

Aplicação do método da continuação homotópica na plataforma EMSO**Environment for modeling, simulation and optimization**

Recebimento dos originais: 22/01/2019

Aceitação para publicação: 25/02/2019

Fernando Cassoli Zumach

Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Departamento de Desenvolvimento de Processos e Produtos

Cidade Universitária Zeferino Vaz

Av. Albert Einstein, 500 - CEP 13083-852 - Campinas - SP - Brasil

E-mail: fernandocassoli@hotmail.com

Reginaldo Guirardello

Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Departamento de Desenvolvimento de Processos e Produtos

Cidade Universitária Zeferino Vaz

Av. Albert Einstein, 500 - CEP 13083-852 - Campinas - SP - Brasil

E-mail: guira@feq.unicamp.br

RESUMO

A utilização de softwares de simulação na indústria e no desenvolvimento de novas pesquisas vem crescendo muito nos últimos, isso ocorre pelas inúmeras vantagens que a simulação apresenta, tais como: redução de custos, maior precisão no dimensionamento de equipamentos ou processos, menor tempo, além de aumentar a produção, já que, torna-se possível escolher os valores ótimos de operação. Neste trabalho é utilizado um simulador gratuito chamado EMSO, para realizar a simulação de uma coluna de destilação extrativa para separar a mistura etanol-agua, utilizando como componente de arraste o etileno glicol. Para aumentar a Robustez da simulação é aplicado o método da Continuação Homotópica, que consiste em transformar um sistema não linear em um novo sistema de equações diferenciais ordinárias. Com essa alteração, em vez de utilizar o método de resolução de Newton-Raphson do EMSO, que possui grandes dificuldades para convergir, torna-se possível utilizar o algoritmo do EMSO para EDO (equação diferencial ordinária), chamado DASSL, que é mais eficiente. Assim, com a utilização deste método conseguimos obter uma maior taxa de convergência da simulação.

Palavras Chaves: EMSO, Simulação, Método da Continuação Homotópica, destilação.

ABSTRACT

The use of simulation software in the industry and in the development of new researches has been increasing a lot in the last, this is due to the innumerable advantages that the simulation presents, such as: cost reduction, greater precision in the design of equipment or processes, to increase production, since it is possible to choose optimal operating values. In this work, a free simulator called EMSO is used to simulate an extractive distillation column to separate the ethanol-water mixture using ethylene glycol as a drag component. In order to increase the robustness of the simulation the Homotopic Continuation method is applied, which consists of

transforming a non-linear system into a new system of ordinary differential equations. With this change, instead of using the Newton-Raphson resolution method of the EMSO, which has great difficulties to converge, it becomes possible to use the EMSO algorithm for the ordinary differential equation (EDO), called DASSL, which is more efficient. Thus, with the use of this method we obtain a higher convergence rate of the simulation.

Keywords: EMSO, Simulation, Homotopic Continuation Method, distillation

1 INTRODUÇÃO

A coluna de destilação é um dos equipamentos mais usados nas indústrias, sendo utilizados na produção de bebidas alcoólicas, refino do petróleo e seus derivados, produção de etanol, entre outros processos de fabricação, isso ocorre pela possibilidade de operar com grandes quantidades de forma contínua e eficiente (Noriler, 2003). Para a produção do etanol anidro, torna-se necessário utilizar uma coluna de destilação extrativa, já que a mistura etanol-água forma um azeótropo, sendo assim, torna-se necessário adicionar um componente de arraste (etilenoglicol), para remover toda água da mistura (Dias, 2008).

Realizar o dimensionamento de uma coluna de destilação de forma eficiente é extremamente complicado, pois, envolve muitos parâmetros operacionais ao longo processo de separação. Além do mais, a montagem de uma planta piloto é custosa e consome muito tempo. Uma alternativa para o problema é a utilização da simulação computacional do processo de destilação. Atualmente, existe um grande número de simuladores disponível no mercado com capacidade de simular esse processo. Neste trabalho será utilizado o simulador EMSO (Environment for Modelling, Simulation and Optimization).

