

# IDENTIFICAÇÃO DE SISTEMA E CONTROLE EM UMA UNIDADE DE COMPRESSÃO DE CLORO

S. K. S. CARMO<sup>1</sup>, L. G. S. VASCONCELOS<sup>2</sup>, M. da S. A. EMERENCIANO<sup>3</sup>

<sup>1,2,3</sup> Universidade Federal de Campina Grande, Unidade Acadêmica de Engenharia Química

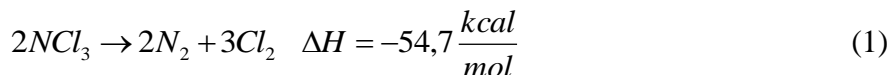
<sup>1</sup> Universidade Federal Rural do Semi-Árido

E-mail para contato: [shirlene\\_kelly@yahoo.com.br](mailto:shirlene_kelly@yahoo.com.br) / [shirlene@ufersa.edu.br](mailto:shirlene@ufersa.edu.br)

**RESUMO** – Em todo o mundo, indústrias químicas e petroquímicas têm se envolvido em acidentes cujos reflexos econômicos, humanos e ambientais muitas vezes ultrapassam os limites de suas instalações, devido à presença de impurezas. Na produção de  $\text{Cl}_2$  (cloro), à presença da amônia ( $\text{NH}_3$ ) no sal, dá origem a Tricloroamina ( $\text{NCl}_3$ ), que é um composto extremamente instável e explosivo em determinadas condições de operação. Neste trabalho foi realizada a Identificação do Sistema na planta de  $\text{Cl}_2$ , assim como, proposta uma estratégia de controle, no Simulink/Matlab. O fluxograma do processo utilizado foi desenvolvido no *Aspen Dynamics*. Sinais de excitação do tipo degrau e PRBS foram aplicados na vazão de  $\text{Cl}_2$  gás, na vazão de  $\text{Cl}_2$  líquido na entrada do pré resfriador, além da Carga térmica do Reator. Os testes em malha aberta foram realizados com o intuito de entender e tirar conclusões sobre o comportamento transiente das variáveis em estudo. Os modelos do tipo Função de Transferência, ARX e Espaço de Estados, foram os que melhor se ajustaram ao comportamento dos dados, em estado transiente, do sistema. Já a malha de controle proposta ao final desse estudo, traz uma justificativa para a não implementação de controle à temperatura do 1º estágio do compressor, visto que a mesma ao invés de afetar no controle Temperatura do Reator, provoca uma elevada saturação na mesma.

## 1. INTRODUÇÃO

A influência de impurezas é freqüentemente mencionada como uma das causas de acidentes na indústria química (Gustin, 2002). A produção de cloro eletrolítico é realizada através de um sistema de compressão onde o cloro é obtido no estado líquido para fins de armazenamento e transporte. Este objetivo é alcançado através dos estágios de compressão e resfriamento. O processo se dá a partir de solução aquosa de cloreto de sódio ou de cloreto de potássio ( $\text{KCl}$ ), e devido à presença de amônia no sal, dá origem a  $\text{NCl}_3$ , que é um composto extremamente instável e explosivo em determinadas condições de pressão e temperatura, mesmo se apresentando em concentrações baixas. De acordo com o relatório GEST 76/55 (2001), 1 ppm de  $\text{NH}_3$  na salmoura a ser eletrolisada é suficiente para resultar em mais de 50 ppm de  $\text{NCl}_3$  no  $\text{Cl}_2$  líquido. Composições em massa superiores a 1000 ppm de  $\text{NCl}_3$  geram graves riscos de acidente na planta. A  $\text{NCl}_3$  formada é degradada na presença de Clorofórmio ( $\text{CHCl}_3$ ), como pode ser visto na Equação 1.



