

18 a 21 de novembro de 2014, Caldas Novas - Goiás

SELEÇÃO ÓTIMA DE ENTRADAS NO ESTUDO DE INFERÊNCIA E CONTROLE DE COMPOSIÇÕES EM UM PROCESSO DE DESTILAÇÃO INDUSTRIAL DE ALTA PUREZA

Morais Jr, A. A., aamj@ct.ufpb.br¹
Rojas, L. O. A., leopoldo@ct.ufpb.br²
Brito, R. P., arjir@bol.com.br¹

¹Universidade Federal de Campina Grande – Departamento de Engenharia Química, Rua Aprígio Veloso, Nº 882, Bodocongó, CEP: 58109-970, Campina Grande, Paraíba, Brasil.

²Universidade Federal da Paraíba – Departamento de Engenharia Química, Campus Universitário I, CEP: 58051-900, João Pessoa, Paraíba, Brasil.

Resumo: O presente trabalho consiste no estudo das variáveis de uma coluna de destilação de alta pureza, com objetivo de desenvolver uma metodologia para selecionar as variáveis de entrada que afetam as composições do produto de base nesse processo. A análise é feita utilizando as técnicas matemáticas da Decomposição de Valores Singulares (SVD) e da Matriz de Ganho Relativo (RGA) implementadas no software Matlab®. A coluna de destilação é simulada com dados reais de uma planta comercial no software Aspen PlusTM. No processo de purificação do 1,2- Dicloroetano (1,2-DCE), antes que o mesmo venha convergir em seu craqueamento térmico para o Monômero Cloreto de Vinila (MVC), o 1,2-DCE deve estar seco, com um teor de água menor que 10 ppm, e ter uma alta pureza (maior que 99,5 %peso/peso), haja vista que o processo de craqueamento é altamente suscetível à inibição e deposição por traços de impurezas. As dificuldades para obtenção em tempo real e controle das variáveis de interesse, como o teor dos compostos Tetracloroeto de Carbono (CCl₄) e Clorofórmio (CHCl₃) motivaram o trabalho. 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.

Palavras-chave: seleção de variáveis, coluna de destilação, SVD, RGA, alta pureza.

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 às 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 à diferentes condições de operação, Moraes JR (2011).

1.1. Análise de Sensibilidade em Processos de Destilação

A seleção de variáveis para fins de inferência ou controle do processo, aqui é feita por meio da análise de sensibilidade. 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 refervedor) 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, C1 e C2, 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.

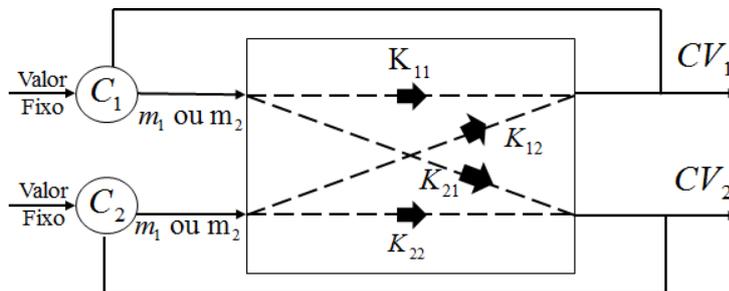


Figura 1. Controle realimentado descentralizado multivariável (2 x 2).

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, ou métodos matemáticos, que são utilizados na análise de sensibilidade em um processo de destilação, 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 consiste no estudo das variáveis de uma coluna de destilação azeotrópica de alta pureza, com objetivo de desenvolver uma metodologia para selecionar as variáveis de entrada que afetam as composições do produto de base nesse processo. O processo é simulado em regime estacionário com dados reais de uma planta industrial no software Aspen Plus™. Foram utilizados os métodos matemáticos 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.

Todas as ferramentas de análise de sensibilidade e controlabilidade utilizadas adiante necessitam da matriz de ganhos do processo em estado estacionário. Para a obtenção desses ganhos, a coluna é simulada em estado estacionário, utilizando-se o simulador comercial AspenPlus™.

1.2. 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 Matriz de Ganho Estacionário (SGA) em malha aberta, que por definição é a matriz $K_{n \times m}$ de sensibilidade do sistema, 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 interação 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.

