



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Controle de uma Coluna de Destilação Azeotrópica Não Convencional – Um Estudo de Caso Industrial

Orientadores: Prof. Dr. Luis Gonzaga Sales Vasconcelos
Prof. Dr. Michel François Fossy

Orientando: André Luis Sousa de Vasconcelos

CAMPINA GRANDE – PARAÍBA
NOVEMBRO DE 2006

Controle de uma Coluna de Destilação Azeotrópica Não Convencional – Um Estudo de Caso Industrial

ANDRE LUIS SOUSA DE VASCONCELOS

DISSERTAÇÃO APRESENTADA À
UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
COMO PARTE DOS REQUISITOS EXIGIDOS PARA
OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: OPERAÇÕES E PROCESSOS

ORIENTADORES: PROF. DR. LUIS GONZAGA SALES VASCONCELOS

PROF. DR. MICHEL FRANÇOIS FOSSY

CAMPINA GRANDE – PARAÍBA

NOVEMBRO DE 2006

BIBLIOTECA

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

V331c Vasconcelos, André Luis Sousa de
2006 Controle de uma coluna de destilação azeotrópica não convencional: um estudo de caso industrial/ André Luis Sousa de Vasconcelos.- Campina Grande, 2006.
86f.: il.

Referências.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia.

1- Destilação Azeotrópica 2- Controle de Processos 3- Controle Feedforward
I- Título

CDU 66.048.62

UFCG - BIBLIOTECA - CAMPUS I	
1142	09-05-07

Controle de uma Coluna de Destilação Azeotrópica Não Convencional – Um Estudo de Caso Industrial

ANDRE LUIS SOUSA DE VASCONCELOS

DISSERTAÇÃO APROVADA EM: 06 / 11 / 2006

BANCA EXAMINADORA:



PROF. DR. LUIS GONZAGA SALES VASCONCELOS
ORIENTADOR



PROF. DR. MICHEL FRANÇOIS FOSSY
ORIENTADOR



PROF. DR. JOÃO MANZI
EXAMINADOR



PROF. DR. LUIS STRAGEVITCH
EXAMINADOR



DR. MÁRCIO HENRIQUE ANDRADE DOS SANTOS
EXAMINADOR

RESUMO

Colunas de destilação, em geral, constituem uma fração significativa do investimento de capital e do custo de produção de plantas químicas. Portanto, necessitam ser projetadas e controladas para manterem-se nas condições operacionais ótimas. Neste trabalho, desenvolveu-se uma nova proposta para uma estratégia de controle de composição para uma coluna de destilação pertencente a uma planta comercial de produção de cloreto de vinila. Algumas particularidades desta coluna e dos requisitos do sistema de controle propiciam e este estudo de caso aspectos não usuais. Trata-se de uma destilação multicomponente de alta pureza, com alta razão de refluxo, onde a mistura apresenta um comportamento azeotrópico não convencional. As respostas em malha aberta para perturbações na vazão de alimentação e na carga térmica do refeedor apresentam substancial sobrelevação e inversão. Os requisitos do sistema de controle são incomuns por incluírem controle de composição de dois componentes em níveis de concentração de partes por milhão na corrente da base da coluna, sendo que um deles, mais precisamente o CCl_4 possui volatilidade intermediária na mistura. A coluna apresenta dificuldades de estabilização deste componente. O projeto de um sistema de controle para um processo com as características citadas representa um grande desafio. Apresentou-se uma breve revisão da literatura sobre destilação, modelagem matemática de colunas e estruturas de controle de colunas de destilação. A simulação estacionária da coluna foi o ponto de partida para o desenvolvimento do trabalho, pois através da mesma o modelo do processo foi validado e os perfis de composição dos componentes obtidos. Ficou definido, controlar a composição de apenas um dos componentes, no caso o CHCl_3 , já que o CCl_4 permaneceu sempre dentro da faixa de composição aceitável durante as várias simulações. A proposta inicial para controlar a composição do componente escolhido foi um controle por inferência, utilizando a temperatura do prato sensível como variável controlada e a carga térmica do refeedor como variável manipulada, mas a mesma foi abandonada devido a pouca sensibilidade apresentada pela temperatura em vários pontos ao longo da coluna e principalmente pelo elevado período de tempo apresentado pela coluna para atingir um novo estado estacionário. Como a vazão de refluxo apresentou uma boa sensibilidade frente a perturbações na vazão da alimentação e na carga térmica do refeedor, a mesma foi escolhida para o controle de composição do CHCl_3 na base da coluna. Esta boa sensibilidade foi

comprovada por um estudo de inferência dinâmica. O problema inicial era como utilizar esta variável para controlar a composição da base, pois a mesma era utilizada para o controle o nível da fase orgânica no vaso de refluxo. Foi pensado então em um controle “Override” com duas malhas: a primeira malha para o controle inferencial da composição do CHCl_3 a partir da vazão de refluxo manipulando a carga térmica do retervedor e a segunda malha para o controle do nível da fase orgânica manipulando a vazão de refluxo. As simulações mostraram que esta estratégia de controle também teria que ser abandonada pelo fato do nível da fase orgânica apresentar variações muito bruscas, ou seja, tende para um máximo ou mínimo de forma muito rápida. Decidimos controlar o nível da fase orgânica no vaso de refluxo a partir da carga térmica deixando a vazão de refluxo livre para pode ser utilizada para o controle de composição. Verificou-se que os efeitos da vazão de alimentação e da vazão de refluxo sobre a composição na base eram contrários, o que nos levou a concluir que a melhor estratégia de controle seria um controle Feedforward, onde para uma dada modificação na vazão da alimentação o sistema de controle ajusta a vazão de refluxo de modo que a soma dos efeitos de cada uma dessas vazões na composição de CHCl_3 se anulam mantendo assim a composição controlada. O desempenho do mesmo foi excelente principalmente porque além de controlar a composição do CHCl_3 na base, também estabilizou a composição de CCl_4 . Concluiu-se que além de controlar a composição de CHCl_3 e estabilizar a composição de CCl_4 na base o sistema de controle ainda é capaz de fornecer de forma contínua estes valores, o que pode vir a permitir que os operadores acompanhem em tempo real as possíveis variações que possam vir a acontecer nos mesmos em relação ao setpoint.

ABSTRACT

INDICE

1. OBJETIVO E MOTIVAÇÃO	13
2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	14
2.1 Destilação	14
2.2 Múltiplos estados estacionários	15
2.3 Desenvolvimentos de sistemas de controle para destilação azeotrópica	17
2.4 Controle por Realimentação (Feedback)	19
3. CARACTERIZAÇÃO DO PROBLEMA	21
3.1 Descrição do Processo	21
3.2 Descrição da Operação da Coluna de Secagem	22
3.3 Especificação Preliminar dos objetivos do Sistema de Controle	24
4. MODELAGEM MATEMÁTICA DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO	26
4.1 Modelo Teórico para estágio de equilíbrio em estado estacionário	26
4.2 Modelo Teórico para o estado dinâmico	30
4.3 Modelo de prato no estado transiente	31
4.4 Métodos Numéricos	33
4.4.1 Resolução do modelo no estado estacionário	33
4.4.2 Resolução do modelo no estado dinâmico	37
5. ESTRUTURAS DE CONTROLE DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO	39
6. SIMULAÇÃO ESTACIONÁRIA	46
6.1 Validação do modelo	48
6.2 Escolha do prato sensível	49
6.3 Estudo da inferência estacionária	50
7. SIMULAÇÃO DINÂMICA	57
7.1 Estudo de inferência dinâmica	58
7.2 Geração dos dados para obtenção das funções de transferência do processo	62
8. DETERMINAÇÃO DAS FUNÇÕES DE TRANSFERÊNCIA	66
8.1 Função de transferência do distúrbio	68
8.2 Função de transferência do processo	69
8.3 Considerações sobre as funções de transferência obtidas	70
9. PROPOSTA DE UMA NOVA ESTRUTURA DE CONTROLE	71
9.1 Análise geral e levantamento de hipóteses	71
9.2 Determinação das novas funções de transferência	83
10. IMPLEMENTAÇÃO DA ESTRUTURA DE CONTROLE	86
10.1 Implementação do sistema de controle no Matlab/Simulink	86
10.2 Implementação do sistema de controle no Simulador Aspen Dynamics TM	89
11. CONCLUSÕES	94
12. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	98
13. BIBLIOGRAFIA	99

INDICE DE FIGURAS

	Pág.
Figura 01 – Controle por realimentação descentralizado (TITO ¹).....	20
Figura 02 – Principais etapas de produção de monocloreto de vinila.....	21
Figura 03 – Fluxograma esquemático da área de purificação do 1,2 – EDC.....	22
Figura 04 – Fluxograma esquemático da coluna de desidratação do 1,2 – EDC (Torre de Secagem).....	23
Figura 05 – Modelo de Estágio de Equilíbrio.....	28
Figura 06 – Cascata em Contracorrente com N Estágios de Equilíbrio.....	29
Figura 07 – Esquema utilizado na representação matemática do prato perfurado.....	32
Figura 08 – Esquema iterativo dos métodos BP (Moura, 1974).....	35
Figura 09 – Esquema iterativo do método SR (Moura, 1974).....	36
Figura 10 – Esquema LV (Junior, 2003).....	40
Figura 11 – Esquema DV (Junior, 2003).....	41
Figura 12 – Esquema LB (Júnior, 2003).....	42
Figura 13 – Esquema LD com x_B manipulando D (Júnior, 2003).....	42
Figura 14 – Esquema [D/(L+D),V] (Júnior, 2003).....	43
Figura 15 – Esquema [D/(L+D),V/B] (Júnior,2003).....	44
Figura 16 – Esquemas de controle para colunas de destilação.....	44
Figura 17 – Fluxograma para a simulação em estado estacionário.....	47
Figura 18 – Perfil de Temperatura da coluna em estudo.....	48
Figura 19 – Perfis de Composição da fase líquida.....	49
Figura 20 – Variação da temperatura do prato 8 e composição do CCl ₄ na base com a vazão da alimentação.....	51
Figura 21 – Variação da temperatura do prato 1 e composição do CHCl ₃ na base com a vazão da alimentação.....	51
Figura 22 – Variação da temperatura do prato 8 e composição do CCl ₄ na base com a retirada de leves.....	52
Figura 23 – Variação da temperatura do prato 1 e composição do CHCl ₃ na base com a retirada de leves.....	53
Figura 24 – Variação da temperatura do prato 8 e composição do CCl ₄ na base com a carga térmica do refeedor.....	54
Figura 25 – Variação da temperatura do prato 1 e composição do CHCl ₃ na base com a carga térmica do refeedor.....	54
Figura 26 – Variação da temperatura do prato 1 e composição do CCl ₄ na base.....	55
Figura 27 – Variação da temperatura do prato 1 e composição do CHCl ₃ na base.....	56
Figura 28 – Fluxograma da coluna com controladores de nível e fluxo.....	57
Figura 29 – Variação da temperatura do prato 1 e composição do CCl ₄ na base.....	58

Figura 30 – Variação da temperatura do prato 1 e composição do CHCl_3 na base.....	59
Figura 31 – Variação da temperatura em vários pontos da coluna para um degrau de + 5% na carga térmica do refeedor.....	60
Figura 32 – Variação da composição de CHCl_3 na base da coluna para um degrau de + 5% na carga térmica do refeedor.....	61
Figura 33 – Fluxograma da coluna com o componente PRBS aplicado na válvula da vazão da alimentação.....	62
Figura 34 – Variação da vazão da alimentação provocada pelo elemento PRBS.....	63
Figura 35 – Resposta da temperatura frente à variação da vazão da alimentação.....	63
Figura 36 – Fluxograma da coluna com o componente PRBS aplicado na carga térmica do refeedor.....	64
Figura 37 – Variação da carga térmica do refeedor provocada pelo elemento PRBS.....	65
Figura 38 – Resposta da temperatura frente à variação da carga térmica do refeedor.....	65
Figura 39 – Interface de interação com o usuário da ferramenta ident TM	67
Figura 40 – Variação da vazão do refluxo e composição do CCl_4 na base.....	72
Figura 41 – Variação da vazão de refluxo e composição do CHCl_3 na base.....	72
Figura 42 – Variação da vazão de refluxo para uma perturbação de + 10 % na vazão da alimentação com malha de nível fechada.....	74
Figura 43 – Variação da composição de CHCl_3 na base para uma perturbação de + 10 % na vazão da alimentação com malha de nível fechada.....	74
Figura 44 – Variação da vazão de refluxo para uma perturbação de + 5 % na carga térmica do refeedor com malha de nível fechada.....	75
Figura 45 – Variação da composição de CHCl_3 na base para uma perturbação de + 5 % na carga térmica do refeedor com malha de nível fechada.....	75
Figura 46 – Variação do nível da fase orgânica para uma perturbação de + 10 % na vazão da alimentação com malha de nível aberta.....	76
Figura 47 – Variação da composição de CHCl_3 na base para uma perturbação de + 10 % na vazão da alimentação com malha de nível aberta.....	77
Figura 48 – Variação do nível da fase orgânica para uma perturbação de + 10 % na carga térmica do refeedor com malha de nível aberta.....	77
Figura 49 – Variação da composição de CHCl_3 na base para uma perturbação de + 5 % na carga térmica do refeedor com malha de nível aberta.....	78
Figura 50 – Instrumentação básica da coluna com controle de nível do vaso de refluxo a partir da carga térmica do refeedor.....	80
Figura 51 – Resultados das mudanças no setpoint do controlador da vazão de alimentação provocadas pelo elemento PRBS.....	81
Figura 52 – Resultados das mudanças no setpoint do controlador da vazão de refluxo provocadas pelo elemento PRBS.....	82

Figura 53 – Validação do modelo para a função de transferência entre vazão de alimentação e composição de CHCl_3 na base.....	84
Figura 54 – Validação do modelo para a função de transferência entre vazão de refluxo e composição de CHCl_3 na base.....	85
Figura 55 – Malha de controle no Matlab/Simulink.....	86
Figura 56 – Desempenho do sistema de controle.....	87
Figura 57 – Desempenho do sistema de controle para o modelo do processo com erro de 10 %.....	88
Figura 58 – Resultados fornecidos pela função de transferência do controlador Feedforward.....	89
Figura 59 – Estrutura completa do sistema de controle da coluna.....	90
Figura 60 – Variação da composição de CHCl_3 em malha aberta e malha fechada em alta frequência.....	91
Figura 61 – Variação da composição de CCl_4 em malha aberta e malha fechada em alta frequência.....	92
Figura 62 – Variação da composição de CHCl_3 em malha aberta e malha fechada em baixa frequência.....	92
Figura 63 – Variação da composição de CCl_4 em malha aberta e malha fechada em baixa frequência.....	93

ÍNDICE DE TABELAS

	Pág.
Tabela 1 – Dados Operacionais.....	47
Tabela 2 – Dados de composição da alimentação.....	47

1. OBJETIVO E MOTIVAÇÃO

O objetivo deste trabalho é desenvolver e propor uma estratégia de controle do processo, utilizando a abordagem de controle clássico e controle robusto, juntamente com ferramentas computacionais como os simuladores de processos Aspen PlusTM e Aspen DynamicsTM e o aplicativo matemático MATLAB/SIMULINKTM, para uma coluna de destilação multicomponente de alta pureza, que apresenta um comportamento azeotrópico não-convencional.

A referida coluna faz parte do sistema de purificação do 1,2 – dicloroetano (1,2-EDC ou $C_2H_4Cl_2$) de uma planta comercial de produção de cloreto de vinila (MVC ou C_2H_3Cl). Cloreto de vinila é a principal matéria prima para a produção de policloreto de vinila (PVC), um dos termoplásticos mais consumidos no mundo.

Os principais problemas relacionados à coluna em estudo são:

- Dificuldade de estabilização da concentração de um dos componentes de interesse (de ponto de ebulição intermediário) no produto de base;
- Corrosão no corpo da torre, bandejas, condensador, vaso e tubulações de refluxo.

Este estudo contempla o primeiro problema acima indicado e utiliza um modelo dinâmico rigoroso aperfeiçoado a partir do modelo proposto por Silva (2002). A motivação principal para o desenvolvimento deste trabalho é decorrente do fato de que o sistema de controle por inferência que está sendo proposto, é possível de ser implementado na prática sem aparentemente grandes custos adicionais, tendo em vista que em tese necessita-se de sensores de temperatura, sendo os mesmos já presentes na instrumentação atual da coluna.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Este capítulo apresenta uma revisão bibliográfica introdutória sobre colunas de destilação, operação e controle de processos de destilação azeotrópica e controle de processos por realimentação.

2.1 Destilação

A destilação é um dos mais antigos e importantes processos de separação utilizado na indústria química e petroquímica. Esta importância deve-se à grande eficiência na separação das mais diferentes misturas. Devido à sua importância no campo da Engenharia Química, o número de publicações sobre colunas de destilação é cada vez maior. Os artigos abrangem desde a modelagem matemática até o estudo de processos específicos. Entretanto, a maioria dos sistemas estudados corresponde a sistemas onde não se observa a presença de azeótropos.

A destilação é o processo de separação mais utilizado pela indústria de processos químicos. A literatura diante de tal fato se refere à destilação como sendo “o processo de separação em relação ao qual todos os outros devem ser comparados” (Kister, 1997; Kunesh et al.,1995). De acordo com Humphrey (1995), somente nos Estados Unidos existem cerca de 40.000 colunas de destilação em operação, as quais respondem por mais de 90 % dos processos de separação e um investimento da ordem de U\$\$ 8.10⁹. Este processo de separação baseia-se na diferença de volatilidade dos componentes a serem separados. Porém, a ocorrência de azeótropos (homogêneo e heterogêneo) adiciona algumas dificuldades para a separação, pelo fato das fases líquida e vapor, apresentarem a mesma composição. A separação destas misturas não é possível por meio da destilação convencional e normalmente elas são separadas por destilação extrativa ou destilação azeotrópica. Convencionalmente, em ambos os processos citados, a alimentação da coluna representa uma mistura no ponto azeotrópico ou próximo a ele e um componente externo é adicionado de modo a possibilitar a separação.

A destilação azeotrópica é um processo muito conhecido e difundido, tendo o seu início por volta dos anos 20. Tradicionalmente, na destilação azeotrópica é adicionado um componente, chamado agente de arraste, cuja finalidade é formar um

novo azeótropo com um dos componentes inicialmente presentes na mistura. Também é importante que o novo azeótropo formado seja heterogêneo, ou seja, é necessário que sob determinada condição, haja a formação de duas fases líquidas. Este novo azeótropo formado é removido como produto de topo ou de base, dependendo do tipo do azeótropo (de mínimo ou de máximo), enquanto que o outro componente puro é removido na extremidade oposta. A utilização de uma segunda coluna se faz necessária para proceder com a recuperação do agente de arraste, o qual retorna à coluna azeotrópica. Conforme a descrição acima, o processo de destilação azeotrópica é caracterizado pela adição de um componente externo, pela formação de novo azeótropo e pela formação de duas fases líquidas.

Entretanto, em algumas situações, não se observa a presença de azeótropo na corrente de alimentação, mas sim uma mistura que tem potencial para formar ponto azeotrópico ao longo da coluna. Neste caso específico o agente de arraste está presente na própria corrente de alimentação.

Embora o número de trabalhos envolvendo a destilação azeotrópica seja elevado, para nossa surpresa, na pesquisa bibliográfica realizada não foi encontrada nenhuma publicação referente ao tipo de coluna de destilação descrito acima. De acordo com a literatura consultada, Silva (2002), em seu trabalho de mestrado definiu o modelo termodinâmico a ser utilizado para modelar o equilíbrio líquido-vapor (ELV) e o equilíbrio líquido-líquido-vapor (ELLV) e apresentou um modelo dinâmico para uma coluna com essas características. Os resultados obtidos por Silva (2002) foram à base para o desenvolvimento do trabalho de Júnior (2003), que estudou a implementação e o desempenho de um sistema de controle para a coluna. Outro sistema que se aproxima bastante do estudado neste trabalho foi apresentado por Ciric *et al.* (2000). A ocorrência de azeótropos na indústria química é um fato relativamente comum. Como característica principal, a destilação azeotrópica apresenta grande sensibilidade a perturbações, as quais podem resultar em deterioração dos produtos, múltiplos estados estacionários e grande dificuldade para retornar a operação normal.

2.2 Múltiplos estados estacionários

Os múltiplos estados estacionários são uma característica apresentada pela destilação azeotrópica seja ela homogênea ou heterogênea. O termo *múltiplos estados*

estacionários é utilizado como referência as diferentes composições de produtos e perfis de composição e fluxo apresentados por colunas que possuem os mesmos parâmetros de entrada, ou seja, mesmos fluxos de alimentação, destilado e base, refluxo, número de estágios, composição e localização da alimentação.

Bekiaris et al. (1993) desenvolveram um estudo sobre multiplicidade de estados estacionários para sistemas homogêneos. Os autores abordaram as situações de refluxo e número de pratos infinitos. Construíram diagramas de bifurcação utilizando o fluxo de destilado como parâmetro e afirmam que a multiplicidade de estados estacionários é devida a variação não monotônica do fluxo de destilado ao longo das trajetórias de composição e determinaram as condições necessárias para a existência dos mesmos a partir da geometria das fronteiras de destilação contidas nos diagramas de composição. Afirmaram também que dependendo da localização da composição da alimentação no diagrama de composição o sistema pode ou não apresentar múltiplos estados estacionários.

Em 1995, Bekiaris et al. realizaram um estudo semelhante sobre a multiplicidade de estados estacionários em sistemas heterogêneos. Eles estudaram a separação da mistura etanol-água tendo o benzeno como entrainer, utilizando como ferramenta o diagrama de curvas residuais e as linhas de destilação apresentados por esta mistura, abordando as situações de refluxo e número de pratos infinitos. Os autores continuam a afirmar que a multiplicidade de estados estacionários é devida a variação não monotônica do fluxo de destilado ao longo das trajetórias de composição, em outras palavras a vazão de destilado decresce em determinados segmentos das trajetórias. Eles analisaram o desempenho de colunas de pratos e de recheio com e sem decantador e para ambos os casos observaram a existência de uma diferença qualitativa entre estes tipos de colunas devido às diferenças entre as curvas residuais e as linhas de destilação. O número de estados estacionários foi determinado a partir de diagramas de bifurcação onde o parâmetro de bifurcação utilizado foi a vazão de destilado. Também afirmam que a localização da composição da alimentação no diagrama pode determinar a existência de mais de um estado estacionário. Concluíram que para este sistema estudado, colunas de pratos com e sem decantador apresentam múltiplos estados estacionários, colunas de recheio com decantador também apresentam múltiplos estados estacionários e sem decantador um único estado estacionário; que os resultados obtidos podem ser utilizados para avaliar o desempenho de colunas de pratos e de recheio com e sem decantador para diferentes combinações de tipos de reboiler e condensador sendo

necessário para isso apenas que as regiões dos possíveis produtos que venham a ser obtidos estejam localizadas corretamente no diagrama de composição.

Wong et al. (1997) realizaram um estudo experimental sobre os múltiplos estados estacionários e sensibilidade do processo de destilação azeotrópica da mistura isopropanol e água com ciclohexano como entrainer. Os autores utilizaram uma coluna em escala de laboratório com 45 estágios construída em vidro pirex onde realizaram simulações estacionárias e dinâmicas. Eles constataram a presença dos múltiplos regimes de operação para determinados valores da vazão de refluxo da fase orgânica e da carga térmica do reboiler, assim como a grande sensibilidade do processo a esta última. Concluíram que a coluna não consegue restabelecer o estado estacionário inicial após sucessivas mudanças na carga térmica do reboiler porque a quantidade de entrainer no interior da coluna não permanece constante o que segundo eles pode ser verificado a partir do cálculo da quantidade de entrainer antes e após o regime final ser atingido. Outras conclusões interessantes que chegaram é que para valores altos do refluxo as trajetórias de destilação caminham para o azeótropo formado por isopropanol e ciclohexano. E isto é caracterizado pela formação de um platô no perfil de temperatura em torno de 70°C que é uma temperatura próxima da temperatura do azeótropo, já que a mesma é em torno de $69,3^{\circ}\text{C}$. Por outro lado, para valores baixos do refluxo as trajetórias de destilação caminham para o azeótropo formado por isopropanol e água. E isto é caracterizado pela presença em todos os estágios da coluna da fase líquida mais pesada.

Esbejerg et al. (1998) também apresentaram um trabalho muito bom, com base nos métodos de refluxo e número de pratos infinitos abordado por Bekiaris et al, (1993 e 1995) sobre a multiplicidade de estados estacionários no processo de desidratação de etanol, via destilação azeotrópica. No trabalho os autores abordaram o sequeciamento direto e indireto das colunas e a identificação dos múltiplos estados estacionários a partir da simulação dinâmica do processo.

2.3 Desenvolvimentos de sistemas de controle para destilação azeotrópica

A síntese de processos de destilação azeotrópica, assim como o desenvolvimento de sistemas de controle eficientes vem ultimamente recebendo uma ênfase maior por parte dos pesquisadores. Isto porque colunas de destilação com comportamento

azeotrópico quase sempre apresentam dinâmicas complexas o que acarreta dificuldades na operação destas colunas e na obtenção dos produtos dentro das especificações desejadas.

Rovaglio et al. (1995) analisaram o clássico processo de separação etanol-água, utilizando o benzeno como entrainer. Os autores definem a estrutura de controle a ser utilizada e estudam a controlabilidade e observabilidade do sistema, confirmando que ambas são propriedades intrínsecas do sistema e que não são afetadas pelas condições de operação. Ainda no trabalho eles definem conceitualmente flexibilidade e operabilidade, realizam simulações no estado estacionário e estabelecem índices para verificar estas propriedades no sistema com o esquema de controle utilizado.

Kurooka et al. (2000) desenvolveram um estudo sobre a simulação dinâmica de um processo de destilação azeotrópica heterogênea para separação de uma mistura constituída de água, n-butil-acetato e ácido acético. Os autores afirmam que o complexo comportamento dinâmico deste sistema dificulta a operação e o projeto do sistema de controle. Um simulador dinâmico do processo foi desenvolvido para o conhecimento das características do processo e um sistema de controle projetado a partir do método de linearização das entradas e saídas do processo, onde o sistema original com três entradas e três saídas é transformado em um sistema SISO (single input-single output). Eles avaliaram o desempenho do sistema de controle para perturbações tipo degrau no fluxo e composição da alimentação a partir de uma comparação com o desempenho de um sistema de controle multimalhas (multiloop). A plataforma utilizada para o desenvolvimento do trabalho foi o aplicativo MATLAB/SIMULINK.

Ross et al. (2001) estudaram um complexo sistema de destilação industrial. O sistema consiste em um trem de separação de isopropanol, cuja a alimentação da primeira coluna contém além do isopropanol, água, propanol e traços de acetona e metil-isobutil-carbinol. Durante o desenvolvimento do trabalho, os autores realizaram um estudo de sensibilidade do sistema para a melhor estrutura de controle fosse definida. A análise mostrou que o sistema é bastante sensível a perturbações na vazão da alimentação e que o comportamento é extremamente não linear. Resultados semelhantes foram obtidos para perturbações na vazão de retirada do produto de topo. Após a definição de um sistema de controle apropriado, os autores perceberam que a grande sensibilidade do sistema é removida. Um procedimento de otimização integrada do projeto do processo e do sistema de controle permite uma economia anual em torno de 13 % quando comparada com as condições de operação originais.

Chien et al. (2004), apresentaram um trabalho sobre o projeto e o controle de um processo de destilação azeotrópica em escala industrial para separação da mistura constituída por isopropanol e água utilizando o ciclohexano como entrainer. O trabalho foi totalmente conduzido com base nos resultados obtidos a partir das simulações estacionária e dinâmica do processo.

Luyben (2005) estudou o clássico exemplo de produção de etanol anidro a partir de uma mistura de etanol e água, utilizando o benzeno como agente de arraste. Durante o desenvolvimento do trabalho o autor simulou o sistema no estado estacionário utilizando o simulador Aspen PlusTM e a partir de simulações no estado dinâmico utilizando o simulador Aspen DynamicsTM desenvolveu um sistema de controle para o processo que apresenta duas colunas ao todo. O desempenho do sistema de controle foi analisado frente a perturbações na composição e no fluxo da alimentação da coluna azeotrópica. O autor também enfatiza a dificuldade de convergência nas simulações devido a grande sensibilidade do sistema em questão.

Outro bom trabalho sobre operabilidade e controlabilidade da operação de sistemas de destilação azeotrópica heterogênea é o apresentado por Rovaglio et al. (1995). Os autores apresentam a partir de uma discussão objetiva as principais dificuldades na operação e controle de sistemas de destilação azeotrópica.

2.4 Controle por Realimentação (Feedback)

Um sistema que estabeleça uma relação de comparação entre a saída e a entrada de referência, utilizando a diferença como meio de controle é denominado sistema de controle com realimentação (Ogata, 2003).

Os sistemas de controle com realimentação não estão limitados à engenharia, podendo ser encontrados em várias áreas. O corpo humano, por exemplo, é um sistema extremamente desenvolvido de controle por realimentação. Tanto a temperatura corporal como a pressão sanguínea, são mantidas constantes por meio da realimentação de ordem fisiológica.

Os sistemas de controle por realimentação são com frequência chamados de sistemas de controle de malha fechada. Na prática, os termos controle com realimentação e controle de malha fechada são usados indistintamente. Em um sistema de controle de malha fechada, o sinal de erro atuante, que é a diferença entre o sinal de

entrada e o sinal de realimentação (sinal de saída), realimenta o controlador de modo que o mesmo minimize o erro e acerte a saída do sistema ao valor desejado.

O controlador proporcional-integral-derivativo é de longe, a forma predominante de controle por realimentação em uso atualmente. Mais de 90 % de todas as malhas de controle são PID. As ações de controle por realimentação proporcional, integral e derivativa atestam que o algoritmo PID considera implicitamente os erros de controle do presente, passado e futuro. É a primeira solução a ser tentada quando o controle por realimentação é usado.

Controladores PID não são adequados para sistemas fortemente não lineares, no entanto podem torna-se atrativos quando usados em conjunto com procedimentos de auto-sintonia, reduzindo o esforço requerido para a aplicação de ganho programável (“gain Schedule”). Em processos multivariáveis, tais como colunas de destilação, a utilização de controladores PID resulta uma estrutura descentralizada ou malhas múltiplas (“mult-loop”), conforme exemplificado na Figura 01 para um sistema 2x2.

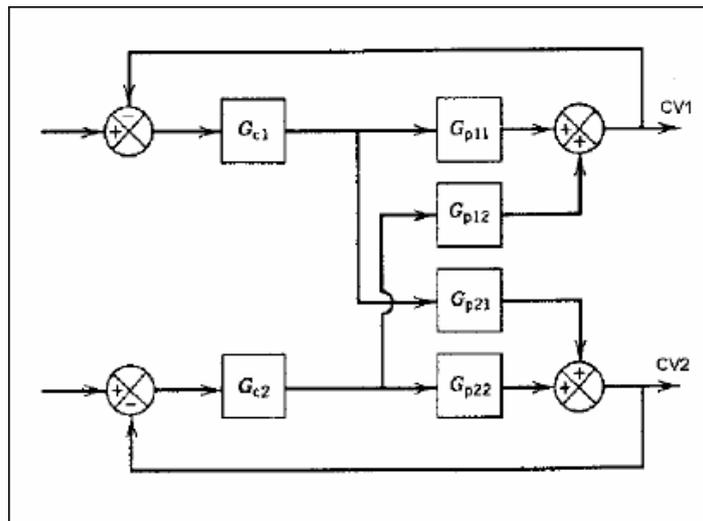


Figura 01 – Controle por realimentação descentralizado (TITO¹)

A maioria das colunas de destilação na indústria é controlada por sistemas deste tipo, que são mais fáceis de serem compreendidos e resintonizados. No entanto, implicam em correspondências fixas entre as variáveis controladas e manipuladas e falta de tratamento as restrições.

