

UM SISTEMA INTELIGENTE DE SEGURANÇA DE PROCESSOS QUÍMICOS

R. M. SOARES, A. R. SECCHI e J. C. PINTO

Universidade Federal do Rio de Janeiro, Programa de Engenharia Química / COPPE

E-mail para contato: rsoares@peq.coppe.ufrj.br

RESUMO – Os sistemas de segurança convencionais são projetados para mitigar incidentes; isto é, têm por objetivo reduzir o impacto de falhas através de válvulas de alívio, discos de ruptura e, em muitos casos, provocam um desligamento de emergência, o chamado *shutdown*. O projeto desses sistemas baseia-se na probabilidade de ocorrência das falhas e na severidade do acidente consequente. Todavia, esta base é obtida empiricamente, deixando o sistema de segurança vulnerável a não linearidades do processo. Para garantir a segurança, as ações de controle são conservadoras, de modo que pequenos desvios aos *setpoints* podem levar ao *shutdown* da unidade, gerando um grande prejuízo econômico. A proposta deste trabalho é simular periodicamente o comportamento do reator diante de falhas em diversos componentes e, a partir desta resposta, determinar o risco ao qual o sistema está submetido. Dependendo deste potencial, ações preventivas de segurança podem ser tomadas para garantir a segurança e a integridade do reator, evitando, assim, um possível *shutdown*. Estas ações são calculadas de modo a perturbar a planta o mínimo possível, a fim de reduzir o impacto na qualidade do produto, mas manter o processo em operação. O objetivo é aumentar o tempo de operação anual da planta sem comprometer a segurança do processo e a qualidade do produto. Os resultados mostram que a proposta é viável para aplicação em tempo real e, com um modelo confiável, é possível evitar *shutdowns* desnecessários.

1. INTRODUÇÃO

Apesar de a indústria química funcionar em grande escala há dezenas de décadas, somente nas duas últimas o tema segurança ganhou a atenção que merece. Vários acidentes marcaram a história da indústria química, como Chernobyl, Bhopal, Seveso e Sandoz. Lições importantes foram aprendidas com estas tragédias e, dentre elas, destaca-se o conhecimento profundo do processo químico envolvido.

Na síntese de um novo processo, mesmo após os testes em escala piloto, o *scale-up* para a escala industrial pode trazer sérias modificações no comportamento dinâmico do sistema. Além destas mudanças, a estrutura de controle pode alterar a estabilidade do sistema em diversos pontos de operação. Neste caso, o uso de modelos matemáticos torna-se indispensável para uma análise dinâmica confiável.

Com o rápido avanço da computação nos últimos anos, o uso de modelos fenomenológicos rigorosos torna-se cada vez mais viável (Manenti, 2011). Sua penetração no meio industrial, no entanto, ainda é tímida. Nos sistemas de segurança não é diferente. Apesar do ganho evidente que modelos matemáticos não lineares podem trazer em relação à confiabilidade das análises, sua aplicação ainda esbarra nas dificuldades de implementação e hesitação da indústria em substituir os tradicionais modelos lineares. Na área de segurança de processos o cenário é ainda mais árido, visto que, tradicionalmente, as análises são baseadas no conhecimento empírico do processo. Em casos esporádicos, utilizam-se modelos qualitativos, que ainda assim estão bastante defasados em relação às propostas encontradas na literatura científica, que já sugerem a utilização de modelos e técnicas mais precisas (Venkatasubramanian *et al.*, 2003).

Além das dificuldades enfrentadas durante o projeto dos sistemas de segurança, novos obstáculos surgem durante a operação industrial. Detectar a origem de eventos indesejados pode ser uma tarefa bastante complexa; porém, uma vez encontrada, pode ser decisiva para determinar a forma de atuação do sistema de segurança (Venkatasubramanian *et al.*, 2003). Outro ponto importante é que muitas decisões que envolvem situações de risco são tomadas pelos operadores, cuja subjetividade reduz consideravelmente a confiabilidade do sistema de segurança. Tudo isso faz com que estes sistemas sejam projetados e operados de maneira conservadora, sob tolerâncias estreitas nos desvios aos *setpoints* e recorrendo muitas vezes ao *shutdown* de emergência como forma de garantir a segurança (Luyben, 2012). Estas ações, contudo, levam a consideráveis perdas de produção e, conseqüentemente, perdas financeiras, uma vez que a planta pode ficar ociosa por dias até que esteja preparada para o novo *startup*.