1.3. Decomposição de Valores Singulares (SVD)

De acordo com MOORE (1980), o método da Decomposição de Valores Singulares (SVD) é bastante útil em análises e projetos de sistemas de controle em processos industriais que tendem à anomalias durante a operação. Assim, às análises feitas em processos industriais reais com o método SVD se mostraram extremamente satisfatórias e ajudaram bastante na implementação de controle.

A SVD é um algoritmo numérico/matemático 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 outras 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 , que são os vetores característicos da matriz $K.K^T$;

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 $K^T.K$;

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 Condiciona (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 .

De acordo com MOORE (1980) quando aplica-se o método SVD em um processo em estado estacionário e principalmente a matriz de ganho estático que descreve características do processo estacionário os valores singulares possuem um significado físico muito forte. Essa importância física permite uma maior clareza sobre os problemas envolvendo o controle e a natureza física desses problemas e pode também prover maneiras de atuar no controle desses problemas.

1.4 Matriz de Ganho Relativo (RGA)

A Matriz de Ganho relativo, RGA, proposta por Bristol (1966), considera apenas o regime estacionário das variáveis das diversas variáveis de processos.

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. A matriz de ganho em malha fechada $K'_{n \times m}$ é dada por:

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

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

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:

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

As análises de interação entre as malhas de controle de um sistema usando informações da RGA são realizadas a partir da magnitude dos valores de λ_{ij} conforme apresentado abaixo:

- $\lambda_{ij}=0$ significa que a variável de entrada j não atua sobre a saída i . Neste caso, para sistemas 2x2, a melhor escolha para o controle da variável de saída seria a outra variável de entrada (não a variável de entrada j);
- $\lambda_{ij}=1$ significa que o sistema é desacoplado, isto é, somente a entrada j atua sobre a saída i , o que possibilita que o sistema multivariável seja tratado como um sistema de múltiplas malhas individuais monovariáveis (SISO; *single input – single output*), resultando no chamado controle descentralizado;
- $0 < \lambda_{ij} < 1$ significa que há interações entre as malhas de controle;
- $\Lambda_{ij} < 0$ significa a impossibilidade de controlar o sistema, pois ao fechar outra malha de controle muda o ganho do par ij inviabilizando a operação do controlador da variável de saída i ;
- $\lambda_{ij} > 1$ significa que há interação, mas também que há menos opções de pareamento (nenhuma no caso 2x2), pois outros λ terão valores negativos, para que a soma resulte 1.

Para sistemas $n \times n$, Bristol (1966) propôs encontrar os ganhos relativos com base em uma equação matricial. Onde 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 tetracloreto de carbono (mantido em torno de 3000 ppm) e clorofórmio (mantido abaixo de 400 ppm) na base da coluna, $XCCl_4(B)$ e $XCHCl_3(B)$ respectivamente.

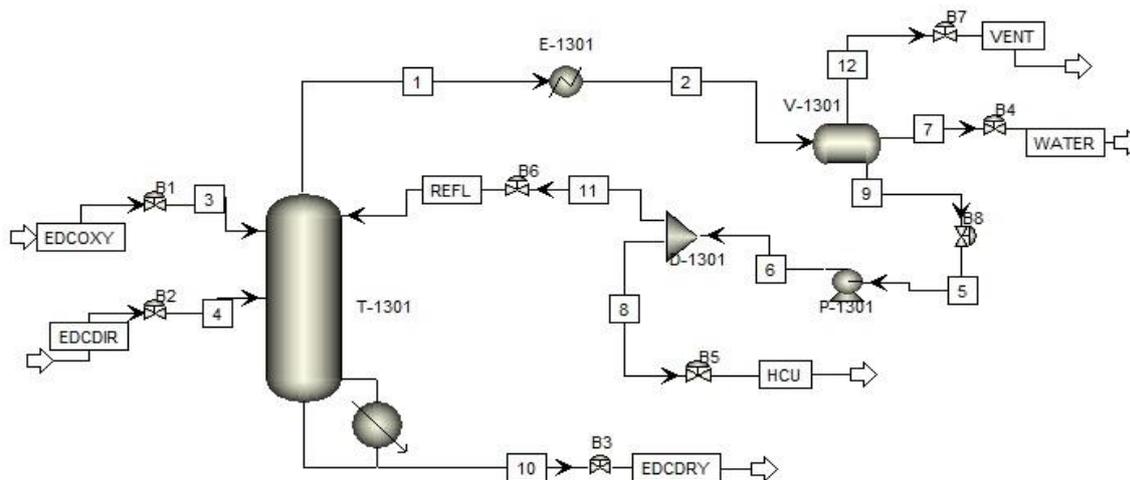


Figura 2. Fluxograma da coluna de purificação do 1,2-EDC implementado no Aspen PlusTM.

