



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
ENG07053 - TRABALHO DE DIPLOMAÇÃO EM ENGENHARIA
QUÍMICA



Aplicação de Técnicas de Otimização na Planta de Cumeno

Autor: Jefferson Lopes da Silva

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Farenzena

Porto Alegre, julho de 16

Sumário

Sumário	ii
Agradecimentos	iv
Resumo	v
Lista de Figuras	vi
Lista de Tabelas	vii
Lista de Símbolos	viii
Lista de Abreviaturas e Siglas	x
1 Introdução	1
2 Revisão Bibliográfica	3
2.1 Otimização	3
2.2 Otimização em Tempo Real (RTO)	3
2.3 Controle Auto-Otimizável (SOC)	6
2.3.1 Graus de liberdade para controle e otimização	8
2.3.2 Implementação	8
2.3.3 Perda máxima e perda média	9
2.3.4 Seleção das variáveis controladas	9
2.3.5 Aplicações Industriais	11
3 Metodologia	13
3.1 Processo de Produção de Cumeno	13
3.2 Construção do modelo	15
3.3 Otimização do processo	16
3.4 Estudo das diferentes técnicas de otimização de processos	16
4 Resultados e Discussões	19
4.1 Análise dos graus de liberdade	19
4.2 Pontos ótimos de operação	19
4.3 Variáveis Controladas	19
4.4 Emparelhamento das Variáveis	20
4.5 Política de distúrbios utilizada	20
4.6 Comparação entre as técnicas de otimização de processos	23
5 Conclusões e Trabalhos Futuros	26
6 Referências	27

Agradecimentos

Agradeço a minha família pelo amor e apoio que sempre me deram. Sempre me proporcionaram as melhores oportunidades para a minha educação e qualificação. Sem eles não seria possível ir atrás de meus objetivos

A todos os professores do Dequi. Em especial ao professor Marcelo Farenzena, por sua orientação e por todos os conhecimentos transmitidos durante a execução deste trabalho.

A meus amigos e colegas de curso presentes desde o primeiro dia de aula no Campus do Vale.

Resumo

Neste trabalho, é realizado a validação das técnicas de otimização de processos e da metodologia *Plantwide Control* em simulação dinâmica. As técnicas de otimização de processos estudadas foram a otimização em tempo real (RTO) e o controle auto-otimizável (SOC). O controle auto-otimizável visa manter o processo próximo do ponto ótimo econômico através do controle de certas variáveis do processo, mantendo-as em *setpoints* constantes. Sua implantação é simples e apresenta um custo de instalação e manutenção inferior ao de um otimizador em tempo real.

Por manter variáveis constantes, o controle auto-otimizável apresenta perdas em relação ao ótimo local quando ocorrem distúrbios no processo. Para isso, existe um grande número de metodologias presentes na literatura com o objetivo de realizar uma seleção adequada das variáveis. No entanto, não é usual realizar a validação das técnicas de otimização, o que é o objetivo desse trabalho.

Utilizou-se uma simulação dinâmica do processo de produção de cumeno para validar as técnicas estudadas. Para construir a simulação dinâmica, utilizou-se o simulador comercial Aspen Plus. Primeiro foi construído o modelo estático da planta para depois convertê-lo para um modelo dinâmico.

A metodologia *Plantwide Control* obteve resultados superiores as outras duas técnicas, comprovando a validade dessa metodologia. Em uma região de distúrbio mais restrita, o controle auto-otimizável obteve resultados semelhantes ao otimizador em tempo real. No entanto, em uma região mais ampla, ele apresentou problemas de controle, o que pode comprometer sua aplicação.

Lista de Figuras

Figura 2.1: Arquitetura típica de controle em uma planta industrial (baseado em Darby <i>et al.</i> , 2011).	4
Figura 2.4: Comportamento da função objetivo em função da variável controlada (Skogestad, 2000).	7
Figura 2.5: Estrutura típica de implementação do controle auto-otimizável (Schultz, 2015).	8
Figura 3.1: Fluxograma do processo de produção de cumeno.	14
Figura 3.2: Estratégia de controle proposta por Luyben.	18
Figura 3.3: Representação da onda senóide quadrada.	18
Figura 4.1: Variação da vazão de propeno na corrente de gás.	21
Figura 4.2: Variação da vazão de propano na corrente de gás.	21
Figura 4.3: Variação da vazão de benzeno na corrente de gás.	22
Figura 4.4: Variação da vazão de cumeno na corrente de gás.	22
Figura 4.5: Variação da vazão de PDIB na corrente de gás.	22
Figura 4.6: Política de distúrbio aplicada no processo.	23
Figura 4.7: Variação do lucro operacional para a política de distúrbios aplicada na planta. (RTO: processo utilizando otimização em tempo real; PWC: processo utilizando a estrutura de controle proposta por Luyben (2010); SOC: processo utilizando controle auto-otimizável).	24
Figura 4.8: Variação do sinal enviado pelo controlador.	24
Figura 4.9: Variação do lucro operacional para toda a região de distúrbio.	25

Lista de Tabelas

Tabela 3.1: Parâmetros cinéticos das reações (Turton <i>et al.</i> , 2003).	13
Tabela 3.2: Variáveis utilizadas no cálculo da função lucro.	17
Tabela 3.3: Preço das correntes utilizadas no cálculo da função lucro. (continua)	17
Tabela 4.1: Valores ótimos para os pontos de distúrbio.	20
Tabela 4.2: Emparelhamento das variáveis.....	20
Tabela 4.2: Comparação entre os lucros obtidos pelas técnicas estudadas.....	25

Lista de Símbolos

u – variável manipulada

x – variável de estado

y – medição disponível

d – distúrbio

c – variável controlada

J – função objetivo

J_{opt} – valor ótimo da função objetivo

f – restrições de igualdade

g – restrições de desigualdade

L – perda

N_m – Número de graus de liberdade para controle

N_{opt} – Número de graus de liberdade para otimização

N_0 – Número de variáveis que não afetam a função objetivo

N_{active} – Número de graus de liberdade que estão na restrição

$N_{opt,free}$ – Número de graus de liberdade para otimização fora da restrição

L_{max} – Perda máxima

D – Região de valores admitidos para o distúrbio

N – Região de valores admitidos para o erro de implementação

n – Valor do erro de implementação

L_{avg} – Perda média

\mathbf{G} – matriz de ganho em estado estacionário

\mathbf{F} – matriz sensibilidade

\mathbf{H} – espaço nulo à esquerda da matriz de sensibilidade

F_{prod} – Vazão de produto

$F_{C3\ fresco}$ - Vazão de C3 fresco na corrente de alimentação

$F_{Benz\ fresco}$ – Vazão de benzeno fresco na corrente de alimentação

$F_{Gás}$ – Vazão de gás que sai do *flash*

F_{fundo2} – Vazão de fundo da coluna 2

$Z_{Gás_Benz}$ – Fração molar de benzeno na corrente de gás

$Z_{Gás_Cum}$ – Fração molar de cumeno na corrente de gás

$Z_{Gás_C3H6}$ – Fração molar de propeno na corrente de gás

$Z_{Gás_C3H8}$ – Fração molar de propano na corrente de gás

$Z_{Gás_PBI}$ – Fração molar de p-diisopropilbenzeno na corrente de gás

$Z_{fundo2,Cum}$ – Fração molar de cumeno na corrente fundo 2

$Z_{fundo2,PBI}$ – Fração molar de p-diisopropilbenzeno na corrente fundo 2

Q_{reator} – Calor gerado no reator

Q_{vap} – Calor trocado no vaporizador

Q_{rebC1} – Calor trocado no refeedor da coluna 1

RR_{C1} – Razão de refluxo da coluna 1

Q_{rebC2} – Calor trocado no refeedor da coluna 1

RR_{C2} – Razão de refluxo da coluna 2

Q_{aq} – Calor trocado no aquecedor

Q_{resf} – Calor trocado no resfriador

$P_{cum\ puro}$ – Valor comercial do cumeno 99,9%

$P_{C3\ fresco}$ – Valor comercial da corrente de C3

$P_{Benz\ puro}$ – Valor comercial da corrente de benzeno puro

P_{Benz} – Valor comercial da corrente de benzeno impuro

P_{Cum} – Valor comercial da corrente de cumeno impuro

P_{C3H6} – Valor comercial da corrente de C_3H_6 impuro

P_{C3H8} – Valor comercial da corrente de C_3H_8 impuro

P_{PBI} – Valor comercial da corrente de PBI impuro

P_E – Valor comercial da energia gerada no reator

P_{VAP} – Valor comercial do vapor de alta pressão usado no processo

P_{EE} – Valor comercial da energia elétrica usada no processo

Lista de Abreviaturas e Siglas

C1 – Coluna 1

C2 – Coluna 2

CV – Variável controlada

HDA – Hidrodealquilação de tolueno

MPC – *Model Predictive Control*

MV – Variável manipulada

NCO – Condições necessárias de otimalidade

OP – *Output*

PV – *Process Variable*

PWC – *Plantwide Control*

RTO – Otimização em tempo real

SOC – Controle auto-otimizável

SP – *Setpoint*

1 Introdução

O atual cenário da indústria de petróleo e petroquímica pressiona as empresas a aliar um aumento de produção com um aumento de eficiência de suas unidades. A otimização de processo, aliada a uma correta aplicação das técnicas de controle, entra como uma excelente ferramenta para atingir esses objetivos.

A otimização em tempo real (RTO – *Real Time Optimization*) é a técnica mais empregada na otimização *online* de processos na indústria, sendo capaz de unir o controle regulatório com a questão econômica da planta. Dessa forma, o RTO mantém o processo operando o mais próximo possível do ótimo econômico, trazendo enormes benefícios para a lucratividade da unidade. No entanto, essa técnica é dependente da acuracidade dos modelos utilizados e das medições das variáveis do processo, além de atuar na planta apenas quando essa se encontra em regime permanente. Outra desvantagem do RTO é seu elevado custo de implementação e manutenção, o que vai de encontro ao presente cenário de estagnação econômica e necessidade de contenção de custos.

Novas metodologias simplificadas que permitem projetar um sistema de automação que maximize o lucro vêm sendo estudadas nos últimos anos. Uma dessas metodologias é o controle auto-otimizável (SOC – *Self-optimizing Control*), uma estratégia de controle que busca operar o sistema o mais próximo possível do ótimo local. Ela consiste na aplicação simples de controladores PI ou PID em uma malha *feedback*, mantendo determinadas variáveis do processo em *setpoints* constantes. As variáveis escolhidas para serem mantidas constantes devem respeitar o requisito de minimizar a perda, isto é, a diferença entre o lucro do SOC e o lucro ótimo.

Uma das vantagens da técnica mencionada anteriormente é seu baixo custo de implementação, visto que ela utiliza a instrumentação já presente na unidade, não sendo necessária a aquisição de *hardware* e *softwares* especializados. Um projeto adequado desse sistema de controle pode garantir uma operação mais suave, rejeitando distúrbios que apareçam no processo, além de possibilitar mudanças operacionais mais rápidas. Contudo, a aplicação dessa técnica não é trivial devido ao elevado número de variáveis manipuladas e medições disponíveis em uma unidade industrial.

