



INFERÊNCIA DINÂMICA EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO PARA UMA UNIDADE DE PROCESSAMENTO DE GÁS NATURAL COM MODELO FENOMENOLÓGICO

L. R. CANABARRO e A. R. SECCHI

Programa de Engenharia Química/COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro,
e-mail: lilian@peq.coppe.ufrj.br, arge@peq.coppe.ufrj.br

RESUMO – A inferência de propriedades que não podem ser medidas com a frequência adequada é uma etapa de grande importância na implementação de sistemas de controle avançado e monitoramento de processos químicos e petroquímicos. Motivados pela grande gama de aplicações possíveis de sensores virtuais, modelos fenomenológicos, rigorosos e dinâmicos e suas malhas de controle foram desenvolvidos para uma coluna desetanizadora e para uma coluna desbutanizadora de uma unidade de processamento de gás natural e implementados no simulador de processos EMSO. Foram obtidos resultados satisfatórios para a inferência de determinadas propriedades utilizando-se o simulador dinâmico, tanto para o estado estacionário quanto para o regime transiente.

PALAVRAS-CHAVE: Sensores virtuais, inferências de propriedades, simulação dinâmica.

1. INTRODUÇÃO

Sistemas de controle e monitoramento de processos necessitam de dados confiáveis e frequentes acerca das variáveis envolvidas no sistema em questão. Sendo assim, se torna justificável o desenvolvimento de sensores virtuais atuando em tempo real, capazes de gerar e transmitir informações com a frequência requerida para o controle de um processo. Este tipo de sensor se baseia em modelos matemáticos e utiliza informações disponíveis do processo para inferência (predição) de propriedades dificilmente medidas ou obtidas em intervalos de tempo insatisfatórios para as aplicações desejadas.

Uma vez que processos verdadeiros exibem comportamento dinâmico, é necessária a representação do processo através de modelos dinâmicos, compostos por sistemas de equações algébrico-diferenciais.

A utilização de modelos em estado estacionário é universalmente aceita em todas as fases de projeto e operação de unidades de processamento de gás natural. Já a simulação dinâmica tem sido utilizada apenas recentemente, e muitos trabalhos baseiam-se em modelagem simplificada/não-rigorosa. Na prática, muitos trabalhos de engenharia lançam mão de modelos baseados em funções de transferência, incapazes de representar não-linearidades em sistemas e descontinuidades no caso de paradas e partidas das unidades. Somente a partir da década de 1990 a simulação dinâmica se tornou uma ferramenta mais utilizada por engenheiros de processos e de controle (MOKHATAB *et al.*, 2007).

Quase todas as ferramentas computacionais utilizadas para modelagem e simulação de processos são baseadas na arquitetura sequencial modular. Embora esta categoria de ferramenta esteja bem difundida na indústria, está se verificando uma tendência



de migração para softwares com arquitetura de modelos baseados em equações. Isto se deve ao fato de um mesmo modelo poder ser utilizado para uma gama maior de aplicações (simulação estacionária ou dinâmica, otimização, estimação de parâmetros, síntese de processos, etc.) e à maior facilidade de incorporação de informações específicas a um modelo já existente (STAUDT *et al.*, 2007).

O objetivo deste trabalho é realizar a inferência dinâmica de propriedades (composição) de correntes de uma coluna desetanizadora e de uma coluna desbutanizadora de uma unidade de processamento de gás natural. Para isso, será utilizado um modelo fenomenológico de uma coluna de destilação implementado em ambiente EMSO (SOARES & SECCHI, 2003), adaptado para reproduzir as características das colunas reais, incluindo sua dinâmica. O modelo matemático foi validado tanto para situações em que a unidade de processo se encontrava em estado estacionário, quanto em regime transiente.

2. MODELO DINÂMICO FENOMENOLÓGICO

A modelagem rigorosa do problema foi implementada no simulador EMSO usando o modelo termodinâmico SRK do pacote VRTherm (SOARES & SECCHI, 2003) para ambas as fases, sendo este o modelo de equação cúbica de estado que melhor se adaptou aos dados de planta.

O modelo utilizado neste trabalho para cada prato da coluna de destilação é baseado em equilíbrio termodinâmico, ponderado pela eficiência de Murphree (E_{MV}). O modelo básico foi construído com as equações correspondentes aos balanços de massa e energia e às relações de equilíbrio, levando em conta os termos de acúmulo nas fases líquida e vapor. O modelo complementar contém as equações da hidrodinâmica que calculam as

vazões de líquido e de vapor que deixam cada prato da coluna (STAUDT *et al.*, 2007).

