

Copyright 2004, Instituto Brasileiro de Petróleo e Gás - IBP

Este Trabalho Técnico Científico foi preparado para apresentação no 3º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás, a ser realizado no período de 2 a 5 de outubro de 2005, em Salvador. Este Trabalho Técnico Científico foi selecionado e/ou revisado pela Comissão Científica, para apresentação no Evento. O conteúdo do Trabalho, como apresentado, não foi revisado pelo IBP. Os organizadores não irão traduzir ou corrigir os textos recebidos. O material conforme, apresentado, não necessariamente reflete as opiniões do Instituto Brasileiro de Petróleo e Gás, Sócios e Representantes. É de conhecimento e aprovação do(s) autor(es) que este Trabalho será publicado nos Anais do 3º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás

MODELAGEM DE COLUNA DE DESTILAÇÃO PARA IMPLEMENTAÇÃO DE OBSERVADOR DE ESTADOS

(Ana Paula Meneguelo^{1*}, Nestor Roqueiro², Ricardo A.F.Machado³)

^{1,3}Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos. Campus Universitário. Caixa Postal 476 – Trindade, Florianópolis – SC. 88010-970

²Departamento de Automação e Sistemas. Campus Universitário. Caixa Postal 476 – Trindade, Florianópolis – SC- 88040-900

apaula@enq.ufsc.br*, nestor@das.ufsc.br, machado@enq.ufsc.br

Resumo – A importância das colunas de destilação em muitos processos na indústria química e petroquímica é há tempos evidente e estudada. Com o avanço dos computadores e ferramentas matemáticas mais robustas a modelagem e simulação de processos são cada vez mais evidentes no cenário industrial. De posse de modelos que descrevem de forma cada vez mais detalhada o processo é possível realizar estudos de sensibilidade, otimização e controle de processos inteiros de forma extremamente satisfatória. Variáveis de difícil medição são também um problema muito comum nos processos químicos. Enquadra-se neste caso as colunas de destilação, equipamentos que possuem como variável importante, porém, comumente não medida em linha, as composições das correntes. O conhecimento dessas variáveis é importante economicamente, pois o mercado exige produtos dentro de limitadas faixas de especificação. Buscando solucionar esse problema, o modelo desenvolvido será inserido em um observador de estados, ferramenta matemática capaz de calcular, via medidas auxiliares, os valores das variáveis não medidas. Desta forma, o modelo possui como requisitos robustez e rapidez de resposta. Resultados encorajadores foram obtidos. Apesar de estar ainda em uma versão preliminar e simplificada, o modelo já é capaz de representar qualitativamente o comportamento da coluna, e mesmo a concordância quantitativa é bastante aceitável.

Palavras-Chave: Modelagem, Coluna de destilação, Sensibilidade.

Abstract – The importance of the distillation columns in many units of the chemical and petrochemical industry is evident and studied for a long time. With the computers' advance and more and more robust mathematical tools available, such processes modeling and simulation are, time to time, important in the industry. With the models that describe with more detail the process is possible to carry out sensitivity analysis, optimization and process control by satisfactory manner. However, variables of difficult measurement are also a very common problem in the chemical processes. In distillation columns, the composition is very important, however, is not often measured online. The knowledge of these variables is important economically because the market demands products inside a limited specification. The current work proposes to implement the idea of soft-sensor, where is possible to recover the unmeasured variables in order to control more robustly the desired output compositions. Thus, the model must show as requisite robustness and quickly response. In spite of being still in a preliminary and simplified version, the simulator is already capable to represent the behavior of the column, and even the quantitative agreement is quite acceptable.

Keywords: Modelling, Distillation Column, Sensibility

1. Introdução

Em algumas indústrias, as colunas de destilação constituem uma grande fração do investimento fixo e dos custos operacionais (Alfradique, 2003). O perfeito funcionamento e a otimização destas unidades são, portanto, fatores cruciais economicamente. Entretanto, industrialmente torna-se complicado realizar determinadas perturbações com a finalidade de apenas avaliar o comportamento do processo. Desta forma, a modelagem destes equipamentos é tema de estudo há muito tempo, sendo que os primeiros métodos práticos para a solução das equações do modelo foram os métodos gráficos de McCabe & Thiele, Ponchon e Savarit (apud Henley e Seader, 1981). Os trabalhos base para os modelos rigorosos atuais foram os de Thiele & Guedes e Lewis e Matheson (apud Henley e Seader, 1981), que apesar de ainda serem métodos rudimentares são uma generalização dos métodos gráficos para misturas multicomponentes. Hoje os modelos desenvolvidos podem ser utilizados tanto para avaliação do desempenho do processo como para treinamento de pessoal. Juntamente com o avanço dos computadores e da necessidade econômica de manter seus produtos dentro de faixas restritas, os modelos matemáticos dos processos vem se tornando cada vez mais complexos. Procura-se descrever da forma mais realista possível o comportamento físico-químico do processo.