Este trabalho se concentra na operação industrial, colocando o *shutdown* de emergência como última alternativa em situações de risco à integridade do sistema. Antes dele, é proposta uma etapa de análise dinâmica do sistema, em que se procura uma condição de operação segura para a qual o sistema pode ser deslocado, evitando o *shutdown* e perturbando o sistema o mínimo possível. O objetivo é aumentar o tempo que a planta permanece ativa durante o ano, reduzindo perdas por ociosidade. A estratégia proposta neste trabalho não se opõe às técnicas já utilizadas em segurança de processos. Em outras palavras, constitui uma nova camada de segurança que pode operar em sintonia com as camadas tradicionais.

2. METODOLOGIA

O sistema em estudo consiste em um reator tanque agitado com camisa alimentado por três correntes independentes de entrada (monômero, solvente e catalisador) e com uma corrente de saída que, além de todos os componentes da entrada, carrega ainda o polímero formado na reação química. A reação química considerada é do tipo $A \rightarrow B$ e simula uma polimerização em suspensão, em que o monômero reage para formar polímero na presença de um solvente. Monômero, solvente, polímero e catalisador estão na fase líquida. O modelo matemático deste sistema é composto por cinco equações diferenciais, sendo uma referente ao balanço de energia (Equação 5) e as demais referentes aos balanços de monômero, polímero, solvente e catalisador (Equações 1 - 4 respectivamente).

$$\frac{dM_{Mon}}{dt} = F_{in}^{Mon} - F_{out}^{Mon} - r \quad (1)$$

$$\frac{dM_{Pol}}{dt} = -F_{out}^{Pol} + r \quad (2)$$

$$\frac{dM_{Sol}}{dt} = F_{in}^{Sol} - F_{out}^{Sol} \quad (3)$$

$$\frac{dM_{Cat}}{dt} = F_{in}^{Cat} - F_{out}^{Cat} \quad (4)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_{in} \cdot T_{in}}{M_t} - \frac{F_{out} \cdot T}{M_t} + \frac{\Delta H_r \cdot r}{M_t \cdot C_p} + \kappa_c (T_c - T) \quad (5)$$

$$k = \frac{k_0 \cdot M_t^2}{V} \quad (6)$$

$$r = x_{Mon} \cdot x_{Cat} \cdot k \cdot \exp\left(\frac{-E_a}{R \cdot T}\right) \quad (7)$$

$$M_t = M_{Mon} + M_{Pol} + M_{Sol} + M_{Cat} \quad (8)$$

$$\kappa_c = \frac{UA}{M_t \cdot C_p} \quad (9)$$

$$F_{in} = F_{in}^{Mon} + F_{in}^{Sol} + F_{in}^{Cat} \quad (10)$$

$$F_{out} = F_{in} \quad (11)$$

$$F_{out}^i = F_{out} \cdot x_i, \quad i = [Mon, Pol, Sol, Cat] \quad (12)$$

$$x_i = \frac{M_i}{M_t}, \quad i = [Mon, Pol, Sol, Cat] \quad (13)$$

Onde F é vazão em mol/h, M é quantidade de matéria em mol, r é a taxa da reação química em mol/h, T é temperatura em K e x é fração molar. O subíndice *in* é entrada, *out* é saída, *c* é camisa, *t* é total e *Mon*, *Pol*, *Sol* e *Cat* são monômero, polímero, solvente e catalisador, respectivamente. O parâmetro k_0 é o fator pré-exponencial de Arrhenius, V é o volume da mistura reacional, k é constante cinética equivalente, E_a é a energia de ativação, R é a constante universal dos gases, ΔH_r é a entalpia de reação, C_p é a capacidade calorífica da mistura reacional, UA é o coeficiente global de troca térmica e κ_c é a constante de troca térmica equivalente da camisa. Os parâmetros do modelo (Tabela 1) foram ajustados empiricamente de modo a representar uma dinâmica típica de um reator do tipo

tanque. Este modelo matemático foi utilizado como planta virtual e como modelo do controlador durante as simulações.