¹TITO – “two inputs two outputs”

3. CARACTERIZAÇÃO DO PROBLEMA

Neste capítulo, o processo de produção no qual a coluna em estudo está inserida e a operação da mesma é descrito, o problema é caracterizado e os objetivos de controle definidos.

3.1 Descrição do Processo

O processo de produção do MVC usado na BRASKEM S.A. (Unidade de Policloreto de Vinila, UPVC) é o de oxicloração do etileno (C_2H_4) com ácido clorídrico (HCl). O principal resultado é a formação de 1,2 – EDC. A etapa seguinte do processo é a pirólise (craqueamento) do 1,2 – EDC para produzir MVC e HCl. A Figura 02 apresenta um esquema simplificado das principais etapas para a produção de MVC. O processo de oxicloração é reconhecido pela necessidade da recuperação de HCl gerado no craqueamento do 1,2 – EDC. Na etapa de oxicloração, o C_2H_4 reage com o HCl e com o oxigênio do ar, para produzir 1,2 – EDC, na presença de um leito catalítico fluidizado. A reação é a seguinte:

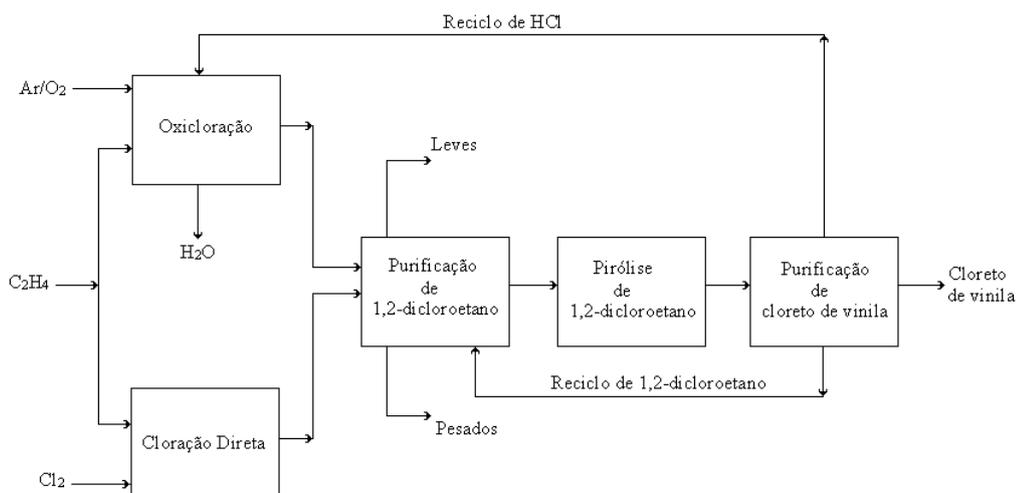
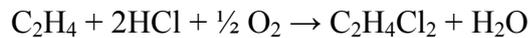


Figura 02 – Principais etapas de produção de monocloreto de vinila

O 1,2 – EDC produzido é purificado e segue para a área de craqueamento onde são produzidos MVC e HCl.

A coluna de destilação que será estudada nesta dissertação está localizada na área de purificação de 1,2 – EDC, a qual se encontra em destaque na Figura 03. A área de purificação é constituída basicamente de três colunas de destilação: a primeira torre recebe 1,2 – EDC da área de oxicloração e sua função é desidratar o 1,2 – EDC, bem como eliminar os componentes mais leves; a segunda torre é projetada para remover impurezas de alto ponto de ebulição e produzir o 1,2 – EDC adequado para a pirólise na área de craqueamento; a terceira torre é projetada para concentrar os hidrocarbonetos clorados pesados e recuperar o 1,2 – EDC contido na corrente da base da segunda coluna.

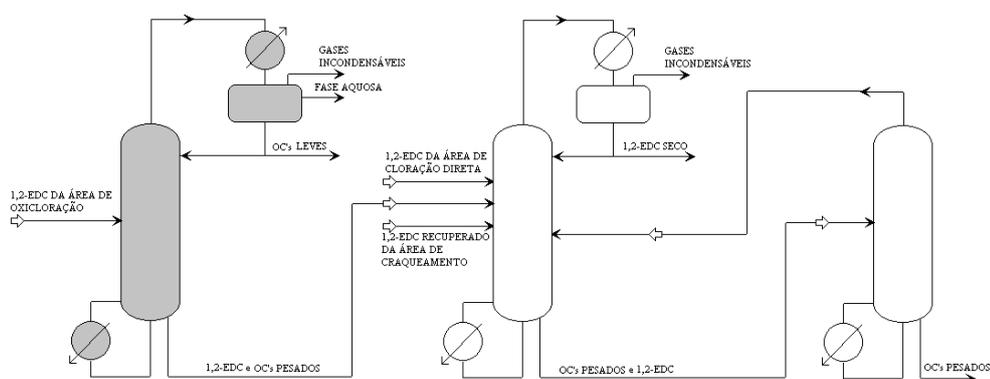


Figura 03 – Fluxograma esquemático da área de purificação do 1,2 – EDC

3.2 Descrição da Operação da Coluna de Secagem

A corrente de alimentação da coluna industrial em estudo é composta por 98 a 99% de 1,2-EDC saturado, além de outras substâncias organocloradas, sendo que CCl_4 e CHCl_3 são os componentes de interesse para fins deste estudo. A finalidade desta coluna é secar o 1,2-EDC e remover a maior parte dos componentes leves do produto de base. A coluna possui 70 pratos, refervedor tipo termosifão, um condensador total e um tambor de decantação como vaso de refluxo.

De acordo com a literatura a água forma azeótropo de mínimo ponto de ebulição com o 1,2 – EDC e outros hidrocarbonetos clorados de baixo ponto de ebulição. Desta forma embora o ponto de ebulição da água (100°C), na pressão atmosférica, seja maior

do que o de 1,2 – EDC (83 ° C), a água é removida juntamente com o produto de topo da coluna, pois esta corrente apresenta comportamento azeotrópico.

Os vapores de topo são condensados e resfriados no condensador e fluem para o vaso de refluxo da coluna. O vaso de refluxo contém uma chicana interna que é projetada para separar a fase orgânica mais densa da fase aquosa. A fase orgânica é bombeada de volta para a torre sob controle de nível, mantendo uma razão de refluxo constante. A fase aquosa decantada no vaso de refluxo é drenada para o tratamento de efluentes.

A coluna foi considerada como uma coluna de destilação azeotrópica heterogênea não convencional, porque apesar de exibir um comportamento azeotrópico no interior da coluna, não se faz necessário à adição de um ‘*entrainer*’ para efetuar a separação dos componentes, ou seja, este agente já está presente na alimentação. A Figura 04 apresenta um esquema da coluna em questão.

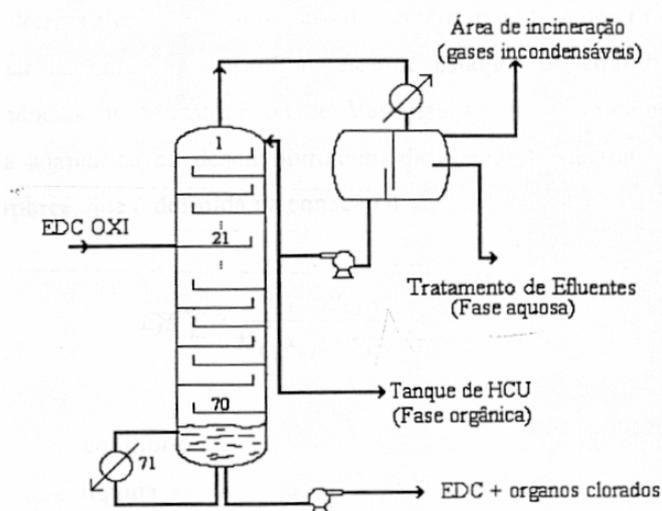


Figura 04 – Fluxograma esquemático da coluna de desidratação do 1,2 – EDC (Torre de Secagem)

Caracterizada como uma coluna de destilação de alta pureza, o produto de base é essencialmente 1,2-EDC (99 %). Devido ao seu efeito catalítico em uma reação química que ocorre em uma etapa posterior do processo (pirólise de 1,2- EDC), a presença de uma determinada concentração de CCl_4 quando bem controlada é desejável no produto de base da coluna. No entanto, a presença de CHCl_3 não o é, visto que o mesmo é um inibidor de craqueamento de 1,2-EDC. Flutuações excessivas na concentração de CCl_4

no produto da base causam variações no teor deste componente na alimentação dos fornos de craqueamento de 1,2-EDC provocando variações na taxa de conversão e afetando todo o processo a jusante. O adequado controle de composição de CCl_4 na alimentação dos fornos estabiliza a conversão de 1,2-EDC e potencialmente reduz a formação de coque que leva à parada prematura da planta. Para a obtenção da concentração desejada de CCl_4 no produto da base, a coluna opera ocasionalmente próxima dos limites quanto aos teores de CHCl_3 e sempre afastada dos limites que possam provocar a presença de água no produto de base. Portanto a água não será objeto deste estudo.

Em resumo o teor de CCl_4 no produto da base é a principal variável a ser controlada. No entanto, o teor de CHCl_3 na base da coluna deve ser mantido em sua respectiva faixa de controle. Vale salientar que este controle apresenta algumas dificuldades, uma vez que estamos lidando com concentrações da ordem de parte por milhão (ppm).

3.3 Especificação Preliminar dos objetivos do Sistema de Controle

Frequentemente, a medição direta da composição é onerosa ou mesmo impossível, neste caso devemos utilizar um determinado parâmetro do processo para estimar a composição. Este procedimento é denominado controle inferencial e a utilização desta estrutura de controle é a proposta deste trabalho.

Assim, o que está sendo pensado inicialmente é um sistema de controle onde a temperatura de determinado prato sensível seja utilizada para estimar a composição da base da coluna, assim a temperatura do prato sensível que é a variável medida será controlada (mantida no seu setpoint) a partir de manipulações na carga térmica do refeedor. Isto garante que as composições de CCl_4 e CHCl_3 na base da coluna sejam controladas por inferência e também permaneçam próximas dos seus setpoints.

Vale salientar que por se tratar de uma proposta inicial, a mesma pode ser abandonada e substituída por outra, caso a sensibilidade da temperatura dos pratos que venham a ser escolhidos sejam pequenas frente aos possíveis distúrbios que ocorram na coluna. Isto será verificado a partir de estudos de inferência estacionária e dinâmica.

Baseado nos requisitos do processo e na operação atual da planta, o sistema de controle deve ter os seguintes objetivos:

- Manter a composição de CCl_4 na base o mais próximo possível do seu ponto de referencia (“setpoint”), demonstrando adequada capacidade de rejeitar distúrbios em especial às alterações na vazão da alimentação da coluna;
- Manter as concentrações de CHCl_3 na base ou de 1,2-EDC no topo, ou ambas, abaixo de seus limites superiores de especificação;
- Ser simples e preferencialmente descentralizado.

4.MODELAGEM MATEMÁTICA DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Este capítulo apresenta a modelagem matemática de colunas de destilação no estado estacionário e dinâmico, assim como uma abordagem nos métodos utilizados para a resolução de ambos os modelos.

As principais áreas de aplicação de um modelo matemático de uma coluna de destilação são:

- Otimização econômica de colunas existentes;
- Projeto de novas colunas;
- Sistemas de controle por computador;

Nas duas primeiras aplicações, um modelo estático da coluna, isto é, um conjunto de equações que calculem seu comportamento em regime permanente pode ser usado. Na terceira aplicação podemos usar um modelo estático, um modelo dinâmico ou ambos.

O uso de um modelo estático permite prover informações à operação sobre quais os tipos de alterações devem ser feitas, por exemplo, na razão de refluxo e na vazão de um dos produtos quando houver mudanças nas condições da alimentação (Moura 1974). Entretanto o computador não poderá atuar nem nos set-points nem nas válvulas de controle, pois o modelo não tem informações sobre o comportamento dinâmico da coluna. Ele apenas informa quais serão as composições dos produtos quando e se o regime estacionário for alcançado. A maioria dos processos atingirá este novo estado de equilíbrio se não existirem controladores. Obviamente na maioria dos casos, o novo estado de equilíbrio, não atenderá uma ou varias especificações do processo (Moura 1974).

4.1 Modelo Teórico para estágio de equilíbrio em estado estacionário

Vamos considerar um separador em estado estacionário liquido-vapor ou liquido-liquido consistindo de um determinado número de estágios arranjados em uma cascata em contracorrente. Assume-se o equilíbrio entre as fases que deixam cada estagio e que não ocorre reação química. Uma representação geral de um estágio de

equilíbrio J de um separador líquido-vapor é mostrada na Figura 05, considerando que os estágios são numerados a partir do topo. A mesma representação pode ser aplicada para um separador líquido-líquido onde as fases líquidas de alta densidade são representadas por correntes de líquido e as fases líquidas de baixa densidade são representadas por correntes de vapor.

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_{FJ} , pressão P_{FJ} , e entalpia molar global H_{FJ} . 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.

Entra no estágio J líquido de um estágio 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 estágio 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.

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 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 estágio J um líquido de propriedades intensivas $x_{i,J}$, $H_{L,J}$, T_J e P_J que estar 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 reboilers. Associado a cada estágio teórico temos a seguinte relação de equações expressas em termos do conjunto de variáveis da Figura 01. Segundo Wang e Henke em Henley e Seader, J.D. (1981), estas equações são conhecidas como equações MESH.

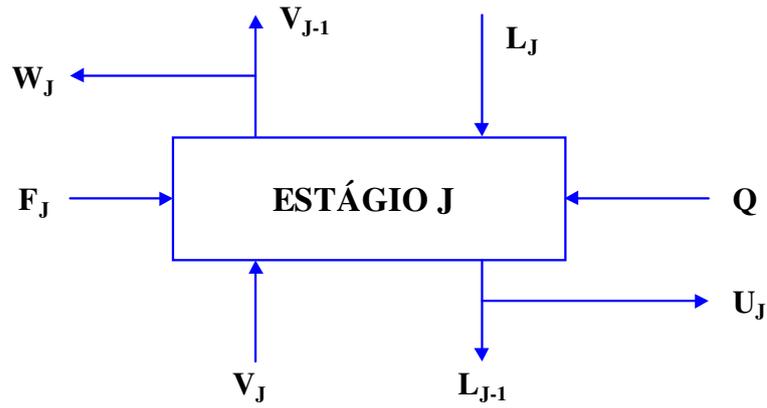


Figura 05 – Modelo de Estágio de Equilíbrio

Equação M – Balanço material para cada componente ($C^{(1)}$ equações para cada estágio)

$$Mi, j = L_{j-1}x_{i,j-1} + V_{j+1}y_{i,j+1} + F_j z_{i,j} - (L_j + U_j)x_{i,j} - (W_j + V_j)y_{i,j} = 0 \quad (1)$$

Equação E – Relações de Equilíbrio de fases (C equações para cada estágio)

$$Ei, j = y_{i,j} - k_{i,j}x_{i,j} = 0 \quad (2)$$

Equação S – Somatório das frações molares (Uma para cada estágio)

$$(Sy)_j = \sum_{i=1}^C y_{i,j} - 1 = 0 \quad (3)$$

$$(Sx)_j = \sum_{i=1}^C x_{i,j} - 1 = 0 \quad (4)$$

Equação H – Balanço de Energia (Uma para cada estágio)

$$Hj = H_{L_{j-1}}L_{j-1} + H_{V_{j+1}}V_{j+1} + F_j H_{F_j} - (L_j + U_j)H_{L_j} - (W_j + V_j)H_{V_j} - Q_j = 0 \quad (5)$$

A equação do balanço material total pode ser usada em lugar de (3) ou (4), então escrevendo o balanço global do estágio 1 até j:

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad (6)$$

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 $2C + 3$ equações MESH. A cascata em contracorrente com N estágios mostrada na Figura 06 é representada por $N(2C+3)$ equações em $[N(3C+10) + 1]$ variáveis. Se N e todos os F_j , $z_{i,j}$, $T_{F,j}$, $P_{F,j}$, P_j , U_j , W_j e Q_j são especificados, o modelo é representado por $N(2C+3)$ equações algébricas simultâneas em $N(2C+3)$ variáveis desconhecidas compreendendo todos os $x_{i,j}$, $y_{i,j}$, L_j , V_j e T_j .

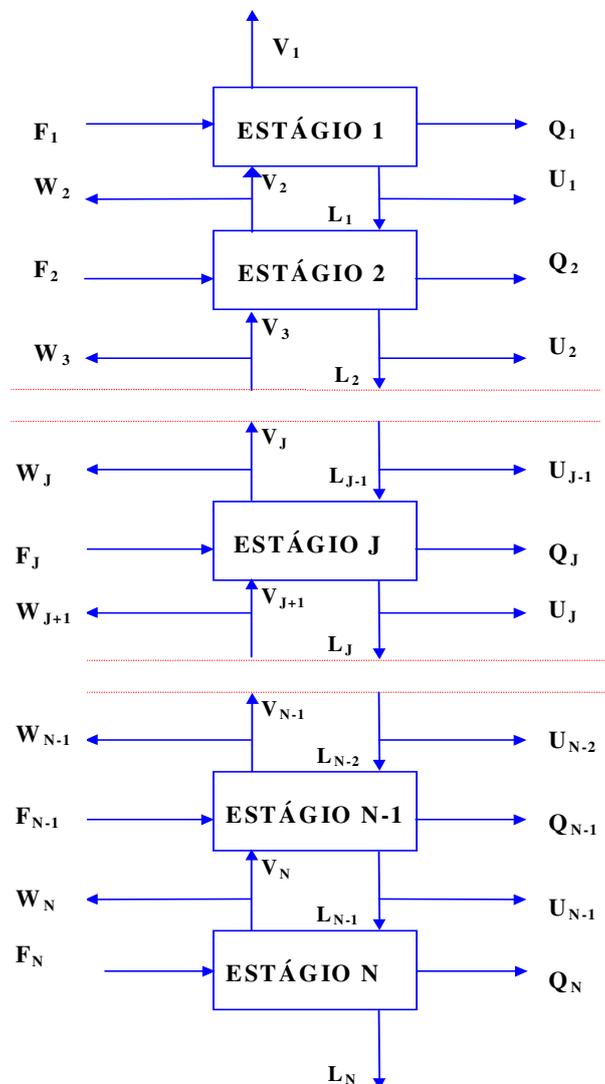


Figura 06 – Cascata em Contracorrente com N Estágios de Equilíbrio

4.2 Modelo Teórico para o estado dinâmico

O modelo matemático que descreve o comportamento dinâmico de uma coluna de destilação é composto de equações diferenciais ordinárias e equações algébricas (DAE). As equações diferenciais são provenientes do balanço global de massa e energia em cada prato, balanço global de energia no refeedor e do balanço parcial para cada componente em cada prato. As equações algébricas são obtidas das relações de equilíbrio e hidráulica.

Balanço global para o prato j

$$\frac{d}{dt}(M_j) = L_{j+1} + V_{j-1} - L_j - V_j + F_j^L + F_j^V - W_j^V - W_j^L \quad (7)$$

Balanço de massa para o componente i no prato j

$$M_j \frac{d}{dt}(x_{i,j}) = L_{j+1}x_{i,j+1} + V_{j-1}y_{i,j-1} - L_jx_{i,j} - V_jy_j + F_j^Lx_{i,j}^F + F_j^Vy_{i,j}^F - W_j^Vy_{i,j} - W_j^Lx_{i,j} - x_{i,j} \frac{d}{dt}(M_j) \quad (8)$$

Balanço global de energia no prato j

$$M_j \frac{d}{dt}(h_j) = L_{j+1}h_{j+1} + V_{j-1}H_{j-1} - L_jh_j - V_jH_j + F_j^Lh_j^F + F_j^VH_j^F - W_j^VH_j - W_j^Lh_j - h_j \frac{d}{dt}(M_j) \quad (9)$$

Balanço de energia na estrutura do refeedor

$$C_{mr} \frac{d}{dt}(T_r) = Q_r - U_{rar}(T_r - T_1) \quad (10)$$

A equação 10 inclui a capacitância térmica do refeedor, C_{mr} , e o coeficiente global de transferência de calor U_{rar} . São duas variáveis de grande importância, principalmente na dinâmica do processo. Nessa equação, considerou-se que todo o vapor que entra no refeedor é retirado na forma de líquido saturado, ou seja, somente a parte de calor latente é aproveitada para a vaporização do líquido do prato 1.

Como no estado estacionário, o modelo apresenta dois graus de liberdade. Normalmente são fixadas a vazão de refluxo e a vazão de vapor para o refeedor.

A presença de equações diferenciais e algébricas simultaneamente faz com que se tenha um sistema de difícil resolução. Para complicar mais ainda, a taxa de variação da composição é muito menor do que a taxa de variação da entalpia. A presença de equações diferenciais rápidas e lentas da origem ao chamado sistema rígido (stiff) (Brito, 1997).

A partir de simplificações, vários modelos são obtidos, todos visando redução no tempo computacional. Dentre as mais comuns tem-se: considerar o holdup constante, considerar o balanço de energia na forma algébrica e desprezar o balanço de energia. Esta é uma prática muito realizada pelos pesquisadores da área de controle. No caso da capacitância do refeedor, é normal os trabalhos nem citarem tal variável (Brito, 1997).

4.3 Modelo de prato no estado transiente

Geralmente o holdup da fase vapor é considerado desprezível em virtude do valor da pressão utilizado nas simulações. Para os modelos matemáticos que não consideram o holdup da fase líquida em cada prato constante, é necessário utilizar uma equação que relacione o holdup de líquido do prato com a vazão de líquido que deixa este prato. Esta relação pode ser obtida a partir da equação de Francis. A Figura 07 mostra o esquema utilizado na modelagem da hidráulica do prato da coluna. A especificação do prato é conseguida através da fixação da altura do vertedouro, h_w , comprimento do vertedouro, L_w e diâmetro do prato, D .

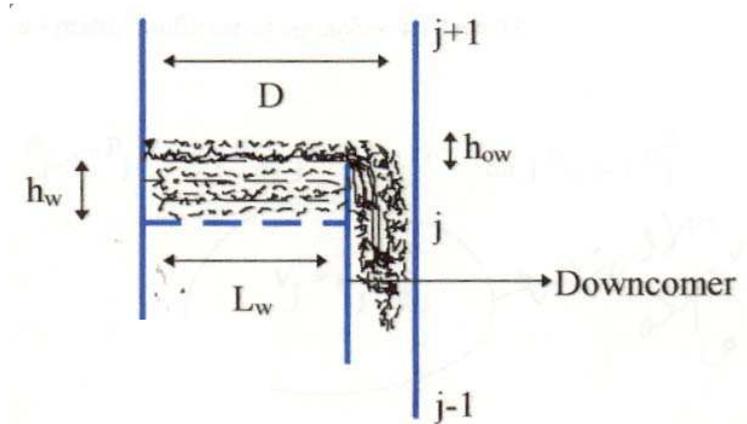


Figura 07 – Esquema utilizado na representação matemática do prato perfurado

A variável h_{ow} representa a altura do líquido acima da altura do vertedouro. É responsável direta pela vazão de líquido que deixa o prato. A equação de Francis, equação 11 é utilizada para calcular o holdup da fase líquida inicial. Para os modelos que consideram o holdup da fase líquida variável, a equação de Francis também é utilizada para calcular a vazão de líquido.

$$L_j = 1.839.L_{w,j}.h_{ow}^{1.5} \quad (11)$$

O valor da altura h_{ow} é calculado da seguinte maneira. Inicialmente transforma-se o holdup molar em holdup volumétrico. Dividindo o holdup volumétrico pela área do prato, obtém-se a altura total de líquido no prato. O valor de h_{ow} é obtido, subtraindo o valor da altura do vertedouro h_w da altura total de líquido. Matematicamente isto está expresso nas equações 12, 13 e 14.

$$M_v = \frac{M}{\rho} \quad (12)$$

$$h_t = \frac{M_v}{A} \quad (13)$$

$$h_{ow} = h_t - h_w \quad (14)$$

Quando o modelo considera a pressão em cada prato variável com o tempo, isto significa que o balanço global de energia esta na forma diferencial, e o mesmo não pode ser utilizado para calcular a vazão de vapor que deixa o prato. Neste caso, a vazão de vapor é calculada a partir da perda de carga quando o prato está vazio e da perda de carga causada pela altura de liquido no prato, conforme as equações 15 e 16.

$$P_{j-1} - P_j = \rho_{L,j} \cdot (h_{w,j} + h_{ow,j}) + K_{dh} \cdot \rho_{V,j-1} \cdot v_j^2 \quad (15)$$

$$V_j = v_j \cdot \rho_{V,j} \quad (16)$$

Luyben (1990) apresenta a modelagem matemática e a simulação dinâmica de uma coluna de destilação binária ideal (Benzeno-Tolueno) e de uma coluna de destilação multicomponente com pressão constante e variável. As simulações foram feitas na linguagem de programação FORTRAM e os programas são descritos pelo autor.

Gani et al (1986) apresentou um trabalho dividido em duas partes sobre dinâmica de colunas de destilação. Na primeira parte os autores apresentam o desenvolvimento do modelo matemático e o procedimento de resolução do mesmo. Na segunda parte do trabalho eles abordam o aspecto numérico e computacional da solução do modelo.

Skogestad (1992) apresenta uma abordagem completa sobre a dinâmica e o controle de colunas de destilação. O autor trata o assunto a partir de uma análise crítica e criteriosa abordando desde a modelagem dinâmica e a simulação até a comparação entre várias estruturas de controle, apontando para cada uma delas suas vantagens e desvantagens.

4.4 Métodos Numéricos

4.4.1 Resolução do modelo no estado estacionário

Embora o estudo de um método de resolução de problemas de equilíbrio liquido-vapor em múltiplos estágios tenha sido iniciado há mais de 70 anos por Lewis e Matherson (1932), só na década de 70 apareceram métodos numéricos eficientes para a

solução geral do problema. Entretanto, a variedade dos problemas de equilíbrio líquido-vapor em múltiplos estágios é tão grande que ainda não existe nenhum programa de computador capaz de resolver todos os problemas (Moura,1981). As variedades decorrem dos seguintes fatores:

1. Tipos de componentes na carga: hidrocarbonetos, gases associados, frações de petróleo, substâncias polares e soluções iônicas;
2. Tipo de equilíbrio: líquido-vapor, líquido-líquido, vapor e dois líquidos, reações químicas na fase líquida, associação na fase vapor;
3. Faixas de pressão e temperatura;
4. Número de estágios e componentes;
5. Eficiência em sistemas multicomponentes;
6. Colunas com pratos ou recheadas;
7. Faixa de ebulição da carga;

Os fatores 1, 2 e 3 criam uma multiplicidade de correlações para cálculo de equilíbrio, nenhuma delas geral. O problema de correlacionar com confiança a eficiência de componentes em misturas multicomponentes parece não ter uma solução geral. Finalmente, o fato de a coluna funcionar de forma discreta (pratos) ou contínua (recheio) conduz a um tratamento matemático completamente diverso. E a consequência dessa imensa variedade de problemas é a existência de um grande número de programas aplicáveis cada um à solução de alguns tipos de problema. Os métodos numéricos mais eficientes simulam colunas existentes, em que o número de estágios, as cargas, os estágios de carga, as vazões de produtos e estágios de retiradas de produtos são conhecidos. Portanto, o uso destes programas baseados nestes métodos tem de ser feito iterativamente quando aplicados em projetos de novas colunas ou quando o objetivo é otimizar uma coluna existente (Moura, 1991).

Os métodos em que o número de estágios é fixo podem ser classificados em:

- Método *Bubble-Point* (BP);
- Método Sum-Rates (SR);
- Método Simultaneous Corrections (SC);

É uma característica dos métodos em que o número de estágios é constante a fixação dos perfis de temperatura e vazão de vapor seguida de um cálculo balanço material. O balanço material é escrito para todos os estágios e relaciona a fração molar

de cada componente num estágio com a sua fração molar nos 2 estágios adjacentes. O sistema de N equações resultante é bastante simples porque a matriz dos coeficientes é tridiagonal o que possibilita a utilização do algoritmo de Thomas para resolvê-la. Até este ponto os métodos BP e SR são idênticos, ou quando muito, diferem em pequenos detalhes. A Figura 08 ilustra o esquema iterativo do método BP:

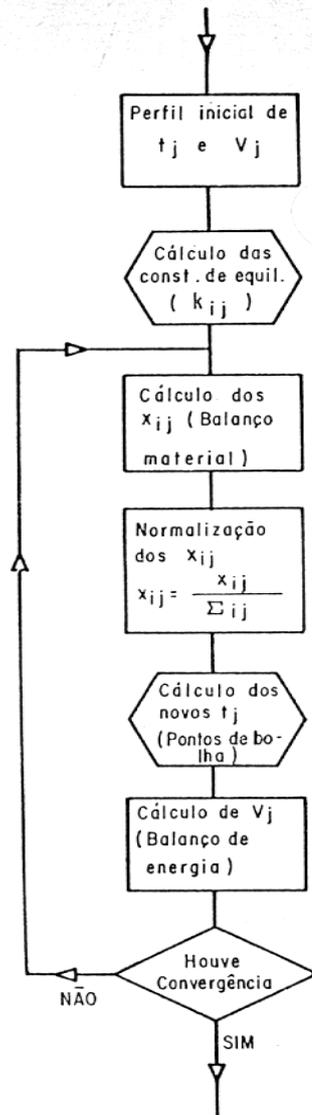


Figura 08 – Esquema iterativo dos métodos BP (Moura, 1974).

Como podemos ver pela Figura 08, após resolver as equações de balanço material, componente por componente, as composições de cada estágio, cuja soma é diferente de 1,0, porque o método ainda não convergiu são normalizadas. Obtêm-se então as novas temperaturas, através do cálculo de ponto de bolha do líquido de todos os estágios, daí o nome do método. Com estas temperaturas e as composições das fases, calculam-se as entalpias e faz-se um balanço de energia, determinando-se as novas

vazões de vapor. Verifica-se a convergência e repete-se o procedimento, caso a mesma não tenha sido obtida. O critério de convergência, sugerido por Wang-Henke (1966) (em Henley e Seader, 1981) é:

$$\tau = \sum_{j=1}^N [T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}] \leq 0.01 * N \quad (17)$$

Friday e Smith (1964) (em Moura, 1981) mostraram que o métodos do BP é adequado para cargas com faixa de ebulição estreita. A faixa de ebulição é definida por:

$$\Delta_{DB} = PO - PB \quad (18)$$

onde PO e PB são os pontos de orvalho e de bolha, na pressão da coluna da carga combinada (soma das cargas) da coluna. Segundo eles os métodos BP tornam-se instáveis quando $\Delta_{DB} > 150 \text{ }^\circ\text{F}$ ($65,5 \text{ }^\circ\text{C}$).

