

ANÁLISE DE SENSIBILIDADE PARA FINS DE CONTROLE EM UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO AZEOTRÓPICA DE ALTA PUREZA

A. A. de MORAIS Jr¹, R. P. BRITO¹, R. F. de OLIVEIRA², L. O. A. ROJAS²

¹ Universidade Federal de Campina Grande, Pós-Graduação em Engenharia Química

² Universidade Federal da Paraíba, Departamento de Engenharia Química

E-mail para contato: aamj@ct.ufpb.br

RESUMO – Este trabalho tem como objetivo o estudo avançado das variáveis que afetam as temperaturas e as composições de interesse em um processo de destilação azeotrópica de alta pureza. Trata-se de uma coluna de destilação azeotrópica de alta pureza do processo de purificação do composto 1,2 Dicloroetano (1,2-EDC), sendo simulada em regime estacionário com dados reais de uma planta industrial no software *Aspen Plus*TM. A análise de sensibilidade para seleção de variáveis de entrada, ditas secundárias, que afetam diretamente as temperaturas e as composições dos produtos de interesse é feita com os métodos da Decomposição dos Valores Singulares (SVD) e da Matriz de Ganho Relativo (RGA) no software Matlab®. São selecionadas pares de variáveis manipuladas - controladas para tomada de decisões. Os resultados obtidos nas análises indicam caminhos onde pode ser aplicado controle de temperatura/composição singular ou dual (*singular/dual composition control*), ou até quais variáveis de entrada podem compor um modelo de inferência de composição de produtos de base, possibilitando a construção de analisadores virtuais e a aplicação de controle inferencial.

1. INTRODUÇÃO

A separação de misturas de líquidos nos seus constituintes é uma das principais operações das indústrias químicas e petrolíferas, e a destilação é sem dúvida o método mais utilizado para conseguir este objetivo. Mas, apesar da sua larga utilização, é pequena a atenção dispensada ao sistema de controle desse processo, principalmente pelo fato que na maioria das indústrias de transformação 80% do custo energético é devido a essa operação unitária (Seader et al., 2011).

Segundo Kalid (2007), as restrições operacionais dessa operação estão ligadas as variáveis como, por exemplo, vazão (F), temperatura(T) e/ou pressão (P) máxima. P e T não podem se aproximar das condições críticas, pois o fluxo hidráulico depende da diferença entre a massa específica da fase líquida e gasosa, além disso, algumas substâncias são termicamente sensíveis.

Considerando a crescente competitividade, as industriais veem modificando e melhorando suas tecnologias quando são requeridas em aumentar sua produção, seus índices de eficiência e, principalmente, suas condições efetivas de segurança. Neste contexto, a importância de um

acompanhamento de um grande conjunto de variáveis críticas nesse processo tão importante, que é a destilação, requerem a utilização de dispositivos de medição e controle adequados.

Na forma de atuação a maior dificuldade do processo de destilação é o controle, medição e estimativa em tempo real das composições dos produtos de topo e de base. A variável composição, devido a sua dificuldade de obtenção, é considerada uma grandeza não diretamente mensurável e sofre constantes modificações no processo quando submetida a diferentes condições de operação, Moraes JR (2011).

1.1. Análise de Sensibilidade em Processos de Destilação

A análise de sensibilidade em estado estacionário é importante para selecionar variáveis que serão estudadas e também obter dados do processo antes de ocorrer à mudança no regime dinâmico. Além disso, pode-se ainda obter informações sobre os pratos de uma coluna onde apresentam irregularidades no processo, como uma variação de temperatura ou composição não esperada.

Segundo Luyben (2013), poucas colunas de destilação usam a estrutura de controle “ideal”, ou seja, os dois graus de liberdade que estão concebidos no processo são normalmente especificados para o produto de fundo e para o produto de destilado. Logo, a estrutura "ideal" de controle iria medir as composições dos dois produtos (base e topo) e manipular duas variáveis de entrada (por exemplo, vazão de refluxo e entrada de calor refeedor) para manter os níveis desejados do componente de interesse nas duas correntes de produto.

Na literatura algumas configurações de controle são propostas para processos multivariáveis utilizando medições de temperatura, onde o controle simultâneo de uma ou duas composições ou temperaturas são denominados, respectivamente, de controle singular e/ou dual (*single/dual composition control*). A utilização de controladores PID, C_1 e C_2 , resulta em uma estrutura descentralizada (malhas múltiplas), ver Figura 1 sistema 2x2, onde m_j representam as variáveis controladas, K_{ij} os ganhos estacionários e CV_i as variáveis controladas.

