos PID é feita de forma contínua e o tempo relacionado com a análise é implementado na forma de um tempo morto (Caso 1).

Os resultados desse estudo aparecem na figura 7.1

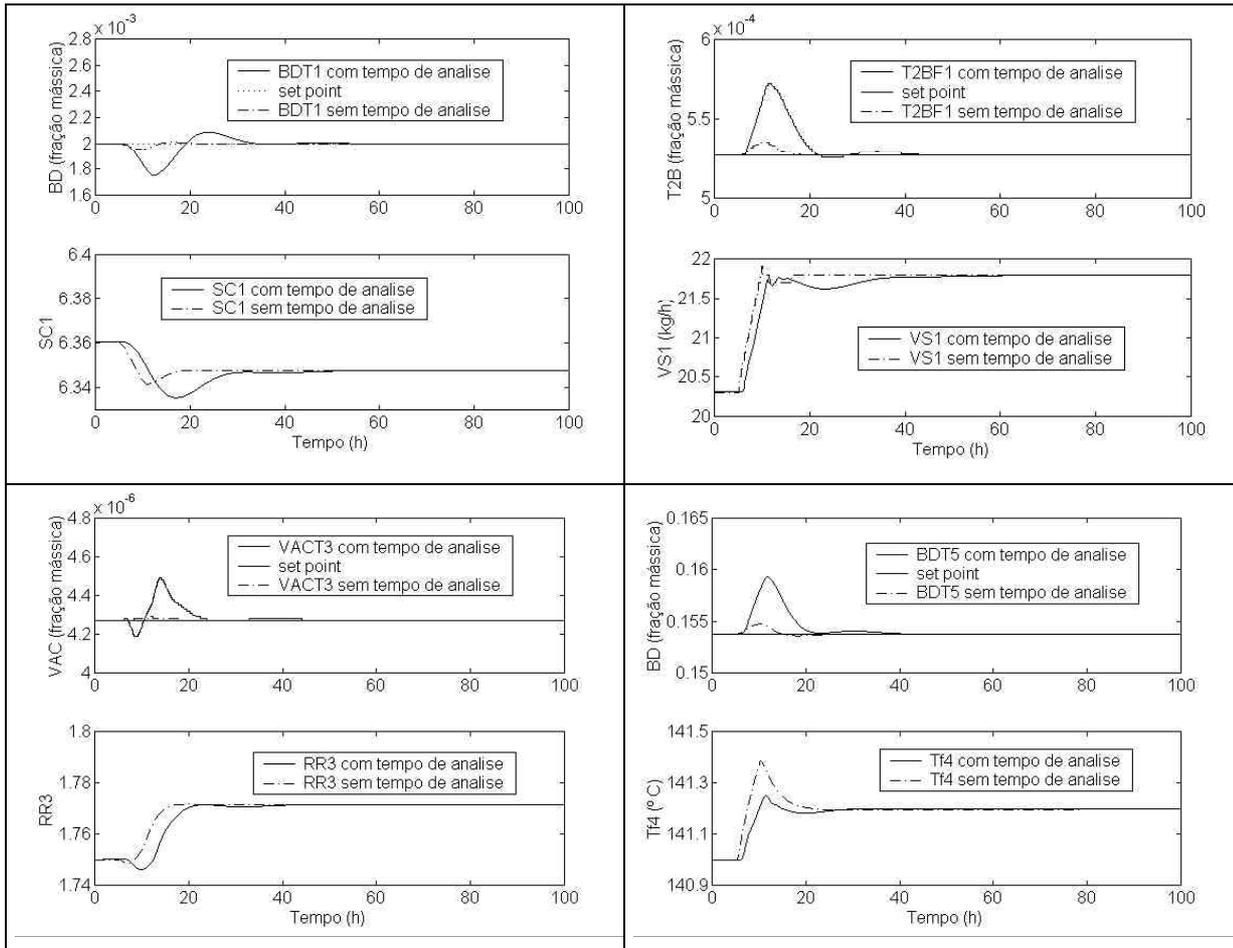


Figura 7.1: Comparação da estrutura de controle com e sem atraso na análise

Nas quatro malhas é visível a melhora de desempenho da estrutura de controle quando o atraso de tempo, relacionado com os analisadores, é eliminado. Neste caso, as variáveis controladas afastam-se muito pouco do valor especificado, sendo que o valor desejado é atingido novamente em metade do tempo consumido pela simulação em que o atraso na medida das composições estava presente. Esta é uma situação idealizada, mas fornece uma idéia da melhora que pode ser obtida com a implantação de uma inferência para determinação das composições.

Outro estudo importante para esta unidade é relacionado com o aproveitamento energético. Como foi descrito no decorrer da dissertação, as correntes de fundo das regeneradoras de solvente (1° S e 2° S) e da 2° CDE, compostas basicamente de solvente em temperatura elevada, cedem calor para os refeedores das colunas que operam a temperaturas menores. Foi realizado um estudo superficial utilizando ferramentas da Tecnologia “Pinch” para avaliar se o nível de aproveitamento desse calor era satisfatório. Porém, seria necessária uma avaliação mais aprofundada para concluir se alterações na configuração utilizada, ou mesmo se a retirada ou inclusão de correntes nessa rede, trariam ganhos ao processo. Em relação à modelagem do processo, seria importante o estudo mais aprofundado do conjunto de parâmetros binários que modelam o comportamento da fase líquida. O ideal seria realizar um ajuste de parâmetros utilizando conjuntos de dados de processo para diversas condições operacionais, tanto para o ajuste dos parâmetros como para a verificação da qualidade do

modelo. O objetivo seria determinar um (ou mais) conjunto de parâmetros abrangentes, que descrevessem bem o comportamento do processo para toda a faixa de operação da unidade.

Apêndice A1

Comparação do comportamento dinâmico da planta e do modelo

As figuras A1.1, A1.2, A1.3, A1.4 e A1.5 mostram as variáveis da planta e do modelo na forma de deltas, em relação aos seus valores no tempo inicial.

