



PIVIC/CNPq/UFPG-2010

## OTIMIZAÇÃO E CONTROLE DE PROCESSOS QUÍMICOS DE GRANDE PORTE

Marina da Silva Zimmermann<sup>1</sup>, Antônio Carlos Brandão de Araújo<sup>2</sup>

### RESUMO

De forma sucinta, o projeto estuda e analisa as decisões estruturais relacionadas ao projeto de sistema de controle aplicado às plantas químicas, mais especificamente quais variáveis podem e devem ser controladas, medidas, manipuladas e quais relações devem ser estabelecidas entre elas. Um dos principais objetivos é determinar o conjunto de variáveis as quais, quando mantidas em seus respectivos "set points", indiretamente conduz a uma (quase) ótima operação com uma perda econômica aceitável, sem a necessidade de se re-otimizar o processo quando distúrbios ocorrerem, reduzindo a frequência com que otimização em tempo real (RTO) que na maioria dos casos não é simples.

Este trabalho teve como objetivo compreender o funcionamento de uma planta de produção de acetato de vinila além de uma otimização para a produção enfatizando a maximização de lucros com a redução de uso de matérias-primas frente a distúrbios operacionais. Tal otimização foi efetuada utilizando-se de um código feito em matlab por Michael Luyben, Thomas McAvoy, Rong Chen, e Kedar Dave que simula o processo de produção do acetato em conjunto com algumas funções de otimização do software.

Com os resultados obtidos pôde-se ver que as variáveis em estudo da planta de produção já se encontram em um valor muito próximo do estado de otimização.

**Palavras-chave:** Plantas de Processos Químicos, Modelagem, Simulação.

### Optimization and control of Chemical Processes of large size.

### Abstract

In brief, the design studies and analyzes the decisions related to the structural design of control system applied to chemical plants, specifically what variables can and should be controlled, measured, handled and what relations should be established between them. One of the main goals is to determine the set of variables which, when kept in their respective set points, indirectly leads to a (almost) optimal operation with acceptable economic loss without the need to re-optimize the process as disorders occur, reducing the frequency with which real-time optimization (RTO) that in most cases is not simple.

This study aimed to understand the operation of a plant for production of vinyl acetate in addition to an optimization for the production emphasizing the maximization of profits with a reduction in use of raw materials front of operational disturbances. This optimization was performed using a Matlab code done by Michael Luyben, Thomas McAvoy, Rong Chen, and Kedar Dave that simulates the process of production of acetate together with some optimization functions of the software.

With the results we could see that the variables in the study of plant production are already at a value very close to the state of optimization.

**Keywords:** Chemical process plants, Modeling, Simulation.

<sup>1</sup>Aluna do Curso de Engenharia Química, Unidade Acadêmica de Engenharia Química, UFPG, Campina Grande, PB, E-mail: ninaszi15@hotmail.com

<sup>2</sup>Engenheiro Químico, Professor. Doutor, Unidade Acadêmica de Engenharia Química, UFPG, Campina Grande, PB, E-mail: antonio@deq.ufcg.edu.br

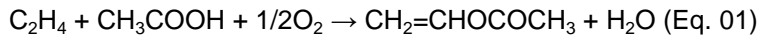
## INTRODUÇÃO

Para realizar a otimização de um modelo matemático adequado do processo químico em estudo e a determinação da capacidade de produção frente a distúrbios, alguns itens devem ser abordados:

1. Definição dos objetivos operacionais, ou seja, identificar as restrições operacionais e definir as funções de custo a serem minimizadas;
2. Determinar as variáveis manipuladas e os graus de liberdade do sistema (dinâmicos e estacionários);
3. Selecionar quais variáveis primárias devem ser controladas;
4. Definir onde a capacidade de produção deve ser ajustada;
5. Seleção das variáveis secundárias;
6. Emparelhamento das variáveis secundárias com as variáveis manipuladas;
7. Manter as variáveis de Controle primárias nos seus respectivos "set points" ótimos usando como graus de liberdade os "set points" informados à camada regulatória e qualquer outra variável manipulada que não esteja em uso;
8. Identificar as restrições ativas e calcular os "set points" ótimos para as variáveis primárias de controle;
9. Para validar a estrutura desejada, tem-se o uso de um modelo não linear do processo.

Nesta proposta, estes dois aspectos serão abordados utilizando-se uma planta química bastante interessante: a produção de acetato de vinila.

Neste processo, a reação do etileno com ácido acético produz acetato de vinila e água através das reações:



Existem 10 sistemas básicos neste processo as quais incluem

1. Um vaporizador;
2. Um reator catalítico do tipo "plugflow";
3. Um trocador de calor de alimentação;
4. Um separador;
5. Um compressor;
6. Um absorvedor;
7. Um sistema de remoção de gás carbônico;
8. Um sistema de remoção de gás;
9. Um tanque para o reciclo de líquido;
10. Uma coluna de destilação azeotrópica com decantador.

O fluxograma do processo pode ser visto na Figura 1.

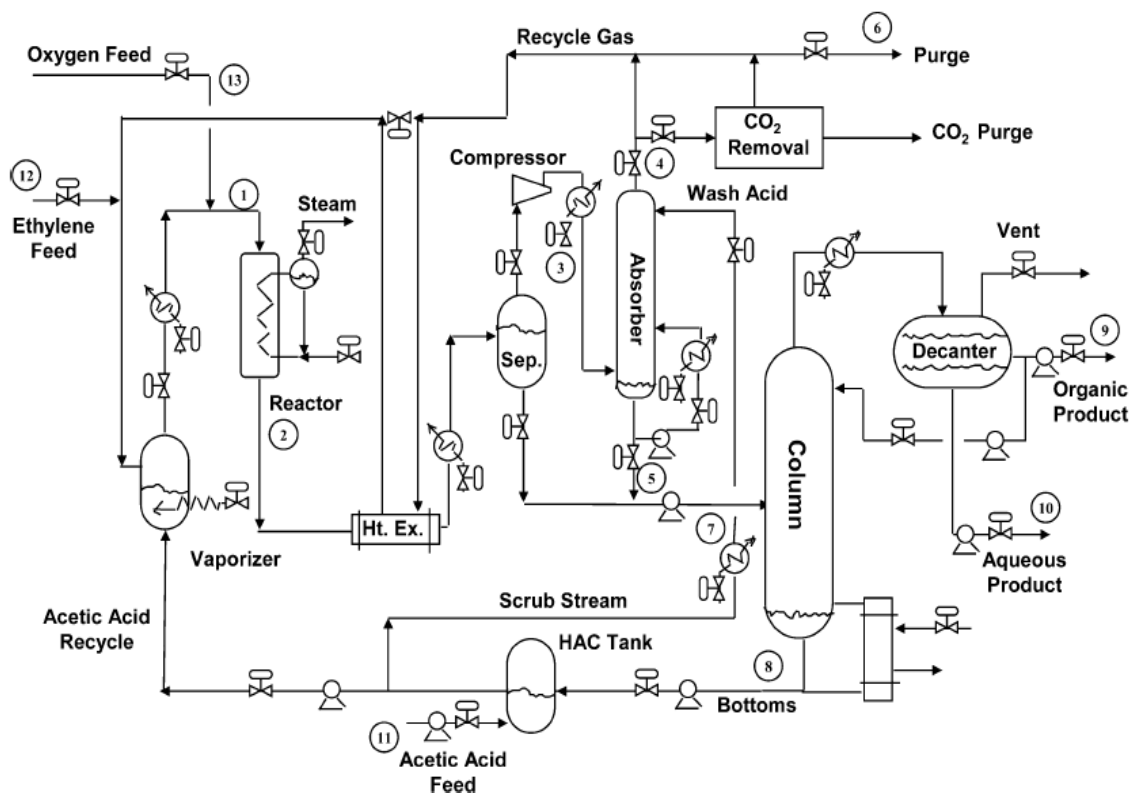


Figura 1. Fluxograma do processo de produção de acetato de vinila.

Um modelo matemático deste processo (Chen et al. 2003) possui 246 estados, 26 variáveis manipuladas e 43 variáveis medidas, constituindo assim um processo de larga escala, extremamente apropriado para a aplicação da técnica de estruturas de controle descrita anteriormente. A sua descrição detalhada se encontra em Chen et al. (2003).

## MATERIAIS E MÉTODOS

Este trabalho foi desenvolvido no Laboratório de Experimentação Numérica de Processos do Departamento de Engenharia Química no Centro de Ciências e Tecnologia da Universidade Federal de Campina Grande – PB.

### ESTUDO DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DE ACETATO DE VINILA (VAc).

No processo de produção de acetato de vinila (VAc) existem 10 unidades básicas de operação que incluem um vaporizador, um reator catalítico do tipo “plugflow”, um trocador de calor de alimentação, um separador, um compressor, uma absorvedor, um sistema de remoção de gás carbônico, um sistema de remoção de gás, um tanque para reciclo de líquido e uma coluna de destilação azeotrópica com decantador, como pode ser observado na figura 6. Existem ainda 7 componentes químicos no processo.