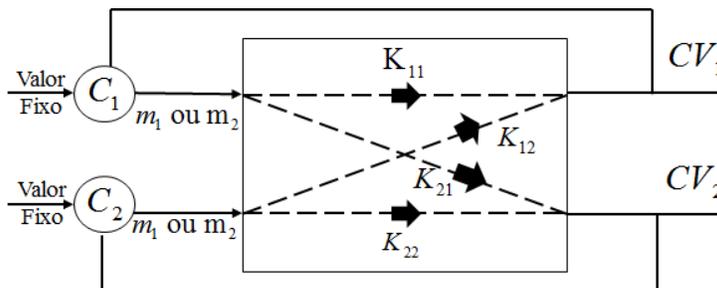


Figura 1 – Controle realimentado descentralizado multivariável (2 x 2).

Em processos multicomponentes as temperaturas dos estágios fornecem informações precisas sobre as concentrações dos componentes de interesse. Além disso, os sensores de temperatura são baratos, apresentam boa confiabilidade e um rápido tempo de resposta. Segundo Luyben (2006) e (2013), existem alguns critérios para definição de análise de sensibilidade, são eles: Método de Pratos sucessivos; Simetria de sensibilidade; Matriz de sensibilidade; Resposta à variação na composição de

alimentação; SVD da matriz de sensibilidade. Além de outros que outros, como a RGA (Matriz de Ganho Relativo); MRI (Índice de Reasiliência de Morari); CN (Número Condicional) e o NI (Índice de Niederlinski).

Este trabalho tem como objetivo realizar uma análise de sensibilidade das variáveis que afetam as temperaturas e as composições de interesse em um processo de destilação azeotrópica de alta pureza, sendo o processo simulado em regime estacionário com dados reais de uma planta industrial no software *Aspen Plus*TM. Foram utilizando os métodos da Decomposição dos Valores Singulares (SVD) e da Matriz de Ganho Relativo (RGA) com uso do software Matlab®. Os resultados obtidos nas análises indicam caminhos onde pode ser aplicado controle de temperatura/composição (*dual composition control*), ou até indicando quais variáveis serão as entradas de um analisador virtual de composição de produtos de base ou topo e possibilitando a aplicação de controle inferencial.

Matriz de Ganho Estacionário (SGA): Em um estudo quantitativo do efeito das variáveis manipuladas sobre as variáveis controladas de um sistema distribuído (as propriedades do mesmo são função da posição espacial) é necessário conhecer a SGA de sensibilidade do sistema, que por definição, é a matriz $K_{n \times m}$ dada por:

$$K_{n \times m} = \begin{bmatrix} \left. \frac{\partial PV_1}{\partial MV_1} \right|_{M, j \neq 1} & \left. \frac{\partial PV_1}{\partial MV_j} \right|_{M, j \neq j} & \left. \frac{\partial PV_1}{\partial MV_m} \right|_{M, j \neq m} \\ \left. \frac{\partial PV_2}{\partial MV_1} \right|_{M, j \neq 1} & \left. \frac{\partial PV_2}{\partial MV_j} \right|_{M, j \neq j} & \left. \frac{\partial PV_2}{\partial MV_m} \right|_{M, j \neq m} \\ \left. \frac{\partial PV_n}{\partial MV_1} \right|_{M, j \neq 1} & \left. \frac{\partial PV_n}{\partial MV_j} \right|_{M, j \neq j} & \left. \frac{\partial PV_n}{\partial MV_m} \right|_{M, j \neq m} \end{bmatrix}$$

Onde: PV_i = Variável de processo medida e/ou controlada i ; MV_j = Variável manipulada j ; e $K_{n \times m}$ = Matriz sensibilidade para as n variáveis medidas e m variáveis manipuladas.

As colunas da matriz K estabelecem como cada variável controlada/ medida sofre a influência de cada variável manipulada. A iteração entre as variáveis medidas/controladas pode ser avaliada a partir dos valores singulares da matriz sensibilidade, fornecendo o grau de acoplamento entre as variáveis do processo.

