

Proposta de uma rota de produção de etileno glicol através da comunicação entre os softwares Scilab e COCO⁽¹⁾

Proposal of ethylene glycol production route through communication between softwares Scilab and COCO

Caio Cesar Lino Menezes⁽²⁾; Davi Leonardo de Souza⁽³⁾

⁽²⁾Estudante; Universidade Federal do Triângulo Mineiro; Uberaba; Minas Gerais; cesarcl.550@gmail.com;

⁽³⁾Professor; Universidade Federal do Triângulo Mineiro; Uberaba; Minas Gerais; davi.ufm@gmail.com;

RESUMO: Na engenharia química, um dos ramos de grande importância, e que cada vez mais vem adquirindo espaço, é a simulação de processos químicos. Aliado a esse crescimento, o desenvolvimento de novas ferramentas computacionais utilizadas para tal finalidade. Nesse contexto, este estudo teve como objetivo principal propôr uma rota para o processo de produção do etileno glicol por meio da comunicação entre os softwares Scilab e COCO. Realizou-se também um estudo para a implementação de um controlador do tipo proporcional e integral (PI), que teve como finalidade aumentar o rendimento da reação de produção de etileno glicol através da manipulação da concentração inicial de óxido de etileno (C_{Ae}). Com a manipulação da C_{Ae} , teve-se o propósito de controlar a concentração de óxido de etileno (C_A), fazendo com que ela atingisse e se mantivesse na faixa de 100 mol/m³ para que a conversão final da reação fosse de 98%. Com o término deste estudo, chegou-se ao êxito na comunicação entre os softwares e na conversão final desejada da reação de produção de etileno glicol.

Palavras-chave: Comunicação entre softwares, controle de processos químicos, etileno glicol, simulação.

ABSTRACT: In chemical engineering, a branch of great importance and that increasingly is acquiring space is the simulation of chemical processes. Allied to this growth has been the development of new computational tools used for this purpose. In this context, this paper aims to propose a route to the ethylene glycol production process through communication of Scilab and COCO softwares. We also conducted a study for the implementation of a proportional and integral type controller (PI), which will aim to increase the yield of ethylene glycol production reaction by manipulating the initial concentration of ethylene oxide (C_{Ae}). With the manipulation of C_{Ae} it was taken the purpose of controlling the concentration of ethylene oxide (C_A), causing it reached and maintained in the range of 100 mol/m³ so that the final conversion of the reaction was 98%. With the completion of this study, we came to the successful communication between the software and the desired final conversion of ethylene glycol production reaction.

Keywords: Communication between softwares, control of chemical processes, ethylene glycol, simulation.

INTRODUÇÃO

A simulação de processos químicos é um ramo novo dentro da engenharia química e que, cada vez mais, vem aumentando a sua importância. De acordo com Garcia (2005), esta conquista cada vez mais sua popularidade à medida que o tempo passa. Por meio da simulação de processos químicos é possível criar novas rotas de produção para diversos produtos, melhorar processos já existentes em termos de eficiência energética e reacional, e funciona também como uma ferramenta didática.

Este seguimento da engenharia química apresenta alguns empecilhos para o seu andamento e por isso é necessário a coleta de dados, principalmente, cinéticos e termodinâmicos. Caso estes dados não se encontrem disponíveis na literatura, é preciso aliar-se a práticas laboratoriais que irão auxiliar na coleta dos dados para o processo simulatório. Como citado anteriormente, um dos objetivos da simulação de processos

químicos é como ferramenta para o aperfeiçoamento de processos químicos já existentes no meio industrial e aliado a isso existem vários tipos de processos químicos que requerem algum tipo de melhoria. Um processo químico de muita importância no meio industrial é a produção de etileno glicol. Este é uma substância química que é utilizada para potencializar outros tipos de processos químicos industriais, como no caso da extração de solventes e na refrigeração industrial, e também pode ser utilizado como matéria-prima para a produção de outros produtos como poliésteres e materiais explosivos.

Este estudo visa abordar a simulação de processos químicos com a justificativa do desafio de criar uma proposição de uma rota para o processo de produção do etileno glicol por intermédio da comunicação das ferramentas computacionais Scilab e COCO. Aliado a estas duas ferramentas computacionais, foi feito um estudo para a implementação de um controlador do tipo proporcional e integral (PI), que teve como

finalidade aumentar o rendimento da reação de produção de etileno glicol através da manipulação da concentração de óxido de etileno (C_{Ae}) na entrada do reator CSTR (*Continuous Stirred-Tank Reactor*). Com a manipulação da C_{Ae} , teve-se o propósito de controlar a concentração de óxido de etileno na saída do reator CSTR (C_A), fazendo com que ela atingisse e se mantivesse na faixa de 100 mol/ m³ para que a conversão final da reação fosse de 98%.

PRODUÇÃO DE ETILENO GLICOL

O etileno glicol é uma substância química que foi sintetizada pela primeira vez em 1859 com o processo de hidrólise do diacetato de etileno glicol pelo químico francês Charles-Adolphe Wurtz. Hoje em dia, ele é utilizado como matéria-prima para a fabricação de produtos químicos de grande importância industrial, na construção civil, no cotidiano das pessoas, dentre outros. O etileno glicol é uma substância que, na sua forma pura, possui as características de ser um líquido límpido, incolor, com um sabor levemente adocicado, de textura ligeiramente viscosa e de considerável toxicidade, pois se ingerido ele pode danificar os rins, o coração e o sistema nervoso (SIEMENS, 2015). Segundo Portantinho (2013), o etileno glicol pode ser utilizado para as seguintes funções:

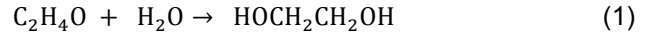
- 1) para a produção de poliésteres como fibras e fios através de sua reação com ácidos dibásicos e seus ésteres como os ácidos tereftálico e oxálico;
- 2) como agente umectante para a pele humana, ou plastificante;
- 3) como um material explosivo substituindo, limitadamente, o uso da glicerina para a confecção da nitroglicerina;
- 4) extração de solventes em processos cuja finalidade seja a separação de produtos aromáticos e parafínicos;
- 5) como um anticongelante na refrigeração industrial e no sistema de arrefecimento de veículos automotores.

O etileno glicol adquiriu sua importância comercial apenas com o surgimento da Primeira Guerra Mundial quando foi utilizado, na Alemanha, como matéria-prima para a produção de materiais explosivos. Recentemente, de acordo com Martins e Cardoso (2005), a necessidade de sua produção anual é de 14 milhões de toneladas e vem aumentando em torno de 3% ao ano. O país que mais o produz são os EUA com uma produção anual de aproximadamente 4 milhões de toneladas. Já o Brasil se destaca, em toda a América Latina, com a produção de 312.000 toneladas.

A reação convencional de etileno glicol é realizada através da síntese do óxido de etileno com

a água de acordo com a Equação 1 (ROCHA, 2010). Ao longo deste estudo serão utilizadas novas nomenclaturas para representar o óxido de etileno (A), a água (B) e o etileno glicol (C). A Equação 2 ilustra esta substituição dos nomes destas três substâncias pelas suas respectivas representações.

Equação convencional de síntese de etileno glicol:



O principal empecilho no andamento da reação de produção de etileno glicol é o manuseio e estocagem do óxido de etileno, pois este é um composto altamente reativo quando em contato com o gás oxigênio. Em contrapartida, o etileno glicol, em condições normais de armazenamento, não necessita de cuidados especiais, pois não apresenta riscos de explosão, polimerização ou incêndio (OXITENO).

Existem vários tipos de plantas industriais que demonstram as diversas maneiras de se produzir o etileno glicol. Essas plantas, no papel, são representadas por flechas que representam as correntes de passagem de material e por símbolos que representam equipamentos como bombas, reatores e válvulas. O conjunto das flechas com os símbolos citados anteriormente dá-se o nome de fluxograma de processo químico. A representação de uma planta padrão que é utilizada na produção de etileno glicol, por meio de um fluxograma e de acordo com Martins e Cardoso (2005), está representada pela Figura 1.

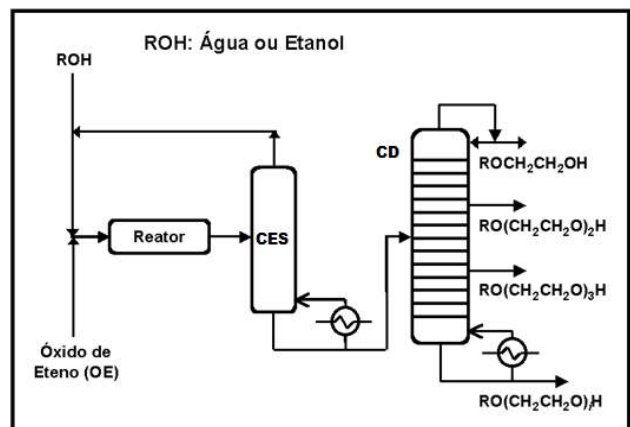


Figura 1. Fluxograma da planta de produção de etileno glicol segundo Martins e Cardoso

Neste modelo de planta ilustrado anteriormente, uma mistura de óxido de etileno e do reagente ROH (água ou etanol) é pré-aquecida a aproximadamente

200 °C antes de entrar no reator do tipo tubular. Após o término do processo reacional no reator, os produtos obtidos irão para uma coluna de expansão súbita (CES) e, posteriormente, para uma coluna de destilação (CD) cujo objetivo é a separação das substâncias. A coluna de expansão súbita possui um produto de topo que será recirculado para o reator e um produto de fundo que será enviado à coluna de destilação. Ao término do processo de separação pela coluna de destilação sairão alguns produtos, dentre eles, o etileno glicol no topo (destilado) da coluna.

Outro modelo de planta industrial de produção de etileno glicol é a desenvolvida por Pereira e Mori (2014), adaptado de Rangaiah e Kariwala (2012), que também expressa o processo reacional e de separação do etileno glicol e está representado pelo fluxograma da Figura 2. Nesta planta, o reator CSTR recebe duas correntes de alimentação, uma contendo o óxido de etileno e a outra contendo água e reciclo oriundo do estágio final de separação da coluna de destilação. Após a reação se processar no reator CSTR, o líquido saturado entra na coluna de destilação onde serão separados o etileno glicol, que sairá no topo, das demais substâncias.