O controle automático, é a forma que mantém a  $\text{NCl}_3$  operando de forma segura no processo. O estudo da degradação do contaminante  $\text{NCl}_3$  no processo, foi fonte de estudos de alguns autores, dentre eles podem ser citados o trabalho de Tavares (2006), que estudou esse processo, considerando fluxogramas contendo apenas Reator e Pré-Resfriador interligados, além de usar como solvente o Tetracloreto de Carbono ( $\text{CCl}_4$ ). Brito (2009) realizou a simulação do processo acrescentando ao estudo, o sistema de compressão, onde este foi acoplado ao Reator/Pré resfriador. Lenp (2004), estudou a substituição do solvente  $\text{CCl}_4$  pelo  $\text{CHCl}_3$  na degradação da  $\text{NCl}_3$ . Verificando assim a influência deste sistema de compressão na degradação da  $\text{NCl}_3$ .

O comportamento em regime transiente foi analisado por simulação utilizando o software *Aspen Dynamics*. Em seguida foi realizada a Identificação do sistema, utilizando o Ident/Matlab. E por fim, o Sistema de Controle proposto no trabalho justifica um dos problemas existentes na planta de produção de Cloro, que é a influência do controle da Temperatura do 1º estágio do Compressor sobre a Temperatura do Reator, utilizando-se do Simulink/Matlab.

## 2. REVISÃO DO ESTADO DA ARTE

A influência de impurezas é freqüentemente mencionada com uma das causas de acidentes na indústria química. Em determinadas condições de processo (temperatura, pressão e composição) onde existe potencial para reação de decomposição rápida e exotérmica, a contaminação com traços de impurezas pode ocasionar acidentes graves. (Gustin, 2002). A produção de  $\text{Cl}_2$  eletrolítico a partir de solução aquosa de cloreto de sódio ou de cloreto de potássio ( $\text{KCl}$ ), devido à presença de amônia ( $\text{NH}_3$ ) no sal, produz a  $\text{NCl}_3$ , que é um composto extremamente instável e explosivo em determinadas condições de pressão e temperatura, mesmo em se tratando de concentrações baixas, estará presente no  $\text{Cl}_2$  produzido, em função da reação química abaixo, correspondente a Equação 2:



De acordo com o relatório GEST 76/55 (2001), 1 ppm de  $\text{NH}_3$  na salmoura a ser eletrolisada é suficiente para resultar em mais de 50 ppm de  $\text{NCl}_3$  no  $\text{Cl}_2$  líquido. Composições em massa superiores a 1000 ppm de  $\text{NCl}_3$  geram graves riscos de acidente na planta. Desta forma, a eliminação da  $\text{NH}_3$  antes da eletrólise se faz necessária e, normalmente, é realizada através da injeção de uma corrente de  $\text{Cl}_2$  gasoso na corrente de salmoura enviada para as células eletrolíticas, o que proporciona a formação da monocloramina ( $\text{NH}_2\text{Cl}$ ), em composto volátil que se desprende do meio líquido com facilidade.

## 3. DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

Na Figura 1 que representa o fluxograma do processo, contém as etapas de compressão do cloro – que é composto por um reator tanque de mistura, uma coluna de absorção, dois compressores e dois trocadores de calor.