Decomposição de Valores Singulares (SVD): A SVD é um algoritmo numérico com diversas aplicações, sendo uma dessas na análise de sensibilidade de sistemas multivariáveis. Proposta por MOORE (1980), ela é baseada no teorema da álgebra linear que diz que a matriz K pode ser decomposta no produto de três matrizes, conforme a Equação (1):

$$K = U S V^T \quad (1)$$

Onde: $K_{n \times m}$ é uma matriz de sensibilidade das n PV_i pelas m MV_j ; U é uma matriz unitária, $n \times n$, ou ortonormal e suas colunas são os vetores singulares à esquerda da matriz K ; são os vetores característicos da matriz $K \cdot K^T$; V é uma matriz unitária $m \times m$, onde suas colunas são os vetores singulares à direita da matriz K ; são os vetores característicos da matriz $K^T \cdot K$; e S é uma matriz diagonal $n \times m$, caracterizada pelos valores singulares da matriz K .

Os valores singulares (σ_i), dados pela Matriz S, são organizados de forma decrescente, isto é, $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_m \geq 0$, fornecendo ganho ideal dissociado do processo em malha aberta. A razão do maior valor singular pelo o menor $\sigma_{\max}/\sigma_{\min}$ é o chamado Numero Condicional (NC) da matriz de ganho e é uma medida da dificuldade do problema do controle multivariável. Os valores singulares são dados pela Equação 2:

$$\sigma = +\sqrt{\lambda(K^T K)} \text{ com } i = 1, 2, \dots, n. \quad (2)$$

Onde λ representa o valor característico (autovalor) de K.

Matriz de Ganho Relativo (RGA): A RGA foi proposta por Bristol (1966), e considera apenas o regime estacionário das variáveis. Numa análise de sensibilidade a RGA fornece o grau de interação entre as malhas de controle de processos e qual o par mais efetivo das variáveis controladas e manipuladas. Ao contrário da SVD, a técnica RGA não é sensível às unidades dos ganhos de processo. Isso acontece por que para cada um dos ganhos de malha aberta da matriz $K_{n \times m}$ há um ganho em malha fechada, assim a matriz de ganho em malha fechada $K'_{n \times m}$ é:

$$K'_{n \times m} = \begin{bmatrix} \left. \frac{\partial PV_1}{\partial MV_1} \right|_{C,i \neq 1} & \left. \frac{\partial PV_1}{\partial MV_j} \right|_{C,i \neq 1} & \left. \frac{\partial PV_1}{\partial MV_m} \right|_{C,i \neq 1} \\ \left. \frac{\partial PV_2}{\partial MV_1} \right|_{C,i \neq 2} & \left. \frac{\partial PV_2}{\partial MV_j} \right|_{C,i \neq 2} & \left. \frac{\partial PV_2}{\partial MV_m} \right|_{C,i \neq 2} \\ \left. \frac{\partial PV_n}{\partial MV_1} \right|_{M,i \neq n} & \left. \frac{\partial PV_n}{\partial MV_j} \right|_{C,i \neq n} & \left. \frac{\partial PV_n}{\partial MV_m} \right|_{C,i \neq n} \end{bmatrix}$$

Para um sistema $n \times n$ a matriz de ganho relativo ($\Lambda_{n \times n}$) é obtida dividindo cada elemento da matriz $K_{n \times m}$ por $K'_{n \times m}$, ou seja, o respectivo ganho em malha aberta pelo respectivo ganho em malha fechada, onde num sistema genérico $n \times n$ o ganho relativo é dado pela Equação 3:

$$\Lambda_{ij} = \frac{\left. \frac{\partial PV_i}{\partial MV_j} \right|_{MV_k, k \neq j}}{\left. \frac{\partial PV_i}{\partial MV_j} \right|_{PV_k, k \neq i}} \quad (3)$$

Num sistema $n \times n$, Bristol (1966) propôs encontrar os ganhos relativos com base na equação matricial. O 1º passo é encontrar a matriz $B = (K_{n \times m}^{-1})^T$ e logo em seguida multiplicar cada elemento da matriz resultante B por cada termo da matriz original, $\Lambda_{ij} = (K_{n \times m}^{-1})^T \cdot K_{n \times m}$.

2. PROCESSO DE DESTILAÇÃO DO 1,2 DICLOROETANO

O processo de destilação azeotrópica da etapa de secagem do 1,2-Dicloroetano (1,2-EDC), Figura 2, mostrou-se interessante para o presente estudo, uma vez que apresenta dificuldades na obtenção e nos teores dos compostos tetracloroeto de carbono (mantido em torno de 3000 ppm) e clorofórmio (mantido abaixo de 400 ppm) na base da coluna, $X_{CCl_4(B)}$ e $X_{CHCl_3(B)}$ respectivamente.