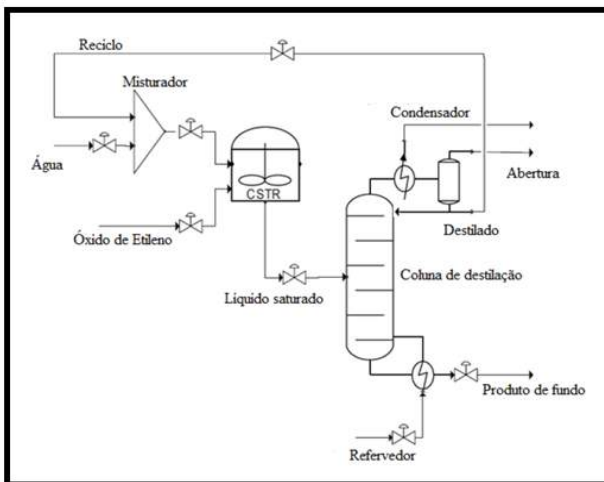


Figura 2. Fluxograma da produção de etileno glicol segundo Pereira e Mori

De acordo com a Siemens (2015), as plantas industriais de produção de etileno glicol mais sofisticadas contam com a integração das unidades de produção de óxido de etileno e de etileno glicol. Com isso, há um aumento significativo na economia dos serviços públicos como no tratamento de efluentes que serão descartados, bem como a recuperação dos produtos que possuem um grau de importância inferior ao etileno glicol. A representação da planta de produção do etileno glicol, de acordo com a Siemens, está ilustrada pelo fluxograma da Figura 3.

Neste último exemplo, o óxido de etileno é enviado ao reator para ocorrer a sua reação com a água na proporção de 1:10. A finalidade deste

excesso de água é para reduzir a formação de produtos secundários, pois ocorrem algumas reações em paralelo com a de síntese de etileno glicol. Finalizada a etapa reacional, alguns glicóis superiores são produzidos, simultaneamente, com o etileno glicol como o dietileno glicol e o trietileno glicol. Estes produtos são enviados aos evaporadores com o objetivo de se extrair o excesso de água e, posteriormente, enviados aos fracionadores que realizarão a separação dos glicóis obtidos na etapa reacional do processo (SIEMENS, 2015).

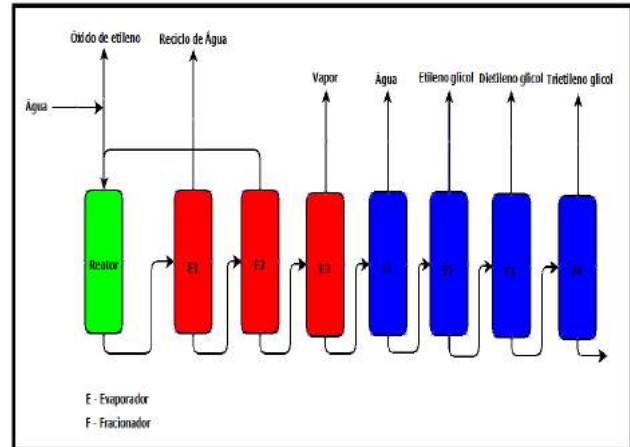


Figura 3. Fluxograma da planta de produção de etileno glicol da Siemens

MODELAGEM MATEMÁTICA

Segundo Bequette (1998), um modelo matemático é uma relação matemática que exprime fenômenos como conservação de massa, conservação de energia, reações químicas, transporte de materiais e termodinâmicos. Na elaboração dos algoritmos que foram inseridos nos softwares para as simulações envolvendo a produção de etileno glicol, foi necessário utilizar modelos matemáticos que representaram o comportamento das concentrações das substâncias envolvidas no processo reacional com o tempo. O conjunto dessas equações matemáticas irá representar o funcionamento do reator CSTR que estará em regime estacionário e, posteriormente, dinâmico após a implementação do controlador PI.

Como representar o comportamento do andamento de uma reação química e sua posterior conversão não é uma tarefa simples, algumas considerações foram realizadas a fim de se obter, simultaneamente, modelos simples e eficazes. Para tal realização, foram considerados o volume do reator CSTR (V) constante, reação do tipo elementar, dependência da concentração de água na equação da taxa reacional segundo sugestão do Fogler (2009), processo reacional seguindo a cinética de Arrhenius e, massas e calores específicos dos componentes, separadamente,

iguais e constantes. As equações do balanço material realizado para os componentes A, B e C junto com o termo que representa a taxa reacional de óxido de etileno (R_A) e a equação que exprime a constante de velocidade (k) na temperatura (T) de entrada do reator CSTR, respectivamente, estão representadas a seguir:

Modelo do balanço material para o óxido de etileno:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F_e}{V} (C_{Ae} - C_A) - R_A \quad (3)$$

Onde F_e é a vazão volumétrica de entrada no reator CSTR.

Modelo do balanço material para a água:

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{F_e}{V} (C_{Be} - C_B) - R_A \quad (4)$$

Em que C_B é a concentração de água ao longo do tempo t e C_{Be} a concentração inicial de água.

Modelo do balanço material para o etileno glicol:

$$\frac{dC_C}{dt} = - \frac{F_e \cdot C_C}{V} + R_A \quad (5)$$

Onde C_C é a concentração de etileno glicol ao longo do tempo t .

Equação da taxa reacional de óxido de etileno:

$$R_A = k \cdot C_A \cdot C_B \quad (6)$$

Equação da constante de velocidade da reação:

$$k = k_0 \cdot e^{\left(\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T}\right)\right)} \quad (7)$$

Em que o termo T_{ref} , na Equação 7, indica uma temperatura de referência que se tenha o valor de k_0 e E_a a energia de ativação da reação de síntese de etileno glicol.

SIMULADOR COCO

O COCO é uma ferramenta computacional que auxilia na simulação de processos químicos. No COCO, é importante destacar suas quatro principais ferramentas: COFE, TEA, COSCOUS e CORN. Estas serão comentadas a seguir:

- 1) COFE: É a parte responsável pela criação dos fluxogramas e é nela onde ocorre a simulação;
- 2) TEA: É a parte onde se cria o pacote termodinâmico que será utilizado na simulação;
- 3) COSCOUS: É a parte onde fornece os equipamentos (como por exemplo misturador, reator, coluna de destilação, flash, entre outros) que serão utilizados na simulação;
- 4) CORN: É a parte onde fornece o pacote de reação que, dependendo do processo, pode ou não ser utilizado.

Com essas ferramentas listadas anteriormente, pode-se desenvolver uma vasta gama de processos químicos industriais. O COCO é um *software* livre, gratuito e que opera em estado estacionário, ou seja, as propriedades são inalteradas com o tempo.

SCILAB

O Scilab é um poderoso *software* livre que serve como ferramenta para profissionais de engenharia e cientistas, principalmente, para o cálculo numérico. Suas principais funções são:

- 1) elaboração de algoritmos;
- 2) realização de cálculos matemáticos;
- 3) construção de gráficos nas formas 2D e 3D;
- 4) modelagem e simulação de dados.

Na elaboração de algoritmos, o Scilab possui algumas funções prontas para a realização dos cálculos e outras oriundas de linguagens de programação convencionais como Pascal, C/C++, FORTRAN, etc.

MATERIAL E MÉTODOS

Antes de iniciar a simulação da produção de etileno glicol foi necessária a instalação dos *softwares* COCO e Scilab e do *plug-in*, que desempenhou a função de comunicar os *softwares*. As instalações dos dois *softwares* e do *plug-in* serão comentadas a seguir.

Primeiramente, instalou-se o Scilab que desempenhou a função de programar os algoritmos. A versão do Scilab que foi utilizada neste estudo é a 5.2.2. Já a versão do COCO utilizada foi a 3.00, não havendo nenhum problema na ordem de instalação entre os dois *softwares*. No Scilab, a ferramenta utilizada foi o SciNotes no qual o seu acesso está representado pela Figura 4. É nesta ferramenta em que foram elaborados e compilados os algoritmos.

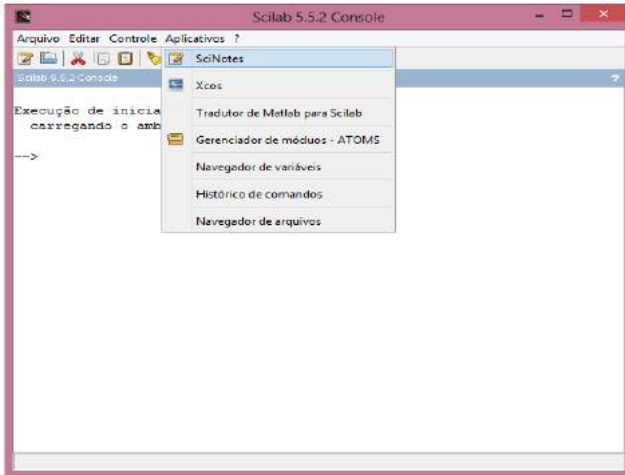


Figura 4. Representação do acesso à ferramenta SciNotes

Acessada a ferramenta SciNotes, aparecerá a tela ilustrada pela Figura 5. Ao término da programação dos algoritmos, foi necessária a compilação destes para a obtenção dos resultados. Para obter a compilação dos algoritmos foi preciso clicar no ícone representado na Figura 6.

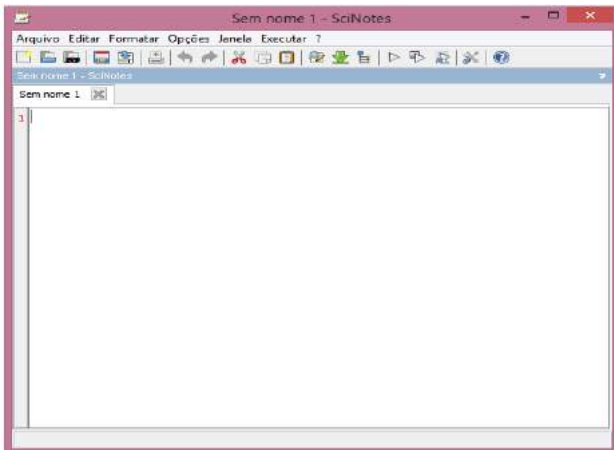


Figura 5. Ambiente de programação do SciNotes

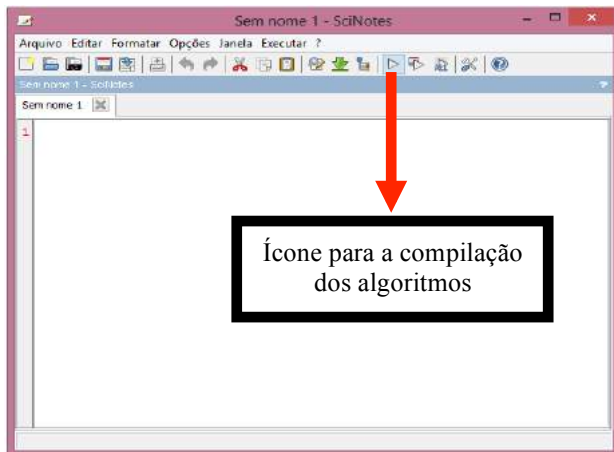


Figura 6. Ícone para a compilação dos algoritmos

Os parâmetros termodinâmicos e as condições de entrada no reator CSTR utilizados nos algoritmos que foram elaborados no Scilab estão listados na Tabela 1. Os parâmetros termodinâmicos como E_a e R foram retirados da literatura (FOGLER, 2009 e SMITH, VAN NESS e ABBOTT, 2007). Já as condições de entrada como F_e , V , C_{Ae} e C_{Be} são dados que foram arbitrados. A temperatura T foi escolhida pela simulação prévia no COCO e é uma temperatura limite antes do surgimento de uma mistura bifásica. Os dados mencionados anteriormente foram adotados no SI.

