



MÉTODO ROBUSTO PARA SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO EM SIMULADORES BASEADOS EM EQUAÇÕES: O CASO DA PURIFICAÇÃO DE BIOETANOL

F. F. FURLAN^{1,*}, J. A. S. GONÇALVES¹, V. M. HENRIQUE¹, R. P. SOARES², A. R. SECCHI³,
R. C. GIORDANO^{1,**}

¹ Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Engenharia Química
e-mail: *felipef.furlan@gmail.com; **roberto@ufscar.br

² Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Departamento de Engenharia Química

³ Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE

RESUMO – Modelos de colunas de destilação são sabidamente de convergência difícil. No caso de simuladores modulares-sequenciais, os módulos dessas colunas incluem muitas vezes procedimentos específicos para aumentar sua robustez. Essa abordagem não pode ser facilmente transposta para simuladores baseados em equações, nos quais todas as equações são resolvidas simultaneamente. Neste trabalho, enfoca-se o trem de colunas de destilação do processo de produção de etanol de primeira e/ou segunda geração, que será integrado em um simulador do bioprocessamento, visando a sua otimização estacionária. Nesse caso, a robustez é fator determinante para o sucesso da otimização. Apresenta-se aqui uma abordagem não-convencional para esse problema, utilizando interpoladores do tipo tabelas de inspeção multidimensionais para representar o estado estacionário das colunas, tendo como base de dados resultados de simulações empregando modelo rigoroso. Essa abordagem foi aplicada à primeira coluna de destilação de uma planta de produção de álcool, utilizando o simulador EMSO (www.enq.ufrgs.br/trac/alsoc).

PALAVRAS-CHAVE: Modelagem, colunas de destilação, interpoladores.

1. INTRODUÇÃO

O uso de simuladores de processos químicos ocorre há mais de 50 anos. Porém, somente nas últimas duas décadas houve uma popularização destas ferramentas no ambiente industrial. Este fato se deve ao aumento da capacidade de processamento dos computadores e ao seu barateamento, permitindo uma maior acessibilidade a recursos computacionais. No início de sua utilização, os simuladores de processos eram bastante específicos, sendo que cada empresa possuía seu próprio. Atualmente os mesmos são desenvolvidos por empresas especializadas ou instituições de ensino e

pesquisa e, por isso, são de uso muito mais geral (SOARES, 2003).

Os simuladores podem ser classificados quanto ao modo como resolvem as equações dos modelos envolvidos. Estas podem ser resolvidas seguindo uma seqüência específica (em geral coincidente com a seqüência física dos equipamentos), abordagem esta conhecida como modular seqüencial. Outra abordagem agrupa todas as equações envolvidas no processo e as resolve de forma simultânea. Os sistemas que empregam tal arquitetura são denominados globais, ou baseados em equações (STAUDT, 2007).



Algumas das ferramentas de simulação comerciais atualmente mais populares (como os aplicativos Aspen Plus® e Aspen Hysys®, ambos comercializados pela empresa Aspen Tech) foram desenvolvidas com base na arquitetura modular, embora algumas versões mais recentes também tenham incorporado a solução simultânea de todas as equações do processo, como característica opcional. Na abordagem modular, a convergência de reciclos da planta é feita de modo iterativo.

Nos simuladores globais, por sua vez, a convergência de reciclos não é questão relevante, uma vez que todas as equações são resolvidas simultaneamente. Por outro lado, quando são utilizados modelos com desvios significativos da linearidade, pode haver dificuldades de convergência dos métodos numéricos para sistemas de equações algébricas não lineares – lembrando-se que a dimensão dos sistemas pode ser da ordem dos milhares de equações. Enquanto simuladores modulares podem incorporar rotinas de convergência específicas para cada módulo, os simuladores baseados em equações, por resolvê-las todas simultaneamente, devem necessariamente empregar algoritmos mais genéricos. No caso de torres de destilação, há técnicas clássicas para auxiliar na convergência do problema (VENKATARAMAN e LUCIA, 1988; WU e BISHNOI, 1986) que, entretanto, podem ser mais facilmente incorporadas em simuladores modulares do que em globais.