Juntamente com essa necessidade constante de manter os produtos dentro de faixas limitadas, estratégias avançadas de controle e otimização são cada vez mais estudadas, surgindo conseqüentemente, a necessidade de analisadores em linha. Entretanto, alguns problemas podem fazer com que esses sensores não estejam disponíveis. Pode-se citar a possibilidade de não existir tecnologia disponível para medir determinada variável, ou a tecnologia não estar disponível para medir a variável em linha. Uma forma de solucionar este problema é a aplicação dos analisadores virtuais em linha.

Os analisadores virtuais são modelos e equações matemáticas resolvidas continuamente, em linha, utilizando valores medidos de determinadas variáveis, com o objetivo de calcular uma outra variável, cujo valor não é fornecido ao modelo, ou é fornecido em uma frequência menor do que aquela calculada pelo modelo. Outras denominações comuns são: VOA (*Virtual On-line Analyser*), *soft sensor* (sensor baseado em algoritmo), inferência ou estimador de estados e variáveis. A Figura 1 mostra um esquema de um analisador virtual, onde se pode observar que um modelo do processo é necessário.

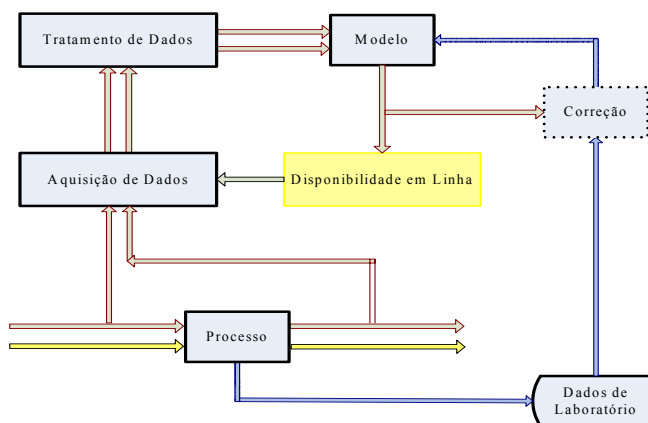


Figura 1.1. – Esquema simplificado de um estimador de estados

Na literatura alguns trabalhos mostram a aplicação de observadores de estado em colunas de destilação podendo-se citar Lang e Gilles (1990), Tham et al. (1991) e Quintero-Marmol et al. (1992), onde a maioria utiliza redes neurais como observador de estados. Trabalhos mais recentes como em Zambare et al. (2003) e Chatterjee e Saraf (2004) afirmam a crescente necessidade de melhora nos modelos de VOA utilizados.

A principal finalidade do observador que se pretende programar será de prever a composição das correntes de topo e base. Inicialmente, pretende-se utilizar como variáveis medidas do processo algumas temperaturas, as vazões e a composição da alimentação, sendo que essas variáveis poderão mudar no decorrer do projeto do observador.

Neste trabalho, será apresentado um modelo de coluna de destilação, cuja finalidade final é ser incluído em um analisador virtual. Para isso, é necessário o conhecimento da robustez do modelo e de suas limitações, de forma a não comprometer a qualidade das observações. Será apresentado o modelo, sua estratégia de resolução, sua avaliação com software comercial e uma análise de sensibilidade, componente importante no conhecimento do processo e das possíveis limitações do modelo.

2. Modelagem

2.1. Modelo Matemático

Foi proposto um modelo simplificado, ou seja, modelo de equilíbrio. O equacionamento corresponde às chamadas equações **MESH** (equações de balanço de Massa, relações de Equilíbrio, Somatórios de frações molares e balanços entálpicos de energia – H).