O EMSO é um simulador Brasileiro, desenvolvido pelo projeto ALSOC, que possui tanto aplicações didáticas, quanto industriais, outro fator importante é o fato de não possuir custos quando utilizado por instituições de ensino e pesquisas (Rodrigues et al. 2006). Além disso, possui sua própria linguagem de programação, tornando-se fácil para organizar, estruturar e manipular os problemas, permitindo ao usuário realizar alterações de maneira rápida e analisar o resultado das mudanças. Os modelos podem ser construídos através de digrama de blocos ou inserindo a sua própria programação. Seus resultados são exibidos na mesma interface ou em gráficos. Outro fator a ser levado em consideração, são modelos de códigos aberto contidos na biblioteca (Soares, 2003).

Além disso, possui uma interface fácil e simples, possibilitando ao usuário trabalhar com vários modelos ao mesmo tempo, e de maneira análoga, analisar os resultados na forma de gráficos (Soares, 2003). Além de todos esses benéficos, o que torna o EMSO um simulador tão atrativo é o fato de possibilitar ao usuário criar sua própria modelagem, de

acordo com as condições do seu processo. Contudo, o EMSO apresenta grandes dificuldades para conseguir convergir dependendo das suas condições iniciais, isso se deve ao fato do EMSO possuir no seu banco de dados apenas o método de Resolução Newton-Raphson, que é muito sensível as condições iniciais processo. Uma alternativa que vai ser aplicado neste trabalho, é a utilização do método da Continuação Homotópica, que consiste básica em criar um novo sistema, utilizando a combinação convexa como o sistema original. Sendo assim, podemos encontrar melhores estimativas iniciais, à medida que simulação acontece, com isso o Método da Continuação possui uma chance maior de conseguir convergir, mesmo utilizando condições iniciais grosseiras (Zumach, 2016).

2 METODOLOGIA

A primeira etapa deste trabalho consiste em realizar a modelagem de uma coluna de destilação extrativa, para isso foram utilizados as equações MESH (Mass, Equilibrium, Summation, Heat): balanço de massa (M), equações de equilíbrio líquido-vapor (E), somatório das frações molares (S) e o balanço de energia (H). As equações de MESH, foram descritas nas equações (1) a (5).

Equação M - Balanço de massa para o componente i no prato j (Uma equação para cada estágio):

$$\frac{dM_{i,j}}{dt} = L_{j-i} \cdot x_{i,j-1} + V_{j+1} \cdot y_{i,j+1} + F_j z_{i,j} - L_j \cdot x_{i,j} - L_j y_{i,j} \quad (1)$$

Equação E - Relações de equilíbrio de fases (Uma equação para cada estágio):

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j} \cdot x_{i,j} \quad (2)$$

Equação S - Somatório das frações molares (Uma equação para cada estágio):

$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^c y_{i,j} - 1.0 \quad (3)$$

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^c x_{i,j} - 1.0 \quad (4)$$

Equação H - Balanço de Energia no prato j (Uma equação para cada estágio):

$$\frac{dH_j}{dt} = L_{j-i} \cdot H_{L,j-1} + V_{j+1} \cdot H_{V,j+1} + F_j \cdot H_{F,j} - L_j \cdot H_{L,j} - V_j \cdot H_{V,j} \quad (5)$$

onde, (F) alimentação, (L) vazão de líquido, (V) vazão de vapor, (H_v) entalpia do vapor, (H_L) entalpia do líquido, (x) fração molar do componente (i) no líquido, (y) fração molar do componente (i) no vapor, (T) temperatura, (P) pressão, (k) razão de equilíbrio e (z) fração

molar da alimentação. Por motivos de facilidade de convergência numérica a torre opera com vazão molar. Foi aplicado o método da continuação para transformando um sistema linear em novo sistema de equações não linear, obtendo a seguinte equação (6), que descreve o comportamento da fração molar na alimentação da coluna. No entanto, uma vez que neste trabalho a modelagem baseia-se nas equações transiente (MESH), a variável de continuação (τ) é feita dependente com o tempo, dada pela equação (7). Podendo (γ) variar de 1 a 0,00001.