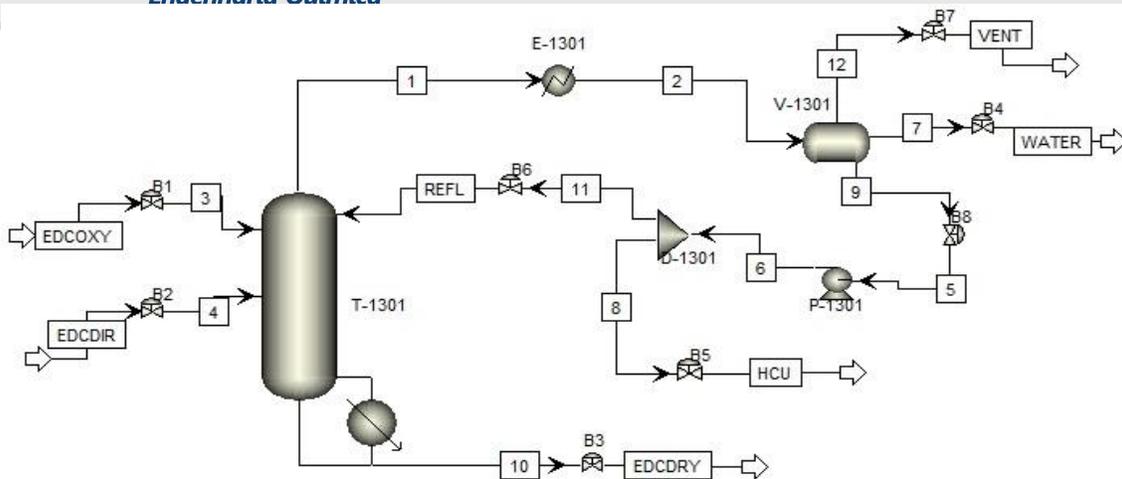


Figura 2 – Fluxograma da coluna de purificação do 1,2-EDC implementado no Aspen Plus™.

Antes de ser convertido no Monômero Cloreto de Vinila, no craqueamento térmico, o 1,2-EDC deve estar “seco” (teor de água < 10 ppm) e ter uma alta pureza (maior < 99,5 % peso/peso). Assim, as correntes que são provenientes de duas rotas de fabricação Do 1,2-EDC, cloração direta (EDC-DIR) e oxicloração (EDC-OXY), passam pelo processo de purificação realizada em um conjunto de três colunas de destilação. O estudo é concentrado apenas na 1ª coluna de destilação, Figura 2, onde os teores dos compostos devem atender suas especificações na base dessa coluna (EDCDRY).

2. MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO PROCESSO

Embora o estado dinâmico seja fundamental na aplicação de controle, é no regime estacionário onde a análise de sensibilidade se faz presente, nos dando informações sobre o sistema (Seader et al, 2011). Por isso a modelagem utilizada neste trabalho foi o modelo teórico dos estágios de equilíbrio em regime estacionário, onde foram utilizadas as Equações MESH (Balanço de Massa, Equilíbrio, Somatório de frações molares e Energia).

A coluna possui um total 72 estágios, incluindo o condensador e o refeedor, duas alimentações, onde o EDC-OXY é alimentado no estágio 32 e o EDC-DIR é alimentado no estágio 54. As simulações foram realizadas com o simulador Aspen Plus™, utilizando a rotina RadFra™ implementada, assumindo em cada estágio o equilíbrio entre as fases é estabelecido. Foi utilizada uma eficiência de Murphree igual a 70 % para todos os pratos, exceto no refeedor e condensador, onde, a eficiência foi fixada em 100 %. O ELV e o ELLV foram simulados, o método o modelo NRTL foi utilizado no cálculo do coeficiente de atividade da fase líquida (γ) e as correlações de Hayden-O'Connell para o calculo do coeficiente de fugacidade da fase vapor. Foram especificadas as variáveis: carga térmica do Refeedor e vazão de destilado (HCU). Foram utilizados dados reais de uma planta industrial para simulação do processo, Tabelas 1 e 2.