O simulador EMSO™ (Environment for Modeling Simulation and Optimization), que foi utilizado no presente trabalho, utiliza a abordagem baseada em equações. Seus modelos matemáticos, tanto os internos ao ambiente como os desenvolvidos *ad hoc*, são transparentes ao usuário (SOARES, 2003). Essas características são importantes para aplicações em pesquisa e desenvolvimento, onde constantemente são estudados equipamentos não convencionais. O EMSO possui outras características que o tornam flexível em aplicações, como a possibilidade

de se adicionarem *plug-ins* na forma de bibliotecas dinâmicas (*dll's*), para realizar cálculos que não são possíveis ou são pouco práticos dentro da linguagem de modelagem do EMSO (RODRIGUES *et al.* 2006). Outra possibilidade é adicionar novos *solvers* e/ou rotinas de otimização ao simulador.

A própria concepção do simulador EMSO é dirigida à solução de problemas dinâmicos, e a possibilidade de empregar essa ferramenta em aplicações de otimização dinâmica em tempo real é, no presente, objeto de investigação. Entretanto, a simulação do sistema em regime permanente é igualmente relevante, por si própria e para fornecer inicializações consistentes de problemas transientes.

A solução de problemas de otimização estacionária é, também, de grande importância no desenvolvimento de processos. Este é o caso do presente trabalho, que enfoca um trem de colunas de destilação tipicamente utilizado em plantas de produção de bioálcool de 1ª geração, e cuja aplicação pode ser estendida à 2ª geração. Ele se insere em um projeto maior que visa à otimização estacionária de uma planta de produção de açúcar e álcool de 1ª e 2ª geração (no bojo do programa FAPESP-BIOEN).

Durante a otimização, as variáveis de entrada do trem de colunas terão seus valores alterados pelo algoritmo de busca. Desta forma, faz-se necessário dispor de modelo robusto das colunas, a fim de garantir sua convergência para uma faixa factível de condições de entrada. Com esse intuito, propõe-se aqui uma abordagem não convencional para contornar a dificuldade de convergência de modelos de torres de destilação, operando em estado estacionário.

Uma possível abordagem para esta questão consiste na utilização de interpoladores do tipo tabelas multidimensionais de inspeção (NELLES,



2001), em lugar do modelo fenomenológico da coluna de destilação. Neste procedimento, utilizam-se as respostas de um modelo fenomenológico, rodado assincronamente, *off line*, para gerar uma tabela contendo as variáveis de entrada e saída relevantes para a coluna que será simulada. O interpolador, então, passa a ler a tabela para obter estimativas para a variável de saída conforme a entrada. A principal desvantagem deste método é a dimensão da tabela que cresce exponencialmente com o número de variáveis de entrada, tornando-o pouco prático para mais que cinco variáveis de entrada (NELLES, 2001).

Assim, o objetivo deste trabalho é apresentar uma alternativa para o problema da convergência de colunas de destilação em simuladores baseados em equações, utilizando um interpolador do tipo tabelas multidimensionais de inspeção para representar o estado estacionário da coluna de destilação. Os resultados obtidos através dessa abordagem foram comparados com os obtidos pela resolução rigorosa do modelo de uma coluna de destilação.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

O caso-base, utilizado como referência nas simulações das colunas, foi apresentado por Dias (2008). A Figura 1 apresenta o trem de colunas empregadas na purificação do etanol.

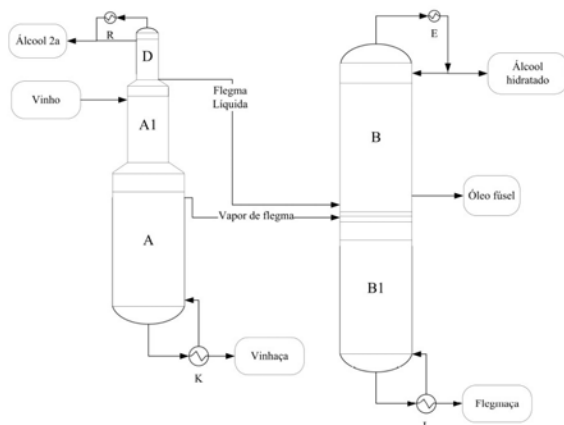


Figura 1: Imagem esquemática do trem de colunas típico de uma indústria de produção de álcool (DIAS, 2008).

