



DESENVOLVIMENTO DE INFERÊNCIAS PARA COLUNAS DE DESTILAÇÃO DE UMA UNIDADE DE PROCESSAMENTO DE GÁS NATURAL

Eliza Hiromi Corrêa Ito

Monografia em Engenharia Química

Orientador Responsável: Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Co- Orientadora: Lilian Rodrigues Canabarro, Eng. Química

SETEMBRO de 2010

DESENVOLVIMENTO DE INFERÊNCIAS PARA COLUNAS DE DESTILAÇÃO DE UMA UNIDADE DE PROCESSAMENTO DE GÁS NATURAL

Eliza Hiromi Corrêa Ito

Monografia em Engenharia Química submetida ao corpo docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheira Química.

Aprovada por:

Prof. Amaro Gomes Barreto Jr., D.Sc.

Prof. Enrique Luis Lima, D.Sc.

Eng. Marcos Vinicius de Carvalho Gomes, D.Sc.

Orientado por:

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Co-orientado por:

Eng.^a Lilian Rodrigues Canabarro, Eng. Química

Rio de Janeiro, RJ – Brasil
Setembro de 2010

Ito, Eliza Hiromi Corrêa

Desenvolvimento de inferências para colunas de destilação de uma
Unidade de Processamento de gás natural / Eliza Hiromi Corrêa Ito. Rio de
Janeiro: UFRJ/EQ, 2010.

x, 86p.;Il.

(Monografia) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química,
2010.

Orientador: Argimiro Resende Secchi

Co-orientadora: Lilian Rodrigues Canabarro

1. Processamento de gás natural
2. Coluna de destilação
3. Inferência dinâmica
4. Modelagem e simulação
5. Monografia. (Graduação –UFRJ/EQ)
6. Argimiro Resende Secchi

I.Título

*Dedico esta monografia ao Senhor Jesus,
meu melhor amigo e mais precioso Deus.*

*“...se procurar a sabedoria
como se procura à prata
e buscá-la como quem busca
um tesouro escondido,
então você entenderá
o que é temer o Senhor
e achará o conhecimento de Deus.
Pois o Senhor é quem dá sabedoria;
de sua boca procedem
o conhecimento e o discernimento.”*

(Provérbios 2: 4-6)

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Orientador Argimiro Resende Secchi, pela orientação, pelo aprendizado e por toda a atenção durante o desenvolvimento do trabalho.

À Engenheira Química Lilian Rodrigues Canabarro, pela orientação e grande apoio dado nas horas mais difíceis do projeto.

Ao Engenheiro e Consultor da PETROBRAS Marcos Vinicius de Carvalho Gomes, pelo tempo dispensado com esclarecimentos e fornecimento de dados.

À todos os amigos do Laboratório de Desenvolvimento de Software para Otimização e Controle Processos (LADES), principalmente a Lizandro, Evandro, Cido, Leonardo e Euclides Almeida, por todo o apoio e por verdadeiras amizades.

À todos meus amigos da Escola de Química, principalmente a Patrícia e Susan, por serem sempre grandes amigas.

À minha família, por todo o apoio de sempre e compreensão nas horas que me ausentei escrevendo o trabalho.

Resumo da monografia apresentada à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenharia Química.

DESENVOLVIMENTO DE INFERÊNCIAS PARA COLUNAS DE DESTILAÇÃO DE UMA UNIDADE DE PROCESSAMENTO DE GÁS NATURAL

Autora: Eliza Hiromi Corrêa Ito

SETEMBRO, 2010

Orientador Responsável: Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Co- Orientadora: Lilian Rodrigues Canabarro, Engenheira química

O objetivo básico do processamento do gás natural é separar seus componentes em produtos com especificação definida e controlada, para que possam ser utilizados com alto desempenho em aplicações específicas, permitindo a incorporação de maior valor agregado aos produtos gerados. Em uma Unidade de Processamento de Gás Natural (UPGN), o gás liquefeito de petróleo (GLP) é um dos produtos com grande potencial financeiro e que precisa estar de acordo com normas específicas para ser comercializado.

Porém, a determinação das composições das correntes de saída nas colunas de destilação geralmente é realizada utilizando-se cromatógrafos, cujo tempo de análise é elevado, inviabilizando a elaboração de estratégias de controle que melhorem o desempenho da planta. Uma forma de contornar esse problema, e desta forma garantir que a planta continue trabalhando de forma eficiente e segura, é a implementação de inferências que consistem em modelos matemáticos que através de variáveis facilmente mensuráveis conseguem prever as variáveis desejadas numa alta frequência de tempo.

A aplicação da inferência tem como objetivo minimizar a dificuldade encontrada em determinar a composição dos produtos e facilitar a aquisição destes dados. Neste contexto, será utilizada uma UPGN (pertencente à Petrobrás), simulada no EMSO (Environment for Modeling, Simulation and Optimization), formada pela coluna desetanizadora que é a responsável pela separação de etano dos demais componentes. Esta torre foi escolhida para inferência das composições das correntes de saída de topo afim de que seja possível o melhor controle do processo, minimizando as perdas de GLP (propano e butano) no topo.

Desta forma, este trabalho tem como objetivo o desenvolvimento do modelo dinâmico e estacionário de uma coluna de destilação multicomponente segundo o conceito de estágios de equilíbrio e eficiência de estágios para as não idealidades, simulação do processo (dinâmico e estacionário) e obter a validação do modelo (dinâmico e estacionário) capaz de realizar inferências de composição de saída da unidade de destilação.

Índice Geral

Capítulo I - Introdução.....	1
1.1. Contexto.....	1
1.2. Relevância.....	2
1.3. Objetivos.....	2
1.4. Estrutura do trabalho.....	3
Capítulo II - Revisão Bibliográfica.....	3
2.1. Processamento do Gás Natural.....	3
2.1.2. Produtos do Gás Natural.....	6
2.1.3. Estrutura Básica de uma Unidade de Processamento de Gás Natural (UPGN) ..	6
2.2. Torres de pratos.....	10
2.2.1. Visão geral.....	10
2.2.2. Eficiência do Prato.....	11
2.2.3. Modelos de Equilíbrio.....	12
2.2.4. Hidráulica de Prato.....	15
2.3. Reconciliação de dados de planta.....	16
2.4. Sistemas de inferências para colunas de destilação.....	18
Capítulo III - Metodologia.....	21
3.1. Estudo de caso: Coluna desetanizadora.....	21
3.1.1. Processo.....	21
3.1.2. Modelo.....	22
3.1.3. Simulação.....	25
3.2. Cálculos dos parâmetros geométricos da coluna.....	27
3.3. Tratamento de Dados – Modelo Estacionário e Dinâmico.....	29
Capítulo IV – Resultados.....	33
4.1. Tratamento dos dados em regime estacionário.....	33
4.2. Inferências Estacionárias.....	44
4.4. Inferências Dinâmicas.....	53
Capítulo V – Conclusão.....	64

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	66
APÊNDICES	68
Apêndice – A1: Modelagem da coluna desetanizadora em ambiente EMSO	68
Apêndice – A2: Modelagem de <i>Streams.mso</i> modificado em ambiente EMSO	75
Apêndice – A3: Modelagem de Reconciliação de Dados em ambiente EMSO	78
Apêndice – A4: Equações de controle PID utilizadas pelo simulador EMSO e resultados de sintonia da coluna desetanizadora.	85

NOMENCLATURA

Símbolo	Descrição	[dimensão]
α :	Coeficiente de queda de pressão no prato seco;	
:	Coeficiente da equação;	
β :	Coeficiente de aeração;	
:	Coeficiente de fugacidade da espécie i em solução líquida;	
:	Coeficiente de fugacidade da espécie i em solução gasosa;	
:	Massa específica da fase vapor (kg/m^3);	
A_h :	Área total dos furos do prato (m^2);	
A_p :	Área do prato (Área do total do prato - Área do downcomer) (m^2);	
c:	Número de componentes;	
E:	Energia interna do sistema (J);	
E_{MV} :	Eficiência de prato de Murphree;	
F_L :	Vazão molar de líquido (mol/s);	
F_V :	Vazão molar de vapor (mol/s);	
:	Vazão molar que entra no equipamento (mol/s);	
	Vazão molar de líquido que entra no equipamento (mol/s);	
	Vazão molar de vapor que entra no equipamento (mol/s);	
	Vazão molar de líquido que sai do equipamento (mol/s);	
	Vazão molar de vapor que sai do equipamento (mol/s);	
h_w :	Altura do vertedouro (m);	
h_{in} :	Entalpia da corrente que entra no equipamento (J/mol);	
	Entalpia da corrente de líquido que entra no equipamento (J/mol);	
	Entalpia da corrente de vapor que entra no equipamento (J/mol);	
	Entalpia da corrente de líquido que sai do equipamento (J/mol);	
	Entalpia da corrente de vapor que sai do equipamento (J/mol);	
Level:	Nível de líquido (m);	
l_w :	Comprimento do vertedouro (m);	
M^L :	Acúmulo molar de líquido (mol);	
M^V :	Acúmulo molar de vapor (mol);	
M_i :	Acúmulo molar do componente i (mol);	
M_j :	Acúmulo molar total no estágio j (mol);	
N:	Número de pratos da coluna;	
P^L :	Pressão do líquido (atm);	
P^V :	Pressão do vapor (atm);	

Pressão da corrente de vapor que entra no equipamento (atm);
Pressão da corrente de vapor que sai do equipamento (atm);
Pressão da corrente de líquido que entra no equipamento (atm);
Pressão da corrente de líquido que sai do equipamento (atm);

Q: Taxa de calor (J/s);

T^L : Temperatura do líquido (K);

T^V : Temperatura do vapor (K);

Volume molar da fase líquida (m^3/mol);
Volume molar da fase vapor (m^3/mol);

V_{prato} : Volume do prato (m^3);

Fração molar do componente i na corrente de líquido que entra no equipamento;
Fração molar do componente i na corrente de líquido que sai do equipamento;
Fração molar do componente i na fase vapor na interface com o líquido, em equilíbrio com a fase líquida;

Fração molar do componente i na corrente de vapor que entra no equipamento;
Fração molar do componente i na corrente de vapor que sai do equipamento;
Fração molar do componente i na corrente que entra no equipamento.

Capítulo I - Introdução

1.1. Contexto

A evolução da oferta de gás natural é relativamente recente no Brasil, pois em 1970 apenas representava 0,1% da matriz energética do país. No entanto, já no final de 1980, com a construção da rede de gasodutos e das descobertas das reservas de petróleo e gás (Bacia de Campos), a oferta desse energético se apresentou de forma muito mais intensa. No âmbito mundial, de acordo com a previsão do Energy Information Administration (EIA, 2006), o gás natural continuará na sua rota de crescimento e estima-se que seja a segunda maior fonte de energia primária no mundo. Adicionalmente, as recentes descobertas de óleo e gás na nova província petrolífera da camada do pré-sal aumentam as condições favoráveis para uma maior participação desta fonte na matriz energética nacional (VAZ *et al.*, 2008).

Neste contexto, intensificaram-se as atividades de processamento de gás natural com o objetivo de permitir o tratamento do gás produzido nos campos a fim de garantir a especificação desse insumo de acordo com as normas vigentes, com alto desempenho em aplicações específicas, gerando produtos de alto valor agregado, como é o caso do conhecido “gás de cozinha” (GLP – gás liquefeito de petróleo).

Com isso, a importância do controle e otimização de processos relacionados aos equipamentos de uma unidade de processamento de gás natural, principalmente na área de fracionamento da carga de gás, vem crescendo ao longo dos anos. Entretanto, este controle depende muitas vezes de variáveis que não são facilmente mensuráveis, como é o caso das composições de produtos de gás analisadas por cromatógrafos, podendo levar de 20 a 40 minutos de tempo de análise. Assim, o uso de modelos de inferências para essas variáveis se apresenta como uma solução interessante, pois estes modelos utilizam variáveis de processo facilmente medidas – como temperatura, pressão, vazão – para se obter as variáveis de interesse, como as composições de produtos. Vale ressaltar que a busca por modelos de inferência, e conseqüentemente sua implementação em sistemas de controle, deve-se também pela necessidade de se garantir as especificações dos produtos e de se evitar as perdas dos componentes de alto valor agregado durante um processo de fracionamento.

O presente trabalho apresenta um estudo de modelo de inferência dinâmica de uma coluna de destilação (desetanizadora) de uma unidade de processamento de gás natural, pertencente à PETROBRAS. A ferramenta deste estudo será através do simulador genérico de processos chamado EMSO (*Environment for Modeling Simulation and Optimization*), pertencente ao projeto ALSOC (Ambiente Livre para Simulação, Otimização e Controle de Processos).

A vantagem do uso deste *software* é a possibilidade do usuário ter total acesso aos códigos dos modelos já validados contidos na biblioteca EML (*EMSO Model Library*) e da mesma forma poder realizar as modificações que julgar necessárias, além do fato da EML ser distribuída no conceito de *software* livre, disponibilizando todos os modelos via internet e sem custo.

1.2. Relevância

Ainda é relativamente recente o uso de *softwares* capazes de utilizar modelos de inferência dinâmicos, ao contrário do uso de modelos em regime estacionário já vastamente utilizado em análises de plantas químicas. A dificuldade se dá pela complexidade dos processos industriais, como no caso das colunas de destilação, que precisam ser modeladas considerando diversos fenômenos físicos e termodinâmicos inerentes ao processo e validados para os casos de inferência. Ainda assim, segundo STAUDT (2007) são muitas as aplicações que necessitam de modelos que possam prever com uma boa fidelidade o comportamento dinâmico de colunas de destilação. As principais aplicações da modelagem dinâmica de processos químicos são: simulações de partidas e paradas, otimizações estacionárias e dinâmicas, estimativas de parâmetros, treinamento de operadores e implementação de sistemas de controle.

De acordo com a literatura (KANO *et al.*, 2003; CAVALCANTE, 1996), o uso de modelos de inferências empíricos tem sido muito utilizado para colunas de destilação multicomponente a partir de um vasto histórico de dados medidos da unidade de processo para realizar as inferências, o que atualmente já estão mais facilmente disponíveis devido à maior capacidade de armazenamento de dados nos equipamentos computacionais. Segundo CAVALCANTE (1996), uma das desvantagens destes tipos de modelos é o fato de utilizarem muitas das vezes uma relação linear das relações entre as variáveis mensuradas e a variável a ser inferida. Uma vez que muitos processos químicos apresentam relações altamente não-lineares entre suas variáveis, os modelos empíricos nem sempre produzem resultados precisos.

O uso de modelos dinâmicos baseados em conceitos teóricos é um desafio para futuras validações e inferências de processos de planta químicas, principalmente para a atual necessidade das indústrias de refino de petróleo e processamento de gás natural de se controlar a qualidade de seus produtos a partir de inferências de composições de seus produtos em tempo real.

1.3. Objetivos

O objetivo deste trabalho é o desenvolvimento de modelos Dinâmico e Estacionário de uma coluna de destilação multicomponente de uma unidade de processamento de gás natural segundo o conceito de estágios de equilíbrio e eficiência de estágios para as não idealidades, incluindo as seguintes etapas de análise:

- Simulação dinâmica e estacionária de uma coluna de destilação para separação de C_2 (e resíduos de leves como o CO_2 e C_1) dos demais componentes (C_3 , $n-C_4$, $i-C_4$, ..., C_9);
- Comparação dos resultados dinâmicos e estacionários obtidos pela inferência (composição) dos produtos de topo e fundo da coluna com os dados reais da planta;
- Análise das simulações dinâmicas e estacionárias alimentadas com dados de planta reconciliados (tratamento de dados de planta) obtidas pelas restrições de balanço de massa global e por componente da unidade de destilação;
- Verificação do modelo de inferência em estudo, tanto para o caso de dados de planta reais (sem tratamento de dados) como para o caso de dados que foram reconciliados.

1.4. Estrutura do trabalho

Este trabalho está dividido em cinco capítulos, estruturados da seguinte forma:

Capítulo I – (este capítulo) trata do contexto geral, além das definições como relevância e objetivos deste trabalho.

Capítulo II – Apresenta os principais tópicos de interesse para revisão deste trabalho, com uma abordagem geral sobre gás natural e seu processamento no tópico (2.1); resumo dos principais conceitos sobre colunas de destilação e sua modelagem no tópico (2.2); a importância e aplicações de reconciliação de dados no tópico (2.3) e sobre a relevância e outras formas de inferência em processos industriais no tópico (2.4).

Capítulo III – Apresenta as considerações e modificações feitas nos modelos utilizados da biblioteca EML (*EMSO Model Library*) para o estudo de caso do trabalho (coluna desetanizadora de uma UPGN, pertencente à PETROBRAS). Além dos cálculos necessários para obtenção de parâmetros geométricos de pratos da coluna de destilação estudada e apresentação da modelagem no ambiente utilizado (simulador EMSO) para simulações dos modelos.

Capítulo IV – Apresenta todos os resultados obtidos a partir da reconciliação dos dados de planta e inferências realizadas com os modelos dinâmicos e estacionários.

Capítulo V – Finalmente, são apresentadas as conclusões sobre todos os resultados e análise realizadas em todo o trabalho, além de algumas sugestões para futuros trabalhos relacionados ao mesmo tema.

Capítulo II - Revisão Bibliográfica

2.1. Processamento do Gás Natural

2.1.1. Importância e Evolução do Gás Natural

O gás natural é um combustível fóssil encontrado em rochas porosas no subsolo e pode estar na forma associado (gás associado) ou não (gás não associado) ao petróleo. Encontra-se em sua composição os hidrocarbonetos leves (metano e etano) e outros mais pesados (propano, butanos, pentanos), podendo chegar até ao decano. Costuma-se encontrar também alguns contaminantes, tais como: nitrogênio, dióxido de carbono, água e compostos de enxofre (MENDONÇA, 2007).

A partir da Conferência Mundial das Nações Unidas (RIO-92) e a elaboração do Protocolo de Quioto em 1997 (Painel de Mudanças Climáticas), o fator ambiental passou a ter papel estratégico na produção de energia primária no mundo. Nesse contexto o gás natural se destacou em relação aos outros tipos de fontes de energia (carvão e derivados de petróleo), devido, principalmente, às suas menores taxas de emissão de gases de efeito estufa (CH₄, CO₂, entre outros) (VAZ *et al.*, 2008).

Apesar de o petróleo ser ainda o principal componente da oferta interna de energia¹ mundial, o gás natural vem reforçando a sua posição estratégica no mundo, com participação de 21% em 2008. De acordo com a previsão do *Energy Information Administration* (EIA), o gás natural tende a ultrapassar o carvão até o final da próxima década, conforme Figura 2.1. (VAZ *et al.*, 2008).

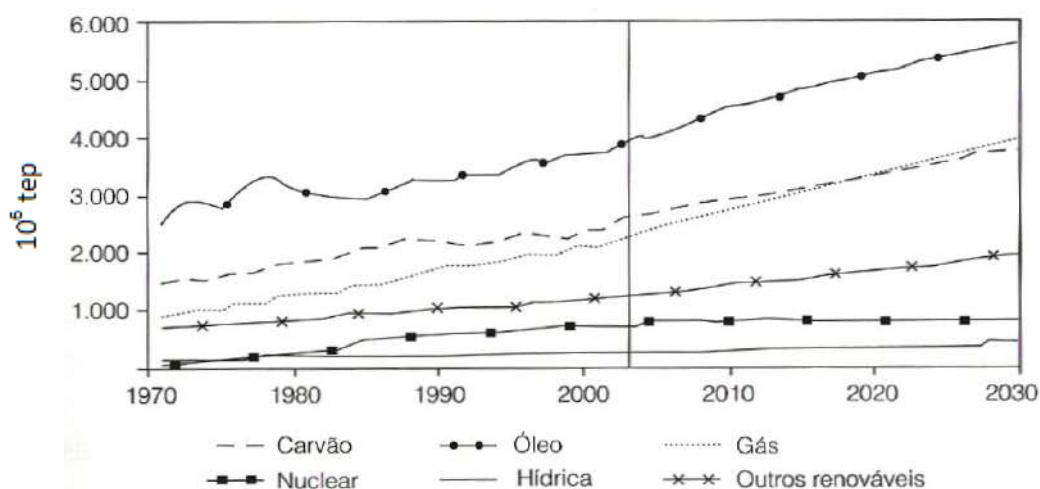


Figura 2.1. Demanda mundial de energia primária no mundo (tep: tonelada equivalente de petróleo), Fonte: EIA, 2006. Figura extraída de VAZ *et al.*, 2008.

As reservas nacionais, que estão em sua maior parte na forma associada, encontram-se distribuídas por várias regiões do território brasileiro. De todo o gás natural descoberto no país, 18,3% estão em terra – principalmente no campo de Urucu (AM) e em campos produtores no Estado da Bahia – enquanto que os 81,7% restantes estão localizados em mar,

¹ Oferta Interna de Energia (OIE) – a energia que se disponibiliza para ser transformada, distribuída e consumida nos processos produtivos de um País (VAZ *et al.*, 2008).

principalmente na Bacia de Campos, a qual detém 45,1% de todas as reservas deste energético no Brasil, conforme pode ser visualizado na Figura 2.2 (ANP, 2010).

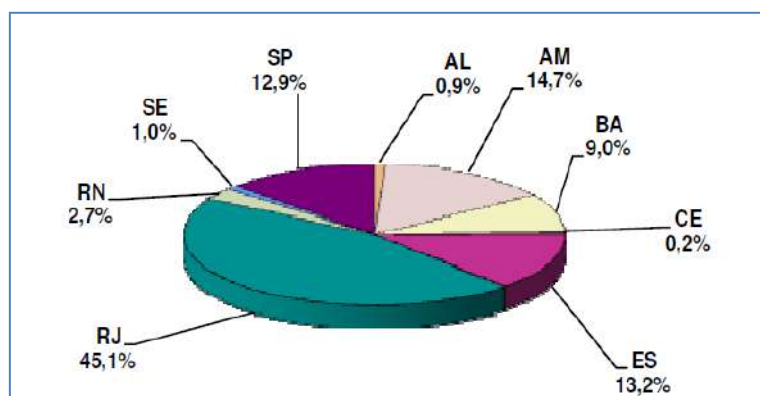


Figura 2.2. Distribuição percentual das reservas provadas de gás natural em 31/12/2009. Fonte: ANP, 2010.

De acordo com os dados históricos da ANP (2010), no período 1970-2008, a produção de gás natural cresceu 7,8% a.a., em média, tendo ocorrido um grande salto na década de 1980, principalmente em decorrência do início de operação das jazidas da Bacia de Campos. Em 2008, 70,9% da produção se concentrou nos campos marítimos, situação bastante distinta daquela ocorrida até 1972, quando a produção concentrava-se nos campos terrestres, especialmente no Estado da Bahia. É importante lembrar que o volume de gás natural produzido não é disponibilizado para venda em sua totalidade, uma vez que parte do volume extraído é destinada a:

- Consumo próprio - parcela da produção utilizada para suprir as necessidades das instalações de produção;
- Queima e perda - parcela do volume extraído do reservatório que foi queimada ou perdida ainda na área de produção;
- Reinjeção - parcela do gás natural produzido que é injetada de volta nos reservatórios;
- LGN (Líquidos de Gás Natural) - parcela de hidrocarbonetos mais pesados (etano, GLP e gasolina natural) extraída do gás natural nas plantas de processamento.

A divisão quantitativa dos destinos do gás natural produzido é apresentada na Figura 2.3.

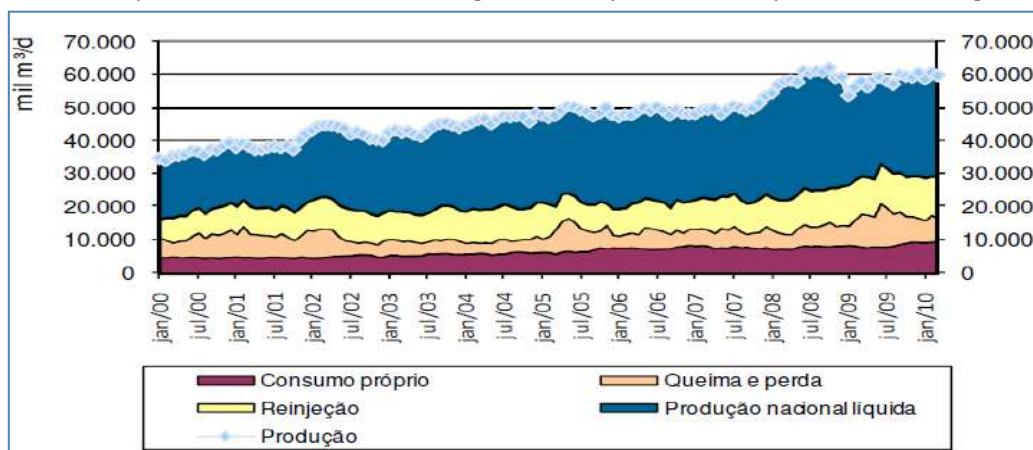


Figura 2.3 - Produção nacional de gás natural - jan/2000-mar/2010. Fonte: ANP, 2010.

2.1.2. Produtos do Gás Natural

A corrente líquida no processamento de gás natural, normalmente formada pelo propano e componentes mais pesados, é conhecida como Líquido de Gás Natural (LGN). O objetivo do fracionamento do LGN é a obtenção de produtos de maior valor energético e, conseqüentemente, maior valor econômico (MENDONÇA, 2007). Os produtos são os seguintes:

- Gás leve (formado basicamente por metano, mas pode incluir etano em alguns casos);
- Etano (quando houver etano em sua composição);
- Gás liquefeito de petróleo (GLP), popularmente conhecido como gás de cozinha;
- Nafta leve.

O gás leve, de menor valor energético, é conhecido como gás processado (ou gás seco), sendo este, o gás especificado utilizado para o consumo residencial, comercial, veicular e em usinas de geração de energia nas termelétricas (MENDONÇA, 2007). O perfil de produtos do processamento de gás natural é apresentado na Figura 2.4.

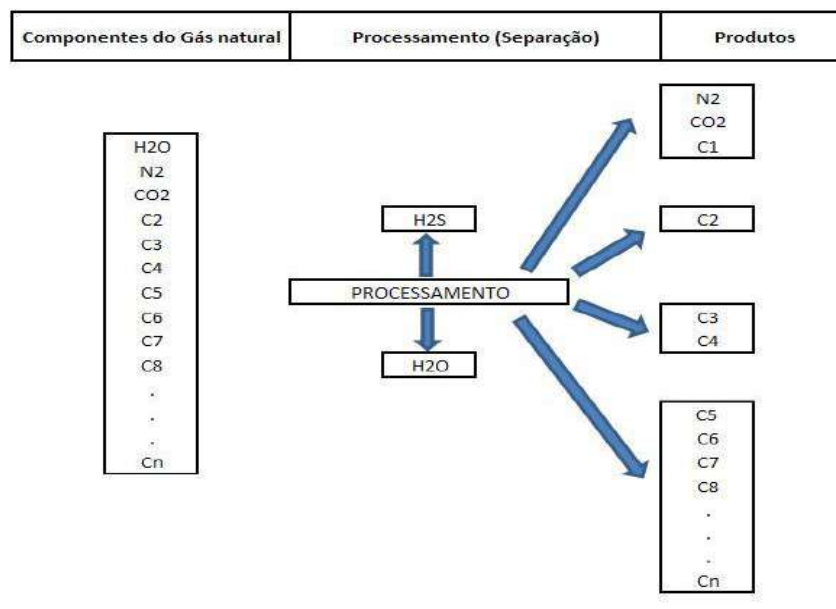


Figura 2.4 – Produtos provenientes do gás natural. Adaptado de VAZ *et al.*, 2008.

O produto cuja relevância é bastante significativa é o GLP (composto por propano e butano) devido ao seu alto valor agregado por se tratar de um combustível muito utilizado no âmbito domiciliar. Atualmente o mercado desse produto ainda é parcialmente atendido por importação, logo é de grande valia para a economia nacional que o aumento de sua produção interna seja alcançado (VAZ *et al.*, 2008). Neste trabalho, tem-se o GLP como principal produto da unidade em estudo, devido ao seu maior valor agregado e a sua maior demanda no mercado nacional.

2.1.3. Estrutura Básica de uma Unidade de Processamento de Gás Natural (UPGN)

O processamento de gás natural tem como principal objetivo garantir a especificação do gás para os consumidores finais do produto. A capacidade nominal de processamento atualmente totaliza 66,5 milhões de m³/dia (ANP, 2010).

Uma unidade de processamento de gás natural (UPGN) é composta por duas áreas distintas e sistemas auxiliares e de tratamento de produto, como esquematizado na Figura 2.5.

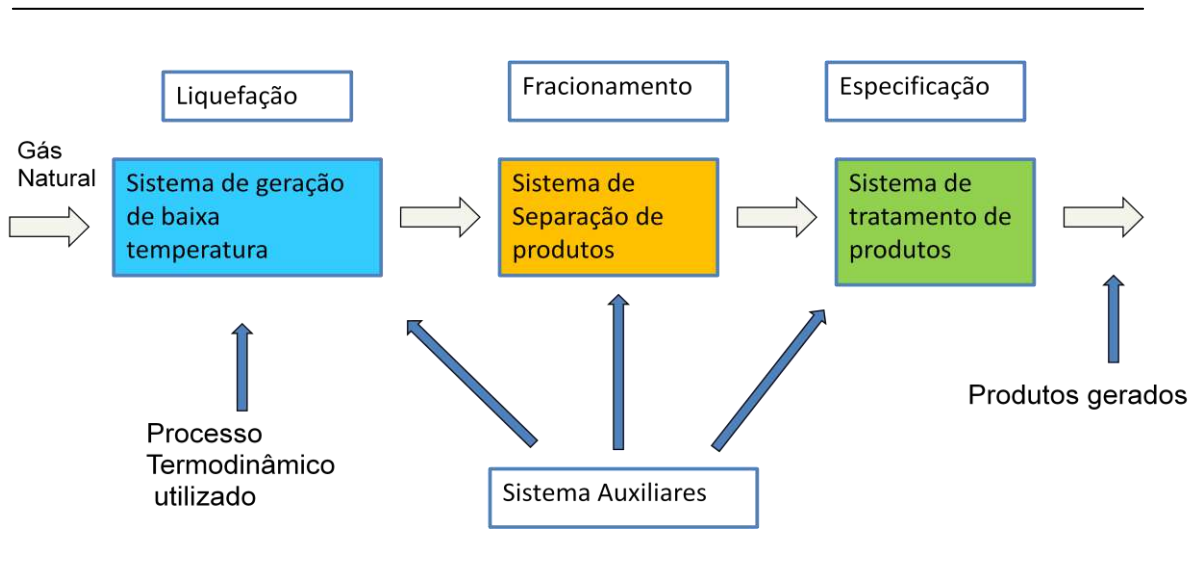


Figura 2.5 - Esquema Básico de uma UPGN. Adaptado de VAZ *et al.*, 2008.

- **Área fria** (Sistema de geração de baixa temperatura) – Corresponde à área que opera normalmente com baixas temperaturas e altas pressões, sendo a área responsável pela geração da fração líquida do gás natural (LGN) de alto valor agregado (VAZ *et al.*, 2008). A eficiência desta etapa é muito importante para o seguimento do processo.
- **Área quente** (Sistema de separação de produtos) – Corresponde à área que opera, em geral, com maiores temperaturas e baixas pressões do que a área fria. Essa área recebe o LGN gerado na área fria e é a responsável pelo seu fracionamento, obtendo-se produtos com especificação bem definida (VAZ *et al.*, 2008).
- **Sistemas de tratamento de carga e produtos** (Especificação) – Têm a função de garantir a qualidade dos produtos finais, e também de especificar a corrente de carga de gás natural da unidade. Os tratamentos dessulfurizantes (tradicional, por lavagem cáustica, à base de óxidos metálicos, etc.) são os principais sistemas de tratamento de carga e produtos (VAZ *et al.*, 2008).
- **Sistemas auxiliares** – São responsáveis pela geração de facilidades, para abastecimento e melhor operação das áreas fria e quente, e dos sistemas de tratamento de produtos (VAZ *et al.*, 2008). Principais sistemas:
 - *Sistema de aquecimento de óleo térmico* – Cede carga térmica para todos os refervedores da área quente da unidade. Em algumas instalações a fonte quente, ao invés do óleo, é o vapor d'água.