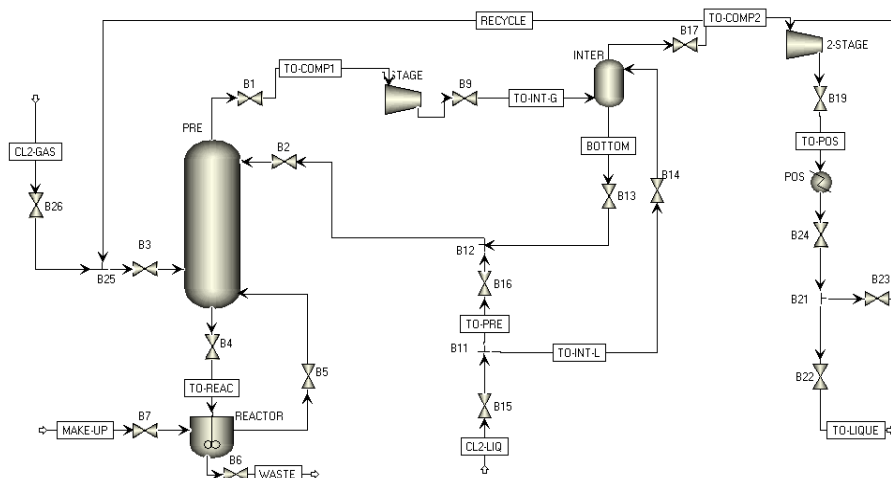


Figura 1 – Planta de produção do cloro

O objetivo principal do sistema de compressão de cloro é a obtenção de cloro no estado líquido para fins de armazenamento e transporte. Este objetivo é alcançado através dos estágios de compressão e resfriamento. Por outro lado, é necessária a retirada de impurezas da corrente de cloro alimentado no sistema de compressão, a qual é realizada no reator e na coluna de absorção. Na Figura 2 é apresentado o comportamento dinâmico da temperatura do reator em uma situação típica, onde é possível observar a variabilidade que interfere forte interferência do fenômeno na segurança e estabilidade do processo. Uma vez que a degradação da  $\text{NCl}_3$  é bastante comprometida devido a essa variabilidade na temperatura. Já, a Figura 3, mostra a variabilidade na temperatura de saída do 1º estágio do compressor, comprometendo a operação em termos de desempenho e segurança.

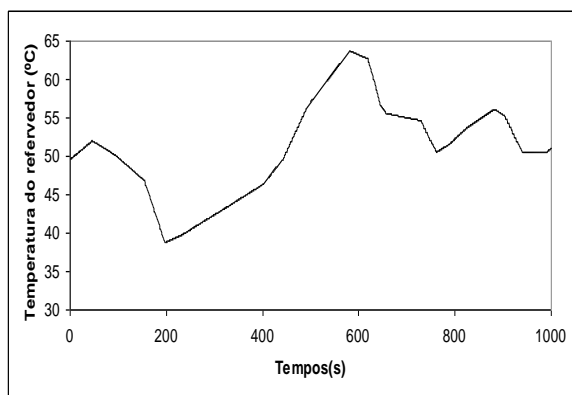


Figura 2 – Comportamento da Temp. do Reator.

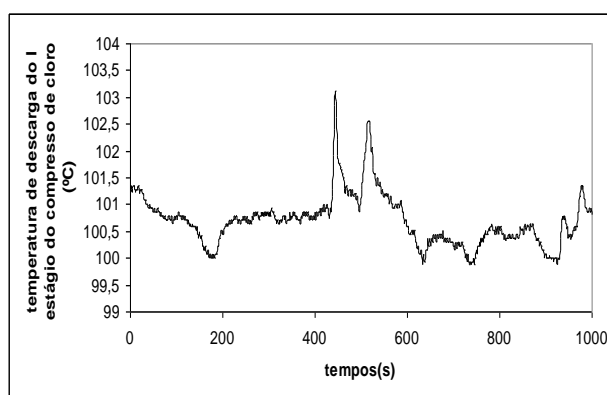


Figura 3 – Temperatura de Descarga do 1º Estágio do Compressor de Cloro.

## 4. MODELAGEM E IDENTIFICAÇÃO DE SISTEMAS DINÂMICOS

O modelo desenvolvido para um sistema é apenas uma representação aproximada, conseqüentemente não existe um modelo do sistema, mas sim uma família de modelos com características e desempenhos variados (Aguirre, 2007).