No método SR, após o balanço material, calcula-se as novas vazões, por meio das relações estequiométricas. Daí determina-se as novas temperaturas, para que os balanços de energia sejam verificados. A Figura 09 ilustra o esquema iterativo do método SR:

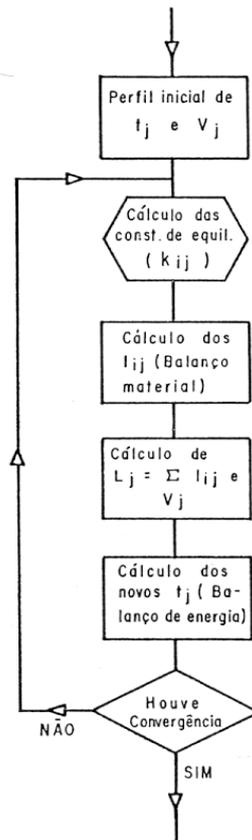


Figura 09 – Esquema iterativo do método SR (Moura, 1974).

O método SR é aplicável a cargas com faixa de volatilidade grande ($\Delta_{DB} > 400^\circ$ F (204° C)) e são ideais para torres de absorção. Quando aplicados são mais rápidos do que os métodos BP, porque em cada iteração as constantes de equilíbrio são calculadas apenas uma vez, ao passo que nos métodos PB o cálculo de um ponto de bolha exige, pelo menos, uns 3 cálculos de constante de equilíbrio. O método SC é mais comumente utilizado no projeto de colunas de absorção gasosa.

Uma descrição detalhada e o esquema iterativo do método SC podem ser encontrados no livro de Henley e Seader (1981) ou em Perry's Chemical Engineer's Handbook, (1999).

4.4.2 Resolução do modelo no estado dinâmico

O modelo dinâmico desenvolvido é formado de equações diferenciais e algébricas. A estratégia que geralmente é utilizada consta em resolver primeiro o sistema algébrico e em seguida o sistema de equações diferenciais ordinárias. Brito (1997), descreve vários modelos que podem ser utilizados na resolução do problema, os mesmos foram usados em sua tese de doutorado para simular dinamicamente o processo de destilação extrativa de vários sistemas, entre eles o sistema etanol-água com etilenoglicol sendo utilizado como solvente. São eles:

Em todos os modelos o método de integração das equações diferenciais que pode ser utilizado pode ser o método de Euler implícito com passo de integração variável. Este método combina a velocidade do Euler implícito e a robustez de integradores de passos variáveis como GEAR. Este é o método utilizado pela Aspen Technology Inc. e apresenta as seguintes vantagens:

- Pode variar tamanho de passos durante a simulação;
- Mantém a exatidão de acordo com a estratégia do controle de erro;
- Para diversas simulações dinâmicas consome menos tempo computacional do que a opção com passo fixo;
- Para muitas simulações dinâmicas, fornece resultados mais exatos durante condições altamente transientes do que do que a opção de passo fixo.

A equação usada pelo método de Euler implícito é apresentada na equação 19.

$$y(t+h) = y(t) + h \cdot \frac{d}{dt} y(t+h) \quad (19)$$

Onde,

h = incremento do passo de integração

$y(t)$ = valor da variável de estado no tempo t

$y(t+h)$ = valor da variável de estado no tempo $t + h$

$\frac{d}{dt} y(t+h)$ = derivada da variável de estado no tempo $t + h$

5. ESTRUTURAS DE CONTROLE DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Este capítulo apresenta uma revisão bibliográfica sobre as estruturas de controle mais usuais em colunas de destilação. O texto deste capítulo é uma adaptação de Junior (2003).

Existem inúmeras estratégias de controle para colunas de destilação e as respostas em malha aberta são completamente diferentes para composição, especialmente se o interesse for pelo controle de qualidade de ambos os produtos. Não existe uma estratégia única que seja adequada a todo tipo de coluna. Em geral, a melhor estratégia é aquela que resulta em um adequado equilíbrio entre redução do acoplamento (entre as malhas de controle de composição), aumento da capacidade de rejeitar distúrbios, redução da não-linearidade do processo e simplicidade do sistema de controle.

As composições dos produtos de uma coluna de destilação são afetadas por duas variáveis manipuladas fundamentais. A primeira é a divisão da alimentação ('feed split'), representando a fração da alimentação que é retirada como produto do topo ou da base. A segunda variável é o fracionamento, que está relacionado à energia que é colocada na coluna para obter a separação. Em geral, a divisão da alimentação tem um impacto muito maior sobre a composição dos produtos que o fracionamento, exceto para colunas de baixa pureza.

As diversas estruturas possíveis costumam ser representadas por siglas onde a primeira letra representa a variável que é manipulada para controle da composição do destilado e a segunda letra representa a variável que é manipulada para controle da composição do produto da base. Tradicionalmente, a vazão de refluxo (L), a vazão de destilado (D) ou a razão de refluxo (L/D) é usada para controle da composição, enquanto a carga térmica (Q_r ou V), a vazão de produto da base (B) ou mesmo a razão entre elas (V/B) é manipulada para controle da composição da base.

A estrutura LV, apresentada na Figura 10, é conhecida como controle por balanço energético, enquanto as demais são variantes de controle por balanço material. A estrutura LV é a mais usual, especialmente quando é requerido o controle de qualidade de apenas um dos produtos. Tem a vantagem de ser simples e pouco suscetível à sintonia dos controladores de nível, mas é inadequada quando os fluxos

internos são elevados, pois o controle dos inventários utilizando D ou B é difícil. A composição da base é controlada ajustando-se a vaporização (“boilup”, V) via Q_r , relativo a um refluxo constante. Para o controle de composição de ambos os produtos, este esquema em geral não é adequado, pois permite que os fluxos de energia e massa interajam em detrimento da qualidade do produto. Ambos os produtos encontram-se sob controle de nível, influenciados por todos os distúrbios que possam afetar a coluna. Neste arranjo, alterações na vazão de vaporização causam a desejada alteração na composição da base, embora também causem alterações na vazão de destilado e de produto de base. Portanto, um ajuste na vazão de vaporização produz dois efeitos interativos. Para colunas de destilação de alta pureza que normalmente são muito afetadas por pequenos desbalanceamentos, esta configuração costuma apresentar forte acoplamento, com elevados valores RGA (Relative Gain Array) em baixas frequências, implicando na inviabilidade do uso de controladores desacopladores.

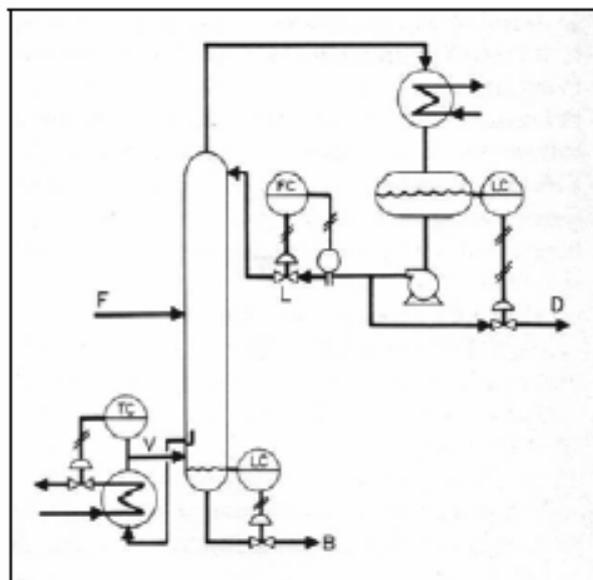


Figura 10 – Esquema LV (Junior, 2003)

Em um sistema de controle por balanço material, o fluxo de um produto é sempre manipulado para controle de composição. Em geral, o produto de menor vazão é usado como variável manipulada para controle de composição, enquanto a vazão do outro produto é manipulada pelo controlador de nível, fechando o balanço material. No esquema DV, exemplificado na Figura 11, a vazão de destilado é manipulada para controle de composição no topo. Geralmente, a composição controlada e o fluxo

manipulado pertencem ao mesmo produto. Este arranjo é suscetível à sintonia do controlador de nível do condensador, que se não for bem ajustada, pode resultar em uma série sobre elevação (overshoot) na composição de produto de base quando uma perturbação é aplicada em V. outra variante é a estrutura VD, que é a inversão de malhas em relação à estrutura DV.

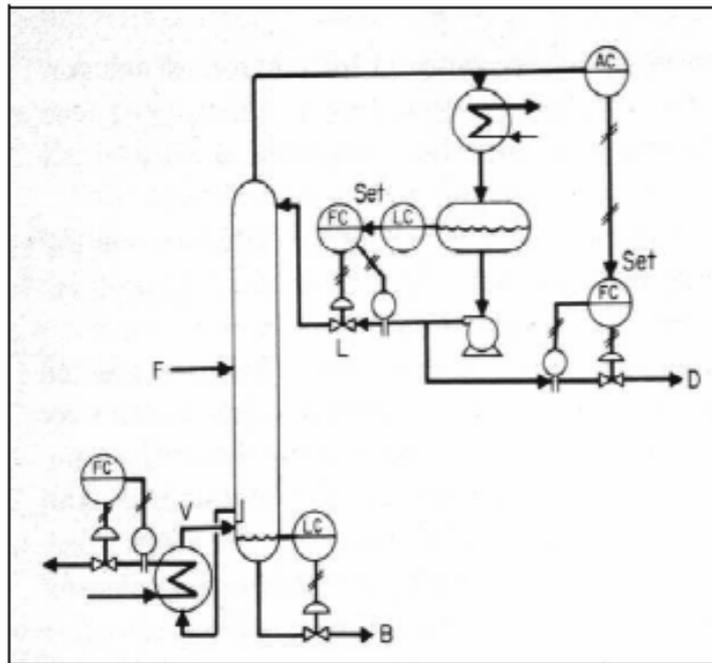


Figura 11 – Esquema DV (Junior, 2003)

Outro esquema de controle por balanço material é o LB, apresentado na Figura 12, onde a vazão do produto de base é ajustada para controlar a sua composição. Este arranjo é usado quando a vazão da base é menor do que a de destilado e propicia uma menor sensibilidade da composição a distúrbios no balanço material.

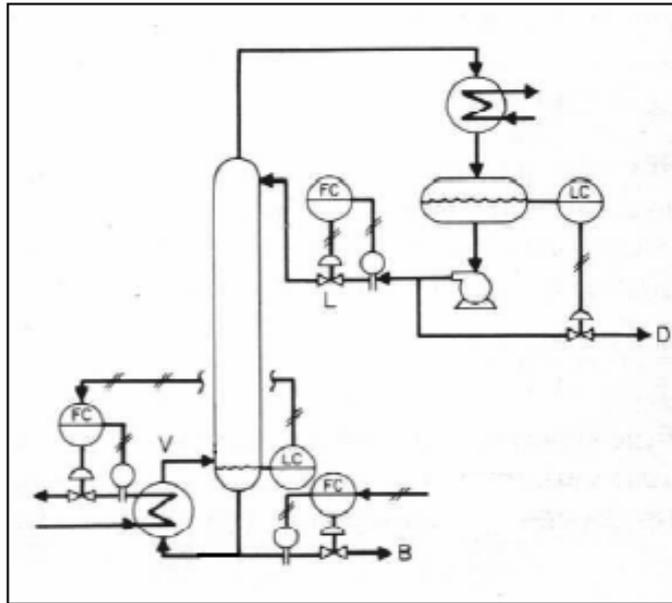


Figura 12 – Esquema LB (Júnior, 2003)

Nem sempre a composição a ser controlada e o fluxo manipulado pertence ao mesmo produto. Sensibilidade em excesso à ação de controle, por exemplo, pode forçar combinações alternativas. Como por exemplo, quando a composição de produto de base necessita ser controlada mas D/F é menor que B/F , a melhor escolha pode recair sobre o esquema LD exemplificado na Figura 13. a carga térmica deve ser ajustada pelo controlador de nível do tambor de refluxo.

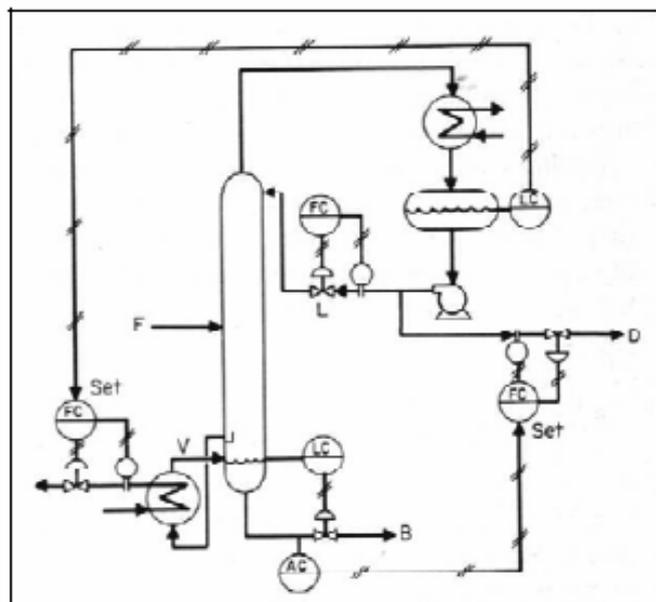


Figura 13 – Esquema LD com x_B manipulando D (Júnior, 2003)

Outra configuração convencional é a $[D/L, V/B]$, considerada uma boa escolha para altas vazões de refluxo, mas de difícil implementação. A Figura 14 apresenta a configuração $[D/(L+D), V]$ que mantém a razão de refluxo constante se a saída do controlador de composição de destilado for constante. Um aumento na carga térmica ocasionado pelo controlador de composição de base não resulta em uma alteração de qualidade do destilado de mesma magnitude como ocorre se o refluxo fosse mantido constante (esquema LV) ou se a vazão de destilado fosse mantida constante (esquema DV). Este sistema pode resultar em um desacoplamento implícito, o que permite sintonizar os controladores por métodos SISO.

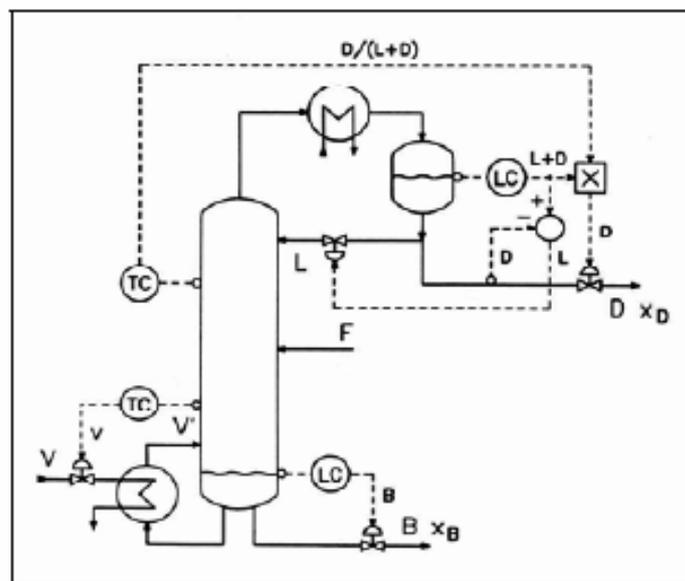


Figura 14 – Esquema $[D/(L+D), V]$ (Júnior, 2003)

Uma extensão desta última configuração é a configuração $[D/(L+D), V/B]$ representado na Figura 15 e que apresenta um acoplamento entre as malhas de controle de composição menor que no esquema $[D/(L+D), V]$.

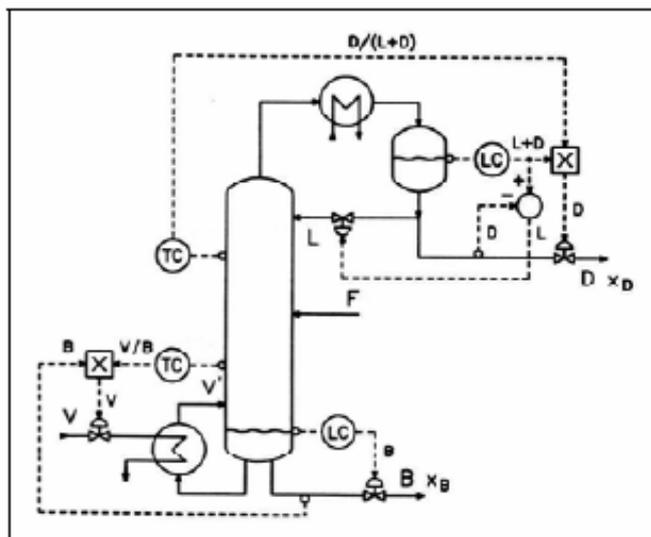


Figura 15 – Esquema [D/(L+D),V/B] (Júnior,2003)

As estruturas mostradas anteriormente são ditas convencionais e aparecem para melhor comparação de forma consolidada na Figura 16.

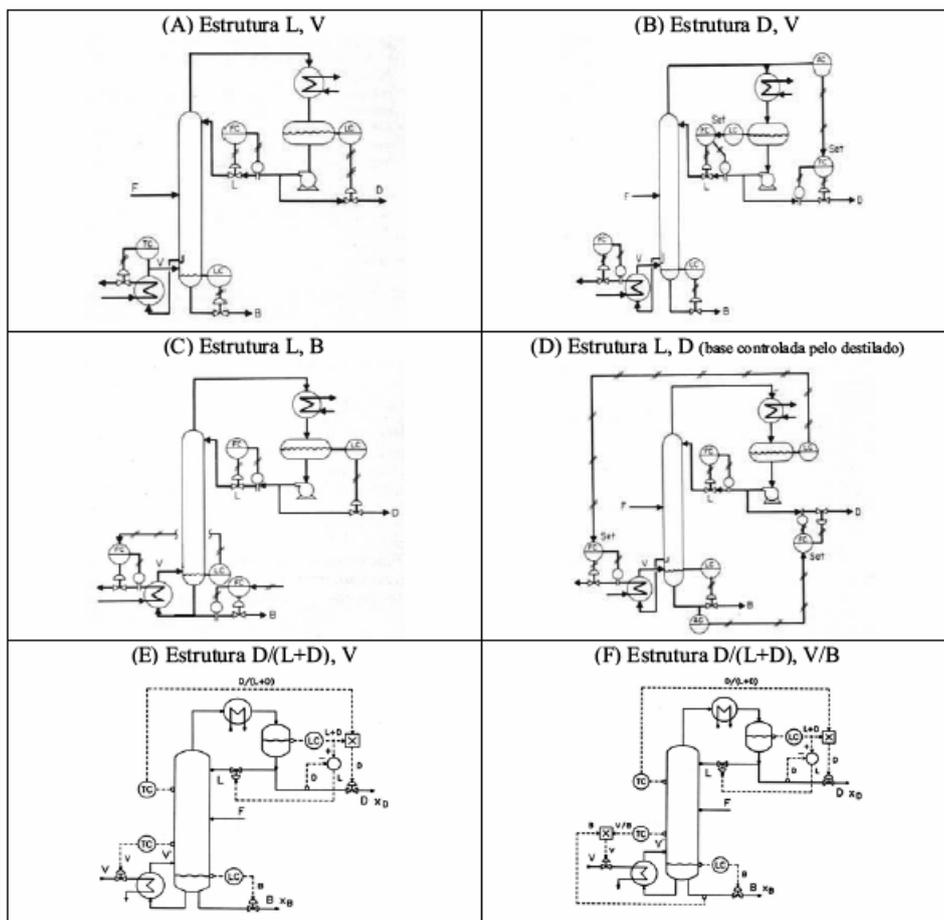


Figura 16 – Esquemas de controle para colunas de destilação

Uma desvantagem do controle por balanço material é o atraso na correção das vazões de vapor e líquido internas, as quais são as determinantes das composições em uma coluna. No entanto, a adição de controladores antecipatórios pode reduzir este inconveniente.

Se o destilado é usado para controle de composição e o refluxo manipulado para controle do nível do condensador conforme o esquema da Figura 15-B, um controlador antecipatório pode reduzir o atraso na correção da vazão de refluxo em até 10 vezes. Como o distúrbio mais freqüente em uma coluna de destilação é uma mudança na vazão de alimentação, um controle antecipatório entre esta variável e a vazão de retirada de produto poderá trazer grandes benefícios.

Distúrbios na composição da alimentação normalmente não requerem controle antecipatório pois esta composição, em geral, varia menos e de forma lenta, quando comparada à variação na vazão de alimentação. A implementação deste controlador exige um analisador em linha na corrente de alimentação. Para garantir uma separação constante, a vaporização (se a vazão de destilado é manipulada para controlar a composição) ou o refluxo (se a vazão do produto de base é manipulada para controlar a composição) deve também ser manipulado por um controlador antecipatório.

6. SIMULAÇÃO ESTACIONÁRIA

Este capítulo apresenta os procedimentos utilizados durante as simulações em estado estacionário, assim como, os resultados obtidos e uma breve discussão sobre os mesmos.

Segundo Skogestad (1997), a base para entender a dinâmica e controlar as especificações de uma coluna de destilação é ter conhecimento detalhado do seu comportamento no estado estacionário. Além disso, para iniciar o estudo do comportamento dinâmico de qualquer equipamento ou processo, é necessário dispor das condições iniciais, as quais são obtidas a partir de simulações no estado estacionário.

As simulações no estado estacionário, foram implementadas no simulador de processos Aspen PlusTM. Benyahia (2000) apresenta uma discussão bastante interessante sobre o uso de simuladores de processos no estudo de processos industriais. O autor utilizou como estudo de caso o processo industrial de produção de MVC e enfatiza que dados cinéticos e métodos de cálculos de propriedades termodinâmicas são as principais fontes de erros no uso de simuladores na reprodução de processos industriais.

No nosso trabalho, os objetivos principais das simulações em estado estacionário foram:

- Validar o modelo, a partir da comparação entre o perfil de temperatura simulado e o perfil obtido a partir de dados da planta;
- Determinar a partir dos perfis de composição, os pratos sensíveis que serão utilizados em um possível controle por inferência;
- Realizar um estudo de inferência estacionária, relacionando a temperatura do prato sensível com a vazão da alimentação, carga térmica do refeedor e vazão de retirada de leves.

A Figura 17, apresenta o fluxograma no estado estacionário da coluna em estudo que foi implementada no simulador de processos Aspen PlusTM.

Os valores iniciais de composição da alimentação utilizados para a simulação foram os mesmos que aparecem na segunda coluna da Tabela 2, porém, o simulador normaliza estes valores, de modo que a sua soma seja igual a 1. os valores após a normalização, aparecem na terceira coluna da Tabela 2.

6.1 Validação do modelo

Como foi dito anteriormente, a validação do modelo foi feita a partir da comparação entre o perfil de temperatura simulado e o perfil obtido a partir de dados da planta. A Figura 18 apresenta os perfis:

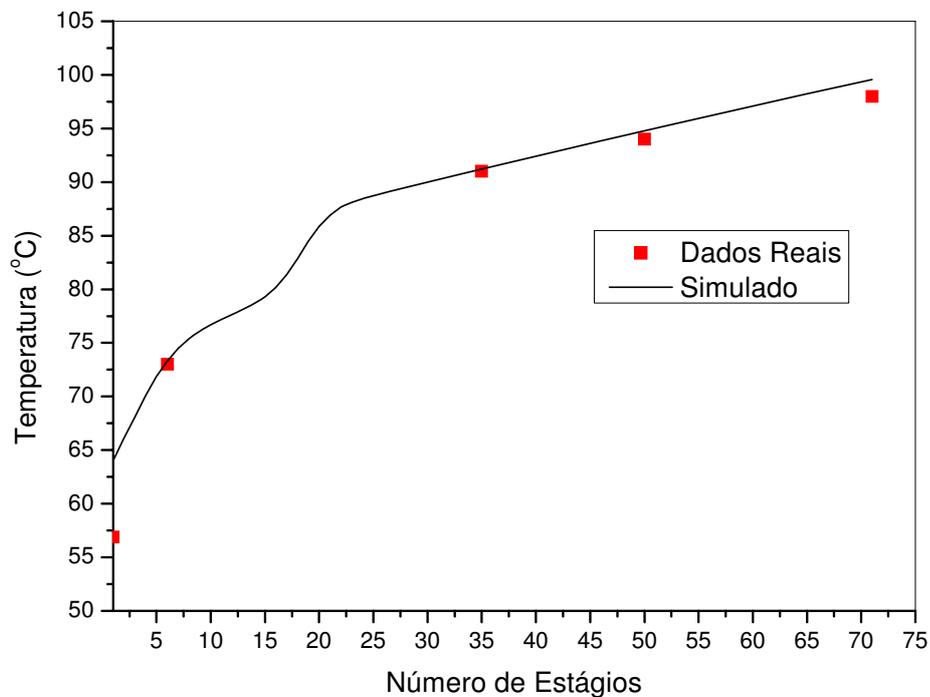


Figura 18 – Perfil de Temperatura da coluna em estudo

É possível observar, que existe uma boa similaridade entre o perfil simulado e o experimental (dados da planta), com exceção dos pontos referente ao topo da coluna onde a diferença é em torno de 9 °C e a base em que a diferença é em torno de 1 °C. Segundo informações obtidas com os responsáveis pela operação da coluna, a temperatura no topo oscila muito e isto não deve ser levado em consideração para validar o modelo.

Como os demais pontos apresentam uma boa concordância, é possível considerar o modelo validado.

6.2 Escolha do prato sensível

Como foi dito anteriormente, a escolha dos pratos sensíveis serão feitas a partir dos perfis de composição dos componentes ao longo da coluna. Estes perfis são apresentados na Figura 19.

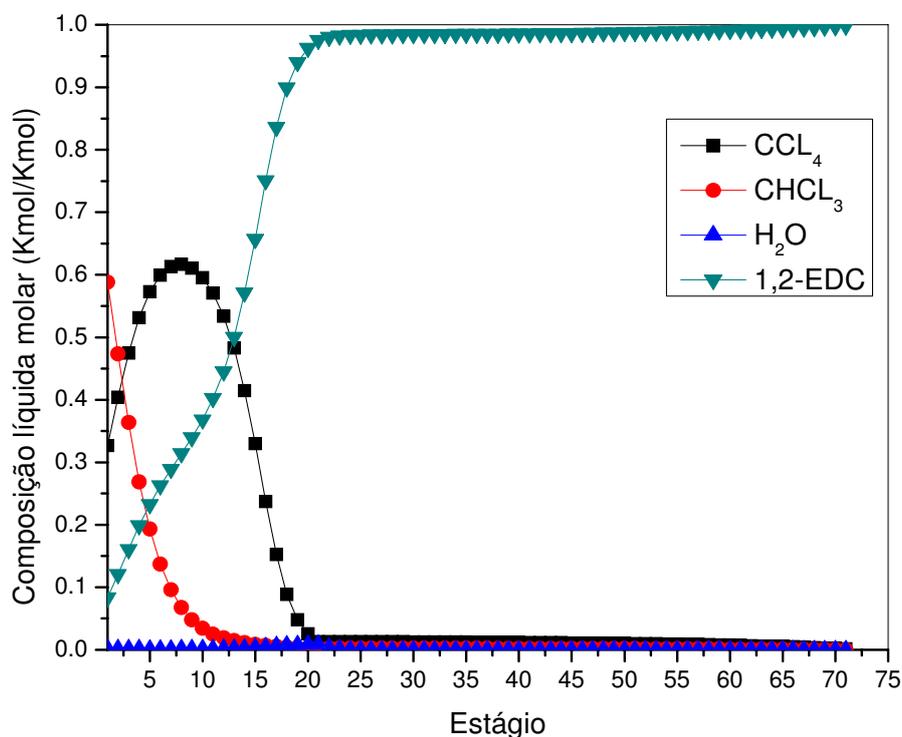


Figura 19 – Perfis de Composição da fase líquida

Analisando o perfil de concentração do CCl₄, percebe-se claramente que este é o componente intermediário, pela inversão característica de concentração na zona de retificação. Outra observação é quanto ao grau de pureza do 1,2 – EDC no prato de alimentação (prato 21), aproximadamente 97 %, o que caracteriza a coluna como uma coluna de alta pureza. Ou seja, a coluna utiliza 71 estágios para elevar a pureza da alimentação em aproximadamente 3 %, que é a concentração de 1,2 – EDC na base da coluna.

A princípio, o critério admitido para a escolha dos pratos sensíveis é que estes seriam os que apresentassem as maiores quantidades de CHCl_3 e CCl_4 . A partir dos perfis apresentados, é possível perceber que os pratos que apresentam as maiores quantidades de CHCl_3 e CCl_4 , são o prato 1 e o prato 8 respectivamente. Estes foram os pratos escolhidos como sendo pratos sensíveis.

6.3 Estudo da inferência estacionária

No estudo de inferência, verificou-se a relação entre a temperatura do prato sensível e composição de CCl_4 e CHCl_3 na base da coluna, para modificações na vazão da alimentação, vazão de retirada de leves e carga térmica do refeedor.

Durante o procedimento, mantinha-se o valor fixo de duas destas variáveis e modificava-se o valor da outra. O valor da temperatura dos pratos sensíveis era registrado, assim como, o valor da composição de ambos os componentes na base da coluna de forma que ao final do estudo da influência de cada uma das variáveis, um gráfico de temperatura versus composição pude-se ser construído. As Figuras 20 e 21 apresentam a variação da temperatura dos pratos escolhidos e composição na base do CCl_4 e CHCl_3 para valores específicos da vazão da alimentação. Em ambos os casos a vazão de retirada de leves foi mantida em 75.6 Kg/h e a carga térmica do refeedor em $2,45 \times 10^6$ Kcal/h.

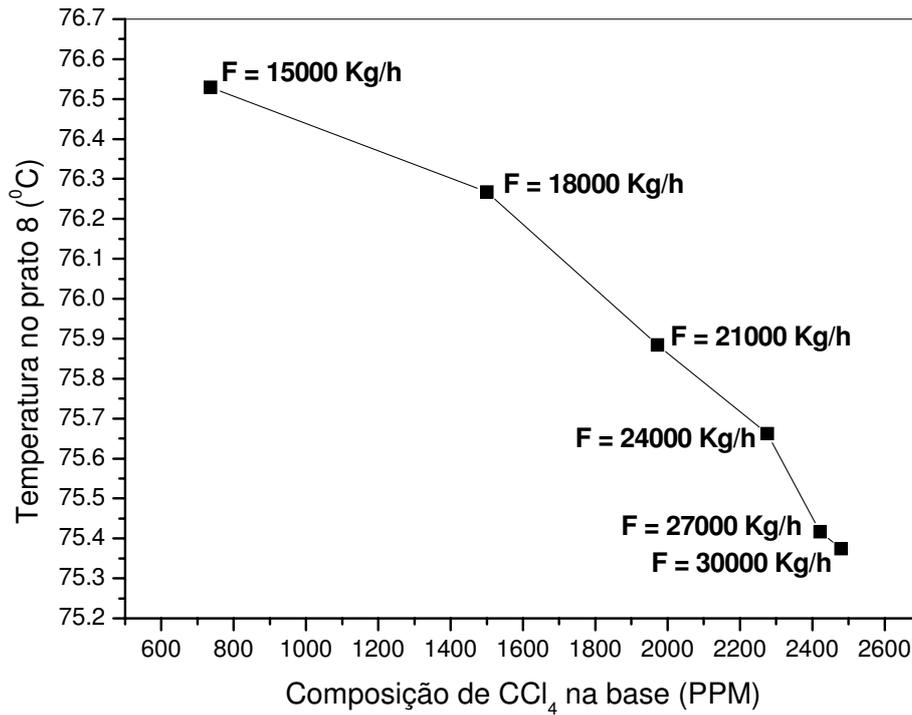


Figura 20 – Variação da temperatura do prato 8 e composição do CCl_4 na base com a vazão da alimentação.