- *Sistema de compressão de propano* – Utilizado como fonte fria na área responsável pela liquefação do gás natural para se obter as temperaturas baixas necessárias para a condensação das frações pesadas do gás. Pode ser utilizado sozinho ou com a turbo-expansão.
- *Sistema de desidratação de gás natural* – É de extrema importância durante a etapa de resfriamento, pois a retirada da água do gás evita a formação de hidratos na unidade.

A composição do gás natural a ser tratado é certamente um dos itens mais relevantes na escolha do processo termodinâmico, sendo os quatro principais tipos de processos conhecidos como: Refrigeração simples, Expansão Joule-Thomson, Absorção Refrigerada e Turbo-Expansão. Todos estes processos têm em comum o princípio básico de promover a condensação dos hidrocarbonetos mais pesados a partir da redução de temperatura. (MENDONÇA, 2007). Este trabalho trata de uma unidade com processo do tipo Turbo-Expansão e sua abordagem de forma mais detalhada pode ser encontrada nos trabalhos de MENDONÇA (2007) e VAZ *et al.* (2008).

De forma geral, as etapas do processamento de gás natural que utiliza o processo de Turbo-Expansão podem ser visualizadas conforme a Figura 2.6 e estão resumidas da seguinte forma (VAZ *et al.*, 2008):

- **Compressão inicial** – aumento do nível de pressão da carga a ser processada;
- **Dessulfurização** – remoção de compostos de enxofre do gás natural;
- **Desidratação** – remoção de umidade de gás natural através de passagem por peneiras moleculares;
- **Regeneração** – remoção de umidade das peneiras moleculares;
- **Pré-resfriamento** – recuperação de energia por troca térmica em permutadores;
- **Ciclo de refrigeração a propano** – utilizado para resfriamento do gás natural;
- **Expansão de gás natural** – liquefação das frações pesadas do gás natural;
- **Desmetanização** – separação das fases líquida e gasosa, com liberação de metano;
- **Compressão de gás residual (gás etanizado, C₂⁺)** – aumento de nível de pressão para escoamento;
- **Fracionamento de LGN** – separação do líquido de gás natural em correntes puras de produtos especificados.

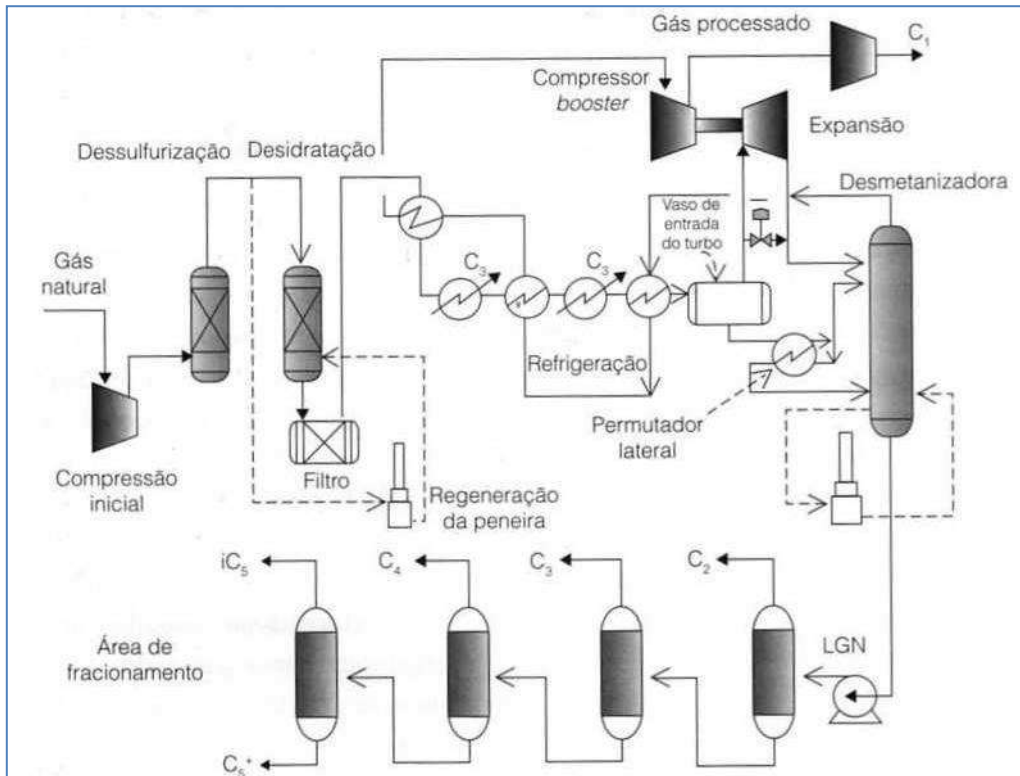


Figura 2.6 - Esquema do processo Turbo-expansão. Fonte: VAZ et al., 2008.

Os produtos gerados a partir do LGN etanizado (produto de fundo da torre desmetanizadora) dependem, sobretudo, da demanda dos consumidores locais para a escolha dos tipos e capacidades dos equipamentos utilizados para o fracionamento em torres subsequentes, isto é, pode haver a geração de corrente pura de etano (uso de uma torre desetanizadora), se houver demanda comercial para este produto, como é o caso de unidades de processamento de gás natural próximas a indústrias petroquímicas (VAZ et al., 2008). No caso do presente trabalho, esta torre desetanizadora está inserida no processo e um estudo mais detalhado sobre sua modelagem será o foco apresentado no estudo de caso.

Na etapa de fracionamento do LGN etanizado, uma das sequências possíveis de torres de destilação utilizadas é a seguinte:

- Torre desetanizadora – separa a corrente de C_2 (etano) e mais leves do LGN;
- Torre despropanizadora – separa a corrente de C_3 (propano) do LGN;
- Torre desbutanizadora – separa a corrente de C_4 (butano) do LGN;
- Torre deisopentanizadora – separa a corrente de $i-C_5$ (isopentano) pelo topo e a corrente pelo fundo.

Algumas das principais malhas de controle que podem ser encontradas nas unidades de processamento de gás natural e, de um modo geral, nas unidades de destilação são:

- Controle de pressão nas torres;
- Controle de temperatura de topo das torres;
- Controle de temperatura de fundo das torres;

- Controle de nível dos vasos de topo e fundo;

O conhecimento do tipo de torre de fracionamento a ser utilizado é muito importante no estudo da sua modelagem matemática, assim como a variedade de dispositivos de contato líquido-gás empregados no processo da unidade, tipos de modelos de equilíbrio e hidráulica dos estágios de separação considerados. Por conta disso, uma breve revisão é apresentada sobre internos de torres de destilação, especialmente para torres de pratos que é o tipo de torre utilizada no estudo de caso deste trabalho.

2.2. Torres de pratos

2.2.1. Visão geral

A transferência de massa em um prato ocorre através das gotas e bolhas formadas pela passagem do vapor dentro da fase líquida. Este contato (borbulhamento) é iniciado quando o líquido chega ao prato através de um *downcomer*, espécie de chapa ou tubo junto ao costado da torre, responsável pelo transporte do líquido do prato superior ao inferior (por gravidade). Ao chegar ao prato, o líquido encontra com o vapor que atravessa os dispositivos de contato gás-líquido (perfurado, válvulas ou borbulhadores) existentes na bandeja, formando assim uma espuma. Esta espuma percorre o prato, vertendo ao final deste em um novo *downcomer*. Neste interno das torres de destilação, a espuma será desfeita e somente o líquido desaerado será transferido ao prato inferior. Acima da bandeja, a espuma coalesce em gotas, e o vapor, praticamente sem líquido, continua para o prato superior. O nível de líquido nos pratos é geralmente mantido por dispositivos chamados vertedores (CALDAS *et al.*, 2007).

Os três principais tipos de pratos encontrados em unidades industriais são: pratos perfurados, valvulados, e pratos com borbulhadores. Na Figura 2.7 são apresentadas as diferentes aberturas encontradas nesses pratos e o caminho a ser realizado pelo vapor para atravessá-lo (STAUDT, 2007).

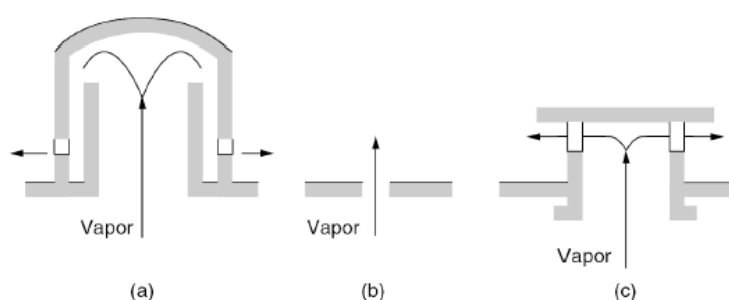


Figura 2.7 - Diferentes tipos de aberturas dos pratos: (a) borbulhadores, (b) perfurado e (c) válvula. Fonte: STAUDT, 2007.

Um prato normal possui uma área ativa, na qual a transferência de massa ocorre, possui também um *downcomer*, para mover o líquido entre os pratos, e uma área aberta, na qual ocorre a separação entre o líquido e o vapor, e nesta mesma área o vapor se conduz ao prato superior. É o projeto do prato que confere ao mesmo a habilidade de misturar e separar o vapor e o líquido adequadamente. Logo, um prato padrão possui uma região sob a entrada e

sobre a retirada do líquido no *downcomer*, nas quais o líquido e o vapor não podem se misturar, em que uma das partes é denominada como “área inativa” do prato (CALDAS *et al.*, 2007), conforme pode ser visualizado na Figura 2.8.

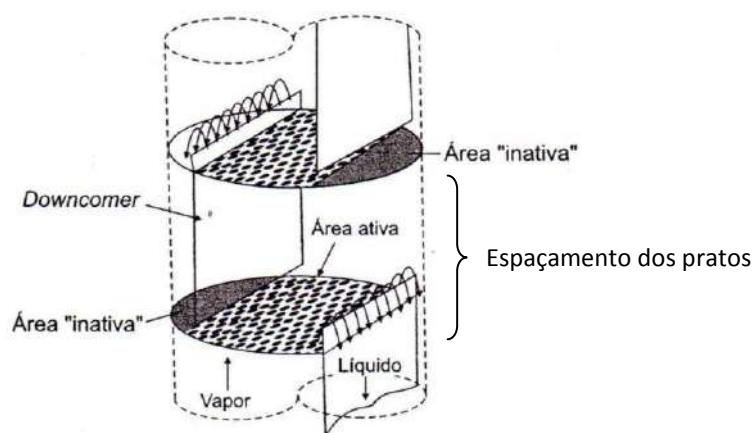


Figura 2.8 - Prato convencional e suas áreas “inativas”. Fonte: CALDAS *et al.*, 2007.

Portanto, é na área ativa que ocorre a maioria da troca térmica e de massa através do contato do líquido e do gás e dos dispositivos utilizados nos pratos. Ela corresponde basicamente à área transversal da torre menos todas as áreas ocupadas pelos *downcomers* que chegam e saem da bandeja (CALDAS *et al.*, 2007). Neste trabalho, todos os cálculos necessários para a obtenção dos parâmetros geométricos (*downcomers*, vertedores, áreas ativas, etc.) de pratos da coluna em estudo será mais detalhado no capítulo 3 (metodologia) e o uso destes parâmetros serão citados no tópico sobre os modelos hidráulicos de pratos adotados.

2.2.2. Eficiência do Prato

Geralmente, a modelagem de um estágio de separação de uma coluna de destilação utiliza a hipótese de equilíbrio termodinâmico entre o vapor e o líquido existentes, conhecidos como modelos de equilíbrio nos estágios. Entretanto, na realidade, este equilíbrio não é alcançado e a explicação para os desvios de idealidade no equilíbrio entre as fases é mais bem explicada pela modelagem que considera as taxas de transferência de massa e de energia, dados pelos modelos de não-equilíbrio. No entanto, uma desvantagem destes modelos é a necessidade de se fornecer uma matriz de coeficientes de transferência de massa que não estão disponíveis de forma abundante na literatura (STAUDT, 2007). Neste trabalho, serão utilizados os modelos de equilíbrio e suas simplificações.

Na modelagem baseada no equilíbrio termodinâmico, o uso do conceito de eficiência de estágios é necessário para relacionar a qualidade de operação dos estágios teóricos aos estágios reais. Assim, altos valores de eficiência de estágio são obtidos mediante elevados valores dos coeficientes de transferência de massa e calor, que por sua vez são obtidos através da agitação e misturas intensas. Nestas condições pode haver grande perda de carga na trajetória longitudinal do fluxo. Os altos valores de eficiência podem ser obtidos mediante crescente tempo de residência entre as fases no equipamento de separação, o que, no caso do

processo de destilação, pode requerer torres de dimensões muito grandes, de alto investimento de fabricação, instalação e manutenção (BARROS, 1997).

O modelo de eficiência de pratos geralmente é baseado no conceito de eficiência de Murphree que relaciona o comportamento de um prato real (Figura 2.9) com o de um prato ideal mediante o grau de contato entre o líquido e o vapor, admitindo-se que o líquido esteja completamente misturado sobre o prato. É definido tanto para fase líquida (Equação 2.1) como para fase vapor (Equação 2.2) (BARROS, 1997).

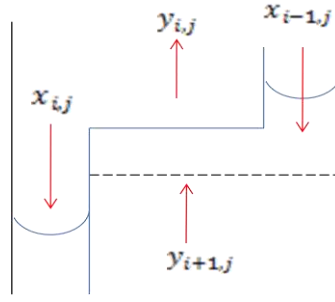


Figura 2.9 – Esquema representativo de uma coluna de destilação. Adaptado de BARROS, 2007.

Nas equações acima, x_{ij} e y_{ij} representam as composições do líquido e vapor em equilíbrio no prato, $x_{i-1,j}$ e $y_{i+1,j}$ representam as composições do líquido que chega e que sai do prato e x_{ij} e y_{ij} representam as composições do vapor que chega e que sai do prato, respectivamente.

2.2.3. Modelos de Equilíbrio

A modelagem de colunas de destilação pode ser feita pelo equacionamento de cada prato (Figura 2.10), tendo em cada estágio um modelo dinâmico descrito por um conjunto de equações diferenciais e algébricas. O sistema algébrico-diferencial é constituído pelos balanços de energia e pelos balanços de massa global e por componente, admitindo-se as relações de equilíbrio líquido-vapor, restrição de composições, cálculo de propriedades físicas e relações hidrodinâmicas (STAUDT, 2007).

Em virtude do comportamento de fluidos em um prato ser um processo complexo, algumas suposições para os modelos de estágio são comumente utilizados na literatura (STAUDT, 2007), tais como:

- O líquido e o vapor estão idealmente misturados;
- A pressão e a temperatura no prato são uniformes;

- O arraste e o gotejamento de líquido são ignorados;
- É considerado um valor de eficiência por prato.

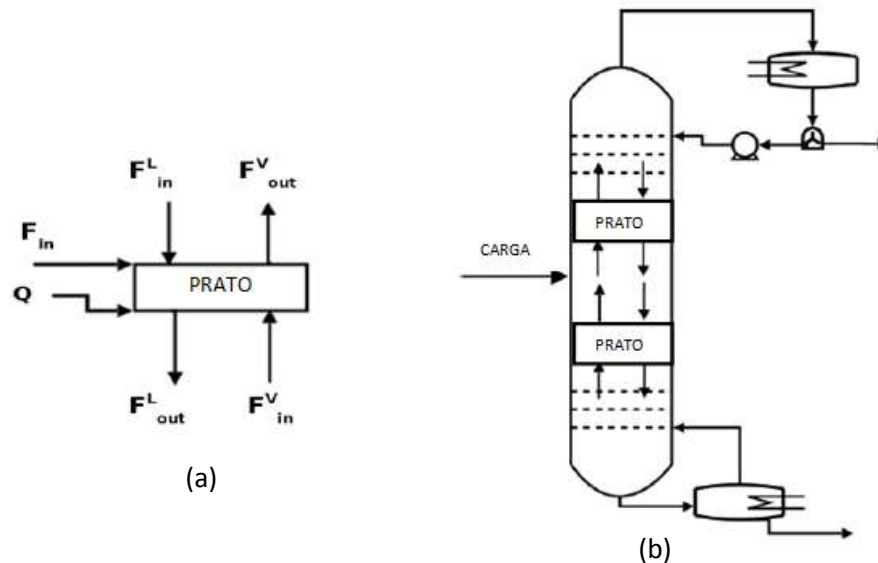


Figura 2.10 – (a) Esquema do estágio; (b) Esquema de Coluna de destilação. Adaptado de STAUDT, 2007.

Toda a modelagem matemática de vários tipos de modelos de estágios de uma coluna de destilação é apresentada em detalhes por STAUDT (2007), sendo estes modelos encontrados também na biblioteca EML (*EMSO Model Library*) do simulador EMSO (SOARES & SECCHI, 2003). Os modelos foram validados pela autora para dois tipos de colunas de destilação: uma coluna de destilação reativa com dados provenientes da literatura e uma coluna deisobutanizadora industrial da PETROBRAS com 80 pratos que separa o isobutano de uma mistura de 13 componentes.

Desta forma, a mesma modelagem matemática de estágio de STAUDT (2007), implementada no simulador EMSO, será utilizada e as modificações da modelagem da coluna de destilação serão apresentadas em detalhes no capítulo sobre estudo de caso (metodologia) deste trabalho. A seguir, serão apresentadas as principais equações de modelo de estágio (modelo dinâmico rigoroso) utilizadas neste trabalho, baseadas na representação de estágio da Figura 2.10.

- O equilíbrio termodinâmico é obtido quando são satisfeitas as condições de equilíbrio químico, térmico e mecânico entre as fases, dadas pelas equações:

$$(2.3)$$

$$(2.4)$$

$$(2.5)$$

Em que, γ_i é o coeficiente de fugacidade da espécie ou componente i em solução; x_i é a composição de líquido do componente i ; o superscrito L é utilizado para representar

o líquido e V para o vapor; T e P são temperatura e pressão, respectivamente; $y_{eq,i}$ é a composição do vapor do componente i que está em equilíbrio com o líquido.

- A equação de balanço de massa por componente em um prato de uma coluna de destilação é dada por:

$$\text{---} \quad (2.6)$$

Onde L e V são as vazões molares de líquido e vapor, respectivamente. Os subscritos *in* e *out* indicam as correntes de entrada e saída, respectivamente, e z é a composição da alimentação externa.

Sendo o acúmulo molar definido como:

$$(2.7)$$

As equações para o cálculo das vazões de líquido e vapor do prato são função das propriedades físicas dos fluidos, da geometria do prato, da queda de pressão e do acúmulo de líquido em cada estágio, sendo essas equações apresentadas no tópico sobre hidráulica de pratos.

- Balanço de energia:

$$\text{---} \quad (2.8)$$

Sendo a energia do estágio definido como:

$$(2.9)$$

Onde H_L e H_V são as entalpias de líquido e vapor, respectivamente, H_{ext} é a entalpia da alimentação externa e Q_{ext} é a taxa de calor fornecido ao estágio por fonte externa.

- Restrições das frações molares na saída de cada prato:

$$(2.10)$$

$$(2.11)$$

- Restrição geométrica:

$$(2.12)$$

- Nível de líquido:

$$\text{---} \quad (2.13)$$

Onde A_p é a área útil do prato (área total do prato - área de downcomer), V_{prato} é o volume total do prato, $Level$ é o nível de líquido, v_L é o volume molar da fase líquida e v_V é o volume molar da fase vapor.

➤ Eficiência de Murphree:

_____ (2.14)

2.2.4. Hidráulica de Prato

Segundo MAHDIPOOR *et al.* (2007), o estudo de hidráulica de uma coluna pode influenciar potencialmente nas taxas de produção e/ou no melhor método de projeto de novas unidades, bem como em melhores desempenhos de controladores utilizados.

Os principais fatores que influenciam o desempenho do prato são (STAUDT, 2007):

- formação de espuma;
- arraste de líquido e vapor;
- gradiente na concentração de líquido no prato;
- gotejamento;
- inundação;
- queda de pressão.

O projeto de uma coluna de destilação deve considerar estes fatores, pois a maioria deles é consequência da capacidade da coluna e das vazões internas de líquido e vapor que caracterizam a condição de processo da coluna. Modelos rigorosos com simplificações nos modelos de hidráulica levam em conta apenas a formação de bolhas, porém isso pode afetar diretamente o nível de líquido no prato e conseqüentemente o seu grau de aeração, além da queda de pressão do equipamento (STAUDT, 2007).

Um exemplo de aplicação da modelagem dinâmica de coluna de destilação é apresentada por MAHDIPOOR *et al.* (2007) que utilizou um modelo rigoroso para simulação de uma coluna de bandejas industrial considerando os balanços de massa e de energia, juntamente com uma equação adequada de hidráulica de pratos. Neste trabalho foram investigados três diferentes regimes de fluxo líquido sobre o comportamento dinâmico do prato da coluna, mostrando em seus resultados que o tipo de regime de fluxo influencia o desempenho de separação de uma coluna.

A seguir, são citados dois modelos de hidráulica de pratos, um para descrever a vazão de vapor (Equação 2.15) e a outro para a vazão de líquido (Equação 2.16) os quais serão utilizados neste trabalho. Estas escolhas foram baseadas no estudo de modelos de hidráulica feito por STAUDT (2007) que obteve melhores resultados na comparação entre dados experimentais *versus* resultados do modelo. Muitos outros modelos de hidráulica de pratos são citados no trabalho de STAUDT (2007), não sendo, porém, este tipo de detalhamento o principal objetivo do presente trabalho.

➤ Modelo de vazão de vapor - Reepmeyer *et al.*(2003)

_____ (2.15)

Onde α (coeficiente de pressão no prato seco) é usado como parâmetro de ajuste do modelo; A_h é a área total dos furos do prato, ρ^v é a massa específica da fase vapor e P^v é a pressão da fase de vapor. Os subscritos *in* e *out* designam variáveis situadas na entrada e saída do estágio de equilíbrio, respectivamente.

- Modelo de vazão de líquido - Wang *et al.*(2003)

$$\frac{\text{---}}{\text{---}} \quad (2.16)$$

Onde α_w e β são parâmetros de ajuste do modelo; *Level* é o nível do prato; h_w é a altura do vertedouro e l_w é o comprimento do vertedouro.

Neste trabalho, serão utilizados dados medidos de planta para as simulações da coluna de destilação em estudo. Com isso, mostra-se de grande relevância uma revisão sobre os tipos de tratamento de dados industriais, sendo a reconciliação de dados abordada de maneira geral e resumida, além dos tipos de aplicações já utilizadas na literatura.

2.3. Reconciliação de dados de planta

Modelos de processo (fenomenológicos ou empíricos) são geralmente utilizados para acompanhamento da produção, gerenciamento da qualidade e implementação de estratégias para aumento das receitas de uma indústria. Além disso, estes tipos de modelos podem ser aplicados também em procedimentos de reconciliação de dados, de estimação de parâmetros, de otimização e de controle. Estas aplicações dependem da qualidade da informação contida nos dados coletados diretamente da planta - como vazões, concentrações, temperaturas, níveis ou pressões - ou podem ser resultantes de análises de laboratório (PRATA, 2005).

NARASIMHAN & JORDACHE (2000) explicam que medidas de processos são, inevitavelmente, corrompidas por erros durante a medição, processamento e transmissão do sinal medido. O total do erro em uma medição, que é a diferença entre o valor medido e o valor real de uma variável, pode ser representado como a soma das contribuições dos dois tipos de erros: erros aleatórios e erros grosseiros.

Erros aleatórios são erros pequenos devidos à variação normal do processo ou à variação aleatória inerente ao funcionamento do instrumento de medida. Os erros sistemáticos são erros maiores devidos à calibragem incorreta ou mau funcionamento dos instrumentos de medida, etc. Esses erros sistemáticos ocorrem ocasionalmente, ou seja, seu número é pequeno quando comparado ao número total de instrumentos em uma planta química (ROMAGNOLI & SÁNCHEZ, 2000).

Pela definição de NARASIMHAN & JORDACHE (2000), a reconciliação de dados é uma técnica que foi desenvolvida para melhorar a precisão das medições, reduzindo o efeito dos erros nos dados. A reconciliação de dados é capaz de ajustar medidas do processo para que as

estimativas possam satisfazer as restrições do modelo. As restrições do modelo são geralmente balanços de massa e energia, sendo possível incluir relações de desigualdade impostas pela viabilidade de operações de processo.

A abordagem integrada do tratamento de dados ou reconciliação envolve um conjunto de procedimentos matemáticos aplicados à instrumentação de processo e às medidas. ROMAGNOLI & SÁNCHEZ (2000) resumem a metodologia geral em três principais etapas:

- Classificação das variáveis de processo e decomposição do problema;
- Detecção, identificação e estimativa dos erros grosseiros;
- Ajuste da medição e estimativa das variáveis de processo não mensuráveis.

Outra questão importante é a possibilidade de realizar a reconciliação com um modelo em estado estacionário ou um modelo dinâmico do processo. Na prática, um processo nunca está realmente em um regime estacionário. No entanto, uma planta é normalmente operada por várias horas ou dias em uma região em torno de um estado estacionário nominal de operação. Durante condições transientes (como durante uma transição para um novo tipo de petróleo em uma refinaria), quando o desvio do estado estacionário é significativo, a reconciliação de estado estacionário não deve ser aplicada, pois poderá resultar em grandes ajustes dos valores medidos. As medições efetuadas durante tais períodos transitórios podem ser reconciliadas, se necessário, utilizando um modelo dinâmico do processo (NARASIMHAN & JORDACHE, 2000).

Como mencionado no trabalho de PRATA (2005), KUEHN e DAVIDSON (1961) foram os pioneiros a reportarem o problema de reconciliação de dados em estado estacionário usando um modelo linear. Os autores ajustaram os dados de processo através da formulação da reconciliação de dados como um problema de otimização de uma função objetivo de mínimos quadrados ponderados, sujeita à satisfação dos balanços de massa e energia. No presente trabalho, esta mesma consideração será utilizada, sendo a sua modelagem utilizada através da função de Otimização (*Optimization*) contida no simulador EMSO e pela função dos mínimos quadrados ponderados como descrito na Equação 2.17.

A função de mínimos quadrados ponderados é apresentada na Equação 2.17 que possui um significado estatístico preciso, sendo uma métrica natural quando os erros experimentais são distribuídos normalmente e não estão correlacionados. Além disso, esta função objetivo permite misturar diferentes conjuntos de dados, desde que os erros de medida sejam conhecidos, sendo a variância do erro experimental (dado pelo quadrado do desvio padrão) o fator de normalização natural das variáveis do problema (SCHWAAB & PINTO, 2007).

$$(2.17)$$

Onde, NE é o número de medidas; NY é o número de variáveis; \hat{y}_i a variável estimada pelo modelo; y_i a variável medida e σ_i o desvio padrão do dado medido.

Outros tipos de técnicas de reconciliação de dados também foram estudados por PRATA (2005), englobando estados estacionários e dinâmicos para o monitoramento em tempo real da qualidade do produto e da produtividade do processo de polimerização de polipropileno em massa em um reator tanque continuamente agitado com correntes de reciclo e purga.

Outro exemplo da aplicação da reconciliação em processos industriais é apresentado por ROMAGNOLI *et al.* (1996) no qual a reconciliação de dados foi utilizada para um reator de pirólise industrial desenvolvido em torno dos balanços de massa e de energia. A abordagem foi testada utilizando dados de plantas coletados em intervalos regulares ao longo do pleno funcionamento do reator. A presença de erros grosseiros no conjunto de dados foi detectada e corrigida. Com isso, o coeficiente global de transferência de calor (parâmetro de funcionamento do reator) calculado através de dados reconciliados mostrou uma tendência consistente com a experiência da planta real.

Vale ressaltar que a reconciliação de dados é baseada na suposição de que só os erros aleatórios estão presentes nas medidas que seguem uma normal (Gaussiana) de distribuição. Por conseguinte, é necessário identificar e remover os possíveis erros grosseiros presentes (NARASIMHAN & JORDACHE, 2000). Existem também técnicas de reconciliação robusta, que procuram reconciliar os dados mesmo na presença de erros grosseiros. Uma revisão destas técnicas é encontrada em PRATA (2005).

Entretanto, não faz parte do escopo deste trabalho a aplicação de detecção de erros grosseiros. Admite-se aqui que os erros de medição são pequenos e aleatórios, sendo sua comprovação feita por análise visual dos dados medidos utilizados nos intervalos de processo em estudo. Além disso, a etapa de estimação de parâmetros não foi necessária neste estudo, sendo apenas o tratamento dos erros aleatórios o objetivo do uso da reconciliação.

Portanto, verifica-se a importância da reconciliação estacionária neste estudo a partir do procedimento de estimar os “verdadeiros” valores das variáveis medidas (corrompidas por pequenos erros) de modo a satisfazer os balanços de material (global e por componente) imposto ao sistema de uma coluna de destilação, utilizando o critério dos mínimos quadrados ponderados, de modo a ponderar os desvios observados entre os valores medidos e preditos.

Todo este estudo de tratamento de dados será comparado com os dados medidos de planta sem a reconciliação e discutidos ao longo deste trabalho. Esta é a etapa que precede o principal foco do trabalho que é a etapa de inferência estacionária e dinâmica de uma coluna de destilação, sendo este tema mais bem detalhado no tópico a seguir.

2.4. Sistemas de inferências para colunas de destilação

Para muitos processos químicos, existe uma dificuldade em se adquirir valores medidos em uma frequência adequada e com qualidade satisfatória para variáveis como a composição e a densidade de produtos. As variáveis de processo tais como temperatura, pressão, vazões, no entanto, podem ser facilmente medidas em uma taxa elevada. Nestes

casos onde as variáveis de processo (ou variáveis secundárias) são disponíveis em uma taxa mais freqüente do que as variáveis de qualidade (ou variáveis primárias), é interessante o desenvolvimento de métodos de predição de variáveis de qualidade em freqüências mais altas utilizando as medições disponíveis das variáveis secundárias de processo. Tais métodos são úteis, por exemplo, para o monitoramento em tempo real da qualidade dos produtos gerados em uma unidade industrial (LU *et al.*, 2003).

Em uma coluna de destilação, as composições de produtos são normalmente variáveis a serem inferidas, enquanto que as variáveis secundárias são temperaturas, pressões e vazões. A inferência é basicamente constituída de algoritmos e modelos matemáticos e sua qualidade é medida pela precisão de suas estimativas. Assim, a predição de propriedades de difícil aquisição por sistemas convencionais de análise pode ser realizada, de forma indireta, por inferências ou analisadores virtuais, através da medida de variáveis correlacionadas à propriedade que se deseja estimar (SECCHI *et al.*, 2009).

Para o controle da composição de produto de colunas de destilação, é raro o caso de se utilizar medidas de composições dos produtos como variáveis controladas devido à dificuldade da exatidão dessas medidas *on-line*. Além disso, a maioria dos analisadores, como os cromatógrafos a gás, sofrem grandes atrasos nas medidas e precisam de altos investimentos e custos de manutenção. Assim, é evidente a importância do uso de modelos inferenciais (KANO *et al.*, 2000). No estudo de caso do presente trabalho, este tempo de análise de cromatógrafo é de 50 minutos, o que evidencia a importância de inferências de composições para as colunas de destilação desta unidade.

Na destilação, os primeiros modelos inferenciais desenvolvidos para estimar a qualidade do produto em colunas de destilação basearam-se no uso da temperatura de um prato já previamente selecionado como variável de predição indireta (CAVALCANTE Jr, 1996).

Assim, no lugar de controlar a composição de um produto, o controle de temperatura do prato é amplamente utilizado, baseado na suposição de que a composição do produto pode satisfazer as suas especificações quando a temperatura especificada do prato é mantida constante em seu *set-point*. Para o caso de colunas de destilação multicomponente, o controle de temperatura não é sempre eficaz para o controle de composição, uma vez que a temperatura do prato pode não corresponder exatamente à composição de produto (KANO *et al.*, 2000).