### 4.1. Identificação de Sistemas

A identificação de sistemas necessita apenas de conhecimentos de entrada e saída para modelar o processo. Portanto, modelos gerados através da identificação de sistemas tendem a ser mais simples, o que torna vantajoso para a representação de processos complexos (Assis, 2001). Fez-se necessário à coleta de dados da planta por simulação, a partir de perturbações aplicadas na planta. Na identificação do processo, foi utilizado o sinal de excitação degrau, assim como o PRBS, para avaliação do comportamento dinâmico do sistema. Os testes utilizando o degrau não obtiveram êxitos quando da realização da validação dos modelos. Logo, o sinal PRBS apresentou melhor desempenho frente a validação. Alguns testes foram realizados para verificar o comportamento de variáveis significativas para a manutenção da estabilidade do processo de produção do cloro em estudo. As variáveis que compõem todo o sistema podem ser vistas na Tabela 1:

Tabela 1 – Variáveis de entrada e saída do processo

Variáveis de Entrada	Carga Térmica do Reator de Clorofórmio
	Vazão de $\text{Cl}_2$ líquido para o Pré-Resfriador do Cloro
	Vazão de $\text{Cl}_2$ gás (provindo das células eletrolíticas)
Variáveis de saída	Temperatura do Reator
	Temperatura do 1º estágio do Compressor

Os dados obtidos através dos testes foram levados ao toolbox *Ident* do Matlab, onde então foi realizada a Identificação dos modelos que representavam o sistema. Vários tipos de estruturas de modelos, tais como: ARX, Função de Transferência, Espaço de Estados, foram desenvolvidos. Em seguida foi realizada uma validação para determinar o modelo mais adequado para representar o comportamento de cada variável analisada no regime transiente.

## 5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O tempo considerado de simulação foi de 10 horas, para que pudesse avaliar o comportamento transiente de cada variável. Na Figura 4 são apresentados todos os modelos que melhor se ajustam aos dados obtidos durante a simulação da planta para uma perturbação na Vazão de Cloro Gás. A Figura 5 apresenta o modelo de Função de Transferência de 1ª ordem, com comportamento integrador. Pode ser observado que a temperatura do reator apresenta pequenas flutuações ao longo

do tempo de processo. A excitação do sinal PRBS aplicado na Vazão de Cloro Gás faz com que a temperatura do reator se eleve em torno de 15°C, ao longo do processo de simulação, o que pode provocar graves riscos no funcionamento da planta, pela presença do contaminante  $\text{NCl}_3$ . A Tabela 2 apresenta o significado da codificação apresentado na Figura 4.