Apesar do apelo, o uso industrial ainda é restrito e sua validação pouco realizada. Os trabalhos da literatura focam na seleção das variáveis, porém a validade das estruturas escolhidas não é verificada em simulação rigorosa dinâmica. Esta validação é essencial, visto que restrições dinâmicas podem inviabilizar o uso de uma estrutura, ou a frequência dos distúrbios tornar a aplicação do RTO inviável, dado sua baixa atuação.

O objetivo do presente trabalho é validar as técnicas de RTO e SOC em simulação dinâmica, bem como estratégias de controle já presentes na literatura proposto por Schultz (2016). Isso será feito utilizando-se um modelo dinâmico de uma planta industrial de produção de cumeno. Serão aplicados diferentes distúrbios no processo a fim de avaliar a resposta das referidas técnicas numa região de distúrbio.

O presente trabalho é dividido da seguinte maneira: o segundo capítulo apresenta uma breve revisão bibliográfica a respeito das principais técnicas de otimização de processos, bem como algumas metodologias para determinação das variáveis controladas utilizadas no SOC. No capítulo 3 a unidade utilizada para realizar o estudo das técnicas é

descrita, além do método empregado para comparar as referidas técnicas. O quarto capítulo apresenta os resultados obtidos para a comparação das técnicas estudadas. Por fim, no último capítulo são apresentadas as conclusões quanto aos resultados observados e sugestões para trabalhos futuros.

2 Revisão Bibliográfica

Este capítulo objetiva apresentar uma breve revisão a respeito das ferramentas de otimização de processos. Serão abordadas as técnicas de otimização em tempo real e controle auto-otimizável, técnicas essas que serão estudadas nesse trabalho.

2.1 Otimização

Otimização, ou programação matemática, consiste em determinar com o auxílio de modelos e métodos matemáticos rigorosos uma solução ou conjunto de soluções ótimas para um determinado problema (Saramago, 2008).

No contexto da engenharia de processos, otimização consiste em operar o processo em seu ponto de operação de maior lucro. Para isso, formula-se um problema de otimização visando à determinação dos valores ótimos das variáveis manipuladas de processo que minimizem o custo de operação. Tal problema de otimização pode ser descrito da seguinte forma (Skogestad, 2000):

$$\begin{cases} \min_u J(u, x, d) \\ f(u, x, d) = 0 \\ g(u, x, d) \leq 0 \end{cases} \quad (2.1)$$

onde J é o custo de operação, f é o modelo do processo representado por balanços de massa, de energia e de quantidade de movimento, g as restrições de desigualdade referentes a limites físicos das variáveis, u as variáveis independentes, d os distúrbios e x as variáveis de estado.

2.2 Otimização em Tempo Real (RTO)

O sistema de controle de uma planta industrial é estruturado hierarquicamente em diversas camadas, cada uma operando em uma escala diferente de tempo. As camadas são interligadas pelas variáveis controladas de forma que a camada superior determina o *setpoint* a ser implementado pela camada inferior. A Figura 2.1: ilustra a forma como é usualmente implementada a hierarquia de controle, que inclui planejamento (semanas), programação (dias), otimização em tempo real (horas), controle preditivo multivariável (minutos), e o controle regulatório (segundos) (Skogestad, 2000).

Os elementos da estrutura de controle típico de uma planta industrial podem ser brevemente descritos como:

Planejamento: Baseando-se na situação econômica e em previsões, o planejamento de produção decide o que e como produzir. Para isso, precisam-se determinar quais matérias-primas comprar, quais produtos e quanto de cada produzir.

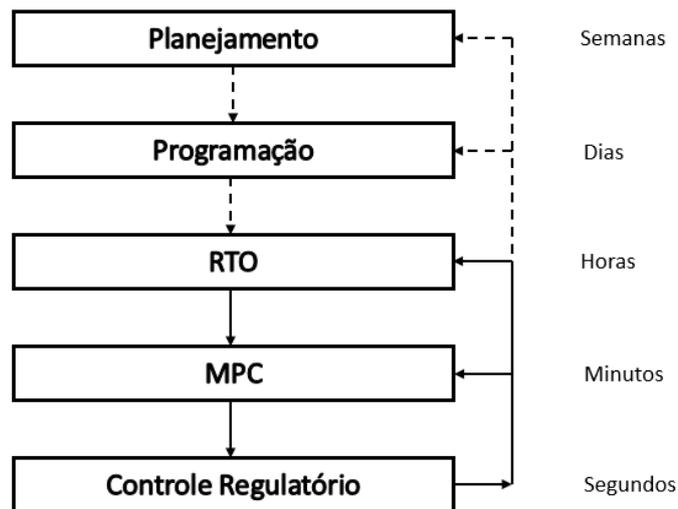


Figura 2.1: Arquitetura típica de controle em uma planta industrial (baseado em Darby *et al.*, 2011).

Programação: Nesse nível lidam-se com problemas como entrega de matéria-prima, mudanças operacionais e estocagem para decidir quando produzir o que foi ordenado pelo nível superior.

RTO: Na otimização em tempo real (RTO), implementam-se decisões econômicas em tempo real utilizando um modelo não-linear e geralmente em estado estacionário, informando para os níveis inferiores os *setpoints* que mantem a operação do processo o mais próxima possível do ótimo econômico.

MPC: O controle preditivo baseado em modelo (MPC) é responsável por controlar dinamicamente a planta utilizando os valores determinados pelo RTO como parâmetros. Em alguns casos possui capacidade (restrita) de otimização.

Controle Regulatório: O último nível realiza o controle regulatório, sendo a principal interface para monitorar e controlar o processo.

A otimização em tempo real (RTO) é uma técnica utilizada em indústrias de processos para estabelecer uma comunicação entre o controle regulatório e a camada de programação da produção da unidade. O RTO é um sistema baseado em modelos rigorosos que opera em malha fechada fornecendo os *setpoints* para as camadas inferiores do sistema com o objetivo de manter a operação o mais próxima possível do ótimo econômico (Engell, 2007). A estrutura hierárquica de um sistema RTO é apresentada na Figura 2.2.

É necessário que o RTO possua ligação com a camadas de planejamento e com a de controle regulatório. Da camada de planejamento, o sistema recebe dados relativos à qualidade de produtos e matérias-primas, custos das correntes e restrições relativas às especificações e demandas de produção. Essas informações são utilizadas como parâmetros na função objetivo e como restrições de desigualdade, sendo utilizadas na formulação do problema de otimização. A camada regulatória fornece valores atualizados das principais variáveis do processo e recebe os *setpoints* das variáveis controladas que otimizam o custo da operação. (Engell, 2007).

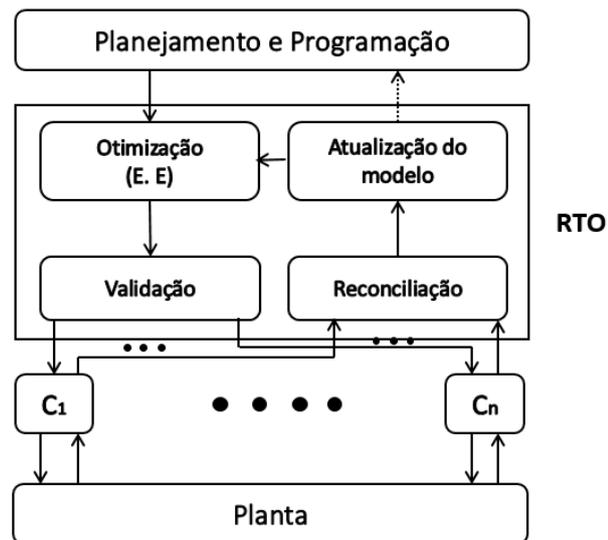


Figura 2.2: Hierarquia da estrutura de controle do sistema RTO. C_1, \dots, C_n representam os controladores da camada regulatória (baseado em Engell, 2007).

O funcionamento do sistema de RTO típico pode ser resumido em seis etapas básicas (Sequeira *et al.*, 2002; Engell, 2007):

1. Identificação do estado estacionário: essa etapa identifica se a planta está em estado estacionário ou estado transiente. O sistema só dá seguimento à próxima etapa quando a planta estiver em estado estacionário.
2. Reconciliação de dados: assim que o processo entra em estado estacionário, é feita a reconciliação de dados das variáveis do processo a partir de balanços materiais e de energia. Dessa forma compensam-se possíveis erros de medição.
3. Atualização do modelo: novos parâmetros do modelo que será utilizado no algoritmo de otimização são determinados a partir dos resultados da etapa anterior.
4. Cálculo do ponto ótimo: após a atualização do modelo do processo, utiliza-se um algoritmo de otimização para determinar o ponto de ótimo econômico. Com isso, são necessárias informações relativas aos custos das matérias-primas e produtos, bem como as restrições de qualidade, de produção e limites dos equipamentos, as quais são fornecidas pela camada de planejamento
5. Validação: nessa etapa, impedem-se movimentos bruscos no processo e pontos de operação inviáveis através da validação dos novos *setpoints* determinados pela etapa anterior. A validação normalmente é realizada com o auxílio da equipe de operação.
6. Aplicação: verifica-se mais uma vez se o processo está em regime estacionário. Caso não tenham ocorrido mudanças significativas, atualizam-se os valores das variáveis controladas.

Existem muitos desafios na aplicação do sistema RTO. Algumas dessas limitações incluem:

- Necessidade de utilizar um modelo estacionário do processo com uma boa precisão a fim de realizar-se a otimização.
- A otimização só pode ser realizada quando a planta está aproximadamente em regime estacionário. Assim, o tempo entre duas aplicações sucessivas do RTO deve ser maior que a constante de tempo do processo, para que a planta atinja um novo estado estacionário.
- Enquanto a planta está em regime transiente, o sistema de otimização não atua, fazendo com que haja uma perda enquanto o planta não atinge um novo estado estacionário para que seja determinado um novo ponto ótimo.

Entretanto, o sistema RTO fornece resultados satisfatórios quando a planta opera por longos períodos em estado estacionário e caso se tenha um modelo não-linear que represente adequadamente a planta. Como já é comum a utilização de modelos na fase de projeto e em treinamentos de operadores, essa última condição já é presente nos dias atuais.

2.3 Controle Auto-Otimizável (SOC)

Para que se opere a planta em seu ponto verdadeiramente ótimo é necessário um modelo perfeito, medições de todos os distúrbios e a resolução *on-line* do problema de otimização dinâmica, o que é inviável na prática (Skogestad, 2000). Dessa forma, buscam-se métodos alternativos que se aproximem de uma operação no ponto ótimo.

Dentre esses métodos, o que mais se destaca na literatura é o controle auto-otimizável (SOC), proposto inicialmente por Skogestad (2000). Inspirado numa ideia de Morari *et al.* (1980), que propôs uma estrutura de controle a qual ele denominou *feedback optimizing control*, Skogestad propôs a seguinte definição para controle auto-otimizável:

Controle auto-otimizável é quando podemos alcançar uma perda aceitável com valores de setpoints constantes para as variáveis controladas (sem a necessidade de reotimizar quando ocorrem distúrbios).