Como mencionado no estudo de CAVALCANTE Jr (1996), BROSILLOW *et al.* (1972) foram os primeiros a sugerir o uso de modelos de inferências empíricos com múltiplas variáveis para inferir a composição dos produtos em colunas de destilação. A utilização deste modelo mostrou na simulação do controle de uma coluna de destilação multicomponente que o controle produzido com um modelo inferencial deste tipo foi comparável ao produzido com a medida direta da composição. Desde então diversos trabalhos tem utilizado este tipo de raciocínio.

KANO *et al.* (2000) utilizaram modelos inferenciais empíricos para estimar em linha a composição do produto de uma coluna de destilação multicomponente a partir de variáveis medidas de processo, tais como temperaturas de prato, vazão de refluxo, carga térmica do

refervedor e pressão. Estes autores fizeram a comparação dos modelos inferenciais (estado estacionário e dinâmico) construídos a partir da regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS - Partial Least Squares) junto com o sistema de controle, concluindo então, que a precisão da estimativa pode ser melhorada através da utilização de modelos dinâmicos.

De acordo com KANO *et al.* (2003), a concepção de um sistema de controle a partir de um modelo de inferência é um bom exemplo para extrair informações úteis a partir dos dados do processo e usá-lo para melhorar o funcionamento do processo. Neste trabalho, o autor descreve um modelo inferencial dinâmico empírico de uma coluna de destilação multicomponente não para estimar a composição do produto atual, mas para prever a composição futura e faz uso de um esquema de controle, configurando o esquema de um “controle preditivo inferencial”.

Conforme é explicado no trabalho de SCHWAAB & PINTO (2007), os modelos empíricos são comumente utilizados porque são em geral mais simples e fáceis de obter, permitindo a construção de modelos de forma mais rápida e barata a partir de vasta quantidade de dados medidos do processo (ou experimentais), quando comparados à construção de modelos teóricos mais detalhados do processo. Entretanto, são os modelos teóricos que permitem extrapolações muito mais confiáveis que aquelas obtidas com modelos empíricos, pois em geral, os pressupostos teóricos (conservação de massa, energia e quantidade de movimento) utilizados são válidos em ampla faixa de dados de processos de planta (experimentação) ou perturbações inerentes ao processo.

Assim, a partir de modelos teóricos, vale ressaltar a importância do uso de modelos dinâmicos frente aos modelos estacionários, visto que inferências obtidas por modelos estacionários podem resultar em inferências pobres (por exemplo, quando o valor de inferência está muito distante do valor real de composição) quando o regime está em transiente, pois não consideram a dinâmica frente às constantes perturbações no processo.

Portanto, são inúmeras as aplicações de modelos inferenciais para controle de qualidade (especificação) e melhoria de um processo. É vasta a quantidade de trabalhos citados na literatura que utilizam modelos empíricos baseados nos dados históricos do processo, utilizados muitas das vezes por conta da complexidade do uso de modelos teóricos. Porém, os estudos de modelos fenomenológicos são de grande relevância para o conhecimento da dinâmica do processo, além de poder contribuir também para o melhor desempenho do sistema de controle do equipamento. Logo, o desafio deste trabalho é o uso do modelo que considera as equações dos fenômenos físicos de uma coluna de destilação multicomponente para a inferência dinâmica e estacionária das composições de topo e fundo desta coluna.

Capítulo III - Metodologia

3.1. Estudo de caso: Coluna desetanizadora

Neste capítulo será apresentada uma breve descrição da unidade de processamento de gás natural da PETROBRAS na qual faz parte a coluna de destilação desetanizadora. Este exemplo será utilizado para a verificação das estimativas de composição de produtos obtidas pelo modelo de inferência implementado no ambiente EMSO de simulação. Além disso, serão apresentados os resultados preliminares de parâmetros geométricos que compõem o modelo da coluna de destilação e considerações feitas para o tratamento de dados industriais (etapa de reconciliação).

3.1.1. Processo

O fluxograma simplificado da UPGN em estudo é apresentado na Figura 3.1. Neste processo, a carga de gás natural sofre inicialmente um processo de desidratação e de um resfriamento intenso que ocorre de duas formas, pelo processo de turbo-expansão e por troca térmica no ciclo a propano. Toda a integração energética desta unidade ocorre através da caixa-fria que engloba várias correntes do processo. A corrente resfriada passa inicialmente pela coluna desmetanizadora que separa os leves (CO_2 , N_2 e C_1) dos mais pesados ($\text{C}_2, \text{C}_3, \dots, \text{C}_9$), chegando a ter na sua composição de topo 91% de metano. O produto de fundo da primeira torre segue para a desetanizadora que separa o etano e resíduos leves (CO_2 e C_1) dos demais componentes, e seu produto de fundo segue finalmente para a desbutanizadora. Nesta última torre ocorre o fracionamento do líquido de gás natural de interesse que é o GLP, composto pelo propano e butano, obtido no topo desta torre, restando os componentes mais pesados (C_5+) no fundo, podendo ser adicionada a outras correntes mais pesadas da unidade (CANABARRO *et al.*, 2009).

Na torre desetanizadora, tem-se dois tipos de destinos para o produto de topo: armazenamento de etano ou uso como gás combustível no forno da unidade, sendo este último tipo, o destino mais utilizado. O condensador desta torre utiliza o propano refrigerante para o resfriamento da corrente de topo da coluna, sendo este produto de topo composto por até 87% em massa de etano. O refeedor desta torre recebe a carga térmica de aquecimento através óleo térmico proveniente do forno desta unidade. O produto de fundo desta torre apresenta uma média de 50% em massa de propano. Nesta torre, é de suma importância que não ocorram perdas de C_3+ no topo, garantindo que o produto de interesse (GLP) seja obtido em sua totalidade no topo da desbutanizadora.

A coluna desetanizadora foi escolhida para o estudo de inferência por dois principais motivos:

- Os produtos de topo e fundo possuem cromatógrafos (análise de composição), sendo esta condição essencial para a verificação das inferências de topo e fundo. Já no caso da desbutanizadora, somente existe cromatógrafo para o produto de topo (GLP);
- Trata-se de uma coluna de destilação tradicional, com uma entrada (carga), saída de produtos no topo e no fundo (uma corrente em cada caso), um condensador parcial e

um refeedor. A única observação a ser feita é a ausência de destilado líquido no topo, com o refluxo de todo o condensado.

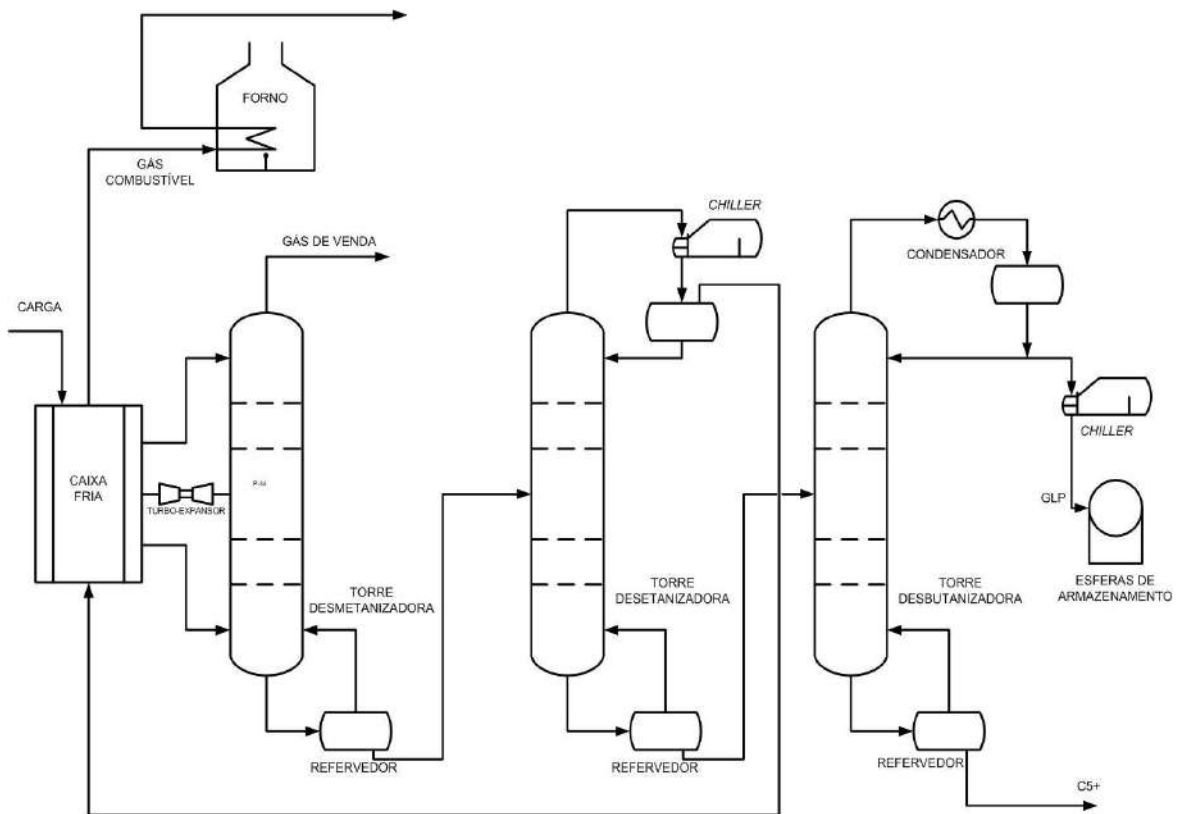


Figura 3.1 - Fluxograma simplificado da UPGN em estudo. Fonte: CANABARRO *et al.* (2009).

3.1.2. Modelo

A coluna em estudo foi obtida com a seguinte estrutura de equipamentos:

- 32 estágios de equilíbrio (igual ao número de pratos reais);
- Entrada da carga ocorre do 17° prato da coluna (considerando a numeração na ordem crescente do topo para o fundo da torre);
- Existem 12 componentes na carga (CO_2 , metano (C_1), etano (C_2), propano (C_3), iso-butano ($i\text{-C}_4$), n-butano (C_4), iso-pentano ($i\text{-C}_5$), n-pentano (C_5), n-hexano (C_6), n-heptano (C_7), n-octano (C_8) e n-nonano(C_9));
- Condensador integrado ao vaso de acúmulo do topo da coluna. Com isso, foi utilizado o volume e área transversal do vaso de acúmulo como parâmetros do condensador;
- Refeedor tipo *kettle* integrado ao tanque de armazenamento do fundo da torre (abaixo do 32° prato). Com isso, foi utilizado o volume e área transversal do tanque de fundo da torre como parâmetros do refeedor;
- Um separador de corrente (*splitter*), para a corrente de produto de topo;
- Uma bomba na corrente de refluxo.

As seguintes estruturas de controle da torre foram consideradas em conformidade com as estruturas da unidade real:

- Controle de nível do tanque de armazenamento do fundo da torre (abaixo do 32° prato) através da manipulação da vazão do produto de fundo;
- Controle de nível do vaso de acúmulo de topo da coluna através da manipulação da vazão de refluxo líquido no topo;
- Controle da temperatura do produto de topo da coluna (corrente de vapor que sai do condensador) manipulando diretamente a carga térmica do condensador;
- Controle da temperatura de fundo da coluna (corrente de vapor que sai do refeedor e retorna ao prato de fundo da coluna) manipulando diretamente a carga térmica do refeedor;
- Controle de pressão no topo (corrente que sai do topo da coluna) através da manipulação da vazão de produto de topo (saída de vapor do condensador).

As principais adaptações nas malhas de controle por conta das considerações de modelagem foram:

- Utilização de condensador e vaso de acúmulo de forma integrada tornou a variável de nível do vaso pertencente ao modelo do condensador;
- Utilização de refeedor e tanque de armazenamento do fundo da torre de forma integrada tornaram a variável de nível do tanque pertencente ao modelo do refeedor;

Os recursos de modelagem oferecidos pelo simulador EMSO e contidos na biblioteca EML (*EMSO Model Library*) tornaram possível a construção do modelo da torre desetanizadora através dos conceitos de composição herança (derivado da Programação Orientada a Objetos, OOP), como por exemplo, as propriedades de corrente (temperatura, pressão, vazão, etc.) de um modelo ser transferido aos outros modelos do equipamento. Além disso, todas as unidades da coluna (estágios de equilíbrio, condensador, refeedor, separador de correntes, etc.) foram conectadas formando um conjunto de modelos que nesta configuração formaram o modelo de todo o sistema da coluna de destilação. Todos os modelos de cada parte da coluna podem ser encontrados de forma bem detalhada no trabalho de STAUDT (2007), autora dos modelos de coluna de destilação encontrados da biblioteca do simulador.

O modelo implementado originalmente por STAUDT (2007) em ambiente EMSO foi adaptado por CANABARRO & SECCHI (2010) para a mesma Unidade de Processamento de Gás Natural em estudo (localidade será omitida por questão de confidencialidade da PETROBRAS), sendo então utilizado como ponto de partida para o presente trabalho.

A modelagem completa em ambiente EMSO (versão 0.9.60 de 2009) da torre está disponível no APÊNDICE A1 e o fluxograma do processo, juntamente com as estruturas de controle da coluna desetanizadora, é apresentado na Figura 3.2.

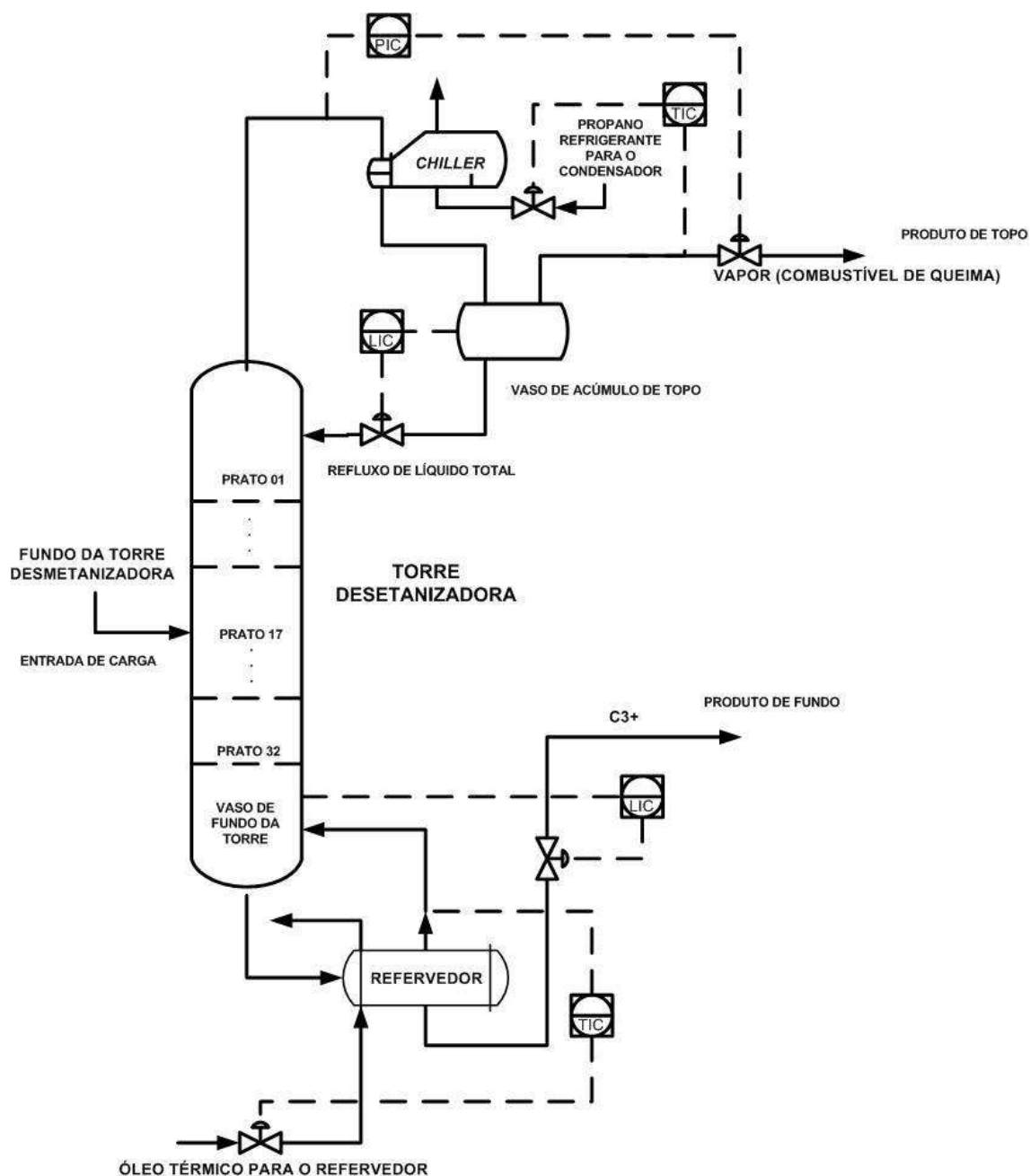


Figura 3.2 – Esquema da coluna desetanizadora em estudo.

A partir de informações fornecidas pela PETROBRAS, não existe controle da temperatura de topo da coluna em todo o período de estudo deste trabalho. No caso das análises em estado estacionário, utilizou-se a malha de controle desta temperatura para fins de determinação das cargas térmicas do condensador que não são conhecidas nesta coluna, utilizando-se os dados de temperatura do processo como os valores de *setpoint* da referida variável. Isto foi feito, pois os estados estacionários foram obtidos por simulações dinâmicas com tempos suficientemente longos para atingir o estacionário. Nas análises em regimes transientes, utilizou-se em malha aberta para esta mesma variável de controle, com valores fixos de carga térmica de condensador (médias de valores obtidos no modelo em estado estacionário). Esta consideração foi utilizada apenas nas análises transientes porque as estruturas de controle influenciam fortemente a dinâmica do sistema.

Uma dificuldade inicialmente encontrada nos dados fornecidos pela PETROBRAS foi o fato de todas as vazões serem medidas na forma volumétrica e em condições padrão (1 atm e 20°C). Logo, um equacionamento adicional, inserido no modelo *Stream* (modelo de corrente com propriedades do fluido) existente no EMSO, foi necessário para se obter as conversões de vazão volumétrica em condição padrão para as vazões volumétricas de processo, e estas, para as vazões molares e mássicas de processo. A modelagem no ambiente de simulação EMSO encontra-se no APÊNDICE A2.

Outra dificuldade encontrada foi a necessidade de se estimar a pressão da corrente de alimentação da torre (carga), pois este dado não é medido na planta. Para isto, utilizaram-se as vazões molares de topo e fundo obtidas pelo modelo *Streams*, considerando que a vazão molar de alimentação é igual à soma dessas vazões de saída da torre. Assim, a partir de outros dados disponíveis de carga (temperatura, composição,), estimou-se a pressão da carga para satisfazer a vazão molar de carga previamente estimada. Considerando-se que os valores de pressão de carga obtidos foram, em média, muito parecidos (e com ordem de grandeza também esperada), este procedimento foi utilizado e bem aceito para todos os estudos.

Como os parâmetros das malhas de controle da coluna de destilação influenciam fortemente o comportamento dinâmico da coluna, a sintonia dos controladores foi realizada na etapa de estudo dos intervalos com dinâmica (dados com 24 horas de simulação e duas perturbações na planta), onde ocorrem mudanças dos valores de variáveis inicialmente em estacionário (vazão de carga, por exemplo) e alterações de *setpoints* de algumas variáveis controladas (T_{topo} , T_{fundo} , P_{topo}). Assim, os ajustes dos parâmetros de controle (ganho, tempo integral e tempo derivativo) foram obtidos de forma que não houvesse muita oscilação e nem saturação (variáveis manipuladas), além do objetivo de seguir os *setpoints* da planta com velocidade compatível com os dados disponíveis.

Sendo assim, os ajustes de controle foram necessários para que a representação do comportamento dinâmico do modelo estivesse de acordo com o comportamento das respostas da planta. No entanto, é necessário ressaltar que isto foi feito devido à dificuldade em se obter as reais equações das malhas de controle da coluna de destilação e seus parâmetros. Apesar das equações de parametrização dos controladores implementados nos SDCDs (Sistema digital de controle distribuído) da planta não serem necessariamente as mesmas equações implementadas nos modelos em estudo, espera-se que tenha sido obtida uma forma aproximada de reproduzir as reais ações de controle presentes na planta.

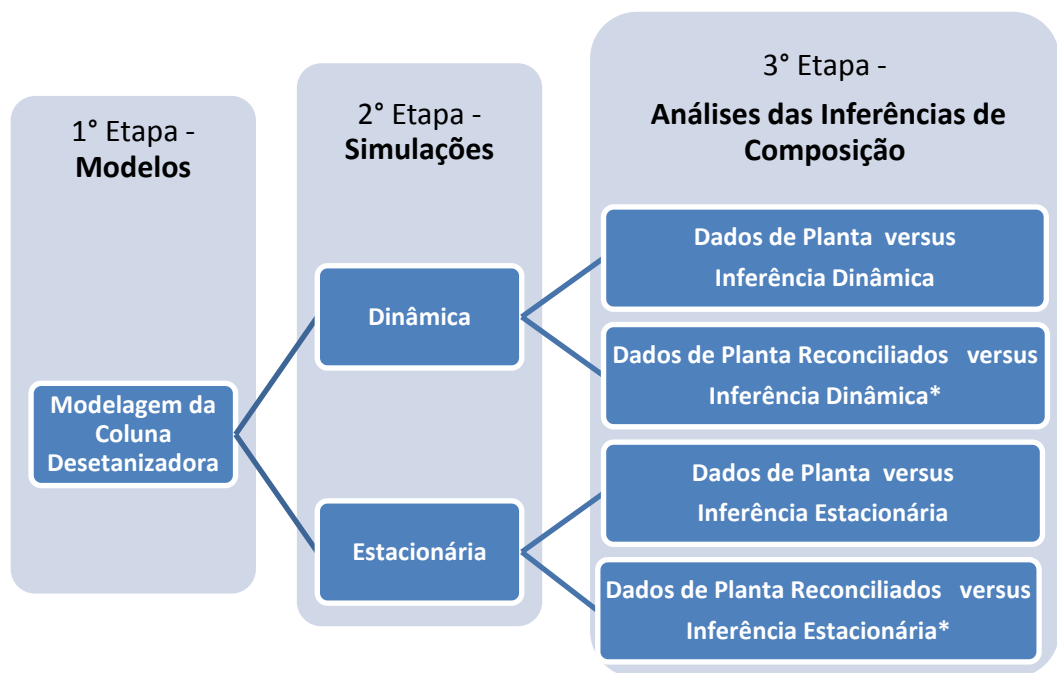
3.1.3. Simulação

Para a execução da simulação da coluna desetanizadora, utilizou-se o pacote termodinâmico *VRTherm* integrado ao simulador EMSO. Dentre os modelos termodinâmicos disponíveis, optou-se pelo uso do modelo de *Soave-Redlich-Kwong* (SRK) para prever o comportamento tanto da fase líquida como da fase vapor durante as simulações por se tratar de uma mistura de hidrocarbonetos leves a pressões elevadas.

Algumas observações sobre o processo de simulação no EMSO são:

- A condição inicial (função *InitialFile*) da simulação é um fator crucial para se obter uma rápida convergência do modelo. Assim, a cada modificação feita na construção do modelo da coluna, novos arquivos de condição inicial (arquivos com terminação “.rlt”) eram gerados e assim utilizados;
- O modelo em regime estacionário foi obtido pelo mesmo modelo dinâmico da coluna, com a diferença de se utilizar um comando (função *Dynamic = false*) no modelo que zera as derivadas das equações, tornando as equações diferenciais do dinâmico em equações algébricas do estacionário. Neste caso, uma estimativa inicial também é utilizada (função *GuessFile*) a partir do arquivo de condição inicial do modelo dinâmico, gerado após uma simulação dinâmica com tempo suficiente para obter uma estimativa inicial, para auxiliar o simulador na resolução das equações do modelo.

Como as simulações foram realizadas com dados de planta industrial, uma comparação das simulações dinâmicas e estacionárias com dados tratados será apresentada como resultados de análise, tanto com a utilização de dados reconciliados como com a utilização de dados puros medidos de planta. Um esquema das etapas da metodologia é apresentado na Figura 3.3.



**Figura 3.3 – Esquema das etapas de metodologia realizadas neste trabalho.
(*) Indica que a Inferência utilizou dados reconciliados.**

Nos modelos das inferências dinâmicas e estacionárias utilizaram-se os dados de carga (vazão e composição) reconciliados para a abordagem de modelos de inferência com dados tratados. Nesta etapa, assume-se que os “verdadeiros” valores são os dados reconciliados e estes podem ser então comparados com os resultados das simulações (inferências).

No caso das simulações estacionárias, foram escolhidos três intervalos estacionários (que não fazem parte do intervalo de estudo dinâmico) para a verificação de inferências com diferentes valores para a vazão de alimentação da torre. Estes pontos operacionais foram simplificados a partir da média dos intervalos citados, tendo todos os intervalos uma duração de dez horas cada um e dados de minuto a minuto.

Na simulação dinâmica, foi escolhido um intervalo de dados com 24 horas (medidos de minuto a minuto), onde ocorrem dois momentos de perturbações do tipo rampa na vazão de alimentação da torre. Com isso, configurou-se no modelo dinâmico dois tipos de intervalos dinâmicos (*DIN1* e *DIN2*), considerando a mudança de três estados estacionários (*EE1*, *EE2* e *EE3*) conforme a Figura 3.4.

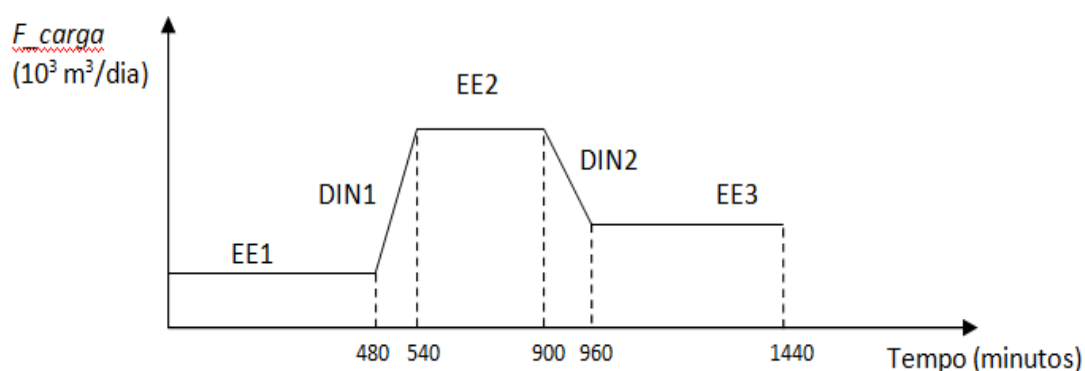


Figura 3.4 – Esquema do intervalo de planta em estudo que apresenta intervalos com dinâmicas.

3.2. Cálculos dos parâmetros geométricos da coluna

As equações referentes ao comportamento hidráulico dos fluidos através dos internos da coluna de destilação e dos trocadores de calor, responsáveis pelo cálculo das vazões de líquido e vapor e consideradas neste trabalho, requerem a definição do valor de alguns parâmetros geométricos. Entretanto, por se tratar de dados considerados confidenciais pela PETROBRAS, todos os valores serão omitidos, sendo apresentadas apenas as formas de resolução dos parâmetros necessários aos modelos.

➤ Condensador e Refervedor:

Como já mencionado anteriormente, foram utilizados os dados do vaso de acúmulo de topo para o modelo do condensador, considerando o controle de nível do vaso neste equipamento. Têm-se os seguintes dados de projeto disponíveis:

- Diâmetro do vaso (D)
- Comprimento do vaso

Logo:

$$\text{—} \quad (3.1)$$

$$(3.2)$$

Da mesma forma, foram utilizados dados do tanque de acúmulo da torre para o modelo do refervedor, considerando o controle de nível do tanque neste equipamento. Utilizou-se também os dados de projeto disponíveis, como o diâmetro do fundo da torre (D) e a altura do tanque de fundo da torre, que resultaram através das Equações 3.1 e 3.2, os valores de área da seção transversal e volume do refervedor.

➤ Seção de topo e fundo da coluna:

O esquema da Figura 3.5 apresenta a configuração das áreas de *downcomer*, área inativa e área ativa do prato, além da distribuição dos dispositivos de válvulas no prato. A seção de topo compreende o 1º prato até o 16º prato, tendo um diâmetro menor que a da seção de fundo da torre. Os dados de projeto da seção de topo e fundo disponíveis são:

- Diâmetro da seção da torre (D);
- Comprimento do vertedouro (lw);
- Altura do vertedouro (hw);
- Comprimento da corda (H);
- Espaçamento entre os pratos;

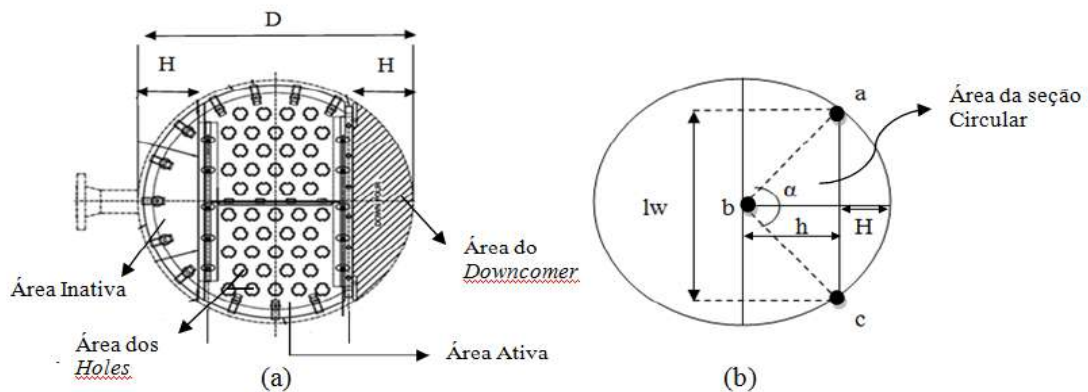


Figura 3.5 – (a) Esquema do prato da torre visto de cima; (b) Esquema dos comprimentos geométricos do prato para uso nos cálculos.

A seguir, as fórmulas utilizadas tanto para seção de topo como para a de fundo:

$$\text{---} \tag{3.3}$$

$$\text{---} \tag{3.4}$$

$$\text{---} \text{ ---} \tag{3.5}$$

$$\text{---} \text{ ---} \tag{3.6}$$

(3.8)

Para o cálculo das áreas dos furos dos pratos com dispositivos do tipo válvulas, foi utilizada uma aproximação de 8 a 15% da área ativa do prato, tendo um valor ótimo em torno de 12%, sendo estas estimativas de projeto encontradas no trabalho de CALDAS *et al.* (2007). Como a coluna de destilação em estudo possui uma pequena perda de carga do topo para o fundo, foi utilizado o valor de 15% da área ativa para o cálculo das áreas perfuradas, tendo então uma área perfurada maior (menor perda de carga).

(3.9)

(3.10)

Os resultados de cálculos geométricos das duas seções da coluna utilizados nos modelos de hidráulica de prato foram:

- Volume total do prato;
- Área útil de líquido no prato;
- Área total dos furos do prato.

3.3. Tratamento de Dados – Modelo Estacionário e Dinâmico

No tratamento de dados para os modelos de inferência estacionários, foram construídos o modelo que trata da simulação estacionária com o uso de equações de balanço de massa global (Equação 3.11) e por componente (Equação 3.12) e as equações de normalização de composição de líquido e vapor (Equação 3.13 e 3.14, respectivamente). Também foi realizado um esquema que trata da reconciliação através da função objetivo dos mínimos quadrados ponderados (Equação 3.15). A modelagem no ambiente de simulação EMSO pode ser consultada no APÊNDICE A3.

(3.11)

, em que $i=1,2,\dots,c$ (3.12)

(3.13)

(3.14)

A seguir, encontra-se a Equação 3.15 aplicada às variáveis em estudo:

$$\frac{\sum_{i=1}^c \left(\frac{F_i}{F} \right) \left(\frac{C_{i,c}}{C_{i,t}} \right)}{\sum_{i=1}^c \left(\frac{F_i}{F} \right) \left(\frac{C_{i,c}}{C_{i,t}} \right)} \quad (3.15)$$

Onde:

c : número de componentes. Nesta coluna, trata-se de 12 componentes ao todo.