Tabela 1. Parâmetros termodinâmicos e condições de entrada no reator CSTR

Parâmetro	Valor	Unidade
F_e	0,002	m^3/s
V	10	m^3
T	284,5	K
E_a	52335	J/mol
R	8,314	J/mol.K
C_{Ae}	5000	mol/ m^3
C_{Be}	5000	mol/ m^3

Realizada a etapa anterior no Scilab, instalou-se o software COCO. Ao término da instalação do COCO, acessou-se o ambiente inicial como COFE e, posteriormente, surgiu a tela inicial, representada pela Figura 7, na qual se desenvolveu o fluxograma do processo.

Para se ter acesso à criação do pacote termodinâmico do COCO (TEA) que foi utilizado, é necessário, primeiramente, acessar a aba *Flowsheet* e, posteriormente, a opção *Configure* como o ilustrado na Figura 8.

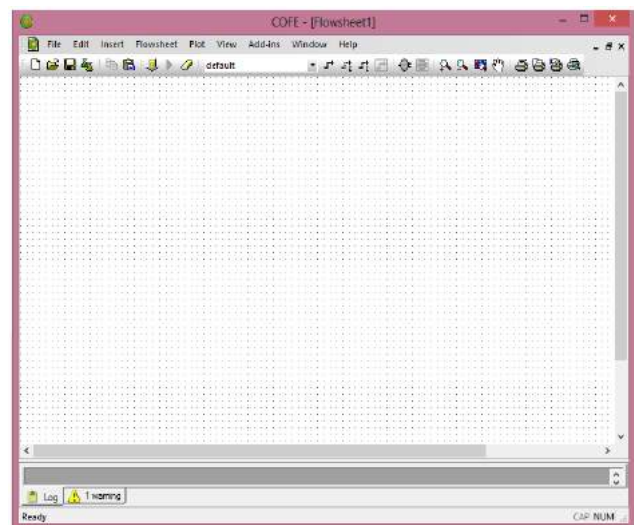


Figura 7. Ambiente inicial do COCO (COFE)

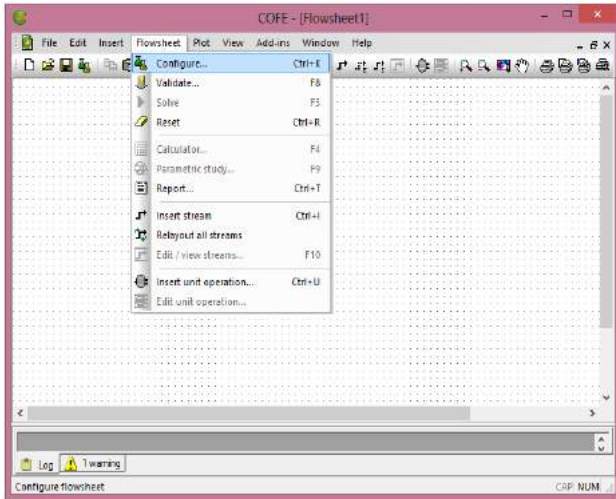


Figura 8. Acesso ao pacote termodinâmico do COCO (TEA)

Com isso, surgirá uma nova janela chamada *Flowsheet configuration*, representada pela Figura 9, a qual contém algumas opções de configuração para o processo simulatório. Como o objetivo foi montar o pacote termodinâmico, foi necessário selecionar a aba *Property packages* e clicar na opção *Add* que fica ao lado direito da janela.

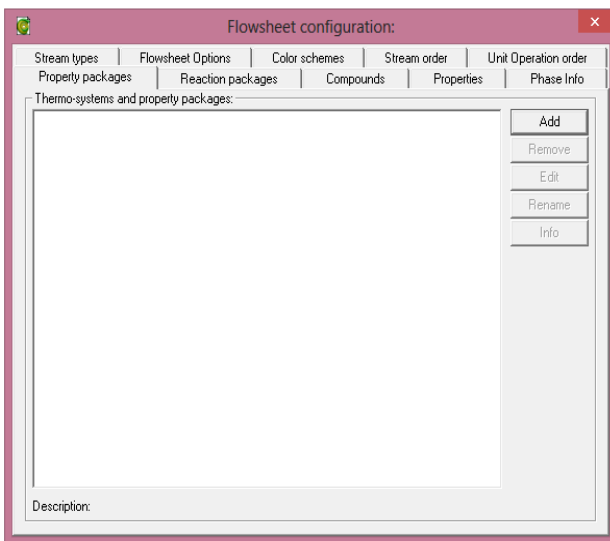


Figura 9. Janela *Flowsheet configuration*

Realizados os passos mencionados anteriormente, surgirá a janela *Select Package or Package Manager*, ilustrada pela Figura 10, a qual dará a opção de escolher um pacote termodinâmico pronto ou de criar um novo pacote. Como para este estudo foi necessário criar um novo pacote termodinâmico, foi necessário selecionar a opção *TEA (CAPE 1.1)* e clicar na opção *Select* que está localizada no canto inferior da janela.

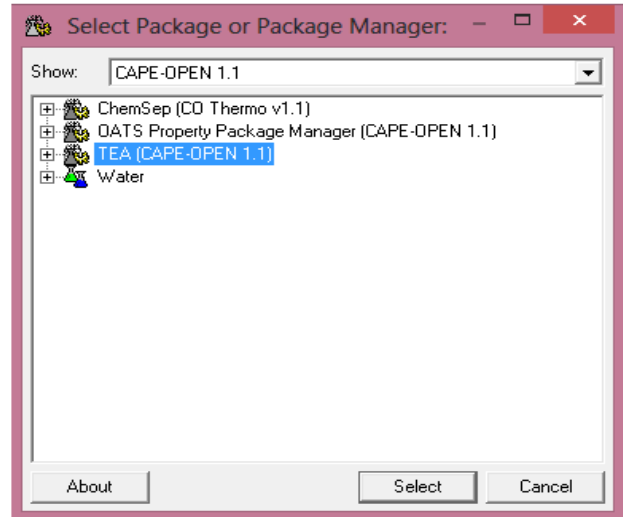


Figura 10. Janela *Select Package or Package Manager*

Ao clicar na opção *Select*, surgirá uma janela chamada *Property package from TEA Property Package Manager*, representada pela Figura 11. Nesta janela clicou-se na opção *New*, localizada no lado direito da janela, para surgir uma nova janela chamada *Property package definition*, que está ilustrada na Figura 12, na qual foram preenchidos os seguintes campos: *Name*, *Description*, *Model set* e *Compounds*.

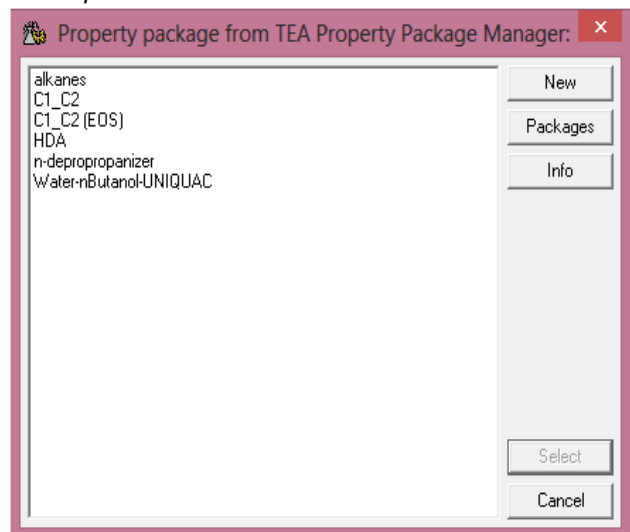


Figura 11. Janela *Property package from TEA Property Package Manager*

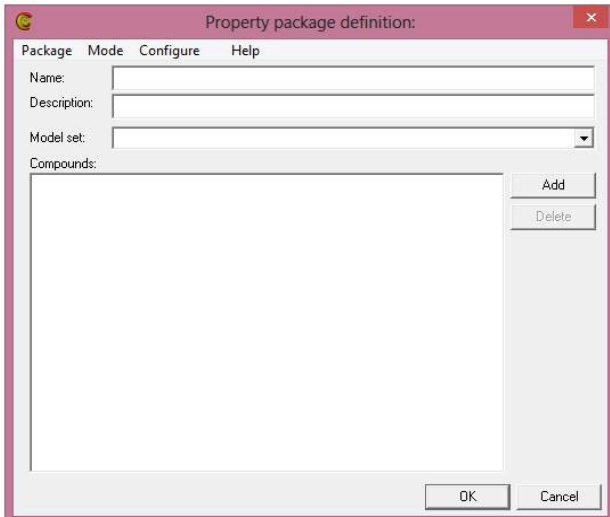


Figura 12. Janela *Property package definition*

O campo *Name* serve para dar nome ao pacote termodinâmico, o *Description* para acrescentar alguma descrição ou observação, o *Model set* para escolher qual equação de estado irá se utilizar para a realização dos cálculos e, por fim, o campo *Compounds* serve para se inserir todos os elementos ou compostos químicos que participarão do processo simulatório.

A representação de como foram preenchidos os três primeiros campos da janela *Property package definition*, para este estudo, estão representados na Figura 13.