A ideia por trás desse método é manter as variáveis certas em um *setpoint* constante, a fim de transformar um problema complexo de otimização em um problema simples de malha *feedback*. Para isso, é necessário que se selecionem variáveis que, quando mantidas constantes, o controlador rejeite os principais distúrbios, minimizando a perda do processo.

O conceito de perda pode ser ilustrado pela Figura 2.3. Nela, pode-se constatar a existência de uma perda quando mantem-se os *setpoints* constantes ao invés de reotimizar o sistema. Quando ocorre um distúrbio diferente do distúrbio nominal (d^*), o processo é deslocado do seu ponto ótimo de operação, caracterizando uma perda. Uma operação satisfatória seria quando a perda L (definida a seguir) é a menor possível.

Portanto, nesse exemplo é preferível manter a variável C_1 constante, em relação à alternativa C_2 .

$$L = J - J_{opt} \quad (2.2)$$

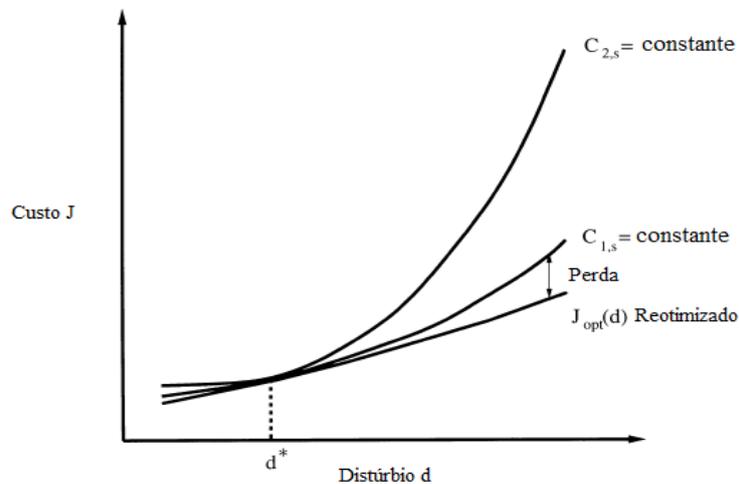


Figura 2.3: Perda associada a estratégia de manter o *setpoint* constante (baseado em Skogestad, 2000).

Segundo Skogestad (2000), uma preocupação adicional ao utilizar esse método é a existência de erro de implementação, o que sempre ocorrerá, devido a erros de medição. O erro de implementação pode causar uma perda maior no lucro dependendo do comportamento da função objetivo. A Figura 2.4 exemplifica três classes diferentes do problema de otimização.

- Ótimo com restrição ativa: o valor mínimo do custo J é obtido quando a restrição está ativa. Nesse caso, não há perda ao manter-se a variável com *setpoint* constante. Além disso, a implementação desse caso é muito fácil (por exemplo, deixando uma válvula fechada).
- Ótimo sem restrição ativa com superfície plana: o custo J é insensível a variações da variável controlada e sua implementação é simples.
- Ótimo sem restrições com superfície aguda: esse caso é considerado o mais difícil de ser implementado, pois o custo é sensível à variável controlada. Geralmente, procura-se outra variável para ser controlada que apresente uma superfície mais plana.

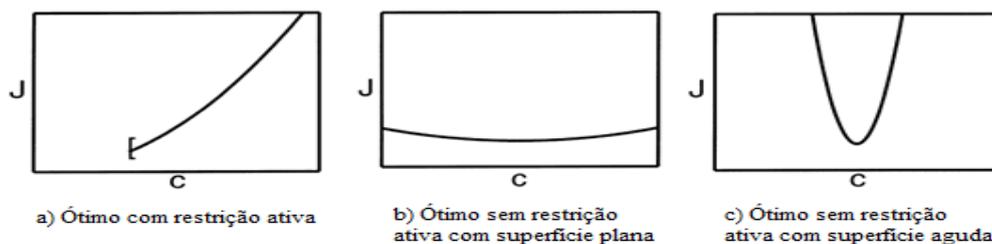


Figura 2.4: Comportamento da função objetivo em função da variável controlada (Skogestad, 2000).

2.3.1 Graus de liberdade para controle e otimização

Conforme Skogestad (2000), para se definir o número de graus de liberdade para controle (N_m), é necessário ter um bom entendimento do processo, pois pode ser obtido pelo número de variáveis independentes que podem ser manipuladas por meios externos (por exemplo o número de válvulas, equipamentos elétricos e mecânicos ajustáveis). No entanto, o número de graus de liberdade para otimização (N_{opt}) geralmente é menor do que esse número, o qual pode ser determinado pela seguinte equação:

$$N_{opt} = N_m - N_0 \quad (2.3)$$

onde N_0 é o número de variáveis que não afetam a função custo J .

A otimização geralmente está sujeita a diversas restrições e N_{opt} deve ser utilizado para satisfazê-las, e ao mesmo tempo otimizar a operação. Assim, pode-se definir o número de graus de liberdade para otimização livres, $N_{opt,free}$, como:

$$N_{opt,free} = N_{opt} - N_{active} \quad (2.4)$$

onde N_{active} é o número de restrições ativas.

2.3.2 Implementação

O controle auto-otimizável é implementado utilizando-se um controlador simples, como um Proporcional-Integral (PI) ou Proporcional-Integral-Derivativo (PID), onde os graus de liberdade são manipulados para manter as variáveis controladas em seus setpoints constantes. A implementação do SOC é barata, já que não há gastos com aquisição de equipamentos ou softwares, pois se utiliza o sistema de controle já existente. Essa técnica pode ser vista como uma camada de controle em cascata controlando variáveis do processo que minimizam a perda quando ocorre algum distúrbio no processo (Schultz, 2015). A implementação do controle auto-otimizável pode ser vista na Figura 2.5:

Onde Y_{set} é o setpoint do controlador (que deve ser mantido constante), yc e $yc2$ são as variáveis controladas, u representa as variáveis manipuladas, d representa os distúrbios do processo, n representa os erros de implementação dos controladores, y representa as variáveis medidas do processo e Y_{soc} representa os setpoints utilizados pelos controladores desenvolvidos por meio da técnica de SOC.

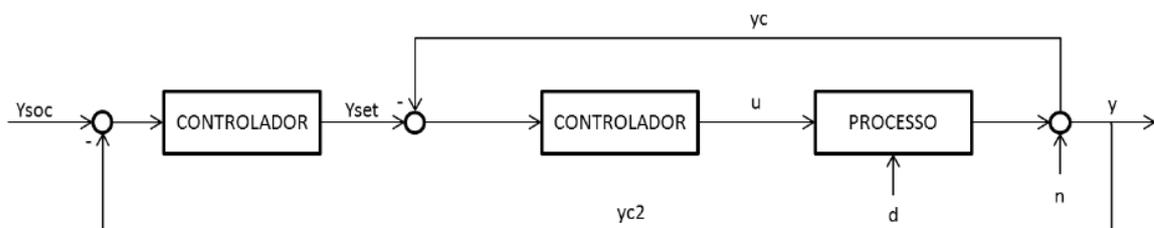


Figura 2.5: Estrutura típica de implementação do controle auto-otimizável (Schultz, 2015).

Segundo Halvorsen *et al.* (2003), a implementação deve ocorrer de tal forma que um conjunto de graus de liberdade seja ajustado com o objetivo de manter as restrições ativas enquanto que os demais graus de liberdade sejam ajustados de forma a manter as variáveis controladas em seus setpoints.

2.3.3 Perda máxima e perda média

Usualmente, utilizam-se duas métricas para se comparar diferentes técnicas de otimização: perda máxima e perda média. Perda máxima corresponde à maior diferença entre a curva da função custo reotimizada e a da função custo obtida com a técnica utilizada. A equação mostra como pode ser calculada a perda máxima (Kariwala *et al.*, 2008):

$$L_{max} = \max_{d \in D} \max_{n \in N} (J_{opt}(d) - J_c(d, n)) \quad (2.5)$$

onde L_{max} é a perda máxima, D representa a região de valores admitidos para o distúrbio, n é o valor do erro de implementação, N é a região de valores permitidos para o erro de implementação, J_{opt} representa o valor ótimo do custo de operação para um determinado distúrbio e J_c é o custo de operação utilizando uma estratégia de otimização, para um determinado distúrbio e erro de implementação.

A perda média corresponde à média da diferença entre a curva da função custo reotimizada e a curva da técnica de otimização, ao longo da região de distúrbio. Esta perda pode ser determinada pela seguinte expressão (Kariwala *et al.*, 2008):

$$L_{avg} = \frac{1}{|D||N|} \int_D \int_N (J_{opt}(d) - J_c(d, n)) dn dd \quad (2.6)$$

onde L_{avg} é a perda média ao longo da região de d e n .

2.3.4 Seleção das variáveis controladas

Determinar o conjunto mais adequado de variáveis controladas (CVs) é um dos principais desafios da estrutura de controle auto-otimizável. Diversos métodos que envolvem a seleção de CVs podem ser encontrados na literatura, assim como diversos estudos de caso (Kariwala, 2007).

Segundo Skogestad (2000) devem-se selecionar variáveis que, ao serem mantidas constantes, minimizem o erro de setpoint (diferença entre o valor do setpoint e o ótimo real) e erros de implementação (diferença entre o valor real da variável e o setpoint). Skogestad (2000) propôs quatro requisitos básicos que derivaram dessa ideia:

1. O seu valor ótimo não deve ser sensível a distúrbios (de forma que o erro de *setpoint* seja pequeno);
2. Deve ser fácil de medir e controlar, para reduzir possíveis erros de implementação;
3. A variável deve ser sensível a mudanças na variável manipulada, de forma que o ganho relativo seja grande. Equivalentemente, pode-se dizer que o ponto ótimo apresente uma superfície plana em relação a variável controlada;
4. Para casos com múltiplas variáveis controladas, elas não devem apresentar grande correlação.

O autor propôs a regra do valor singular máximo, onde combinam-se os quatro requisitos básicos nessa única regra. Para pequenas variações, é possível linearizar a relação entre os graus de liberdade \mathbf{u} restantes e qualquer conjunto de variáveis candidatas a serem mantidas constantes, \mathbf{c} :

$$\Delta \mathbf{c} = \mathbf{G} \Delta \mathbf{u} \quad (2.7)$$

onde \mathbf{G} é a matriz do ganho em estado estacionário, sendo $\bar{\sigma}(\mathbf{G})$ o valor singular mínimo da matriz. Assumindo certas condições, devem-se escolher conjuntos de CVs para o qual $\bar{\sigma}(\mathbf{G})$ seja maximizado.

O procedimento proposto pelo autor segue as seguintes etapas:

1. Análise de graus de liberdade;
2. Definição da função custo e das restrições;
3. Identificação dos distúrbios mais importantes para o processo;
4. Otimização em d^* ;
5. Identificação de candidatas a variáveis controladas. Sempre se implementam as variáveis controladas que possuem ótimo na restrição;
6. Avaliação da perda para as estruturas escolhidas;
7. Análise final e seleção (incluindo análise de controlabilidade).