O vinho deslevedurado, proveniente das centrífugas, com concentração de etanol entre 7 e 10% em massa, é a corrente de entrada do trem de colunas. Na configuração mais freqüente empregam-se cinco colunas (A, A1, D, B e B1). As três primeiras (A, A1 e D) são montadas uma sobre a outra, de modo que somente a coluna A possui refeedor e a coluna D condensador. O produto de fundo deste conjunto é a vinhaça. No topo do segundo conjunto (formado pelas colunas B e B1), chamado de trem de retificação, obtém-se o álcool etílico hidratado.

Por simplicidade, somente as colunas A e A1 foram utilizadas no presente trabalho para a validação da abordagem descrita.

Dados de processo (variáveis de entrada do modelo) foram introduzidos no simulador comercial ASPEN Plus (versão AspenOne 7.0) para gerar a tabela de interpolação. Foi utilizado o módulo RADFRAC que realiza a simulação rigorosa da coluna. A fase líquida foi modelada utilizando a equação NRTL com os parâmetros fornecidos pelo próprio ASPEN e, para a fase vapor, utilizou-se a equação de gás ideal. Procurou-se varrer uma região de operação ao redor do ponto nominal, variando de $\pm 20\%$ as entradas do modelo.

Foram escolhidas como variáveis de entrada: a fração molar de etanol na corrente de entrada (z_E), a vazão de vapor no topo da coluna (F_{topo}) e a vazão de vapor na saída lateral da mesma (F_{vapor}). Como variáveis resposta, foram escolhidas as temperaturas no topo da coluna (T_{topo}), na saída lateral (T_{vapor}) e no fundo (T_{fundo}), o calor trocado no refeedor (Q_R), a fração molar de etanol no fundo da coluna (x_B) e a fração molar na saída lateral (x_V).



Os dados obtidos no trabalho de Dias (2008) foram escolhidos como pontos centrais da malha de interpolação. Geraram-se duas malhas de espaçamento constante, uma com cinco (malha 1) e outra com 17 (malha 2) pontos para cada variável de entrada.

A resposta dada pelo interpolador consiste nos pontos mais próximos à entrada ponderados pelas áreas (ou volumes, hipervolumes, etc.) opostas a ele, como mostra a equação (1).

$$y = \frac{\sum_i^n w_i a_i}{\sum_i^n a_i} \quad (1)$$

Na qual n é o número de variáveis de entrada, w_i é o valor da variável resposta em um dos pontos da tabela de interpolação e a_i é a área (ou volume, etc) oposta ao ponto.

Uma vez criada a tabela de inspeção, a mesma foi utilizada para simular a coluna no

EMSO. Para isso foi utilizado um *plug-in*, desenvolvido pelos autores, que realiza a leitura da tabela e o processo de interpolação, seguindo o modelo descrito no item anterior.

Para a validação do modelo, escolheram-se pontos no interior da região de trabalho que não coincidiram com os das malhas utilizadas, pois pontos coincidentes gerariam respostas idênticas. Estes pontos foram distribuídos tanto em posições próximas às bordas da malha, como em regiões centrais. Assim, pôde-se estudar a variação da precisão dos dados previstos pelo interpolador com relação à região em que estes se encontram.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Tabela 1 apresenta os valores empregados para cada variável de entrada para as duas malhas geradas e a Tabela 2 indica os pontos utilizados para validação das respostas das tabelas de inspeção.

Tabela 1: Valores para as variáveis de entrada utilizadas nas malhas de interpolação.