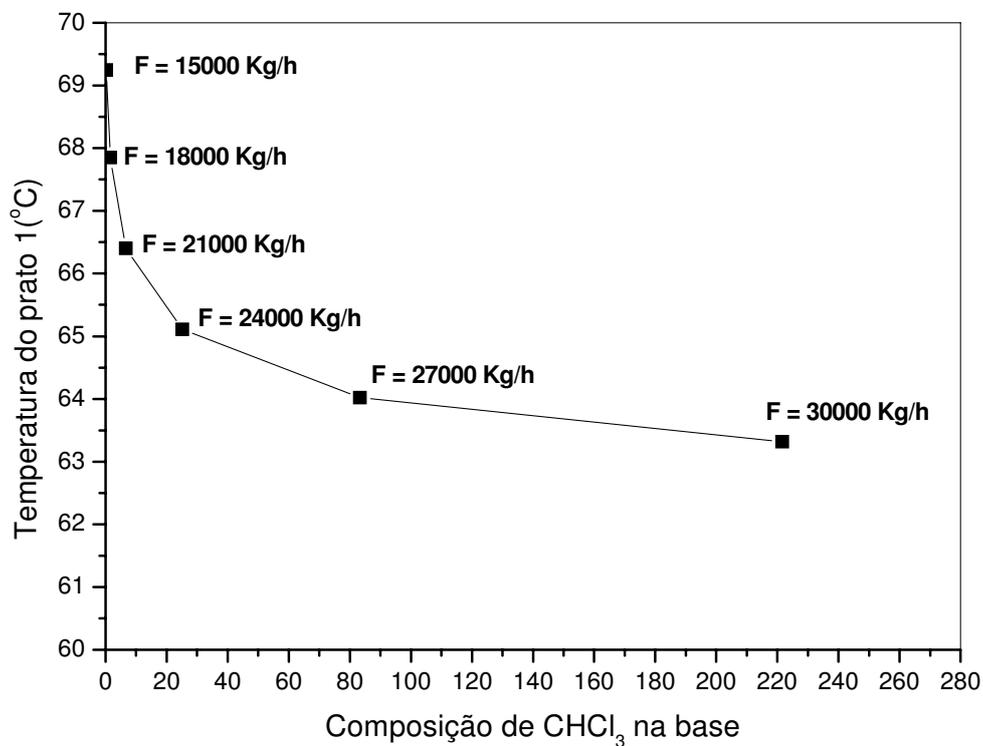


Figura 21 – Variação da temperatura do prato 1 e composição do CHCl_3 na base com a vazão da alimentação

As Figuras 22 e 23 apresentam a variação da temperatura dos pratos escolhidos e composição na base do CCl_4 e CHCl_3 para valores específicos da vazão de retirada de levas. Em ambos os casos a vazão da alimentação foi mantida em 27000 Kg/h e a vazão de retirada de levas foi mantida em 75.6 Kg/h

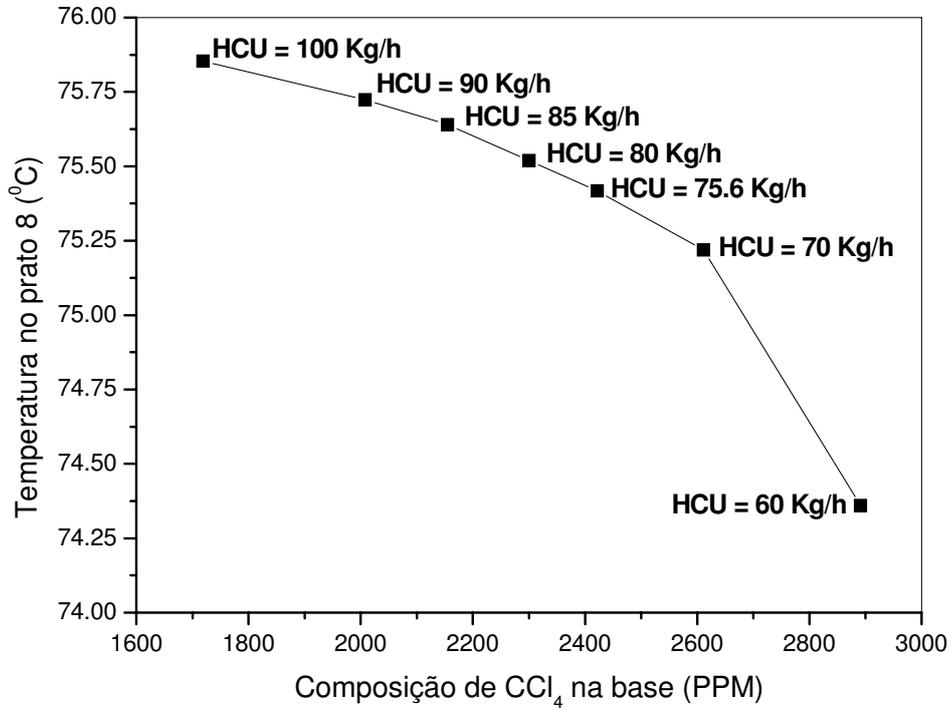


Figura 22 – Variação da temperatura do prato 8 e composição do CCl_4 na base com a retirada de levas.

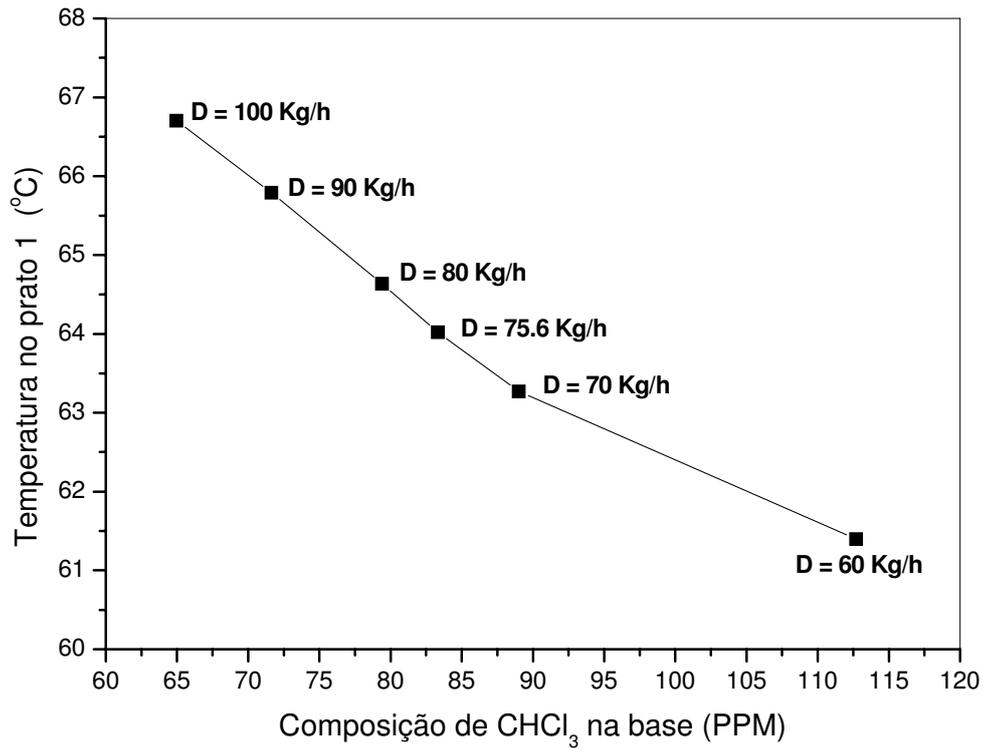


Figura 23 – Variação da temperatura do prato 1 e composição do CHCl_3 na base com a retirada de leves.

As Figuras 24 e 25 apresentam a variação da temperatura dos pratos escolhidos e composição na base do CCl_4 e CHCl_3 para valores específicos da carga térmica do refeedor. Em ambos os casos a vazão da alimentação foi mantida em 27000 Kg/h e a carga térmica do refeedor em $2,45 \times 10^6$ Kcal/h.

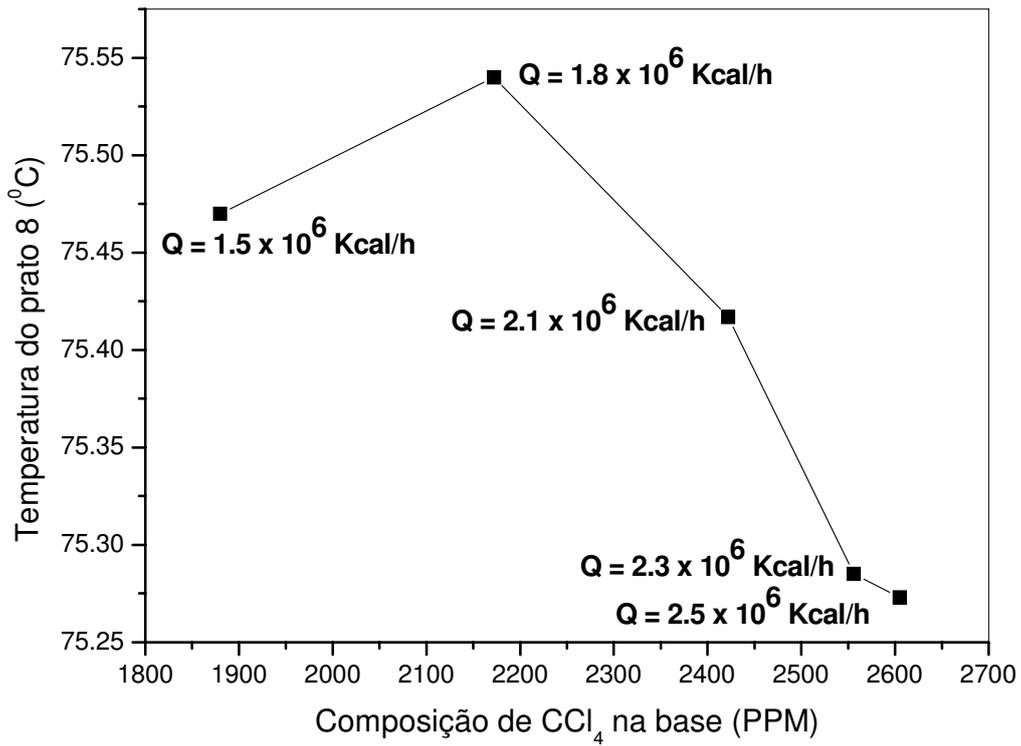


Figura 24 – Variação da temperatura do prato 8 e composição do CCl₄ na base com a carga térmica do refeedor.

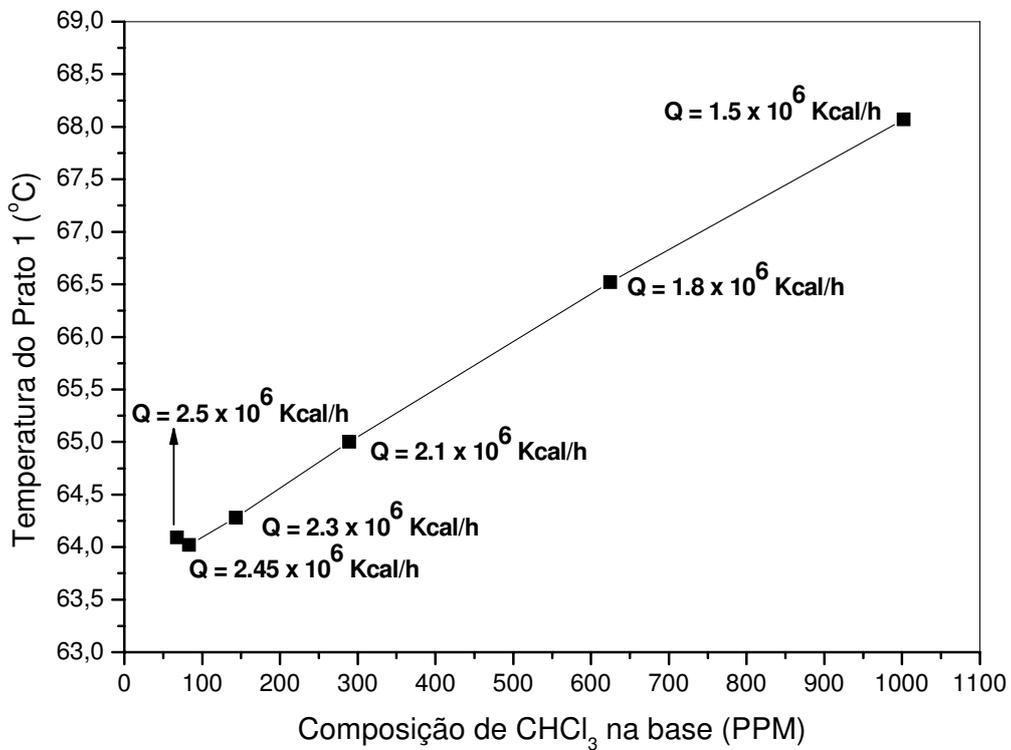


Figura 25 – Variação da temperatura do prato 1 e composição do CHCl₃ na base com a carga térmica do refeedor.

A partir das inúmeras discussões que cercaram este estudo e dos resultados obtidos, ficou definido que o sistema de controle que está sendo proposto, atuará de forma a manter a concentração desses componentes dentro de uma faixa de operação aceitável a partir de um controle por inferência, onde a variável controlada será a temperatura do prato 1 e por inferência a concentração de CHCl_3 na base. A temperatura no prato 1 se mostrou mais sensível às perturbações na vazão da alimentação, carga térmica do refeedor e vazão de retirada de leves apresentando em algumas situações variações de até 5 graus.

Por outro lado, a temperatura do prato 8 não chegou a apresentar variações nem de um grau em alguma situações impossibilitando assim para o que está sendo proposto a sua escolha como variável controlada.

As Figuras 26 e 27 apresentam a variação da temperatura do prato 1 e da composição da base para o CHCl_3 e CCl_4 . Em ambas as Figuras foram colocadas as três curvas referentes à variação da vazão da alimentação, vazão de retirada de leves e carga térmica do refeedor com o objetivo de obter uma visão mais geral da influência de cada uma destas variáveis nas composições de CHCl_3 e CCl_4 na base da coluna.

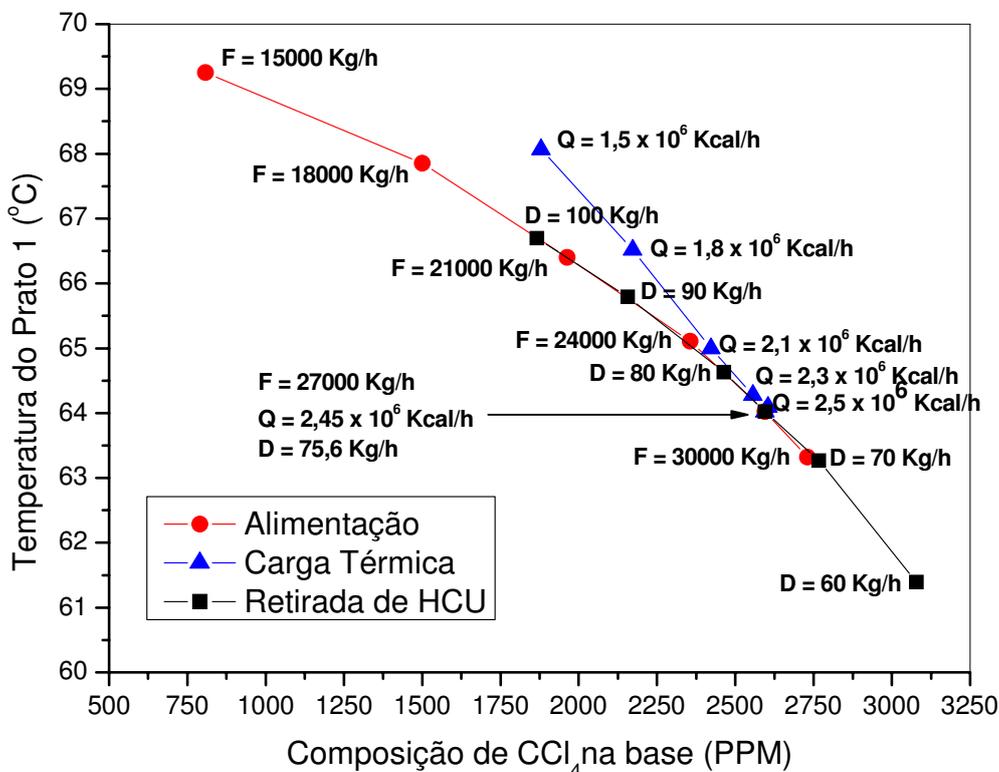


Figura 26 – Variação da temperatura do prato 1 e composição do CCl_4 na base.

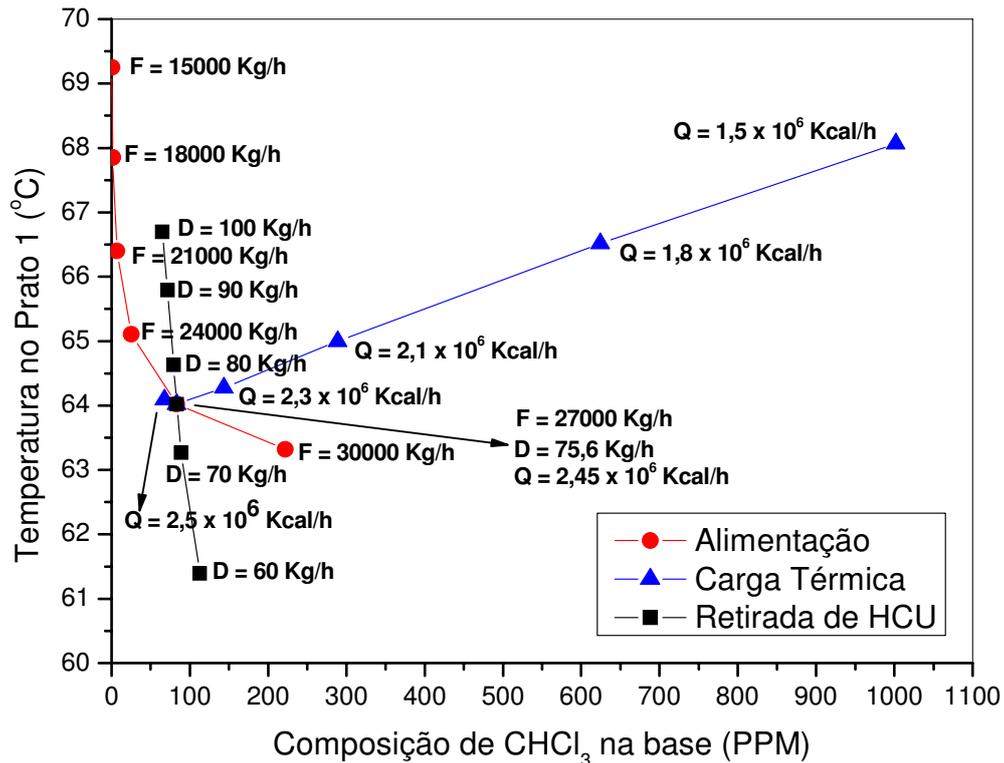


Figura 27 – Variação da temperatura do prato 1 e composição do CHCl₃ na base.

A Figura 26 mostra que a composição de CCl₄ na base da coluna permanece dentro da faixa de valores permitidos. A Figura 27 recebe uma atenção especial pelo fato de representar a relação entre temperatura e composição de CHCl₃ na base da coluna e de apresentar um comportamento um tanto inusitado do sistema. A partir da mesma percebe-se que o aumento da vazão da alimentação (distúrbio) provoca uma diminuição da temperatura do prato 1 e um aumento da concentração de CHCl₃ na base o que é indesejado. Era de se esperar que para elevar a temperatura do prato até o valor do setpoint (64 °C) a carga térmica deveria ser aumentada o que diminuiria também a concentração deste componente mas não é isso que se observa. É possível perceber pela Figura que para elevar a temperatura, a carga térmica tem que ser diminuída causando assim um aumento na concentração de CHCl₃ na base o que é indesejável.

A impressão que fica é de que a estratégia de controle que está sendo proposta não será possível de ser utilizada, mas ainda é cedo para afirmar isto. Para comprovar esta desconfiança é necessário obter as funções de transferência do processo e suas respectivas constantes de tempo, realizar um estudo de inferência dinâmica e verificar mais uma vez a relação entre temperatura do prato 1 e composição de CHCl₃ e CCl₄ frente as modificações na vazão da alimentação, carga térmica e retirada de leves.

7. SIMULAÇÃO DINÂMICA

Este capítulo apresenta os procedimentos utilizados, durante as simulações em estado dinâmico, assim como os resultados obtidos e uma breve discussão sobre os mesmos.

No nosso trabalho, os objetivos iniciais das simulações em estado dinâmico foram:

- Realizar um estudo de inferência dinâmica;
- Verificar a sensibilidade da temperatura em vários pontos da coluna frente a perturbações na vazão de alimentação e na carga térmica do refeedor;
- Obter as funções de transferência do sistema.

A simulação estacionária foi exportada através do simulador ASPEN PLUSTM para o simulador ASPEN DYNAMICSTM. O próprio simulador apresenta no fluxograma controladores de nível para a base da coluna e vaso de refluxo. Além destes, controladores de fluxo para a corrente de alimentação e retirada de levas foram adicionados ao fluxograma do processo. Os valores utilizados para os parâmetros destes controladores foram os sugeridos por Luyben (2002). A Figura 28 apresenta o fluxograma da coluna com a instrumentação básica que contém os controladores de nível no vaso de refluxo e na base e os controladores de fluxo da vazão da alimentação e da retirada de levas.

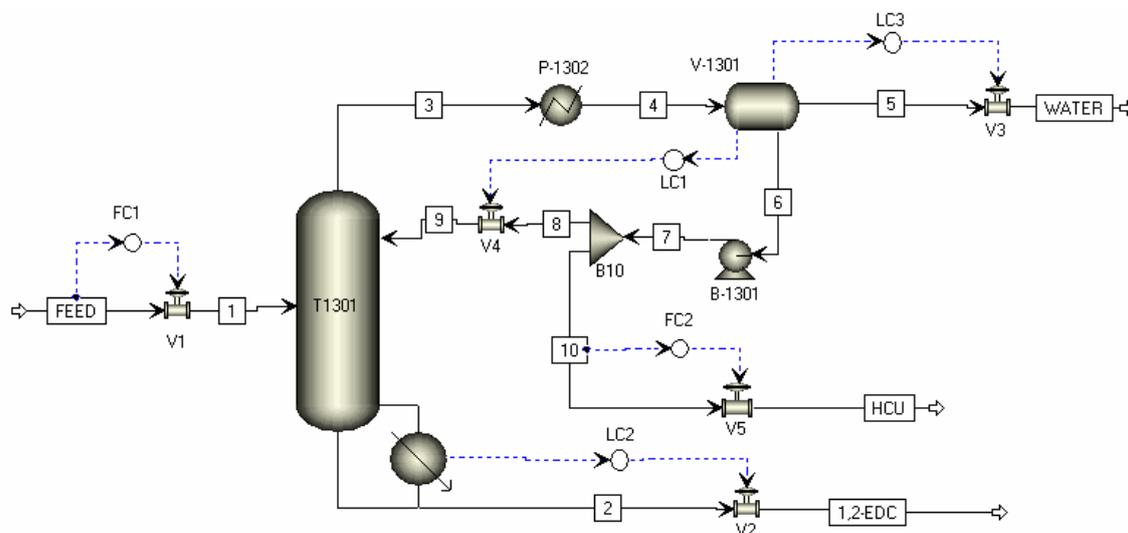


Figura 28 – Fluxograma da coluna com controladores de nível e fluxo.

7.1 Estudo de inferência dinâmica

Os controladores de fluxo para a alimentação e retirada de leves foram adicionados para que fosse possível a realização de um estudo de inferência dinâmica para o prato 1, pois o mesmo apresentou uma boa sensibilidade na inferência estacionária. O mesmo procedimento utilizado para a inferência estacionária também foi utilizado, ou seja, verificou-se a relação entre a temperatura do prato sensível e composição de CCl_4 e CHCl_3 na base da coluna, para modificações na vazão da alimentação, vazão de retirada de leves e carga térmica do refeedor. Feitas as mesmas perturbações do estudo de inferência estacionária, as simulações eram conduzidas até que um novo estado estacionário fosse obtido para que assim o valor da temperatura do prato 1 e das composições de ambos os componentes na base pudessem ser registrados. As Figuras 29 e 30 apresentam os resultados obtidos. Vale mais uma vez salientar que a composição de CCl_4 permanece dentro da faixa de valores permitidos e mais uma vez o componente de interesse é o CHCl_3 por isso boa parte das discussões serão feitas em cima da Figura que representa a relação entre a temperatura do prato 1 e a composição deste componente na base.

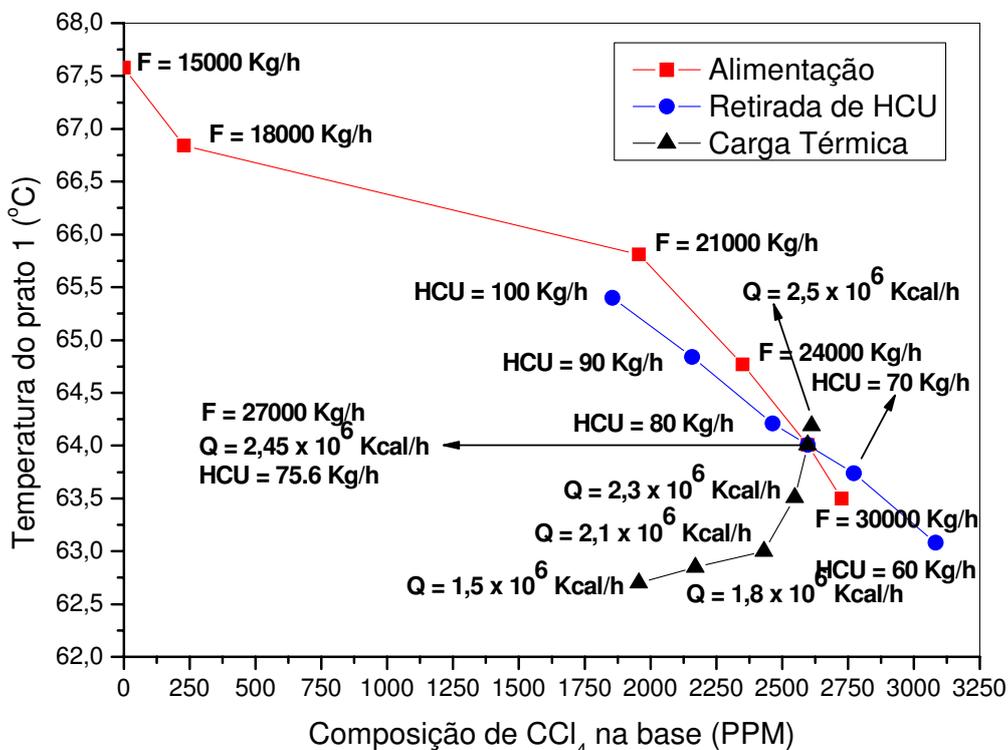


Figura 29 – Variação da temperatura do prato 1 e composição do CCl_4 na base.

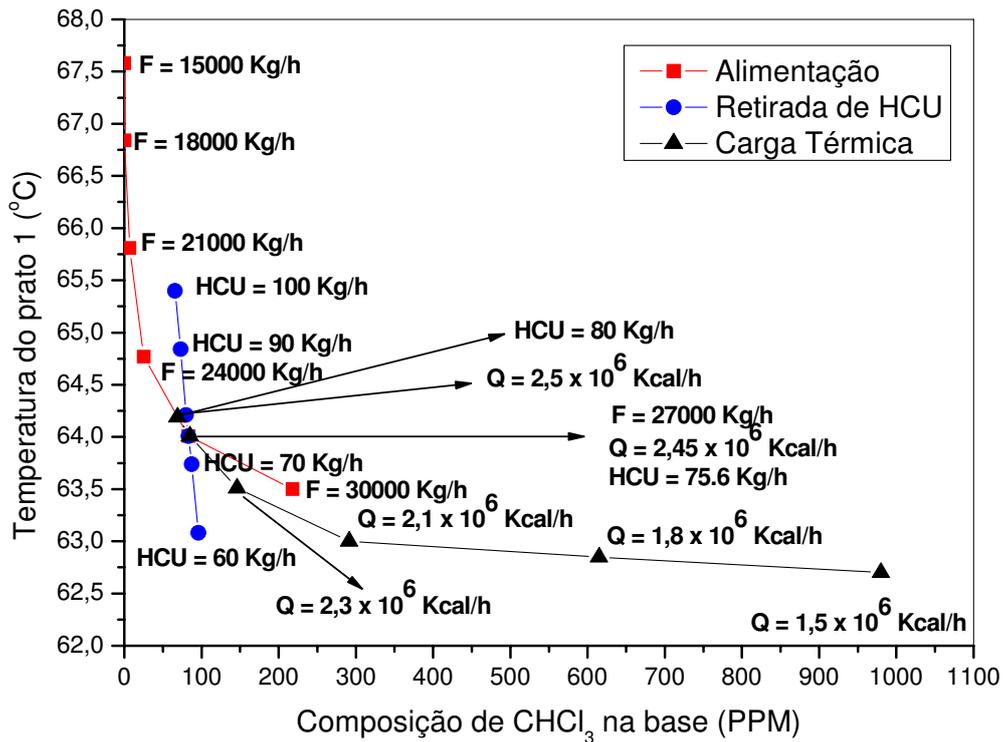


Figura 30 – Variação da temperatura do prato 1 e composição do CHCl₃ na base.

A Figura 30 mostra que o aumento da vazão da alimentação (distúrbio) provoca uma diminuição da temperatura do prato 1 e um aumento da concentração de CHCl₃ na base como já era esperado. Assim como era de se esperar, para elevar a temperatura do prato até o valor do setpoint (64 °C) a carga térmica deve ser aumentada, diminuindo assim a concentração deste componente na base. Esta relação entre a temperatura do prato 1, carga térmica do refeedor e composição do CHCl₃ na base para modificações na carga térmica do refeedor é totalmente diferente e contrária a relação apresentada na inferência estacionária. É possível também observar que a composição de CHCl₃ na base da coluna varia significativamente com a carga térmica assim como também foi visto na inferência estacionária, mas a temperatura apresentou uma variação em torno de pouco mais de 1 grau enquanto que na inferência estacionária esta variação foi em torno de consideráveis 5 graus. Este comportamento em que concentração varia muito e temperatura varia pouco não favorece a implementação da estrutura de controle que esta sendo proposta.