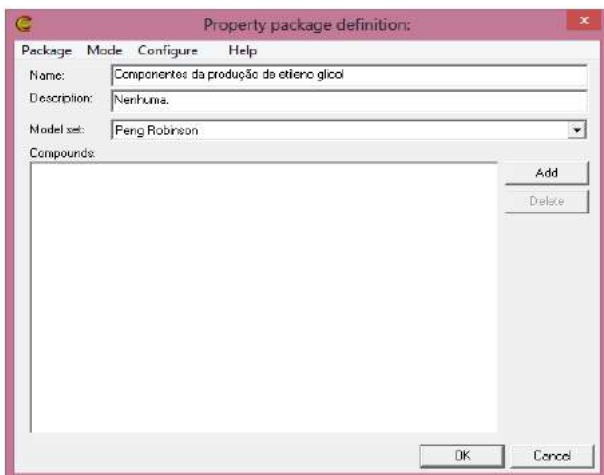


Figura 13. Campos *Name*, *Description* e *Model set* preenchidos

Para preencher o campo *Compounds*, primeiramente, foi necessário clicar no botão *Add*, localizado ao lado direito da janela. Ao realizar este procedimento, surgirá a janela *Add components*, ilustrada pela Figura 14, que contém uma lista com vários elementos e compostos químicos com as suas respectivas fórmulas moleculares, nomes, pesos molares, CAS (número de registro), e seus nomes padrão. É importante ressaltar que os nomes dos elementos ou compostos químicos estão todos

em inglês, sendo assim, para se identificar e selecionar cada um, foi necessário inserir o nome de cada componente no campo *Filter by* e, depois de encontrado, clicar na opção *OK*, localizada no canto inferior da janela. No caso desta simulação, os componentes que foram utilizados são: *Ethylene oxide* (óxido de etileno), *Water* (água) e *Ethylene glycol* (etileno glicol).

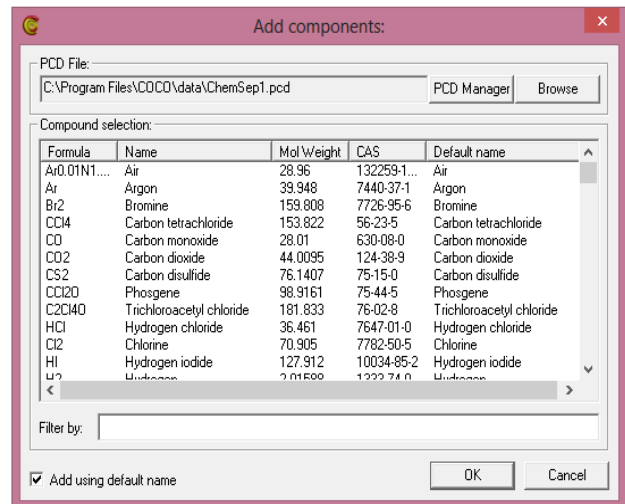


Figura 14. Janela *Add componentes*

Ao término da seleção de todos os componentes, a janela *Property package definition* ficou preenchida como mostra a Figura 15. Para finalizar este procedimento, clicou-se na opção *OK*, localizada no canto inferior da janela.

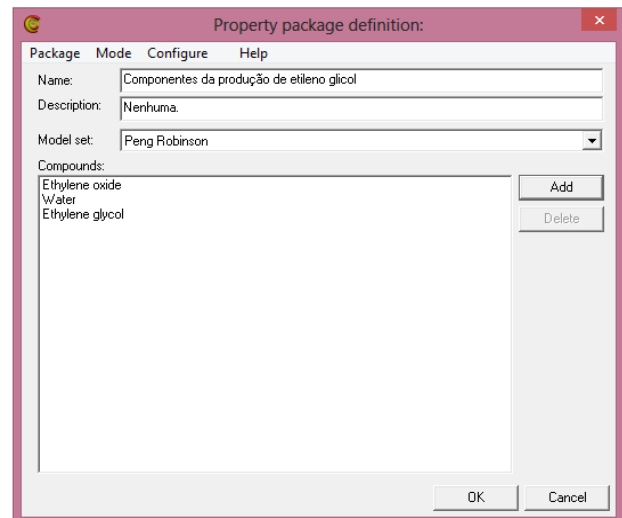


Figura 15. Janela *Property package definition* preenchida

A próxima ferramenta do COCO a ser abordada é a COSCOUS. Para tal abordagem, na tela do ambiente inicial do COCO (COFE), selecionou-se a aba *Flowsheet* e escolheu-se a opção *Insert unit operation*, como o representado na Figura 16.

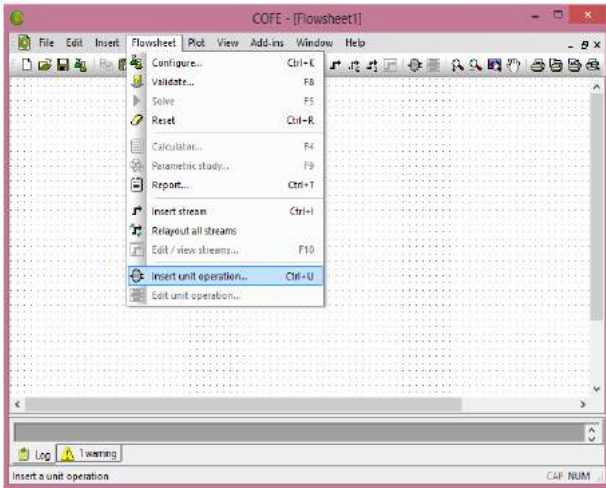


Figura 16. Acesso ao COSCOUS

Depois de ter selecionada a opção citada anteriormente, surgirá a seguinte janela chamada *Select Unit Operation*, representada pela Figura 17, na qual foram selecionados os equipamentos utilizados para a elaboração do fluxograma de produção de etileno glicol. Neste caso, os equipamentos utilizados foram um reator do tipo CSTR, uma *Pump* (Bomba), um *HeaterCooler* (Trocador de Calor) e um *Flash*. O CSTR, que foi o equipamento onde foram introduzidos os algoritmos para o processo simulatório e que será abordado posteriormente, é um reator que opera de forma contínua, ou seja, a vazão de entrada é igual a vazão de saída. A Bomba foi acessada pela opção *Pumps & Compressors* e teve a função de aumentar o fluxo de líquido através do aumento de pressão no recalque. O Trocador de Calor foi acessado pela opção *Heaters, Coolers & Heat exchangers* e é um tipo de trocador de calor que funciona tanto para aquecimento quanto para resfriamento do produto oriundo do CSTR, no caso desta simulação, ele funcionou como um aquecedor. E por fim, o *Flash* foi acessado pela opção *Separators* e é um equipamento que foi utilizado com a finalidade de separar, em forma de ELV, a mistura oriunda do reator CSTR.

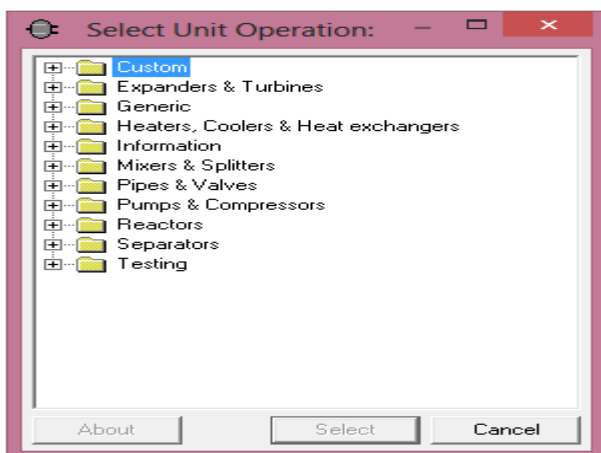


Figura 17. Janela *Select Unit Operation*

Como a reação de síntese de etileno glicol foi elaborada e compilada no Scilab, neste estudo não utilizou-se a ferramenta CORN, pois a reação foi introduzida diretamente nos algoritmos.

Feitos os procedimentos anteriores para a familiarização com os dois *softwares*, já é possível instalar o *plug-in* que, como dito anteriormente, foi a ferramenta que realizou a comunicação entre estes dois softwares.

Para a instalação do *plug-in*, acessou-se o link <http://www.amsterchem.com/scilabunitop.html> e, posteriormente clicou-se na opção *downloads*, localizada no lado esquerdo da página acessada. Feito isso, escolheu-se a opção *ScilabCapeUnitOperation* contida no tópico *Scilab CAPE-OPEN*. É importante mencionar que, periodicamente, estas ferramentas sofrem atualizações e, conseqüentemente, a versão encontrada pode ser diferente da utilizada neste estudo que foi a versão *ScilabCapeUnitOperation.2.0.0.2*. Realizados os passos anteriores, foi baixado e instalado o *plug-in*. Depois de instalado o *plug-in*, será fornecida uma licença provisória para avaliação pela AmsterCHEM, detentora dos direitos autorais desta ferramenta.

Caso se queira obter uma licença permanente, deve-se, na mesma página citada anteriormente, clicar na opção *Request non-commercial license*, localizada dentro do tópico *Availability*. Com isso, abrirá uma nova tela onde devem ser preenchidos os campos, representados pela Figura 18, para a solicitação da licença permanente do *plug-in*.

 A screenshot of a web form titled 'Non-commercial Scilab CAPE-OPEN Unit Operation license request:'. The form has a light blue background and contains the following fields: 'name:', 'e-mail:', 'affiliation:', 'purpose:', and 'comments:'. The 'purpose:' field has a dropdown menu with the text '<Please select a registration type>'. Below the form is a green button labeled 'Request license'.

Figura 18. Campos de preenchimento para a licença permanente do *plug-in*

Com a elaboração dos algoritmos no Scilab, o conhecimento das principais ferramentas do COCO e a instalação do *plug-in*, foi possível ter as informações e ferramentas necessárias para a elaboração do fluxograma da produção de etileno glicol no COCO representado pela Figura 28. É importante ressaltar que este fluxograma que foi desenvolvido teve o objetivo de ser uma proposta de uma rota na produção de etileno glicol e tem o cunho experimental.

Para dar início à elaboração do fluxograma da produção de etileno glicol, primeiramente, foi

preciso conhecer como inserir uma corrente para a passagem de material. Para isso, é necessário clicar no ícone representado na Figura 19 para, posteriormente, surgir uma flecha contínua que representa esta passagem de material. Ela está ilustrada pela Figura 20.

