

BIORREFINARIA VIRTUAL: SIMULAÇÃO DINÂMICA DE EVAPORADORES

J. Ferreira, E. C. Biscaia Jr, A. R. Secchi

Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química.

e-mail: mquagliata@peq.coppe.ufrj.br

RESUMO - As biorrefinarias produtoras de etanol a partir de cana-de-açúcar, na indústria nacional, são em sua maioria plantas que obtêm o etanol a partir do processo de fermentação de primeira geração. Atualmente, está sendo estudada e avaliada tecnologicamente e economicamente, a produção de etanol de segunda geração. Uma das etapas de grande consumo energético comum aos processos de 1ª e 2ª geração é a etapa de concentração do caldo por sistemas de evaporadores. No presente trabalho é apresentada a modelagem fenomenológica em regime transiente de evaporador tipo Robert, implementada no simulador EMSO, com as propriedades físico-químicas calculadas pelo pacote termodinâmico VRTherm. A seção da calandra foi modelada como um trocador de calor do tipo casco e tubo com mudança de fase, seguida de um vaso de flash para separação das fases, com controle de nível e pressão. Foi utilizado um método de diferenças finitas na variável espacial para a resolução do sistema obtido de equações diferenciais parciais, e o uso do código DASSLC para a resolução do sistema de equações algébrico-diferenciais. As composições das fases líquida e vapor e as temperaturas obtidas estão em concordância com dados obtidos de unidades industriais e da literatura.

1. INTRODUÇÃO

O conceito de biorrefinaria é muito vasto; um deles é a conversão de biomassa em energia, combustível e/ou produtos químicos, onde a biomassa pode ser, por exemplo, cana-de-açúcar, beterraba, milho, madeira, grãos e algas. Existem várias classificações de biorrefinarias. Demirbas (2009) classifica as biorrefinarias segundo o processo de obtenção dos produtos: Bio-singas, pirólise, fermentação e processos hidrotérmicos. Outra classificação muito utilizada, também presente no trabalho de Demirbas (2009), é segundo o tipo de matéria-prima da biorrefinaria: 1ª, 2ª, 3ª, ou 4ª geração. Nas plantas de 1ª geração a matéria-prima são sementes ou grãos, utilizando a celulose como composto intermédio; nas plantas de segunda geração são utilizados o bagaço, as palhas ou madeira, onde os produtos intermediários são a hemicelulose e a lignina; 3ª geração são as plantas onde se produzem

combustíveis a partir de algas; e, por último, 4ª geração são as plantas de produção de biodiesel a partir de óleos vegetais. Ainda é possível distinguir 4 tipos de tecnologias em uma refinaria: termoquímicos, bioquímicos, químicos e mecânicos/físicos.

O Brasil é o segundo maior produtor de etanol no mundo, as plantas industriais em funcionamento, atualmente, são plantas de primeira geração a partir de cana-de-açúcar, as quais utilizam um processo de fermentação como etapa para converter a sacarose presente no caldo de cana-de-açúcar em etanol. Portanto, o conhecimento de cada um dos processos presentes nas biorrefinarias de cana-de-açúcar é primordial para o avanço tecnológico e melhora de cada etapa.

A modelagem dinâmica de sistema de evaporação industrial tem sido pouco abordada na literatura, sendo um dos primeiros trabalhos realizado por Holland e Liapis (1983), apresentando a modelagem do evaporador tipo *flash* em estado não estacionário, para um sistema binário. Na simulação de sistemas de evaporadores de múltiplos efeitos na indústria sucroalcooleira, são destacados os trabalhos de Cadet et al. (1999) e Elhaq et al. (1999) que apresentaram a modelagem do sistema de evaporação para fins de controle; Manrique et al. (2011) que utilizaram a modelagem do evaporador tipo *flash* em estado não estacionário no software ECOSIMPRO; Jesus (2004) modelou evaporadores em estado estacionário e em transiente utilizando redes neurais; e Silva (2013) que apresentou a modelagem e simulação dinâmica de evaporadores tipo *flash* e Robert aplicado a biorrefinarias.

No presente trabalho é abordada a modelagem fenomenológica dinâmica do evaporador tipo Robert no simulador EMSO, um simulador orientado por equações e por objetos, com as propriedades físico-químicas calculadas pelo pacote termodinâmico VRTherm.

2. MODELAGEM DO EVAPORADOR TIPO ROBERT

Para a modelagem do evaporador tipo Robert, foi considerado o evaporador em duas seções conectadas em série, uma onde acontece a troca de calor nos tubos e outra seção onde acontece a separação das fases, modelada como um *flash*. Um esquema do sistema é apresentado na Figura 1.