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 da 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).

3. MODELAGEM MATEMÁTICA 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, em equilíbrio líquido-vapor ou líquido-líquido arranjado em uma cascata em contracorrente representados pela Figura 3, sendo os estágios enumerados a partir do topo do processo de separação.

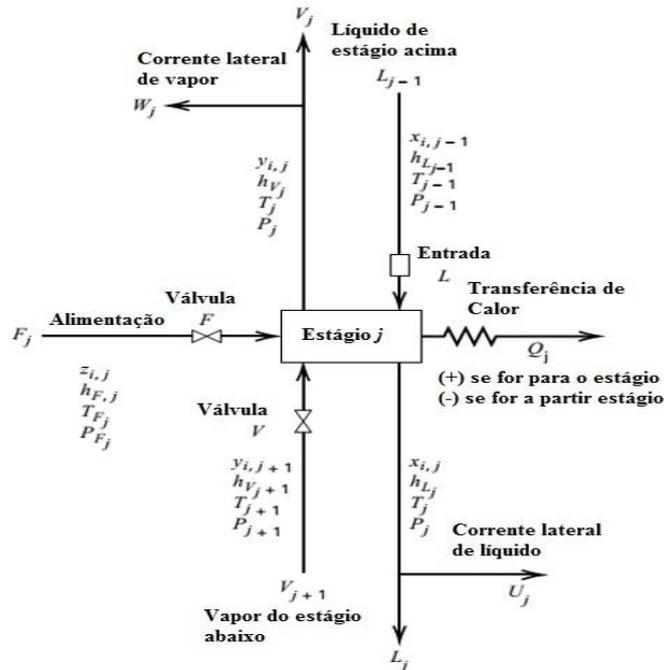


Figura 3. Representação de um estágio de equilíbrio em estado estacionário. Adaptado de Seader *et al.* (2011).

Nesse modelo matemático, o entra no estágio j uma alimentação com uma ou duas fases de fluxo molar F_j , com composição global $z_{i,j}$ de um componente i , temperatura $T_{F,j}$, pressão $P_{F,j}$, e entalpia molar global $h_{F,j}$. Assume-se que a pressão da alimentação é igual ou maior do que a pressão do estágio P_j . A diferença de pressão $(P_F - P_j)$ pode ser reduzida à zero através de uma válvula F .

Entra no estágio j líquido de um estagio acima $j - 1$ de fluxo molar L_{j-1} , com composição em fração molar $x_{i,j-1}$, entalpia $h_{L,j-1}$, temperatura T_{j-1} e pressão P_{j-1} que é igual ou menor do que a pressão do estagio j .

De forma similar de um estágio $j + 1$ abaixo, temos um fluxo molar de vapor V_{j+1} , com composição em fração molar $y_{i,j+1}$, entalpia $h_{V,j+1}$, temperatura T_{j+1} e pressão P_{j+1} que entra no estágio j . A diferença de pressão $(P_{j+1} - P_j)$ é reduzida para zero através de uma válvula V .

Deixa o estágio j um vapor de propriedades intensivas, $y_{i,j}$, $h_{V,j}$, T_j e P_j . Esta corrente é dividida em duas outras: uma corrente lateral de vapor de fluxo molar, W_j , e uma corrente interestágio de fluxo molar V_j que é enviada ao estágio $j - 1$ ou se $j = 1$, ela deixa o separador como produto.

Também deixa o estagio j um liquido de propriedades intensivas $x_{i,j}$, $h_{L,j}$, T_j e P_j , que esta em equilíbrio com o vapor $(V_j + W_j)$. Esta corrente é dividida em duas outras correntes: uma lateral de fluxo molar U_j e uma corrente interestágio ou corrente de produto de fluxo molar L_j que é enviada ao estágio $j + 1$ ou se $j = N$, ela deixa o separador como produto.