As hipóteses adotadas são:

- equilíbrio de fase nos estágios;
- as não idealidades da fase vapor são representada por equações de estado cúbicas;
- não idealidades da fase líquida representadas pela equação de estado UNIFAC;
- queda de pressão constante;
- devido a baixa pressão o *holdup* (“volume de retenção”) de vapor é desprezado e, como consequência;
 - holdup* nos estágios é o *holdup* do líquido;
 - entalpia nos estágios é a entalpia do líquido
- não há transferência de massa e calor entre as fases no tanque de refluxo;
- condensador total e condensador parcial.

Um esquema de uma coluna de destilação é apresentado na Figura 2.1. A numeração é considerada decrescente da base para o topo.

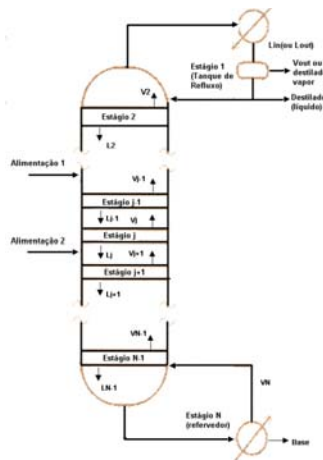


Figura 2.1 – Esquema de uma coluna de destilação

Para modelar a quantidade de líquido que escoar de um prato para outro foi utilizada a fórmula de Francis conforme apresentada em Luyben (1990).

2.2. Termodinâmica e Propriedades Físicas

O cálculo das propriedades termodinâmicas é essencial na simulação de colunas de destilação, uma vez que todo o procedimento de separação está baseado no equilíbrio líquido-vapor. Para representação da não-idealidade da fase líquida emprega-se neste trabalho o método de UNIFAC, utilizado devido à mistura de etanol e água ser fortemente polar. As entalpias das fases líquida e vapor são calculadas segundo correlação sugerida em Reid et al. (1989), a entalpia molar de vaporização foi calculada usando a equação de Clausius-Clapeyron, de acordo com a equação 1

$$\Delta h_i^{vap} = RT^2 \frac{d \ln P^{sat}}{dT} \quad (1)$$

onde R é a constante universal dos gases, T a temperatura do sistema e P^{sat} a pressão de saturação calculada segundo a equação de Antoine, onde sua forma e coeficientes foram utilizados segundo Reid et al. (1989).

2.3. Método de Resolução

Os modelos dinâmicos de colunas de destilação são suscetíveis ao problema de índice superior na solução do conjunto das equações algébrico-diferenciais (DAE). De acordo com Sneesby et al. (1997) o índice de um sistema é de ordem superior quando é necessário se diferenciar mais de uma vez o conjunto de equações DAE para se obter a solução. Existem duas formas possíveis de se tratar o problema, a primeira é realizar uma redução do índice, tarefa bastante trabalhosa principalmente quando se trata de sistemas não-lineares. Por outro lado, a vantagem é a possibilidade de utilização de integradores bastante conhecidos como, por exemplo, a DASSPG. A outra possibilidade é se trabalhar com o sistema de índice superior. Neste caso, pode-se utilizar como integrador o PSIDE.

Neste trabalho, optou-se por não fazer uma redução do índice, sendo assim, o sistema tratado é de índice 2. Para resolução simultânea do sistema de equações utilizou-se o integrador PSIDE, implementado em Fortran77. O modelo da coluna foi então todo implementado em Compaq Visual Fortran 90 versão 6.1.

3. Avaliação do Modelo

O modelo foi avaliado com dados retirados do simulador comercial Hysys[®] versão 3.1, e as simulações foram realizadas em um PentiumIV 2.4GHz. O software foi escolhido por ser uma ferramenta de simulação amplamente utilizada em estudos na engenharia química (Smejkal e Soós, 2002), juntamente com outros, como por exemplo, ASPEN PLUS. Foram testadas uma série de condições operacionais e diferentes misturas, sempre com o intuito de avaliar o desempenho do modelo. O quadro 3.1 mostra a série de testes realizados, sendo que os componentes são representados por uma série homóloga de alcanos e o sistema água/álcool encontra-se em fase de teste, pois neste caso, o modelo estará sendo validado com dados retirados de uma coluna em escala piloto pertencente ao Laboratório de Controle de Processos (LCP) da Universidade Federal de Santa Catarina, porém os resultados preliminares já se mostram satisfatórios.

Quadro 3.1. Testes realizados para avaliação do modelo.