F : Vazão molar média;

$\bar{C}_{i,c}$ e $\bar{C}_{i,t}$: médias das composições calculadas (modelo) de carga, topo e fundo do componente i , respectivamente;

$C_{i,c}$ e $C_{i,t}$: composições medidas (planta) de carga, topo e fundo do componente i , respectivamente;

Desvio padrão da variável (vazão ou composição).

Os valores de desvio padrão foram obtidos pela função “DESVPAD” encontrada no *software* Microsoft Office Excel 2007, considerando-se que dentro do intervalo estacionário, existe um desvio padrão médio das medidas de minuto em minuto. Como os intervalos em estudo possuem cerca de dez horas de dados, medidos de minuto em minuto, tem-se uma grande quantidade de dados para esta forma de cálculo de desvio padrão.

A aplicação dos modelos pode ser visualizada conforme o esquema das Figuras 3.6 e 3.7.

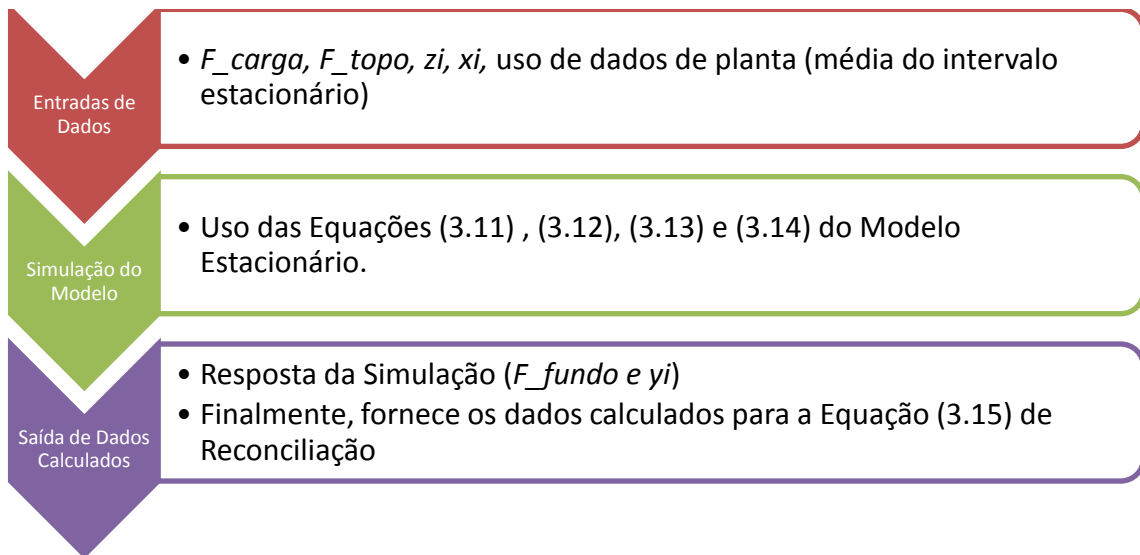


Figura 3.6 – Esquema do Modelo com as Equações de Balanço de Massa Global e por Componente.

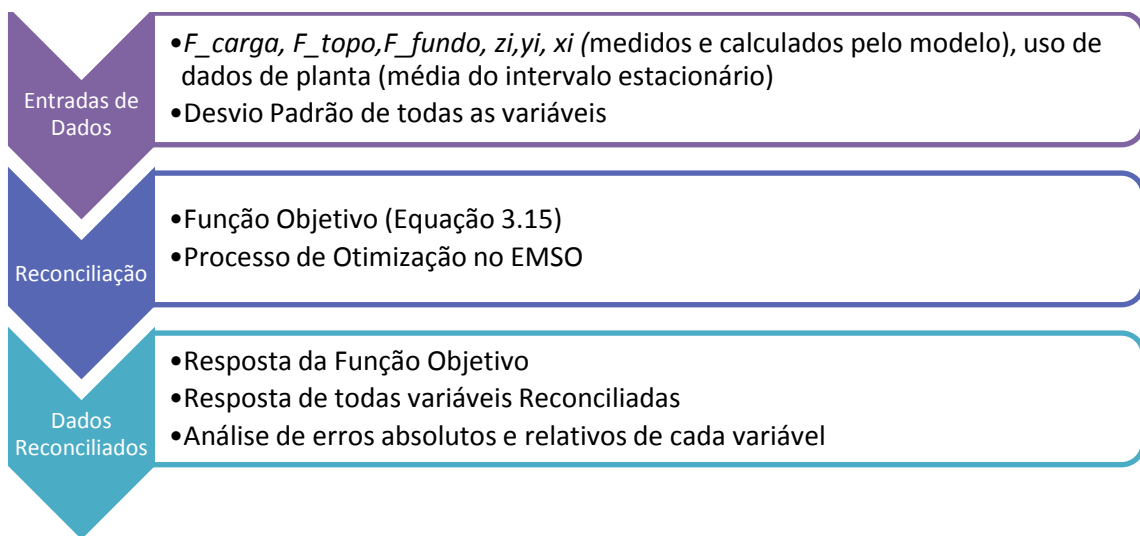


Figura 3.7 – Esquema de Reconciliação Estacionária com a Função dos Mínimos Quadrados Ponderados.

No caso dos modelos dinâmicos de inferência, não serão utilizados modelos de reconciliação dinâmica e sim uma correção das medidas de composição nos intervalos estudados com dinâmica (onde ocorre perturbação de carga, por exemplo). Assim, será considerado o erro absoluto da variável de composição de um estado estacionário (EE1) que antecede o intervalo dinâmico e o erro do estado estacionário (EE2) após o intervalo dinâmico,

obtendo-se erros médios para a variável no intervalo dinâmico (DIN), de acordo com a Equação 3.16.

(3.16)

Sendo,

(3.17)

Logo,

(3.18)

Assim, foram escolhidos alguns pontos dentro do intervalo dinâmico em estudo utilizando-se a Equação (3.18). Maiores detalhes serão apresentados no capítulo de resultados, assim como as análises dos intervalos estacionários e dinâmicos.

No capítulo a seguir, serão apresentados os resultados de reconciliação de dados de planta, bem como os erros de balanços de massa por componente com dados de planta puros e dados após a reconciliação. Serão enfatizadas as análises de inferências dos principais componentes de produtos de topo (CO_2 , C_1 , C_2 e C_3) e dos produtos de fundo (C_3 , $i-C_4$, C_4 , $i-C_5$, C_5 , C_6 , C_7 , C_8 , C_9), relevantes para o controle e monitoramento da unidade em estudo. No caso dos modelos estacionários, é apresentada uma breve análise de desvio das variáveis medidas – como as vazões de carga - em relação à média desta variável no intervalo estacionário em estudo. No caso dos modelos dinâmicos, será apresentada também uma breve análise de algumas das malhas de controle consideradas na torre desetanizadora.

Capítulo IV – Resultados

4.1. Tratamento dos dados em regime estacionário

A fase inicial para a análise dos dados em regime estacionário foi obtida por uma análise visual da variável de vazão volumétrica de carga (corrente de entrada) da torre. Essa análise preliminar possibilitou a obtenção de intervalos em regime estacionário da planta, sendo escolhidos então três pontos operacionais da planta para posterior análise com o modelo estacionário da torre (validação estacionária). Lembrando-se que todas as vazões volumétricas apresentadas estão expressas em condição padrão (20°C e 1 atm).

Além da análise visual do intervalo de dados de processo em estado estacionário, pôde-se verificar também que o desvio padrão (σ) em relação à média (μ) de cada intervalo apresentou valores dentro da faixa do erro de medida desta variável (< 5%) (Equação 4.1), confirmando um comportamento próximo ao regime estacionário. No caso do terceiro ponto operacional, apesar do erro de medida ser menor que 7%, os dados disponíveis foram verificados e constatou-se que apesar da maior variação das medidas de vazão nesta região de operação, devido a prováveis problemas de medição ou de sintonia de malha de controle, (dada à característica oscilatória da vazão) esta região foi considerada também em estado estacionário. Um resumo dessa análise é dado na Tabela 4.1 em que a vazão volumétrica de carga foi analisada para cada ponto operacional correspondente.

$$100 \sigma/\mu \quad (4.1)$$

Tabela 4.1 - Análise do intervalo estacionário da vazão volumétrica de carga nos três Pontos Operacionais.

Desvio padrão percentual da variável medida em relação à média no estacionário	Ponto Operacional (1)	Ponto Operacional (2)	Ponto Operacional (3)
Equação (4.1) aplicada à vazão de Carga (10³m³/dia)	4.36 %	4.53%	6.94%

Os três pontos operacionais foram escolhidos de forma que estivessem com valores diferenciados de vazão volumétrica estacionária da carga. Dessa forma, a validação foi obtida para diferentes pontos estacionários da torre desetanizadora. Os resultados gráficos serão apresentados, separadamente, para cada ponto do intervalo estacionário em estudo.

No tratamento dos dados em estado estacionário foram realizadas reconciliações dos dados de processo pelas equações de balanço de massa global e por componente utilizando-se as variáveis: vazões de carga, topo e fundo, além das composições de carga, topo e fundo da torre desetanizadora. Os resultados também mostram a comparação de dados de processo medidos e dados reconciliados e os correspondentes erros relativos de balanço de massa global.

Algumas das considerações feitas para estes resultados de tratamento de dados em estado estacionário foram:

- Utilizaram-se os valores médios de cada variável de processo do intervalo (ponto operacional) em estudo;
- Os valores de desvio padrão das vazões molares foram estimados em 2% dos valores obtidos (cálculos de conversão de vazão volumétrica para molar), visto que estes foram os valores aproximados obtidos nos desvios nas vazões volumétricas medidas de planta;

a) **Ponto de operação (1): 14 de maio de 2009 (12h às 22h)**

A Figura 4.1 mostra o comportamento da vazão volumétrica da carga da torre durante o dia escolhido (24 horas) e destaca-se o intervalo considerado em estado estacionário, compreendendo 10 horas de dados medidos de minuto em minuto. A análise gráfica do desvio das medidas de vazão em relação à média dos dados deste intervalo escolhido (600 minutos) é apresentada na Figura 4.2.

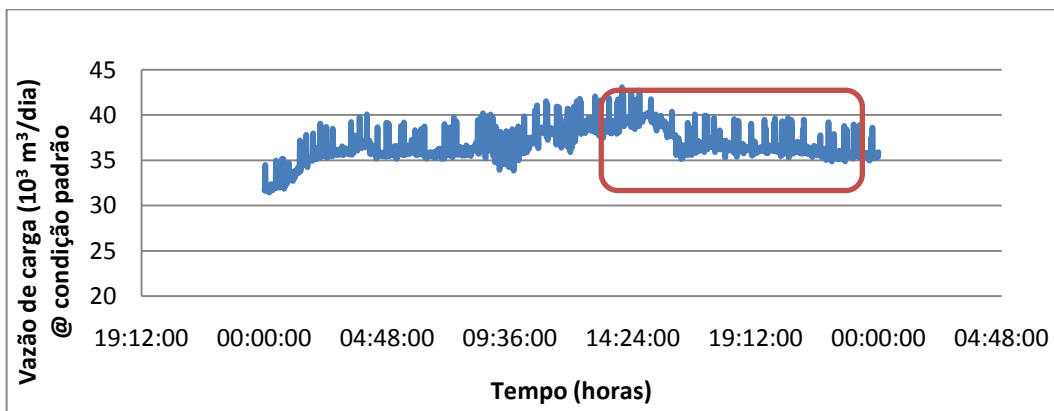


Figura 4.1 – Ponto de operação 1 - Análise visual da vazão volumétrica de carga no dia 14 de maio de 2009. Em destaque, intervalo em estado estacionário.

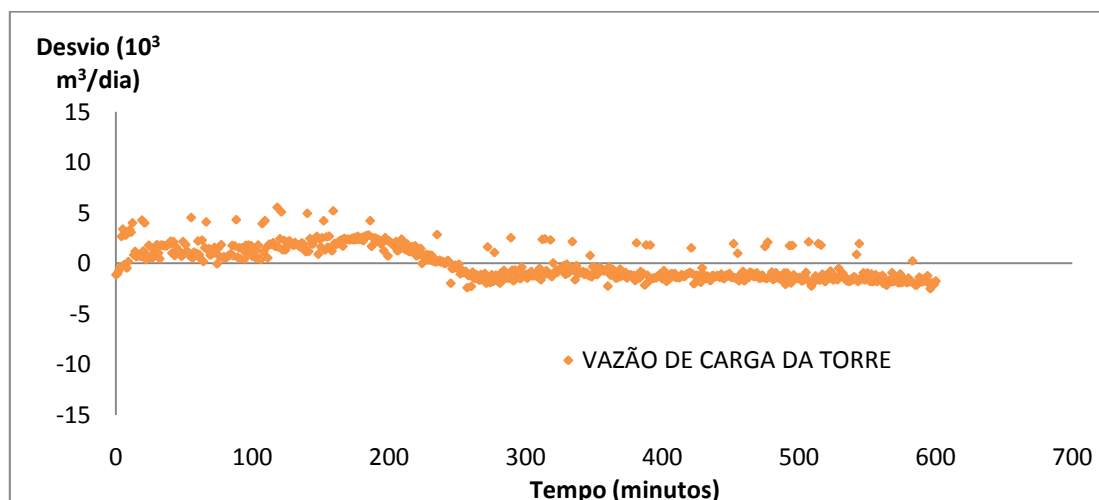


Figura 4.2 – Ponto de operação 1 - Desvios da vazão volumétrica de carga em relação à média no estado estacionário.

Como pode ser observado na Figura 4.1, existem muitas oscilações nos dados de vazão volumétrica medidas e com isso o gráfico da Figura 4.2 mostra alguns pontos distantes (desvio de $\pm 5 \times 10^3 \text{ m}^3/\text{dia}$) da média que se encontra em torno de zero. Ainda assim, foi considerada uma quantidade de dados considerável em regime estacionário.

As Tabelas 4.2 a 4.4 apresentam os resultados da reconciliação realizados para as composições molares da carga, topo e fundo da torre (médias dos intervalos estacionários). Em todos os casos, foram obtidos bons resultados em virtude de erros relativos baixos, com valores máximos entre 3% e 4%. Nos casos das vazões molares reconciliadas apresentadas na Tabela 4.5, tem-se erros relativos de até 5%, considerados ainda como bons resultados para o tratamento de dados utilizado.

Tabela 4.2 - Dados Reconciliados da composição molar de carga no ponto operacional (1).

Composição de carga	Composição Medida de Planta	Composição Reconciliada	Erro Absoluto	Erro Relativo (%)	Desvio Padrão
z(CO ₂)	0.0163	0.0163	0.00006	0.3926	0.00204
z(C1)	0.0670	0.0671	0.00006	0.0891	0.00291
z(C2)	0.4197	0.4249	0.00518	1.2352	0.00539
z(C3)	0.2706	0.2680	-0.00257	-0.9498	0.00384
z(i-C4)	0.0533	0.0528	-0.00054	-1.0145	0.00072
z(n-C4)	0.0851	0.0841	-0.00100	-1.1716	0.00123
z(i-C5)	0.0256	0.0254	-0.00018	-0.7020	0.00064
z(n-C5)	0.0262	0.0258	-0.00042	-1.5916	0.00065
z(n-C6)	0.0216	0.0215	-0.00011	-0.5165	0.00088
z(n-C7)	0.0089	0.0087	-0.00013	-1.5208	0.00048
z(n-C8)	0.0047	0.0045	-0.00023	-4.9635	0.00053
z(n-C9)	0.0010	0.0009	-0.00001	-1.1920	0.00009

Tabela 4.3 - Dados Reconciliados da composição molar de produto de topo no ponto operacional (1).

Composição de topo	Composição Medida de Planta	Composição Reconciliada	Erro Absoluto	Erro Relativo (%)	Desvio Padrão
y(CO ₂)	0.0352	0.0349	-0.00030	-0.844	0.0030
y(C1)	0.1434	0.1431	-0.00029	-0.204	0.0035
y(C2)	0.8059	0.8055	-0.00039	-0.048	0.0038
y(C3)	0.0154	0.0152	-0.00019	-1.244	0.0027
y(i-C4)	0.0000	0.0003	0.00029	-----	0.0000
y(n-C4)	0.0000	0.0001	0.00008	-----	0.0000
y(i-C5)	0.0000	0.0000	0.00000	-----	0.0000
y(n-C5)	0.0000	0.0003	0.00026	-----	0.0000
y(n-C6)	0.0000	0.0000	0.00000	-----	0.0000
y(n-C7)	0.0000	0.0000	0.00004	-----	0.0000
y(n-C8)	0.0000	0.0002	0.00018	-----	0.0000

$y(n-C9)$	0.0000	0.0004	0.00042	-----	0.0000
-----------	--------	--------	---------	-------	--------

Tabela 4.4 - Dados Reconciliados da composição molar de produto de fundo no ponto operacional (1).

Composição de fundo	Composição Medida de Planta	Composição Reconciliada	Erro Absoluto	Erro Relativo (%)	Desvio Padrão
$x(CO_2)$	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
$x(C1)$	0.0001	0.0001	0.00000	-0.2574	0.0001
$x(C2)$	0.0918	0.0898	-0.00200	-2.1742	0.0032
$x(C3)$	0.4908	0.4906	-0.00023	-0.0463	0.0054
$x(i-C4)$	0.0988	0.0990	0.00019	0.1917	0.0006
$x(n-C4)$	0.1575	0.1581	0.00055	0.3459	0.0015
$x(i-C5)$	0.0475	0.0477	0.00022	0.4666	0.0013
$x(n-C5)$	0.0469	0.0482	0.00134	2.8614	0.0018
$x(n-C6)$	0.0407	0.0403	-0.00033	-0.8064	0.0036
$x(n-C7)$	0.0157	0.0164	0.00065	4.1402	0.0018
$x(n-C8)$	0.0079	0.0083	0.00035	4.4395	0.0010
$x(n-C9)$	0.0014	0.0014	0.00005	3.7916	0.0003

Tabela 4.5 - Dados Reconciliados das vazões molares de carga, produto de topo e de fundo no ponto operacional (1).

Vazão molar (kgmol/h)	Vazão Medida de Planta (kgmol/h)	Vazão Reconciliada (kgmol/h)	Erro Absoluto	Erro Relativo (%)	Desvio Padrão (2% Vazão molar medida)
$F_{entrada}$	408.996	408.913	-0.083	-0.020	8.179
F_{topo}	202.032	191.442	-10.590	-5.242	4.041
F_{fundo}	206.352	217.471	11.119	5.388	4.127

Assim, observa-se que os resultados de reconciliação foram satisfatórios para o primeiro ponto operacional escolhido, apresentando erros relativos máximos na ordem de 4 a 5%. Nesta reconciliação, o valor obtido da função objetivo minimizada foi de 19.66.

A seguir, será apresentada a análise dos balanços de massa por componente com dados puros de planta e dados que foram tratados baseados na restrição dos balanços de massa na coluna de destilação, de acordo com as Equações 4.2 e 4.3. Os resultados obtidos encontram-se na Tabela 4.6. Estas equações também serão utilizadas nos demais pontos operacionais.

$$) \quad (4.2)$$

$$(4.3)$$

Tabela 4.6 - Erros de Balanço de Massa por componente com e sem a reconciliação de dados:

Composição de carga	Sem Reconciliação		Com Reconciliação	
		Erro Relativo (%)		Erro Relativo (%)
z(CO ₂)	0.607	8.353	-0.00001	0.00022
z(C1)	2.210	7.465	-0.00002	0.00006
z(C2)	13.191	7.136	0.00004	-0.00003
z(C3)	-8.335	-8.145	0.00002	-0.00002
z(i-C4)	-6.808	-45.369	-0.00001	0.00005
z(n-C4)	-2.980	-9.364	0.00008	-0.00024
z(i-C5)	-2.321	-28.529	-0.00002	0.00016
z(n-C5)	-1.239	-13.079	0.00002	-0.00022
z(n-C6)	-0.603	-7.342	0.00000	0.00000
z(n-C7)	-0.447	-14.067	0.00001	-0.00032
z(n-C8)	-0.329	-20.534	0.00000	0.00008
z(n-C9)	-0.118	-43.006	0.00000	-0.00012

A partir dos dados da Tabela 4.6, observa-se que o uso da reconciliação de dados permite que o erro de balanço de massa seja próximo do zero, o que dificilmente pode ser obtido somente com os dados de processo (sem tratamento de dados), devido aos erros inerentes às medidas feitas na planta. Além disso, os dados reconciliados atendem às restrições de balanços de massa e, naturalmente, apresentaram pequenos erros relativos.

A seguir encontram-se os resultados obtidos para os outros dois pontos operacionais citados, tendo empregado para os mesmos as equações e análises feitas no ponto operacional (1).

a) Ponto de operação (2): 18 de maio de 2009 (06h às 16h)

A Figura 4.3 mostra o comportamento da vazão volumétrica de carga durante as 24 horas do dia escolhido, na qual se destaca o intervalo considerado em regime estacionário (10 horas). A análise gráfica do desvio das medidas de vazão em relação à média dos dados deste intervalo escolhido é apresentada na Figura 4.4.

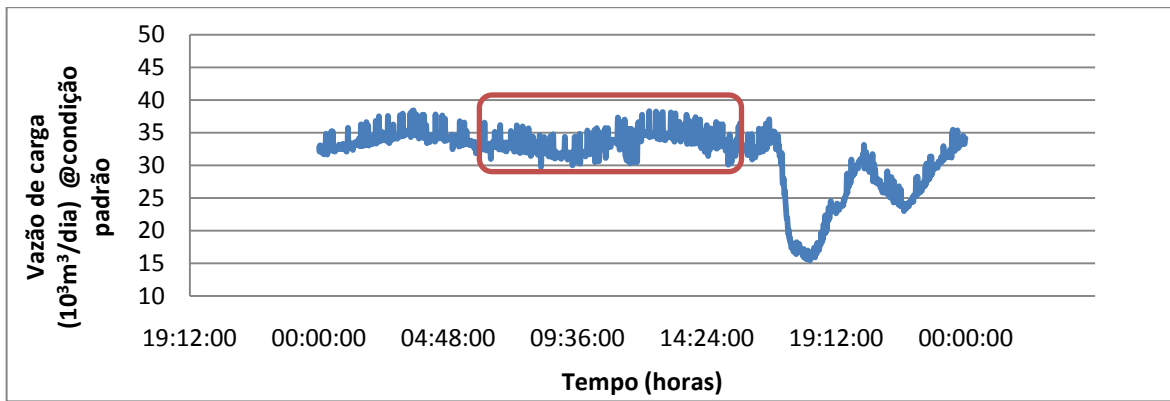


Figura 4.3 - Ponto de operação 2 - Análise visual da vazão volumétrica de carga no dia 18 de maio de 2009. Em destaque, intervalo em estado estacionário.

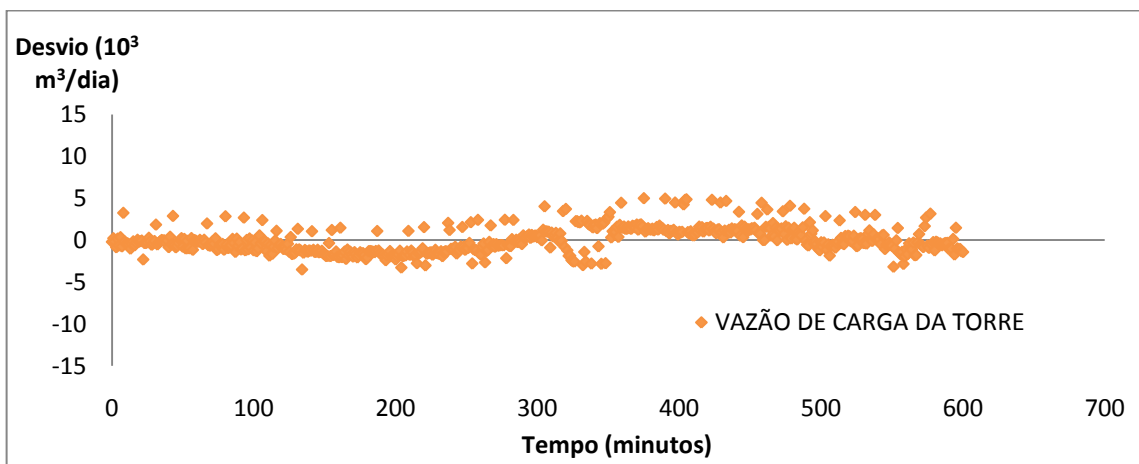


Figura 4.4 - Ponto de operação 2 - Desvios da vazão volumétrica de carga em relação à média no estado estacionário.

Como pode ser observado no gráfico da Figura 4.4, têm-se alguns pontos distantes (desvio de $\pm 5 \times 10^3 \text{ m}^3/\text{dia}$) da média que se encontra em torno de zero. Como no primeiro ponto operacional, foi considerada uma quantidade significativa de pontos em estado estacionário.

As Tabelas 4.7 a 4.9 apresentam os resultados das composições molares medidas de processo na etapa de tratamento de dados e a Tabela 4.10 apresenta os resultados para as vazões molares reconciliadas com erros relativos de aproximadamente 4%.

Tabela 4.7 - Dados Reconciliados da composição molar de carga no ponto operacional (2).

Composição de carga	Composição Medida de Planta	Composição Reconciliada	Erro Absoluto	Erro Relativo (%)	Desvio Padrão
$z(\text{CO}_2)$	0.0133	0.0133	0.00001	0.067	0.0017
$z(\text{C1})$	0.0685	0.0710	0.00255	3.728	0.0046
$z(\text{C2})$	0.4046	0.4192	0.01460	3.608	0.0156
$z(\text{C3})$	0.2874	0.2770	-0.01038	-3.613	0.0093
$z(\text{i-C4})$	0.0547	0.0530	-0.00169	-3.092	0.0015

$z(n-C4)$	0.0853	0.0822	-0.00302	-3.547	0.0021
$z(i-C5)$	0.0255	0.0250	-0.00049	-1.933	0.0007
$z(n-C5)$	0.0256	0.0248	-0.00083	-3.223	0.0007
$z(n-C6)$	0.0211	0.0210	-0.00016	-0.743	0.0008
$z(n-C7)$	0.0084	0.0082	-0.00025	-2.956	0.0006
$z(n-C8)$	0.0044	0.0042	-0.00021	-4.829	0.0004
$z(n-C9)$	0.0010	0.0009	-0.00002	-2.222	0.0002

Tabela 4.8 - Dados Reconciliados da composição molar de produto de topo no ponto operacional (2).

Composição de topo	Composição Medida de Planta	Composição Reconciliada	Erro Absoluto	Erro Relativo (%)	Desvio Padrão
$y(CO_2)$	0.0296	0.0285	-0.0011	-3.804	0.0000
$y(C1)$	0.1530	0.1517	-0.0013	-0.880	0.0020
$y(C2)$	0.8110	0.8097	-0.0012	-0.152	0.0027
$y(C3)$	0.0063	0.0054	-0.0009	-14.370	0.0029
$y(i-C4)$	0.0000	0.0002	0.0002	-----	0.0000
$y(n-C4)$	0.0000	0.0002	0.0002	-----	0.0000
$y(i-C5)$	0.0000	0.0006	0.0006	-----	0.0000
$y(n-C5)$	0.0000	0.0020	0.0020	-----	0.0000
$y(n-C6)$	0.0000	0.0000	0.0000	-----	0.0000
$y(n-C7)$	0.0000	0.0003	0.0003	-----	0.0000
$y(n-C8)$	0.0000	0.0009	0.0009	-----	0.0000
$y(n-C9)$	0.0000	0.0006	0.0006	-----	0.0000

Tabela 4.9 - Dados Reconciliados da composição molar de produto de fundo no ponto operacional (2).

Composição de fundo	Composição Medida de Planta	Composição Reconciliada	Erro Absoluto	Erro Relativo (%)	Desvio Padrão
$x(CO_2)$	0.0000	0.0000	0.0000	-----	0.0000
$x(C1)$	0.0002	0.0002	0.0000	-0.559	0.0001
$x(C2)$	0.0777	0.0760	-0.0017	-2.211	0.0034
$x(C3)$	0.5168	0.5158	-0.0010	-0.193	0.0045
$x(i-C4)$	0.0992	0.0994	0.0002	0.241	0.0009
$x(n-C4)$	0.1537	0.1544	0.0007	0.426	0.0016
$x(i-C5)$	0.0462	0.0465	0.0003	0.621	0.0009
$x(n-C5)$	0.0441	0.0449	0.0008	1.801	0.0010
$x(n-C6)$	0.0393	0.0394	0.0001	0.285	0.0031
$x(n-C7)$	0.0146	0.0151	0.0005	3.446	0.0013
$x(n-C8)$	0.0069	0.0071	0.0002	2.951	0.0007
$x(n-C9)$	0.0012	0.0012	0.0000	2.080	0.0003

Tabela 4.10 - Dados Reconciliados das vazões molares de carga, de produto e de topo no ponto operacional (2).

Vazão molar (kgmol/h)	Vazão Medida de Planta (kgmol/h)	Vazão Reconciliada (kgmol/h)	Erro Absoluto	Erro Relativo (%)	Desvio Padrão (2% Vazão molar medida)
<i>F_entrada</i>	368.1450	367.7030	-0.4420	-0.120	7.363
<i>F_topo</i>	180.5620	171.9960	-8.5660	-4.744	3.611
<i>F_fundo</i>	187.7090	195.7080	7.9990	4.261	3.754

De forma semelhante, o ponto operacional (2) apresentou resultados satisfatórios na etapa de reconciliação, com erros relativos máximos de 3 a 4% (salvo a exceção para o $y(C3)$ que resultou em 14.37% de erro relativo), com valor da função objetivo obtida de 22.67.

No caso da reconciliação da composição de $y(C3)$, os valores desta composição são bem menores comparados aos demais valores de composição de topo como o de $y(C1)$ ou $y(C2)$, apresentando-se naturalmente erros relativos mais altos para qualquer diferença do valor esperado. No entanto, o valor de erro absoluto é considerado um valor pequeno e satisfatório para a composição de y_3 .

Na Tabela 4.11, é apresentada a análise dos balanços de massa por componente com dados puros de planta e dados que foram tratados baseados na restrição dos balanços de massa na coluna de destilação.

Tabela 4.11 - Erros de Balanço de Massa por componente com e sem a reconciliação:

Composição de carga	Sem Reconciliação		Com Reconciliação	
		Erro Relativo (%)		Erro Relativo (%)
$z(CO_2)$	0.657	11.813	0.00000	0.00009
$z(C1)$	3.542	12.319	-0.00012	0.00046
$z(C2)$	17.303	10.408	-0.00054	0.00035
$z(C3)$	-11.324	-11.984	-0.00018	0.00018
$z(i-C4)$	-2.234	-12.475	-0.00004	0.00020
$z(n-C4)$	-3.638	-13.106	-0.00001	0.00002
$z(i-C5)$	-1.050	-12.572	0.00000	0.00002
$z(n-C5)$	-1.474	-18.518	0.00000	0.00002
$z(n-C6)$	-0.683	-9.626	-0.00003	0.00034
$z(n-C7)$	-0.471	-17.898	0.00000	0.00004
$z(n-C8)$	-0.372	-29.890	0.00000	0.00026
$z(n-C9)$	-0.131	-60.045	0.00000	0.00041

Como esperado, erros de balanço de massa para os dados sem tratamento são elevados, chegando até 60.045% de erro relativo em massa para o $z(n-C9)$. Já para o caso de dados reconciliados, estes erros são desprezíveis.

Finalmente, os resultados do último ponto operacional serão apresentados a seguir.

a) **Ponto de operação (3): 22 de maio de 2009 (06h às 16h)**

A Figura 4.5 mostra o comportamento da vazão volumétrica de carga durante o dia escolhido e destaca-se o intervalo considerado em estacionário (10 horas). A análise gráfica do desvio das medidas de vazão em relação à média dos dados deste intervalo escolhido é apresentada na Figura 4.6.

