



Universidade Federal de Campina Grande
Centro de Ciências e Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

**Modelagem, Simulação e Controle do Processo de
Degradação de Tricloroamina (NCl_3) na Produção de
Cloro (Cl_2) Eletrolítico.**

JÚLIO INÁCIO HOLANDA TAVARES NETO

CAMPINA GRANDE – PARAIBA
FEVEREIRO DE 2006

**Modelagem, Simulação e Controle do Processo de
Degradação de Tricloroamina (NCl₃) na Produção de
Cloro (Cl₂) Eletrolítico.**

JULIO INACIO HOLANDA TAVARES NETO

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 PROCESSO

ORIENTADORES: Prof. Dr. Luís Gonzaga Sales Vasconcelos
Prof. Dr. Romildo Pereira Brito

CAMPINA GRANDE – PARAÍBA
FEVEREIRO DE 2006



T231 Tavares Neto, Julio Inácio Holanda.
Modelagem, simulação e controle do processo de
degradação de tricloroamina (NCI3) na produção de
cloro (Cl2) eletrolítico / Julio Inácio Holanda Tavares
Neto – Campina Grande/PB, 2006.

80 f.: 30 cm.

Dissertação (Mestrado em Operações e Processos) –
Universidade Federal de Campina Grande, Estado da
Paraíba, 2006.

Bibliografia: f. 64.

1. Modelagem. 2. Controle de Processo. 3.
Tricloroamina. I. Título.

CDD
660.2

**Modelagem, Simulação e Controle do Processo de
Degradação de Tricloroamina (NCl₃) na Produção de
Cloro (Cl₂) Eletrolítico.**

JULIO INACIO HOLANDA TAVARES NETO

Dissertação aprovada em: 22 / 02 / 06

Banca Examinadora:



Prof. Dr. Luís Gonzaga Sales Vasconcelos



Prof. Dr. Romildo Pereira Brito



Prof. Dr. João Manzi



Prof. Dr. William Gonçalves Vieira

Aos meus pais Antonio e Isabel.

À minha esposa Célia pela
tolerância e apoio sem os quais este
trabalho não seria possível.

AGRADECIMENTOS

Aos Professores Luís Vasconcelos e Romildo Brito pelo apoio, paciência, incentivo e orientação ao longo do trabalho.

Aos colegas de turma que tanto ajudaram na consolidação do aprendizado das várias disciplinas que juntos cursamos.

À Braskem S.A. pelo apoio e suporte na realização do curso de mestrado para sua equipe de engenheiros.

RESUMO

Reações químicas realizadas em plantas industriais, que apresentam risco de explosão, devem ser cuidadosamente controladas, com o objetivo de prevenir as óbvias conseqüências indesejáveis de uma operação incorreta. Controlar processos químicos significa interagir com sistemas nos quais as variáveis controladas e manipuladas normalmente apresentam restrições além de fortes interações. Desenvolveu-se uma estratégia de controle para um refeedor acoplado com uma coluna de absorção, contendo reciclo, existente numa planta comercial de produção de Cl_2 onde no primeiro equipamento, ocorre uma reação química que apresenta restrição quanto à máxima temperatura de operação (elevado risco de explosão) e, portanto deve ser cuidadosamente controlada. Um modelo teórico no estado estacionário para o sistema acoplado foi gerado no simulador comercial Aspen Plus™ a partir do qual foi desenvolvido um modelo dinâmico no simulador comercial Aspen Dynamics™, do qual as funções de transferência envolvendo variáveis controlada e manipulada foram obtidas. Teste de planta foi realizado com a finalidade de se proceder a identificação do sistema, ou por outras palavras, a adequação do modelo proposto. Peculiaridades não usuais para sistema acoplado com reciclo são verificadas onde, a magnitude do distúrbio de carga além de elevado é uma corrente principal no processo industrial, provocando desta maneira, dificuldades adicionais ao atendimento dos objetivos de controle requeridos pelo processo. Foi explicitada uma descrição detalhada do processo de produção comercial do Cl_2 , além de uma breve revisão da literatura sobre as estratégias de controle envolvendo sistemas acoplados, a partir de onde, se definiu as variáveis manipulada e controlada. Após a análise de estabilidade em malha fechada, várias técnicas de sintonia do controlador foram realizadas e comparadas. Simulações dinâmicas foram desenvolvidas e os resultados foram discutidos com o objetivo de identificar a melhor estratégia de controle. Conclui-se que os vários métodos apresentaram resultados satisfatórios, frente aos objetivos de controle, possibilitando assim, sua implementação na planta industrial. Outras recomendações, sugerindo alterações no projeto industrial foram propostas com o intuito de otimizar o desempenho do sistema em estudo.

ABSTRACT

Chemical reactions, with explosion risk, performed in industrial plants should be carefully controlled to prevent the obviously undesirable consequences of an incorrect operation. Controlling chemical processes, means to work with systems in which the controlled variables and manipulated variables usually present restrictions, besides strong interactions. A control strategy was developed for a reboiler coupled with an absorption column, containing recycles, located in a commercial Cl₂ production plant. A chemical reaction that presents restriction to the maximum operating temperature (high explosion risk) happens in the first equipment and therefore should be carefully controlled. A theoretical model, in the stationary state for the coupled system, was generated in the commercial simulator Aspen Plus™, from which a dynamic model was developed in the commercial simulator Aspen Dynamics™, obtaining the transfer functions involving controlled variables and manipulated variables. A plant test was performed with the purpose of identifying the system, to proceed with the adaptation of the proposed model. Systems coupled with recycle present unusual peculiarities when a high magnitude of load disturbance is present in the main current of the global industrial process, leading to additional difficulties to obtain the control objectives requested by the process. A detailed description of the process of commercial production of Cl₂ was presented, as well as a brief revision of the literature existent on the control strategies involving coupled systems, from which the manipulated and controlled variables were defined. After the analysis of stability in closed mesh, several techniques of the controller's syntony were accomplished and compared. Dynamic simulations were developed and the results were discussed to identify the best control strategy. The conclusion was that the several methods presented satisfactory results towards the control objectives, making it possible their implementation in the industrial plant. Other recommendations, suggesting alterations of the industrial project were proposed with the intention of optimizing the performance of the system in study.

NOMENCLATURA

a	Coefficiente angular de correlação no programa LABIFIT para cálculo de E_a e K_0
b	Coefficiente linear de correlação no programa LABIFIT para cálculo de E_a e K_0
a_1	Constante utilizada na modelagem de um processo integrador
b_1	Constante utilizada na modelagem de um processo integrador
C_A	Concentração de NCl_3 na saída do refeedor
C_{A0}	Concentração de alimentação de NCl_3 no refeedor
C_p	Calor específico à pressão constante da corrente de alimentação do refeedor
C_{pJ}	Calor específico à pressão constante do vapor de alimentação do refeedor
E_A	Energia de ativação (Kj/kmol)
F	Fluxo de saída do refeedor
f	Filtro de baixa
F_0	Fluxo de alimentação do refeedor
FE	Elemento primário de fluxo
FIC	Controlador indicador de fluxo
FIC	Controlador indicador de fluxo
$G_L(s)$	Função de transferência entre a temperatura e o distúrbio (vazão de Cl_2)
$G_P(s)$	Função de transferência entre a temperatura e a vazão de vapor
H	Entalpia
H_{Lj}	Entalpia do líquido no prato j
H_{Vj}	Entalpia do vapor no prato j
K	Constante de velocidade (1/h)
K_0	Fator pré-exponencial ou fator de frequência (1/h)
K_1	Constante de tempo da função de transferência entre a temperatura e a vazão de vapor
K_2	Constante de tempo da função de transferência entre a temperatura e a vazão de Cl_2 .
K_C	Ganho do controlador PID
K_{CU}	Ganho último
L	Vazão de líquido
$L(s)$	Distúrbio de carga
L_j	Vazão de líquido no prato j

M	Amplitude da função degrau no domínio de Laplace
M_1	Amplitude degrau na vazão de vapor
M_2	Amplitude degrau na vazão de Cl_2
$M_{i,j}$	Vazão mássica do componente i no prato j
P	Pressão absoluta
P	Controlador proporcional
P_c	Pressão crítica
PDV-15	Válvula diferencial de pressão
PI	Controlador proporcional e Integral
PID	Controlador proporcional Integral e Derivativo
P_U	Período de oscilação
PV-10C	Válvula de pressão de reciclo do compressor
Q	Quantidade de calor
Q_1	Vazão de vapor no domínio de Laplace
Q_2	Vazão de Cl_2 no domínio de Laplace
r	Parâmetro inteiro positivo do filtro de passagem de baixa do método IMC
R	Constante universal dos gases (8,314 J/molK)
s	Variável independente no domínio de Laplace
SDCD	Sistema Digital de Controle Distribuído
T	Temperatura
t	Tempo (min)
T_c	Temperatura crítica
TE	Elemento primário de temperatura
TIC	Controlador indicador de temperatura
TRC	Registrador controlador de temperatura
TT	Transmissor de temperatura
TV	Válvula de temperatura
U	Energia interna
u(t)	Perturbação em degrau na variável manipulada
U_j	Energia interna no prato j
V	Vazão de vapor

V_j	Vazão de vapor no prato j
W	Trabalho
WCR	Retorno de água gelada
WCS	Suprimento de água gelada
W_j	Trabalho realizado sobre o sistema no prato j
WLR	Retorno de água de resfriamento
WLS	Suprimento de água de resfriamento
X	Fração mássica
X_1	Fração molar do Cl_2
X_2	Fração molar do CCl_4
$x_{i,j}$	Fração mássica do componente i na fase líquida no prato j
$y_{i,j}$	Fração mássica do componente i na fase vapor no prato j

LETRAS GREGAS

β	Fator de ponderação de set point.
θ	Tempo morto do processo
ξ	Grau de oscilação na resposta do processo após uma perturbação (damping).
ρ	Densidade
r	Velocidade de reação (kg/hm ²)
Σ	Símbolo indicativo de somatório
\sum	Símbolo indicativo de somatório
τ	Constante de tempo do processo (min)
τ_c	Constante de tempo desejada para a resposta em malha fechada (min)
τ_D	Tempo derivativo do controlador PID (min)
τ_I	Tempo integral ou tempo de reinício ("reset") do controlador PID (min)
ρ_J	Densidade do vapor na alimentação do refulvedor

ÍNDICE

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO.....	01
1.1 IMPUREZAS COMO CAUSAS DE ACIDENTES.....	01
1.2 SISTEMA ACOPLADO REATOR/COLUNA.....	03
1.3 OBJETIVO E MOTIVAÇÃO.....	05
CAPÍTULO 2 – CARACTERIZAÇÃO DO PROBLEMA.....	07
2.1 PROCESSAMENTO INDUSTRIAL DO CLORO.....	07
2.2 SISTEMA DE DEGRADAÇÃO: REATOR/COLUNA.....	09
2.3 MALHA DE CONTROLE E RESTRIÇÕES DO SISTEMA.....	12
2.4 OBJETIVOS DO SISTEMA DE CONTROLE.....	14
CAPÍTULO 3 – MODELAGEM DO PROCESSO.....	15
3.1 MODELAGEM MATEMÁTICA.....	15
3.2 CINÉTICA DA REAÇÃO DE DEGRADAÇÃO.....	16
3.3 MODELO EM ASPEN™.....	20
3.4 VALIDAÇÃO DO MODELO EM ASPEN™.....	24
CAPÍTULOS 4 – DESENVOLVIMENTO DO SISTEMA DE CONTROLE.....	30
4.1 ESTUDO DE CONTROLABILIDADE.....	30
4.1.1 Definição das Variáveis Controlada e Manipulada.....	30
4.2 ESPECIFICAÇÃO DOS OBJETIVOS DE CONTROLE.....	33
4.3 OBTENÇÃO DAS FUNÇÕES DE TRANSFERÊNCIA.....	33
4.3.1 Obtenção da função de transferência entre a temperatura do revededor e o distúrbio na vazão de vapor.....	33
4.3.2 Obtenção da função de transferência entre a temperatura do revededor e o distúrbio na vazão de Cl ₂ líquido.....	36
4.3.3 Obtenção das funções de transferência dos componentes da malha de controle.....	38
4.4 PROPOSTA DE ESTRATÉGIA DE CONTROLE.....	40

CAPÍTULO 5 – SIMULAÇÃO EM MALHA FECHADA.....	41
5.1 ANÁLISE DE ESTABILIDADE EM MALHA FECHADA.....	41
5.2 SINTONIA PELO MÉTODO DE SÍNTESE DIRETA.....	43
5.3 SINTONIA PELO MÉTODO IMC.....	46
5.4 SINTONIA PELO MÉTODO DO CICLO CONTÍNUO.....	51
5.5 RESUMO DAS SIMULAÇÕES DINÂMICAS.....	55
CAPÍTULO 6 – CONCLUSÕES.....	56
CAPÍTULO 7 – SUGESTÕES PARA TRABALHO FUTUROS.....	63
CAPÍTULO 8 – REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	64

ÍNDICE DE FIGURAS

- Figura 1 – Sistema acoplado reator/coluna com pesados no topo.
- Figura 2 – Sistema acoplado reator/coluna com leves no topo.
- Figura 3 – Produção de Cloro eletrolítico.
- Figura 4 – Sistema de purificação de Cloro.
- Figura 5 – Fluxograma do sistema de decomposição de NCl_3 .
- Figura 6 – Dados de planta para o nível de líquido do reator.
- Figura 7 – Dados de planta para a temperatura do reator.
- Figura 8 – Diagrama esquemático da malha de controle do refervedor.
- Figura 9 – Constante de velocidade de reação (h^{-1}) para decomposição da NCl_3 em função da temperatura.
- Figura 10 – Logaritmo de K_0 em função de $1/T$.
- Figura 11 – Temperatura do refervedor para uma perturbação degrau de 2,9Kg/h na vazão de vapor - Modelo.
- Figura 12 – Temperatura do refervedor para uma perturbação degrau de 252 Kg/h na vazão de cloro-Modelo.
- Figura 13 – Temperatura do refervedor para uma perturbação degrau de 2,9Kg/h na vazão de vapor-dados de planta.
- Figura 14 – Temperatura do refervedor para uma perturbação degrau de 1363,2Kg/h na vazão de cloro-dados de planta.
- Figura 15 – Temperaturas do refervedor obtidas através do modelo e teste de planta.
- Figura 16 – Temperatura obtida pelo modelo versus temperatura obtida valores de planta.
- Figura 17 – Comparação das respostas da temperatura para simulação e teste de planta.
- Figura 18 – Diagrama esquemático da malha de controle do refervedor.
- Figura 19 – Temperatura do refervedor para uma perturbação degrau de 2,9Kg/h na vazão de vapor - modelo.
- Figura 20 – Diagrama de bloco esquemático entrada e saída de vapor no processo.
- Figura 21 – Temperatura do refervedor para uma perturbação degrau de 2,9Kg/h na vazão de cloro - modelo.
- Figura 22 – Diagrama de bloco no ambiente Simulink™ para o sistema de controle.
- Figura 23 – Respostas Problema Servo para o controlador - Método da Síntese Direta.
- Figura 24 - Respostas Problema Regulatório para o controlador - Método da Síntese Direta.

Figura 25 – diagrama de bloco simplificado para feedback convencional e IMC.

Figura 26 – Respostas problema servo para o controlador - método IMC.

Figura 27 – Respostas problema regulatório para o controlador - método IMC.

Figura 28 - Determinação gráfica do último ganho e período último

Figura 29 – Respostas problema servo para o controlador-método Ciclo Contínuo.

Figura 30 – Respostas problema regulatório para o controlador-método ciclo contínuo.

Figura 31 – Respostas problema servo para os melhores parâmetros do controlador pelos três métodos de sintonia.

Figura 32 – Respostas problema regulatório para os melhores parâmetros do controlador pelos três métodos de sintonia.

Figura 33 – Respostas problema servo para os melhores parâmetros do controlador pelos dois métodos de sintonia.

Figura 34–Respostas problema regulatório para os melhores parâmetros do controlador pelos dois métodos de sintonia.

ÍNDICE DE TABELAS

- Tabela 1 – Valores da constante de velocidade de reação de degradação NCl_3 .
- Tabela 2 – Valores para $\frac{1}{T}(K^{-1})$ e $\ln k_0(h^{-1})$.
- Tabela 3 – Dados do estado estacionário obtidos do modelo Aspen PlusTM.
- Tabela 4 – Alternativas de emparelhamento das variáveis controlada e manipulada.
- Tabela 5 – Funções de transferência para o processo e distúrbio.
- Tabela 6 – Funções de transferência e ganhos do processo.
- Tabela 7 – Valores dos parâmetros para sintonia do controlador - síntese direta.
- Tabela 8 – Expressões dos parâmetros para sintonia do controlador - IMC.
- Tabela 9 – Valores dos parâmetros para sintonia do controlador- método IMC.
- Tabela 10 – Expressões para o ajuste de controlador pelo método do ciclo contínuo.
- Tabela 11 – Parâmetros do controlador pelo método do ciclo contínuo.
- Tabela 12 – Parâmetros do controlador obtidos pelos vários métodos de sintonia.
- Tabela 13 – Grade com resultados das estratégias de controle testadas.
- Tabela 14 – Valores dos melhores parâmetros do controlador pelos três métodos.

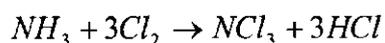
CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO

Este capítulo apresenta uma revisão bibliográfica introdutória sobre a influência de traços de impurezas em acidentes na indústria química e sobre sistemas acoplados (reator/coluna) usados para decomposição dessas impurezas, bem como os objetivos e motivação deste trabalho.

1.1 IMPUREZAS COMO CAUSAS DE ACIDENTES

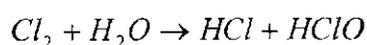
A influência de traços de impureza é freqüentemente mencionada como uma das causas de acidentes na indústria química. Em condições de processo (pressão, temperatura e composição) onde existe potencial para reação de decomposição rápida e exotérmica, a contaminação com traços de impurezas pode ocasionar acidentes graves. Exemplos clássicos dessa situação envolvem processos com compostos orgânicos nitrogenados e estocagem de monômeros reativos, e algumas reações químicas inorgânicas (Gustin, 2002).

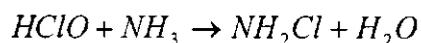
Outra situação frequentemente citada na literatura diz respeito à produção de Cl_2 eletrolítico (rota mais usada) a partir de solução aquosa de cloreto de sódio (NaCl) ou de cloreto de potássio (KCl). Devido à presença de amônia (NH_3) no sal, a NCl_3 , que é um composto extremamente instável e explosivo em determinadas condições de pressão e temperatura, mesmo em se tratando de concentrações baixas, estará presente no Cl_2 produzido, em função da reação química:



Registros de explosões em plantas de Cl_2 devido a altas concentrações de NCl_3 são relatados por Vogler (1963), Dokter (1985), Gustin (2005) e Gerrat (2002).

Desta forma, a eliminação da NH_3 antes da eletrólise se faz necessária e, normalmente, é realizada através da injeção de uma corrente de Cl_2 gasoso na corrente de salmoura enviada para as células eletrolíticas, o que proporciona a formação da monocloroamina (NH_2Cl), um composto volátil que se desprende do meio líquido com facilidade, de acordo com as reações:





Entretanto, mesmo a concentração de NH_3 presente no sal sendo muito baixa a sua eliminação não é completa, de forma que a salmoura enviada para a eletrólise ainda contém um residual, o que proporciona a formação da NCl_3 . A NCl_3 formada dentro da célula eletrolítica segue com a corrente de Cl_2 gasoso, torna-se uma impureza perigosa do Cl_2 líquido, visto que a evaporação posterior do Cl_2 líquido em vasos fechados irá concentrar a NCl_3 , formando meio explosivo. De acordo com o relatório GEST 76/55 (2001), 1 ppm de NH_3 na salmoura a ser eletrolisada é suficiente para resultar em mais de 50 ppm de NCl_3 no Cl_2 líquido, de modo que a recomendação é manter a concentração de NCl_3 em todas as partes da planta abaixo de 1000 ppm.

Considerando o aspecto de segurança, a decomposição da NCl_3 é uma etapa de fundamental importância na produção de Cl_2 eletrolítico, sob pena de explosão do conjunto, cujas conseqüências danosas às pessoas e patrimônio são óbvias. Nesse sentido, a decomposição térmica, usando como solvente o CCl_4 , é amplamente empregada nas indústrias de Cl_2 (GEST 76/55, 2001), principalmente pela simplicidade e custo da instalação, conforme a reação química abaixo:



Em se tratando de solvente, o mesmo deve ser miscível com a NCl_3 e com o Cl_2 , além de ser inerte devido à presença do Cl_2 . Nesse sentido, o CCl_4 é o mais indicado dos solventes, pois não corre o risco de sofrer cloração adicional, além de apresentar ponto de ebulição maior do que a NCl_3 . Por outro lado, de acordo com o Protocolo de Montreal (Montreal Protocol, 1997)¹, o CCl_4 deverá ter a comercialização banida até o ano de 2010, o que tem levado a indústria a procurar um substituto.

Devido à importância das reações envolvendo o Cl_2 a publicação das experiências é fundamental para a segurança das indústrias que produzem esse produto químico e, nesse ponto, a literatura consultada é muito vasta. Entretanto, observou-se a ausência de um

¹ Montreal Protocol, 1997 – acordo que estabelece data limite para comercialização e restrições para a utilização de um grupo de produtos químicos no qual o tetracloreto de carbono está incluso.

aprofundamento no entendimento do processo de decomposição da NCl_3 durante a produção de Cl_2 eletrolítico.

Este trabalho envolve o processo de decomposição térmica da NCl_3 na produção de Cl_2 , usando como estudo de caso a unidade Cloro-Soda da Braskem em Alagoas, cujo sistema é constituído por uma coluna e um reator, os quais estão acoplados.

1.2 SISTEMA ACOPLADO REATOR/COLUNA

Apesar de freqüentemente utilizado na indústria, o projeto no estado estacionário e o controle dinâmico de sistemas acoplados reator e coluna, são pouco compreendidos e têm sido relativamente pouco estudados na literatura, muito embora separadamente, haja vasta literatura (Chang K. Y and William L. Luyben., 1995).

Sistemas acoplados reator e coluna caracterizam um reator com uma coluna de destilação ou absorção, situada acima do reator, para remover componentes voláteis ou situada abaixo do reator, para remover componentes pesados. Esses sistemas oferecem inúmeras vantagens em relação à alternativa de instalá-los separadamente (aumento de rendimento e redução do custo de energia), especialmente quando são usados para reações reversíveis (Chang K. Y. and William L. Luyben., 1995). A explicação para esta afirmação é que, semelhantemente à destilação reativa, a contínua remoção dos produtos formados da mistura reagente para a coluna, reduz a velocidade da reação inversa. Na destilação reativa a reação química ocorre nas bandejas da coluna, enquanto nos sistemas acoplados reator/coluna, a reação química acontece só e somente só no reator.

A configuração apresentada na Figura 1 mostra um sistema acoplado reator/coluna no qual o produto da reação é mais pesado que a massa reacional e nesse caso, a coluna deve ficar localizada abaixo do reator.