Componentes utilizados	Número de componentes	Número de pratos			Fase líquida real	Fase líquida ideal
		5	10	15	UNIFAC	
					Número de pratos 10	
n-butano+n-pentano ⁽¹⁾	2	X	X	X	X	X
n-butano+n-pentano+n-hexano ⁽²⁾	3	X	X	X		
n-butano+n-pentano+n-hexano+n-heptano ⁽³⁾	4	X	X	X		
n-butano+n-pentano+n-hexano+n-heptano+n-octano ⁽⁴⁾	5	X	X	X	X	X
etanol+água ⁽⁵⁾	Água/álcool	X	X	X	X	X

Dentre as simulações realizadas duas serão apresentadas; 2 alcanos e 5 pratos e 5 alcanos e 5 pratos, casos ⁽¹⁾ e ⁽⁴⁾ apresentados no quadro 3.1. As condições operacionais comuns aos dois testes são mostradas na tabela 3.1, as condições específicas de cada teste na tabela 3.2.

Tabela 3.1 Condições operacionais comuns aos dois casos

Condições	Unidade	Valores
Vazão da alimentação	[gmol/s]	540,0
Volume condensador	[m ³]	2,0
Volume refeedor	m ³	2,0
Pressão na base	[bar]	2,0
Pressão no topo	[bar]	1,8
Razão de refluxo		4,0
Número de pratos		5
Prato de alimentação		4

Tabela 3.2 Condições operacionais de cada caso

Condições	Unidades	Teste 1	Teste 2
Temperatura da alimentação	°C	35	60
Fração molar na alimentação		x ₁ =x ₂ =0,5	x ₁ =x ₂ =x ₃ =x ₄ =x ₅ =0,2
Calor no refeedor	J/s	2,7725*10 ⁶	3,2417*10 ⁶

As figuras 3.1, 3.2, 3.3 e 3.4 mostram a comparação entre os perfis encontrados no simulador comercial e os encontrados nas simulações do modelo proposto.

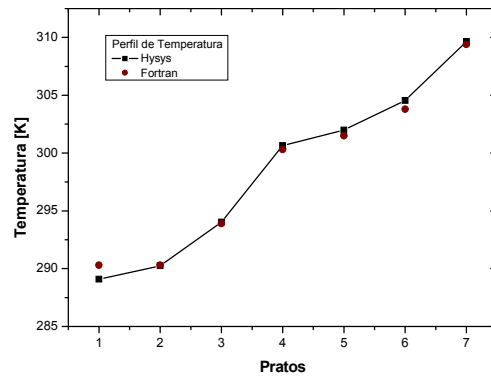


Figura 3.1. Perfil de temperatura para o teste 1. Comparação entre os valores encontrados no Hysys e no modelo.

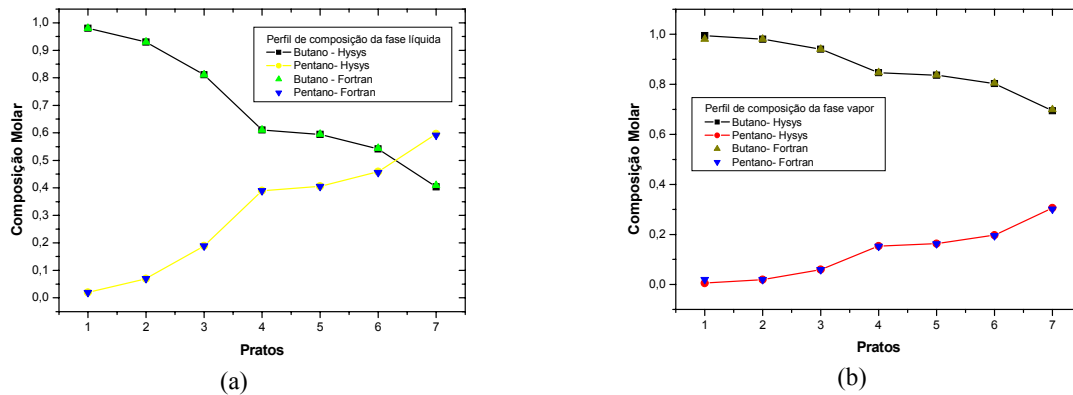


Figura 3.2. Perfil de composição em (a) composição do líquido em (b) composição do vapor. Dados de comparação entre Hysys e modelo proposto- condições do teste 1.