Tabela 1- Correntes de alimentação externa.

| Condições de Alimentação | EDCOXY | EDC-DIR |
|------------------------------|--------|---------|
| Temperatura (°C) | 30 | 45 |
| Vazão (kg/h) | 21000 | 24750 |
| Pressão alimentação (Kg/cm2) | 6 | 7 |

Tabela 2- Condições de operação.

| Condições Operacionais da Coluna | |
|----------------------------------|------|
| Carga do refeedor (Gcal/h) | 2,57 |
| Pressão no topo (Kg/cm2) | 1,03 |
| Pressão na base (Kg/cm2) | 1,6 |
| Vazão de retirada de leves (HCU) | 40 |

A alimentação dessa coluna, feita em dois pontos, é composta por 98-99,8% (alta pureza) de 1,2-EDC saturado em água, CCl_4 e CHCl_3 , além de outras substâncias orgânicas cloradas, num total de 18 componentes. Água forma azeótropos de mínimo com quase todos os componentes chave, principalmente com o 1,2-EDC, o CHCl_3 e o CCl_4 . Os gráficos das Figuras 3 e 4 foram gerados no software *Aspen Plus*TM, representam os azeótropos de mínimo formados com os componentes citados acima.

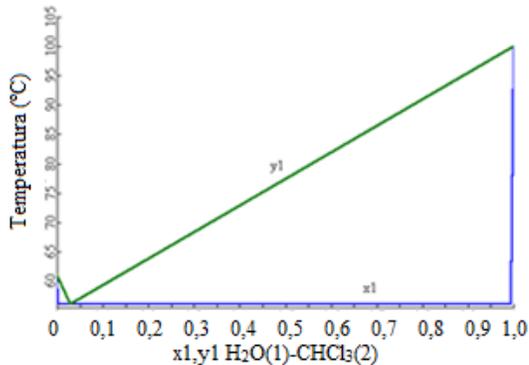


Figura 3 – Diagrama T-xy para $\text{H}_2\text{O}-\text{CHCl}_3$.

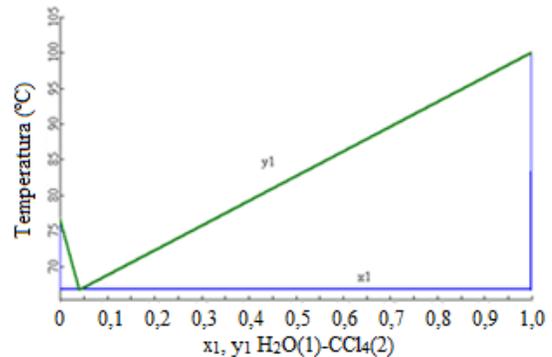


Figura 4 – T-xy para $\text{H}_2\text{O}-\text{CCl}_4$.

4. RESULTADOS

O processo foi simulado em regime estacionário no software *Aspen Plus*TM com os dados reais, conforme as Tabelas 1, 2 e 3. Os perfis de concentração para os quatro principais componentes e de temperaturas nos estágios da coluna são mostrados nas Figuras 5 e 6, respectivamente.

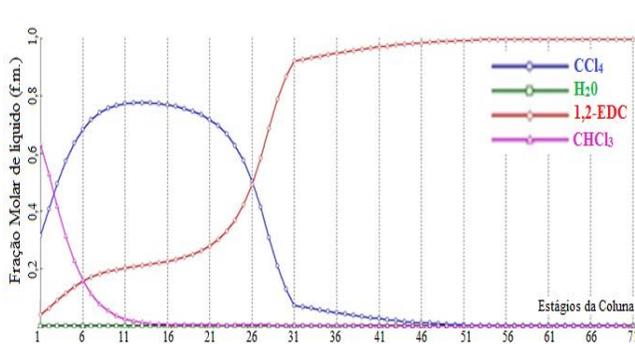


Figura 5 – Perfis de concentração dos compostos.

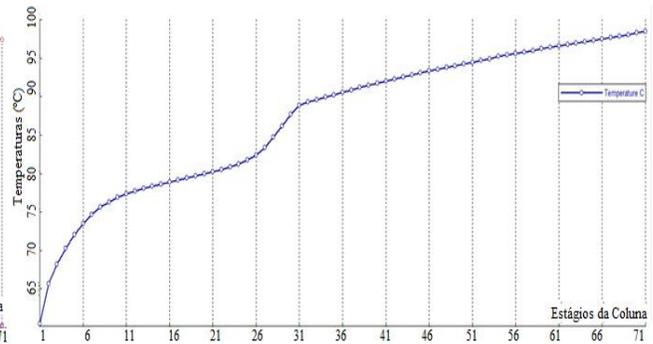


Figura 6 - Perfis de temperaturas.