Halvorsen *et al.* (2003) desenvolveram um método numericamente eficiente para avaliar a perda ao manter setpoints constantes chamado Método Exato Local. Esse método é baseado na utilização de um modelo linearizado na região do ponto ótimo nominal do processo e considera que todas as restrições ativas são controladas. Após a linearização do modelo, realiza-se uma expansão por séries de Taylor da função objetivo na região do ponto ótimo nominal. Contudo, esse método não é adequado para processos que apresentam grandes distúrbios.

Alstad e Skogestad (2007) propuseram o Método do Espaço Nulo, cujo objetivo é selecionar as variáveis controladas com uma combinação linear das medições disponíveis a partir de:

$$\mathbf{c} = \mathbf{H} \mathbf{y} \quad (2.8)$$

onde \mathbf{c} são combinações lineares das medições \mathbf{y} , e \mathbf{H} é uma matriz com os coeficientes da combinação linear. Os requisitos são que haja pelo menos a mesma quantidade de medições que graus de liberdade não restritos e distúrbios, que o erro de implementação possa ser negligenciado e que as restrições ativas não mudem com os distúrbios. O primeiro passo é obter a partir de um modelo de estado estacionário uma matriz sensibilidade \mathbf{F} em relação aos distúrbios. A matriz ótima \mathbf{H} satisfaz:

$$\mathbf{H} \mathbf{F} = 0 \quad (2.9)$$

Assim, o próximo passo é obter H no espaço nulo à esquerda de F e, então, c , usando a Equação 2.8.

Nos métodos anteriormente mencionados, a perda é calculada no pior cenário. No entanto, habitualmente considera-se que o mais importante na realidade industrial é a perda média. Com isso em mente, Kariwala *et al.* (2008) propuseram um novo método baseado nesse fato, além de apresentar a vantagem de se computacionalmente mais eficiente. É importante ressaltar que minimizar a perda média nem sempre garante um resultado econômico satisfatório, pois em certos casos pode apresentar um fraco desempenho para determinados distúrbios e erros de implementação.

Aprimorando o método do espaço nulo, Alstad *et al.* (2009) obtiveram uma expressão explícita para a matriz H . Além disso, estenderam o método anterior para incluir os erros de implementação e para casos em que há medições extras, usando os graus de liberdade a mais para minimizar a perda devido a erros de implementação. O método do espaço estendido basea-se na ideia de primeiramente minimizar a perda causada pelos distúrbios e, em seguida, caso haja graus de liberdade remanescentes, minimizar a perda devido a erros de medição. O autor explica que a ideia de, em um primeiro momento, reduzir os distúrbios é devida à maior facilidade de reduzir os erros de medição após a redução dos distúrbios, além de que a presença dos distúrbios é o motivo da utilização de controle *feedback* e otimização.

Outra área de otimização implícita, que também considera medições para diminuir os erros do modelo e a influência dos distúrbios no processo, é o NCO *tracking* – busca de condições necessárias de otimalidade. François *et al.* (2005) propuseram metodologias para utilizar medições para corrigir as incertezas de um processo real ao forçar as NCO no processo. No mesmo trabalho, o autor enfatiza a importância das restrições ativas.

Os métodos anteriores utilizam o ponto nominal do distúrbio como ponto base de análise. Entretanto, a troca de tal ponto, pode acarretar em regiões operacionais mais planas, acarretando em menor perda. Baseado em tal premissa, Schultz (2015) propôs o método *Best Operating Point for Self-Optimizing Control* (BOPSOC), onde a ideia básica é definir o ponto de operação e o conjunto de CVs em um único procedimento de otimização a partir de uma análise da região de distúrbios. Nessa metodologia, os *setpoints* fazem parte das variáveis de decisão do problema de otimização, aumentando o grau de complexidade do problema. Com o método BOPSOC, há um aumento no número de conjuntos de CVs que podem manter os *setpoints* constantes na região de distúrbio.

2.3.5 Aplicações Industriais

A estrutura de controle auto-otimizável ainda é pouco empregada em unidades industriais, apesar de ser de fácil implementação. No entanto, as vantagens e a viabilidade a aplicação dessa metodologia já foram demonstradas em trabalhos publicados nos últimos anos.

Larsson *et al.* (2001) utilizaram o SOC no processo de Tennessee Eastman, processo que possui um grande número de variáveis (12 graus de liberdade, 41 medições e 20 distúrbios) e, portanto, uma dificuldade considerável para aplicação das técnicas. Contudo, foi demonstrado que a estrutura é viável e apresenta um bom desempenho econômico.

De Araújo *et al.* (2007) aplicaram as técnicas de SOC no processo de hidrodealquilação de tolueno (HDA), utilizando o Aspen Plus para construir o modelo da unidade. A validação das estruturas foi realizada com a utilização do modelo não linear para um conjunto de distúrbios individuais o processo. Utilizando-se o modelo dinâmico do processo, testou-se a viabilidade de implementação das estratégias de controle, obtendo-se um controle robusto e com bom desempenho dinâmico.

Gera *et al.* (2013) aplicaram o conceito de controle auto-otimizável no processo de produção de cumeno. No entanto, o processo estudado é levemente diferente do proposto por Luyben (2010). As variáveis controladas mantidas no *setpoint* ótimo foram escolhidas baseadas em conhecimento do processo e implementadas em pares de malha. A estrutura apresentou um bom desempenho econômico e uma boa controlabilidade.

3 Metodologia

Neste capítulo será descrita unidade estudada e a construção da simulação do sistema. Em seguida, será exposto o processo de otimização do processo de cumeno. Por fim, será descrito o método utilizado para comparação das técnicas estudadas.

3.1 Processo de Produção de Cumeno

Foi estudado o processo de produção de cumeno (C_9H_{12}) descrito por Luyben (2010). A produção de cumeno (isopropilbenzeno) envolve a reação entre benzeno e propeno na fase vapor em um reator de alta temperatura e pressão. Ocorre também uma reação em sequência entre o produto desejado (cumeno) e o propeno formando o p-diisopropilbenzeno (PDIB). O fluxograma simplificado da referida unidade está disposto na Figura 3.1.

As correntes de C3 (mistura 95% propeno e 5% propano) e benzeno são alimentadas no início do processo na fase líquida. As vazões dessas correntes foram estabelecidas como sendo 110 e 104,2 kmol/h, respectivamente. Essas são misturadas com a corrente de topo da coluna 1, rica em benzeno, que é reciclada e então são alimentadas em um vaporizador. O vapor saturado deixa o vaporizador a 209°C e 25 bar. Antes de chegar ao reator, tal corrente ainda troca calor em dois trocadores de calor. No primeiro, recupera-se calor com a corrente de saída do reator, realizando-se uma integração energética. O segundo aquece os reagentes até a temperatura de 360°C.

O reator é do tipo tubular, onde ocorrem as reações 3.1 e 3.2. Os parâmetros cinéticos das referidas reações estão dispostas na Tabela 3.1.



Tabela 3.1: Parâmetros cinéticos das reações (Turton *et al.*, 2003).

	Reação 4.1	Reação 4.2
K	$2,8 \times 10^7$	$2,32 \times 10^9$
E (kJ/kmol)	104174	146742
Termos de concentração (kmol/m³)	$C_P C_B$	$C_C C_P$

O reator é resfriado de forma a manter uma temperatura de reação constante de 360°C. Assume-se que a temperatura do fluido refrigerante é a mesma que a temperatura de entrada do reator. O reator é formado por 342 tubos com 0,0763 m de diâmetro e 6 m de comprimento. O coeficiente global de transferência térmica utilizado é 0,065 kWm⁻²k⁻¹. A corrente deixa o reator a 427°C e é resfriada a cerca de 322°C no trocador de integração energética. Depois se utiliza água de resfriamento para resfriar a corrente a 90°C.

A mistura bifásica é separada em um vaso *flash*. O vapor que sai do *flash* é utilizado como combustível e a corrente de fundo enviada para duas colunas de destilação em série (C1 e C2, respectivamente) para posterior separação do produto e subproduto.

A coluna C1 possui 15 estágios e é alimentada no estágio 6, que é o estágio ótimo de alimentação, de forma a minimizar o calor no refeedor. A pressão de operação é de 1,75 bar e a temperatura do condensador é 60°C, portanto pode-se utilizar água de resfriamento. A razão de refluxo é de 0,44 e a corrente de topo é composta de 95,6% de benzeno. A corrente de topo é majoritariamente composta por benzeno que não reagiu e por isso é realimentada no início do processo para que se possa reaproveitar o benzeno na reação. O diâmetro da coluna é de 1,36 m.

A coluna C2 tem 20 estágios e o prato de alimentação é o 12º. A pressão de operação é de 1 bar e a temperatura do condensador é de 152°C. A razão de refluxo é de 0,63 e o diâmetro da coluna é de 1,26 m. A vazão da corrente de topo é de 97 kmol/h e apresenta uma composição de 99,9% de cumeno. A vazão da corrente de fundo é de 2 kmol/h e é majoritariamente composta por PDIB. Foi assumida uma queda de pressão para as duas colunas de 0,01 bar em cada estágio.

3.2 Construção do modelo

Neste trabalho, utilizou-se o simulador Aspen Plus 7.2 para modelar o sistema, devido à complexidade do processo. A simulação do processo em Aspen Plus foi realizada utilizando o pacote termodinâmico NRTL. O fluxograma do processo construído no referido simulador, baseado no trabalho de Luyben (2010) foi apresentado na Figura 3.1.

Posteriormente, as restrições do problema foram definidas, as quais são provenientes das especificações do produto e limitações dos equipamentos. Além disso, determinaram quais serão as variáveis manipuladas e seus limites, bem como escolheram-se os distúrbios a serem aplicados no modelo e realizou-se a análise dos graus de liberdade para otimização que serão utilizados para manter as variáveis controladas em *setpoints* constantes.

Uma seleção adequada das variáveis deve garantir que o sistema se mantenha o mais próximo possível ao ótimo frente aos distúrbios. Neste trabalho, foram considerados como distúrbio a vazão de C3 fresco, com valores entre 107,5 e 112,5 kmol/h e sua composição, cuja fração molar de propeno variou entre 93,5% e 96,5%. A região de distúrbio foi escolhida com base no trabalho de Schultz (2016).

Para avaliação das diferentes técnicas de otimização de processos, é necessária a construção de um modelo dinâmico para a planta. Para isso, utilizou-se o Aspen Dynamics para converter o modelo estático criado no Aspen Plus para um modelo dinâmico. Ressalta-se que os controladores de inventário gerados pelo *software* não foram alterados, apenas os controladores PIDs necessários para as técnicas de controle auto-otimizável inseridos. Os controladores implementados no *Plantwide Control* e no SOC foram sintonizados utilizando o método IMC.