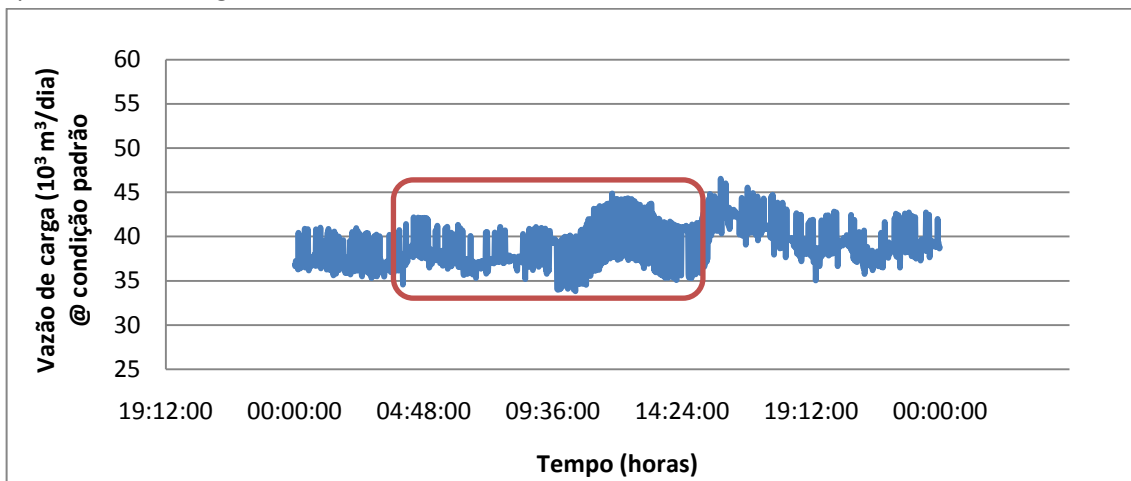


Figura 4.5 - Ponto de operação 3 - Análise visual da vazão volumétrica de carga no dia 22 de maio de 2009. Em destaque, intervalo em estado estacionário.

Observa-se neste intervalo de pontos operacionais que as medidas da vazão volumétrica de carga oscilam muito mais nesse período, conforme a Figura 4.5. Esta observação fica mais bem explícita através da Figura 4.6 que praticamente não apresenta pontos próximos de zero, onde se encontra a média de todos os dados. Entretanto, ainda se destaca um desvio de $\pm 5 \times 10^3 \text{ m}^3/\text{dia}$ durante todo o intervalo escolhido, como nos outros dois pontos operacionais já citados.

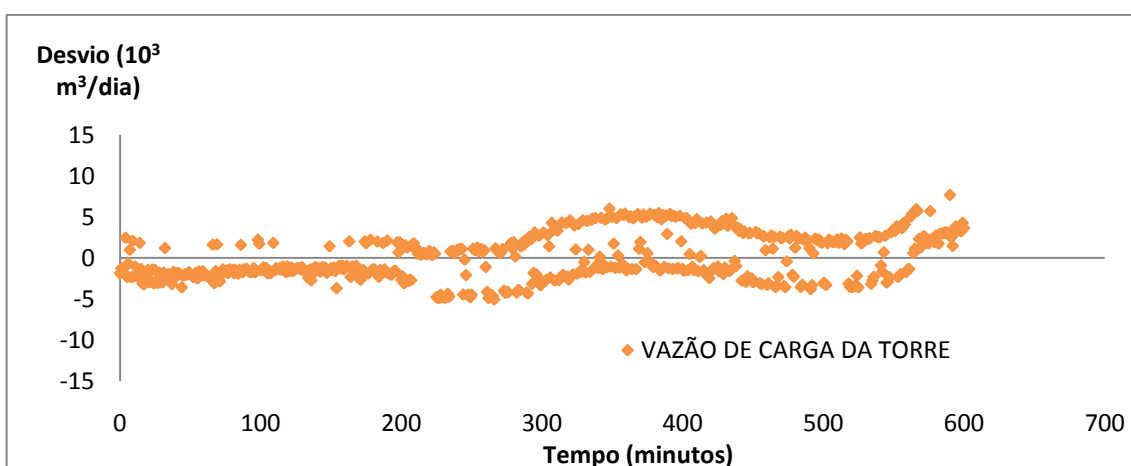


Figura 4.6 - Ponto de operação 3 - Desvios da vazão volumétrica de carga em relação à média no estado estacionário.

A seguir, nas Tabelas 4.12 a 4.14, encontram-se os resultados da reconciliação de dados (composição molar) deste intervalo em estado estacionário e a Tabela 4.15 apresenta os resultados para as vazões molares reconciliadas com erros relativos de aproximadamente 8%.

Tabela 4.12 - Dados Reconciliados da composição molar de carga no ponto operacional (3).

Composição de carga	Composição Medida de Planta	Composição Reconciliada	Erro Absoluto	Erro Relativo (%)	Desvio Padrão
z(CO ₂)	0.0152	0.0155	0.00029	1.925	0.0006
z(C1)	0.0631	0.0638	0.00065	1.030	0.0018
z(C2)	0.4358	0.4390	0.00320	0.735	0.0026
z(C3)	0.2661	0.2634	-0.00262	-0.986	0.0026
z(i-C4)	0.0528	0.0527	-0.00013	-0.241	0.0005
z(n-C4)	0.0823	0.0820	-0.00027	-0.331	0.0009
z(i-C5)	0.0246	0.0246	-0.00005	-0.183	0.0004
z(n-C5)	0.0247	0.0245	-0.00022	-0.876	0.0004
z(n-C6)	0.0213	0.0211	-0.00025	-1.152	0.0007
z(n-C7)	0.0086	0.0084	-0.00023	-2.652	0.0005
z(n-C8)	0.0045	0.0043	-0.00023	-5.140	0.0003
z(n-C9)	0.0009	0.0009	-0.00006	-6.630	0.0002

Tabela 4.13 - Dados Reconciliados da composição molar de produto de topo no ponto operacional (3).

Composição de topo	Composição Medida de Planta	Composição Reconciliada	Erro Absoluto	Erro Relativo (%)	Desvio Padrão
y(CO ₂)	0.0328	0.0324	-0.00048	-1.450	0.0017
y(C1)	0.1337	0.1334	-0.00030	-0.222	0.0020
y(C2)	0.8200	0.8196	-0.00038	-0.047	0.0027
y(C3)	0.0133	0.0133	-0.00009	-0.708	0.0029
y(i-C4)	0.0000	0.0000	0.00000	-----	0.0000
y(n-C4)	0.0000	0.0000	0.00000	-----	0.0000
y(i-C5)	0.0000	0.0000	0.00000	-----	0.0000
y(n-C5)	0.0000	0.0002	0.00022	-----	0.0000
y(n-C6)	0.0000	0.0000	0.00000	-----	0.0000
y(n-C7)	0.0000	0.0002	0.00015	-----	0.0000
y(n-C8)	0.0000	0.0005	0.00048	-----	0.0000
y(n-C9)	0.0000	0.0005	0.00051	-----	0.0000

Tabela 4.14 - Dados Reconciliados da composição molar de produto de fundo no ponto operacional (3).

Composição de fundo	Composição Medida de Planta	Composição Reconciliada	Erro Absoluto	Erro Relativo (%)	Desvio Padrão
$x(\text{CO}_2)$	0.0000	0.0000	0.00000	-----	0.0000
$x(\text{C1})$	0.0001	0.0001	0.00000	-0.700	0.0000
$x(\text{C2})$	0.0926	0.0911	-0.00152	-1.645	0.0018
$x(\text{C3})$	0.4934	0.4921	-0.00133	-0.269	0.0055
$x(\text{i-C4})$	0.0985	0.1008	0.00232	2.352	0.0000
$x(\text{n-C4})$	0.1570	0.1569	-0.00009	-0.060	0.0014
$x(\text{i-C5})$	0.0473	0.0471	-0.00023	-0.495	0.0015
$x(\text{n-C5})$	0.0448	0.0466	0.00187	4.174	0.0021
$x(\text{n-C6})$	0.0404	0.0403	-0.00004	-0.111	0.0028
$x(\text{n-C7})$	0.0151	0.0159	0.00084	5.548	0.0016
$x(\text{n-C8})$	0.0072	0.0078	0.00067	9.321	0.0009
$x(\text{n-C9})$	0.0012	0.0012	0.00004	2.977	0.0002

Tabela 4.15 - Dados Reconciliados das vazões molares de carga, de produto e de topo no ponto operacional (3).

Vazão molar (kgmol/h)	Vazão Medida de Planta (PI) (kgmol/h)	Vazão Reconciliada (kgmol/h)	Erro Absoluto	Erro Relativo (%)	Desvio Padrão (2% Vazão molar medida)
F_{entrada}	437.1370	435.8990	-1.2380	-0.283	8.743
F_{topo}	227.3590	208.1440	-19.2150	-8.451	4.547
F_{fundo}	210.2720	227.7540	17.4820	8.314	4.205

O ponto operacional (3) também apresentou resultados satisfatórios na etapa de reconciliação, porém com erros relativos maiores e com valores máximos de erro relativo de até 9.32% na composição de $x(\text{n-C8})$. O valor da função objetivo obtido nesta reconciliação também foi elevado, com valor de 43.25.

A última verificação de erros de balanço de massa é apresentada na Tabela 4.16 chegando até 53.04% de erro relativo em massa para o $z(\text{n-C9})$. Já para o caso de dados reconciliados, os erros são desprezíveis, como esperado após a reconciliação.

Tabela 4.16 - Erros de Balanço de Massa por componente com e sem a reconciliação:

Composição de carga	Sem Reconciliação		Com Reconciliação	
		Erro Relativo (%)		Erro Relativo (%)
z(CO ₂)	0.278	4.023	0.00003	0.00043
z(C1)	0.551	1.958	0.00002	0.00008
z(C2)	2.989	1.545	0.00056	0.00029
z(C3)	-1.319	1.147	0.00022	0.00019
z(i-C4)	-0.689	3.079	0.00010	0.00045
z(n-C4)	-0.261	0.731	0.00021	0.00058
z(i-C5)	-0.016	0.147	0.00001	0.00008
z(n-C5)	-0.613	6.024	0.00003	0.00030
z(n-C6)	-0.138	1.508	0.00004	0.00039
z(n-C7)	-0.339	9.897	0.00000	0.00001
z(n-C8)	-0.362	22.254	0.00001	0.00028
z(n-C9)	-0.143	53.037	0.00000	0.00038

Assim, após a etapa de verificação dos dados de processo tratados pela reconciliação, tem-se a apresentação das simulações em regime estacionário e as análises de inferências obtidas através de simulações dos pontos operacionais citados no EMSO.

4.2. Inferências Estacionárias

Os dados de parâmetros de ajuste dos modelos dos estágios de equilíbrio são encontrados na Tabela 4.17, sendo estes valores obtidos por tentativa e erro de forma que as simulações apresentassem uma queda de pressão na coluna similar aos dados de processo.

Tabela 4.17 – Resultados dos parâmetros de ajuste dos modelos utilizados.

Parâmetros de ajuste dos modelos	Valores estimados e utilizados
Eficiência de Murphree	80%
Coefficiente de pressão no prato seco (α)	2
	1.7
β	1

Para cada ponto operacional em regime estacionário, foram verificadas as vazões molares pelo modelo (*Streams.mso*) que converte as vazões volumétricas em condição padrão

(20°C e 1 atm) medidas do processo para vazões molares a partir de outras variáveis de processo como a temperatura, pressão e composição da corrente em estudo. Essas estimativas serão consideradas como medidas de planta e apresentadas nas tabelas de dados de cada intervalo estacionário em estudo. As composições medidas de planta se encontram nas tabelas da seção 4.1 (Tratamento de dados) já abordada neste trabalho.

a) **Ponto de operação (1):**

Dados de processo (14 de maio de 2009, 12h às 22h) usados na simulação são apresentados na Tabela 4.18. Os dados abaixo representam a média dos valores de cada uma das variáveis durante o intervalo citado.

Tabela 4.18 – Dados medidos de Planta no intervalo estacionário do Ponto de Operação (1).

Dados da corrente de Carga		Dados da corrente de Topo		Dados da corrente de Fundo	
Temperatura (°C)	34.9046	Temperatura (°C)	-1.6930	Temperatura (°C)	89.3636
Pressão absoluta (kPa)(**)	2708	Pressão absoluta (kPa)	2723	Pressão absoluta (kPa)	2739
Vazão Volumétrica @ condição padrão (10 ³ m ³ /Dia)	37.5422	Vazão Volumétrica @ condição padrão (10 ³ m ³ /Dia)	120.3889	Vazão Volumétrica @ condição padrão (m ³ /h)	28.2579
Vazão Molar (kgmol/h) (*)	408.996	Vazão Molar (kgmol/h) (*)	206.352	Vazão Molar (kgmol/h) (*)	202.032
		Setpoint do controlador de pressão absoluta de Topo (kPa)	2736	Setpoint do controlador de temperatura de Fundo (°C)	89.9778

(*) Vazões molares estimadas pelos modelos de “Streams.mso”; (**) Pressão estimada pelo modelo de “Streams.mso”.

Os resultados das inferências estacionárias são apresentados a seguir na Tabela 4.19 com as duas abordagens feitas, uma utilizando os dados puros medidos de planta e a outra utilizando os dados reconciliados.

Tabela 4.19 - Resultados da simulação Estacionária no EMSO e comparação com e sem a reconciliação no ponto de operação (1).

Variáveis de processo	Sem Reconciliação			Com Reconciliação		
	Comparação com dados medidos de planta			Comparação com dados reconciliados no intervalo estacionário		
Composição de topo	Valores simulados no EMSO	Erro absoluto	Erro Relativo (%)	Valores simulados no EMSO	Erro absoluto	Erro Relativo (%)
$y(\text{CO}_2)$	0.0352	0.000004	0.011	0.0349	0.0000	0.001
$y(\text{C1})$	0.1458	-0.0025	-1.727	0.1442	0.0011	0.750
$y(\text{C2})$	0.8072	-0.0013	-0.160	0.8098	0.0043	0.533
$y(\text{C3})$	0.0118	0.0036	23.748	0.0111	-0.0041	-26.917
Composição de fundo						
$x(\text{C3})$	0.4906	0.0002	0.034	0.4915	0.0009	0.185
$x(\text{i-C4})$	0.0987	-0.0244	-32.849	0.0987	-0.0003	-0.301
$x(\text{n-C4})$	0.1575	0.0001	0.054	0.1573	-0.0008	-0.516
$x(\text{i-C5})$	0.0473	-0.0070	-17.459	0.0475	-0.0003	-0.561
$x(\text{n-C5})$	0.0484	-0.0016	-3.342	0.0482	0.0000	-0.079
$x(\text{n-C6})$	0.0399	0.0008	1.899	0.0401	-0.0002	-0.561
$x(\text{n-C7})$	0.0164	-0.0007	-4.246	0.0163	-0.0001	-0.368
$x(\text{n-C8})$	0.0087	-0.0008	-10.186	0.0084	0.0001	1.328
$x(\text{n-C9})$	0.0018	-0.0004	-30.715	0.0018	0.0004	25.742
Vazão molar de Topo (kgmol/h)	187.8960	0.1845	8.943	191.4420	-1.2220	-0.638
Vazão molar de Fundo (kgmol/h)	221.0910	-19.0590	-9.434	217.4710	1.2220	0.562

A partir dos resultados de inferência contidos na Tabela 4.19, verifica-se que em primeira análise geral, as duas abordagens de inferência estacionárias apresentam resultados satisfatórios. Já numa análise mais minuciosa, verifica-se que a utilização de dados reconciliados apresentou uma maior quantidade de erros relativos mais próximos de zero que as obtidas com os dados de processo que não foram tratados, apresentando uma diferença de erros relativos como, por exemplo: 32.85% (sem reconciliação) e 0.30% (com reconciliação)

para o $i-C_4$ no produto de fundo. No caso da inferência de C_3 no topo, os erros relativos ficaram com valores próximos.

b) Ponto de operação (2):

Dados de processo (18 de maio de 2009, 06h às 16h) usados na simulação a partir da média do intervalo são apresentados na Tabela 4.20.

Tabela 4.20 – Dados medidos de Planta no intervalo estacionário do Ponto de Operação (2).

Dados da corrente de Carga		Dados da corrente de Topo		Dados da corrente de Fundo	
Temperatura (°C)	33.9733	Temperatura (°C)	-3.1872	Temperatura (°C)	90.1481
Pressão absoluta (kPa)(**)	2621	Pressão absoluta (kPa)	2723	Pressão absoluta (kPa)	2751
Vazão Volumétrica @ condição padrão ($10^3 \text{ m}^3/\text{Dia}$)	33.2624	Vazão Volumétrica @ condição padrão ($10^3 \text{ m}^3/\text{Dia}$)	121.4888	Vazão Volumétrica @ condição padrão (m^3/h)	26.4191
Vazão Molar (kgmol/h) (*)	368.1450	Vazão Molar (kgmol/h) (*)	180.5620	Vazão Molar (kgmol/h) (*)	187.7090
		Setpoint do controlador de pressão absoluta de Topo (kPa)	2736	Setpoint do controlador de temperatura de Fundo (°C)	91.00

(*) Vazões molares estimadas pelos modelos de “Streams.mso”; (**) Pressão estimada pelo modelo de “Streams.mso”.

Tabela 4.21 - Resultados da simulação Estacionária no EMSO e comparação com e sem a reconciliação no ponto de operação (2).

Variáveis de processo	Sem Reconciliação			Com Reconciliação		
	Comparação com dados medidos de planta			Comparação com dados reconciliados no intervalo estacionário		
Composição de topo	Valores simulados no EMSO	Erro absoluto	Erro Relativo (%)	Valores simulados no EMSO	Erro absoluto	Erro Relativo (%)
$y(CO_2)$	0.0297	0.0001	0.185	0.0286	0.0001	0.247
$y(C1)$	0.1534	0.0004	0.238	0.1530	0.0013	0.865
$y(C2)$	0.8131	0.0022	0.267	0.8149	0.0052	0.637
$y(C3)$	0.0038	-0.0025	-39.400	0.0035	-0.0018	-33.967
Composição de fundo						
$x(C3)$	0.5163	-0.0005	-0.094	0.5141	-0.0017	-0.324
$x(i-C4)$	0.0989	-0.0003	-0.317	0.0990	-0.0004	-0.438
$x(n-C4)$	0.1541	0.0004	0.242	0.1536	-0.0008	-0.533
$x(i-C5)$	0.0461	-0.0001	-0.231	0.0467	0.0002	0.461

x(n-C5)	0.0463	0.0022	5.039	0.0463	0.0014	3.164
x(n-C6)	0.0382	-0.0011	-2.828	0.0392	-0.0003	-0.641
x(n-C7)	0.0152	0.0007	4.491	0.0153	0.0002	1.275
x(n-C8)	0.0079	0.0010	15.150	0.0078	0.0007	9.981
x(n-C9)	0.0017	0.0005	41.862	0.0017	0.0005	40.406
Vazão molar de Topo (kgmol/h)	164.3900	23.3190	12.423	170.7400	-1.2560	-0.730
Vazão molar de Fundo (kgmol/h)	203.7550	-23.1930	-12.845	196.9630	1.2550	0.641

Os resultados das inferências estacionárias apresentados na Tabela 4.21 apresentam duas abordagens feitas, uma utilizando os dados puros medidos de planta e a outra utilizando os dados reconciliados.

Neste segundo resultado de inferência estacionária, percebe-se que os resultados ficaram semelhantes aos resultados do primeiro ponto operacional, apresentando melhores resultados na parte com reconciliação. Destacam-se novamente erros relativos bem pequenos para as vazões molares de topo e fundo.

a) Ponto de operação (3):

Dados de processo (22 de maio de 2009, 06h às 16h) usados na simulação a partir da média do intervalo são apresentados na Tabela 4.22.

Tabela 4.22 – Dados medidos de Planta no intervalo estacionário do Ponto de Operação (3).

Dados da corrente de Carga		Dados da corrente de Topo		Dados da corrente de Fundo	
Temperatura (°C)	32.9723	Temperatura (°C)	-1.2163	Temperatura (°C)	89.3488
Pressão absoluta (kPa)(**)	2650	Pressão absoluta (kPa)	2734	Pressão absoluta (kPa)	2752
Vazão Volumétrica @ condição padrão (10 ³ m ³ /Dia)	38.8849	Vazão Volumétrica @ condição padrão (10 ³ m ³ /Dia)	132.6367	Vazão Volumétrica @ condição padrão (m ³ /h)	29.4312
Vazão Molar (kgmol/h) (*)	437.1370	Vazão Molar (kgmol/h) (*)	227.3590	Vazão Molar (kgmol/h) (*)	210.2720
		Setpoint do controlador de pressão absoluta de Topo (kPa)	2736	Setpoint do controlador de temperatura de Fundo (°C)	89.24

(*) Vazões molares estimadas pelos modelos de “Streams.mso”; (**) Pressão estimada pelo modelo de “Streams.mso”.

Os resultados das inferências estacionárias são apresentados a seguir na Tabela 4.23 com as duas abordagens feitas, uma utilizando os dados puros medidos de planta e a outra utilizando os dados reconciliados.

Tabela 4.23 - Resultados da simulação Estacionária no EMSO e comparação com e sem a reconciliação no ponto de operação (3).

Variáveis de processo	Sem Reconciliação			Com Reconciliação		
	Comparação com dados medidos de planta			Comparação com dados reconciliados no intervalo estacionário		
Composição de topo	Valores simulados no EMSO	Erro absoluto	Erro Relativo (%)	Valores simulados no EMSO	Erro absoluto	Erro Relativo (%)
$y(\text{CO}_2)$	0.0320	-0.0008	-2.457	0.0323	0.0000	-0.083
$y(\text{C1})$	0.1341	0.0004	0.323	0.1342	0.0008	0.593
$y(\text{C2})$	0.8243	0.0043	0.525	0.8239	0.0043	0.520
$y(\text{C3})$	0.0095	-0.0038	-28.640	0.0096	-0.0037	-27.723
Composição de fundo						
$x(\text{C3})$	0.4941	0.0007	0.145	0.4932	0.0012	0.240
$x(\text{i-C4})$	0.0997	0.0013	1.274	0.1004	-0.0005	-0.448
$x(\text{n-C4})$	0.1554	-0.0016	-1.033	0.1562	-0.0007	-0.449
$x(\text{i-C5})$	0.0465	-0.0008	-1.608	0.0468	-0.0002	-0.450
$x(\text{n-C5})$	0.0466	0.0019	4.165	0.0466	0.0000	-0.021
$x(\text{n-C6})$	0.0403	-0.0001	-0.267	0.0402	-0.0002	-0.452
$x(\text{n-C7})$	0.0162	0.0012	7.978	0.0160	0.0001	0.429
$x(\text{n-C8})$	0.0086	0.0014	20.157	0.0082	0.0004	5.108
$x(\text{n-C9})$	0.0018	0.0006	50.410	0.0017	0.0005	37.446
Vazão molar de Topo (kgmol/h)	205.7050	4.5670	2.172	207.1190	-1.0250	-0.492
Vazão molar de Fundo (kgmol/h)	231.4330	-4.0740	-1.792	228.7800	1.0260	0.450

Finalmente, com este último resultado de inferência estacionária, pode-se dizer que todos os três pontos operacionais apresentaram resultados de inferência parecidos e satisfatórios, mesmo para diferentes intervalos e com valores de vazões de carga diferenciados, validando inicialmente, as inferências obtidas a partir do modelo implementado no EMSO em estado estacionário. Observa-se que as principais semelhanças dos resultados foram:

- Erros relativos de vazões de produtos apresentarem valores bem pequenos;
- Erros relativos de componentes mais leves dos produtos de fundo e de topo foram menores que os erros dos componentes mais pesados;

- Erros relativos do propano no produto de topo foram muito parecidos (23% a 39%);
- Em geral, os resultados dos dados de processo tratados foram mais satisfatórios que aqueles sem reconciliação.

4.3. Simulação Dinâmica e ajuste de sintonia de controle

Os dados de parâmetros de ajuste utilizados no modelo dinâmico foram os mesmos do modelo estacionário, com exceção da eficiência de Murphree que foi de 90% para o regime dinâmico.

O intervalo utilizado para o estudo dinâmico encontra-se na Figura 4.7 com duração de um dia e que mostra o comportamento explicado no capítulo de metodologia, com três intervalos considerados estacionários e dois intervalos dinâmicos do processo para a vazão volumétrica.

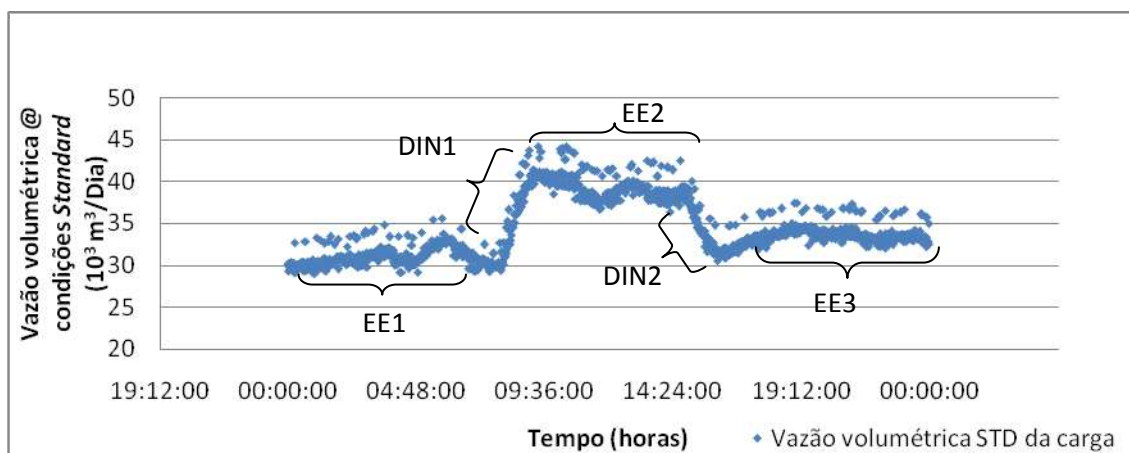


Figura 4.7 – Dados medidos de processo da vazão volumétrica da carga em condição padrão no dia 17 de maio de 2009. Em destaque as separações dos intervalos em estudo.

O intervalo foi dividido em cinco partes e a Tabela 4.24 resume todos os dados obtidos a partir da média de cada intervalo estacionário. Com isso, a partir do primeiro intervalo estacionário (EE1), a construção do primeiro intervalo dinâmico (DIN1) foi obtida na forma de perturbação do tipo rampa do primeiro estado estacionário (EE1) até o segundo estado estacionário (EE2). Da mesma forma, a partir do segundo estado estacionário (EE2), foi realizada uma perturbação do tipo rampa para obtenção do segundo intervalo dinâmico (DIN2), até que se alcançasse o último estado estacionário (EE3). Essas perturbações de um estado estacionário para outro incluiu as variáveis de vazão molar, temperatura, pressão e composição de carga, além dos *setpoints* de pressão de topo e de temperatura de fundo.

Como explicado anteriormente, não houve controle da temperatura do produto de topo da coluna de destilação. Logo, optou-se em deixar em malha aberta e fixaram-se valores de cargas térmicas para o condensador. Com isso, a variável da carga térmica passou a fazer parte das variáveis que sofreram perturbações entre os estados estacionários, como uma forma também de se controlar a variável de temperatura de produto de topo.

Tabela 4.24 – Dados de cada estado estacionário em estudo (horários referentes ao dia 17 de maio de 2009).

Dados de Processo	Estado estacionário (EE1) (00:00h até 08:00h)			Estado estacionário (EE2) (09:00h até 15:00h)			Estado estacionário (EE3) (16:00h até 23:59h)		
	CARGA	TOPO	FUNDO	CARGA	TOPO	FUNDO	CARGA	TOPO	FUNDO
Temperatura (°C)	27.58	-1.14	89.5	30.00	-0.37	90.03	33.29	-3.20	91.50
Pressão absoluta (kPa)	2593 ⁽¹⁾	2734	2750	2615 ⁽¹⁾	2734	2752	2610 ⁽¹⁾	2735	2750
Vazão Volumétrica @ condição padrão (10³ m³/Dia)	31.03	131.9	21.18 ⁽²⁾	39.37	152.1	28.32 ⁽²⁾	33.50	120.2	26.9 ⁽²⁾
Vazão Molar (kgmol/h) ⁽³⁾	377.64	226.2	150.9	461.53	260.8	201.2	401.76	209.60	189.24
Composição de Carga	Estado estacionário (EE1)			Estado estacionário (EE2)			Estado estacionário (EE3)		
z(CO₂)	0.0220			0.0162			0.0122		
z(C1)	0.0500			0.0602			0.0708		
z(C2)	0.5007			0.4583			0.3959		
z(C3)	0.2403			0.2635			0.2934		
z(i-C4)	0.0447			0.0487			0.0558		
z(n-C4)	0.0732			0.0781			0.0866		
z(i-C5)	0.0205			0.0227			0.0258		
z(n-C5)	0.0214			0.0232			0.0259		
z(n-C6)	0.0168			0.0181			0.0205		
z(n-C7)	0.0063			0.0069			0.0079		
z(n-C8)	0.0031			0.0034			0.0041		
z(n-C9)	0.0008			0.0007			0.0009		

Subscritos (1) e (3) indicam que a pressão e a vazão molar foram estimados no modelo de “Streams.mso”, respectivamente. O subscrito (2) indica que a unidade é m³/h para as vazões volumétricas de fundo.

A seguir, os resultados obtidos de algumas variáveis controladas da coluna de destilação são apresentados nas Figuras 4.8 e 4.9. Os resultados dos ajustes dos parâmetros dos controladores encontram-se no APÊNDICE A4 juntamente com as equações de controle implementadas na modelagem dinâmica.

Na Figura 4.8 observa-se que o objetivo de se obter a temperatura de topo da coluna pela manipulação da carga térmica do condensador nas perturbações do tipo rampa apresentou bons resultados, levando-se em conta que esta variável não é medida.

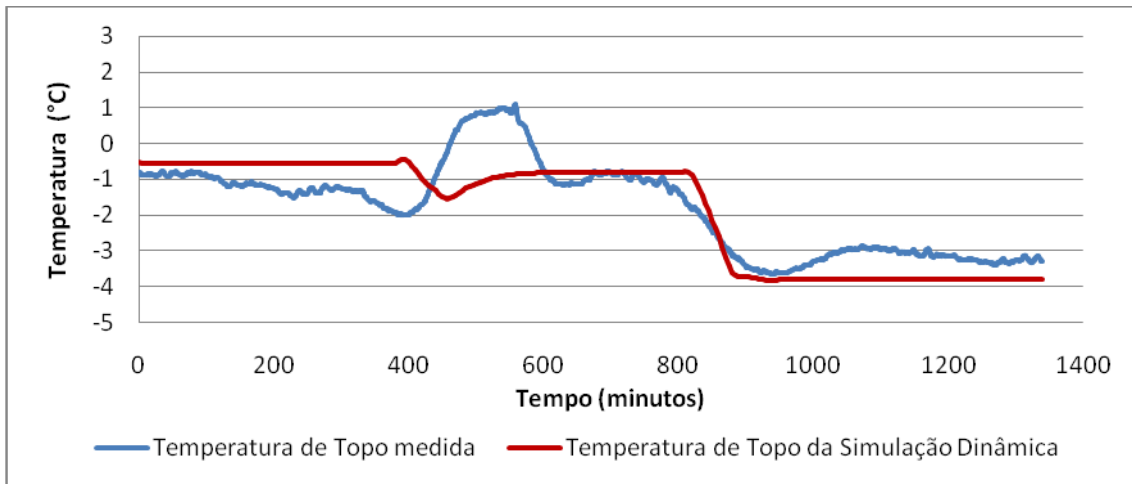


Figura 4.8 – Variação da temperatura de produto de topo da torre.

A Figura 4.9 apresenta o controle da temperatura de fundo da torre, que é uma variável muito importante para as inferências, visto que as composições de produtos são em geral muito sensíveis ao valor desta variável. Verifica-se que a temperatura de fundo foi controlada satisfatoriamente no intervalo em estudo e consegue acompanhar o aumento de temperatura de fundo ao longo das perturbações de processo (variação de aproximadamente 89,5 °C para 91,5°C). A discrepância no transiente está na forma de variação do *setpoint* que foi adotada na simulação, que é diferente dos dados de planta.