Etileno ( $C_2H_4$ ), oxigênio puro ( $O_2$ ), ácido acético (HAc), água ( $H_2O$ ), dióxido de carbono ( $CO_2$ ), etano ( $C_2H_6$ ) que é inerte na reação e o próprio acetato de vinila (VAc) como produto. A reação de produção do VAc ocorre de acordo com as equações 01 e 02.

Para se fazer um modelo do processo primeiro deve-se considerar os seguintes pressupostos para o processo geral:

1) Não existem componentes leves ( $O_2, CO_2, C_2H_4, C_2H_6$ ) na coluna de destilação. A razão para este pressuposto é o de que, na realidade, os componentes leves possuem baixa concentração e que se mantêm essencialmente na fase vapor dentro da coluna. Os mesmos deixam a coluna através de um sistema de ventilação no decantador. A corrente líquida que alimenta a coluna contém apenas VAc,  $H_2O$  e HAc. Já a corrente gasosa contém os quatro componentes leves que são enviados de volta e combinados com o vapor produzido pelo separador para formar o vapor que alimenta o absorvedor.

2) Para simplificar a modelagem do ciclo dinâmico de gás, presume-se que toda a queda de pressão do gás ocorre apenas no reator. Existem duas válvulas de vapor efluente no processo, uma no vaporizador e outra no separador. De acordo com o pressuposto não ocorrem quedas de pressão nas válvulas.

3) A quantidade de gás circulando no processo é fixa.

4) A dinâmica do compressor e da bomba são ignorados por ser muito rápida.

5) A temperatura da casca do reator perfeitamente controlada.

6) A temperatura da jaqueta de resfriamento do separador é uma variável manipulável.

7) Para simplificação um balanço de energia em estado estacionário é aplicado nos aquecedores e resfriadores para calcular a temperatura de corrente de saída. Para introduzir uma dinâmica, dois minutos de “delay” são adicionados na temperatura de saída de cada aquecedor e resfriador.

8) As unidades da taxa de fluxo molar, fluxo de calor, e temperatura são respectivamente, kmol/min, kcal/min e °C.

Uma vez aceitado estes pressupostos, parte-se então para uma análise física, específica de cada equipamento utilizado na modelagem do processo e as equações utilizadas em cada um deles. O sistema como um todo pode ser observado na figura 1.

É possível verificar que o sistema é alimentado pelas correntes 11, 12 e 13 com ácido acético, etileno e oxigênio respectivamente. O corrente do etileno se mistura com uma corrente de gás de reciclo que é utilizada para reaproveitar o calor perdido no trocador de calor, essa corrente resultante vai para o

vaporizador juntamente com a corrente de ácido acético onde são vaporizados e seguem para o reator onde acontece a formação do acetato de vinila seguindo as reações mencionadas acima. Do reator sai um produto misto líquido-gás que é separado no separador, a parte líquida vai direto para a coluna de destilação e a parte gasosa segue para um absorvedor onde é lavado com ácido acético para se retirar quase que por completamente o acetato de vinila que ainda resta na mistura gasosa. Na base do absorvedor sai acetato de vinila com o ácido acético que foi utilizado na lavagem e estes seguem para a coluna de destilação, já a saída do topo do absorvedor contém apenas gases que serão reciclados no processo. Na coluna de destilação após todos os estágios temos ácido acético na base e uma mistura de acetato de vinila e água basicamente no topo, que será condensada e em um decantador serão separadas a água do produto orgânico (acetato de vinila).

**a) Dados Termodinâmicos e Propriedades Físicas** – O equilíbrio líquido-vapor (ELV) é calculado assumindo uma fase de vapor ideal e os parâmetros Wilson de coeficiente de atividade líquida. A pressão de vapor dos componentes é feita utilizando a equação de Antoine. E o peso molecular dos componentes utilizados possuem 3 casas decimais.

**b) Vaporizador** - O vaporizador é implementado como um sistema misto com sete componentes. Possui uma entrada de fluxo de gás ( $F_1$ ), que é uma mistura do fluxo de  $C_2H_4$  da alimentação e da corrente efluente de vapor do absorvedor. Também possui um fluxo líquido de entrada ( $F_2$ ), que vem do tanque de HAC. Há oito variáveis de estado no vaporizador, incluindo o nível de líquido e a fração molar de  $O_2, CO_2, C_2H_4, VAc, H_2O, HAC$ . Um balanço de massa total, componentes e energia são feitos para se modelar a dinâmica no equipamento:

$$\rho_L^{VAP} \dot{V}_L^{VAP} = F_1^{VAP} MW_1^{VAP} + F_2^{VAP} MW_2^{VAP} + F_V^{VAP} MW_V^{VAP} \quad (\text{Eq. 03})$$

$$M_L^{VAP} \dot{x}_{L,i}^{VAP} = F_1^{VAP} (x_{1,i}^{VAP} - x_{L,i}^{VAP}) + F_2^{VAP} (x_{2,i}^{VAP} - x_{L,i}^{VAP}) - F_V^{VAP} (x_{V,i}^{VAP} - x_{L,i}^{VAP}) \quad (\text{Eq. 04})$$

$$Cp_L^{VAP} M_L^{VAP} \dot{T}_L^{VAP} = F_1^{VAP} (h_1^{VAP} - h_L^{VAP}) + F_2^{VAP} (h_2^{VAP} - h_L^{VAP}) - F_V^{VAP} (h_V^{VAP} - h_L^{VAP}) + Q^{VAP} \quad (\text{Eq. 05})$$

No vaporizador existem 2 variáveis manipuláveis que são o  $Q^{VAP}$  e  $F_V^{VAP}$ , o volume de líquido  $V_L^{VAP}$  é  $2,8 \text{ m}^3$  e a temperatura de saída é especificada para ser  $150^\circ\text{C}$ .

**c) Reator Catalítico do Tipo "PlugFlow"** – É implementado como sendo um sistema com 10 seções axiais onde ocorrem as duas reações de produção do VAc. Não existem gradientes de velocidade, concentração ou temperatura. A transferência de massa e calor entre o fluido e o catalisador é muito rápida. A temperatura da casca é uniforme. A queda de pressão é linear ao longo do tubo e é independente do tempo, representado pela equação:

$$\Delta P / \Delta Z = f \rho_1^{RCT} (v_1^{RCT})^2 \quad (\text{Eq. 06})$$

Onde:  $\Delta P / \Delta Z$  é a queda de pressão por unidade de comprimento

$f$  é a constante fator de fricção

$\rho_1^{RCT}$  é a densidade da corrente de alimentação

$v_1^{RCT}$  é o fluxo volumétrico da corrente de alimentação

O balanço de massa e de energia é feito com base no modelo dinâmico de reator tubular desenvolvido por Reyes e Luyben.

$$\varepsilon \frac{\delta C_{i,j}}{\delta t} = - \frac{\delta(C_{i,j} v_i)}{\delta z} + \Phi_j \rho_b (\theta_{1,j} r_{1,i} + \theta_{2,j} r_{2,i}) \quad (\text{Eq. 07})$$

$$\left( \varepsilon \sum_{k=1}^7 C_{j,k} Cp_{j,k} + \rho_b Cp_b \right) \frac{\delta T_j}{\delta t} = - \frac{\delta [v_i \sum_{k=1}^7 (C_{j,k} Cp_{j,k}) T_j]}{\delta z} - \Phi_j \rho_b (r_{1,i} E_1 + r_{2,i} E_2) - Q_j^{RCT} \quad (\text{Eq. 08})$$

Onde a indexação  $i$  representa o número da seção e  $j$  o componente  $j$ .  $\Phi_i$  é a atividade do catalisador na seção  $i$ .  $\theta_{1,j}$  e  $\theta_{2,j}$  são o coeficiente estequiométrico para o componente  $j$  nas duas reações.  $r_{1,i}$  e  $r_{2,i}$  são taxa de reação na seção  $i$ .  $E_1$  e  $E_2$  são os calores das reações.  $Q_i^{RCT}$  é o fluxo de calor externo por unidade de volume na seção  $i$ , que é obtida pela equação:

$$Q_i^{RCT} = UA(T_i - T_s) \quad (\text{Eq. 09})$$

Onde  $T_s$  é a temperatura da casca

A temperatura na saída do reator ao final do processo é  $159,17^\circ\text{C}$ .

**d) Trocador de Calor de Alimentação** – Não é necessário um modelo rigoroso da dinâmica do processo no trocador de calor, tendo em vista que esta dinâmica não tem grande importância na resposta

do sistema. Existe uma variável manipulável que é a razão do “bypass” e a temperatura do efluente na saída do trocador é 134°C.

**e) Separador** – O separador é modelado como um condensador parcial. Em cada ponto no tempo, um estado estacionário equilíbrio-flash é calculado para obter as taxas de fluxo e as propriedades da corrente de vapor e líquido imediatamente após a válvula de queda de pressão na corrente de alimentação do separador. Em operação a pressão do separador é 84,25 psia e a temperatura da fase líquida é 40°C. As variáveis manipuladas são o fluxo da corrente de saída de líquido, o fluxo da corrente de saída de vapor, e a temperatura da jaqueta de resfriamento.