3.3 Otimização do processo

A função objetivo a ser maximizada, o lucro J , é descrita pelas Equações 3.1 a 3.4, onde são considerados os custos com matéria-prima, custo das utilidades e o valor dos produtos. A Tabela 3.2 descreve as variáveis utilizadas e a Tabela 3.3 apresenta os custos utilizados no cálculo (Luyben, 2010). As restrições a que o processo está sujeito são descritas pelas Equações 3.5 a 3.10. Foi utilizada a ferramenta de otimização presente no Aspen Plus para realizar a otimização. O método de otimização utilizado pelo simulador é o SQP (*Sequential Quadratic Programming*).

$$C_{Prod} = F_{Prod} * P_{Cum\ puro} + F_{Gás} * (Z_{GásBenz} * P_{Benz} + Z_{GásCum} * P_{Cum} + Z_{GásC3H6} * P_{C3H6} + Z_{GásC3H8} * P_{C3H8} + Z_{GásPBI} * P_{PBI}) + F_{fundo2} * (Z_{fundo2Cum} * P_{Cum} + Z_{fundo2PBI} * P_{PBI}) \quad (3.1)$$

$$C_{MP} = F_{C3\ fresco} * P_{C3} + F_{Benz\ fresco} * P_{Benz\ puro} \quad (3.2)$$

$$C_E = Q_{reator} * P_E - (Q_{vap} + Q_{rebC1} + Q_{rebC2}) * P_{VAP} - (Q_{aq} + Q_{resf}) * P_{EE} \quad (3.3)$$

$$J = C_{Prod} - C_{MP} + C_E \quad (3.4)$$

$$360^\circ \leq T_{reator} \leq 390^\circ \quad (3.5)$$

$$1,31\ Gcal\ h^{-1} \leq Q_{rebC1} \leq 1,97\ Gcal\ h^{-1} \quad (3.6)$$

$$0,37 \leq RR_{C1} \leq 1 \quad (3.7)$$

$$1,01\ Gcal\ h^{-1} \leq Q_{rebC2} \leq 1,67\ Gcal\ h^{-1} \quad (3.8)$$

$$0,2 \leq RR_{C2} \leq 1,2 \quad (3.9)$$

$$Z_{prod\ cum} \geq 0,999 \quad (3.10)$$

3.4 Estudo das diferentes técnicas de otimização de processos

De posse da simulação estática e dinâmica, as diferentes abordagens de otimização de processos foram confrontadas. Além das técnicas de RTO e SOC, foi estudada também a estratégia de controle proposta por Luyben (2010), que está reproduzida na Figura 3.2.

Para o RTO, o modelo estacionário da planta, fidedigno ao dinâmico, foi utilizado. Como mencionado anteriormente, o sistema RTO atua no processo apenas quando é identificado o estado estacionário na planta. Considera-se que o processo atingiu o regime permanente quando as variações na função objetivo são menores do que 2%.

Tabela 3.2: Variáveis utilizadas no cálculo da função lucro.

Sigla	Descrição	Unidade
F_{prod}	Vazão de produto	kmol/h
$F_{C3 fresco}$	Vazão de C3 fresco na corrente de alimentação	kmol/h
$F_{Benz fresco}$	Vazão de benzeno fresco na corrente de alimentação	kmol/h
$F_{Gás}$	Vazão de gás que sai do <i>flash</i>	kmol/h
F_{fundo2}	Vazão de fundo da coluna 2	kmol/h
$Z_{GásBenz}$	Fração molar de benzeno na corrente de gás	kmol/kmol
$Z_{GásCum}$	Fração molar de cumeno na corrente de gás	kmol/kmol
$Z_{GásC3H6}$	Fração molar de propeno na corrente de gás	kmol/kmol
$Z_{GásC3H8}$	Fração molar de propano na corrente de gás	kmol/kmol
$Z_{GásPBI}$	Fração molar de PBI na corrente de gás	kmol/kmol
$Z_{fundo2Cum}$	Fração molar de cumeno na corrente fundo 2	kmol/kmol
$Z_{fundo2PBI}$	Fração molar de PBI na corrente fundo 2	kmol/kmol
Q_{reator}	Calor gerado no reator	Gcal/h
Q_{vap}	Calor trocado no vaporizador	Gcal/h
Q_{rebC1}	Calor trocado no refeedor da coluna 1	Gcal/h
Q_{rebC2}	Calor trocado no refeedor da coluna 2	Gcal/h
Q_{aq}	Calor trocado no aquecedor	Gcal/h
Q_{resf}	Calor trocado no resfriador	Gcal/h

Tabela 3.3: Preço das correntes utilizadas no cálculo da função lucro.

Sigla	Descrição	Preço	Unidade
$P_{cum puro}$	Valor comercial do cumeno 99,9%	132,5	\$/kmol
$P_{C3 fresco}$	Valor comercial da corrente de C3	34,3	\$/kmol
$P_{Benz puro}$	Valor comercial da corrente de benzeno puro	68,6	\$/kmol
P_{Benz}	Valor comercial de benzeno impuro	27,9	\$/kmol
P_{Cum}	Valor comercial de cumeno impuro	26,6	\$/kmol
P_{C3H6}	Valor comercial de C3H6 impuro	10,4	\$/kmol
P_{C3H8}	Valor comercial de C3H8 impuro	10,9	\$/kmol
P_{PBI}	Valor comercial de PBI impuro	36,50	\$/kmol
P_E	Valor comercial da energia gerada no reator	27,91	\$/Gcal
P_{VAP}	Valor comercial do vapor de alta pressão usado no processo	41,13	\$/Gcal
P_{EE}	Valor comercial da energia elétrica usada no processo	70,29	\$/Gcal

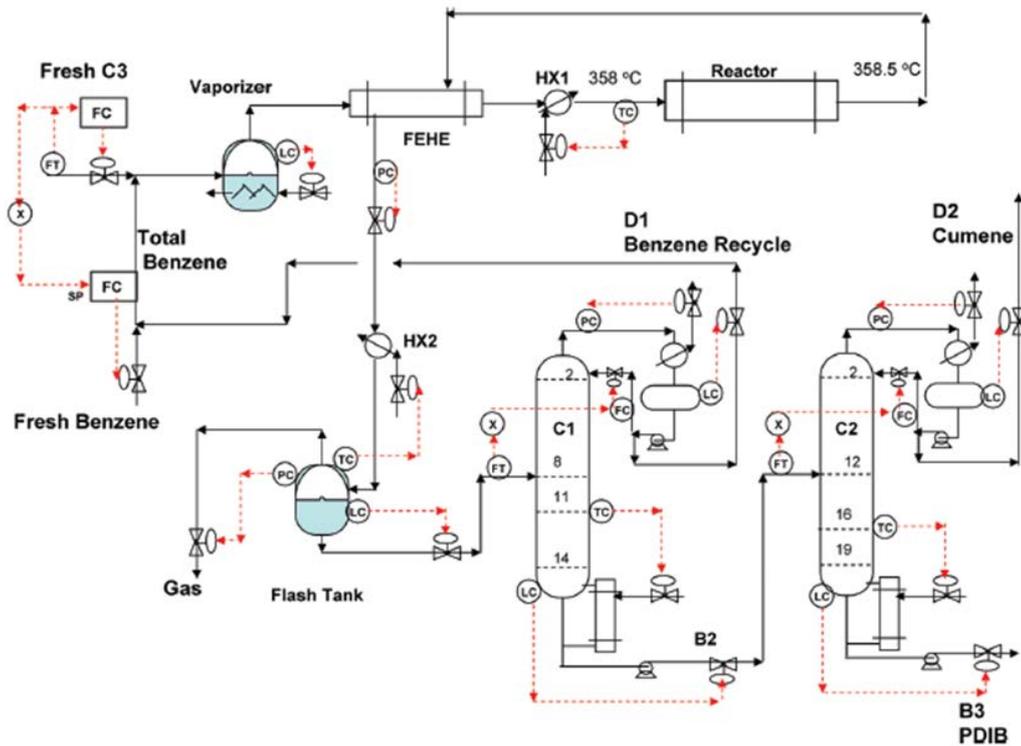


Figura 3.2: Estratégia de controle proposta por Luyben.

Portanto, é necessário analisar a frequência com que ocorrem distúrbios no sistema. Uma das maneiras de fazer essa análise é utilizando uma onda senóide quadrada da variável distúrbio, onde a cada passo de tempo o valor do distúrbio é alterado. Para isso, utiliza-se a amplitude de valores possíveis para a variável distúrbio para construir a senóide. Dessa forma, determinou-se uma frequência de distúrbio adequada para determinar a técnica de otimização mais indicada para cada faixa de ocorrência de distúrbios. A Figura 3.3 ilustra o formato da onda senóide quadrada.

Assim, calculou-se o lucro médio obtido na região de distúrbio para comparar as duas técnicas de otimização estudadas junto com o *plantwide control* proposto Luyben (2010). Com os resultados obtidos, constrói-se um gráfico relacionando a variação do lucro médio com a frequência de mudança dos distúrbios, podendo então observar quais técnicas são mais recomendadas para cada faixa de distúrbio.

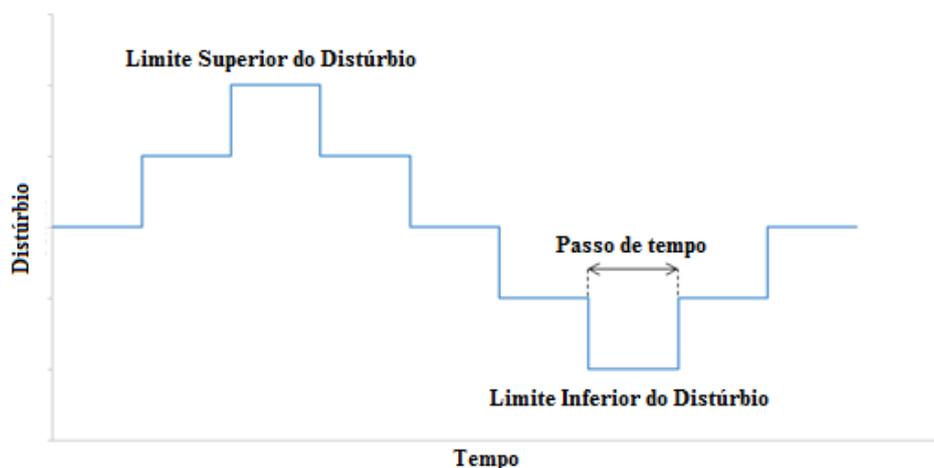


Figura 3.3: Representação da onda senóide quadrada.

4 Resultados e Discussões

Esse capítulo descreve os principais resultados deste trabalho, os quais englobam o processo de otimização em tempo real para determinar o ponto ótimo de operação, seguido da análise das técnicas de otimização estudadas (SOC, RTO e Plantwide Control).

4.1 Análise dos graus de liberdade

Antes de realizar a otimização do sistema, é necessário determinar o número de graus de liberdade para otimização. No sistema estudado, foi considerado que há cinco graus de liberdade para otimização, dois relacionados a cada uma das colunas (razão de refluxo e calor no refeedor) e o calor trocado no aquecedor, que controla a temperatura de entrada no reator que, como dito anteriormente, considera-se que é equivalente à temperatura do fluido de resfriamento.