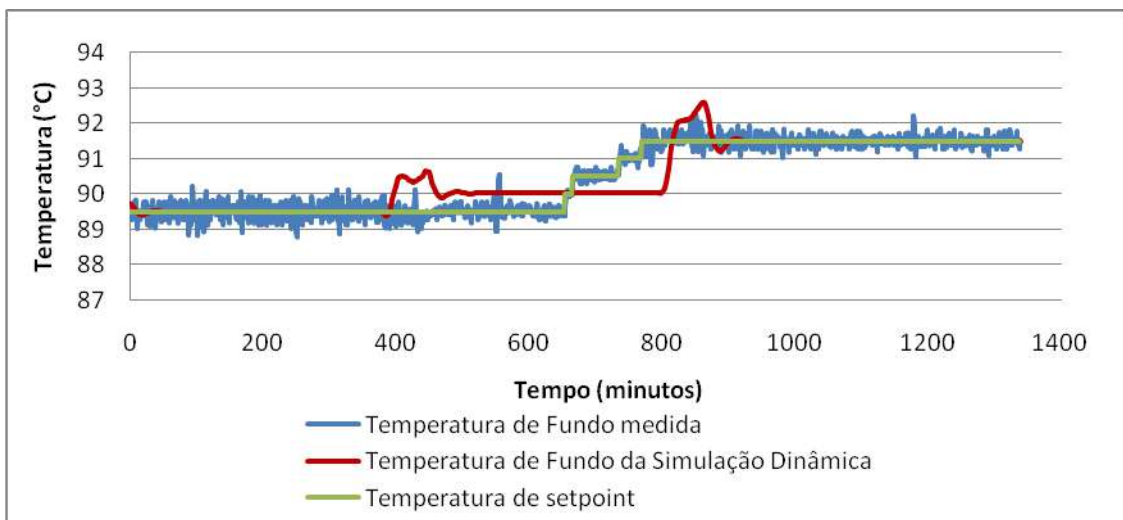


Figura 4.9 – Controle da temperatura de fundo da torre.

Nas Figuras 4.10 e 4.11 são mostradas as cargas térmicas do condensador e do refeedor que são as variáveis manipuladas utilizadas para o controle das temperaturas de produto de topo e temperatura de fundo da torre, respectivamente. Sendo assim, é importante que essas variáveis estejam dentro dos limites estabelecidos de forma que não

ocorra a saturação na carga térmica nos trocadores de calor. Nota-se que os valores obtidos estão próximos das cargas térmicas de projeto da unidade, sendo estes iguais a -720 kW e 1350 kW, para o condensador e o refeedor, respectivamente.

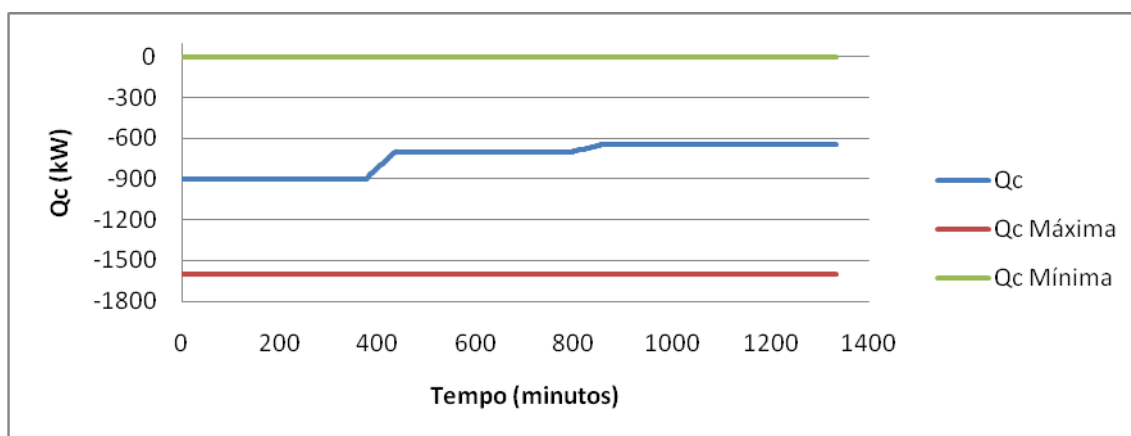


Figura 4.10 – Limites de carga térmica do condensador e a variável manipulada (Q_c) ao longo da simulação.

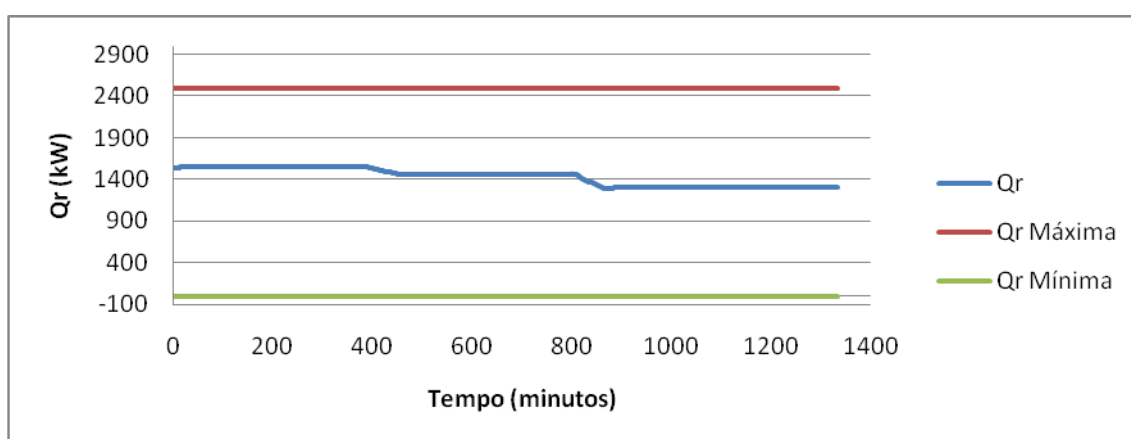


Figura 4.11 – Limites de carga térmica do refeedor e a variável manipulada (Q_r) ao longo da simulação.

Com as malhas de controle em funcionamento adequado quando comparadas aos dados de processo, as inferências dinâmicas foram obtidas a partir da simulação do intervalo escolhido do dia 17 de maio de 2009, com as perturbações (rampa) de variáveis pertencentes de um estado estacionário para outro.

4.4. Inferências Dinâmicas

As análises de inferências dinâmicas abordam os resultados do uso de reconciliação de dados para as vazões molares e de composição molar de carga e para o caso em que se utilizou os dados puros de processo. Inicialmente, serão apresentados os resultados de inferências sem o uso da reconciliação de dados e, na seqüência, as inferências com o tratamento de dados.

a) Inferências dinâmicas sem o uso de reconciliação de dados

As inferências de composição do produto de topo da coluna desetanizadora são apresentadas nas Figuras 4.12 a 4.14, sendo estas as composições principais de produtos, visto que os outros componentes aparecem no topo em quantidades insignificantes ou nulas.

Todas as inferências dinâmicas de composição de produtos de topo apresentaram resultados satisfatórios, pois muitos pontos de medidas de processo (dados fornecidos pela UPGN) se encontram próximos aos resultados das inferências, mesmo após as perturbações de processo, onde as diferenças de valores de composição (inicial e final) são evidentes.

Entretanto, para o caso do propano no topo, houve certo desvio da composição esperada em duas regiões do intervalo, ainda assim, a resposta da inferência acompanhou a tendência de aumentar quantidade de propano no topo (metade do intervalo), lembrando que se trata de uma perda não desejada deste componente na coluna desetanizadora.

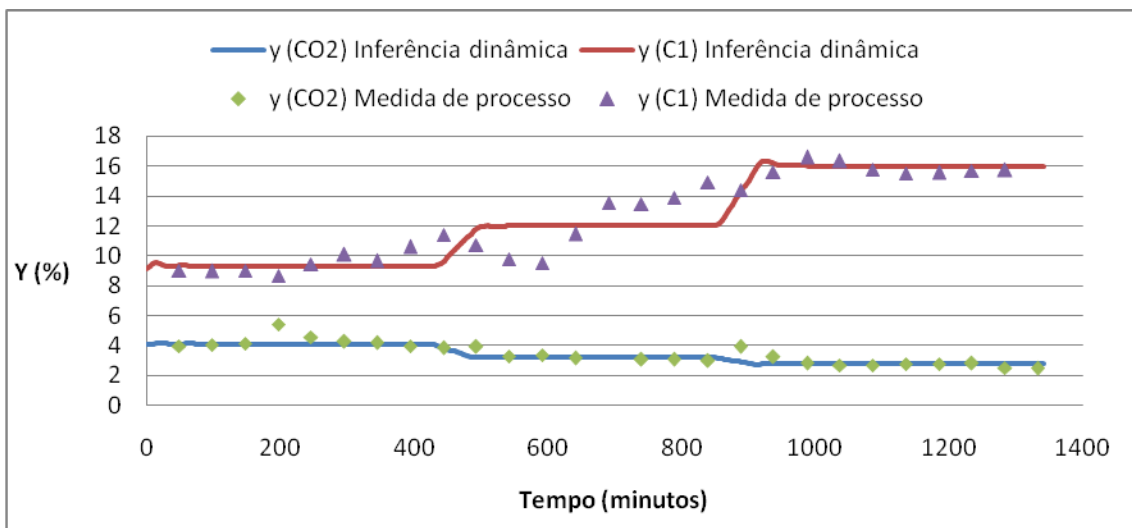


Figura 4.12 – Inferências de composição percentual de produto de topo para o CO₂ e metano (C1) da coluna.

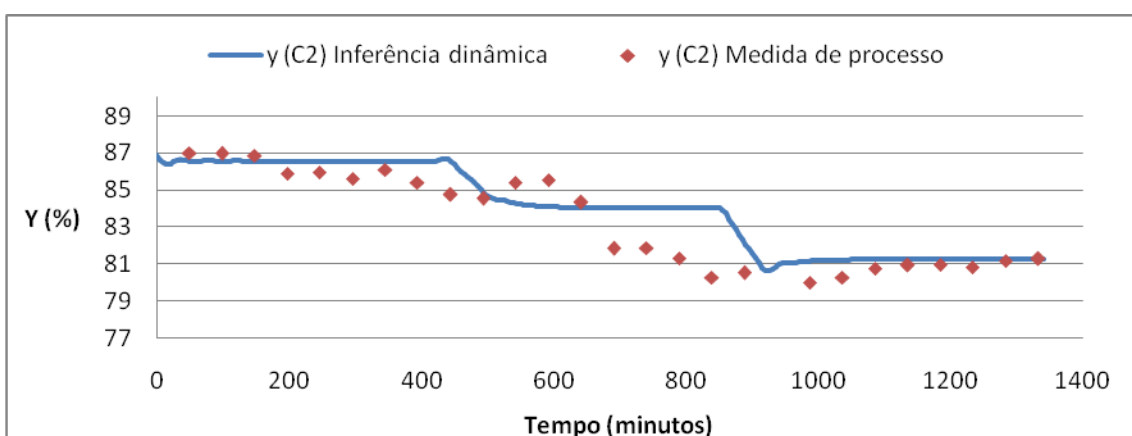


Figura 4.13 – Inferências de composição percentual de produto de topo para o etano (C2) da coluna.

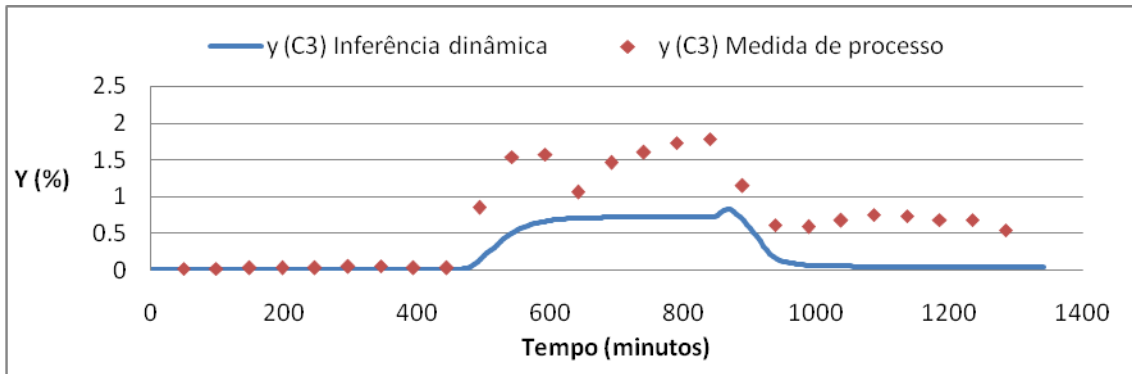


Figura 4.14 – Inferências de composição percentual de produto de topo para o propano (C3) da coluna.

Para o caso das composições mais importantes no topo (etano e propano) para fins de controle de qualidade do produto, realizou-se uma análise qualitativa da distribuição de composições inferidas *versus* as composições medidas de processo de acordo com a Figura 4.15 e 4.16 para o etano e propano, respectivamente. Nestes gráficos, verifica-se que quanto mais próximo da reta de referência ($Y_{inferência} = Y_{medido}$) estiverem as composições, menores são os desvios dos valores obtidos. No caso do etano, verifica-se uma diferença percentual de 4% no valor de composição (em destaque o ponto mais distante da reta na Figura 4.15). Já no caso do propano, estes desvios são mais freqüentes, com desvio máximo de aproximadamente 1% no valor de composição em percentagem (em destaque o ponto mais distante da reta na Figura 4.16).

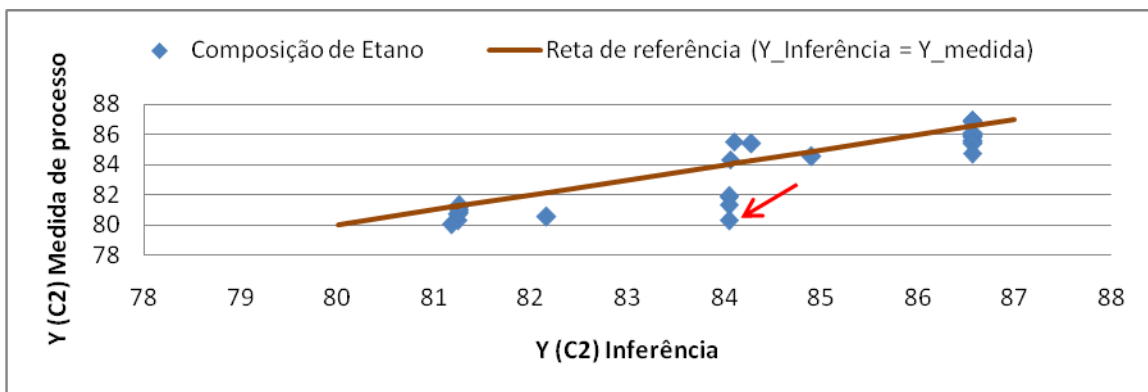


Figura 4.15 – Análise qualitativa da distribuição de composições inferidas *versus* as composições medidas de processo para o etano.

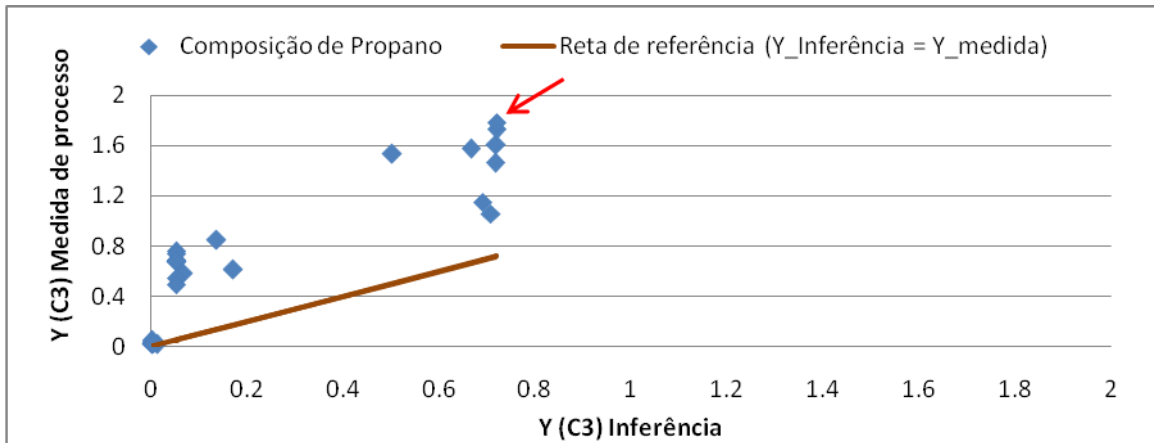


Figura 4.16 Análise qualitativa da distribuição de composições inferidas versus as composições medidas de processo para o propano.

As inferências de composição do produto de fundo da coluna desetanizadora são apresentadas nas Figuras 4.17 a 4.21, sendo estas, as composições principais de produto, visto que os componentes mais leves não se apresentam normalmente no produto de fundo.

De forma semelhante à inferência no produto de topo, os resultados das inferências dinâmicas das composições de produto de fundo apresentaram bons resultados, com desvios pequenos em cada composição.

No caso das inferências de componentes importantes no produto de fundo, destaca-se o etano para que se controle a quantidade a ser injetada na próxima coluna do processo (desbutanizadora), além dos componentes constituintes do GLP, como o propano, iso-butano e n-butano. Os demais componentes são obtidos como produto de fundo da coluna desbutanizadora, mas suas inferências também são válidas para verificação deste modelo de inferência. Com isso, detalharam-se alguns componentes em separado como o etano na Figura 4.17 e o propano na Figura 4.18.

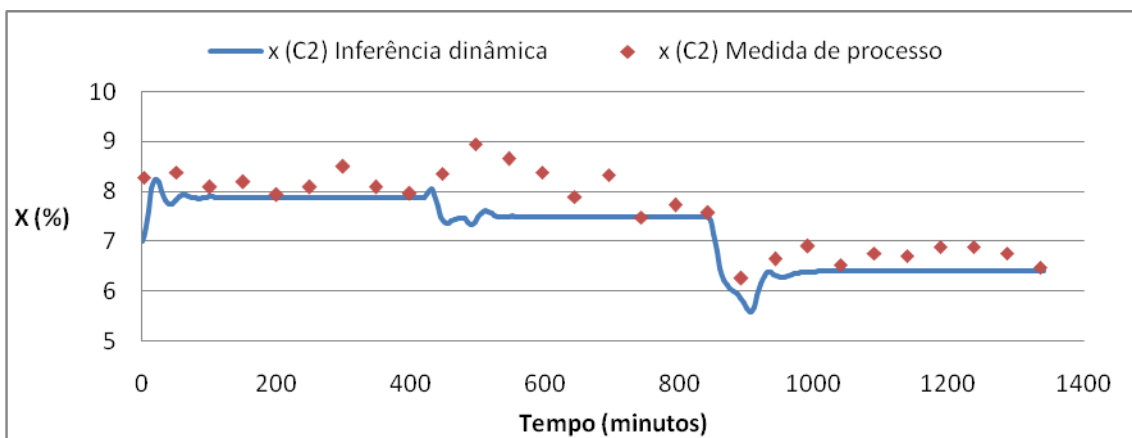


Figura 4.17 – Inferências de composição percentual de produto de fundo para o etano (C2) da coluna.

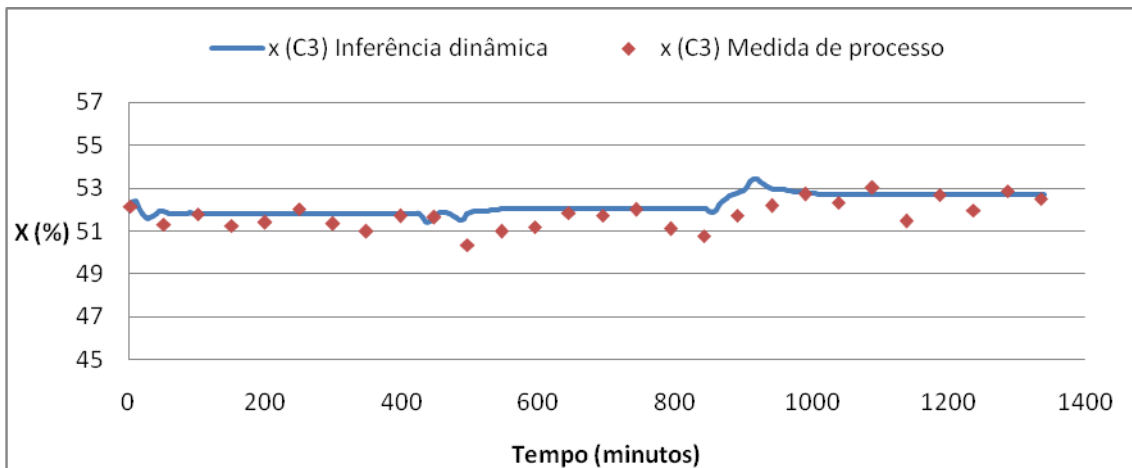


Figura 4.18 – Inferências de composição percentual de produto de fundo para o propano (C3) da coluna.

Observa-se a partir das Figuras 4.19 a 4.21 que os componentes mais pesados do produto de fundo da coluna possuem valores menos variantes mesmo com as perturbações relacionadas às mudanças de estados estacionários. Com isso, optou-se por uma breve análise dessas composições, apenas para a verificação das inferências estarem de acordo com os valores de composição de medidas de processo. Em todos os casos obtiveram-se boas inferências, sendo apenas as inferências de n-octano (Figura 4.21) que apresentaram maiores desvios em relação às composições medidas.

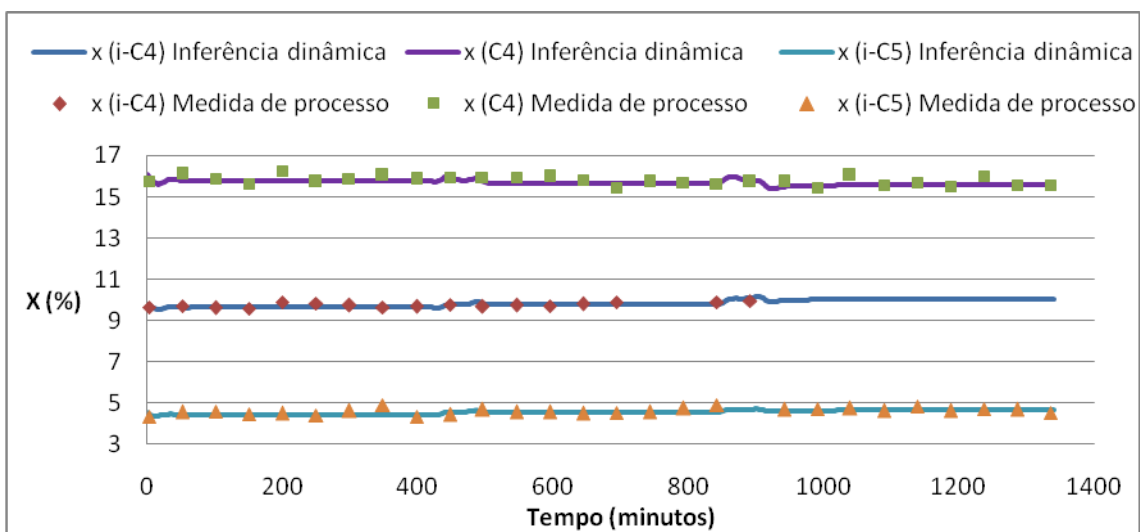


Figura 4.19 – Inferências de composição percentual de produto de fundo para o iso-butano (i-C4), n-butano (C4) e iso-pentano (i-C5) da coluna.

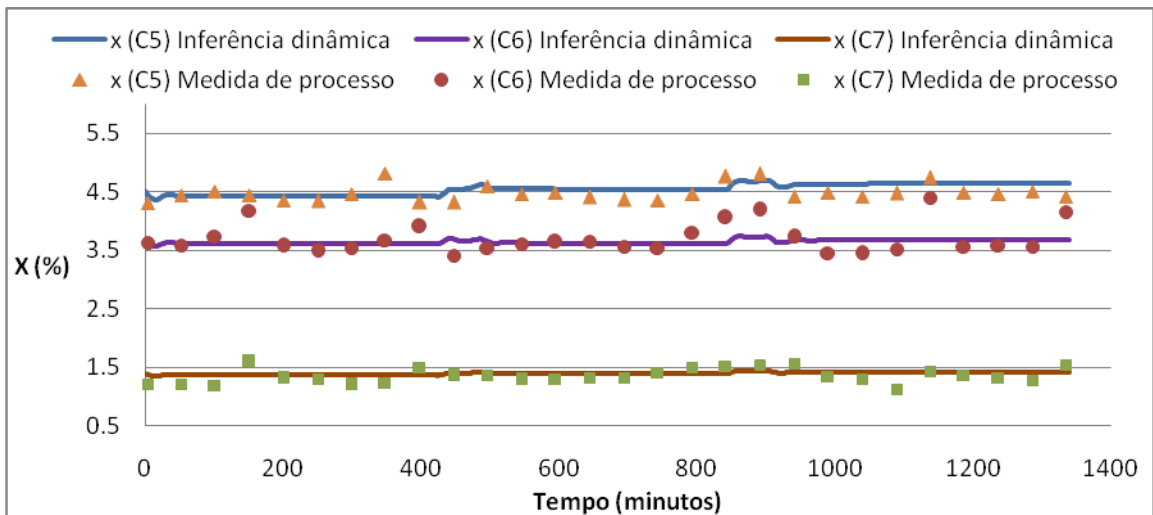


Figura 4.20 – Inferências de composição percentual de produto de fundo para o n-pentano (C5), n-hexano (C6) e n-heptano (C7) da coluna.

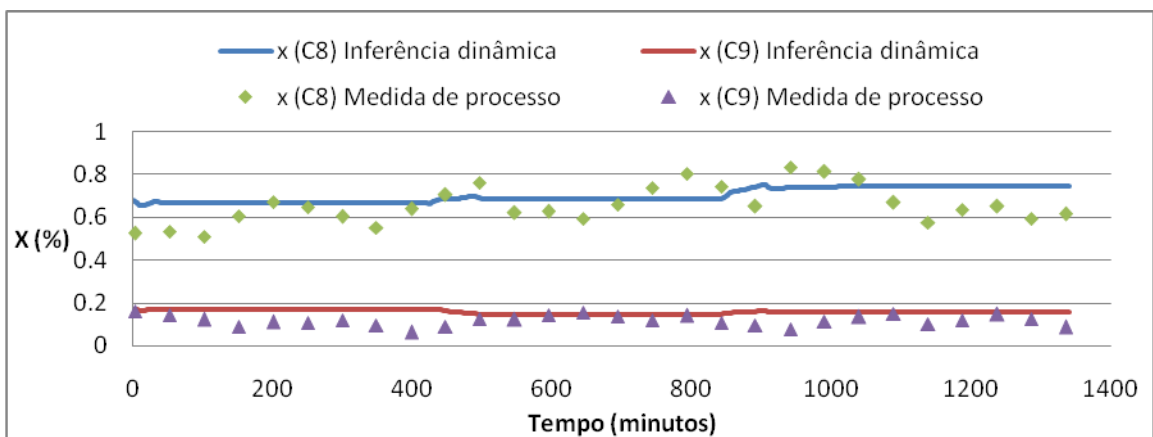


Figura 4.21– Inferências de composição percentual de produto de fundo para o n-octano (C8) e n-nonano (C9) da coluna.

Para o caso das composições mais importantes no fundo (etano e propano), para fins de controle de qualidade do produto, realizou-se uma análise qualitativa da distribuição de composições inferidas *versus* as composições medidas de processo de acordo com a Figura 4.22 e 4.23 para o etano e propano, respectivamente. Nestas duas análises, verifica-se a qualidade da inferência destes componentes de forma mais clara, já que todos os pontos se encontram bem próximos à reta de referência (inferência perfeita, $X_{inferência} = X_{medido}$), indicando boas inferências.

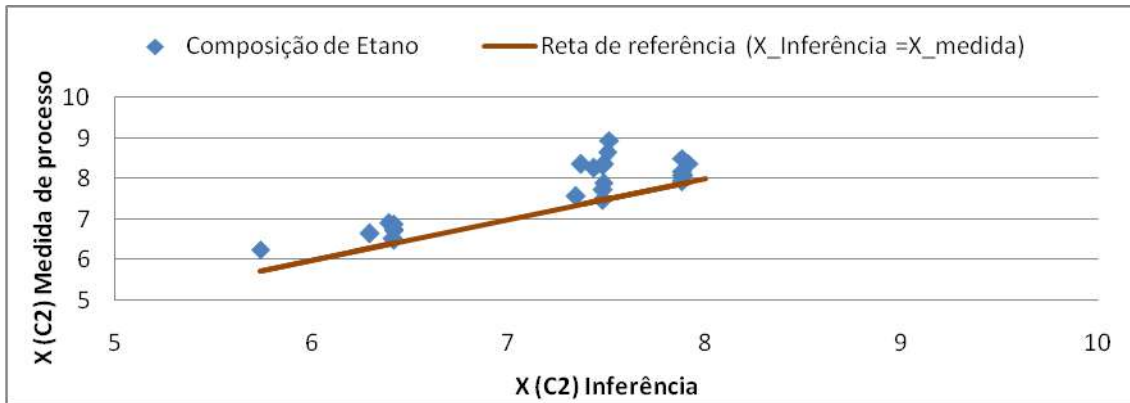


Figura 4.22 – Análise qualitativa da distribuição de composições inferidas versus as composições medidas de processo para o etano.

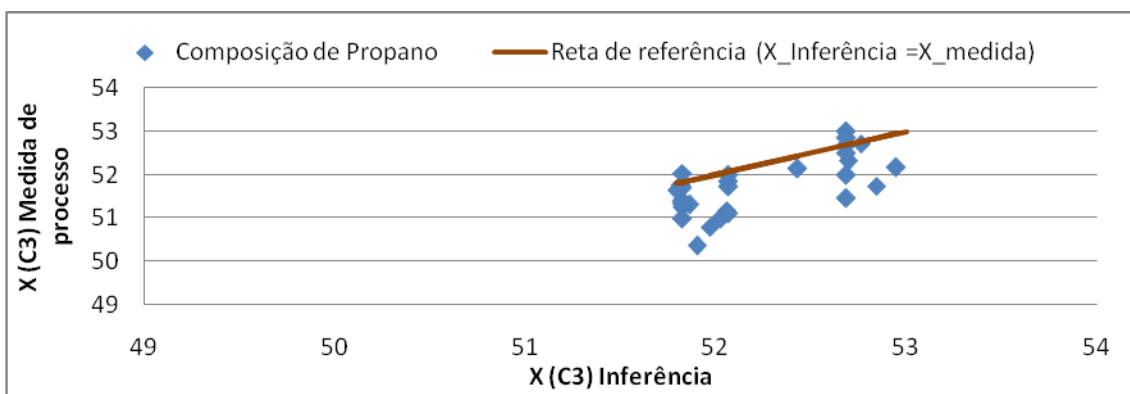


Figura 4.23 – Análise qualitativa da distribuição de composições inferidas versus as composições medidas de processo para o propano.

b) Inferências Dinâmicas com o uso de reconciliação de dados

Os resultados das inferências dinâmicas após o tratamento de dados através da reconciliação de dados são apresentados nas Figuras 4.24 a 4.26 para os produtos de topo e nas Figuras 4.27 a 4.31 para os produtos de fundo. Em todos os casos foi utilizada a reconciliação estacionária para os intervalos em estado estacionário (*EE1*, *EE2* e *EE3*) e a correção dos dados de processo através nos erros absolutos dinâmicos nos intervalos dinâmicos (*DIN1* e *DIN2*), como já detalhado no capítulo de metodologia. Com isso, nota-se que os dados a serem comparados com as inferências dinâmicas correspondem os dados reconciliados das medidas de processo, com valores constantes ao longo de cada intervalo estacionário e valores variantes nos intervalos onde se considerou a dinâmica do processo.

