

SIMULAÇÃO E CONTROLE DE UM REATOR DE POLIMERIZAÇÃO DE PROPENO COM O SOFTWARE EMSO

A. C. S. R. DIAS¹, W. B. da SILVA² e J. C. S. DUTRA³

LAMCES – Laboratório de Métodos Computacionais, Controle e Estimação
Universidade Federal do Espírito Santo – Engenharia Química (campus de Alegre)
¹ana_csr@hotmai.com; ²wellingtonuff@yahoo.com.br; ³juliosdutra@yahoo.com.br

RESUMO – O polipropileno tem grande importância econômica, o que estimula buscas por melhoria em seu processo produtivo. Para tal, a simulação de processos, testando modelos matemáticos, tem sido muito utilizada por ser um procedimento simples e de baixo custo. Neste trabalho, utilizando-se o *software* EMSO, estudos computacionais foram realizados, envolvendo modelagem, simulação e controle de um reator de polimerização de propeno. Algumas adaptações de código computacional foram necessárias para a implementação do modelo. Usando o pacote DASSLC, a simulação foi rápida e robusta, levando a resultados consistentes que podem ser utilizados para o monitoramento e controle da polimerização. Dessa forma, mostrou-se que o EMSO é uma ferramenta eficiente e de grande potencial.

1. INTRODUÇÃO

O polipropileno (PP) é uma resina que apresenta alta resistência a impactos e a fratura, fácil moldagem, baixo custo e muito utilizada em diversos setores industriais (Dutra *et al.*, 2014; Chum e Swogger, 2008). Existem diversos processos de produção de PP, combinando tecnologias de produção e de catalisadores, realizados por meio de solução, suspensão em um solvente (*slurry*), em massa (*bulk*) ou em fase gasosa. Um processo bastante comum baseia-se na tecnologia LIPP (*Liquid Pool Polymerization*), que utiliza a polimerização em suspensão de propeno líquido em um reator mecanicamente agitado operando em alta pressão (Dutra *et al.*, 2014; Ferreira e Faezipour, 2012).

Para se compreender os problemas operacionais do processo produtivo ou o efeito de diversas variáveis, de forma antecipada e preditiva, recomenda-se o uso de simuladores. Essas ferramentas são extremamente importantes porque permitem, por exemplo, encontrar condições ideais de operação, avaliar mudanças em instalações industriais sem afetar a operação real e reduzir o tempo de decisão em relação às políticas operacionais (Soares e Secchi, 2003; Ferreira e Faezipour, 2012).

Existem diversos simuladores computacionais que podem ser empregados para estes fins. Mas, cabe destaque àqueles que conferem flexibilidade para lidar com diversas situações e que sejam de código livre, como o *software* EMSO. Especificamente, esta ferramenta consiste de um ambiente computacional voltado para a modelagem, otimização de processos, projeto de estruturas de controle, estimação de parâmetros e reconciliação de dados (Soares e Secchi, 2003).

Neste contexto, o presente trabalho aborda a questão da simulação e do controle do processo de polimerização de propeno com o *software* EMSO, empregando a modelagem proposta por Dutra *et al.* (2014). Durante a implementação do novo algoritmo, mudanças na representação do modelo do processo foram feitas para adequar à linguagem computacional do EMSO. Os resultados mostram um bom desempenho do simulador escolhido, que operou com rapidez e robustez.

2. O SOFTWARE EMSO

A simulação de um processo permite prever o comportamento do sistema, com um dado grau de confiança, baseando-se em informações de entrada e parâmetros, de acordo com o conjunto de considerações especificado. Os simuladores são ferramentas importantes no projeto e no desenvolvimento de processos industriais, pois possibilitam, por exemplo, a validação de projetos ou modificações em uma planta industrial sem influenciar sua operação real. Permitem avaliar sua operabilidade prática, como também possíveis aumentos de produção e reduções de custo. As alterações são feitas no simulador, seus resultados são analisados e, só depois, se confirmadas mais eficientes, são aplicadas no processo real. Com isso, é possível reduzir o tempo envolvido no processo decisório e na aplicação de novas condições operacionais (Quinto *et al.*, 2009).

A simulação de processos é uma prática crescente em ambientes de produção. Entretanto, as ferramentas disponíveis no mercado são consideradas insuficientes pelos usuários, principalmente pela flexibilidade limitada dos *softwares*, dificuldade de utilização e aprendizagem, e pelo alto custo de aquisição. Com o intuito de proporcionar maior flexibilidade aos usuários, o projeto Ambiente Livre para Simulação, Otimização e Controle de Processos (ALSOC) da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, em parceria com outras universidades e petroquímicas nacionais, desenvolveu o EMSO. Aspectos positivos dos simuladores mais utilizados foram mantidos e novos métodos foram desenvolvidos para suprir características ausentes. O paradigma de programação orientada a objetos foi utilizado, permitindo trabalhar com conceitos de objeto, herança e composição, possibilitando melhor organização e versatilidade (Quinto *et al.*, 2009; Soares e Secchi, 2003).