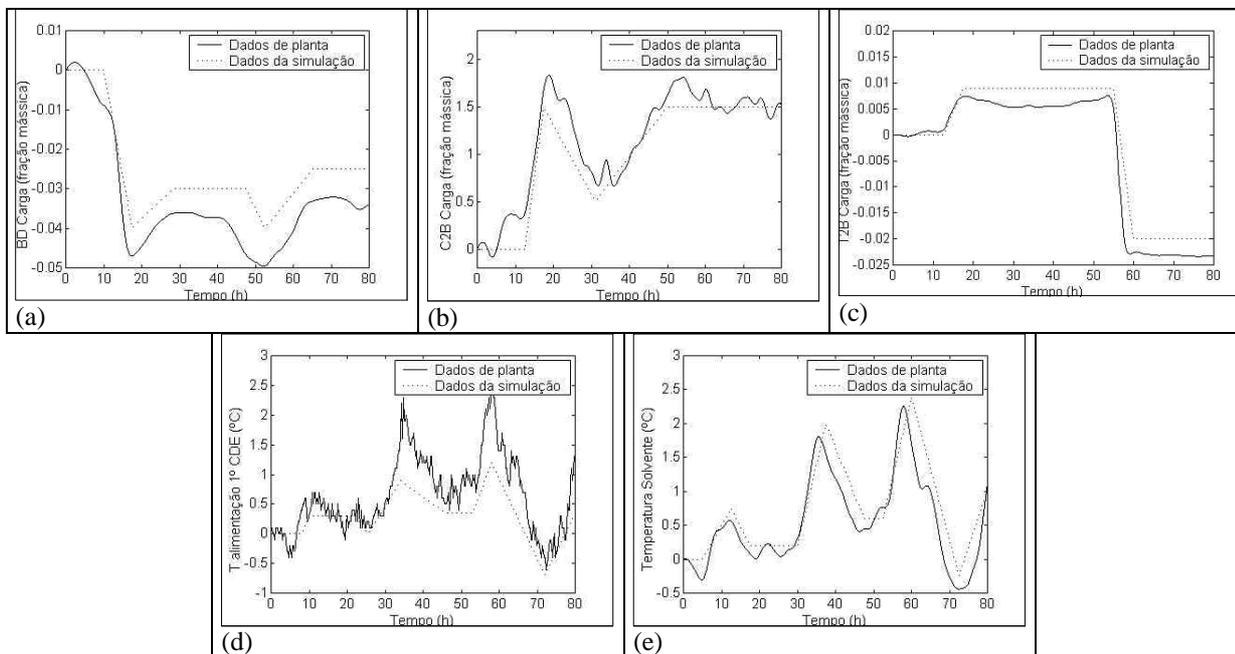


Figura A1.1: Distúrbios modelados e dados de planta [(a) BD na carga (b) C2B na carga (c) T2B carga (d) Temperatura da carga (e) Temperatura do solvente]

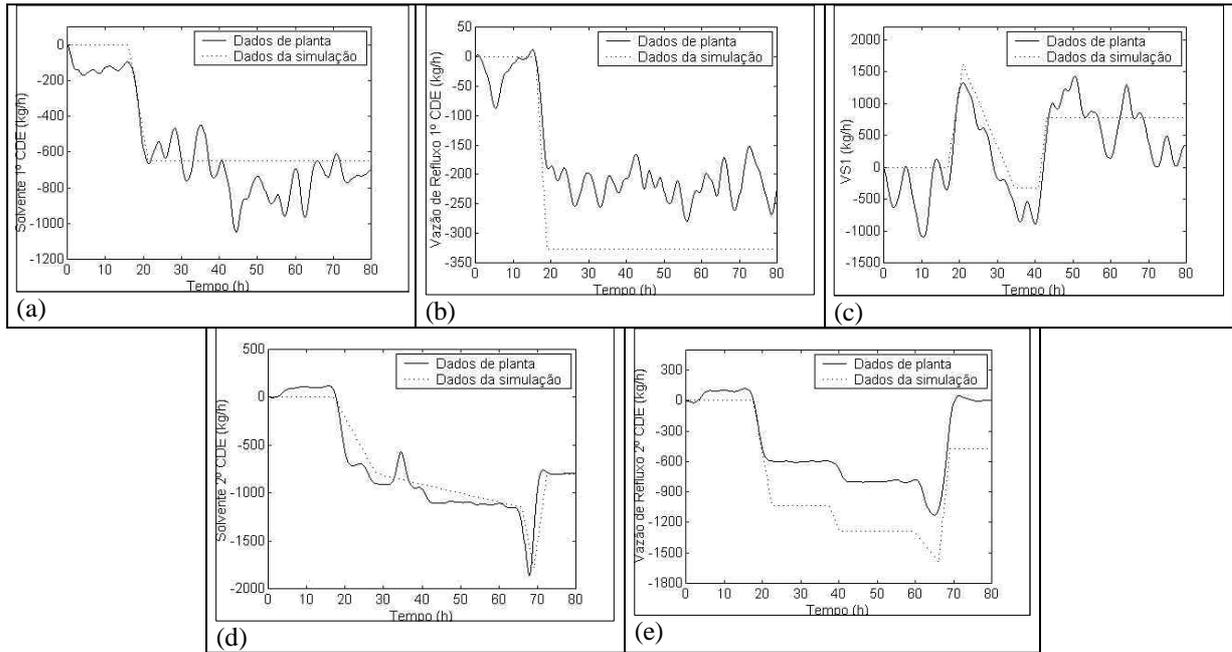


Figura A1.2: Alterações nas variáveis manipuladas no modelo e planta: [(a) Vazão de solvente 1° CDE (b) Vazão de Refluxo 1° CDE (c) Vazão de Selagem (VS1) (d) Vazão de solvente 2° CDE (e) Vazão de Refluxo 2° CDE]

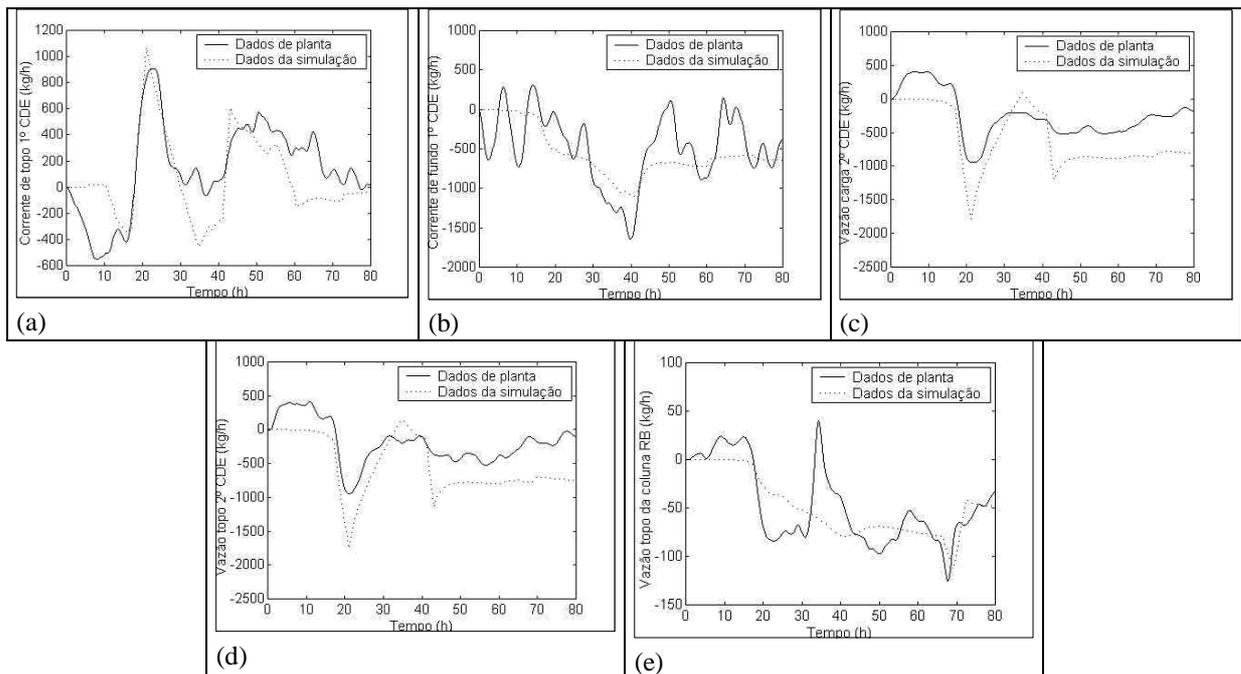


Figura A1.3: Vazões do modelo e dados de planta [(a) Topo da 1° CDE (b) Fundo da 1° CDE (c) Carga da 2° CDE (c) Topo da 2° CDE (d) Topo da coluna RB]