Neste sistema existem algumas opções para se estabelecer a definição de quais variáveis podem ser escolhidas como variáveis manipuladas, distúrbios e controladas. Há que, inicialmente, se definir o grau de liberdade do sistema para realizar a escolha.

A configuração apresentada na Figura 2 mostra outra opção para o caso onde o produto da reação é mais volátil do que a massa reacional.

O sistema acoplado, objeto do presente trabalho, tem essa característica já que o N_2 e Cl_2 formados, a partir da degradação da NCl_3 , são mais voláteis que a massa reagente. Há ainda há uma vantagem na utilização das configurações apresentadas: facilidade de substituição de

catalisador, utilização de “hold up” elevado no reator, utilização do calor de reação em detrimento de utilização de fluido de aquecimento externo ao sistema (Chang K. Y. and William L. Luyben., 1995).

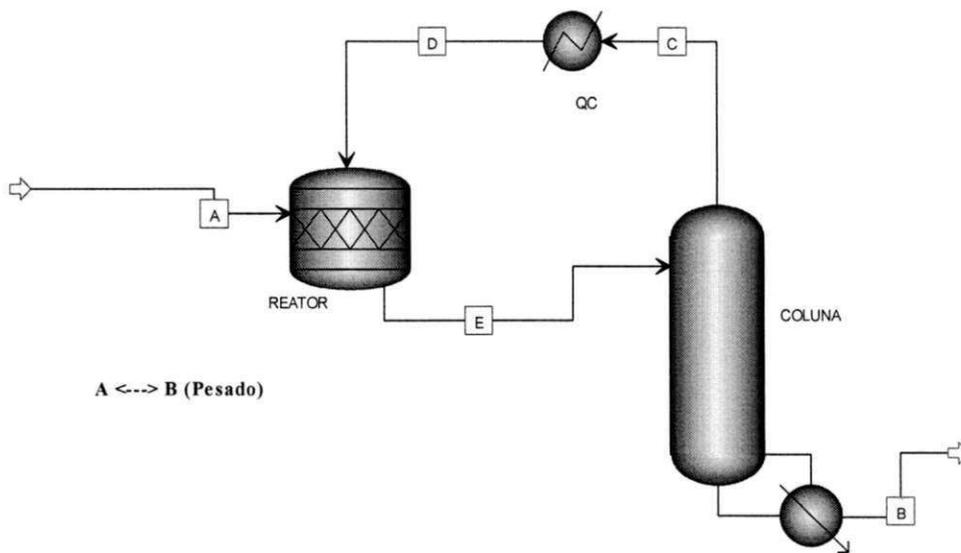


Figura 1 – Sistema acoplado reator/coluna com pesados no topo.

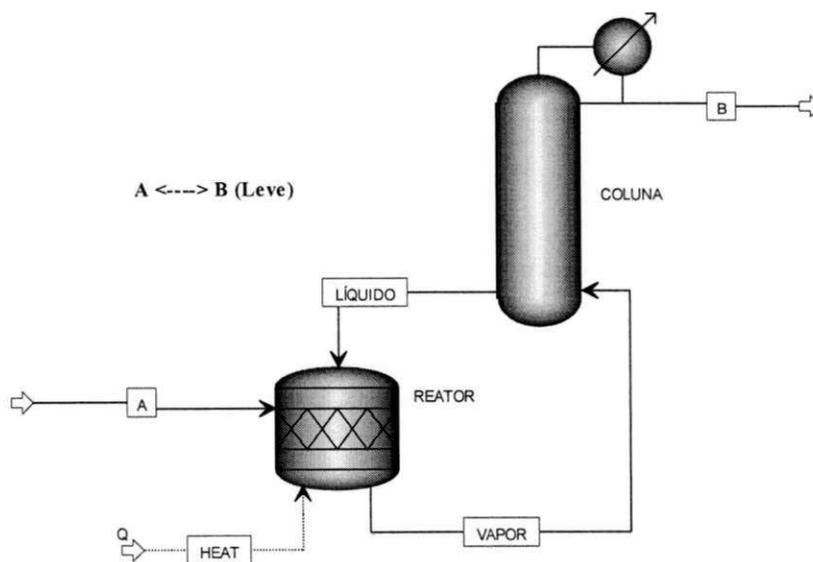


Figura 2 – Sistema acoplado reator/coluna com leves no topo.

A dinâmica de sistemas convencionais e integrados reator-coluna com reciclo, tem sido estudada por alguns pesquisadores (Gilliland et al., 1964; Veykios e Luyben, 1978; Kapoor

et al., 1986). Nos sistemas conforme mostrado na Figura 2, o vapor que alimenta a coluna é oriundo diretamente do reator; portanto o calor de reação pode ser usado como fonte de calor para vaporização do fundo da coluna, para os casos de reação exotérmica. O calor de reação tem efeito significativo no projeto e controlabilidade dos sistemas acoplados.

Para o sistema objeto de estudo deste trabalho, onde o calor de reação é pequeno, uma fonte adicional de calor é requerida no refeedor. No caso, vapor é injetado na camisa do refeedor. Observa-se a vantagem da utilização desse sistema, já que a degradação da NCl_3 é uma reação exotérmica, embora a concentração da NCl_3 seja extremamente baixa e, sendo a reação é de 1ª ordem, esse efeito é negligenciado.

1.3 OBJETIVO E MOTIVAÇÃO

O objetivo deste trabalho consiste em desenvolver e implementar uma estratégia de controle de processo utilizando as técnicas de controle clássico para o sistema refeedor (reator) e pré-resfriador (coluna) de Cl_2 instalado na Unidade de Cloro-Soda da Braskem em Alagoas. Apesar da presença do termo exponencial, decorrente da equação de Arrhenius na lei de velocidade, a não linearidade foi desprezada devido à baixa concentração do reagente que implica num desprezível calor gerado pela reação, quando comparado com o calor adicionado no refeedor. A realização desta meta está relacionada com os seguintes objetivos específicos:

- Reduzir a perda de tetracloreto de carbono (CCl_4) por evaporação devido elevada variabilidade da temperatura de operação do Refeedor de CCl_4 levando a temperatura do sistema próxima ao ponto de ebulição da massa reagente;
- Melhorar o controle da reação química de degradação de NCl_3 no interior do Refeedor de CCl_4 pela redução de variabilidade da temperatura, evitando assim descartes emergenciais do inventário do refeedor de CCl_4 devido altas concentrações de NCl_3 ;
- Tornar mais segura a operação do sistema em questão já que concentração elevada de NCl_3 (superior a 10.000 ppm) pode provocar uma explosão do CCl_4 .

Para o desenvolvimento deste trabalho, foi necessário o desenvolvimento de um modelo dinâmico rigoroso, através do simulador comercial AspenTM(PlusTM e DynamicsTM) e a

abordagem das técnicas de controle clássico foi preferida, devido à possibilidade de implementação no SDCD² existente na planta industrial.

² SDCD – Sistema Digital de Controle Distribuído

CAPÍTULO 2 – CARACTERIZAÇÃO DO PROBLEMA

Neste capítulo é descrito o processo de produção no qual o sistema objeto deste trabalho está inserido. Dados de operação da planta são apresentados bem como, caracteriza-se o problema detalhadamente e, os objetivos do sistema de controle são preliminarmente estabelecidos.

2.1 PROCESSAMENTO INDUSTRIAL DO CLORO

O processo industrial de produção de Cl_2 pela tecnologia originalmente da Hooker Chemical Corporation, atualmente adquirida pela Eltech System Corporation, consiste das etapas descritas brevemente abaixo, e mostradas nas Figuras 3 e 4.

A salmoura purificada (ácida) e aquecida previamente, é alimentada às células eletrolíticas, onde por ação da corrente elétrica se processa a eletrólise do Hidróxido de Sódio (NaCl), com a conseqüente formação de Cl_2 , Hidróxido Sódio (NaOH) e Hidrogênio (H_2).

O Cl_2 gás proveniente das células requer de um tratamento especial, pois, a corrente gasosa apresenta temperatura elevada, contendo algumas impurezas que necessitam ser eliminadas para que se possa viabilizar técnica e economicamente sua industrialização e posterior comercialização.

Inicialmente a corrente gasosa acima citada é resfriada em duas etapas em série, nas quais o vapor de água presente é condensado e parcialmente eliminado. A primeira etapa é realizada por contato indireto em um trocador de calor, resfriado com água da torre de resfriamento enquanto a segunda etapa de resfriamento, será também por contato indireto em um trocador de calor que neste caso, usa água gelada como líquido refrigerante.

Após o resfriamento, o Cl_2 passa por um filtro com elementos de lã de vidro, no qual partículas sólidas, principalmente sais arrastados das células, são retidas.

Todos os vapores de água condensados no primeiro e segundo estágios e filtro fluem para o vaso de água clorada do qual é enviada através de bombeamento, à cloração de salmoura, área de decloração e cloração da água da torre de resfriamento. Em seguida, o Cl_2 é conduzido ao sistema de secagem, após ter perdido durante o resfriamento, 99% da água originalmente arrastada das células. Este sistema é composto de quatro torres de secagem, que operam em série, com concentrações crescentes de ácido sulfúrico, cujo contato com o Cl_2 , através do

recheio promovido por células cerâmicas intalox, remove o restante de água contida no mesmo.

O Cl_2 passa agora para a área de compressão, onde é resfriado em uma torre, por contato direto com Cl_2 líquido. Daí é comprimido até $2,5 \text{ kg/cm}^2$ e $115 \text{ }^\circ\text{C}$; sendo então, novamente resfriado e comprimido até $7,5 \text{ kg/cm}^2$ e $115 \text{ }^\circ\text{C}$, fluindo para a liquefação, como indicado na Figura 4.

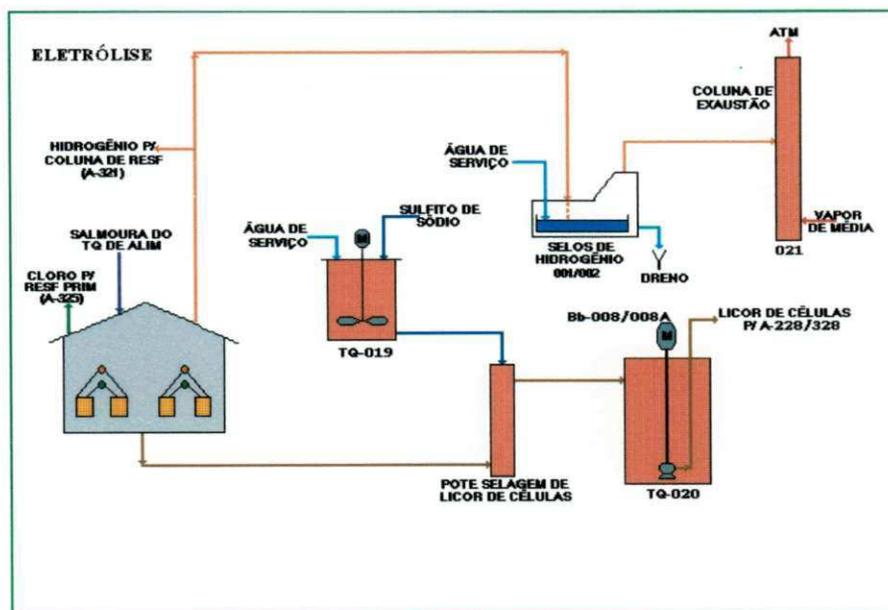


Figura 3 – Produção de cloro eletrolítico.

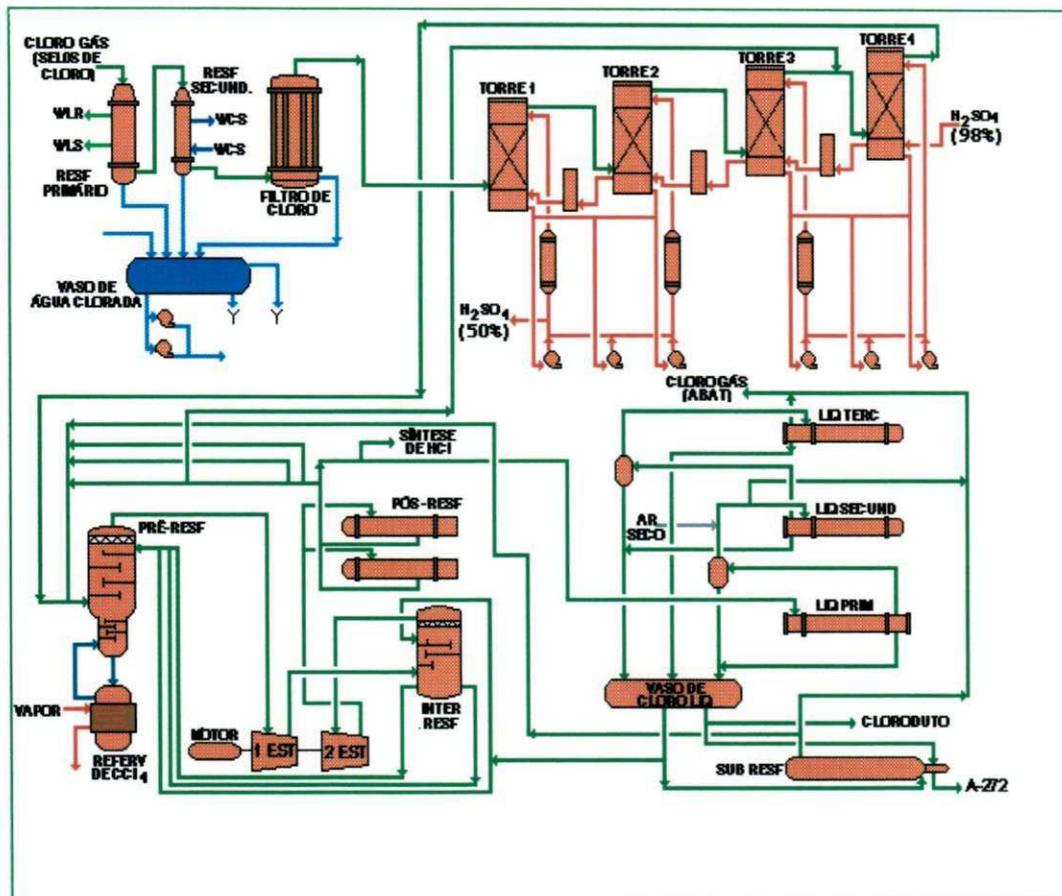


Figura 4 – Sistema de purificação de cloro.

Antes da liquefação, o Cl_2 é resfriado até $35\text{ }^\circ\text{C}$ por um trocador de calor que utiliza água da torre de resfriamento como fluido refrigerante, indo em seguida para os liquefadores primário, secundário e terciário. O Cl_2 liquefeito flui para um tanque pulmão, do qual é enviado ao sistema de sub-resfriamento, estocagem e/ou diretamente à produção de dicloroetano.

Os gases não condensáveis são encaminhados às unidades de abatimento do cloro e/ou fabricação de hipoclorito (HClO), situadas na área 225³.

2.2 SISTEMA DE DEGRADAÇÃO: REATOR/COLUNA

Do ponto de vista de Operações Unitárias, o sistema de decomposição pode ser entendido como uma destilação reativa sem condensador de topo e sem retirada de base, com a reação

³ área 225 – denominação da parte da planta na qual ocorre o processamento do cloro produzido na eletrólise.

de decomposição ocorrendo no refeedor (reator). A Figura 5 mostra o esquema usado pela Braskem.

O Cl_2 gasoso (Cl_2 -GAS), produzido nas células eletrolíticas e contaminado com a NCl_3 alimenta a coluna (pré-resfriador de cloro), abaixo da quarta bandeja enquanto Cl_2 líquido (Cl_2 -LIQ) a uma temperatura aproximada de $-36\text{ }^\circ\text{C}$ é introduzido como um refluxo externo na parte superior. O Cl_2 gasoso, juntamente com os vapores proveniente do refeedor, é então lavado pelo Cl_2 líquido, o qual além de remover a NCl_3 da fase gasosa, resfria o Cl_2 gasoso até $-36\text{ }^\circ\text{C}$, adequando-o as condições exigidas na etapa de compressão. A NCl_3 condensa e se dissolve no Cl_2 líquido, seguindo para o refeedor.

O líquido do holdup do reator é constituído basicamente de CCl_4 (mais de 97 %), que tem como finalidade extrair a NCl_3 do Cl_2 líquido e evitar altas concentrações de NCl_3 . Ou seja, o CCl_4 tem como objetivo tornar a decomposição um processo seguro, funcionando como um agente (inerte) de extração e de diluição. Em função da composição do holdup do reator, o CCl_4 é o principal componente da corrente RECY.

Vapor de água circulando pela jaqueta do refeedor é a fonte de calor utilizada para aquecer e vaporizar o líquido do holdup. Atualmente, a alimentação de vapor é especificada através da malha de instrumentação do tipo controle por realimentação.

Na presença do CCl_4 e com a temperatura do refeedor em torno dos $55\text{ }^\circ\text{C}$, uma taxa de decomposição da ordem de $12,5\text{ g/h}$ de NCl_3 por kg de CCl_4 é alcançada. Temperaturas superiores a $70\text{ }^\circ\text{C}$ devem ser evitadas, devido ao risco de explosão, resultante do aumento na concentração da NCl_3 . Para valores de temperatura inferior a $40\text{ }^\circ\text{C}$ a decomposição da NCl_3 é lenta, o que também poderá motivar altas concentrações de NCl_3 no refeedor (Gerrat, 2002).

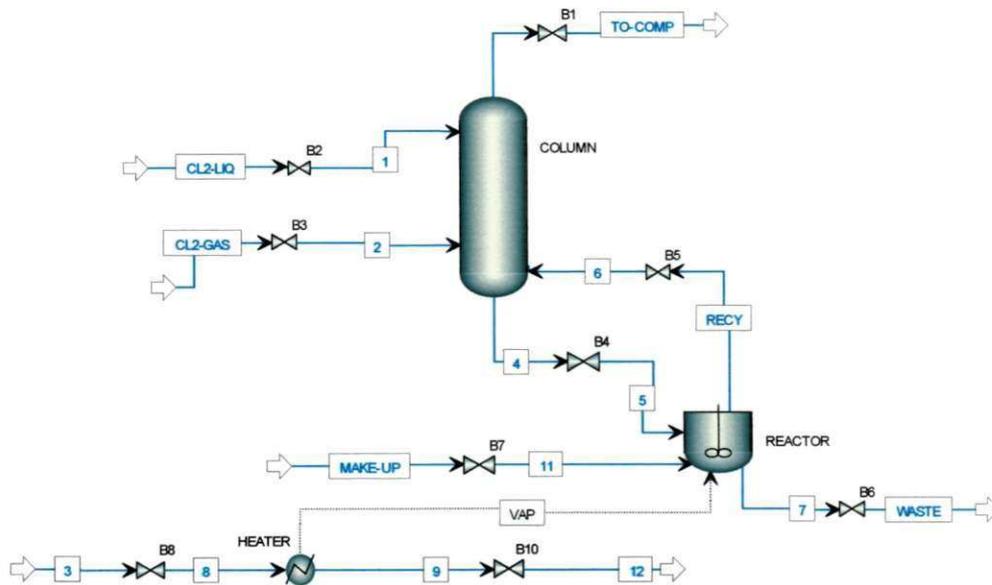


Figura 5 – Fluxograma do sistema de decomposição de NCl_3 .

Atualmente, CCl_4 é continuamente perdido por arraste pelo topo do pré-resfriador de cloro, o que provoca um abaixamento lento e contínuo do nível do refervedor. A corrente reposição é usada esporadicamente para repor o CCl_4 perdido. Dessa forma, o nível no refervedor oscila devido à perda e pela reposição de CCl_4 , conforme pode ser observado na Figura 6. No caso da Braskem, a reposição de CCl_4 é realizada semanalmente e é um ponto relevante, visto que a comercialização desse composto será suspensa, em decorrência do Protocolo de Montreal (Montreal Protocol, 1997), do qual o Brasil é signatário. Dessa forma, o modelo desenvolvido também poderá ser utilizado na adequação do possível substituto para o CCl_4 que provavelmente será o $CHCl_3$.

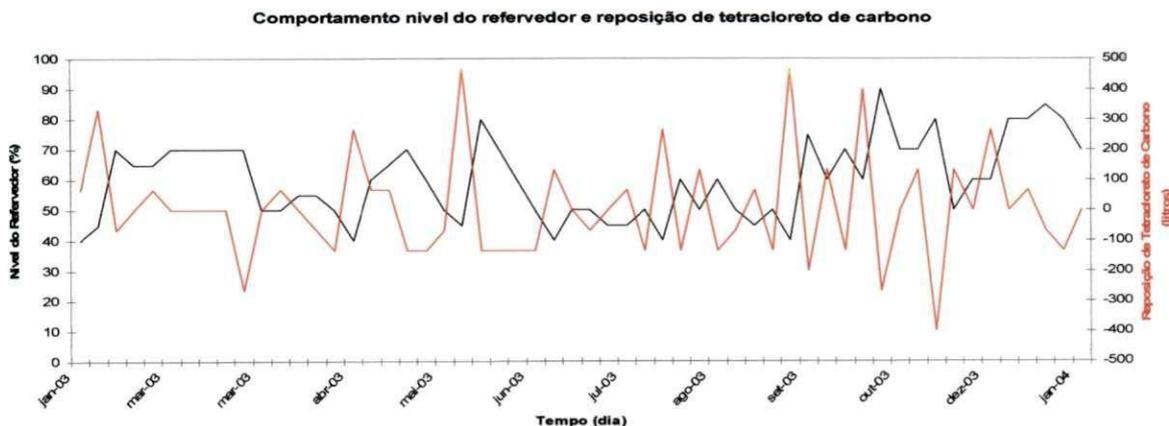


Figura 6 – Dados de planta para o nível de líquido do reator.

A Figura 6 foi gerada a partir de valores de planta, registrados em planilha de leitura preenchida pelos operadores de processo. Valores de reposição inferiores a zero indicam quantos litros houve de perda entre uma leitura e outra enquanto valores de reposição superiores a zero indicam quantos litros de solvente foram repostos no refervedor.

A corrente WASTE é usada nas operações de descarte do holdup. Ou seja, em paradas do sistema ou renovação do solvente.

Outro problema fundamental relacionado com o sistema apresentado na Figura 5, além da perda de solvente, é a instabilidade da temperatura do reator de decomposição, conforme os dados extraídos da planta e apresentados na Figura 7. Vale salientar que a temperatura do reator de decomposição influencia diretamente na perda de solvente pelo topo da coluna.