**f) Compressor** – A pressão aumenta no compressor de acordo com as equações:

$$P_{OUT}^{COM} = P_{IN}^{COM} + \Delta P \quad (\text{Eq.10})$$

$$\Delta P = \gamma \rho^{COM} \quad (\text{Eq.11})$$

Onde  $\gamma$  é o coeficiente do compressor,  $\rho^{COM}$  é a densidade na corrente de entrada do compressor.

**g) Absorvedor** – É modelado de forma que é representado por 8 estágios e em cada estágio a massa transferida da fase vapor para a fase líquida é dado por:

$$N_j = \min[N_{MT}(y_i - y_{INT,j}), 1/2F_{V,i}y_i] \quad (\text{Eq.12})$$

Onde  $N_i$  é a taxa de fluxo molar do componente  $i$ ,  $N_{MT}$  é o coeficiente de transferência de massa,  $y_i$  é a fração molar do componente  $i$  da corrente de vapor,  $y_{INT,i}$  é a fração molar do componente  $i$  na interface gás - líquido.  $F_{V,i}$  é o fluxo molar do componente  $i$  na corrente de vapor. Em operação o volume de líquido é 0,25 m<sup>3</sup> e a temperatura da corrente de saída dos dois resfriadores é 25°C.

**h) Sistema de Remoção de Gás Carbônico** – Este sistema é modelado de forma que sua eficiência é dada pela equação,

$$eff = 0,995 - 3,14 \times 10^{-6} (F_{CO_2} - 6,4136) - 32,5(x_{CO_2} - 0,01342) \quad (\text{Eq.13})$$

Onde  $F_{CO_2}$  é a taxa de fluxo na corrente de entrada e  $x_{CO_2}$  é a fração molar de  $CO_2$  na corrente de entrada.

**i) Sistema de Remoção de Gás** – Este sistema é feito para remover todos os componentes leves na corrente de alimentação da coluna antes que entre na mesma. Ele separa os sete componentes em duas correntes distintas, uma de gás que volta e se combina com o vapor produzido pelo separador e uma corrente líquida que alimenta a coluna.

**j) Coluna de Destilação Azeotrópica** – Coluna de destilação que contém 20 estágios. A destilação azeotrópica que ocorre na coluna é um processo de separação difusional realizado quando a mistura contendo os componentes que precisam ser separados apresentam baixa volatilidade relativa. Nesta coluna o coeficiente de eficiência de cada estado é de 50% e é modelada seguindo o modelo proposto por Luyben e Tyreus no artigo “*An Industrial Design/Control Study for the Vinyl Acetate Monomer Process*”.

**k) Tanque de HAc** – É simplesmente usado para misturar o HAc das correntes de refluxo com o HAc da corrente de alimentação e reenvia-lo para o processo.

É importante notar que o sistema possui limites de operação nos seguintes pontos:

- A composição de oxigênio não pode ultrapassar 8% em mols no gás de reciclo.
- A pressão do gás de reciclo não pode ultrapassar 140 psia
- A temperatura ao longo do reator não pode ultrapassar 200°C
- O nível de líquido no vaporizador, separador, base do absorvedor, base da coluna e decantador devem operar no intervalo de 10-90% de sua capacidade
- A temperatura da alimentação do reator deve ser maior que 130°C
- A composição de ácido acético no decantador não deve superar 0,06% por mol
- A composição de acetato de vinila na base da coluna não deve superar 0,01% por mol

## ESTUDO DO MATLAB.

Tanto em meios industriais quanto em meio acadêmicos o Matlab é uma ferramenta computacional bastante utilizada, pois trata-se de um software de alta performance voltado para o cálculo numérico. É possível a realização de aplicações em vários níveis de abordagens que compreendem uma larga fatia dos problemas científicos e de engenharia, dentre eles:

- Análise Numérica
- Análise de Dados

- Cálculo Matricial
- Processamento de Sinais
- Construção de Gráficos

Dois fatores muito importantes na utilização do software é que ele facilita a implementação dos problemas, pois, são escritos ou implementados somente como são escritos matematicamente (grande vantagem sobre a programação tradicional), tornando a obtenção dos resultados muito mais rápidas. E por fim o fato de todos os dados (na parte interna processamento de e aquisição de dados) são estruturados na forma de matrizes, de onde vem o seu nome “Matlab – Matrix Laboratory”.

Um código de domínio público feito em MATLAB por McAvoy e Luyben foi feito utilizando esta modelagem para se controlar o processo de produção de acetato de vinila. A modelagem total é grande e em parte altamente não-linear. Obtendo resultados bastante satisfatórios se comparados a softwares já feitos para o mesmo processo.

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

Foi desenvolvido um programa Simulink (Ferramenta Matlab) para representar a planta química real. Este programa foi desenvolvido um programa rigoroso, não linear, e um programa linear. Esses foram comparados e os resultados são mostrados aqui em forma de gráficos. Foram usados apenas alguns inputs e alguns outputs, pois eles são muitos, então foram selecionados apenas 11 inputs e 6 outputs.

Os gráficos foram feitos da seguinte maneira:

- Antes de rodar o Simulink alterou-se o valor final do input Y (um de cada vez, ou seja o programa Simulink foi rodado 11 vezes). Y tem os seguintes valores: 1, 3, 5, 6, 7, 9, 11, 14, 15, 20, 21;
- Rodar o Simulink e salvar;
- Na janela de comando chamar e salvar ym e yml;
- Em seguida plotar os gráficos com o seguinte comando:

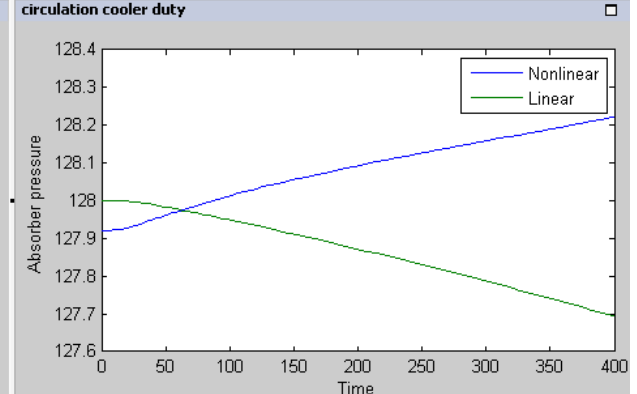
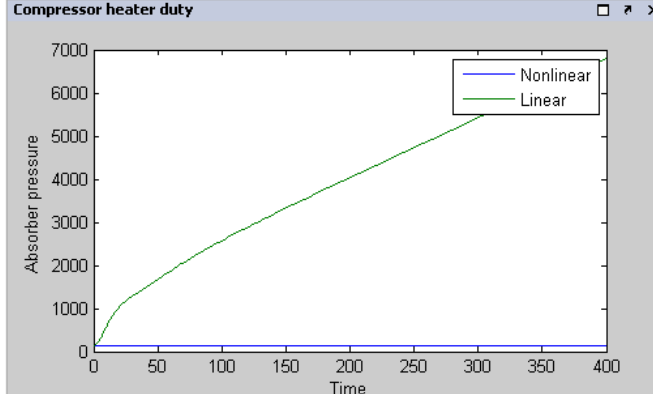
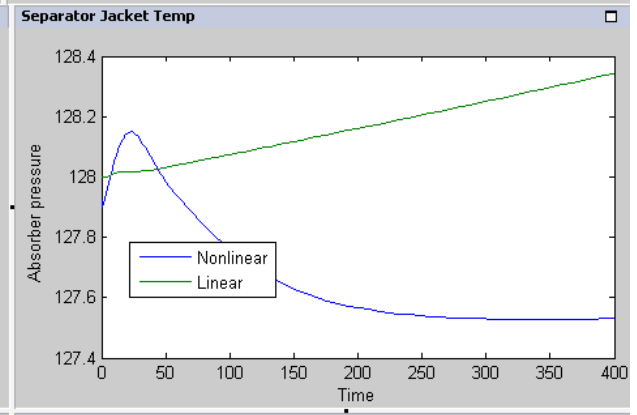
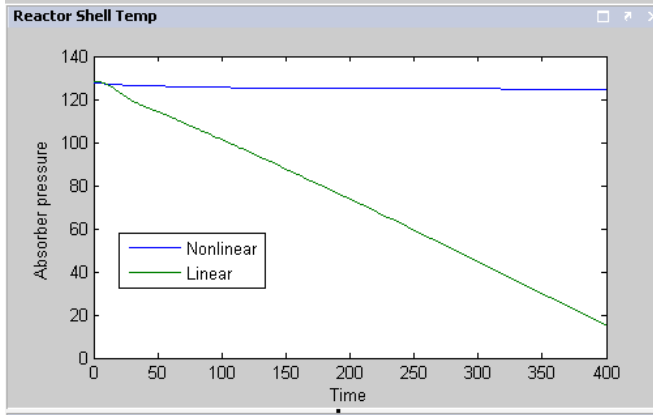
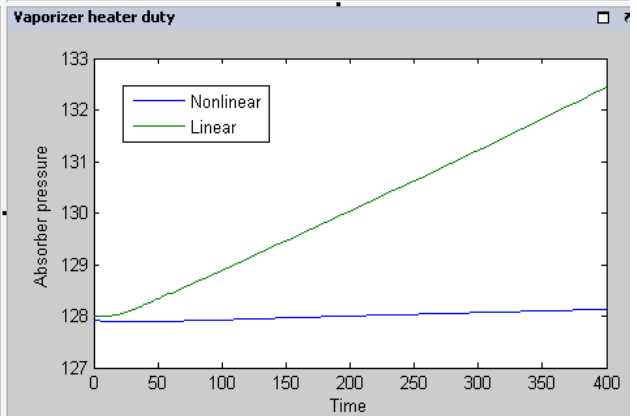
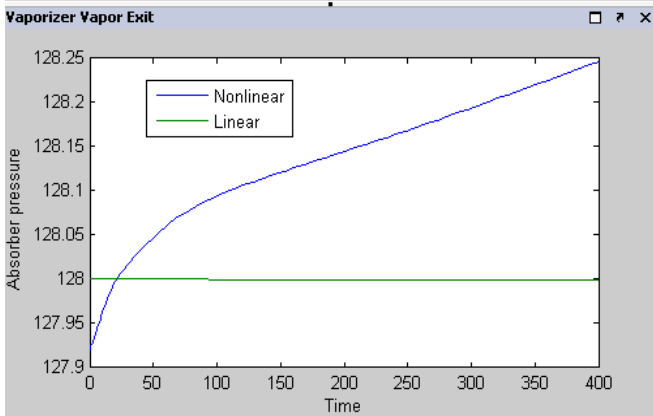
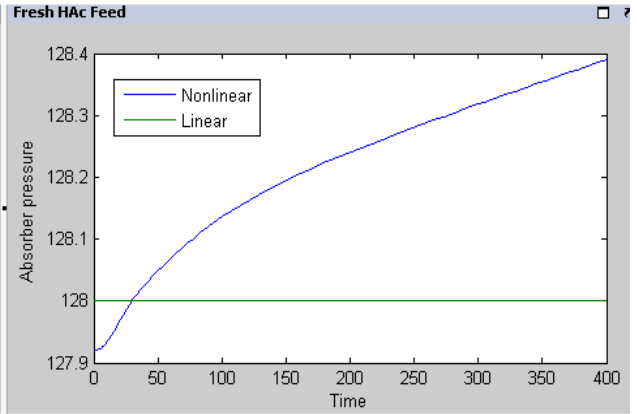
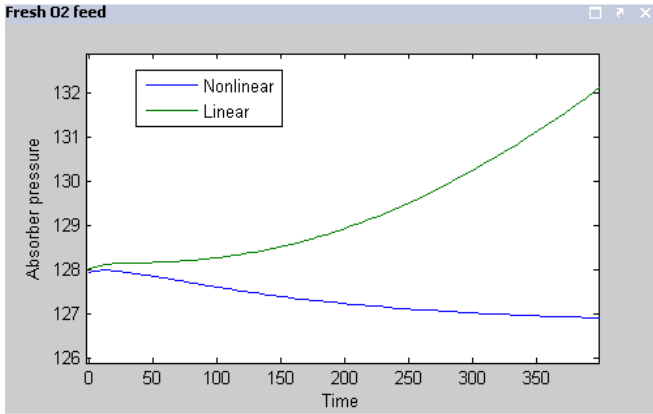
```
plot(ym.time,ym.signals(X).values,yml.time,yml.signals(1).values(:,X)),legend('Nonlinear','Linear')
```