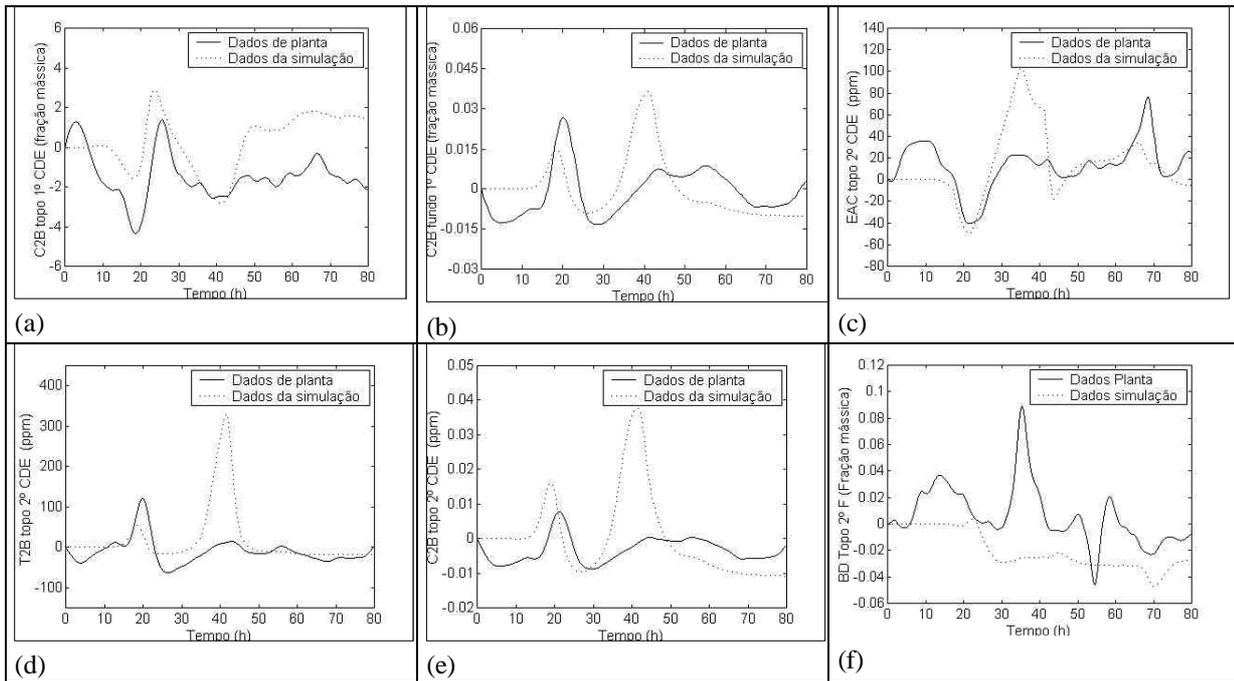


Figura A1.4: Composições modelo e dados de planta [(a) C2B topo da 1º CDE (b) C2B fundo da 1º CDE (c) EAC topo da 2º CDE (d) T2B topo da 2º CDE (e) C2B topo da 2º CDE (f) BD topo da coluna RB]

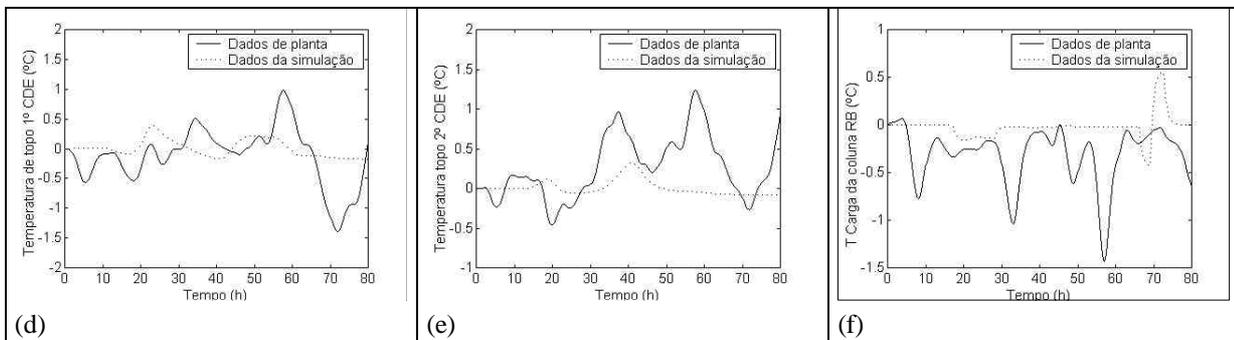


Figura A1.5: Temperaturas modelo e dados de planta [(a) Topo da 1º CDE (b) Topo da 2º CDE (c) Carga da coluna RB]

As figuras A1.6, A1.7, A1.8, A1.9 e A1.10 mostram as variáveis da planta e do modelo em valores absolutos.

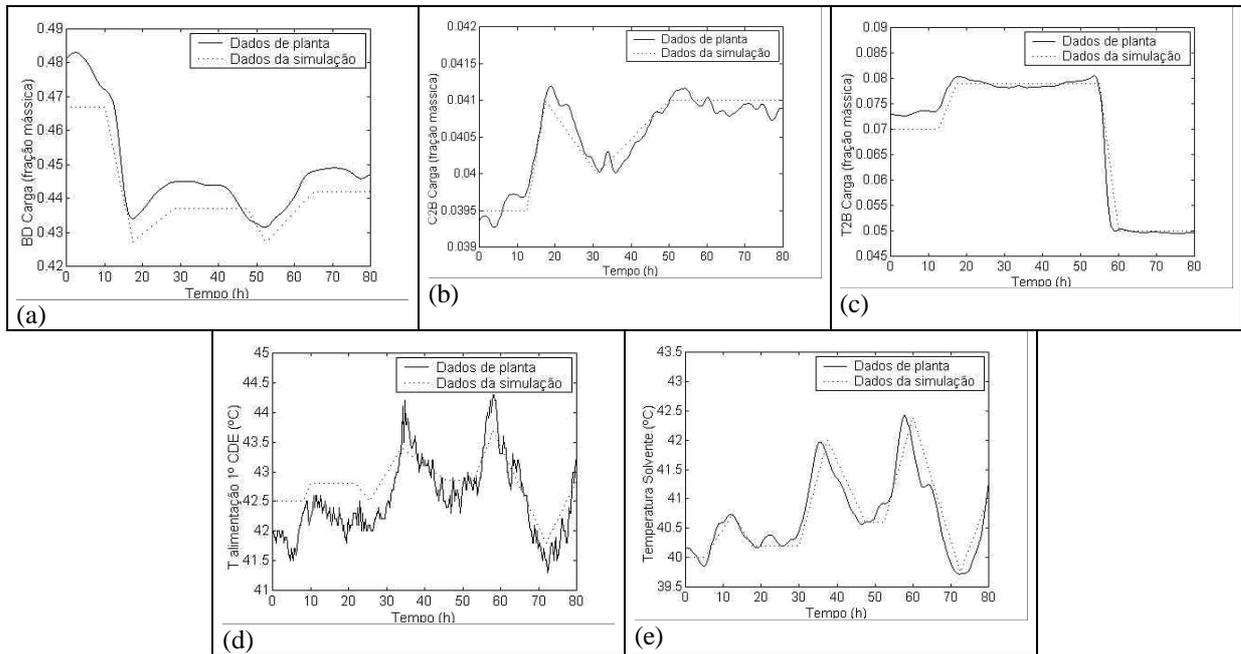


Figura A1.6: Distúrbios modelados e dados de planta [(a) BD na carga (b) C2B na carga (c) T2B carga (d) Temperatura da carga (e) Temperatura do solvente]