Calor é transferido a uma taxa Q , para simular no estágio interresfriadores, interaquecedores, condensadores e refervedores. Associado a cada estágio teórico temos a seguinte relação de equações expressas em termos do conjunto de variáveis da Figura 3. Estas equações são conhecidas como equações MESH e são:

M – Balanço material para cada componente, C equações para cada estágio, Equação 4:

$$M_{i,j} = L_{j-1}x_{i,j-1} + V_{j+1}y_{i,j+1} + F_jz_{i,j} - (L_j + U_j)x_{i,j} - (V_j + W_j)y_{i,j} = 0 \quad (4)$$

E – Equações de Equilíbrio, C equações para cada estágio, Equação 5:

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j}x_{i,j} = 0 \quad (5)$$

Onde $K_{i,j}$ é a razão das constantes de equilíbrio de fases.

S – Somatório das frações molares dos componentes, fase vapor e líquida, respectivamente, uma para cada estágio, dada pela Equações 6 e 7:

$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^c y_{i,j} - 1 = 0 \tag{6}$$

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^c x_{i,j} - 1 = 0 \tag{7}$$

H – Balanço de Energia (Para cada estágio)

$$H_{i,j} = L_{j-1}h_{L_{j-1}} + V_{j+1}h_{V_{j-1}} + F_j h_{F_j} - (L_j + U_j)h_{L_j} - (V_j + W_j)h_{V_j} + Q_j = 0 \tag{8}$$

As energias cinéticas e potenciais são desprezadas. Uma equação de balanço material geral pode ser usada no lugar das Equações 3 e 4, $\sum_{i=1}^j z_{i,j} = 1$, somando com a Equação 1 para todos os componentes e estágios acima do 1 através de j , tem-se então a Equação 9:

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 \tag{9}$$

Em geral, $K_{i,j} = K_{i,j}\{T_j, P_j, x_j, y_j\}$, $h_{V_j} = h_{V_j}\{T_j, P_j, y_j\}$ e $h_{L_j} = h_{L_j}\{T_j, P_j, x_j\}$. Se estas relações não são contadas como equações e estas três propriedades não são contadas como variáveis, cada estágio de equilíbrio é definido unicamente por $2C + 3$, C = Compostos, equações MESH.

A coluna possui um total de 71 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. Nas simulações foram utilizados os seguintes dados 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

As simulações foram realizadas com o simulador Aspen Plus™, utilizando a rotina de destilação RadFra™, assumindo que em cada estágio o equilíbrio entre as fases é estabelecido. Foi utilizada uma eficiência de Murphree na separação das fases igual a 70 % para todos os estágios, exceto no refeedor e no condensador, onde a eficiência foi fixada em 100 %.

O Equilíbrio-Líquido-Vapor (ELV) e o Equilíbrio-Líquido-Líquido-Vapor (ELLV) foram simulados, onde o modelo *Non-Random Two-Liquid* (NRTL) foi utilizado para o cálculo do coeficiente de atividade da fase líquida (γ), e as correlações de Hayden-O'Connell foram utilizadas para o cálculo do coeficiente de fugacidade da fase vapor. O número de graus de liberdade no processo de destilação são 2, onde aqui foram especificadas as seguintes variáveis: carga térmica do Refeedor (Q_R) e vazão de destilado (D).

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 chaves, principalmente com o 1,2-EDC, o $CHCl_3$ e o CCl_4 . Os gráficos das Figuras 4 e 5 foram gerados no software Aspen Plus™, representam os azeótropos de mínimo formados com os componentes citados acima.

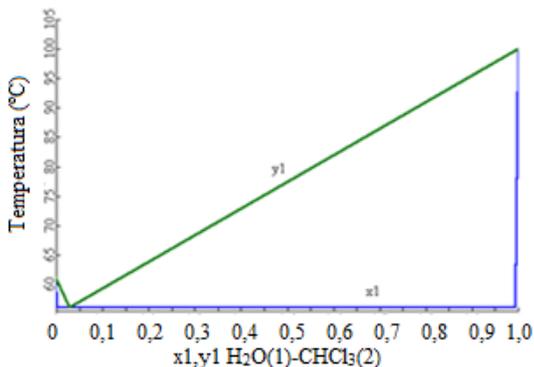


Figura 4. Diagrama T-xy para H₂O- CHCl₃.