$$z_i = \tau \cdot z_i^{projetado} \quad (6)$$

$$\tau = 1 - e^{-\gamma \cdot t} \quad (7)$$

3 RESULTADOS

Para rodar as simulações foram fixados os seguintes valores: corrente de alimentação 300 kmol/h, razão de refluxo de 0,5, 36 estágios (incluindo condensador e refeedor), em seguida foram realizadas 7 simulações variando temperatura da alimentação, concentração molar da alimentação (etanol, água), os valores estão descritos na Tabela 1. As 7 simulações foram testadas duas vezes, uma utilizando o método da continuação e a outra sem o método, as simulações foram nomeadas de (A a G).

Das 7 simulações simples, apenas 2 conseguiram convergir (E, F), sendo que, os valores utilizados por essas duas simulações estão bem próximo dos valores ideais de um processo real. As simulações utilizando o método da continuação conseguiu ter uma maior taxa de convergência, das 7 simulações apenas a (G) não conseguiu encontrar uma resposta. Com base nestes resultados podemos concluir que o método da continuação mostrou ser eficiente, aumentando e muito a chances do programa em obter uma resposta, já que, apenas uma simulação não conseguiu convergir. A utilização do método é uma ótima opção para contorna a sensibilidade do EMSO com as condições iniciais. Todas as simulações deste trabalho foram realizadas utilizando um computador com a seguinte configuração: CPU Intel Core I7 3,4 GHZ 3,4 GHZ e 12 GB de RAM, com um tempo médio de simulação de 180 s.

Tabela 1 – Condições iniciais para simulação de A a G.

Simulação	Temperatura (k)	% Água	% Etanol	Simplex	Método
A	430	0,9	0,1	-	*
B	410	0,85	0,15	-	*

C	390	0,8	0,2	-	*
D	380	0,75	0,25	-	*
E	360	0,7	0,3	*	*
F	340	0,65	0,35	*	*
G	320	0,6	0,4	-	-

Legenda: (-) não convergiu, (*) convergiu.

4 CONCLUSÃO

Por fim, a aplicação do método da continuação Homotópica na modelagem de uma coluna de destilação extrativa para separar etanol-água, utilizando o simulador EMSO, mostrou ser eficiente, já que, aumento a taxa de convergência das simulações, mesmo quando utilizado condições iniciais muito ruins a simulação conseguiu convergir é encontrar bons resultado, no entanto, os modelos que utilizaram o método tiveram um maior esforço computacional para convergir.

REFERÊNCIAS

- DIAS, M. O. S. Simulação do processo de produção de etanol a partir do açúcar e do bagaço, visando à integração do processo e a maximização da produção de energia e excedentes do bagaço. Dissertação de mestrado, Unicamp, Campinas - SP, 2008;
- NORILER, D. Modelagem matemática e simulação numérica do escoamento líquido-vapor num prato de destilação. Dissertação de Mestrado, Unicamp, Campinas - SP, 2003;
- RODRIGUES, R. et al. Ensino de cinética e cálculo de reatores químicos utilizando o simulador EMSO. In: XVI Congresso Brasileiro de Engenharia Química, p.3986-3993, Santos, 2006;
- SOARES, R. P. Desenvolvimento de um simulador genérico de processos dinâmicos. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Escola de Engenharia. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2003;
- SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. Emso: a new environment for modelling, simulation and optimization. In: ESCAPE 13. Lappeenranta: Elsevier Science Publishers. p.947-952, 2003;

ZUMACH, F. C. Aplicação do método de continuação para simulação robusta de colunas de destilação. Dissertação de mestrado, Unicamp, Campinas - SP, 2016.