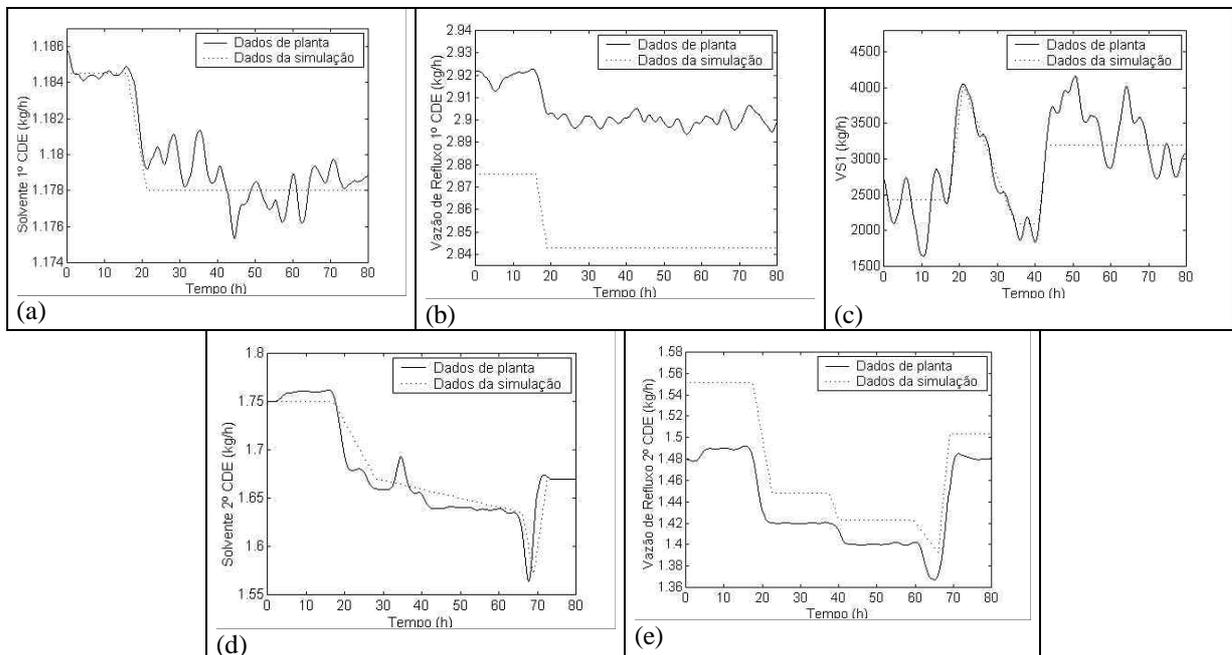


Figura A1.7: Alterações nas variáveis manipuladas no modelo e planta: [(a) Vazão de solvente 1º CDE (b) Vazão de Refluxo 1º CDE (c) Vazão de Selagem (VS1) (d) Vazão de solvente 2º CDE (e) Vazão de Refluxo 2º CDE]

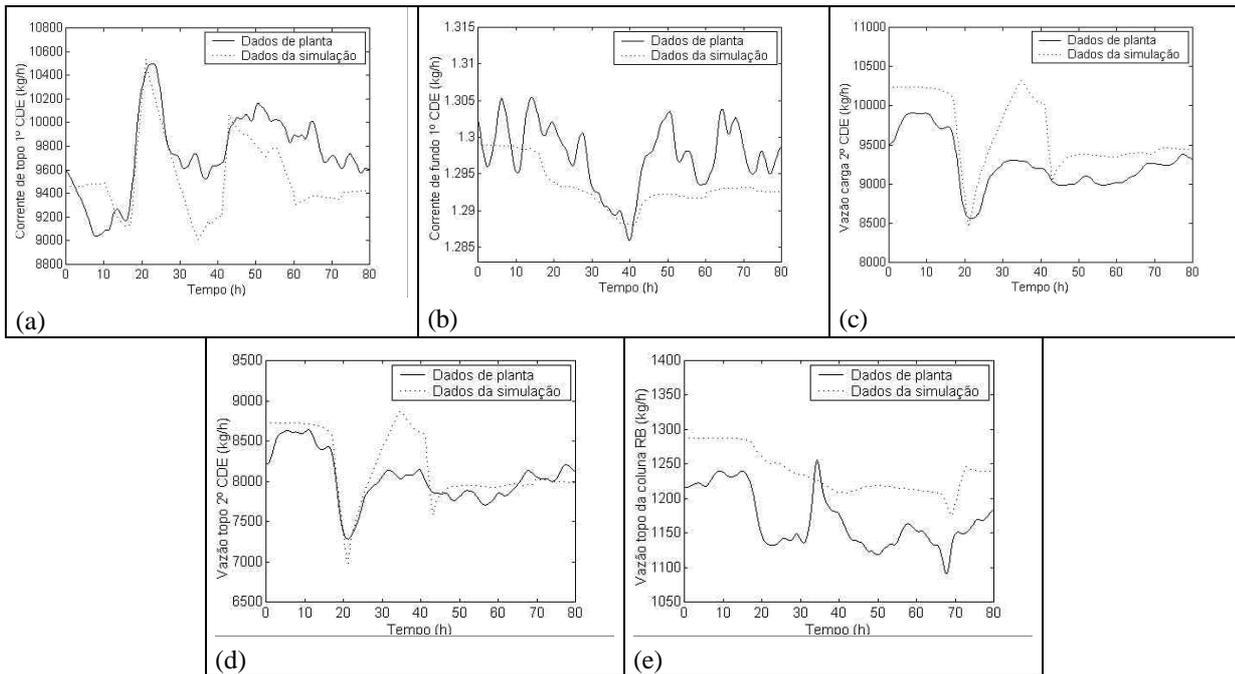


Figura A1.8: Vazões do modelo e dados de planta [(a) Topo da 1º CDE (b) Fundo da 1º CDE (c) Carga da 2º CDE (c) Topo da 2º CDE (d) Topo da coluna RB]