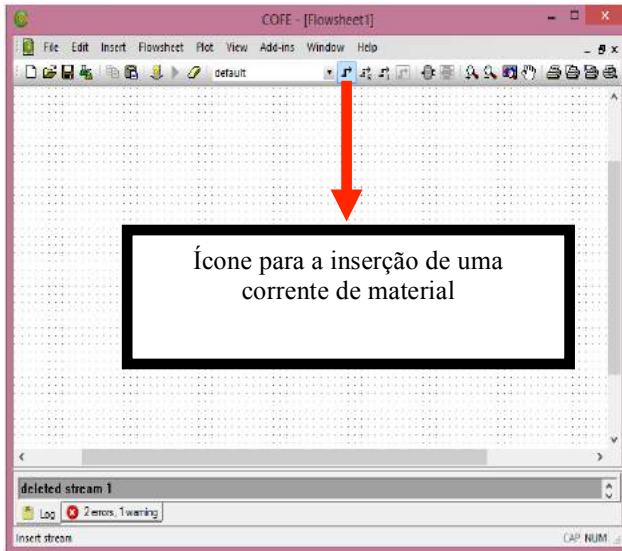


Figura 19. Ícone de inserção de uma corrente de material

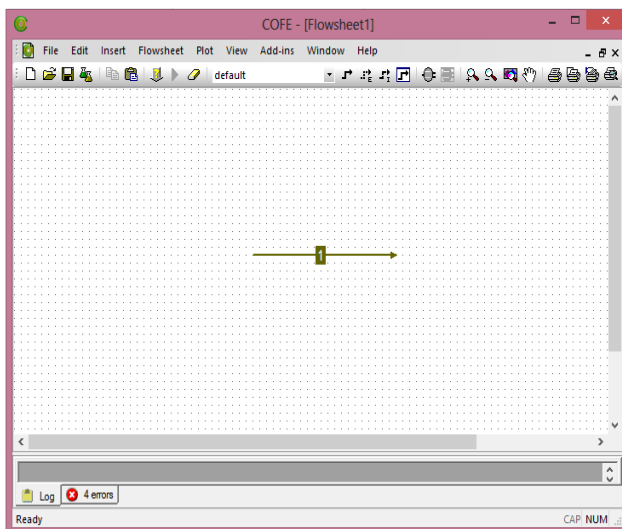


Figura 20. Ilustração da corrente de material

Ao inserir uma corrente de material, é necessário preenchê-la com parâmetros de entrada como pressão, temperatura, frações molares dos componentes e a vazão de entrada nos campos ilustrados pela Figura 21. No caso deste estudo, foram necessárias 6 correntes de material para o processo simulatório. Estas estão nomeadas de 1 a 6. É importante mencionar que apenas a corrente de material 1 foi preenchida com os valores requisitados, pois as demais correntes retiraram suas informações dos processos anteriores.

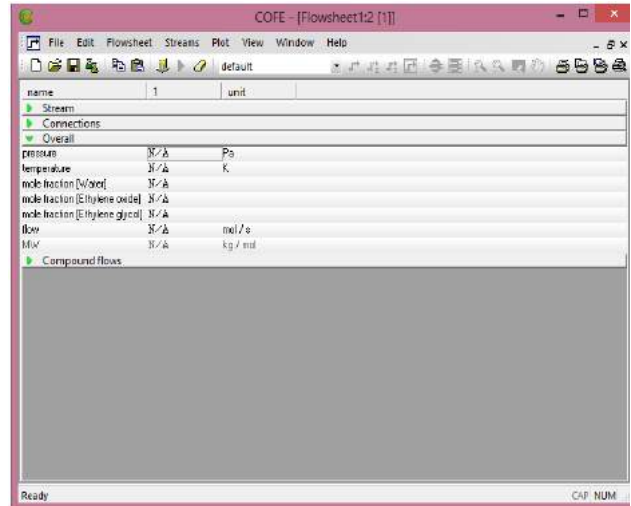


Figura 21. Campos de preenchimento dos parâmetros de entrada

Os parâmetros termodinâmicos e de entrada utilizados na corrente de material 1 do COCO, nas simulações sem e com o auxílio do controlador PI, estão ilustrados na Tabela 2. A T foi escolhida da mesma maneira que no Scilab com a realização de um tratamento prévio, ou seja, foi a temperatura limite antes do surgimento de uma mistura bifásica. A pressão de operação do reator CSTR (P) foi utilizada a ambiente e os outros parâmetros como fração molar de óxido de etileno (FM_A), fração molar de água (FM_B), fração molar de etileno glicol (FM_C) e vazão molar de entrada no reator CSTR (f_m) foram adaptados dos valores de entrada do Scilab. É importante citar que todos estes parâmetros utilizados no COCO também encontram-se no SI.

Tabela 2. Parâmetros termodinâmicos e de entrada do COCO

Parâmetro	Valor	Unidade
P	101325	Pa
T	284,5	K
FM_A	0,5	----
FM_B	0,5	----
FM_C	0	----
f_m	20	mol/s

Finalizado o procedimento anterior, a próxima etapa para a elaboração do fluxograma será a abordagem da construção do reator CSTR. Para isso, acessou-se novamente o caminho *Flowsheet* → *Insert unit operation*. Feito isso, na janela *Select Unit Operation*, selecionou-se o tópico *Custom*. Neste tópico, foi selecionada a opção *Scilab Unit Operation*. É válido ressaltar que a opção *Scilab Unit Operation* só estará disponível em *Custom* após a instalação do *plug-in*.

Ao selecionar a opção mencionada anteriormente, aparecerá um ícone, representado pela Figura 22, que irá representar a comunicação entre os softwares. Ele recebeu e compilou os algoritmos programados no Scilab.

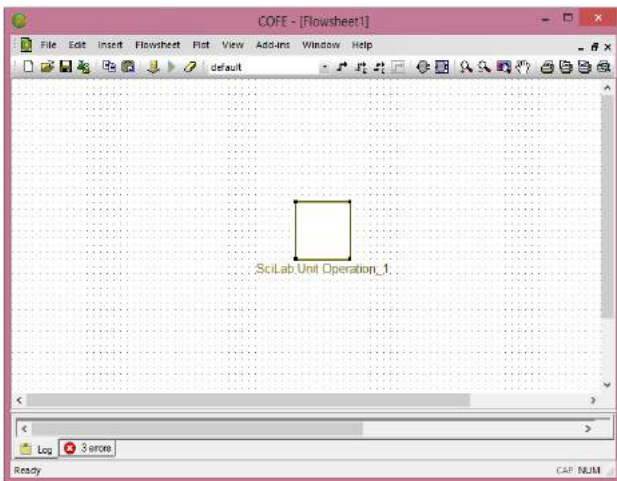


Figura 22. Ícone representativo da comunicação entre o Scilab e o COCO

Como este ícone representará o reator do tipo CSTR, para modificar sua imagem padrão foi preciso clicar com o botão direito do mouse, ou touchpad caso seja um notebook, para surgir a janela, representada pela Figura 23, que irá oferecer as opções para modificação de sua apresentação.

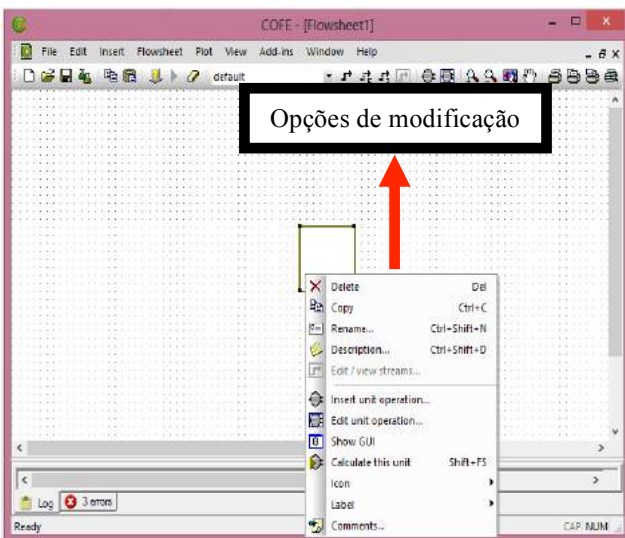


Figura 23. Janela com opções de modificação

Nesta janela, escolheu-se o caminho *Icon* → *Select unit icon* para surgir a janela chamada *Select unit operation icon*, que fornecerá as opções das imagens dos equipamentos que poderão substituir a imagem padrão do ícone citado anteriormente. Como neste caso a imagem que irá substituir é a de um reator do tipo CSTR, escolheu-se a opção *stirred_vessel*, contida na pasta *Vessels*, como o representado pela Figura 24.

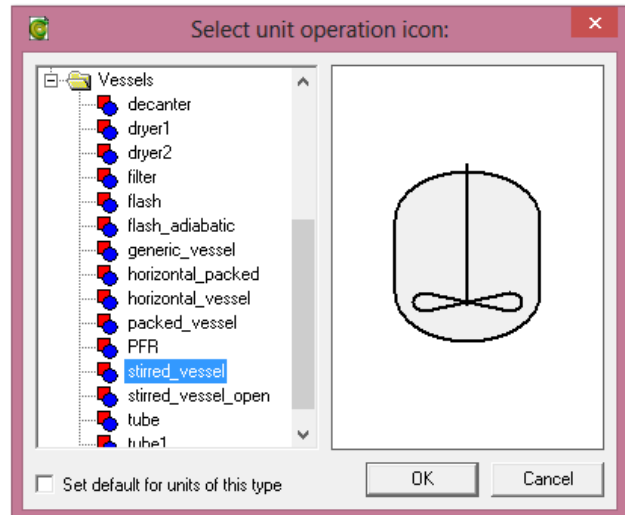


Figura 24. Janela Select unit operation icon

Ao escolher a opção *stirred_vessel*, clicou-se no botão OK, localizado no canto inferior da janela, para finalizar a escolha. Já para modificar o nome deste ícone, na mesma janela, selecionar a opção *Rename* e escrever o nome escolhido, neste caso, o nome escolhido foi CSTR. A representação deste ícone, agora chamado CSTR, com as modificações realizadas anteriormente, está ilustrada na Figura 25.

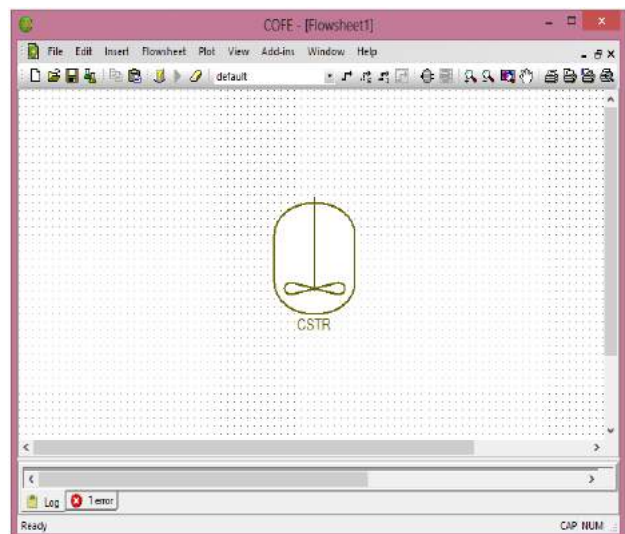


Figura 25. CSTR

Finalizados os ajustes anteriores, foi necessário inserir o algoritmo programado no Scilab no COCO através do CSTR citado anteriormente. Para isso, primeiramente, é necessário clicar com o cursor nele para surgir a janela chamada *Unit operation CSTR* representada pela Figura 26.