4.2 Pontos ótimos de operação

Através da ferramenta SQP disponível no Aspen, foi possível calcular os pontos ótimos de operação do processo em cada ponto de distúrbio, descrito no Capítulo 3. Foi preciso implementar a Equação 3.4 como função objetivo, os graus de liberdade como MVs e as restrições representadas pelas Equações 3.5 a 3.10. No entanto, não foi possível utilizar o valor de 36,5 como peso para variável que representa a vazão de PDIB na corrente de gás e foi necessário estabelecer uma amplitude menor como restrição para o Q_{rebC2} , pois não possível obter uma convergência para o problema. Foi necessário estabelecer como peso para a variável $F_{Gas} * Z_{GasPB1}$ um valor unitário, o que não impacta significativamente na função objetivo, visto que a vazão de gás no *flash* é pequena comparada aos outros parâmetros da função. A Tabela 4.1 apresenta os valores ótimos em cada ponto de distúrbio.

4.3 Variáveis Controladas

Schultz (liberado para publicação) realizou a aplicação de técnicas de controle auto-otimizável utilizando um modelo estático. A seleção das variáveis foi baseada na aplicação do método do exato local. No entanto, não foi realizado uma comparação com a técnica de RTO e nem a validação em modelo dinâmico. O conjunto de variáveis controladas que apresentou os melhores resultados para perda máxima e perda média é composto por T_{reator} (temperatura de entrada no reator), RR_{C1} (razão de refluxo da coluna 1), VAP_{in} (corrente que chega no vaporizador), RR_{C2} (razão de refluxo da coluna 2), $Z_{Prod,cum}$ (fração molar de cumeno na corrente de produto) .

Tabela 4.1: Valores ótimos para os pontos de distúrbio.

Sigla	Ponto Ótimo				Unidade
	110kmol/h, 95%	112,5 kmol/h, 95%	107,5 kmol/h, 95%	107,5 kmol/h, 96,5%	
VP-IN	317,14	310,88	321,49	321,73	kmol/h
Q_{vap}	3,26	3,23	3,23	3,17	Gcal/h
Q_{aq}	0,71	0,71	0,75	0,99	Gcal/h
T_{reator}	362,76	365,14	360,01	373,63	K
T_{Re-Out}	392,17	391,57	392,84	390,88	K
$T_{liqflash}$	362,83	352,77	369,46	372,26	K
RR_{C1}	0,73	0,67	0,72	0,64	—
$Q_{reb,C1}$	1,93	1,91	1,92	1,85	Gcal/h
Topo1	102,94	94,18	109,79	110,03	kmol/h
Fundo1	100,58	102,15	98,65	99,72	kmol/h
RR_{C2}	0,62	0,60	0,65	0,62	—
$Q_{reb,C2}$	1,21	1,24	1,24	1,23	Gcal/h
Produto	97,07	98,13	95,72	96,62	kmol/h
Fundo2	3,50	4,02	2,93	3,10	kmol/h
Z_{cum}	0,999	0,995	1,000	0,995	—
Lucro	2000,98	1941,75	1952,80	1947,15	\$/h

4.4 Emparelhamento das Variáveis

O emparelhamento das variáveis foi obtido de forma heurística, onde se utilizaram as variáveis manipuladas para controlar as variáveis de saída de seus respectivos equipamentos. O emparelhamento proposto está apresentado na Tabela 4.2. Como as razões de refluxo são variáveis manipuladas, foi necessário emparelhar-se apenas as outras três variáveis. A temperatura do reator é diretamente controlada pelo calor trocado no aquecedor. Os calores dos refeedores estão correlacionados com as correntes de topo das colunas, logo $Z_{Prod,cum}$ é controlado por $Q_{reb,C2}$ e $Q_{reb,C2}$ controla a vazão do reciclo e, conseqüentemente, VAP_{in} .

Tabela 4.2: Emparelhamento das variáveis.

CV	MV
T_{reator}	Q_{AQ}
VAP_{in}	$Q_{reb,C1}$
$Z_{Prod,cum}$	$Q_{reb,C2}$

4.5 Política de distúrbios utilizada

Para realizar a comparação entre as técnicas de otimização de processo, é necessário determinar uma frequência de ocorrência de distúrbios adequada. Para isso, aplicou-se um distúrbio na vazão de carga da planta utilizando-se o Aspen Dynamics. As Figuras 4.1 a 4.5 apresentam a variação na corrente de gás (a componente da função lucro que demorou mais tempo para estabilizar) após a aplicação de um distúrbio na alimentação.

O tempo de assentamento encontrado quando a alimentação de C3 varia de 110 para 112,5 kmol/h no instante de tempo 7h foi de 14h.

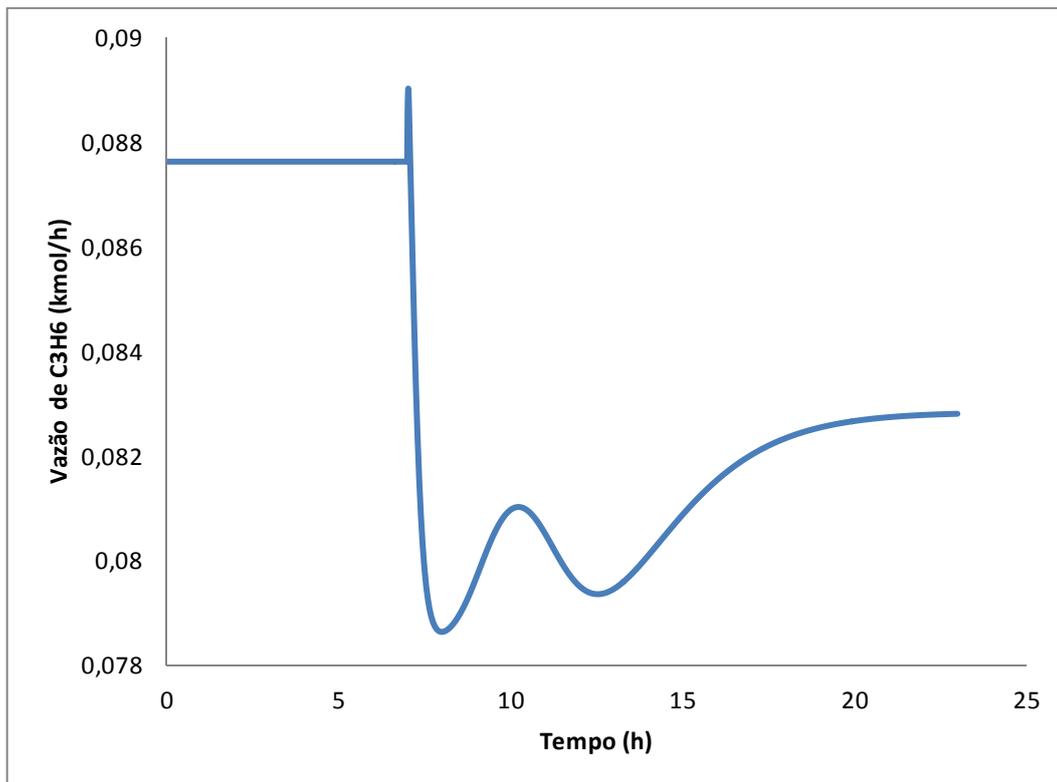


Figura 4.1: Variação da vazão de propeno na corrente de gás.

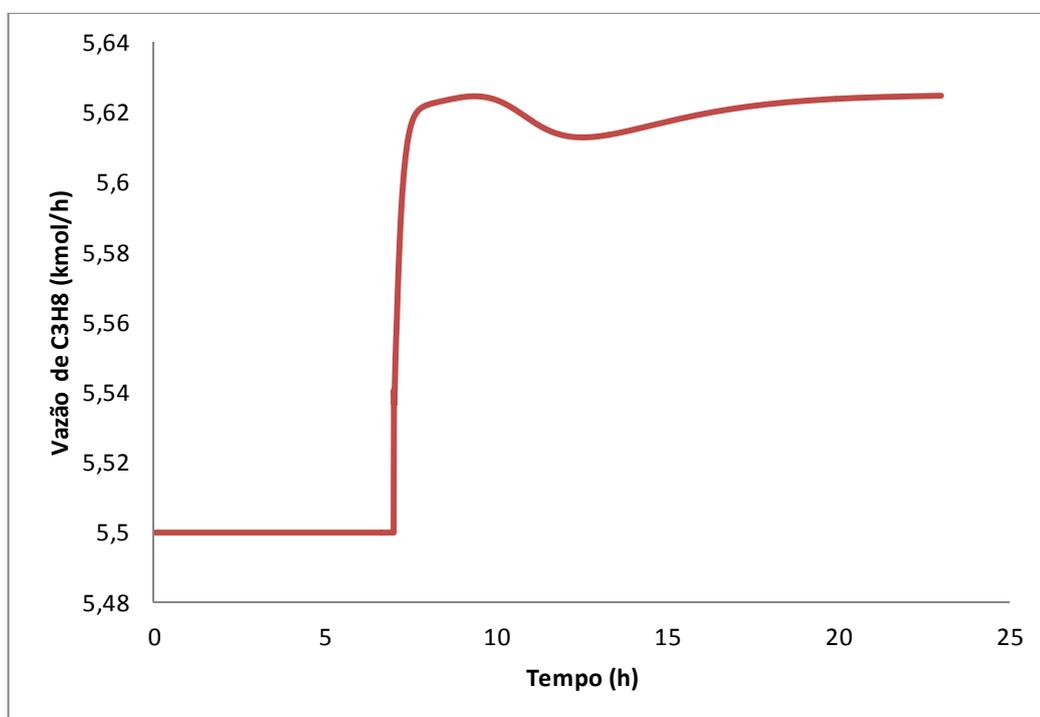


Figura 4.2: Variação da vazão de propano na corrente de gás.

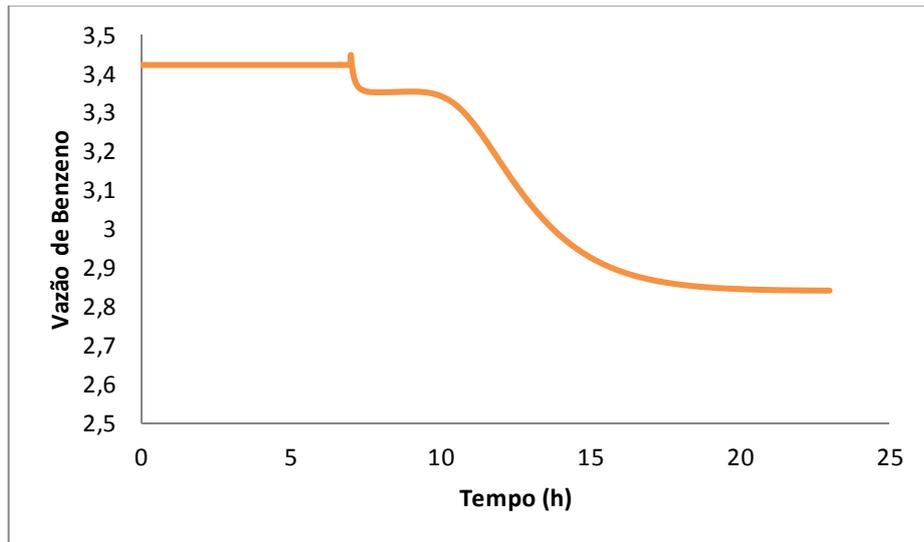


Figura 4.3: Variação da vazão de benzeno na corrente de gás.