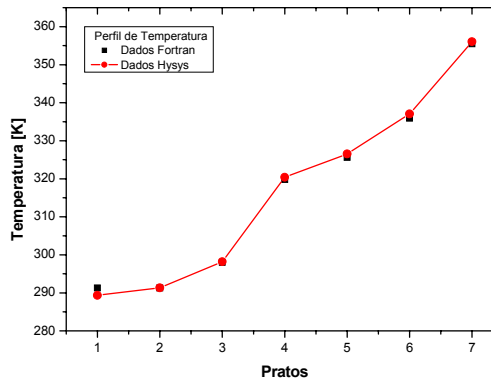


Figura 3.3. Perfil de temperatura para o teste 2. Comparação entre os valores encontrados no Hysys e no modelo.

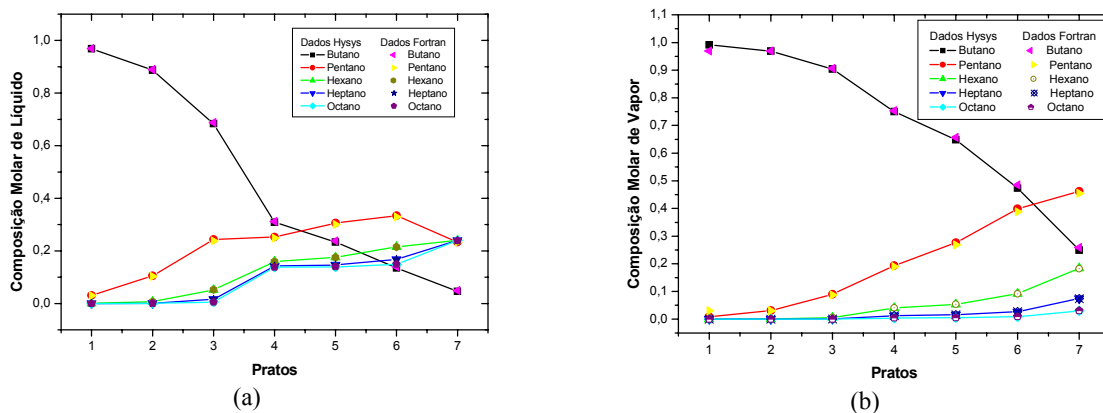


Figura 3.4. Perfil de composição- em (a) composição do líquido em (b) composição do vapor. Dados de comparação entre Hysys e modelo proposto- condições do teste2.

Pode-se observar a adesão do modelo proposto com os resultados encontrados no simulador comercial. Observa-se que a principal diferença entre os modelos está no condensador. No modelo proposto a modelagem do condensador inclui apenas o calor latente, ou seja, condensa a corrente de vapor que chega. Já no Hysys® o condensador total é modelado com a contribuição sensível do calor, reduzindo assim a temperatura da mistura.

4. Resultados e Conclusões

Nesta seção serão apresentados alguns testes realizados durante a análise de sensibilidade do modelo proposto. As análises apresentadas são referentes a variações na vazão molar da alimentação e na razão de refluxo. Uma das principais finalidades da análise foi verificar como o modelo se comportava com essas modificações. As condições operacionais do teste dois (2) são similares às apresentadas nas tabelas 3.1 e 3.2, sendo que houve variação na razão de refluxo. Os valores utilizados foram: 0,01; 0,5; 1; 2; 4 e 10. As condições das simulações apresentadas na figura 4.1(a) são apresentadas na tabela 4.1.

Tabela 4.1 Condições Simuladas na Figura 4.1 (a)

Condições operacionais		Condições das simulações	Calor no refeedor [J/s]	Vazão da alimentação [gmol/s]
Número de pratos	15	Teste 1	$2,907 \cdot 10^6$	144
Prato de alimentação	7	Teste 2	$2,6611 \cdot 10^6$	540
Razão de refluxo	4	Teste 3	$2,6064 \cdot 10^6$	1080

Os resultados são apresentados nas figuras 4.1(a) e (b) apresentadas abaixo.