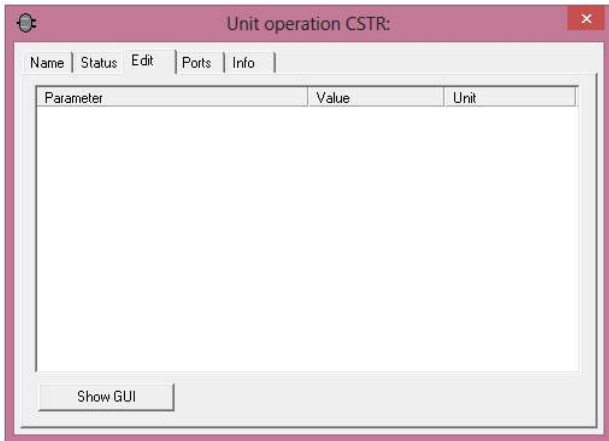


Figura 26. Janela *Unit operation CSTR*.

Na janela mencionada anteriormente, selecionar a aba *Edit* e clicar no botão *Show GUI*, localizado no canto inferior da janela. Feito isso, irá surgir a tela chamada *Scilab CAPE-OPEN Unit Operation*, que está ilustrada na Figura 27, onde, na aba *Scilab*, será o local para se inserir o algoritmo. Para a inserção do algoritmo basta selecioná-lo e copiá-lo do Scilab para a janela citada acima. É importante mencionar que estes algoritmos retirados do Scilab sofreram algumas modificações em sua estrutura para a simulação no COCO. Na mesma opção Scilab, dentro da janela *Scilab CAPE-OPEN Unit Operation*, existem duas ferramentas: *Script* e *Output*. Na ferramenta *Script* é a parte em que deve se inserir o algoritmo e na ferramenta *Output* é a parte na qual são mostrados os resultados oriundos da compilação do algoritmo no *software COCO*.

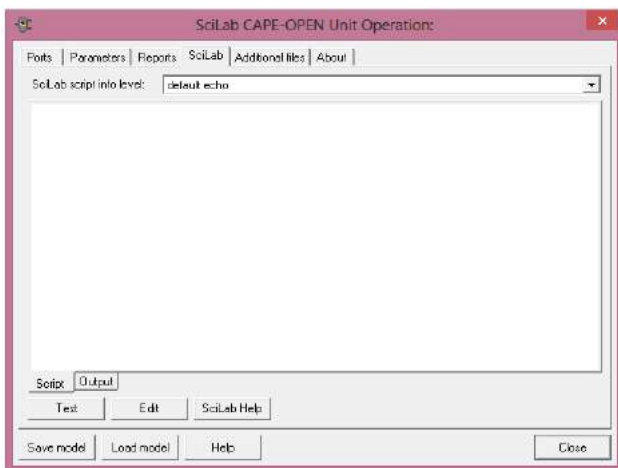


Figura 27. Janela *Scilab CAPE-OPEN Unit Operation*

Ao inserir os algoritmos no COCO, na ferramenta *Script*, foi necessário testá-los previamente para verificar se os resultados foram os mesmos obtidos pelo *software* Scilab. Para esta verificação, é necessário clicar no botão *Test* e, posteriormente surgirá os resultados pela ferramenta *Output*. Se os resultados obtidos no COCO forem os mesmos obtidos pela simulação no Scilab, clique no botão

Close, localizado na parte inferior da janela *Scilab CAPE-OPEN Unit Operation*, para voltar no ambiente inicial do COCO. No caso deste estudo, os resultados obtidos por ambos os *softwares* foram exatamente os mesmos.

Com o conhecimento da inserção dos algoritmos no COCO, os equipamentos que foram escolhidos e da inserção de correntes de material, o fluxograma da produção de etileno glicol, sem resolução, está ilustrado pela Figura 28.

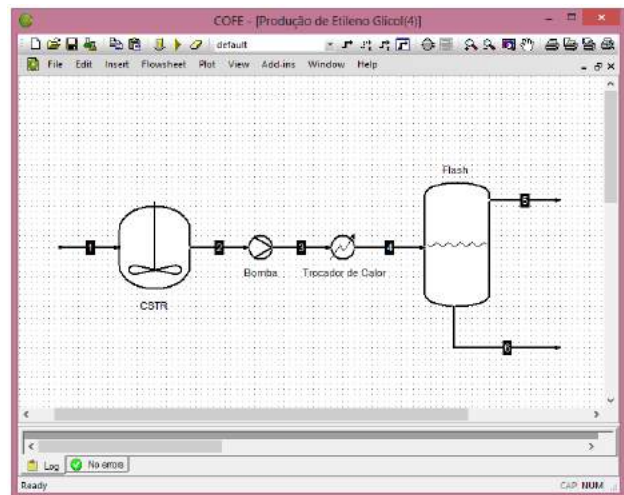


Figura 28. Fluxograma da produção de etileno glicol

Para a resolução do fluxograma foi necessário clicar no ícone indicado na Figura 29. Depois disso, o simulador irá resolvê-lo e, caso haja convergência nos resultados, aparecerá a seguinte mensagem no canto inferior da tela "*Flowsheet is solved*". Um outro indicativo da convergência desta simulação é o fluxograma ficar com a tonalidade verde fluorescente. O fluxograma da produção de etileno glicol resolvido para este estudo está representado na Figura 30.

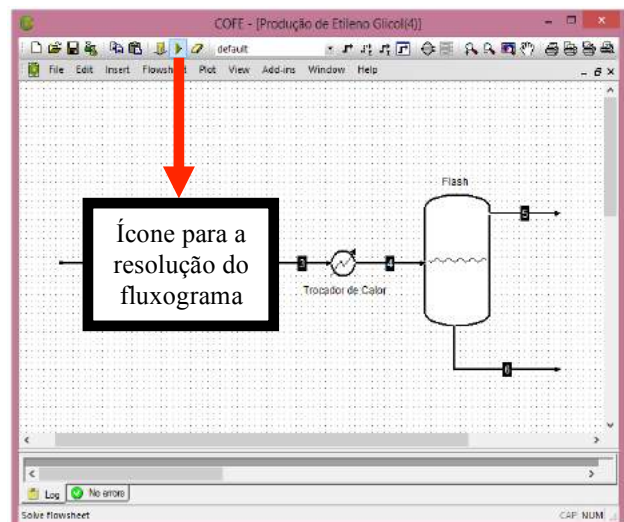


Figura 29. Ícone utilizado para a resolução do fluxograma

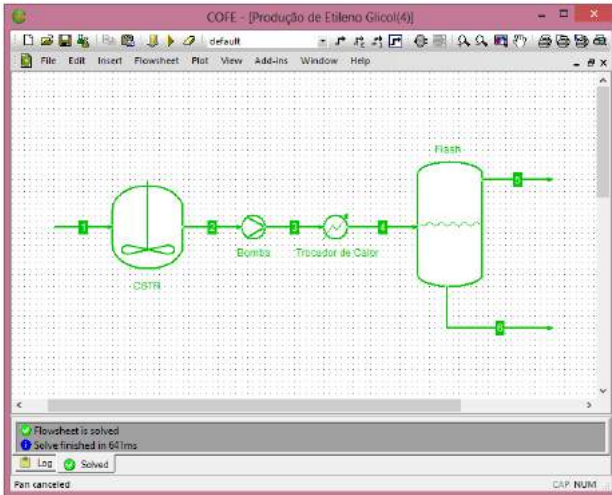


Figura 30. Fluxograma da produção de etileno glicol resolvido

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Ao término deste estudo obtiveram-se dois resultados importantes e que servirão de comparativo para se discutir o êxito deste: o primeiro foi a conversão da reação obtida pela simulação realizada sem o uso do controlador PI e o segundo foi a conversão obtida com o uso do controlador PI, inserido no próprio algoritmo programado no Scilab.

Primeiramente, serão apresentados os resultados da simulação sem a inserção do controlador. Ao se resolver o algoritmo sem a implementação do controlador, através do Scilab, a conversão atingida foi de 96,52%. Este resultado obtido pelo *software* Scilab está ilustrado na Figura 31.

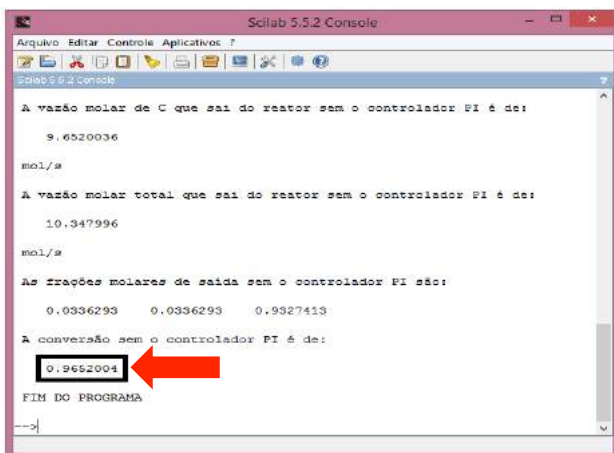


Figura 31. Conversão obtida no Scilab sem o controlador PI

Para esta simulação foram obtidos outros resultados em forma de gráficos para as concentrações de A, B e C. Eles exprimem o comportamento do processo aliado ao tempo em

que este leva para atingir sua estabilidade. Esses gráficos estão representados na Figura 32.