Malha 1 (5 pontos)			Malha 2 (17 pontos)		
F _{topo}	F _{vapor}	Z _E	F _{topo}	F _{vapor}	Z _E
9,31	2,93	0,059	9,31	2,93	0,059
-	-	-	9,60	3,02	0,061
-	-	-	9,89	3,11	0,063
-	-	-	10,18	3,20	0,065
10,47	3,29	0,066	10,47	3,29	0,066
-	-	-	10,76	3,38	0,068
-	-	-	11,05	3,47	0,070
-	-	-	11,34	3,57	0,072
11,63	3,66	0,074	11,63	3,66	0,074
-	-	-	11,92	3,75	0,076
-	-	-	12,22	3,84	0,077
-	-	-	12,51	3,93	0,079
12,80	4,02	0,081	12,80	4,02	0,081
-	-	-	13,09	4,11	0,083
-	-	-	13,38	4,21	0,085
-	-	-	13,67	4,30	0,087
13,96	4,39	0,088	13,96	4,39	0,088



Tabela 2: Pontos escolhidos para a validação das malhas de interpolação.

	Z_E	F_{topo}	F_{vapor}	T_{topo}	T_{vapor}	T_{fundo}	Q_R	x_B	x_V
1	0,060	3,04	9,82	374,7	375,7	384,6	2,9E+07	3,5E-03	0,44
2	0,060	3,04	13,60	374,7	377,9	385,0	3,7E+07	1,6E-07	0,34
3	0,060	3,59	12,72	374,7	377,8	385,0	3,6E+07	2,4E-07	0,35
4	0,067	3,86	13,60	374,2	377,4	385,0	3,8E+07	1,2E-07	0,36
5	0,069	3,04	11,85	374,1	375,2	385,0	3,2E+07	3,3E-05	0,46
6	0,069	3,31	13,60	374,1	376,8	385,0	3,6E+07	3,3E-07	0,39
7	0,069	3,59	11,85	374,1	375,7	385,0	3,3E+07	4,4E-06	0,44
8	0,076	3,31	9,82	373,6	374,5	383,2	2,8E+07	1,4E-02	0,49
9	0,082	3,04	9,82	373,2	374,2	382,5	2,7E+07	2,0E-02	0,50
10	0,082	3,59	12,72	373,2	374,2	385,0	3,3E+07	2,1E-04	0,50
11	0,082	4,05	10,98	373,2	374,1	384,0	3,1E+07	7,7E-03	0,50
12	0,082	4,05	13,60	373,2	375,4	385,0	3,6E+07	6,4E-07	0,45

As Tabelas de 3 a 6 apresentam, para os pontos utilizados na validação, os valores obtidos pelo modelo fenomenológico, pelas duas malhas de interpolação e os erros

relativos das predições da tabela de inspeção, calculados pela equação (2):

$$\text{Erro relativo} = \frac{\text{Valor método rigoroso} - \text{Valor interpolado}}{\text{Valor método rigoroso}} \quad (2)$$

Tabela 3: Resultados obtidos para T_{topo}

	T_{topo}			Erro relativo	
	Fenomenológico	Malha 1	Malha 2	Malha 1	Malha 2
1	374,7	374,7	374,7	6,6E-06	1,3E-06
2	374,7	374,7	374,7	3,9E-06	1,3E-06
3	374,7	374,7	374,7	4,8E-06	4,9E-07
4	374,2	374,2	374,2	3,6E-06	1,8E-06
5	374,1	374,1	374,1	1,0E-05	7,0E-07
6	374,1	374,1	374,1	1,0E-05	3,5E-07
7	374,1	374,1	374,1	1,1E-05	2,6E-06
8	373,6	373,6	373,6	8,2E-06	5,2E-06
9	373,2	373,2	373,2	4,0E-06	4,0E-06
10	373,2	373,2	373,2	4,5E-06	6,2E-06
11	373,2	373,2	373,2	5,0E-06	5,7E-06
12	373,2	373,2	373,2	5,0E-06	5,7E-06

Os resultados indicados na Tabela 3 ilustram a alta precisão do interpolador, para ambas as malhas, ao prever as temperaturas de topo. O mesmo ocorre para as temperaturas da retirada de vapor (T_{vapor}) e do fundo (T_{fundo}) que, por motivo de concisão,

não são apresentadas aqui. Com efeito, o maior erro relativo observado foi da ordem de $4,3 \times 10^{-4}$ (ou seja, de 0,16 K). A precisão de qualquer instrumento de medida de temperaturas no processo industrial será,



certamente, ordens de grandeza inferior a esse desvio.