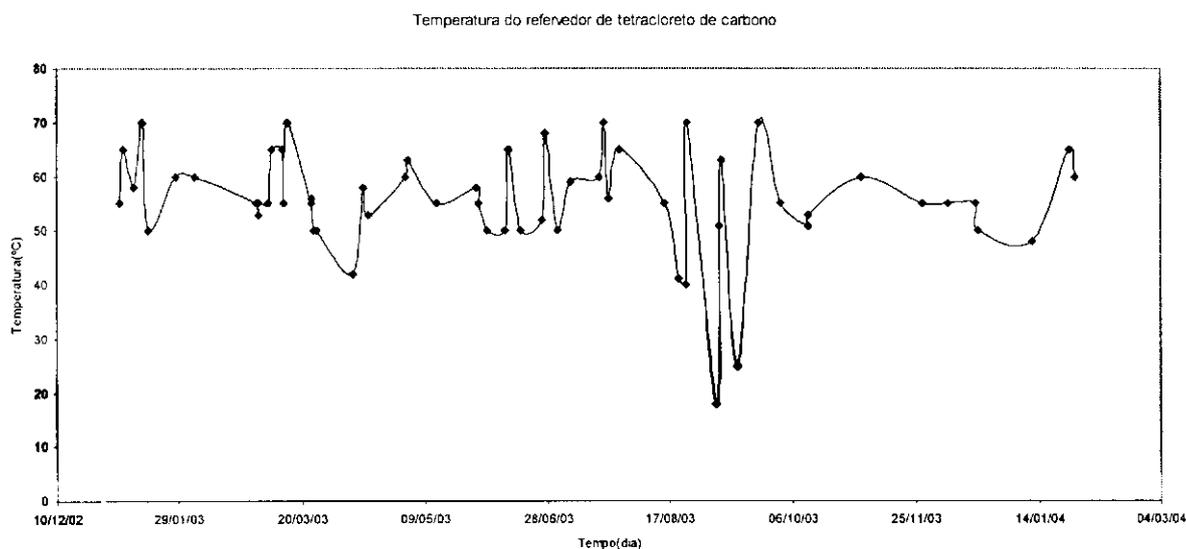


Figura 7 – Dados de planta para a temperatura do reator.

2.3 MALHA DE CONTROLE E RESTRIÇÕES DO SISTEMA

O controle da temperatura de operação do refervedor de tetracloreto de carbono é realizado pela injeção de vapor na camisa do refervedor cujo fluxo de vapor é controlado por uma malha de controle do tipo feedback. A temperatura no topo do refervedor é medida através do TE 225081 cujo sinal é enviado ao controlador de temperatura TIC225081 que compara o valor com o ponto de ajuste desejado e o erro gerado é transformado num sinal que modula a vazão de vapor através da válvula de vapor, TV22581, conforme mostra a Figura 8.

A observação do comportamento do refervedor (reator) demonstra que existe uma grande variabilidade na temperatura de operação deste equipamento. Restrições de operação do

compressor de Cl_2 que exige uma temperatura de sucção constante. Esse fato impossibilita que o operador mantenha uma vazão constante de Cl_2 líquido para o pré-resfriador e, desta forma, essa corrente provoca variação na temperatura do refeedor de tetracloreto de carbono, decorrente da variação da vazão de Cl_2 líquido para o pré-resfriador, de acordo com o gráfico mostrado na Figura 7.

Em função da variação de temperatura acima explicada, observa-se que o nível de tetracloreto de carbono no refeedor apresenta uma queda gradativa devido a perdas por arraste, observada no topo do pré-resfriador. A perda de solvente ocorre por arraste no topo do pré-resfriador devido a grande variabilidade na vazão de Cl_2 para esse equipamento que permite valores de temperatura superior a 70°C . Acredita-se que em vazão menores de Cl_2 líquido não é possível a formação do nível de líquido nas bandejas do pré-resfriador e assim o solvente é perdido pelo topo do pré-resfriador. Este fato é confirmado pela presença do tetracloreto de carbono na corrente de Cl_2 produzida.

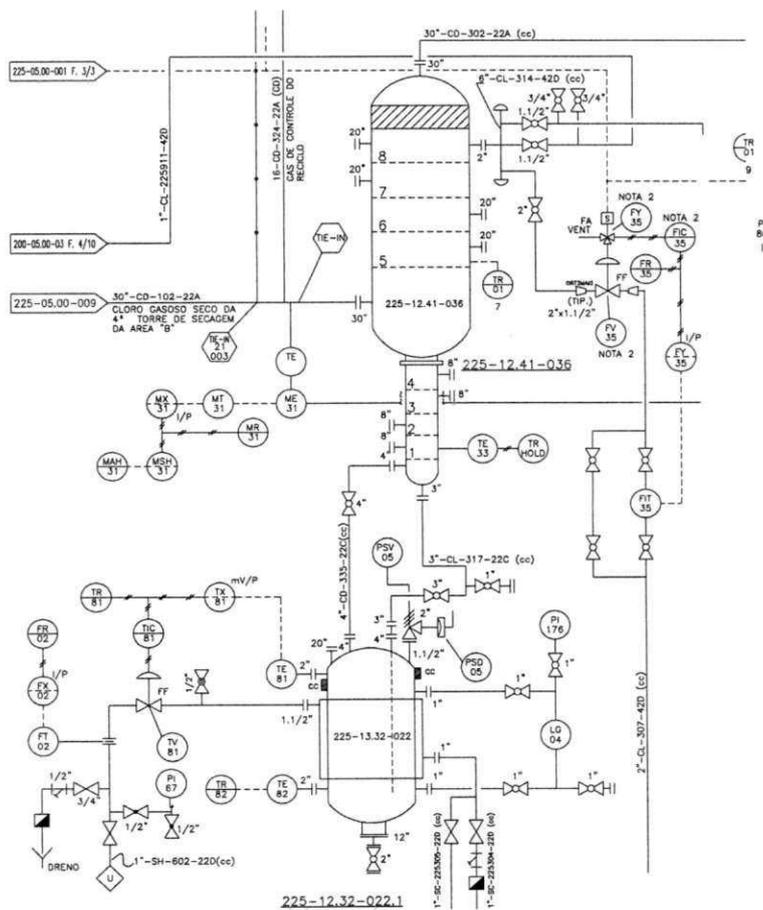


Figura 8 – Diagrama esquemático da malha de controle do refeedor.

2.4 OBJETIVOS DO SISTEMA DE CONTROLE

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

- Assegurar a degradação da NCl_3 limitando seu valor máximo em 1.000ppm no refervedor de tetracloreto de carbono, através da manutenção da temperatura de operação do refervedor entre 55°C e 60°C ;
- Minimizar a perda de tetracloreto de carbono por arraste, ocasionado pela operação do refervedor em temperaturas elevadas e próximas ao ponto de ebulição do tetracloreto de carbono;
- Reduzir a variabilidade da temperatura de operação do refervedor promovendo assim maior estabilidade do sistema de compressão de Cl_2 .

Neste trabalho será priorizada uma estratégia de controle que seja simples e de fácil implementação na planta. Ainda será um objetivo do presente trabalho, uma estratégia de controle que possibilite uma redução da variabilidade da temperatura de operação do refervedor de tetracloreto de carbono.

De acordo com a operação atual da planta, a vazão de Cl_2 líquido para o pré-resfriador não é uma variável a ser utilizada para controlar a temperatura do refervedor. Esta afirmação deve-se ao fato de que essa corrente é manipulada manualmente para controlar a temperatura de descarga do compressor de Cl_2 . Esse distúrbio, ao refervedor, é mantido dentro de um intervalo de operação que atende as restrições de operação do compressor de Cl_2 e, cuja intensidade deve ser considerada na estratégia de controle da temperatura do refervedor.

Outro aspecto relevante na operação da planta refere-se a corrente de alimentação do pré-resfriador de Cl_2 que consiste no somatório da recirculação do compressor de Cl_2 , gás da descarga do sub-resfriador de Cl_2 e a corrente referente a produção da planta. Essa corrente principal tem a característica de permanecer com pouca variabilidade durante a maior parte do processo, razão pela qual não interfere significativamente na temperatura do refervedor. Assim, preliminarmente identifica-se que a temperatura do refervedor deva ser controlada através da corrente de vapor para a camisa do refervedor, tendo como distúrbio, a injeção de Cl_2 líquido para o pré-resfriador de Cl_2 .

CAPÍTULO 3 – MODELAGEM DO PROCESSO

Este capítulo se inicia com uma breve definição sobre modelagem matemática. A seguir, é apresentada a cinética da degradação da NCl_3 . O objetivo de consubstanciar a obtenção do modelo do processo: estacionário e dinâmico.

Ainda nesse capítulo se faz a adequação do modelo dinâmico aos propósitos do trabalho, através da obtenção de um modelo empírico obtido através de teste de planta. Considerações e justificativas sobre as simplificações utilizadas na obtenção do modelo serão explicitadas ao longo capítulo.

3.1 MODELAGEM MATEMÁTICA

Todo modelo é uma construção imaginária que incorpora apenas as características que se supõe importantes para a descrição do sistema físico em questão, características estas selecionadas intuitivamente ou por conveniência matemática. A validação de um modelo é determinada pela experimentação.

Pode-se também definir um processo como o conjunto de equipamentos interligados associados a procedimentos operacionais para produzir um (ou mais) produto(s) a partir de matérias-primas.

Todo processo normalmente é modelado através de suas variáveis que são usadas para definir o estado do processo, em cada instante (comportamento dinâmico).

A modelagem de processos pode ser realizada de duas formas: a partir das leis fundamentais da física e química (modelagem fenomenológica), e a partir da informação contida nas variáveis de processo, registradas ao longo do tempo (modelagem empírica ou identificação de processos).

Quando se utilizam as equações de balanço (massa, energia e momento), a partir das leis que regem os fenômenos físicos e químicos envolvidos no processo, obtém-se o conhecido modelo fenomenológico.

Quando são utilizadas equações empíricas (um conjunto de equações algébrico - diferenciais, em princípio sem relação com as equações de balanço), gerando um modelo cuja estrutura (número e tipo de equações) e parâmetros são obtidos a partir de dados experimentais, por correlação ou ajuste, obtém-se o denominado modelo empírico, metodologia conhecida como identificação de processos.

Uma vez determinado o modelo do processo, a resolução numérica das equações permite determinar os valores que as variáveis de saída deverão adotar em diferentes condições de operação (variáveis de entrada). Este procedimento é chamado de simulação de processos.

Neste trabalho o processo será modelado utilizando-se as duas opções acima citadas com o objetivo de buscar um modelo que melhor represente o processo em estudo.

Para os objetivos de controle de processo, a grande maioria dos processos industriais são representados por funções de transferência que os aproximam a sistemas de primeira ordem, segunda ordem, sistemas integradores com ou sem tempo morto.

3.2 CINÉTICA DA REAÇÃO DE DEGRADAÇÃO

No refeedor foi necessário conhecer a cinética da reação de decomposição da NCl_3 em presença do CCl_4 . Na literatura consultada, vários artigos trazem a cinética de decomposição da NCl_3 ; entretanto, a maioria trata da decomposição em meio aquoso ou da própria formação da espécie (Rubtsov., 1998; Leung and Valentine., 1994; Kumar et al., 1987). Apenas nos relatórios do Chlorine Institute, (Vogler., 1963) e do Euro Chlor (Gerrat., 2001), encontrou-se a cinética da decomposição da NCl_3 em presença de CCl_4 . De acordo com essas publicações, a decomposição é de 1ª ordem e a taxa da reação é expressa pela seguinte equação:

$$r = -Kx$$

Onde x é fração mássica de NCl_3 .

No Aspen Plus™, a implementação da cinética de reações é realizada através da equação de Arrhenius:

$$K = K_0 e^{-\frac{Ea}{RT}}$$

Onde K_0 é a constante pré-exponencial, Ea a energia de ativação da reação, R a constante universal dos gases e T a temperatura do meio reacional. Desta forma, foi necessária a determinação da constante K_0 e da Ea .

O relatório do Euro Chlor (2001)⁴ também disponibiliza os dados da constante K em função de T , conforme mostra a Figura 9, os quais foram usados para determinação de K_0 e Ea .

⁴ Euro Chlor – Instituto europeu que congrega fabricantes e detentores de tecnologia de produção de cloro, soda e seus derivados.

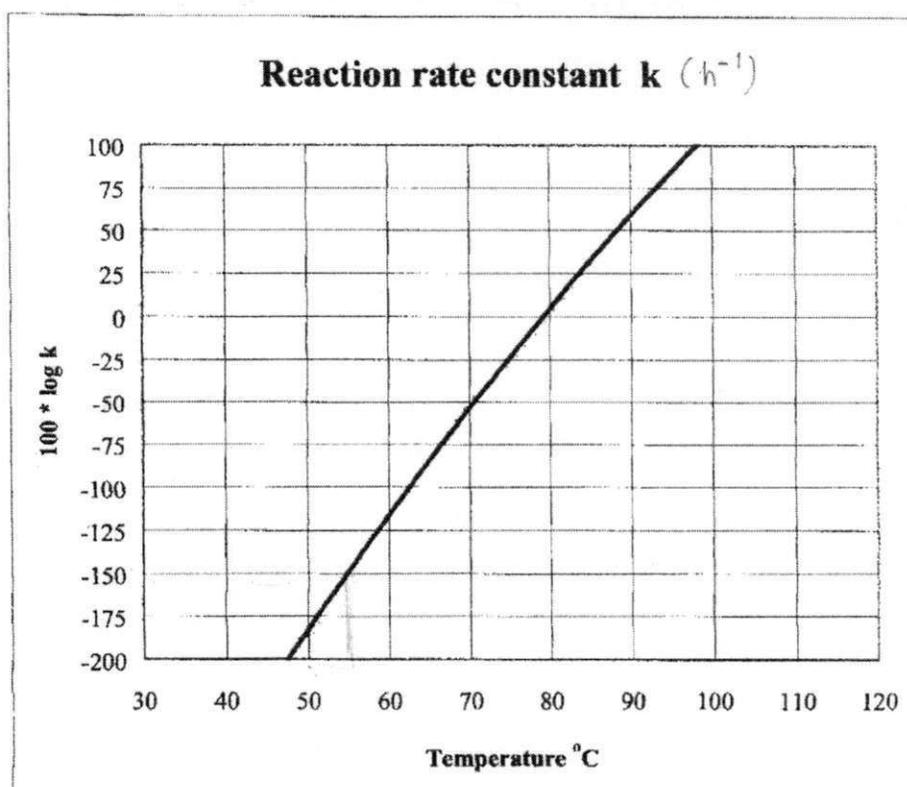


Figura 9 – Constante de velocidade de reação (h^{-1}) para decomposição da NCl_3 em função da temperatura.

Inicialmente, com a ajuda do programa DIGITIZE, coletou-se 20 pontos do gráfico da Figura 9, de acordo com a Tabela 1. Para sabermos os valores K_0 e da E_a reorganizou-se a

equação $k = k_0 * e^{-\frac{E}{R*T}}$ da seguinte forma:

$$\ln k = \ln k_0 - \frac{E}{R} * \frac{1}{T}$$

Sabendo que uma reta é dada por $y = a * x + b$, então:

$$y = \ln k, x = \frac{1}{T}, a = -\frac{E}{R}, b = \ln k_0$$

Construiu-se a Tabela 2 em termos de $\ln k_0 (h^{-1})$ e $\frac{1}{T} (K^{-1})$. Em seguida plotou-se gráfico de $\ln k_0$ vs $\frac{1}{T}$, o qual está mostrado na Figura 10.

Tabela 1 – Valores da constante de velocidade de reação de degradação NCl_3 .

	T(°C)	100 * log $k(h^{-1})$
1	53,334	-160,37
2	56,862	-135,32
3	59,992	-117,11
4	65,472	-84,100
5	70,563	-51,084
6	72,909	-38,567
7	74,477	-27,180
8	76,041	-19,215
9	79,169	-2,1441
10	81,515	10,374
11	83,861	22,891
12	84,256	27,449
13	86,598	37,686
14	87,776	46,796
15	89,727	54,756
16	91,292	63,862
17	92,855	71,827
18	94,417	78,651
19	96,761	90,028
20	98,328	100,27

Com o auxílio do programa LABIFIT fez-se um ajuste de curvas para determinação dos parâmetros **a** e **b**:

$$a = -0,1606129688845E + 05 \text{ e } b = 0,46000040857E + 02$$

Dessa forma,

$$b = \ln k_0$$

$$k_0 = e^b$$

$$k_0 = 5,884793048 * 10^{19} h^{-1}$$

e

$$a = -\frac{E}{R}$$

$$E = 1,335336223 * 10^5 J / mol$$

Estes valores foram necessários para iniciar as simulações.

Tabela 2 – Valores para $\frac{1}{T}(K^{-1})$ e $\ln k_0(h^{-1})$.

	$\frac{1}{T}(K^{-1})$	$\ln k_0(h^{-1})$
1	0,003064345	-3,692655714
2	0,003031571	-3,115858148
3	0,003003075	-2,696557402
4	0,002954454	-1,936474063
5	0,002910674	-1,176252569
6	0,002890934	-0,888037993
7	0,002877888	-0,625842628
8	0,002863943	-0,442441726
9	0,002839546	-0,049369727
10	0,002820755	0,238870178
11	0,002802212	0,527084754
12	0,002799113	0,632036582
13	0,002780883	0,867752218
14	0,002771803	1,07751772
15	0,002756894	1,260803494
16	0,002745051	1,470476892
17	0,002733323	1,653877795
18	0,002721703	1,811006201
19	0,00270445	2,072971308
20	0,002693037	2,308802073

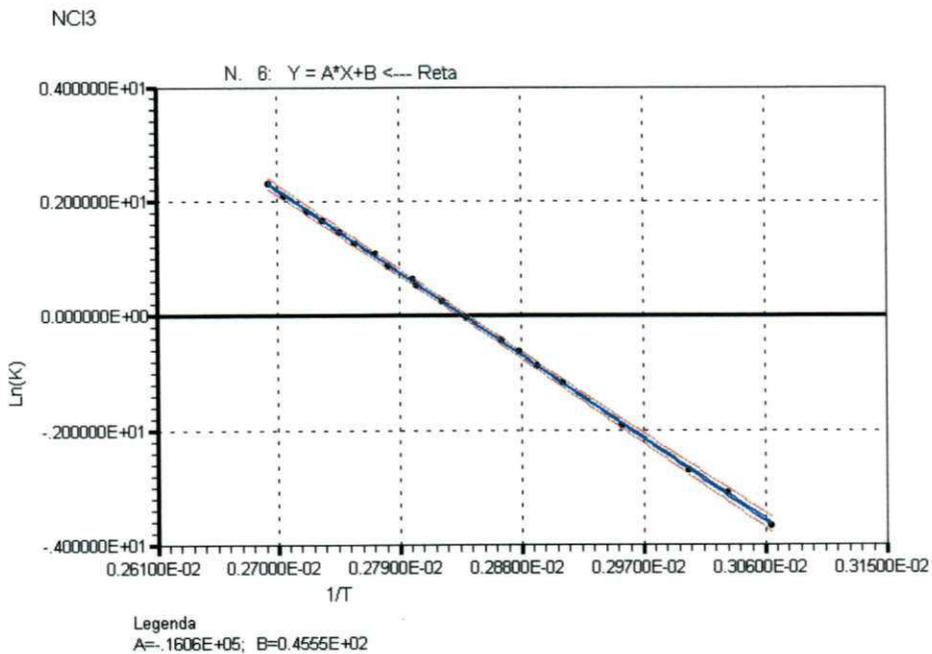


Figura 10 – logaritmo de K_0 em função de $1/T$.

3.3 MODELO EM ASPEN™

As simulações podem ser estacionárias e dinâmicas:

- Simulação estacionária – faz referência a sistemas que estão em regime permanente, ou seja, aquelas onde as variáveis são independentes do tempo;
- Simulação dinâmica – representação de sistemas que variam no tempo, ou seja, são usadas equações diferenciais ordinárias no tempo ou parciais no tempo e espaço.

No estado estacionário o sistema foi implementado usando o simulador Aspen Plus™ e os resultados obtidos foram usados como valor inicial para as simulações dinâmicas, as quais foram realizadas com auxílio do simulador Aspen Dynamics™.

O pré-resfriador foi simulado como uma coluna de pratos, usando a rotina interna RadFrac do Aspen Plus™. A equação de estado de Peng-Robinson foi usada para representar a Termodinâmica do processo: equilíbrio entre as fases (ELV) e propriedades. Os dados de projeto dessa coluna são: 08 estágios (1º ao 4º estágio com 1.0 m de diâmetro; 5º ao 8º estágio com 0.5 m de diâmetro) e eficiência de Murphee igual a 70 %.

A rotina interna RCSTR do Aspen Plus™ foi usada para simular o refeedor como um reator do tipo mistura perfeita (CSTR), com as seguintes características: diâmetro de 1.4 m e altura de 2.0 m. A troca térmica com o meio ambiente e a capacitância do reator foram levadas em consideração. A decisão de simular o reator industrial como sendo um CSTR justifica-se pelo alto grau de agitação dentro do equipamento.

Com objetivo de tornar a simulação mais próxima da realidade a vazão de vapor de água, foi conectada a um trocador de calor, não existente no processo, mas cuja carga térmica total foi transferida para o refeedor. Assim foi possível, como ocorre na planta, especificar a saída do fluido de aquecimento como líquido saturado.

O fluxograma do processo, incluindo a coluna, o reator, as correntes e as válvulas, foi montado conforme a Figura 5. Os dados de vazão e composição das correntes de Cl_2 gás e Cl_2 líquido foram os mesmos usados na planta. No caso da corrente de vapor de água para a jaqueta do refeedor, a princípio, a vazão foi fixada igual àquela usada na planta. Entretanto, a simulação estacionária apresentou grande dificuldade para alcançar a convergência, a qual somente foi alcançada para valores de vazão de vapor de água abaixo daquele observado na planta. O resultado foi uma temperatura do reator bem abaixo do valor da planta. Optou-se por usar esse resultado como valor inicial para a simulação dinâmica.

Os problemas de convergência da simulação estacionária podem ter duas possíveis causas: a primeira é forte interação entre a coluna e o reator devido a existência de reciclo; e a segunda é a perda de solvente (CCl_4) pelo topo do pré-resfriador. Provavelmente a segunda causa seja a mais importante, visto que para a real temperatura de operação do reator, existe uma perda de solvente o que resulta no não fechamento dos balanços de massa e energia do sistema. Acredita-se que por essa razão, a convergência somente foi alcançada para valores de temperatura do reator muito baixa, quando a perda de solvente não é observada.

Os resultados obtidos para o estado estacionário foram exportados para o simulador Aspen Dynamics™. As condições observadas na planta, principalmente a temperatura do reator, foram alcançadas através da manipulação das válvulas de controle apresentadas na Figura 5, deixando-se que o processo avançasse no tempo através da integração das equações diferenciais.

Os dados do estado estacionário estão indicados na página seguinte, na Tabela 3, e foram obtidos assumindo como entradas, os valores atuais da operação da planta.

Tabela 3 – Dados do estado estacionário obtidos do modelo Aspen Plus™.