O cálculo da vazão de vapor que deixa os pratos (F^V) é dado pela Equação 1, na qual A_h é a área total dos furos do prato, α é o coeficiente de queda de pressão no prato seco, v^V é o volume molar da fase vapor, ρ^V , a massa específica da fase vapor, P_{in}^V e P_{out}^V , as pressões das correntes de entrada e saída do prato, respectivamente.

$$F^V = \frac{A_h}{v^V} \sqrt{\frac{(P_{in}^V - P_{out}^V)}{\rho^V \cdot \alpha}} \quad (1)$$

A vazão de líquido que deixa cada prato (F^L) é dada pela Equação 2 de Francis, na qual v^L é o volume molar da fase líquida, l_w é o comprimento do vertedouro, h é o nível de líquido no prato, h_w é a altura do vertedouro e β é o coeficiente de aeração.

$$F^L = \frac{l_w}{v^L} \left(\frac{h - \beta \cdot h_w}{\beta} \right)^2 \quad (2)$$

A eficiência do prato, considerada igual para todos os componentes, o coeficiente de queda de pressão do prato seco e o coeficiente de aeração foram considerados constantes para cada seção da coluna (seções de retificação e esgotamento). Partindo dessa premissa, há dois valores de E_{MV} , α e β no problema.

O modelo final utilizado no simulador dinâmico possui um número grande de variáveis e equações, o que significa um desafio para o problema de inferência de propriedades em tempo real. A Tabela 1 explicita alguns detalhes sobre a dimensão do problema de inferência em questão, tanto para a torre desetanizadora (T02), quanto para a desbutanizadora (T03).

Uma descrição mais detalhada acerca da unidade estudada se encontra na Seção 3, a seguir.



Tabela 1. Dimensão do problema de inferência em questão

Classe	T02	T03
Equações	2591	2525
Variáveis	2634	2481
Especificações	43	44
Estados	462	440

3. DESCRIÇÃO DO PROCESSO

3.1. A torre desetanizadora

A primeira parte do problema estudado compreende a coluna desetanizadora, que possui 32 pratos valvulados e processa uma mistura contendo 12 componentes (CO₂ e série homóloga de metano a n-nonano), proveniente de uma torre desmetanizadora a montante. O condensador do tipo *chiller* da torre é parcial e não há retirada de líquido como produto, apenas vapor (corrente de gás combustível (GC) contendo etano principalmente). O produto de fundo da torre, chamado neste trabalho de C3+, é uma corrente líquida proveniente do refeedor e é carga da uma torre desbutanizadora a jusante.

Nesse sistema há cinco malhas de controle, a saber: controle de nível, temperatura e pressão no vaso de acúmulo no topo da torre, manipulando a vazão de refluxo, o nível de propano no chiller e a saída de vapor (GC), respectivamente; controle de nível e temperatura no fundo da coluna de destilação, manipulando respectivamente a vazão de C3+ e de óleo térmico para o refeedor.

Uma ilustração da torre desetanizadora estudada, incluindo suas malhas de controle, encontra-se na Figura 3.1.

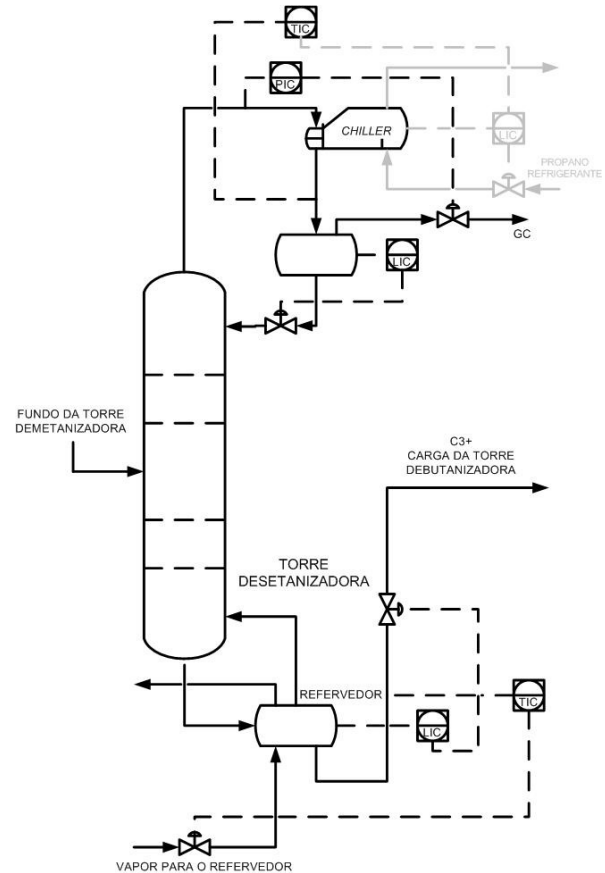


Figura 3.1. Ilustração da torre desetanizadora.