O mesmo comportamento qualitativo é observado para a previsão do fluxo de calor

no refeedor, Q_R (vide Tabela 4). Mais uma vez, a malha mais fina teve desempenho semelhante à de cinco pontos.

Tabela 4: Resultados obtidos para Q_R

	Q_R			Erro Relativo	
	Fenomenológico	Malha 1	Malha 2	Malha 1	Malha 2
1	2,88E+07	2,88E+07	2,88E+07	6,6E-04	2,0E-05
2	3,70E+07	3,70E+07	3,70E+07	1,6E-06	6,5E-06
3	3,63E+07	3,63E+07	3,63E+07	2,4E-06	1,1E-05
4	3,77E+07	3,77E+07	3,77E+07	1,4E-06	3,1E-05
5	3,17E+07	3,18E+07	3,17E+07	2,3E-03	1,8E-04
6	3,63E+07	3,63E+07	3,62E+07	2,5E-05	5,3E-05
7	3,30E+07	3,30E+07	3,30E+07	3,3E-04	5,4E-05
8	2,78E+07	2,78E+07	2,78E+07	2,6E-04	4,1E-05
9	2,68E+07	2,68E+07	2,68E+07	2,4E-04	2,1E-05
10	3,30E+07	3,31E+07	3,31E+07	1,8E-03	4,7E-04
11	3,07E+07	3,07E+07	3,07E+07	2,0E-04	8,6E-06
12	3,60E+07	3,60E+07	3,60E+07	1,2E-04	1,5E-04

Também para a fração molar de etanol na retirada lateral, x_V , observou-se um excelente desempenho do interpolador, pois as previsões de ambas as malhas se aproximaram muito das do modelo fenomenológico (Tabela 5).

A fração molar de etanol no produto de fundo, prevista pelo modelo fenomenológico, é muito baixa, sempre inferior a $1,5 \times 10^{-2}$. Há, contudo, variações relativas importantes em x_B , de até cinco ordens de grandeza. É de se esperar, assim, erros relativos maiores nessa resposta (Tabela 6). Neste caso, as diferenças entre as duas malhas passam a ser importantes. Entretanto, esse ponto deve ser

relativizado, em função da significância dos valores de x_B . Com efeito, se fosse essencial estimar x_B com precisão (por exemplo, em virtude de uma especificação estreita de um contaminante no produto final), a acuidade dessa previsão poderia justificar o uso de uma malha mais refinada para a tabela de inspeção. Entretanto, no caso estudado aqui, a fração de etanol no fundo seria apenas uma perda muito pequena do processo, sem grande impacto em uma função objetivo econômica, por exemplo. Com isso, pode-se recomendar, no presente caso, a utilização da malha de cinco pontos, novamente, reduzindo assim a dimensionalidade do interpolador utilizado.



Tabela 5: Resultados obtidos para x_v

	x_v			Erro Relativo	
	Fenomenológico	Malha 1	Malha 2	Malha 1	Malha 2
1	0,44	0,44	0,44	4,8E-03	7,3E-05
2	0,34	0,34	0,34	1,7E-03	9,3E-05
3	0,35	0,35	0,35	6,5E-04	1,0E-04
4	0,36	0,36	0,36	1,7E-03	2,7E-04
5	0,46	0,46	0,46	1,5E-02	1,5E-03
6	0,39	0,40	0,39	1,8E-03	3,1E-04
7	0,44	0,44	0,44	1,2E-03	3,3E-04
8	0,49	0,49	0,49	5,7E-04	4,0E-05
9	0,50	0,50	0,50	3,1E-04	1,2E-04
10	0,50	0,50	0,50	1,1E-02	3,8E-03
11	0,50	0,50	0,50	3,3E-04	2,4E-04
12	0,45	0,45	0,45	6,6E-04	6,0E-04