Corrente	CL2-GAS	CL2-LIQ	TO-COMP	4	RECY	3	12
Destino	B3	B2		B4	B5	B8	
Origem			B1	COLUNA	REATOR		B10
Fase	VAPOR	LIQUIDO	VAPOR	LIQUIDO	VAPOR	VAPOR	MIXED
Fluxo mássico (Kg/hr)							
CL ₂	40000	6300	46251,15	1007,632	958,7868	0	0
H ₂	0	0	0	0	0	0	0
O ₂	0	0	0	0	0	0	0
N ₂	0	0	0	0	0	0	0
NCL ₃	0	0	0	0	0	0	0
CCL ₄	0	0	0,000898	0,79287	0,793764	0	0
ÁGUA	0	0	0	0	0	130	130
Fração Mássica							
CL ₂	1	1	1	0,999214	0,999173	0	0
H ₂	0	0	0	0	0	0	0
O ₂	0	0	0	0	0	0	0
N ₂	0	0	0	0	0	0	0
NCL ₃	0	0	0	0	0	0	0
CCL ₄	0	0	1,94E-08	0,000786	0,000827	0	0
ÁGUA	0	0	0	0	0	1	1
Fluxo Total (kmol/hr)	564,1319	88,85078	652,2938	14,2161	13,52722	7,216097	7,216097
Fluxo Total (kg/hr)	40000	6300	46251,16	1008,425	959,5805	130	130
Fluxo Total (cum/hr)	11153,25	4,365995	14650,53	0,647561	190,6096	62,03413	2,1445
Temperatura (°C)	30	10	-34,7283	-32,5549	-23,8508	144	131,6803
Pressão (kgf/sqcm)	1,3	8	0,9	1,1	1,5	4,114058	2,891351
Fração de Vapor	1	0	1	0	1	1	0,0233572
Fração de Líquido	0	1	0	1	0	0	0,9766427

Conforme citado anteriormente, a condição observada na planta foi alcançada através da manipulação de válvulas de controle. Quando a temperatura do refeedor atingiu o valor observado na planta, 52 °C, a concentração de NCl₃ no holdup era de 160 ppm, enquanto na planta, esse valor apresenta valor médio igual a 150 ppm. As vazões de Cl₂ gás e Cl₂ líquido eram aquelas observadas na planta, bem como a concentração de NCl₃ na alimentação de Cl₂ gás. No caso da coluna, foi validada apenas a temperatura de topo, em torno de -36 °C, que é a temperatura de ebulição do Cl₂ naquela pressão. Nessa condição operacional, sem nenhum distúrbio, a perda de CCl₄ é de aproximadamente 1,5 kg/h, motivo pelo qual o nível do refeedor diminui.

A perda de solvente, que no caso da Braskem é diretamente proporcional à temperatura de operação do refeedor, faz com que o processo não atinja o estado estacionário. Ou seja, à medida que a temperatura de operação do refeedor aumentar, o processo se afastará mais ainda da condição estacionária. Para que o estado estacionário fosse alcançado seriam necessários mais estágios no pré-resfriador, o que implica em uma modificação de projeto.

Com a substituição do solvente atual (CCl_4), a perda será maior ou menor, dependendo do ponto de ebulição do novo solvente, cujo candidato mais provável é o clorofórmio CHCl_3 . Apesar de apresentar características semelhantes às do CCl_4 , o CHCl_3 apresenta menor ponto de ebulição, de modo que a perda de solvente será maior. Estudos preliminares usando o CHCl_3 em substituição ao CCl_4 , mostram que, para o patamar atual de temperatura do reator de decomposição, a perda de solvente será o dobro da que é observada hoje. Os resultados obtidos para a operação com o CHCl_3 e a comparação com o atual sistema usando CCl_4 não serão apresentados neste trabalho.

A Figura 11 apresenta o comportamento da temperatura do refervedor mediante uma perturbação em degrau em malha aberta de 2,9 Kg/h aplicada na vazão de vapor para o refervedor, duas horas após o estado estacionário estabelecido.

Sistemas integradores ou capacitivos são freqüentes em processos que apresentam reciclo, observa-se que o sistema não atinge um estado estacionário, característica de um sistema integrador. Observa-se também que a curva apresenta um coeficiente de correlação e 99,31% em relação à equação de uma reta.

Na Figura 12 apresenta-se o comportamento da temperatura do refervedor mediante uma perturbação em degrau de 252Kg/h, em malha aberta, aplicada na vazão de Cl_2 líquido para o pré-resfriador refervedor.

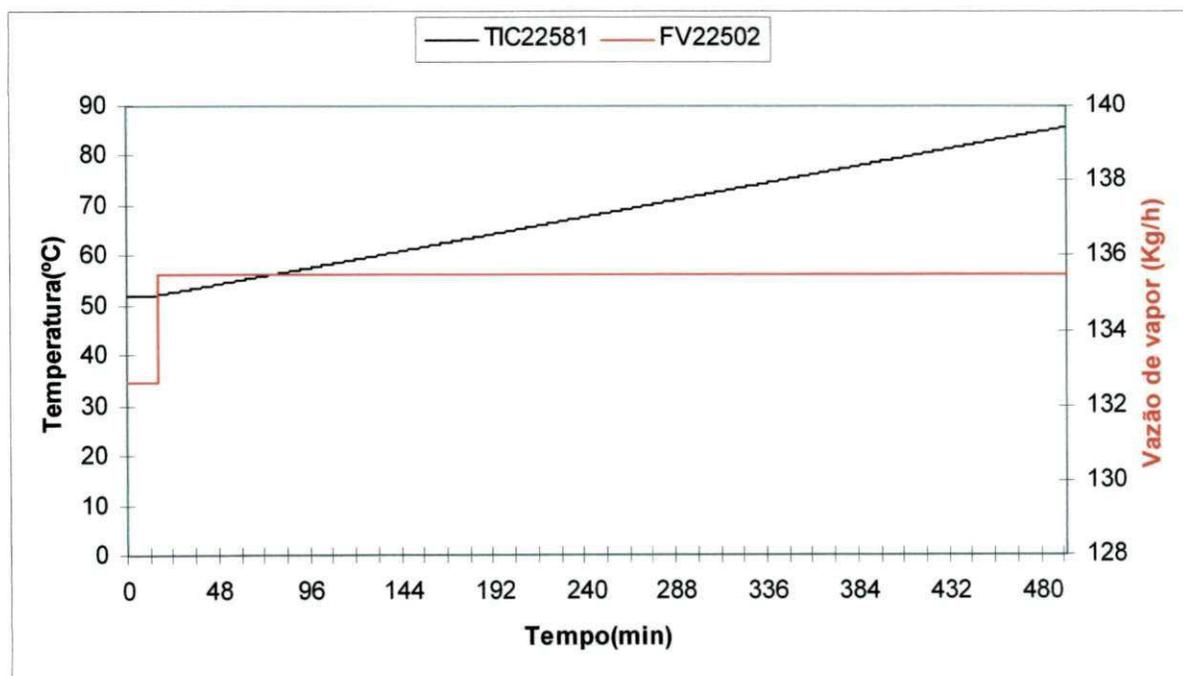


Figura 11 – Temperatura do refervedor para uma perturbação degrau de 2,9Kg/h na vazão de vapor - Modelo.

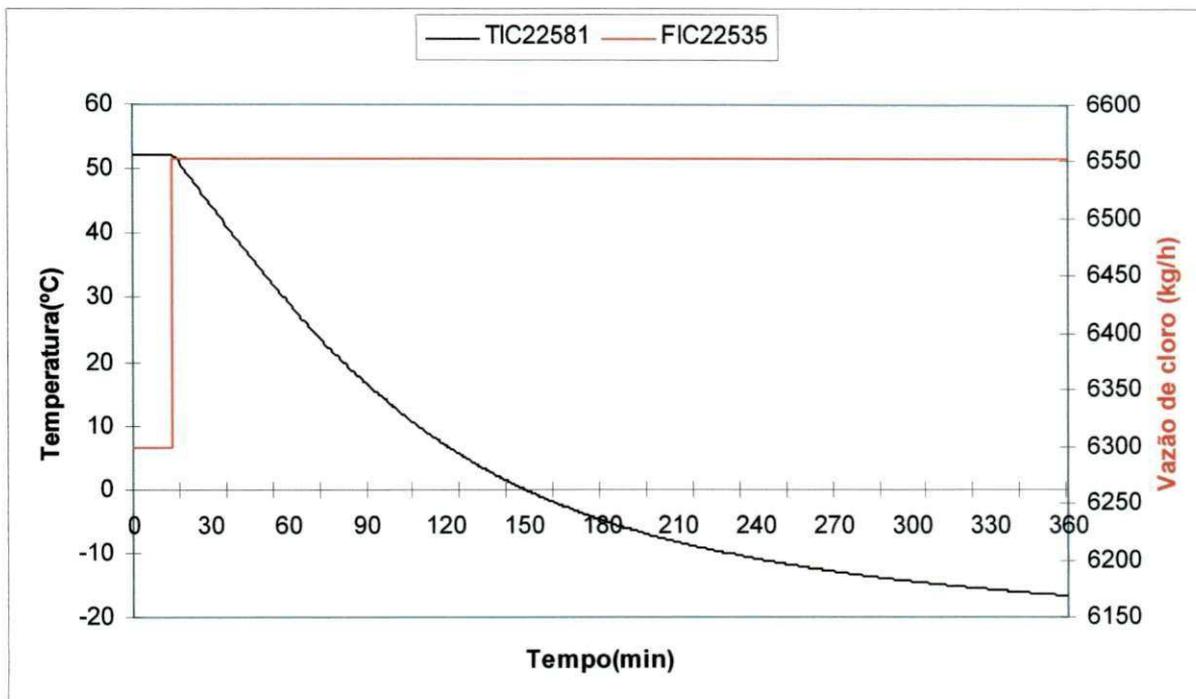


Figura 12 – Temperatura do refervedor para uma perturbação degrau de 252 Kg/h na vazão de cloro-Modelo.

3.4 VALIDAÇÃO DO MODELO EM ASPEN™

Modelos dinâmicos empíricos são normalmente utilizados para identificação de sistemas com comportamento desconhecidos e/ou de difícil modelagem matemática. No presente trabalho, a modelagem dinâmica empírica foi utilizada para validação do modelo teórico, baseada na simulação realizada no simulador comercial Aspen Dynamics™.

Para desenvolver o modelo dinâmico empírico, um teste de planta foi realizado, permitindo-se dessa forma gerar informações que pudessem ser comparadas com os dados obtidos pelo simulador comercial Aspen Dynamics™.

Existem diversos métodos para a determinação de modelos empíricos estacionários e dinâmicos, entre eles pode-se citar: regressão linear, regressão não linear, aproximação gráfica, etc.. No presente trabalho utilizou-se o método da aproximação gráfica, através da perturbação em degrau.

As respostas de um processo a uma perturbação em degrau na alimentação ou curva de reação do processo, estão colocadas em gráficos, obtidos a partir dos dados gerados no teste de planta descrito a seguir.

Para evitar desperdício de tempo das pessoas, somente iniciou-se o teste quando a planta estava operando em condições de normalidade. Toda instrumentação foi corretamente calibrada e testada. O manuseio do cronômetro foi checado pela pessoa que registrou o tempo de coleta de amostra. A pressão de vapor para o refulvedor foi mantida constante durante todo o teste.

O teste foi realizado de acordo com o seguinte procedimento:

- Foi estabelecida uma abertura para as válvulas de vapor (TV-22581) e Cl₂ líquido para o pré-resfriador (FV-22535), na posição manual que manteve a temperatura do refulvedor e entre 45 - 50°C;
- A ação acima necessitou que as demais variáveis de processo envolvendo o sistema de compressão, fossem também mantidas constantes. Assim, a pressão de liquefação, carga da planta, temperatura de descarga dos dois estágios de compressão permaneceram invariáveis durante o teste;
- Como referência, sugeriu-se que a pressão da liquefação fosse mantida em 7,3 Kgf/cm² e a temperatura de descarga do primeiro estágio do compressor de Cl₂, fosse mantida em 112 °C, que são os valores de estado estacionário do sistema de compressão que contém o subsistema em estudo;
- Iniciou-se a coleta de dados apenas quando a planta estava operando em regime estacionário;
- O teste foi iniciado registrando-se quatro tomadas dos dados durante vinte minutos, sem que nenhuma perturbação ou variação fosse observada no processo;
- É importante ressaltar que as quatro leituras das variáveis de processo foram iguais. Para o sucesso do teste, essa etapa foi rigorosamente seguida;
- Prosseguiu-se com o teste, promovendo uma perturbação no sistema pelo incremento de 10% no percentual de abertura da TV-22581, a qual encontrava-se com 65% de abertura;
- Continuou-se com a coleta de dados de temperatura do refulvedor de tetracloreto de carbono em intervalo de dois minutos;
- Não se observou a tendência de estabilização da temperatura e, definiu-se o prosseguimento do teste;
- Retornou-se a abertura do TV-22581 para o valor inicial do teste; o sistema retornou para a condição registrada nas quatro primeiras leituras;

Promoveu-se nova perturbação no sistema, desta vez, reduzindo a abertura da FIC-22504 em 3% deixando-a em 17%.

- Prosseguiu-se com a coleta de dados de temperatura do refeedor de tetracloreto de carbono, também a intervalos de dois minutos até o novo estado estacionário ser atingido;
- Identificou-se também que inexistia estado estacionário conforme já assinalado anteriormente;
- Concluiu-se o teste e colocou-se a planta em condições normais de operação.

As principais condições operacionais da planta antes das perturbações são apresentadas na Tabela 3, na qual se indicam apenas os últimos valores do estado estacionário antes de se iniciar os distúrbios.

A abertura da válvula FV-22502, de 65 para 75 %, representou um aumento de 5,8 % na vazão de vapor para o refeedor, enquanto a abertura da válvula FIC-22504, de 14 para 17 %, representou um aumento de 21,5 % na vazão de Cl_2 líquido para o pré-resfriador.

O comportamento da temperatura do refeedor de tetracloreto de carbono frente ao distúrbio de 2,9Kg/h em malha aberta, provocado na vazão de vapor no teste de planta, é a seguir apresentada na Figura 13.

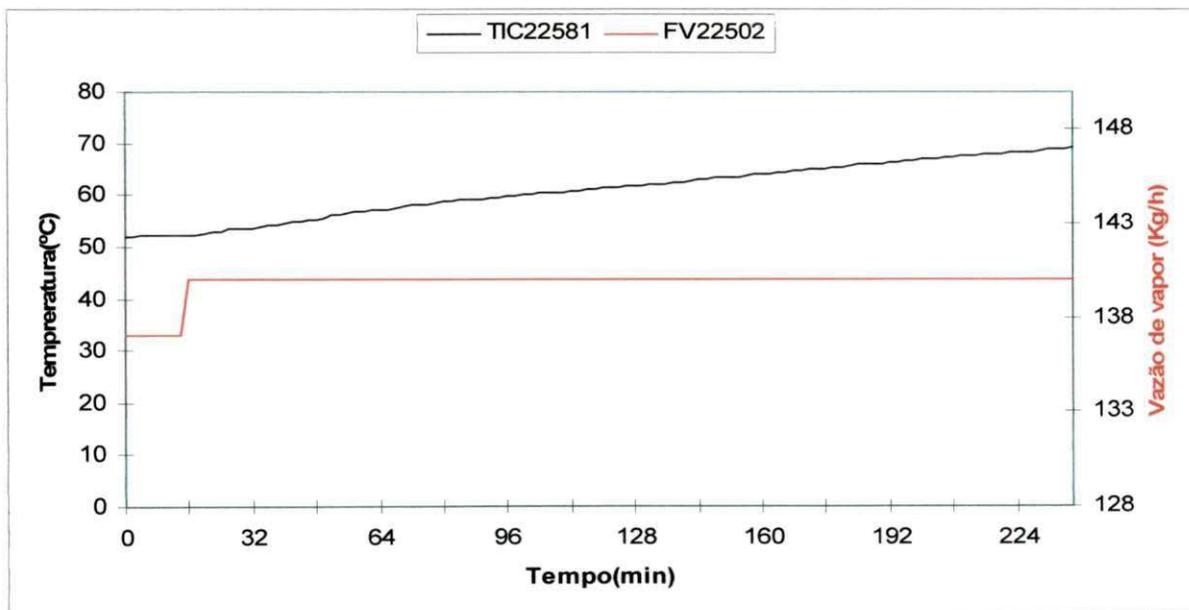


Figura 13 – Temperatura do refeedor para uma perturbação degrau de 2,9Kg/h na vazão de vapor-dados de planta.

Observa-se que o comportamento da curva, uma reta, é similar ao resultado obtido na simulação equivalente utilizando-se o modelo desenvolvido no Aspen Dynamics™ com um coeficiente de correlação de 99,28%.

A seguir, apresenta-se na Figura 14 o resultado do teste de planta frente a um distúrbio positivo em malha aberta de 1.363,2 Kg/h na vazão de Cl₂ líquido.

Observa-se que o comportamento da curva, é similar ao resultado obtido na simulação equivalente utilizando-se o modelo desenvolvido no Aspen Dynamics™ e aproxima-se de um comportamento semelhante a uma função de transferência de primeira ordem.

Salienta-se que a discrepância observada nas curvas referentes a curva teórica e aquela obtida no teste de planta, pode ser explicada devido ao fato do modelo não considerar alguns fatores que influenciam a realidade, tais como ruídos, variabilidade e tempo morto que sempre os sistemas reais apresentam.

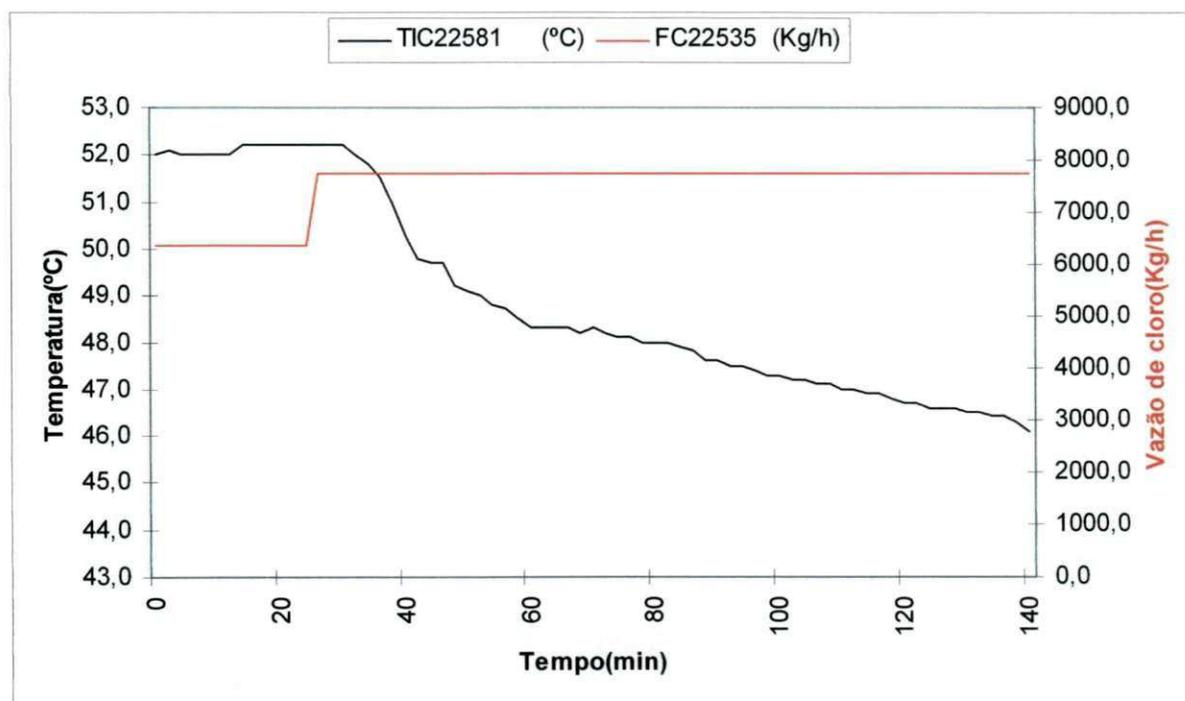


Figura 14 – Temperatura do refeedor para uma perturbação degrau de 1363,2Kg/h na vazão de cloro-dado de planta.

A análise dos dados de planta, e os apresentados no modelo, mostram uma concordância bastante elevada, conforme o gráfico apresentado na Figura 15 no qual a temperatura obtida através do modelo e a temperatura obtida através do teste de planta são apresentadas, quando da aplicação de um degrau na vazão de vapor.

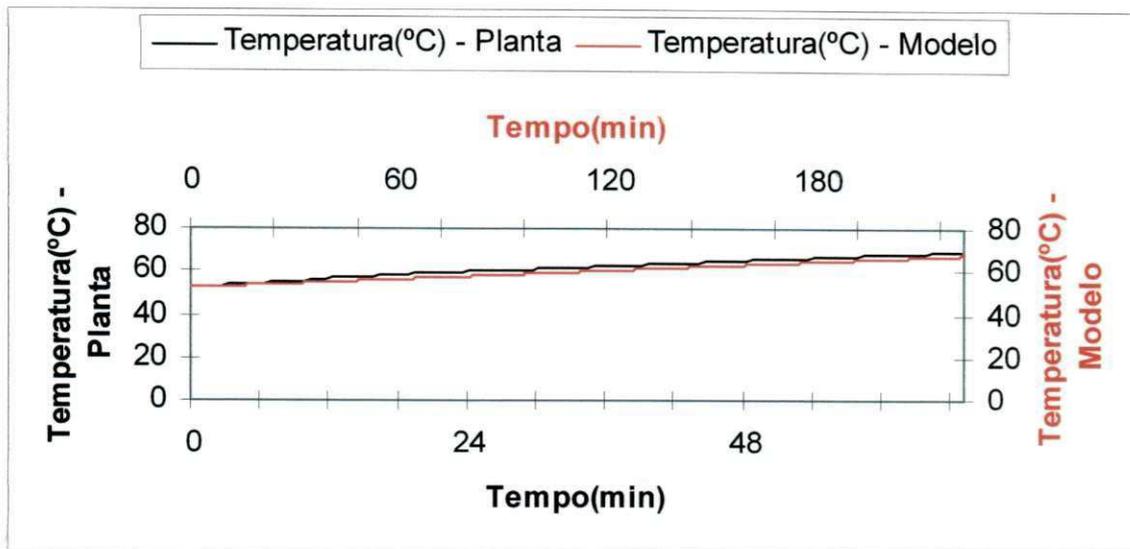


Figura 15 – Temperaturas do reator obtidas através do modelo e teste de planta.

Na Figura 16 mostra-se o comportamento da temperatura obtida através do modelo contra a temperatura obtida através do teste planta para o mesmo distúrbio provocado na vazão de vapor, de 2,9 kg/h.

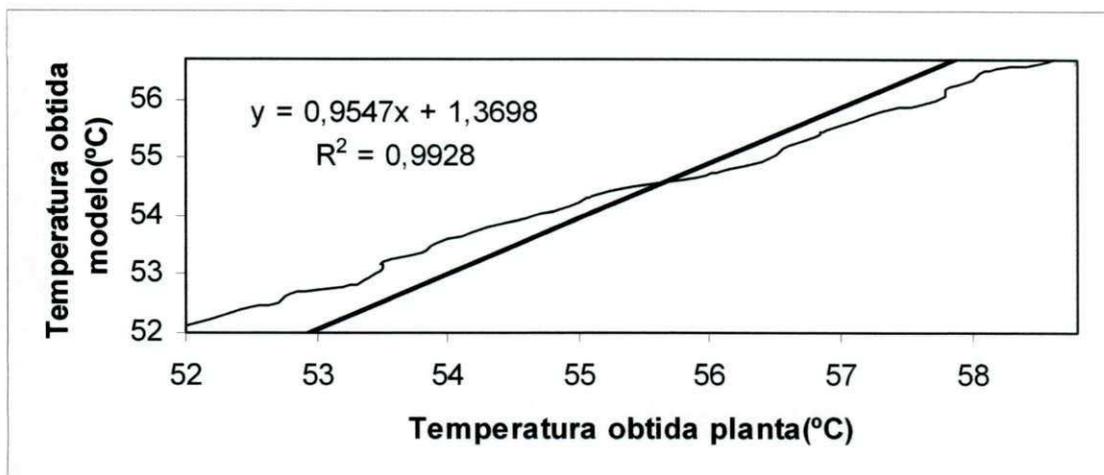


Figura 16 – Temperatura obtida pelo modelo versus temperatura obtida valores de planta.