A estratégia de controle adotada neste trabalho é conhecida como Controle Preditivo Não Linear (NMPC – *Nonlinear Model Predictive Control*), uma estratégia de controle avançado baseado em modelo não linear. Este controlador surgiu a partir do conceito do *Model Predictive Control* (MPC), idealizado na década de 60, e consiste basicamente em um problema de otimização dinâmica com múltiplos objetivos e restrições. O NMPC vem ganhando destaque na indústria nos últimos anos, especialmente, por causa de três características (Manenti, 2011): (i) é capaz de lidar com não linearidades econômicas e na dinâmica do processo; (ii) pode se basear em modelos matemáticos fenomenológicos ou modelo não lineares semi-empíricos; (iii) é capaz de resolver, simultaneamente, o problema de controle e o problema de otimização dinâmica em tempo real (problema econômico), satisfazendo restrições para as variáveis de estado e para as variáveis manipuladas.

Tabela 1 – Parâmetros do modelo

Parâmetros	Valores	Unidades
k	$5,0 \cdot 10^7$	mol/h
E_a	$1,0 \cdot 10^4$	J/mol
R	8,32	J/mol.K
T_{in}	350,0	K
ΔH_r	$2,5 \cdot 10^4$	J/mol
C_p	125,6	J/mol.K

O controlador foi programado para assumir configurações distintas dependendo da avaliação do risco ao qual o processo está sujeito. Em condições normais de operação (operação segura) o controlador assume a configuração SISO (*Single Input Single Output*), onde a variável manipulada é a temperatura da camisa e a variável controlada é a temperatura do reator. Quando o algoritmo de segurança detecta uma situação adversa (operação insegura), novos *setpoints* são calculados e, para atingi-los, o controlador é reconfigurado como MIMO (*Multiple Input Multiple Output*). Neste caso, as variáveis manipuladas são: temperatura da camisa, vazão de monômero, vazão de catalisador e vazão de solvente. Já as variáveis controladas são: temperatura do reator, quantidade de monômero no reator, quantidade de catalisador no reator e quantidade de solvente no reator. Devido à reação química, monômero e polímero não podem ser controlados simultaneamente. Apenas um deles pode ser controlado, enquanto o outro tem seu comportamento vinculado à reação química. Vale ressaltar que o controlador MIMO é mantido até que o *setpoint* de segurança seja atingido. Após a convergência, a configuração retorna para SISO, pois o algoritmo garante que esta configuração é capaz de manter o sistema em segurança.

Em grande parte dos processos químicos ocorrem mudanças nos parâmetros ao longo da operação. Para que o modelo do controlador continue capaz de representar o sistema, este trabalho utiliza um algoritmo de reconciliação de dados e estimação de parâmetros simultâneos em tempo real com janela móvel. O problema de reconciliação pode ser definido, de maneira geral, como um problema de otimização cujo objetivo é aproximar a resposta do modelo matemático dos pontos medidos na planta. As vazões de alimentação, a vazão de saída e a temperatura da camisa são

consideradas medidas sem ruído e alimentam o modelo de predição; ou seja, não compõem a função objetivo do reconciliador. Apenas a medida da temperatura do reator compõe a função objetivo do reconciliador, por isso, foi corrompida com ruído normal de média zero e desvio padrão 0,2. Os outros estados são estimados juntamente com o parâmetro κ_c . O modelo do controlador é atualizado a cada instante de amostragem com as novas estimativas do reconciliador, possibilitando a adaptação do controlador às mudanças do processo (Souza *et al.*, 2011).

O sistema inteligente de segurança tem por objetivo testar a capacidade real de reação do controlador frente a falhas críticas e tomar medidas de segurança antecipadas em caso de risco. O risco, neste caso, se refere a uma possível violação dos limites de segurança do processo como consequência de um eventual comportamento indesejado. Tem-se, portanto, duas etapas: uma para avaliar o risco e outra para determinar a medida de segurança. A primeira consiste na simulação dinâmica do processo frente a uma falha. Caso alguma variável controlada viole um limite de segurança, a operação é considerada insegura e novos *setpoints* devem ser calculados. Se não for encontrado um estado seguro de operação, a única alternativa em caso de falha seria o *shutdown* de emergência. O sistema integrado de controle, reconciliação e segurança é esquematizado na Figura 1. A metodologia proposta por este trabalho para calcular esses *setpoints* consiste em resolver o problema de otimização descrito a seguir:

$$\min_u (\mathbf{x}_0(k) - \mathbf{x}(k+P))^T \mathbf{X} (\mathbf{x}_0(k) - \mathbf{x}(k+P)) \quad (14)$$