2.1. Modelagem da seção de *flash*

A modelagem da parte que atua como *flash* é composta pelos balanços de massa por componentes e de energia. Considerando que as fases estão totalmente misturadas e que as perdas de energia pelas paredes do evaporador são desprezíveis, resulta nas seguintes equações:

$$\frac{dn_i}{dt} = F_o z_i - F_L x_i - F_V y_i \quad \text{em que } n_i = N_L x_i + N_V y_i, \quad i = 1, \dots, NC$$

$$\frac{dE}{dt} = F_o h_o - F_L h_L - F_V h_V \quad \text{em que } E = N_L h_L + N_V h_V - PV$$

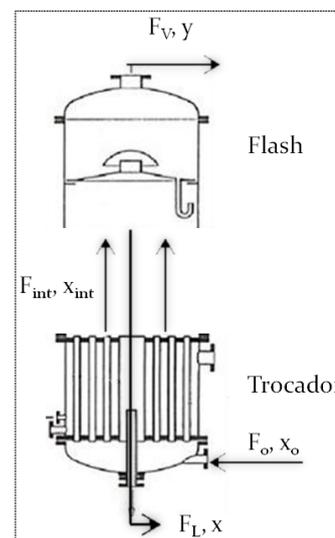


Figura 1 – Evaporador tipo Robert.

Com: $\sum_{i=1}^{NC} x_i = 1$ e $\sum_{i=1}^{NC} y_i = 1$ e NC o número de componentes.

Além dos balanços foram consideradas as equações de equilíbrio térmico, mecânico e químico:

$$T_L = T_V \quad , \quad P_L = P_V \quad e \quad \phi_i^L x_i = \phi_i^V y_i$$

e foram adicionadas as equações dos controladores do tipo PI, para o controle de nível e de pressão, em que $u(t)$ representa as vazões de líquido, F_L , e vapor, F_V , respectivamente:

$$u(t) = u_b + K_c e(t) + \frac{K_c}{\tau_i} \int_0^t e(\eta) d\eta \quad , \quad u_b \text{ é o } bias \text{ e } K_c \text{ e } \tau_i \text{ são parâmetros do controlador.}$$

A seção de *flash* tem o volume constante e, portanto: $V = N_L v_L + N_V v_V$, em que N_L e N_V são as quantidades molares de líquido e vapor e v_L e v_V os volumes específicos molares.

Para o cálculo do nível considerou-se que o evaporador tem uma geometria cilíndrica. As propriedades termodinâmicas (h_L , h_V , v_L , v_V , ϕ_L , ϕ_V) são funções da temperatura, pressão e composição da respectiva fase, e são calculadas a partir do *plugin* do EMSO, VRTherm.

2.2. Modelagem da seção do trocador de calor

No trocador de calor, o caldo está dentro dos tubos e o vapor (fluido aquecedor) do lado exterior dos tubos. Para o modelo do trocador de calor, foi considerado que não há acúmulo de massa dentro dos tubos, resultando na seguinte equação da continuidade, com z a variável espacial, $\rho(z)$ a massa específica molar e $v(z)$ a velocidade do fluido:

$$v(z) \rho(z) = v_0 \rho_0$$

Os balanços de massa para cada componente e de energia nos tubos são:

$$\frac{\partial(\rho x_i)}{\partial t} = - \frac{\partial(v \rho x_i)}{\partial z} \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} = - \frac{\partial(v \rho h)}{\partial z} + U \frac{4}{D_t} [T_{vap} - T(z)] \quad (2)$$

As propriedades termodinâmicas (h , ρ) são funções da temperatura, pressão e composição da mistura calculados através do *plugin* VRTherm do EMSO.

O coeficiente de transferência de calor, U , foi calculado a partir dos coeficientes de película interno e externo, h_{int} e h_{ext} , obtidos a partir de correlações empíricas (Minton, 1986) em função dos números de Reynolds, Nusselt e Prandtl, assim como das propriedades do fluido interior e exterior aos tubos.

3. ALGORITMOS DE RESOLUÇÃO NUMÉRICA

O EMSO tem vários algoritmos implementados para a resolução numérica de sistemas de equações diferenciais ordinárias ou sistemas de equações algébrico-diferenciais. Para a simulação do evaporador, foi utilizado o algoritmo DASSLC, que faz uso das fórmulas BDF e da técnica de predição-correção (Secchi, 2012).