O comportamento inverso da relação entre a temperatura do prato 1, carga térmica do refeedor e composição do CHCl₃ na base em relação a inferência estacionária pode ser explicada considerando a dinâmica bastante lenta da coluna que é

caracterizada por grandes períodos transientes e elevadas constantes de tempo, o que já foi observado e enfatizado nos trabalhos de Silva (2002) e Braga Junior (2003). O elevado período transiente que a coluna apresenta nos leva a considerar que os resultados apresentados pela inferência dinâmica dizem respeito a um estado pseudo-estacionário, ou seja, o estado estacionário real é o apresentado pela inferência estacionária, mas a coluna só alcançará este estado estacionário depois de um tempo aproximadamente igual a quatro vezes a constante de tempo do processo. Isto pode ser identificado a partir das Figuras 31 e 32 que apresentam a variação da temperatura em vários pontos da coluna e a variação da composição de CHCl_3 na base da coluna para um degrau + 5 % na carga térmica do refervedor respectivamente.

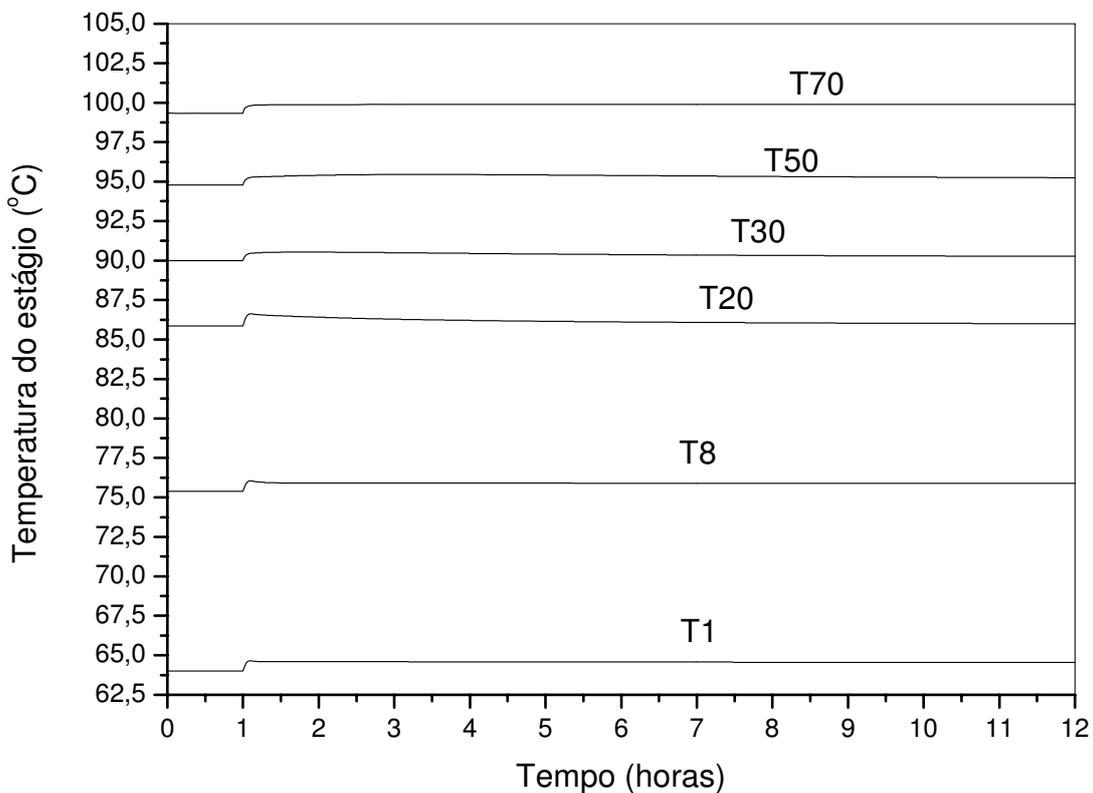


Figura 31 – Variação da temperatura em vários pontos da coluna para um degrau de + 5% na carga térmica do refervedor.

A Figura 31 mostra a baixa sensibilidade da temperatura dos estágios em vários pontos da coluna e a dinâmica lenta da mesma. Percebe-se que a temperatura em ambos os estágios apresentam inicialmente uma pequena elevação quando a carga térmica é perturbada e depois com exceção do estágio 70 que é o primeiro prato de baixo para

cima uma tendência constante a diminuir, ou seja, uma tendência de atingir o estado estacionário previsto pela inferência estacionária, ou seja, aumentando a carga térmica a temperatura tende a diminuir, mas isso depois de um período de tempo muito longo.

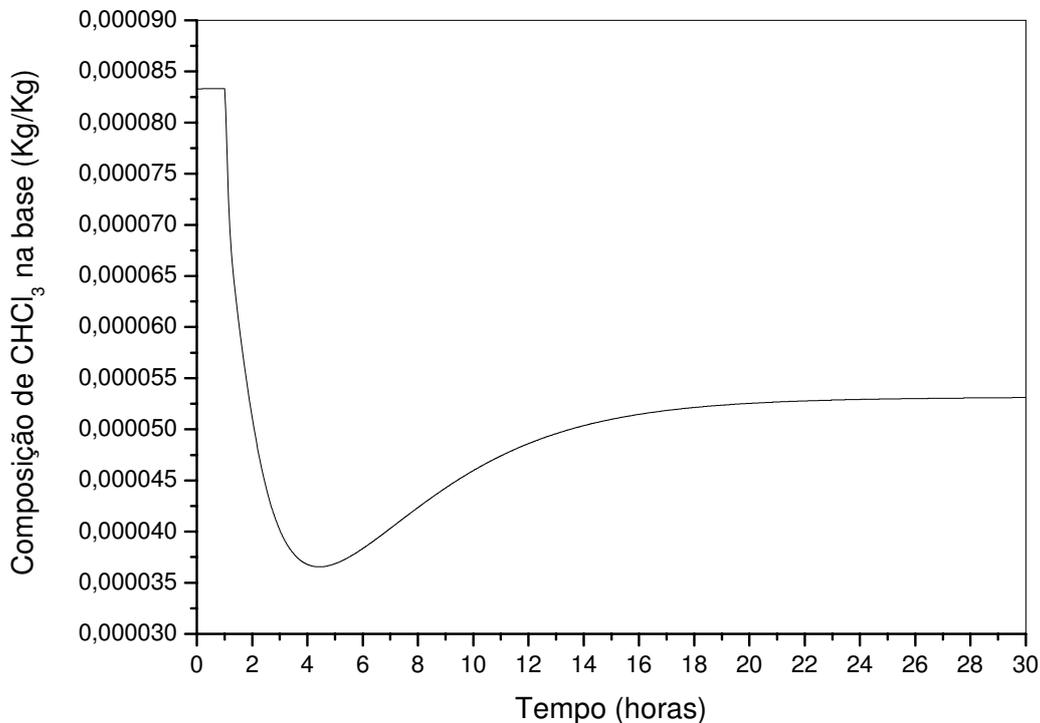


Figura 32 – Variação da composição de CHCl₃ na base da coluna para um degrau de + 5% na carga térmica do revedor.

A Figura 32 mostra que quando ocorre à perturbação a concentração de CHCl₃ diminui, mas em seguida começa a aumentar e a tendência é que continue aumentando sempre até alcançar o estado estacionário previsto pela inferência estacionária, ou seja, aumentando a carga térmica a composição de CHCl₃ também irá aumentar, mas depois de um período de tempo muito longo.

Para que seja possível prever o tempo em que o sistema vai levar para atingir o estado estacionário previsto pela inferência estacionária é necessário determinar a função de transferência do processo e sua respectiva constante de tempo, pois como foi dito anteriormente este tempo corresponde a quatro vezes a constante de tempo do processo e caso a mesma seja realmente alta como se espera e com base em tudo o que foi dito e confirmado o uso da carga térmica como variável manipulada para controlar a temperatura do prato 1 e por inferência a composição de CHCl₃ torna-se inviável assim como a estratégia de controle que esta sendo proposta.

7.2 Geração dos dados para obtenção das funções de transferência do processo

A partir do componente PRBS da subbiblioteca Model Controls foram feitas perturbações de amplitude variável e período constante na vazão da alimentação, adotada como distúrbio do processo e na carga térmica do refervedor adotada como variável manipulada. Este componente permite a geração de entradas aleatórias, submetendo assim o modelo a condições mais próximas da realidade. A Figura 33 apresenta o componente PRBS aplicado na válvula que controla a vazão da alimentação para gerar os dados necessários para obter a função de transferência do distúrbio.

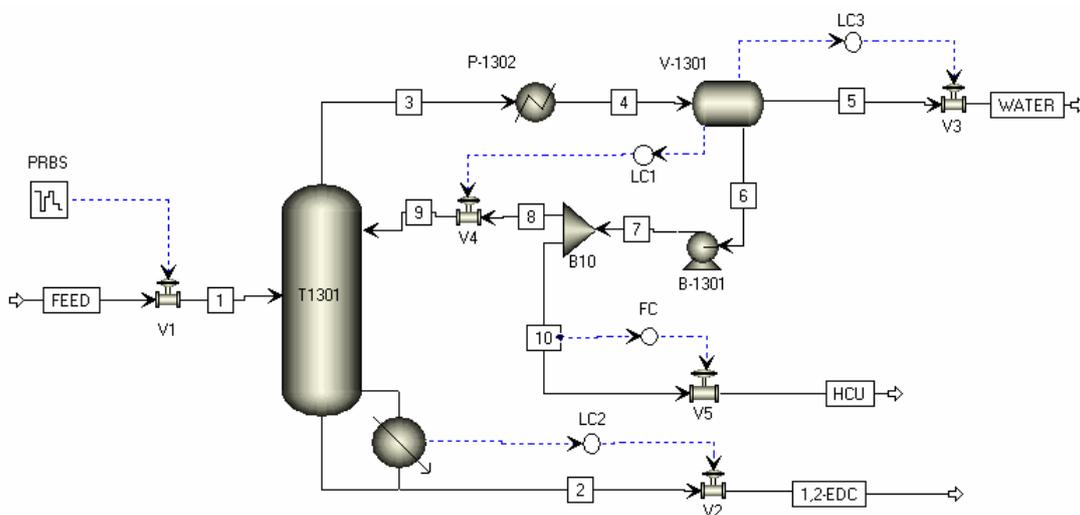


Figura 33 – Fluxograma da coluna com o componente PRBS aplicado na válvula da vazão da alimentação.

O componente PRBS gera uma perturbação de amplitude variável e com período de 15 minutos na abertura da válvula que controla a vazão da alimentação alterando continuamente a mesma, o que caracteriza uma entrada de processo aleatória. As Figuras 34 e 35 apresentam a variação da vazão da alimentação e a resposta da temperatura do prato 1 durante um intervalo de tempo de 20 horas. Estes dados serão utilizados posteriormente para a obtenção da função de transferência que relaciona a vazão da alimentação (distúrbio) e a temperatura do prato 1.

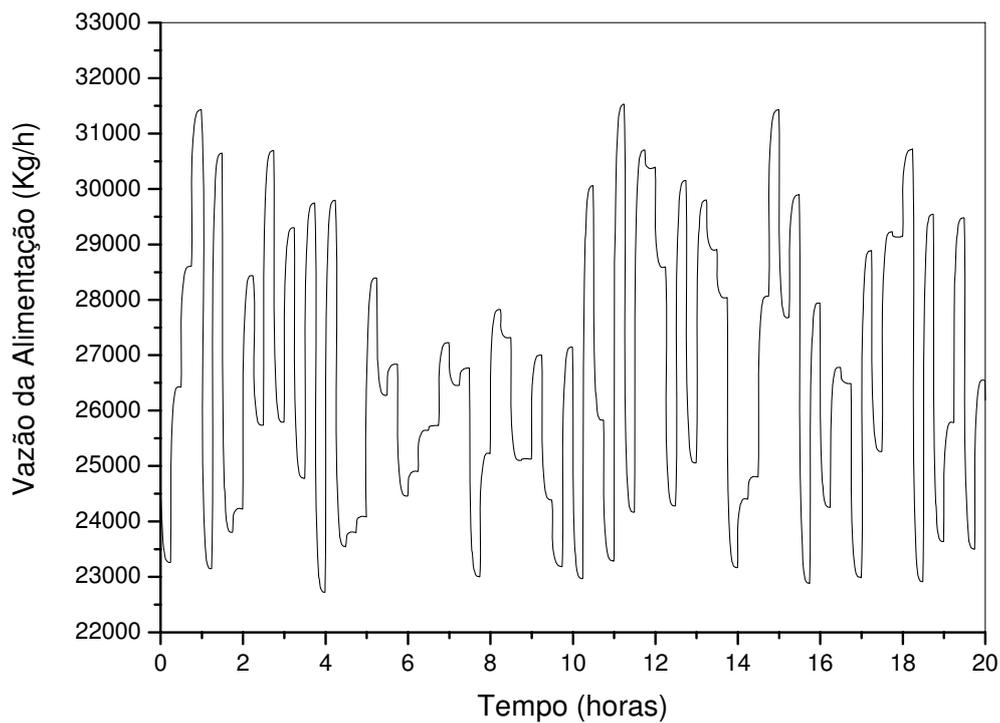


Figura 34 – Variação da vazão da alimentação provocada pelo elemento PRBS.

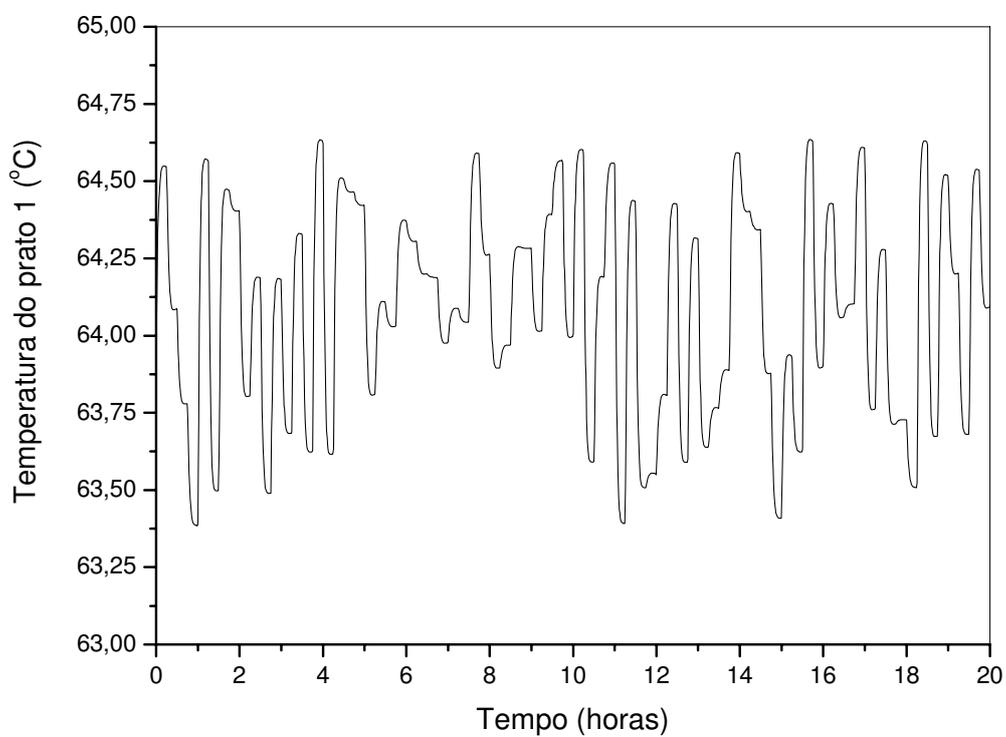


Figura 35 – Resposta da temperatura frente à variação da vazão da alimentação.

A partir da Figura 35 comprova o que foi dito anteriormente em relação a sensibilidade da temperatura. É possível perceber que a temperatura variou apenas meio grau para cima quando a vazão da alimentação diminui e meio grau para baixo quando a vazão da alimentação aumentou.

Para determinar a função de transferência do processo, o elemento PRBS foi aplicado na carga térmica do refeedor, gerando assim uma perturbação de amplitude variável e de período igual a 15 minutos. A Figura 36 apresenta o componente PRBS aplicado na carga térmica do refeedor e as Figuras 37 e 38 apresentam a variação da carga térmica e a resposta da temperatura do prato 1 durante um intervalo de tempo de 20 horas. Estes dados serão utilizados posteriormente para a obtenção da função de transferência que relaciona a carga térmica do refeedor (manipulada) e a temperatura do prato 1 (controlada).

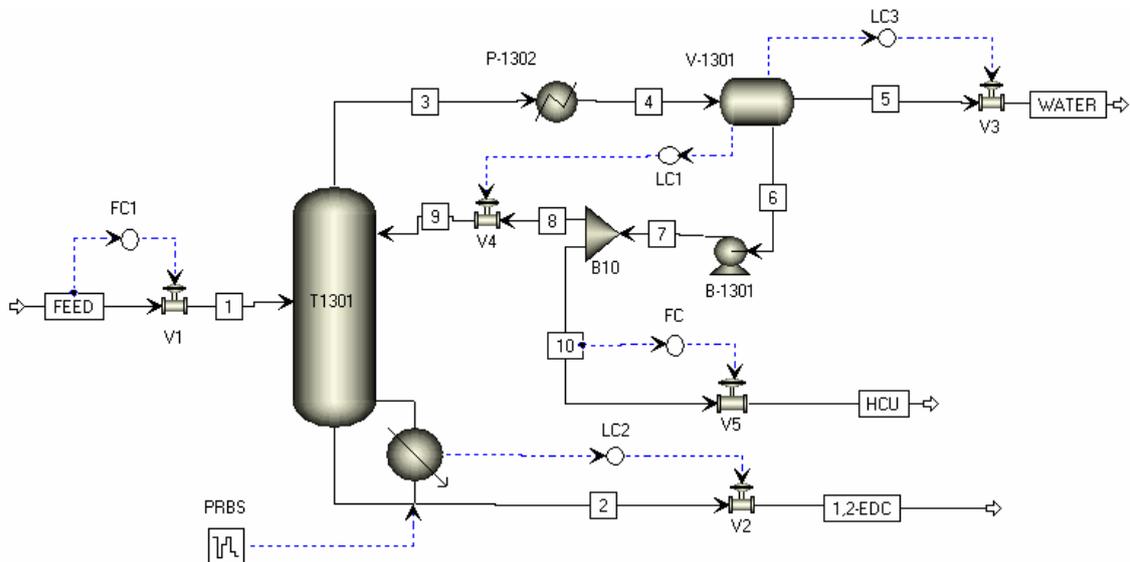


Figura 36 – Fluxograma da coluna com o componente PRBS aplicado na carga térmica do refeedor.

A Figura 38 mais uma vez nos mostra a pouca sensibilidade da temperatura do estagio 1 frente a perturbações na carga térmica do refeedor. Também se percebe uma elevação e queda da temperatura de apenas meio grau. Isto é um indicio de que tudo o que foi dito na discussão dos resultados das inferências estacionária e dinâmica esta sendo comprovado, faltando apenas verificar a constante de tempo do processo para que se tenha a confirmação definitiva de tudo o que foi afirmado, principalmente em relação ao fato do estado estacionário previsto pela inferência estacionaria ser atingido depois de um período de tempo muito elevado.

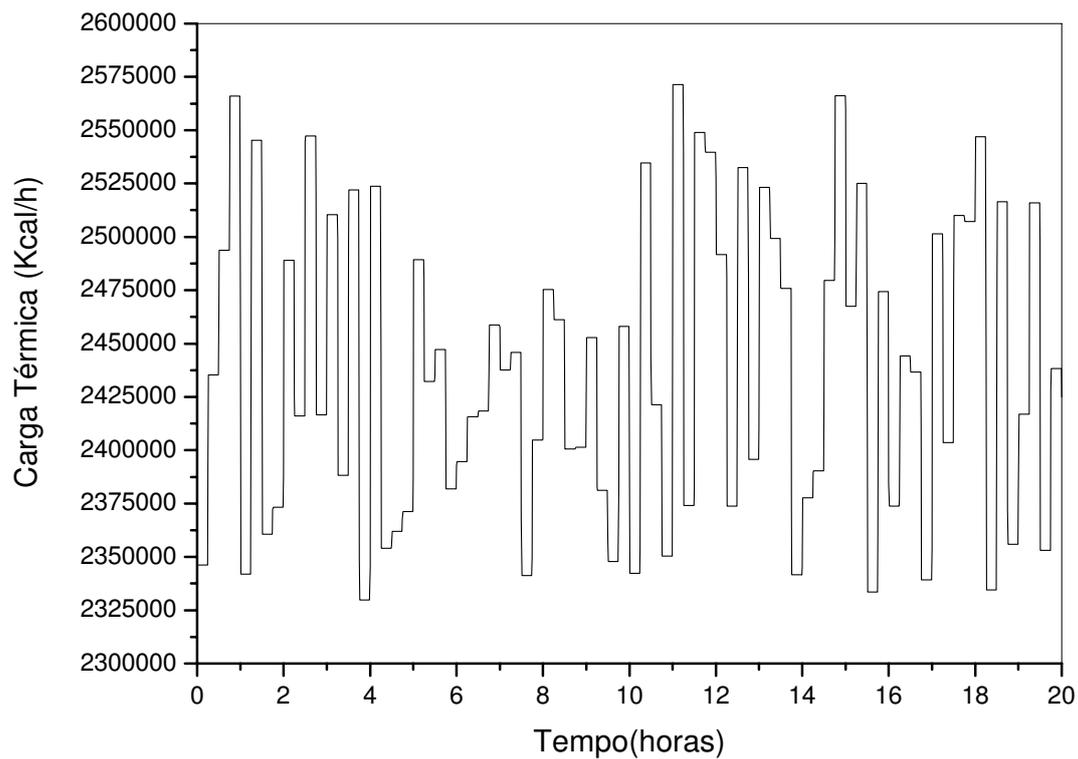


Figura 37 – Variação da carga térmica do refervedor provocada pelo elemento PRBS.

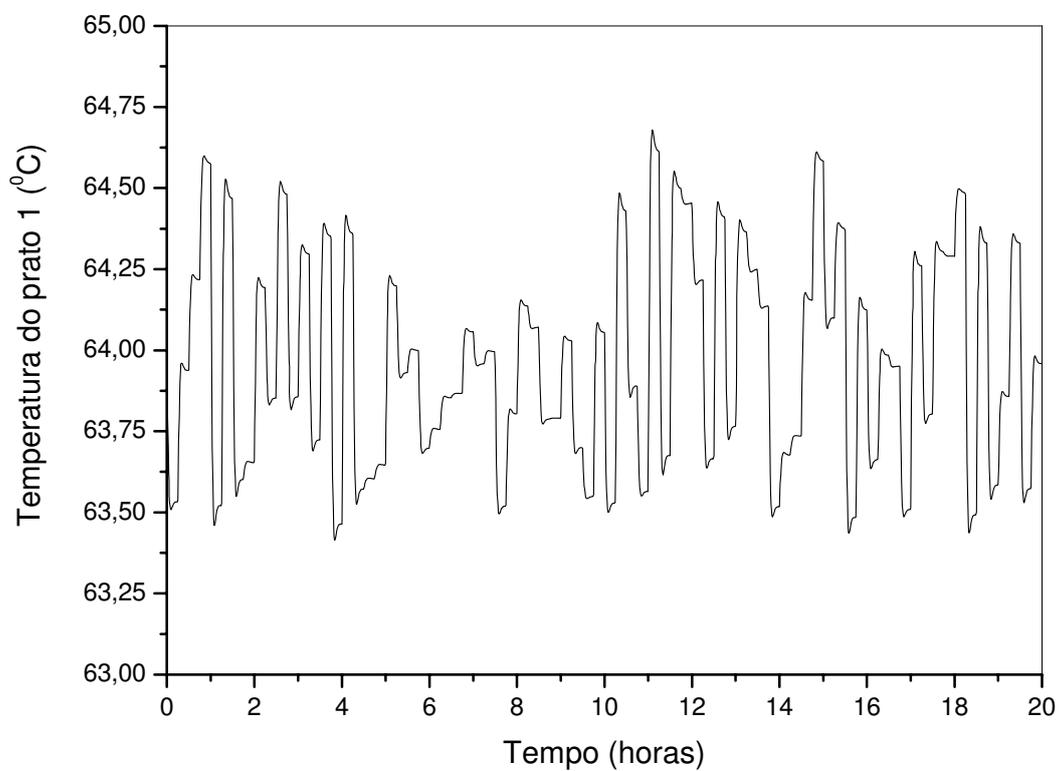


Figura 38 – Resposta da temperatura frente à variação da carga térmica do refervedor.

8. DETERMINAÇÃO DAS FUNÇÕES DE TRANSFERÊNCIA

Este capítulo apresenta a metodologia utilizada para a determinação das funções de transferência, assim como, uma caracterização das mesmas em termos de ganho, pólos, zeros e representação em espaço de estados. O objetivo principal é obter a função de transferência do processo e sua respectiva constante de tempo para que assim, o tempo em que o processo leva para atingir o estado estacionário previsto pela inferência estacionária possa ser calculado, tendo em vista que o mesmo é igual a quatro vezes a constante de tempo do processo.

As chamadas funções de transferência são funções usadas para caracterizar as relações entre entrada e saída de componentes ou sistemas que possam ser representados por equações diferenciais lineares invariantes no tempo. A clássica metodologia para a representação de sistemas em função de transferência, pressupõe o emprego das transformadas de Laplace as equações diferenciais lineares que descrevem o modelo matemático do sistema dinâmico.

Devido a grande complexidade do modelo matemático do sistema em estudo, tendo em vista que o mesmo é composto além das equações diferenciais, de equações algébricas não lineares a aplicação da metodologia clássica é inviável. Sendo assim, as funções de transferência do processo foram obtidas a partir dos resultados das simulações dinâmicas em malha aberta. Estes resultados foram apresentados anteriormente pelas Figuras 34 e 35, 37 e 38.

Os dados foram exportados para o ambiente MATLABTM que possui uma ferramenta denominada *ident*TM. Esta ferramenta é própria para a regressão de dados e determinação de modelos de processos na forma de funções de transferência a partir de dados provenientes do domínio do tempo. A ferramenta também possibilita:

- Analisar a resposta do modelo no domínio da frequência;
- Analisar as respostas às perturbações degrau e impulso;
- Fornece a localização dos zeros e pólos da função de transferência;
- Permite comparar o desempenho de vários modelos;
- Validar o modelo proposto a partir dos dados originais.

A Figura 39 apresenta a interface de interação com o usuário no ambiente MATLAB da ferramenta *ident*TM.

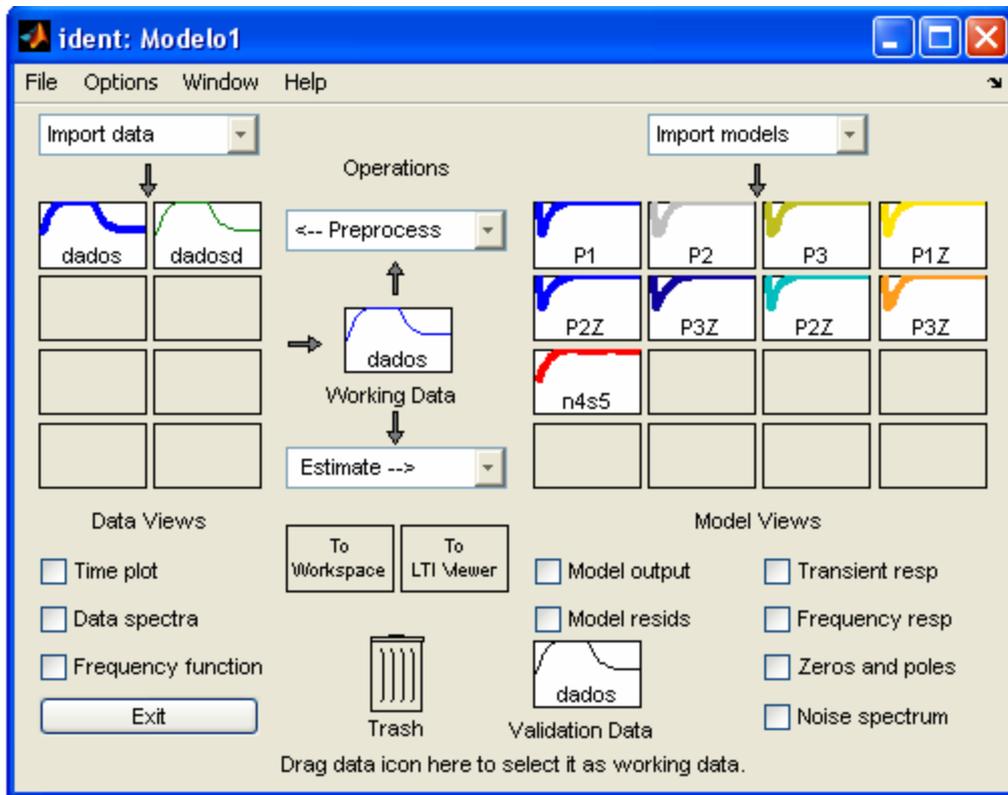


Figura 39 – Interface de interação com o usuário da ferramenta *ident*TM.

A ferramenta *ident*TM determina os parâmetros do modelo, a partir de um processo de otimização que consiste na minimização do erro quadrático entre os valores oriundos do modelo rigoroso e aqueles preditos pelo modelo simplificado. É possível testar várias opções de modelo e a partir do coeficiente de correlação escolher o que melhor ajusta os dados obtidos a partir do modelo rigoroso.

8.1 Função de transferência do distúrbio.

Como foi dito anteriormente, a função de transferência do distúrbio relaciona a temperatura do prato 1 e a vazão da alimentação, ou seja, variável controlada e distúrbio do processo respectivamente. A mesma foi obtida a partir dos resultados apresentados pelas Figuras 34 e 35. É um modelo de segunda ordem com zero no plano direito. A seguir é mostrado a sua estrutura, seus pólos e zeros, assim como, sua representação em espaço de estado.

Modelo:

$$G(s) = \frac{0.0027554(-270.03s + 1)}{(5171.9s + 1)(0.020314s + 1)} \quad (20)$$

Ganho: $K = 0.0027554$

Pólos: $P1 = -0.000193$
 $P2 = -49.2271$

Zeros: $Z1 = 0.0037$

Modelo no espaço de estado:

$$A = \begin{bmatrix} -49.2273 & -0.0095182 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{Matriz de estado}$$

$$B = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{Matriz de controle;} \quad C = [-0.0070815 \quad 2.6226 \cdot 10^{-5}] \quad \text{Matriz de saída}$$

$$D = [0] \quad \text{Matriz de transmissão direta}$$

8.2. Função de transferência do processo

A função de transferência do processo relaciona a temperatura do prato 1 e a carga térmica do refeedor, ou seja, variável controlada e variável manipulada do processo respectivamente. A mesma foi obtida a partir dos resultados apresentados pelas Figuras 37 e 38. É um modelo de terceira ordem com zero no plano esquerdo. A seguir é mostrado a sua estrutura, seus pólos e zeros, assim como, sua representação em espaço de estado.