As principais variáveis a serem inferidas nessa parte do problema são: a quantidade de propano na corrente de gás combustível, que expressa as perdas desse componente e que não serão aproveitadas na corrente de GLP; a quantidade de etano na corrente de C3+, que impacta diretamente a quantidade de C2 no GLP, quantidade esta que se deseja ser a maior possível até um certo limite de especificação – definido como sendo de no máximo 12% para evitar descolamento de chama na utilização do GLP como combustível – com o objetivo de aumentar a produção do GLP sem prejudicar sua qualidade.

3.2. A torre desbutanizadora

A segunda parte do problema estudado compreende na coluna desbutanizadora, também pertencente à UPGN. Esta coluna possui 30 pratos valvulados e processa uma mistura contendo 12 componentes (CO₂ e série



homóloga de metano a n-nonano), sendo sua carga proveniente do produto de fundo da torre desetanizadora.

O condensador do tipo *air cooler* da torre é parcial e, nesse caso, não há retirada de vapor como produto, apenas líquido (corrente de GLP, contendo principalmente propano e butanos). O GLP obtido passa por um sistema de resfriamento dotado de um *chiller* de propano e segue para as esferas de armazenamento.

O produto de fundo da torre, a gasolina natural, é uma corrente líquida proveniente do refeedor e contém majoritariamente componentes com cinco ou mais átomos de carbono. Seu destino é o *pool* de gasolina, onde será misturada a outras correntes provenientes das demais unidades de processamento.

As malhas de controle envolvidas nessa parte do processo são: controle de nível, pressão máxima e temperatura no fundo, manipulando respectivamente vazão de C5+, vazão de GLP e vazão de óleo térmico para o refeedor; controle de nível e pressão mínima no topo, manipulando respectivamente a vazão de refluxo e de descarte de vapor para o *flare* (o que ocorre apenas ocasionalmente).

Uma ilustração da torre desbutanizadora estudada, incluindo suas malhas de controle, encontra-se na Figura 3.2.

As principais variáveis a serem inferidas nessa parte do problema são: a quantidade de etano na corrente de GLP, que se deseja ser próxima a 12%, conforme discutido anteriormente. Além do etano, também se deseja inferir a porcentagem de C5+ no GLP, no sentido de conhecer a quantidade de condensáveis não reaproveitados na utilização deste produto. Também se faz interessante a inferência da composição da corrente de C5+ proveniente do refeedor da torre desbutanizadora. Esta corrente não é

monitorada pelos cromatógrafos instalados na UPGN estudada e fará parte da composição da gasolina a ser ainda processada ou vendida diretamente para o mercado consumidor.

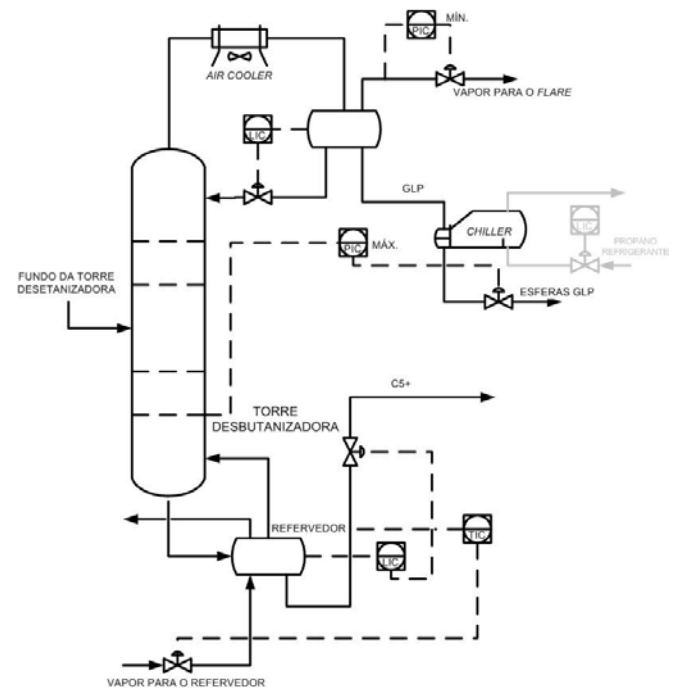


Figura 3.2. Ilustração da torre desbutanizadora.