Observa-se na Figura 16 acima que a linearidade entre as duas variáveis posta em gráfico, com um coeficiente de correlação de 99,28% , indica que o modelo representa de forma adequada o processo. Nota-se que a inclinação da curva é de 43,5 graus e não o valor de 45. Atribui-se essa pequena divergência, pelo fato do modelo não considerar ruídos e tempos mortos, presentes nos dados de planta. Se o teste prosseguisse, a temperatura atingiria o ponto

de ebulição do CCl_4 na pressão de operação do reator o que provocaria o completo esvaziamento do reator.

A seguir, comparação análoga entre o modelo e o teste de planta será feita para o distúrbio provocado na vazão de Cl_2 líquido para o refeedor. Observa-se na Figura 17 abaixo o comportamento da temperatura do refeedor, obtido pelo modelo e pelo teste de planta, quando um distúrbio na vazão de cloro líquido de 252 kg/h foi aplicado no modelo e, 1363,2 kg/h aplicado no teste de planta.

Considerando que os valores obtidos no teste de planta estão sujeitos a influências não consideradas no modelo, tais como ruído, tempo morto e eventuais erros de leituras e calibração, pode-se concluir que o modelo representa o processo para os fins que se propõe esse trabalho.

Pode-se observar que a causa principal da oscilação no valor da temperatura do reator é a manipulação da vazão de vapor para atender as exigências do compressor de Cl_2 . Observa-se também que o modelo desenvolvido pode ser utilizado para prever as diversas condições operacionais encontradas na planta.

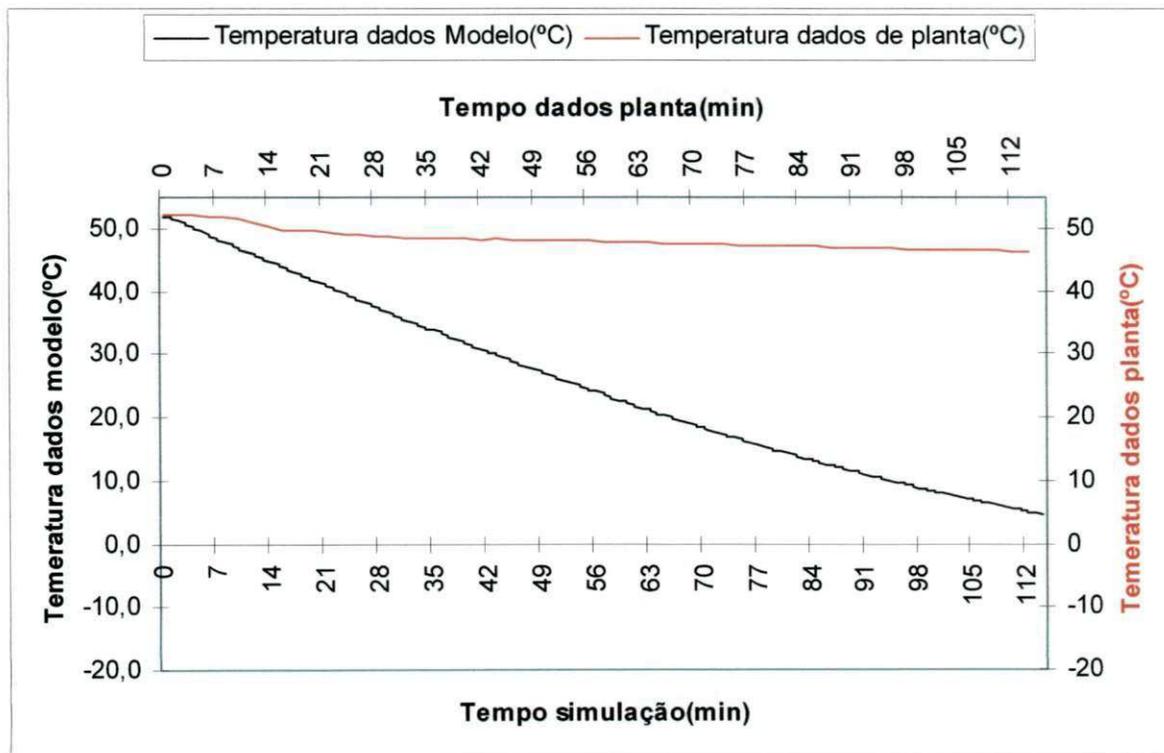


Figura 17 – Comparação das respostas da temperatura pela simulação e teste de planta.

CAPÍTULO 4 – DESENVOLVIMENTO DO SISTEMA DE CONTROLE

A seleção das variáveis manipuladas e controladas é apresentada neste capítulo, iniciando-se pelo estudo de controlabilidade, através da revisão bibliográfica das estruturas de controle mais frequentemente encontradas em sistemas acoplados reator/coluna. Em seguida, os objetivos do sistema de controle são reafirmados, seguidos da obtenção das funções de transferências do processo bem como, uma proposta para a estratégia de controle.

4.1 ESTUDO DE CONTROLABILIDADE

A principal variável a ser controlada é a temperatura de operação do refervedor de tetracloreto de carbono. A análise de controlabilidade deve ser iniciada pelo julgamento de engenharia (Luyben, 1990). Neste trabalho, o julgamento de engenharia foi baseado principalmente no conhecimento e experiência que se tem da planta, que se encontra em operação há 28 anos.

4.1.1 Definição das variáveis controladas e manipuladas

O julgamento de engenharia toma por base o entendimento, o conhecimento e a experiência existente sobre o sistema em estudo ou outros sistemas similares.

A análise do fluxograma do processo indicado na Figura 18 sugere, para definição das variáveis manipuladas e controladas, as opções indicadas na Tabela 4.

Tabela 4 – Alternativas de emparelhamento das variáveis controlada e manipulada.

Variáveis Controladas (CV)	Vaiáveis manipuladas (MV)
Nível do refervedor	Vazão de Cl ₂ líquido para a coluna
Pressão do refervedor	Vazão de vapor para o refervedor
Pressão da coluna	Vazão de Cl ₂ gás para a coluna
Temperatura do refervedor	Vazão de Cl ₂ gasoso do reciclo do compressor
Concentração de NCl ₃ no refervedor	Vazão de Cl ₂ gasoso do subresfriador de Cl ₂

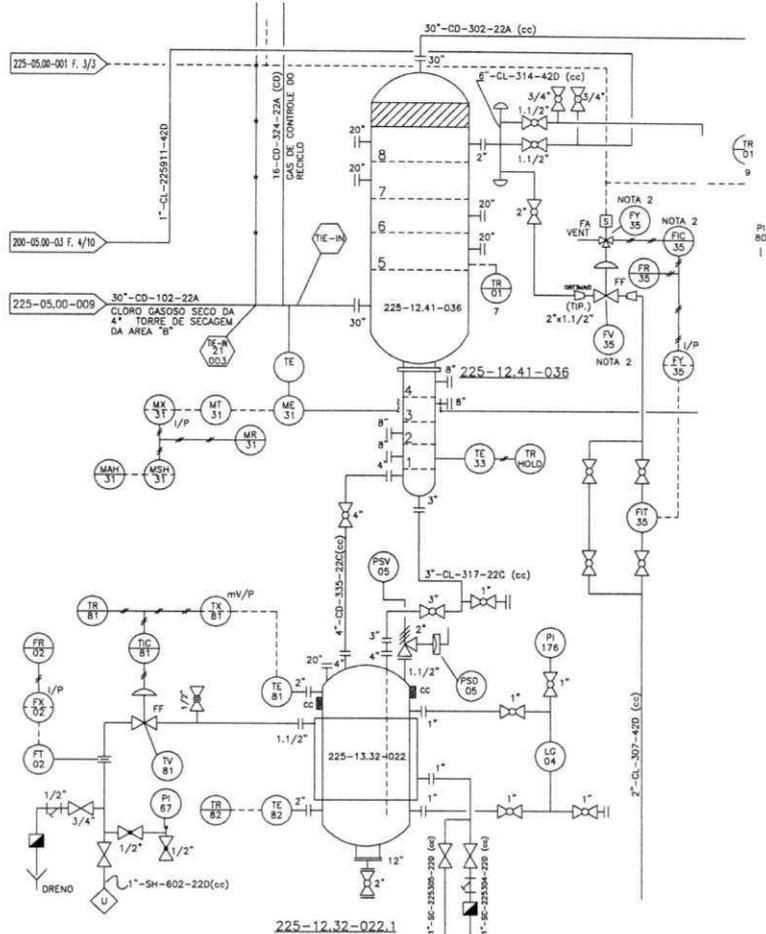


Figura 18 – Diagrama esquemático da malha de controle do refeedor.

Em projeto de reatores CSTR normalmente a temperatura de reação é uma variável controlada, isso se faz, através da manipulação do fluido de aquecimento ou resfriamento utilizado na camisa do reator. Alternativamente se pode controlar a temperatura de reação através da manipulação da vazão de alimentação do(s) reagente(s).

Para projetos de colunas de absorção são inúmeras as alternativas opções de seleção de variáveis a controlar e manipular. Para sistemas acoplados reator/coluna há proposição para setenta possíveis estruturas de controle (Price., and Georgakis., 1993).

O julgamento de engenharia no sistema em estudo indica que a concentração de NCl_3 , não pode ser uma variável controlada, já que não é possível medi-la através de analisador e, o tempo de análise laboratorial é superior a seis horas. Segundo William L. Luyben (1992), em algumas colunas onde mudanças bruscas na pressão são pouco prováveis, a pressão é deixada

flutuar de forma a ser a menor possível e reduzir o consumo energético, ou seja, nessas colunas não há controle de pressão. No caso do sistema em estudo, a pressão da coluna é indiretamente mantida, através de uma estrutura de controle do reciclo de Cl_2 gasoso para a coluna com o objetivo de manter constante a pressão de sucção do compressor de Cl_2 . Assim tanto a pressão da coluna quanto o reciclo de gases não são adequados para seleção de variáveis controladas ou manipuladas.

Ainda em relação a seleção das variáveis controladas, observa-se que a pressão do refervedor é automaticamente definida pela pressão de operação da coluna de absorção, já que o fluxo de líquido que alimenta o refervedor é realizado por gravidade, e assim, a pressão de refervedor não pode ser controlada.

O nível do refervedor é mantido manualmente através de reposição periódica de tetracloreto de carbono com a finalidade de garantir a diluição da NCl_3 , evitando-se assim risco de explosão da planta por elevada concentração da mesma no interior do equipamento. Assim não se pode selecionar essa variável como variável controlada. A partir da tabela 4, observa-se que, conforme se verifica na planta, sugere-se a seleção da temperatura do refervedor de tetracloreto de carbono como variável controlada.

Em relação a seleção das variáveis manipuladas, considerando que a continuidade operacional da planta é da ordem de 99% com o percentual de utilização da carga máxima, próxima a 100%, a vazão de Cl_2 gás oriunda da secagem do Cl_2 que alimenta o pré-resfriador é constante e portanto não adequada para ser selecionada como variável manipulada. Semelhantemente a corrente de reciclo gasoso citado no parágrafo acima, a corrente de Cl_2 gasoso que sai do sub-resfriador de Cl_2 para o pré-resfriador é mantido aproximadamente constante e tem sua vazão atrelada ao controle de pressão do sub-resfriador de Cl_2 .

A vazão de Cl_2 líquido para o pré-resfriador de Cl_2 é controlada por uma malha que tem a finalidade de manter a temperatura de descarga do primeiro estágio do compressor de Cl_2 e por isso não pode ser selecionada como variável manipulada aos propósitos do objetivo de controle aqui estabelecidos. Entretanto observa-se que essa corrente é a principal responsável pelos distúrbios de temperatura observados no refervedor de tetracloreto de carbono.

Uma alternativa para a seleção das variáveis controladas no sistema em estudo, pode ser a temperatura de operação do refervedor de tetracloreto de carbono.

Baseado no estudo de controlabilidade fortemente consubstanciado pelo julgamento de engenharia, sugere-se um sistema do tipo *Single Input Single Output* (SISO), tendo como

variável controlada a temperatura do refeedor e como variável manipulada a vazão de vapor para a camisa do refeedor.

4.2 ESPECIFICAÇÃO DOS OBJETIVOS DE CONTROLE.

Os objetivos do sistema de controle já foram definidos preliminarmente. Com o conhecimento das restrições impostas pelo sistema em estudo as características desejadas na estratégia de controle ficam assim consolidadas:

- Reduzir a variabilidade da temperatura de operação do refeedor de tetracloreto de carbono através da manipulação da vazão de vapor;
- Uma vez atendida a condição acima será assegurada a degradação da NCl_3 de forma a manter sua concentração no refeedor dentro de um limite superior seguro (inferior a 3.000 ppm);
- Como consequência do primeiro objetivo citado acima se tem a redução de perdas de solvente por arraste no topo do pré-resfriador de cloro.

4.3 OBTENÇÃO DAS FUNÇÕES DE TRANSFERÊNCIA.

Utilizando-se a modelagem dinâmica no simulador comercial Aspen Dynamics™, as funções de transferência foram obtidas pelo método gráfico, a partir de perturbações em malha aberta nas correntes de vapor para o refeedor e Cl_2 líquido para o pré-resfriador de Cl_2 .

4.3.1 Obtenção da função de transferência entre a temperatura do refeedor e o distúrbio na vazão de vapor.

A observação do gráfico indicado na Figura 19 na qual a temperatura não atinge um estado estacionário, frente a um distúrbio na vazão de vapor, indica um comportamento integrador. Um processo integrador pode ser entendido como um processo de primeira ordem, mas que não possui auto-regulação. Pode-se ainda identificá-lo como um processo que não apresenta resistências, apenas capacitância. A capacitância está relacionada com a capacidade

do processo em acumular matéria ou energia e é definida como a variação da quantidade de material ou energia necessária para fazer uma variação unitária na variável do processo.

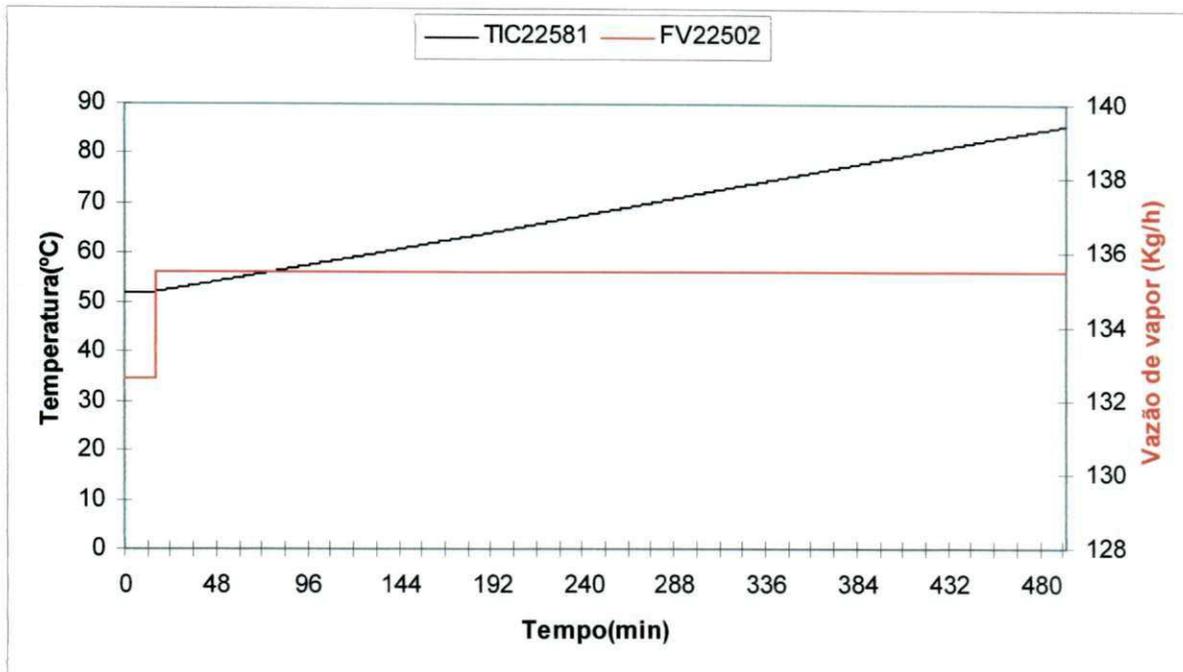


Figura 19 – Temperatura do refervedor para uma perturbação degrau de 2,9Kg/h na vazão de vapor - modelo.

Em um processo integrador a saída não atinge um valor final e por isso a idéia de ganho estático não se aplica. O comportamento da temperatura do refervedor segue uma rampa ascendente para uma perturbação na vazão de vapor porque o sistema acoplado, refervedor / pré-resfriador de Cl_2 , contendo reciclo normalmente apresenta essa característica integradora (Luyben, 1990).

Em um processo integrador a saída do processo não atinge um estado estacionário e por isso a idéia de ganho no estado estacionário não se aplica.

Como a saída do processo não atinge naturalmente um estado estacionário, a idéia de constante de tempo também não se aplica neste caso.

Para processos integradores a relação matemática entre algumas variáveis de saída e variáveis de entrada, é governada por integrais e possui, no domínio de Laplace, um termo $1/s$. Esses processos são algumas vezes chamados de processos não auto-reguláveis no sentido de que se um degrau é aplicado na variável de entrada, a variável de saída não atingirá um novo estado estacionário (Y. Akkun., and J. Downs., 1990). Nesses processos o usual ganho no estado estacionário não é definido de acordo com Seborg (1989).

Esquemáticamente o sistema pode ser expresso como abaixo na Figura 20:

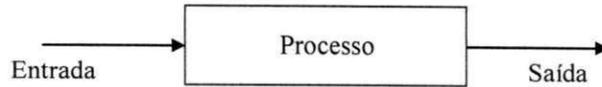


Figura 20 – Diagrama de bloco esquemático entrada e saída de vapor no processo.

Uma perturbação em degrau de amplitude M_1 é uma variação instantânea descrita matematicamente por:

$$u_1(t) = \begin{cases} 0 & \text{para } t \leq 0 \\ M_1 & \text{para } t > 0 \end{cases}$$

Como o aspecto observado na perturbação de entrada mostrada na Figura 11 representa um processo integrador, a modelagem pode ser assumida como abaixo:

$$a_1 \frac{dT(t)}{dt} = b_1 u_1(t)$$

Definindo $K_{p1} = b_1 / a_1$ a equação acima pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{dT(t)}{dt} = K_{p1} u_1(t)$$

onde K_{p1} é denominado ganho proporcional ou estático do processo. Sendo a transformada de Laplace da função degrau dada por:

$$U_1(s) = \frac{M_1}{s}$$

A transformada de Laplace da equação acima será então escrita como:

$$T(s) = \frac{K_{p1}}{s} \cdot \frac{M_1}{s}$$

Calculando a transformada inversa de Laplace será obtida a seguinte expressão no domínio do tempo:

$$T(t) = M_1 \cdot K_{1p} \cdot t$$

A inclinação da reta será igual ao produto $M_1 \cdot K_{1p}$, assim:

$$\tan \theta_1 = M_1 \cdot K_{1p} = 0,0708^\circ C / \text{min}$$

De onde se encontra o valor para o ganho estático K_{1p}

$$K_{1p} = \frac{0,0708}{0,048} \qquad K_{1p} = 1,475^\circ C / Kg \text{ com } M_1 = 0,048 Kg / \text{min}$$

Assim a função de transferência que relaciona o distúrbio na vazão de vapor com a temperatura do refeedor será:

$$\frac{T(S)}{Q_1(s)} = \frac{K_{1p}}{s}$$

$$G_p(s) = \frac{T(S)}{Q_1(s)} = \frac{K_{1p}}{s}$$

$$G_p(s) = \frac{1,475}{s}$$

4.3.2 Obtenção da função de transferência entre a temperatura do refeedor e o distúrbio na vazão de cloro líquido para a coluna.

O gráfico abaixo indicado na Figura 21 apresenta o comportamento da temperatura do refeedor quando submetido a um degrau na vazão de Cl_2 líquido para o pré-resfriador. A análise desta figura, indica que a temperatura se comporta segundo uma função de

transferência de primeira ordem, sem tempo morto, frente a um distúrbio na vazão de Cl_2 líquido. Esquemáticamente se pode representar o processo como indicado na Figura 20.

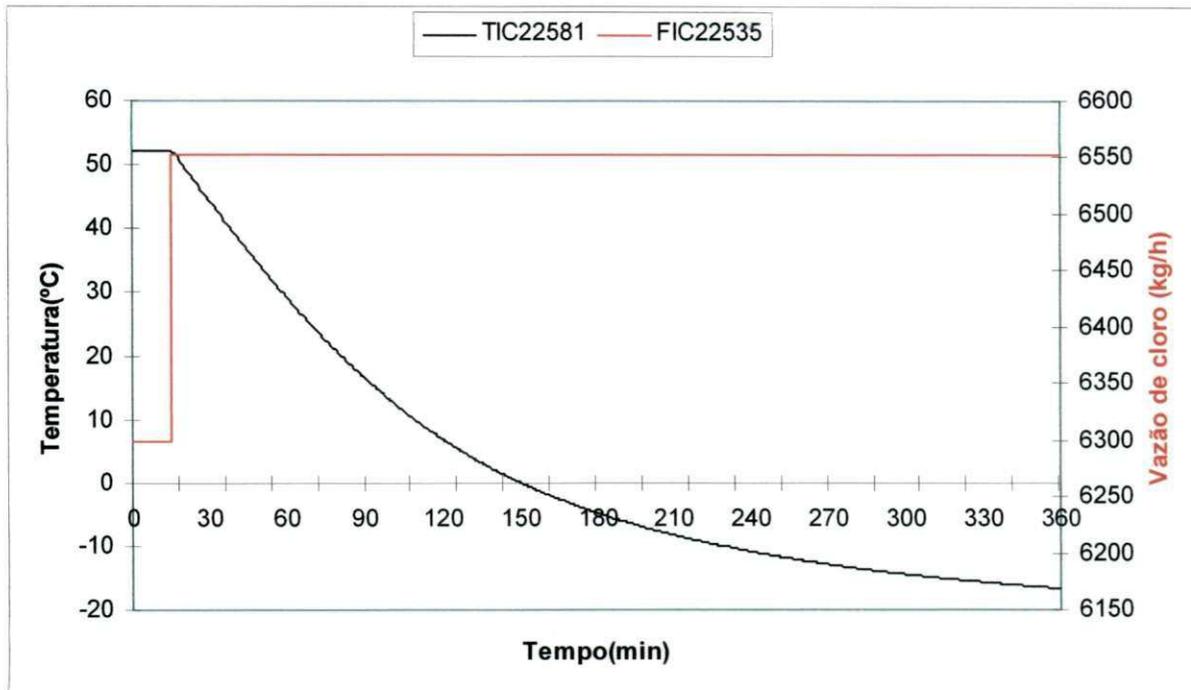


Figura 21 – Temperatura do reservatório para uma perturbação degrau de 2,9Kg/h na vazão de cloro - modelo.