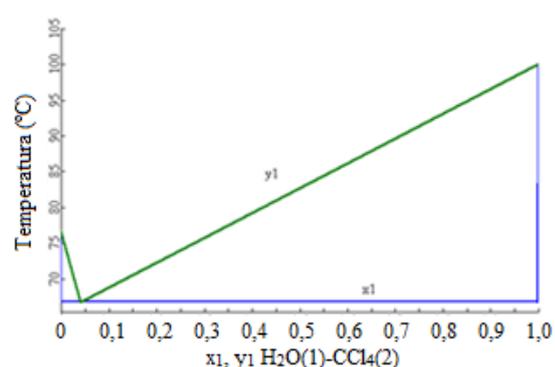


Figura 5. T-xy para H₂O-CCl₄.

4. RESULTADOS

O processo foi simulado em regime estacionário no software *Aspen Plus*TM com os dados reais, conforme as Tabelas 1 e 2. Os perfis de concentração para os quatro principais componentes e de temperaturas nos estágios da coluna são mostrados nas Figuras 6 e 7, respectivamente.

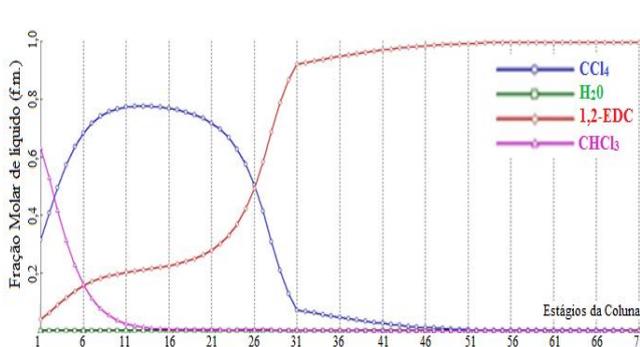


Figura 6. Perfis de concentração dos compostos.

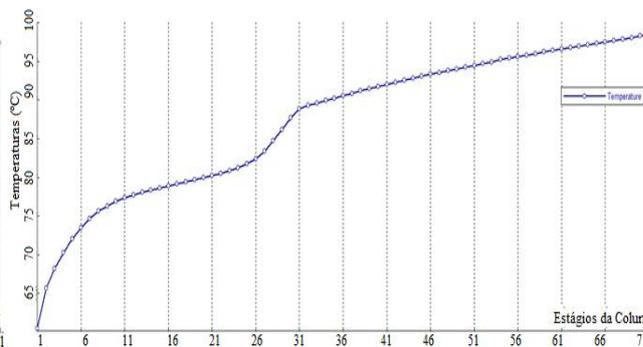


Figura 7. Perfis de temperaturas.

Foram avaliadas as variáveis manipuladas vazão de destilado (D), carga térmica (Q) e vazão de refluxo (R) com relação às controladas X_{CCl4} e X_{CHCl3} , e temperaturas dos estágios. Caso 1: foi introduzido uma perturbação em Q mantendo D constante, logo em seguida perturbou-se D mantendo Q constante, ambas perturbações de graus de +10%. Caso 2: foram avaliadas os pares R e Q, com relação às controladas X_{CCl4} e de X_{CHCl3} , e temperaturas dos estágios. Inicialmente foi introduzido uma perturbação em R mantendo Q constante, logo em seguida perturbou-se Q mantendo R constante, 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 8 representa a matriz de sensibilidade U da SVD dos pares de variáveis Q e D, com relação à temperatura.