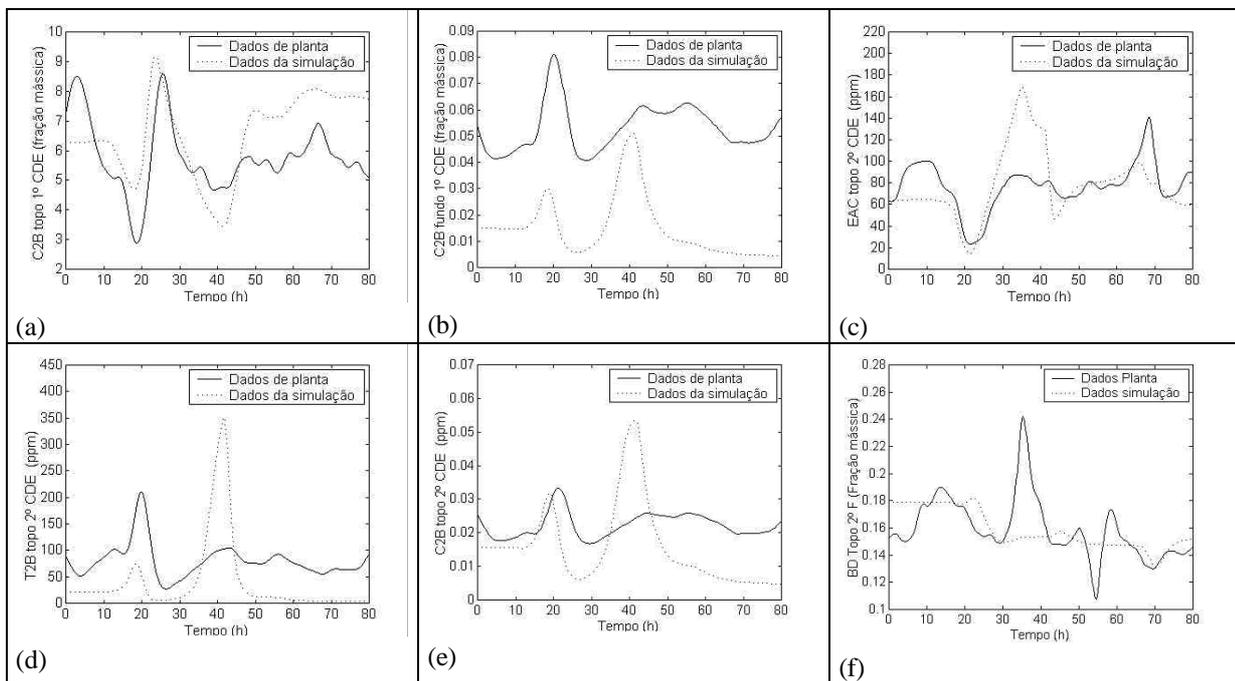


Figura A1.9: Composições modelo e dados de planta [(a) C2B topo da 1º CDE (b) C2B fundo da 1º CDE (c) EAC topo da 2º CDE (d) T2B topo da 2º CDE (e) C2B topo da 2º CDE (f) BD topo da coluna RB]

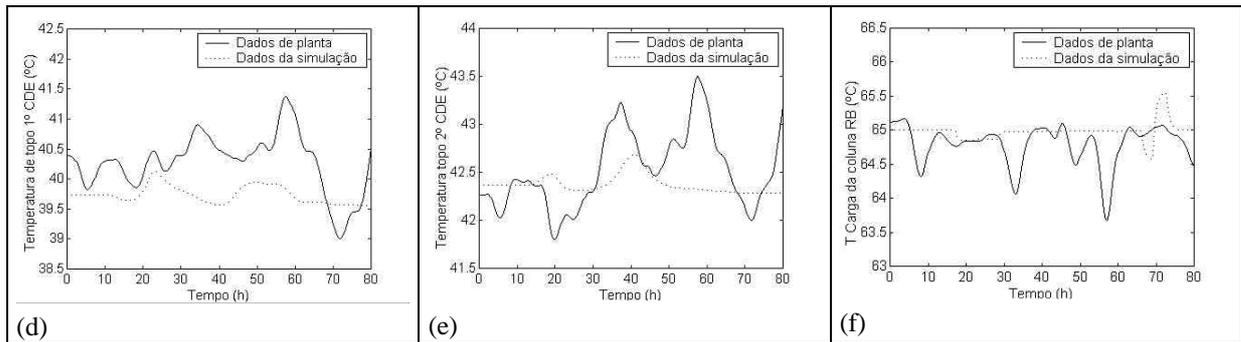


Figura A1.10: Temperaturas modelo e dados de planta [(a) Topo da 1º CDE (b) Topo da 2º CDE (c) Carga da coluna RB

Apêndice A2

Características das Matrizes Esparsas

Matrizes esparsas são uma classe especial de matrizes que contém um número significativo de elementos nulos. Esta propriedade permite que os procedimentos computacionais utilizem apenas os elementos não nulos da matriz, reduzindo o tempo computacional e eliminando operação entre elementos nulos. A complexidade computacional das operações esparsas é proporcional ao número de elementos não nulos e, depende linearmente da quantidade de linhas (nl) e colunas da matriz (nc). Porém, é independente do produto $nl \times nc$, que é o número total de elementos nulos e não nulos da matriz. [MATLAB The Language of Technical Computing - Using MATLAB, 1999, versão5, cap9]

Qualquer matriz com elevado número de elementos nulos pode ser tratada como uma matriz esparsa. Um índice utilizado na sua classificação é a densidade de matriz, definido como o número de elementos não nulos divididos pelo número total de elementos da matriz.

As matrizes que formam o espaço de estado da UEB possuem acentuadas características esparsas. A figura A1 mostra a matriz Jacobiana da 1º CDE, as variáveis de estados são os elementos não nulos, sendo todo o restante da matriz formada por elementos iguais a zero. A densidade dessa matriz é de 0,052. Cerca de 95 % dos elementos na matriz cheia são nulos.

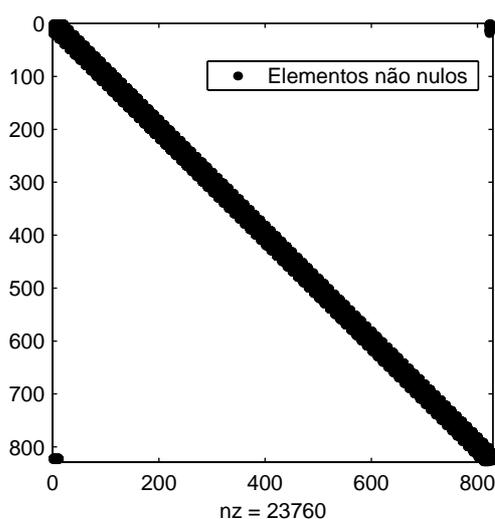


Figura A2: Matriz Jacobiana da 1º CDE

O espaço utilizado na alocação dessa matriz na forma esparsa e na forma cheia fornece uma idéia do quanto vantajoso é trabalhar com as matrizes na forma esparsa. A tabela A1

apresenta o número de bytes utilizado para guardar a matriz Jacobiana da 1º CDE, esses valores foram obtidos no MATLAB v.5.3.