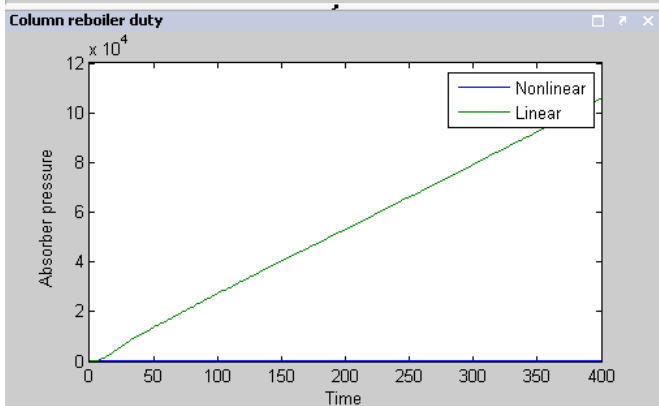
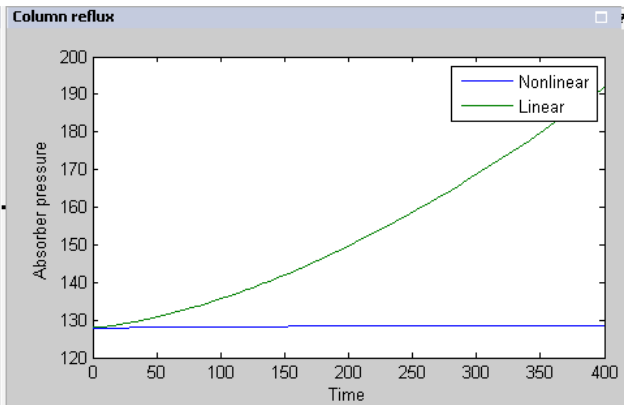
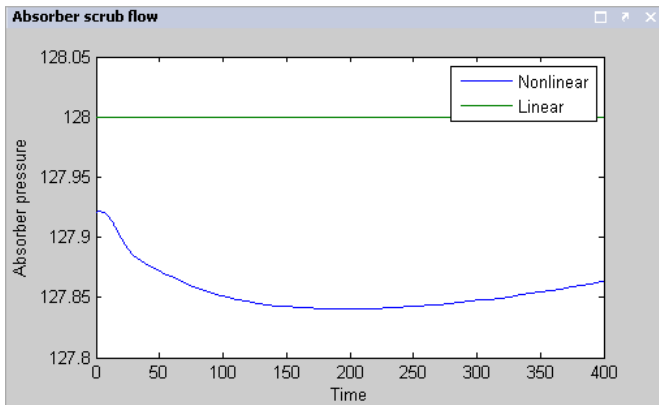
Onde X tem os seguintes valores: 12, 17, 22, 26, 27, 37. (Para cada gráfico é usado apenas um valor de X).

- No gráfico nomear os eixos:  
Eixo X : Time  
Eixo Y: Nome da Output(X)  
Título do Gráfico: Nome do input (Y) que teve seu valor final alterado.

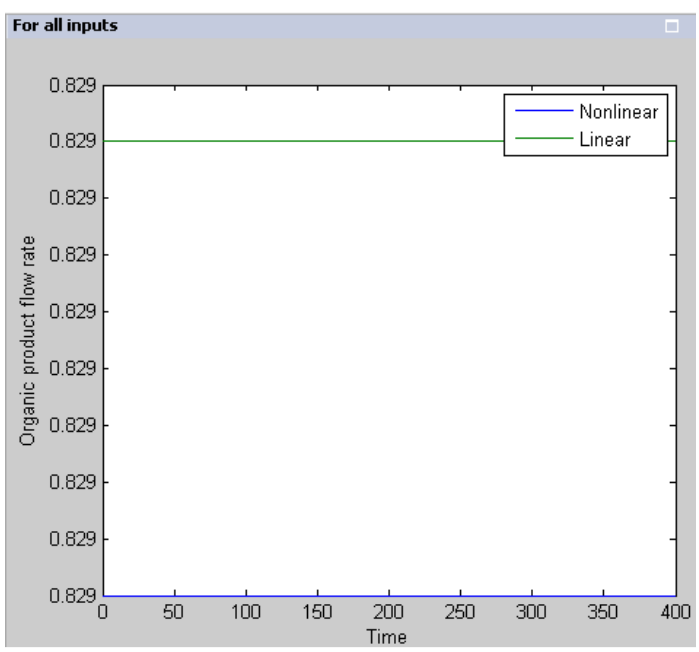
Aqui onde são mostrados os resultados, os gráficos são mostrados em função de seus outputs, afim de facilitar a comparação dos efeitos causados, nos outputs, pela mudança de valor de cada input.