O EMSO é um ambiente gráfico integrado para o desenvolvimento de modelos e não apresenta custo para utilização em instituições de ensino. Trata-se de um simulador baseado em equacionamento, o que o torna flexível para lidar com diversas situações. A modelagem é realizada por uma linguagem de alto nível, bem estruturada e de fácil aprendizagem, o que o torna um *software* apropriado para muitas aplicações em pesquisa e ensino (Soares e Secchi, 2003). Portanto, os esforços neste trabalho convergiram para o desenvolvimento de um algoritmo com linguagem de modelagem adequada à plataforma do EMSO.

3. POLIMERIZAÇÃO DE PROPENO

Diversos processos de polimerização podem ser utilizados para a produção de polipropileno, combinando tecnologias de produção e de catalisadores. A escolha do catalisador depende das propriedades do PP que se deseja obter (Dutra *et al.*, 2014).

Para atender as exigências do mercado, os processos de polimerização devem ser projetados para operar em diversas formas e produzir resinas com diferentes propriedades.

Duas soluções possíveis para esta situação podem ser assim descritas: a) utilizar diferentes reatores para as diferentes condições de operação, o que gera custos elevados e exige grande espaço físico; ou, b) diferentes sistemas catalíticos. Esta segunda opção requer estudos sobre os possíveis problemas de controle que surgem, pois os catalisadores apresentam cinéticas diferentes que afetam o comportamento do processo e mudam para cada sistema selecionado (Dutra *et al.*, 2014).

Para o desenvolvimento das estratégias de controle, é necessário um modelo matemático que permite a análise do comportamento e a determinação das condições operacionais. Na literatura, existem várias contribuições, contudo, uma referência recente é o estudo de Dutra *et al* (2014), que considera a produção de PP em fase líquida - a tecnologia LIPP.

3.1. Modelagem do Processo

O modelo proposto por Dutra *et al.* (2014) utiliza um reator contínuo de tanque agitado (CSTR), operando em alta pressão, utilizando três tipos diferentes de catalisadores. Propileno líquido é usado como meio de suspensão para as partículas de polímero; trietil-alumínio (TEA) e para-etox-etyl-benzoato (PEEB) são utilizados como aditivos. O hidrogénio participa como um agente de transferência de cadeia.

Por simplicidade, neste presente trabalho, o sistema de três catalisadores foi substituído por um único tipo de catalisador, no caso Ziegler-Natta, para a produção de polímero com elevada massa molar e baixa rigidez. Selecionou-se esse sistema por atender a maioria das aplicações industriais e por apresentar a reação de transferência de cadeia com hidrogênio, o que é muito importante no controle do tamanho da cadeia polimérica.

3.2. Configuração de Controle

O sistema de controle proposto por Dutra *et al.* (2014) é dividido em duas camadas hierárquicas. A camada inferior (controle regulatório) garante a estabilidade do processo. Ela contempla as malhas de controle do volume do reator (V), das temperaturas do reator (T), da saída de líquido refrigerante (Tw) e da produtividade. A camada superior (controle supervisório) atenua os efeitos das perturbações sobre a estabilidade do processo. É composta pelas malhas de controle do teor de solúveis em xileno (XS) e do índice de fluidez (MI). Os controladores PI foram implementados para ambas as camadas de acordo com o algoritmo de velocidade discreta dado pela Equação 1.

$$u(t_k) = u(t_{k-1}) + kc \left(e(t_k) - e(t_{k-1}) + Ts \frac{e(tk)}{\tau_I} \right) \quad (1)$$

Nesta representação $u(t_k)$ é a variável controlada no instante k e $u(t_{k-1})$, no instante $k-1$. kc é o ganho do controlador, $e(t_k)$ e $e(t_{k-1})$ são, respectivamente, os erros entre o valor do *set point* e o valor da variável medida nos instantes k e $k-1$, Ts é o tempo de amostragem e τ_I é a constante de tempo integral do controlador.