Tabela A2: Espaço utilizado para alocar a matriz A na forma cheia e esparsa

Nome	Tamanho	Bytes	Classe
A_1cde_esparsa	828x828	288436	sparse array
A_1cde_full	828x828	5484672	double array

A maior parte das operações no MATLAB com os espaços de estado gerados no ASPEN foram realizadas com o sistema na forma esparsa. Ainda existem algumas restrições relacionadas, principalmente com a decomposição em valores singulares das matrizes, sendo que cálculos que incluíam essa determinação foram feitos com as matrizes cheias.

Maiores informações sobre matrizes esparsas podem ser encontradas em [MATLAB The Language of Technical Computing - Using MATLAB, 1999, versão5, cap9].

Apêndice A3

Métodos de Integração e Tolerâncias Relativas utilizadas no Modelo Linear

Os métodos disponíveis para serem utilizados no simulink são divididos em dois grupos de sistemas: ‘Sistemas Rígidos’ e ‘Sistemas Não Rígidos’. Sistemas rígidos são aqueles em que existem dinâmicas com velocidades bastante distintas, caracterizados por autovalores com ordens bastante distintas (maior autovalor é cerca de 10^3 vezes maior que o menor autovalor). Para os quais são necessários métodos de integração mais eficientes que utilizam mais informações do sistema.

Métodos para Sistemas Não Rígidos

ODE45: baseado em Runge_Kutta explícito. Ele utiliza uma solução com passo único, para calcular $y(t_n)$ é necessário somente a solução para o instante anterior $y(t_{n-1})$. Geralmente é utilizado como primeira tentativa na resolução de problemas.

ODE23: também baseado em Rung-Kutta explícito. Porém, é mais eficiente que o ODE45 para sistemas com características rígidas. Da mesma forma que o ODE45 utiliza a solução com passo único.

ODE113: método de ordem variável Adams-Bashfotth-Moulton PECE. Pode ser mais eficiente que o ODE45 em termos de tempo de cálculo. Utiliza solução com vários passos, normalmente necessita da solução em vários instantes de tempo anteriores para calcular a solução corrente.

Métodos para Sistemas Rígidos

ODE15s: método de ordem variável baseado em fórmulas de diferenciação numérica. Como o ODE113 é um método de vários passos.

ODE23s: é baseado na fórmula de Rosenbrock modificada de ordem 2. Como é um método de passo único, é menos efetivo que o ODE15s para pequenas tolerâncias, porém resolve alguns problemas que esse método não soluciona.

ODE23t: é uma implementação da regra do trapézio utilizando interpolação livre. Deve ser utilizado apenas para sistemas moderadamente rígidos gerando solução sem oscilações numéricas.

ODE23tb: utiliza Runge-Kutta implícito com uma regra de passo trapezoidal no primeiro estágio e um segundo estágio com uma fórmula de diferenciação de segunda ordem.

O método de integração que está sendo usado é o ODE23tb. Foram testados todos os outros, sendo que os para sistemas não rígidos não conseguem resolver o problema. Os outros têm desempenho similar em relação ao tempo de integração e, como visto no capítulo 4 não afetam a resposta do sistema.

Em relação a tolerância utilizada nos métodos de integração, existem dois tipos:

Tolerância Relativa (RelTol): é uma medida do erro relativa ao tamanho de cada componente da solução. O valor “default” é $1e-3$, o que corresponde a 0.1 % de acuracidade.

Tolerância Absoluta (AbsTol): é um escalar ou um vetor com o erro absoluto para cada componente da solução. Ele é um limite, abaixo do qual os valores das soluções para determinados componentes não são importantes. O valor default é $1e-6$.

O erro (e) em cada passo de integração (i) é definido da seguinte forma:

$$|e(i)| \leq \max(\text{RelTol} \times \text{abs}(y(i)), \text{AbsTol}(i))$$

Onde y é o vetor com as respostas dos sistemas.

Para os testes apresentados no Capítulo 4, a tolerância relativa do sistema foi variada, nos seguintes valores: $1e-3$, $1e-5$ e $1e-12$. Para esses diferentes valores não houve alterações nas respostas do sistema.

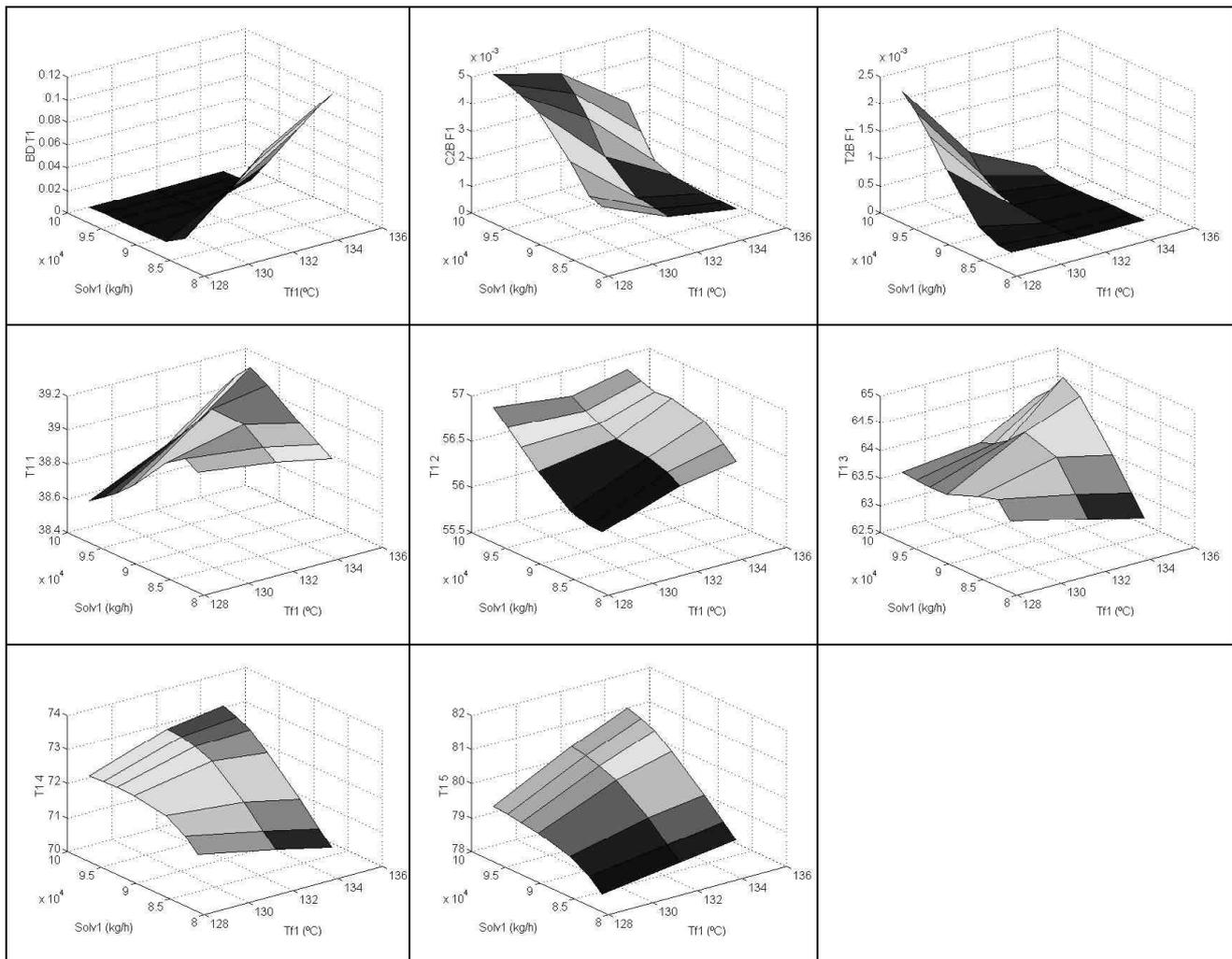
Apêndice A4

Gráficos da Análise de Sensibilidade Estacionária

As figuras abaixo foram geradas na análise de sensibilidade estacionária (Cap 4), estando relacionadas com as principais variáveis da 1º SDE e 2º SDE.