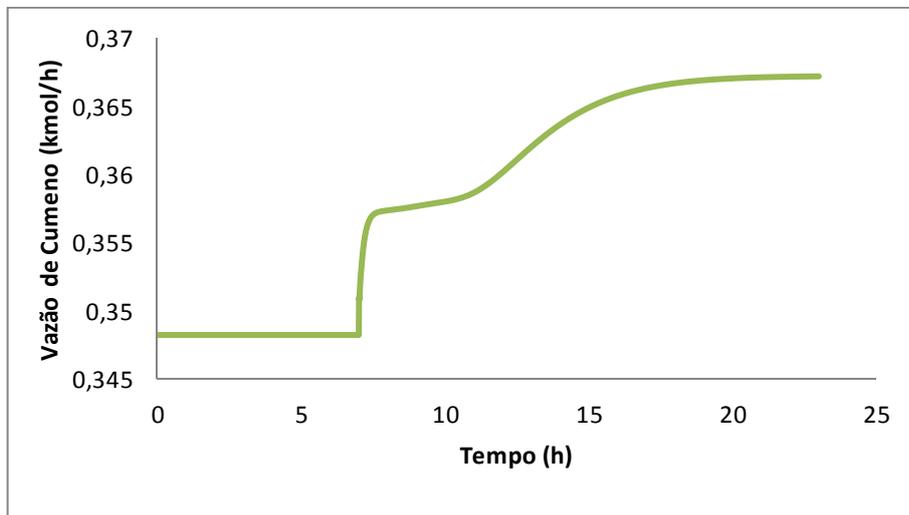


Figura 4.4: Variação da vazão de cumeno na corrente de gás.

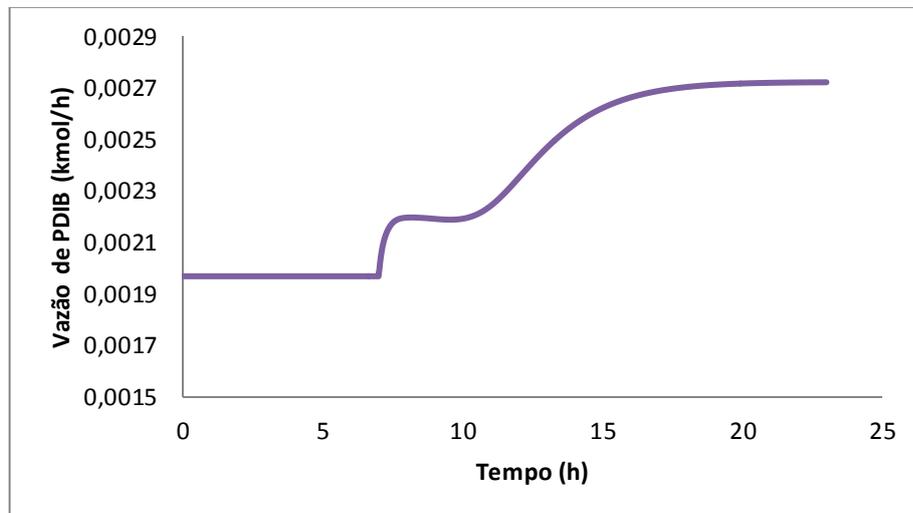


Figura 4.5: Variação da vazão de PDIB na corrente de gás.

A partir desse resultado, escolheu-se como frequência de ocorrência de distúrbios um tempo de 21h, que corresponde a 1,5 vezes o tempo de assentamento. Para isso, considerou-se o critério de oscilação menor do que 2% do valor final da função objetivo.

Posteriormente, determinou-se a política de distúrbios a ser aplicada no processo a fim de compararem-se as técnicas de otimização. A Figura 4.6 retrata a política de distúrbios empregada. O primeiro distúrbio (112,5 kmol/h de C3) foi aplicado no instante 45h, o segundo distúrbio (110 kmol/h de C3) no instante 66h, o terceiro distúrbio (107,5 kmol/h) no instante 87h e o quarto distúrbio no instante 108h.

Para o RTO, foi considerado que aplicação dos novos pontos ótimos ocorre 14h depois da ocorrência do distúrbio. Portanto, aplicaram-se os pontos ótimos, expostos na Tabela 4.1, nos instantes 59, 80, 101 e 122h. A aplicação dos novos pontos ótimos está representada pelas linhas tracejadas.

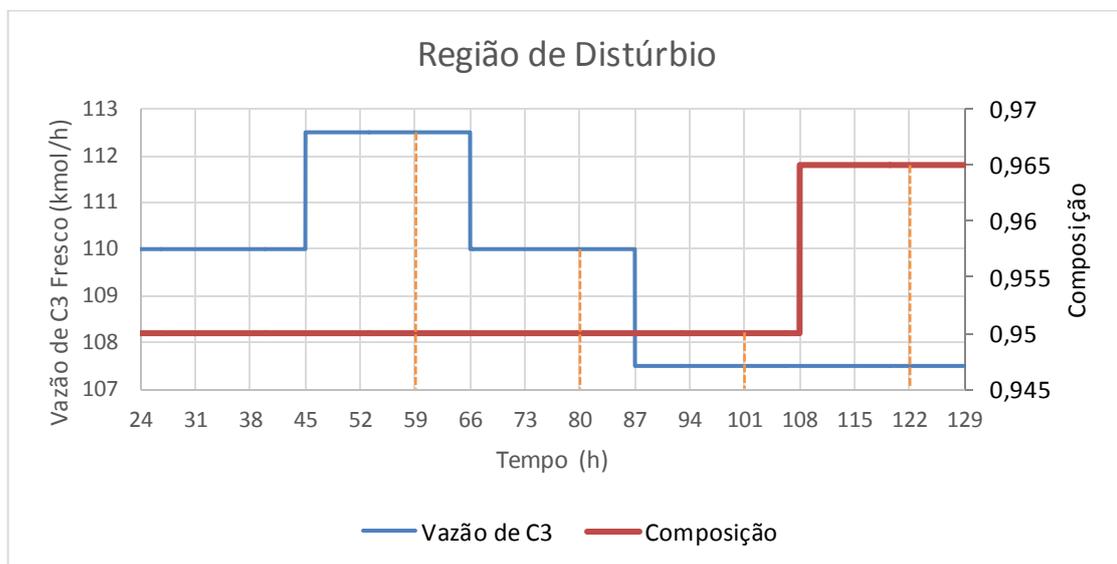


Figura 4.6: Política de distúrbio aplicada no processo.

4.6 Comparação entre as técnicas de otimização de processos

Para comparar as diferentes técnicas de otimização foi calculado o lucro médio do processo na região de distúrbio escolhida, considerando que o distúrbio se comporta como uma senóide quadrada. A curva comparativa para o caso estudado é apresentada na Figura 4.7, onde é possível observar a melhor técnica para a unidade tendo em vista a frequência com que ocorrem distúrbios na planta, assim como avaliar o ganho que cada técnica pode proporcionar ao processo.

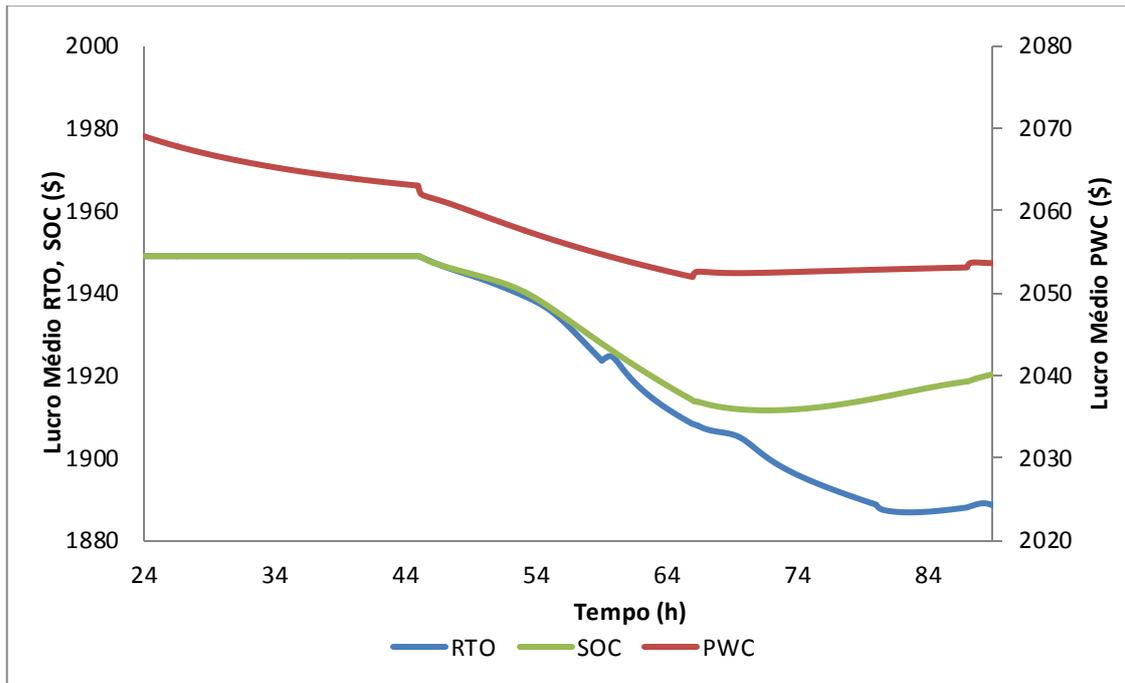


Figura 4.7: Variação do lucro operacional para a política de distúrbios aplicada na planta. (RTO: processo utilizando otimização em tempo real; PWC: processo utilizando a estrutura de controle proposta por Luyben (2010); SOC: processo utilizando controle auto-otimizável).

Contudo, o SOC apresentou um problema de controlabilidade na aplicação do terceiro distúrbio (107,5 kmol/h). Na Figura 4.8, onde PV é *Process Variable*, SP é *Setpoint* e OP é *Output*, pode-se constatar uma saturação do controlador de nível do vaso de fundo (controle de inventário). A Figura 4.9 apresenta a comparação entre o PWC e o RTO para toda a região de distúrbio.