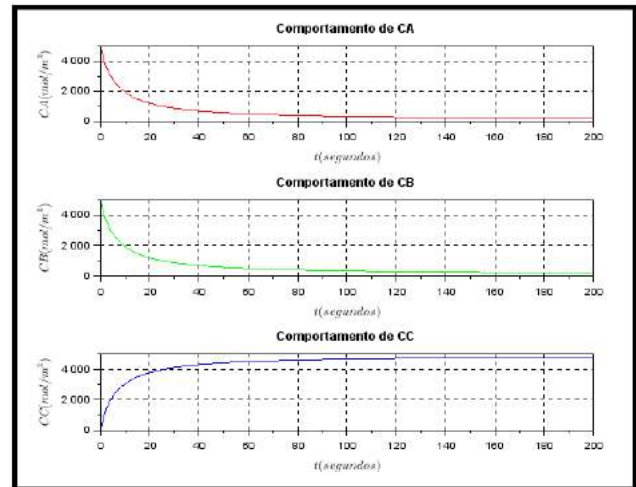


Figura 32. Comportamento dinâmico das concentrações de A, B e C sem a atuação do controlador PI

A partir do resultado da conversão da reação, obtido pelo Scilab, foi necessário verificar se este irá se igualar com o apresentado pelo COCO. Como dito anteriormente, alguns parâmetros de entrada que o COCO requisita são diferentes dos parâmetros de entrada que foram utilizados no Scilab, por esse motivo, o algoritmo elaborado no Scilab sofreu algumas modificações para ser executado no COCO. Dentre essas modificações, foi necessário incluir duas funções essenciais que fazem parte, exclusivamente, desta comunicação entre os dois *softwares*. Elas estão discriminadas a seguir:

- 1) *getFeedprop* (corrente de entrada, “tipo de parâmetro”): Esta ferramenta tem como finalidade enviar o valor dos parâmetros de entrada que, através da corrente de entrada do CSTR, foram inseridos no COCO e que serão utilizados pelo algoritmo elaborado para a obtenção dos resultados;
- 2) *setproduct* (corrente de saída, vazão molar de saída, frações molares de saída, “pressão de saída”, nome atribuído à pressão, “temperatura de saída”, nome atribuído à temperatura): Esta ferramenta irá retornar os valores obtidos através da simulação, realizada pelo algoritmo, a corrente de saída do CSTR. Os valores retornados são: vazão molar de saída, frações molares de saída, pressão de saída e temperatura de saída.

Para visualizar o resultado que foi obtido na simulação realizada no COCO é necessário clicar com o cursor no CSTR para aparecer a janela *Unit operation CSTR*, mencionada anteriormente, que irá apresentar o resultado da conversão. Este resultado está expresso pela Figura 33.

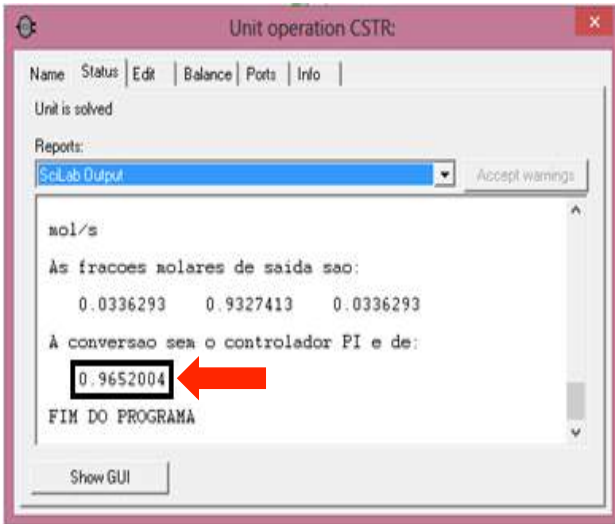


Figura 33. Resultado da conversão da reação obtido no COCO sem o controlador PI

Como foi possível observar pela imagem anterior, a conversão obtida pela simulação no COCO foi a mesma obtida pela simulação no Scilab. Isso demonstra que a comunicação entre os dois softwares acarretou no resultado esperado.

Outro resultado importante obtido para esta simulação no COCO foi a separação e purificação do etileno glicol na corrente de saída do Flash. O grau de pureza do etileno glicol, na corrente de líquido saturado do Flash, foi de 94,5%. Os resultados das vazões junto com as frações molares de saída de cada corrente (*Stream*) do fluxograma, sem a utilização do controlador PI, estão representados pela Tabela 3.

Tabela 3. Valores das correntes do fluxograma sem o controlador PI.

C*	1	2	3	4	5	6	U*
P	101325	101325	1013250	1013250	810600	810600	Pa
T	284,5	284,5	284,660	525	520,528	520,528	K
f_m	20	10,348	10,348	10,348	0,269	10,079	mol/s
FM _A	0,50	0,034	0,034	0,034	0,378	0,024	---
FM _B	0,50	0,034	0,034	0,034	0,148	0,031	---
FM _C	0,00	0,932	0,932	0,932	0,474	0,945	---

C*: Corrente.
U*: Unidade.

É possível observar nos dados apresentados pela tabela anterior que, entre a corrente 1 e 2, ocorreu uma mudança nos valores das frações molares das substâncias e na vazão molar, ou seja, isto é um indicativo de que o reator CSTR se encontra entre

essas duas correntes. É importante destacar que a mudança de valores da vazão molar entre as correntes 1 e 2 modificou para menos, ou seja, estão saindo menos mols por segundo dos componentes A e B, e mais de C, indicando que o processo reacional se processou como o esperado. Já entre as correntes 2 a 4, as frações molares das substâncias A, B e C mantiveram-se constantes, apenas havendo entre as correntes 2 e 3 a localização da Bomba, que fez com que a pressão aumentasse bruscamente, e entre as correntes 3 e 4 o Trocador de Calor, que fez com que a temperatura aumentasse significativamente. Por fim, entre as correntes 5 e 6, nota-se uma diferença nas frações molares dos três componentes pois, na corrente 5 houve a saída de vapor saturado, topo do *Flash*, e na corrente 6 houve a saída de líquido saturado, oriundo do fundo do *Flash*. É importante mencionar que, entre as correntes 4 e 5 houve uma queda de pressão causada pela válvula de estrangulamento contida na entrada do *Flash*.

Finalizados os resultados obtidos para a primeira simulação, sem a inserção do controlador PI, serão abordados agora os resultados para a simulação com a inserção do controlador. O resultado obtido para a simulação no Scilab com o controlador PI foi a conversão de 98% da reação ilustrado na Figura 34. Essa nova conversão representa um aumento de 1,51 % em relação a conversão sem o controlador PI.

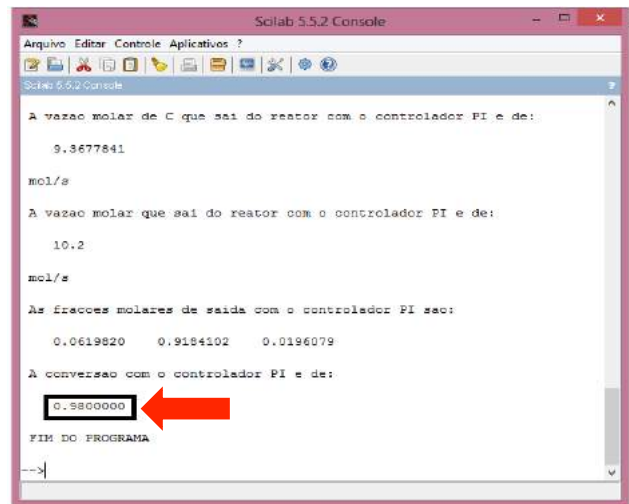


Figura 34. Conversão obtida no Scilab com o controlador PI

É importante citar que todo controlador PI possui seus parâmetros de sintonia: K_C referente à parte proporcional e τ_i referente à parte integral (SEBORG, 2004). A seguir representa-se a equação que simula o comportamento do controlador PI (Equação 8) e a Tabela 4 representa os valores dos parâmetros utilizados na sintonização deste controlador.

Equação do controlador PI:

$$CA_e(t) = K_C \cdot e(t) + \frac{K_C}{\tau_i} \cdot \int_{t_0}^t e(t) dt \quad (8)$$

Em que $e(t)$ é a função que representou o erro do controlador PI.

Tabela 4. Parâmetros do controlador PI

Parâmetros do controlador PI	Valor
K_C	7000
τ_i	0.9

A C_{Ae} atuará neste controlador como variável manipulada e a concentração C_A , ao longo do processo reacional, atuará como variável controlada. Com isso, os resultados obtidos em forma de gráficos para as concentrações de A, B e C, para esta simulação com a inserção do controlador, estão ilustrados nas Figuras 35 e 36.

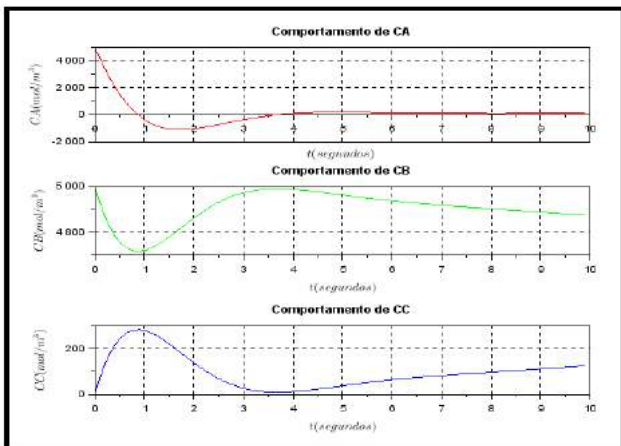


Figura 35. Comportamento dinâmico inicial das concentrações de A, B e C com a atuação do controlador PI

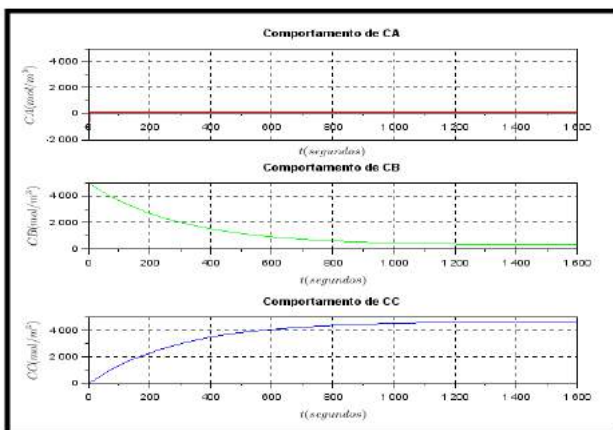


Figura 36. Comportamento dinâmico, ao longo do tempo de simulação, das concentrações de A, B e C com a atuação do controlador PI

Depois de apresentados os resultados anteriores, é necessário apresentar o resultado da variável manipulada C_{Ae} junto a variável controlada C_A para a verificação do atingimento do *set point* desejado para uma concentração final de 100 mol/m³ de A. Este resultado está apresentado em forma de gráficos pela Figura 37.