Foram avaliadas as variáveis manipuladas vazão de destilado (D), carga térmica (Q) e vazão de refluxo (R) com relação às controladas X_{CCl_4} e X_{CHCl_3} , e temperaturas dos estágios. Caso 1: foi introduzido uma perturbação em Q mantendo D constante, logo em seguida perturbou-se D mantendo Q contante, ambas perturbações de graus de +10%. Caso 2: foram avaliadas os pares R e Q, com relação às controladas X_{CCl_4} e de X_{CHCl_3} , e temperaturas dos estágios. Inicialmente foi introduzido uma perturbação em R mantendo Q constante, logo em seguida perturbou-se Q mantendo R contante, ambas perturbações de graus de +10%.

Em seguida comparando ao caso base, simulações com os dados originais, e obtemos 6 matrizes SGA. O gráfico da Figura 7 representa a matriz de sensibilidade U da SVD dos pares de variáveis Q e D, com relação a temperatura.

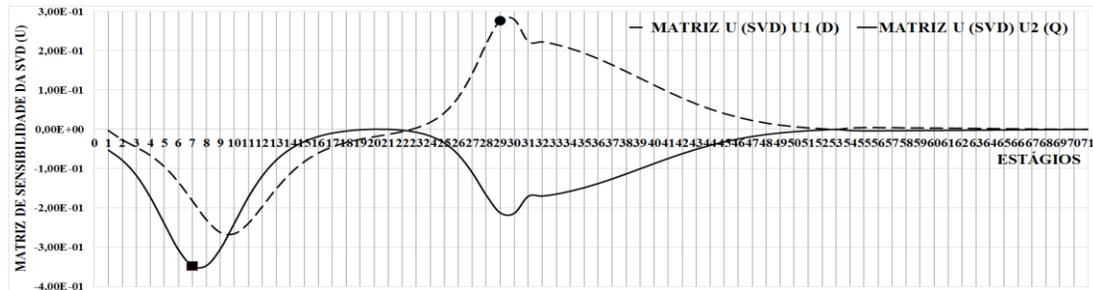


Figura 7-Matriz de sensibilidade da SVD, pares Q-D frente as temperaturas dos estágios.

A Figura 7 apresenta os resultados obtidos com a SVD das temperaturas dos estágios e indica que, no caso de um controle singular, o estágio 7 pode ser controlado pela carga do refeedor, enquanto o estágio 29 pode ser controlado pela vazão de destilado. Já num controle dual, o delta de temperatura dos estágios 7 e 8, manipulando D, poderia ser utilizado para controlar as composições dos composto de interesse no topo da coluna, enquanto o delta de temperatura entre os estágios 29 e 30, manipulando-se Q, seria utilizado para controlar as composições de base. Os resultados com os pares Q-D são recomendados, haja vista que apresentam uma maior sensibilidade, avaliada também pelo Número Condicional, $NC = 4,4046$, quando comparado com o outro par combinados R-Q, $NC = 141,54$.

Essa afirmação de se utilizar Q e D para manipular X_{CCl4} e X_{CHCl3} na base da coluna (B = EDCDRY), deve agora ser avaliada pela matriz de ganho relativo, assim definindo, também, quais os pares de variáveis manipuladas mais efetivos para controle. As matrizes foram calculadas, no software Matlab®, combinando os pares Q- D e frente perturbações de graus de +10% em ambas, de forma individual, com as variáveis controladas na base $X_{CCl4(B)}$ e $X_{CHCl3(B)}$, formando 4 pares X_{CCl4-Q} , X_{CCl4-D} , $X_{CHCl3-Q}$ e $X_{CHCl3-D}$, sistema 2 x 2. Abaixo são mostradas as matriz SGA e RGA:

$$K = \begin{bmatrix} \left. \frac{\partial x_{CCl4}(B)T_1}{\partial D} \right|_Q & \left. \frac{\partial x_{CCl4}(B)}{\partial Q} \right|_D \\ \left. \frac{\partial x_{CHCl3}(B)}{\partial D} \right|_Q & \left. \frac{\partial x_{CHCl3}(B)}{\partial Q} \right|_D \end{bmatrix} \quad K = \begin{bmatrix} -0,0000922 & -0,00001662 \\ -0,0001323 & -0,0000044035 \end{bmatrix} \quad \Lambda = \begin{bmatrix} -0,2333 & 1,2333 \\ 1,2333 & -0,2333 \end{bmatrix}$$