Na tabela A4.1 aparecem as frações molares de BD no topo da 1º CDE, frações molares de C2B e T2B na corrente de fundo da 1º CDE e as temperaturas dos pratos da 1º CDE para variações em Solv1 e Tf1.

Tabela A4.1: Variáveis da 1º SDE



Na tabela A4.2 estão as frações molares de VAC, EAC, T2B, C2B e BD no topo da 2º CDE, BD no fundo da coluna RB e as temperaturas dos pratos da 2º CDE, onde existem termopares para variações em Tf4 e Solv1. Pode-se relacionar a quantidade de BD no fundo da coluna RB com a quantidade deste componente no topo da 2º F, que é uma variável importante na estratégia de controle. Devido à importância da variável RR3 na operação da 2º SDE, os gráficos das variáveis relacionadas com essa seção, quando são variadas Tf4 e RR3 são apresentados na tabela A4.3.

Tabela A4.2: Variáveis da 2º SDE

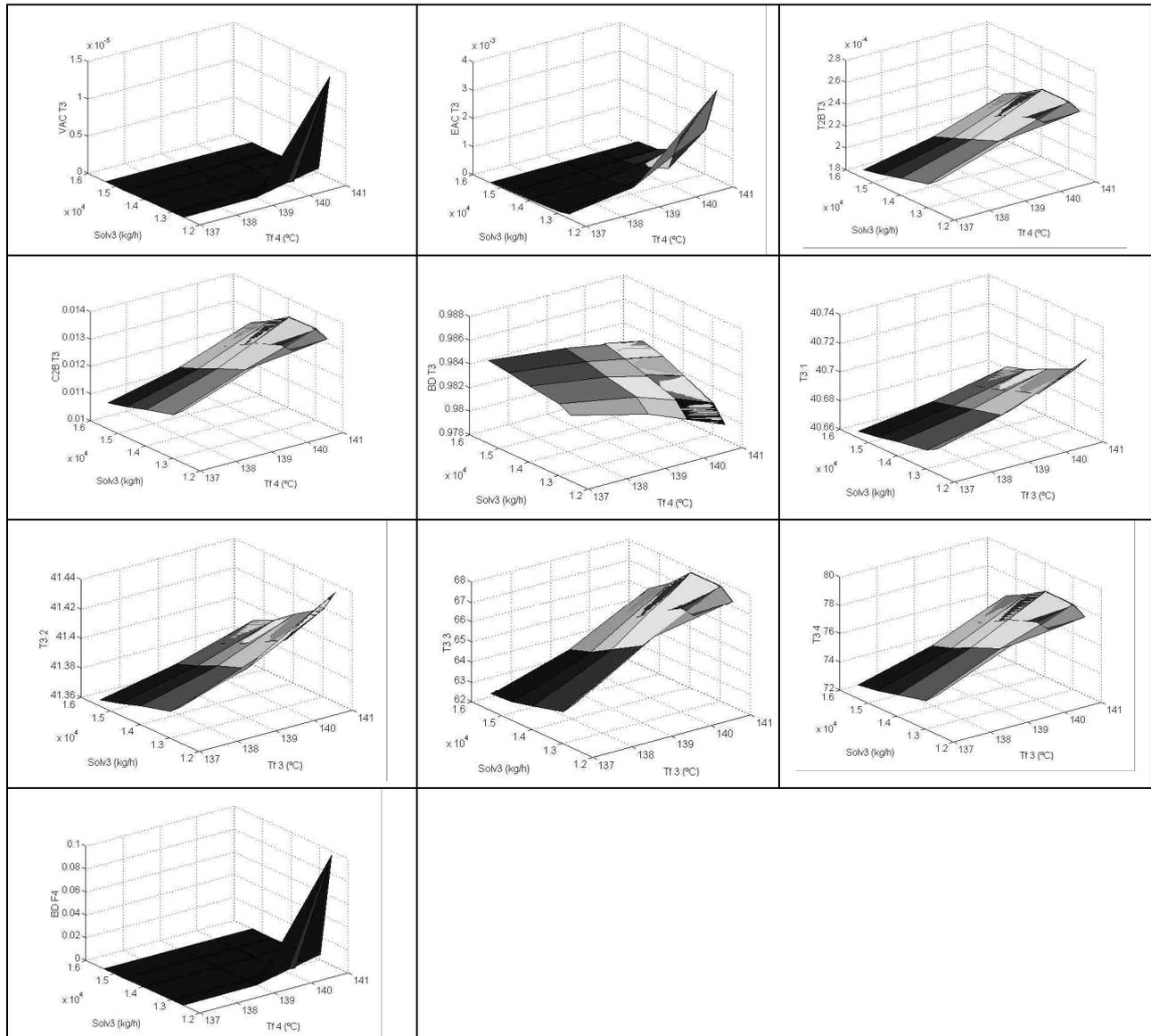
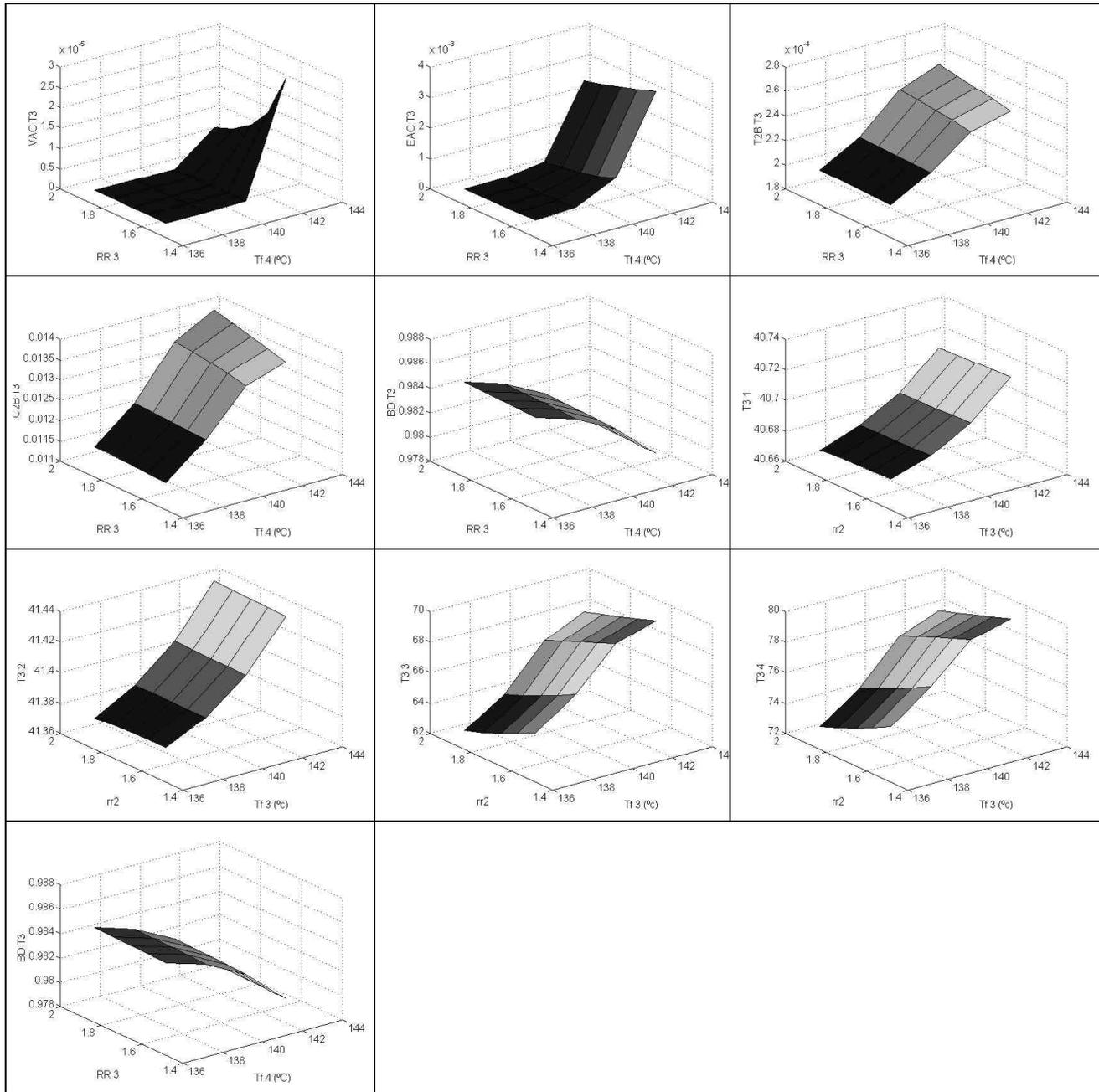