➤ Output 12 (Absorber pressure)



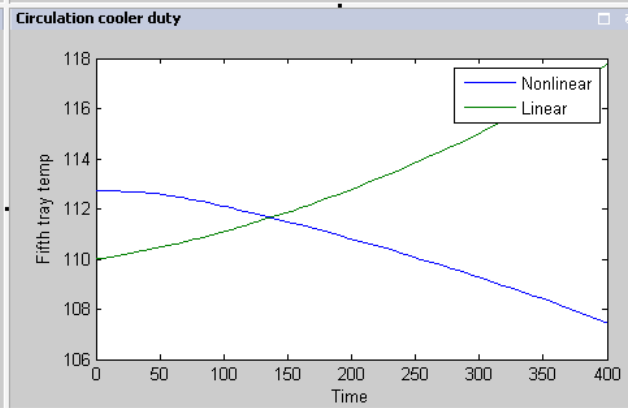
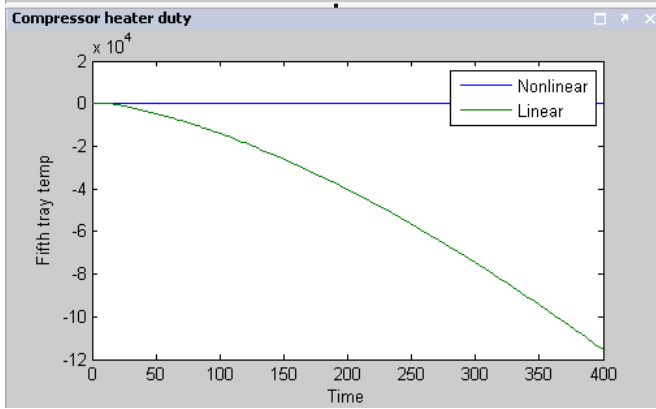
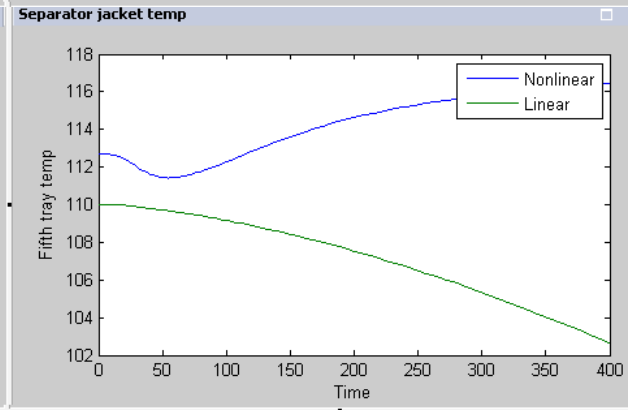
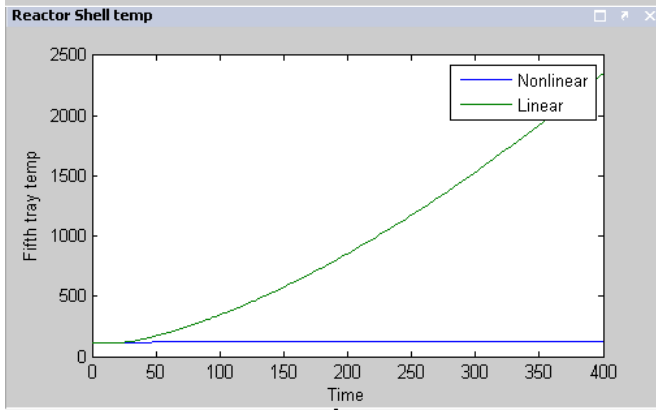
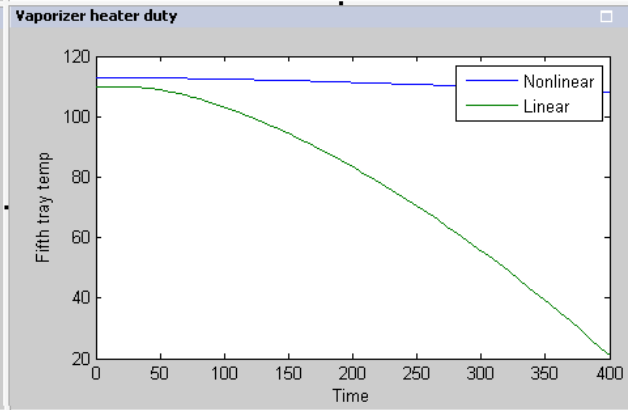
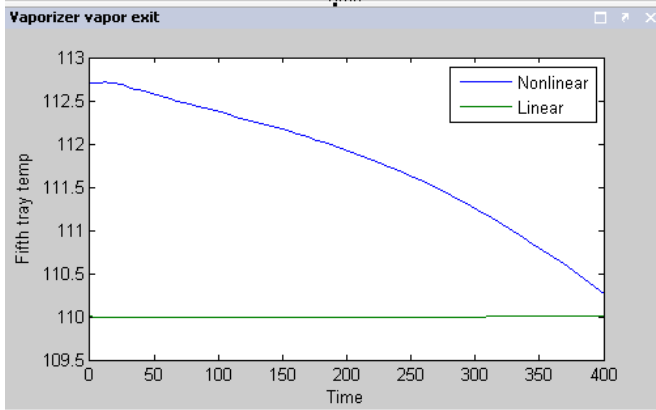
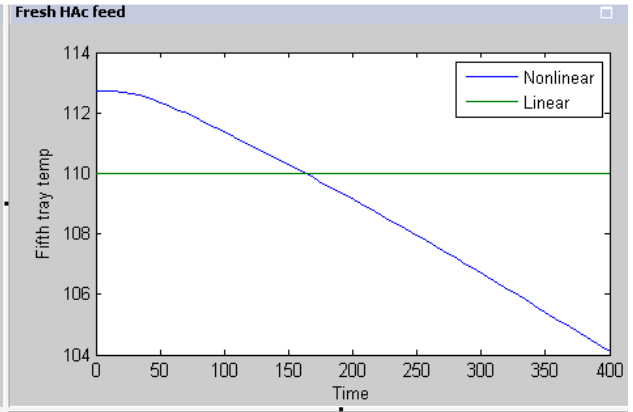
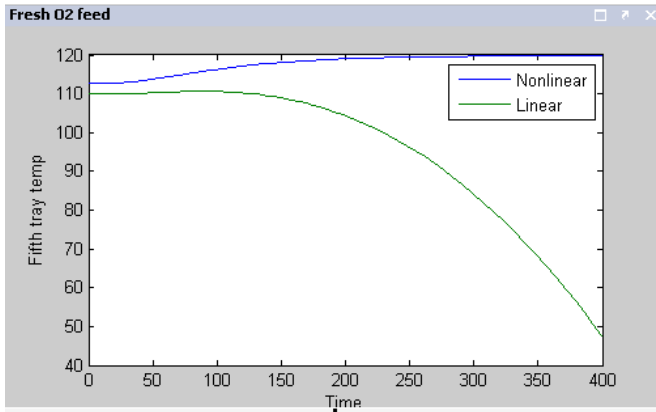


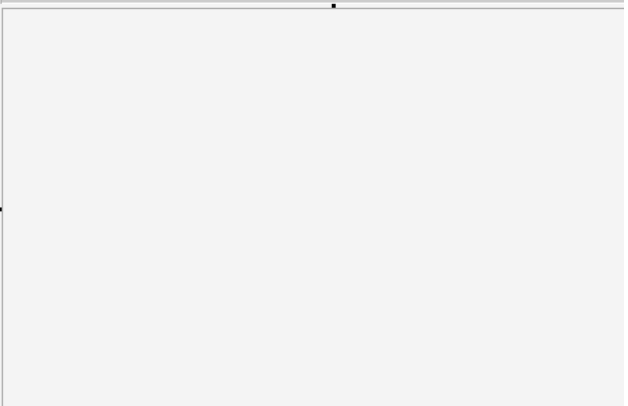
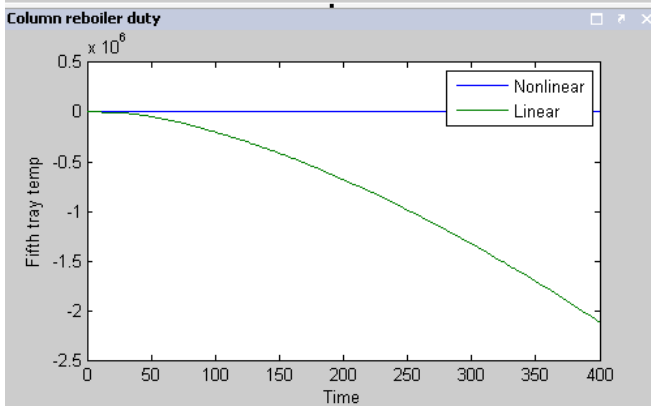
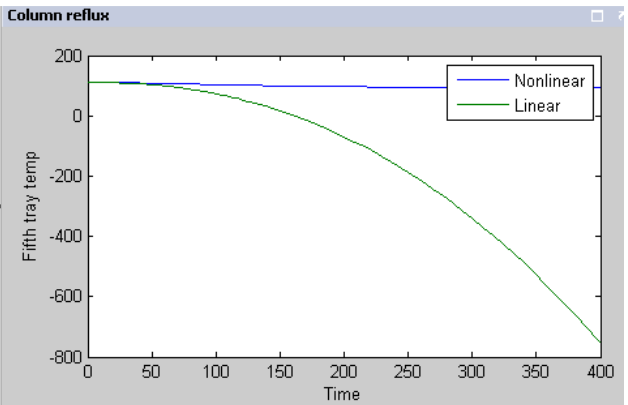
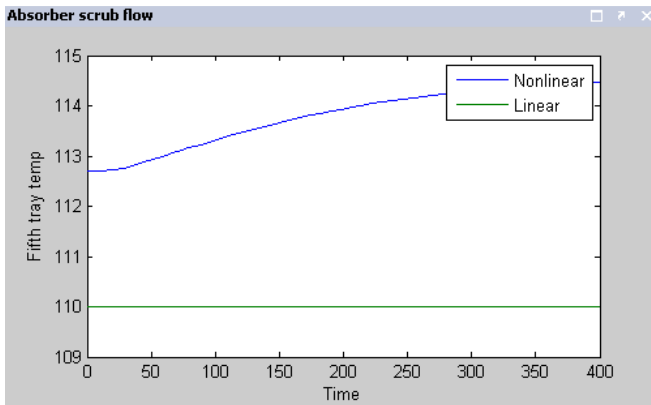
➤ Output 17 (Organic product flow rate)