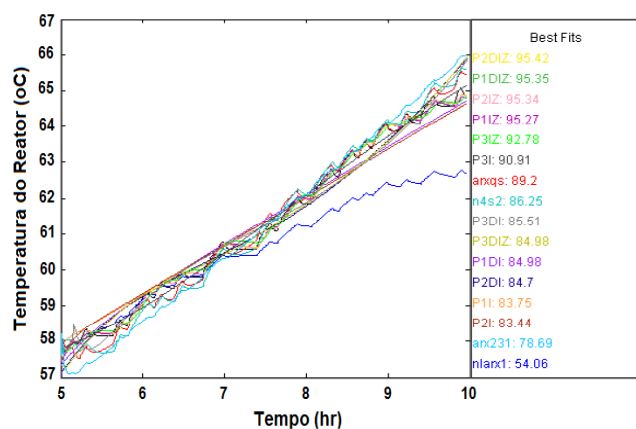


Figura 4 – Resposta de todos os modelos selecionados

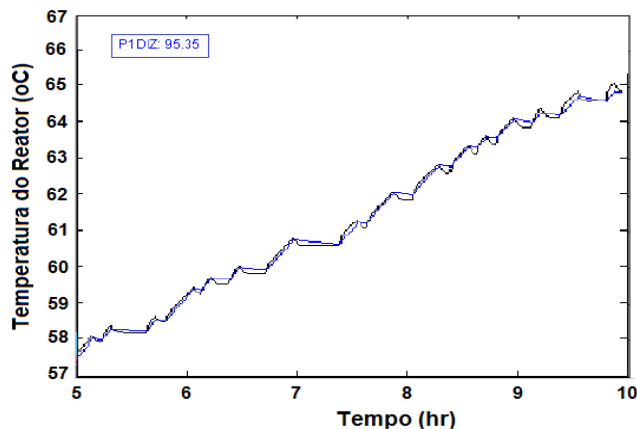


Figura 5 – Modelo escolhido

Tabela 2 - Significado da codificação dos modelos

Codificação	Modelos
$P_iDIZ$	Função de transferência de ordem i, com tempo morto, com zeros e comportamento integrador
$Arx(ijk)$	ARX (modelo autoregressivo com entradas exógenas)
$P_iI$	Função de transferência de ordem i, com comportamento integrador
$n_i s_j$	Modelo em espaço de estados
$narx(i)$	Modelo não linear autoregressivo com entradas exógenas
$P_iIZ$	Função de Transferencia de ordem i, com zero e comportamento integrador

A quantidade de  $\text{CHCl}_3$  que sai do reator aumenta a medida que transcorre o tempo de simulação, em decorrência da elevação da temperatura, e a quantidade de  $\text{NCl}_3$  decai um pouco, atingindo uma composição na saída do Reator de 69.5 ppm, que está bem abaixo do limite permitido que é de 1000 ppm, evitando assim, riscos de explosão na planta. A Figura 6 apresenta o modelo que melhor representa o comportamento da temperatura do reator frente a uma perturbação na carga térmica. O modelo trata-se de uma função de transferência de 1ª ordem com comportamento integrador. A temperatura sofre uma elevação em torno de 16°C. No processo, a quantidade da  $\text{NCl}_3$  presente na coluna de absorção é de (~7225ppm) visto que a temperatura no equipamento é baixa, o que propicia o acúmulo do contaminante. Então é necessária sua degradação para evitar possíveis riscos e danos ao funcionamento da planta de produção do Cloro. Ao passar pelo reator, essa concentração é de 0,3 kg de  $\text{NCl}_3$ , que corresponde a 417 ppm (na temperatura de 50°C), chegando ao término do processo a cerca de aproximadamente 69.5 ppm (~66°C) na saída do reator.