Tabela A4.3: Variáveis da 2° SDE



Referências bibliográficas

- ASPEN TECH, Aspen Technology, Inc. (1999), consultar <http://www.aspentech.com>
- BANNISTER R.R (1969), “Butadiene Recovery via Extractive Distillation”, Chemical Engineering Progress ,Vol65 n°9, September, pp65-68
- CHOO,K.P.,SAXENA, A.C. (1987), “Inferential Composition Control of an Extractive Distillation Tower”, Ind. Eng. Chem. Res, 26, pp2442-2444
- DURAIK R., FERNANDES P.R., TRIERWEILER J.O. & SECCHI A.R. (1999). “Benefícios da Aplicação de Técnicas Avançadas de Controle à Unidade de Separação de Aromáticos”, II ENPROMER CD Room, T228, submetido a publicação no Latin American Applied Research
- FARINA, L.A. (2001). “RPN-Toolbox: uma ferramenta para o desenvolvimento de estruturas de controle”, Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- FARINA, L.A., TRIERWEILER, J.O., SECCHI, A.R. & ENGELL, S. (1999). “Solving Plant Wide Control Problems Via RPN Toolbox”, II ENPROMER CD Room, T305, submetido a publicação no Latin American Applied Research.
- GERSTER, J.A. (1966), “*Azeotropic and Extractive Distillation*”, Chemical Engineering Progress, vOL 65 N°9,pp43-46.
- LEVINE, W.S. (1996). “The Control Handbook”, 30ª edição, CRC Press e IEEE Press
- LUYBEN, W.L. (1990). “Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers”, McGraw-Hill
- LUYBEN, W.L. (1992). “Practical Distillation Control”, van Nostrand Reinhold
- LUYBEN, W.L. (1994). “Snowball Effects in Reactor/Separator Processes with Recycle”, Ind. Eng. Chem. Res., 33 (2), pp. 299-305

- LUYBEN, W.L. , TYRÉUS, B,D. & LUYBEN, M. L. (1998). “Plantwide Process Control”, McGrawHill.
- LUSA,L.P, (2001). “Desenvolvimento de Estratégias de Controle para uma Unidade Desmetanizadora”, Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- LUSA,L.P., Relatórios internos de estudos sobre a Seção de Especificação de Produto, (2001)
- MACIEJOWSKI, J.M., (1989). “Multivariable Feedback Design”, Addison-Wesley Publishing Company
- MANUAL DE OPERAÇÃO DA COPENE
- MAHONEY D. P., FRUEHAUF P.S. , (). “An Integrated Approach for Distillation Column Control Design using Steady State and Dynamic Simulation”
- MARCON S.M., CAMARA R.O., ASSIS W.R., SECCHI A.R. & TRIERWEILER J.O. (1999). “Desenvolvimento da Estrutura de Controle para a Seção de Separação de Gases”, II ENPROMER CD Room, T375, submetido a publicação no Latin American Applied Research
- MARTINEZ E, BELTRAMINI L, LEONE H, et al.(1992), “Knowledge Elicitation and Structuring for a Real-Time Expert System for monitoring a Butadiene Extraction System”, European Symposium on Computer Aided Process Engineering-16, May, S345-S352.
- MATHWORKS INC, THE (1998). “Control System Toolbox for use with MATLAB”, Natick/MA/EUA.
- NG, C. & STEPHANOPOULOS, G. (1998). “Plant-Wide Control Structures and Strategies”, DYCOPS’98, 5^o IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems, pp 1-16
- OGUNNAIKE, B.A. & RAY, W.H. (1994). “Process Dynamics, Modeling and Control”, *Oxford University Press*.
- RIGGS, B. James (1998). “Improve Distillation Column Control”. Chemical Engineering Progress, October, pp 31 – 47.
- SKOGESTAD, S. & MORARI M. (1987). “Implication of Large RGA Elements on Control Performance”, *Ind. Eng. Chem. Res*, 26, pp. 2323-2330
- Tecnical Report, “Butadieno Extration”, (1995), *Dynamic Matrix Control Information System ’95*.

- TRIERWEILER, J.O. (1997). "A Systematic Approach to Control Structure Design", Ph.D. Thesis, University of Dortmund.
- TRIERWEILER J.O. & ENGELL S. (1997) "The Robust Performance Number: a New Tool for Control Structure Design" *Comp. chem. Eng.* 21, Suppl., S409-414
- TRIERWEILER, J.O., MÜLLER, R. & ENGELL, S. (2000.a). "Multivariable Low Order Structured-Controller Design by Frequency Response Approximation", submetido ao *Brazilian Journal of Chemical Engineering*.
- TRIERWEILER J.O., MARCON S.M., ASSIS W.R., SECCHI A.R. (2001). "Control Structure Design for the FCC Absorber-Stripper Unit: Specification vs. Constraint Approach", *Computer Aided Process Engineering: The 10th European Symposium*.