Tabela 6: Resultados obtidos para x_B

	x_B			Erro Relativo	
	Fenomenológico	Malha 1	Malha 2	Malha 1	Malha 2
1	3,49E-03	3,74E-03	3,49E-03	-7,0E-02	1,1E-03
2	1,63E-07	2,47E-07	1,67E-07	-5,1E-01	2,4E-02
3	2,42E-07	3,25E-07	2,46E-07	-3,5E-01	1,6E-02
4	1,24E-07	2,06E-07	1,26E-07	-6,5E-01	1,3E-02
5	3,33E-05	1,08E-03	1,48E-04	-3,2E+01	3,4E+00
6	3,28E-07	6,63E-07	3,42E-07	-1,0E+00	4,2E-02
7	4,43E-06	1,71E-04	5,10E-06	-3,8E+01	1,5E-01
8	1,42E-02	1,42E-02	1,42E-02	-1,2E-03	2,0E-03
9	2,01E-02	2,00E-02	2,01E-02	-1,5E-04	1,5E-03
10	2,13E-04	1,08E-03	5,39E-04	-4,1E+00	1,5E+00
11	7,73E-03	7,73E-03	7,78E-03	-2,9E-04	6,7E-03
12	6,39E-07	7,21E-05	6,83E-07	-1,1E+02	7,0E-02

4. NOMENCLATURA

a_i – área oposta ao ponto i da malha;

F_{topo} – Vazão molar no topo da coluna;

F_{vapor} – Vazão molar na saída lateral da coluna;

Q_R – Calor trocado no refeedor da coluna;

T_{fundo} – Temperatura no fundo da coluna;

T_{topo} – Temperatura no topo da coluna ;

T_{vapor} – Temperatura na saída lateral da coluna;

w_i – Valor da variável nos pontos da malha;

x_B – Fração molar no fundo da coluna;



x_V - Fração molar na saída lateral da coluna;

y - Variável resposta do interpolador;

5. CONCLUSÃO

A utilização de interpoladores do tipo tabelas de inspeção multi-lineares em substituição a modelo fenomenológico de coluna de destilação apresentou boa aproximação, para o caso das primeiras colunas do trem de uma planta de produção de etanol. A região dos pontos interpolados apresentou pouca ou nenhuma influência na qualidade da precisão da malha. A previsão da fração molar de etanol no produto de fundo apresentou maiores erros relativos, em função dos pequenos valores que essa variável assume e de sua grande variabilidade. Para este caso específico, como o etanol perdido no fundo não é um contaminante que deva ser controlado de forma fina, conclui-se que mesmo um modelo mais grosseiro, utilizando uma malha de apenas cinco pontos para interpolações, conseguiu prover resultados satisfatórios.

O interpolador foi incorporado como um *plug-in* do simulador EMSO com sucesso. Desta forma, aumenta-se a robustez do simulador ao se processarem as várias iterações que a solução de um problema de otimização estacionária da planta demanda.

6. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à FAPESP (programa BIOEN) pelo apoio financeiro.

7. REFERÊNCIAS

DIAS, M. Simulação do processo de produção de etanol a partir do açúcar e do bagaço, visando a integração do processo e a maximização da produção de energia e excedentes do bagaço. 2008. 253 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química.

z_E - Fração molar na entrada da coluna.

Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2008.

NELLES, O. Linear, Polynomial, and Look-Up Table Models. In: Nonlinear System Identification. 2. ed. Berlin: Springer, 2001. P. 219 – 238.

RODRIGUES, R.; GUERRA, C. D. W.; SECCHI, A. R.; LANSARIN, M. A. Ensino de cinética e cálculo de reatores químicos utilizando o simulador EMSO. In: Congresso Brasileiro de Engenharia Química, 16., 2006, Santos. Anais, Santos, 2006.

SOARES, R. P. Desenvolvimento de um simulador genérico de processos dinâmicos. 2003. 146 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia). Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2003.

STAUDT, P. B. Modelagem e simulação dinâmica de colunas de destilação. 2007. 124 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia). Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2007.

VENKATARAMAN, S.; LUCIA, A. solving distillation problems by Newton-Like methods. Comput. Chem. Engng. v. 12, n. 1, p. 55-69, 1988.

WU, J. S.; BISHNOI, P. R. A method for steady-state simulation of multistage separation columns involving nonideal systems. Comput. Chem. Engng. v. 10, n. 4, p. 343-351, 1986.