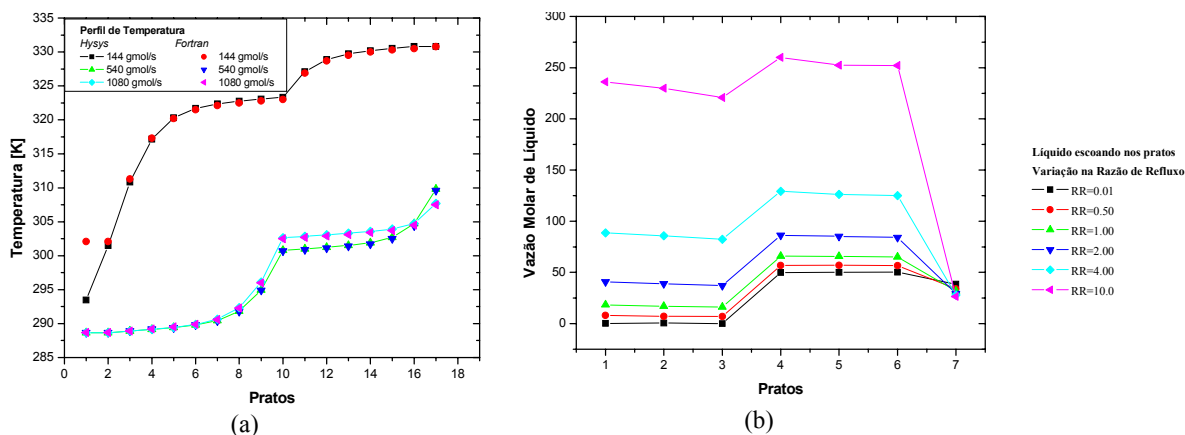


Figura 4.1 Testes de sensibilidade realizados no modelo. Em (a) variação na vazão de alimentação, (b) variação na razão de refluxo.

Observa-se que o modelo respondeu de forma coerente com os dados do simulador comercial. Sabe-se que o Hysys® é um simulador amplamente empregado na indústria química e petroquímica tanto como uma ferramenta de estudo dos processos como de treinamento de pessoal. Porém, como em toda ferramenta numérica é necessário se ter conhecimento da consistência dos dados fornecidos ao simulador. Desta forma, avaliada a consistência física dos testes propostos, pode-se concluir que o modelo desenvolvido possuiu adequação aos resultados obtidos via simulador. A forma de resolução, ou seja, o método numérico se mostrou adequado a tal finalidade, uma vez que o tempo de integração não é elevado, variando de 360 a 540 s de CPU.

7. Agradecimentos

Os autores agradecem ao fomento provindo da **Agência Nacional de Petróleo (ANP)** na forma do programa de recursos humanos **PRH-ANP/MCT** à equipe do **PRH-34** essencial ao desenvolvimento deste trabalho de pesquisa.

8. Referências

- ALFRADIQUE, M.F. Implementação Automática de Procedimentos para Simulação de Colunas de Destilação Convencional e Reativa usando Computação Algébrica. *Tese*, UFRJ, 2003
- HENLEY, E.J., SEADER, J.D. Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering. *John Wiley & Sons*, 742p, 1981
- LANG L., GILLES E.D. Nonlinear Observers for Distillation Columns, *Computers Chemical Engineering*, vol. 14, nº.11, 1297-1301, 1990
- LUYBEN W.L. Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers 2ª Edição, *Mac-Graw-Hill Education*, 726p, 1990.
- N. ZAMBARE, M. SOROUGH, B.A. OGUNNAIKE. A method of robust multi-rate state estimation. *Journal of Process Control*, Vol.13 n4, 2003
- QUINTERO-MARMOL E., LUYBEN W.L. Inferential Model-Based Control of Multicomponent Batch Distillation *Chemical Engineering Science*, vol. 47, nº 4, pp. 887-898, 1992
- REID R.C., PRAUSNITZ J.M., POLING B.E. The Properties of Gases & Liquids 4ª Edição, *McGraw-Hill*, 741p, 1987
- SMEJKAL Q.; SOOS M Comparison of computer simulation of reactive distillation using aspen plus and hysys software *Chemical Engineering and Processing* pp. 413-418(6). Vol41, Issue 5, 2002
- SNEESBY, M.G., TADÉ, M.O., SMITH, T.N. Implications of Stead-State Multiplicity for Operation and Control of Etherification Columns Distillation and Absortion 97, *Institute of the Chemical Engineering Symposium Series*, 142, pp.205-216, 1997.
- THAM M. T., MONTAGUE G. A., MORRIS A. J., and LANT P. A. Soft-Sensors for Process Estimation and Inferential Control *J. Proc. Cont.* vol 1, 1991
- TIRTHA CHATTERJEE AND DEOKI N. SARAF On-line estimation of product properties for crude distillation units *Journal of Process Control*, Volume 14, Issue , pp 61-77, 2004.