Na Figuras 4.24, observa-se que as inferências obtidas apresentaram bons resultados, principalmente para o caso do metano (C_1) que apresentou mudanças de composições nos dois instantes em que houve as perturbações de processo, totalizando uma variação de até 7% aproximadamente na composição inicial e final.

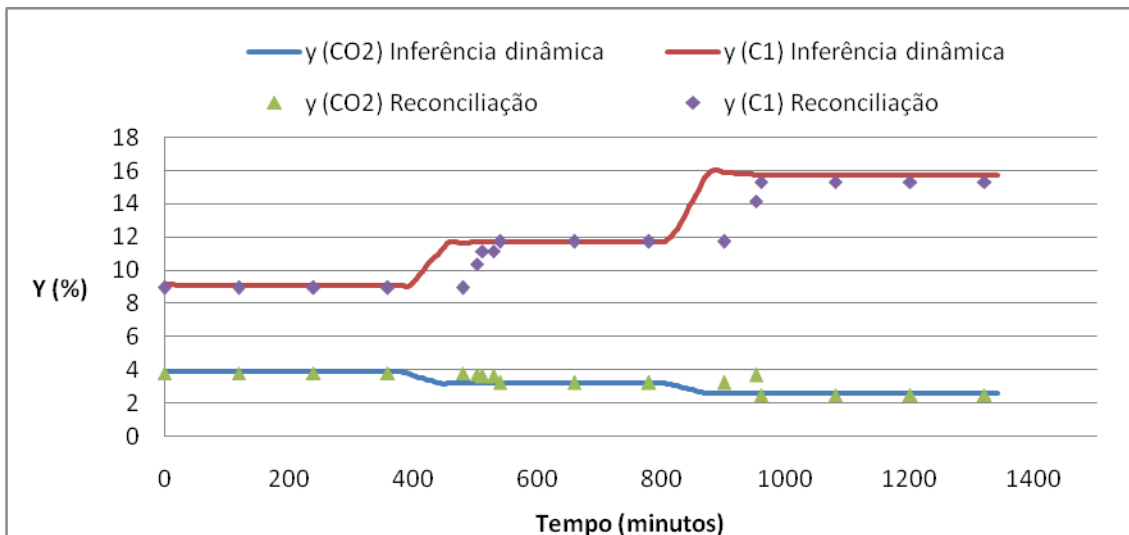


Figura 4.24 – Inferências de composição percentual de produto de topo para o CO₂ e o metano (C1) após reconciliação.

Nas Figuras 4.25 e 4.26, verifica-se que as inferências apresentaram melhores resultados no que se refere ao segundo estado estacionário (entre 500 e 800 minutos), ainda assim os desvios são considerados de pequenas proporções. Além disso, os resultados de inferência dinâmica acompanham de forma satisfatória as composições reconciliadas pelo erro absoluto dinâmico (estimativas da reconciliação dinâmica). Para o caso do propano, verifica-se que o desvio das composições reconciliadas e as obtidas pela inferência ocorrem apenas no último intervalo (acima de 900 minutos), diferentemente do ocorrido nos resultados de inferência sem o tratamento de dados em que houve desvios nos dois últimos intervalos.

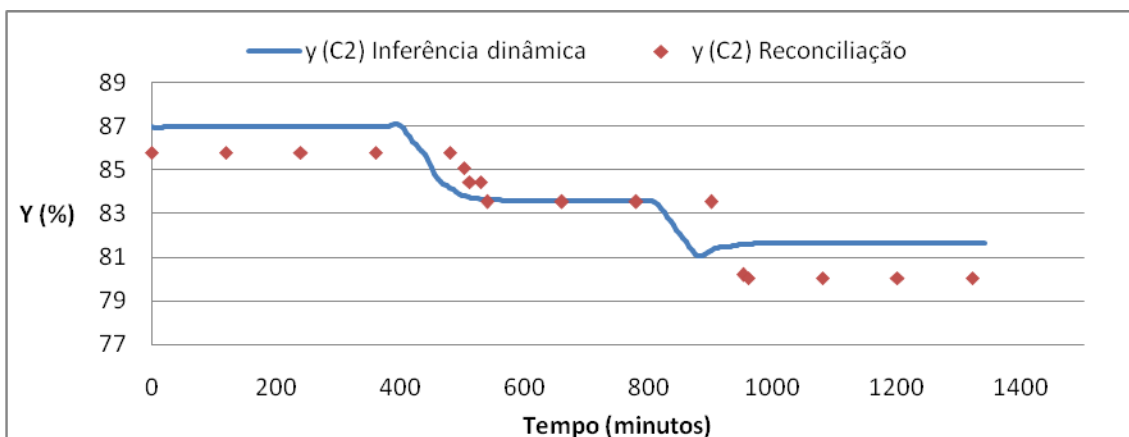


Figura 4.25 – Inferências de composição percentual de produto de topo para o etano (C2) após reconciliação.

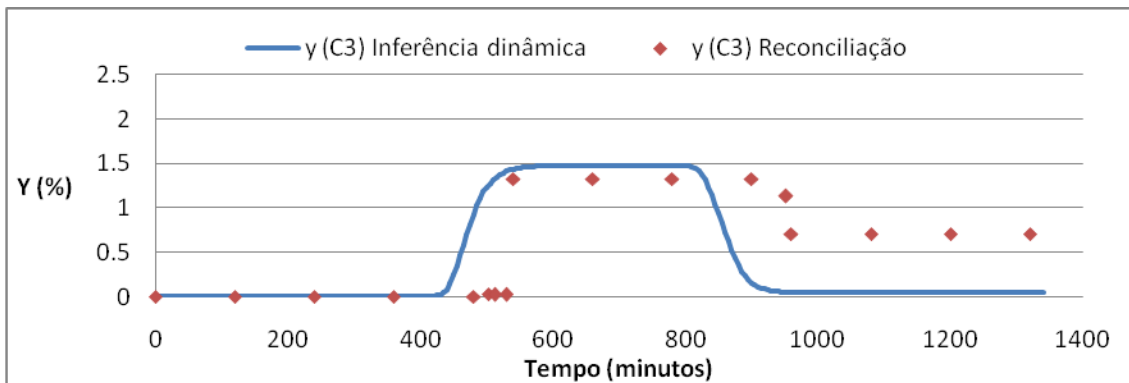


Figura 4.26 – Inferências de composição percentual de produto de topo para o propano (C3) após reconciliação.

De maneira semelhante, os resultados das inferências dinâmicas para os produtos de fundo apresentados nas Figuras 4.27 a 4.29 foram satisfatórios para todas as composições. Vale destacar que o segundo estado estacionário (entre 500 e 800 minutos) apresentou novamente melhores resultados como nas inferências de produto de topo. Isso se deve, possivelmente, por conta de uma reconciliação mais bem aproximada com os dados de processo em relação a todas as variáveis utilizadas como as vazões molares e composições de carga, topo e fundo da coluna. Uma forma de se analisar este fato é a partir do valor da função objetivo dos mínimos quadrados utilizada para cada estado estacionário, que resultou nos valores de 41.02, 20.70 e 91.74 para os três estados estacionários *EE1*, *EE2* e *EE3*, respectivamente. Sendo assim, nota-se que o menor valor da função objetivo utilizada é correspondente ao segundo estado estacionário, por conseguinte, pode-se dizer que quanto melhor a reconciliação de dados, mais confiáveis serão os resultados para comparação com os dados simulados e menores serão os desvios dessas variáveis de inferência.

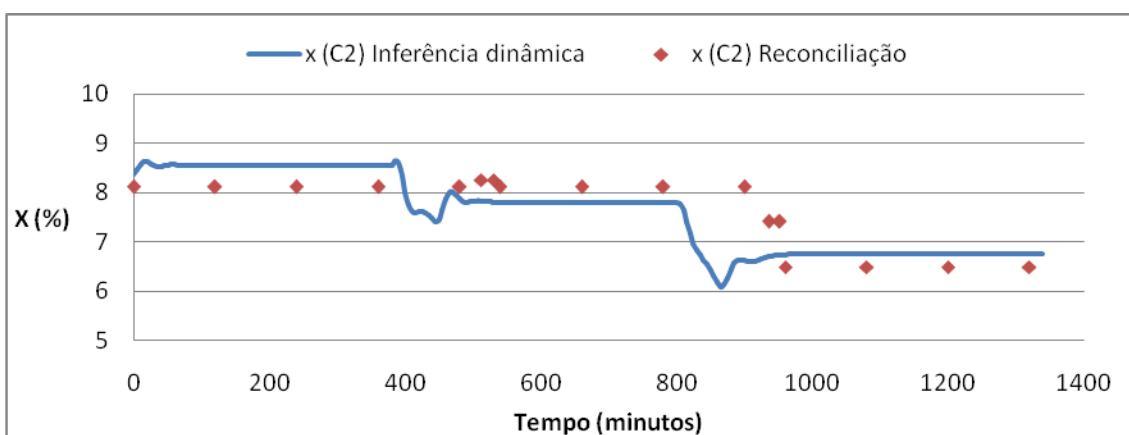


Figura 4.27 – Inferências de composição percentual de produto de fundo para o etano (C2) após reconciliação.

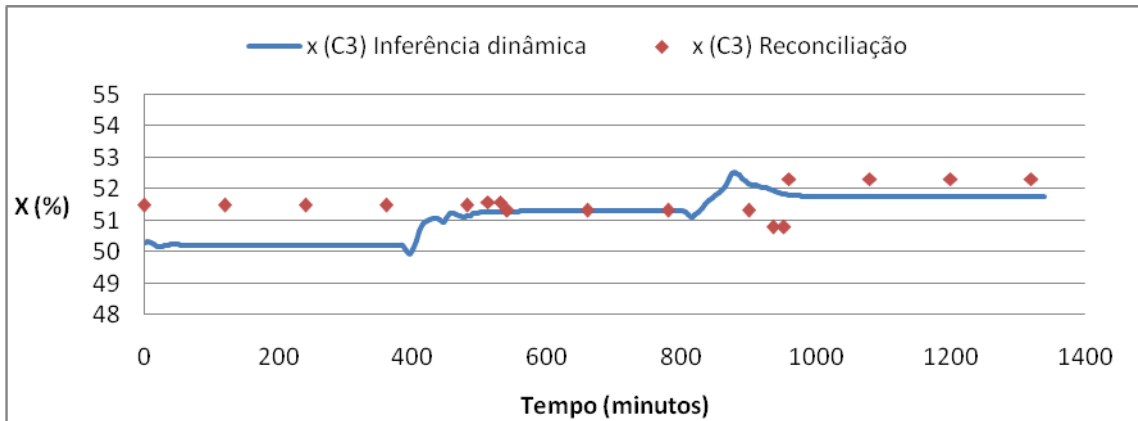


Figura 4.28 – Inferências de composição percentual de produto de fundo para o propano (C3) após reconciliação.

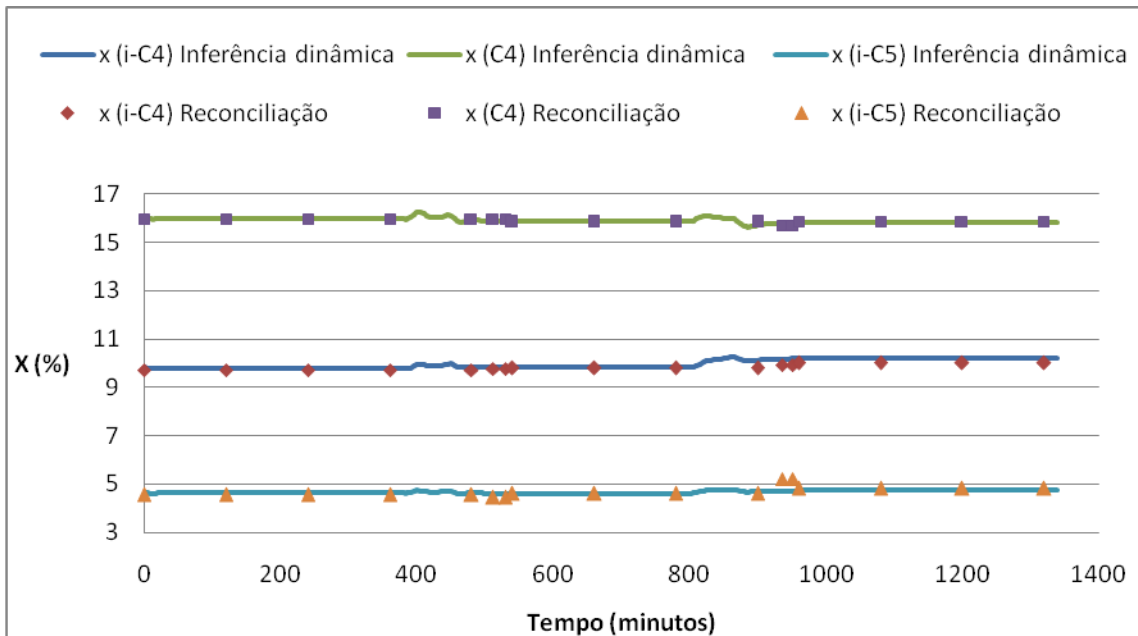


Figura 4.29 – Inferências de composição percentual de produto de fundo para o iso-butano (i-C4), n-butano (C4) e iso-pentano (i-C5) após reconciliação.

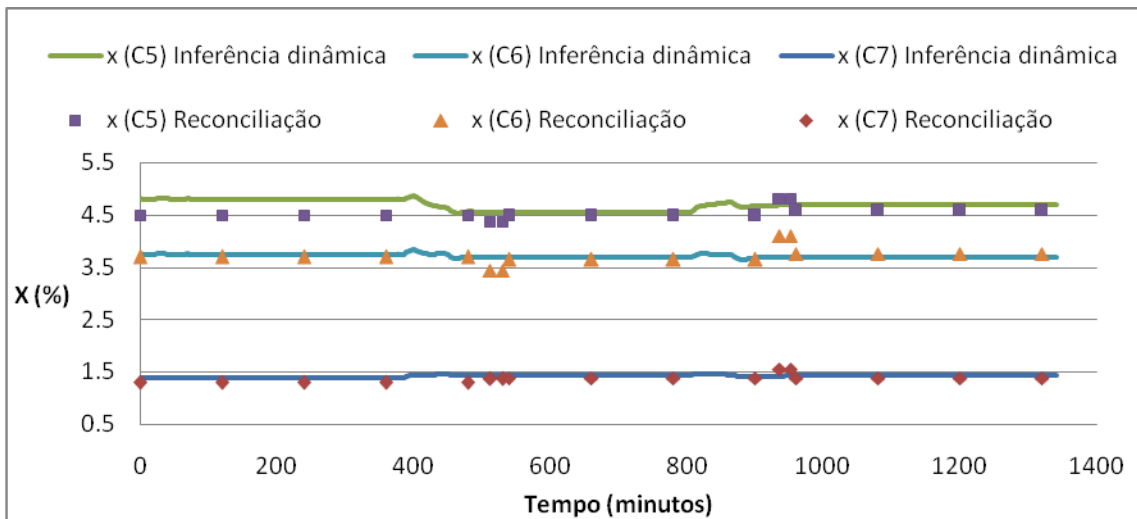


Figura 4.30 – Inferências de composição percentual de produto de fundo para o n-pentano (C5), n-hexano (C6) e n-heptano (C7) após reconciliação.

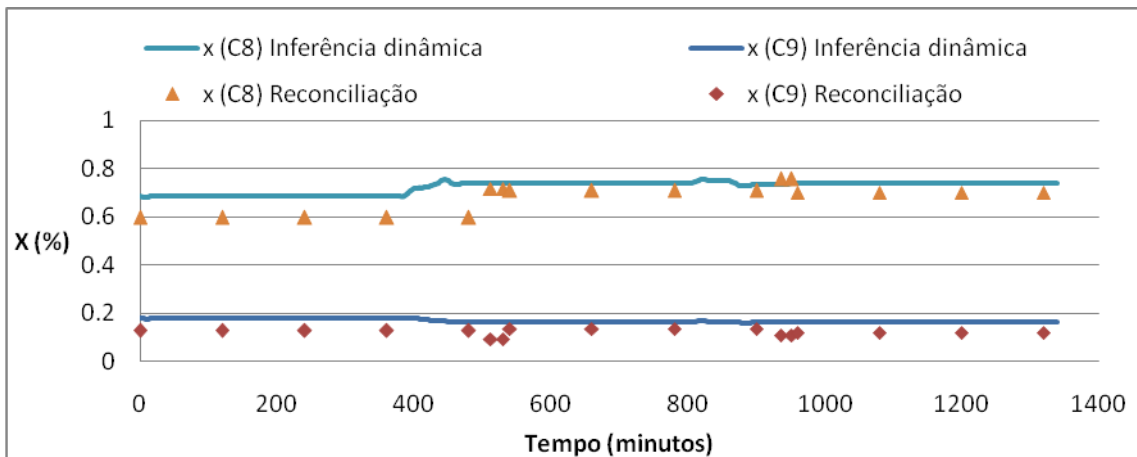


Figura 4.31– Inferências de composição percentual de produto de fundo para o n-octano (C8) e n-nonano (C9) após reconciliação.

Finalmente, após todas as análises de reconciliação de dados e inferências obtidas, verifica-se que todos os objetivos mencionados no primeiro capítulo foram alcançados com sucesso e uma conclusão geral de todo o trabalho será apresentada no capítulo a seguir.

Capítulo V – Conclusão

De maneira geral, todos os resultados de inferência de composição apresentados foram qualitativamente satisfatórios com relação ao objetivo de se verificar o uso de um modelo fenomenológico rigoroso de coluna de destilação multicomponente, tanto para o caso estacionário como para o dinâmico, implementado no simulador dinâmico de processos EMSO.

No estudo de inferências com o tratamento de dados de processo em regimes estacionários, verificou-se que a partir de uma boa reconciliação de dados (menor valor da função objetivo), melhores são os resultados de inferência de composição comparados aos dados reconciliados. Entretanto, como se trata de dados de processo e muitas vezes possuem desvios padrões elevados, é essencial que os dados sejam utilizados em intervalos estacionários e que não apresente erros grosseiros.

Na etapa da sintonia das malhas de controle, observou-se que o controle das malhas era crucial para que se obtivessem boas inferências, principalmente no caso de se controlar as temperaturas de topo e fundo, as quais as composições se mostraram relativamente sensíveis às mudanças de *setpoint* das temperaturas da coluna ou pela saturação das cargas térmicas dos trocadores de calor.

O estudo da inferência estacionária foi essencial para dar o início aos estudos de inferência dinâmica, além disso, foi nesta etapa que se pôde constatar as variações das composições a serem obtidas por inferência frente a diferentes valores de vazões molares e de composição de carga, além de outras variáveis como a temperatura e a pressão. Além disso, verificou-se que o modelo teórico correspondia às inferências de composição dos produtos de topo e fundo em intervalos com regimes estacionários, mesmo com as simplificações e considerações citadas ao longo deste trabalho.

No caso das inferências dinâmicas, os resultados foram ainda mais relevantes, visto que uma coluna de destilação é um processo dinâmico sujeito a vários tipos de perturbações de processo. Com isso, pôde-se verificar que as inferências acompanharam os diferentes valores de composição dos produtos durante os intervalos com e sem as perturbações, mostrando que o modelo dinâmico utilizado respondeu de forma satisfatória às inferências em tempo contínuo.

Portanto, a utilização do modelo teórico de inferência se apresentou como uma promissora ferramenta para se estimar as composições em tempo real considerando toda a dinâmica inerente ao processo de uma coluna de destilação (desetanizadora) de uma UPGN, principalmente para a estimativa de componentes de maior interesse no processo, como as inferências de propano no produto de topo (perdas não desejadas) e de etano no produto de fundo (maior concentração desejada).

No entanto, a necessidade de se utilizar o tratamento de dados de processos precisa ainda ser mais estudada, principalmente para o caso do uso de reconciliação dinâmica, visto

que neste trabalho foi utilizada apenas uma correção (ou estimativa) de alguns pontos de composição nos intervalos com dinâmica, não sendo objetivo um maior detalhamento nesse assunto. Já no caso do tratamento de dados em regime estacionário, pode-se concluir que a reconciliação de dados estacionária, através da função dos mínimos quadrados ponderados, foi uma etapa necessária para melhores resultados de inferências estacionárias.

Como perspectivas de trabalhos futuros, algumas verificações podem ser testadas, como a realização de simulações do modelo utilizado neste trabalho com entradas de variáveis de processo (temperatura, pressão, vazões) em tempo real (minuto a minuto). Além disso, pode-se realizar um estudo de sensibilidade das variáveis de composição dos produtos de topo e fundo para uma validação detalhada do modelo da coluna desetanizadora.

Ou ainda, pode-se utilizar o modelo da coluna desetanizadora como um ponto de partida para uma implementação em outros tipos de colunas de uma UPGN e a realização de inferências de composição de outros tipos de produtos, como por exemplo, a inferência direta de GLP (produto de topo de uma desbutanizadora) ou até mesmo de componentes mais pesados como a gasolina (produto de fundo de uma desbutanizadora).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), *Boletim mensal do Gás Natural (agosto de 2010)*. Disponível em: <http://www.anp.gov.br>. Acessado em: 02 de agosto de 2010.

BARROS A.A.C. *Desenvolvimento de modelo de correlações de eficiência para os processos de destilação convencional e extrativa*, Dissertação (Doutorado em Engenharia Química), Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas-SP, 1997.

CALDAS J.N.; LACERDA A.I.; VELOSO E.; PASCHOAL L.C. *Internos de Torres – Pratos & Recheios*, 2° ed., Rio de Janeiro: Ed. Interciência - Petrobrás, 2007.

CANABARRO L.R.; RIBEIRO L.D.; MENEZES M.P.; *Estudo de um Problema de Controle de Processos no Sistema de Refrigeração a Propano em uma Unidade de Processamento de Gás Natural*. Trabalho de Conclusão de Curso do Programa de Pós-Graduação em Engenharia, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC - RJ), Rio de Janeiro – RJ, 2009.

CANABARRO L.R.; SECCHI A.R. “Inferência dinâmica em colunas de destilação para uma unidade de processamento de gás natural com modelo fenomenológico”, *XVIII Congresso Brasileiro de Engenharia Química (COBEQ)*, 2010.

CAVALCANTE Jr. A.P. *Inferência na otimização e controle de colunas de destilação via funções racionais*. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas – SP, 1996.

KANO M.; MIYAZAKI K.; HASEBE S.; HASHIMOTO I. “Inferential control system of distillation compositions using dynamic partial least squares regression”, *Journal of Process Control*, v.10, p. 157-166, 2000.

KANO M.; SHOWCHAIYA N.; HASEBE S.; HASHIMOTO I. “Inferential control of distillation compositions: selection of model and control configuration”, *Control Engineering Practice*, v.11, p. 927–933, 2003.

LU N.; YANG Y.; GAO F.; Wang F. “Multirate dynamic inferential modeling for multivariable processes”, *Chemical Engineering Science*, v.59, p. 855 – 864, 2004.

MAHDIPOOR H.R.; SHIRVANI M.; JAFARI NASR M.R.; SHAKIBA S. “Rigorous Dynamic Simulation of an Industrial tray column, considered liquid flow regime and efficiency of trays”, *Chemical Engineering Research and Design*, v.85 (A8), p. 1101–1111, 2007.

MENDONÇA, E.S. *Monitoramento, diagnóstico e otimização operacional de uma unidade de processamento de gás natural*, Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Processos Químicos e

Bioquímicos), Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, Escola de Química, Rio de Janeiro - RJ, 2007.

NARASIMHAN S.; JORDACHE C. *Data reconciliation and gross error detection : an intelligent use of process data*. 1ªed. USA, Houston – Texas: Gulf Publishing Company, 2000.

PRATA, D.M. *Reconciliação de Dados em um Reator de Polimerização*. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, COPPE, Rio de Janeiro – RJ, 2005.

REEPMEYER, F.; REPKE, J.-U.; WOZNY, G. “Analysis of the start-up process for reactive distillation”, *Chemical Engineering Technology*, v. 26, p. 81–86, 2003.

ROMAGNOLI, J.A.; WEISS G. H.; ISLAM K.A. “Data Reconciliation – An Industrial case Study”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 20, n. 12, p. 1441–1449, 1996.

ROMAGNOLI J.A.; SÁNCHEZ M.C. *Data Processing and Chemical Process Operations*. 1ªed., v.2, USA, San Diego - California: Academic Press, 2000.

SCHWAAB M.; PINTO J.C. *Análise de Dados Experimentais I – Fundamentos de Estatística e Estimção de Parâmetros*. Série Escola Piloto em Engenharia Química, v.1, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro: E-papers, 2007.

SECCHI A.R.; MUNIZ L.A.R.; DIEHL F.C.; LUSA L.P.; LONGHI L.G.S. “Simulação operacional de uma torre de destilação atmosférica via ASPEN PLUS e avaliação de modelos de analisadores virtuais”, *Revista Controle & Automação*, v.20, n.3, 2009.

SOARES, R.P.; SECCHI, A. R. “EMSO: A New Environment for Modelling, Simulation and Optimisation”, *In: Proceedings of the 13th European Symposium on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE 13)*. Lappeenranta, Finland, p. 947-852, 2003.

STAUDT P.B. *Modelagem e Simulação Dinâmica de Colunas de Destilação*. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de Engenharia, Porto Alegre – RS, 2007.

VAZ, C. E. M.; MAIA, J. L. P.; SANTOS, W.G. S. *Tecnologia da indústria do gás natural*. 1ª ed. São Paulo: Ed. Blucher, 2008.

WANG, L.; LI, P.; WOZNY, G.; WANG, S. “A start-up model for simulation of batch distillation starting from a cold state”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, p. 1485–1497, 2003.

APÊNDICES

Apêndice – A1: Modelagem da coluna desetanizadora em ambiente EMSO

A seguir, no código A.1 e A.2 podem ser visualizados o fluxograma (*FlowSheet*) da coluna desetanizadora estudada. Os modelos citados neste fluxograma (após o comando “using”) estão contidos na biblioteca EML (*EMSO Model Library*) do simulador EMSO.

Código A.1: FlowSheet de Coluna de destilação desetanizadora

```
using "stage_separators/column2";  
using "controllers/PIDIncr";  
using "controllers/PIDs";
```

FlowSheet Column_T02

PARAMETERS

```
PP as Plugin (Brief="Physical Properties",  
Type="PP",  
Components = ["carbon dioxide","methane", "ethane", "propane",  
"isobutane", "n-butane","isopentane","n-pentane", "n-hexane", "n-  
heptane","n-octane","n-nonane"],  
LiquidModel = "SRK",  
VapourModel = "SRK",  
# Soave, G., 1972. Equilibrium constant from a modified Redlich-  
# Kwong equation of state. Chem. Eng. Sci., 27: 1197-1203. );
```

```
NComp as Integer;
```

Top:

```
LMin as length (Brief = "Minimum liquid level in top tank");  
LMax as length (Brief = "Maximum liquid level in top tank");  
Fcmin as flow_mol (Brief = "Minimum top vapor flow rate");  
Fcmax as flow_mol (Brief = "Maximum top vapor flow rate");  
Fcmin2 as flow_mol (Brief = "Minimum reflux flow rate");  
Fcmax2 as flow_mol (Brief = "Maximum reflux flow rate");  
Pmin as pressure (Brief = "Minimum top pressure");  
Pmax as pressure (Brief = "Maximum top pressure");  
TcMin as temperature (Brief = "Minimum top temperature");  
TcMax as temperature (Brief = "Maximum top temperature");  
QcMin as heat_rate (Brief = "Minimum Condenser Heat supplied");  
QcMax as heat_rate (Brief = "Maximum Condenser Heat supplied");
```

Column (trays):

```
FVMin as flow_mol (Brief = "Minimum vapor flow rate");  
FVMax as flow_mol (Brief = "Maximum vapor flow rate");  
FLMin as flow_mol (Brief = "Minimum liquid flow rate");  
FLMax as flow_mol (Brief = "Maximum liquid flow rate");  
PMin as pressure (Brief = "Minimum column pressure");
```

PMax as pressure (Brief = "Maximum column pressure");

Bottom:

Lmin as length (Brief = "Minimum liquid level in reboiler");

Lmax as length (Brief = "Maximum liquid level in reboiler");

Frmin as flow_mol (Brief = "Minimum bottom flow rate");

Frmax as flow_mol (Brief = "Maximum bottom flow rate");

TMin as temperature (Brief = "Minimum bottom temperature");

TMax as temperature (Brief = "Maximum bottom temperature");

QrMin as heat_rate (Brief = "Minimum Reboiler Heat supplied");

QrMax as heat_rate (Brief = "Maximum Reboiler Heat supplied");

VARIABLES

Qc as energy_source (Brief = "Heat rate removed from condenser");

Qr as energy_source (Brief = "Heat rate supplied to reboiler");

SP_Ptop as pressure (Brief = "Setpoint top pressure");

SP_Ttop as temperature (Brief = "Setpoint top temperature");

SP_Tbottom as temperature (Brief = "Setpoint bottom temperature");

RR as positive (Brief = "Reflux ratio");

deltaP as press_delta (Brief = "Pressure Difference");

SET

NComp = PP.NumberOfComponents;

DEVICES

feed as source;

T02 as Distillation_kettle_cond;

zero as stream;

LC1 as PIDIncr;

LC_top as PIDIncr;

PC_top as PIDIncr;

TC_bottom as PID;

TC_top as PID;

CONNECTIONS

feed.Outlet to T02.trays(17).Inlet;

zero to T02.reb.Inlet;

zero to T02.trays([1:16]).Inlet;

zero to T02.trays([18:T02.NTrays]).Inlet;

Qc.OutletQ to T02.cond.InletQ;

Qr.OutletQ to T02.reb.InletQ;

EQUATIONS

"Bottom Level Controller"

LC1.Parameters.tau = 1*s';

LC1.Parameters.tauSet = 1*s';

LC1.Parameters.alpha = 0.3;

LC1.Parameters.bias = 0.2;

LC1.Parameters.gamma = 1;


```

LC1.Parameters.beta          = 1;
LC1.Options.action          = -1;
LC1.Options.clip            = 1;
LC1.Options.autoMan         = 0;
LC1.Parameters.intTime      = 90*'s';
LC1.Parameters.gain         = 1;
LC1.Parameters.derivTime    = 0*'s';
LC1.Ports.setPoint          = (1 * 'm' - Lmin)/(Lmax-Lmin);
LC1.Ports.input             = (T02.reb.Level - Lmin)/(Lmax-Lmin);
T02.reb.OutletL.F          = Frmin + (Frmax-Frmin) * LC1.Ports.output;

```

"Top Level Controller"

```

LC_top.Parameters.tau        = 1*'s';
LC_top.Parameters.tauSet    = 1*'s';
LC_top.Parameters.alpha     = 0.3;
LC_top.Parameters.bias      = 0.6;
LC_top.Parameters.gamma     = 1;
LC_top.Parameters.beta      = 1;
LC_top.Options.action       = -1;
LC_top.Options.clip        = 1;
LC_top.Options.autoMan     = 0;
LC_top.Parameters.intTime   = 200*'s';
LC_top.Parameters.gain      = 3;
LC_top.Parameters.derivTime = 0*'s';
LC_top.Ports.setPoint       = (1 * 'm' - LMin)/(LMax-LMin);
LC_top.Ports.input          = (T02.cond.Level - LMin)/(LMax-LMin);
T02.sptop.Outlet1.F        = 0 * 'kmol/h';
T02.sptop.Outlet2.F        = Fcmin2 + (Fcmax2-Fcmin2) * LC_top.Ports.output;

```

"Pressure Controller Top"

```

PC_top.Parameters.tau        = 1*'s';
PC_top.Parameters.tauSet    = 1*'s';
PC_top.Parameters.alpha     = 0.3;
PC_top.Parameters.bias      = 0.1;
PC_top.Parameters.gamma     = 1;
PC_top.Parameters.beta      = 1;
PC_top.Options.action       = -1;
PC_top.Options.clip        = 1;
PC_top.Options.autoMan     = 0;
PC_top.Parameters.intTime   = 10*'min';
PC_top.Parameters.gain      = 1.6;
PC_top.Parameters.derivTime = 0*'s';
PC_top.Ports.setPoint       = (SP_Ptop - Pmin)/(Pmax-Pmin);
PC_top.Ports.input          = (T02.cond.InletV.P - Pmin)/(Pmax-Pmin);
T02.cond.OutletV.F         = Fcmin + (Fcmax-Fcmin) * PC_top.Ports.output;