No domínio de Laplace, para uma entrada de magnitude M_2 $Q_2(s) = M_2/s$, pode-se modelar o sistema como:

$$T(s) = \frac{K_2 \cdot M_2}{s(\tau \cdot s + 1)} \quad \text{com} \quad M_2 = 4,2 \text{ Kg/min}$$

Aplicando a transformada inversa de Laplace retorna-se ao domínio do tempo com a seguinte expressão para a relação entre a temperatura e o tempo:

$$T(t) = K_2 \cdot M_2 \cdot (1 - e^{-t/\tau})$$

A determinação dos parâmetros da função de transferência foi obtida pelo método gráfico com os seguintes resultados:

$$\tau_2 = 99,4^\circ \text{C} \quad \text{e} \quad K_2 = -16,4^\circ \text{C} \cdot \text{min} / \text{Kg}$$

Assim a função de transferência que relaciona o distúrbio provocado na vazão de Cl₂ com a temperatura do refeedor será da forma:

$$\frac{T(s)}{Q_2(s)} = \frac{K_2}{\tau_2 \cdot s + 1}$$

$$\frac{T(s)}{Q_2(s)} = G_L(s)$$

$$G_L(s) = \frac{-16,4}{99,4 \cdot s + 1}$$

As funções de transferência para o processo e o distúrbio podem ser resumidas conforme a Tabela 5.

Tabela 5 – Funções de transferência para o processo e distúrbio.

DOMÍNIO DE LAPLACE	DOMÍNIO DO TEMPO
$G_p(s) = \frac{1,475}{s}$	$T(t) = 52,2 + 0,0708 \cdot t$
$G_L(s) = \frac{-16,4}{99,4 \cdot s + 1}$	$T(t) = 52,0 - 68,88 \cdot (1 - e^{-t/99,4})$

4.3.3 Obtenção dos ganhos e funções de transferência dos componentes da malha de controle.

Sensor e transmissor de temperatura do refeedor:

$$Km_1 = \frac{(1 - 0,2)}{(70 - (-30))} = 0,008 \text{Kg} / \text{cm}^2 / ^\circ \text{C} \quad Km_1 = 0,008 \text{Kg} / \text{cm}^2 / ^\circ \text{C}$$

Ajuste do controlador da vazão de vapor:

$$Km_2 = \frac{(1 - 0,2)}{(70 - (-30))} = 0,008 \text{Kg} / \text{cm}^2 / ^\circ \text{C} \quad Km_2 = 0,008 \text{Kg} / \text{cm}^2 / ^\circ \text{C}$$

Posicionador da válvula de vapor:

$$K_{ipv} = \frac{(2,46 - 0)}{(1 - 0,2)} = 3,075 \text{Kg} / \text{cm}^2 / \text{Kg} / \text{cm}^2 \quad K_{ipv} = 3,075 \text{Kg} / \text{cm}^2 / \text{Kg} / \text{cm}^2$$

Função de transferência da válvula de vapor:

$$K_{VV} = \frac{(3,0 - 0) \text{Kg} / \text{min}}{(1 - 0,2) \text{Kg} / \text{cm}^2} = 3,75 \text{cm}^2 / \text{min} \quad \tau_{VV} = 0,35 \text{min}$$

$$G_{VV} = \frac{3,75}{0,35 \cdot s + 1}$$

Função de transferência da válvula de Cl₂ líquido:

$$K_{VC} = \frac{(250 - 0) \text{Kg} / \text{min}}{(1 - 0,2) \text{Kg} / \text{cm}^2} = 312,5 \text{cm}^2 / \text{min}$$

$$G_{VC}(s) = \frac{312,5}{0,45 \cdot s + 1}$$

Posicionador da válvula de Cl₂ líquido:

$$K_{IPC} = \frac{(2,46 - 0)}{(1 - 0,2)} = 3,075 \text{Kg} / \text{cm}^2 / \text{Kg} / \text{cm}^2 \quad K_{IPC} = 3,075 \text{Kg} / \text{cm}^2 / \text{Kg} / \text{cm}^2$$

Controlador manual da válvula de Cl₂ líquido:

$$K_{HV} = \frac{(1 - 0,2)}{(100 - 0)} = 0,008 \text{Kg} / \text{cm}^2 / \% \quad K_{HV} = 0,008 \text{Kg} / \text{cm}^2 / \%$$

As funções de transferência e ganhos do processo podem ser resumidas na Tabela 6.

Tabela 6 – Funções de transferência e ganhos do processo.

DESCRIÇÃO DAS FUNÇÕES	FUNÇÕES DE TRANSFERÊNCIA
Processo	$G_p(s) = \frac{1,475}{s}$
Distúrbio	$G_L(s) = \frac{-16,4}{99,4s + 1}$
Sensor e transmissor de temperatura do refeedor	$Km_1 = 0,008Kg / cm^2 / ^\circ C$
Ajuste do controlador da vazão de vapor	$Km_2 = 0,008Kg / cm^2 / ^\circ C$
Posicionador da válvula de vapor	$Kipv = 3,075$
Função de transferência da válvula de vapor	$G_{VV} = \frac{3,75}{0,35 \cdot s + 1}$
Função de transferência da válvula de Cl ₂ líquido	$G_{VC}(s) = \frac{312,5}{0,45 \cdot s + 1}$
Posicionador da válvula de Cl ₂ líquido	$K_{IPC} = 3,075$
Controlador manual válvula de Cl ₂	$K_{HV} = 0,008Kg / cm^2 / \%$

4.4 PROPOSTA DE ESTRATÉGIA DE CONTROLE.

Uma vez estabelecidas as funções de transferência envolvendo as variáveis manipulada e controlada e, o distúrbio, propõe-se na Figura 22 o diagrama de blocos elaborado no Simulink™, o qual será utilizado para a sintonia do controlador Proporcional/Integral/Derivativo (PID), inserido na malha de controle.

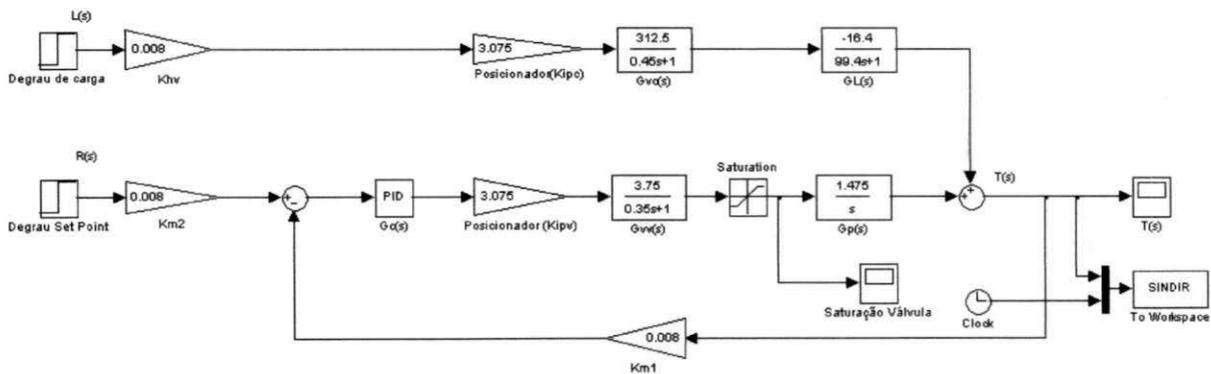


Figura 22 – Diagrama de bloco no ambiente Simulink™ para o sistema de controle.

CAPÍTULO 5 – SIMULAÇÃO EM MALHA FECHADA.

Neste capítulo inicia-se um estudo preliminar de estabilidade em malha fechada, seguida do projeto do controlador PID por três diferentes métodos de sintonia, baseados na resposta transiente. Os resultados obtidos no SimulinkTM para o problema servo e regulatório são obtidos e, preliminarmente avaliados.

5.1 Análise de estabilidade em malha fechada

Como ponto de partida para análise de estabilidade e, considerado o diagrama de bloco apresentado na Figura 22, a álgebra de bloco permite escrever a função de transferência em malha fechada para o problema servo:

$$\frac{T(s)}{R(s)} = \frac{G_p(s) \cdot G_{VV}(s) \cdot K_{IPV} \cdot G_C(s) \cdot K_m}{1 + G_p(s) \cdot G_{VV}(s) \cdot K_{IPV} \cdot G_C(s) \cdot K_m} \quad \text{Com } K_{m1} = K_{m2} = K_m$$

Semelhantemente pode-se escrever a função de transferência em malha fechada para o problema regulatório:

$$\frac{T(s)}{L(s)} = \frac{G_L(s) \cdot G_{VC}(s) \cdot K_{IPC} \cdot K_{HV}}{1 + G_p(s) \cdot G_{VV}(s) \cdot K_{IPV} \cdot G_C(s) \cdot K_m}$$

Definindo:

$$G_{OL}(s) = G_p(s) \cdot G_{VV}(s) \cdot K_{IPV} \cdot G_C(s) \cdot K_m \quad \text{e}$$

$$G_L(s) = G_L(s) \cdot G_{VC}(s) \cdot K_{IPC} \cdot K_{HV} \quad \text{obtem-se as seguintes expressões:}$$

Problema Servo:

$$\frac{T(s)}{R(s)} = \frac{G_{OL}(s)}{1 + G_{OL}(s)}$$

Problema Regulatório:

$$\frac{T(s)}{L(s)} = \frac{G_L(s)}{1 + G_{OL}(s)}$$

Pode-se ainda escrever para o caso de mudança de ajuste de ponto de referência simultâneo à um distúrbio do processo, a seguinte expressão geral:

$$T(s) = \frac{G_{OL}(s)}{1 + G_{OL}(s)} \cdot R(s) + \frac{G_L(s)}{1 + G_{OL}(s)} \cdot L(s)$$

A equação característica foi obtida considerando-se o problema servo e o fato de que o segundo membro de sua equação é de na realidade uma relação de polinômios em “s”, além de uma função racional a qual pode ser fatorada em pólos-zeros, como:

$$\frac{T(s)}{R(s)} = K' \cdot \frac{(s - z_1) \cdot (s - z_2) \cdot \dots \cdot (s - z_m)}{(s - p_1) \cdot (s - p_2) \cdot \dots \cdot (s - p_n)} \quad \text{Sendo } K' \text{ uma constante para fornecer o ganho}$$

no estado estacionário.

Para que o sistema seja fisicamente realizável deve-se ter $n > m$. Comparando-se as duas últimas equações, verifica-se que os pólos são também raízes da seguinte equação:

$$1 + G_{OL}(s) = 0 \quad \text{que é a equação característica do sistema em malha fechada.}$$

Assumindo-se um distúrbio unitário no ponto de referência a equação para o problema servo se torna:

$$T(s) = K' \cdot \frac{1}{s} \cdot \frac{(s - z_1) \cdot (s - z_2) \cdot \dots \cdot (s - z_m)}{(s - p_1) \cdot (s - p_2) \cdot \dots \cdot (s - p_n)} \quad \text{Assumindo distintos pólos a equação pode ser}$$

escrita da seguinte forma:

$$T(s) = \frac{A_0}{s} + \frac{A_1}{(s - p_1)} + \frac{A_2}{(s - p_2)} + \dots + \frac{A_n}{(s - p_n)} \quad \text{Aplicando a transformada inversa de}$$

Laplace tem-se:

$$T(t) = A_0 + A_1 \cdot e^{p_1 t} + A_2 \cdot e^{p_2 t} + \dots + A_n \cdot e^{p_n t}$$

⁵ s – Variável no domínio de Laplace

Pelo critério geral de estabilidade, o sistema será estável se e somente se todas as raízes da equação característica forem reais e negativas e/ou se tiverem raízes complexas com a parte real também negativa, do contrário, o sistema será instável.

Assumindo um controlador PID com ação proporcional apenas e, desenvolvendo a equação característica do sistema em malha fechada, pode-se expressá-la, de acordo com as equações contidas na tabela 6 da seguinte forma:

$$1 + G_p(s) \cdot G_{VV}(s) \cdot K_{IPV} \cdot G_C(s) \cdot K_m = 0 \text{ ou ainda}$$

$$1 + \frac{1,476}{s} \cdot \frac{3,75}{0,35 \cdot s + 1} \cdot 3,075 \cdot K_C \cdot 0,008 = 0$$

Resolvendo-se a equação no domínio de s acima, e de acordo com o critério geral de estabilidade, conclui-se que para o sistema ser estável, o parâmetro K_C deve ser maior que zero.

5.2 Sintonia do controlador pelo Método de Síntese Direta.

A função do controlador feedback a ser projetado neste trabalho é assegurar que a resposta em malha fechada tenha uma dinâmica que atenda as especificações dos objetivos de controle, mencionados no item 4.2. A sintonia do controlador através deste método apresenta restrições para sistemas que são instáveis em malha aberta, portanto se avaliam os resultados aqui obtidos com as restrições impostas pelo método. Outro aspecto relevante é que este método de sintonia sempre gera controlador PI, PD ou PID para modelos de processos comumente encontrados.

Considerando o Problema Servo conforme explicitado no item 5.1, a seguinte função de transferência em malha fechada para mudança de ponto de referência pode ser escrita:

$$\frac{T(s)}{R(s)} = \frac{G_p(s) \cdot G_{VV}(s) \cdot K_{IPV} \cdot G_C(s) \cdot K_m}{1 + G_p(s) \cdot G_{VV}(s) \cdot K_{IPV} \cdot G_C(s) \cdot K_m}$$

Adotando o procedimento prático de projeto de controladores inerente a este método e, portanto assumindo que:

$$G(s) = G_p(s) \cdot G_{VV}(s) \cdot K_{IPV} \cdot K_m \quad \text{ou ainda:}$$

$$G(s) = \frac{K}{s \cdot (\tau_{VV} \cdot s + 1)} \quad \text{com } K = 0,136 \quad \text{e} \quad \tau_{VV} = 0,35 \text{ min}$$

$$G(s) = \frac{0,136}{s \cdot (0,35 \cdot s + 1)} \quad \text{a equação para o problema servo se reduz a:}$$

$$\frac{T(s)}{R(s)} = \frac{G_C(s) \cdot G(s)}{1 + G_C(s) \cdot G(s)} \quad \text{rearranjando a equação, obtém-se uma expressão para o controlador,}$$

como se segue:

$$G_C(s) = \frac{1}{G(s)} \cdot \left(\frac{T(s)/R(s)}{1 - T(s)/R(s)} \right) \quad \text{segundo a metodologia de sintonia adotada pelo método, para}$$

processos sem tempo morto, o modelo de primeira ordem para a função de transferência em malha fechada $T(s)/R(s)$ é uma escolha razoável.

$$\frac{T(s)}{R(s)} = \frac{1}{\tau_c \cdot s + 1}$$

Observa-se que, como o ganho no estado estacionário é unitário, não ocorrerá offset⁶ para mudanças de ponto de referência. O projeto para o controlador feedback conduzirá a seguinte expressão:

$$G_C(s) = \frac{\tau \cdot s + 1}{K \cdot \tau_c} \quad \text{pode-se observar que esta equação equivale a forma padrão de um}$$

controlador PD, escrito como:

$$G_C(s) = \frac{1}{K \cdot \tau_c} \cdot (1 + \tau \cdot s) \quad \text{de onde se conclui que os parâmetros do controlador serão:}$$

$$K_C = \frac{1}{K \cdot \tau_c} \quad \tau_D = \tau_{VV}$$

⁶ Offset – Desvio em relação a um valor de referência.

O parâmetro de projeto τ_C fornece um conveniente parâmetro para a sintonia do controlador, que pode ser usado para tornar o controlador mais agressivo (pequeno τ_C) ou menos agressivo (grande τ_C). Como estimativa inicial, será assumido um valor para τ_C como 2 minutos.

A Tabela 7 abaixo, apresenta algumas alternativas para os valores numéricos dos parâmetros do controlador PD:

Tabela 7 – Valores dos parâmetros para sintonia do controlador - síntese direta.

Parâmetros	$\tau_C = 1$	$\tau_C = 4$	$\tau_C = 20$
K_C	7,35	1,84	0,36
τ_I	-	-	-
τ_D	0,35	0,35	0,35

A avaliação das respostas obtidas pelo método da síntese direta para o problema servo, indicado na Figura 23, mostra que a opção de parâmetros que utiliza $\tau_C = 1$ ($K_C = 7,35$ e $\tau_D = 0,35$), se adequou melhor aos objetivos de controle do sistema em estudo.

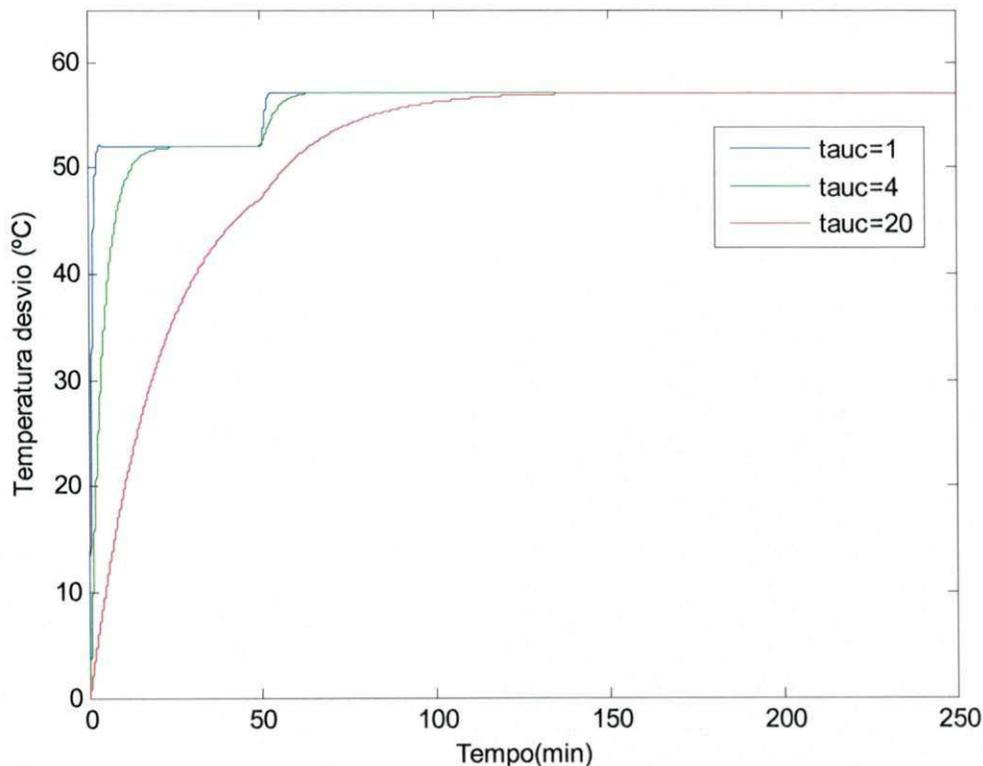


Figura 23 – Respostas Problema Servo para o controlador- Método da Síntese Direta.

A avaliação das respostas obtidas pelo método da síntese direta para o problema regulatório, indicadas na Figura 24 abaixo, mostra-se que a opção de parâmetros que utiliza $\tau_C = 1$ ($K_C = 7,35$ e $\tau_D = 0,35$), se adequou melhor aos objetivos de controle do sistema em estudo pelo fato de atingir o ponto de ajuste mais rapidamente que as demais opções bem como, por apresentar menor overshoot.

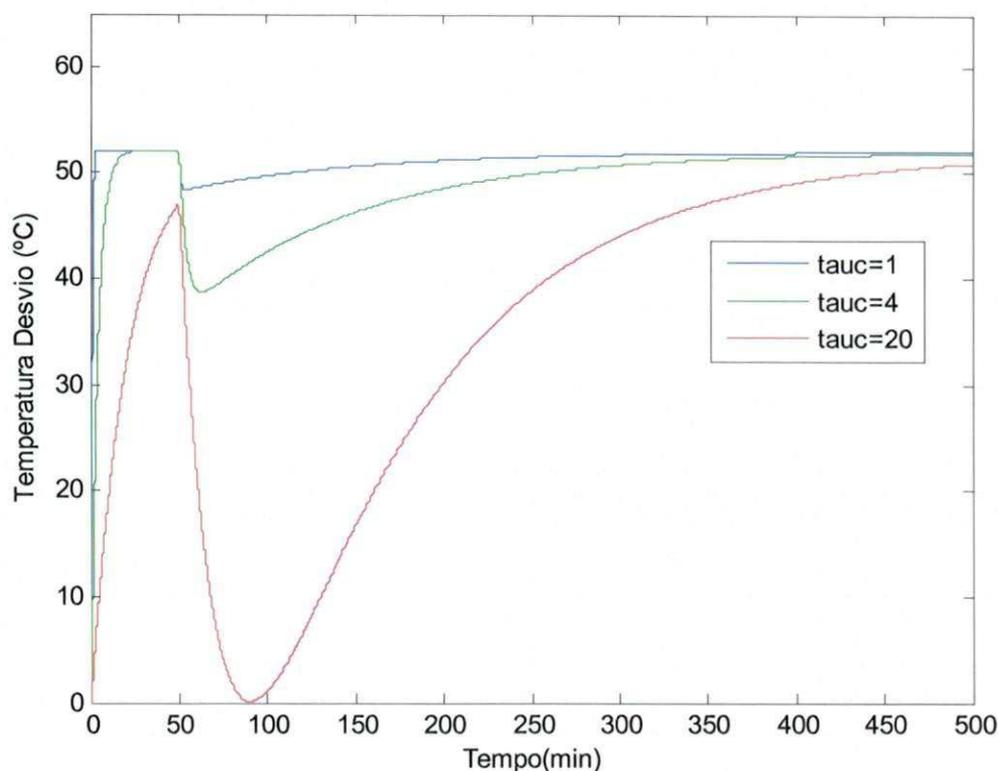


Figura 24 - Respostas Problema Regulatório para o controlador - Método da Síntese Direta.

5.3 Sintonia do controlador pelo Método IMC⁷.

Uma outra técnica de projeto de controladores, baseada em modelo, é conhecida como Internal Model Control (IMC) e foi desenvolvida por Morari e co-autores (Garcia and Morari, 1982; Rivera et al., 1986). O método IMC, semelhantemente ao anterior, é baseado em um modelo validado do processo e conduz a expressões analíticas para os parâmetros do controlador.

⁷ IMC – Internal Model Control

Os dois métodos de projeto de controladores tendem a produzir o mesmo resultado se os parâmetros de projeto são especificados de maneira consistente.