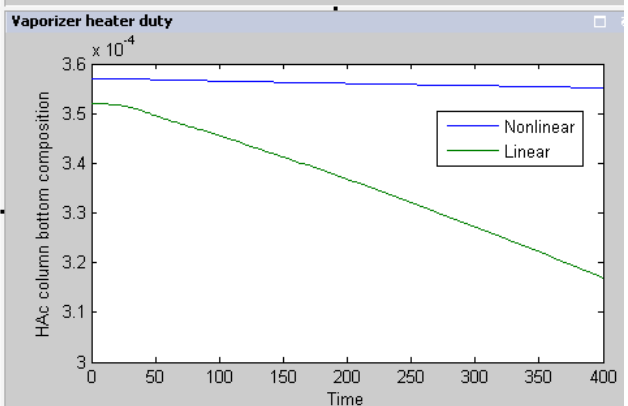
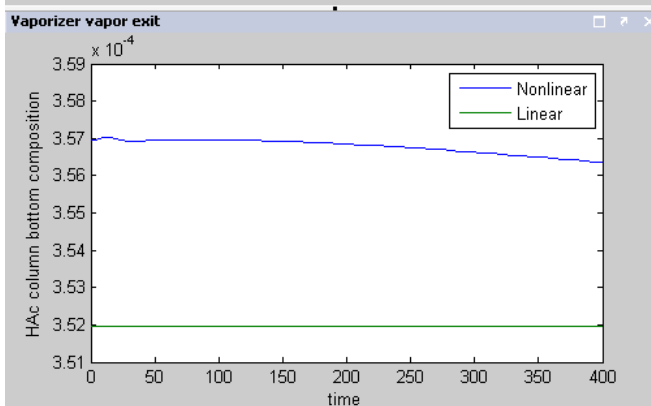
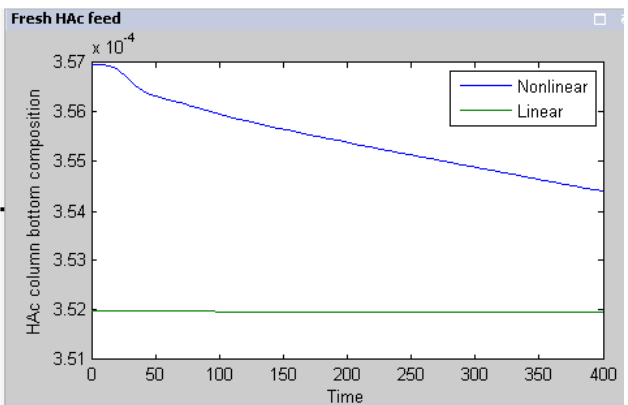
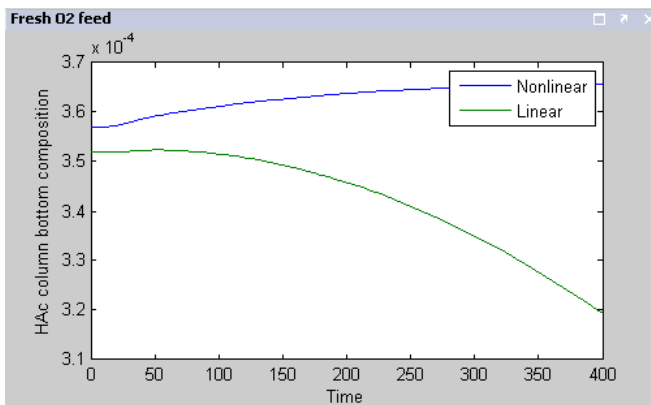


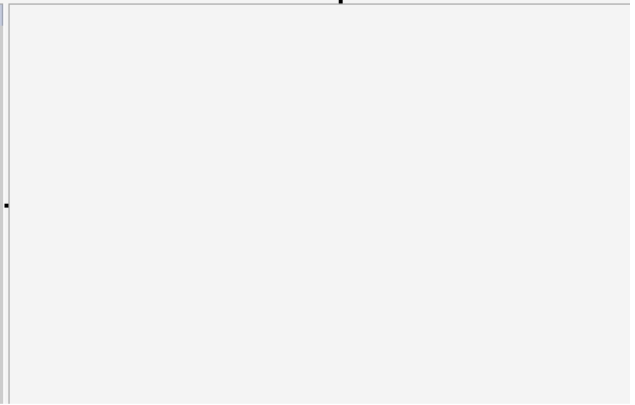
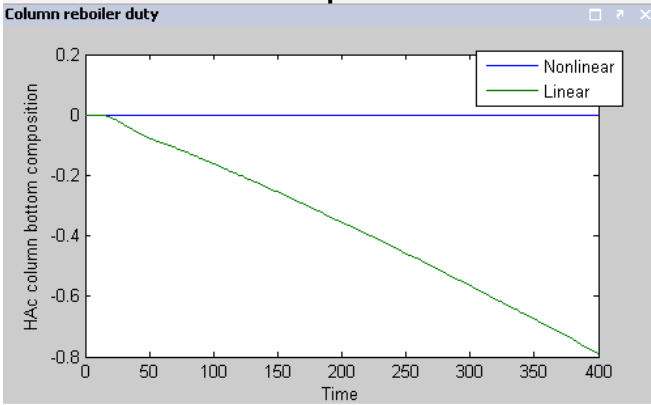
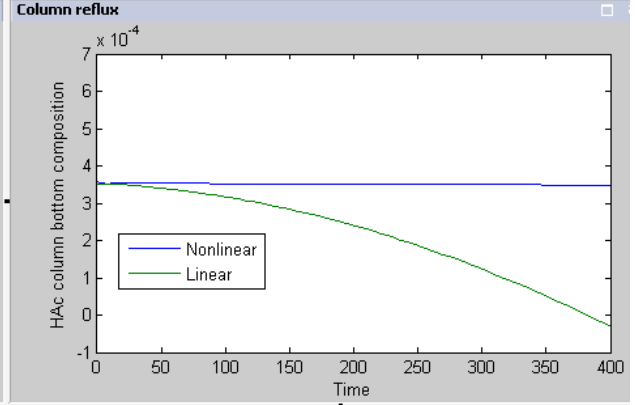
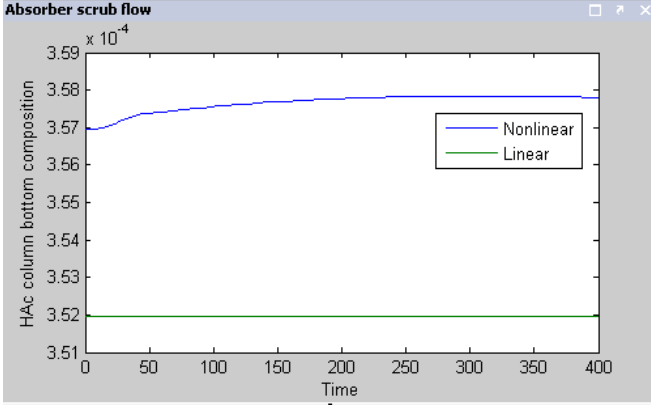
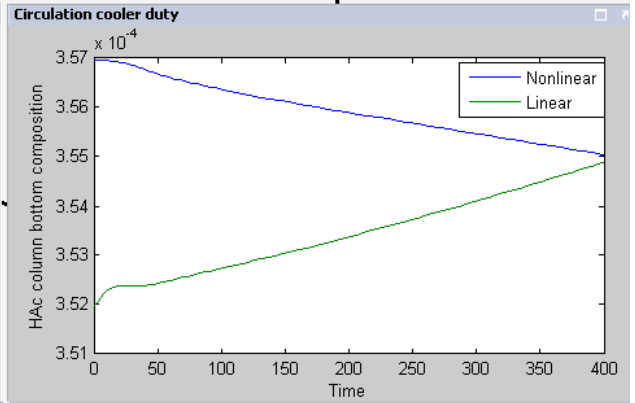
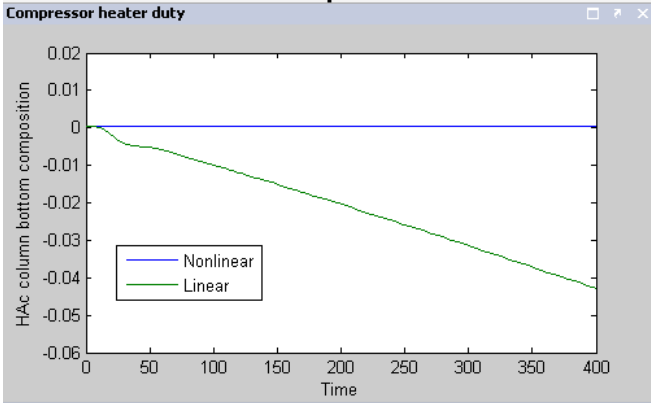
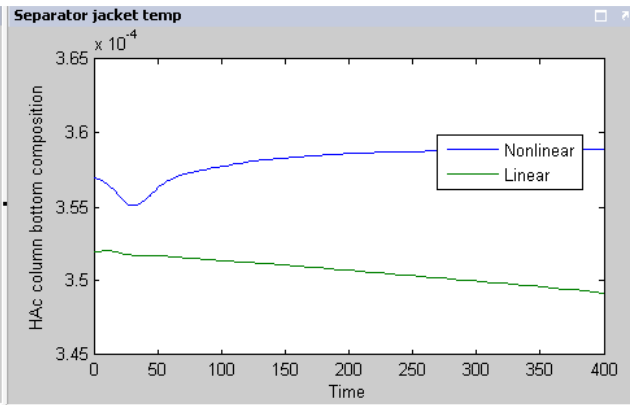
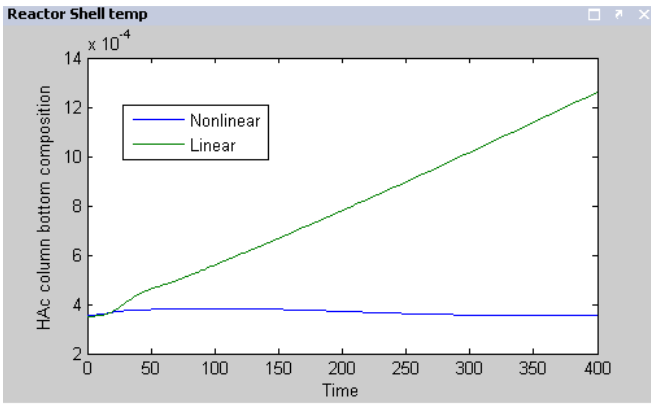
➤ Output 22 (Fifthtraytemp)