```

"Temperature Controller Bottom"

```

TC_bottom.Parameters.tau     = 1*'s';
TC_bottom.Parameters.tauSet  = 1*'s';
TC_bottom.Parameters.alpha   = 0.3;
TC_bottom.Parameters.bias    = 0.4;

```

```

TC_bottom.Parameters.gamma      = 1;
TC_bottom.Parameters.beta       = 1;
TC_bottom.Options.action        = 1;
TC_bottom.Options.clip          = 1;
TC_bottom.Options.autoMan       = 0;
TC_bottom.Parameters.intTime    = 1*'min';
TC_bottom.Parameters.gain       = 0.2;
TC_bottom.Parameters.derivTime  = 0.2*'min';
TC_bottom.Ports.setPoint        = (SP_Tbottom - TMin)/(TMax-TMin);
TC_bottom.Ports.input           = (T02.reb.OutletV.T - TMin)/(TMax-TMin);
Qr.OutletQ.Q                    = QrMin + (QrMax-QrMin) *
TC_bottom.Ports.output;

```

"Temperature Controller Top"

```

TC_top.Parameters.tau           = 1*'s';
TC_top.Parameters.tauSet       = 1*'s';
TC_top.Parameters.alpha        = 0.3;
TC_top.Parameters.bias         = 0.2;
TC_top.Parameters.gamma        = 1;
TC_top.Parameters.beta         = 1;
TC_top.Options.action          = -1;
TC_top.Options.clip            = 1;
TC_top.Options.autoMan         = 1; #Controller off;
TC_top.Parameters.intTime      = 15*'min';
TC_top.Parameters.gain         = 4;
TC_top.Parameters.derivTime    = 3*'min';
TC_top.Ports.setPoint          = (SP_Ttop - TcMin)/(TcMax-TcMin);
TC_top.Ports.input             = (T02.cond.OutletV.T - TcMin)/(TcMax-TcMin);
#Qc.OutletQ.Q                  = QcMin + (QcMax-QcMin) *
TC_top.Ports.output;

```

```

T02.trays(2:16).Emv            = T02.trays(1).Emv;
T02.trays(18:32).Emv          = T02.trays(17).Emv;
T02.trays(2:16).beta          = T02.trays(1).beta;
T02.trays(18:32).beta         = T02.trays(17).beta;
T02.trays(2:16).alfa          = T02.trays(1).alfa;
T02.trays(18:32).alfa         = T02.trays(17).alfa;
RR * (T02.cond.OutletV.F + T02.sptop.Outlet1.F) = T02.sptop.Outlet2.F;
deltaP = T02.trays(32).OutletL.P - T02.trays(1).OutletL.P;

```

"Disturbances (ramp)"

```

if time < 480 * 'min' then
"EE1"
feed.Outlet.F                = 377.644 * 'kmol/h';
feed.Outlet.T                = (27.58366281+273.15) * 'K';
feed.Outlet.P                = 2593*1e3 * 'Pa';
feed.Composition              =
[2.203833784,4.999609367,50.06643106,24.03480213,4.468536646,7.320648988,2.0
54202797,2.14087016,1.679564515,0.632320148,0.30973367,0.078494177]/100;
SP_Tbottom                   = (89.5+273.15) * 'K';
SP_Ttop                       = (-1.1391+273.15) * 'K';

```

Qc.OutletQ.Q = -900 * 'kW';

else if time >= 480 * 'min' and time < 540 * 'min' then

"DIN1"

feed.Outlet.F = 377.644 * 'kmol/h' + (time/'min' - 480)*(461.533 - 377.644) * 'kmol/h'/60;

feed.Outlet.T = (27.58366281+273.15) * 'K' + (time/'min' - 480)*(30.00366417 - 27.58366281) * 'K'/60;

feed.Outlet.P = 2593*1e3 * 'Pa'+ (time/'min'- 480)*(2615*1e3 -2593*1e3) * 'Pa'/60;

feed.Composition =
[2.203833784,4.999609367,50.06643106,24.03480213,4.468536646,7.320648988,2.054202797,2.14087016,1.679564515,0.632320148,0.30973367,0.078494177]/100 + (time/'min'-480)*([1.617632,6.018017002,45.82531187,26.34579088,4.87092525,7.807244917,2.270566825,2.318597334,1.807782031,0.692468875,0.342047762,0.073684721]/100-[2.203833784, 4.999609367, 50.06643106, 24.03480213, 4.468536646, 7.320648988,2.054202797,2.14087016,1.679564515,0.632320148,0.30973367,0.078494177]/100)/60;

SP_Tbottom = (89.5+273.15) * 'K' + (time/'min' - 480)*(90.02638889 - 89.5) * 'K'/60;

SP_Ttop = (-1.1391+273.15) * 'K' + (time/'min' - 480)*(-0.365993971 + 1.1391) * 'K'/60;

Qc.OutletQ.Q = -900 * 'kW' + (time/'min' - 480)*(-700 + 900) * 'kW'/60;

else if time >= 540 * 'min' and time < 900 * 'min' then

"EE2"

feed.Outlet.F = 461.533 * 'kmol/h';

feed.Outlet.T = (30.00366417+273.15) * 'K';

feed.Outlet.P = 2615*1e3 * 'Pa';

feed.Composition =
[1.617632,6.018017002,45.82531187,26.34579088,4.87092525,7.807244917,2.270566825,2.318597334,1.807782031,0.692468875,0.342047762,0.073684721]/100;

SP_Tbottom = (90.02638889+273.15) * 'K';

SP_Ttop = (-0.365993971+273.15) * 'K';

Qc.OutletQ.Q = -700 * 'kW';

else if time >= 900 * 'min' and time < 960 * 'min' then

"DIN2"

feed.Outlet.F = 461.533 * 'kmol/h' - (time/'min' - 900)*(461.533 - 401.76) * 'kmol/h'/60;

feed.Outlet.T = (30.00366417+273.15) * 'K' - (time/'min' - 900)*(30.00366417 - 33.28635909) * 'K'/60;

feed.Outlet.P = 2615*1e3 * 'Pa'- (time/'min'- 900)*(2615*1e3 -2610*1e3) * 'Pa'/60;

feed.Composition =
[1.617632,6.018017002,45.82531187,26.34579088,4.87092525,7.807244917,2.270566825,2.318597334,1.807782031,0.692468875,0.342047762,0.073684721]/100 - (time/'min'- 900)*([1.617632, 6.018017002, 45.82531187, 26.34579088, 4.87092525, 7.807244917, 2.270566825, 2.318597334, 1.807782031, 0.692468875, 0.342047762, 0.073684721]/100 - [1.216916561, 7.07578796, 39.5857448, 29.33838822, 5.580792637, 8.66144679, 2.5813 72425, 2.590177915, 2.048805599, 0.790024792, 0.41392505, 0.088974224]/100)/60;

```

SP_Tbottom = (90.02638889+273.15) * 'K' - (time/'min' - 900)*(90.02638889-
91.5) * 'K'/60;
SP_Tto = (-0.365993971+273.15) * 'K' - (time/'min' - 900)*(- 0.365993971 +
3.201717759) * 'K'/60;
Qc.OutletQ.Q = -700 * 'kW' - (time/'min' - 900)*(-700 + 650) * 'kW'/60;

```

else

"EE3"

```

feed.Outlet.F = 401.76 * 'kmol/h';
feed.Outlet.T = (33.28635909+273.15) * 'K';
feed.Outlet.P = 2610*1e3 * 'Pa';
feed.Composition =
[1.216916561,7.07578796,39.5857448,29.33838822,5.580792637,8.66144679,2.5813
72425,2.590177915,2.048805599,0.790024792,0.41392505,0.088974224]/100;
SP_Tbottom = (91.5+273.15) * 'K';
SP_Ttop = (-3.201717759+273.15) * 'K';
Qc.OutletQ.Q = -650 * 'kW';
end end end end

```

SPECIFY

```

SP_Ptop = 2635*1e3 * 'Pa';
zero.F = 0 * 'kmol/h';
zero.T = 300 * 'K';
zero.P = 1 * 'atm';
zero.z = 1/NComp;
zero.v = 0;
zero.h = 0 * 'J/mol';

```

```

T02.pump1.dP = 2 * 'kPa';
T02.trays(1).Emv = 0.9;
T02.trays(17).Emv = 0.9;
T02.alfaTopo = 2;
T02.trays(1).beta = 1;
T02.trays(17).beta = 1;
T02.trays(1).alfa = 1.7;
T02.trays(17).alfa = 1.7;

```

SET

```

T02.NTrays = 32;
T02.cond.Across = (confidential) * 'm^2';
T02.cond.V = (confidential) * 'm^3';
T02.trays(1:16).V = (confidential) * 'm^3';
T02.trays(17:T02.NTrays).V = (confidential) * 'm^3';
T02.trays(1:16).Ah = (confidential) * 'm^2';
T02.trays(17:T02.NTrays).Ah = (confidential) * 'm^2';
T02.trays(1:16).lw = (confidential) * 'm';
T02.trays(17:T02.NTrays).lw = (confidential) * 'm';
T02.trays(1:16).hw = (confidential) * 'm';
T02.trays(17:T02.NTrays).hw = (confidential) * 'm';
T02.trays(1:16).Ap = (confidential) * 'm^2';

```

```
T02.trays(17:T02.NTrays).Ap = (confidential) * 'm^2';
T02.trays.Q = 0 * 'kW';
T02.reb.V = (confidential) * 'm^3';
T02.reb.Across = (confidential) * 'm^2';
```

Controllers type:

```
LC1.PID_Select = "Ideal_AW";
LC_top.PID_Select = "Ideal_AW";
PC_top.PID_Select = "Ideal_AW";
TC_bottom.PID_Select = "Ideal_AW";
```

Top:

```
Lmin = 0 * 'm';
Lmax = 4.65 * 'm';
QcMax = -1600 * 'kW';
QcMin = 0 * 'kW';
TcMax = (20+273.15) * 'K';
TcMin = (-20+273.15) * 'K';
Pmin = 20 * 'atm';
Pmax = 30 * 'atm';
Fcmin = 0 * 'kmol/h';
Fcmax = 1000 * 'kmol/h';
Fcmin2 = 0.5 * 'kmol/h';
Fcmax2 = 1200 * 'kmol/h';
```

Column:

```
PMax = 35 * 'atm';
PMin = 10 * 'atm';
FVMax = 4000 * 'kmol/h';
FVMin = 0 * 'kmol/h';
FLMax = 4000 * 'kmol/h';
FLMin = 0 * 'kmol/h';
```

Bottom:

```
QrMax = 2500 * 'kW';
QrMin = 0 * 'kW';
TMax = (200+273.15) * 'K';
TMin = (0+273.15) * 'K';
LMax = 1.524 * 'm';
LMin = 0 * 'm';
Frmin = 0 * 'kmol/h';
Frmax = 1000 * 'kmol/h';
```

INITIAL

Condenser

```
T02.cond.OutletL.T = 273 * 'K';
T02.cond.ML = 10 * 'kmol';
T02.cond.OutletL.z([1:(NComp-1)]) = 1/NComp;
```

Reboiler

```
T02.reb.OutletL.T = (120+273.15) * 'K';
```

```

T02.reb.ML          = 5      * 'kmol';
T02.reb.OutletL.z([1:(NComp-1)]) = 1/NComp;

# Column trays
T02.trays.OutletL.T = [255:(330-255)/(T02.NTrays-1):330] * 'K';
T02.trays.Level     = 1.05*T02.trays.hw;
T02.trays(1:16).OutletL.z([1:(NComp-1)]) = 1/NComp;
T02.trays(17:T02.NTrays).OutletL.z([1:(NComp-1)]) = 1/NComp;

OPTIONS
#Dynamic = false;
TimeStep   = 300;
TimeEnd    = 86400;
TimeUnit   = 's';
InitialFile = "T02_EE1_sem_rec_DIN.rlt";
#GuessFile  = "T02_sem_rec_DIN.rlt";

    DAEsolver(
    File = "pside",
    RelativeAccuracy = 1e-4,
    AbsoluteAccuracy = 1e-5);

    NLSolver(
    File = "sundials",
    RelativeAccuracy = 1e-4,
    AbsoluteAccuracy = 1e-5);

end

```

Apêndice – A2: Modelagem de *Streams.mso* modificado em ambiente EMSO

A adição de algumas equações no modelo de *Streams.mso* da biblioteca EML (*EMSO Model Library*) com a função de converter vazões volumétricas em condições padrão (20C e 1 atm) para vazões de processo é apresentada a seguir.

Código A.3: Modelos de *Streams/Source.mso* modificado

```

using "types";

Model source

PARAMETERS

outer PP      as Plugin (Brief = "External Physical Properties", Type="PP");
outer NComp   as Integer (Brief = "Number of chemical components", Lower = 1);
M(NComp)     as molweight (Brief = "Component Mol Weight");
CompositionBasis as Switcher (Brief = "Molar or Mass
Composition", Valid = ["Molar", "Mass"], Default="Molar");

```

```

ValidPhases as Switcher (Brief = "Valid Phases for Flash
Calculation", Valid = ["Vapour-Only", "Liquid-Only", "Vapour-Liquid"],
Default="Vapour-Liquid");
T_std as temperature (Brief = "Standard temperature", Hidden=true,
Default = 293.15);
P_std as pressure (Brief = "Standard pressure", Hidden=true, Default = 1);

```

SET

```
M = PP.MolecularWeight();
```

VARIABLES

```

out Outlet as stream (Brief = "Outlet stream");
Composition(NComp) as fraction (Brief = "Stream Composition");
F as flow_mol (Brief = "Stream Molar Flow Rate");
Fw as flow_mass (Brief = "Stream Mass Flow");
Fvol as flow_vol (Brief = "Volumetric Flow");
Fvol_std as flow_vol (Brief = "Standard Volumetric Flow (1 atm, 20 C)");
T as temperature (Brief = "Stream Temperature");
T_Cdeg as temperature (Brief = "Temperature in °C", Lower=-200);
P as pressure (Brief = "Stream Pressure");
x(NComp) as fraction (Brief = "Liquid Molar Fraction");
y(NComp) as fraction (Brief = "Vapour Molar Fraction");
Mw as molweight (Brief = "Average Mol Weight");
vm as volume_mol (Brief = "Molar Volume");
vm_std as volume_mol (Brief = "Standard Molar Volume");
rho as dens_mass (Brief = "Stream Mass Density");
rhom as dens_mol (Brief = "Stream Molar Density");
zmass(NComp) as fraction (Brief = "Mass Fraction");

```

EQUATIONS

switch CompositionBasis

```

case "Molar":
"Stream Molar Composition"
Outlet.z = Composition/sum(Composition);
"Stream Mass Composition"
zmass = M*Outlet.z / Mw;
case "Mass":
"Stream Mass Composition"
zmass = Composition/sum(Composition);
"Stream Molar Composition"
Outlet.z*sum(zmass/M) = zmass/M;

```

end

switch ValidPhases

```

case "Liquid-Only":
"Vapour Fraction"
Outlet.v = 0;
"Liquid Composition"
x = Outlet.z;

```

```

"Vapour Composition"
y = Outlet.z;
"Overall Enthalpy"
Outlet.h = PP.LiquidEnthalpy(Outlet.T, Outlet.P, x);
"Molar Volume"
vm = PP.LiquidVolume(Outlet.T, Outlet.P, x);
"Standard Molar Volume"
vm_std = PP.LiquidVolume(T_std, P_std, x);

case "Vapour-Only":
"Vapor Fraction"
Outlet.v = 1;
"Liquid Composition"
x = Outlet.z;
"Vapour Composition"
y = Outlet.z;
"Overall Enthalpy"
Outlet.h = PP.VapourEnthalpy(Outlet.T, Outlet.P, y);
"Molar Volume"
vm = PP.VapourVolume(Outlet.T, Outlet.P, y);
"Standard Molar Volume"
vm_std = PP.VapourVolume(T_std, P_std, y);

case "Vapour-Liquid":
"Flash Calculation"
[Outlet.v, x, y] = PP.Flash(Outlet.T, Outlet.P, Outlet.z);
"Overall Enthalpy"
Outlet.h = (1-Outlet.v)*PP.LiquidEnthalpy(Outlet.T, Outlet.P, x) +
Outlet.v*PP.VapourEnthalpy(Outlet.T, Outlet.P, y);
"Molar Volume"
vm = (1-Outlet.v)*PP.LiquidVolume(Outlet.T, Outlet.P, x) +
Outlet.v*PP.VapourVolume(Outlet.T, Outlet.P, y);
"Standard Molar Volume"
vm_std = (1-Outlet.v)*PP.LiquidVolume(T_std, P_std, x) +
Outlet.v*PP.VapourVolume(T_std, P_std, y);

end

"Molar Density"
rhom * vm = 1;
"Average Molecular Weight"
Mw = sum(M*Outlet.z);
"Mass or Molar Density"
rhom * Mw = rho;
"Flow Mass"
Fw = Mw*Outlet.F;
"Volumetric Flow"
Fvol = Outlet.F*vm ;
"Standard Volumetric Flow"
Fvol_std = Outlet.F*vm_std ;
"Temperature in °C"
T_Cdeg = Outlet.T - 273.15 * 'K';
"Equate Flow"

```



```
Outlet.F = F;  
"Equate Pressures"  
Outlet.P = P;  
"Equate Temperatures"  
Outlet.T = T;  
end
```

Apêndice – A3: Modelagem de Reconciliação de Dados em ambiente EMSO

A modelagem de Reconciliação de dados estacionária a partir da função dos mínimos quadrados ponderados é apresentada no código A.4.

Código A.4: Modelagem de Reconciliação de Dados estacionária

```
using "types";
```

```
FlowSheet T02_REC_MOLAR
```

VARIABLES

Variáveis a serem calculadas pelas equações de Balanço de massa:

```
F_in as flow_mol;  
F_dest as flow_mol;  
F_bot as flow_mol;  
z(12) as fraction;  
y(12) as fraction;  
x(12) as fraction;
```

```
z1 as fraction;  
z2 as fraction;  
z3 as fraction;  
z4 as fraction;  
z5 as fraction;  
z6 as fraction;  
z7 as fraction;  
z8 as fraction;  
z9 as fraction;  
z10 as fraction;  
z11 as fraction;  
z12 as fraction;
```

```
y1 as fraction;  
y2 as fraction;  
y3 as fraction;  
y4 as fraction;  
y5 as fraction;  
y6 as fraction;  
y7 as fraction;  
y8 as fraction;  
y9 as fraction;
```

```
y10 as fraction;  
y11 as fraction;  
y12 as fraction;
```

```
x1 as fraction;  
x2 as fraction;  
x3 as fraction;  
x4 as fraction;  
x5 as fraction;  
x6 as fraction;  
x7 as fraction;  
x8 as fraction;  
x9 as fraction;  
x10 as fraction;  
x11 as fraction;  
x12 as fraction;
```

PARAMETERS

Variáveis (fixas) medidas para reconciliação:

```
F_in_med as flow_mol;  
F_dest_med as flow_mol;  
F_bot_med as flow_mol;
```

```
z1_med as fraction;  
z2_med as fraction;  
z3_med as fraction;  
z4_med as fraction;  
z5_med as fraction;  
z6_med as fraction;  
z7_med as fraction;  
z8_med as fraction;  
z9_med as fraction;  
z10_med as fraction;  
z11_med as fraction;  
z12_med as fraction;
```

```
y1_med as fraction;  
y2_med as fraction;  
y3_med as fraction;  
y4_med as fraction;  
y5_med as fraction;  
y6_med as fraction;  
y7_med as fraction;  
y8_med as fraction;  
y9_med as fraction;  
y10_med as fraction;  
y11_med as fraction;  
y12_med as fraction;
```

```
x1_med as fraction;  
x2_med as fraction;
```

```
x3_med as fraction;  
x4_med as fraction;  
x5_med as fraction;  
x6_med as fraction;  
x7_med as fraction;  
x8_med as fraction;  
x9_med as fraction;  
x10_med as fraction;  
x11_med as fraction;  
x12_med as fraction;
```

Variáveis (fixas) para declarar os desvios padrões:

```
DP_F_in as flow_mol;  
DP_F_dest as flow_mol;  
DP_F_bot as flow_mol;
```

```
DP_z1 as Real;  
DP_z2 as Real;  
DP_z3 as Real;  
DP_z4 as Real;  
DP_z5 as Real;  
DP_z6 as Real;  
DP_z7 as Real;  
DP_z8 as Real;  
DP_z9 as Real;  
DP_z10 as Real;  
DP_z11 as Real;  
DP_z12 as Real;
```

```
DP_y1 as Real;  
DP_y2 as Real;  
DP_y3 as Real;  
DP_y4 as Real;  
DP_y5 as Real;  
DP_y6 as Real;  
DP_y7 as Real;  
DP_y8 as Real;  
DP_y9 as Real;  
DP_y10 as Real;  
DP_y11 as Real;  
DP_y12 as Real;
```

```
DP_x1 as Real;  
DP_x2 as Real;  
DP_x3 as Real;  
DP_x4 as Real;  
DP_x5 as Real;  
DP_x6 as Real;  
DP_x7 as Real;  
DP_x8 as Real;  
DP_x9 as Real;
```

DP_x10 as Real;
DP_x11 as Real;
DP_x12 as Real;

EQUATIONS

"Global Molar Balance"

$F_{in} = F_{dest} + F_{bot};$

"Component Molar Balance"

$F_{in} * z = F_{bot} * x + F_{dest} * y;$

$sum(z) = 1;$

$sum(y) = 1;$

$z1 = z(1);$

$z2 = z(2);$

$z3 = z(3);$

$z4 = z(4);$

$z5 = z(5);$

$z6 = z(6);$

$z7 = z(7);$

$z8 = z(8);$

$z9 = z(9);$

$z10 = z(10);$

$z11 = z(11);$

$z12 = z(12);$

$y1 = y(1);$

$y2 = y(2);$

$y3 = y(3);$

$y4 = y(4);$

$y5 = y(5);$

$y6 = y(6);$

$y7 = y(7);$

$y8 = y(8);$

$y9 = y(9);$

$y10 = y(10);$

$y11 = y(11);$

$y12 = y(12);$

$x1 = x(1);$

$x2 = x(2);$

$x3 = x(3);$

$x4 = x(4);$

$x5 = x(5);$

$x6 = x(6);$

$x7 = x(7);$

$x8 = x(8);$

$x9 = x(9);$

$x10 = x(10);$

$x11 = x(11);$

x12 = x(12);

SPECIFY

#Feed:

F_in = 377.644 * 'kmol/h';

z1 = 2.203833784/100;

z2 = 4.999609367/100;

#z3, será obtido por normalização!

z4 = 24.03480213/100;

z5 = 4.46853664/100;

z6 = 7.320648988/100;

z7 = 2.054202797/100;

z8 = 2.14087016/100;

z9 = 1.679564515/100;

z10 = 0.632320148/100;

z11 = 0.30973367/100;

z12 = 0.078494177/100;

Bottom:

x1 = 0;

x2 = 0.0112/100;

#x3, será obtido por normalização!

x4 = 51.5705/100;

x5 = 9.6879/100;

x6 = 15.8912/100;

x7 = 4.5213/100;

x8 = 4.4455/100;

x9 = 3.6600/100;

x10 = 1.2775/100;

x11 = 0.5931/100;

x12 = 0.1268/100;

#Top:

F_dest = 226.178 * 'kmol/h';

Valores dos dados medidos de planta SEM Reconciliação:

#F_in = 377.644 * 'kmol/h' = 104.9011 mol/s;

#F_dest = 226.178 * 'kmol/h' = 62.8272 mol/s;

#F_bot = 150.902 * 'kmol/h' = 41.9172 mol/s;

SET

#Dados medidos de processo:

F_in_med = 104.9011 * 'mol/s';

F_dest_med = 62.8272 * 'mol/s';

F_bot_med = 41.9172 * 'mol/s';

z1_med = 2.203833784/100;

z2_med = 4.999609367/100;

z3_med = 50.06643106/100;

z4_med = 24.03480213/100;

z5_med = 4.468536646/100;

z6_med = 7.320648988/100;
z7_med = 2.054202797/100;
z8_med = 2.14087016/100;
z9_med = 1.679564515/100;
z10_med = 0.632320148/100;
z11_med = 0.30973367/100;
z12_med = 0.078494177/100;

y1_med = 4.1992/100;
y2_med = 9.3922/100;
y3_med = 86.3666/100;
y4_med = 0.03136/100;
y5_med = 0;
y6_med = 0;
y7_med = 0;
y8_med = 0;
y9_med = 0;
y10_med = 0;
y11_med = 0;
y12_med = 0;

x1_med = 0;
x2_med = 0.0112/100;
x3_med = 8.2074/100;
x4_med = 51.5705/100;
x5_med = 9.6879/100;
x6_med = 15.8912/100;
x7_med = 4.5213/100;
x8_med = 4.4455/100;
x9_med = 3.6600/100;
x10_med = 1.2775/100;
x11_med = 0.5931/100;
x12_med = 0.1268/100;

Valores dos Desvio Padrão:

DP_F_in = (0.02* 104.9011) *'mol/s' ;
DP_F_dest = (0.02*62.8272) *'mol/s' ;
DP_F_bot = (0.02*41.9172) *'mol/s' ;

DP_z1 = 0.002129736;
DP_z2 = 0.004409433;
DP_z3 = 0.011206178;
DP_z4 = 0.007936866;
DP_z5 = 0.001382316;
DP_z6 = 0.001757908;
DP_z7 = 0.000497039;
DP_z8 = 0.000508551;
DP_z9 = 0.000647436;
DP_z10 = 0.000574502;
DP_z11 = 0.000368833;
DP_z12 = 0.0000927865;

```
DP_y1 = 0.003762858;  
DP_y2 = 0.003762858;  
DP_y3 = 0.003762858;  
DP_y4 = 0.003762858;  
DP_y5 = 0.003762858;  
DP_y6 = 0.003762858;  
DP_y7 = 0.003762858;  
DP_y8 = 0.003762858;  
DP_y9 = 0.003762858;  
DP_y10 = 0.003762858;  
DP_y11 = 0.003762858;  
DP_y12 = 0.003762858;
```

```
DP_x1 = 0;  
DP_x2 = 0.001;  
DP_x3 = 0.001852657;  
DP_x4 = 0.003661727;  
DP_x5 = 0.001038721;  
DP_x6 = 0.001865124;  
DP_x7 = 0.001498227;  
DP_x8 = 0.001436246;  
DP_x9 = 0.001997372;  
DP_x10 = 0.001250425;  
DP_x11 = 0.000633378;  
DP_x12 = 0.000336747;
```

OPTIONS

```
Dynamic = false;
```

end

Optimization T02_opt_EE as T02_REC_MOLAR

MINIMIZE

#Minimizar a Função dos mínimos quadrados ponderados:

```
((F_in-F_in_med)^2)*(DP_F_in)^-2+  
((F_bot-F_bot_med)^2)*(DP_F_bot)^-2+  
((F_dest-F_dest_med)^2)*(DP_F_dest)^-2+  
((z1-z1_med)^2)*(DP_z1)^-2+  
((z2-z2_med)^2)*(DP_z2)^-2+  
((z3-z3_med)^2)*(DP_z3)^-2+  
((z4-z4_med)^2)*(DP_z4)^-2+  
((z5-z5_med)^2)*(DP_z5)^-2+  
((z6-z6_med)^2)*(DP_z6)^-2+  
((z7-z7_med)^2)*(DP_z7)^-2+  
((z8-z8_med)^2)*(DP_z8)^-2+  
((z9-z9_med)^2)*(DP_z9)^-2+  
((z10-z10_med)^2)*(DP_z10)^-2+  
((z11-z11_med)^2)*(DP_z11)^-2+  
((z12-z12_med)^2)*(DP_z12)^-2+  
((y1-y1_med)^2)*(DP_y1)^-2+  
((y2-y2_med)^2)*(DP_y2)^-2+  
((y3-y3_med)^2)*(DP_y3)^-2+
```

```

((y4-y4_med)^2)*(DP_y4)^-2+
((y5-y5_med)^2)*(DP_y5)^-2+
((y6-y6_med)^2)*(DP_y6)^-2+
((y7-y7_med)^2)*(DP_y7)^-2+
((y8-y8_med)^2)*(DP_y8)^-2+
((y9-y9_med)^2)*(DP_y9)^-2+
((y10-y10_med)^2)*(DP_y10)^-2+
((y11-y11_med)^2)*(DP_y11)^-2+
((y12-y12_med)^2)*(DP_y12)^-2+
((x1-x1_med)^2)*(DP_x1)^-2+
((x2-x2_med)^2)*(DP_x2)^-2+
((x3-x3_med)^2)*(DP_x3)^-2+
((x4-x4_med)^2)*(DP_x4)^-2+
((x5-x5_med)^2)*(DP_x5)^-2+
((x6-x6_med)^2)*(DP_x6)^-2+
((x7-x7_med)^2)*(DP_x7)^-2+
((x8-x8_med)^2)*(DP_x8)^-2+
((x9-x9_med)^2)*(DP_x9)^-2+
((x10-x10_med)^2)*(DP_x10)^-2+
((x11-x11_med)^2)*(DP_x11)^-2+
((x12-x12_med)^2)*(DP_x12)^-2;

```

FREE

```

# Coloca as variáveis declaradas no modelo para serem reconciliadas também:
F_in;F_dest;z1;z2;z4;z5;z6;z7;z8;z9;z10;z11;z12;x1;x2;x4;x5;x6;x7;x8;x9;x10;x11;x12;
#*Variáveis a serem reconciliadas:
Vazões: carga, destilado e fundo.
Composição: carga,topo e fundo.*#

```

OPTIONS

```

NLPsolver(
    RelativeAccuracy = 1e-4,
    AbsoluteAccuracy = 1e-5,
    MaxIterations=3000,
    #File = "complex"
    File = "ipopt_emso");
Dynamic = false;

```

end

Apêndice – A4: Equações de controle PID utilizadas pelo simulador EMSO e resultados de sintonia da coluna desetanizadora.

A equação do controlador PID ideal com ação anti-windup é apresentada a seguir conforme a Equação A1.

(A1)

Onde $u(t)$ é a ação de controle PID, K_p a constante de proporcionalidade (também chamada de ganho do controlador), K_i a constante de tempo integral e K_d a constante de

tempo derivativa. O erro $e(t)$ é dado como a diferença entre o valor de referência (*setpoint*) e a variável que se deseja controlar de acordo com a Equação A2.

$$(A2)$$

Onde $e(t)$ é o sinal de erro, w o valor de referência e y o valor da variável que se deseja controlar.

Para a aplicação do PID a processos industriais são necessárias algumas considerações, que garantem a funcionalidade e a operacionalidade do sistema de controle, são elas:

- Normalização de variáveis (Equação A3):

$$(A3)$$

Onde x é a variável, x_{min} é o valor mínimo que x pode atingir, x_{max} é o valor máximo que x pode atingir, e x_n o da variável x normalizada. Controladores que trabalham com variáveis normalizadas geram ações normalizadas, que para serem aplicadas ao processo devem ser desnormalizadas.

- Ação anti-windup: Quando a variável que se deseja manipular alcança uma limitação do atuador ocorre a saturação do sistema de controle. O processo é, então, submetido a uma ação que é diferente da saída do controlador. Nesse caso, se o controlador possuir o modo integral, ele continuará integrando o erro e, conseqüentemente, o acumulando. A ação de controle permanecerá na condição de saturação por um tempo maior que o necessário, até que este sinal seja anulado por um sinal de erro oposto. Para que este fenômeno seja evitado existem estratégias anti-windup, que consistem em compensar este aumento do termo integral durante a saturação.

Os resultados de sintonia da coluna de destilação são apresentados na Tabela A1 abaixo.

Parâmetros	LIC-Topo	LIC-Fundo	PIC-Topo	TIC-Topo	TIC-Fundo
K_p	3	1	1.6	4	0.2
K_i	200 (s)	90 (s)	10 (min)	15 (min)	1 (min)
K_d	0	0	0	3 (min)	0.2 (min)