3.3. Implementação do Modelo

Durante a implementação das estruturas de controle, deparou-se com um problema de compatibilidade de linguagem computacional. O EMSO não permite a consideração de variáveis contínuas e discretas na mesma equação, embora considere variáveis inteiras em laços do tipo *FOR-END*. Neste caso, os termos envolvendo a diferença entre um dado do tempo atual e o do tempo anterior (isto é, $t_k - t_{k-1}$) foram considerados derivadas de primeira ordem em relação ao tempo, permitindo a implementação do controlador na forma de velocidade (Equação 2). O *bias* do controlador foi tomado como o valor inicial deste, $u(t_0)$, e os novos valores, $u(t)$, das variáveis manipuladas foram determinados durante a integração do sistema de equações diferenciais do modelo juntamente com as equações que definem os controladores.

$$\frac{du(t)}{dt} = kc \left(\frac{de(t)}{dt} + Ts \frac{e(tk)}{\tau_I} \right) \quad (2)$$

As equações do controlador foram alteradas pela adição de uma estrutura condicional (*IF-ELSE-END*) para limitar entre valores mínimos e máximos a manipulação das vazões utilizadas pelas camadas de controle, de modo a evitar problemas numéricos.

Para as simulações, utilizou-se um método numérico Dasslc (Secchi, 1992) para solução das equações algébrico-diferenciais.

De acordo com o registro de simulação fornecido pelo EMSO, o índice de estrutura diferencial (*structural differential index*) deste problema é 1 e há 68 variáveis, 65 equações e 3 especificações, fornecendo grau de liberdade igual a 0. Dentre as equações, 25 são diferenciais ordinárias.

4. RESULTADOS

Para testar o desempenho das estruturas de controle, aplicaram-se degraus de magnitude 10 nos *set points* das malhas de controle do teor de solúveis em xileno (XS), que tem grande impacto na qualidade final do polímero, e da temperatura do reator (T), que influencia diretamente na atividade catalítica.

As Figuras 1a e 1c mostram, respectivamente, os resultados de simulação para o teor de solúveis em xileno e para a temperatura do reator em seus valores nominais. Por outro lado, as Figuras 1b e 1d apresentam o comportamento de XS e de T após a aplicação do degrau em seus respectivos *set points*. Como se pode observar, as estruturas de controle implementadas mostraram-se satisfatórias, e, quando aplicado o degrau em seus respectivos *set points*, resultou no aumento do valor das variáveis controladas (teor de extraíveis em xileno e temperatura do reator) atingindo os novos valores de *set points* (mantendo-os nestas novas condições) com ação rápida e suave (*smooth*).

Foi aplicado também um degrau de magnitude 10 K na temperatura de alimentação do monômero (Figura 2), atuando como uma perturbação para a malha de controle da temperatura do reator. Mesmo na presença de perturbação, o controlador foi capaz de retornar o valor da variável controlada (temperatura do reator) para seu *set point* com robustez.

Figura 1 – (a) Perfil do teor de solúveis em xileno, (b) Perfil de XS após aplicação do degrau de magnitude 10 em seu *set point*, (c) Perfil da temperatura do reator, (d) Perfil de T após aplicação do degrau de magnitude 10 em seu *set point*.