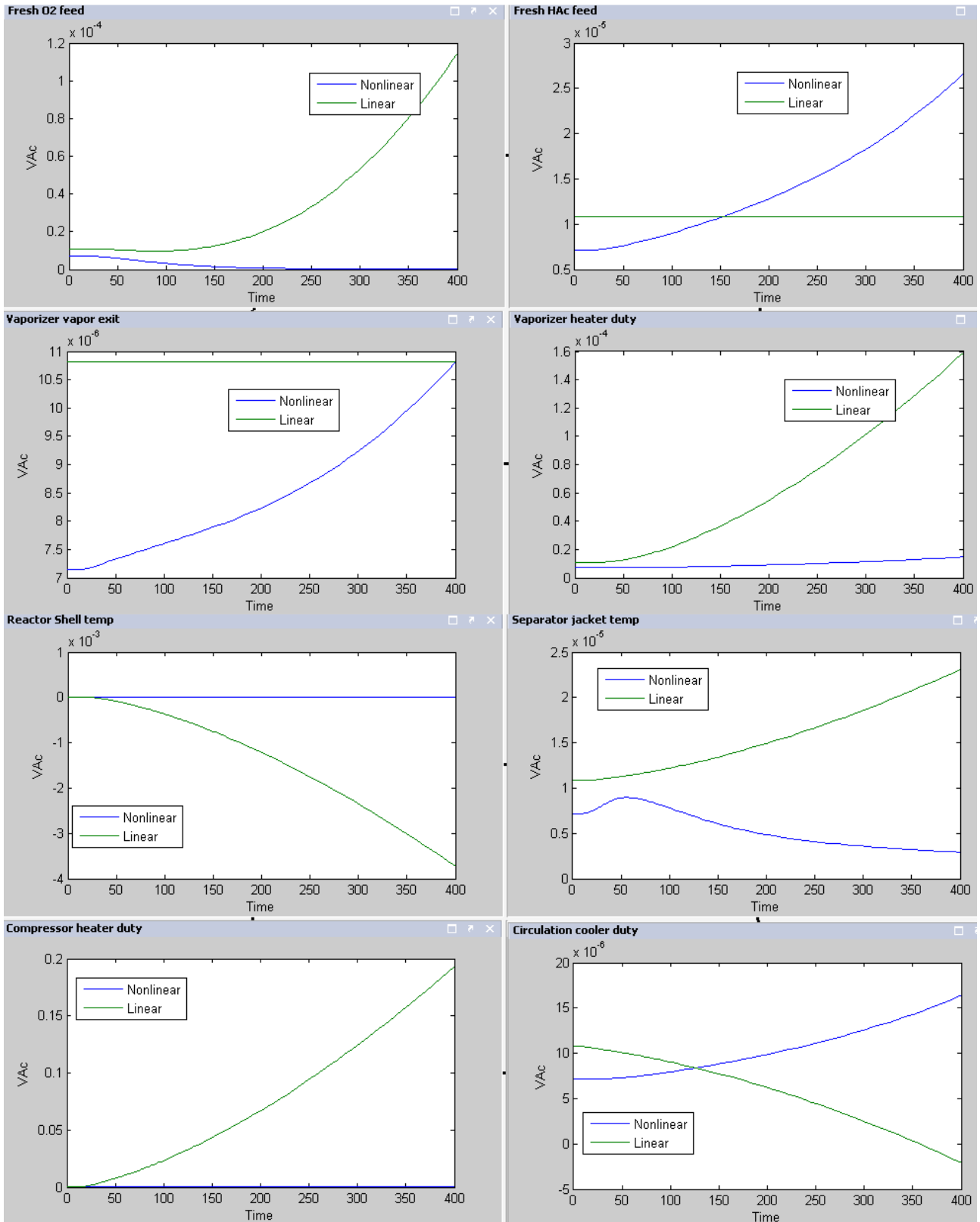


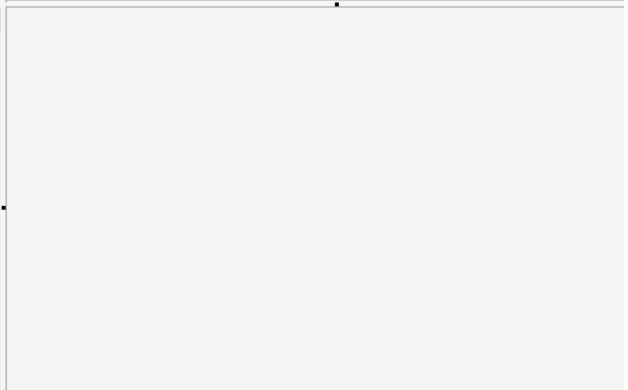
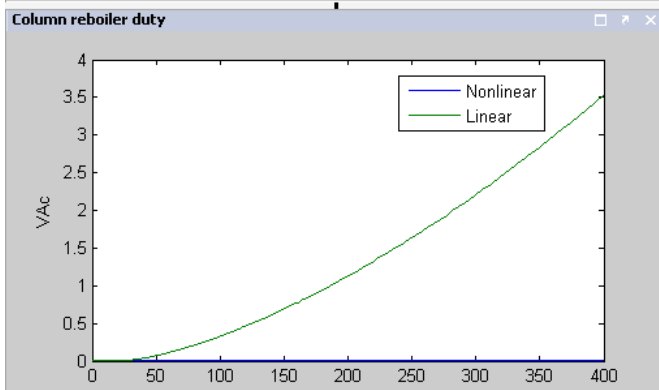
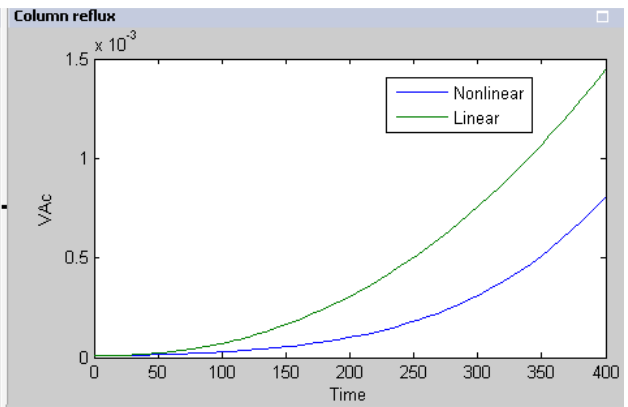
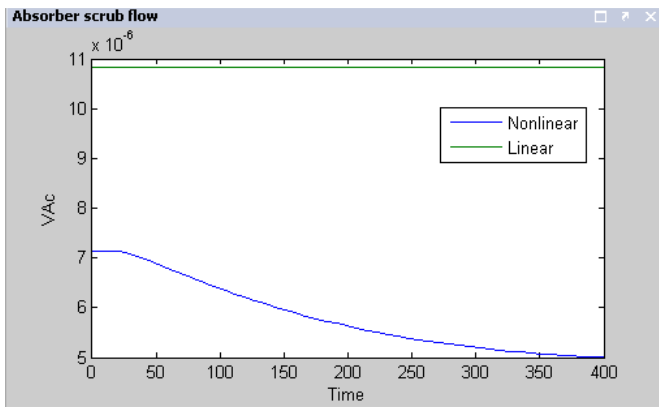
➤ Output 26 (HAc column bottom composition)