Modelo:

$$G(s) = \frac{2.6938 \times 10^{-5} (339.65s + 1)}{(0.017359s + 1)(0.0027713s + 1)(1883.2s + 1)} \quad (21)$$

Ganho: $k = 2.6938 \times 10^{-5}$

Pólos: P1 = -360.84

Zeros: Z1 = -0.002944

P2 = -57.607

P3 = -0.00053101

Modelo no espaço de estado:

$$A = \begin{bmatrix} -418.45 & -20787 & -11.038 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{Matriz de estado}$$

$$B = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{Matriz de controle;} \quad C = [0 \quad 0.101 \quad 0.00029735] \quad \text{Matriz de saída}$$

$D = [0]$ Matriz de transmissão direta

8.3 Considerações sobre as funções de transferência obtidas

Os modelos obtidos para as funções de transferência do distúrbio e do processo são modelos complexos, com zeros nos subplanos direito e esquerdo do plano-s respectivamente e valores de ganho relativamente pequenos. Ambas as funções de transferência também apresentam elevadas constantes de tempo o que comprova a dinâmica lenta da coluna e os elevados períodos transientes apresentados pela mesma frente a distúrbios sofridos.

Como foi dito no capítulo anterior a obtenção das funções de transferência do processo era de grande importância, pela necessidade de comprovação das afirmações feitas referentes às análises dos resultados apresentados pelas inferências estacionária e dinâmica já que ambas apresentaram comportamento totalmente contrário da relação entre temperatura, carga térmica do refeedor e composição de CHCl_3 na base da coluna e uma sensibilidade muito baixa da temperatura do prato 1 na inferência dinâmica em relação à inferência estacionária. Na inferência dinâmica a sensibilidade foi em torno de apenas 1°C enquanto na inferência estacionária este valor foi em torno de 5°C . Foi dito também que o estado estacionário real é o apresentado pela inferência estacionária, mas que o mesmo só vem a ser atingido depois de um período de tempo igual a quatro vezes a constante de tempo do processo.

Suspeitava-se que a partir das observações feitas nas respostas transientes da coluna frente a possíveis perturbações na vazão da alimentação e na carga térmica do refeedor as constantes de tempo tanto do distúrbio quanto do processo seriam elevadas e após a determinação das mesmas a nossa suspeita foi confirmada.

A função de transferência do processo apresenta duas constantes de tempo pequenas, que influenciam na resposta rápida inicial e uma constante de tempo grande que é responsável pelos elevados períodos transientes que a coluna apresenta. Sendo assim com base nestes valores podemos ver que o estado estacionário previsto pela inferência estacionária será obtido depois de um tempo de 4×1883.2 horas = 7532.8 horas o que vem confirmar tudo o que foi comentado sobre os resultados e diferenças de comportamento entre as inferências estacionária e dinâmica. Isto nos leva a concluir de forma definitiva que a estratégia de controlar a composição de CHCl_3 a partir da temperatura do prato 1 manipulando a carga térmica do refeedor não é adequada e sendo assim temos que partir para uma nova estratégia de controle.

9. PROPOSTA DE UMA NOVA ESTRUTURA DE CONTROLE

Este capítulo discute e apresenta a proposta de uma nova estrutura de controle para a coluna. São mostrados vários resultados do comportamento de outras variáveis do processo frente a perturbações na vazão da alimentação e carga térmica do refeedor que podem vir a ser utilizadas para o controle por inferência da composição de CHCl_3 na base da coluna.

9.1 Análise geral e levantamento de hipóteses

Como foi explicado nos capítulos anteriores, como os resultados apresentados pelas inferências estacionária e dinâmica apresentaram comportamentos totalmente contrários da relação entre temperatura, carga térmica do refeedor e composição de CHCl_3 na base da coluna e devido ao fato de que o estado estacionário previsto pela inferência estacionária só será atingido depois de um período de tempo bastante elevado, a estrutura de controle inicialmente proposta que consistia em controlar por inferência a composição de CHCl_3 a partir do controle da temperatura do prato 1 manipulando a carga térmica do refeedor teve que ser descartada, pois devido a estas características apresentadas pela coluna esta estrutura de controle se tornou inviável.

Com base em novas observações, surgiu uma nova proposta que consiste em controlar por inferência a composição de CHCl_3 a partir de uma nova variável controlada, neste caso a vazão de refluxo, manipulando a carga térmica do refeedor. Um estudo de inferência dinâmica foi realizado para verificar a sensibilidade desta nova variável controlada e a sua relação com a composição de CCl_4 e CHCl_3 na base da coluna para modificações na vazão da alimentação e na carga térmica do refeedor. O procedimento foi o mesmo utilizado nos estudos de inferência anteriores. As Figuras 40 e 41 apresentam os resultados obtidos. Como a composição de CCl_4 permanece sempre dentro da faixa de valores desejados, vale novamente salientar que o componente de interesse é o CHCl_3 , por isso boa parte das discussões será feita em cima da Figura que representa a relação entre a vazão de refluxo e a composição deste componente na base.

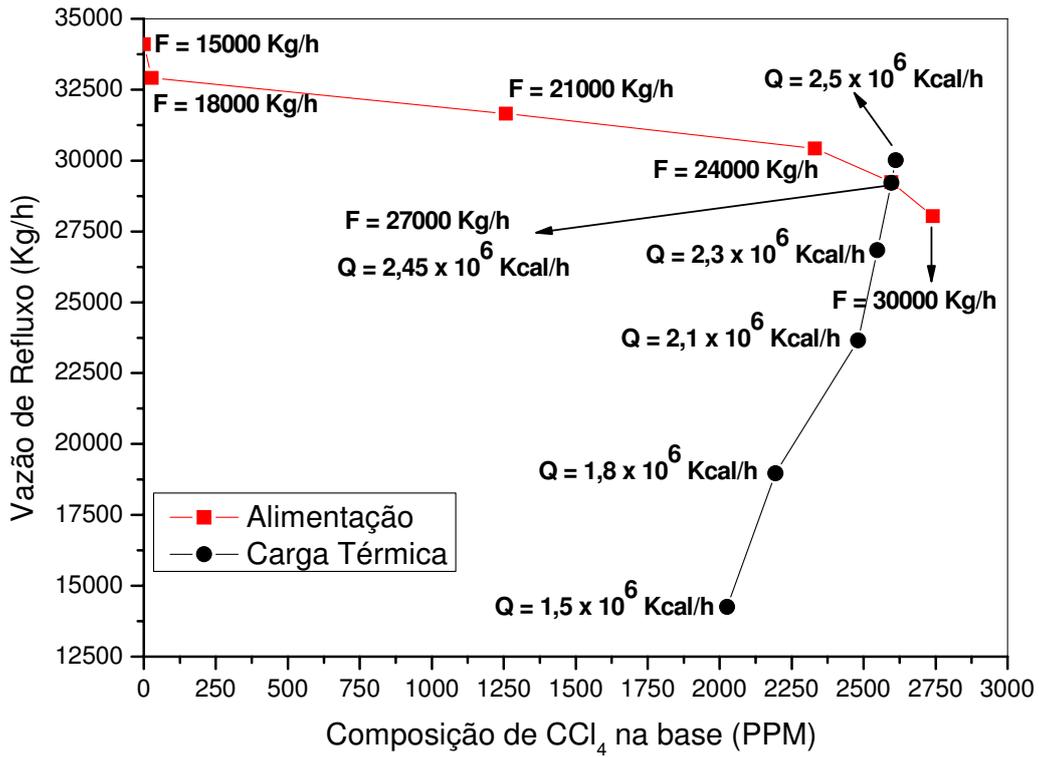


Figura 40 – Variação da vazão do refluxo e composição do CCl₄ na base.

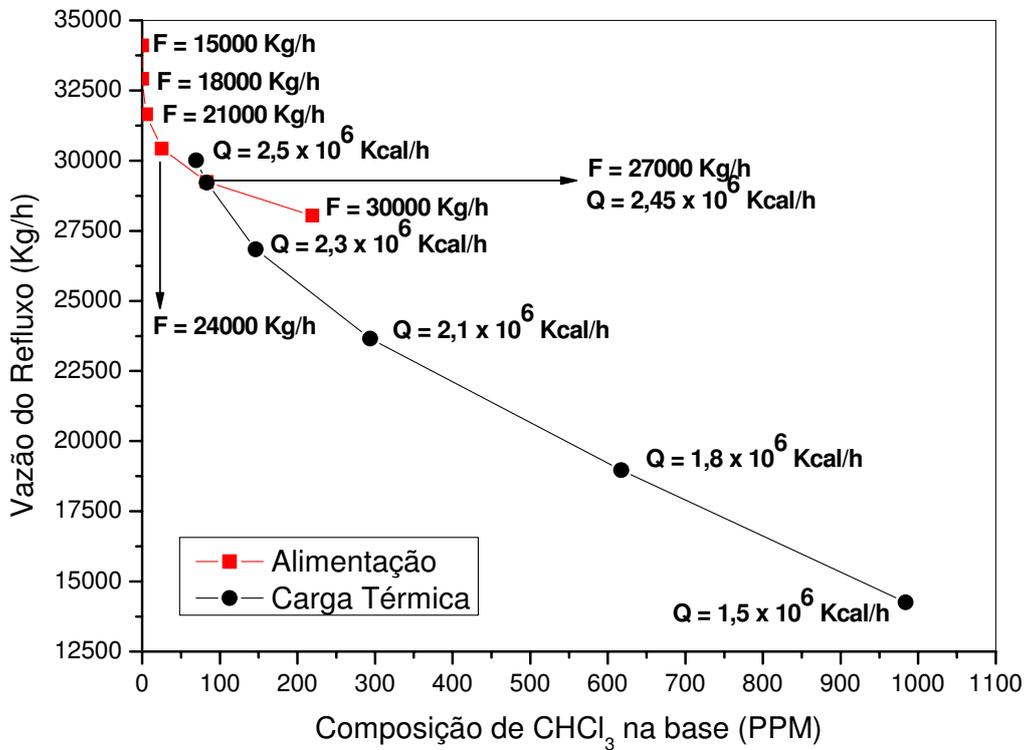


Figura 41 – Variação da vazão de refluxo e composição do CHCl₃ na base.

A Figura 41 mostra que aumentando vazão da alimentação, a vazão de refluxo cai e a composição de CHCl_3 aumenta aproximando-se do limite permitido de 300 ppm. Fica claro que a vazão de refluxo apresentou uma sensibilidade bem maior do que a composição. Em relação à carga térmica, quando aumenta-se a mesma, aumenta-se também a vazão de refluxo e conseqüentemente a composição de CHCl_3 na base diminui. A sensibilidade apresentada pela vazão de refluxo e pela composição é muito boa. Tanto o comportamento inverso quanto à boa sensibilidade são importantes e favorecem a estrutura que esta sendo proposta.

Embora apresente uma boa sensibilidade tanto a modificações na vazão da alimentação quanto na carga térmica do refeedor, o que é bom para a nova estrutura proposta, vale salientar que a vazão de refluxo é uma variável manipulada da malha de controle de nível da fase orgânica no vaso de refluxo. Sendo assim, ao aumentar a vazão da alimentação, a quantidade de vapor que deixa o topo da coluna e que entra no condensador diminui, conseqüentemente uma quantidade menor de líquido condensado é formado e enviado ao vaso de refluxo onde ocorre a separação das fases orgânica e aquosa. Como uma quantidade menor de líquido entra no vaso, o nível de ambas as fases começa a diminuir. Para manter o nível da fase orgânica no setpoint o controlador reduz a abertura da válvula que regula a vazão de refluxo reduzindo também à mesma. O inverso ocorre quando a vazão da alimentação é reduzida.

Aumentando-se a carga térmica do refeedor, aumenta-se a quantidade de vapor que deixa o topo da coluna e que entra no condensador, conseqüentemente uma quantidade maior de líquido condensado é formado e enviado ao vaso de refluxo onde ocorre a separação das fases orgânica e aquosa. Como uma quantidade maior de líquido entra no vaso, o nível de ambas as fases começa a aumentar. Para manter o nível da fase orgânica no setpoint o controlador aumenta a abertura da válvula que regula a vazão de refluxo aumentando também à mesma. O inverso ocorre quando a carga térmica do refeedor é reduzida.

As Figuras 42 e 43 apresentam a variação da vazão de refluxo e da composição de CHCl_3 na base para uma perturbação de + 10 % na vazão da alimentação e as Figuras 44 e 45 a variação da vazão de refluxo e da composição de CHCl_3 na base para um degrau de + 5 % na carga térmica do refeedor. Em ambos os casos a malha de controle de nível esta fechada. Vale salientar que esta malha de controle de nível é uma malha padrão do simulador, ou seja, ao exportar a simulação do Aspem PlusTM para o

Aspen Dynamics™ o próprio simulador já apresenta a malha com o controlador e seus respectivos parâmetros.

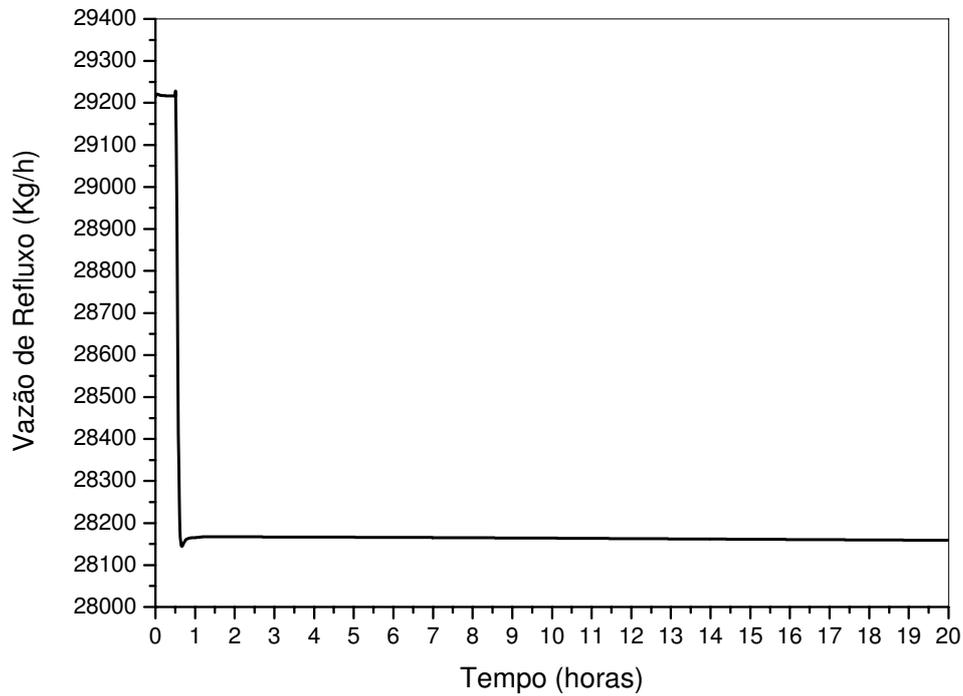


Figura 42 – Variação da vazão de refluxo para uma perturbação de + 10 % na vazão da alimentação com malha de nível fechada.

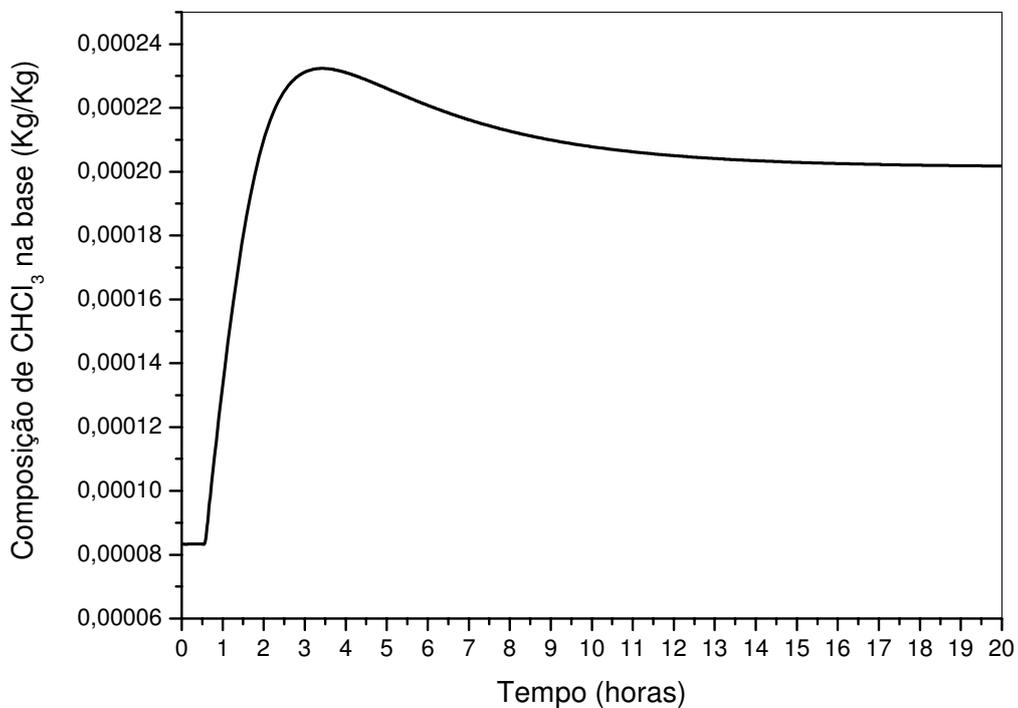


Figura 43 – Variação da composição de CHCl_3 na base para uma perturbação de + 10 % na vazão da alimentação com malha de nível fechada.

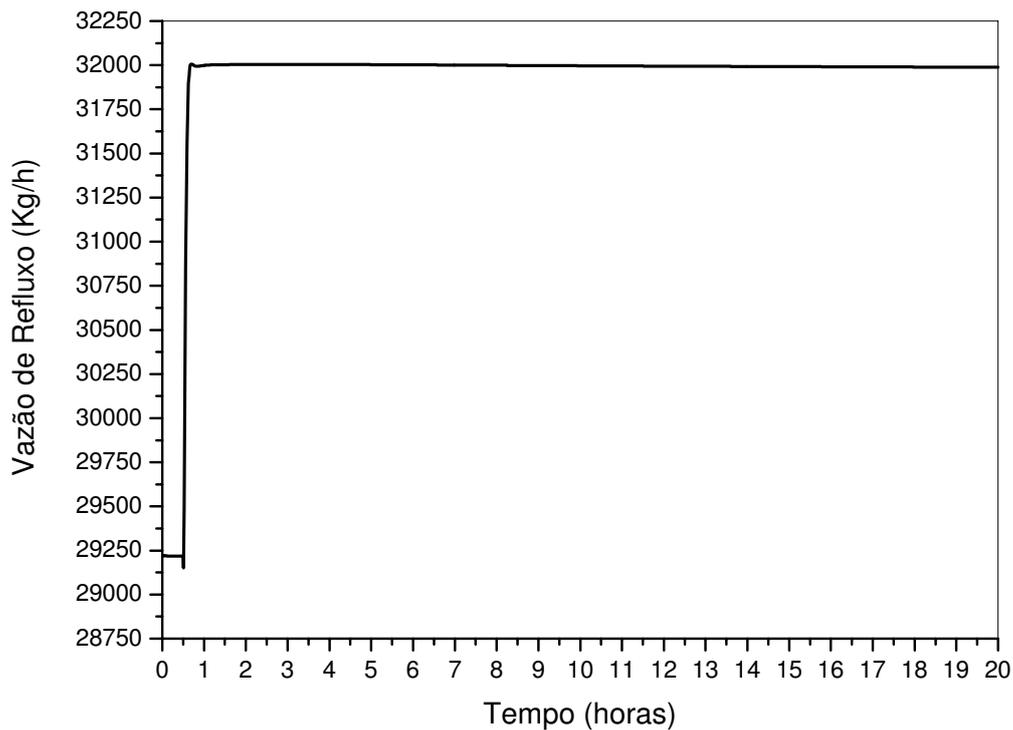


Figura 44 – Variação da vazão de refluxo para uma perturbação de + 5 % na carga térmica do refeedor com malha de nível fechada.

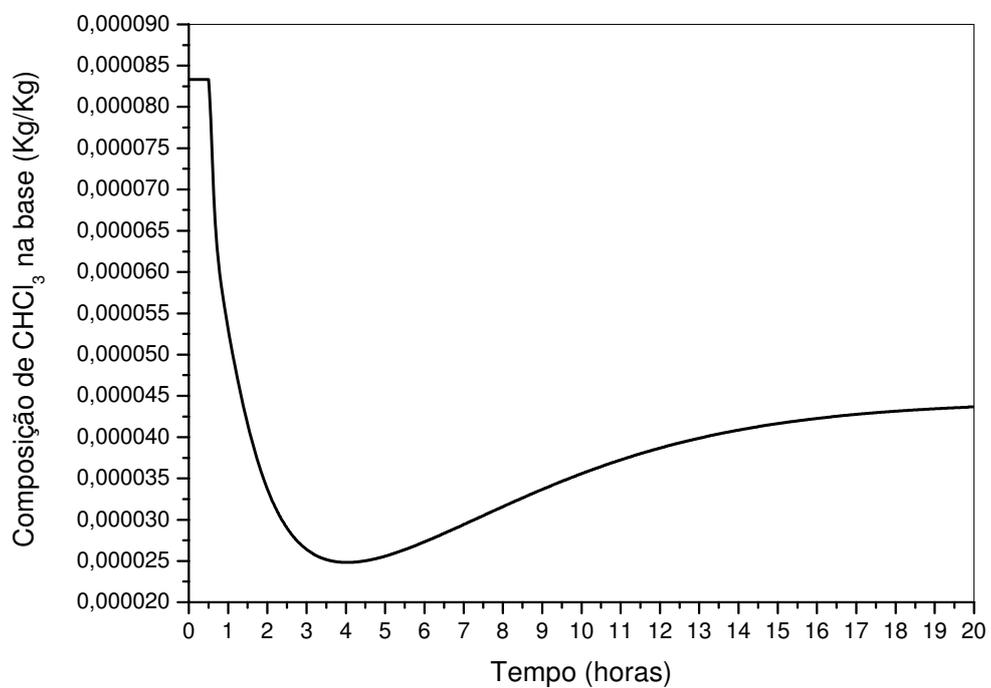


Figura 45 – Variação da composição de CHCl_3 na base para uma perturbação de + 5 % na carga térmica do refeedor com malha de nível fechada.

A partir das Figuras é possível perceber que ao aumentar a vazão da alimentação, a vazão de refluxo diminui e a composição de CHCl_3 aumenta como já tinha sido previsto pelo estudo de inferência dinâmica. Por outro lado, aumentando a carga térmica, a vazão de refluxo aumenta e a composição de CHCl_3 diminui. É justamente por causa deste comportamento inverso entre a vazão de refluxo e composição de CHCl_3 em relação a variável de distúrbio e a variável manipulada que é possível implementar uma malha para o controle da composição de CHCl_3 a partir da vazão de refluxo.

As Figuras 46 e 47 apresentam a variação do nível da fase orgânica e da composição de CHCl_3 na base para uma perturbação de + 10 % na vazão da alimentação. A razão entre a vazão da alimentação e vazão de refluxo foi mantida a partir de uma perturbação também de + 10 % na vazão do refluxo. As Figuras 48 e 49 apresentam a variação do nível da fase orgânica e da composição de CHCl_3 na base para um degrau de + 5 % na carga térmica do refeedor. Em ambos os casos a malha de controle de nível esta aberta.

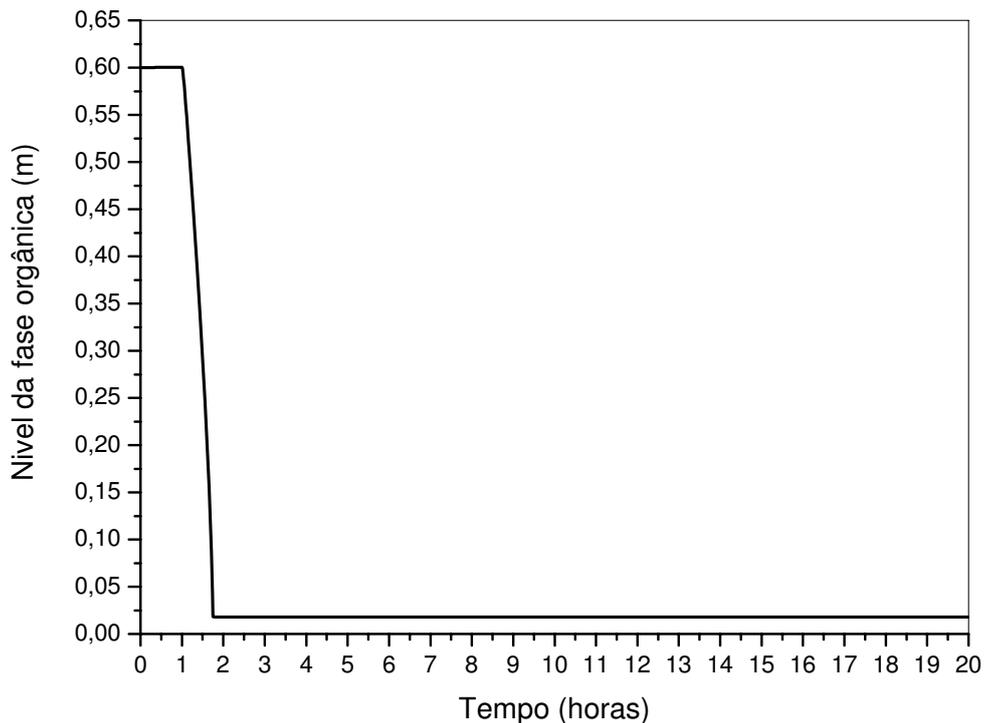


Figura 46 – Variação do nível da fase orgânica para uma perturbação de + 10 % na vazão da alimentação com malha de nível aberta.

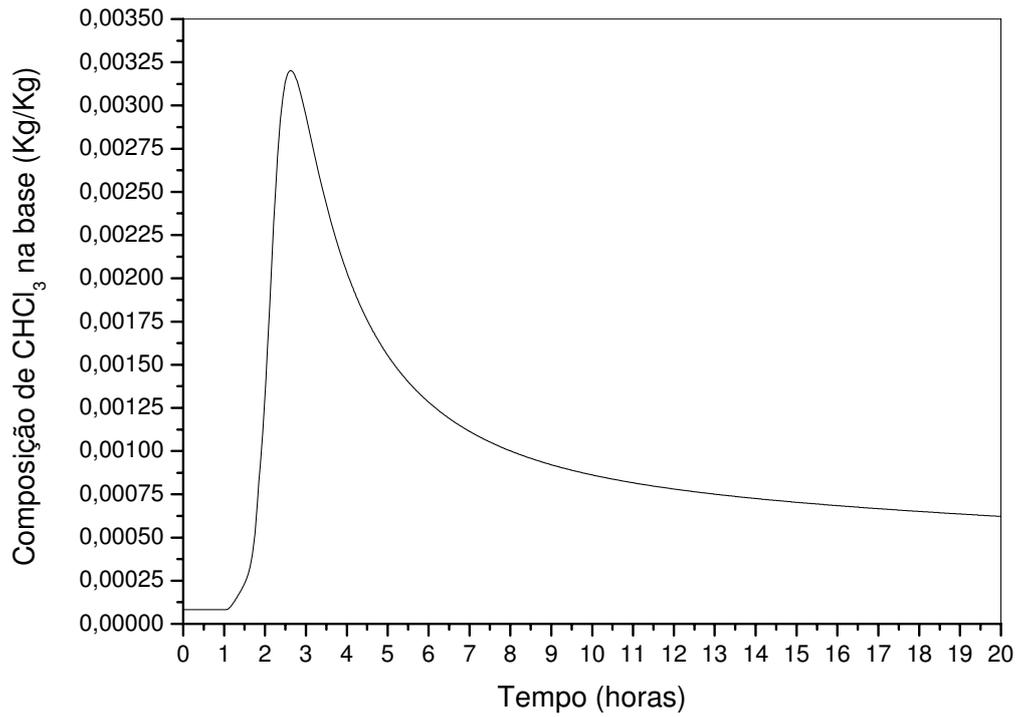


Figura 47 – Variação da composição de CHCl₃ na base para uma perturbação de + 10 % na vazão da alimentação com malha de nível aberta.

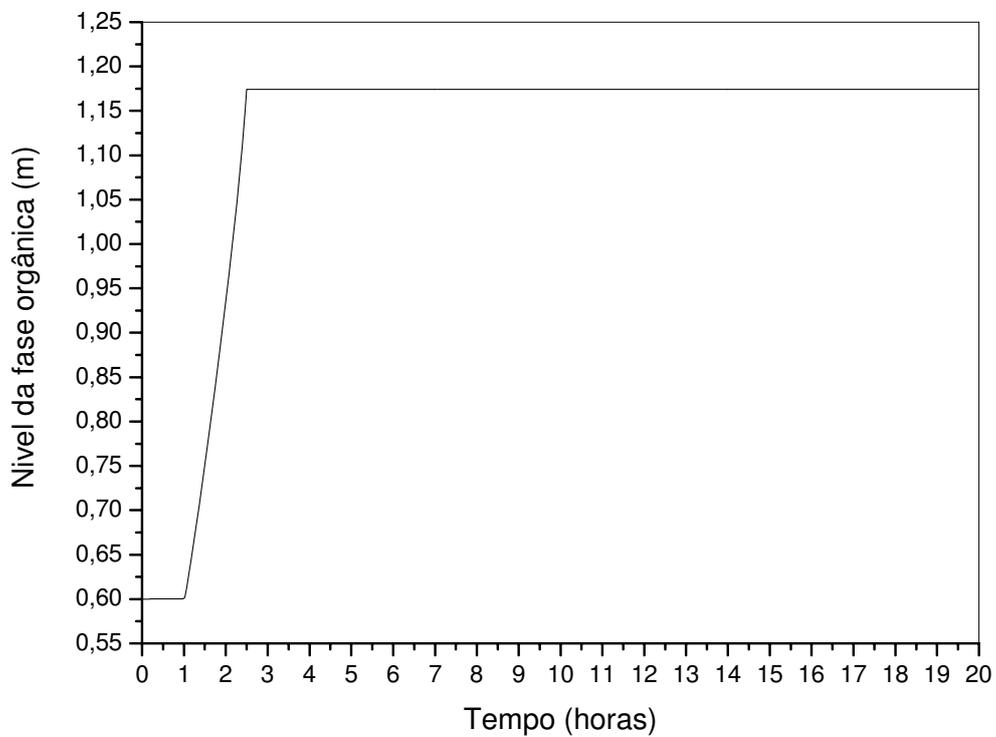


Figura 48 – Variação do nível da fase orgânica para uma perturbação de + 10 % na carga térmica do refeedor com malha de nível aberta.