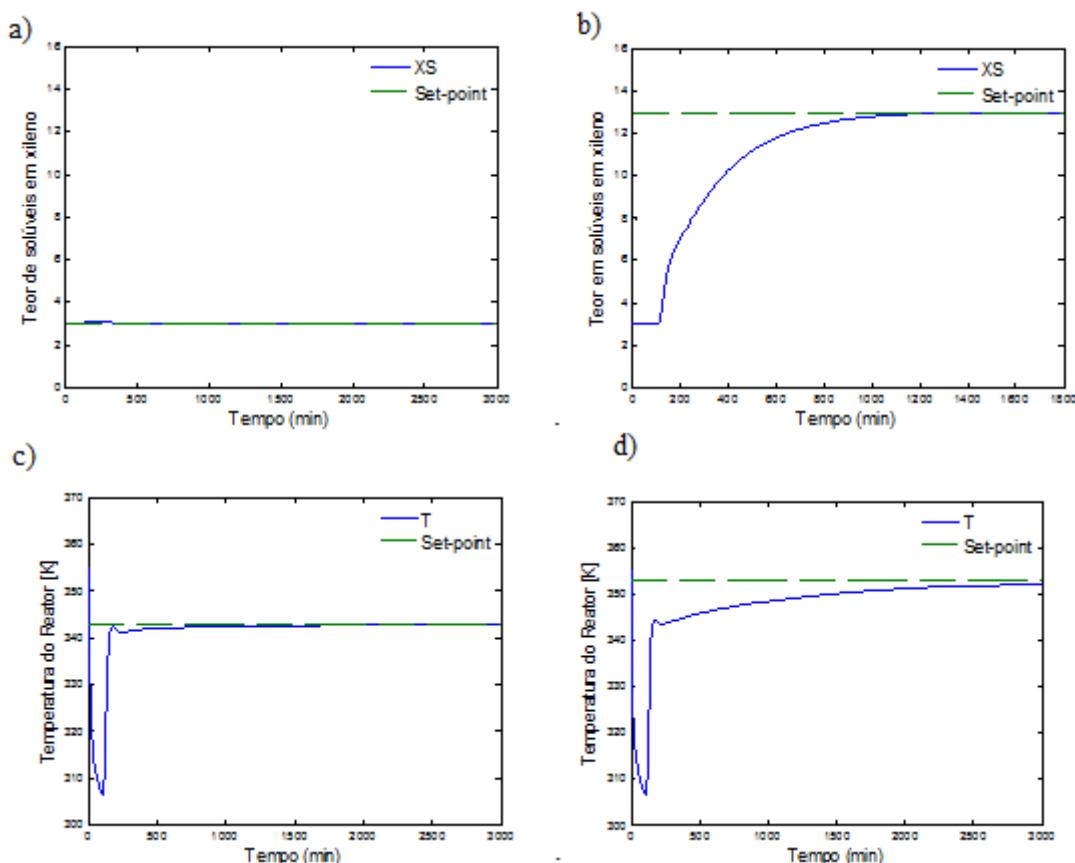
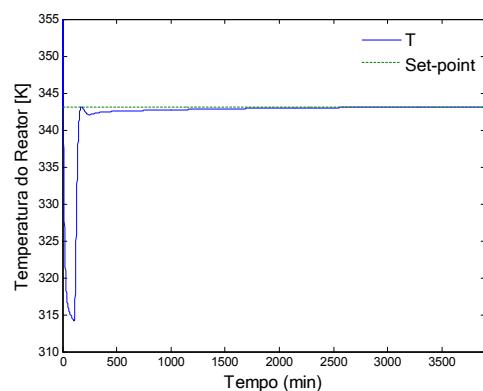


Figura 2 – Perfil da temperatura de saída do reator frente a uma perturbação na temperatura de entrada de monômero no reator.



5. CONCLUSÃO

Neste trabalho, estudaram-se a modelagem matemática e o problema de controle propostos por Dutra *et al.* (2014) para o processo de polimerização de propeno em massa, sendo que a contribuição central desta pesquisa foi o emprego do *software* EMSO para as tarefas de simulação dinâmica e controle.

Esta ferramenta de simulação foi utilizada com sucesso; no entanto, exigiu que fossem feitas adaptações em algumas representações do modelo, como a transformação de variáveis discretas em contínuas. O teste servo realizado para as malhas de controle do teor de solúveis em xileno e da temperatura do reator; e, o teste regulatório para a temperatura do reator; mostraram resultados satisfatórios. Isto confirma a eficácia das estruturas de controle propostas por Dutra *et al.* (2014) e a potencialidade do EMSO em relação à integração numérica rápida e robusta das equações com o pacote DASSLC.

O modelo implementado em EMSO pode ser usado em trabalhos futuros na aplicação de outras ferramentas de controle, como a estimativa de estado para o controle inferencial; na otimização das condições de operação (a fim de reduzir a utilização de um catalisador, por exemplo); e, na implementação de políticas operacionais ótimas de controle preditivo.

6. REFERÊNCIAS

- CHUM, P. S.; SWOGGER, K. W. Olefin polymer Technologies – History and recent progress at the Dow Chemical Company. *Progress in Polymer Science*, v. 33, p. 797-819, 2008.
- DUTRA, J. C. S.; FEITAL, T. S.; SKOGESTAD, S.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. Control of bulk propylene polymerizations operated with multiple catalysts through controller reconfiguration. *Macromolecular Reaction Engineering*, v. 8, p. 201-216, 2014.
- FERREIRA, S.; FAEZIPOUR, M. An analysis of processes, risks, and best practices for use in developing systems engineering process simulators. *Procedia Computer Science*, v. 8, p. 87-92, 2012.
- QUINTO, T. C.; SECCHI, A. R.; BISCAIA JR., E. C. A continuous implementation of the ideal time delay in EMSO. *Computer Aided Chemical Engineering*, v. 27, p273-278, 2009.
- SECCHI, A. R. DASSLC User's Manual Version 1.0, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, DEQUI, Porto Alegre, RS, Brasil, 1992
- SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. EMSO: A new environment for modelling, simulation and optimisation. *Computer-Aided Chemical Engineering*, v. 14, p. 947-952, 2003.