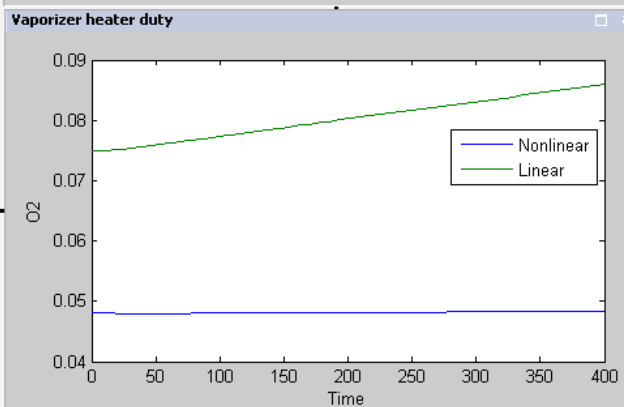
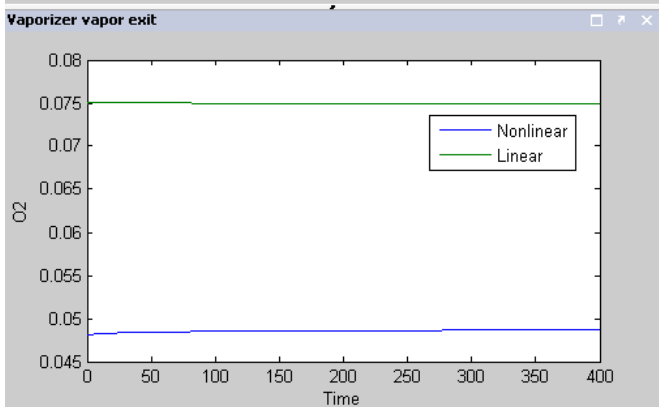
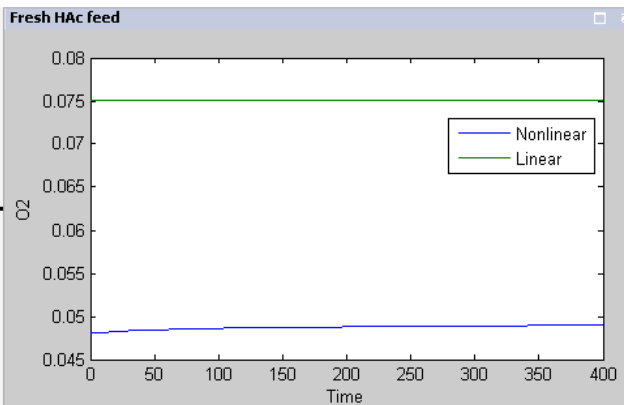
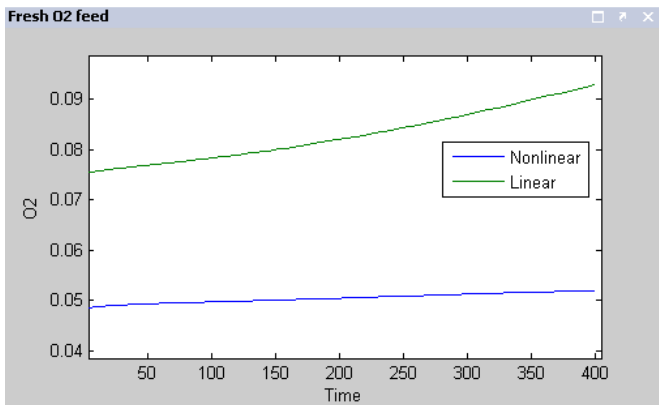


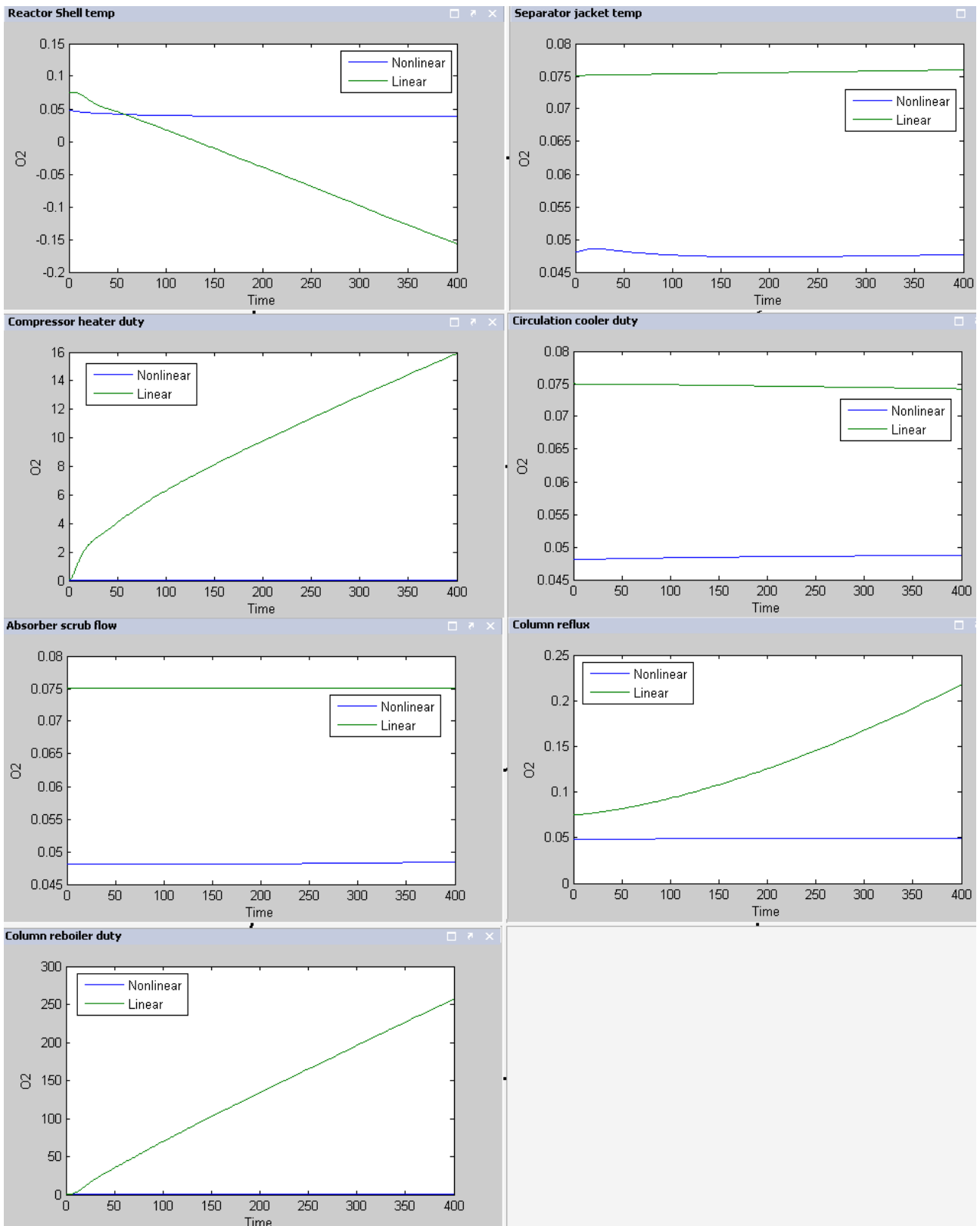
➤ Output 27 (VAc)





➤ Output 37 (O<sub>2</sub>)





## CONCLUSÃO.

Este trabalho de iniciação científica detalhou um procedimento para otimização e controle de processos químicos de grande porte. Os resultados sugerem que o procedimento, usando o software Matlab com Simulink, é bastante eficiente e pode ser usado para a operação de plantas químicas mais complexas.

## AGRADECIMENTOS

Ao apoio familiar e ao professor orientador.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.

Seborg, D.S., Edgar, T.F., Mellichamp, D.A., Process Dynamics and Control. Editora John Wiley & Sons, Inc. 1989.

Hanselman, D., Littlefield, B., Matlab 6 – Curso Completo. Editora Prentice Hall. 2003

Skogestad, S., Control structure design for complete chemical plants. Computers and Chemical Engineering 2004, 28, 219–234.

Skogestad, S., Plantwide control: The search for the self-optimizing control structure. Journal of Process Control 2000, 10, 487–507.

Chen, R., Dave, K., McAvoy, T. J., A Nonlinear Dynamic Model of a Vinyl Acetate Process, Ind. Eng. Chem. Res. 2003, 42, 4478-4487.

Luyben, M. L., Tyréus, B.D., An Industrial Design/Control Study For The Vinyl Acetate Monomer Process. Computers Chem. Engng, Vol. 22, N° 7-8, 867-877. 1998