Para a simulação primeiro foi realizada uma discretização do sistema de equações diferenciais parciais na variável z pelo método de diferenças finitas de primeira ordem, gerando um sistema de equações algébrico-diferenciais ordinárias. Foram utilizados os valores de 1×10^{-6} e 1×10^{-8} como tolerância relativa e tolerância absoluta respectivamente, para o algoritmo DASSLC.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para as simulações foi considerada como fluido de entrada uma mistura de dois componentes: água e sacarose, nas condições utilizadas na indústria.

Foram utilizadas as condições de operação e iniciais no evaporador indicadas pelas Tabelas 1 e 2.

Tabela 1 – Condições de operação

Parâmetro	Valor (Unidades)	Controlador PID	Parâmetro	Valor (Unidades)
V	153,74 m ³	pressão	u_b	0,5
D_t	0,0331 m		K_c	0,9
N_t	7575		τ_i	40 s
H_t	2,80 m		Set Point	1 atm
T_{vap}	388,75 K			
F_o	1380 kmol/h	nível	u_b	0,5
T_o	358,15 K		K_c	10
P_o	1,2 atm		τ_i	10 min
x_o	[0,99724 0,00276]		Set Point	2,9 m

Tabela 2 – Condições iniciais (Runyon, 1991)

$x(t=0)$	[0,99683 0,00317]
Nível (t=0)	2,9 m
T (t=0)	373 K

Por ser utilizado o método de diferenças finitas, foi encontrada a convergência da malha de discretização com 80 subdivisões, usando como critério a tolerância de 0,01 na pressão de saída do trocador de calor em qualquer tempo. Na Tabela 3 são apresentados os resultados dos testes de convergência da malha de discretização.

Tabela 3 – Convergência da malha de discretização e tempo de resolução

Tamanho da malha	Módulo das diferenças de pressão	Tempo de resolução (s)
10		2,836
20	0,0148	3,395
40	0,0121	6,606
80	0,0099	10,729

Na Figura 2 são apresentados os valores da pressão e da temperatura, no estado estacionário, no interior dos tubos ao longo do trocador de calor.

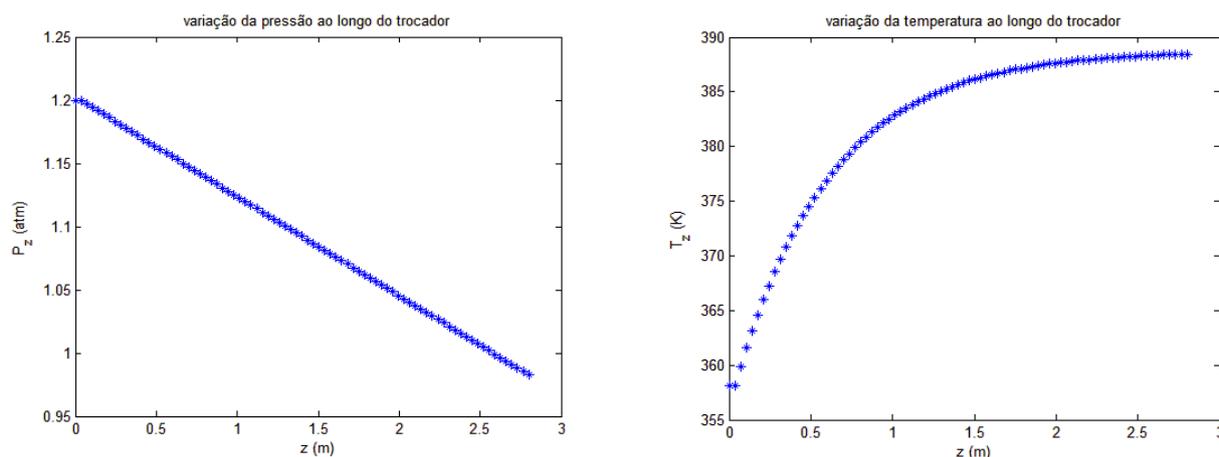


Figura 2 - Perfis estacionários de pressão e temperatura no trocador de calor.

Para a simulação do evaporador tipos *flash*, foi calculada uma taxa de calor transferido constante, de acordo com a taxa de calor transferido no estado estacionário para o evaporador tipo Robert.

De forma de poder comparar os dados obtidos com a literatura, foram realizadas a simulações, com um degrau de +20% na concentração de entrada às 4 horas, da mesma forma que no trabalho de Runyon (1991).

Na Figura 3 são apresentados a concentração de sacarose na saída do líquido concentrado ao longo do tempo e o fluxo molar do vapor de saída para as simulações do evaporador tipo Robert e o evaporador tipo *flash* nas mesmas condições. A partir desta figura

é possível observar que é atingido o estado estacionário para as duas simulações, e que as condições no estado estacionário atingido são similares.