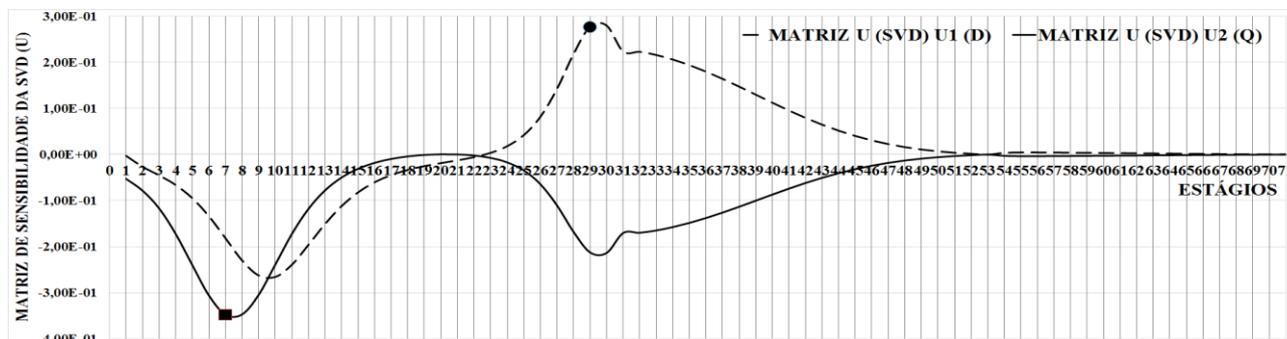


Figura 8. Matriz de sensibilidade da SVD, pares Q-D frente as temperaturas dos estágios.

A Figura 8 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_{CH3} - 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 , dos ganhos relativos $\Lambda_{12} = \Lambda_{21} = 1,2333 = \frac{12333}{10000} = \frac{1}{0,81}$, implica em um aumento de ganho de 1,25 quando a outra malha está fechada. Obviamente, esse emparelhamento de variáveis, X_{CCl4} - Q e X_{CH3} - D resulta em menos sensibilidade à interação do que o outro.

Assim, por este critério a carga do Refervedor (Q) deve ser utilizada para controlar a composição de Tetracloroeto de Carbono ($X_{CCl4(B)}$), e a vazão de destilado (D) deve ser utilizada para controlar a concentração de Clorofórmio ($X_{CH3(B)}$), 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 .

REFERÊNCIAS

- Bristol, E. H., January, 1966. On a New Measure of Interaction for Multivariable Process Control. IEEE, Transactions on Automatic Control, pp. 133-134.
- Kalid, R. A., 2007. Apostila: Controle de Coluna de Destilação. LACOI – Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal da Bahia – UFBA.
- Luyben, W. L. 2006 e 2012. Distillation Design and Control Usign Aspen Simulation. New Jersey. Ed: John Wiley & Sons, 1st and 2nd.
- Moore, Charlie. 1980. Application of Singular Value Decomposition to the Design, Analysis, and Control of Industrial Processes. Proc. Am. Control Conf., 643.
- Morais JR, A. A., 2011. 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., 2011. Separation Process Principles, 3rd Ed. John Wiley & Sons, New York.

RESPONSABILIDADE AUTORAL

“O(s) autor(es) é(são) o(s) único(s) responsável(is) pelo conteúdo deste trabalho”.

OPTIMAL SELECTION OF INPUTS FOR SOFT SENSOR AND CONTROL FOR AN DISTILLATION COLUMN OF HIGH PURITY

Morais Jr, A. A., aamj@ct.ufpb.br¹
Rojas, L. O. A., leopoldo@ct.ufpb.br²
Brito, R. P., arjir@bol.com.br¹

¹Federal University of Campina Grande, Department of Chemical Engineering, Street Aprígio Veloso, Nº 882, Bodocongó, ZIP-CODE: 58109-970, Campina Grande, Paraíba, Brazil.

²Federal University of Paraíba, Department of Chemical Engineering, University Campus I, ZIP-CODE: 58051-900, João Pessoa, Paraíba, Brasil.

Abstract. *This paper is the study of the variables of a distillation column of high purity, with the objective of developing a methodology to select the input variables that affect the compositions of the product in the process. The analysis is made using the mathematical techniques of Singular Value Decomposition (SVD) and the Relative Gain Array (RGA) implemented in the Matlab® software. The distillation column is simulated with real data of a commercial plant in the Aspen Plus™ software. In the process of purification of 1,2 - Dichloroethane (1,2-EDC), before it will converge on your cracking for Vinyl Monomer Chloride (VMC), the 1,2-DCE should be dry, with a content less than 10 ppm water, and have a high purity (greater than 99.5% w/w), given that the cracking process is highly susceptible to inhibition and deposition of trace impurities. The difficulties in obtaining real-time control of the variables of interest, such as the presence of the compounds carbon tetrachloride (CCl4) and Chloroform (CHCl3) motivated the work. The results obtained in this paper indicate paths where temperature control or single/dual compositions can be applied, or even which input variables can compose an soft sensor of compositions, allowing the construction these virtual analyzers and the application of inferential control.*

Keywords: *selection of inputs, distillation column of high purity, SVD,RGA, high purity*