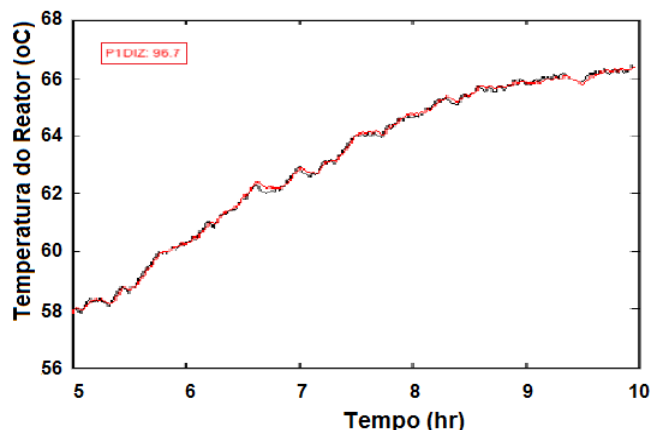


Figura 6 – Modelo escolhido

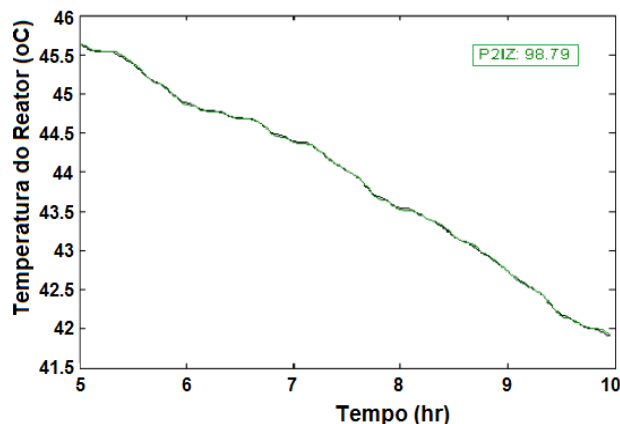


Figura 7 – Modelo escolhido

Já a Figura 7, mostra a influência do cloro líquido na temperatura do reator. O modelo Função de Transferência de 2ª ordem teve o melhor ajuste aos dados experimentais após a simulação da planta, com isso também pôde ser observado que a temperatura atinge 42 °C em 10 horas de simulação. Sofrendo pequenas frequências em torno de todo o tempo de amostragem. Devido a diminuição da temperatura, a massa de  $\text{CHCl}_3$  se acumula no interior do reator. Conseqüentemente a massa da  $\text{NCl}_3$  obtém ao final do estudo uma composição de ~996 ppm. Valor esse superior ao que inicialmente é obtido quando o contaminante entra no equipamento. Esta situação é justificada pela diminuição de temperatura. As representações matemáticas dos modelos tanto para a temperatura do reator, quanto para a temperatura do 1º estágio do compressor são apresentadas na Tabela 3, como se segue:

Tabela 3 – Representações matemáticas correspondendo as variáveis do processo.

Variáveis do Processo	$\text{Cl}_2$ Gás provindo das células	Carga Térmica	$\text{Cl}_2$ Líquido para o Pré-Resfriador
Temperatura do Reator	$G(s) = 2.5442 \times 10^{-5} \frac{(811.25s + 1)}{s(1 + 5.5413s)}$	$G(s) = 7.2545 \frac{(206.82s + 1)}{s(1 + 4.5687s)}$	$G(s) = -5.302 \times 10^{-5} \frac{(2987s + 1)}{s(1 + 0.004472s)(1 + 5.2907s)}$
Temperatura do 1º estágio do compressor	$G(s) = -2.7928 \times 10^{-7} \frac{(5357s + 1)}{s(1 + 0.001s)}$	$G(s) = 0.002443 \frac{(210.19s + 1)}{s(1 + 0.029231s)}$	$G(s) = -7.0173 \times 10^{-9} \frac{(757s + 1)}{s(1 + 0.0618s)(1 + 0.016s)}$

O intuito de apresentar modelos para estas duas variáveis de processo, é que, além de identificar o sistema, se propôs no trabalho, um sistema de controle o qual mostrou a influência do controle da temperatura do 1º estágio do compressor sobre a temperatura do reator de  $\text{CHCl}_3$ . O sistema de controle foi implementado no ambiente Simulink/Matlab, com o objetivo de sintonizar a malha de controle a partir dos modelos matemáticos encontrados através dos testes realizados na simulação do modelo da planta de produção de  $\text{Cl}_2$ . A Figura 8 apresenta a estrutura da malha, onde o controle estabelecido foi o Feedback, e foi definido como sendo uma relação entre as Funções de Transferência do distúrbio (Vazão de cloro Gás) e das variáveis manipuladas (Vazão de Cloro líquido) e (Carga térmica) atuando na temperatura do reator e dos distúrbios (Vazão de cloro Gás) e

(Vazão de Cloro líquido), e da variável manipulada (Carga térmica) atuando na Temperatura do 1º estágio do Compressor.