É possível observar também a partir da Figura 3, que as trajetórias dinâmicas para chegar ao estado estacionário nos dois processos são diferentes. Por exemplo, a trajetória da concentração da sacarose para o modelo do evaporador tipo *flash* é bem mais lenta e não apresenta tempo morto quando comparada com a simulação do evaporador tipo Robert.

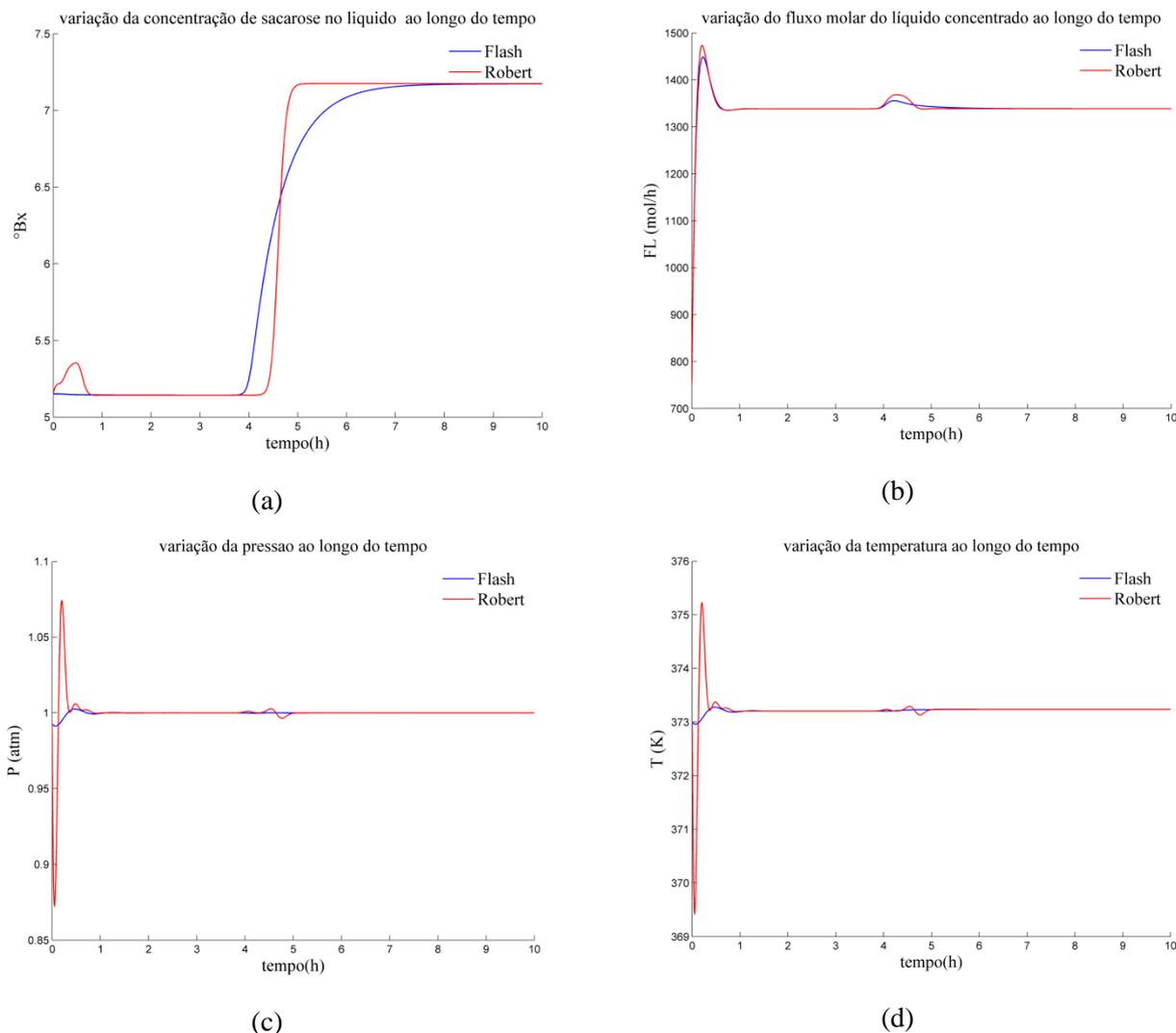


Figura 3 – Comparações dos modelos de evaporadores tipo Robert e tipo *flash*.

Foi achado que a resposta dos sistemas, Figura 3(a), a um degrau na concentração de entrada, são similares ao sistema de Runyon (1991) para o sistema sem controle de concentração de produto deste artigo.