O método IMC é baseado no diagrama de bloco simplificado, mostrado na Figura 25 abaixo:

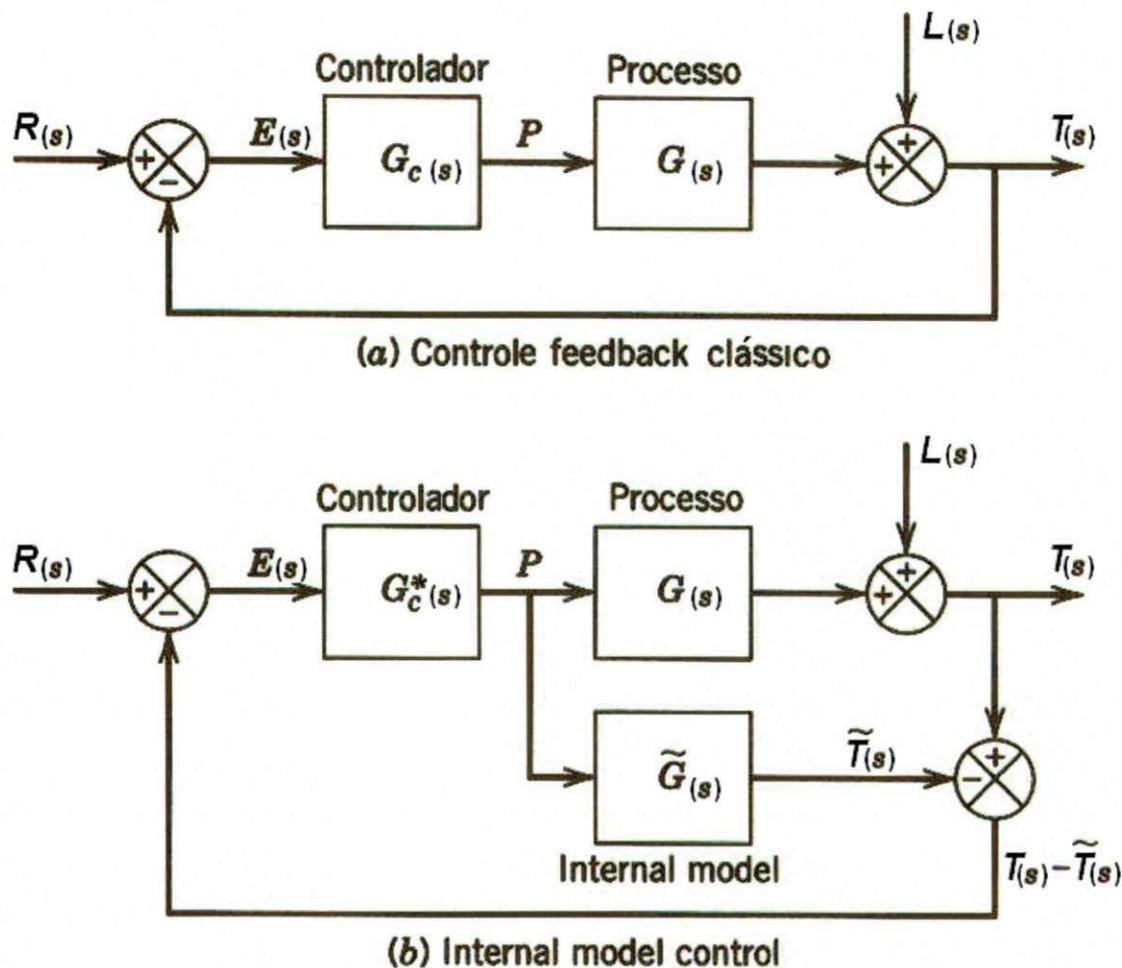


Figura 25 – diagrama de bloco simplificado para feedback convencional e IMC.

A resposta do modelo é subtraída da resposta real e a diferença $T(s) - \tilde{T}(s)$ é usada como entrada para o controlador IMC. Normalmente $T(s) \neq \tilde{T}(s)$ devido a erro do modelo e a presença de distúrbios assim o diagrama de bloco para o controle feedback convencional e o IMC estão comparados na Figura 25 acima.

A álgebra de blocos permite afirmar que os diagramas são idênticos se os controladores satisfizerem a relação abaixo:

$G_C(s) = \frac{G_C^*(s)}{1 - G_C^*(s) \cdot \tilde{G}(s)}$ Dessa forma um controlador IMC é equivalente a um controlador

feedback convencional e vice-versa.

Usando a álgebra de blocos, se pode escrever a seguinte relação em malha fechada para o controlador IMC:

$$T(s) = \frac{G_C^*(s) \cdot G(s)}{1 + G_C^*(s) \cdot (G(s) - \tilde{G}(s))} \cdot R(s) + \frac{1 - G_C^*(s) \cdot \tilde{G}(s)}{1 + G_C^*(s) \cdot (G(s) - \tilde{G}(s))} \cdot L(s)$$

Assumindo que o modelo esteja validado, a equação acima pode ser escrita conforme abaixo:

$$T(s) = G_C^*(s) \cdot G(s) \cdot R(s) + (1 - G_C^*(s) \cdot G(s)) \cdot L(s)$$

Como primeira etapa do projeto do controlador IMC, o modelo pode ser aproximado do modelo do processo e fatorado da seguinte forma:

$G(s) = \tilde{G}_+(s) \cdot \tilde{G}_-(s)$ com $\tilde{G}_+(s)$ contendo tempo morto e os zeros existentes no plano direito e ainda especificado com ganho unitário no estado estacionário.

O controlador IMC é então especificado como:

$$G_C^*(s) = \frac{1}{\tilde{G}_-(s)} \cdot f \text{ onde } f \text{ é um low pass filter com ganho unitário que assumirá a seguinte}$$

forma:

$$f = \frac{1}{(\tau_C \cdot s + 1)^r} \quad \text{com} \quad r = 1 \text{ e } \tau_C \text{ a constante de tempo em malha}$$

fechada para a saída do processo.

As considerações acima irão assegurar que o sistema será estável e fisicamente realizável, inclusive pelo fato do sistema ser estável em malha aberta.

A seleção de τ_c é uma importante decisão no sucesso do projeto do controlador IMC. Algumas recomendações são apresentadas a seguir. Em geral um aumento em τ_c produzirá um controlador mais conservativo pelo fato de K_C diminuir com o aumento de τ_c .

- a) $\tau_c > 0,1\tau$ (Rivera et al., 1986)
 b) $\tau > \tau_c$ (Chien and Fruehauf, 1990)

A Tabela 8 abaixo, de acordo formulada por Rivera, D. E., M. Morari, e S. Skogestad, Internal Model Control, 4. PID controller Design, Ind. Eng. Process Design Dev. 25,252 (1986). Fornece as expressões para a determinação dos parâmetros do controlador. Especificamente nesse trabalho, será usado o caso "F".

Tabela 8 – Expressões dos parâmetros para sintonia do controlador - IMC.

Caso	Modelo	$K_c K$	τ_I	τ_D
A	$\frac{K}{\tau s + 1}$	$\frac{\tau}{\tau_c}$	τ	—
B	$\frac{K}{(\tau_1 s + 1)(\tau_2 s + 1)}$	$\frac{\tau_1 + \tau_2}{\tau_c}$	$\tau_1 + \tau_2$	$\frac{\tau_1 \tau_2}{\tau_1 + \tau_2}$
C	$\frac{K}{\tau^2 s^2 + 2\zeta \tau s + 1}$	$\frac{2\zeta \tau}{\tau_c}$	$2\zeta \tau$	$\frac{\tau}{2\zeta}$
D	$\frac{K(-\beta s + 1)}{\tau^2 s^2 + 2\zeta \tau s + 1}, \beta > 0$	$\frac{2\zeta \tau}{\tau_c + \beta}$	$2\zeta \tau$	$\frac{\tau}{2\zeta}$
E	$\frac{K}{s}$	$\frac{2}{\tau_c}$	$2\tau_c$	—
F	$\frac{K}{s(\tau s + 1)}$	$\frac{2\tau_c + \tau}{\tau_c^2}$	$2\tau_c + \tau$	$\frac{2\tau_c \tau}{2\tau_c + \tau}$
G	$\frac{K e^{-\theta s}}{\tau s + 1}$	$\frac{\tau}{\tau_c + \theta}$	τ	—
H	$\frac{K e^{-\theta s}}{\tau s + 1}$	$\frac{\tau + \frac{\theta}{2}}{\tau_c + \frac{\theta}{2}}$	$\tau + \frac{\theta}{2}$	$\frac{\tau \theta}{2\tau + \theta}$

Conclui-se então que os parâmetros do controlador serão expressos como:

$$K_C = \frac{2 \cdot \tau_c \cdot \tau}{K \cdot \tau_c^2} \qquad \tau_I = 2 \cdot \tau_c + \tau \qquad \tau_D = \frac{2 \cdot \tau_c \cdot \tau}{2 \cdot \tau_c + \tau}$$

A Tabela 9 abaixo, apresenta algumas alternativas para os valores numéricos dos parâmetros do controlador PID utilizando-se o método IMC:

Tabela 9 – Valores dos parâmetros para sintonia do controlador- método IMC.

	$\tau_C = 1$	$\tau_C = 4$	$\tau_C = 20$
K_C	5,15	1,29	0,26
τ_I	2,35	8,35	40,35
τ_D	0,30	0,34	0,35

A avaliação das respostas obtidas pelo método IMC para o problema servo, indicado na Figura 26 abaixo, mostra que a opção de parâmetros que utiliza $\tau_C = 1$ ($K_C = 5,15$, $\tau_I = 2,35$ e $\tau_D = 0,30$), se adequou melhor aos objetivos de controle do sistema em estudo por apresentar menor overshoot. Observa-se também que as duas outras opções não são adequadas ao processo.

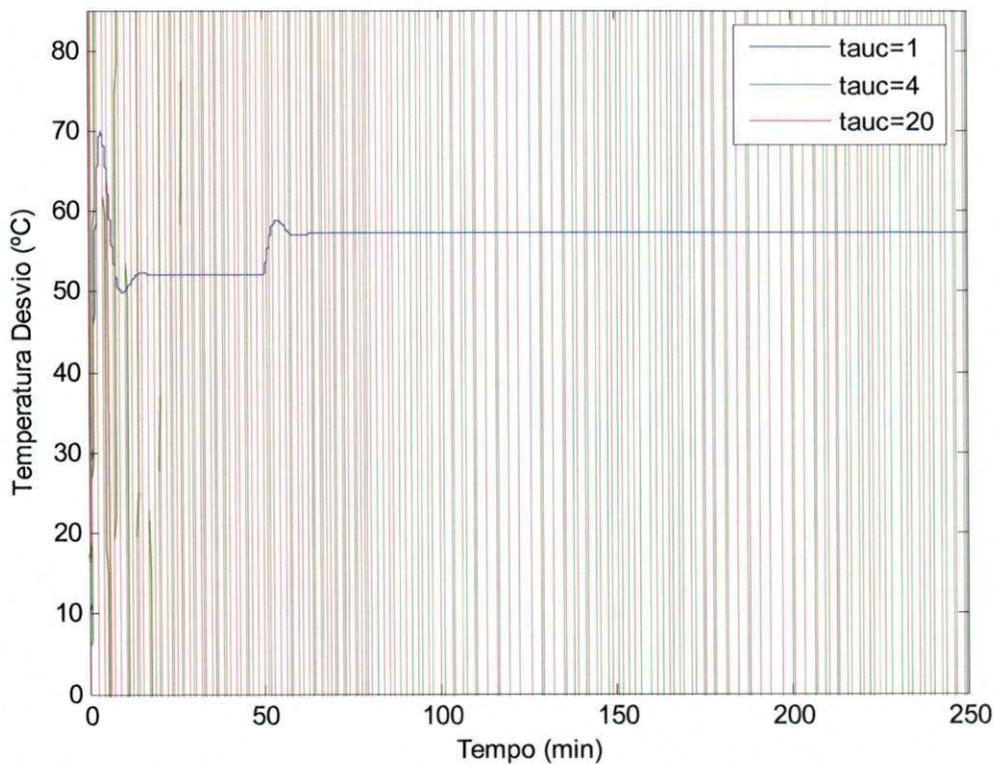


Figura 26 – Respostas problema servo para o controlador - método IMC.

A avaliação das respostas obtidas pelo método IMC para o problema regulatório, indicado na Figura 27 abaixo, mostra que a opção de parâmetros que utiliza $\tau_C = 1$ ($K_C = 5,15$, $\tau_I = 0,014$ e $\tau_D = 0,30$), se adequou melhor aos objetivos de controle do sistema em estudo por apresentar menor overshoot. Nota-se ainda que as outras duas opções para o parâmetro de projeto do controlador não forneceu bons resultados.

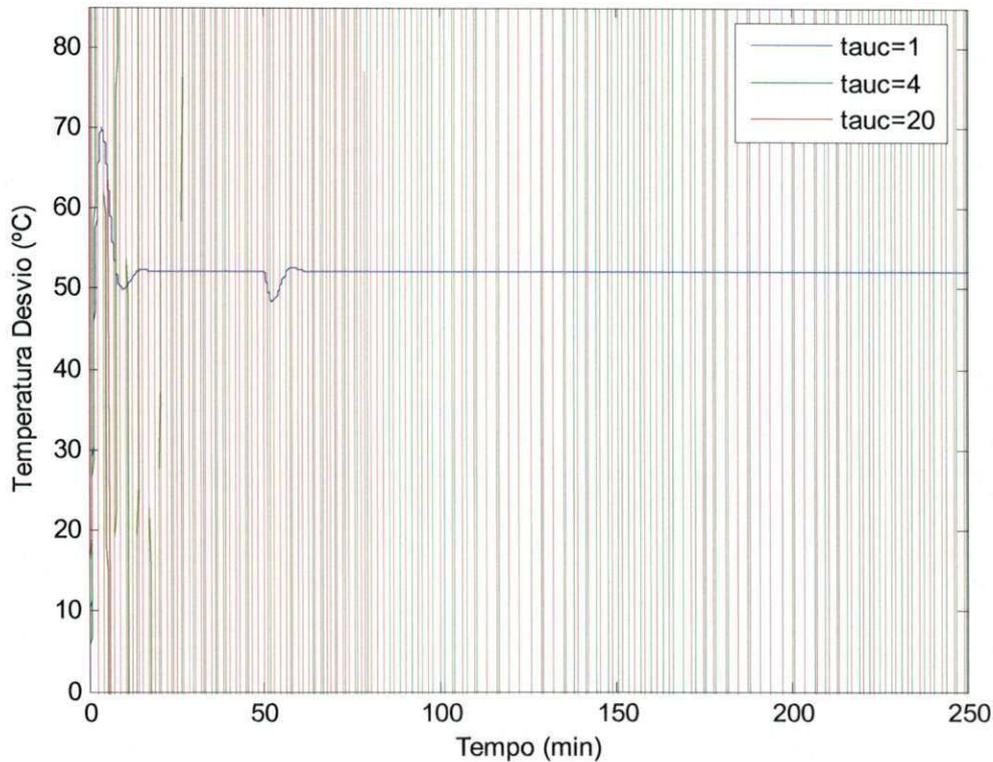


Figura 27 – Respostas problema regulatório para o controlador - método IMC.

5.4 Sintonia do Controlador pelo Método do Ciclo Contínuo.

Nesta seção será adotado o método proposto por Ziegler e Nichols (Ziegler.J. G., and N. B. Nichols, Optimum Settings for Automatic Controllers, Trans. ASME 64,759 (1942)), o qual é baseado no procedimento de tentativa e erro, também referido como Método do Último Ganho.

Algumas restrições são impostas à aplicação desse método, por exemplo, não é recomendada sua aplicação para processos que sejam instáveis em malha aberta já que são instáveis para qualquer valor assumido para K_c . Pelo mesmo motivo não se aplica esse método aos processos integradores.

O procedimento adotado para a sintonia do controlador está abaixo explicitado:

Passo 1. Após o processo atingir o estado estacionário (ou próximo dele), eliminar a ação integral e derivativa do controlador assumindo o valor nulo para o tempo derivativo e o máximo valor possível para o tempo integral.

Passo 2. Ajustar K_c para um pequeno valor (por exemplo, 0.5) e colocar o controlador em modo automático.

Passo 3. Introduzir um pequeno incremento no ponto de referência de modo que a variável controlada apresenta um desvio em relação ao valor observado no estado estacionário. Gradualmente o valor de K_c deve ser aumentado por pequenos incrementos até que o ciclo contínuo seja atingido. O termo ciclo contínuo é definido como uma oscilação sustentada com amplitude constante. O valor numérico de K_c que produz o ciclo contínuo (para ação proporcional apenas) é chamado ganho último, K_{cu} . O período correspondente à oscilação sustentada é chamado de período de oscilação, P_u .

Passo 4. Calcular os parâmetros do controlador PID usando as relações de sintonia de Ziegler-Nichols (Z-N) mostradas na Tabela 10 abaixo.

Passo 5. Avaliar os parâmetros do controlador Z-N introduzindo pequenas alterações no ponto de referência e observar a adequação da resposta em malha fechada. Se necessário, fazer sintonia fina. .

Tabela 10 – Expressões para o ajuste de controlador pelo método do ciclo contínuo.

Parâmetros do controlador baseados no Método do Ciclo Contínuo.			
Ziegler – Nichols	K_C	τ_I	τ_D
P	$0.55K_{CU}$	-	-
PI	$0.45K_{CU}$	$P_U / 1.2$	-
PID	$0.6K_{CU}$	$P_U / 2$	$P_U / 8$
Tyreus – Luyben †	K_C	τ_I	τ_D
PI	$0.31K_{CU}$	$2.2P_U$	-
PID	$0.45K_{CU}$	$2.2P_U$	$P_U / 6.3$
† Luyben and Luybem (1997).			

A aplicação do método proporcionou os seguintes resultados, demonstrados na Tabela 11 abaixo e na Figura 28:

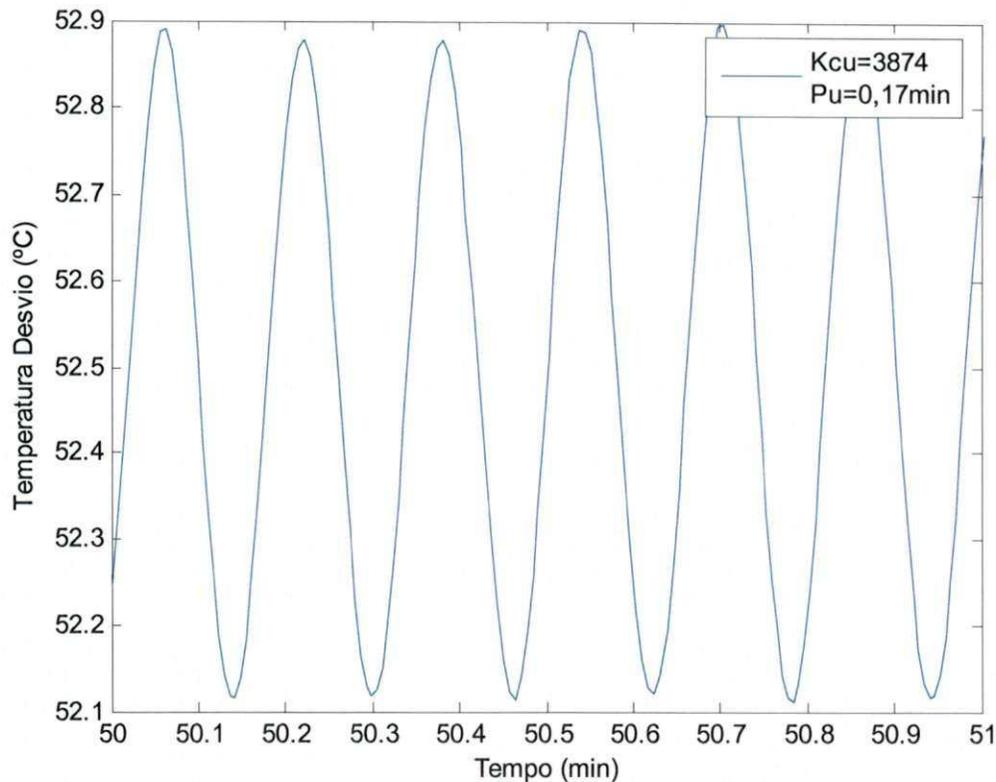


Figura 28 - Determinação gráfica do último ganho e período último

$$K_{CU} = 3874 \quad P_U = 0,17$$

Tabela 11 – Parâmetros do controlador pelo método do ciclo contínuo.

Z-N	K_C	τ_I	τ_D
P	2130,7	-	-
PI	1743,3	0,142	-
PID	2324,4	0,09	0,021

A avaliação das respostas obtidas pelo método do Ciclo Contínuo para o problema servo, indicado na Figura 29 abaixo, mostra que a opção de parâmetros que utiliza o controlador Proporcional-Integral ($K_C = 1743,3$ e $\tau_I = 0,142$), se adequou melhor aos objetivos de controle do sistema em estudo por apresentar menor overshoot e menor tempo de acomodação.

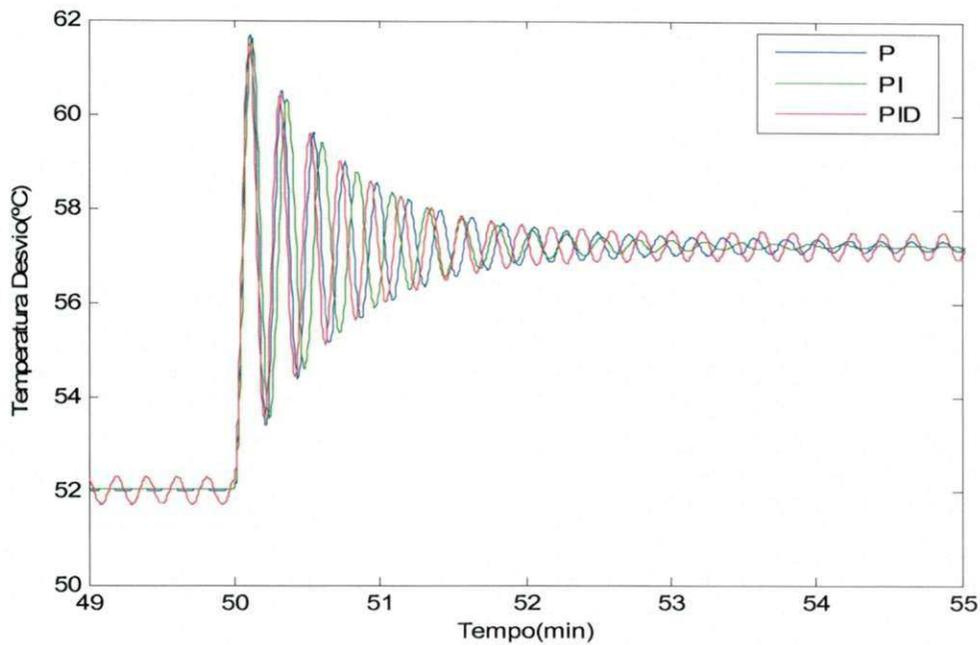


Figura 29 – Respostas problema servo para o controlador-método Ciclo Contínuo.

A avaliação das respostas obtidas pelo método do Ciclo Contínuo para o problema Regulatório, indicado na Figura 30 abaixo, mostra que a opção de parâmetros que utiliza o controlador Proporcional-Integral ($K_C = 1743,3$) e $\tau_I = 0,142$, se adequou melhor aos objetivos de controle do sistema em estudo, por apresentar menor overshoot e menor tempo de acomodação.