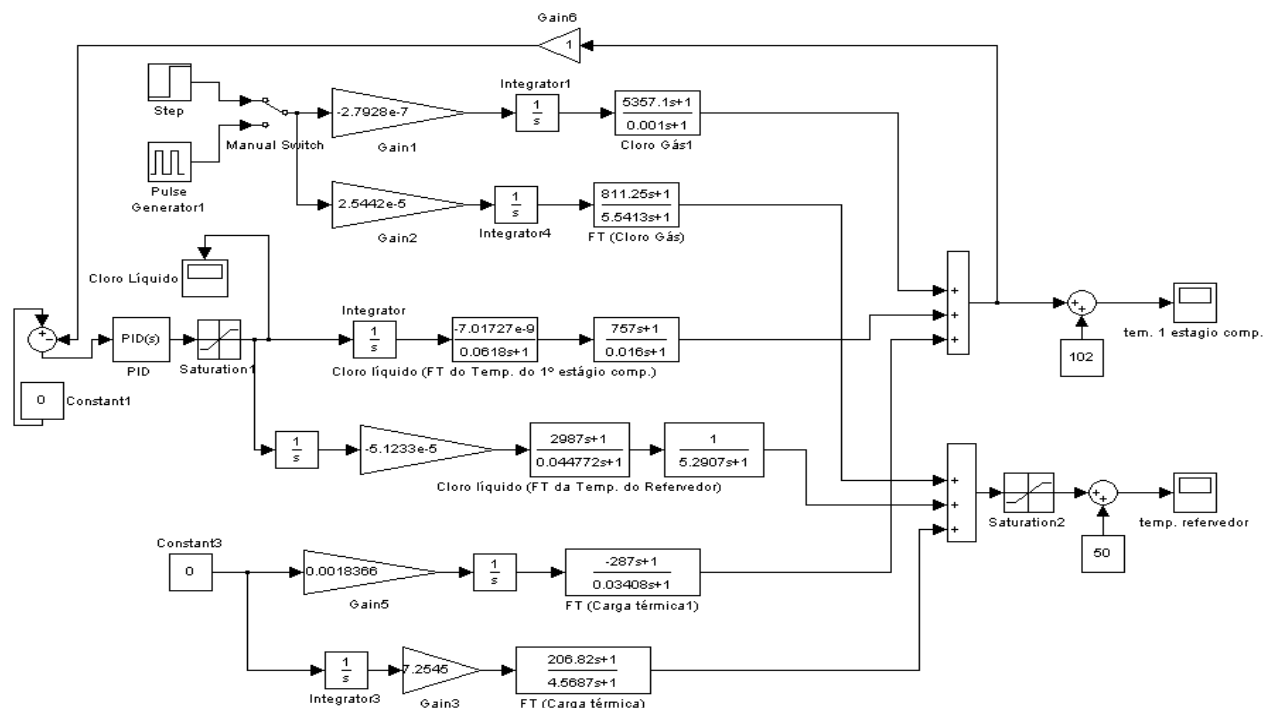


Figura 8 – Malha de Controle no SIMULINK/MATLAB

É possível verificar o comportamento que a Vazão de Cloro Líquido, que funciona como Distúrbio sobre a Temperatura do 1º estágio do Compressor, obtém ao tentar controlar essa Temperatura. Como mostrado nas Figuras seguintes, (Figura 9(a), 9(b) e 9(c)), como se segue.