5. CONCLUSÕES

Foram construídos modelos matemáticos para os evaporadores tipo *flash* e Robert, onde a modelagem do evaporador do tipo Robert é apresentada em uma forma mais completa, tendo em conta as variações nas propriedades termodinâmicas ao longo dos tubos.

Os resultados obtidos nas simulações foram comparados, mostrando que os dois modelos alcançam o mesmo estado estacionário desde que a taxa de calor injetada no evaporador tipo *flash* seja a mesma do valor estacionário obtida no evaporador tipo Robert. Por outro lado, os comportamentos dinâmicos mostraram-se diferentes entre os dois modelos, com respostas mais lentas e sem tempo morto para o evaporador tipo *flash*.

Os valores de concentração, temperatura e pressão obtidos estão de acordo com os dados obtidos da literatura.

Ao ter os dois sistemas comportamentos dinâmicos diferentes, é de utilidade o conhecimento do tipo de comportamento dinâmico para ser usado, por exemplo, em atividades de partida da unidade ou projeto de sistemas de controle.

Com continuidade deste trabalho, pretende-se adicionar na mistura alimentada nos evaporadores outros componentes típicos da indústria sucroalcooleira.

6. NOMENCLATURA

$e(t)$	erro, diferença entre o <i>set point</i> e a entrada do sinal	P	pressão no volume de controle, atm
E	Energia no volume de controle, kJ	P_L	pressão no volume de controle da fase líquida, atm
F_L	fluxo molar da saída em fase líquida, kmol/h	P_V	pressão no volume de controle da fase vapor, atm
F_o	fluxo molar de entrada, kmol/h	T_L	temperatura no volume de controle da fase líquida, K
F_V	fluxo molar da saída em fase vapor, kmol/h	T_V	temperatura no volume de controle da fase vapor, K
h_L	entalpia do fluido de saída em fase líquida, kJ/kmol	ρ	massa específica molar, kmol/m ³
h_o	entalpia do fluido de entrada, kJ/kmol	U	coeficiente de transferência de calor, kW/h/K/m ²
h_V	entalpia do fluido de saída em fase vapor, kJ/kmol	V	volume do evaporador, m ³
τ_i	constante do termo integral do controlador (min)	v_L	volume molar da fase líquida no volume de controle, m ³ /kmol
K_c	constante do termo proporcional do controlador	v_V	volume molar da fase vapor no volume de controle, m ³ /kmol
n_i	número de mols do componente i no volume de controle, kmol	x_i	fração molar do componente i na fase líquida
N_L	número de mols no volume de controle na fase líquida, kmol	y_i	fração molar do componente i na fase vapor
N_V	número de mols no volume de controle na fase vapor, kmol	z_i	fração molar do componente i no fluido de entrada

7. REFERÊNCIAS

- CADET, C., TOURÉ, Y., GILLES G., CHABRIAT, J.P., “Knowledge modeling and nonlinear predictive control of evaporators in cane sugar production plants”, *J. of Food Eng.* 40, 59-70, 1999.
- DEMIRBAS, M.F., “Biorefineries for biofuel upgrading: A critical review”, *App. Ener.*, v. 86, pp 151–161, 2009.
- HOLLAND, C.D., LIAPIS, A.L., “Computer methods for solving dynamic separation problems”, Estados Unidos: McGraw Hill Book Company, 1983.
- JESUS, C. D. F., “Validação da simulação dinâmica das etapas de evaporação e cristalização da produção de açúcar com dados obtidos em plantas industriais”, Tese de doutorado, UFSCar, 2004.
- ELHAQ, L. S., GIRI, F., UNBEHAUEN, H., “Modelling identification and control of sugar evaporation theoretical design and experimental evaluation”, *Con. Eng. Pra.*, vol. 7, pag. 931-942, 1999.
- MANRIQUE, J., IPANIQUE, W., “Modelling and simulation of a multistage evaporator in ethanol plant using Ecosimpro environment”, 9th IEEE Int. Conf. on Cont. and Auto., 2011.
- MINTON, P. E., “Handbook of evaporation technology”, Estados Unidos: Noyes Publications, 1986.
- RUNYON, C. H., RURNSEY, T. R., MCCARTHY, K. L., “Dynamic simulation of a nonlinear model of a double effect evaporator”, *J. Food Eng.*, vol. 14, pag. 185-201, 1991.
- SECCHI, A. R., “DASSLC User’s manual v 3.8”, UFRGS, <http://www.enq.ufrgs.br/enqlib/numeric/>, 2012.
- SILVA, P., “Simulação dinâmica e otimização de evaporadores de múltiplos efeitos em biorrefinarias”, Dissertação de mestrado, UFRJ, 2013.