$$\text{Sujeito a:} \quad (15)$$

$$\mathbf{x}(i+1) = f(\mathbf{x}(i), \mathbf{u}(i)) \quad i = k, \dots, k+P-1 \quad (16)$$

$$\mathbf{x}(k) = \mathbf{x}_0(k) \quad (17)$$

$$\tilde{\mathbf{x}}(j+1) = f(\mathbf{x}(j), \mathbf{u}(j), \omega) \quad j = k+P, \dots, k+P+H-1 \quad (18)$$

$$\tilde{\mathbf{x}}(k+P) = \mathbf{x}(k+P) \quad (19)$$

$$\tilde{\mathbf{x}}(k+P+H) - \tilde{\mathbf{x}}(k+P+H-1) < tol \quad (20)$$

$$\tilde{\mathbf{x}}(j+1) < \mathbf{x}^{max} \quad (21)$$

$$|\mathbf{x}(k+P) - \mathbf{x}(k+P-1)| < tol \quad (22)$$

A partir do estado $\mathbf{x}_0(k)$, que é o estado atual da planta (Equação 17), variando \mathbf{u} , deve-se encontrar um estado estacionário $\tilde{\mathbf{x}}(k+P)$ (Equações 19 e 22) a partir do qual a trajetória dinâmica de uma situação de falha (Equação 18) não ultrapasse os limites de segurança estabelecidos (Equação 21) e que, ao final do tempo de predição, não seja crescente (Equação 20) – caso contrário, após o tempo de predição, poderia violar os limites de segurança. O estado $\tilde{\mathbf{x}}(k+P)$ deve ser estacionário (Equação 22) porque na troca do controlador de SISO para MIMO, as ações de controle $\mathbf{u}(k+P)$

serão repetidas e somente T_c será manipulada, assim, se $\tilde{x}(k + P)$ for um ponto de uma trajetória dinâmica, não há garantias de que o limite de segurança seja obedecido.

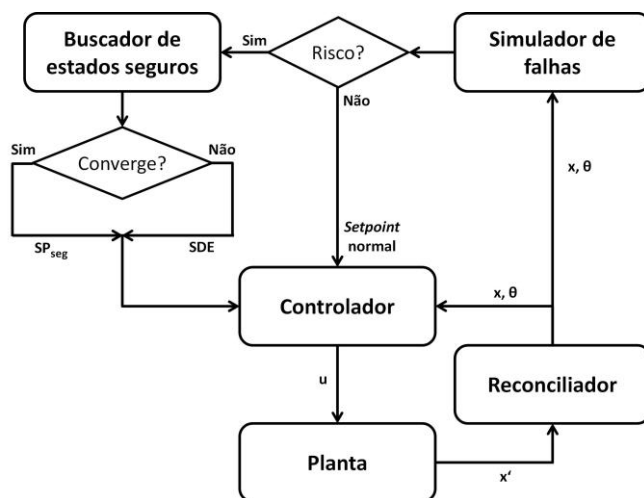


Figura 1 – Estrutura do sistema proposto.
SDE: *Shutdown* de Emergência. SP_{seg} : *Setpoint* Seguro

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Com o objetivo de testar a eficiência do algoritmo de segurança proposto neste trabalho foi considerado um cenário no qual ocorre um evento indesejado, neste caso, a perda da capacidade de refrigeração do reator. O limite de segurança arbitrado na simulação foi referente à temperatura do reator, que deve atingir, no máximo, o valor de 385 K. A perda da capacidade de refrigeração é simulada através da variação do parâmetro κ_c . Este tipo de evento é bastante comum durante a operação de reatores com camisa. Diversas falhas podem provocar uma diminuição da capacidade de troca térmica entre camisa e reator, por exemplo, falha na bomba de alimentação de fluido, falha na agitação do reator, aumento da viscosidade da mistura reacional (efeito gel) e incrustação.