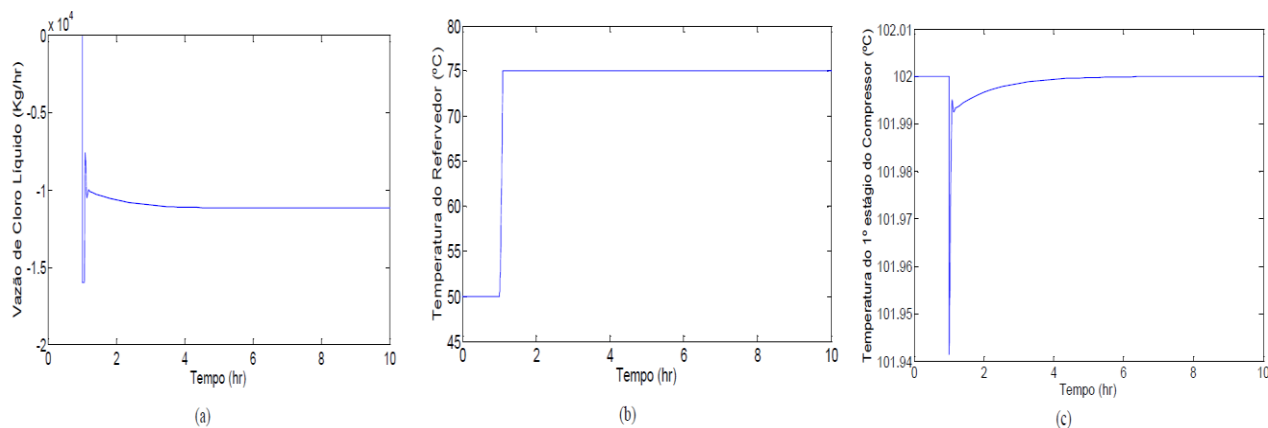


Figura 9 – Comportamento da Vazão de Cloro Líquido Total (a), Temperatura do Reator (b) e Temperatura do 1º estágio do Compressor.



Assim como pode ser observado acima, na Figura 9, a Temperatura do 1º estágio do Compressor sofre pouca variação ser perturbada na malha, atingindo rapidamente o setpoint. Porém a tentativa de estratégia desse controle faz com que a Temperatura do reator alcance valores elevados rapidamente. Por sua vez, fazendo com que o  $\text{CHCl}_3$  seja totalmente evaporado, e o equipamento atinja o esvaziamento. Esta série de eventos ocasiona sérios problemas ao funcionamento da planta. Além disso, pode ser observado que a quantidade de Cloro Líquido que entra na coluna de absorção sofre uma enorme diminuição, isso fará com que grande parte ou todo o Cloro gás saia pelo topo da coluna, e não permitirá que o contaminante ( $\text{NCl}_3$ ) provindo das células eletrolíticas chegue ao Reator, onde acontece a degradação. Desta forma comprometerá todo o funcionamento da planta, causando riscos de explosão, e outros problemas.

## 6. CONCLUSÃO

O trabalho teve como finalidade, minimizar os distúrbios existentes em uma Unidade de Cloro-Soda, em especial na seção de Compressão do Cloro. Sabendo que a temperatura do reator é um fator crítico para a degradação da  $\text{NCl}_3$ , logo, o seu controle é de fundamental importância. A ideia do trabalho foi propor uma estratégia de controle, na qual através de um controle da temperatura do 1º estágio do compressor a faixa de temperatura do reator mantivesse entre os limites estabelecidos, que é em torno de  $50^\circ\text{C}$  - sugestão essa, indicada pelos gestores da planta de produção de Cloro. Porém, a malha de controle apresentada nesse trabalho provou que tal fato não é eficaz, visto que a Temperatura do 1º estágio do Compressor sofre pouca variação ser perturbada na malha, atingindo rapidamente o setpoint. Porém a tentativa de estratégia desse controle faz com que a Temperatura do reator alcance valores elevados rapidamente, o que ocasionaria outros vários problemas no processo.

## 7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGUIRRE, L. A.; **Introdução à Identificação de Sistemas**. 3ª edição, Belo Horizonte (2007)
- ASSIS, A. J. de., **Identificação e controle de processos não-lineares utilizando redes neurais artificiais**, 2001. Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas.
- BRITO, K. D.; **Avaliação do comportamento dinâmico de uma unidade de compressão de cloro**, 2009. Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Campina Grande.
- GEST 76/55. **Maximum Levels of Nitrogen Trichloride in Liquid Chlorine**, Euro Chlor Publications, (2001).
- GUSTIN, J. L.; **Influence of Trace Impurities on Chemical Reaction Hazards**. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 37-48. (2002)
- LENP, L. d.-U., **Eliminação de Tricloroamina no Processo de Produção de Cloro – Substituição do Tetracloreto de Carbono pelo Clorofórmio**. Proposta de Consultoria, Campina Grande - 882. (2004)
- TAVARES, J. I., **Industrial and Simulation Analysis of Nitrogen Trichloride Decomposition Process in Eletrolytic Chlorine Production**. *Journal of Harzards Materials*. (2006).