4. RESULTADOS

A validação do modelo da torre desetanizadora, assim como para a torre desbutanizadora, implementados no simulador EMSO, foi realizada para operação em estado estacionário e em regime transiente.

A Tabela 2 apresenta os resultados obtidos na validação do modelo em estado estacionário da torre desetanizadora, mantendo os valores de E_{MV} , α e β constantes e iguais a 0,8, 20 e 1, respectivamente, tomando como base um instante de tempo em que os dados de processo apresentavam comportamento estacionário. Nesta tabela, os valores de composição são expressos em porcentagem molar. A validação do modelo em estado estacionário da torre desbutanizadora também apresentou resultados satisfatórios, como pode ser observado na Tabela 3.



Tabela 2. Resultados da validação do modelo em estado estacionário da torre desetanizadora

Variável	Valor referência	Inferência	Desvio	Desvio relativo (%)
F CG, $10^3 \text{ m}^3/\text{h}$ @std	128,74	143,71	-14,97	-11,62
T topo, K	275,97	277,31	-1,34	-0,5
GC CO ₂	3,43	3,59	-0,16	4,79
GC C1	9,48	9,83	-0,35	-3,64
GC C2	86,73	85,98	0,75	0,86
F fundo, m^3/h @std	26,11	27,59	-1,48	5,67
C3+ C2	8,79	11,46	-2,67	-30,35
C3+ C3	50,84	49,78	1,06	2,09
C3+ iC4	9,64	9,36	0,28	2,92
C3+ nC4	15,74	15,03	0,71	4,54
C3+ iC5	4,80	4,32	0,48	10,07
C3+ nC5	4,66	4,34	0,32	6,79

Tabela 3. Resultados da validação do modelo em estado estacionário da torre desbutanizadora

Variável	Valor referência	Inferência	Desvio	Desvio relativo (%)
F GLP, m^3/h @std	15,60	20,07	-4,47	28,69
T prato topo, K	341,04	342,80	-1,76	0,52
GLP C2	0,11	0,12	-0,01	-6,13
GLP C3	0,58	0,57	0,02	2,62
GLP iC4	0,11	0,11	0,004	3,69
GLP nC4	0,18	0,18	0,005	2,75
GLP iC5	0,01	0,03	-0,02	-143,23
GLP nC5	0,001	0,003	-0,002	-162,32
F fundo (C5+), m^3/h @std	4,04	3,95	0,09	2,20
ΔP , atm	0,59	0,53	0,05	9,28

As Figuras 4.1 a 4.3 mostram os resultados da predição de CO₂, metano e etano na corrente de gás combustível (produto de topo da torre desetanizadora) durante a etapa de validação do modelo dinâmico, para um período de 15h de operação.

As Figuras 4.4 a 4.7 mostram os resultados da predição de etano, propano e butanos na corrente de GLP (produto de topo da torre desbutanizadora).

Nas figuras a seguir os pontos correspondem aos dados reais, informados por análises cromatográficas em linha, e as linhas, a variável inferida pelo simulador. As barras verticais representam o desvio padrão da variável medida.

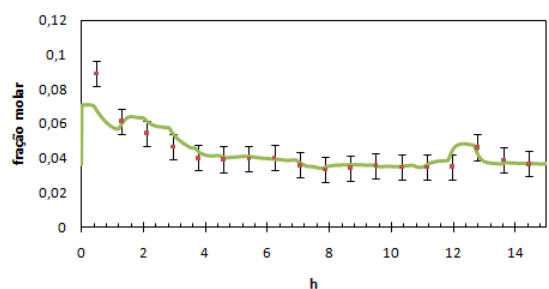


Figura 4.1. Inferência de CO₂ no produto de topo da desetanizadora.

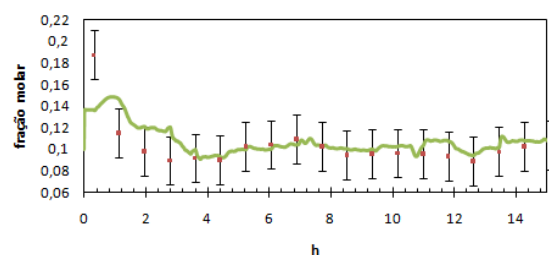


Figura 4.2. Inferência de metano no produto de topo da desetanizadora.