Os resultados indicam o emparelhamento PV_1-MV_1 e PV_2-MV_2 , X_{CCl4-D} e $X_{CHCl3-Q}$, de ganhos relativos $\Lambda_{11} = \Lambda_{22} = -0,2333 = \frac{2333}{-10000} = \frac{1}{-4,2863}$, implicam que o ganho da malha muda de sinal num fator de 4,2864 quando a outra malha está fechada. Este emparelhamento não é adequado, haja vista que a ação do controlador depende que a outra malha esteja aberta ou fechada.

Já o emparelhamento, PV_1-MV_2 e PV_2-MV_1 , de ganhos relativos $\Lambda_{12} = \Lambda_{21} = 1,2333 = \frac{12333}{10000} = \frac{1}{0,81}$, implica num aumento de ganho de 1,25 quando a outra malha está fechada. Obviamente, esse

emparelhamento de variáveis, X_{CCl_4} -Q e X_{CH_3} -D resulta em menos sensibilidade à interação do que o outro. Logo, por este critério a carga do Refervedor (Q) deve ser utilizada para controlar a composição de Tetracloreto de Carbono ($X_{CCl_4(B)}$), e a vazão de destilado (D) deve ser utilizada para controlar a concentração de Clorofórmio ($X_{CH_3(B)}$), ambas na base da coluna.

5. CONCLUSÕES

Neste trabalho foi realizada uma análise de sensibilidade das variáveis que afetam as variáveis controladas, temperaturas e as composições de interesse, em um processo de destilação azeotrópica de alta pureza. Os dados em regime estacionário foram gerados pelo simulador *Aspen Plus*TM e as técnicas, de Decomposição dos Valores Singulares (SVD) e da Matriz de Ganho Relativo (RGA), forma implementadas no software Matlab@_R2013^a.

Os resultados obtidos com os pares de variáveis carga do refervedor e vazão de destilado (Q-D), escolhidos por apresentarem um melhor Número Condicional, $NC = 4,4046$, mediante critério SVD das temperaturas dos estágios, indicam que no caso de um controle singular, o estágio 7 da coluna pode ser controlado por Q, enquanto o estágio 29 pode ser controlado por D. Já num controle dual, o delta de temperatura dos estágios 29 e 30, manipulando-se Q, seria utilizado para controlar as composições de base. Além disso, as temperaturas entre os estágios 23-50 poderiam ser selecionadas para compor um modelo de inferência de composição dos produtos de base, por exemplo, as 5 temperaturas mais sensíveis poderiam entradas de um analisador virtual de composição ou para implementação de um controlador inferencial, conforme Morais JR (2011). Além disso, o critério RGA indicou bons resultados de controle multivariável, indicando os pares mais efetivos de PV_i - MV_j .

6. REFERÊNCIAS

- BRISTOL, E. H., "On a New Measure of Interaction for Multivariable Process Control," IEEE Transactions on Automatic Control, pp. 133-134, January, 1966.
- KALID, R. A.. Apostila: Controle de Coluna de Destilação. LACOI – Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal da Bahia – UFBA, 2007.
- LUYBEN, W. L. Distillation Design and Control Usign Aspen Simulation. New Jersey. Ed: John Wiley & Sons, 1st and 2nd, 2006 e 2011.
- MOORE, CHARLIE. Application of Singular Value Decomposition to the Design, Analysis, and Control of Industrial Processes. Proc. Am. Control Conf...643, 1980.
- SEADER, J.D.; HENLEY, E.J. and ROPER, D. K., Separation Process Principles, 3rd Ed. John Wiley & Sons, New York, 2011.
- MORAIS JR, A. A. Elaboração de um Analisador Virtual Utilizando Sistema Híbrido Neuro-Fuzzy para Inferenciar a Composição em um Processo de Destilação. dissertação de mestrado, Universidade Federal de Alagoas, 2011.
- SEADER, J.D.; HENLEY, E.J. and ROPER, D. K., Separation Process Principles, 3rd Ed. John Wiley & Sons, New York, 2011.