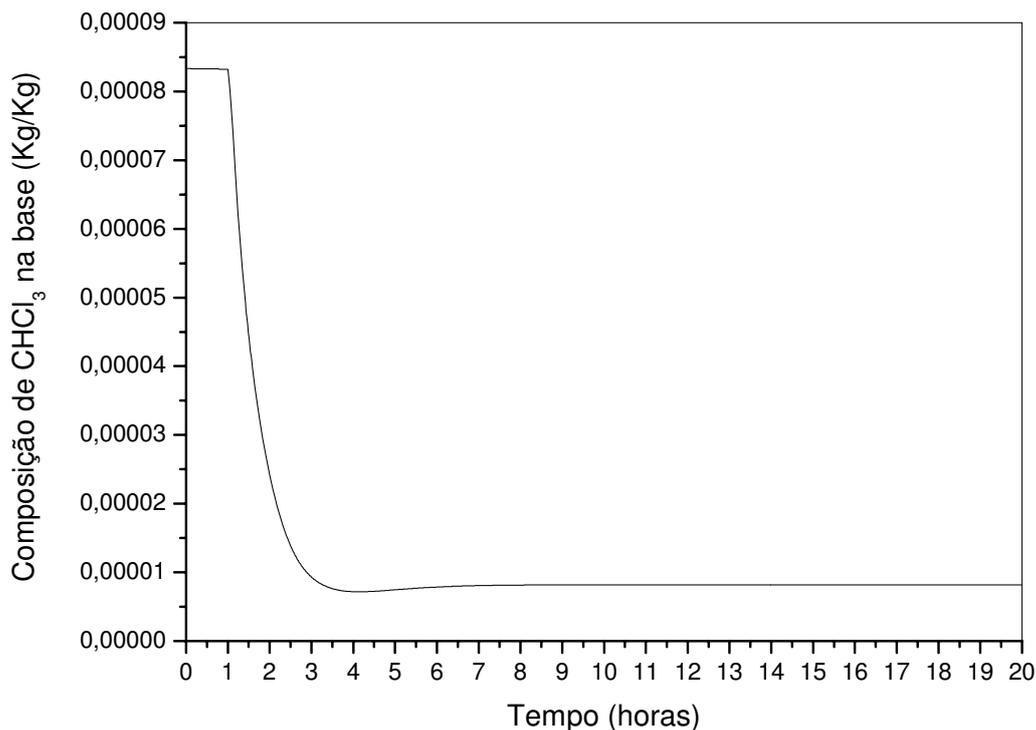


Figura 49 – Variação da composição de CHCl₃ na base para uma perturbação de + 5 % na carga térmica do refeedor com malha de nível aberta.

As Figuras mostram que aumentando a vazão da alimentação mantendo fixa a relação entre a mesma e a vazão de refluxo o nível da fase orgânica cai para bem próximo de zero e lá permanece. Ocorre saturação na abertura da válvula, ou seja, o nível cai tanto que pelo fato da vazão de refluxo ser mantida constante, chega um ponto em que à mesma não consegue ser mantida mesmo com a válvula totalmente aberta. A composição de CHCl₃ na base aumenta rapidamente e de forma considerável, depois começa a cair lentamente tendendo ao valor inicial. O aumento brusco é atribuído a quase total diminuição do nível da fase orgânica o que causa uma redução considerável na vazão de refluxo. Por outro lado, aumentando a carga térmica do refeedor o nível aumenta muito chegando a ocupar quase todo o vaso, pois mais uma vez a vazão de refluxo é mantida constante causando assim um acúmulo maior de líquido no vaso de refluxo. A composição de CHCl₃ diminui como era de se esperar.

Assim, de uma forma geral possível perceber que ao aumentar a vazão da alimentação, o nível diminui e a composição de CHCl₃ aumenta como já tinha sido previsto pelo estudo de inferência dinâmica. Por outro lado, aumentando a carga térmica, o nível aumenta e a composição de CHCl₃ diminui. Este comportamento inverso entre nível da fase orgânica e composição de CHCl₃ em relação a variável de

distúrbio e a variável que será manipulada para o controle da composição de CHCl_3 a partir da vazão de refluxo justifica a necessidade de uma segunda malha na estrutura do sistema de controle para controlar o nível do vaso de refluxo.

Com base nestas considerações, chegamos a pensar em um novo sistema de controle composto de duas malhas: a primeira malha para o controle inferencial da composição do CHCl_3 a partir da vazão de refluxo manipulando a carga térmica do refeedor e a segunda malha para o controle do nível da fase orgânica manipulando a vazão de refluxo. Teríamos assim um controle “Override” onde dependendo da situação e a partir de um seletor, determinada malha atuaria, ou seja, para controlar por inferência a composição do CHCl_3 na base, a vazão de refluxo será controlada manipulando a carga térmica do refeedor. Caso o nível da fase orgânica do vaso de refluxo venha a aumentar ou diminuir muito devido à ação do controlador de composição, o seletor desativa a malha de controle de composição e ativa a malha de controle de nível, onde o nível da fase orgânica será controlado manipulando a vazão de refluxo.

Segundo Luyben (2002), a estratégia de controle Override por possuir uma estrutura variável é muito poderosa e permite que se venha a obter sem grandes dificuldades um controle robusto. O problema é que o nível tende a zero ou ao valor máximo em cada uma das situações de forma rápida de modo que as malhas se alternariam de forma muito intensa o que provavelmente empobreceria o desempenho do sistema de controle.

Sendo assim decidimos mudar de forma total o que vinha sendo pensado até o presente momento, e depois de várias discussões em cima dos resultados obtidos resolveu-se por fim inicialmente alterar a forma de controle do nível do vaso de refluxo. Este agora passa a ser controlado manipulando a carga térmica do refeedor, deixando assim a vazão de refluxo livre para ser utilizada no controle de composição do CHCl_3 na base da coluna. A Figura 50 apresenta a instrumentação básica da coluna com o controle do nível do vaso de refluxo feito a partir da manipulação da carga térmica do refeedor. Vale salientar que daqui para frente esta estrutura básica será de fato utilizada para o desenvolvimento da nova estratégia de controle.

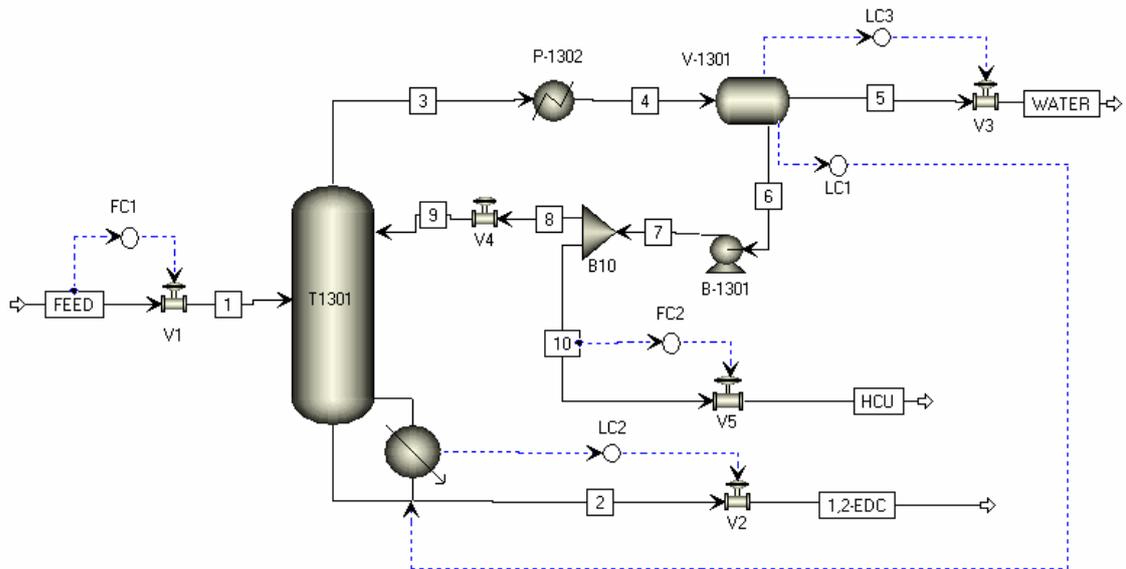
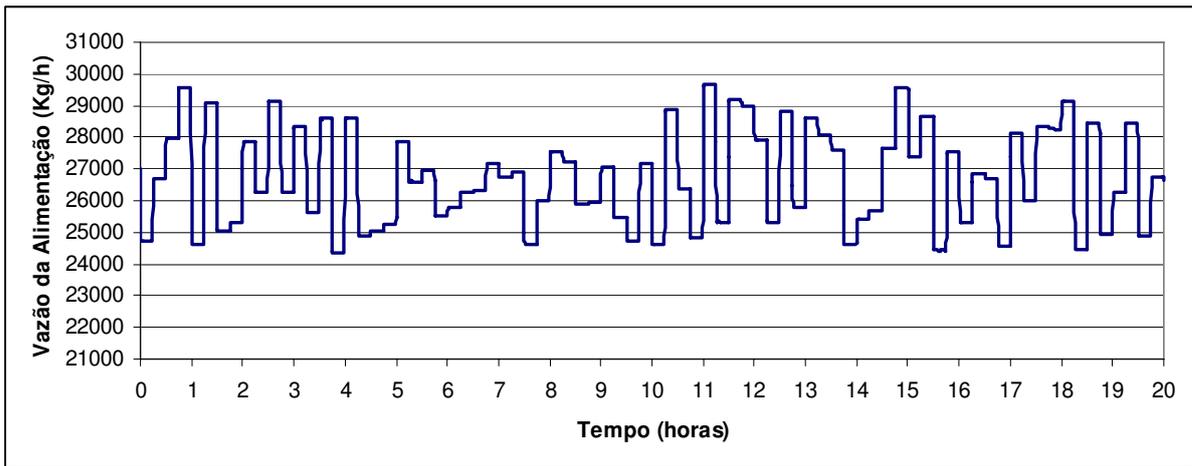


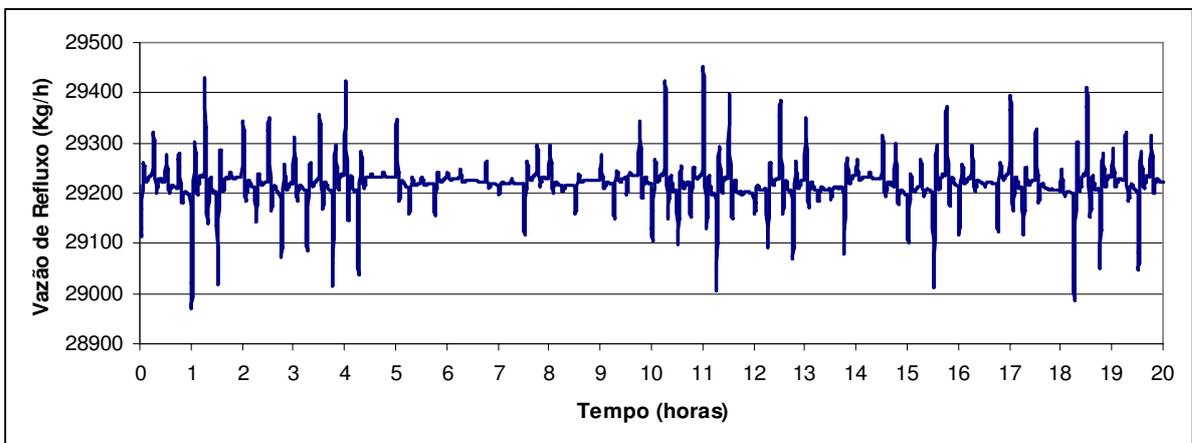
Figura 50 – Instrumentação básica da coluna com controle de nível do vaso de refluxo a partir da carga térmica do refeedor.

Com o problema do controle do nível do vaso de refluxo resolvido, voltamos à atenção agora para o controle da composição do CHCl_3 na base da coluna. Como foi dito antes, a idéia é conseguir controlar esta variável a partir da vazão de refluxo. Para isto, é preciso saber quais os efeitos da vazão da alimentação sobre a vazão de refluxo e composição do CHCl_3 na base e quais os efeitos da vazão de refluxo sobre a composição do CHCl_3 na base da coluna com o nível do vaso de refluxo controlado agora a partir da carga térmica do refeedor. Vale sempre lembrar que a vazão da alimentação é uma variável de distúrbio do processo.

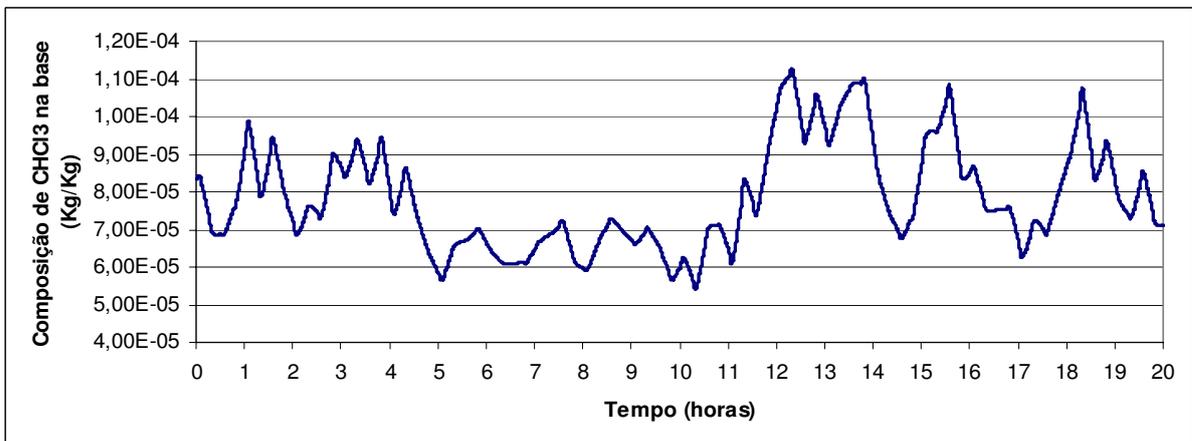
Utilizando o elemento PRBS no simulador Aspen DynamicsTM foi possível realizar contínuas mudanças de amplitude variável e período constante no setpoint do controlador de vazão da alimentação e acompanhar as respostas a estas mudanças da vazão de refluxo e da composição do CHCl_3 na base da coluna. O mesmo procedimento foi realizado para provocar contínuas mudanças também de amplitude variável e período constante no setpoint do controlador de vazão de refluxo e obter as respostas a estas mudanças da composição de CHCl_3 na base da coluna. A utilização de um controlador de fluxo para a vazão de refluxo se fez necessária para evitar um efeito combinado da perturbação do PRBS e da carga térmica do refeedor na vazão de refluxo tendo em vista que a mesma se relaciona diretamente com o nível do vaso de refluxo. As Figuras 51 e 52 apresentam os resultados obtidos.



(a)

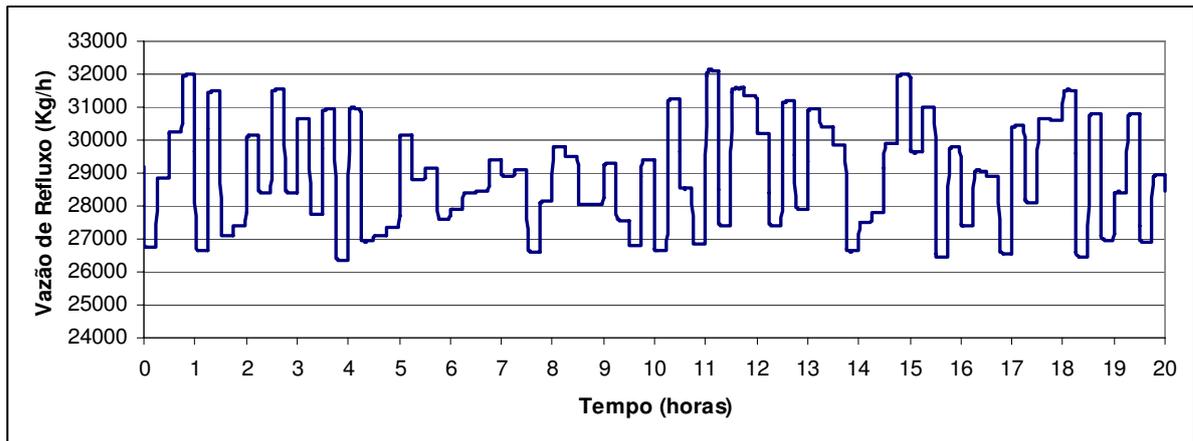


(b)

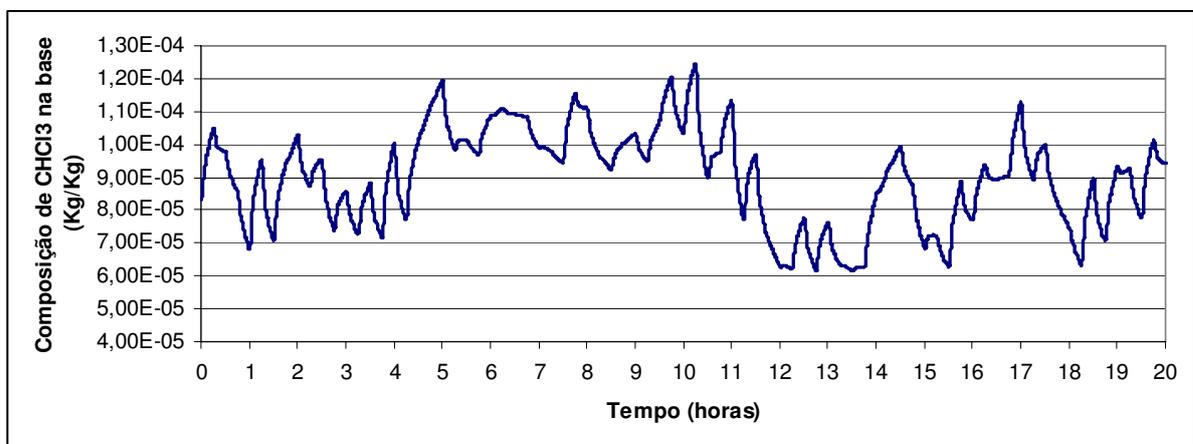


(c)

Figura 51 – Resultados das mudanças no setpoint do controlador da vazão de alimentação provocadas pelo elemento PRBS. a) Vazão da alimentação, b) vazão de refluxo e c) composição de CHCl_3 na base da coluna.



(a)



(b)

Figura 52 – Resultados das mudanças no setpoint do controlador da vazão de refluxo provocadas pelo elemento PRBS. a) Vazão de refluxo e b) composição de CHCl_3 na base da coluna.

As Figuras 51 e 52 mostram que os efeitos da vazão de alimentação e da vazão de refluxo sobre a composição de CHCl_3 na base da coluna são contrários e isto é bom, pois caso ocorra uma perturbação na alimentação causando uma alteração sobre a composição de CHCl_3 , uma modificação na vazão de refluxo também irá provocar uma alteração na composição CHCl_3 de forma contrária neutralizando a alteração da composição sofrida pela mudança na vazão da alimentação.

Com base nestas importantes observações, uma estrutura de controle tipo Feedforward para controlar a composição de CHCl_3 na base da coluna será considerada. Assim, para uma perturbação na vazão da alimentação, o controlador Feedforward provoca uma modificação na vazão de refluxo. Ambas as modificações possuem efeitos contrários sobre a composição, de modo que quando estes efeitos forem somados para

formar a resposta final da composição a ambas as perturbações, as mesmas tendem a se anular, mantendo assim a composição de CHCl_3 em valores próximos ao valor do setpoint.

O próximo passo para o desenvolvimento e implementação do sistema de controle é a obtenção das funções de transferência que relacionam a vazão de alimentação com a vazão de refluxo e com a composição de CHCl_3 e a função de transferência que relaciona vazão de refluxo e composição de CHCl_3 .

9.2 Determinação das novas funções de transferência

As novas funções de transferência foram determinadas mais uma vez com o auxílio da ferramenta *ident*TM que foi apresentada e descrita no capítulo 8. Os dados apresentados pelas Figuras 51 e 52 foram exportados para o *MATLAB*TM e a partir das várias opções oferecidas pela ferramenta *ident*TM foi possível fazer um ajuste dos mesmos. Os modelos obtidos foram:

Função de transferência do distúrbio

As função de transferência do distúrbio relaciona a vazão de alimentação com a composição de CHCl_3 na base da coluna. Esta possui a seguinte forma:

$$G(s) = \frac{-2.031 \times 10^{-9} s^3 + 2.51 \times 10^{-7} s^2 - 0.0001163s + 0.002658}{s^4 + 75.63s^3 + 5063s^2 + 8.491 \times 10^4 s + 8.106 \times 10^4} \quad (22)$$

A Figura 53 apresenta a validação do modelo a partir de uma comparação entre os dados gerados durante as simulações e os dados gerados pelo modelo.

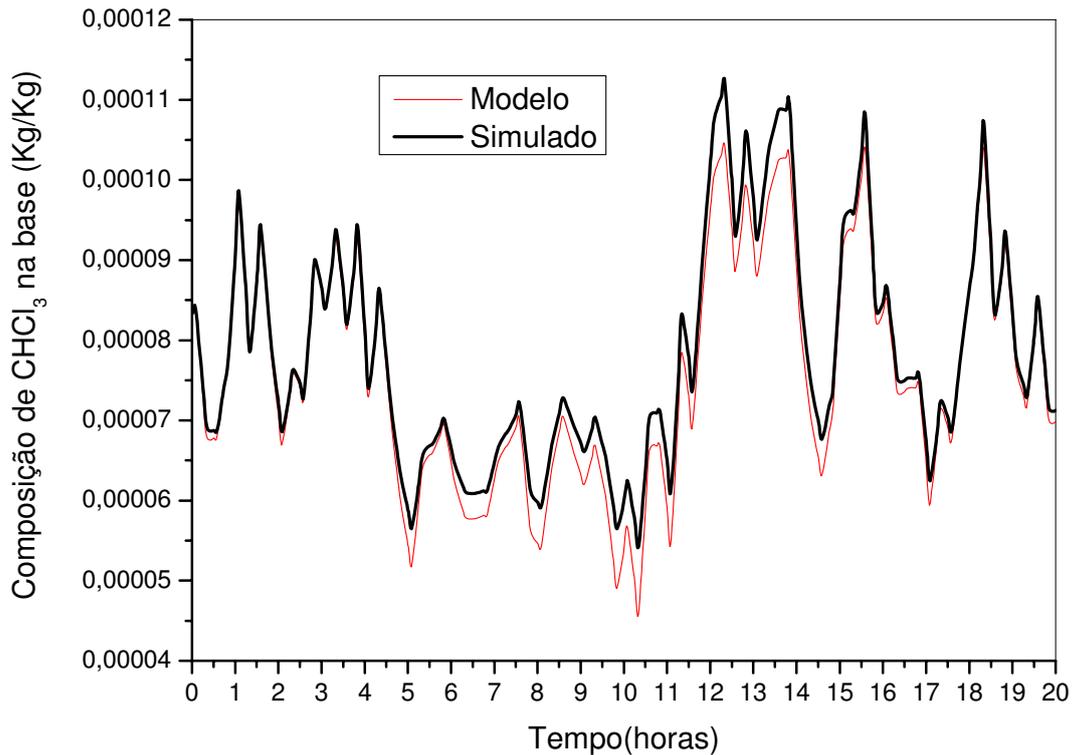


Figura 53 – Validação do modelo para a função de transferência entre vazão de alimentação e composição de CHCl_3 na base.

Função de transferência do processo

A função de transferência do processo relaciona a vazão de refluxo com a composição de CHCl_3 na base da coluna. Esta função é dada por:

$$G(s) = \frac{-4.011 \times 10^{-9} s - 3.1211 \times 10^{-8}}{0.055737 s^2 + 1.1174 s + 1} \quad (23)$$

A Figura 54 apresenta a validação do modelo a partir de uma comparação entre os dados gerados durante as simulações e os dados gerados pelo modelo.

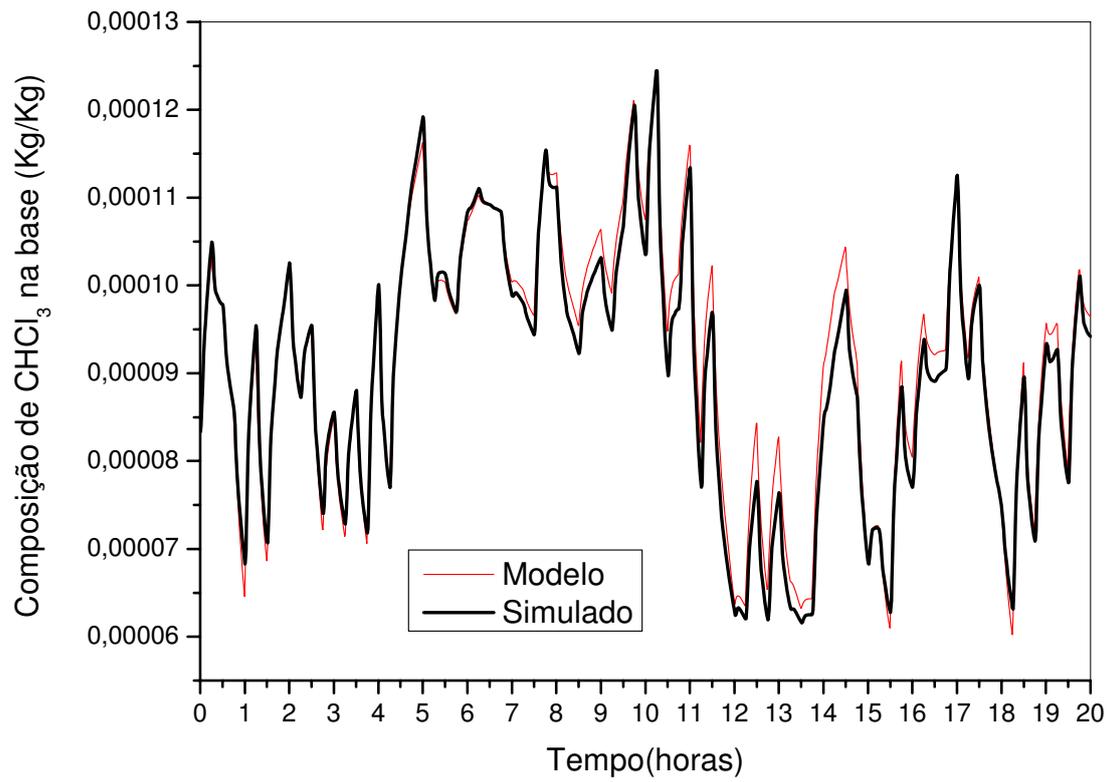


Figura 54 – Validação do modelo para a função de transferência entre vazão de refluxo e composição de CHCl_3 na base.

$$Gf(s) = -\frac{GL(s)}{GP(s)} \quad (24)$$

(25)

$$Gf(s) = \frac{1.132 \cdot 10^{-10} s^5 - 1.1721 \cdot 10^{-8} s^4 + 6.2038 \cdot 10^{-6} s^3 - 1.8446 \cdot 10^{-5} s^2 - 2.8537 \cdot 10^{-3} s - 0.002658}{-4.011 \cdot 10^{-9} s^5 - 3.3456 \cdot 10^{-7} s^4 - 2.2668 \cdot 10^{-5} s^3 - 4.986 \cdot 10^{-4} s^2 - 2.9753 \cdot 10^{-3} s - 0.00253}$$

A Figura 56 apresenta o desempenho do sistema de controle a partir de uma comparação entre as respostas da composição para perturbações na alimentação, com o sistema em malha aberta e malha fechada.

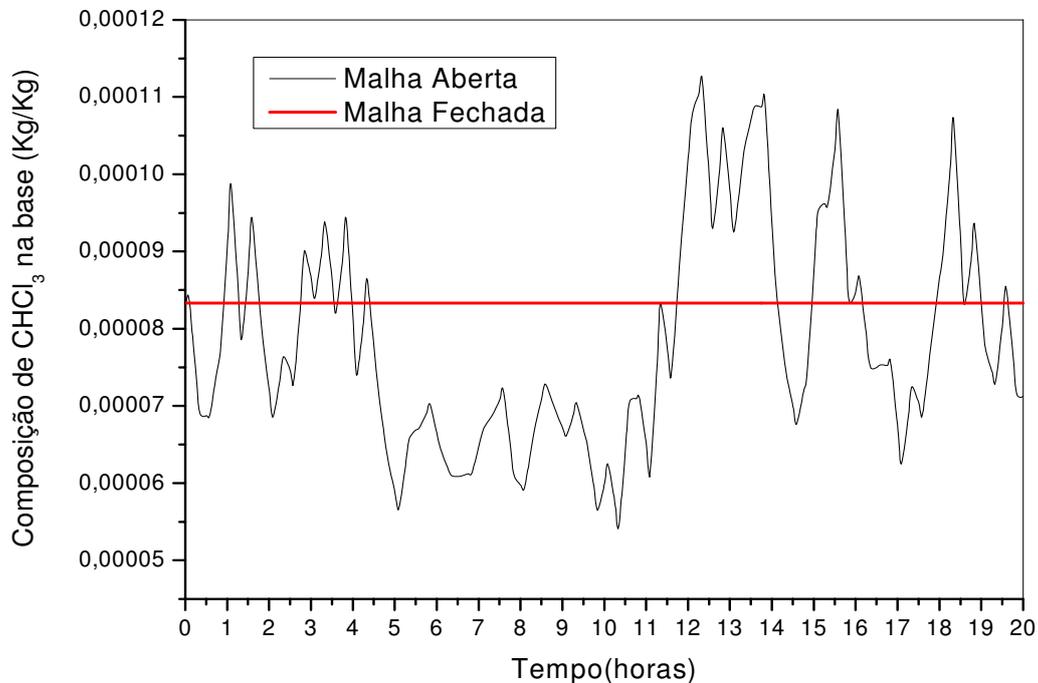


Figura 56 – Desempenho do sistema de controle

A Figura 56 nos mostra um desempenho excelente do sistema de controle. O setpoint de composição de CHCl₃ é mantido durante todo o tempo e a resposta em malha fechada não apresenta nem sequer oscilações o que vem a ser algo surpreendente, tendo em vista que era esperado um desempenho bom, mas com a composição variando entre valores próximos ao setpoint, ou seja, apresentando oscilações com pequenas amplitudes.

Como o desempenho do sistema de controle superou as expectativas e isso apesar de ser muito bom causou certa desconfiança, pois se sabe que não existe nada

perfeito principalmente dentro da engenharia, o sistema de controle foi testado com um modelo do processo contendo um erro de 10 % para mais em relação aos seus parâmetros, como ganho e constantes de tempo. A Figura 57 apresenta o desempenho do sistema de controle para esta situação.

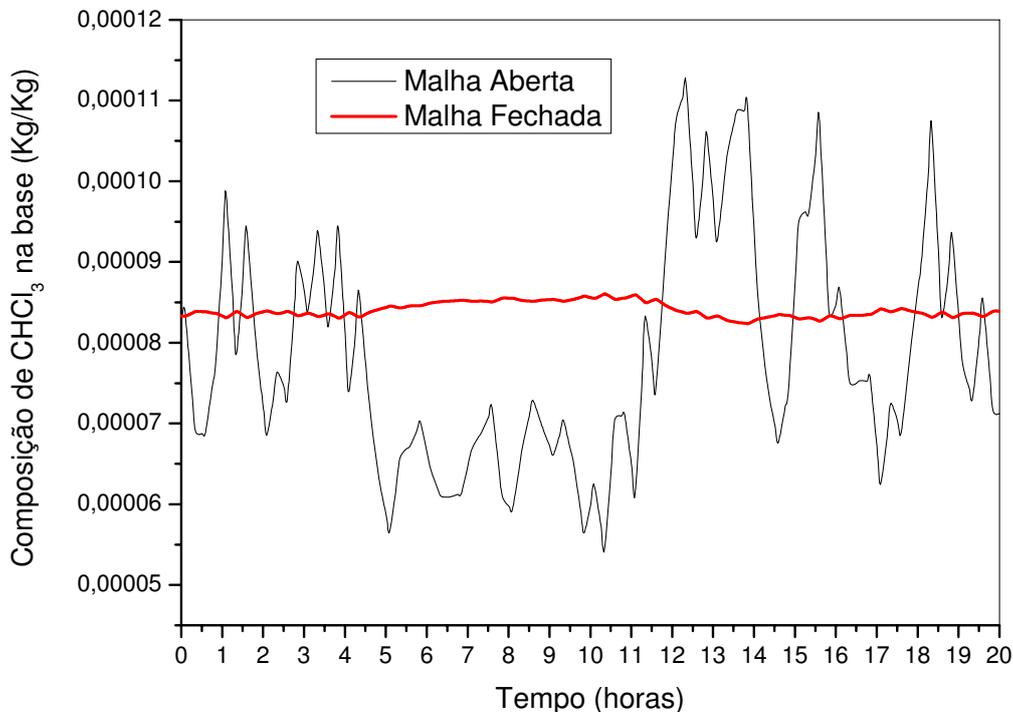


Figura 57 – Desempenho do sistema de controle para o modelo do processo com erro de 10%.