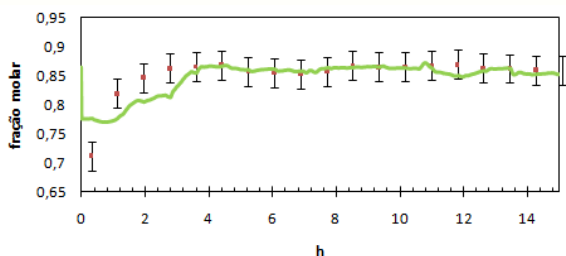


Figura 4.3. Inferência de etano no produto de topo da desetanizadora.

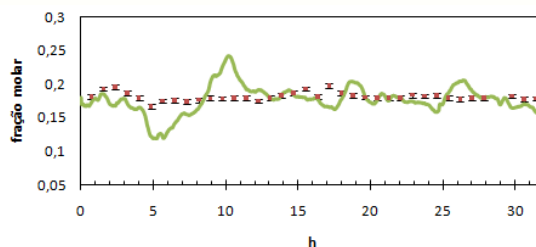


Figura 4.7. Inferência de n-butano no GLP.

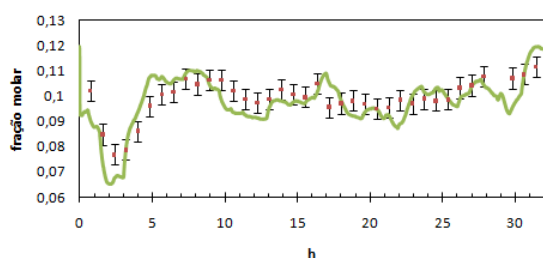


Figura 4.4. Inferência de etano no GLP (produto de topo da desbutanizadora).

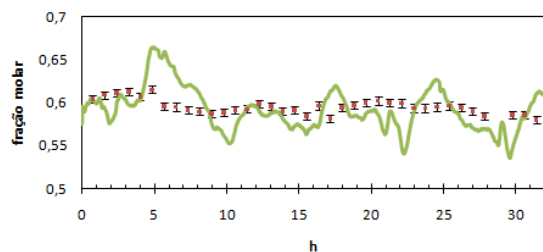


Figura 4.5. Inferência de propano no GLP.

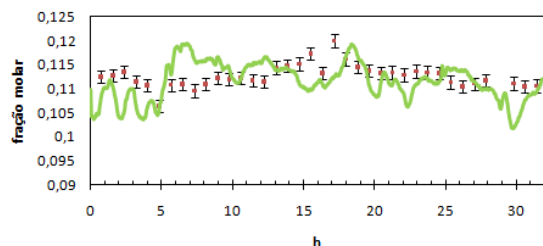


Figura 4.6. Inferência de iso-butano no GLP.

A simulação dinâmica partiu de um ponto em que a unidade encontrava-se em estado próximo ao estacionário, sendo esta condição diferente dos pontos utilizados como entradas do modelo. Para as mesmas foram utilizados dados reais de vazão, composição e temperatura da carga, assim como os *setpoints* das malhas de controle, conforme foi citado anteriormente, com um tempo de amostragem de 1 minuto. Desta forma, alguma diferença era esperada nos instantes iniciais da simulação dinâmica, como pode ser observado nas Figuras 4.1 e 4.2.

Observando os resultados obtidos, pode-se dizer que os mesmos foram satisfatórios, uma vez que dizem respeito apenas à etapa de predição, ou seja, não houve nenhum tipo de correção dos estados nem tampouco estimação de parâmetros na geração dos mesmos. O modelo dinâmico foi capaz de reproduzir qualitativamente e quantitativamente o comportamento das variáveis inferidas para uma janela de trinta e duas horas de dados de processo (para o caso da desbutanizadora) e de quinze horas (para o caso da desetanizadora).

Porém, o modelo dinâmico não foi capaz de realizar inferências satisfatórias de algumas variáveis importantes do ponto de vista de processo (alguns exemplos são: a perda de propano no gás combustível, a fração molar de etano no produto de fundo da torre desetanizadora e na carga da desbutanizadora, a quantidade de pentanos no GLP e a temperatura do prato de topo de ambas as torres). Algumas destas variáveis podem ser visualizadas nas Figuras 4.8 a 4.10.