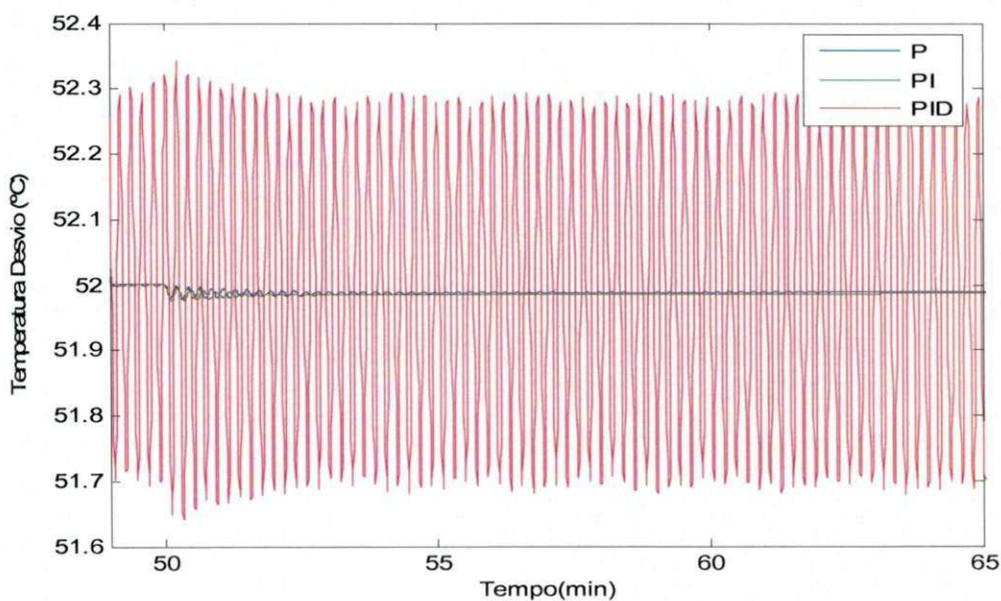


Figura 30 – Respostas problema regulatório para o controlador-método ciclo contínuo.

5.5 Resumo das simulações dinâmicas.

A Tabela 12 abaixo mostra um resumo dos parâmetros do controlador para os vários métodos utilizados no projeto do controlador.

Tabela 12 – Parâmetros do controlador obtidos pelos vários métodos de sintonia.

Método	Algoritmo	$\tau_c = 1$			$\tau_c = 4$			$\tau_c = 20$		
		K_C	τ_I	τ_D	K_C	τ_I	τ_D	K_C	τ_I	τ_D
Síntese Direta	PD	7,35	-	0,35	1,84	-	0,35	0,36	-	0,35
IMC	PID	$\tau_c = 1$			$\tau_c = 4$			$\tau_c = 20$		
		K_C	τ_I	τ_D	K_C	τ_I	τ_D	K_C	τ_I	τ_D
		5,15	2,35	0,30	1,29	8,35	0,34	0,26	40,35	0,35
		$K_{CU} = 3874$				$P_U = 0,17$				
Ciclo Contínuo		K_C	τ_I	τ_D						
	P	2130,7	-	-						
	PI	1743,3	0,142							
	PID	2324,4	0,09	0,021						

CAPÍTULO 6 – CONCLUSÕES.

Este capítulo trata das conclusões obtidas ao longo dos capítulos anteriores. Inicialmente um resumo dos principais resultados obtidos ao longo do trabalho é salientado após o que, uma grade das simulações é apresentada com os resultados de cada simulação brevemente classificados. Em seguida, os resultados das simulações são apresentados e confrontados com os objetivos do sistema de controle. Finalmente, em uma terceira etapa, é selecionada uma das alternativas obtidas nas simulações, como a estratégia de controle mais adequada.

Observamos que o modelo dinâmico obtido no Aspen Dynamics TM, a partir do modelo no estado estacionário gerado no Aspen Plus, apresentou-se adequado aos propósitos deste trabalho, que tem a precípua finalidade de desenvolver uma estratégia de controle para o refeedor de tetracloreto de carbono.

Uma grade de simulações realizada para os problemas Servo e Regulatório é apresentada neste capítulo na qual, se busca avaliar a adequação das respostas obtidas, aos objetivos da estratégia de controle proposta. As restrições impostas pela operação da planta, são consideradas na definição da melhor estratégia a ser implementada na unidade industrial.

Tabela 13 – Grade com resultados das estratégias de controle testadas.

		RECURSO UTILIZADO	RESULTADO		
Problema Servo	Síntese Direta	P			
		PD	•	Satisfatório	$\tau_C = 1$
		PID			
	IMC	P			
		PI			
		PID	•	Satisfatório	$\tau_C = 1$
	Ciclo Contínuo	P	•	Insatisfatório	
		PI	•	Insatisfatório	
		PID	•	Insatisfatório	
Problema Regulatório	Síntese Direta	P			
		PD	•	Satisfatório	$\tau_C = 1$
		PID			
	IMC	P			
		PI			
		PID	•	Satisfatório	$\tau_C = 1$
	Ciclo Contínuo	P	•	Satisfatório	
		PI	•	Satisfatório	
		PID	•	Insatisfatório	

A análise dos objetivos do sistema de controle, explicitado na seção 4.2, indica que temperaturas elevadas ou grandes overshoots devem ser evitados. Assim a robustez do controlador torna-se mais relevante do que a alta performance. Analisando os resultados obtidos para os parâmetros do controlador, apresentados no capítulo anterior para os problemas servo e regulatório, conclui-se que para ambos os problemas, os melhores resultados obtidos são os apresentados na Tabela 14 abaixo mostrada.

Tabela 14 – Valores dos melhores parâmetros do controlador pelos três métodos.

Método	Algoritmo	Kc	τ_I	τ_D
Síntese Direta	PD	7,35	-	0,35
IMC	PID	5,15	2,35	0,30
Ciclo Contínuo	PI	1743,3	0,142	-

A seguir serão apresentados e comparados os resultados da seleção indicada na tabela 14 acima para o problema servo e regulatório.

Problema Servo:

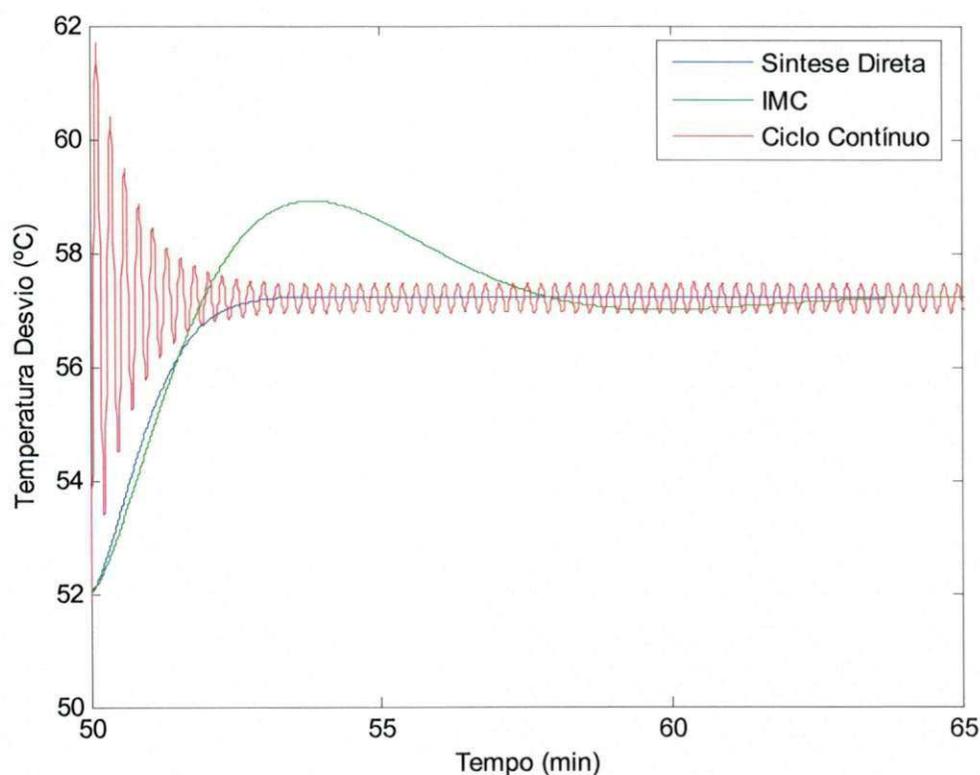


Figura 31 – Respostas problema servo para os melhores parâmetros do controlador pelos três métodos de sintonia.

A análise dos resultados apresentados na Figura 31 acima, indica que o resultado apresentado pelo método da Síntese Direta para o problema servo, apresenta maior aderência aos objetivos de controle. Assim o controlador PID obtido pelo Método da Síntese Direta mostra ser mais adequado para implantação no modelo proposto para o refervedor.

Problema Regulatório:

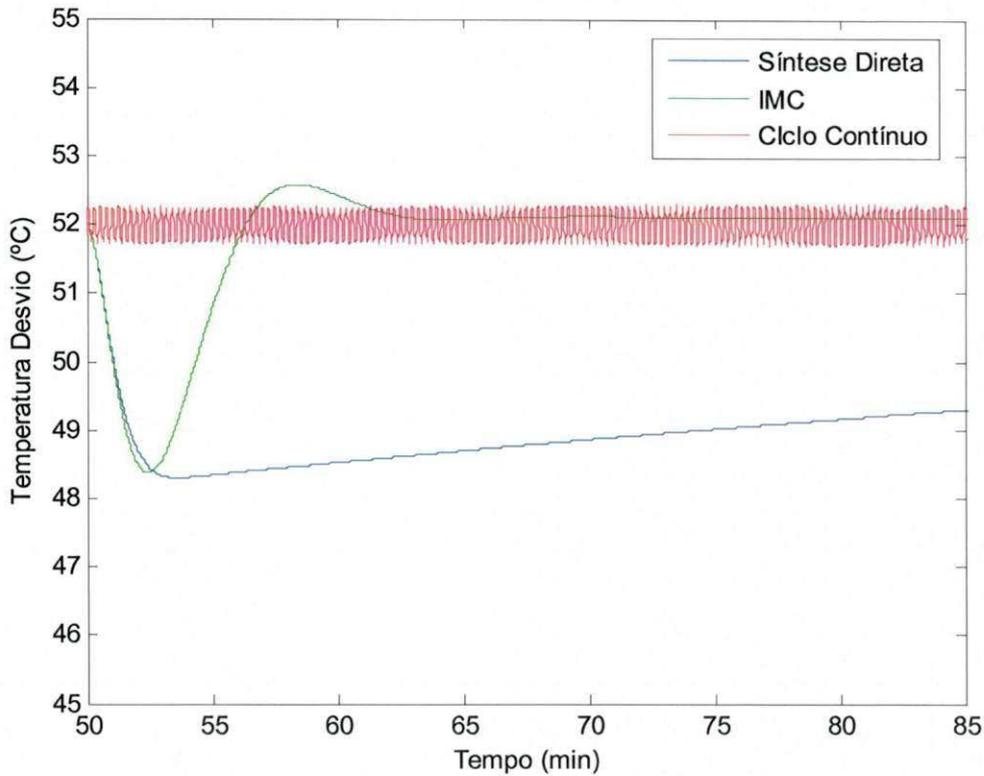


Figura 32 – Respostas problema regulatório para os melhores parâmetros do controlador pelos três métodos de sintonia.

A análise dos resultados gráficos obtidos para os parâmetros do controlador apresentados conforme Tabela 12 acima e mostrados na Figura 32 acima, para o problema regulatório, demonstra que o resultado que melhor adere aos objetivos de controle é aquele obtido pelo método do Ciclo Contínuo.

Nesse ponto será comparado o melhor resultado para o problema servo com o melhor resultado para o problema regulatório. A Figura 33 abaixo, mostra o comportamento da resposta dinâmica para cada opção selecionada para o problema servo.

Problema Servo:

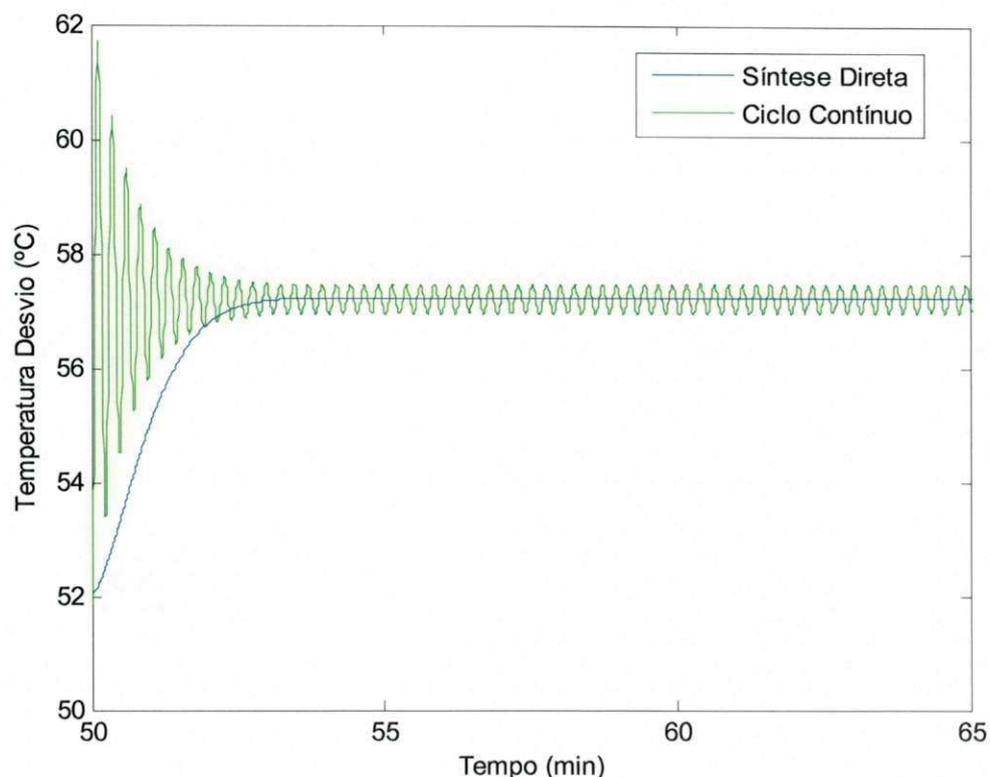


Figura 33 – Respostas problema servo para os melhores parâmetros do controlador pelos dois métodos de sintonia.

Tabela 15 - integrais ITAE e IAE problema servo.

Método Síntese Direta		Método do Ciclo Contínuo	
ITAE	IAE	ITAE	IAE
96,7	112,3	1932,0	93,2

Observa-se que a resposta obtida pelo método da Síntese Direta, para o problema servo, apresenta-se mais adequada aos objetivos de controle estabelecidos na seção 2.4. Como critério de desempenho, pode-se justificar a afirmação, pelo fato do método selecionado apresentar menor overshoot, melhor velocidade de resposta e melhor taxa de decaimento, em relação aos resultados obtidos pelo método do Ciclo Contínuo. Ainda, na tabela 15 acima observa-se um menor valor para a integral do erro absoluto ponderado no tempo. Nota-se também que a integral do erro absoluto estão bastante próximas para os dois métodos.

Problema Regulatório:

Em relação ao problema regulatório, será comparado o melhor dos três resultados para o problema servo com o melhor dos três resultados para o problema regulatório. A Figura 34 abaixo mostra o comportamento da resposta dinâmica para cada melhor opção selecionada para o problema regulatório.

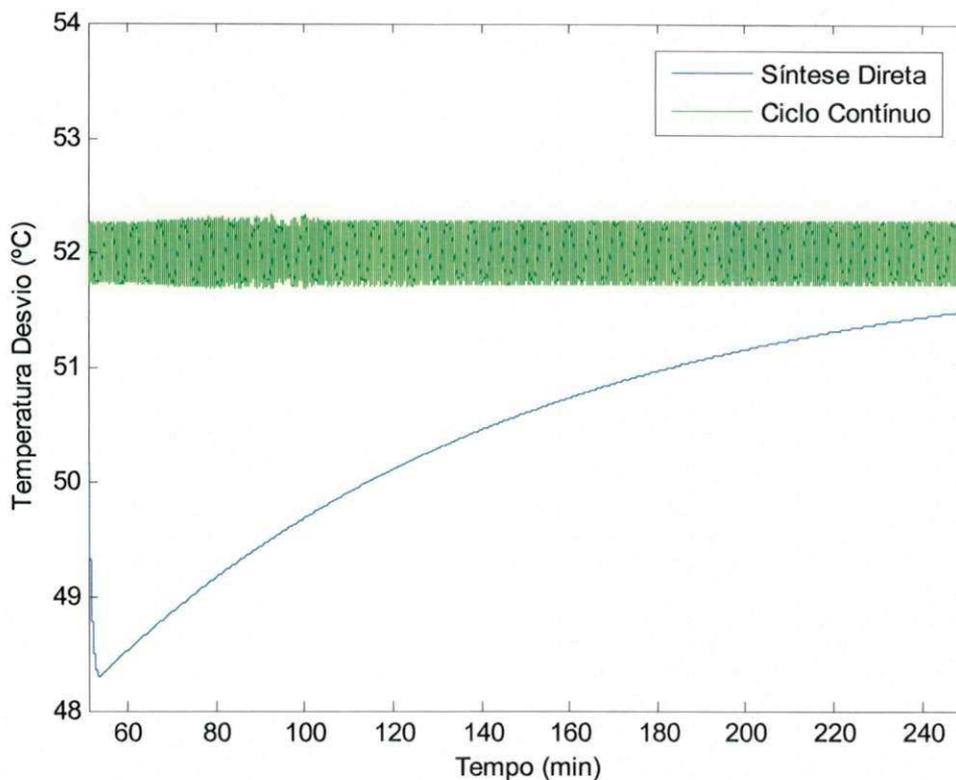


Figura 34–Respostas problema regulatório para os melhores parâmetros do controlador pelos dois métodos de sintonia.

Tabelas 16 – integrais ITAE e IAE problema - regulatório.

Método Síntese Direta		Método do Ciclo Contínuo	
ITAE	IAE	ITAE	IAE
$2,7 \cdot 10^4$	453,7	$7,4 \cdot 10^3$	131,5

Observa-se que a resposta obtida pelo método do Ciclo Contínuo apresenta-se mais adequada aos objetivos de controle estabelecidos na seção 2.4, justamente por apresentar menor overshoot, melhor velocidade de resposta e melhor taxa de decaimento. Ainda, na

tabela 16 acima observa-se um menor valor para a integral do erro absoluto ponderado no tempo bem como um menor valor para a integral do erro absoluto.

Observa-se que o melhor resultado para o problema regulatório foi o obtido pelo Método do Ciclo Contínuo e, inversamente para o problema servo, tem-se um melhor resultado pelo Método da Síntese Direta. Considerando que o resultado observado pelo Método da Síntese Direta para o problema regulatório, atender aos objetivos estabelecidos na seção 4.2, recomenda-se que o Método da Síntese Direta seja a melhor opção para implantação na instalação industrial em estudo.

A utilização da opção acima é uma aproximação inicial para implantação dos parâmetros do controlador na planta. Sugere-se que após a implantação da estratégia de controle selecionada na unidade industrial, deve-se buscar melhor desempenho do sistema através das técnicas de sintonia de campo, inclusive a técnica pelo método da tentativa e erro.

CAPÍTULO 7 – SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.

As sugestões para trabalhos futuros são apresentadas segundo dois aspectos. O primeiro refere-se à implementação na planta, da estratégia de controle proposta nesse trabalho e a seguir uma avaliação dos resultados a partir dos dados de planta.

O segundo aspecto refere-se ao desenvolvimento de um estudo dinâmico considerando a bifurcação da corrente de cloro líquido: uma derivação para o pré-resfriador de cloro e outra corrente, direcionada para o refeedor de tetracloreto de carbono, como forma de facilitar o controle de temperatura do refeedor de tetracloreto de carbono. A partir dessa configuração alternativa, fazer estudo de controlabilidade e implementar mudanças na planta, sugeridas pelo resultado obtido no estudo.

Ainda sugere-se que uma estratégia feedforward seja estudada, como forma de minimizar o efeito do distúrbio na vazão de cloro líquido para o pré-resfriador de cloro.

Outra sugestão refere-se ao teste de todas as opções de sintonia do controlador que se mostraram satisfatórias, já que discrepâncias entre o modelo assumido e o real, podem resultar em diferentes resultados entre a simulação e o resultado real de planta.

A presença de reciclo existente no processo, especialmente o reciclo de cloro gasoso oriundo do compressor, provoca grandes distúrbios, especialmente pela própria variabilidade do fluxo desta corrente. Sugere-se para trabalhos futuros, a contemplação dessa corrente no estudo dinâmico do processo.

Finalmente, sugere-se que seja desenvolvido um estudo, incluindo todo sistema de compressão de cloro, que modo que seja possível considerar todas as variáveis de processo que influem na operação dos equipamentos, objeto desse trabalho, especialmente a presença dos reciclo internos existentes refeedor de tetracloreto de carbono e pré-resfriador de cloro.

CAPÍTULO 8 – REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.

Gustin, J. L., Influence of Trace Impurities on Chemical Reaction Hazards, Journal of Loss Preventions in the Processes Industries, 2002.

Vogler, C. E., Chemistry of Nitrogen Trichloride – A Review of the Literature, Eighth Meeting of Chlorine Plant Managers, 1963.

Dokter, T., Fire and Explosion Hazards of Chlorine-Containing, Journal of Hazardous Materials, Elsevier Science Publishers B.V., 1985.

Euro Chlor, Maximum Levels of Nitrogen Trichloride in Liquid Chlorine, Euro Chlor Publications, 2001.

Gerrath, C., Recent Developments in Chlorine, a Joint Venture Company of the NUKEM Group, 2002.

Rubtsov, N. M., Kinetic Mechanism and Chemical Oscillations in the Branching Chain Decomposition of Nitrogen Trichloride, Mendeleev Communications Electronic Version, 1998.

Mattice, J. S., Current Status of Models in Determining Optimum Chlorination Practices, Environmental International, 1980.

Leung, S. W. and Valentine, R. L., An Unidentified Chloramine Decomposition Product – II a Proposed Formation Mechanism, War. Res., 1994.

Wrona, P. K., Electrode Processes of Chloramines in Aqueous Solutions, Journal of Electroanalytical Chemistry, 1998.

Kumar, K, Shinness, R. W. and Margerum, D. W., Kinetics and Mechanisms of the Base Decomposition of Nitrogen Trichloride in Aqueous, Inorg. Chem., 1987.

Gilliland E.R., Gould L.A. and Boyle T.J., Dynamics effects of material recycle, 1964.

Verykios X. and Luyben W. L., Steady-state sensitivity and dynamics of a reactor/distillation column system with recycle (1978).

Kapoor, N.; McAvoy, T.J.; Marlin, T.E. Effect of Recycle Structure on Distillation Tower Time Constant (1986).

Tavares Neto, J. I., Brito, K. D., Vasconcelos, L. G. S., Alves, J. J. N., Fossy, M. F. and Brito, R. P., Thermal Degradation of Nitrogen Trichloride in Electrolytic Production of Chlorine, ENPROMER 2005, Rio de Janeiro, Brazil, 2005.

Y. Akkun, J. Downs., A general method to calculate input-output gains and the relative gains array for integrating processes.

Seborg, D.A., Process dynamics and control 1989