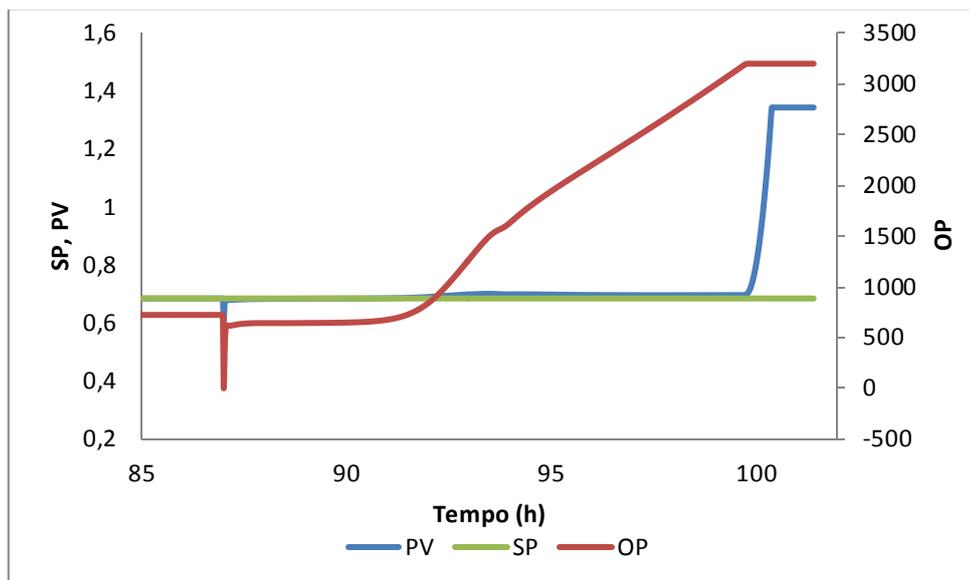


Figura 4.8: Variação do sinal enviado pelo controlador.

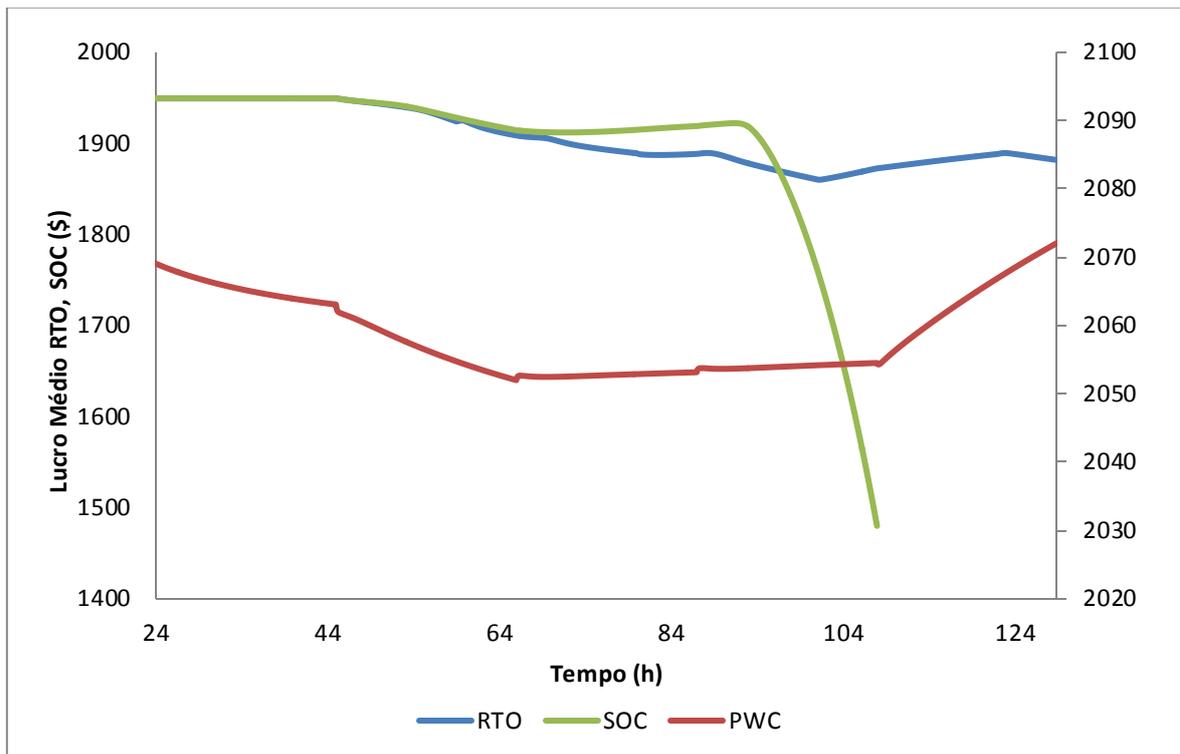


Figura 4.9: Variação do lucro operacional para toda a região de distúrbio.

Devido a tal falha, ocorre uma queda abrupta no lucro na região final, o que pode inviabilizar sua aplicação caso tal distúrbio seja frequente. Tal análise corrobora a validade do teste dinâmico, geralmente não realizado no projeto de estruturas SOC. Apesar de se obter no estado estacionário um ponto viável, devido a problemas no controle de nível, não se pode aplicar tal solução em toda a faixa de distúrbios.

Apesar disso, o comportamento do SOC em uma região mais restrita de distúrbios foi bem próxima a do RTO, justificando sua aplicação real. Entretanto, em comparação com o PWC, os resultados foram piores, mostrando a validade de tal metodologia, muitas vezes não considerada para otimização de processos.

A Tabela 4.2 apresenta uma comparação entre os lucros médios obtidos por cada uma das técnicas durante a simulação. Entre as estruturas estudadas, a que apresentou um melhor desempenho foi aquela proposta por Luyben (2010). Na região de distúrbio mais restrita, o SOC obteve um resultado melhor do que o RTO.

Tabela 4.2: Comparação entre os lucros obtidos pelas técnicas estudadas.

Técnica Estudada	Lucro Médio (\$/h)	
PWC	2058,25	2058,48
RTO	1925,09	1905,90
SOC	1932,20	—

5 Conclusões e Trabalhos Futuros

Este trabalho realizou a validação das técnicas de controle auto-otimizável, otimização em tempo real e a estratégia *plantwide control* utilizando um modelo dinâmico do processo de produção de cumeno utilizando os simuladores comerciais Aspen Plus 7.2 e Aspen Dynamics. Utilizou-se um conjunto de variáveis controladas que recentemente foi liberado para publicação em *Industrial and Engineering Chemistry Research*.

Foi realizado uma análise dos graus de liberdade para otimização, onde obteve-se cinco graus de liberdade. Foi proposto um emparelhamento das variáveis controladas obtido na literatura com os graus de liberdade para otimização do processo estudado. Foi determinado o lucro em cada um dos pontos de distúrbio estudados utilizando-se a ferramenta SQP do Aspen Plus.

A análise do desempenho de cada técnica foi realizado com base no lucro médio obtido na ocorrência de distúrbios na carga. A frequência de ocorrência do distúrbio utilizada no estudo foi de 50% maior que o tempo de assentamento da planta. Pode-se realizar a simulação com três distúrbios, além do ponto nominal do processo.

Para a região de distúrbio escolhida, a estratégia de controle presente na literatura apresentou o melhor resultado. Ao comparar-se a otimização em tempo real com o controle auto-otimizável, foi possível constatar um desempenho semelhante na ocorrência do primeiro distúrbio. Na ocorrência do segundo distúrbio, o controle auto-otimizável apresentou um resultado melhor. Foi constatada a necessidade da validação através da simulação dinâmica, pois em uma parte da região de distúrbios foram observados problemas de controle na estrutura do SOC, o que pode inviabilizar sua utilização em regiões de distúrbio mais amplas.

Para trabalhos futuros, novos distúrbios podem ser considerados, bem como a frequência com que estes ocorrem. Além disso, outras estratégias de controle já presentes na literatura podem ser comparadas as técnicas de otimização de processos.

6 Referências

ALSTAD, Vidar; SKOGESTAD, Sigurd. Null space method for selecting optimal measurement combinations as controlled variables. **Industrial & engineering chemistry research**, v. 46, n. 3, p. 846-853, 2007.

ALSTAD, Vidar; SKOGESTAD, Sigurd; HORI, Eduardo S. Optimal measurement combinations as controlled variables. **Journal of Process Control**, v. 19, n. 1, p. 138-148, 2009.

DARBY, Mark L. et al. RTO: An overview and assessment of current practice. **Journal of Process Control**, v. 21, n. 6, p. 874-884, 2011.

DE ARAÚJO, Antonio CB; GOVATSMARK, Marius; SKOGESTAD, Sigurd. Application of plantwide control to the HDA process. I—steady-state optimization and self-optimizing control. **Control engineering practice**, v. 15, n. 10, p. 1222-1237, 2007.

ENGELL, Sebastian. Feedback control for optimal process operation. **Journal of process control**, v. 17, n. 3, p. 203-219, 2007.

FRANÇOIS, Grégory; SRINIVASAN, Balasubrahmanya; BONVIN, Dominique. Use of measurements for enforcing the necessary conditions of optimality in the presence of constraints and uncertainty. **Journal of Process Control**, v. 15, n. 6, p. 701-712, 2005.

GERA, Vivek et al. Economic plantwide control of the cumene process. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 52, n. 2, p. 830-846, 2012.

HALVORSEN, Ivar J. et al. Optimal selection of controlled variables. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 42, n. 14, p. 3273-3284, 2003.

KARIWALA, Vinay; CAO, Yi; JANARDHANAN, S. Local self-optimizing control with average loss minimization. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 47, n. 4, p. 1150-1158, 2008.

KARIWALA, Vinay. Optimal measurement combination for local self-optimizing control. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 46, n. 11, p. 3629-3634, 2007.

LARSSON, Truls et al. Self-optimizing control of a large-scale plant: the Tennessee Eastman process. **Industrial & engineering chemistry research**, v. 40, n. 22, p. 4889-4901, 2001.

LUYBEN, William L. Design and control of the cumene process. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 49, n. 2, p. 719-734, 2009.

MORARI, Manfred; ARKUN, Yaman; STEPHANOPOULOS, George. Studies in the synthesis of control structures for chemical processes: Part I: Formulation of the problem. Process decomposition and the classification of the control tasks. Analysis of the optimizing control structures. **AIChE Journal**, v. 26, n. 2, p. 220-232, 1980.

SARAMAGO, Simone Pereira; STEFFEN JR, Valder. Introdução às técnicas de otimização em engenharia. **Horizonte científico**, v. 2, n. 2, 2008.

SEQUEIRA, Sebastián Eloy; GRAELLS, Moisés; PUIGJANER, Luis. Real-time evolution for on-line optimization of continuous processes. **Industrial & engineering chemistry research**, v. 41, n. 7, p. 1815-1825, 2002.

SCHULTZ, Eduardo dos Santos. A importância do ponto de operação nas técnicas de self-optimizing control. 2015. 128 f. Tese (Mestrado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre. 2015.

SCHULTZ, Eduardo dos Santos; TRIERWEILER, Jorge Otávio; FARENZENA, Marcelo. The importance of nominal operating point selection in Self-Optimizing Control. Aceito para publicação em **Industrial & engineering chemistry research**.

SKOGESTAD, Sigurd. Plantwide control: the search for the self-optimizing control structure. **Journal of process control**, v. 10, n. 5, p. 487-507, 2000.