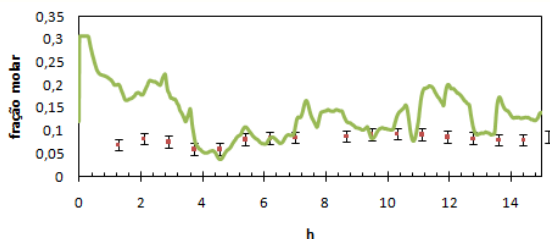


Figura 4.8. Inferência de etano no produto de fundo da desetanizadora (carga da desbutanizadora).

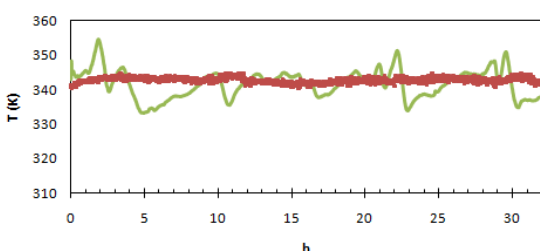


Figura 4.9. Inferência da temperatura de topo da desbutanizadora.

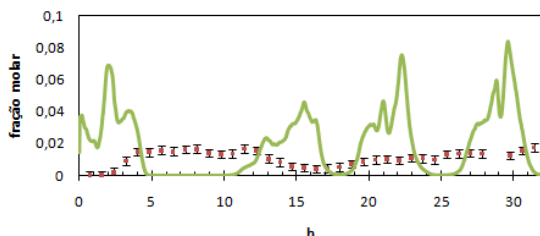


Figura 4.10. Inferência de iso-pentano no GLP.

Com o intuito de aumentar a qualidade destas inferências uma solução promissora é a utilização de estimadores de estados trabalhando em conjunto com o simulador dinâmico de processos. Esta técnica tem sido aplicada com sucesso por diversos autores (maiores detalhes podem ser encontrados em GESTHUISEN *et al.*, 2001; HASELTINE e RAWLINGS, 2005; SALAU *et al.*, 2009, entre outros), sendo capaz de estimar recursivamente estados e parâmetros do modelo a partir de dados disponíveis de processo. De fato, os resultados apresentados neste trabalho correspondem à etapa crítica de

desenvolvimento dos modelos de inferência necessários para a construção destes estimadores de estado. Como a qualidade das inferências, sem a correção do estimador, foi considerada satisfatória para a maioria das variáveis, a aplicação da etapa de correção tem um grande potencial de levar as demais variáveis para os níveis desejáveis das inferências.

5. CONCLUSÕES

Foram desenvolvidos modelos fenomenológicos, rigorosos e dinâmicos para a inferência de propriedades de correntes de uma unidade real de processamento de gás natural. Foram implementados no simulador EMSO modelos de uma torre desetanizadora e desbutanizadora.

Os resultados das simulações mostraram que é possível inferir satisfatoriamente os teores de CO₂, metano e etano no produto de topo da torre desetanizadora, assim como os teores de etano e propano presentes no GLP, produzido na desbutanizadora.

Sendo o desenvolvimento do modelo dinâmico uma etapa crítica para a obtenção de estimadores de estados, é promissora a sua utilização no monitoramento em tempo real de variáveis de uma UPGN. A utilização do estimador de estados via inferência adaptativa permitirá ainda a obtenção de resultados de melhor qualidade na predição de variáveis importantes do ponto de vista de processo, como o teor de pentanos no GLP.

6. REFERÊNCIAS

- Gesthuisen, R., Klatt, K., Engell, S. (2001). Optimization-based state estimation - a comparative study for the batch polycondensation of polyethyleneterephthalate". *European Control Conference, ECC*.



- Haseltine, E. L.; Rawlings, J. B. (2005). Critical evaluation of extended Kalman filtering and moving-horizon estimation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. v.44, n.8, p.2451-2460.
- Mokhatab, S., Poe, W. A., Speight, J. G. (2006). “Dynamic simulation of gas processing plants”. In: *Handbook of Natural Gas Transmission and Processing*, Gulf Professional Publishing, Burlington, p. 461-483.
- Salau, N.P.; Secchi, A.R.; Trierweiler, J.O. (2009) Numerical Pitfalls by State Covariance Computation. *Computer Aided Chemical Engineering*, Volume 27, 1215-1220.
- Soares, R.P., Secchi, A. R. (2003). 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.
- Staudt, P. B., Soares, R. P., Secchi, A. R. (2007) Dynamic Simulation of Reactive Distillation Processes to Predict Start-Up Behavior. In: *Preprints of 8th International IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems*, v.2, Cancún, Mexico