O desempenho do sistema de segurança para uma queda abrupta de κ_c de 1 para 0,1 é mostrado na Figura 2. Tal evento seria capaz de elevar a temperatura do reator a 392 K, valor que representa risco à segurança do processo. Para $t \leq 1$ h o sistema opera normalmente na configuração SISO. No instante 1 h, é realizada uma simulação da falha em questão, cuja trajetória é definida pelos xis cinzas da Figura 2. Uma violação do limite de segurança é observada na Figura 2a e, imediatamente, o buscador de estados seguros é ativado. O estado seguro encontrado é mostrado na Tabela 2, em que se nota uma boa proximidade entre as variáveis, resultado do esquema de otimização proposto. A trajetória dinâmica predita pelo algoritmo para a mesma falha, tendo o estado seguro como condição inicial, é caracterizada por diamantes cinzas a partir do tempo de 4 h. Esta trajetória foi calculada no instante 1 h, mas, para facilitar a comparação com a trajetória real da planta, foi deslocada graficamente para o instante 4 h. Encontrado o estado seguro, o controlador é reconfigurado para o modo MIMO a fim de perseguir o novo *setpoint*. Esta configuração permanece

ativa no intervalo $1 \text{ h} < t \leq 4 \text{ h}$. Embora não sejam mostrados, os outros estados seguem perfeitamente para seus novos *setpoints*. No instante 4 h, o controlador volta para configuração SISO e a falha simulada pelo sistema de segurança é efetivamente aplicada na planta, com o objetivo de testar a eficácia do algoritmo. Como pode ser observado na Figura 2a, a temperatura final do reator se mantém em torno do limite de segurança e a trajetória real da planta é semelhante à trajetória predita pelo algoritmo.

Tabela 2 – Comparação entre os *setpoints* inicial e calculado pelo sistema de segurança

Estados	Inicial	Seguro
M_{Mon}	36,2	50.21
M_{Pol}	77,2	62.05
M_{Sol}	200,0	201.20
M_{Cat}	0,10	0.09
T	380,0	380.16

A Figura 2b mostra o parâmetro estimado κ_c . Os pontos pretos são os valores estimados durante a operação. Os xis cinzas, que partem de 1 h, são resultantes da simulação de falhas que, além de considerar o comportamento do controlador, também considera o comportamento do sistema de reconciliação, através da adição de um ruído à temperatura simulada. Os diamantes cinzas, no intervalo $t > 4 \text{ h}$, são os valores de κ_c utilizados na predição da trajetória do sistema, representada pelo mesmo símbolo na Figura 2a.

Para este caso, portanto, o sistema inteligente de segurança foi capaz de reverter uma falha que elevaria a temperatura do reator a cerca de 392 K, bem acima do limite segurança, e que ativaria o *shutdown* de emergência e, conseqüentemente, causaria um enorme prejuízo econômico. O sistema passou a operar com uma conversão mais baixa, mas com aumento de produção, mostrando que as perdas causadas pela ação preventiva de segurança são relativas. As trajetórias das ações de controle são mostradas na Figura 3.

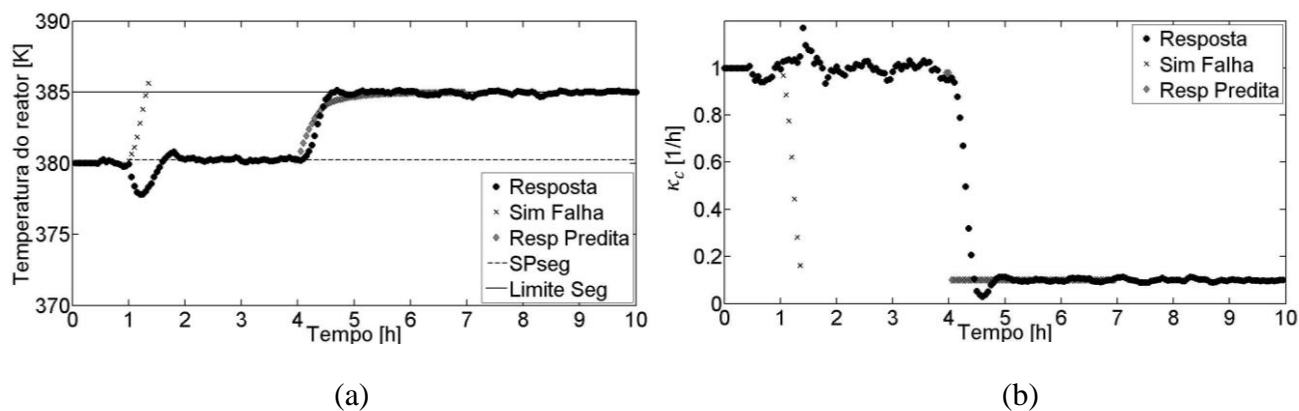


Figura 2 – O desempenho do sistema de segurança (a) para uma queda abrupta do κ_c (b).