A partir da Figura 57 é possível perceber que mesmo com o modelo do processo apresentando um erro de 10% nos seus parâmetros o desempenho do sistema de controle ainda é excelente, apresentando somente algumas pequenas oscilações na resposta da composição.

Mesmo com os desempenhos excelentes apresentados nas Figuras 56 e 57 ainda é cedo para se empolgar, pois o sucesso total do que está sendo proposto vai depender do desempenho do sistema de controle no simulador Aspen DynamicsTM, pois vale salientar que no Matlab/Simulink todo o modelo do processo está linearizado o que também contribuiu para os excelentes resultados obtidos. Já no simulador toda a não linearidade do modelo está presente, e isto pode contribuir para um desempenho não tão satisfatório como o apresentado até o presente momento, pois é válido lembrar que o

modelo é altamente não linear. A implementação do sistema de controle no simulador é o próximo e último passo a ser seguido no desenvolvimento deste trabalho.

10.2 Implementação do sistema de controle no Simulador Aspen Dynamics™

Para implementar a estrutura de controle Feedforward no simulador Aspen Dynamics™ foi necessário ajustar os resultados fornecidos pela função de transferência do controlador por um modelo de atraso-avanço. O ajuste permitiu determinar os parâmetros exigidos pelo bloco do controlador Feedforward como as constantes de atraso, avanço, ganho e tempo morto. A Figura 58 apresenta os resultados fornecidos pela função de transferência do controlador Feedforward. O modelo que ajustou os resultados foi obtido a partir da ferramenta `ident™` do Matlab™.

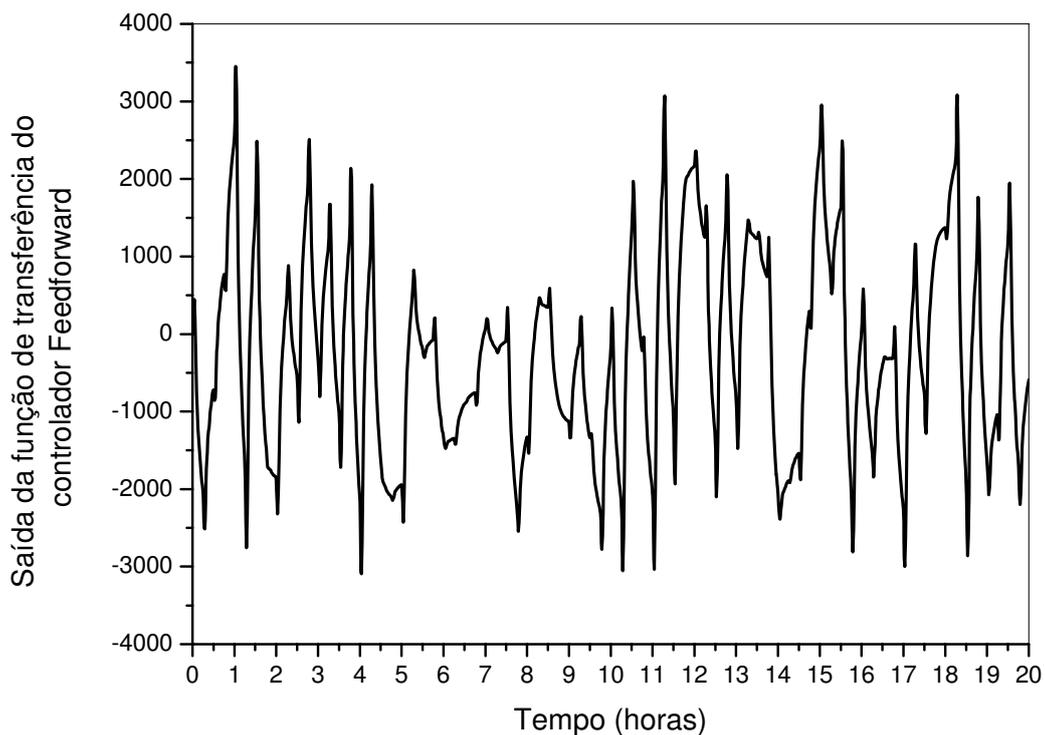


Figura 58 – Resultados fornecidos pela função de transferência do controlador Feedforward

O modelo obtido possui a seguinte forma:

$$Gf(s) = 1,1366 \frac{(1 + 0,0011243s)}{(1 + 0,10995s)} \exp(-0,05s) \quad (25)$$

Onde temos:

Ganho = 1,1366;

Constante de atraso = 0,10995;

Constante de avanço = 0,0011243;

Tempo morto = 0,05

A Figura 59 apresenta todas as malhas que compõem a estrutura completa do sistema de controle da coluna, incluindo os controladores de fluxo para a vazão da alimentação e vazão de retirada de leves.

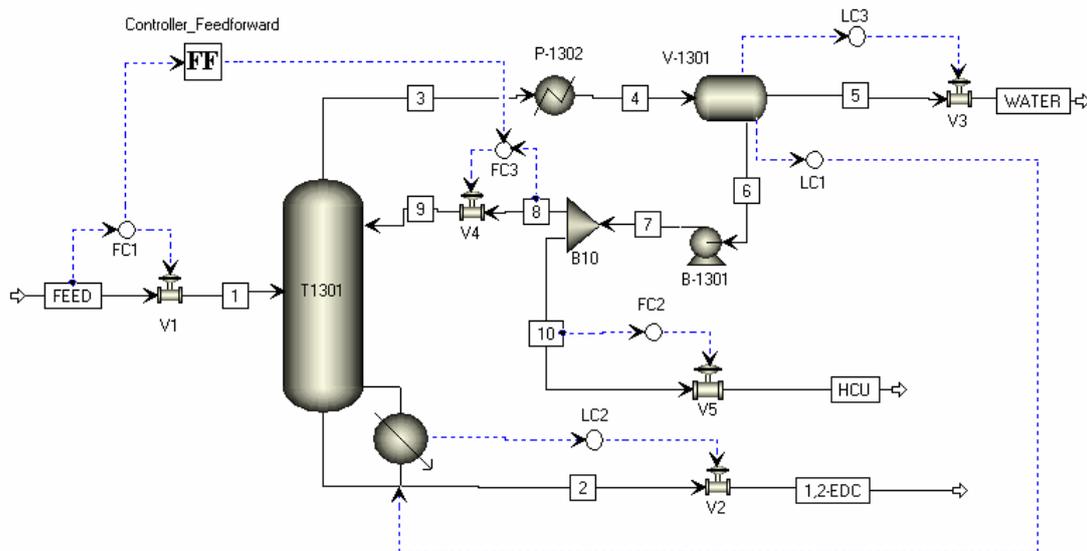


Figura 59 – Estrutura completa do sistema de controle da coluna.

A estrutura completa do sistema de controle é constituída pelas seguintes malhas:

- Controle de nível na base da coluna a partir da vazão do produto;
- Controle de nível da fase orgânica no vaso de refluxo a partir da carga térmica do refeedor;
- Controle de nível da fase aquosa a partir da vazão de retirada da mesma;
- Controle de composição Feedforward na base a partir da vazão de refluxo.

As Figuras 60 e 61 apresentam o desempenho da malha de controle de composição na base a partir de uma comparação entre as respostas das composições de CHCl_3 e CCl_4 em malha aberta e malha fechada para perturbações na vazão da alimentação em alta frequência, ou seja, com períodos de 20 minutos. Estas perturbações foram causadas pelo elemento PRBS, o mesmo utilizado para gerar os dados para obtenção das funções de transferência.

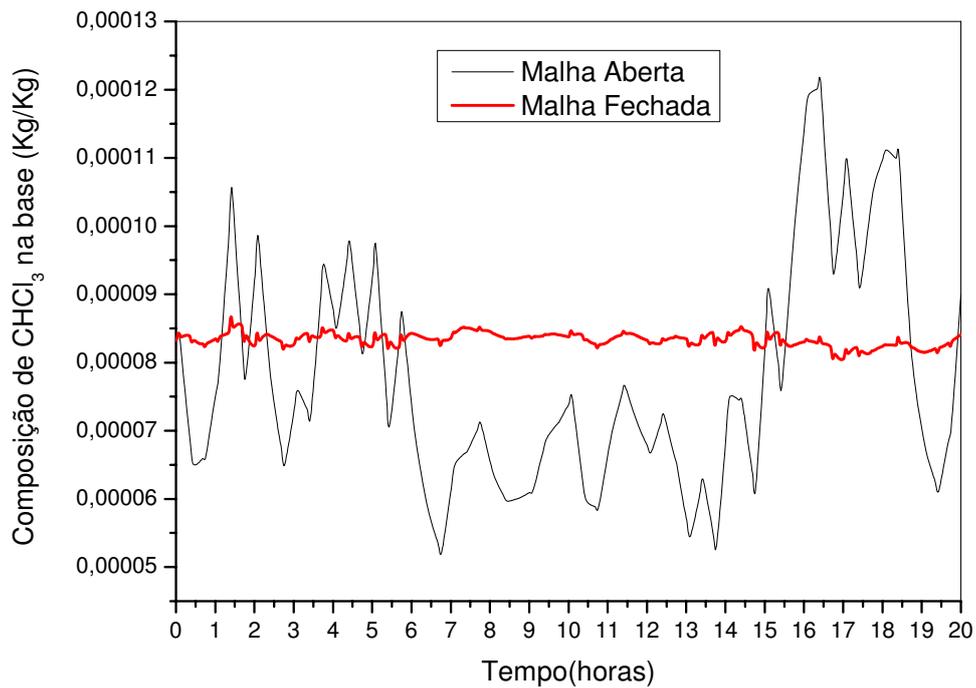


Figura 60 – Variação da composição de CHCl_3 em malha aberta e malha fechada em alta frequência.

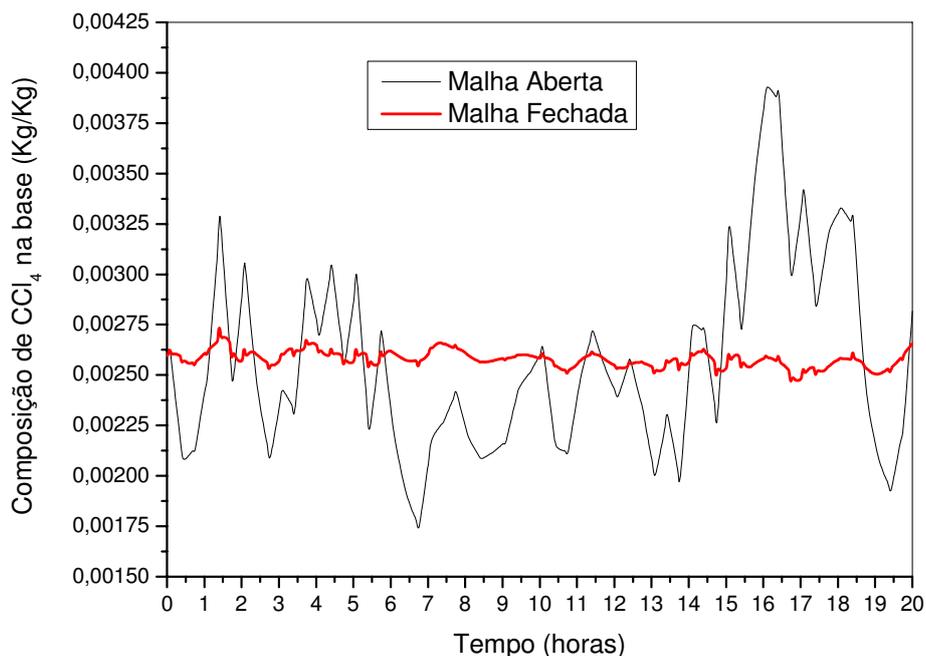


Figura 61 – Variação da composição de CCl_4 em malha aberta e malha fechada em alta frequência.

As Figuras 62 e 63 apresentam o desempenho da malha de controle de composição na base a partir de uma comparação entre as respostas das composições de CHCl_3 e CCl_4 em malha aberta e malha fechada para perturbações na vazão da alimentação em baixa frequência, ou seja, com períodos de 60 minutos.

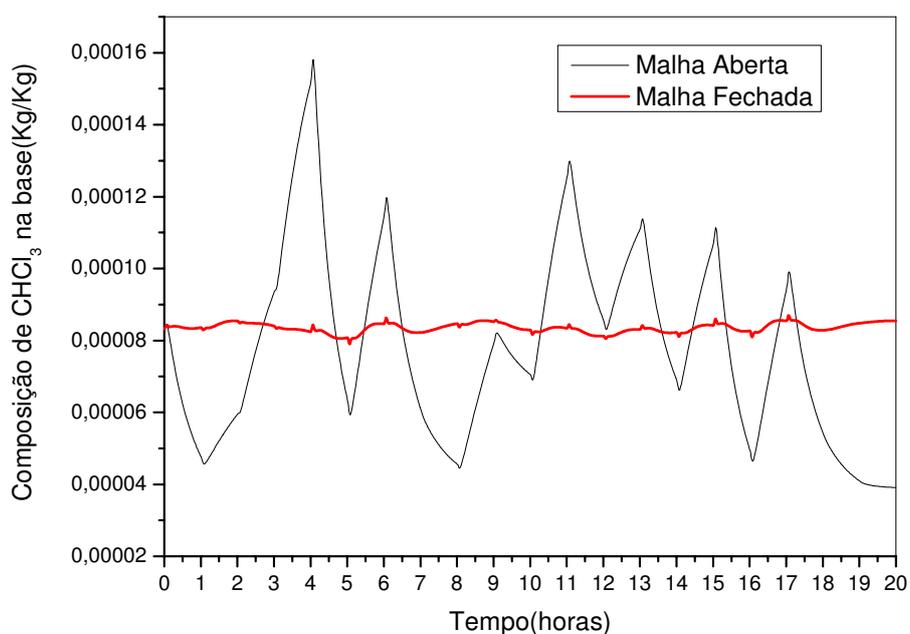


Figura 62 – Variação da composição de CHCl_3 em malha aberta e malha fechada em baixa frequência.

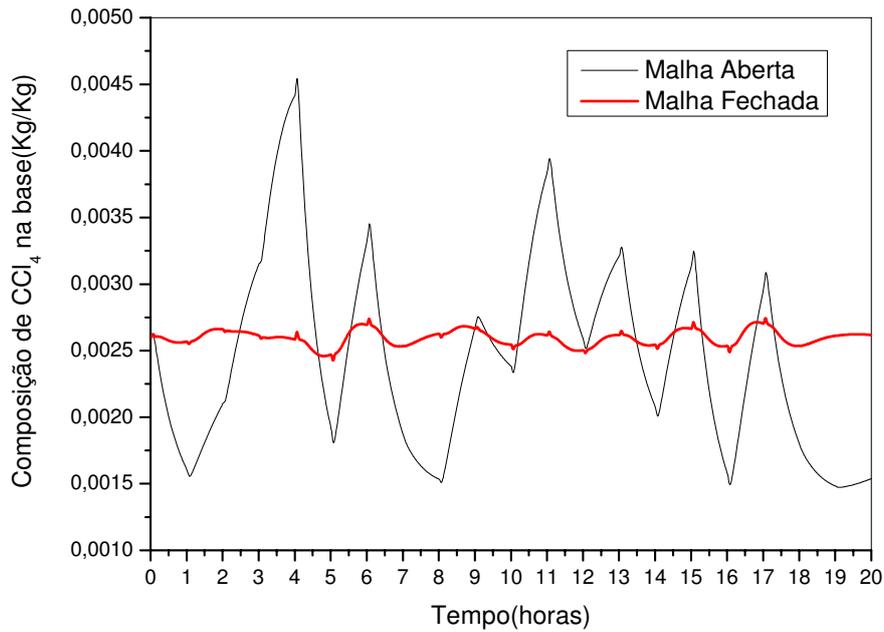


Figura 63 – Variação da composição de CCl_4 em malha aberta e malha fechada em baixa frequência.

A partir das Figuras 60, 61, 62 e 63 podemos observar que o desempenho do sistema de controle para composição é excelente principalmente quando se trabalhou em baixa frequência. As respostas em malha fechada apresentam pequenas oscilações em torno do setpoint devido a grande não linearidade do sistema e também pelo fato das composições estarem em termos de ppm, o que torna o controle das mesmas difícil. Vale salientar que para obter este bom desempenho foi necessário fazer um pequeno ajuste em alguns parâmetros do controlador Feedforward representado pela equação 25, como o ganho e o tempo morto. Um procedimento normal principalmente quando se trabalha com este tipo de controlador. Os valores do ganho e do tempo morto que possibilitaram a obtenção de um excelente controle de composição foram respectivamente 2,2 e 0,055. As constantes de atraso e avanço não precisaram ser modificadas, pois ambas não chegaram a exercer uma influência significativa nas respostas em malha fechada.

11. CONCLUSÕES

Este capítulo apresenta as conclusões que foram obtidas durante todo o período de desenvolvimento deste trabalho nas inúmeras discussões entre as pessoas envolvidas no mesmo sobre os resultados fornecidos pelas simulações do processo. As conclusões são apresentadas na seqüência lógica em que foram obtidas durante cada etapa do desenvolvimento do trabalho, desde a simulação estacionária que foi a etapa inicial, até a implementação da estrutura de controle definitiva no simulador Aspen DynamicsTM, sendo esta a etapa final do trabalho.

Ratificando o que foi dito no capítulo sobre a simulação estacionária, a base para entender a dinâmica e controlar as especificações de uma coluna de destilação é ter conhecimento detalhado do seu comportamento no estado estacionário. A primeira conclusão obtida foi em relação ao modelo do processo, ao qual a partir da concordância entre os perfis de temperatura simulado e experimental concluímos que a sua eficiência e qualidade são muito boas, sendo os resultados obtidos a partir do mesmo bastante confiáveis. A segunda conclusão obtida foi em relação à sensibilidade da temperatura dos pratos 1 e 8, onde a partir do estudo da inferência estacionária foi observado que a temperatura do prato 1 apresenta uma boa variação para perturbações na vazão da alimentação, na carga térmica do refeedor e na retirada de leves, o que o nos levou a inicialmente a pensar em utilizar a temperatura deste prato para um controle inferencial de composição na base da coluna, idéia esta que posteriormente foi abandonada. A terceira conclusão obtida foi em relação aos estados estacionários previstos pela inferência estacionária, principalmente em relação ao comportamento inverso entre a temperatura do prato 1 e a carga térmica. Este comportamento inesperado causou um certo espanto e praticamente derrubou a idéia inicial de utilizar a temperatura do prato para um controle de composição por inferência, tendo em vista que a mesma seria usada como variável controlada e a carga térmica seria usada como variável manipulada. Sendo assim, após inúmeras discussões em cima dos resultados apresentados pela inferência estacionária concluímos que era de extrema importância comparar estes com os resultados de um estudo de inferência dinâmica e assim obter justificativas claras e seguras para tal comportamento e a partir daí, definir se a estrutura

de controle de composição na base por inferência utilizando a temperatura do prato 1 é viável ou não.

Os resultados apresentados pela inferência dinâmica para a relação entre temperatura do prato 1 e composição de CHCl_3 tiveram o mesmo comportamento dos resultados da inferência estacionária para modificações na vazão da alimentação e vazão de retirada de leves, por outro lado os resultados apresentados para modificações na carga térmica do refeedor foram totalmente contrárias e além disso a variação da temperatura foi muito pequena enquanto a variação da composição de CHCl_3 na base foi grande. Isto também foi algo que chamou a atenção e nos levou a concluir que era necessário verificar o comportamento da temperatura frente a modificações na carga térmica em vários pontos da coluna assim como a variação da composição do CHCl_3 na base. Os resultados obtidos são apresentados e ilustrados pelas Figuras 31 e 32 onde foi possível observar que a variação da temperatura em vários pontos da coluna é muito pouca e ocorre de forma muito lenta e que a composição no momento da perturbação cai de forma significativa, mas inverte a resposta depois de um determinado tempo crescendo sempre.

Com base nestas observações concluímos previamente que o estado estacionário real é o apresentado pela inferência estacionária, mas o mesmo devido a dinâmica muito lenta da coluna só será atingido ou alcançado depois de um período de tempo muito elevado em torno de quatro vezes a constante de tempo do processo. Com a determinação da função de transferência do processo obtemos a constante de tempo do processo que foi em torno de 1883.2 horas. Assim o estado estacionário previsto pela inferência estacionária seria atingido após um período de tempo de $4 \times 1883.2 = 7532.8$ horas. Este resultado confirmou tudo o que foi levantado como hipótese nas discussões sobre os resultados e diferenças de comportamento entre as inferências estacionária e dinâmica. Isto nos levou a concluir de forma definitiva que a estratégia de controlar a composição de CHCl_3 a partir da temperatura do prato 1 manipulando a carga térmica do refeedor não é adequada pois a variação da temperatura do prato 1 é muito pequena e a variação da composição de CHCl_3 na base é grande para modificações na carga térmica, o tempo necessário para que o estado estacionário previsto pela inferência estacionária seja alcançado ou atingido é muito grande e finalmente pelo fato da inferência estacionária mostrar que para elevar a temperatura do prato 1, a carga térmica tem que ser diminuída o que causa um aumento na composição de CHCl_3 na base o que é totalmente indesejado.

Assim tivemos que partir para uma proposta de uma nova estrutura de controle o que foi possível graças à boa sensibilidade apresentada pela vazão de refluxo, tanto para modificações na vazão da alimentação como para modificações na carga térmica do retervedor. Esta boa sensibilidade foi comprovada por um estudo de inferência dinâmica. O problema inicial era como utilizar esta variável para controlar a composição da base, pois a mesma estava inicialmente sendo utilizada para controlar o nível da fase orgânica no vaso de refluxo. Começamos a cogitar a possibilidade de utilizar um controle “Override” onde teríamos duas malhas: a primeira malha para o controle inferencial da composição do CHCl_3 a partir da vazão de refluxo manipulando a carga térmica do retervedor e a segunda malha para o controle do nível da fase orgânica manipulando a vazão de refluxo. A partir de várias simulações, com a malha de controle de nível aberta e fechada, concluímos que esta estratégia de controle também teria que ser abandonada pelo fato do nível da fase orgânica apresentar variações muito bruscas, ou seja, tende para um máximo ou mínimo de forma muito rápida. Este comportamento de uma forma ou de outra foi interessante, pois nos fez tomar uma decisão de mudar, por que não dizer de maneira radical à maneira que vinha sendo pensada de controlar a composição de CHCl_3 na base. O primeiro passo foi utilizar a carga térmica para controlar o nível da fase orgânica no vaso de refluxo, deixando a vazão de refluxo livre para ser utilizada no controle de composição.

A partir de mais algumas inúmeras simulações observamos que os efeitos da vazão de alimentação e da vazão de refluxo sobre a composição do CHCl_3 na base eram contrários o que nos levou a concluir que a melhor estratégia de controle seria um controle Feedforward, onde para uma dada modificação na vazão da alimentação o sistema de controle ajusta a vazão de refluxo de modo que a soma dos efeitos de cada uma dessas vazões na composição de CHCl_3 se anulam mantendo assim a composição controlada.

A implementação desta estrutura de controle no simulador Aspen DynamicsTM foi de certa maneira bastante gratificante, pois o desempenho do sistema de controle superou as expectativas. Concluímos que o desempenho do mesmo foi excelente principalmente quando as perturbações ocorrem em baixas frequências e que apesar de ter sido priorizado o controle de composição do CHCl_3 na base, conseguimos, além disso, estabilizar a composição de CCl_4 . Vale salientar e por que não dizer relembrar que todo o desenvolvimento deste trabalho foi em torno do controle de composição na base do CHCl_3 , pois a composição de CCl_4 quase sempre permaneceu dentro da faixa de

valores desejados e isto pode ser visto e comprovado pelos gráficos de inferência estacionária.

Outra conclusão bastante interessante é o fato de que além de controlar a composição de CHCl_3 e estabilizar a composição de CCl_4 na base o sistema de controle ainda é capaz de fornecer de forma contínua estes valores, permitindo aos operadores acompanharem em tempo real as possíveis variações que possam vir a acontecer nos mesmos em relação ao setpoint. Variações estas que podem ser decorrentes de perturbações no processo e da própria ação de controle tentando neutralizar estas perturbações.

12. SUGESTOES PARA TRABALHOS FUTUROS

As sugestões para trabalhos futuros surgiram a partir das inúmeras discussões em cima dos vários resultados e conclusões obtidas neste trabalho. São as seguintes:

- Avaliar de forma mais concisa e aprofundada a influência da retirada de leves na composição do CHCl_3 e do CCl_4 na base e no topo da coluna;
- Avaliar a influência da composição da corrente da alimentação da coluna nas composições na base e no topo do CHCl_3 e do CCl_4 ;
- Analisar quais as possíveis possibilidades de ocorrência de falhas no sistema de controle proposto e suas principais conseqüências não só para a operação da coluna, mas de todo o processo;
- Desenvolver e implementar uma estratégia de controle robusto para a composição, com controladores de horizonte de predição;
- Analisar toda a operação do trem de destilação do qual a coluna faz parte e propor caso seja possível uma estratégia de controle global de toda a operação.

Outras sugestões para trabalhos futuros, voltadas para o aspecto de controle foram listadas em Braga Júnior (2003) e não devem ser esquecidas.

13. BIBLIOGRAFIA

BRITO, R. P. (1997), Processo de Destilação Extrativa: Modelagem Dinâmica, Simulação e Avaliação de Nova Configuração, Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas;

BENYAHIA, F. (2000). Flowsheeting Packages: Reliable or Fictitious Process Models?. IChemE, 78, Part A;

BEKIARIS, N., MESKI, G. A., RADU, C. M., MORARI, M. (1993). Multiple Steady States in Homogeneous Azeotropic Distillation. Ind. Eng. Chem. Res. 32, 2023-2038;

BEKIARIS, N., MESKI, G. A., MORARI, M. (1995). Multiple Steady States in Heterogeneous Azeotropic Distillation. Comput. Chem. Engng, 19, 21-26;

CIRIC, A. R., MUMTAZ, H.S., CORBETT, G., REAGAN, M., SEIDER, W. D., FABIANO, L. A., KOLESAR, D. M., WIDAGDO, S. (2000). Azeotropic Distillation with an Internal Decanter. Comput. Chem. Engng, 24, 2435-2446;

CHIEN, I-L., ZENG, K-L., CHAO, H-Y. (2004). Design and Control of a Complete Heterogeneous Azeotropic Distillation Column System. Ind. Eng. Chem, 43,2160-2174;

GANI, R., RUIZ, C. A., CAMERON, I. T.(1986). A Generalized Model For Distillation Columns – I, Model Description and Applications. Computers & Chemical Engineering, 10, 181-198;

GANI, R., RUIZ, C. A., CAMERON, I. T.(1986). A Generalized Model For Distillation Columns – II, Numerical and Computational Aspects. Computers & Chemical Engineering, 10, 199-211;

HUMPHREY, J. (1995). Separation Processes: Playing a Critical Role. Chem. Eng. Progr, 91, 10.

HENLEY, E.J. e SEADER, J.D. (1981), Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering. John Wiley & Sons, Inc., New York;

JUNIOR, L. R. B. (2003), Controle de Colunas de Destilação de Alta Pureza um Caso Industrial, Dissertação de Mestrado, UFCG;

KISTER, H. Z. (1992), Distillation Design. McGraw-Hill, Inc., New York;

KUNESH, J., KISTER, H., LOCKETT, M., FAIR, J. (1995). Distillation: Still Towering Over Other Options. Chem. Eng. Progr, 91, 10.

KUROOKA, T., YAMASHITA, Y., NISHITANI, H., HASHIMOTO, Y., YOSHIDA, M., NUMATA, M. (2000). Dynamic simulation and nonlinear control system design of a heterogeneous azeotropic distillation column. Comput. Chem. Engng, 24, 887-892;

LUYBEN, W. L. (1990), Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers, 2ª Edição, McGraw-Hill, USA;

LUYBEN, W. L. (2002), Plantwide Dynamic Simulators in Chemical Processing and Control, Marcel Dekker, Inc., New York;

LUYBEN, W. L. (2005). Control of Multiunit Heterogeneous Azeotropic Distillation Process, AIChE, vol. 52, No. 2, 623-637;

MOURA, C A. D. (1974), Modelo de Torres de Fracionamento, PETROBRÁS, Rio de Janeiro, Trabalho apresentado no Curso de Controle Digital de Processos, realizado no Departamento Industrial;

MOURA, C. A. D. (1981), *Uso* Eficiente de Programas de Computador na Simulação de Colunas de Destilação. B. téc. PETROBRAS, Rio de Janeiro, 195-200;

OGATA, K. (2002), Engenharia de Controle Moderno, Prentice Hall, 4ª edição;

OGATA, K. (1997), Solução de Problemas de Engenharia de Controle com MATLAB, Prentice Hall do Brasil;

PERRY, R. H. & GREEN, D. W. (1999), Perry's Chemical Engineer's Handbook. McGraw-Hill, Inc., New York;

ROVAGLIO, M., FARAVELLI, T., GAFFURI, P., DI PAOLO, C., DORIGO, A. (1995). Controllability and operability of azeotropic heterogeneous distillation systems. Comput. Chem. Engng, 19, 525-530;

ROSS, R., PERKINS, J. D., PISTIKOPOULOS, E. N., KOOT, G. L. M., VAN SCHIJNDEL, J. M. G. (2001)., Optimal design and control of a high-purity industrial distillation system. Computers & Chemical Engineering, 25, 141-150;

SKOGESTAD, S. (1992). Dynamics and Control of Distillation Columns – A Critical Survey. IFAC – symposium DYCORS+’92, Maryland, Apr. 27-29, 1992;

SILVA, A. A. R. (2002), Aspectos Estacionário e Dinâmico de uma Destilação Azeotrópica não Convencional, Dissertação de Mestrado, UFCG;

WANG, J. C. E HENKE, G. E. (1966), Tridiagonal Matrix for Distillation. *Hydrocarbon Processing*, 45(8): 155-163, aug., em HENLEY, E.J. e SEADER, J.D. (1981), *Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering*. John Wiley & Sons, Inc., New York;

WONG, D. S. H., WANG, C. J., CHIEN, I-L., SHIH, R. F., WANG, S. J., TSAI, C. S. (1997). Experimental Investigation of Multiple Steady States and Parametric Sensitivity in Azeotropic Distillation. *Comput. Chem. Engng*, 21, 535-540