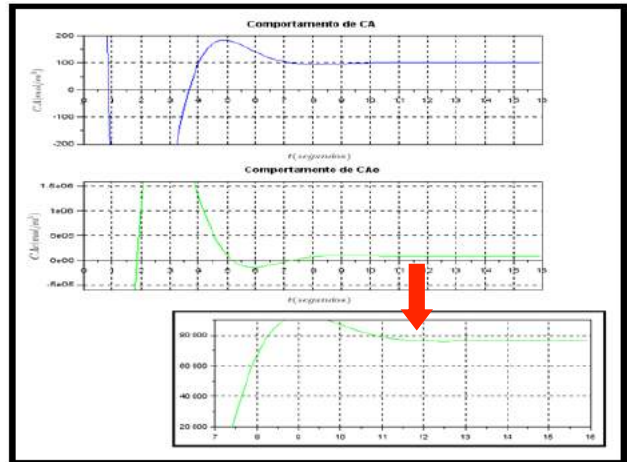


Figura 37. Set point desejado

O resultado obtido pela simulação no COCO com o algoritmo elaborado utilizando o controlador PI está representado pela Figura 38. É importante citar que, como no caso do algoritmo adaptado para a inserção no COCO sem a atuação do controlador, o algoritmo inserido no COCO com a atuação do controlador precisou ser adaptado.

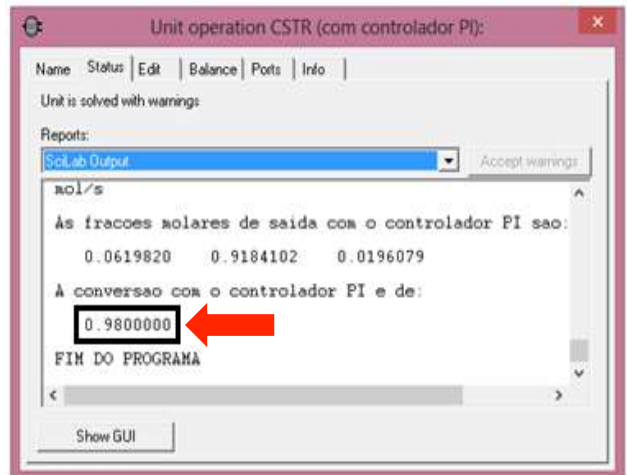


Figura 38. Resultado da conversão da reação obtido no COCO com o controlador PI

Seguindo o mesmo exemplo para a simulação sem o controlador PI, foi possível observar na figura acima que o resultado para a nova conversão, com o controlador, obtido pelo Scilab também foi o mesmo obtido pelo COCO, reforçando assim o êxito na comunicação entre os softwares.

Para finalizar, serão apresentados os resultados das vazões junto com as frações molares de saída de cada corrente para a simulação com a uso do

controlador PI pela Tabela 5. É importante mencionar que a pressão e as temperaturas para esta simulação com o controlador foram similares as da simulação sem o controlador. No resultado final para a separação do etileno glicol foi obtido um grau de pureza de 92,7% com a utilização do controlador PI.

Tabela 5. Valores das correntes do fluxograma com o controlador PI

C*	1	2	3	4	5	6	U*
P	101325	101325	1013250	1013250	810600	810600	Pa
T	284,5	284,5	284,659	525	521,552	521,552	K
f_m	20	10,200	10,200	10,200	0,190	10,01	mol/s
FM _A	0,50	0,020	0,020	0,020	0,242	0,015	---
FM _B	0,50	0,062	0,062	0,062	0,284	0,058	---
FM _C	0,00	0,918	0,918	0,918	0,474	0,927	---

C*: Corrente.

U*: Unidade.

Nos dados apresentados pela tabela anterior, é possível observar que, entre a corrente 1 e 2, ocorreu uma mudança nos valores das frações molares das substâncias e na vazão molar, ou seja, também indica a presença do reator CSTR. É importante mencionar que, o uso do controlador PI tendênciou o andamento da conversão da reação e por isso a discrepância entre os valores das substâncias A e B. Nas correntes 2 a 4, as frações molares das três substâncias mantiveram-se constantes. Da mesma maneira que na análise realizada dos resultados sem a inserção do controlador PI, a Bomba está localizada entre as correntes 2 e 3 e o Trocador de Calor entre as correntes 3 e 4. Para concluir esta análise, entre as correntes 5 e 6, nota-se que houve uma diferença nas frações molares da mesma maneira que ocorreu quando a análise era na simulação sem a inserção do controlador PI. A queda de pressão entre as correntes 4 e 5 também foi causada pela válvula de estrangulamento contida na entrada do *Flash* e na corrente 6 saiu menos etileno glicol como produto de fundo do *Flash*, pois com a atuação do controlador PI obteve-se uma quantidade maior de água na saída do reator CSTR. Esse aumento de água fez com que houvesse uma sobrecarga na operação do *Flash*, sendo que haveria a necessidade de uma quantidade de energia empregada maior para obter uma quantidade maior de etileno glicol como produto de fundo do *Flash*.

CONCLUSÕES

O ramo da simulação de processos químicos desempenha um importante papel para o estudo e melhoria de uma série de processos químicos industriais. No caso deste estudo, ela foi utilizada para o estudo do processo de produção de etileno glicol. Primeiramente, foram elaborados dois algoritmos no *software* Scilab: o primeiro sem a inserção do controlador PI e o segundo com a inserção do controlador PI. Nos dois casos, foi possível obter o êxito com a compilação dos algoritmos no *software* Scilab. Os resultados obtidos para as conversões da reação de síntese de etileno glicol demonstraram estar em compatibilidade com o esperado, pois, com a atuação do controlador PI, ou seja, o aumento da conversão da reação. Sem o uso do controlador, o resultado obtido para a conversão foi de 96,52% enquanto que o resultado da conversão com o uso do controlador foi de 98%, representando um aumento da conversão em etileno glicol de 1,51%. O objetivo da atuação deste controlador PI foi o controle da concentração C_A de saída do reator CSTR na faixa de 100 mol/m³, através da manipulação da C_{Ae} , para atingir a conversão final de 98%. A partir deste resultado no Scilab, por meio de algumas modificações nos dois algoritmos, sem e com a inserção do controlador PI, introduziram-se os dois para a simulação no *software* COCO. O resultado, como o demonstrado anteriormente, foi de acordo com o que se esperava, acarretando no sucesso do objetivo principal deste estudo que era a comunicação entre os dois *softwares*.

É importante destacar outro resultado deste estudo: a obtenção de um produto de fundo do *Flash* (líquido saturado) com alto grau de etileno glicol. Nos dois casos, tanto a simulação sem a inserção do controlador tanto como a simulação com a inserção do controlador, obtiveram um produto de fundo com um grau de etileno glicol satisfatório. A primeira obteve-se o valor de 94,5% e a segunda o valor de 92,7%, representando uma variação de apenas 1,9%.

Durante a execução deste estudo, a principal dificuldade encontrada foi a inserção do balanço de energia nos dois algoritmos. Isso não foi possível, pois algumas propriedades termodinâmicas dependem da temperatura para a construção de seus modelos matemáticos. Para a execução de tal tarefa, seria necessário o dispêndio de um tempo maior e a disponibilidade de ferramentas para a coleta de dados laboratoriais.

SIMBOLOGIAS

A – óxido de etileno.
 B – água.
 C – etileno glicol.
 C_A – concentração de óxido de etileno.
 C_B – concentração de água.
 C_C – concentração de etileno glicol.
 C_{Ae} – concentração de óxido de etileno na entrada do reator CSTR.
 C_{Be} – concentração de água na entrada do reator CSTR.
 E_a – energia de ativação da reação de síntese de etileno glicol.
 f_m - vazão molar de entrada no reator CSTR.
 F_e – vazão volumétrica de entrada no reator CSTR.
 FM_A – fração molar de óxido de etileno.
 FM_B – fração molar de água.
 FM_C – fração molar de etileno glicol.
 k – constante de velocidade da reação de síntese de etileno glicol na temperatura T .
 k_0 – constante de velocidade da reação de síntese de etileno glicol na temperatura T_{ref} .
 K_C – parâmetro do controlador PI referente a parte proporcional.
 P – pressão de operação do reator CSTR.
 R – constante universal dos gases.
 R_A – taxa reacional de óxido de etileno.
 T – temperatura de entrada e operação do reator CSTR.
 T_{ref} – temperatura de referência.
 V – volume do reator CSTR.
 \mathcal{T}_i – parâmetro do controlador PI referente a parte integral.

REFERÊNCIAS

- BEQUETTE, B.W. **Process Dynamics: Modeling, Analysis, and Simulation**. New Jersey: Prentice Hall PTR, 1998.
- COCO. **Simulation environment**. Disponível em: <<http://www.cocosimulator.org/index.html>>. Acesso em: 13 jul. 2016.
- FOGLER, H. S. **Elementos de Engenharia das Reações Químicas**. 4. ed. São Paulo: LTC, 2009.
- GARCIA, C. **Modelagem e simulação de processos industriais e de sistemas eletromecânicos**. 2. ed. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2005.
- MARTINS, L.; CARDOSO, D. Produção de etileno glicóis e derivados por reações catalíticas do óxido de eteno. **Revista Química Nova**, v. 28, n. 2, 2005.
- OXITENO. Boletim Técnico. **Etilenoglicóis**. Disponível em: <www.oxiteno.com.br/cms/media/26054/dietilenoglicol_co_port.pdf>. Acesso em: 07 jul. 2016.
- PEREIRA, F. F.; MORI, R. P. **modelagem e simulação de um sistema CSTR-COLUNA de destilação: produção de monoetilenoglicol (MEG)**. Universidade Federal de Alfenas, 2014.
- PORTANTIOLO, C. S. **Ficha Técnica do ETILENO GLICOL (MONO)**. Quimidrol, 2013.
- ROCHA, R. S. **Eletrossíntese de metanol e etilenoglicol eletrodos de difusão à gás**. Universidade Estadual de Campinas, 2010.
- RANGAIAH, G. P.; KARIWALA, V. **Plantwide Control: Recent Developments and Applications**. Singapura: Wiley, 2012.
- SCILAB. **About Scilab**. Disponível em: <www.scilab.org/scilab/about>. Acesso em: 13 julho. 2016.
- SEBORG, D. E.; EDGAR, T. F.; MELLICHAMP, D. A. **Process Dynamics and Control**. WILEY, 2. Ed, 2004.
- SIEMENS. **Process Analytics in Ethylene Oxide and Ethylene Glycol Plants**. 2015. Disponível em: <www.industry.usa.siemens.com/automation/us/en/process-instrumentation-and-analytics/process-analytics/pa-case-studies/Documents/PIACS-00013-1015-Ethylene-Oxide.pdf>. Acesso em: 13 julho. 2015.
- SMITH, J. M.; VAN NESS, H. F.; ABBOTT, M. M. **Introdução à termodinâmica da engenharia química**. 7. ed. São Paulo: LTC, 2007.