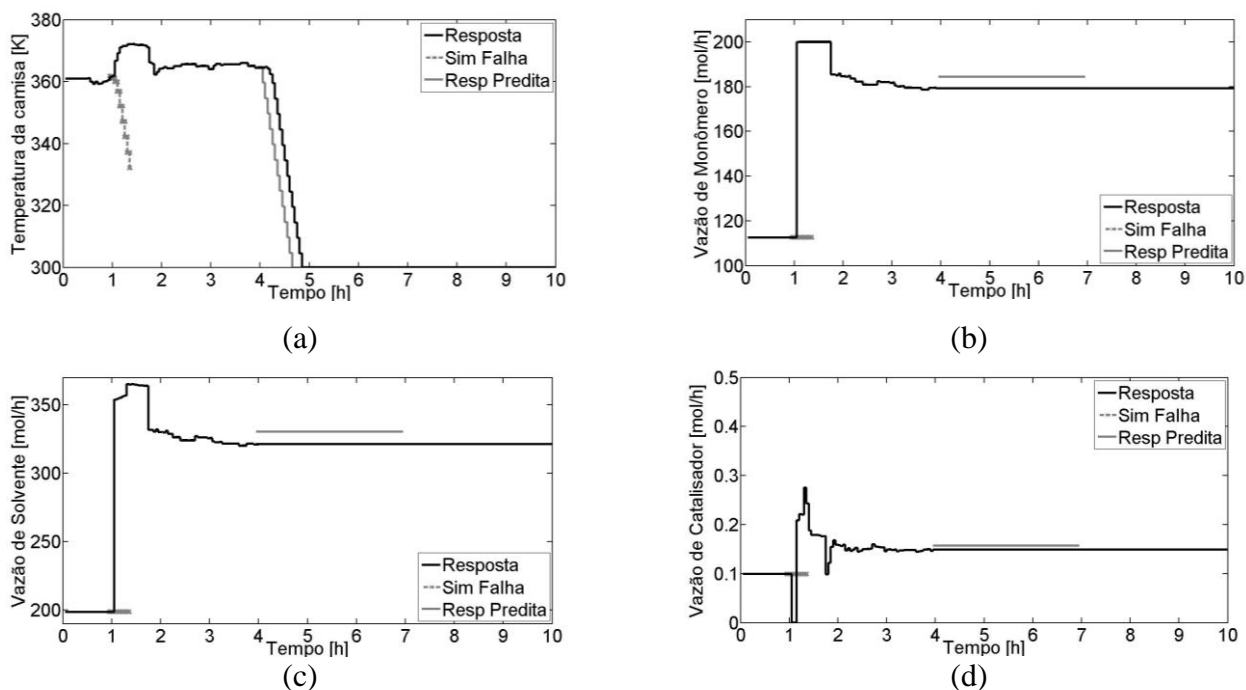


Figura 3 – Trajetórias das variáveis manipuladas.

4. CONCLUSÕES

Este trabalho propõe uma nova camada de segurança, deixando o *shutdown* de emergência como última alternativa. O objetivo é evitar desligamentos desnecessários e aumentar o tempo de operação anual da planta. E os resultados mostraram que o algoritmo proposto pode ser viável se houver um modelo confiável do processo. Para o caso apresentado, de perda da capacidade de refrigeração, o algoritmo se mostrou eficaz, sendo capaz de prevenir uma violação do limite de segurança que possivelmente provocaria um *shutdown*, evitando, consequentemente, perdas econômicas.

5. REFERÊNCIAS

- LUYBEN, W. L. Use of dynamic simulation for reactor safety analysis. *Comput. Chem. Eng.*, v. 40, p. 97-109, 2012.
- MANENTI, F. Considerations on nonlinear model predictive control techniques. *Comput. Chem. Eng.*, v. 35, p. 2491-2509, 2011.
- SOUZA, P. M.; SOARES, M.; AMARAL, M. M.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. Data reconciliation and control in styrene-butadiene emulsion polymerizations. *Macromol. Symp.*, v. 302, p. 80-89, 2011.
- VENKATASUBRAMANIAN, V.; RENGASWAMY, R.; YIN, K. A review of process fault detection and diagnosis Part I: Quantitative model-based methods. *Comput. Chem. Eng.*, v. 27, p. 293-311, 2003.